

CrySPYによる結晶構造探索

山下 智樹

長岡技術科学大学

大阪大学産業科学研究所

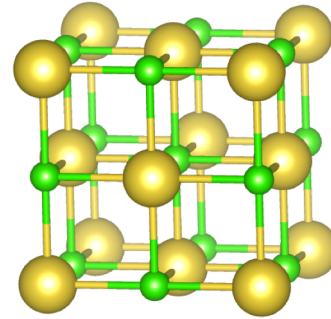


CrySPYについて概説

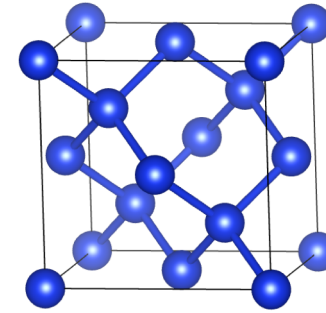
共同研究者

佐藤	暢哉	(産業技術総合研究所)
三宅	隆	(産業技術総合研究所)
木野	日織	(物質・材料研究機構)
寺山	慧	(東京大学)
津田	宏治	(東京大学)
兼平	慎一	(大阪大学)
小口	多美夫	(大阪大学)

原子の組み合わせに応じて
様々な安定構造

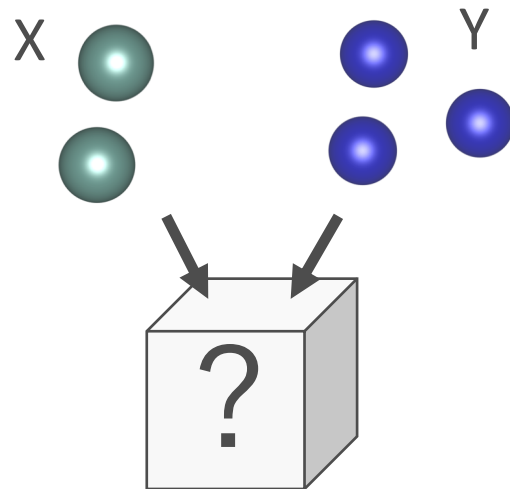


NaCl



Si

新材料設計



- 実験で合成
 - ✓ 費用がかかる
 - ✓ 安定構造が得られない



シミュレーションによる予測

マテリアルズインフォマティクス

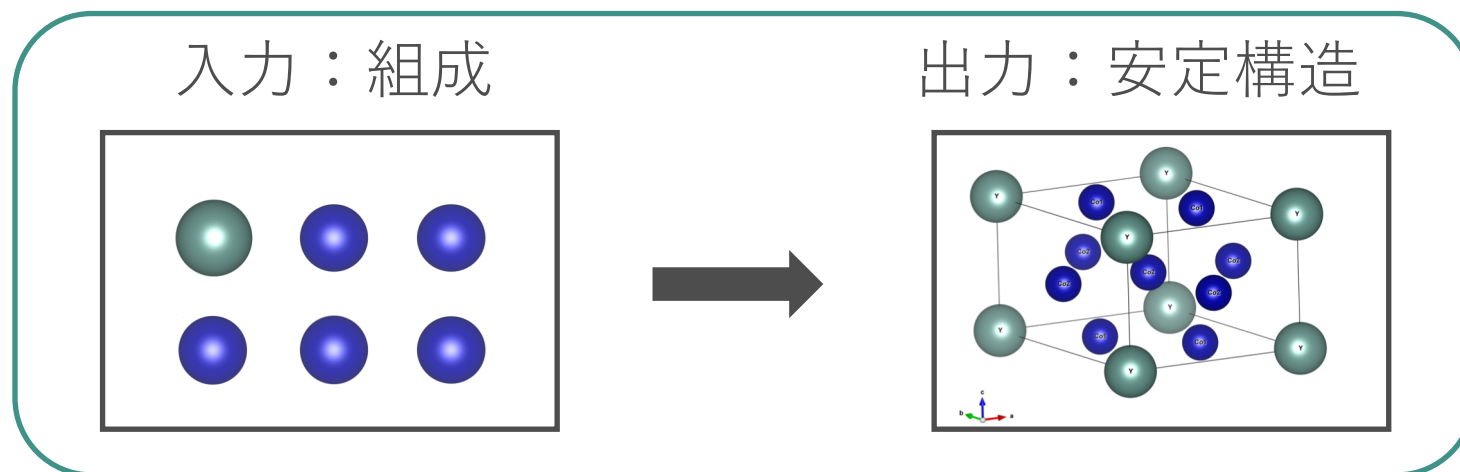
第一原理計算によるデータ × インフォマティクス

⇒ 結晶構造が入力！！

新材料の結晶構造なんてわからない

⇒ **結晶構造探索手法**

最安定構造を予測可能な非常に強力なツール



