

# 機械学習と材料機能解析

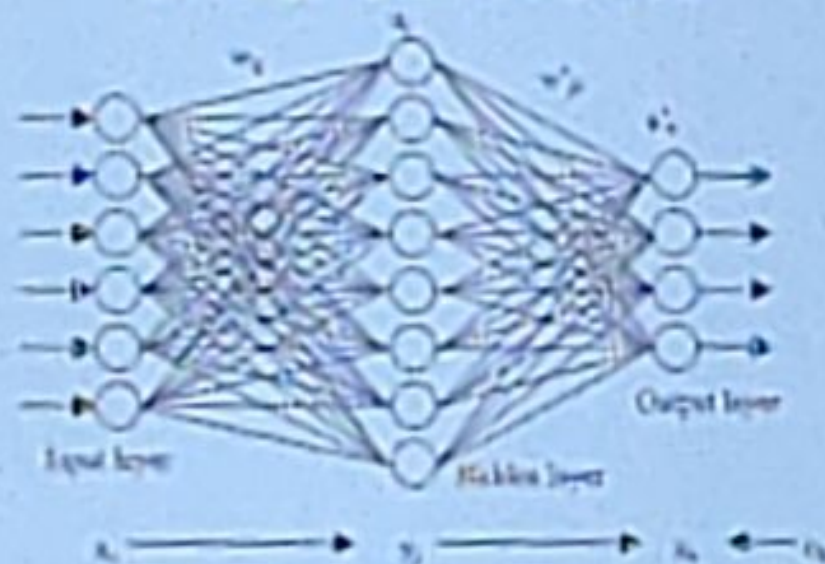
30

入力

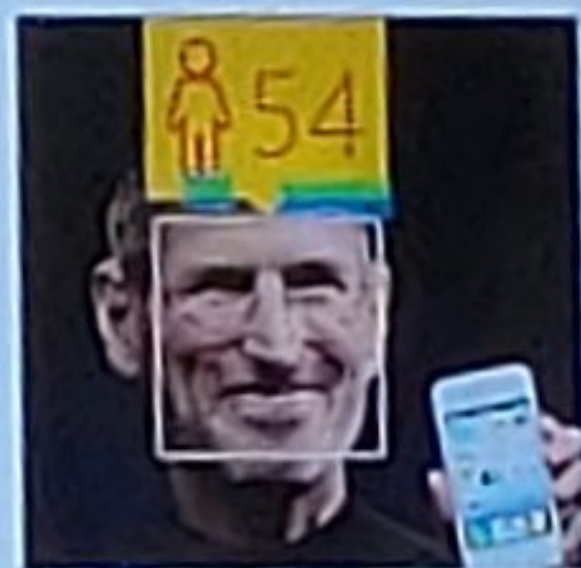


機械学習モデル

(例: ニューラルネットワーク)



予測



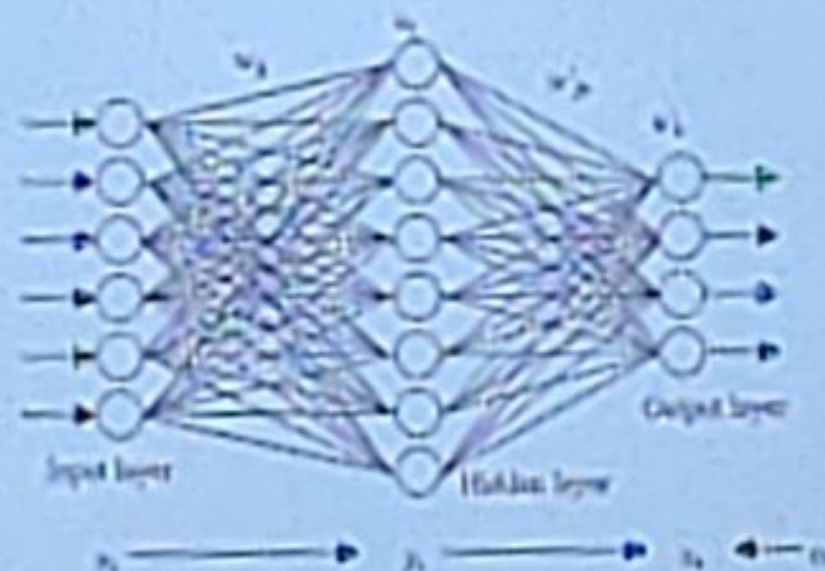
働く人かどうか?

放射光分光測定



空間情報

エネルギー



働く材料かどうか?

