

# データ駆動科学による合金材料探索への展開

五十嵐康彦

筑波大学 システム情報系

人工知能科学センター

イノベイティブ計測技術開発研究センター

ゼロCO<sub>2</sub>エミッション機能性材料開発研究センター

地球データ駆動科学シンポジウム

JAMSTEC-東大-筑波大-NIMS合同セミナー

2025年3月25日(火) 13:00-17:10

# マテリアルズ・インフォマティクス



機械学習を材料開発に活用

# データ駆動科学の3つのレベルと マテリアルズ・インフォマティクスの基盤構築 AI・機械学習を用いた実材料開発への展開



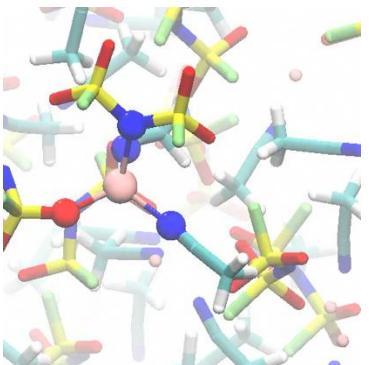
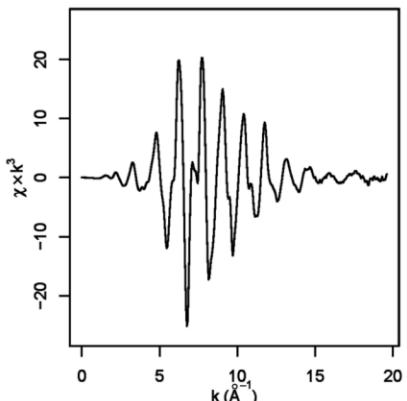
五十嵐 康彦

筑波大システム情報系

観測過程など、実データにおいて考慮すべき問題の提示

AI・機械学習による、計測・実験・計算データへの  
マテリアルズ・インフォマティクスとしての展開

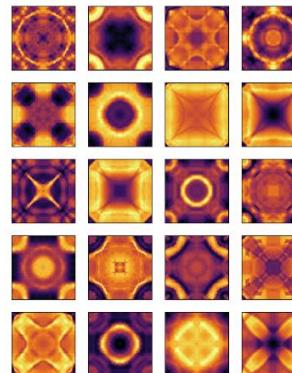
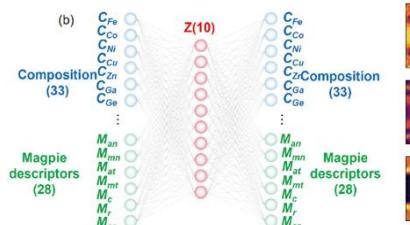
実験・計測データ / 大規模計算データ



