

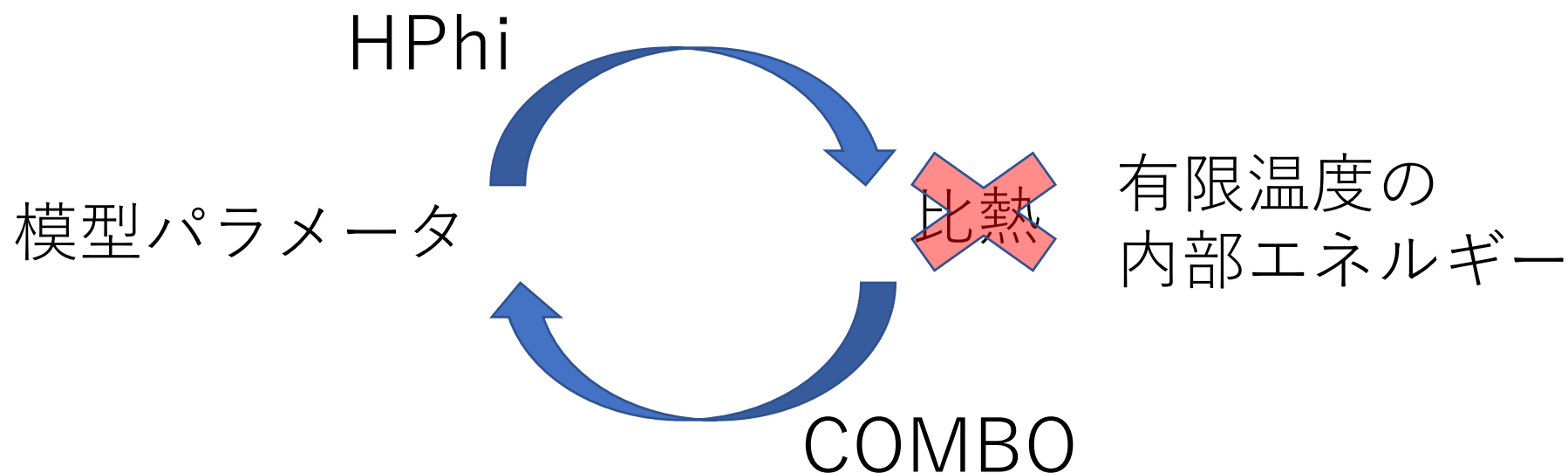
成果発表

GroupA 井戸

有限温度の物理量からのモデル推定 by HPhi

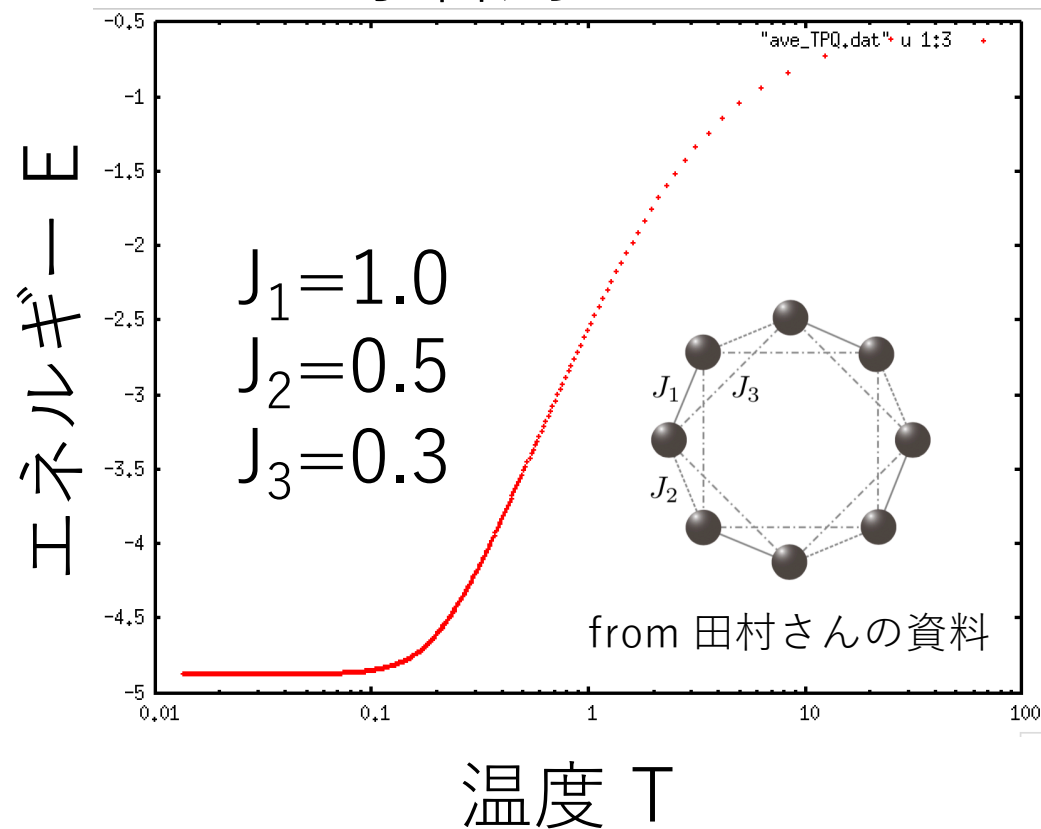
- 実験で測定される量
スペクトル、磁気パターン、磁化曲線、**比熱**

有限温度の情報からモデル推定できるか？

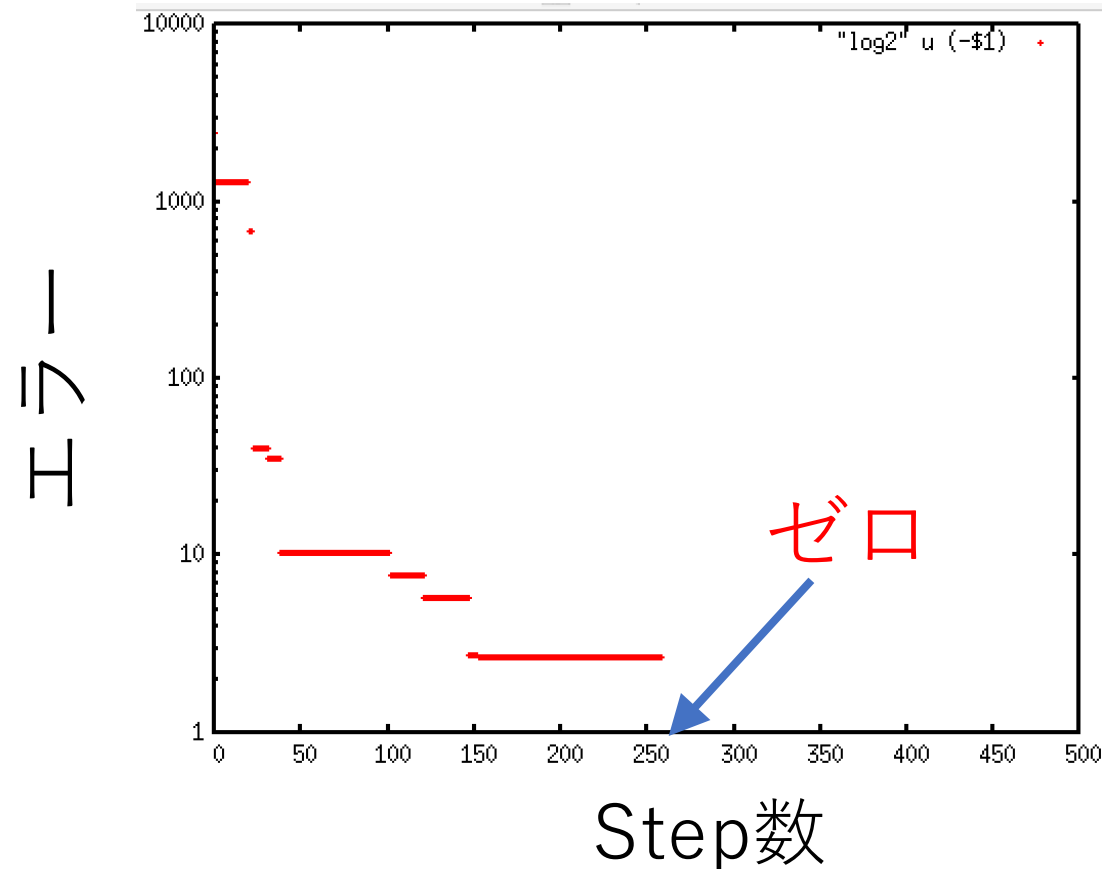


有限温度の物理量からのモデル推定 by HPhi

