PINN 計算による外場駆動ナノ構造形成メカニズムの解明

課題番号　EX26704

CUI Yi（崔羿）名古屋大学 大学院工学研究科　機械･航空宇宙工学専攻

電子風力駆動せん断帯形成と応力場誘起ナノ介在物界面剥離パターンの統合数値解析

1. 理論 ： DFT-ML-MD-KMC / PINN 数値解析基盤の構築

外場駆動ナノ構造形成を，第一原理・機械学習potential・MD・KMC・PINNで接続する解析基盤

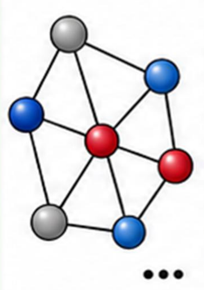
1. DFT
第一原理データベース

- エネルギー： E
- 力： $\boldsymbol{F} = -\dfrac{\partial E}{\partial \boldsymbol{R}}$
- 応力： $\boldsymbol{\sigma} = -\dfrac{1}{V}\dfrac{\partial E}{\partial \varepsilon}$

計算対象：
バルク・欠陥・表面・NEB など

2. 機械学習ポテンシャル (GNN)
DFTデータで学習

グラフ表現



メッセージパッシング
$h_i^{(l+1)} = \phi^{(l)}\left(h_i^{(l)}, \sum_{j\in\mathcal{N}(i)} m_{ij}^{(l)}\right)$

原子エネルギー
$E = \sum_i E_i$

局所エネルギー
$E_i = \psi(h_i, Z_i)$

損失関数
$\mathcal{L} = w_E\mathcal{L}_E + w_F\mathcal{L}_F + w_\sigma\mathcal{L}_\sigma$

出力: 高速MLポテンシャル
$(E_{ML},\ F_{ML},\ \boldsymbol{\sigma}_{ML})$

3. MD
MLポテンシャルによる時間発展

運動方程式
$m_i\,\ddot{\boldsymbol{r}}_i = \boldsymbol{F}_{i,ML}$

統計集団
$NVE\,/\,NVT\,/\,NPT$

出力
- 軌道： $\boldsymbol{R}(t),\ V(t)$
- 熱力学特性
- 拡散： $D = \lim_{t\to\infty}\dfrac{\langle|\boldsymbol{r}(t)-\boldsymbol{r}(0)|^2\rangle}{6t}$