数理的  
定式化

スパースモデリング・  
ベイズ推論・深層学習など

多分野  
展開

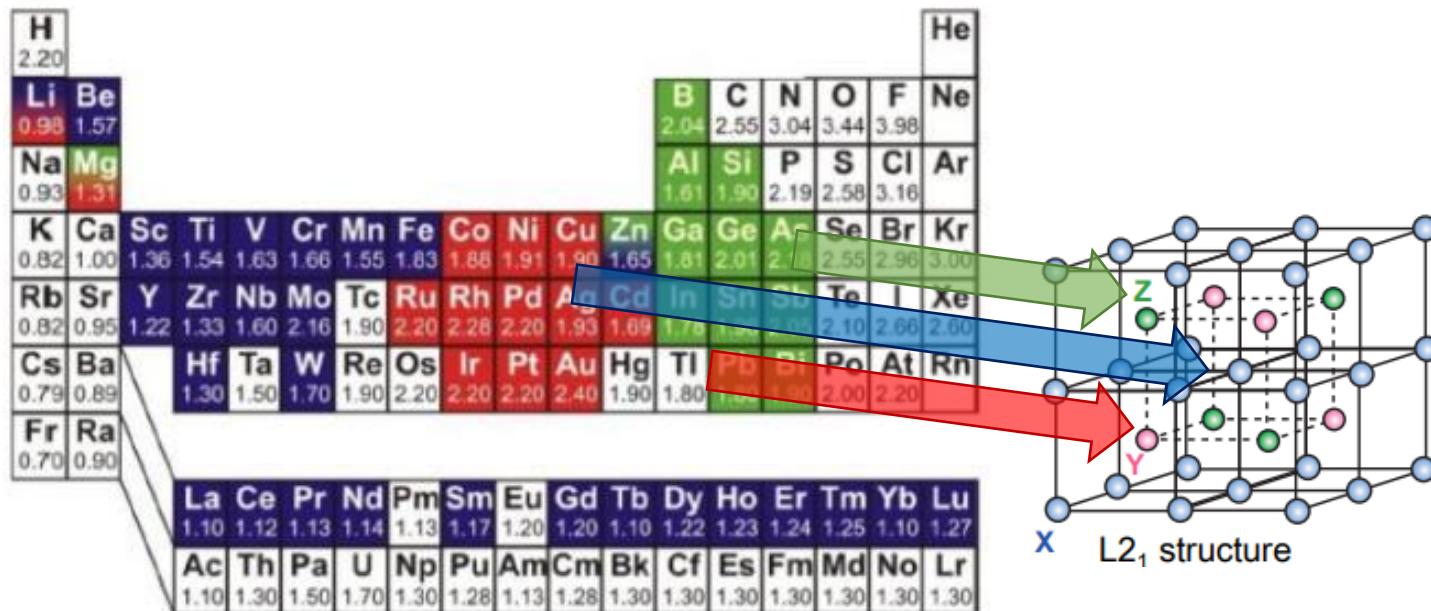


解くべき実問題を抽象化し、AI・機械学習を深化/展開

コンピュータサイエンス=共通の数理を持つ問題を、どう解くか

# 背景 材料探索における巨大な探索空間

- 多元素化/複合化/準安定相により、近年の材料探索空間は巨大化
- 巨大探索空間を人間の知識/スキルのみで探索するのは不可能



e.g. 6元ホイスター合金

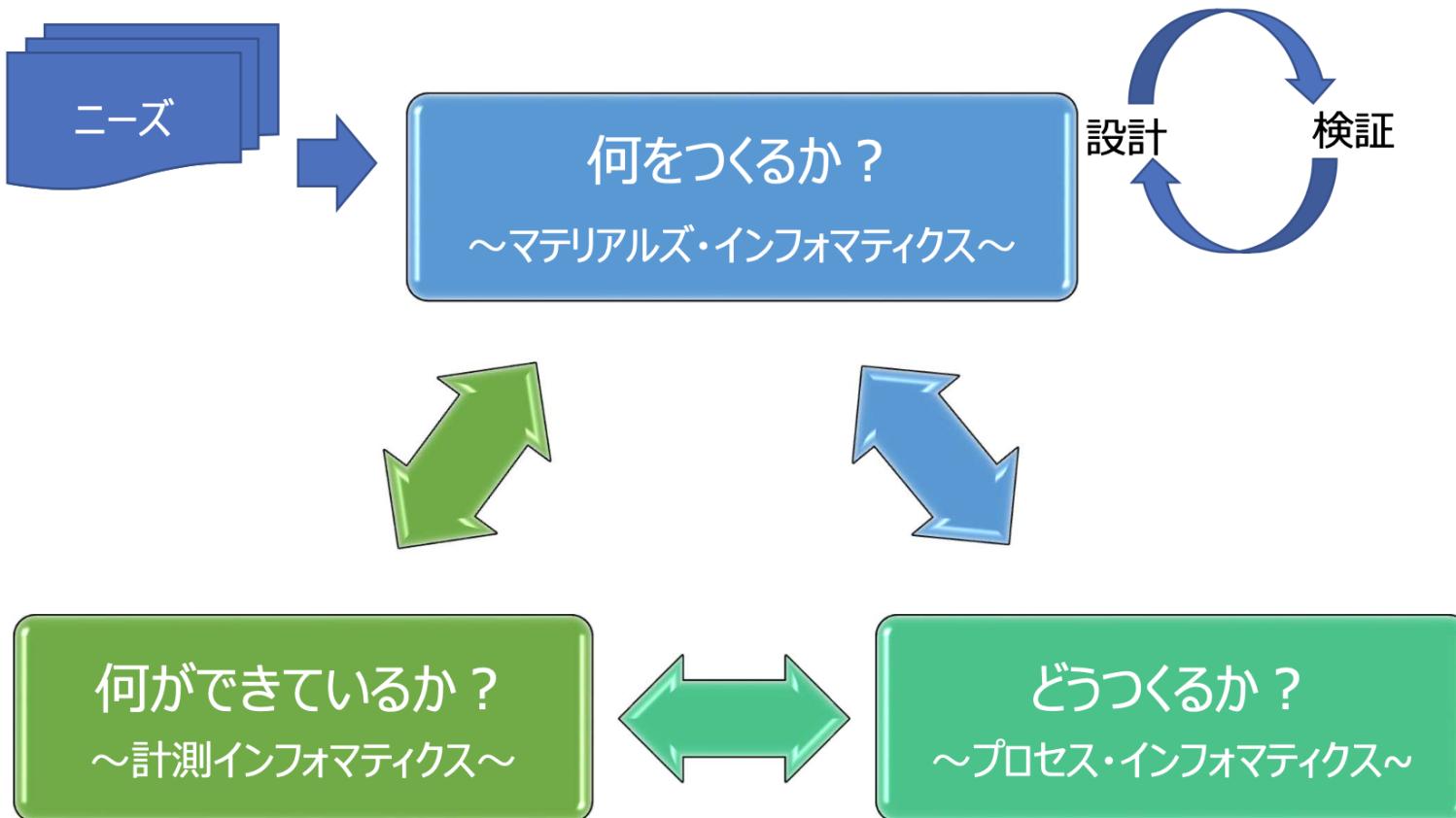
組成の組み合わせだけでも  
6兆パターン以上。

準安定相(Disorder)やプロセスパラメータ（温度、時間、etc.）を含めると材料空間はさらに拡大

⇒ 材料実験/第一原理計算/データ科学/ロボティクスを組み合わせて  
自動的/自律的に巨大材料空間を探索する手法(自律探索AI)の必要性

