

研究課題名 機械学習に基づく効率的な界面物性探索

研究者氏名(所属機関・部署・役職) 名古屋工業大学・大学院情報工学専攻・准教授

(H29-H32年度)

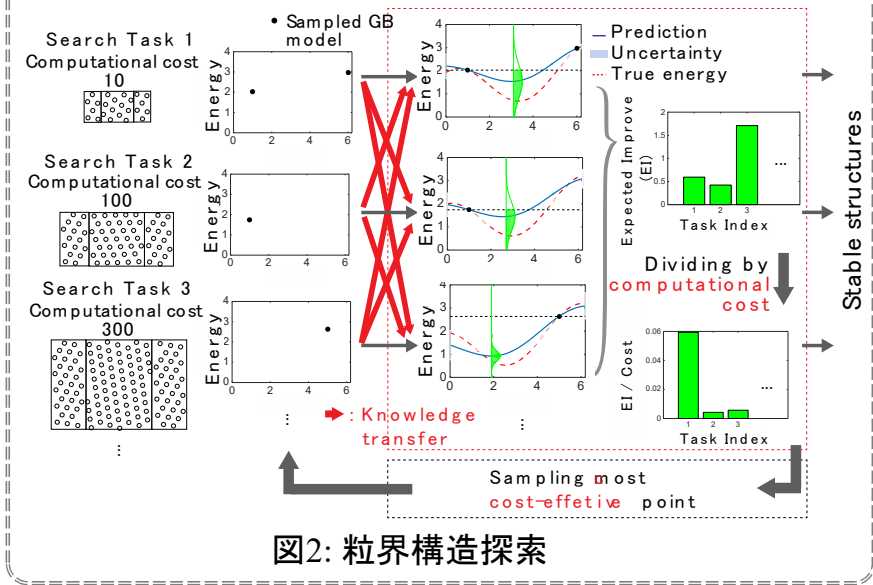
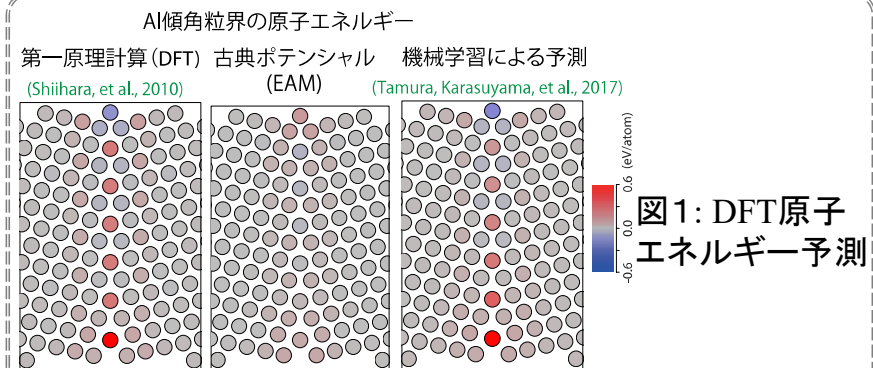
研究の概要:

結晶粒同士の境界が形成する界面や粒界は材料の性質を左右する重要な構造である。例えば、近年注目を集める全固体電池では、固体電解質材料の中の粒界が抵抗に大きく影響することが知られている。計算機の発展に伴い、理論計算により様々な材料の性質を調べることが一般的になってきているが、このような局所的に乱れた構造は、計算モデルのサイズや、多様性から網羅的な調査は困難とされてきた。本研究は、理論計算と機械学習を組み合わせることで自動的かつ効率的な界面・粒界の探索アルゴリズムの構築を目指すものである。

研究の成果

本研究では、蓄積された粒界データに機械学習を適用し、時間コストの高い粒界解析を最大限加速する方法論を構築した。主要な成果に、1) 粒界の原子エネルギー予測と2) 粒界の同時構造探索が挙げられる。粒界近傍でのエネルギーの振る舞いは、粒界の重要な基本情報となるが、計算で網羅的に調べることは難しい。右図1は、我々の方法で機械学習が原子エネルギーを正確に再現できることを示している。構造探索研究では、大量の構造探索問題を転移学習の枠組みで加速し、さらに、コストの低いものから優先的に調べることで、コスト効率を最大化する方法を提案した(図2)。これらの成果は、次世代材料開発のボトルネックとなる界面・粒界解析の加速を強く促すものであり、今後実践的な運用を目指していく。

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



参考文献・リンク

[T. Yonezu, T. Tamura, I. Takeuchi, M. Karasuyama, Physical Review Materials, 2, 113802, 2018.](#)

[T. Tamura, M. Karasuyama, R. Kobayashi, R. Arakawa, Y. Shiihara, and I. Takeuchi, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.25, no.7, 075003, 2017.](#)