

多元系材料探索のためのゲーム木探索による高速組成最適化

Boosting Material Modeling using Game Tree Search Composition Optimization

NEC IoT デバイス研究所, °澤田 亮人, 岩崎 悠真, 石田 真彦

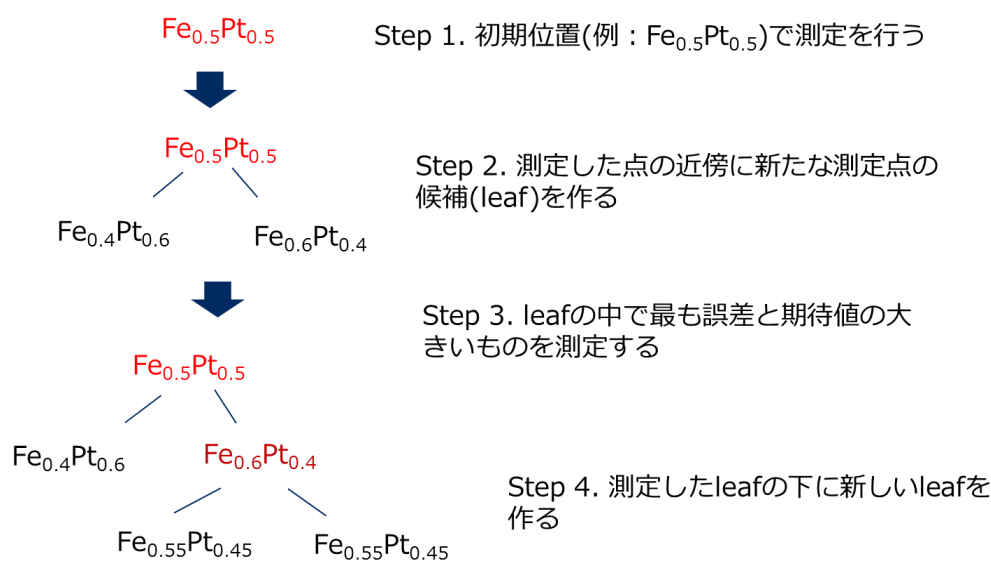
NEC IoT Devices Research Laboratories, °Ryohto Sawada, Yuma Iwasaki and Masahiko Ishida

E-mail: sawada_ry@cp.jp.nec.com

材料開発の迅速、低コスト化のために、少ない実験回数で優れた特性を持つ材料を探索する技術が求められている。特に、多元合金などの総当り的な探索が不可能なケースでは、経験や直感などの人間的な予想だけでは最適化が困難であるため、数理的なアプローチが重要となる。

これまでの研究では、ベイズ推定や遺伝アルゴリズムによる材料組成・物性の最適化アプローチが報告されてきた。例えば、ベイズ推定では過去の測定結果から任意の組み合わせでの特性の期待値と不確かさを計算し、双方が高い組み合わせから優先的に探索を行う。しかし、計算コストが最適化するパラメタの数に指数関数に比例するため多元合金などの総当り的な探索が不可能なケースへの適用が難しい。遺伝アルゴリズムは特性の悪い組み合わせの淘汰と良い組み合わせの交叉によって探索の優先度を調整する。しかし、広く浅い探索と狭く深い探索の系統的な制御は難しく、局所解に陥ってしまいがちである。これら従来手法の問題点は、広く浅い探索と狭く深い探索を両立の難しさに起因している。即ち、良い特性が得られた材料に似通った材料は同じく良い特性を持つ可能性が高い一方で、これまで測定が行われてこなかったような組み合わせの探索も必要ななかで、如何にして両者のバランスを高速かつ高効率に保つかが焦点となる。

そこで、本研究ではゲーム木探索を用いて上記問題の解決を試みた。ゲーム木探索では下図のように測定結果を木構造で管理し、根の深さに応じて探索の細かさを変えることで、広く浅い探索と狭く深い探索を両立している。講演では実装の詳細と異常ネルンスト材料やホイスラー型の多元合金の最適化などの実践例について述べる。本研究は JST, ERATO の支援を受けています。



図：ゲーム木探索の概略