

マテリアルズ・インフォマティクス/データベース販売

新規材料開発において、特性データベースを利用したデータ駆動型アプローチ(マテリアルズ・インフォマティクス)の重要性が高まっています。コベルコ科研では試験研究会社の特徴を活かし、様々な分析試験や数値計算技術を用いて、お客様のニーズに特化したデータベース構築や機械学習による最適材料探索モデリングを支援します。

事例: 機械学習によるNO直接分解反応に適した触媒材料探索

化石燃料の燃焼によって発生する窒素酸化物(NO_x)の削減が喫緊の課題となっており、近年では還元剤を必要としない直接分解反応($\text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2$)が多く研究されています。ここでは、機械学習を用いて材料に求める性能と材料基礎物性のデータを関連付けて学習モデルを構築し、直接反応に適した合金組成を予測した事例を紹介します。

合金組成候補

| period | group | | | | | | | | | | | | | | |
|--------|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | |
| 3 | Mg | | | | | | | | | | | | | Al | Si |
| 4 | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | | |
| 5 | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | |
| 6 | Ba | | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | |
| | | | La | Ce | | Nd | | | | | | | | | |

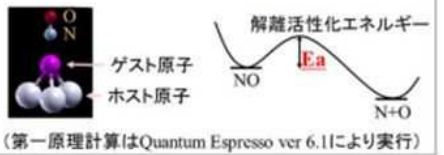
- ・計算形状:四面体クラスターモデル (2種類元素の組み合わせ)
- ・探索対象:左表元素
- ・NO吸着エネルギーからEaを推定 (計算が収束したものに限り)

モデリング方法

入力(説明変数):材料基礎物性 (単結晶における物性 (ハンドブック参照))
電気陰性度(EN)、融解エンタルピー(EF) イオン化ポテンシャル(IP)、密度(D)
[1] Takigawa, I., Shimizu, K.-i., Touda, K. & Takakura, S. *RSC Adv.* 6, 52587-52595 (2016).

出力(目的変数):材料の性能 (第一原理計算によりEaを推定)
NO直接分解における素反応において、①②が律速反応と仮定[2]
[2] 福田,江原,第19回理論化学討論会予稿,(2016) 3B07

- ① NO adsorption
- ② $\text{NO} \rightarrow \text{N} + \text{O}$
- ③ $\text{NO} + \text{N} \rightarrow \text{N}_2\text{O}$
- ④ $\text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$
- ⑤ $\text{N} + \text{N} \rightarrow \text{N}_2$



機械学習



ANN(ニューラルネットワーク):順方向モデル
入力と出力の関係を推測し予測モデルを作成
ANN構築:scikit-learnのMLPRegressor(Relu, lbfgs)
中間層ユニット数46

機械学習モデルの回帰特性

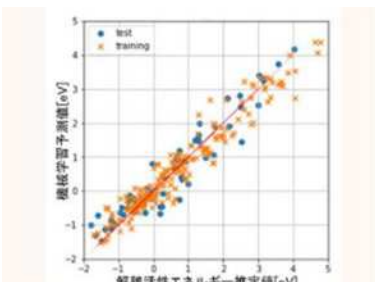


図. ANNモデルによる機械学習予測モデルの構築結果

直接分解反応エネルギーの予測結果

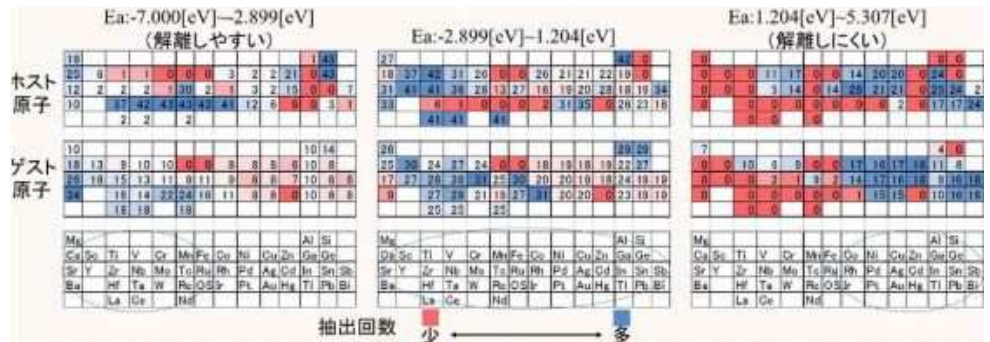


図. ベイズ最適化により求められた各サンプリング点の入力値xとユークリッド距離が最も近い元素の抽出結果

大川ほか、第68回応用物理学会春季学術講演会(2021年、オンライン).