

材料計測データのモダリティ変換

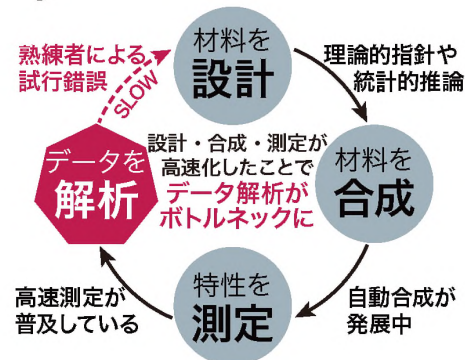
『AIで物質の性質を賢く調べる』

鈴木 雄太^{1,2} 1. 総合研究大学院大学, 2. 高エネルギー加速器研究機構



解決したい課題と背景

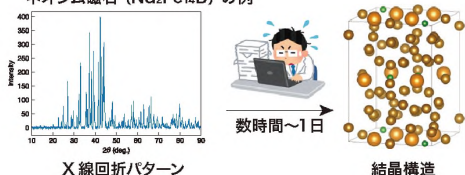
- 研究のボトルネックを解決し、材料開発を加速する



- 優れた材料は豊かな社会の基盤
高性能磁石、リチウムイオン電池、青色LEDの実現など、優れた材料は社会を一変させるインパクトがある。材料開発の効率化は、社会全体に波及する基盤技術

- X線回折 (XRD) : 結晶構造を調べる基本
物質の性質は結晶構造 (原子の並び方) に支配される。XRDは原子による光の回折を利用し結晶構造を調べる。材料の最も基本的な分析手法の一つ

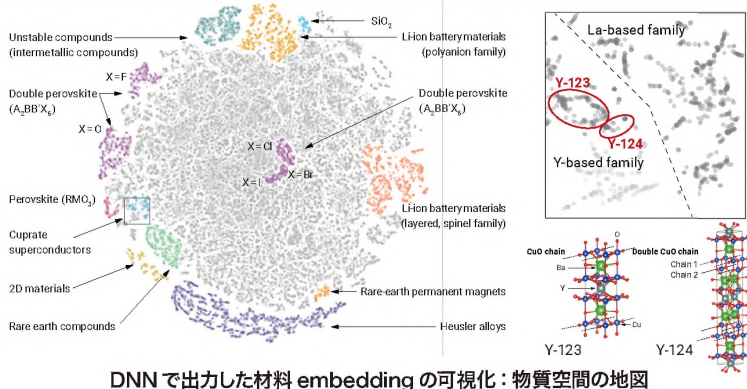
- 生のデータを見てよくわからない
計測データの解析には、試行錯誤と経験が必要
ネオジム磁石 (Nd₂Fe₁₄B) の例



研究の目的

- 機械学習を用いて、XRDパターンから高速に結晶構造を推定する手法を開発する。
- さらに、物理モデルを用いたXRDパターン解析法 (リートベルト法) を自動化し、精密な結晶構造を自動で得る手法を開発する。

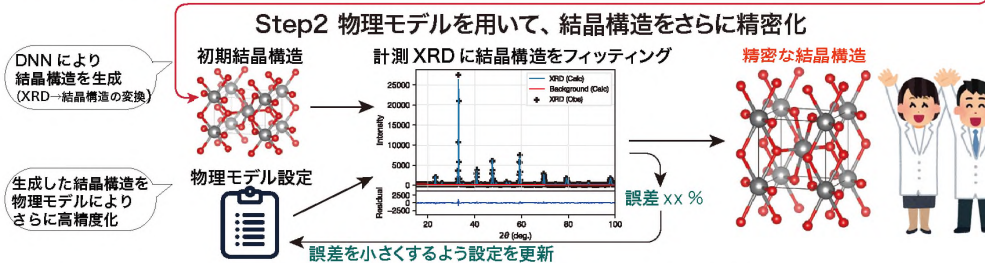
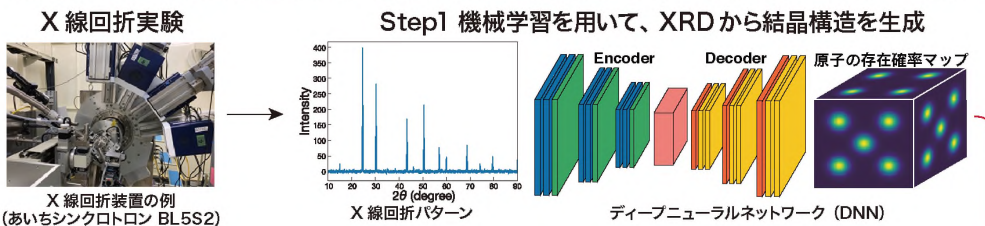
結果1 | 結晶構造を出入力するDNNの開発



