

ナীবベイズを用いた結晶構造中の原子配列最適化

Optimization of atomic arrangement in crystal structures using Naïve Bayes

名大工¹

野田祐輔¹, 横井達矢¹, 松永克志¹

¹Department of Materials Physics, Nagoya Univ.

Yusuke Noda¹, Tatsuya Yokoi¹, Katsuyuki Matsunaga¹

E-mail: noda@mp.pse.nagoya-u.ac.jp

材料研究において、多元系合金中の金属元素の配列や母材料中の不純物原子サイトの特定など、原子配列の最適化は機能性材料の物性解析において重要である。原子配列に関する組み合わせ最適化問題として、遺伝的アルゴリズム (GA) を用いた研究が報告されている[1-3]。GA は簡易的な計算を用いた手法として長年活用されているが、初期に得られた良い解に影響されて新しい解を見つけ難くなる過剰適合という短所が知られている。近年は AI 技術を材料研究へ応用するマテリアルズ・インフォマティクスが盛んになり、組み合わせ最適化手法としてベイズ最適化を用いた研究も報告されている[4,5]。ベイズ最適化は得られたデータを基に最適解に成り得そうな候補解を予測する機械学習の手法であり、効率的に最適解を探索することが可能である。しかし、新しいデータを入れる度に全ての組み合わせについて予測値を算出しなければならないため、組み合わせ数が膨大な高次元の組み合わせ最適化問題に活用することは困難である。

本研究では、ナীবベイズを取り入れた組み合わせ最適化手法を開発し、結晶構造中の原子配列最適化計算に応用した。ナীবベイズでは要素間の独立性を仮定することで予測値の算出が容易になり、高次元の組み合わせ最適化問題への応用が可能となる。ケーススタディとして、 $\text{Si}_{50}\text{C}_{50}$ の 3 次元結晶構造を対象とした完全な炭化ケイ素 SiC を得るための組み合わせ最適化問題を設定した。古典力場計算を用いて各結晶構造モデルのエネルギーを算出し、エネルギーがより低い Si , C 原子配列を探索した。GA とナীবベイズを用いた提案手法の最適解探索のパフォーマンスを比較し、探索能力として提案手法がより優れている結果が得られた(図 1 参照)。当日は、得られた成果の詳細を紹介する。

謝辞

本研究の一部は JST-CREST(グラント番号 JPMJCR17J1)から支援を受けて行われた。

参考文献

- [1] D. Wolf, O.V. Buyevskaya, M. Baerns, Appl. Catal. A **200**, 63 (2000).
- [2] S. Lysgaard, J. S. G. Mýrdal, H. A. Hansen, and T. Vegge, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 28270 (2015).
- [3] Y. Noda, K. Nakano, H. Takeda, M. Kotobuki, L. Lu, and M. Nakayama, Chem. Mater. **29**, 8983 (2017).
- [4] S. Ju, T. Shiga, L. Feng, Z. Hou, K. Tsuda, and J. Shiomi, Phys. Rev. X **7**, 021024 (2017).
- [5] Y. Okamoto, J. Phys. Chem. A **121**, 3299 (2017).

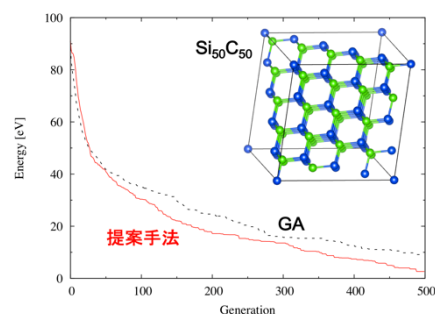


図 1. $\text{Si}_{50}\text{C}_{50}$ エネルギーの最適値との誤差