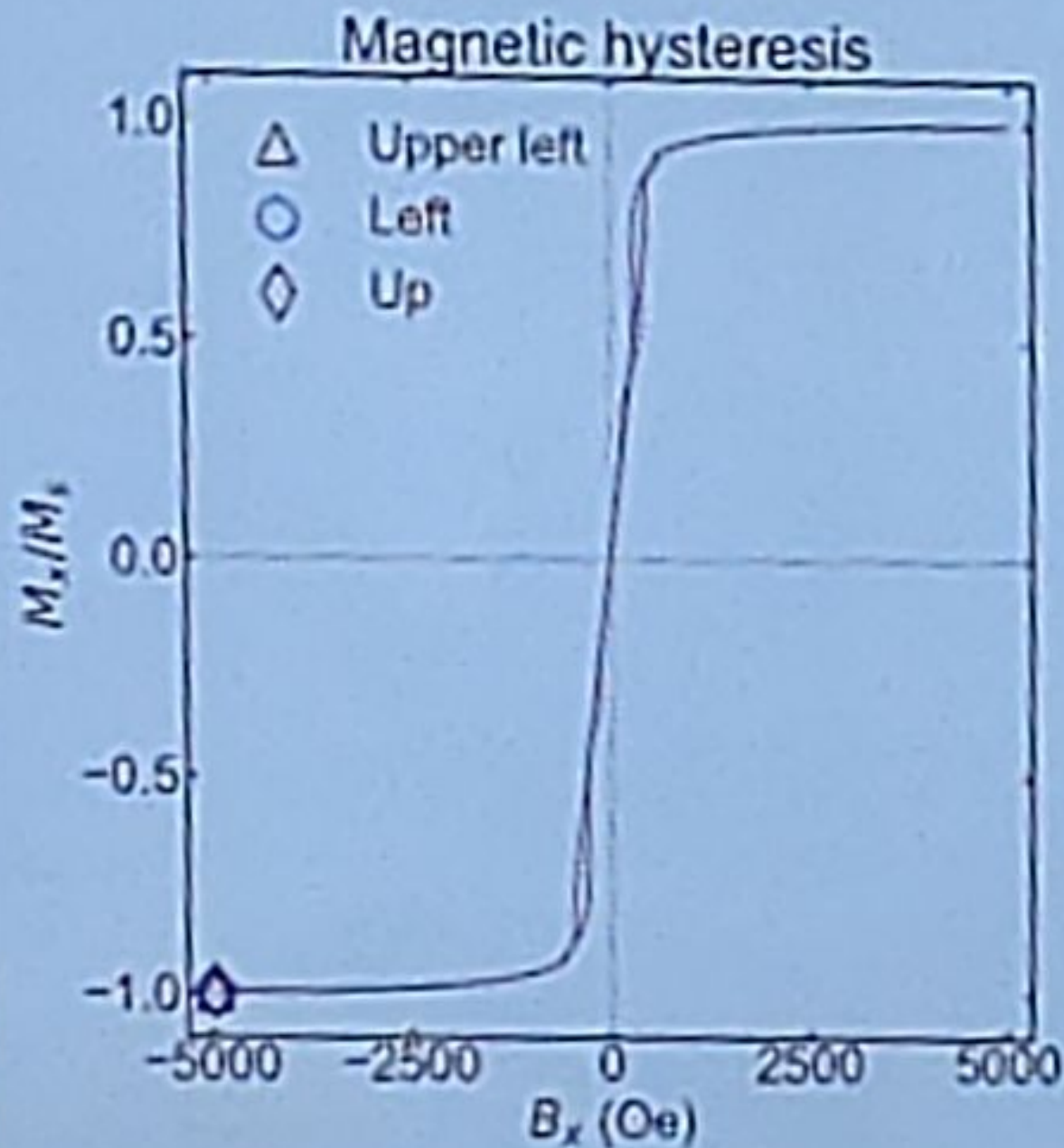
自動解析や埋もれた情報の抽出



# Quiz : 最も消費電力の低いデバイスは？

Which is the lowest energy consumption?

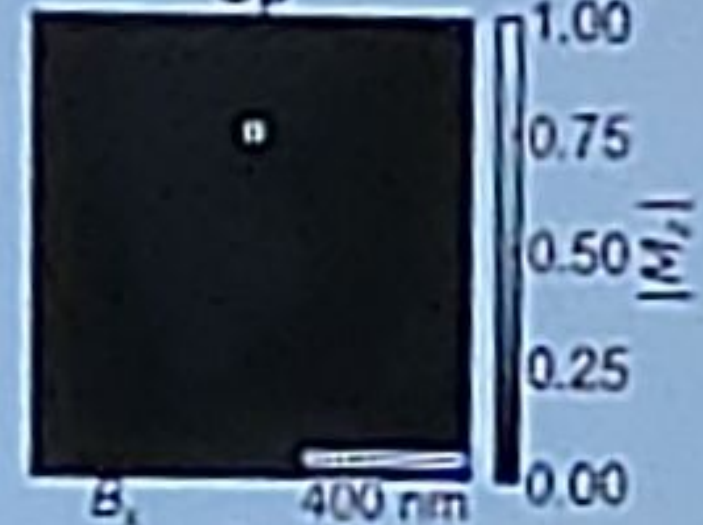
3 Squared magnetic patterns with different point defect



Upper left



Up



Left



● : Defect

Which?  
Why?  
Where?



