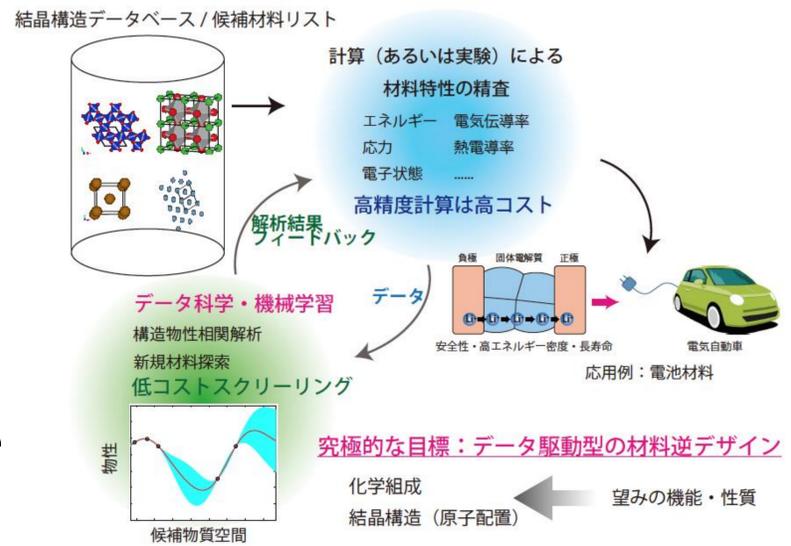




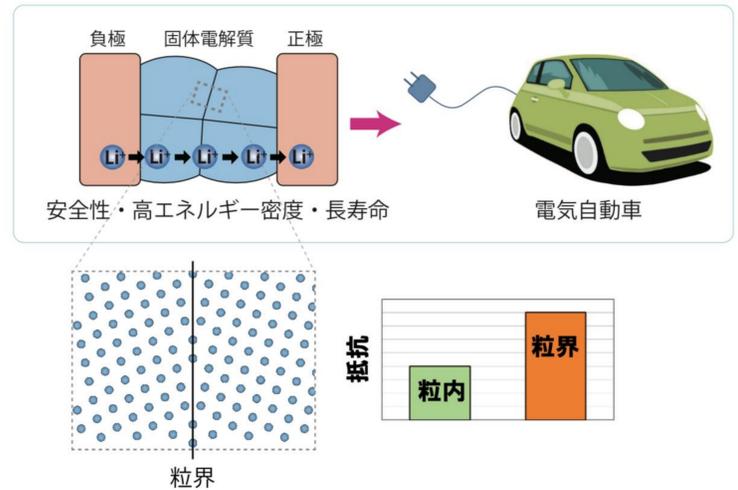
# データ駆動型材料探索の実現に向けて

収集したデータから未知の知見を見出すための統計的データ解析技術の重要性が多岐にわたる分野で示されている。特に、機械学習による材料データの解析は材料情報学（Materials Informatics）と呼ばれ、多様な材料から有望なものを効率よく見出すための新たなアプローチとして注目されている。ここでは、機械学習によって粒界と呼ばれる結晶構造が作る境界面を解析する事例を紹介する。



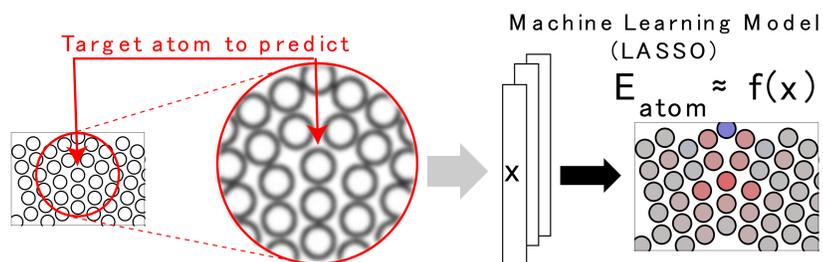
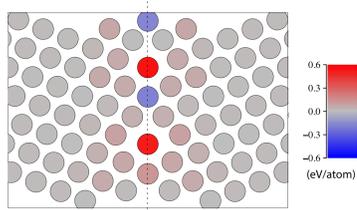
## 概要

