

# 機械学習による粒界データ解析：データ駆動型材料探索に向けて

## Machine Learning for Grain-boundary Data Analysis: Toward Data-driven Materials Discovery

名古屋工業大学<sup>1</sup>, 物質・材料研究機構<sup>2</sup>, 科学技術振興機構<sup>3</sup> ○烏山 昌幸<sup>1,2,3</sup>

Nagoya Institute of Technology<sup>1</sup>, National Institute for Materials Science<sup>2</sup>, Japan Science and Technology Agency, <sup>3</sup>Masayuki Karasuyama<sup>1,2,3</sup>

E-mail: karasuyama@nitech.ac.jp

機械学習を用いて、データ駆動型の材料探索を考える Materials Informatics の研究が盛んになってきている。本発表では特に、計算による結晶粒界の安定構造探索を主なターゲットとして、多様な候補構造の中から、所望の性質を持つものを探す材料探索の過程を、統計的アプローチによって加速するための方法について紹介する。粒界は結晶同士が作る境界面であり、電解質材料など様々な場面で物性の変化を引き起こす。しかし、粒界には回転角や並進移動の組み合わせにより多様な候補構造が存在し、安定構造を発見するだけでも大量の構造緩和計算が必要であり、網羅的な解析は現実的ではない。本研究では、機械学習における転移学習とコスト考慮型探索の2つのコンセプトを粒界の構造探索に導入する。関連のある複数の問題をデータ駆動で解く場合に、問題間で情報の共有を行うことが機械学習手法の効率を向上させることが知られている。この枠組みは転移学習と呼ばれ、画像認識分野など、機械学習では広く用いられてきた。粒界解析では多数の安定構造探索が必要となるが、粒界が含む原子配置パターンの類似性により、各々の探索曲面には強い相関が存在する。そこで、転移学習によって複数の安定構造探索間で情報を共有することで、探索の効率が劇的に向上できることを示す。また、粒界探索におけるもう一つの特徴は、計算コストの多様性にある。これは粒界モデルの周期性に起因するものであり、長い周期を持ちセルサイズの大きな粒界モデルの安定構造探索はより計算コストが高くなる。一方で、たとえ大きく周期が異なっても粒界内には局所的に類似した原子配置が頻繁に現れることが知られており、これにより小さなセルと大きなセルの粒界モデル間にも多くの場合、曲面の類似性が存在する。我々は計算コストの低い粒界で曲面に関する知識を収集し、計算コストの高い粒界に転移するアプローチを考える。このようにすることで、探索全体のコスト効率を最大化することができる。具体的な事例として、AIの傾角粒界探索での検証について紹介する。