実験データによらない新材料設計



最安定構造が得られれば第一原理計算などを用いて物性予測が可能

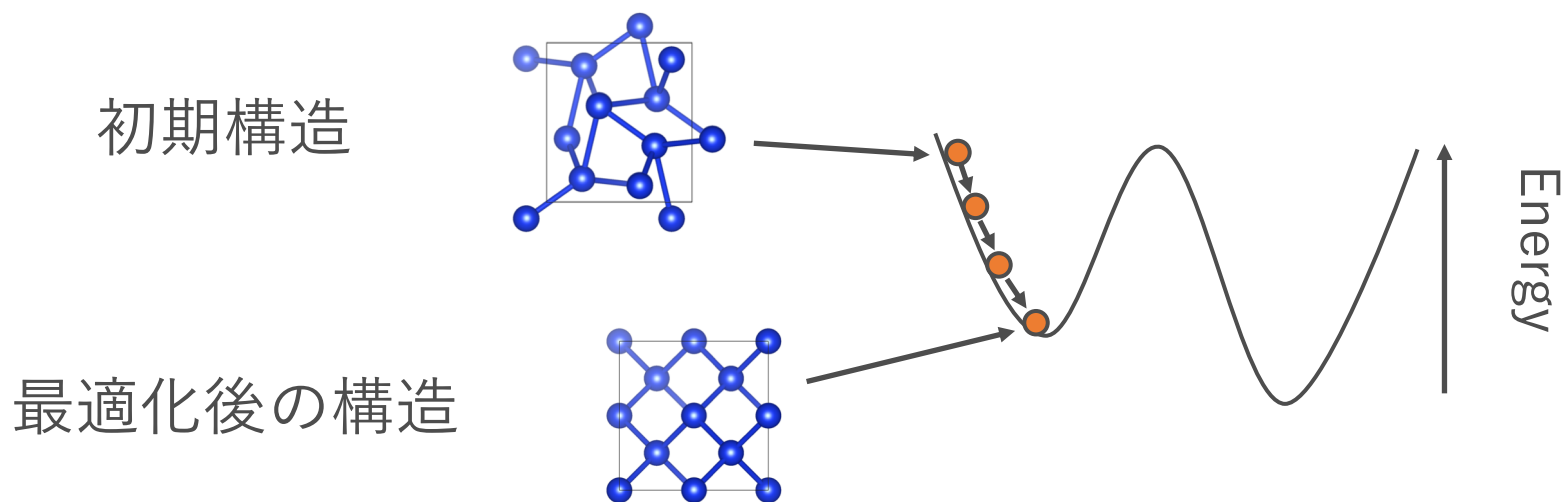
構造生成と構造最適化の組み合わせ

構造生成

- ランダム
- 進化的アルゴリズム (USPEX) 等

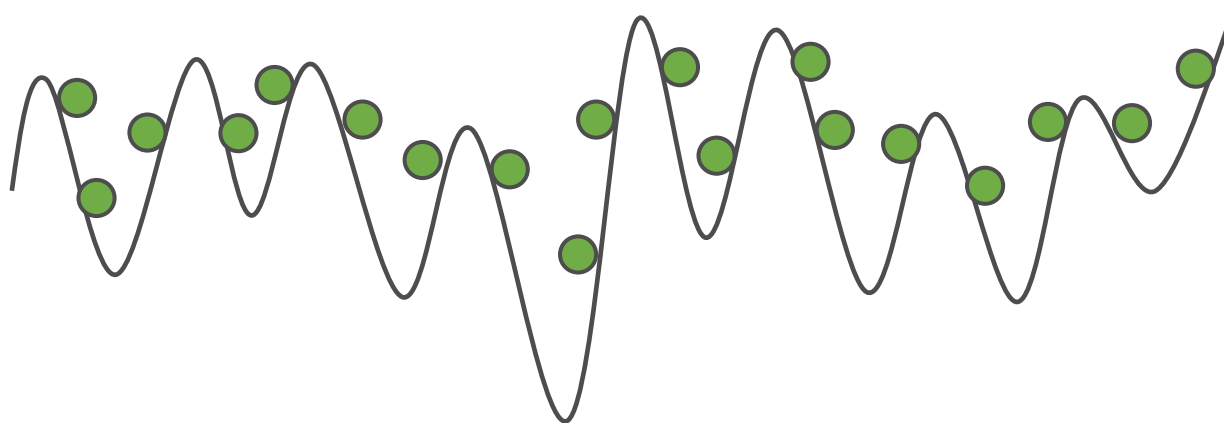
構造最適化

- 第一原理計算



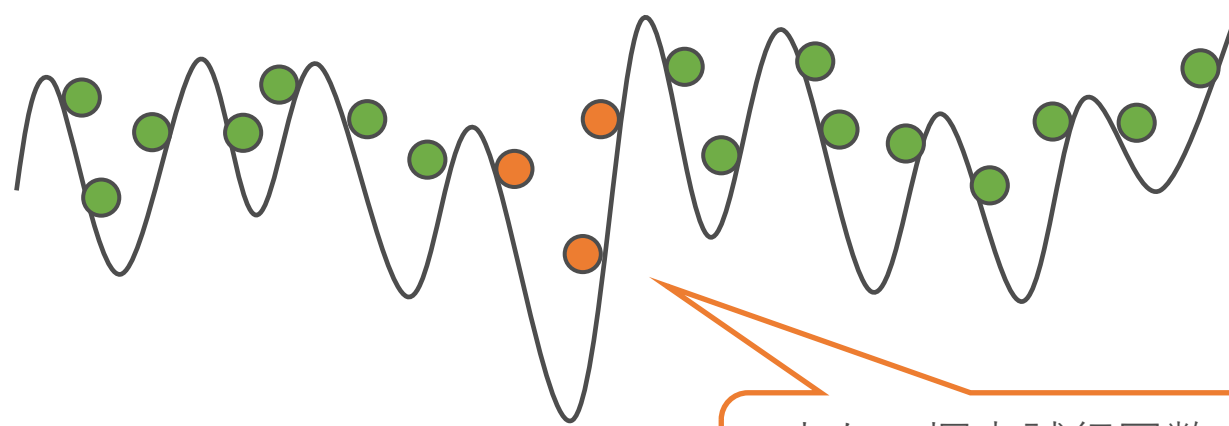
複雑な系では安定構造の予測は困難

- ◆ 候補となる構造の数が大量に必要
- ◆ 全ての候補を最適化するのは時間がかかり過ぎる



さらに効率の良い探索アルゴリズムが必要！

新アルゴリズムの提案: 選択型アルゴリズム



機械学習

少ない探索試行回数で
良い候補を選択

ベイズ最適化

- ✓ ブラックボックス関数の最適化
- ✓ ガウス過程回帰

LAQA

- ✓ オリジナルのアルゴリズム
- ✓ 強化学習の一種

T. Yamashita, et al., Phys. Rev. Mater. **2**, 013803 (2018).

K. Terayama, T. Yamashita, et al., npj Comput. Mater. **4**, 32(2018).

Fingerprint: 動径分布関数から計算

A. R. Oganov and M. Valle, J. Chem. Phys. 130, 104504 (2009).

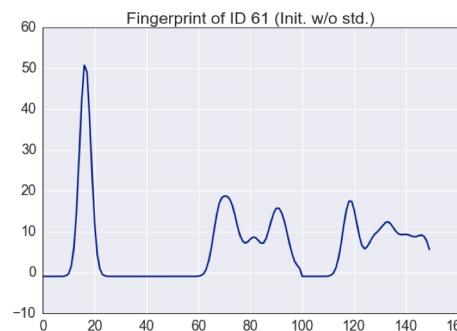
$$F_{AB}(R) = \sum_{A_i, \text{cell}} \sum_{B_j} \frac{\delta(R - R_{ij})}{4\pi R_{ij}^2 \frac{N_A N_B}{V} \Delta} - 1 \quad \begin{array}{l} F_{AB}(0) = -1 \\ F_{AB}(\infty) = 0 \end{array}$$

- i th atoms of type A within the unit cell
- j th atoms of type B within the distance R_{\max} (5 Å)
- discretized over bins of width Δ (50 discretized R points)

