2021/5/24

PHYSBOの概要

東京大学/物質・材料研究機構　田村 亮

NIMS 国立研究開発法人 物質・材料研究機構

東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

MANA Nano Revolution for the Future

MaDIS NIMS MATERIALS DATA and INTEGRATED SYSTEM

PHYSBO

English 日本語

Top PHYSBOについて インストール ドキュメント ニュース お問合せ

PHYSBO

- ver. 1.0-
  - 田村 亮 (物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点)
  - 寺山 慧 (横浜市立大学大学院 生命医科学研究科)
  - 津田 宏治 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)
  - 植野 剛 (株式会社 Magne-Max Capital Management)
  - 本山 裕一 (東京大学 物性研究所)
  - 吉見 一慶 (東京大学 物性研究所)
  - 川島 直輝 (東京大学 物性研究所)

PASUMS

Project for advancement of software usability in materials science

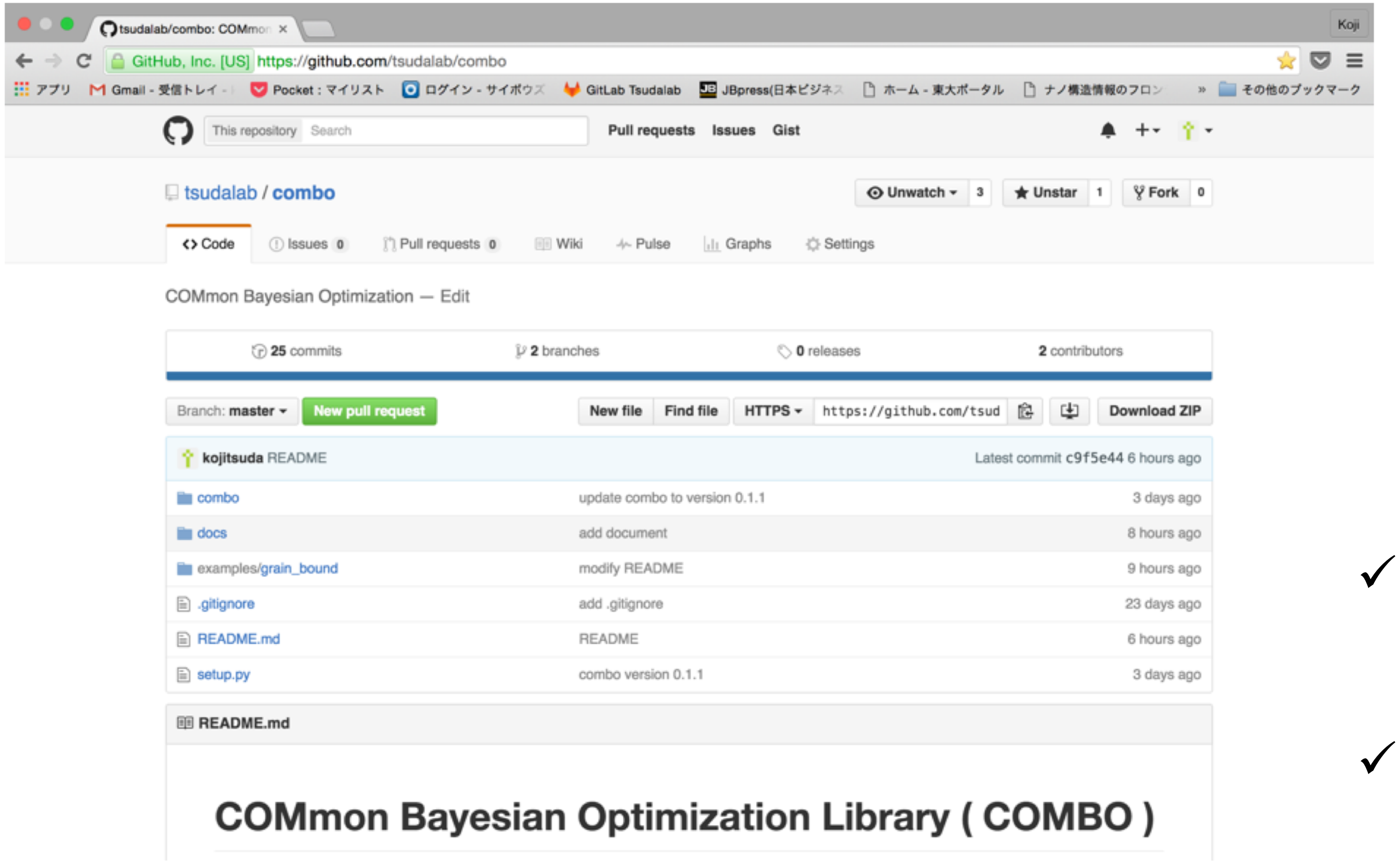
PASUMS

東京大学物性研究所

ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

ライセンスがGPLなので企業の方は注意を！

ベイズ最適化パッケージCOMBO



- ✓ ハイパーパラメタの学習を自動で実行
- ✓ トレーニングデータに対して線形計算可能

https://github.com/tsudalab/combo

ベイズ最適化とは？（良い特性を得る）

$$\underline{y} = f(\underline{\mathbf{x}})$$

目的変数
(材料特性)

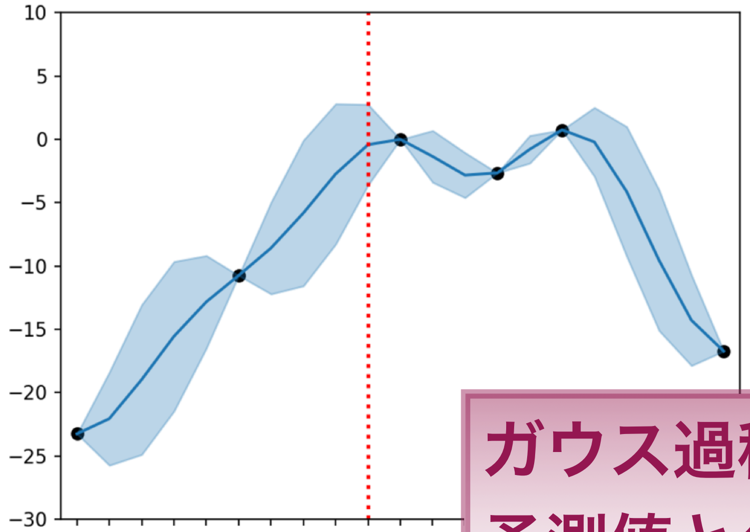
説明変数
(組成，構造，プロセス)

f がわからない場合に有用な最適化手法
→ **ベイズ最適化**

- <u>N個の候補点</u>があり，この中から最大の観測値を持つものを探したい．

  $\mathbf{x}_i \quad (i = 1, 2, ..., N)$

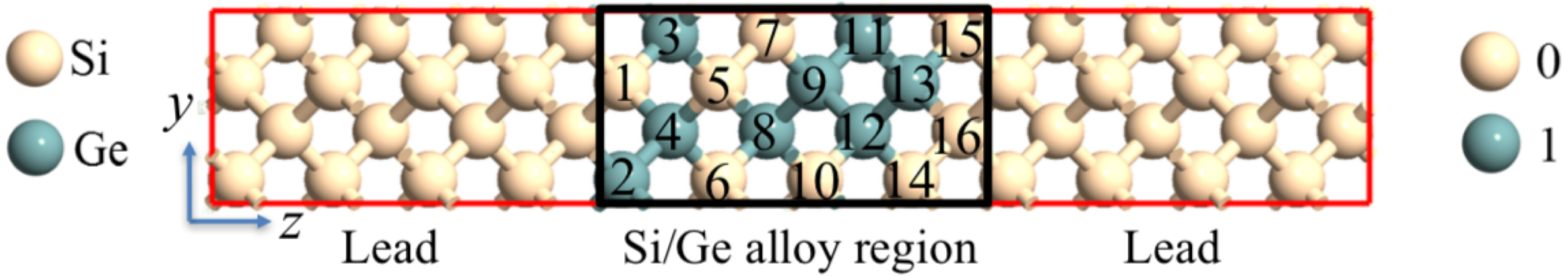
- できるだけ実験数を少なくしたい．
- M個の候補点に対する実験が終わった．
- 次のM+1個目の候補点を最適に選びたい．
- M個のサンプル点から予測モデルを学習し，それを用いて，残りの候補点をスコアリングし実際に観測するサンプルを選ぶ．



ガウス過程回帰
予測値と分散から，
次の候補を選ぶ

応用事例１：熱伝導率の最適化

Question: How to organize 16 alloy atoms (Si: 8, Ge: 8) to obtain the largest and smallest interfacial thermal conductance?