# 物質・材料DX(デジタルトランスフォーメーション) マテリアルズ・インフォマティクスを超えて

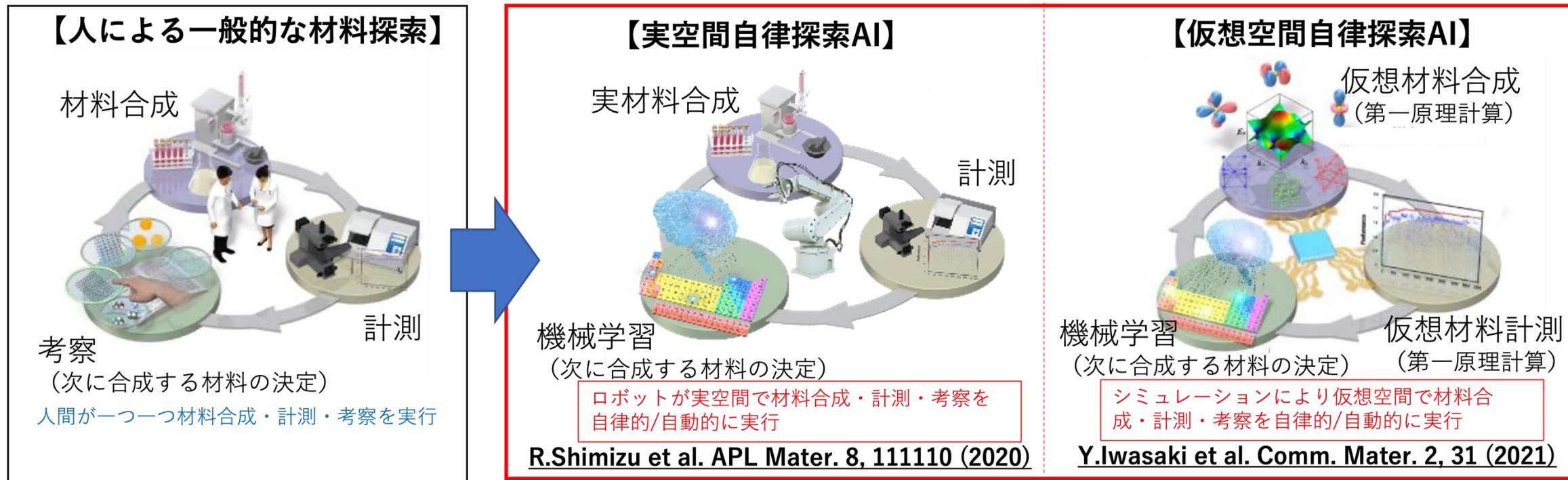
## データ駆動型ものづくりスキーム



JST-CRDS 俯瞰ワークショップ「プロセスインフォマティクス」伊藤特任フェロー(CRDS)プレゼン資料から



## 科学者拡張型の階層的自律探索による新材料創製 NIMS 岩崎悠真

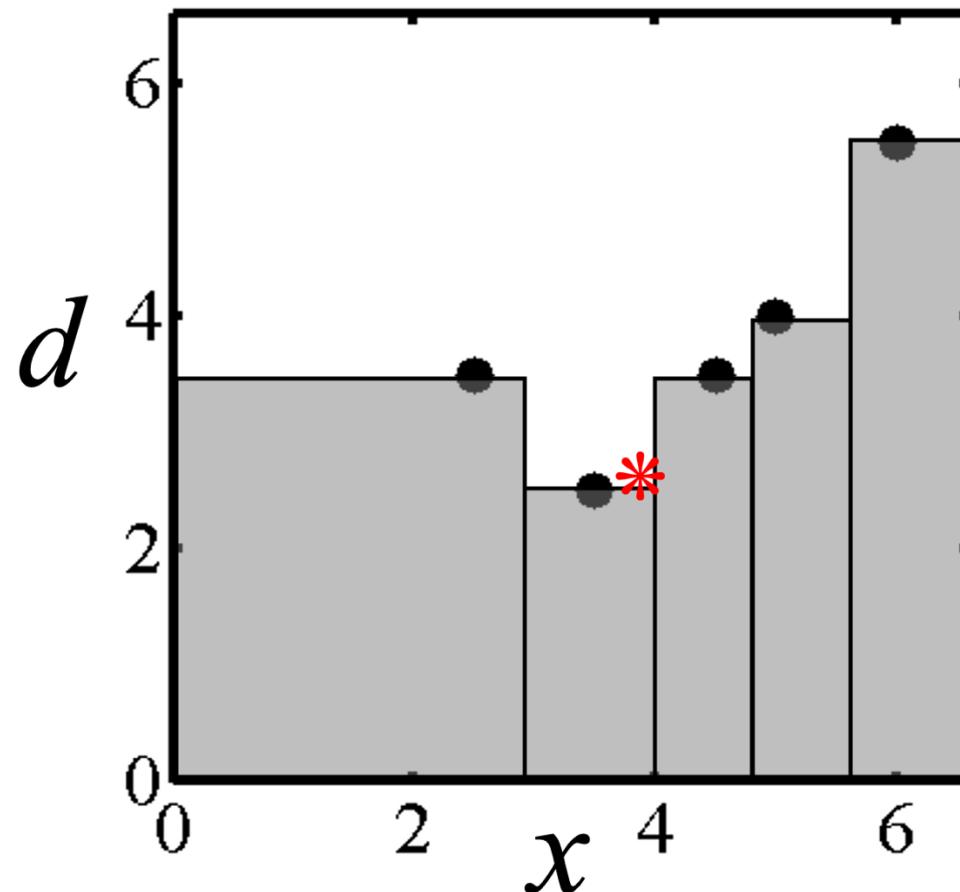


実空間自律探索AIと仮想空間自律探索AIの両方において、  
我々グループメンバーが技術先導

理論・計算・データ科学の本格的な融合、連携が重要になってきている

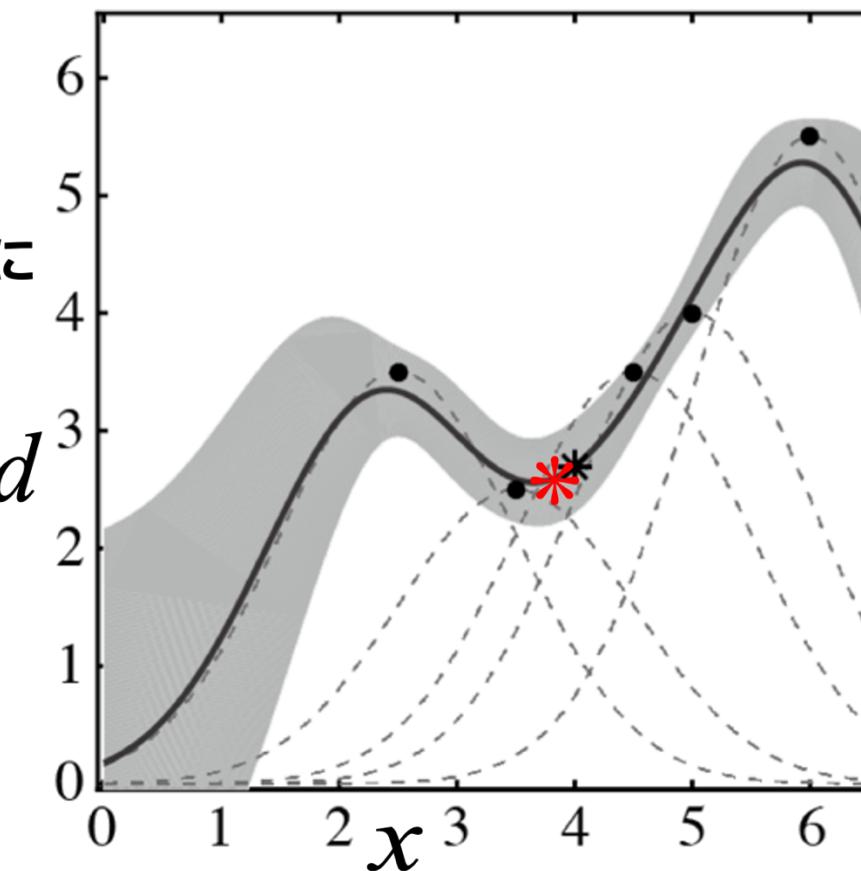
# 棒グラフ表現とガウス過程

棒グラフ表現



ガウス過程 (GP)

