

ニューラルネットワークによる磁気冷凍材料の 物性測定条件学習・予測

Optimization of measurement process for magnetocaloric materials by neural network

物材機構¹, 筑波大² ○寺嶋 健成¹, Pedro Baptista de Castro^{1,2}, 山本貴史¹,

Miren Garvine Esparza Eshevarria^{1,2}, 松本凌¹, 竹屋浩幸¹, 高野義彦^{1,2}

NIMS¹, Univ. of Tsukuba², °Kensei Terashima¹, Pedro Baptista de Castro^{1,2}, Takafumi D Yamamoto¹,

Miren Garvine Esparza Eshevarria^{1,2}, Ryo Matsumoto¹, Hiroyuki Takeya¹, Yoshihiko Takano^{1,2}

E-mail: TERASHIMA.Kensei@nims.go.jp

2つの変数に依存する物性値を実験から求める際、少ない予備データから尤もらしい物性値を得る2変数ステップの設定方法について、ニューラルネットワーク学習を用いた検討を報告する。

物質中のスピンに由来するエントロピーは外部磁場の印加・除去により操作可能で、このエントロピー変化(ΔS_M)に対応して物質が示す温度変化(磁気熱量効果)は、気体冷凍に代わる高効率な冷凍手段を与えると期待されている。 ΔS_M は物質と温度(T)と磁場(H)に大きく依存し、様々な温度域でそれぞれ大きな ΔS_M を示す物質探索が求められている。作成した試料の $\Delta S_M(T, H)$ 評価法には、磁化測定と Maxwell の関係式に基づく算出がよく用いられる。この際、特に試料の磁化が温度と磁場により急峻に変化する一次転移の磁性体では、 ΔS_M の評価には適切な温度・磁場測定ステップの設定を要する。図1(a)は一次転移物質 ErCo_2 に対し、5 T までの磁場変化で、二次転移物質は概ね評価できる粗めの磁場ステップでの磁化曲線を、図1(c)に(a)から算出した ΔS_M を破線で示す。測定ステップが試料に対し適切でない場合、実験結果から得られる ΔS_M は extrinsic な振動を示す。

我々はこの一次転移物質の ΔS_M を評価できる適切な温度・磁場ステップを、少ない予備データ点から効率的に求めるため、機械学習による予測を用いた。図1(b,c)に、図1(a)の磁化曲線をニューラルネットワーク学習させることで得た、より細かい磁場ステップ(0.2 T 毎)での磁化曲線と ΔS_M の予測を実線で示す。また図1(b,c)に、実際 0.2 T ステップで測定した磁化曲線と ΔS_M の実験結果を丸で示す。両者は概ね一致しており、予備的な測定結果の学習により、実験の本測定において設定すべき2変数の測定条件のシミュレートが可能であることが示唆される。

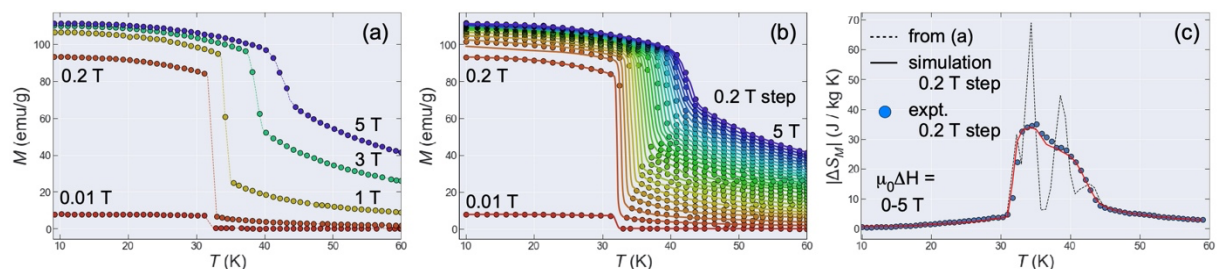


図1 (a) ErCo_2 の粗い磁場ステップで測定した磁化曲線 (b) (a)データの学習モデルによる 0.2T 毎の予測(実線)と実験値(丸)の比較 (c) ΔS_M 。破線: (a)のデータから、実線: 予測、丸: 実験値