遷移率（ML障壁から）

4. KMC
格子／グラフ上のイベント動力学

遷移率（アレニウス型）
$k_i = \nu_i \exp\left(-\dfrac{\Delta E_i}{k_B T}\right)$

マスター方程式
$\dfrac{dP_n}{dt} = \sum_m (W_{nm}P_m - W_{mn}P_n)$

出力
- 組織進化
- 長時間挙動
- 高次の時間･長さスケール

出力: 長時間挙動
（例: 体積分率・フラックス・寿命）

アクティブラーニングループ
不確実性／高誤差構造 → 新規NEB計算 → GNN再学習

デジタルツイン：統合 DFT−ML−MD−KMC 基盤
✓ スケール横断　✓ 定量予測　✓ 時間・空間拡張　✓ 実験・設計支援

概要

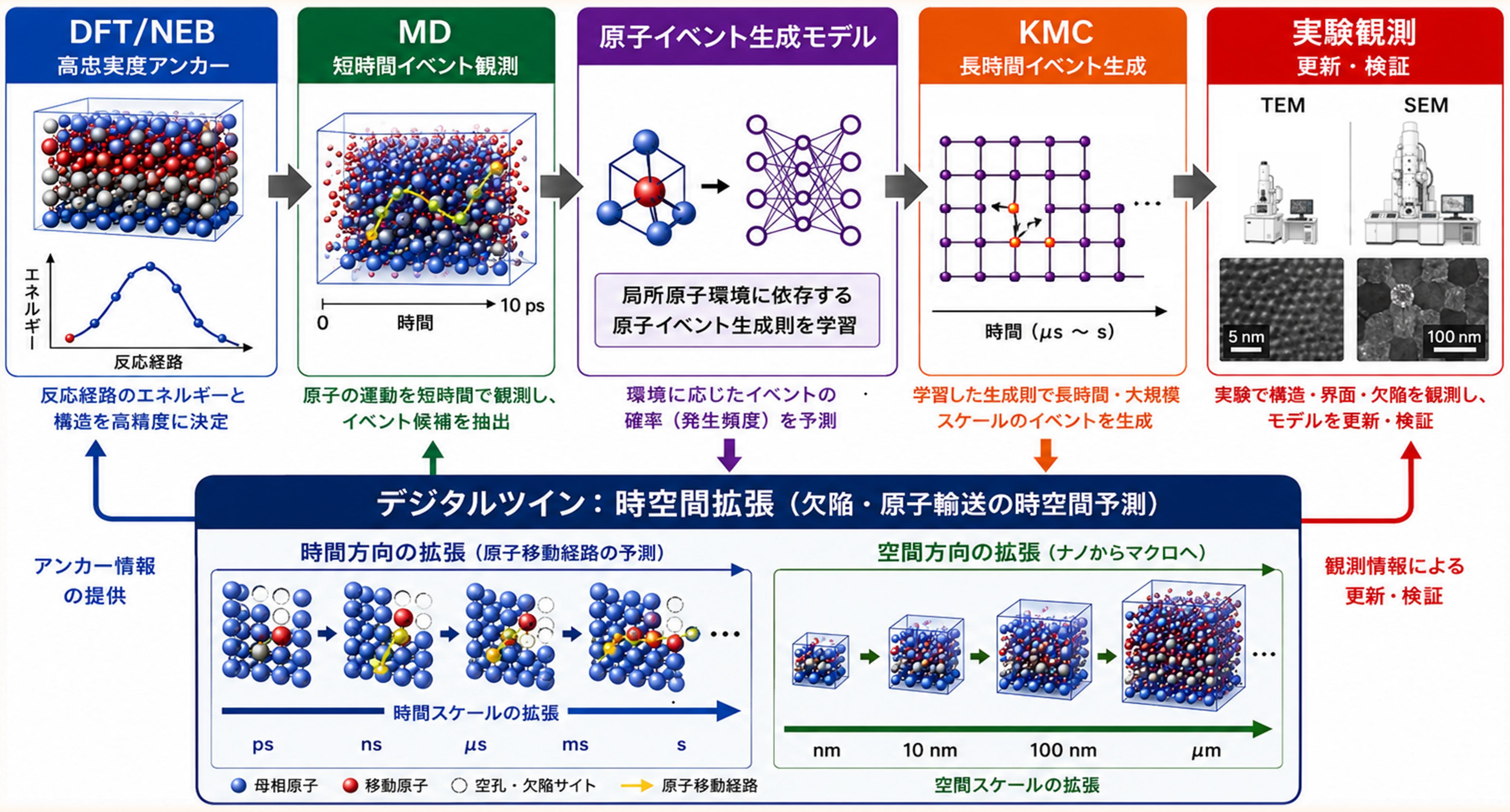
外場で駆動される原子移動, 欠陥輸送, 界面応力応答を同一の計算フローで扱うための全体構成。

理論

外場駆動ナノ構造形成を解析するための統合計算基盤を示す。DFT/NEBで反応経路とエネルギーを高精度に決定し、GNNポテンシャルで原子間相互作用を学習する。さらにMDにより短時間の原子運動を追跡し、KMCにより長時間･大規模スケールの組織発展を予測する。得られた情報をPINN解析と接続することで、原子輸送･欠陥形成･応力場応答を統一的に評価する。

2. 電子風力場の結果図 ： electric current-driven shear bands 形成

電流印加で生じる電子風力を駆動力として，dual-phase Ti alloy の不均一組織発達と shear bands を解析



結果

電流印加により生じる電子風力が原子輸送を促進し、dual-phase Ti alloy 内に不均一な組織発達と shear bands を形成する。MD–KMC解析により実験で観察されたナノ双晶状構造を再現し、提案モデルの妥当性を確認した。

