

界面構造、1秒で計算

東大AIの「転移学習」活用

東京大学生産技術研究所の溝口照康准教授らは、材料の界面構造の推定に人工知能(AI)技術を活用し、計算量を3600分の1に抑えることに成功した。AI技術の一つ「転移学習」を利用し、最も安定な界面構造を計算した。従来は1時間かかっていた計算が1秒で済む。これまで模の界面構造を求められ、材料設計に生かせるようになる。

研究グループは、鉄

材内部の33種類の界面構造を計算で求めた。原子数は100、600個。想定される界面の構造を確かめるには165万回の計算が必要だったが、462回の計算で33構造を求めることができた。界面の三次元立体構

造を74次元に拡張して転移学習を利用した。転移学習は計算結果を別の似た問題に転用して効率的に解く手法。最安定構造にたどり着くまでに、計算結果を繰り返し利用し学習して計算数を減らすことができた。