

原子レベルでの加工現象の機械学習援用理論解析

大阪大学大学院工学研究科 稲垣耕司

- 目的 各種超精密加工の原子除去メカニズムを原子レベルでの機械学習ポテンシャルを用いた大規模シミュレーションにより解明する
- 内容 グラフニューラルネットワークに基づくNequipアプリケーションを利用して機械学習ポテンシャルを生成するための学習データを効率よく収集する手法の開発を実施
- 結果 LammmpsによるMD計算と自作の学習用データ収集アプリケーションで学習データを収集する繰り返し法を開発した。これをSi表面上でのH拡散プロセスに適用し、結合生成・切断の解析精度を強化した機械学習ポテンシャルの生成に成功した。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	1,000 SQUIDポイント
使用メモリ	30 GB
並列化	1ノード 並列

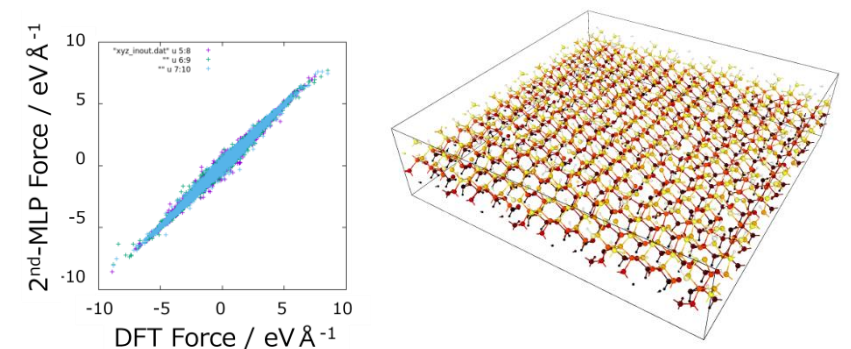


図 得られた高精度機械学習ポテンシャルと適用例