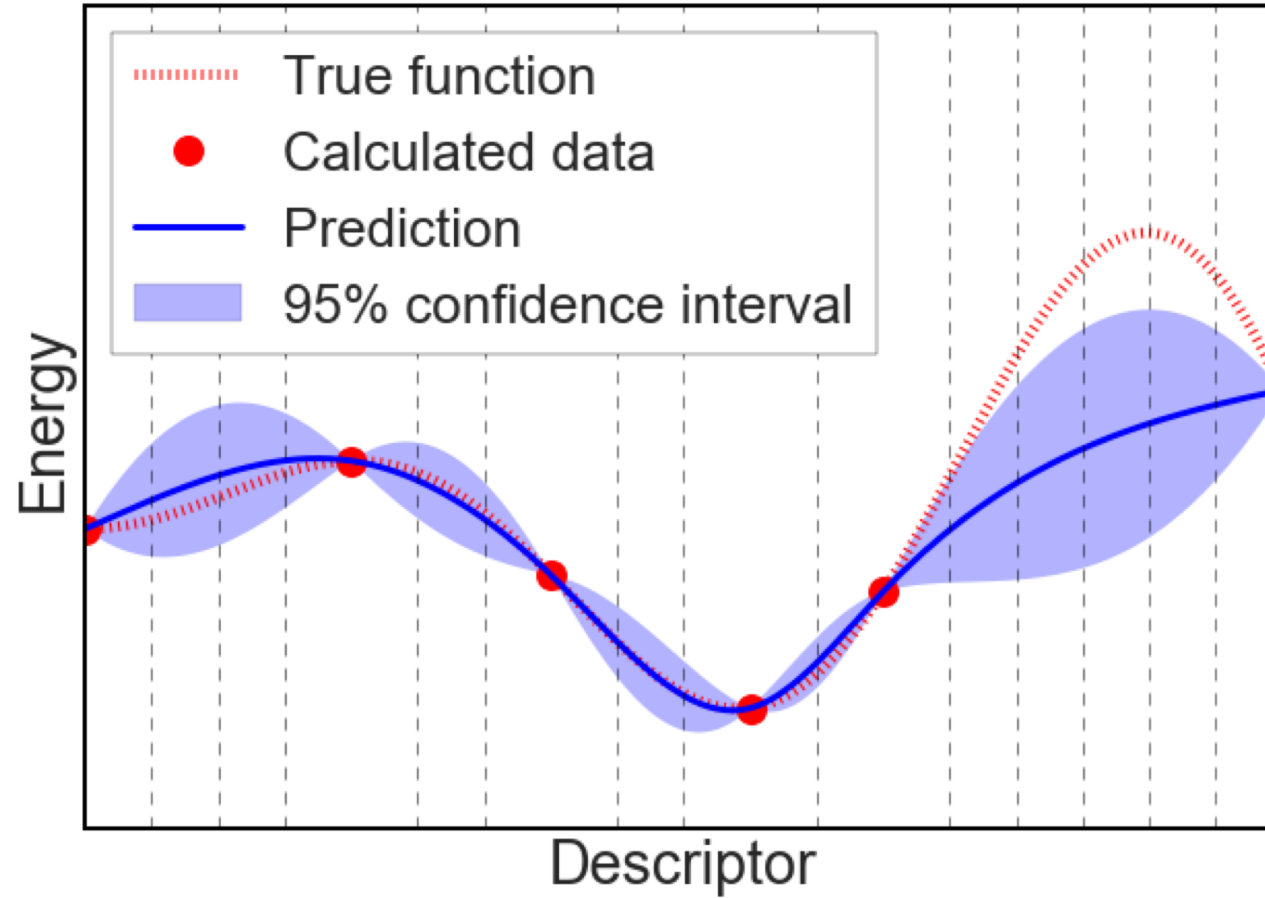
例: Y_2Co_{17}

Y-Y, Y-Co, Co-Co

20, 20, 20