- 計算機の発展でシミュレーション計算によって結晶材料の性質を調査する計算材料科学が一般的になった
- しかし、粒界・界面のような複雑な構造の計算は計算コストが高く網羅的な調査は現実的でない
- そこで、多様な粒界候補構造の一部についてシミュレーション計算を実施した結果に機械学習を適用することで効率的なスクリーニングや探索を実現する方法を提案する
- ここでは、粒界原子エネルギーの予測と粒界構造探索における事例を紹介する



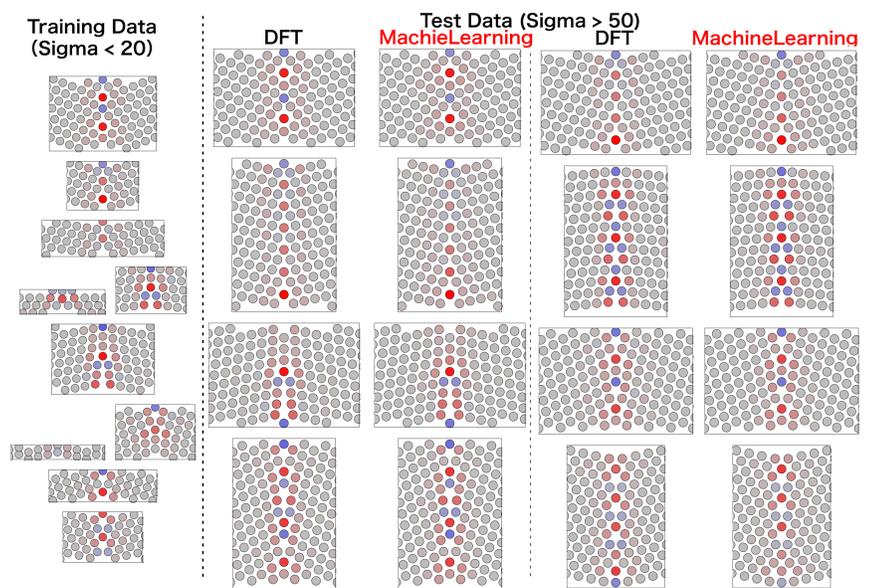
## 事例1：粒界原子エネルギー予測 [1]

- 原子エネルギーを調べるDFT計算 (Shiuhara, et al, Phys. Rev. B 2010)
- 粒界近傍の原子エネルギーの分布を描けるが計算コストが高く網羅調査は不可能

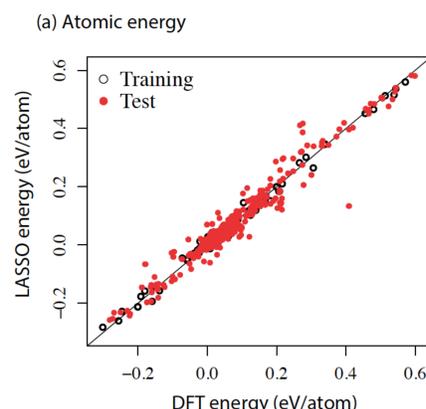


Numerical vector representation  $x$  of local atomic density centered at the target atom (S. De, et al, Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 13754, 2016)

- 対象周辺の原子環境をベクトルで表現し、機械学習モデルを学習



ML showed surprisingly high accuracy in much larger GBs

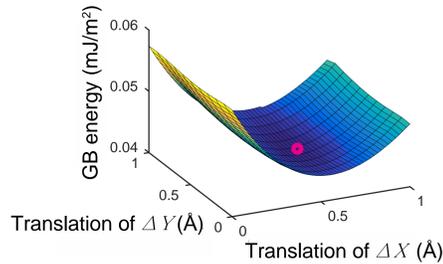
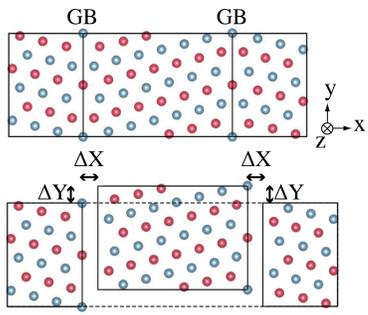