# マテリアルズインフォマティクスによる機能解析

ミクロ組織とマクロ機能を情報空間を通じて双方向接続する。

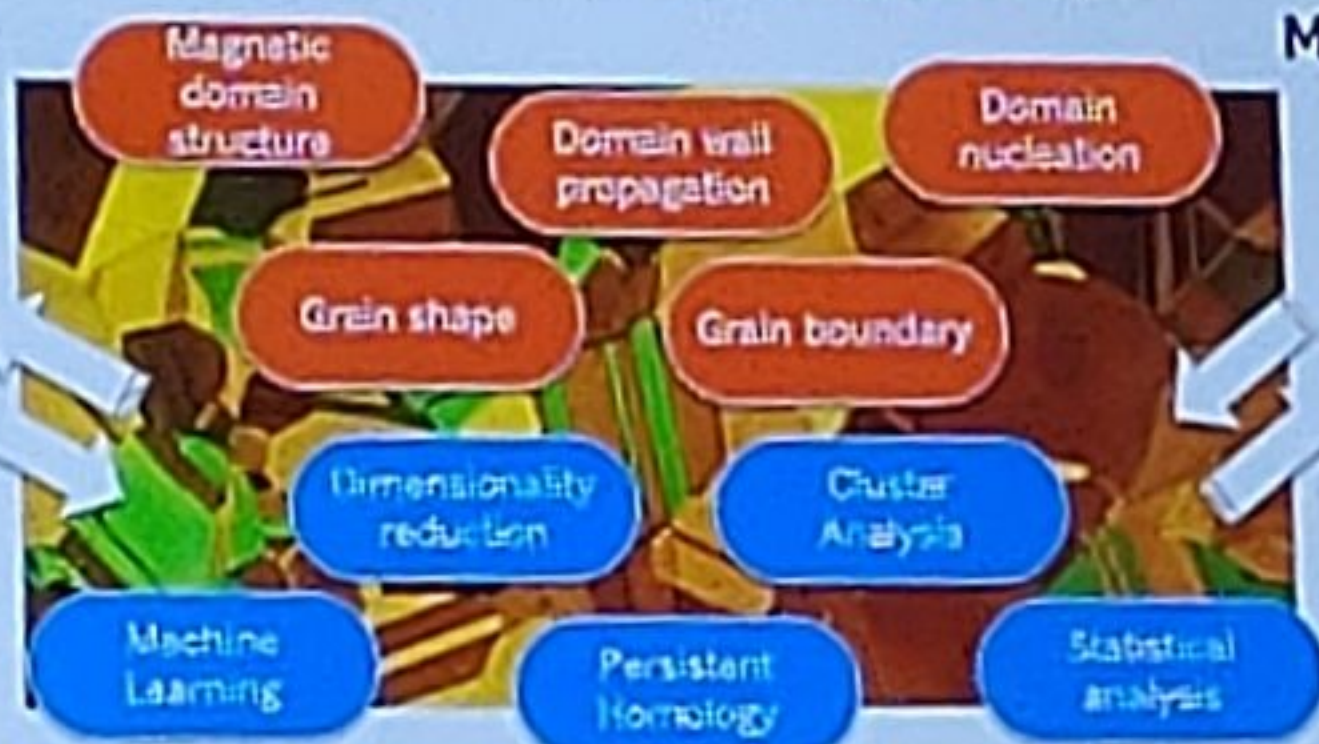
解析が定性的、解釈の属人性、階層性の問題

Microstructure

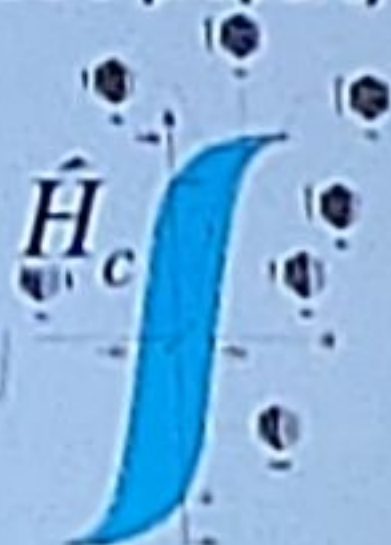


放射光顕微鏡  
Kerr顕微鏡

高次元  
大規模データ



Macro property



保磁力  
鉄損  
磁歪

## Our strategy

- 空間的不均一性の定量化
- ミクローマクロの双方向解析
- 論理的な因果関係の構築

## Our idea

- トポロジカルデータ解析
- 解釈性の高い機械学習
- 機能の背後にあるエネルギー地形に着目

情報科学を用いた新しい機能解析手法



# 拡張型ランダウ自由エネルギーモデルによる保磁力解析

磁区構造データ

ランダウ自由エネルギーモデル

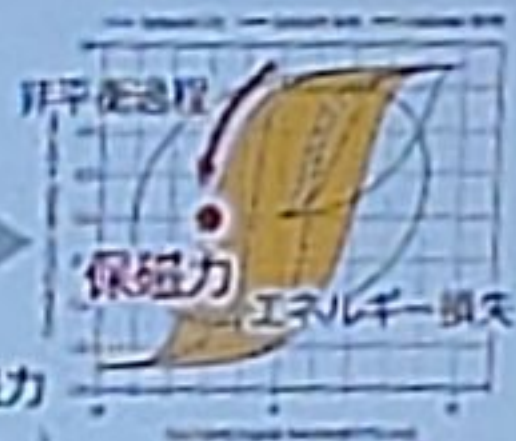
磁気ヒステリシス



不均一性  
取扱不可



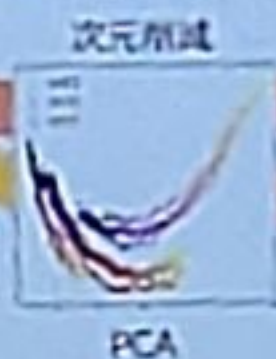
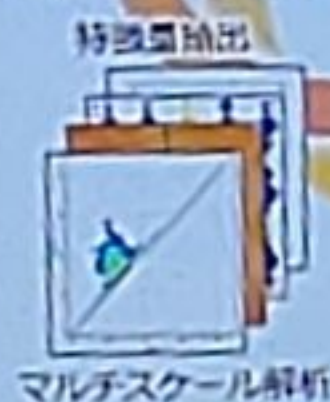
実材料の保磁力  
説明困難



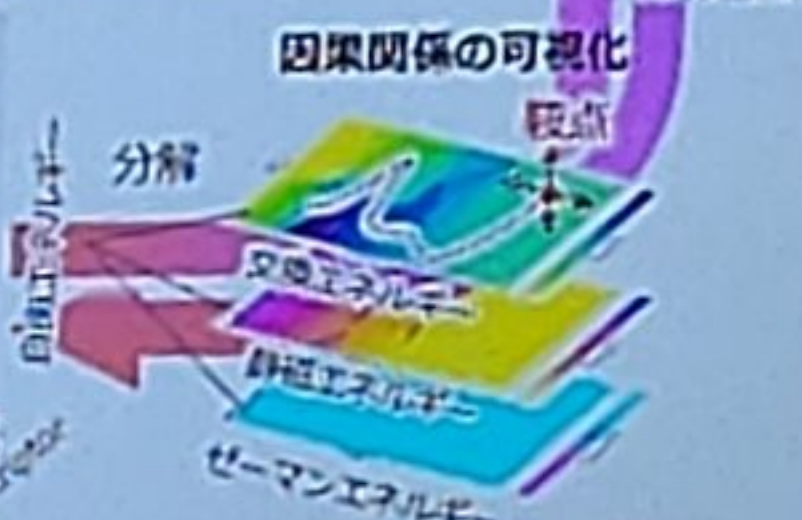
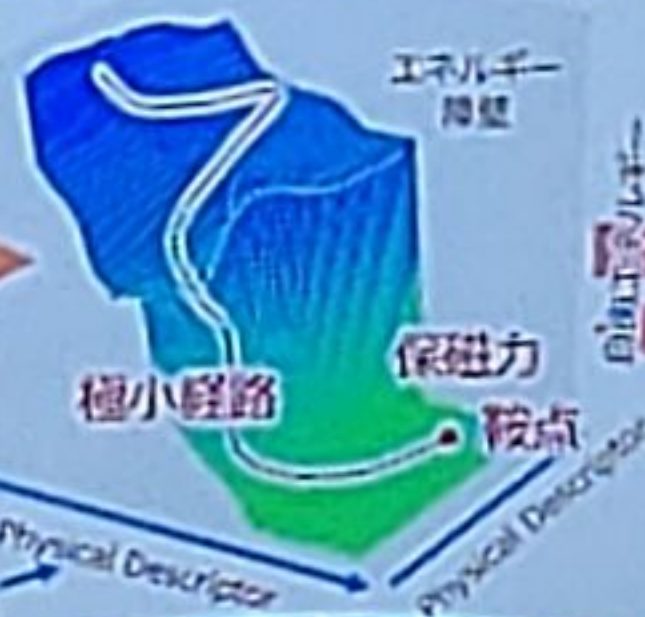
Our idea