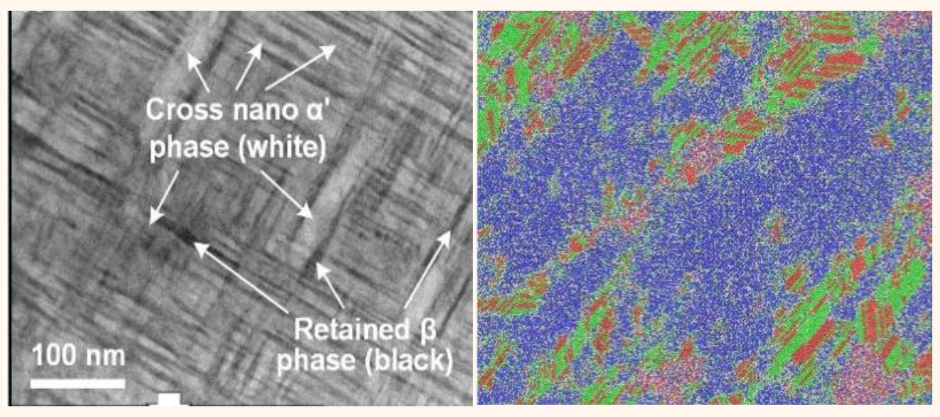


図　電子風力実験[1](左)とMD–KMC予備解析(右)：
Shear bandsの再現により、妥当性を示す

[1] Shaojie Gu, Yasuhiro Kimura, Yi Cui, Yasuyuki Morita, et al., al., "Electric current-driven heterogeneous microstructures in dual-microstructures in dual-phase titanium alloys," Nature Communications, 2026

3. 外部応力場の結果図 ： nano inclusion の debonding pattern

原子シミュレーションから得られた変位場に対して、PINNを用いて応力場を復元し、ナノ介在物の配置に依存する界面剥離パターンを評価する

PINN アプローチと損失項

■ **総損失関数（Total Loss）**

$$\mathcal{L} = w_{\mathrm{data}}\mathcal{L}_{\mathrm{data}} + w_{\mathrm{phys}}\mathcal{L}_{\mathrm{eq}} + w_\sigma\mathcal{L}_{(\sigma_{xx})} + w_{\mathrm{per}}(t)\mathcal{L}_{\mathrm{per}}$$

● **データ損失（Data loss）**

原子の正規化残差に対する教師あり MSE（平均二乗誤差）:

$$\mathcal{L}_{\mathrm{data}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{r}_N(\mathbf{x}_n) - \mathbf{r}_{N,\mathrm{gt}}(\mathbf{x}_n)\right\|_2^2$$

- N ：データ点（原子）の総数
- $\mathbf{r}_N(\mathbf{x}_n)$ ：PINN が予測した原子位置
- $\mathbf{r}_{N,\mathrm{gt}}(\mathbf{x}_n)$ ：真の原子位置（参照データ）
- $\|\cdot\|_2$ ：L2 ノルム