Descriptors: $C_{16}^{8} = 12{,}870$

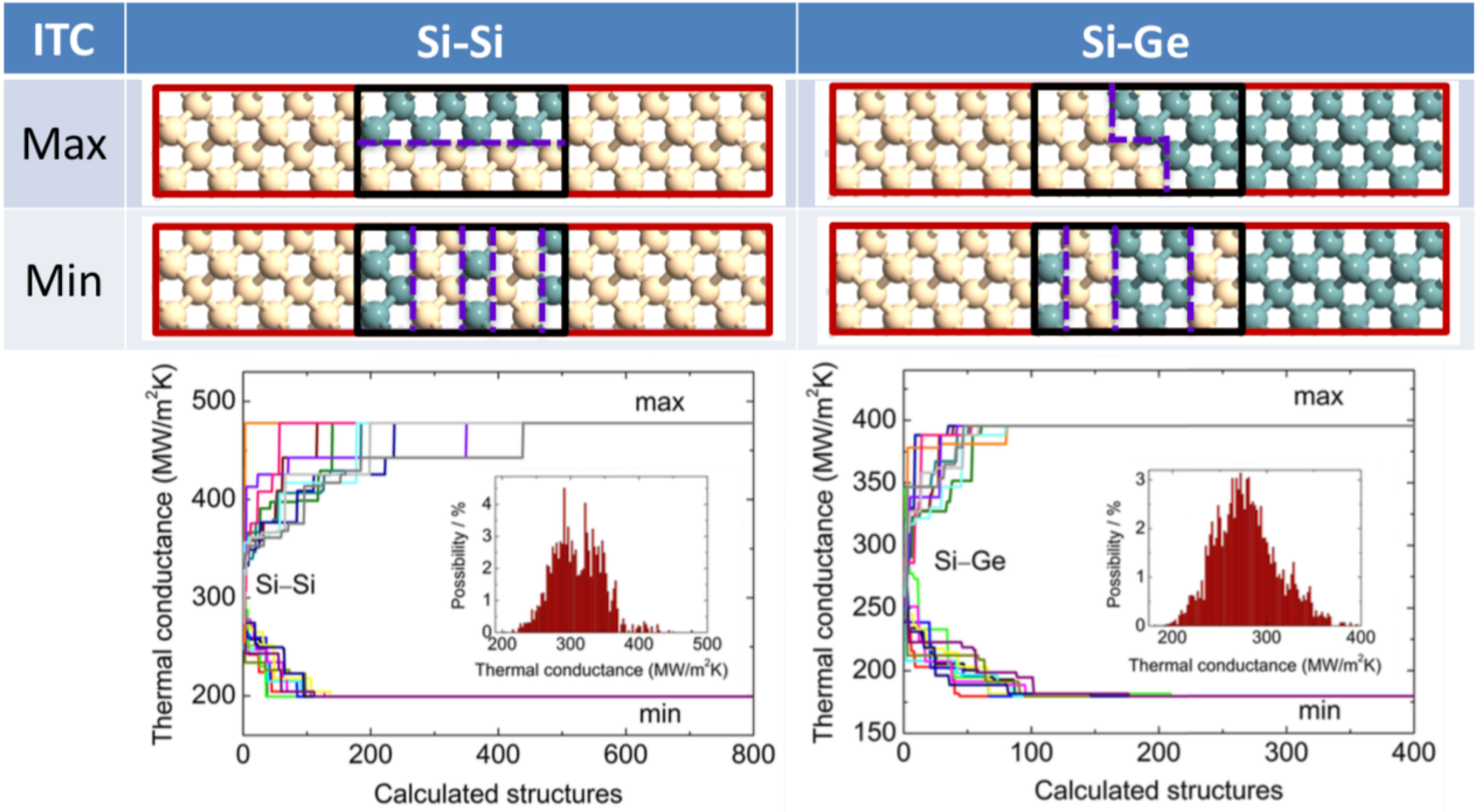
Case	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
3	1	1	1	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0
…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…	…

Calculator: Atomistic Green’s Function (AGF): Phonon transmission

Evaluator: Interfacial Thermal Conductance (ITC)

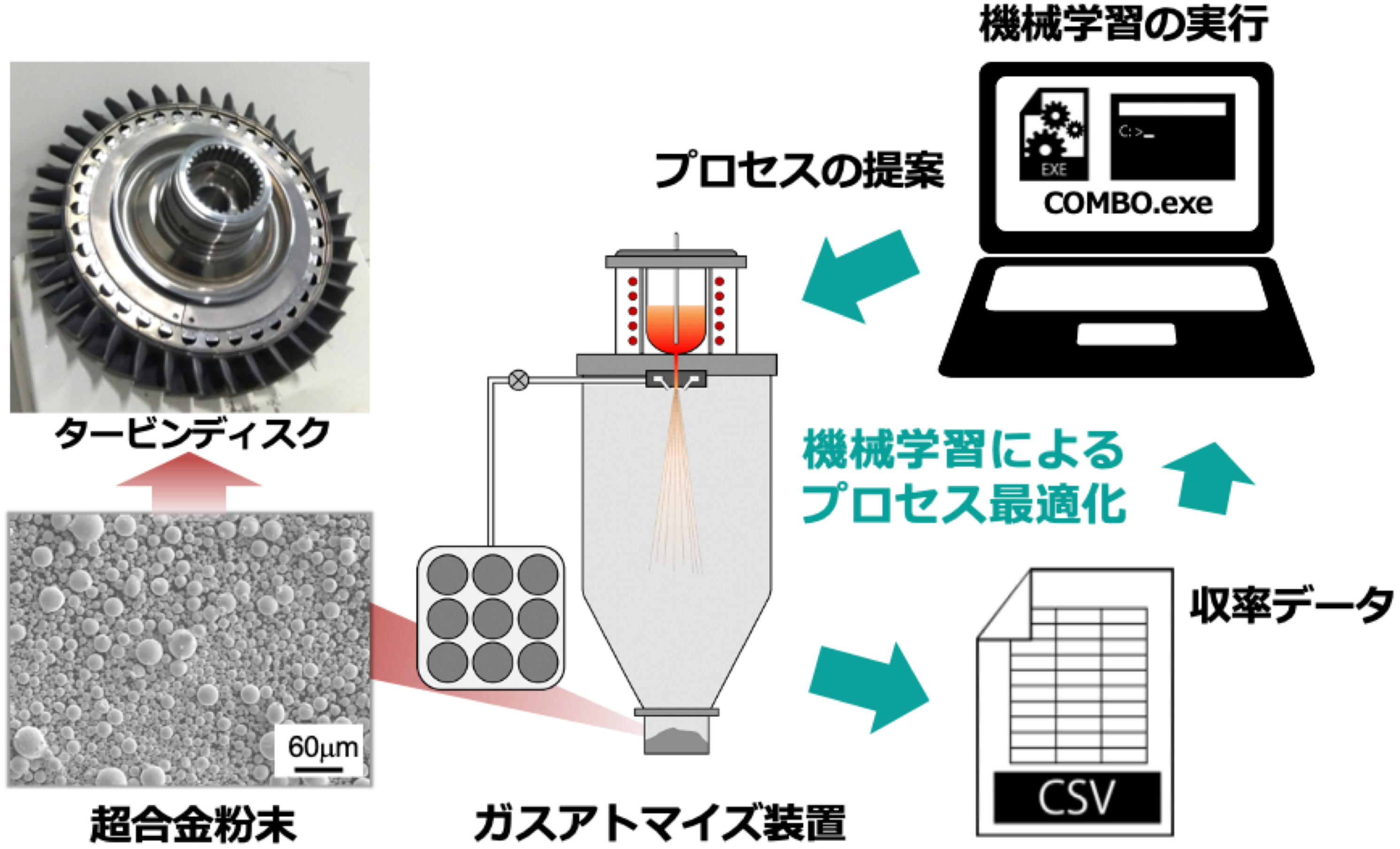
Optimization method: Thompson Sampling (Bayesian Optimization)

応用事例１：熱伝導率の最適化



S. Ju, K. Tsuda, J. Shiomi, et al, Phys. Rev. X **7**, 021024 (2017).

応用事例２：ガスアトマイズ最適化



R. Tamura, T. Osada, K. Minagawa, T. Kohata, M. Hirosawa,
K. Tsuda, and K. Kawagishi,
Materials & Design 198, 109290 (2020).

最適化対象超合金

航空機エンジン用材料として有望なNi-Co基超合金

	Ni	Co	Cr	Mo	W	Al	Ti	Nb	Ta	Hf	Zr	C	B	O	γ'-solvus Temp.	Solidus Temp.	Liquidus Temp.
							wt.%							ppm	°C	°C	°C
Nominal	Bal.	27.0	11.7	3.4	1.9	3.2	4.4	0.5	2.2	0.35	0.05	0.03	0.02	-	1178	1232	1339
Actual (< 53 μm)	Bal.	27.8	11.6	3.39	1.95	3.22	4.53	0.49	2.21	0.33	0.046	0.03	0.016	150	1182	1231	1337

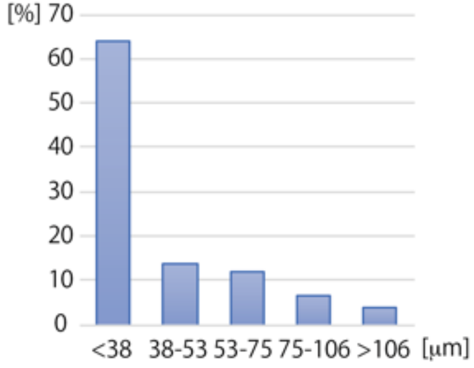
最適化手順

現状の収率データセット

溶解温度 [℃]	ガス圧力 [MPa]	53 μm以下収率 [%]
1600	6.0	64.63658
1500	9.0	76.64815
1650	7.0	71.50594
⋮	⋮	⋮

