

2022/6/20

# PHYSBOの概要

東京大学/物質・材料研究機構 田村 亮



国立研究開発法人  
物質・材料研究機構



東京大学  
THE UNIVERSITY OF TOKYO



MaDIS  
NIMS MATERIALS DATA and  
INTEGRATED SYSTEM





[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

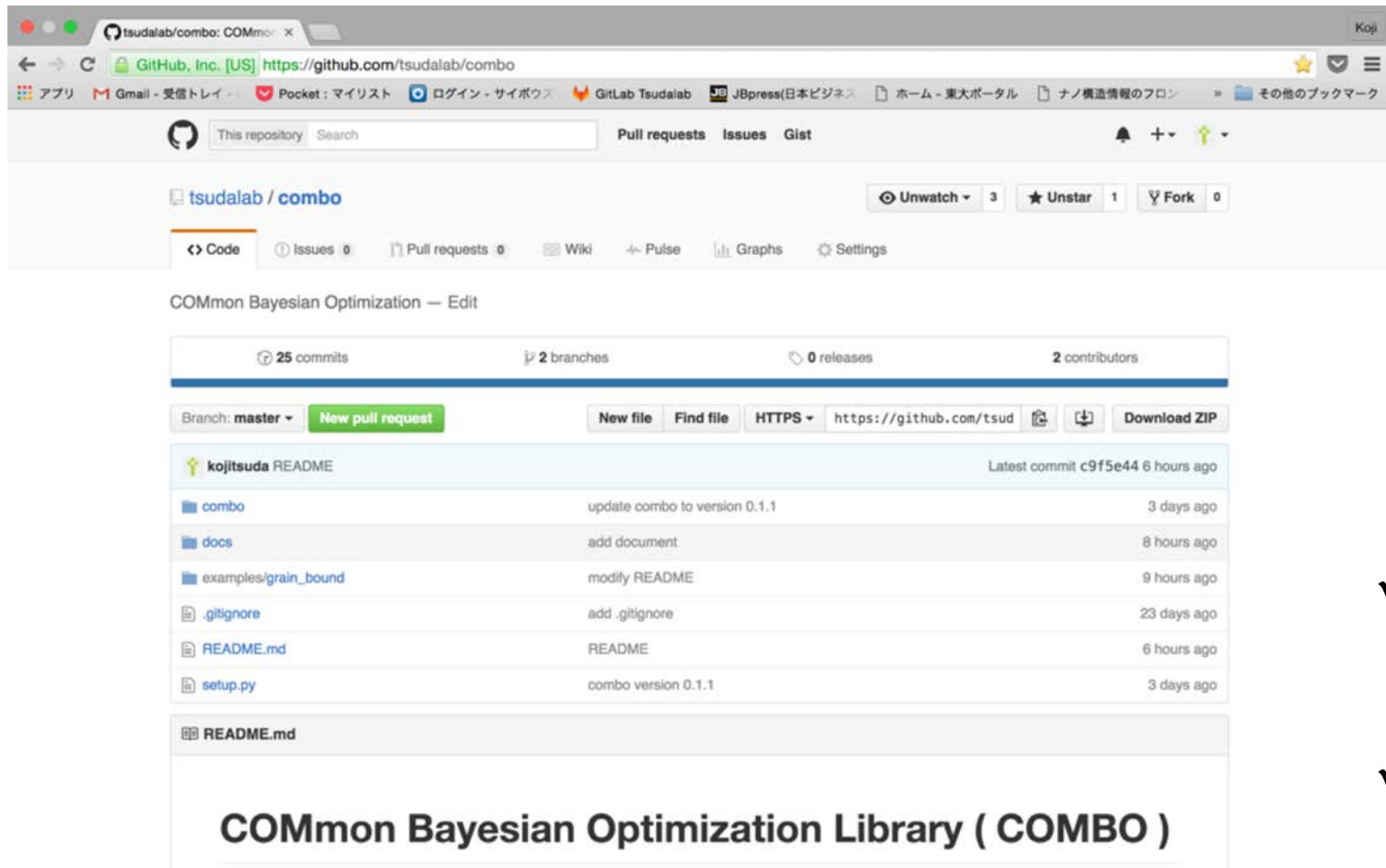
東京大学物性研究所

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



tsudalab / combo

25 commits 2 branches 0 releases 2 contributors

Branch: master New pull request

File	Commit Message	Time Ago
kojitsuda README		Latest commit c9f5e44 6 hours ago
combo	update combo to version 0.1.1	3 days ago
docs	add document	8 hours ago
examples/grain_bound	modify README	9 hours ago
.gitignore	add .gitignore	23 days ago
README.md	README	6 hours ago
setup.py	combo version 0.1.1	3 days ago

COMmon Bayesian Optimization Library ( 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）

$y = f(\mathbf{x})$   $f$  がわからない場合に有用な最適化手法  
目的変数 (材料特性)      説明変数 (組成, 構造, プロセス)      → ベイズ最適化

- N個の候補点があり，この中から最大の観測値を持つものを探したい。

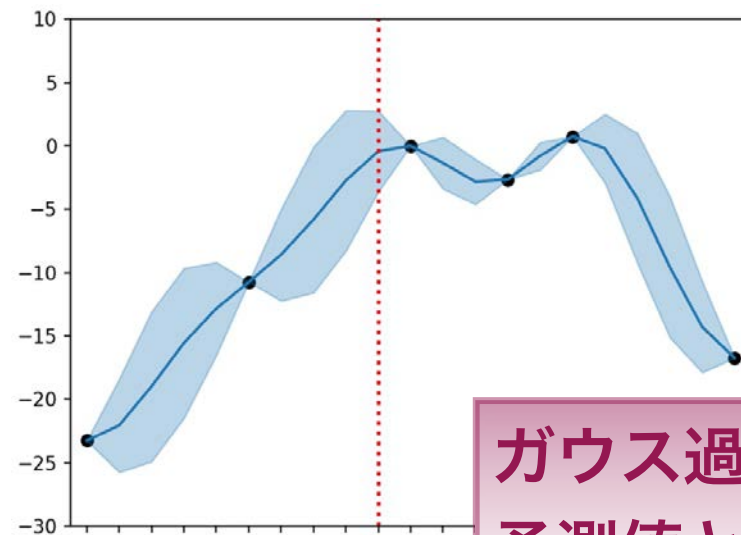
$\mathbf{x}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ )

- 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。

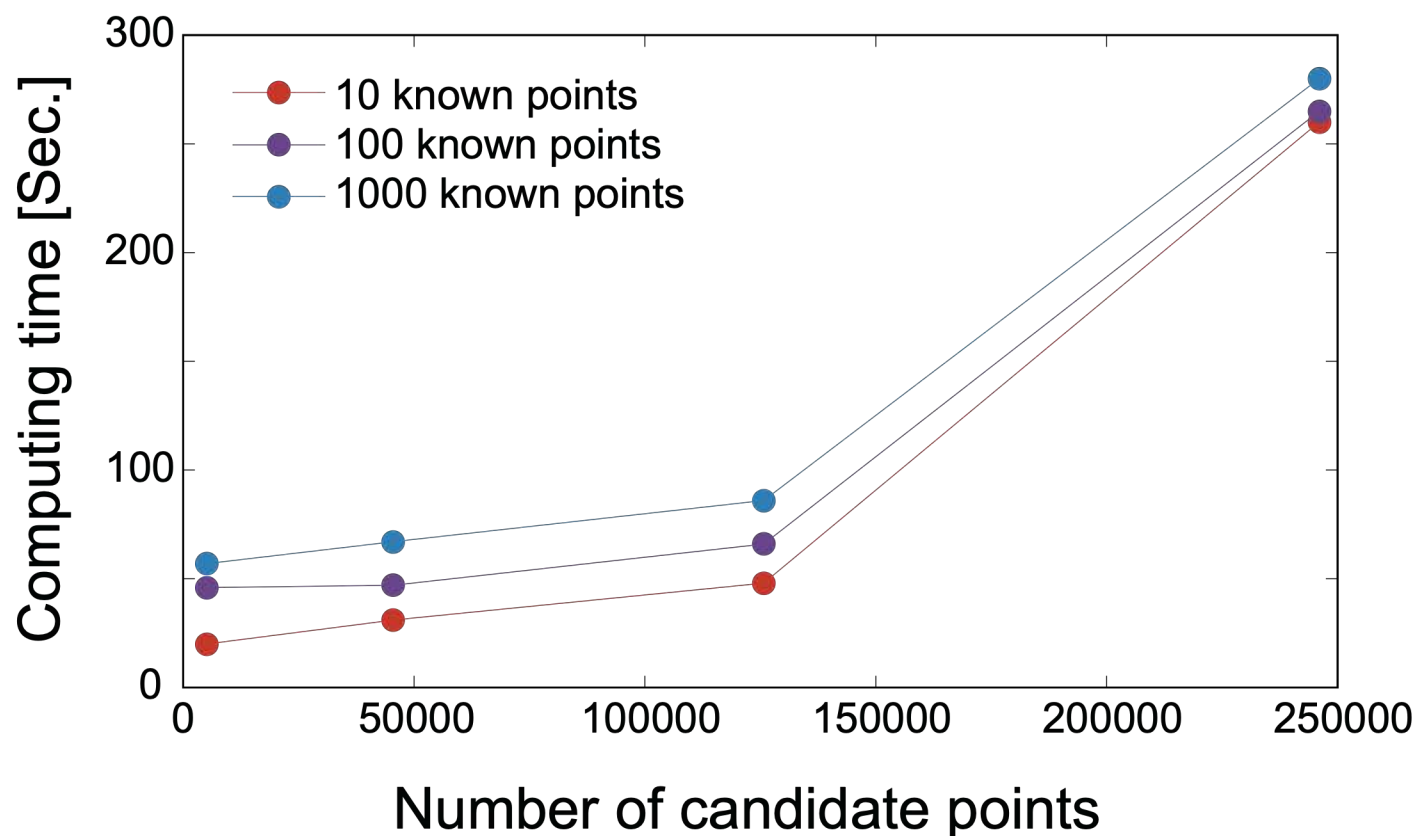
- M個のサンプル点から予測モデルを学習し，それを用いて，残りの候補点をスコアリングし実際に観測するサンプルを選ぶ。