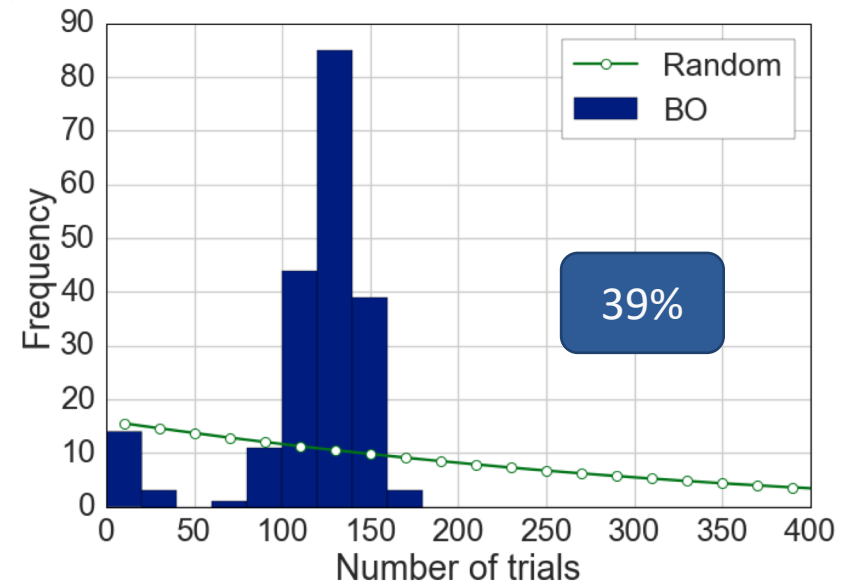
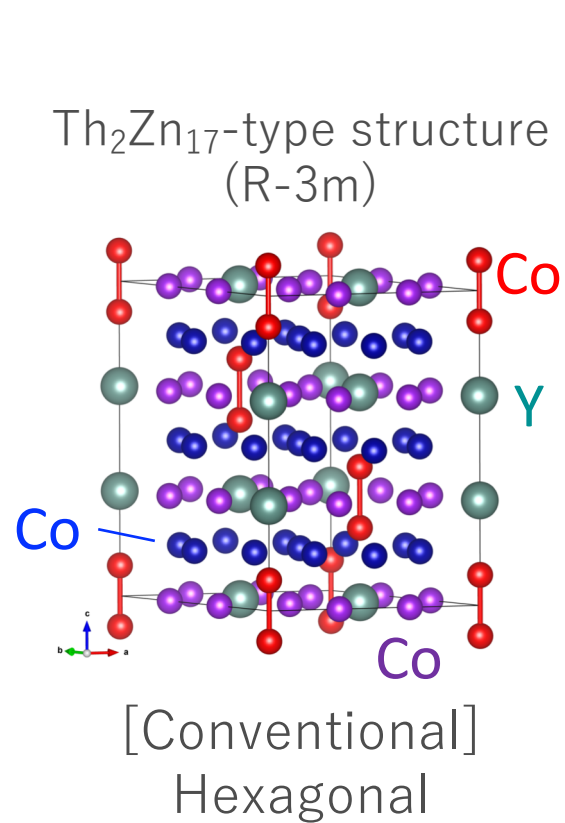