データの追加

粒度分布



ふるい分級

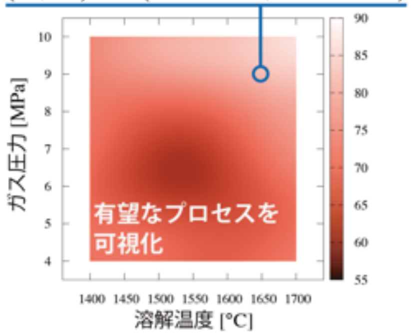
機械学習を用いた粉末製造プロセス最適化

機械学習予測モデルの学習

ベイズ最適化

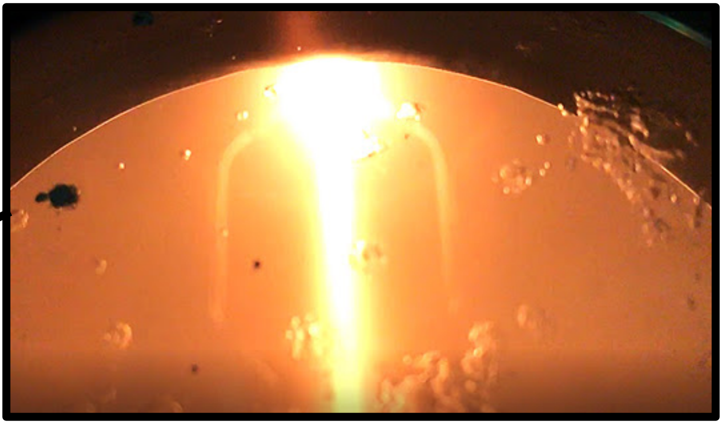
候補プロセスの選定

$(T, P) = (1650\,^\circ\mathrm{C}, 9.0\,\mathrm{MPa})$



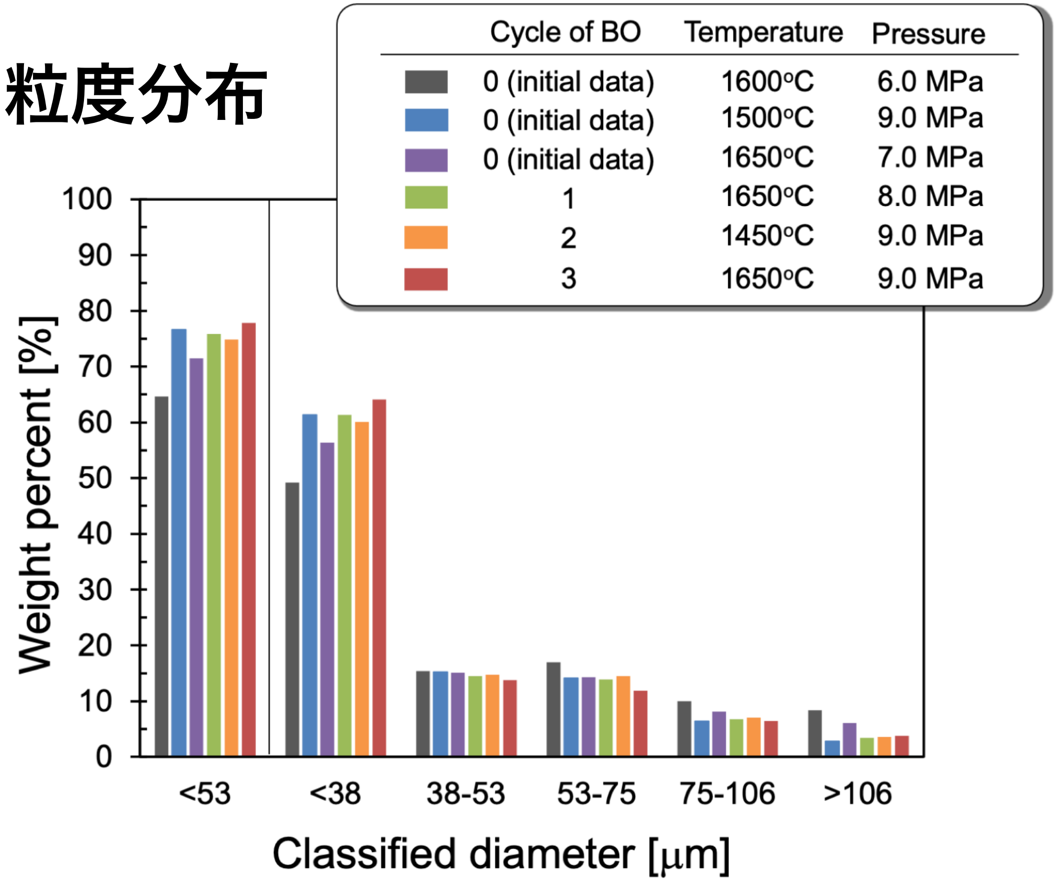
プロセスの提案

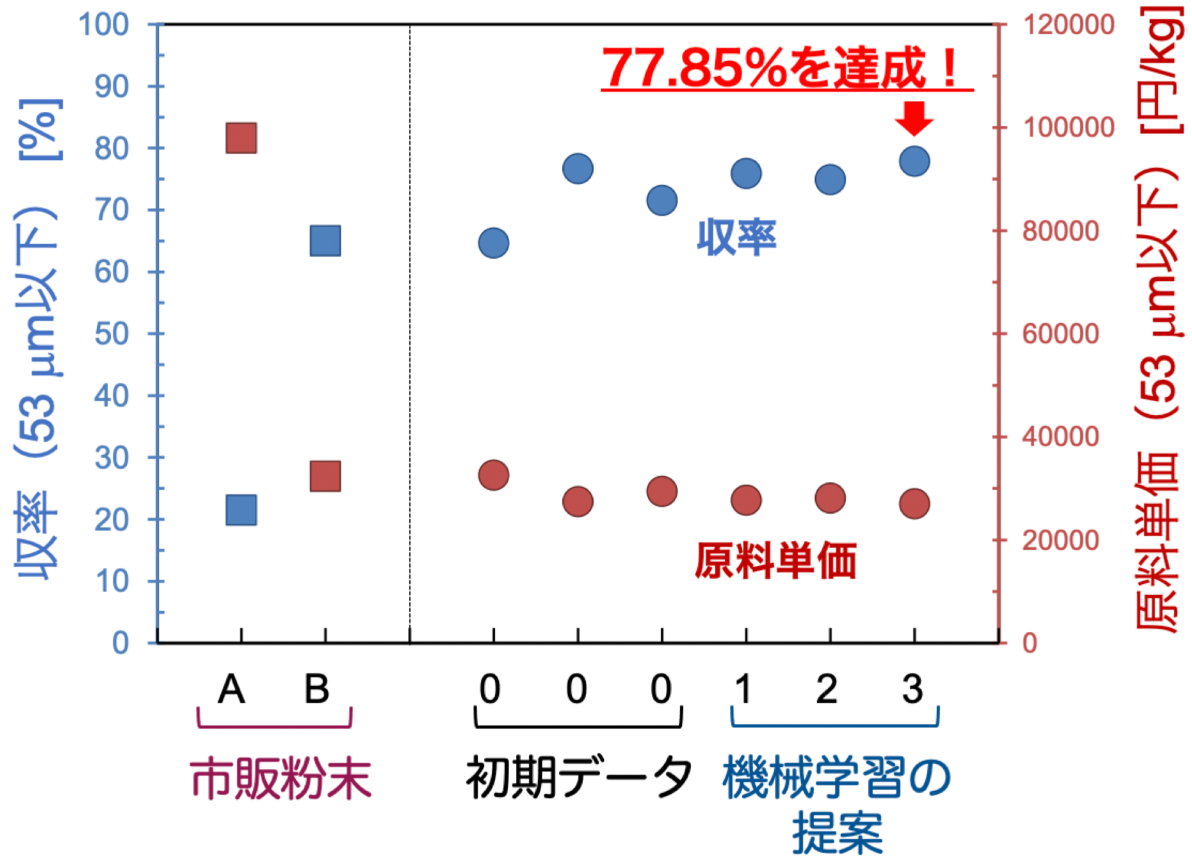
ガスアトマイズ



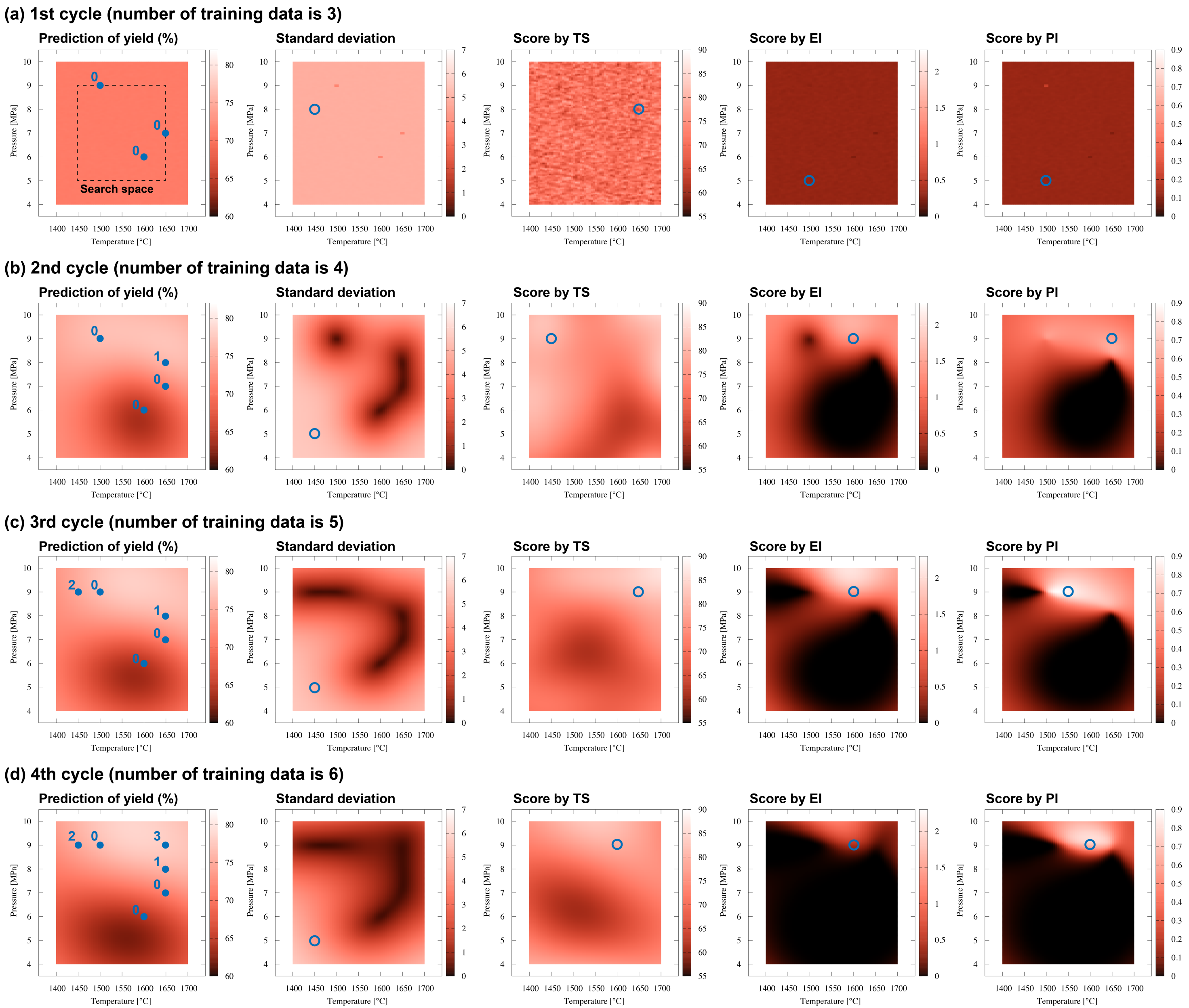