ガウス過程回帰  
予測値と分散から，  
次の候補を選ぶ

# 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

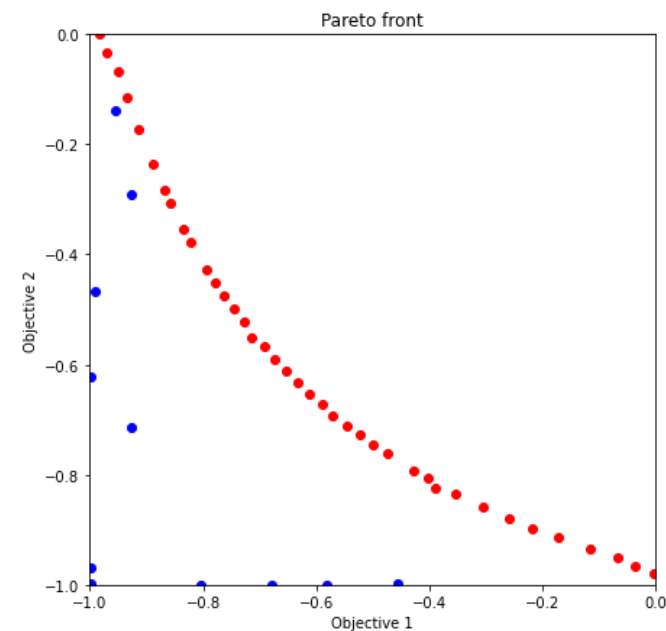
## • 多目的最適化

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)



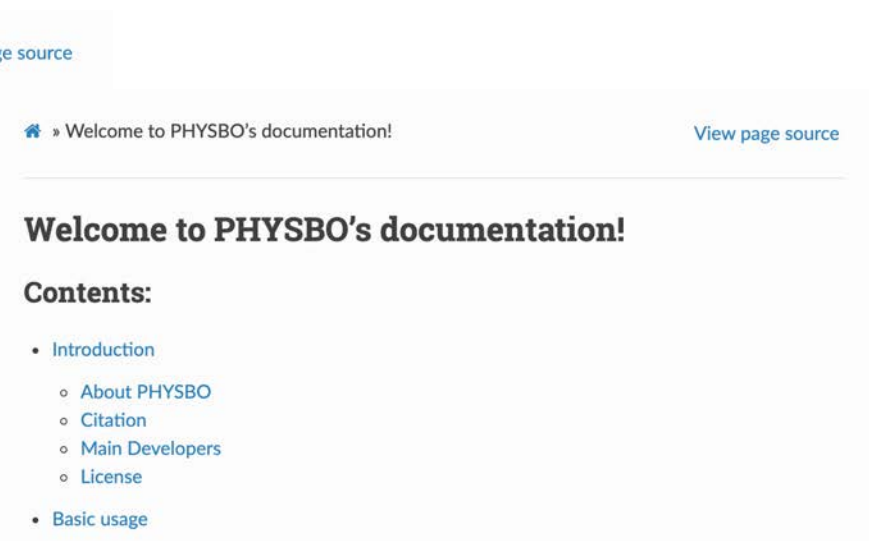
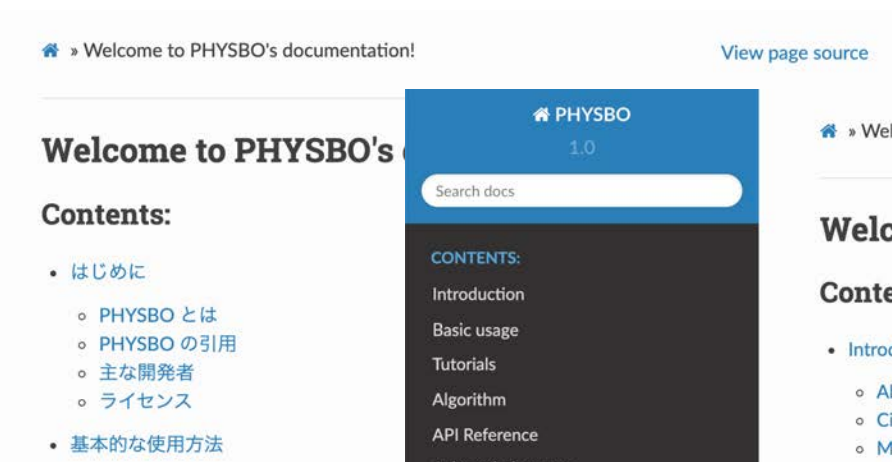
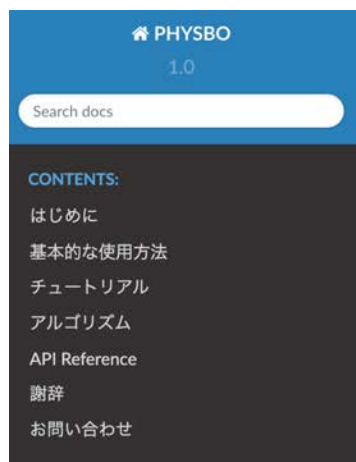
# PHYSBO

- 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





[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

Yuichi Motoyama, Ryo Tamura, Kazuyoshi Yoshimi, Kei Terayama, Tsuyoshi Ueno, and Koji Tsuda,  
Computer Physics Communications 278, 108405 (2022).

- 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





# PHYSBOベンチマーク：材料スクリーニングの実行例

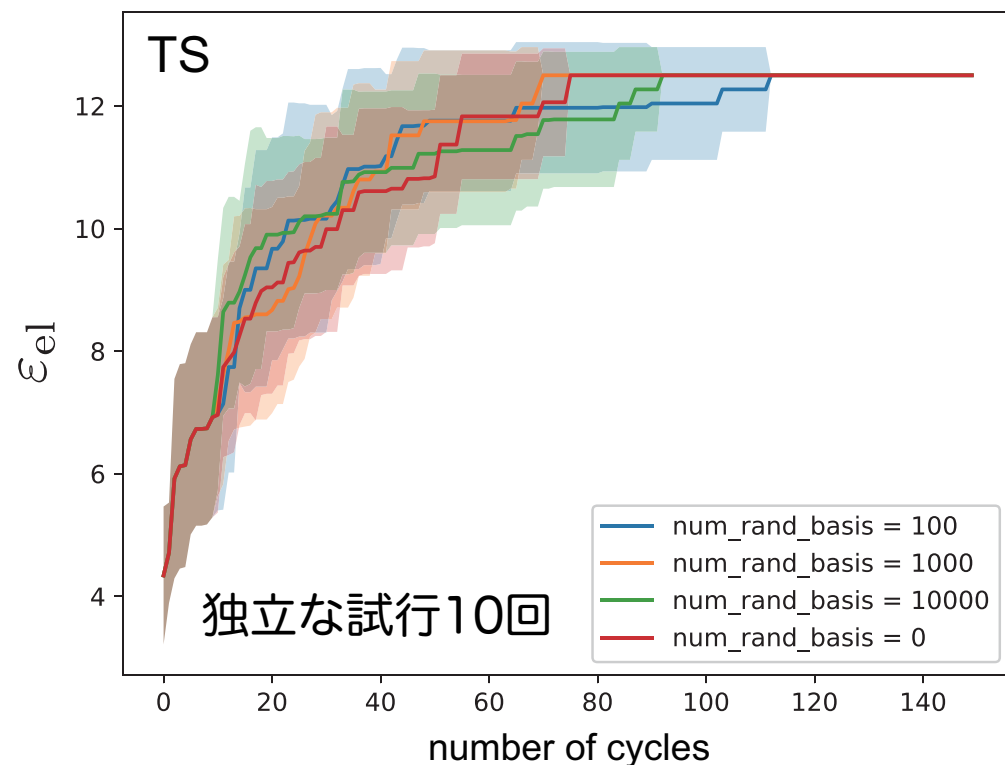
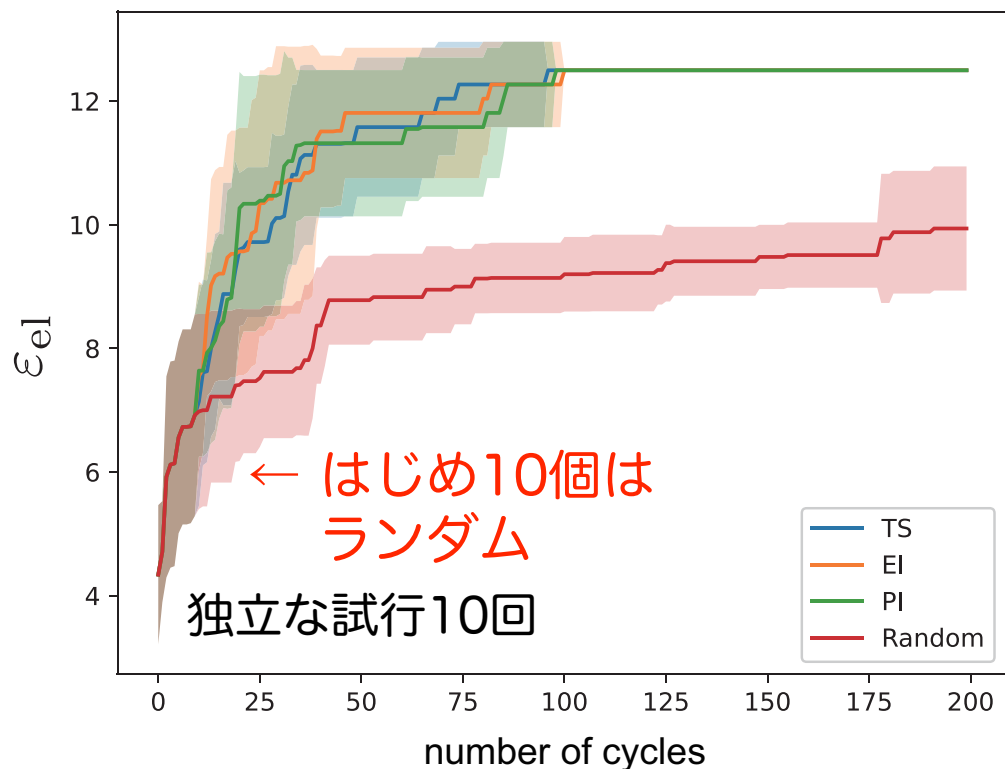
## 誘電率の大きな材料を見つける問題に適用