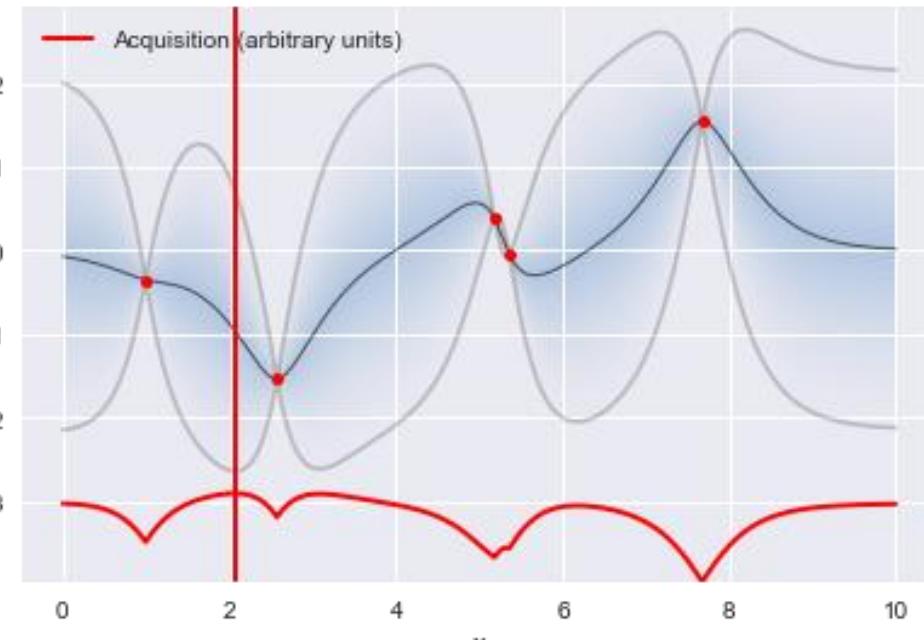
棒グラフを  
ガウス関数に  
置き換える



隣のデータ点だけでなく、近傍のデータ点全体を用いて  
滑らかに非線形関数を近似することができる

# ベイズ最適化 (Bayesian Optimization, BO)

現在得られている点でGPを行い、次に調べるべき点を自動的に決めて、高速に最適化を行う手法 ⇒ **探索と活用をうまく使い分ける**



**探索**

まだデータが全然獲得できていない部分(不確  
かさが大きく残っている)の点を獲得すること

**活用**

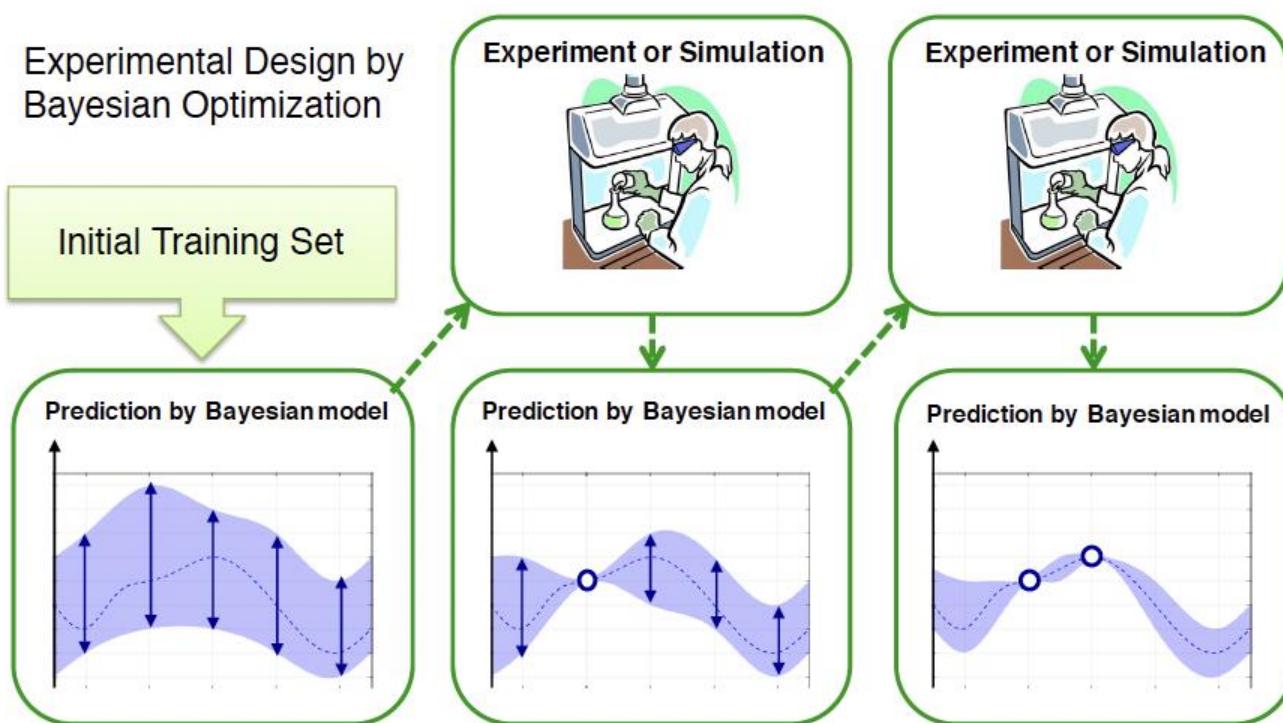
現状得られているデータで最適解(最大値、最  
小値)の近くの点を獲得すること

この二つの方針のどちらを重視すべきかを、最適  
化の進み具合によって変化させる。

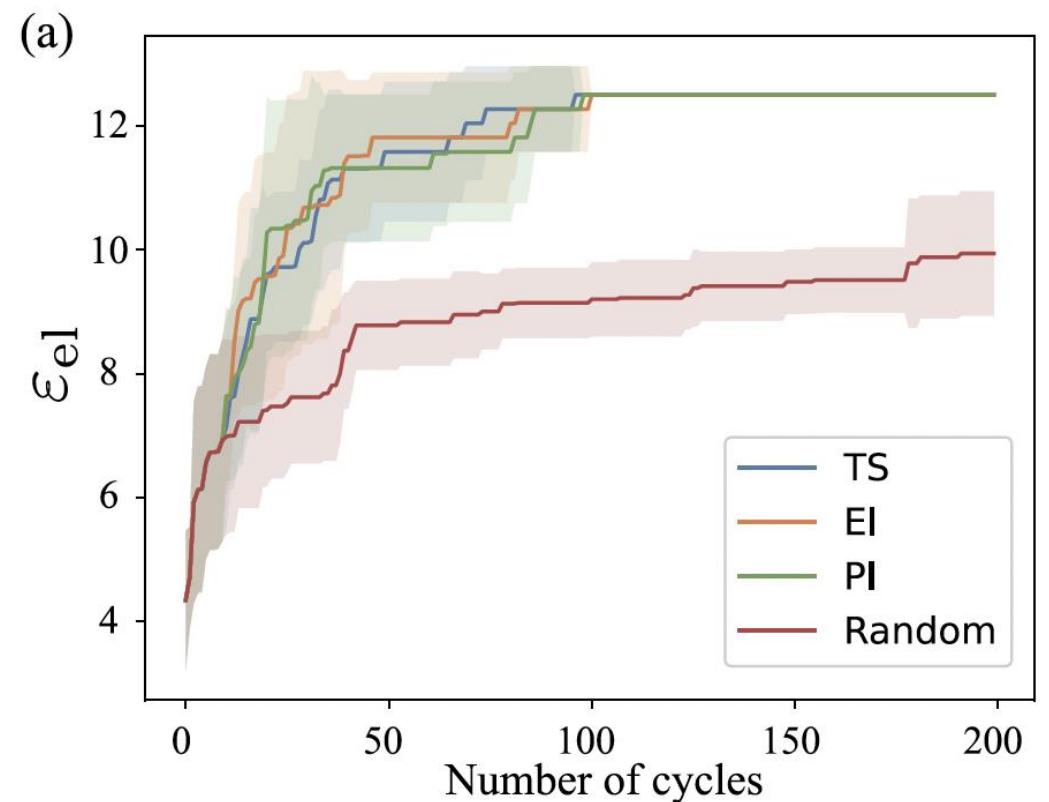


ガウス過程回帰で得られた、予測分散は、データが少数のときは大きく、  
データが十分集まると小さくなっていく。つまり、この予測分散を  
用いたスコア(獲得関数)によって探索・活用をうまく制御する