最適化結果-試行数６回-

粒度分布





機械学習による予測結果

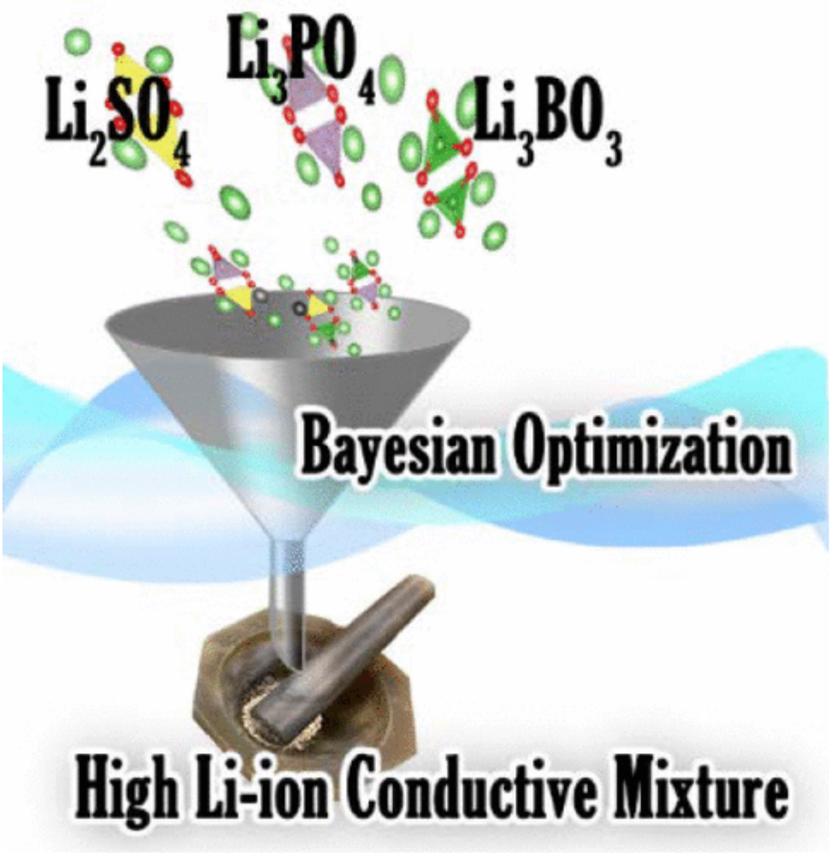


53μm以下の
粉末収率を
向上させる

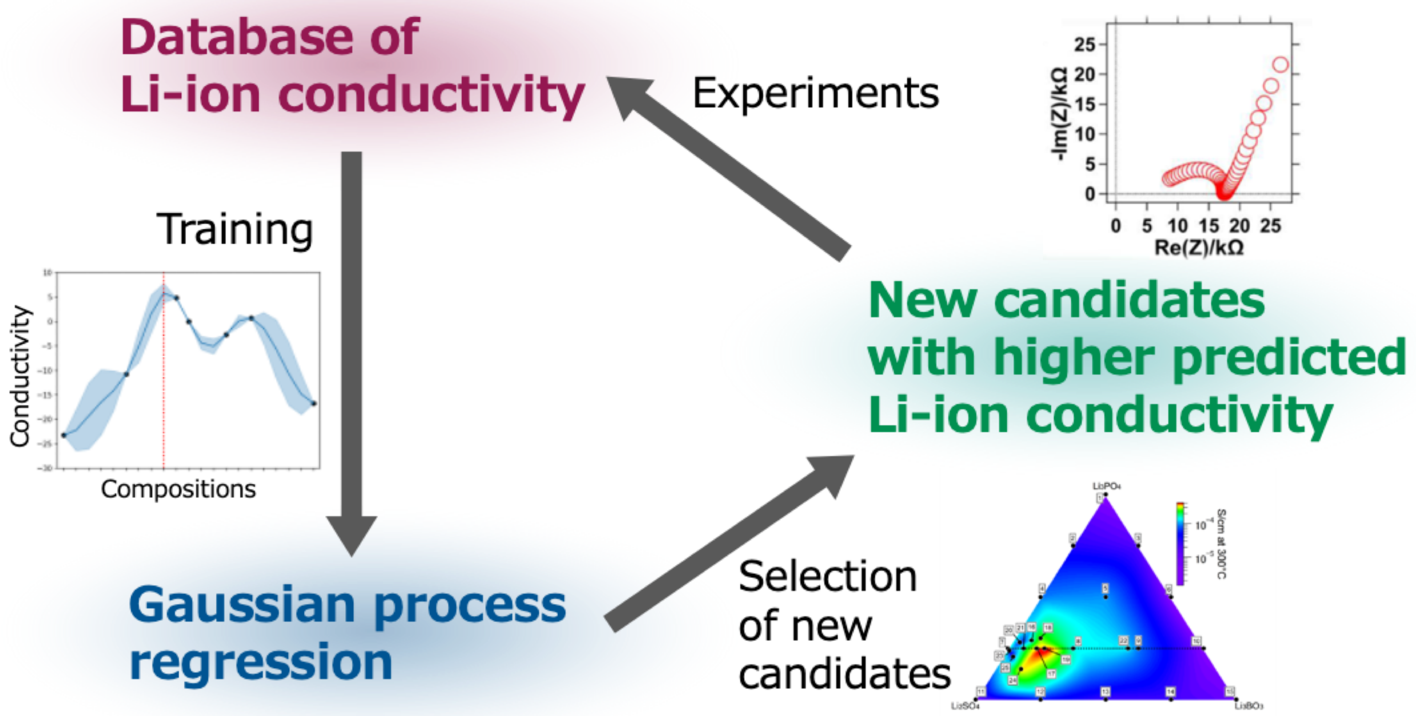
- 溶解温度
- ガス圧力

を探索する.

応用事例３：Liイオン伝導度最適化



最適化手順



K. Homma, Y. Liu, M. Sumita, R. Tamura, N. Fushimi, J. Iwata,
K, Tsuda, and C. Kaneta,
The Journal of Physical Chemistry C 124, 12865 (2020).

