

勾配ブースティング決定木による多元素ナノ合金の状態密度予測

(信大先材研¹⁾) ○難波 優輔¹・古山 通久¹

Prediction of density of states for multinary nanoalloy by gradient boosting decision tree (¹Research Initiative for Supra-Materials, Shinshu University) ○Yusuke Nanba,¹ Michihisa Koyama¹

From the perspective of electronic structure, density of states (DOS) was used to discuss the variation of catalytic activity by alloying. It was reported that the nanoalloy exhibited properties close to those of mono-metal nanoparticles (NPs) when the DOS of the nanoalloy resembled that of mono-metal NP.¹⁾ However, searching for configurations that reproduce the desired DOS required enormous computational resources for derivation using first-principles calculations. In this study, we attempted to predict the DOS of IrPdPtRhRu quinary nanoalloys by gradient boosting decision tree (GBDT) such as lightGBM and XGBoost with the descriptor of SOAP.²⁾ To save the resources, DOS of binary nanoalloys were used for training set. DOS of quinary nanoalloys predicted by GBDT with SOAP matches that calculated by DFT (Fig. 1). Cutoff radius dependence of SOAP indicates that neighboring of the adjacent atom to object atom affects DOS largely.

Keywords : Nanoalloy; Density functional theory; Machine learning; DOS

状態密度は合金化などによる触媒活性の変化を電子状態の観点から議論する際に用いられている。ナノ合金の電子状態が単金属ナノ粒子の状態密度に似ていると、性質も似ることが報告されている。¹⁾しかしながら、単金属ナノ粒子の状態密度を再現するナノ合金の配置を最適化手法から探索しようとする、第一原理計算では莫大な計算資源が必要となる。本研究では、SOAP²⁾を記述子とした lightGBM および XGBoost などの勾配ブースティング決定木 (GBDT) を用いて IrPdPtRhRu 五元ナノ合金の状態密度の予測を行った。資源を節約するため、五元ナノ合金の構成元素から成る二元ナノ合金について各原子の状態密度を取得し、訓練データとして考慮した。GBDT と SOAP の組み合わせは DFT 計算から取得した五元ナノ合金の状態密度を上手く予測している (図 1)。また、SOAP のカットオフ半径依存性から、対象の隣の隣の原子までが状態密度に大きく影響することが分かった。

本研究は科研費特別推進研究 (20H05623)

の支援により行われた。ナノ粒子モデルの計算は九州大学情報基盤センターITO および東北大学金属材料研究所 MASAMUNE-IMR で実施した。

1) A. Yang, *et al.*, *Appl. Chem. Lett.* **2014**, 105, 153109. 2) A. P. Bartók *et al.*, *Phys. Rev. B* **2013**, 87, 184115.

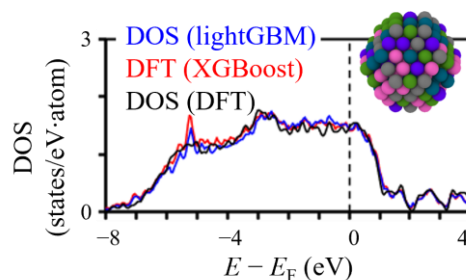


Fig. 1 Comparison between DOS of IrPdPtRhRu nanoalloys calculated by DFT and predicted by GBDT.