- テスト点と予測値の相関係数  $\approx 0.98$
- 局所構造の類似性により、高精度な予測を達成
- 課題: より複雑な粒界, 訓練データの収集法確立

# 事例2：粒界構造探索 [2]

## 粒界モデルの安定構造探索

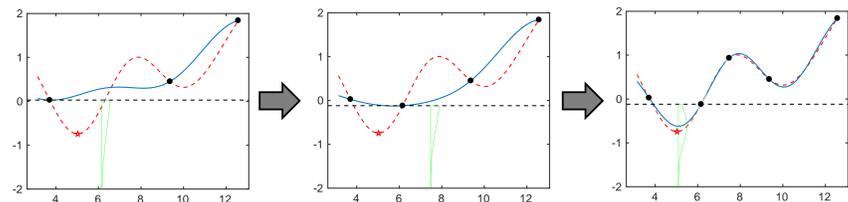
Each one point in the surface is given by structure relaxation for each  $(\Delta X, \Delta Y)$



粒界面の回転角毎の並進移動 ( $\Delta X, \Delta Y$ ) を構造緩和計算 (安定構造の特定)

## ベイズ最適化

過去の取得した観測点の粒界安定性情報を基に、未知の粒界がそれまでのものよりどの程度安定性を向上するかを確率的に予測

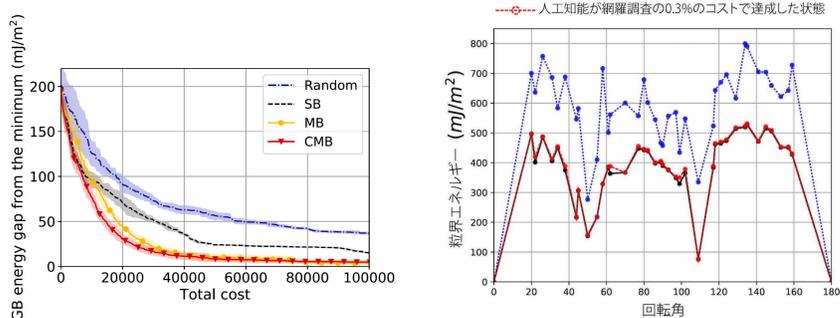


赤: 真の関数(未知), 青: 機械学習の予測, 灰色: 不確かさ, 緑: 改善確率, ●: 観測点

## 『コスト考慮型マルチタスクベイズ最適化』の構築

- 複数のモデル同士が、類似性を考慮して曲面の情報を共有 (Knowledge transfer)
  - 時間的コストを考慮して、コストパフォーマンスで次の候補を選択 (Cost-sensitive sampling)
- ⇒最小のコストで安定構造を探索できる

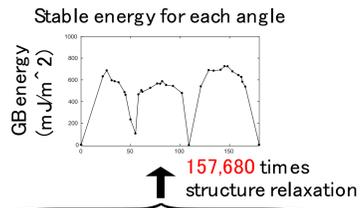
## FCC-AI粒界による実証



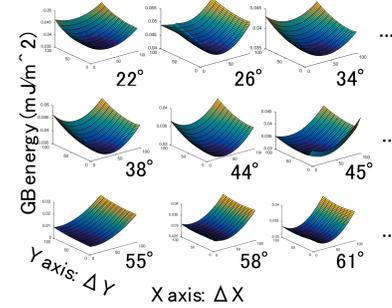
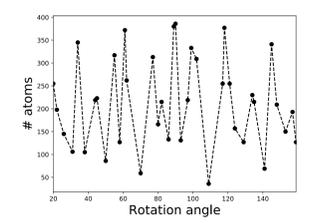
- 古典ポテンシャル(EAM)による全点計算との比較
- 全点計算 (網羅調査) の0.3%程度のコストで5mJ/m<sup>2</sup>の誤差に到達