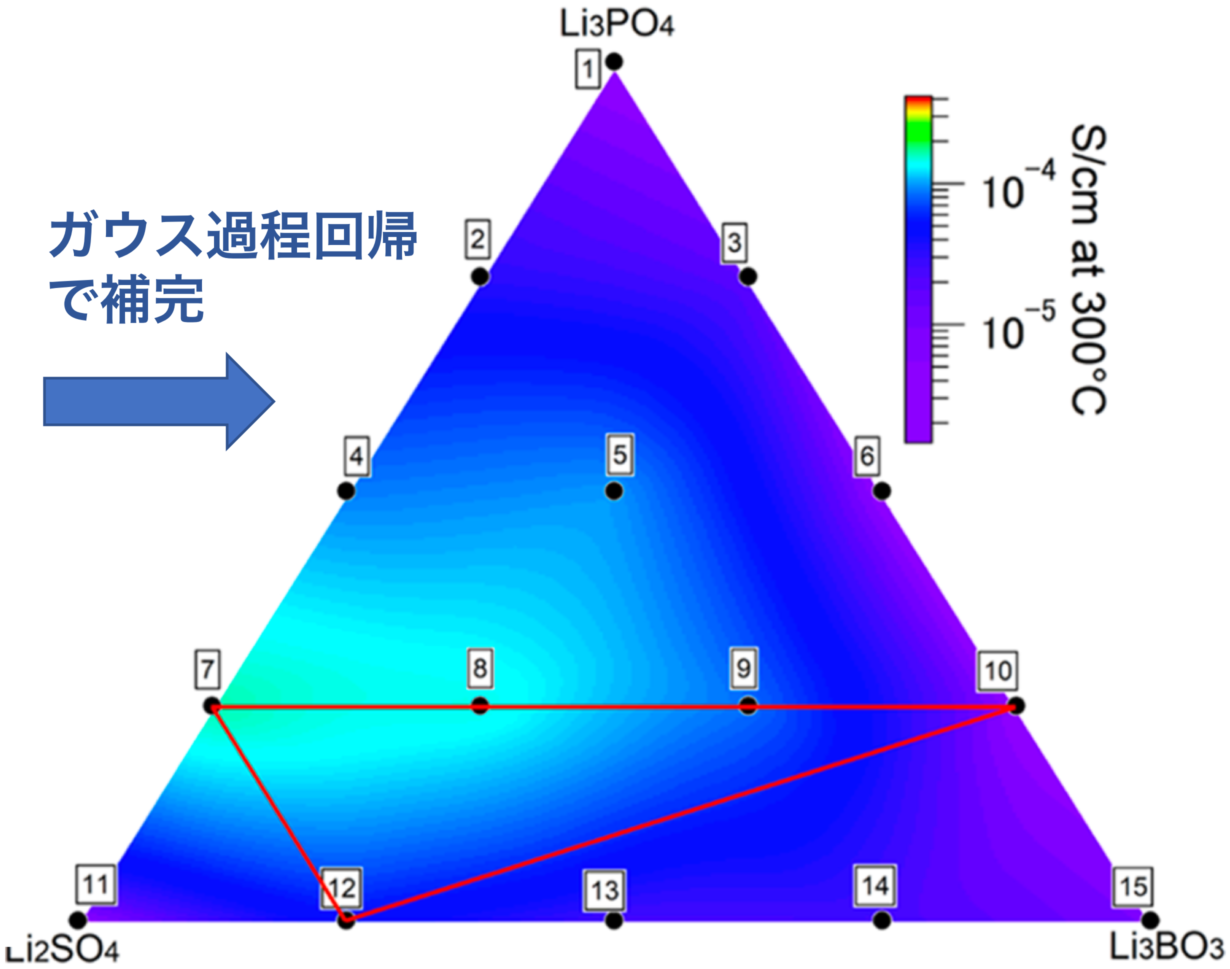
初期データの準備

Li_2SO_4, Li_3PO_4, Li_3BO_3の混合

15点の初期データ

sample no.	ratio (Li_3PO_4, Li_3BO_3, Li_2SO_4)	ionic conductivity (S/cm)
1	(100, 0, 0)	3.9×10^{-9}
2	(75, 0, 25)	3.3×10^{-5}
3	(75, 25, 0)	1.7×10^{-5}
4	(50, 0, 50)	9.9×10^{-5}
5	(50, 25, 25)	9.7×10^{-5}
6	(50, 50, 0)	5.6×10^{-7}
7	(25, 0, 75)	1.6×10^{-4}
8	(25, 25, 50)	1.7×10^{-4}
9	(25, 50, 25)	8.3×10^{-5}
10	(25, 75, 0)	1.2×10^{-6}
11	(0, 0, 100)	1.4×10^{-7}
12	(0, 25, 75)	4.9×10^{-5}
13	(0, 50, 50)	2.3×10^{-5}
14	(0, 75, 25)	2.3×10^{-5}
15	(0, 100, 0)	9.1×10^{-6}

