

審査の結果の要旨

氏名 黄 焘鈞

材料物性予測と材料探索は様々な材料の研究開発に共通して重要な課題であるが、近年、材料の原子構造や物性値等のデータを基に機械学習することによりこれらを加速しようとする試みが注目を集め、盛んに研究されている。しかし、実際の研究開発においては原子構造の情報が得られないケースがしばしばあるにもかかわらず、機械学習による物性予測や材料探索の手法はこのような場合に対してはまだ不十分である。本論文は、原子構造の情報を含まない新たな記述子を提案し、この記述子とニューラルネットワークとを組み合わせた機械学習による材料物性予測および材料探索法をガラス材料の粘性挙動等のいくつかの対象に対して適用して、この手法の有用性を示すことを目指したものである。本論文は7章からなる。

第1章は緒言である。最近の機械学習の進歩と材料研究における機械学習の応用の現状を概観した後、材料の構造や物性等を数値化するために用いられる記述子について、これまでに開発されたものを概観している。様々な記述子が開発されているものの、組成ないし原材料の成分比のみの情報しか得られない場合に適用可能なものは少なく、また適用可能なものも汎用性が必ずしも十分でないため、このような場合に適用できるより良い記述子の開発が望まれることを指摘して、本研究の目的を明確にした。

第2章では、本研究で用いられる人工ニューラルネットワークについて述べている。人工ニューラルネットワークの構造や機械学習による人工ニューラルネットワーク中のパラメータの最適化のアルゴリズム等を説明した後、良い予測性能を得る上で有用な、過学習、正規化、ベイズ最適化、敵対的学習等について述べている。

第3章では、本研究で提案した新しい記述子である「元素フィンガープリント」の概要を述べている。そして、元素ないし原材料の物性値のヒストグラムから構成するため平均値等の単純な統計量を用いる既存の記述子より情報量が多いと期待でき、また目的に応じて物性値を選べるという本記述子の長所を述べている。

第4章では、本研究で提案した手法によるガラス材料の粘性挙動の予測を試みている。元素フィンガープリントとニューラルネットワークを用いてガラスの粘度が指定された値になる温度の予測器を作成し、実験値のデータベースでこれを学習させた後に予測性能を調べた結果、組成のみを用いる既存の記述子を上回る予測性能（すなわち小さな予測誤差）を得た。特に、特定の原料酸化物を除いたデータで学習させた後にその原料酸化物を含むガラスに対する予測を行った場合についても既存の記述子を上回る予測性能を得て、提案した手法の有効性を示した。

第5章では、第一原理計算結果のデータベースによる機械学習において提案手法の有用

性を調べている。まず、元素フィンガープリントを複数のニューラルネットワークのアンサンブルと組み合わせた予測器で生成エンタルピーの予測を試み、既存の記述子を上回る予測性能が得られることを示した。さらに、この手法とベイズ最適化を用い、エネルギーギャップと密度からなる仮想的な性能指数を最大化する材料探索を試み、16,444 個の材料中、性能指数値が最大になるものを平均 47 回の試行で見出すことに成功して本手法の有効性を示した。なお、ここではベイズ最適化における予測値の分散の評価に、通常用いられるガウス過程でなく、ニューラルネットワークアンサンブルを用いており、この評価法の有用性も確認した。

第 6 章では、金属材料の引張強度の予測に提案手法を適用している。引張強度は製造プロセスと実験条件に大きく依存する量であるが、元素フィンガープリントと試験温度のみを記述子として用いて実験値のデータベースで学習した結果、単一の予測器で Fe 基、Ni 基、Co 基のいずれの合金に対してもある程度の予測性能を得ることに成功した。他方、熱処理条件の情報がないデータのみを用いて学習した場合、熱処理条件の情報のあるデータについては予測性能が悪かったが、これは引張強度の向上に熱処理が重要であることから予測された結果である。有用な予測性能を得るためにはさらなる改善を要するが、本章の結果はこの問題に対しても提案手法が一定の有用性を持つことを示すことができ、また性能改善の方向性も示せた。

第 7 章は総括である。

以上のように、本論文は、組成ないし原材料の成分比のみに基づく新しい記述子である原子フィンガープリントを提案し、その予測性能を検証した。ガラス材料の粘性挙動、金属材料の引張強度、広範囲な材料の生成エンタルピーやエネルギーギャップ等、様々な対象に対して元素フィンガープリントとニューラルネットワークとを組み合わせる既存の手法を上回る予測性能を得、提案した手法の有用性を示した。よって本論文の材料情報学（マテリアルズ・インフォマティクス）への寄与は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。