# ベイズ最適化による効率的な材料探索



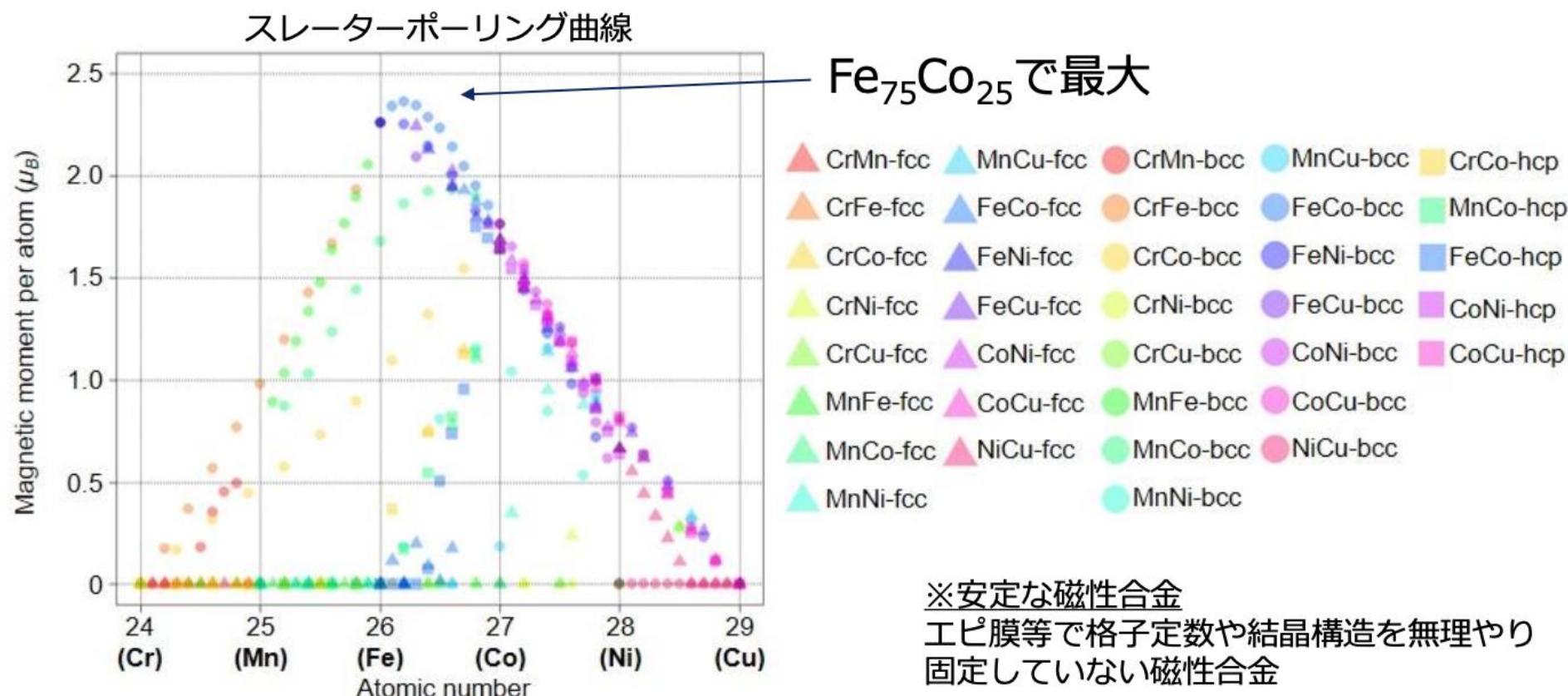
Ueno, T. et al. (2016). COMBO: An efficient Bayesian optimization library for materials science. *Materials discovery*, 4, 18-21.



Motoyama, Y., et al., (2022). Computer Physics Communications

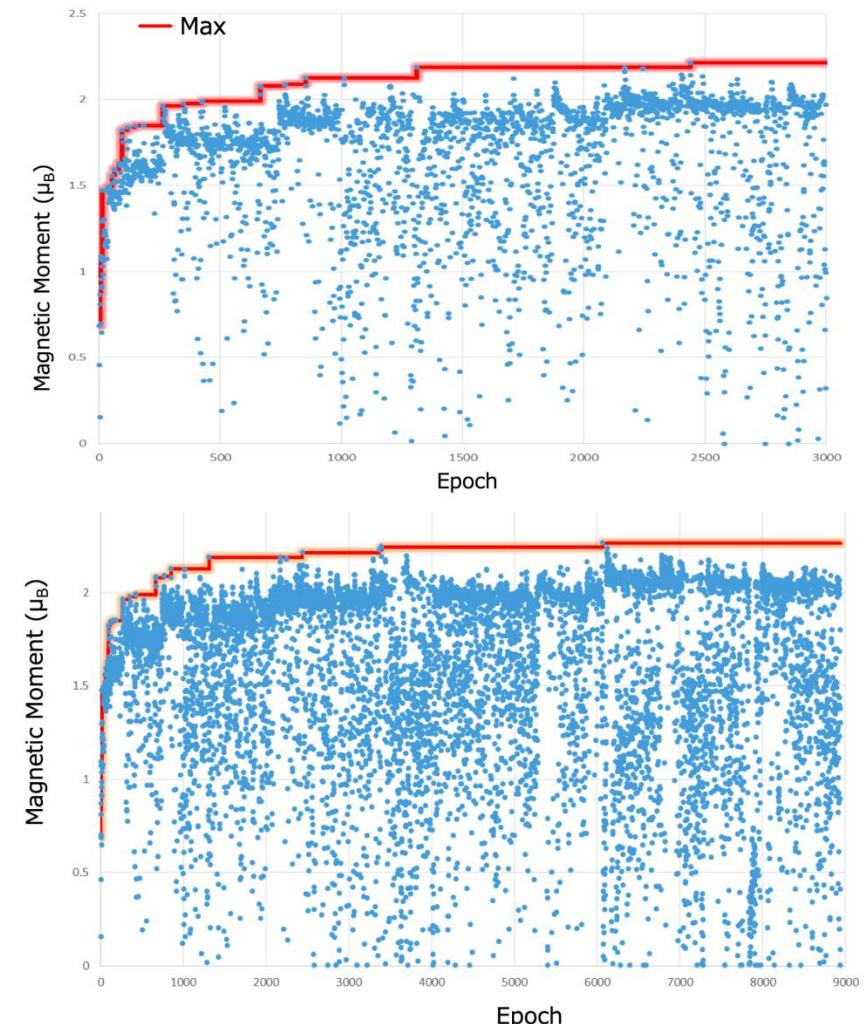
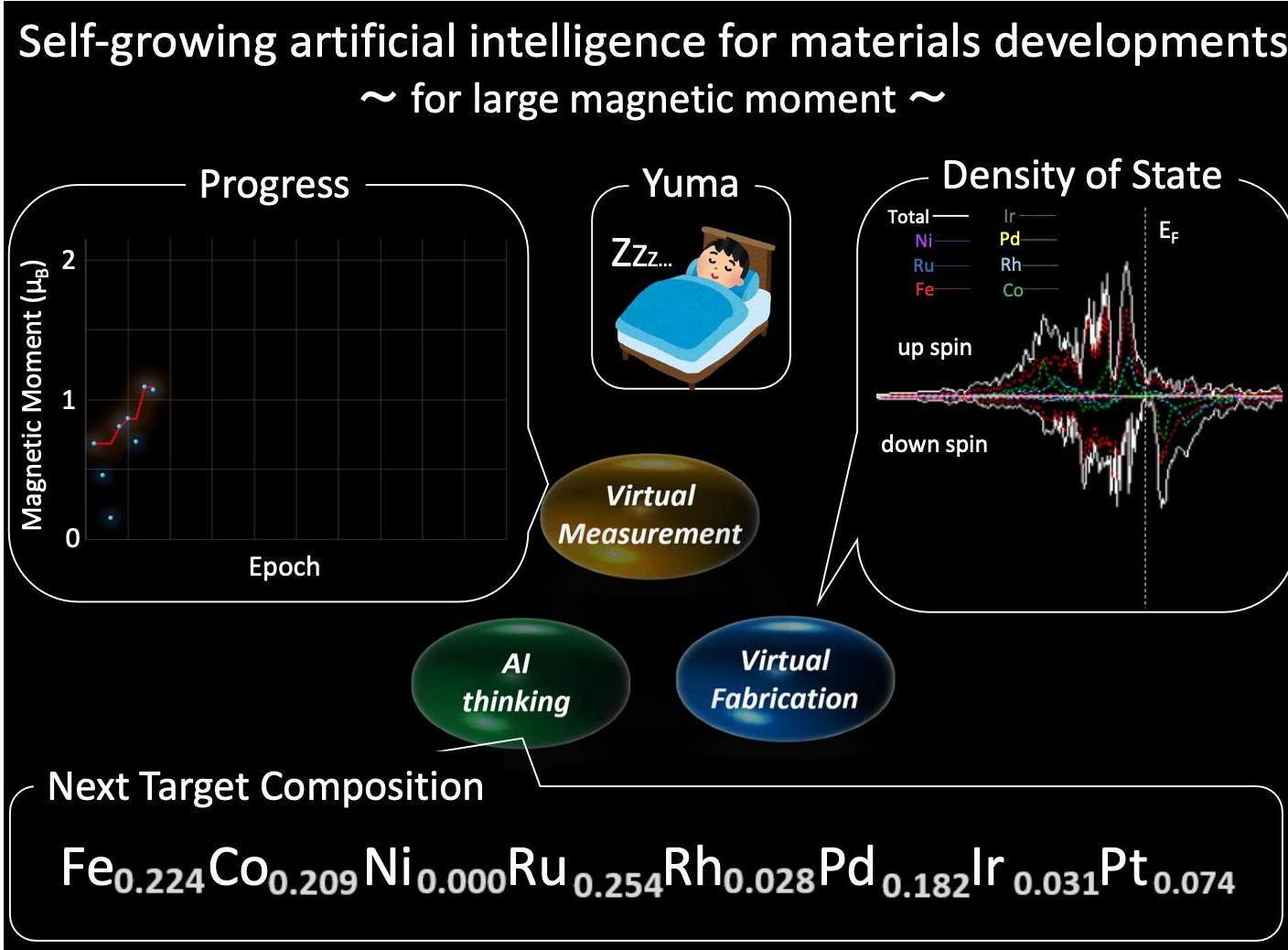
# 合金材料に対する磁気モーメントの自動探索

