

機械学習を用いた第一原理計算適用範囲の拡張

An Extension of the First-Principles Simulations Using Machine Learning

豊田中研¹、[○]旭良司¹、三輪和利¹、陣内亮典¹、Joohwi Lee¹

Toyota Central R&D Labs.¹, [○]Ryoji Asahi¹, Kazutoshi Miwa¹, Ryosuke Jinnouchi¹, Joohwi Lee¹

E-mail: rasahi@mosk.tytlabs.co.jp

1. 背景

近年、マテリアルズインフォマティクスによる材料探索が盛んに研究されている。特に第一原理計算の高精度な定量予測を活用した材料設計やデータベースの構築に期待が高まっている。一方で、第一原理計算の計算負荷は依然として大きく、実用的な材料設計を可能にするために、より大規模な計算を高効率に実行する手段が必要となる。本研究では、計算評価を格段に高速化する機械学習ポテンシャルの活用、および、機械学習を利用した新規構造探索アルゴリズムの研究について紹介する。

2. 手法

第一原理計算によって取得したデータベースにある局所構造と未知の局所構造の間の類似性を記述する計量ベクトルを用いて[1]、ノンパラメトリック線形回帰により、未知の局所構造におけるエネルギー、力場、ストレス等を予測した[2,3]。さらに、MD 計算の過程で学習していない原子配列と判断した場合、第一原理計算によって新たに基底関数として加えるアルゴリズムを構築した[2]。また、データベースにない新規構造の探索法として、ターゲット物性を機械学習により高速評価可能な回帰式で表現しておき、進化的アルゴリズムを用いて、所望のターゲット物性を実現する構造を効率よく最適化する手法を確立した[4,5]。

3. 結果

機械学習ポテンシャルを用いて、ナノ粒子上の触媒活性[3,6]や、相転移やドーピングが伴うイオン伝導体材料の拡散挙動[7,8]等、第一原理計算では困難な大規模系に対して、高精度な計算結果を得た。また新規構造の探索法をジルコニア系酸化物イオン伝導体の材料探索に適用し、その有用性を実証した[5]。これらの計算技術は、マテリアルズインフォマティクスに必須である系統的かつ広範な材料データベースの構築に有用である。

参考文献：

- [1] A.P. Bartók, R. Kondor, G. Csanyi, Phys. Rev. B, 87, 184115 (2013).
- [2] K. Miwa, H. Ohno, Phys. Rev. B 94, 184109 (2016).
- [3] R. Jinnouchi, R. Asahi, J. Phys. Chem. Lett. 8, 4279 (2017).
- [4] A. R. Oganov, C. W. Glass, J. Chem. Phys. 124, 244704 (2006).
- [5] J. Lee, N. Ohba, R. Asahi, RSC Adv. 8, 25534 (2018).
- [6] R. Jinnouchi, H. Hirata, R. Asahi, J. Phys. Chem. C 121, 26397 (2017).
- [7] K. Miwa, H. Ohno, Phys. Rev. Mater. 1, 053801 (2017).
- [8] K. Miwa, R. Asahi, Phys. Rev. Mater. 2, 105404 (2018).