

# 不定形材料のマテリアルズ・プロセスインフォマティクスを 実現する深層学習による仮想実験法の開発

## Deep Learning Virtual Experimentations for Materials and Process

### Informatics of Tangible Materials

産総研<sup>1</sup>, ADMAT<sup>2</sup> ◦室賀 駿<sup>1</sup>, 本田 隆<sup>2</sup>, 中島 秀朗<sup>1</sup>

小橋 和文<sup>1</sup>, 清水 太陽<sup>1</sup>, 森田 裕史<sup>1</sup>, 岡崎 俊也<sup>1</sup>, 畠 賢治<sup>1</sup>

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology(AIST)<sup>1</sup>, Research Association of High-Throughput Design and Development for Advanced Functional Materials (ADMAT)<sup>2</sup>

E-mail: muroga-sh@aist.go.jp

材料開発の高速化、新規材料の探索、材料組成の最適化、より環境負荷低減・省エネルギー・低コストのプロセス実現等を目的として、データ科学を活用したマテリアルズ・プロセスインフォマティクスに関する研究開発が盛んに行われてきた。近年元素の組み合わせ、原子配置、電子状態を記述子とする機械学習や材料探索法に関して著しい進展が見られる。一方で対象系に関しては限定され、低分子化合物[1,2]、金属等の無機化合物[3,4]、結晶構造を持つ材料[5,6,7]が主である。

こうした現状を打ち破り、より適用可能な材料系を拡大し、複雑な材料構造を対象とする検討を可能にするために、我々は深層学習を用いた仮想実験法に関して検討を進めてきた[8]。不定形材料の構造を捉えた画像を深層学習の1種である conditional generative adversarial network (c-GAN)[9,10]を用いて計算機上に再現した。これにより原子配置等を要せずに材料の特徴学習を可能にした。c-GANへ組成のベクトルを入力することで任意の複数組成を混合した結果の混合状態の仮想実験が可能になっている。得られた仮想構造を畳み込みニューラルネットワーク(CNN)によって特性とリンクさせることで、任意組成に対応した構造生成と特性の推定が可能になった(Fig. 1)。

本研究ではカーボンナノチューブ(CNT)をブレンドした膜をモデル材料系とした c-GAN 及び CNN による仮想実験に関する内容に関して報告する。CNT の場合は、エネルギーデバイスに向けて導電性と内部の空隙構造の同時制御に適した CNT の組成が重要であり、構造生成と特性推定を伴う本手法による仮想実験が極めて有効である。また階層構造を有する材料系であるため、本研究ではスケールごとに合わせた c-GAN モデルを構築し、仮想実験を可能にするアプローチをとった。得られた推定結果を活用した結果の一例を Fig. 2 に示す。Fig. 2(a) はブレンド組成ごとの 2 物性の散布状況の推定結果である。CNT のブレンドによって層数ごとに支配的な物性散布領域があることが明

瞭に可視化されている。Fig. 2(b)では各ブレンド組成の経済性を算出し、各物性のレンジごとにコスト最小の組成導出を行った結果である。このようにして物性算出に基づいて、組成ごとの物性や経済性の推移状況に関して深層学習を活用した仮想実験から可能になった。講演では得られた知見から任意の材料系への水平展開の可能性と将来的な構想まで含めた発表を行う予定である。

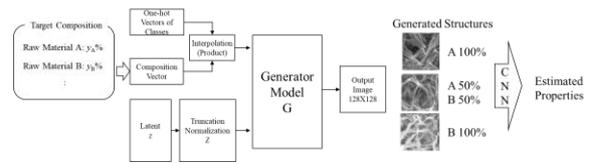


Fig. 1 Schematic of virtual experimentation of tangle materials using c-GAN and CNN models.

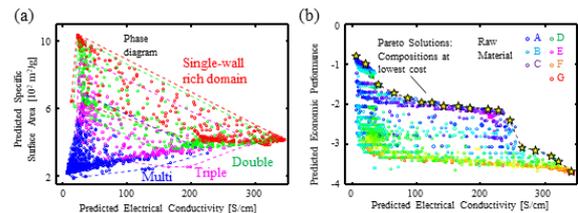


Fig. 2 (a) Phase diagram of predicted properties (electrical conductivity and specific surface area). (b) Determination of economically optimal compositions from the virtual experimentation.

謝辞：本成果は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託事業(JPNP16010)の結果得られたものです。

References: [1] Butler, et al., *Nature*, **559**, 547 (2018). [2] Sanchez-Lengeling, et al., *Science*, **361**, 360 (2018). [3] Ma, et al., *ACS Nano*, **12**, 6326 (2018). [4] Mao, et al., *Sci. Adv.*, **6**, eaaz4169 (2020). [5] Xie, et al., *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 145301 (2018). [6] Kim, et al., *Sci. Adv.*, **6**, eaax9324 (2020). [7] Wu, et al., *npj Comput. Mater.*, **5**, 66 (2019). [8] 室賀ほか, プラスチック成形加工学会第32回年次大会 (2021). [9] Goodfellow et al., *Conference paper at NeurIPS* (2014). [10] Brock et al., *Conference paper at ICLR* (2019).