画像を磁化の情報とみなし  
不均一性を積極活用

Physical Descriptor (PD)



拡張型ランダウ自由エネルギーモデル



保磁力機構の因果解析

物理に根拠した記述子

空間不均一性取り扱い可

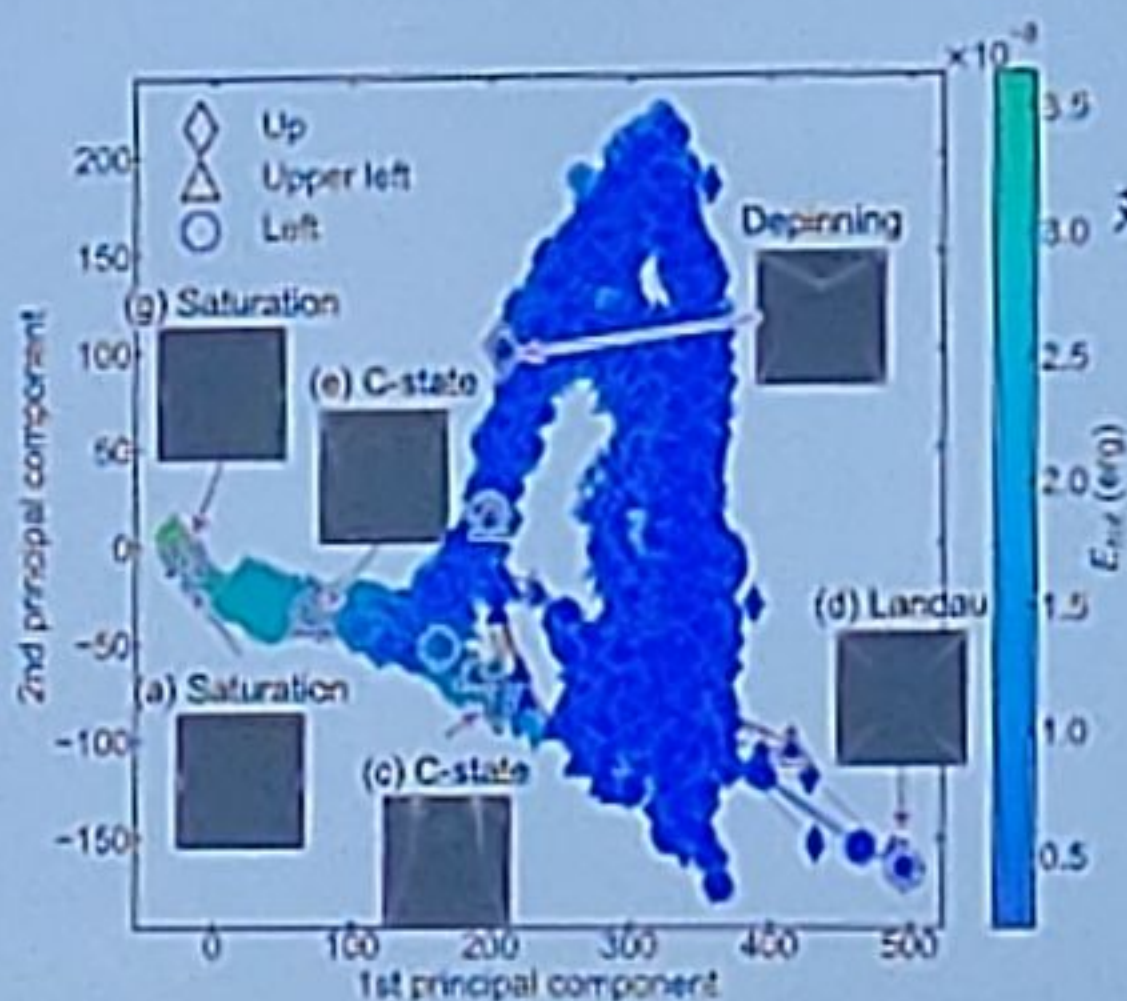
高い解釈性

情報科学を用いた新しい自由エネルギーモデル

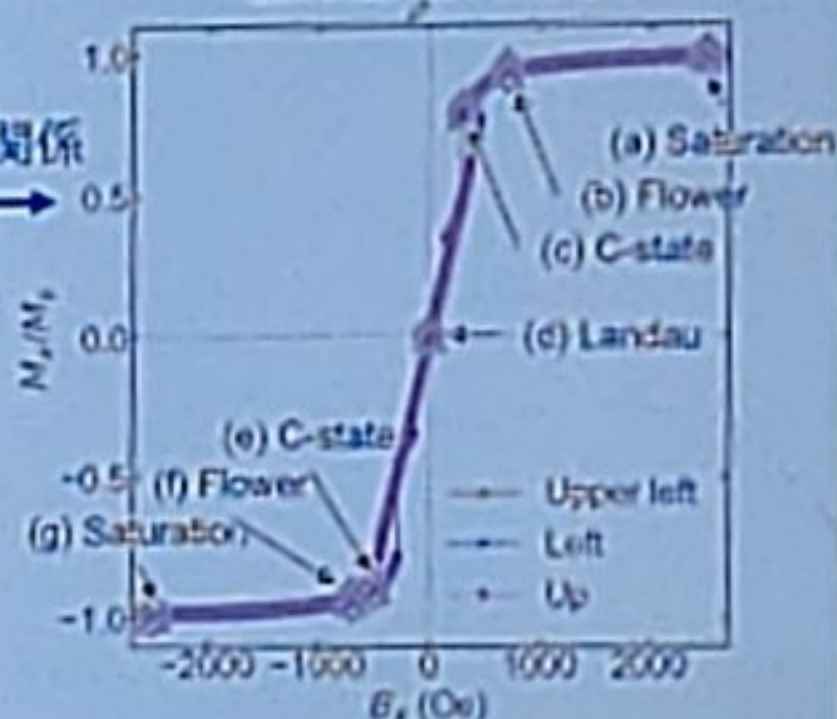