Slater-Pauling ruleの限界 ( $\text{Fe}_{75}\text{Co}_{25}$ ) を超える  
安定な磁性合金※は存在するのか？



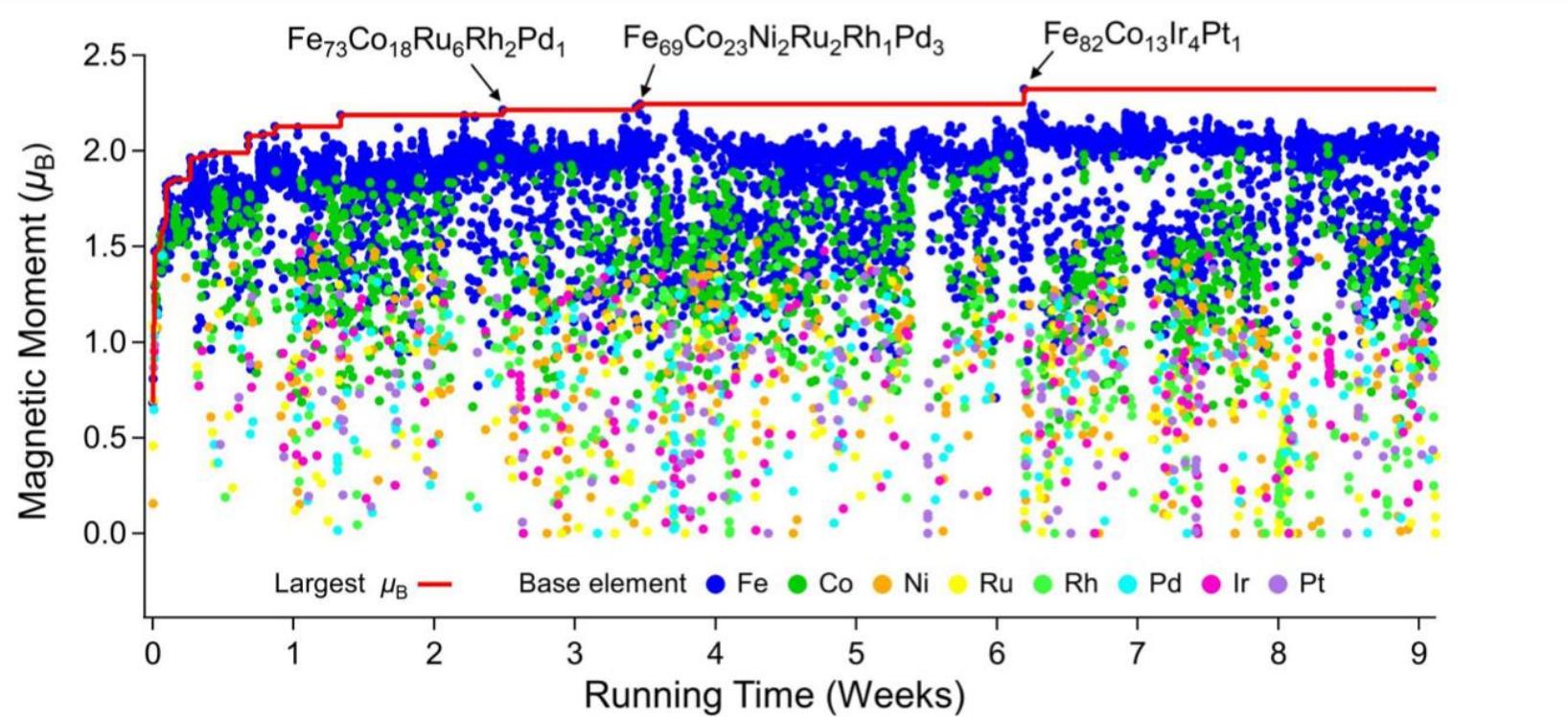
# Autonomous AI for materials developments

## ~ for large magnetic moment ~



Iwasaki, Y., Sawada, R., Saitoh, E. et al. Machine learning autonomous identification of magnetic alloys beyond the Slater-Pauling limit. Commun Mater 2, 31 (2021).

# 合金材料に対する磁気モーメントの自動探索



自律材料探索システムは、大きな磁化を持つ磁性合金として $\text{Fe}_{82}\text{Co}_{13}\text{Ir}_4\text{Pt}_1$ を提案

# 合金材料に対する磁気モーメントの自動探索

## 【科学者（磁性材料屋）の認識】

磁化が最も大きい合金は  
**Fe<sub>75</sub>Co<sub>25</sub>** である

## 【成長した自律材料探索システムの認識】

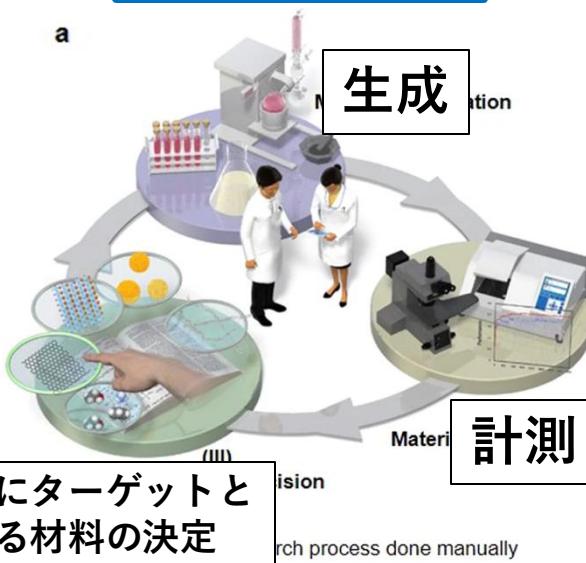
磁化が最も大きい合金は  
**Fe<sub>82</sub>Co<sub>13</sub>Ir<sub>4</sub>Pt<sub>1</sub>** である

