

Tersoff-NN : ボンドオーダーのみを機械学習する ハイブリッド型ポテンシャルの開発 (II)

Tersoff-NN: A Hybrid Interatomic Potential with a Bond-order Function using Neural Networks (II)

早大理工 ○平井 健太郎, 西村 祐亮, 渡邊 孝信

©K. Hirai, Y. Nishimura, T. Watanabe (Waseda Univ.)

E-mail: kenc71389@akane.waseda.jp

【はじめに】従来の機械学習ポテンシャルの計算コストと外挿能力を改善するため、我々の研究グループでは、ボンドオーダー (BO) のみを機械学習させるハイブリッド型ポテンシャルを「Tersoff-NN」を開発している。これは Tersoff ポテンシャルをベースとしており、BO を Multi-layer Perceptron (MLP) を用いて予測する。前の講演で Tersoff-NN の概要を紹介したので、本講演では、BO 計算部の構成と記述子の選択が予測精度に与える影響について、調査した結果を報告する。

【BO 計算部の概要】ベースとした Tersoff ポテンシャル^[1]では、 b_{ij} は次式のように定義されている。

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-0.5/n} \quad \zeta_{ij} = \sum_k^{n_i} \xi_{jik}$$

$$\xi_{jik} = f_c(r_{ik}) g(\theta_{jik}) \exp \left\{ \lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3 \right\}$$

$$g(\theta_{jik}) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta_{jik})^2}$$

k は原子 i の n_i 個の周辺原子(結合相手である j を除く)のラベルであり、 $f_c(r_{ik})$ はカットオフ関数、 $g(\theta_{jik})$ は角度依存項、 n 、 β 、 c 、 d 、 h はパラメータである。原子 i 、 j と、それ以外の周辺原子 k からなる j - i - k トリプレットの寄与 ξ_{jik} を足し合わせた値 ζ_{ij} を用いて原子 i - j 間のBO b_{ij} を計算している。

このBO 決定部を機械学習に置き換える際、上記のどの部分を MLP に担わせるかが問題となる。今回、MLP に担わせる役割が異なる 2 つの構成(a)、(b)を用意し、学習能力を比較した。

構成(a)を Fig. 1(a)に示す。原子 i の局所環境の記述子として Behler-Parrinello の対称性関数^[2]を採用し、さらに注目する原子 i - j 間距離 r_{ij} を入力ベクトルに加えて、MLP が直接 b_{ij} を出力する。

もう一方の構成(b)では、Fig.1(b)に示すように、MLP は途中の ζ_{ij} の計算までを担う。原子 i 、 j 、および原子 i の周辺原子 k の座標、原子種を成分とするベクトル $\{[r_i, r_j, r_k, Z_i, Z_j, Z_k] | k \neq j, 1 \leq k \leq n_i\}$ を入力として、 ξ_{jik} を計算する。あとは Tersoff ポテンシャルの定義通りに b_{ij} を計算する。Fig.1(c)に ξ_{jik} の計算部を示す。各 j - i - k トリプレットについて、 i - j 間距離 r_{ij} 、 i - k 間距離 r_{ik} 、原子 i を中心とする j - i - k 角の余弦 $\cos \theta_{jik}$ 、原子種 Z_i 、 Z_j 、 Z_k を入力として、 ξ_{jik} を出力する。

今回、オリジナルの Tersoff ポテンシャルの b_{ij} を訓

練データとして、BO 計算部の学習能力を比較した。64 原子の Si ダイヤモンド型結晶を 6000K で熔融する定積MD シミュレーションの軌跡から得られた 300 個の構造を用意し、Tersoff ポテンシャルで計算される b_{ij} を訓練データとして用いた。300 個の構造のうち、80%を学習データ、20%をテストデータとした。

【結果】テストデータに対するパリティプロットを Fig. 2 に示す。各 j - i - k トリプレットに対して予測を行う構成(b)のモデル方が、明らかに良い精度を示していることがわかる。構成(a)のモデルでは全てのトリプレットの寄与が入力の際時点で対称性関数に集約されており、個々のトリプレットの寄与を MLP が学習できなかったためと考えられる。BO の学習にはトリプレットの情報を MLP の中で保持することが重要であることを示唆している。

【謝辞】本研究は科学研究費 基盤研究 (B) (23K22800) の支援を受けて行われた。

【参考文献】 [1] J. Tersoff, *Phys. Rev. B*, 38, 9902–9905 (1988). [2] J. Behler, *J. Chem. Phys.*, 134 (2011).

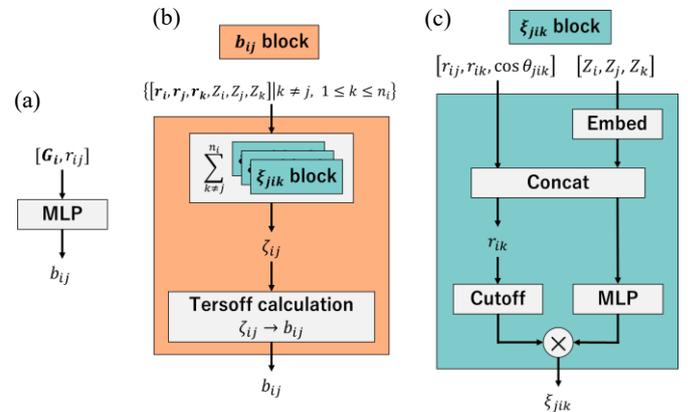


Fig. 1 Two architectures of bond order prediction models.

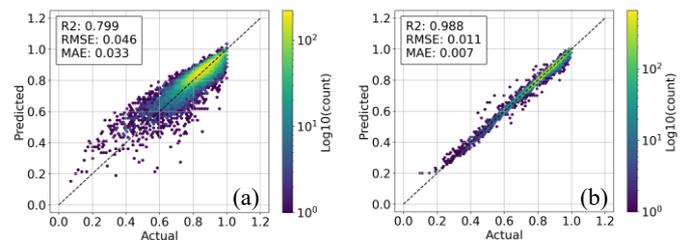


Fig. 2 Prediction accuracy of bond order for test data in model (a) and (b).