# エネルギー地形のモデリング

## 主成分分析による次元削減結果



## 磁気ヒステリシス



- $E_{tot}$ と散布図の点の位置は、概ね連続的に変化する
- 欠陥の位置が異なっても、概ね同じ座標に位置する

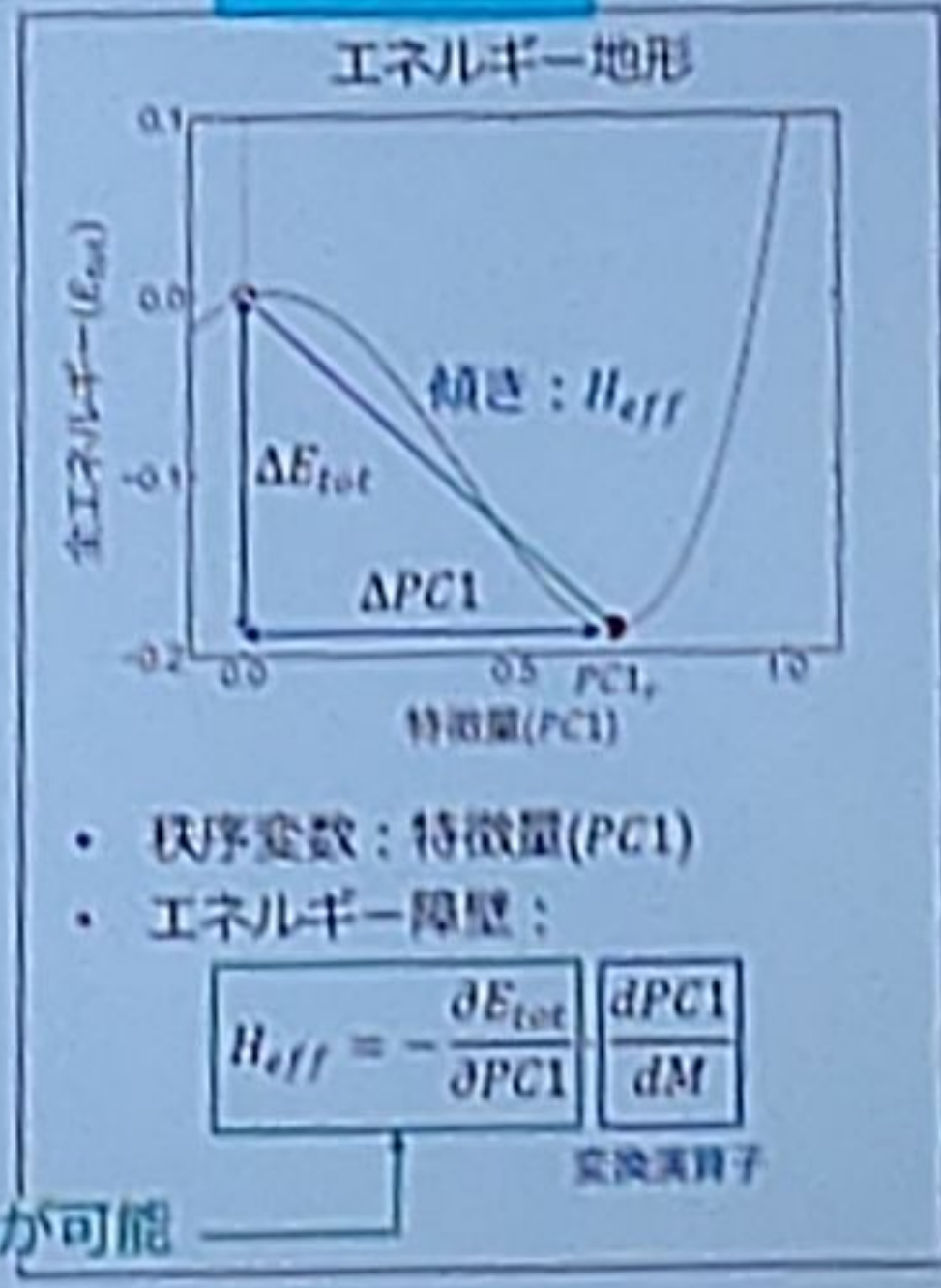
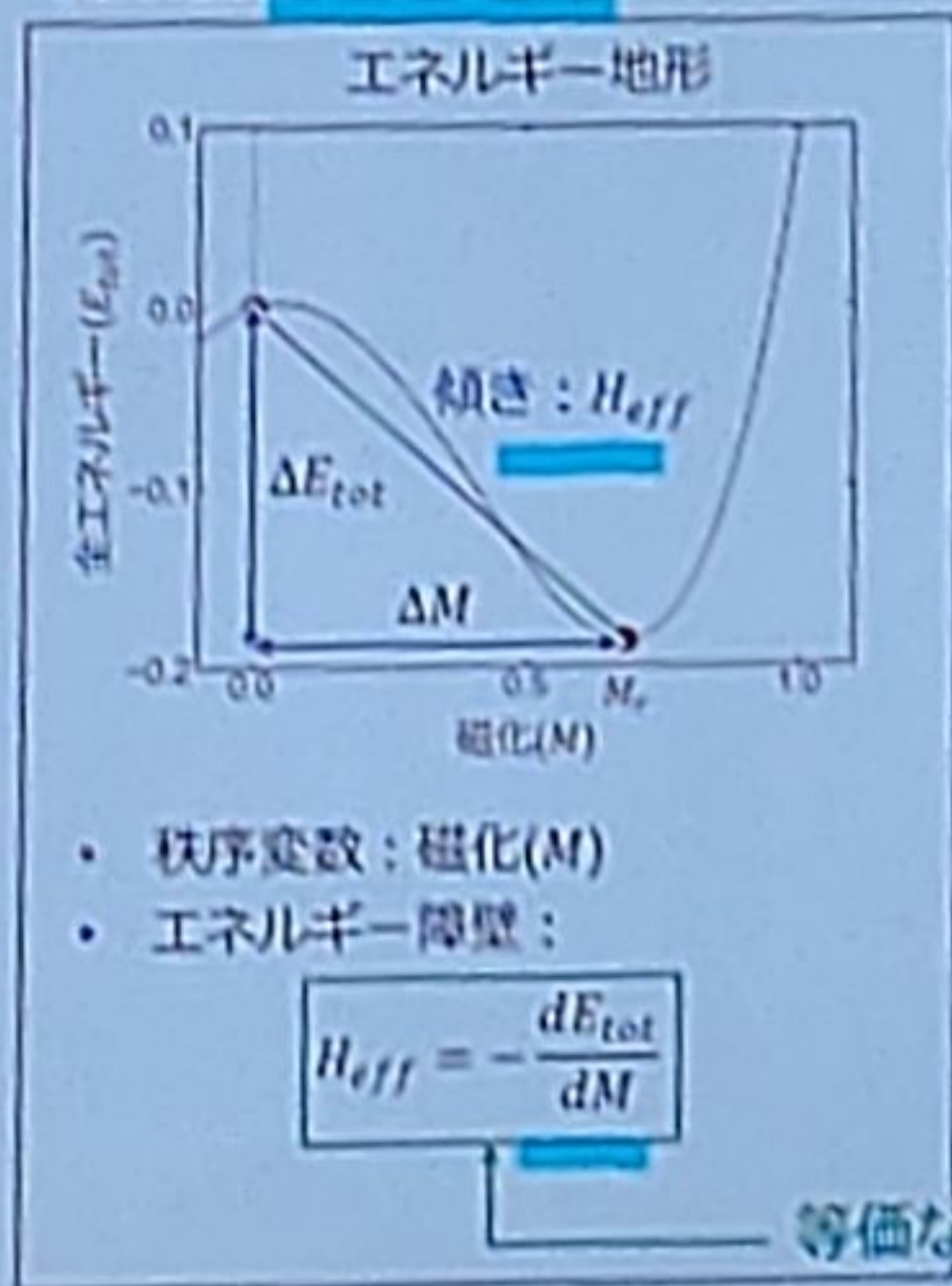
磁区構造から抽出した特徴量を用いて、エネルギー地形を描画した



