

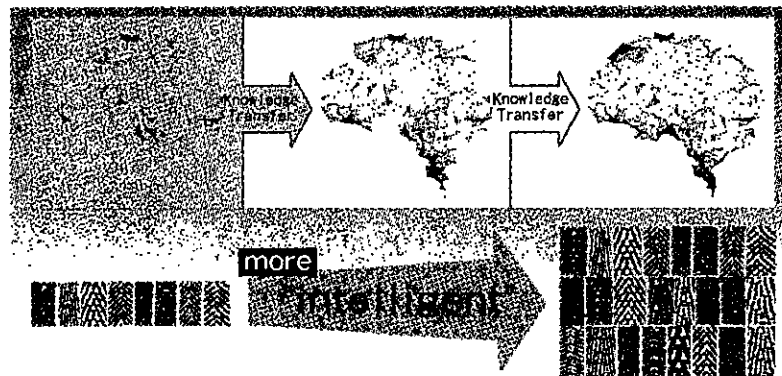
界面構造解析にAI活用

東京大学生産技術研究所の溝口照康准教授らの研究グループは、人工知能(AI)を利用して界面構造を高速に決定する手法を開発した。機械学習と転移学習により人工知能を育成することで、物質の界面構造を決定するための計算コストを3600分の1まで削減することに成功した。人工知能に過去の経験を学習させる(計算対象を絞り込ませる)ことで、鉄の33種類の界面構造すべてを462回の計算で決定できることを確認している。界面は物質機能に決定的な役割を果たしており、開発手法を用いることで素材開発の大幅な効率化が期待される。

東大、転移学習組み合わせ

界面構造は物質の電気伝導性やイオン伝導性、耐久性といった機能と密接に関係しており、界面構造を決定することは物質研究の中でも最も重要な研究課題の一つとなっている。しかし、同じ物質でも無数の種類の界面が存在し、それぞれの界面が異なる構造を持つていて、1種類の界面構造を決定するだけでも数千〜数万個という候補構造の中から初期の原子配置から安定構造とそのエネルギーを算出するためには膨大な量の理論計算を必要とする。研究グループでは、これまでに資源探索に用いられる空間補間法の一つであるクレンジングという機械学習の手法を利用して人工知能を育成し、界面構造を探索させる手法の研究開発に取り組んでいる。転移学習はある問題のために作成した人工知能を類似した別の問題に応用することで育成する手段であり、今回は機械学習に転移学習を組み合わせることで人工知能の大幅な高性能化に成功している。

素材開発を大幅効率化



過去に学習した経験 (Knowledge) を次々に転移 (Transfer) することで、より多くの界面構造を高速に決定することができる
(下は研究で実際に得られた界面の構造)

具体的には、探索空間(パラメーター)を従来の3次元から74次元に拡張し、転移学習を繰り返す行うことで人工知能を育成。この人工知能に過去に報告のある鉄の33種類の界面構造を決定させたところ、通常なら165万6600回の膨大な理論計算が必要だが、462回の計算ですべての構造を決定することに成功している。並列計算機で数週間を要する計算を、1台のコンピュータで数日程度で行うことが可能となる。工業的に使用されている多くの物質で界面は重要な役割を果たしており、物質開発には界面構造とその機能の理解が不可欠。今回開発した手法により、界面構造をより効率的に決定できれば物質開発の大幅な短縮が見込まれる。