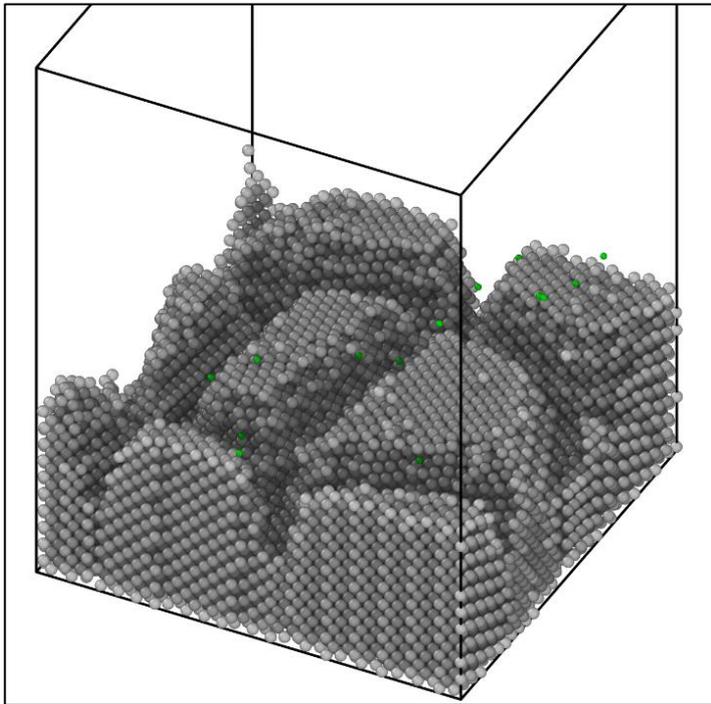


2023年度 研究テーマ紹介

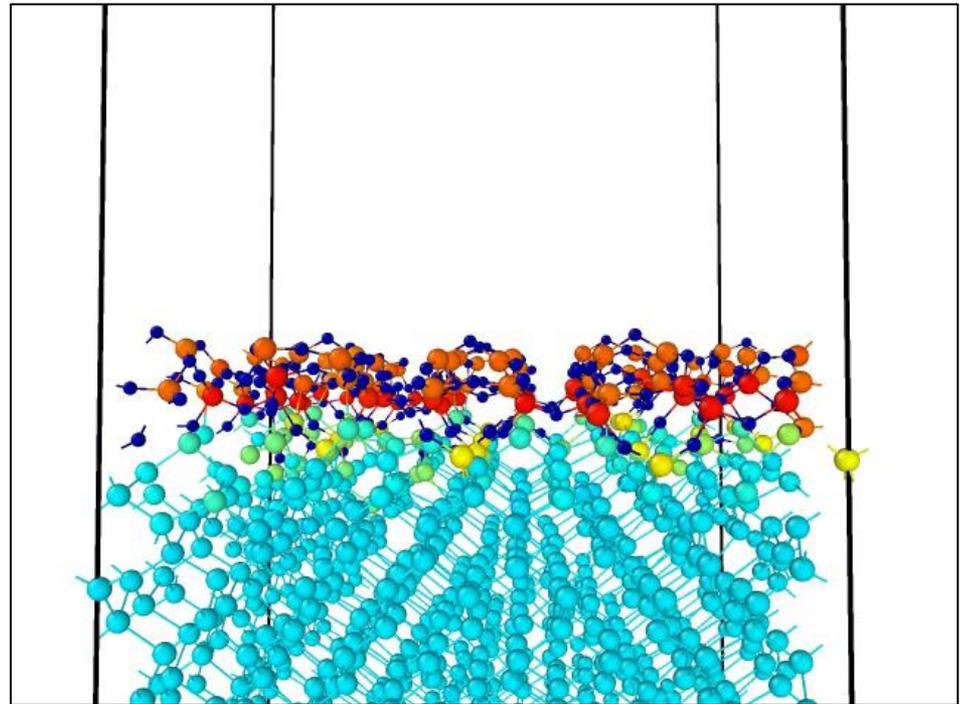
深層学習を活用した
原子間ポテンシャルの自律学習手法の開発

分子動力学シミュレーション

- 原子・分子の動きを見るためのシミュレーション
 - 各原子・分子の軌道を運動方程式から求める



W膜の成長



シリコン結晶の酸化

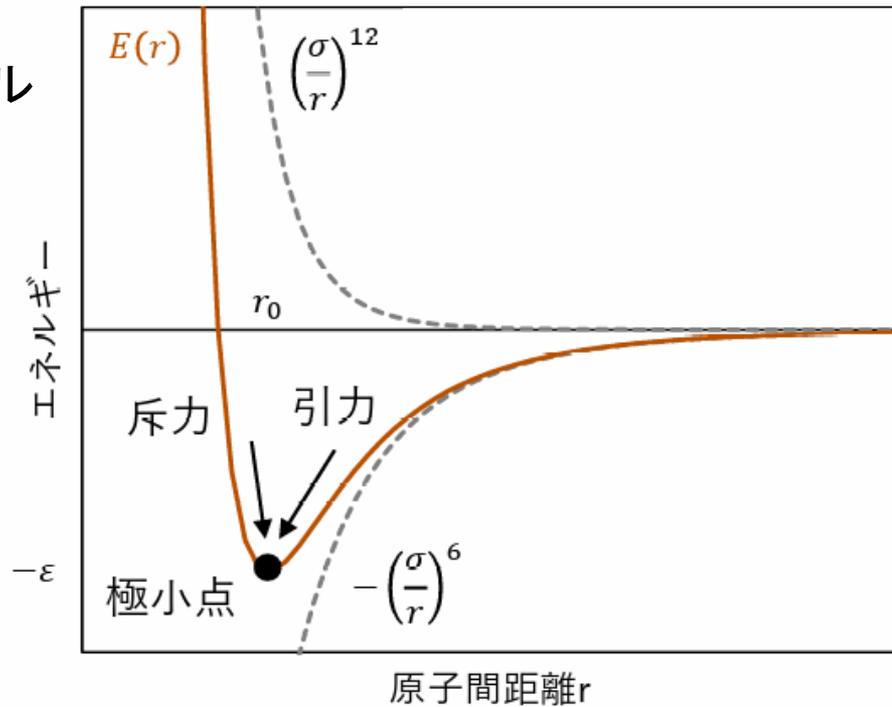
分子動力学シミュレーション

- 働く力を求めるために原子間ポテンシャルが必要
- 原子間ポテンシャル…局所原子環境の変化に伴うポテンシャルエネルギーの変化を表す