# エネルギー地形と記述子変換

## 従来型ランダウ理論 (GL) [11]

## 拡張型ランダウ理論 (ex-GL) [5]



等価な議論が可能

第一主成分(PC1)の微分を用いて、エネルギー障壁を再定義できる



# 機能支配因子の可視化

S. Kuni, K. Mizutani, A. Fogliato, C. Mizumata, and M. Kobayashi,  
Scientific Reports, (2022) accepted

・ 全エネルギー、静磁エネルギー、交換エネルギーの寄与を元の磁区構造に可視化



各エネルギーの寄与因子を元の磁区構造に可視化

Leftが最もエネルギー障壁の小さいデバイス。

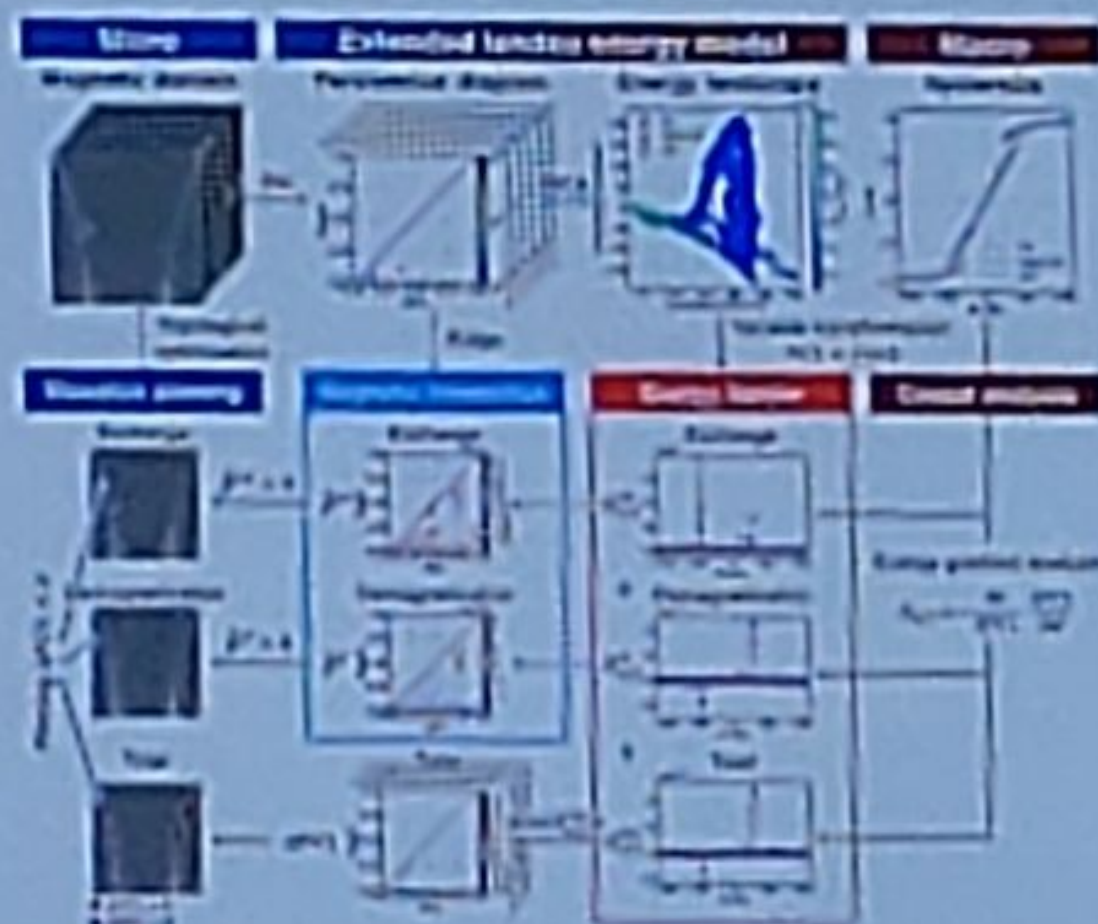
静磁エネルギーがピニング現象を支配していることがわかった。

人間の目では認識困難な情報

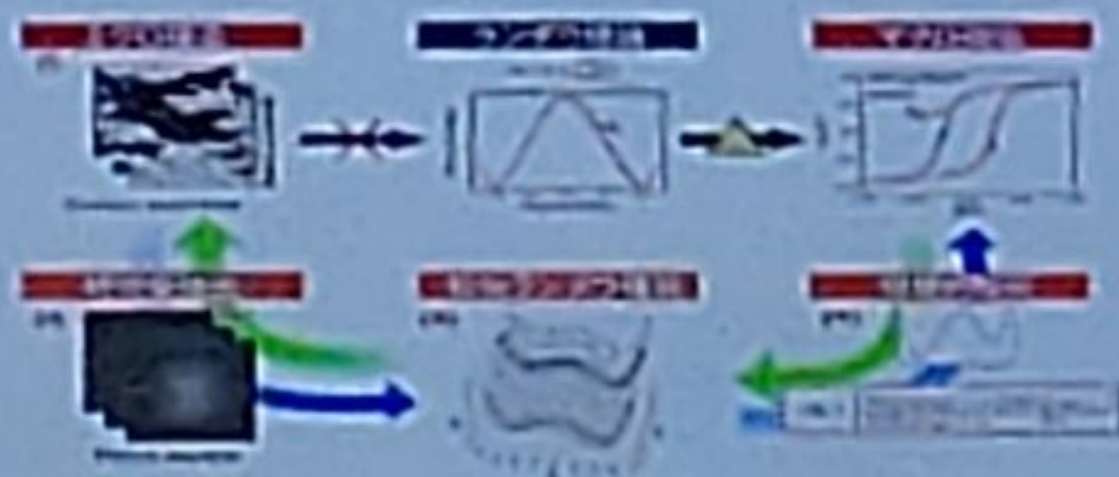


## 研究成果の発信(データ班)

S. Kunii, K. Masuzawa, A. Fogliatto, C. Matsumata, and M. Kotsugi\*, Scientific Reports, (2022) 12 (2022) 19892.



A. Fogliatto, S. Kuzii, C. Mitsumata, and M. Kotsugi, *Communications Physics*, 5 (2022) 277.



## 理科大プレスリリース 2022年11月29日



TOKYO UNIVERSITY OF SCIENCE  
1-3 Kagurazaka, Shinjyuku-ku, Tokyo 162-8601, Japan  
(Phone: 03-3261-2511)

● 2004 年 4 月

© 2004 Blackwell Publishing Ltd *Journal of Internal Medicine* 255: 103–110

[\[Back\]](#) | [\[Print\]](#) | [\[Email\]](#) | [\[Share\]](#)

来源: 2011年12月10日, 中国天气网, 中国天气网, 中国天气网, 中国天气网

● 世界地圖 1/25000

[illegible]

4. 計算機中文字系統的發展情況，與通訊、網絡技術及互聯網的應用關係。
5. 了解“211工程”、“863計劃”及“金字塔工程”的總體目標與實施的階段性目標。
6. 了解“金字塔工程”的實施與發展情況，以及“211工程”與網絡技術的關係。
7. 了解我國編碼制式與國際標準關係，並掌握常用編碼制式及標準。



新編ランドブック増補  
キャラクターを  
(イラストは石井さん西氏)

紅軍總司令朱德

[illegible]