60次元ベクトル



探索と活用のトレードオフがうまくバランスされた手法

統計的に検証するため、200回シミュレーションを行った



1000構造のうち4構造が安定構造

ベイズ最適化はランダムサーチと比較して、
探索の試行回数を平均で30 – 40%削減可能

CrySPY

<https://github.com/Tomoki-YAMASHITA/CrySPY>

CrySPY is a Crystal Structure Prediction tool written in Python, distributed under the MIT License

- ◆ 結晶構造の生成
- ◆ 構造最適化計算のジョブの実行
- ◆ 構造最適化の計算結果収集
- ◆ 機械学習による構造候補の選択 (BO, LAQA)

● アルゴリズム

- ✓ ランダムサーチ (RS)
- ✓ 進化的アルゴリズム (EA)
- ✓ **ベイズ最適化 (BO)**
- ✓ **LAQA**

● 構造最適化

- ✓ VASP
- ✓ Quantum Espresso
- ✓ soiap
- ✓ LAMMPS
- ✓ OpenMX

CrySPYチュートリアル

CMDで利用する計算機

- pyxis (公開鍵) `ssh xxx@pyxis.mp.es.osaka-u.ac.jp`
- cmd4 (pyxis経由) `ssh -p 4201 xxx@133.1.100.216`

CrySPY関係

- github <https://github.com/Tomoki-YAMASHITA/CrySPY>
- ドキュメント (英語) <https://tomoki-yamashita.github.io/CrySPY/>
- チュートリアル (日本語) <https://tomoki-yamashita.github.io/cryspy/tutorial/outline.html>

チュートリアルはバージョンが古いので注意

Python関係のリンク

- combo3 <https://github.com/tsudalab/combo3>
- pymatgen <https://pymatgen.org/>

最新バージョンは version 0.8.0

今回使用するのは開発バージョンの 0.9.0b ← インストールが楽

CrySPY以外に必要なもの

v0.8.0

Python3
COMBO3
numpy
pandas
pymatgen
find_wy

v0.9.0b

Python3
COMBO3
numpy
pandas
pymatgen
PyXtal

find_wyの
インストール
はスキップ

Download v0.9.0 beta

githubのmasterブランチはまだv0.8.0
developブランチを利用する必要あり

```
git clone https://github.com/Tomoki-YAMASHITA/CrySPY.git
```

```
cd CrySPY
```

```
git checkout -b develop origin/develop
```

[確認]

```
git branch
```

```
* develop
```

```
master
```

ベイズ最適化を使うなら
f-fingerprintのコンパイルも
必要（チュートリアル参照）

v0.8.0

```
[basic]
algo = RS
calc_code = QE
tot_struc = 5
natot = 16
atype = Si
nat = 16
nstage = 2
njob = 5
jobcmd = qsub
jobfile = job_cryspy
```

v0.9.0b

```
[basic]
algo = RS
calc_code = QE
tot_struc = 5
nstage = 2
njob = 5
jobcmd = qsub
jobfile = job_cryspy

[structure]
natot = 16
atype = Si
nat = 16
```