例: Lennard-Jonesポテンシャル

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}}_{\text{斥力}} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6}_{\text{引力}} \right]$$

σ, ε : パラメータ



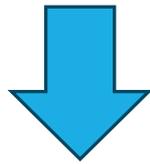
Lennard-Jonesポテンシャル

研究背景

うまく学習できていないと...

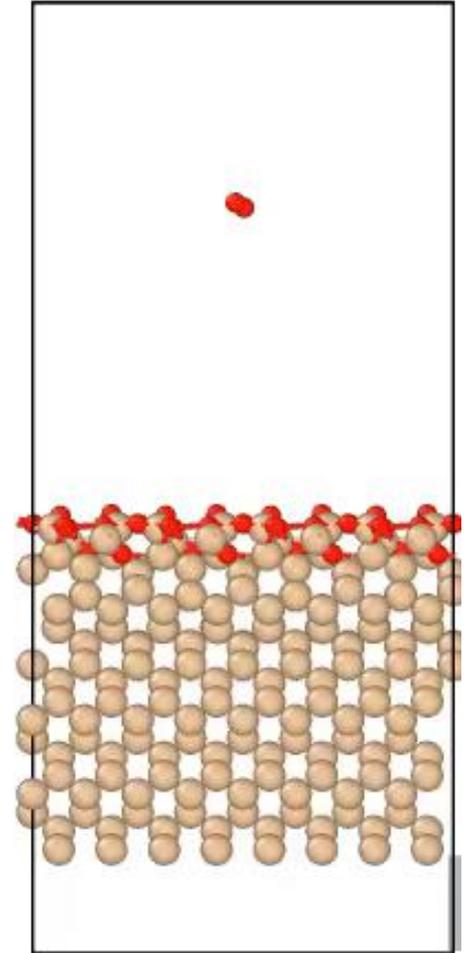
- 適切なシミュレーションのためにパラメータの学習を行う
 - 学習のために抜けのない教師データが必要