# 拡張型自由エネルギーモデルシリーズ

エネルギーの知見性を利用し  
様々な材料課題に取組中

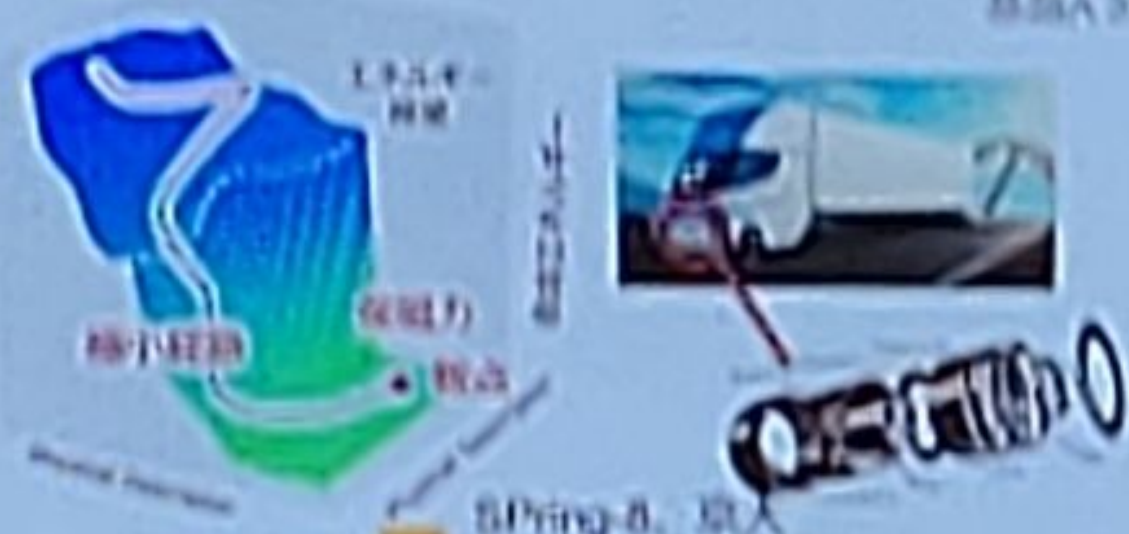
## 拡張型ランダム自由エネルギーモデル **科研費**

総額 3200万円

## 革新的パワーエレクトロニクス受動素子

**文部科学省**

5000万円



SPring-8, 京大

**電磁鋼板の保磁力設計論**



2021.10.1



東北大, NIMS, トーキン, 都立大, AIST, 京大

**エネルギー損失のメカニズム解析**

科学者の能力を拡張する階層的自律探索手法  
による新材料の創製

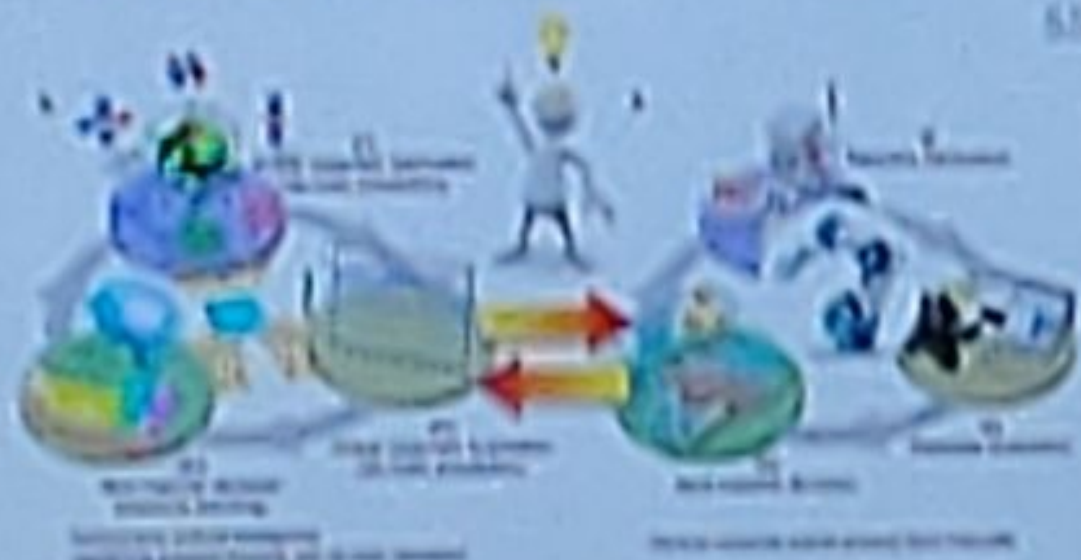
**CREST**

5500万円

2次元水ウ素未踏材料の創製と機能開拓

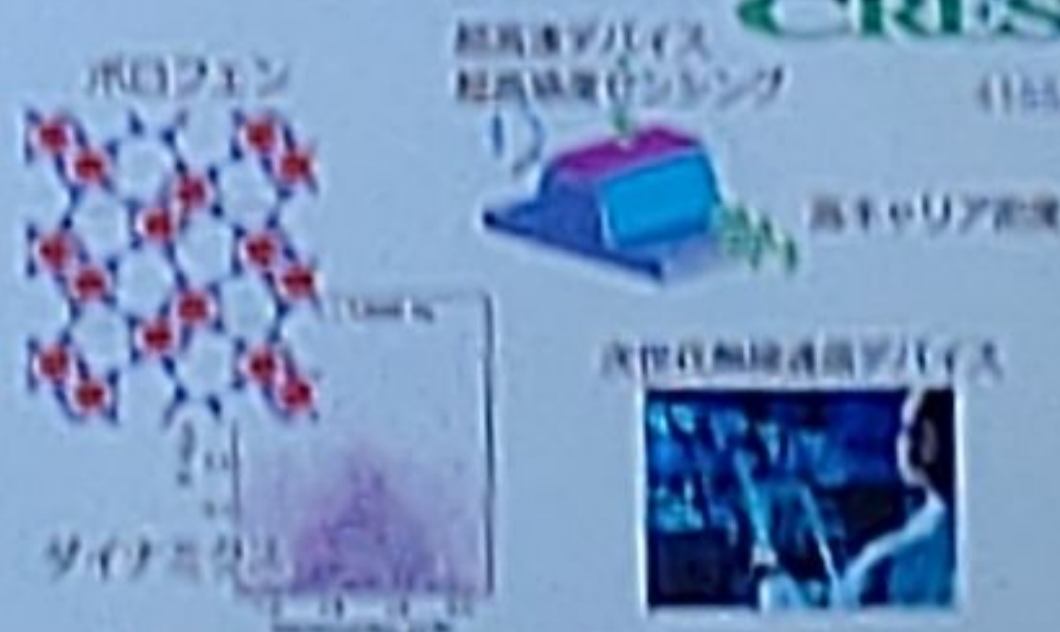
**CREST**

4150万円



NIMS, SPring-8, 筑波大, 東工大

