

研究課題名 機械学習手法による合理的な材料物性予測技術の構築

研究者氏名(所属機関・部署・役職) 京都大学・工学研究科材料工学専攻・准教授

(H29-H32年度)



研究の概要

機械学習による材料探索・構造探索などにおいては、予測する物性についてのデータベースをもとに、機械学習手法により物性予測モデルを構築する。このような物性予測モデルにおいては、記述子(物性予測モデル構築のための説明変数)が予測精度の大部分を決定する。その中でも、結晶構造情報をどのように記述子として表すかということは非常に難しい問題である。本研究では、機械学習による物性予測モデルに適した結晶構造を表現する一般的な記述子を考案する。さらに、これらを用いた物性予測モデル構築を実施する。以下の2つの研究項目に対して、考案した結晶構造記述子を応用することにより、結晶構造記述子の有効性や可能性を評価する。

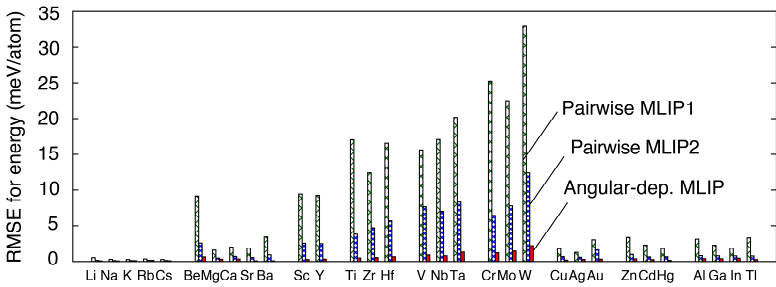
- I. 結晶構造記述子を利用した高精度原子間ポテンシャル構築
- II. 元素記述子、結晶構造記述子を利用した物性予測モデル構築手法の開発

研究の成果

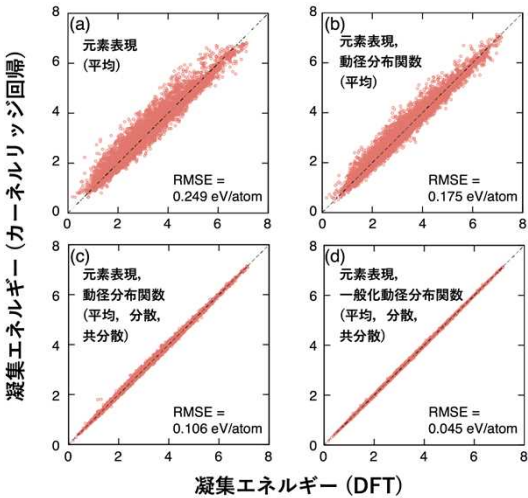
本研究では、機械学習のための様々な元素・結晶構造・化合物記述子を導入した。本研究で導入した記述子は、以下の3つに分類される。

- ①物理・化学・材料科学の分野において、古くから様々な用途で使われている量を拡張し、網羅的な形で記述子として利用したもの。電気陰性度、擬ポテンシャル半径などの元素記述子、動径分布関数などの構造記述子が該当する。
 - ②元素種や化学組成を直接的に記述子として利用するもの。元素の有無を1または0で表現するOne-hot表現などが該当する。
 - ③本研究提案の群論的方法およびその拡張により生成可能な化合物データや物性の対称性を満たす系統的な記述子。
- また、第一原理計算により様々な物性データセットを構築し、予測モデルを作成することにより、導入した記述子の有効性を実証した。

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)



単体金属31元素におけるMLIPの予測誤差



凝集エネルギーの第一原理計算値
およびカーネルリッジ回帰予測値

参考文献・リンク

https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html

(注1) 募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。