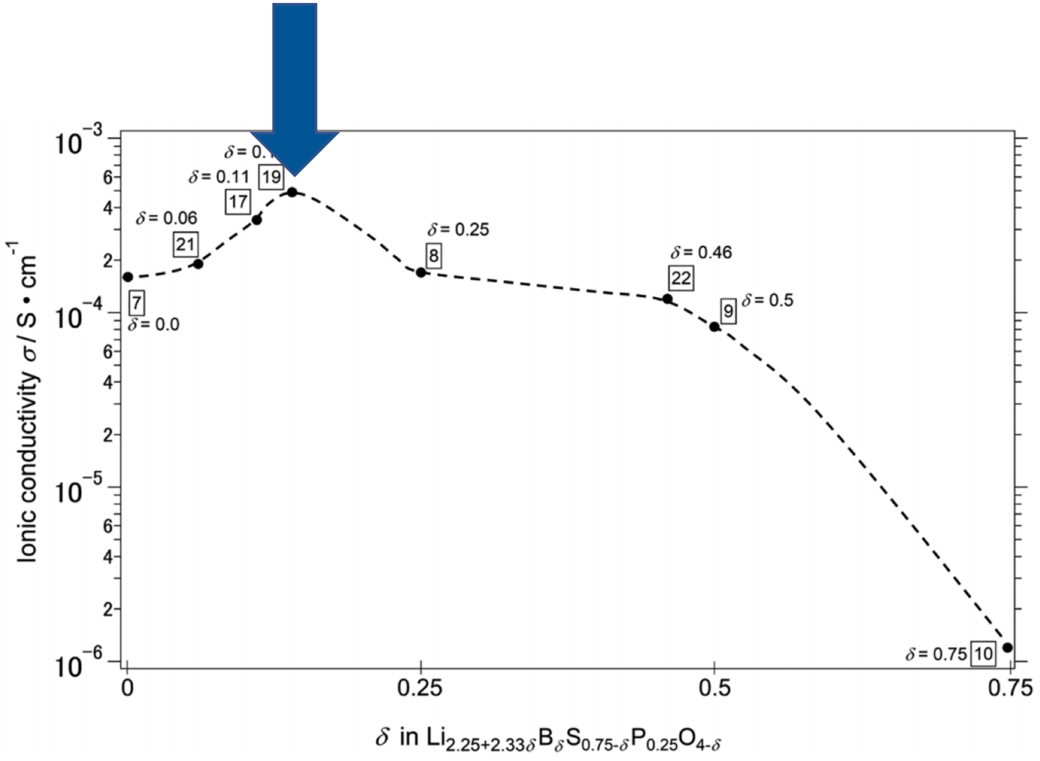
ガウス過程回帰
で補完



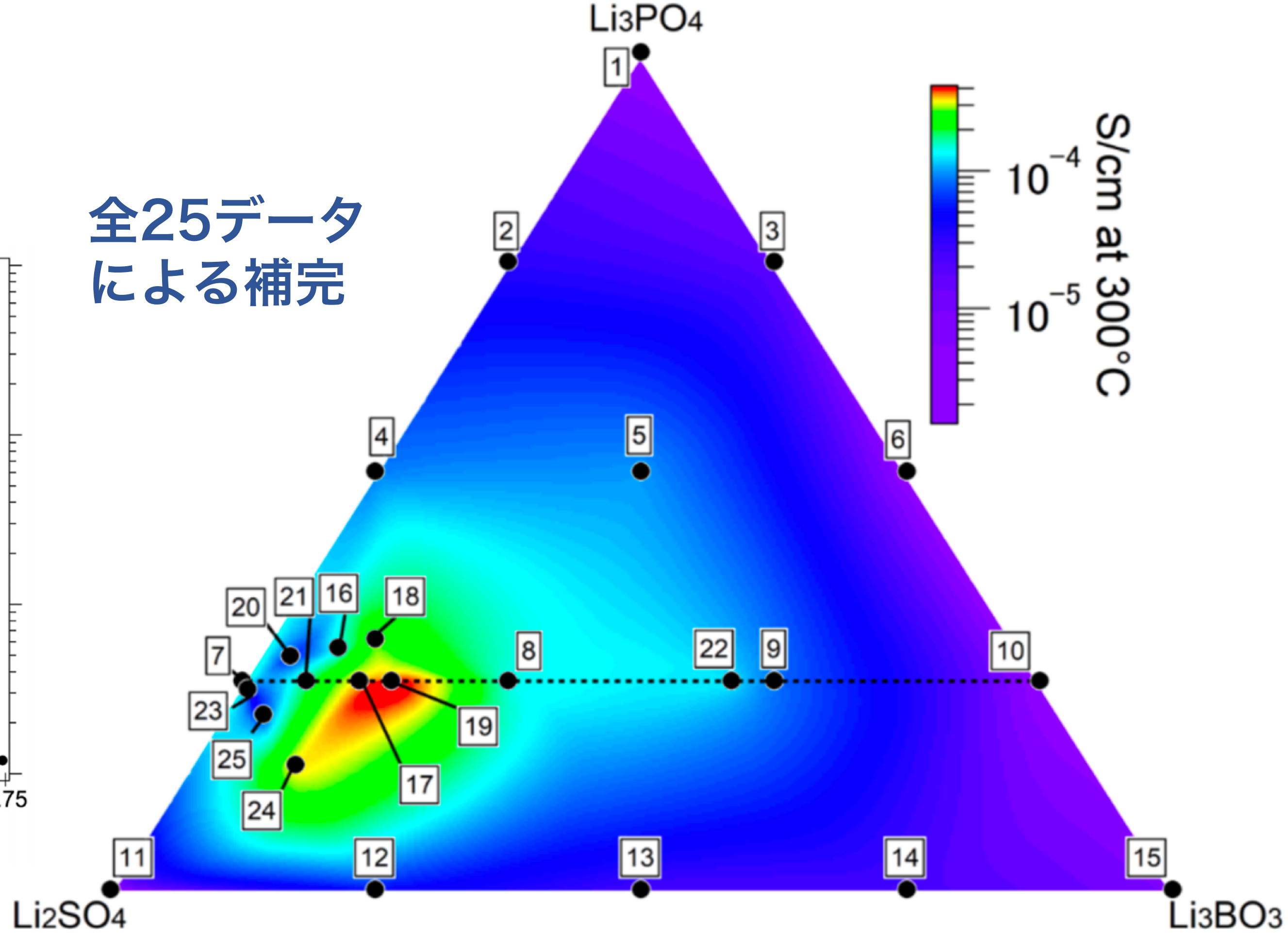
ベイズ最適化による最適組成

Li_2SO_4, Li_3PO_4, Li_3BO_3の混合

4.9 ×10^{-4} S/cm (300 °C)



全25データ
による補完



応用事例４：ハミルトニアン推定

フォワードモデリング

$P(m(H,\mathbf{x})|\mathbf{x})$ 　　$P(m^{\mathrm{ex}}(H)|m(H,\mathbf{x}))$

有効モデル

$\mathbf{x}$ ={モデルパラメタ}

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \cdots$$

モデルによる計算磁化

$$m(H,\mathbf{x})$$

実験による観測磁化

$$m^{\mathrm{ex}}(H)$$

$$P(\mathbf{x}|m^{\mathrm{ex}}(H)) = \frac{P(m^{\mathrm{ex}}(H)|\mathbf{x})P(\mathbf{x})}{P(m^{\mathrm{ex}}(H))}$$

：ベイズの定理

ベイズモデリング

$P(B|A)$：事象Aが観測された後での，事象Bが観測される条件付き確率（事後分布）

ベイズモデリング

実験による測定結果を入力し，事後確率分布を最大とするハミルトニアンを求める.

事後確率分布（最大化したい）

$$P(\underline{\mathbf{x}}|\{y^{\mathrm{ex}}(g_l)\}_{l=1,\cdots,L}) = \exp[-E(\mathbf{x})]$$

推定したいモデルパラメタ

エネルギー関数（最小化したい）

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{l=1}^{L}\left[\underbrace{y^{\mathrm{ex}}(g_l)}_{\text{測定物理量}} - \underbrace{y^{\mathrm{cal}}(g_l,\mathbf{x})}_{\text{計算物理量}}\right]^2 - \log \underbrace{P(\mathbf{x})}_{\text{事前確率分布}}$$

測定物理量
(実験により測定)

計算物理量
(モデルから計算)

事前確率分布
（事前知識）

R. Tamura and K. Hukushima, Phys. Rev. B 95, 064407 (2017).

古典イジングモデルのパラメタ推定

フォワード計算は平均場近似で実行
(事前確率分布は定数と仮定)

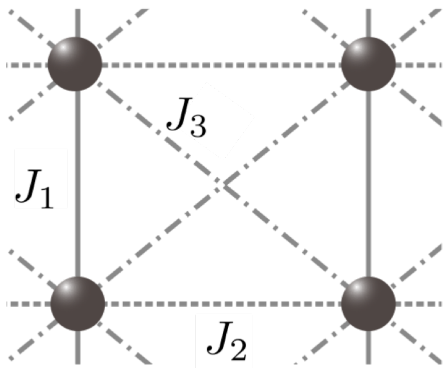
R. Tamura and K. Hukushima,
PLoS ONE 13, e0193785 (2018).

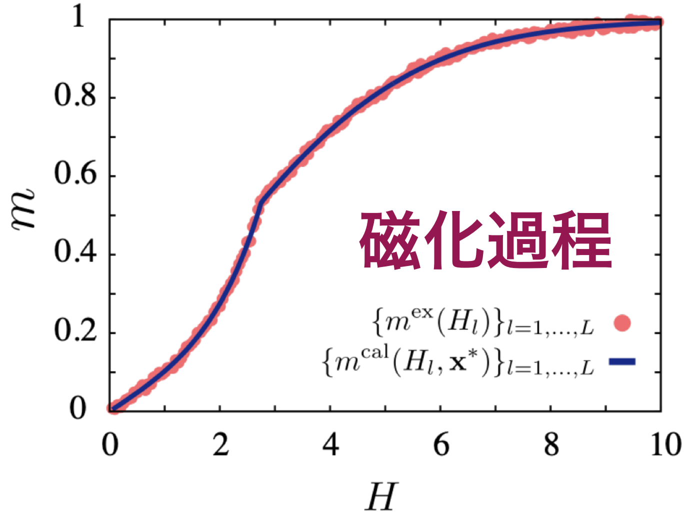
$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{l=1}^{L}\left[y^{\mathrm{ex}}(g_l) - y^{\mathrm{cal}}(g_l,\mathbf{x})\right]^2$$

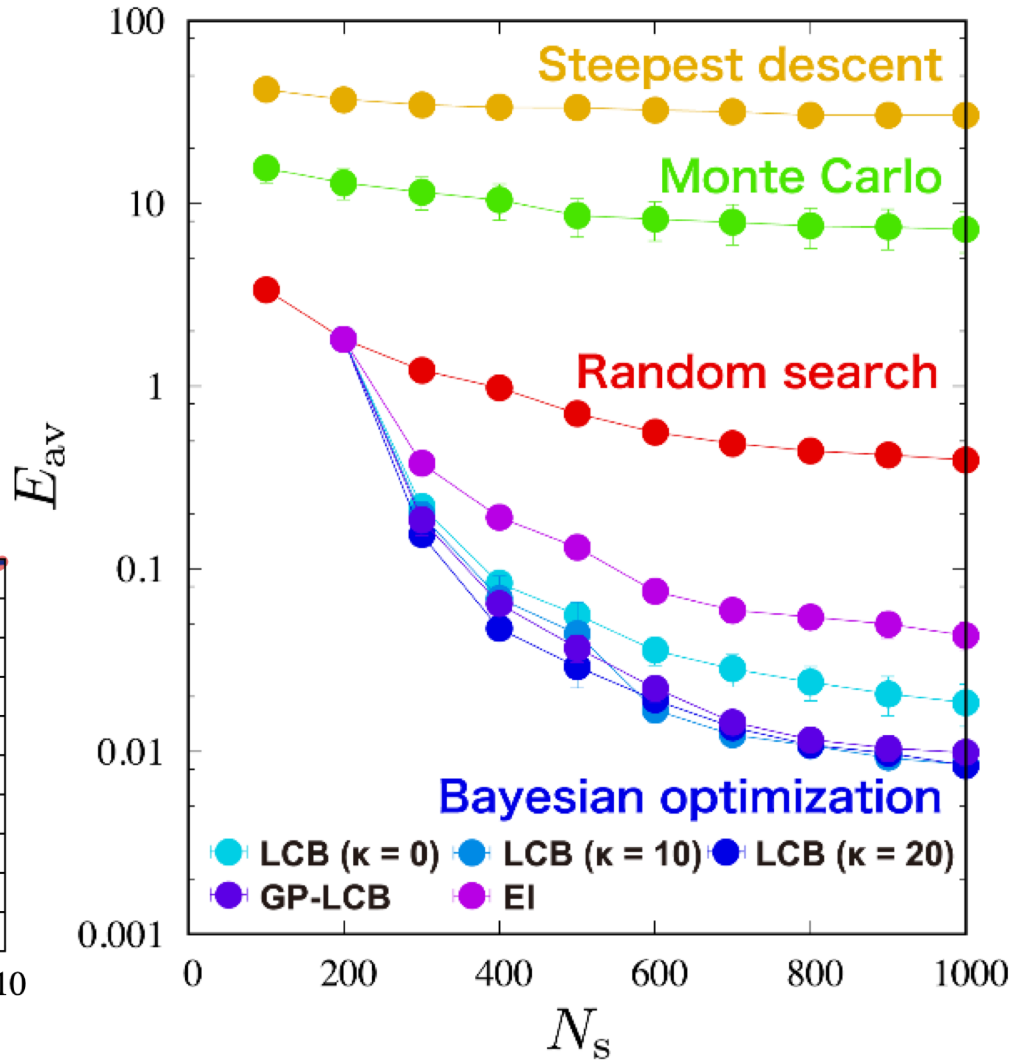
を最小化するパラメタをベイズ最適化で探索

対象ハミルトニアン：

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z - H\sum_i \sigma_i^z$$







量子ハイゼンベルクモデルのパラメタ推定

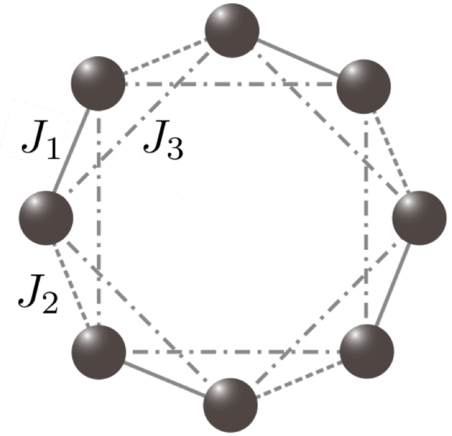
フォワード計算は厳密対角化で実行
(事前確率分布は定数と仮定)

