

ベイズ最適化と進化的アルゴリズムによる結晶構造探索

Crystal Structure Prediction by Bayesian Optimization and Evolutionary algorithm

長岡技科大¹, 物材機構², 東大新領域³, 理研⁴, 産総研⁵, 阪大産研⁶

○山下 智樹¹, 木野 日織², 津田 宏治^{2,3,4}, 三宅 隆⁵, 小口 多美夫⁶

Nagaoka Univ. Tech.¹, NIMS², Univ. Tokyo³, RIKEN⁴, AIST⁵, Osaka Univ.⁶,

○Tomoki Yamashita¹, Hiori Kino², Koji Tsuda^{2,3,4}, Takashi Miyake⁵, Tamio Oguchi⁶

E-mail: yamashita06@vos.nagaokaut.ac.jp

近年、指定した組成における安定構造が予測可能な、結晶構造探索手法が注目を集めている。探索アルゴリズムにはランダムサーチ (RS) や、進化的アルゴリズム (EA) が用いられてきた。しかし、複雑な系の安定構造を予測するためには、さらなる探索の高効率化が求められる。これまでに我々はベイズ最適化 (BO) を用いた選択型探索手法の開発を行い、多数の候補の中から効率よく安定構造を選択することが可能であることを示した。本研究では、RS、EA、BO および BO と EA を組み合わせたハイブリッドアルゴリズム (BO-EA) の探索効率を議論する。

Si₁₆ (ユニットセル内に Si 原子 16 個の系)、Si₃₂、Al₈O₁₂ および Y₂Co₁₇ の系について、RS、EA、BO および BO-EA を用いて結晶構造探索シミュレーションを実行した。Si₃₂ では 300 構造の探索を行い、それ以外の系では 100 構造の探索を行った。なお、選択型アルゴリズムを用いる BO および BO-EA では、Si₃₂ において 600 構造生成して 300 構造を探索、それ以外の系では 300 構造生成して 100 構造探索した。この手続きをそれぞれ 50 回繰り返して、安定構造が得られた成功率を算出したものを表 1 に示す。RS と EA を比較すると基本的には EA の方が成功率は高く、EA による構造生成はランダムよりも効果的なことがわかる。BO の成功率も RS より高く、ベイズ最適化による選択がうまく働いている。また、BO-EA はどの系においても最も成功率が高く、効率が良い探索アルゴリズムであることがわかった。図 1 は Si₃₂ における安定構造が得られた成功率を探索試行回数の関数として表したものである。BO-EA は成功率が一番高いことに加えて、他のアルゴリズムと比べて安定構造が早い段階で探索できていることがわかった。

Table 1. Success rate.

	RS	EA	BO	BO-EA
Si ₁₆	64%	60%	68%	80%
Si ₃₂	50%	60%	56%	76%
Al ₈ O ₁₂	0%	26%	0%	34%
Y ₂ Co ₁₇	44%	56%	52%	72%

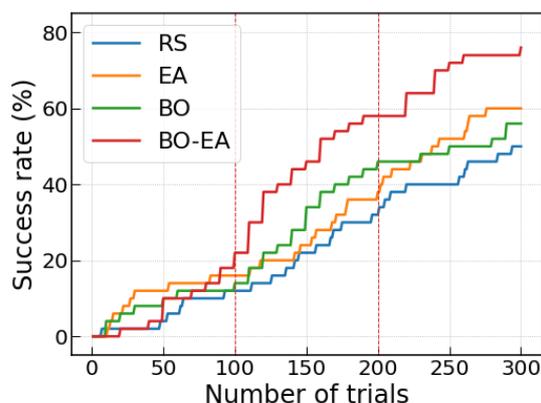


Figure 1. Success rate as a function of number of trials in Si₃₂.