成長した自律材料探索システムは、  
我々科学者とは違う意見を持っている

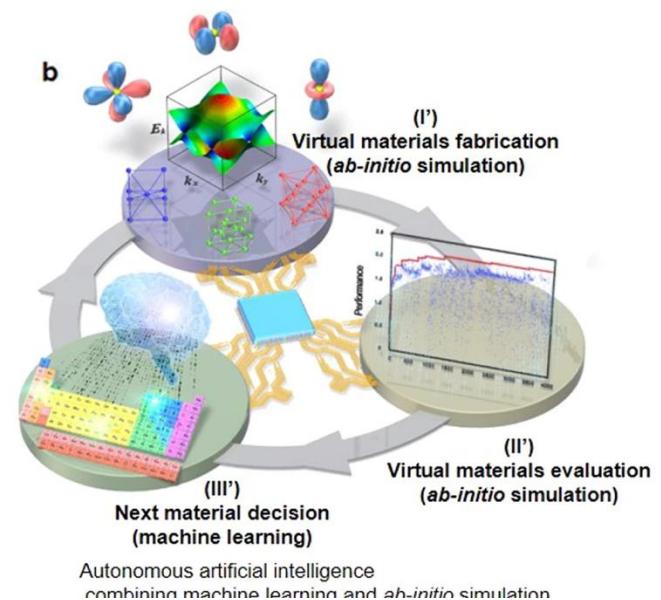
# データ駆動科学による合金探索の推進 ベイズ最適化を用いた材料探索の自動化

情報G × 計算G

従来の実験



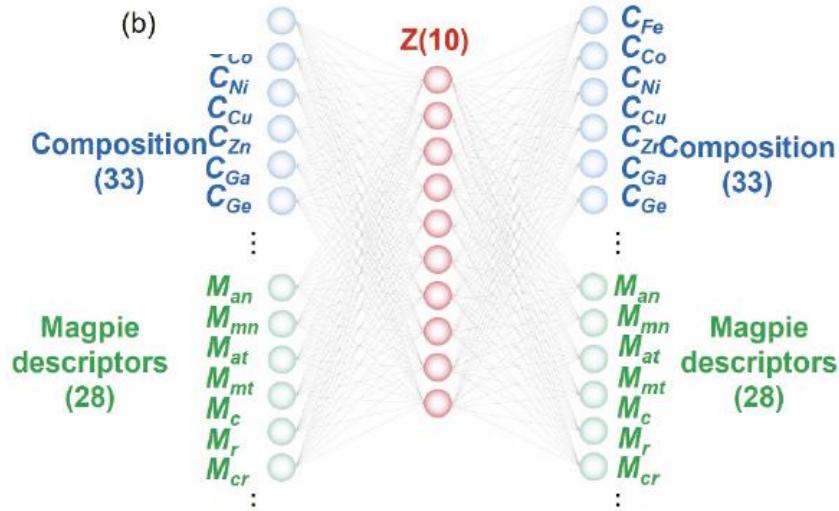
計算科学 + ベイズ最適化



Iwasaki, Y., Sawada, R., Saitoh, E. et al. Machine learning autonomous identification of magnetic alloys beyond the Slater-Pauling limit. *Commun Mater* 2, 31 (2021).

入力空間が10~20次元を超えると探索が困難に

組成情報



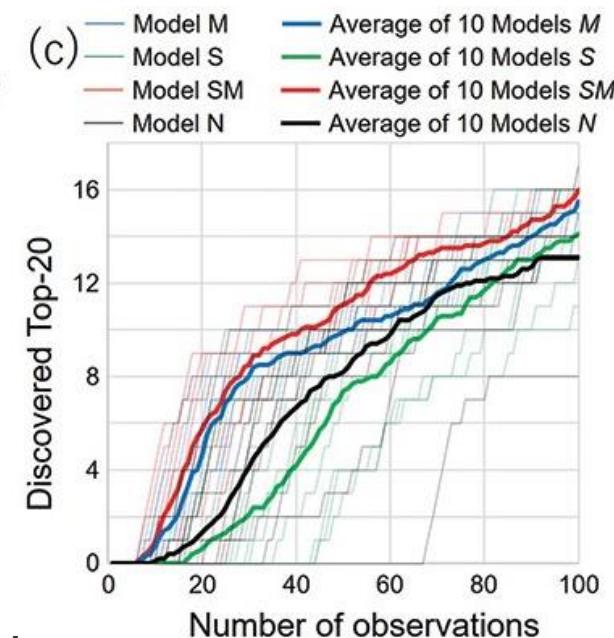
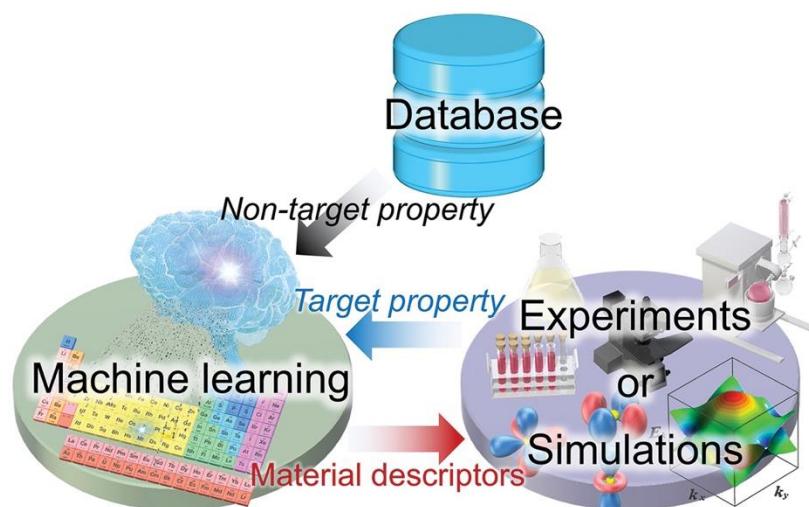
Magpie記述子

Iwasaki, Y., ... Igarashi Y., *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 2.1 (2022): 365-371.

Autoencoderを用いて次元圧縮し、  
低次元空間でのベイズ最適化により  
効率的な探索を実現

# データ駆動科学による合金探索の推進 ニューラルネットワークのアンサンブル学習&転移学習

情報G × 計算G



Jaekyun Hwang & Yuma Iwasaki (2023),  
Science and Technology of Advanced Materials: Methods  
Yoshida et al., in prep.

