

ベイズ最適化と第一原理計算を用いた 磁石化合物の組成最適化による物質探索

○深澤 太郎*, 三宅 隆

産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

Materials exploration by optimization of chemical composition using first-principles calculation and Bayesian optimization

○Taro Fukazawa* and Takashi Miyake

CD-FMat, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

機能材料の探索には多くの考慮すべきパラメータがあり、その可能なすべての組み合わせを尽くして探索することは不可能である。そこで近年、マテリアルズインフォマティクスが大いに注目されており、機械学習などの方法を用いて考え得る多くの候補物質・候補プロセスパラメータの中からより効率的に有望なものを見つけ出す手法の開発がさかんに行われている。

われわれも永久磁石をターゲットに、機械学習と第一原理計算を用いて有望な磁石化合物を探索する手法の開発を行っている。最近とくに機械学習の方法のひとつであるベイズ最適化に注目し、磁化・キュリー温度・生成エネルギーなどの磁石化合物にとって重要な物性値を組成について効率的に最適化する手法を提案した[1]。

この手法の目的は、時間のかかる第一原理計算の回数をできるだけ少なく抑えながら、計算によって得られたデータを使って、より高速に性能値の高い物質を発見することである。とくに本講演ではこの枠組みを用いることで添加元素の選択やその量についての最適化を効率的に行えることを示す。

我々の方法では主な第一原理計算の手法として Kohn-Sham Green 関数法を用いる。またドーピングに伴うランダムネスを Coherent potential approximation (CPA) を用いて取り扱うことで非化学量論的な系のデータを集める方式をとった。しかし KKR 法には全エネルギーの計算を効率よく行えないという欠点があるため、これを補うため化学量論的な系について Projector augmented wave (PAW) 法による第一原理計算を行い、確率モデルを用いてそれらの結果をデータ統合する手法を開発した。

このような手法を用いて我々は ThMn_{12} 型構造の (R,

Z) (Fe, Co, Ti)₁₂ (R = Y, Nd, Sm; Z = Zr, Dy) について組成最適化を行い、磁化・キュリー温度・単体からの生成エネルギーのそれぞれについて性能値の高い系を少ない第一原理計算の回数で見つけるベンチマークを行った。我々は 3630 個の系を用意しその中の TOP10 を 50 回以内の第一原理計算によって見つける確率を統計的に算出した。このタスクは単なる乱択では成功率 13% であるが、適切なベイズ最適化を用いた場合には 100% に近い成功率となった (下図)。

またベイズ最適化の際には、記述子(系をコンピュータ可読な形に表す形式)の選択が重要であることも分かった。記述子の選択は大きく探索効率に影響し、最悪の場合には乱択よりも悪くなることも報告する。

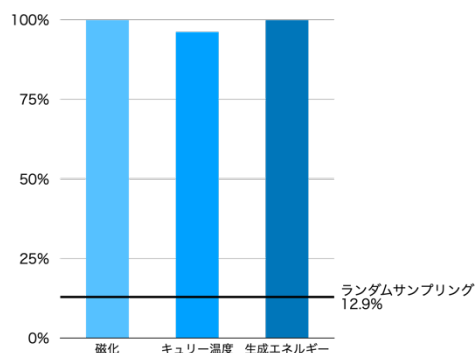


Fig. 1. ベイズ最適化による探索の成功率 (3630 中 TOP10 の性能値の物質を 50 回の探索で見つける割合)

文 献

- 1) T. Fukazawa et al, PRMaterials 3 (2019) 053807.

*E-mail: taro.fukazawa@aist.go.jp