

岩崎 悠真

日本電気（株）
システムプラットフォーム研究所

材料開発に特化した高精度ホワイトボックス型機械学習手法の開発と、
そのスピン熱電材料開発への応用

§ 1. 研究成果の概要

スピンを活用した熱電材料(スピン熱電材料)の開発に、コンビナトリアル実験技術とハイスループット第一原理計算技術と解釈可能な機械学習技術を応用し、新規スピン熱電材料を開発した。

具体的には、まず、コンビナトリアル実験技術とハイスループット第一原理計算技術によって、スピン熱電材料に関する大量の材料データを取得し、そのデータを FAB/HMEs(Factorized Asymptotic Bayesian Inference Hierarchical Mixture of Experts)と呼ばれる機械学習手法で学習させ、モデルを構築した。そのモデルの内部を材料工学の観点から解析することで得られた知見を指標として材料開発を進めた結果、熱電性能が大きな新規スピン熱電材料の発見およびその合成に成功した。

(Y. Iwasaki et al. npj Comput. Mater. 5, 103 (2019))

