

データ同化による結晶構造予測 (Crystal structure prediction by data assimilation)

藤堂眞治^{1,2,3,*}

¹ 東京大学大学院理学系研究科

² 東京大学物性研究所

³ 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門

Syngé Todo^{1,2,3}

¹ Department of Physics, University of Tokyo

² Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

³ MaDIS, National Institute for Materials Science

*wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

密度汎関数法や量子モンテカルロ法に代表される計算科学アルゴリズムの進化やスーパーコンピュータによる大規模な並列化により、より複雑な物質をより精密にシミュレーションすることが可能となってきた。また近年、シミュレーションソフトウェアのオープンソース化やパッケージ化も進み、計算物質科学の専門家でなくとも本格的なシミュレーションを手軽に行えるようになってきた[1,2]。先端的な計算物質科学シミュレーションと精密な実験データを最新のデータ科学の手法により組み合わせることで、これまで難しかった物質の構造予測や物性予測が今後飛躍的に発展すると期待される。

その一つの試みとして、最近我々が提案した実験とシミュレーションの「データ同化」による新しい結晶構造手法[3,4]を紹介する。この手法では、原子間ポテンシャルエネルギーと X 線回折データから定義される「結晶化度」を組み合わせたコスト関数を最適化する。たとえ X 線回折データがそれ自体では従来の構造解析手法には全く不十分であったとしても、シミュレーションという全く性質の異なるデータと組み合わせることで構造予測が可能となる。我々は SiO_2 の多形やダイヤモンドなどの物質にこの手法を適用し、100 以上の原子を含むような大きな計算セルに対しても、高い確率で正しい構造が推定されることを示した。また、この手法で現れる、複数のコスト関数の同時最適化問題に対する新しい最適化手法を開発することで、アニーリング法などの「メタヒューリスティクス」に頼らずにさらに効率よく最適解を探索することが可能となった。講演では、シミュレーションや実験データといった様々な「部品」をデータ科学により「同化」することで可能となる新しい物質科学について展望する。

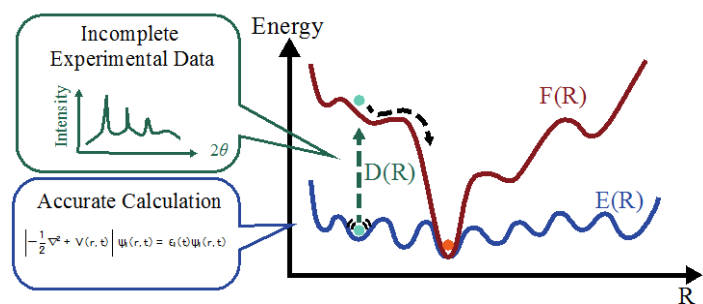


Fig. 1: 実験と計算のデータ同化の概念図.

[1] MateriApps – 物質科学シミュレーションのポータルサイト <http://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/>

[2] 本山, 三澤, 加藤, 藤堂, 固体物理 **52**, 743-755 (2017).

[3] N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo, S. Tsuneyuki, *Phys. Rev. Materials* **2**, 053801 (2018).

[4] D. Adachi, N. Tsujimoto, R. Akashi, S. Todo, S. Tsuneyuki, preprint: arXiv:1808.06846.