

Target Learning VAE とベイズ最適化による高磁性合金材料探索の効率化

Improving the efficiency of searching for highly magnetic alloy materials using Target Learning VAE and Bayesian optimization

筑波大学¹, 物質・材料研究機構² ○吉田尚暉¹, 岩崎悠真², 五十嵐康彦¹

University of Tsukuba.¹, National Institute for Materials Science (NIMS)², ○Naoki Yoshida¹,
Yuma Iwasaki², Yasuhiko Igarashi¹ E-mail: igayasu1219@cs.tsukuba.ac.jp

3 元素以上から組成される多元合金についての研究は, 組合せ爆発の問題により従来の手動による材料開発方法では困難である. そのため, 第一原理計算による物性値評価と機械学習による効率的な探索を組み合わせた自律型材料探索が重要になる (4). さらに, 入力空間の増大に伴って通常のベイズ最適化だけでなく, Autoencoder や Variational Auto-Encoder(VAE) を用いた低次元化とベイズ最適化を組み合わせが重要となる (3).

本研究では, 次元圧縮手法とベイズ最適化を組み合わせた効率的な材料探索手法に焦点を当て, ベイズ最適化にとって効果的な次元圧縮手法について検討する. 磁性合金の物性値の内, 磁気モーメント, スピン偏極率, キュリー温度は互いに相関がみられることがわかっている. そこで, 物性値情報を利用し, 最適化に有利に働く VAE モデルの学習を検討する. Target Learning VAE(TL-VAE)(1) によって, 非ターゲットプロパティ情報を埋め込むことにより, ベイズ最適化の効率が向上する潜在空間をデザインする. また, 半教師あり VAE(2) によって, 非ターゲットプロパティ情報が少数の場合においても検証する.

各物性値情報を導入した VAE の低次元空間でベイズ最適化を行った結果を示す. 図 1 はキュリー温度のベイズ最適化を行った結果である. 探索回数 50 回時点で比較を行うと, 磁気モーメントとスピン偏極率を同時に加えたもの (赤) は組成のみ (黒) のものと比較してベイズ最適化の性能が 31.4% 向上している. この結果から, 最適化目的の情報またはそれに関連する情報を VAE の学習に利用する方法は最適化性能の向上に寄与すると考えられる.

参考文献

- [1] Ericsson Chenebueh, Michel Nganbe, and Alain Tchagang, *Target-learning the latent space of a variational autoencoder model for the inverse design of stable perovskites.*, Canadian AI, 2023.
- [2] Stephan Eissman, Daniel Levy, Rui Shu, Stefan Bartzsch, and Stefano Ermon, *Bayesian optimization and attribute adjustment*, Proc. 34th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, 2018.
- [3] Yuma Iwasaki, Hwang Jaekyun, Yuya Sakuraba, Masato Kotsugi, and Yasuhiko Igarashi, *Efficient autonomous material search method combining ab initio calculations, autoencoder, and multi-objective bayesian optimization*, Science and Technology of Advanced Materials: Methods **2** (2022), no. 1, 365–371.
- [4] Yuma Iwasaki, Ryohto Sawada, Eiji Saitoh, and Masahiko Ishida, *Machine learning autonomous identification of magnetic alloys beyond the slater-pauling limit*, Communications Materials **2** (2021), no. 1, 31.

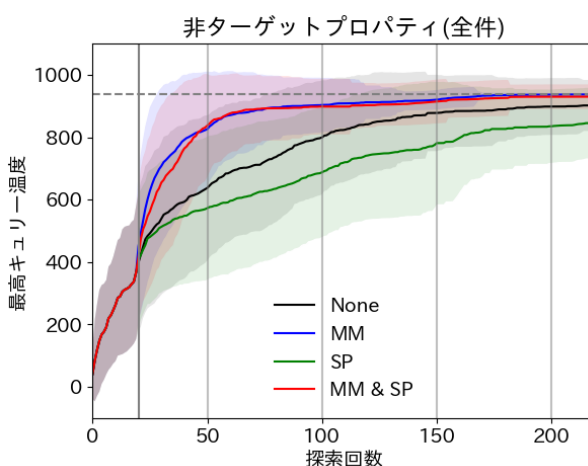


図 1: TL-VAE の学習プロパティ情報とベイズ最適化性能