学習用データ



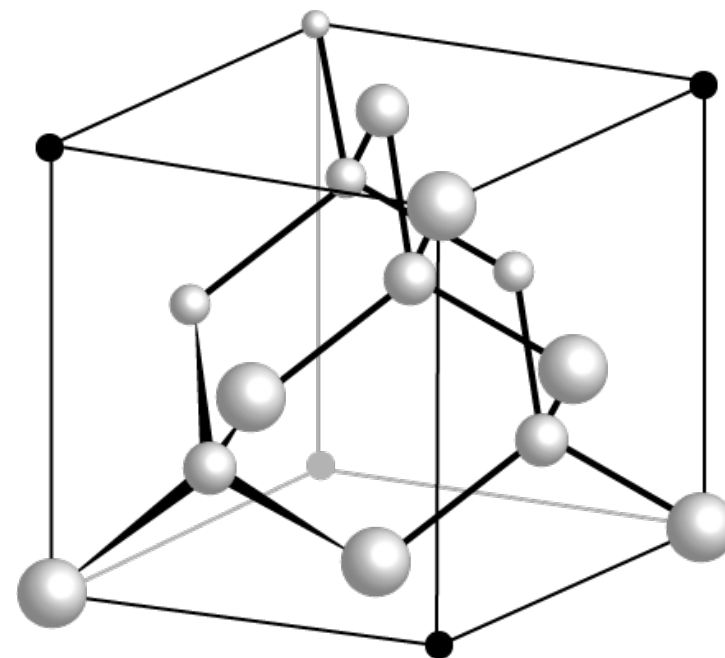
最適化結果



正しいモデル推定ができた！

COMBOでの結晶構造最適化:目的

- DFTに基づいた第一原理計算から物質の構造を最適化
- 通常は提案構造に対し力を計算し全エネルギーが下がっていくように原子位置を動かす
→局所ミニマムに陥る可能性！



Siの結晶構造

<http://chemieaula.blog.shinobi.jp/Entry/301/>