- 自己教師あり学習により、材料の意味的類似性を捉えたベクトル表現 (embedding) を得た。
- 人間でも知識なしには判断が難しい、複雑な結晶構造の類似性も認識された。(例: 銅酸化物超伝導体 Y-123 と Y-124)
- embedding を用いることで、材料同士の意味的類似性の定量評価や、類似性に基づく材料の検索が実現する。
- 結晶構造を扱うDNNは発展途上であり、この他にエンコーダ・デコーダの開発など様々な研究に取り組んだ。

研究の概要 | 機械学習と物理モデルの二刀流

XRD 測定→機械学習モデルを用いた構造予測までの一連のワークフローを実証



- 高速な予測 × 物理モデルによる高精度化
・機械学習は精度 \times 速度 \circ
・シミュレーションは精度 \circ 速度 \times
これらを組み合わせ、お互いの弱点を補うアプローチ
- 1日かかりの解析が自動かつ30分程度に
手間を要するデータ解析を大きく加速できた。
単なる高速化にとどまらず、データ解析の自動化は今後の自動・自律実験に向けたキー技術の一つと期待

研究項目・成果

1. 結晶構造を出入力するDNNの開発

- 結晶構造 (=不定個の原子で構成される3次元構造) を取り扱うDNNを設計
- 学習方法を工夫し、材料の性質を自律的に学習することも可能に

2. 物理モデルを用いたデータ解析の自動化

- 物理モデルのパラメータ調整を、ブラックボックス最適化 (数理最適化の技術) の問題として定式化して解いた

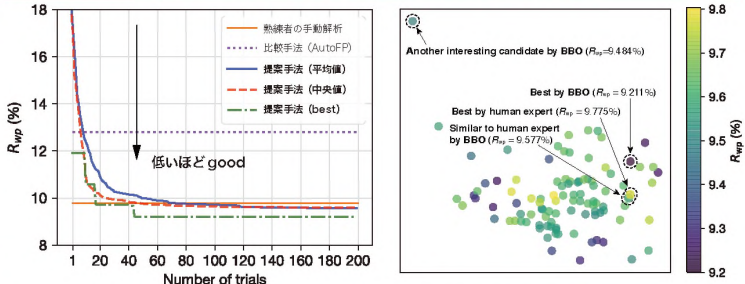
今後の展望

- さまざまな計測モダリティ・空間スケールの統合
XRDに限らず様々な計測・シミュレーションデータを統合した学習により、材料の多様な空間的スケールの特徴により発現する物性の理解を目指す。

目指す未来ビジョン

- 人間とAI、ロボットが協働する材料開発の実現
研究者の発想やデータ分析を支援するAI、自動実験を行うAIとロボットなどにより、より優れた材料を迅速に生み出し世に届けられる世界の実現を目指す。

結果2 | 物理モデルあてはめの自動化



BBOによる自動リートベルト解析の結果
左: 最適化の進行に伴う残差 R_{wp} の推移 (Dy_{0.5}Sr_{0.5}MnO₃)
右: 実験を100回行って得られた結晶構造の類似度マップ (同)

- ブラックボックス最適化 (BBO) により、熟練者が数時間かけた結果と同等以上の精度の解析結果が自動で得られた。
- 一般的なPCを用いて30分程度の計算で熟練者と並ぶ結果が得られた。
- 本手法は国内外の研究機関に普及中
- XRD以外のデータ解析にも展開可能
- 得られた結晶構造の類似度を分析すると、熟練者の結果と同等の構造が確認された。
- さらに『データへのフィットも良い上に手動解析とは大きく違う構造』も発見できた。
- データ解析における人間のクセや思い込みを除くことで、新たな発見が導かれると期待