Open Access

材料データ数：1277個  
説明変数x: magpie descriptor

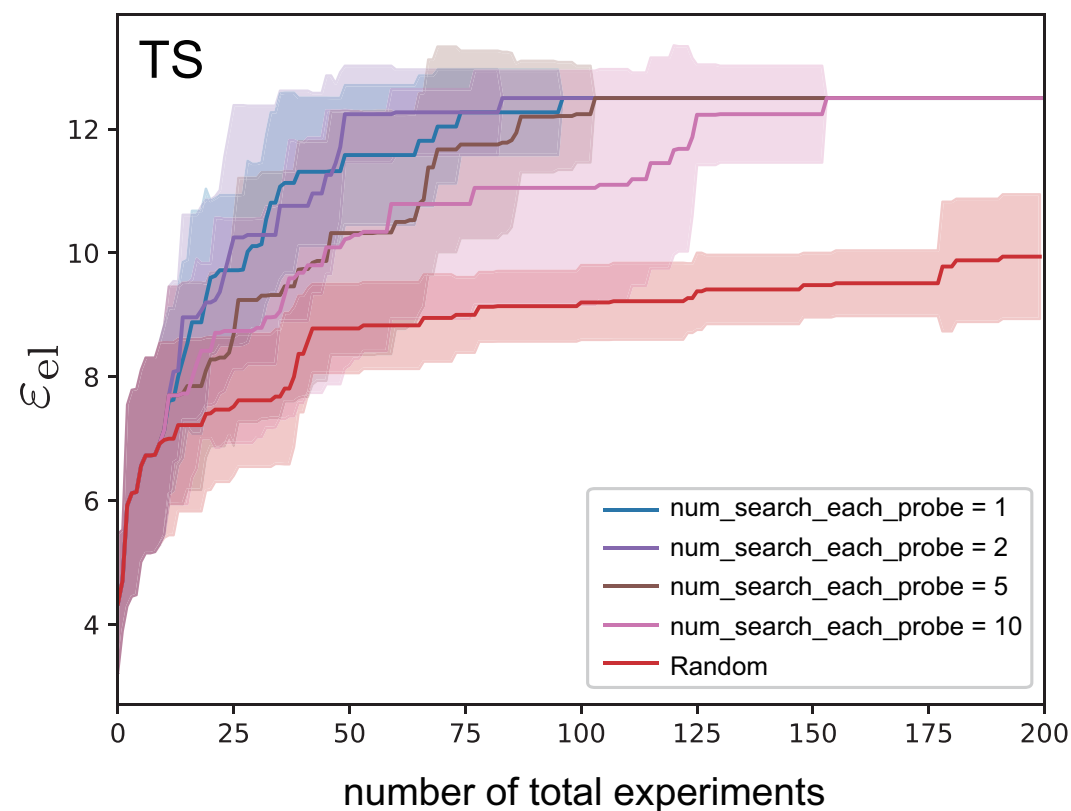
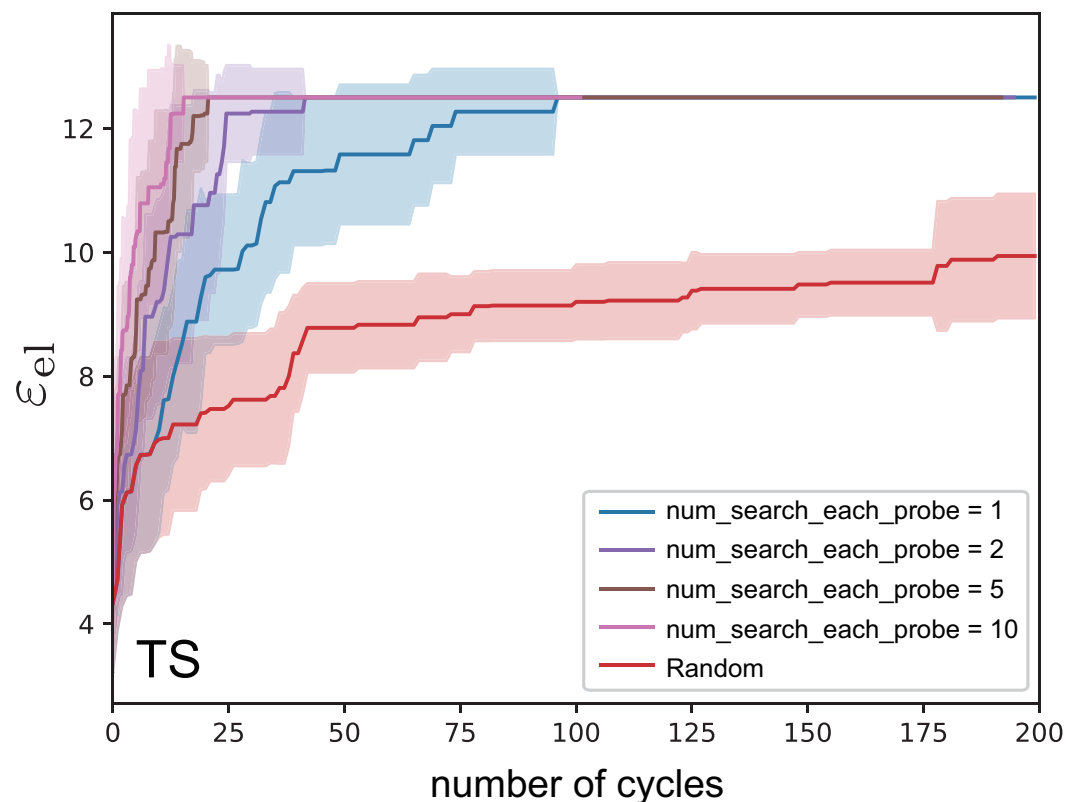
Machine learning models for predicting the dielectric constants of oxides based on high-throughput first-principles calculations

Akira Takahashi, Yu Kumagai, Jun Miyamoto, Yasuhide Mochizuki, and Fumiyasu Oba  
Phys. Rev. Materials **4**, 103801 – Published 9 October 2020



# PHYSBOベンチマーク：複数提案の場合

- 利点：ベイズ最適化のサイクル数を少なくできる。
- 欠点： $y$ の評価回数（実験回数・計算回数に対応）は増える。

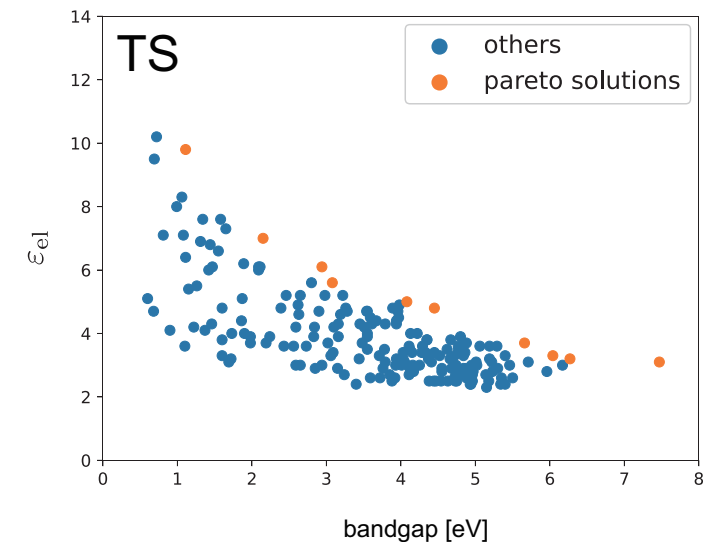
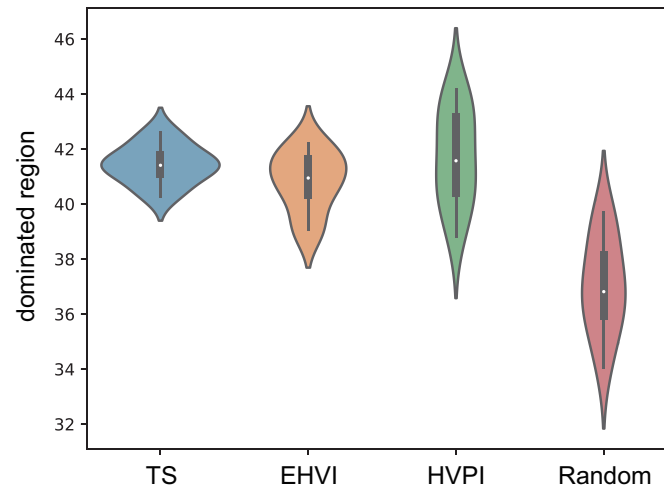
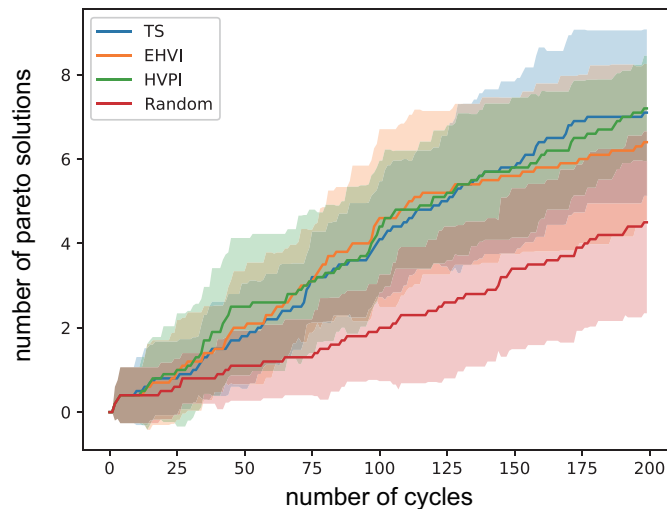
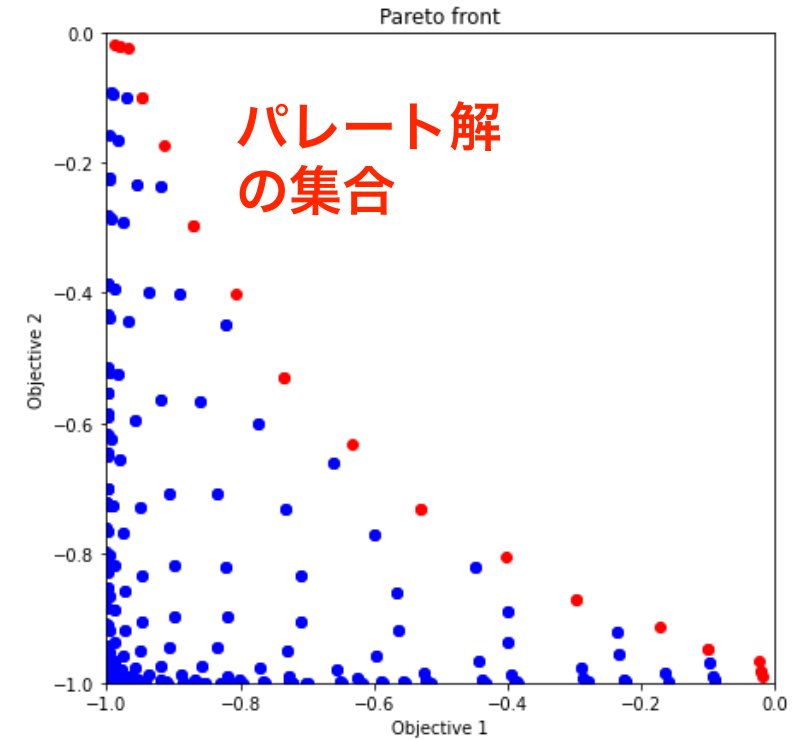