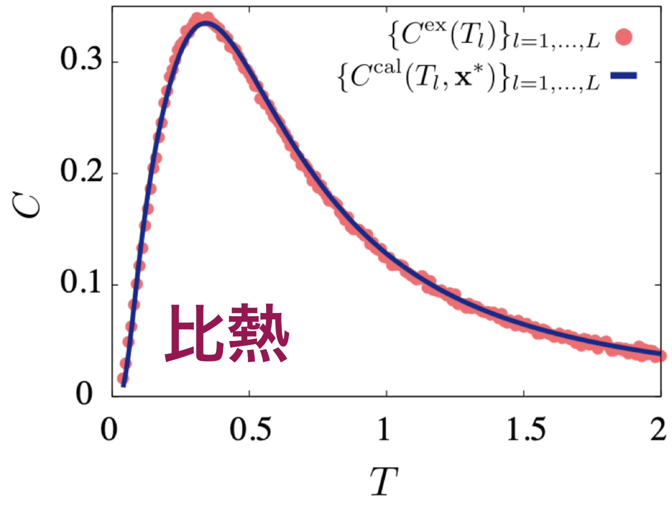
$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{l=1}^{L}\left[y^{\mathrm{ex}}(g_l) - y^{\mathrm{cal}}(g_l, \mathbf{x})\right]^2$$

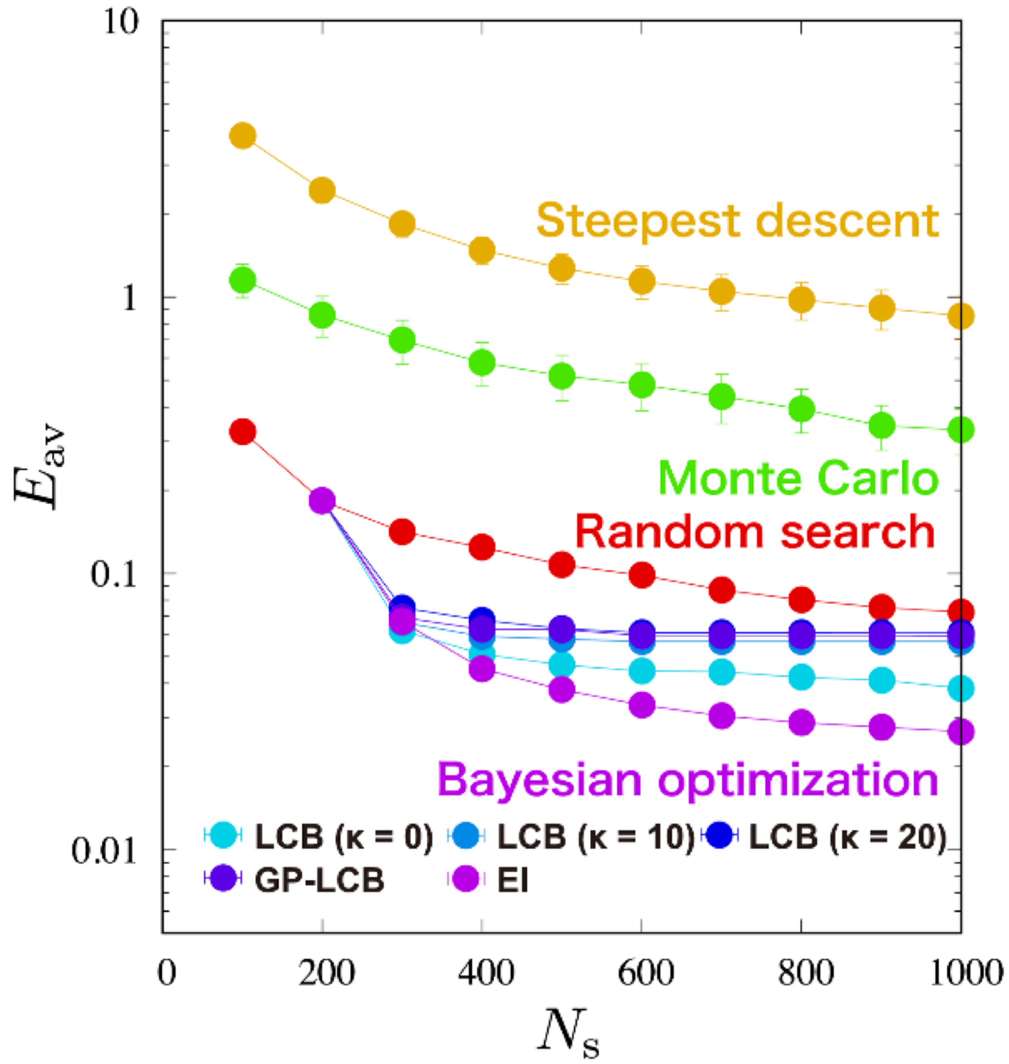
を最小化するパラメタをベイズ最適化で探索

対象ハミルトニアン：

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij}\left[s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z\right] - H\sum_i s_i^z$$



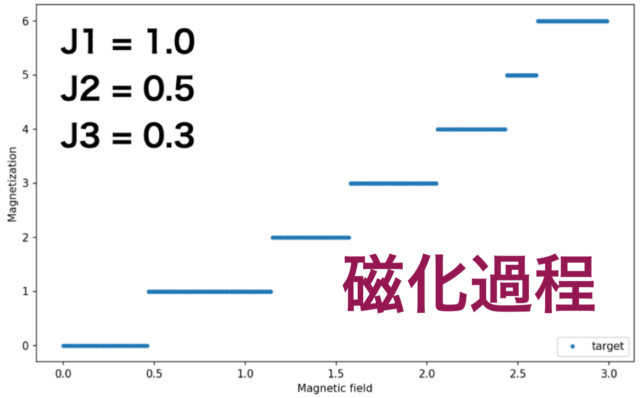


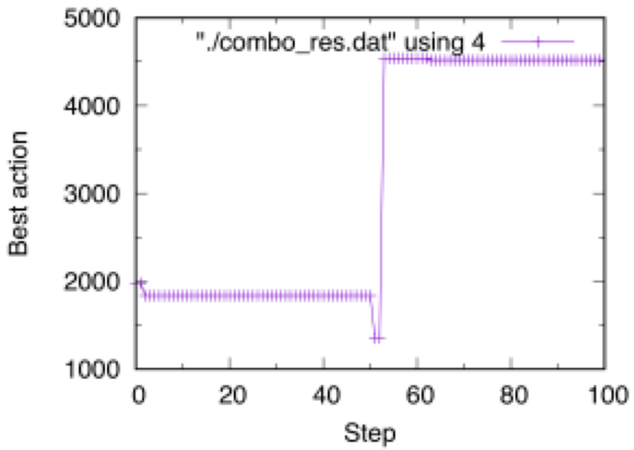


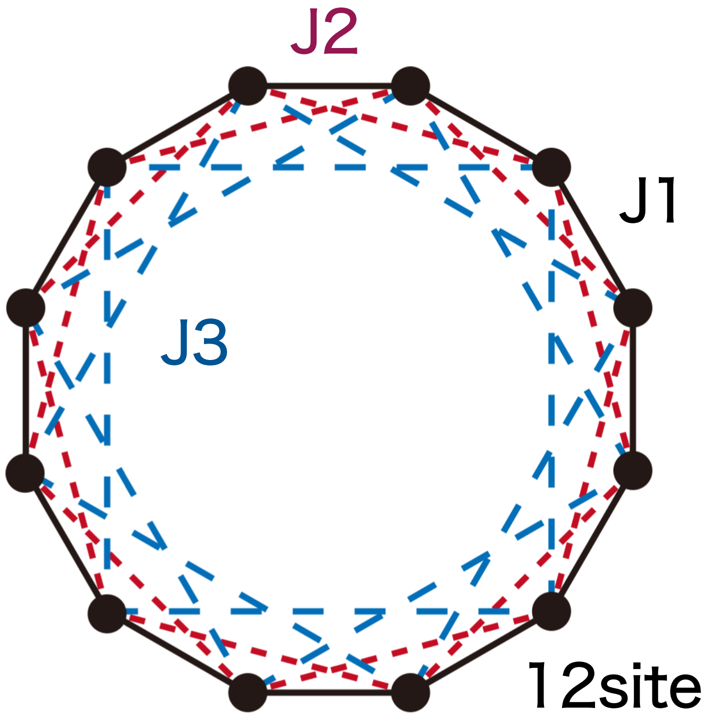
HΦを用いたハミルトニアン推定

物性研
吉見一慶さんと
共同開発

$$H=\sum_{i=1}^{12} J_1 S_i\cdot S_{i+1}+J_2 S_i\cdot S_{i+2}+J_3 S_i\cdot S_{i+3}$$