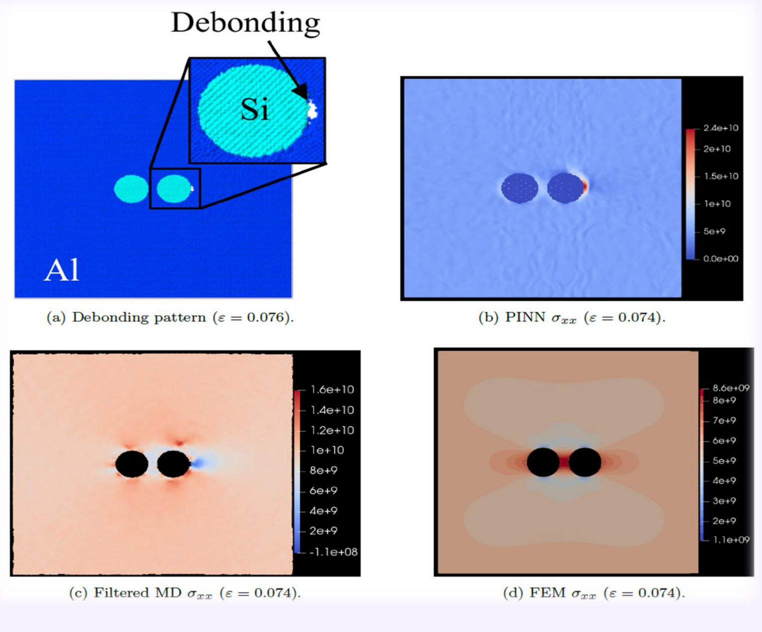
● **物理損失（平衡方程式）**

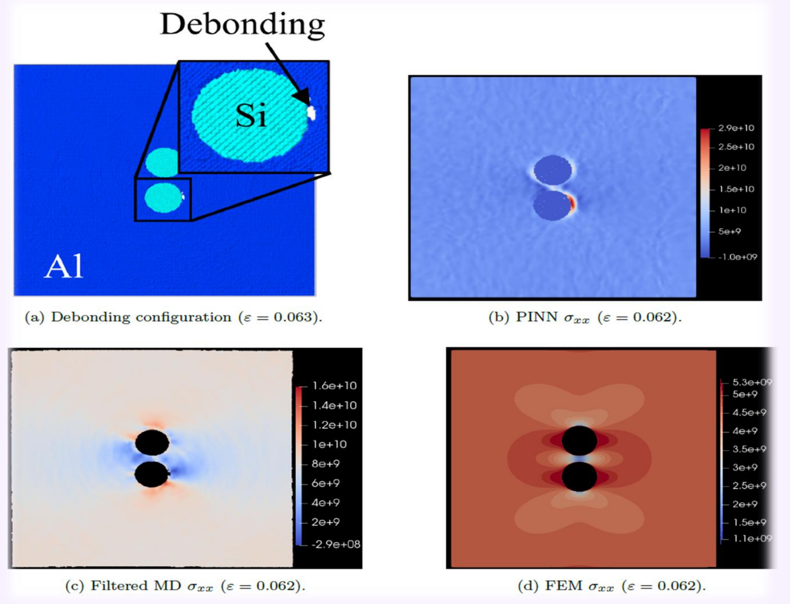
応力の発散がゼロであることを課す（力の釣り合いの満足）:

$$\mathcal{L}_{\mathrm{eq}} = \mathbb{E}_{\mathbf{x}}\left[\frac{\|\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})\|_2^2}{\sigma_{\mathrm{ref}}^2}\right],\quad \sigma_{\mathrm{ref}} = \mathrm{SXX_TARGET}$$

- $\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ ：応力の発散
- σ_{ref} ：正規化用の基準応力（SXX_TARGET）
- $\mathbb{E}_{\mathbf{x}}$ ：空間領域における平均

原子シミュレーション（原子スケール）原子系の挙動を高精度にシミュレーション ＋ **連続体力学（弾性理論）** 弾性理論に基づく物理法則を導入 → **PINN による応力場の予測** PINN により連続的な応力場を高精度に予測





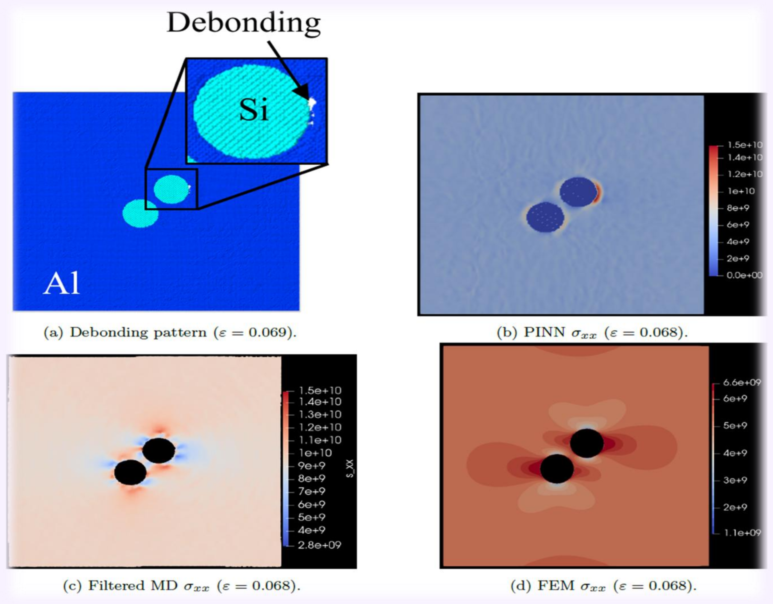


図　応力場の結果図[2]：nano inclusion 界面剥離と PINN 応力場写像による debonding pattern。 原子シミュレーションで得た変位場からPINNにより応力場を復元し、ナノ介在物周辺の界面剥離挙動を評価した。介在物の配置方向により応力集中位置と剥離パターンが変化し、MD結果とPINN応力場の対応から剥離機構を可視化した。

[2] P. Sheng, W. Yang, S. Gu, S. Yoon, Z. Chen, Y. Cui*, "Atomistic and physics-informed neural network investigation of interfacial debonding in differently aligned nanoinclusions," Computational Materials Science 269, 114733, 2026.