**並列実験， 並列計算のコストが十分小さければ， 複数提案は有効！**

# PHYSBOベンチマーク：多目的最適化

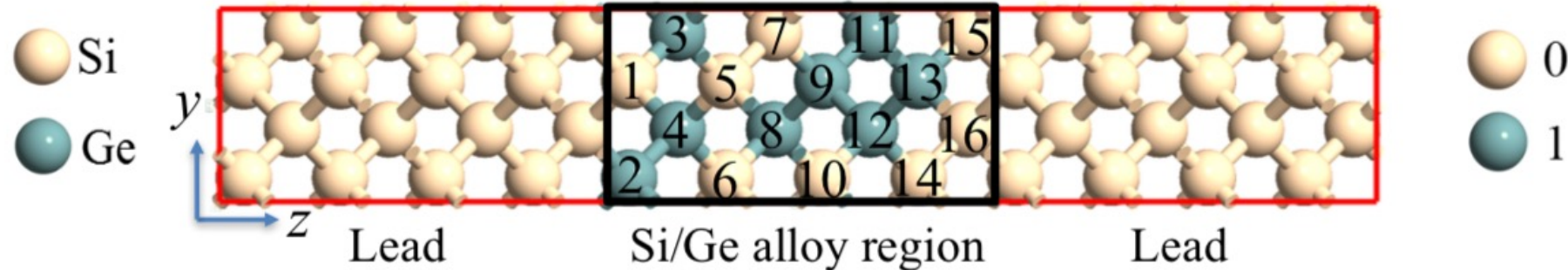
多目的最適化の問題設定： $\min_{\mathbf{x}} [f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]$

- 複数の最適化したい関数  $f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})$  があるが、関数間にはトレードオフの関係があり、多くのパレート解が存在する。
- パレート解を多く求めておき、動機にフィットした解を選択する。



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

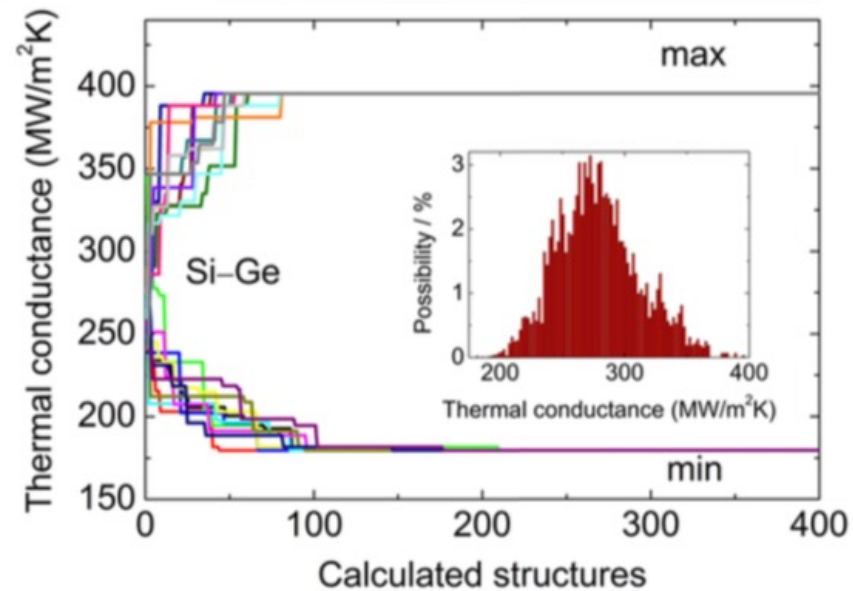
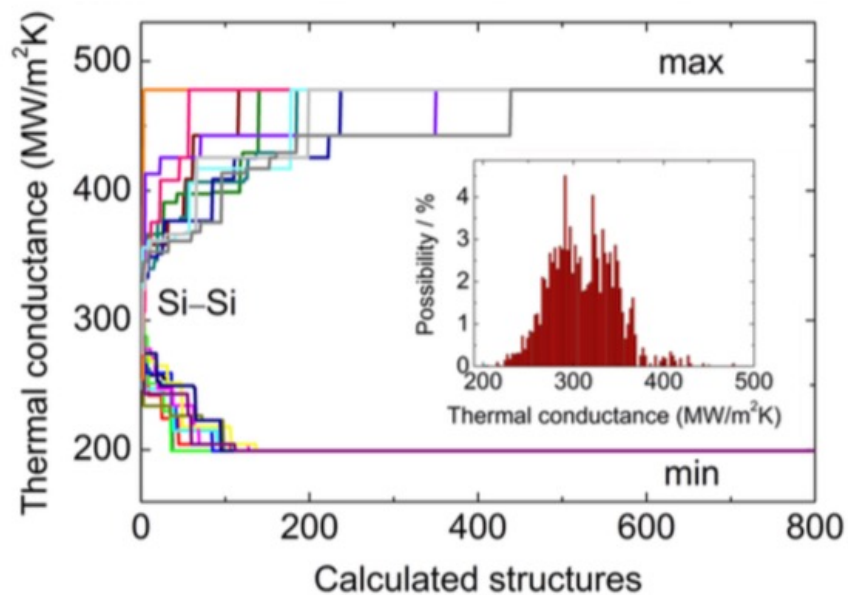
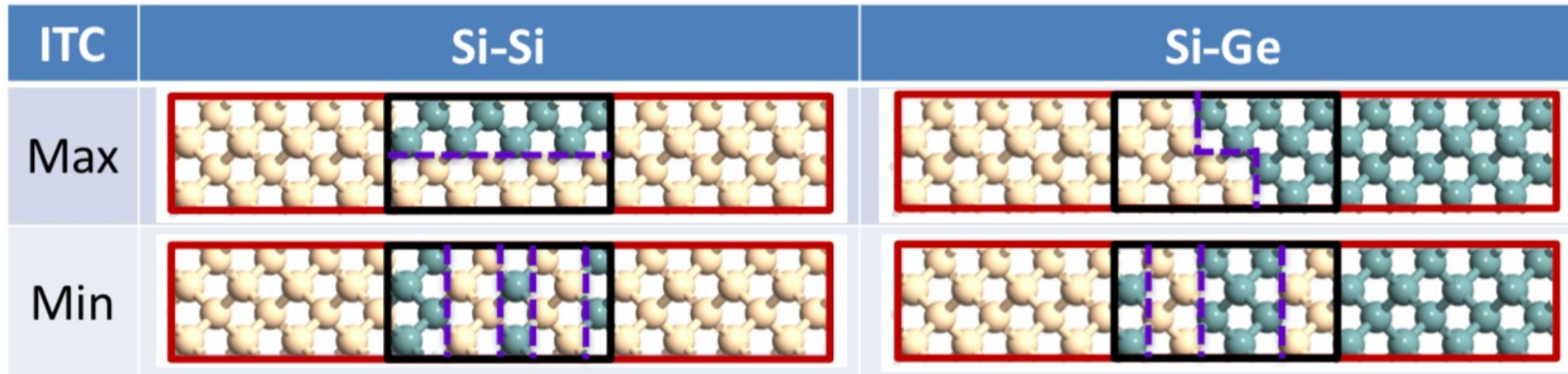
Case	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
3	1	1	1	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