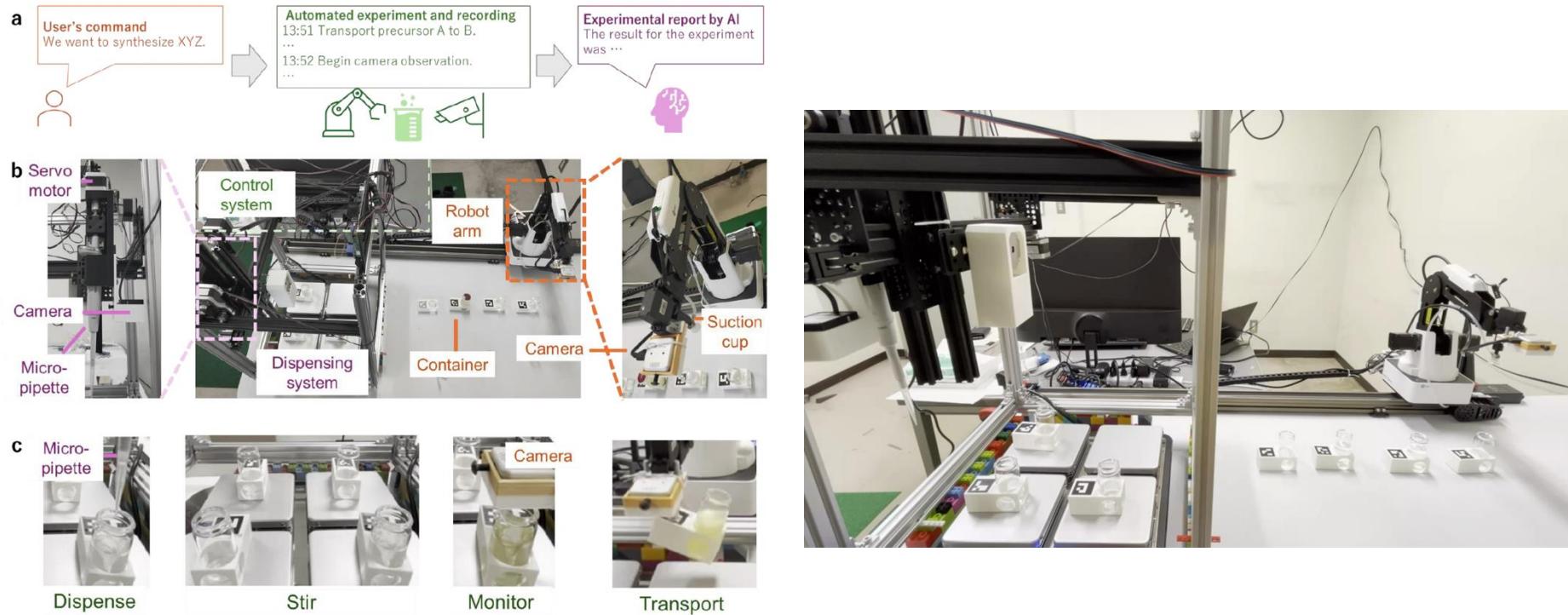
Model M : 磁気モーメントから転移学習  
Model S : スピン偏極率から転移学習  
Model SM : 磁気モーメントとスピン偏極率の両方から転移学習  
Model N : 転移学習なし

転移学習によって知見を共有し,  
ベイズ最適化の効率が向上

# Scientists-Augmentation AI

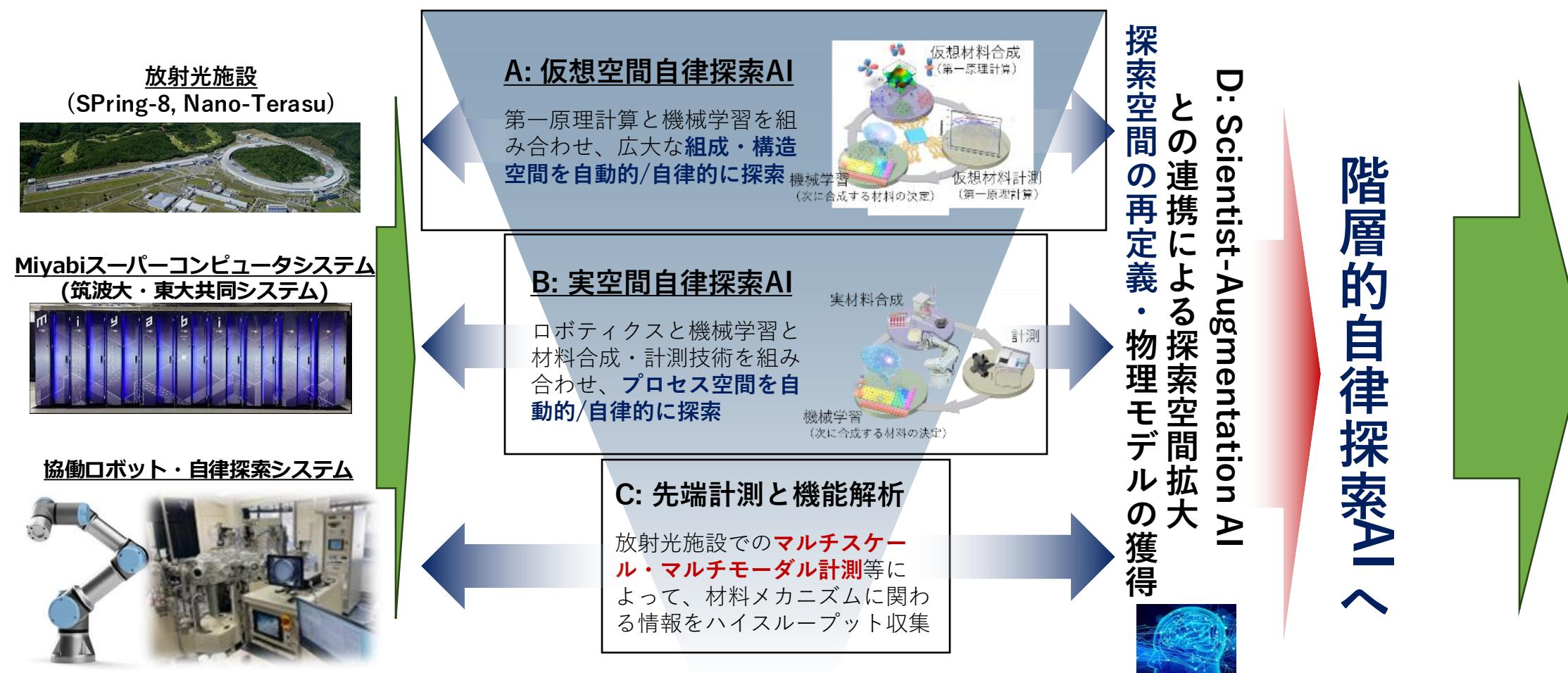
## 大規模言語モデルによる マテリアルズ・インフォマティクスへの展開

高分子合成のための大規模言語モデルによる実験とデータ作成の自動化



Hatakeyama-Sato, K., Ishikawa, H., Takaishi, S., Igarashi, Y., Nabae, Y., & Hayakawa, T. "Automated experiment and data generation by foundation models for synthesizing polyamic acid particles", *Polymer Journal* 2024

# 実験・計算・計測を融合した データ駆動科学による合金探索の推進



产学連携・人材交流

探索空間拡大するための手法を、さらに実材料開発へ展開する