しかし、複雑な構造ではデータの不足の判断は困難

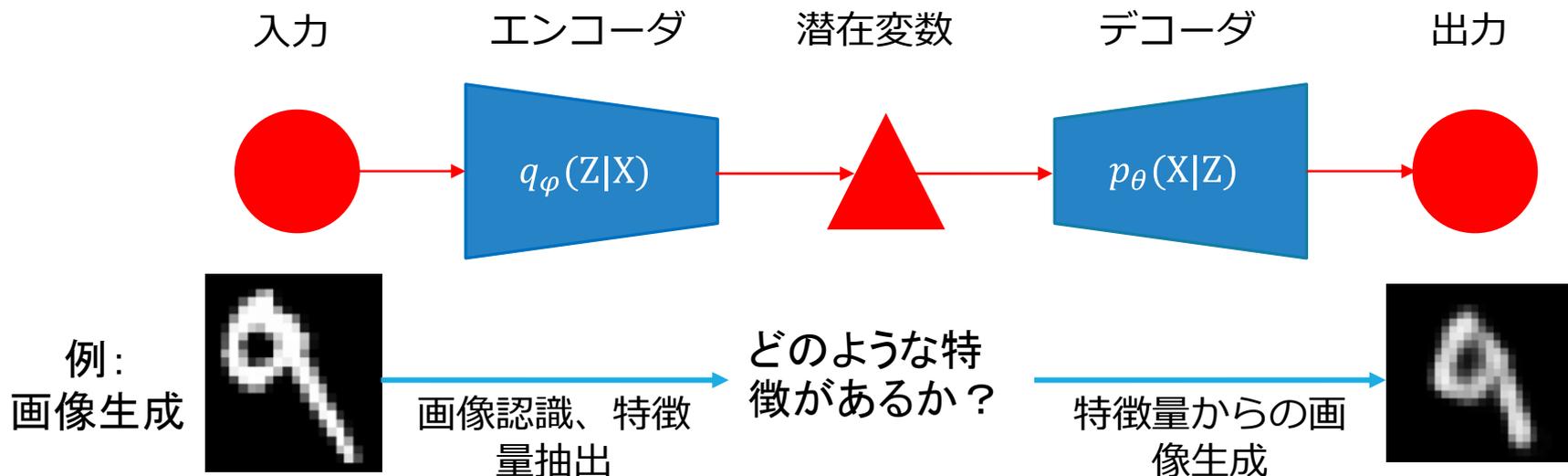


機械学習を活用してデータの不足を判断し、必要なデータを生成する

- 生成には変分オートエンコーダ (VAE) を用いる



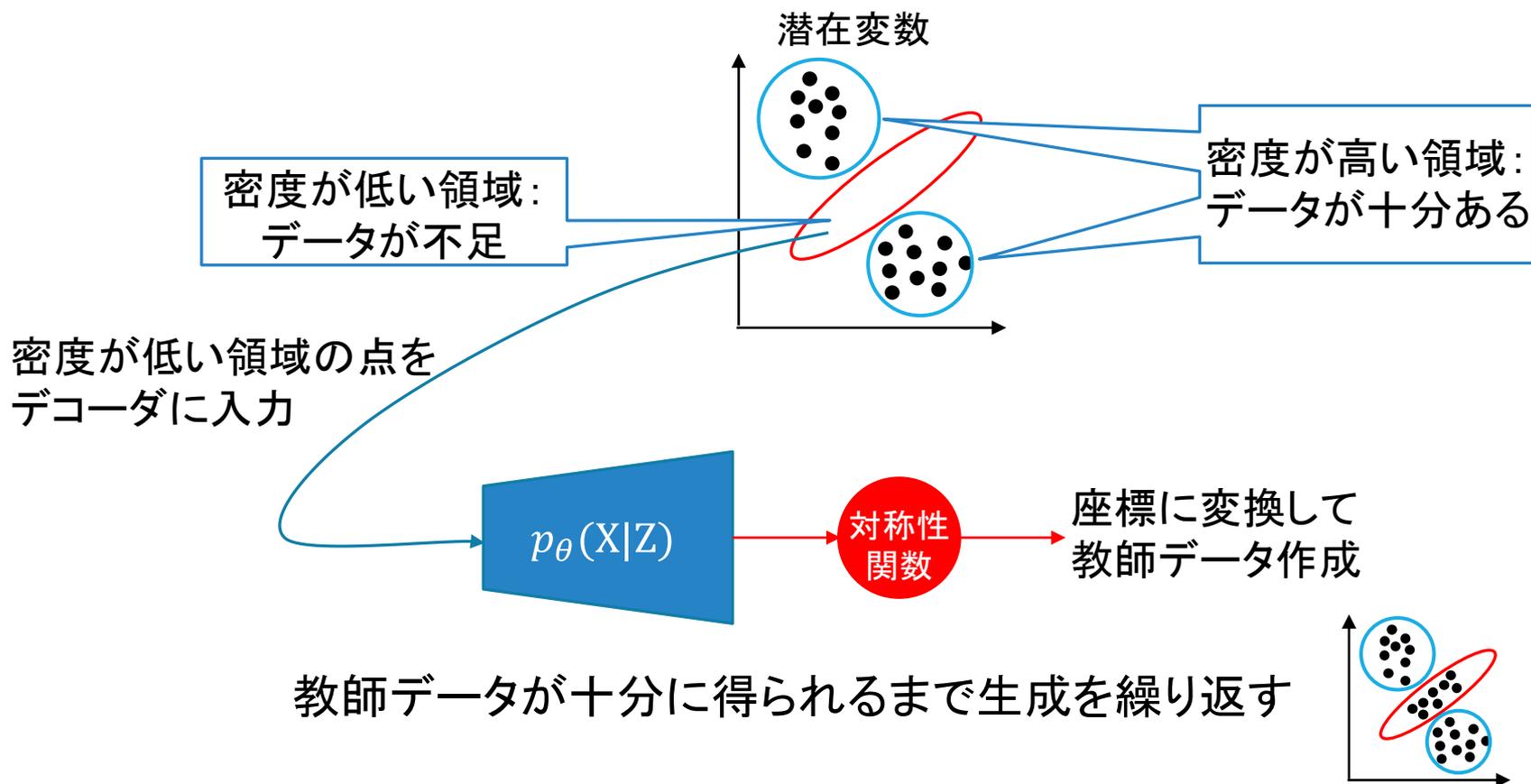
VAEについて



- 生成モデルの一種で、画像生成などによく用いられる
- エンコーダ: 入力 → 潜在変数
デコーダ: 潜在変数 → 出力
 - 学習時はエンコーダ + デコーダ
生成時はデコーダのみ用いる

