

インフォマティクスを用いたコンビナトリアル結晶構造解析

○Yuma Iwasaki¹, A. Gilad Kusne², Sean Fackler³, Ichiro Takeuchi⁴

¹IoT Devices Research Laboratories, NEC Corporation, Tsukuba 305-8501, Japan

²National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD20899, USA

³Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA94720, USA

⁴Department of Materials Science and Engineering, University of Maryland, College park, MD 20742, USA

Email: y-iwasaki@ih.jp.nec.com

実験手法・計算手法の発展に伴い、短期間で大量の材料データの取得が可能となっている。これら”材料 Big Data”を機械学習によって解析する”Materials Informatics”と呼ばれる領域が近年注目されている。現在、我々もコンビナトリアル実験^[1]で得られる大量の機能/特性データ、および第一原理計算から得られる大量の電子構造データを実際に取得し、機械学習による解析を積極的に活用して熱電材料の開発を行っている。

発表では、その材料開発システムの一部に採用している教師なし学習を用いた結晶構造解析を紹介する^[2]。これはコンビナトリアル実験から得られた大量の XRD データにクラスタリング解析を施すことで、瞬時に結晶構造 phase diagram を作成するものである。この技術により材料探索の高速な First Screening が可能になっただけでなく、第一原理計算データと実験データを機械学習で紐づける際にも重要な役割を果たしている。

解析を施す際には、XRD データ間の類似度/非類似度を定義づける”metric”を適切に設定することによって、解析精度が大幅に向上する。初めに、コンビナトリアルスパッタで作成した 3 元組成分布薄膜の XRD データ (fig. 1) から、8 種類の metric (Euclidean, Manhattan, Pearson, etc.) によって構築した phase diagram (fig. 2) を示し、その定量的/定性的な評価を行う (fig. 3)。その後、この解析から得られた知見を使用し、新しい metric (NCDTW : Normalized and Constrained Dynamic Time Warping) を提案し、それによってクラスタリング精度が向上することを示す^[3]。

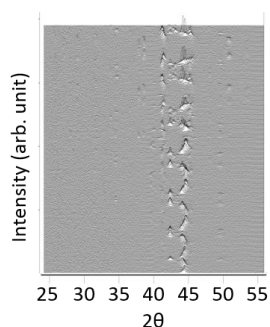


Fig.1
コンビナトリアル実験で得られた大量の XRD pattern

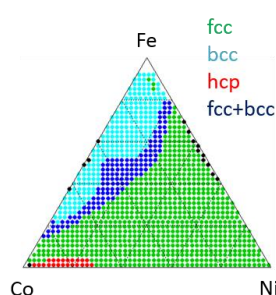


Fig.2
NCDTW で作成された Phase diagram

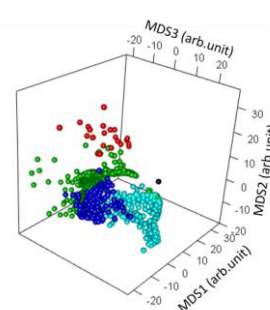


Fig.3
Multi Dimension Scaling (MDS) による metric の定性的評価の様子

- [1] I. Takeuchi, et al. Nat. Mater. **2**, 180 (2003)
- [2] A. G. Kusne, et al. Sci. Rep. **4**, (2014)
- [3] Y. Iwasaki, et al. NPJ Comput. Matter. In press (2017)