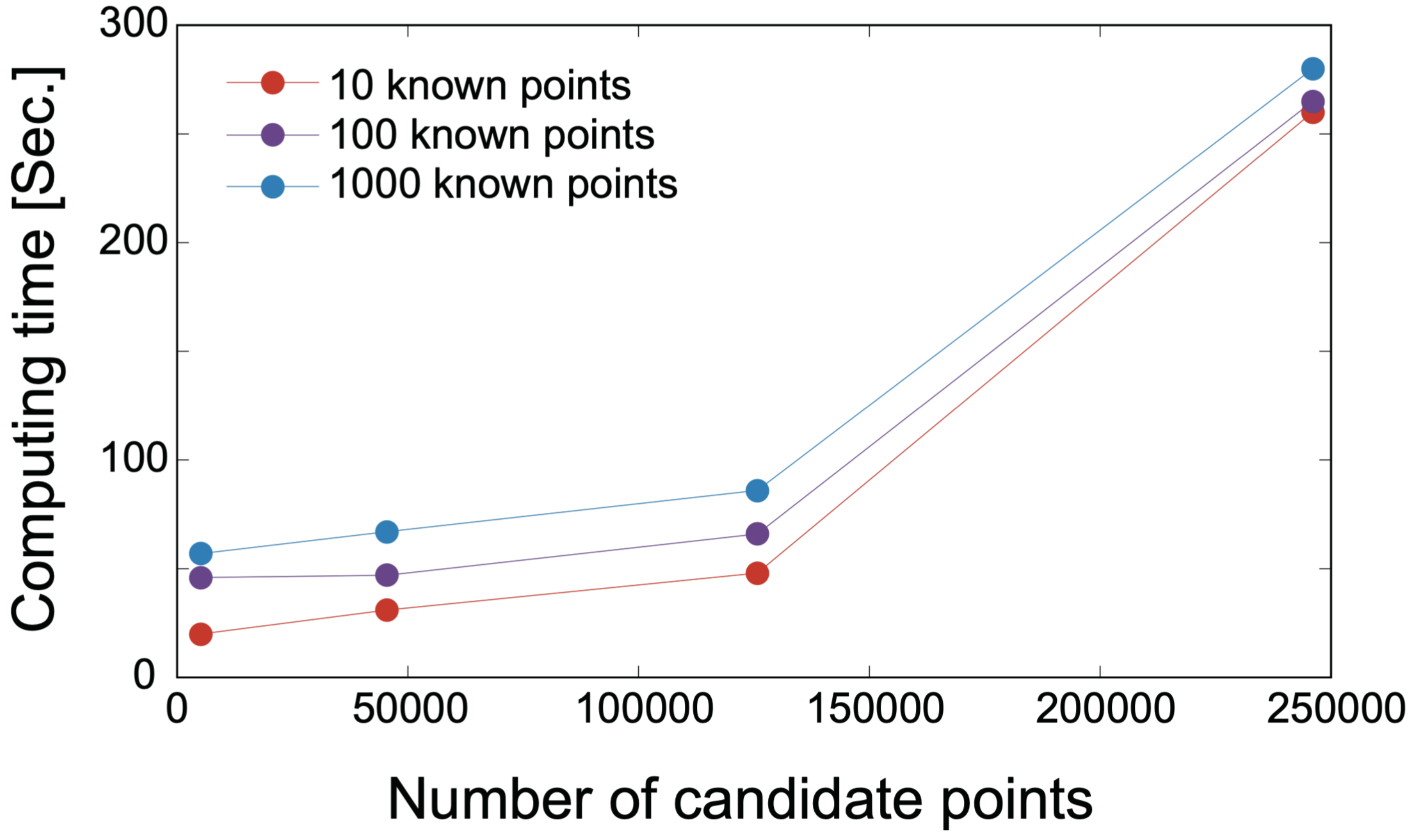






ベイズ最適化に残された問題

ベイズ最適化では，全ての候補に対して獲得関数を計算している.
候補が多いと計算が大変…



材料科学や物理では，
組合せ爆発が起こる.

獲得関数計算をスパコンで並列計算すれば，より高速化できるか？

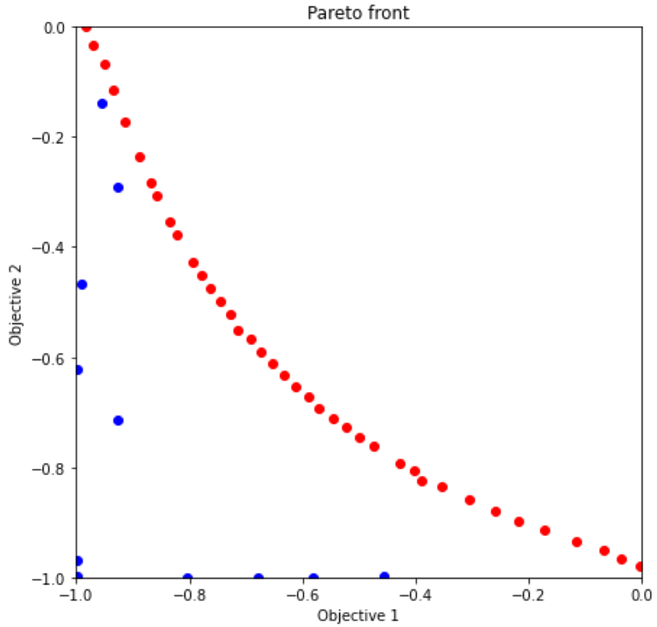
PHYSBO

- **スパコンを用いた並列計算**

  候補選定の部分は，用意した全ての候補に対して獲得関数を計算し，次に検討すべき候補のランキングを計算する．この部分は並列化が容易であり(分散並列処理が可能)，この部分をスパコンで並列化するプログラムを実装

- **多目的最適化**

  多目的最適化で利用する獲得関数の実装
  HVPI (Hypervolume-based Probability of Improvement)
  EHVI (Expected Hyper-Volume Improvement)
  TS (Thompson Sampling)

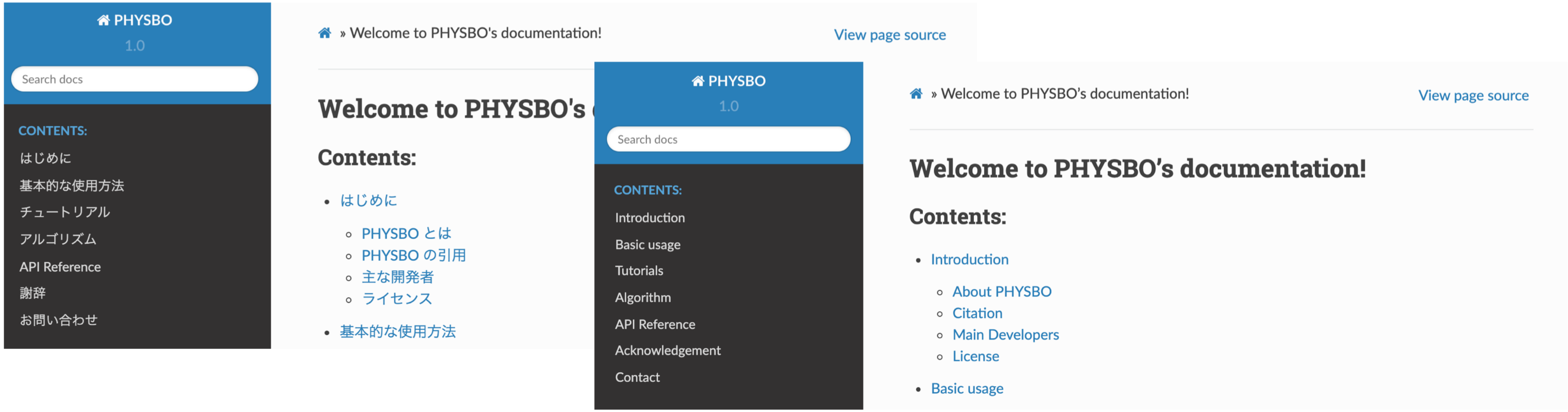


PHYSBO

- **インタラクティブな実行**
- **Python3環境で実行**

  COMBOはPython2で書かれているため，バージョンアップ

- **マニュアルの充実**



PHYSBO

PHYSBO

English 日本語

Top PHYSBOについて インストール ドキュメント ニュース お問合せ

PHYSBO

- ver. 1.0-
  - 田村 亮 (物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点)
  - 寺山 慧 (横浜市立大学大学院 生命医科学研究科)
  - 津田 宏治 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)
  - 植野 剛 (株式会社 Magne-Max Capital Management)
  - 本山 裕一 (東京大学 物性研究所)
  - 吉見 一慶 (東京大学 物性研究所)
  - 川島 直輝 (東京大学 物性研究所)

PASUMS
Project for advancement of software usability in materials science

PASUMS
東京大学物性研究所
ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

- **多目的最適化**
- **インタラクティブな実行**
- **Python3対応**
- **マニュアル完備**
- **スパコンを用いた並列計算**