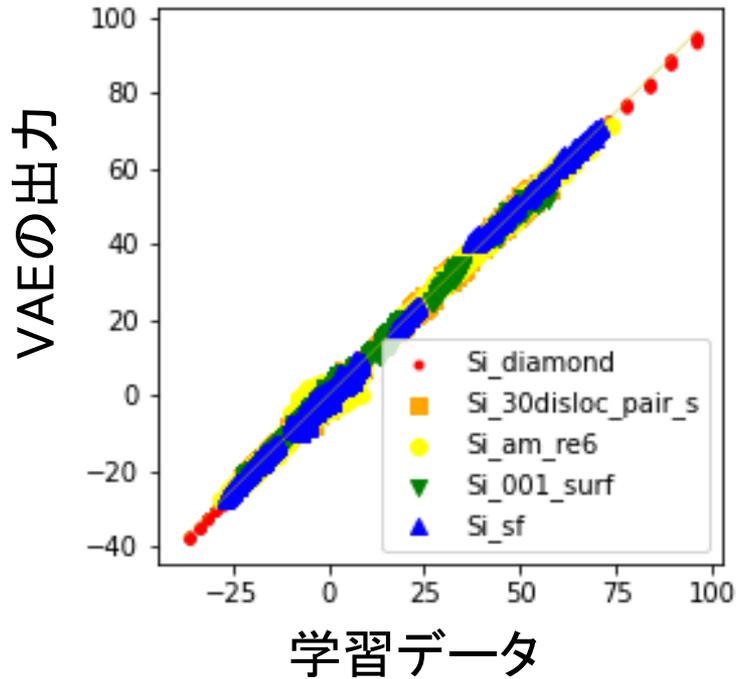
VAEの活用

- Chebyshevの対称性関数(原子の周辺環境を表す)をVAEの入出力とする

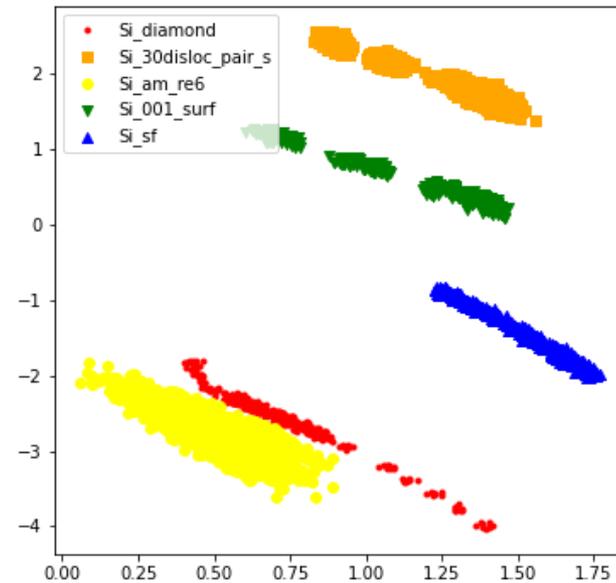


VAEによるデータの可視化、分類

VAEの学習結果



潜在変数



- 学習データを学習済みのVAEに再び入力
- 学習データを概ね再現できており、学習に成功したといえる

- 学習に用いたSiのデータ(5つのラベル)を潜在空間上にプロット
- 異なるラベルが潜在空間上で異なる場所に存在
 - ✓ ラベル毎の特徴を上手く抽出できている