**Calculator:** Atomistic Green's Function (AGF): Phonon transmission

**Evaluator:** Interfacial Thermal Conductance (ITC)

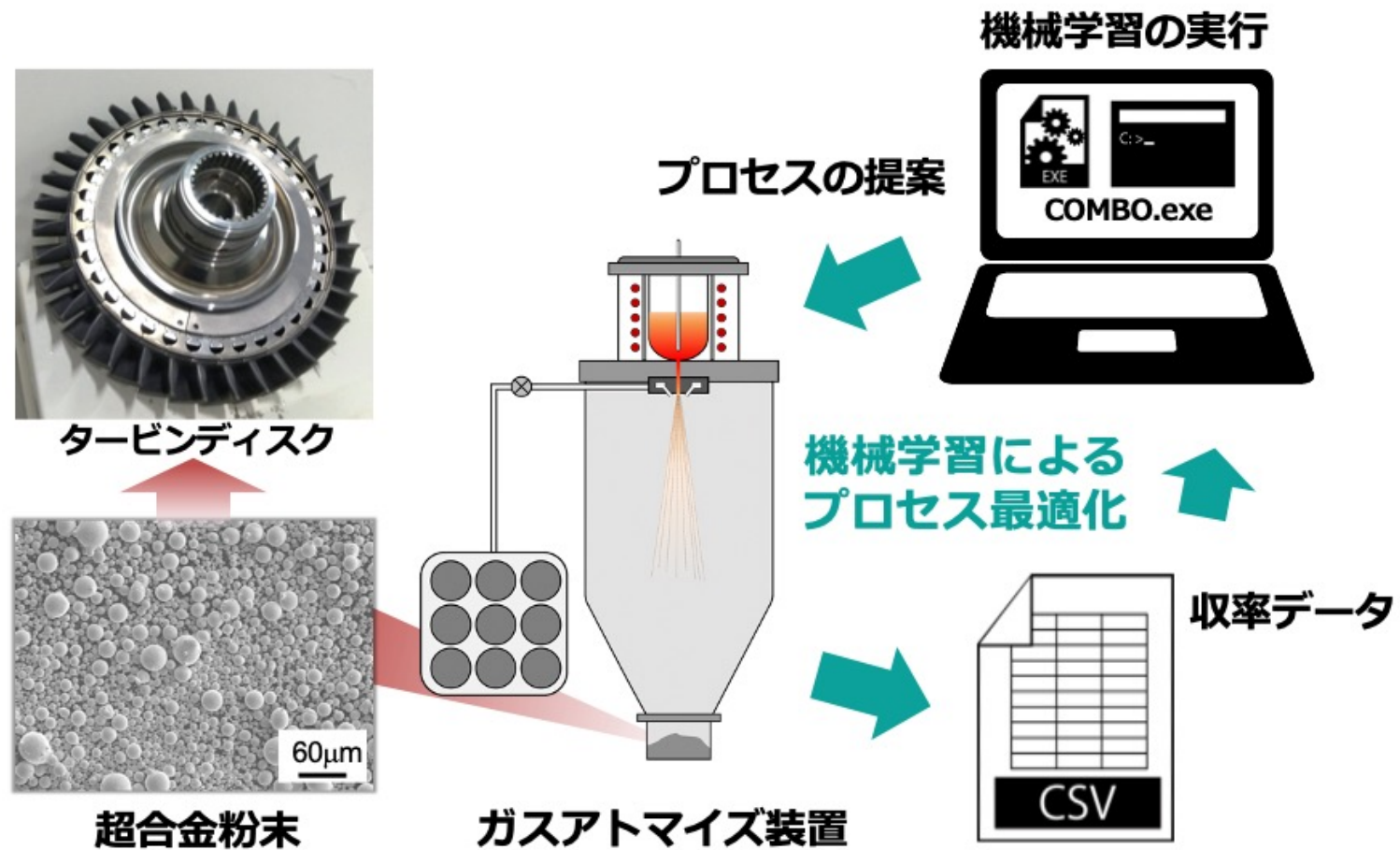
**Optimization method:** Thompson Sampling (Bayesian Optimization)

# 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. Hirose, 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	$\gamma'$ -solvus Temp. °C	Solidus Temp. °C	Liquidus Temp. °C	
	wt.%														ppm			
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 ( $< 53 \mu\text{m}$ )	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	



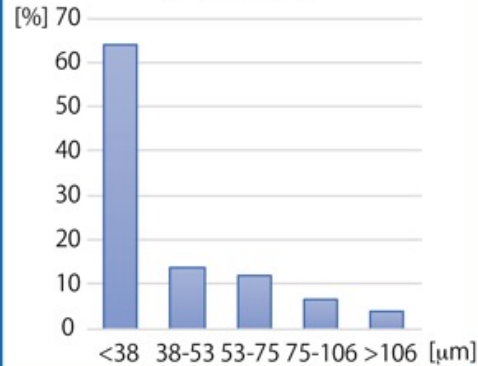
# 最適化手順

現状の収率データセット

溶解温度 [°C]	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



機械学習予測  
モデルの学習

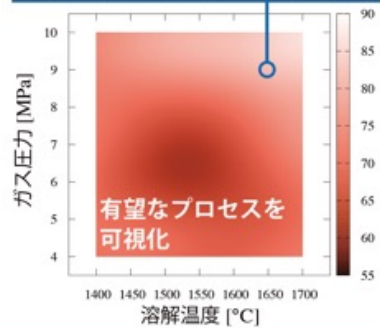
機械学習を用いた  
粉末製造プロセス  
最適化

ふるい分級

ベイズ  
最適化

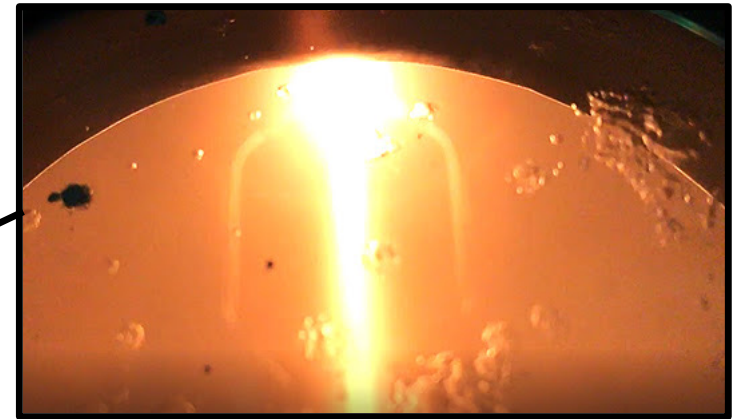
候補プロセスの選定

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



プロセスの  
提案

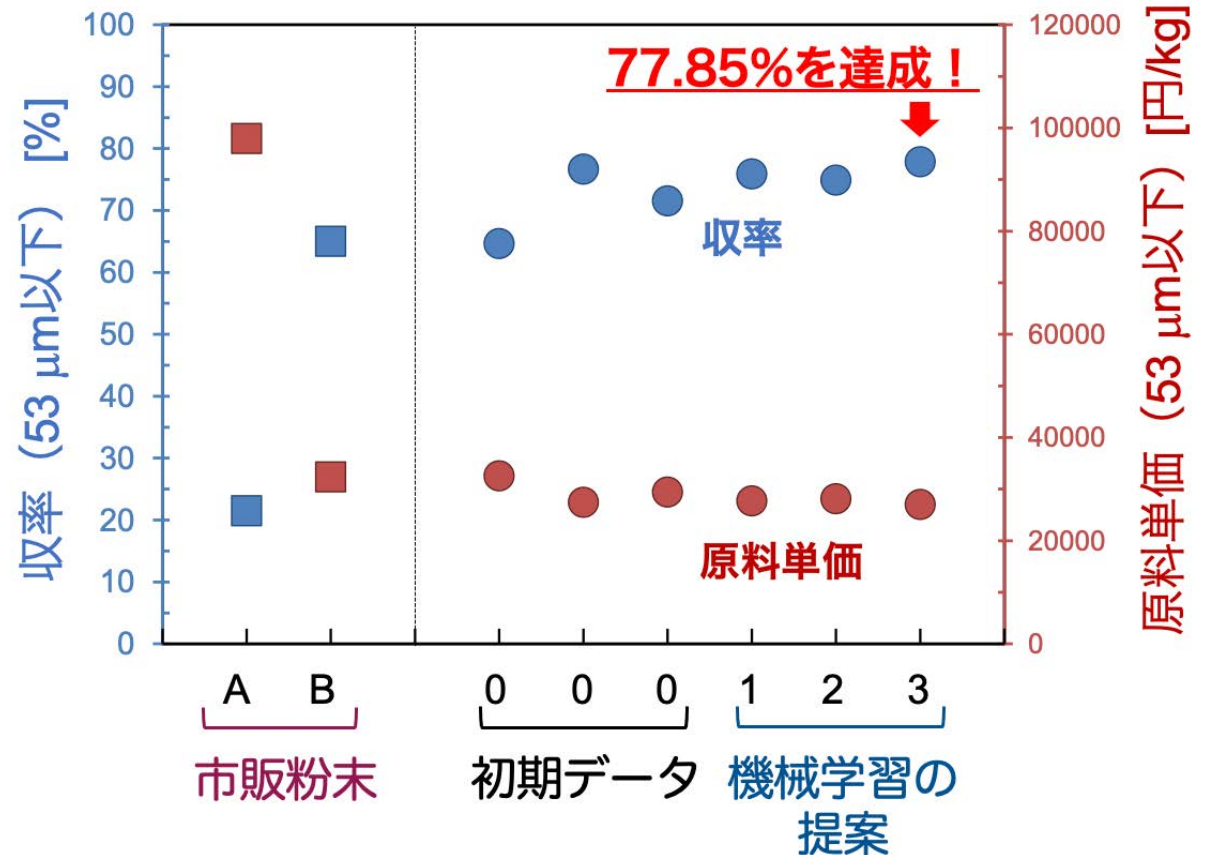
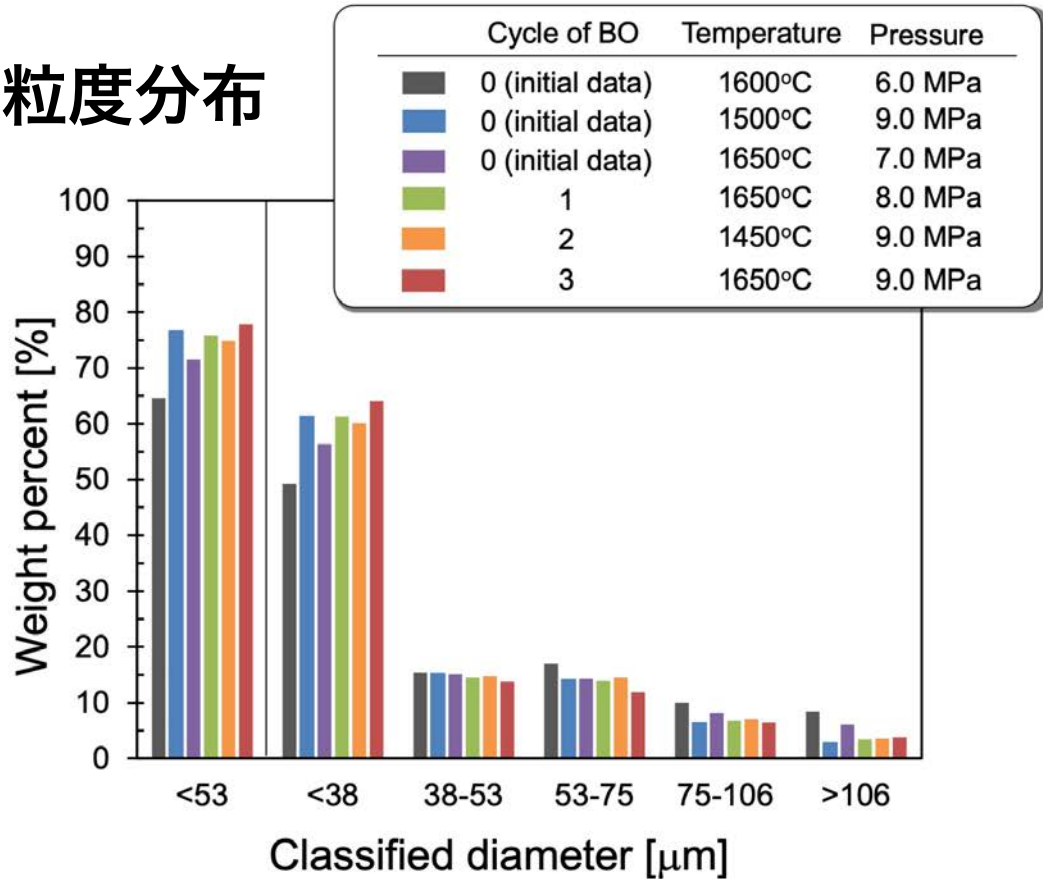
ガスアトマイズ