**スピントロニクスデバイス応用**



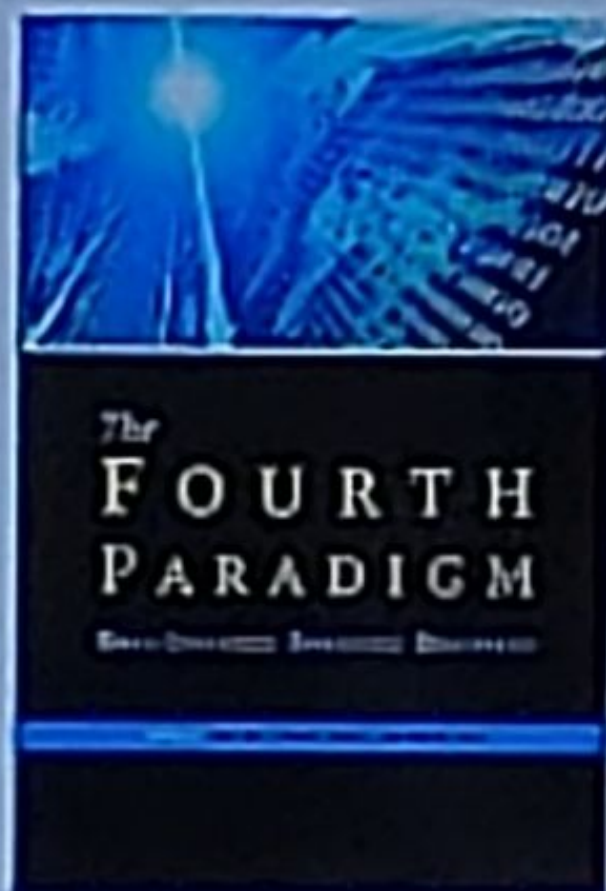
東大, AIST, SPring-8, 筑波大, 東北大

**Beyond-6G 超高速通信への応用**



# Materials Informatics

科学技術における第4のパラダイム



Tony Hey,  
Microsoft™

マテリアルズインフォマティクス



米国: Materials Genome Initiative (MGI)



CITRINE  
INFORMATICS

欧州: Novel Materials Discovery (NOMAD)



日本: 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>)

Mi<sup>2</sup>i

中国: China Materials Genome Initiative (CMGI)

## 材料科学と情報科学の融合



材料科学のビッグデータの中から  
本質的に重要な要素を抽出して  
**法則**や**機能**を導き出す。

マテリアルズインフォマティクス