## ☆粒界探索特有の困難さ

(1) 様々な回転角について構造探索が必要

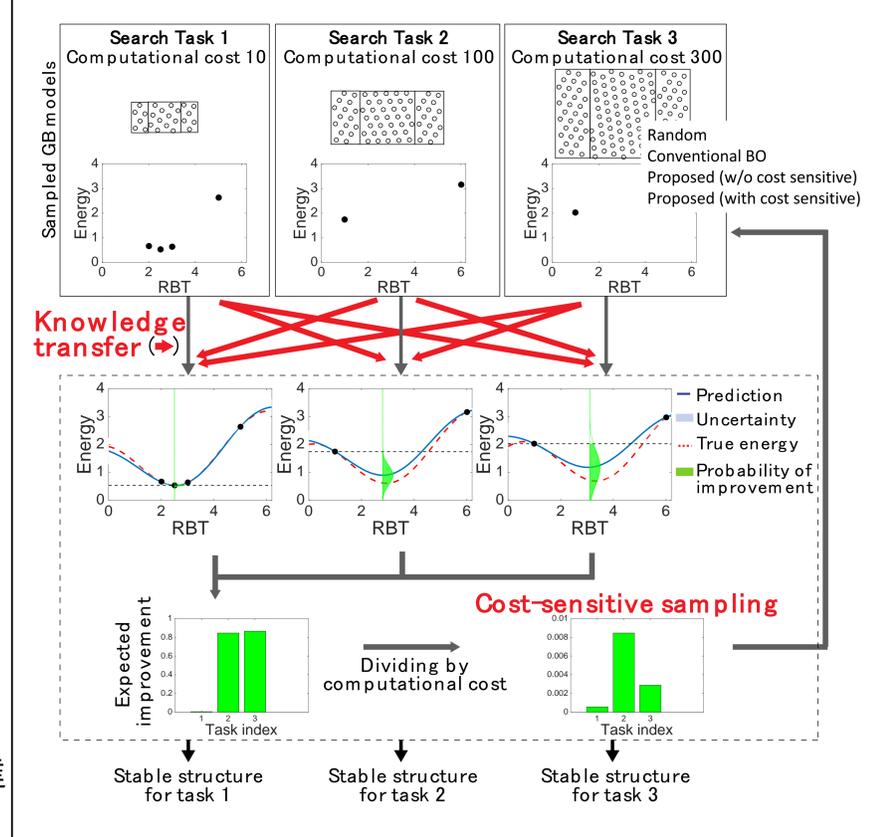


(2) 計算コストの多様性



構造的な類似性から似た曲面がたくさん現れるが計算の大変さは大きく異なる

## コスト考慮型マルチタスクベイズ最適化の概念図



## 参考文献

- [1] T. Yonezu, T. Tamura, I. Takeuchi, M. Karasuyama, Knowledge-Transfer based Cost-effective Search for Interface Structures: A Case Study on fcc-AI [110] Tilt Grain Boundary, Physical Review Materials, 2, 113802, 2018.
- [2] T. Tamura, M. Karasuyama, R. Kobayashi, R. Arakawa, Y. Shihara, and I. Takeuchi, Fast and Scalable Prediction of Local Energy at Grain Boundaries: Machine-learning based Modeling of First-principles Calculations, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.25, no.7, 075003, 2017.

## 産学連携について

材料科学に限らないデータ解析技術一般を研究しています。機械学習を活用した予測や最適化技術に注目が高まっていますが、機械学習はまだ魔法の杖ではなく、実際には技術者の試行錯誤が必要で適切な結果を得るには正しい知識が必要です。技術相談など適宜お受けしております。

## 研究フェーズ

- 1 原理検証
- 2 基礎固め
- 3 開発研究
- 4 実用性評価
- 5 技術移転可

## 【お問合せ】名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627 FAX:052-735-5542

E-mail: nitfair@adm.nitech.ac.jp URL: https://technofair.web.nitech.ac.jp/