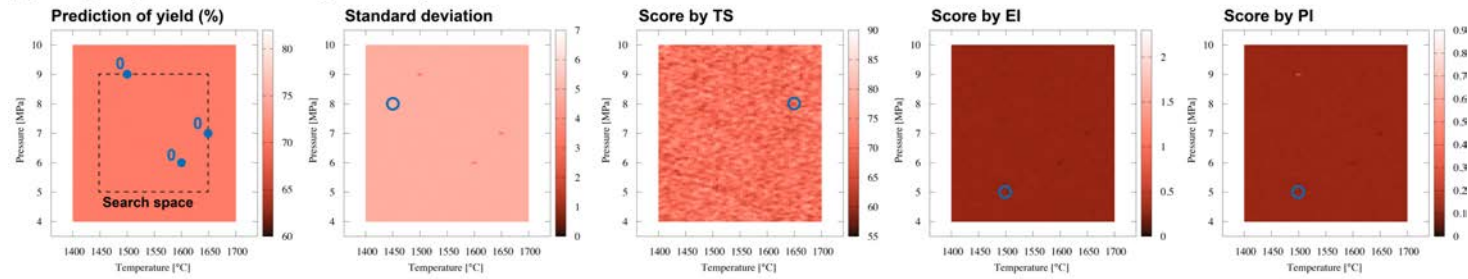
# 最適化結果-試行数 6 回-

## 粒度分布

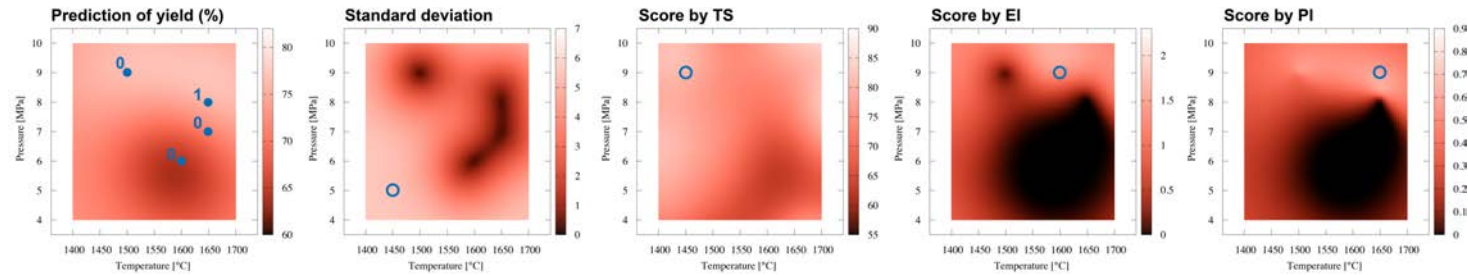


# 機械学習による予測結果

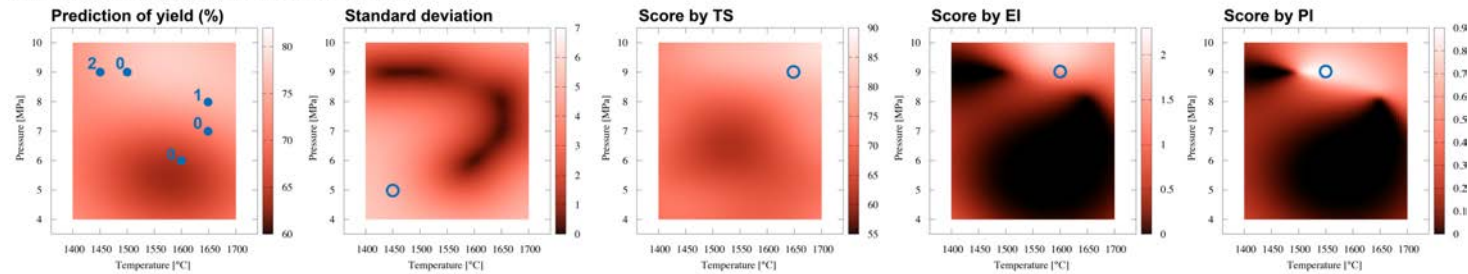
(a) 1st cycle (number of training data is 3)



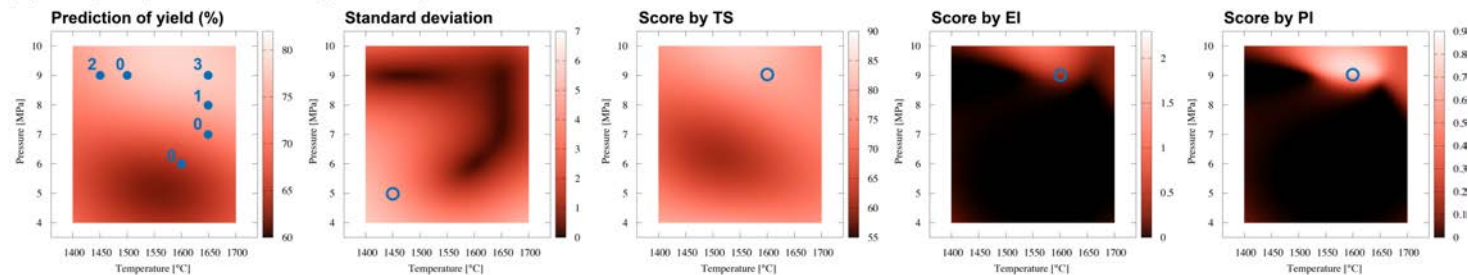
(b) 2nd cycle (number of training data is 4)



(c) 3rd cycle (number of training data is 5)

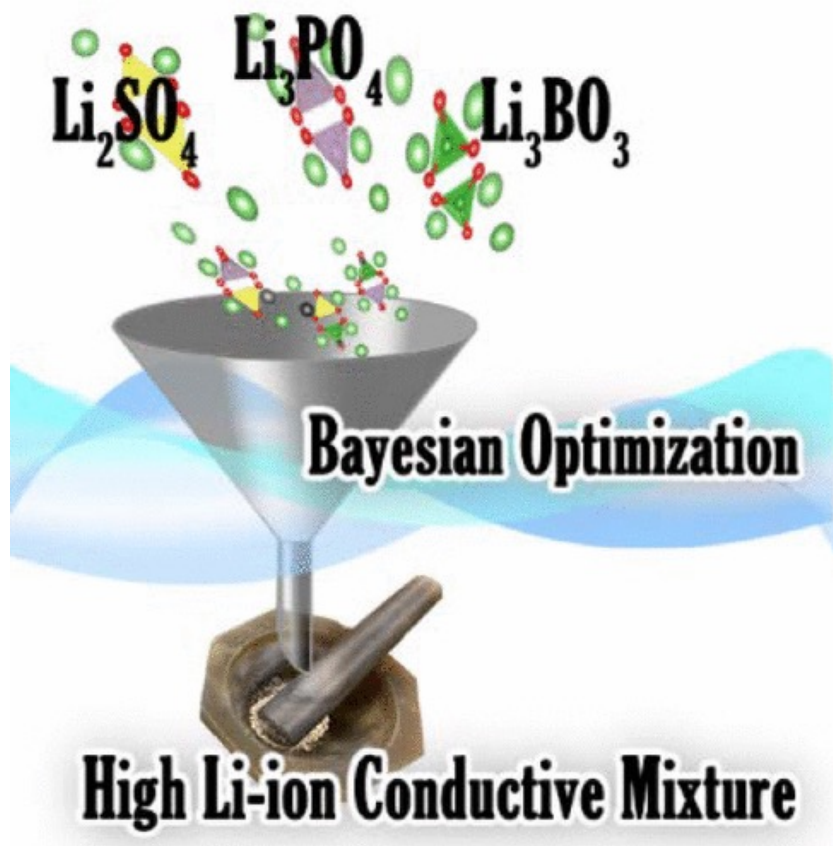


(d) 4th cycle (number of training data is 6)

