

# ニューラルネットワークに基づく PbTe 系熱電材料の特性予測

## Prediction of PbTe-like Thermoelectric Materials' Properties with a Neural Network

東京大学<sup>1</sup>, 物質材料機構<sup>2</sup>, 理化学研究所<sup>3</sup> ○(B) 佐藤陸<sup>1</sup>, (M2) 小谷拓史<sup>1,2</sup>, 桂ゆかり<sup>1,2</sup>,  
熊谷将也<sup>3</sup>, 今井庸二<sup>2,3</sup>, 郡司咲子<sup>2</sup>, 木村薫<sup>1</sup>

Tokyo Univ.<sup>1</sup>, NIMS<sup>2</sup>, RIKEN<sup>3</sup> ○Riku Sato<sup>1</sup>, Takushi Kodani<sup>1,2</sup>, Yukari Katsura<sup>1,2</sup>,

Masaya Kumagai<sup>3</sup>, Yoji Imai<sup>2,3</sup>, Sakiko Gunji<sup>2</sup>, Kaoru Kimura<sup>1</sup>

E-mail: rsato@phys.mm.t.u-tokyo.ac.jp

### 1. 緒言

廃熱を電気エネルギーとして回収できる熱電材料は、持続可能社会の実現に貢献し得る重要な材料であるが、実用化のためにはより高いエネルギー変換効率の達成が必要となる。熱電材料の性能を表す指標としては、一般に無次元性能指数  $zT = S^2 \sigma T / \kappa$  ( $T$  は絶対温度、 $S$  はゼーベック係数、 $\sigma$  は電気伝導率、 $\kappa$  は熱伝導率) が用いられるが、その制御は容易ではない。キャリア濃度  $n$  が高くなると、 $\sigma$  が高くなるが  $S$  が下がり  $\kappa$  が上がるように、それぞれの要素が複雑に絡み合っているため、熱電特性の改善は、研究者の経験による勘に依存するところが多い。

近年では、材料開発にデータ科学を取り入れる動きが盛んになってきており、その中でも計算値データを使用した機械学習の研究は数多く見られる[1]。しかしながら、十分な量のデータを集めることの困難などから、実験値データを用いた機械学習の試みはほとんどない。

本研究では、web 上の論文から抽出した PbTe 系熱電材料の実験データを教師データとしてニューラルネットワークによる機械学習・熱電物性予測を行い、熱電材料開発の指針を得ることを目指した。

### 2. 方法

66 本の論文のグラフ画像から抽出した PbTe 系熱電材料 210 試料分の実験データのうち、

70% を教師データとして、Fig I に示す 3 層ニューラルネットワーク[2]に学習させた。組成を記述子として、 $S, \sigma, \kappa, \log n$  の 300 K における実験値を 0~1 の範囲に規格化したものを目的変数とした。学習は誤差逆伝播法によって行い、最適化に Adam、過学習抑制のために Dropout と Weight Decay を採用した。残りのデータをテストデータとして、予測誤差を評価した。

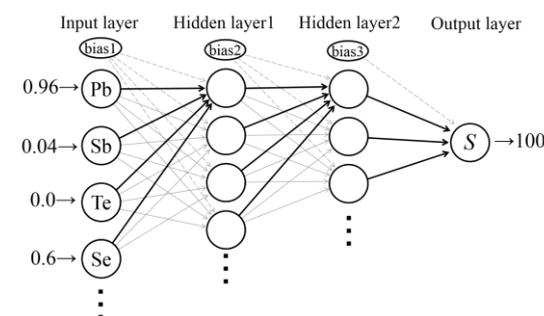


Fig I. Structure of the three-layer neural network

### 3. 結果と考察

$S, \sigma, \kappa, \log n$  のいずれの特性についても、80~90% の試料では 10% 以内の誤差で予測できた。特に、 $S$  については平均誤差が約 6.2% と、他の特性と比べて高い予測精度が得られた。今後は、元素の物性値を使用した合成記述子を利用して、さらなる予測精度の上昇を目指す。

### 4. 参考文献

- [1] A. Jain *et al.*, *J. Mater. Res.* **31**, 977 (2016).  
[2] 斎藤康毅, ゼロから作る Deep Learning — Python で学ぶディープラーニングの理論と実装. 東京, オライリー・ジャパン, 2016, 320p