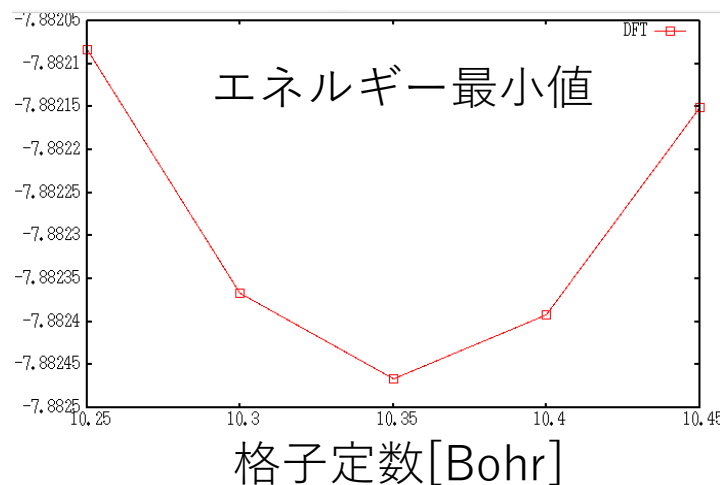
Siの結晶構造をCOMBOで最適化できるか？
(DFT計算コード: QE)

COMBOでの結晶構造最適化:結果

- 格子定数：7.5~15[Bohr]を100分割
分率座標のメッシュ：4x4x4
※一つのSi原子は固定した

- 最適化の結果

	格子定数	分率座標		
Bayes	10.35	0.25	0.25	0.25
Random	10.45	0.25	0.25	0.25



Bayes最適化は
正しい最小値に
なっている！