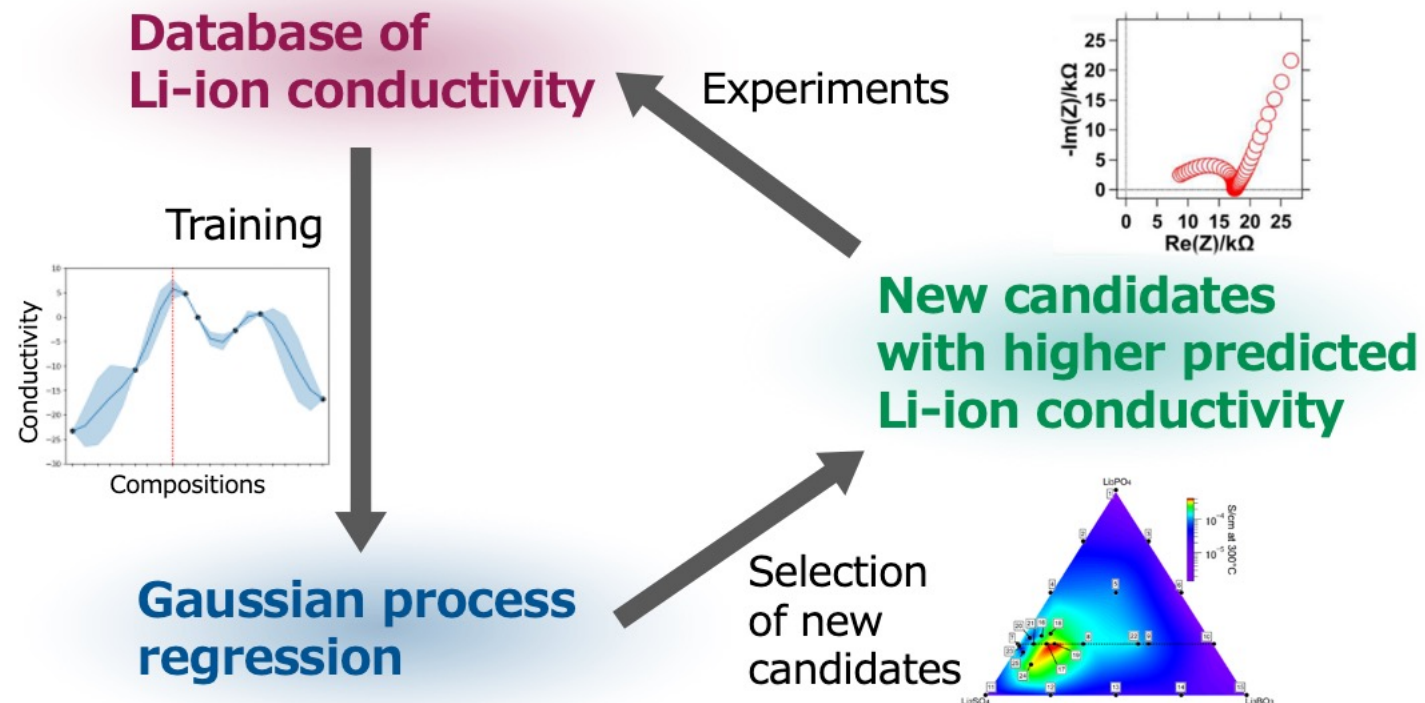


53  $\mu\text{m}$ 以下の  
粉末収率を  
向上させる  
・ 溶解温度  
・ ガス圧力  
を探索する。

# 応用事例 3 : Liイオン伝導度最適化



## 最適化手順



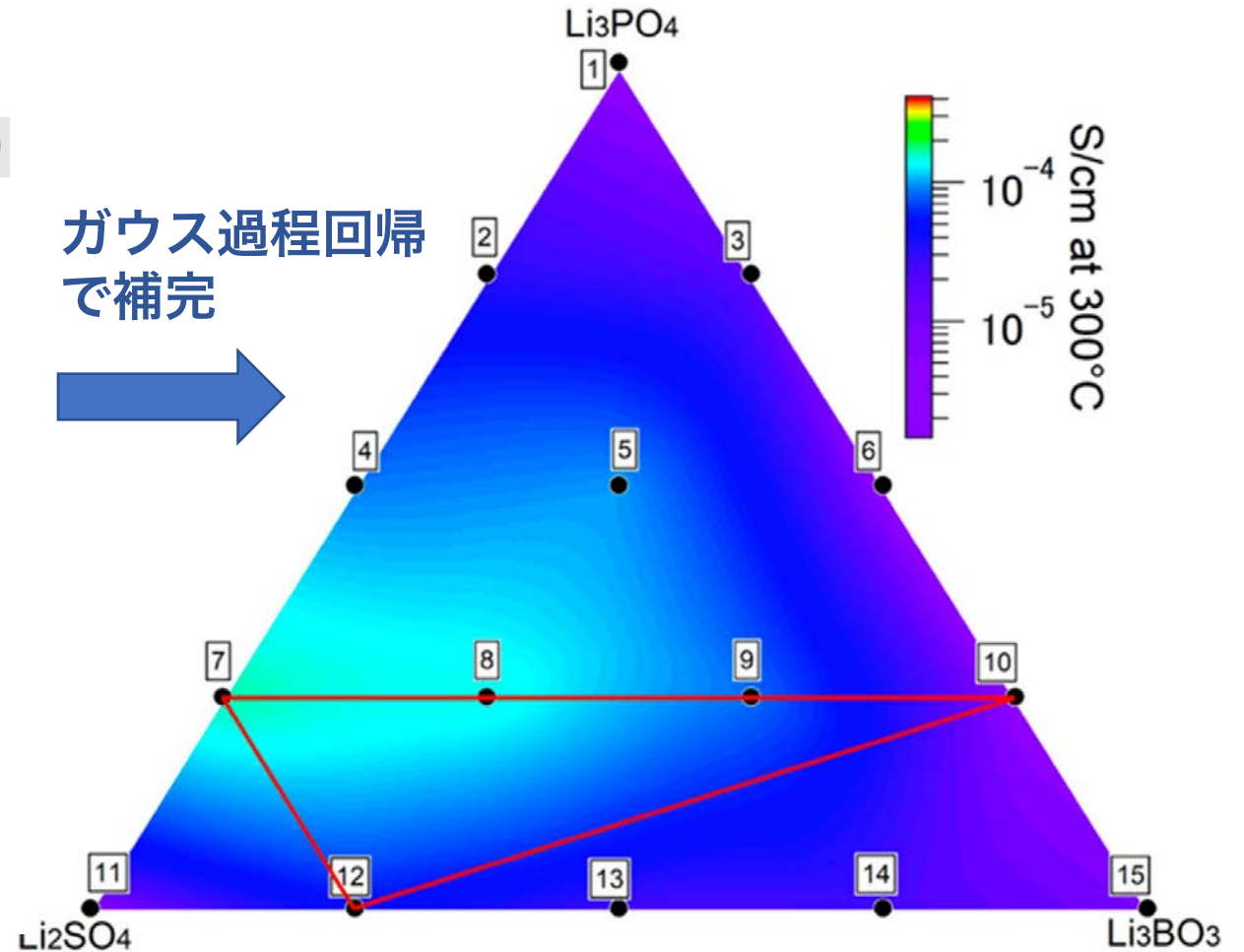
K. Homma, Y. Liu, M. Sumita, R. Tamura, N. Fushimi, J. Iwata, K. Tsuda, and C. Kaneta, The Journal of Physical Chemistry C 124, 12865 (2020).

# 初期データの準備

## Li<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, Li<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, Li<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>の混合

### 15点の初期データ

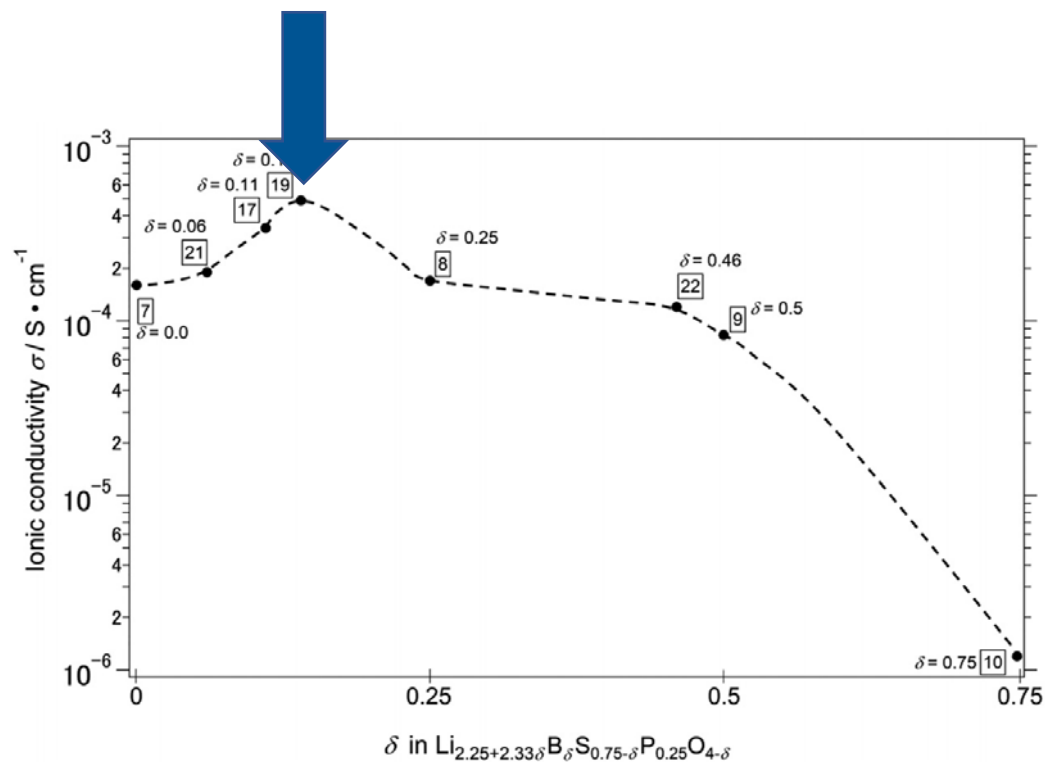
sample no.	ratio (Li <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> , Li <sub>3</sub> BO <sub>3</sub> , Li <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> )	ionic conductivity (S/cm)
1	(100, 0, 0)	$3.9 \times 10^{-9}$
2	(75, 0, 25)	$3.3 \times 10^{-5}$
3	(75, 25, 0)	$1.7 \times 10^{-5}$
4	(50, 0, 50)	$9.9 \times 10^{-5}$
5	(50, 25, 25)	$9.7 \times 10^{-5}$
6	(50, 50, 0)	$5.6 \times 10^{-7}$
7	(25, 0, 75)	$1.6 \times 10^{-4}$
8	(25, 25, 50)	$1.7 \times 10^{-4}$
9	(25, 50, 25)	$8.3 \times 10^{-5}$
10	(25, 75, 0)	$1.2 \times 10^{-6}$
11	(0, 0, 100)	$1.4 \times 10^{-7}$
12	(0, 25, 75)	$4.9 \times 10^{-5}$
13	(0, 50, 50)	$2.3 \times 10^{-5}$
14	(0, 75, 25)	$2.3 \times 10^{-5}$
15	(0, 100, 0)	$9.1 \times 10^{-6}$



