

転移学習による日射遮蔽材料探索**Exploring Heat-Shielding Materials Using Transfer Learning****住友金属鉱山¹, 北陸先端大情報², 北陸先端大情報基盤³****○吉田 智大¹, 前園 涼², 本郷 研太³****Sumitomo Metal Mining¹, Sch. Info. Sci., JAIST², RCACI, JAIST³****○Tomohiro Yoshida¹, Ryo Maezono², and Kenta Hongo³****E-mail: tomohiro.yoshida.r7@smm-g.com**

太陽光からの熱線を遮蔽する日射遮蔽材料は、省エネルギーの観点から注目を集めており、車のフロントガラスや窓ガラスに用いられている。しかし、日射遮蔽材料として知られている材料の多くは貴金属や希少元素で構成されているため、より安価な代替材料が望まれている。

本研究では第一原理計算と転移学習を活用し新規日射遮蔽材料の探索を実施した[1]。日射遮蔽材料は近赤外線吸収と可視光透明性を有する必要がある。特に重要な可視光透明性に着目し、可視光吸収の小さい金属材料の探索を行った。可視光吸収は誘電関数の虚部に由来するが、誘電関数を第一原理計算から高精度に計算するためには計算コストの高いハイブリッド汎関数を用いた第一原理計算が必要となる[2]。そのため、ハイスループットスクリーニングはもちろんのこと、機械学習により予測精度の高い予測モデルを作成するためのデータを得ることすら困難である。一方、計算コストの低い一般化勾配近似（GGA）を用いることで大量のデータを作成することは可能であるが、誘電関数の計算精度が低く新規日射遮蔽材料探索に用いることはできない。

これらの困難を解決するため、本研究では GGA を用いた DFT 計算でビッグデータを生成し、それを学習した予備的な可視光吸収予測モデルを準備し、ハイブリッド汎関数を用いた DFT 計算で生成したスモールデータを利用した転移学習によって、可視光吸収の高精度予測モデルを構築した。このモデルを使用して、Materials Project から日射遮蔽材料の網羅的探索を実施した。その結果、高い日射遮蔽特性を持つ新規材料を発見した。

[1] T. Y., R. Maezono, and K. Hongo, submitted.

[2] S. Yoshio, K. Maki, and K. Adachi, J. Chem. Phys. 144, 234702 (2016).