

統計的機械学習を活用した酸化物薄膜の材料探索 ～実験家によるインフォマティクスの活用体験～

若林 勇希¹, 大塚 琢馬², 谷保 芳孝¹, 山本 秀樹¹, 澤田 宏²

NTT 物性科学基礎研究所¹, NTT コミュニケーション科学基礎研究所²

E-mail: yuuki.wakabayashi.we@hco.ntt.co.jp

近年、情報科学を援用して材料開発を高効率、高速で進めるマテリアルズインフォマティクス[1]が急速に発展している(図1)。本講演では、新物質探索の加速に向けて機械学習を活用した取り組みを紹介する。統計的機械学習手法のガウス過程回帰(GPR)を用いた予測と探索を、結晶成長時のパラメータデータや物性評価のためのスペクトル測定データに適用することで、原理的には、新物質探索の高効率化が可能になると考えられる。しかし、機械学習による実験データの予測と探索には、目的を適切に定量化した評価関数の設計・利用が重要であり、その設計によって実験効率は大きく異なりうる。本講演では、どのような評価関数を用いるかの決定に、情報科学の知識や物性研究者自らのセンスが重要であることを、酸化物磁性体[2,3]に対するスペクトル測定を例に紹介し、結晶成長時の成長パラメータ最適化をより高効率に行う取り組みについても言及する。

GPRによって計測データを学習し、スペクトル形状を予測しながら次の計測データ点を決定する高効率スペクトル測定手法は2018年に上野らによって開発された[4]。これに対し我々は、次の計測データ点を決定する際の評価関数に予測標準偏差だけでなく予測信号強度も取り入れる改良を行い、スペクトルのピーク周辺を優先的にサンプリングするアルゴリズムによりスペクトル形状の予測精度を向上させた[5]。改良手法を原子の価数評価のためのX線吸収スペクトル(XAS)測定に対して適用したところ、測定点を予め定めた従来の実験の6分の1の測定点数で、詳細な形状までスペクトルを再現できた(図2)。さらに、本手法の適用により、物質やスペクトルの計測手法に依らず、従来の実験よりも少ない測定点数でのスペクトル測定が可能となることを示し、本手法の高い汎用性を確認した。材料の物性評価のためのスペクトル測定は、新材料開発に必要な不可欠なプロセスであるため、本手法によるその実験時間とコストの大幅な削減を通じて、新物質・新材料開発が加速されることが期待される。

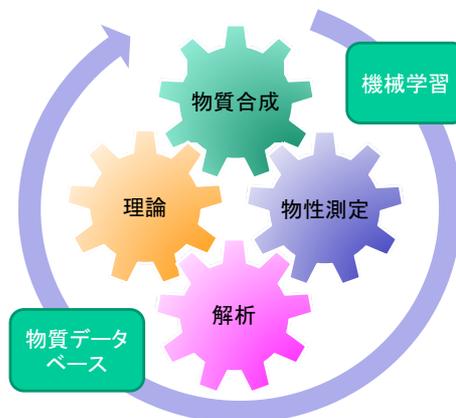


図1. 新材料開発サイクル。

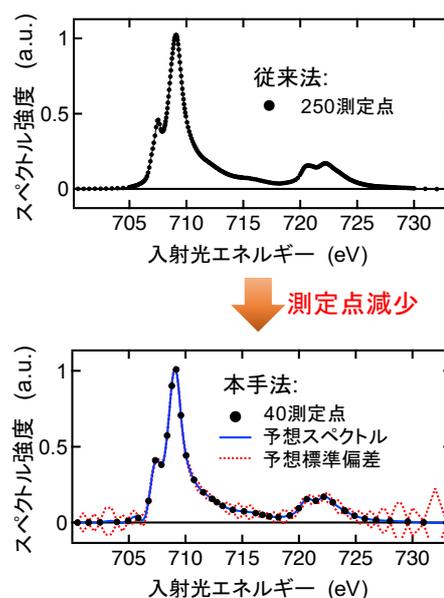


図2. (上図) 従来の測定手法での測定スペクトル [250 測定点]。 (上図) 改良した高効率スペクトル測定手法で 40 測定点から予測したスペクトル。

- [1] K. Rajan, *Mater. Today* **8**, 38 (2005). [2] Y. K. Wakabayashi, *et al.*, *Phys. Rev. B* **96**, 104410 (2017). [3] Y. K. Wakabayashi, *et al.*, *Nat. Commun.* in press. [4] T. Ueno, *et al.*, *npj Comput. Mater.* **4**, 4 (2018). [5] Y. K. Wakabayashi, *et al.*, *Appl. Phys. Express* **11**, 112401 (2018).