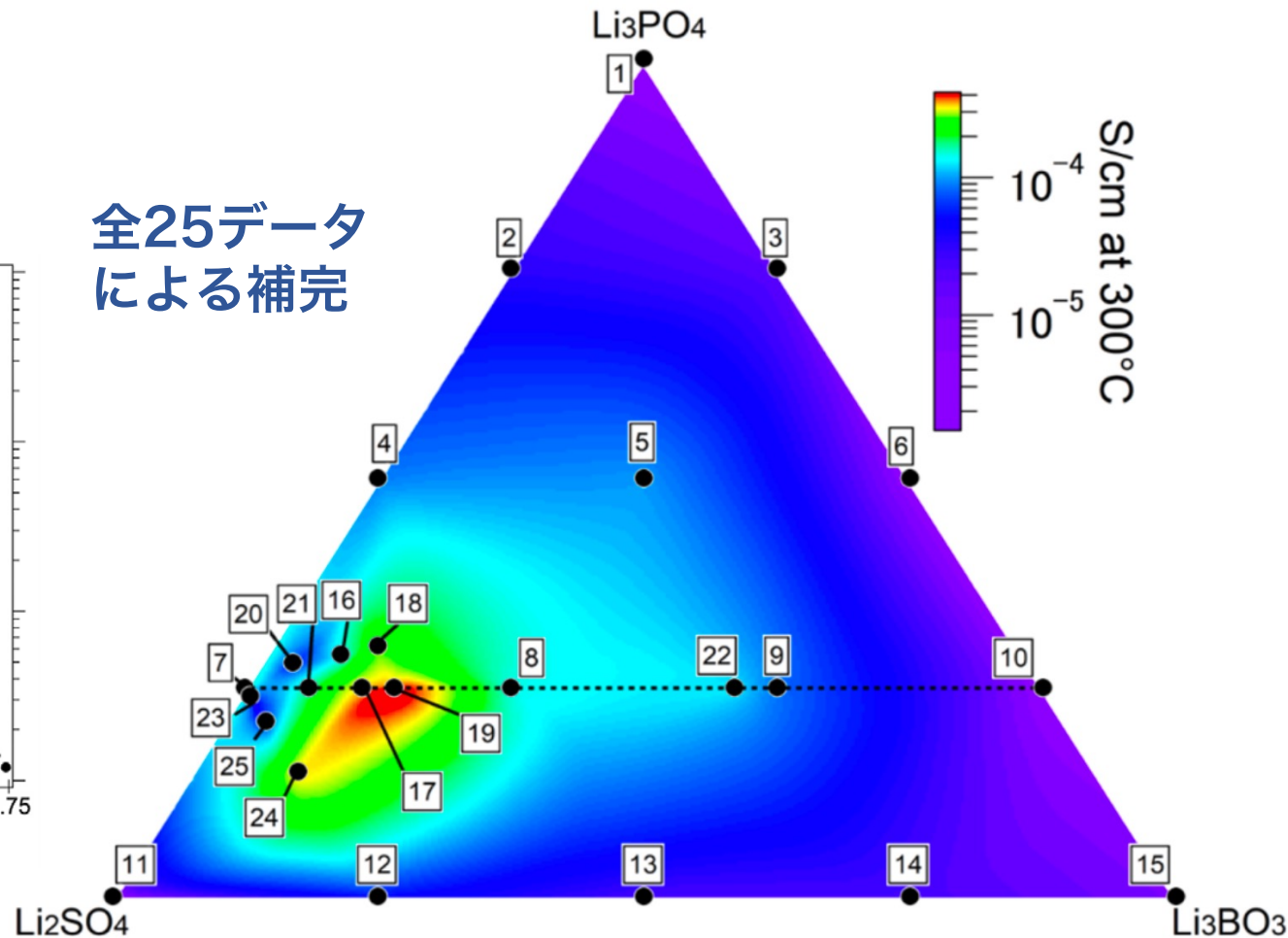
# ベイズ最適化による最適組成

Li<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, Li<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, Li<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>の混合

**4.9 × 10<sup>-4</sup> S/cm (300 °C)**



全25データ  
による補完



# 応用例4：HΦを用いたハミルトニアン推定

アプリ掲載数 269 件

お問合せ / アプリ掲載依頼

JP / EN

MateriApps

物質科学シミュレーションのポータルサイト

MateriApps について レビュー募集

Google カスタム検索

もっと詳

NEWS / 講習会・イベント アプリ一覧 アプリ詳細検索 キーワード解説 レビュー 事例 アプリコンシェルジュ

公開度：3 ★★★ ドキュメント充実度：1 ☆☆☆

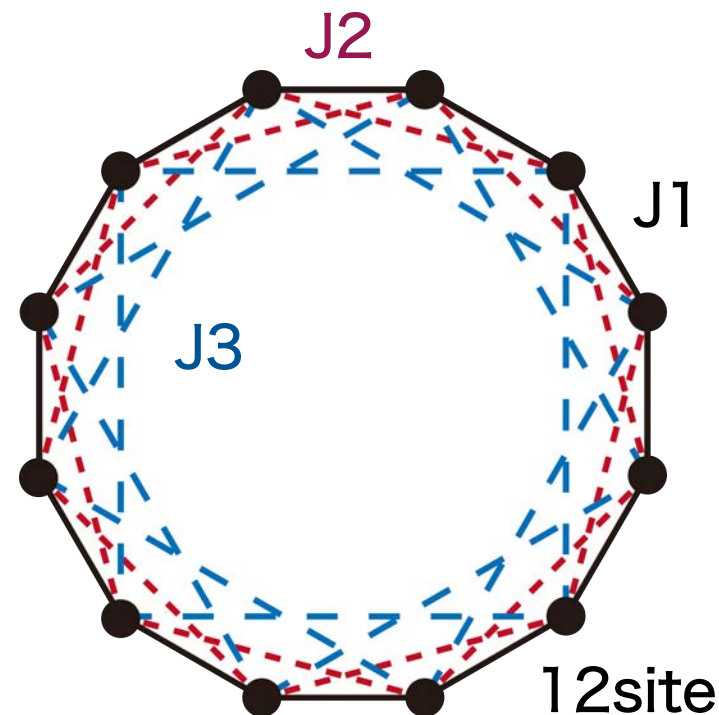
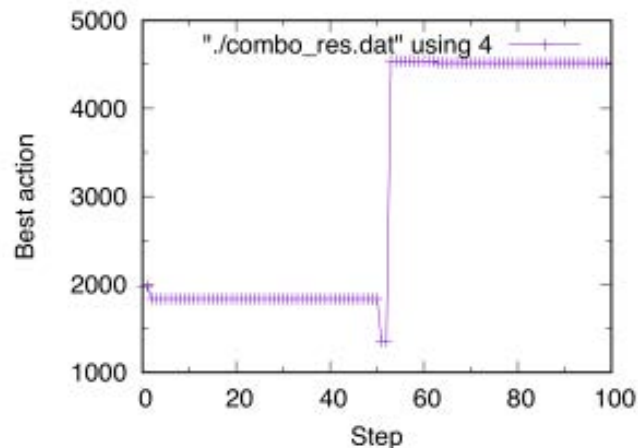
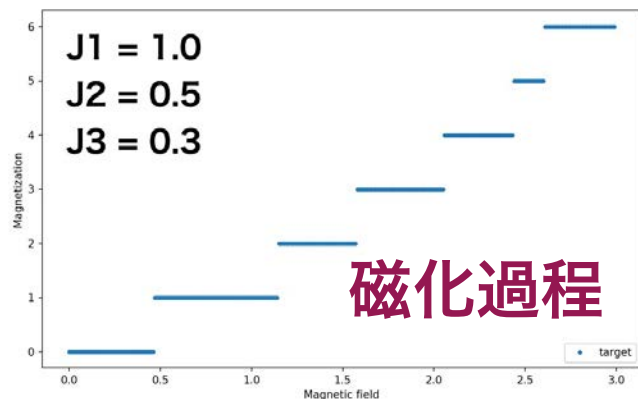
機械学習で使われるベイズ最適化のPythonライブラリ。データ数に対して線形に計算コストが増大するので、大きな特徴空間でベイズ最適化を行うことが可能。ハイパーパラメータは第二種最尤推定に基づいてデータから自動的に学習される。

04 / 06

01 基本情報

量子格子模型ソルバーHΦとベイズ最適化ライブラリCOMBOを組み合わせたモデル推定事例の紹介

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



物性研  
吉見一慶さんと  
共同開発



[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