

A I を用いた磁性材料開発

Magnetic materials development using artificial intelligence

NEC¹, JST さきがけ², ○岩崎悠真^{1,2}

NEC Corp.¹, JST-PRESTO², °Yuma Iwasaki^{1,2}

E-mail: y-iwasaki@ih.jp.nec.com

AI 囲碁(AlphaGo)や AI 将棋(Ponanza)等による AI ブームの影響から、材料開発の分野でも AI 技術を用いた取り組みが盛んに行われている。囲碁や将棋などでは、AI が人類を超越した存在になっているが、材料開発の分野では解くべき問題が複雑であるため、AI 技術さえあればよいという状況には至っていない。そのため、材料開発では『AI と人間の協創』が非常に重要となる。本講演では、材料開発を行う人間を強力にアシストすることができる AI 技術(機械学習技術)を2つ紹介し、その実際の磁性材料開発への応用事例を交えて講演する。

【① 異種混合学習による磁性熱電材料開発】

材料開発の分野では、機械学習で作成した Data-Driven モデルを人間が解釈することで材料創成のヒントを得ることがしばしばある。そのためには、Deep Learning のようなブラックボックス型の機械学習ではなく、人間が解釈できるホワイトボックス型で Data-Driven モデルを作成する必要がある。本講演の前半は、ホワイトボックスでかつ高精度に予測を行うことができる異種混合学習(FAB/HMEs^{※1}, 図 1)を用いて、磁性熱電材料(異常ネルンスト材料)を開発した事例を紹介する。

【② ベイズ最適化と第一原理計算を用いた材料自動探索システムによる磁性材料開発】

講演の後半は、ベイズ最適化と第一原理計算を組み合わせた自動材料探索システムを紹介する(図 2)。ベイズ最適化は、材料開発における次の一手(次に何をすればよいか)を数学的に導出することができる。この手法と第一原理計算(仮想的な材料作成と特性評価)を組み合わせることで、① 仮想材料作成 ⇒ ② 仮想材料の特性評価 ⇒ ③ 次の仮想材料決定 ⇒ ① 仮想材料作成・・・のループを PC 内で自動的に実行し続けることによって、有望な材料を選別することができる。人間はこのシステムが提案する候補材料を中心に作成することで、無駄な実験を大幅に減らすことができる。本講演では、本システムを用いて金属磁性材料(ホイスラー合金)を探索した事例を紹介する。



図 1 異種混合学習(FAB/HMEs)

記述子を自動的に選定しつつホワイトボックスで非線形モデルを作成することが可能

※1 Factorized Asymptotic Bayesian Inference / Hierarchical Mixture of Experts



図 2 材料自動探索システム

ベイズ最適化と第一原理計算を用いて材料開発のルーチン(材料作成⇒特性評価⇒次の作成材料決定⇒材料作成⇒・・・)を PC 内で実行し続ける。