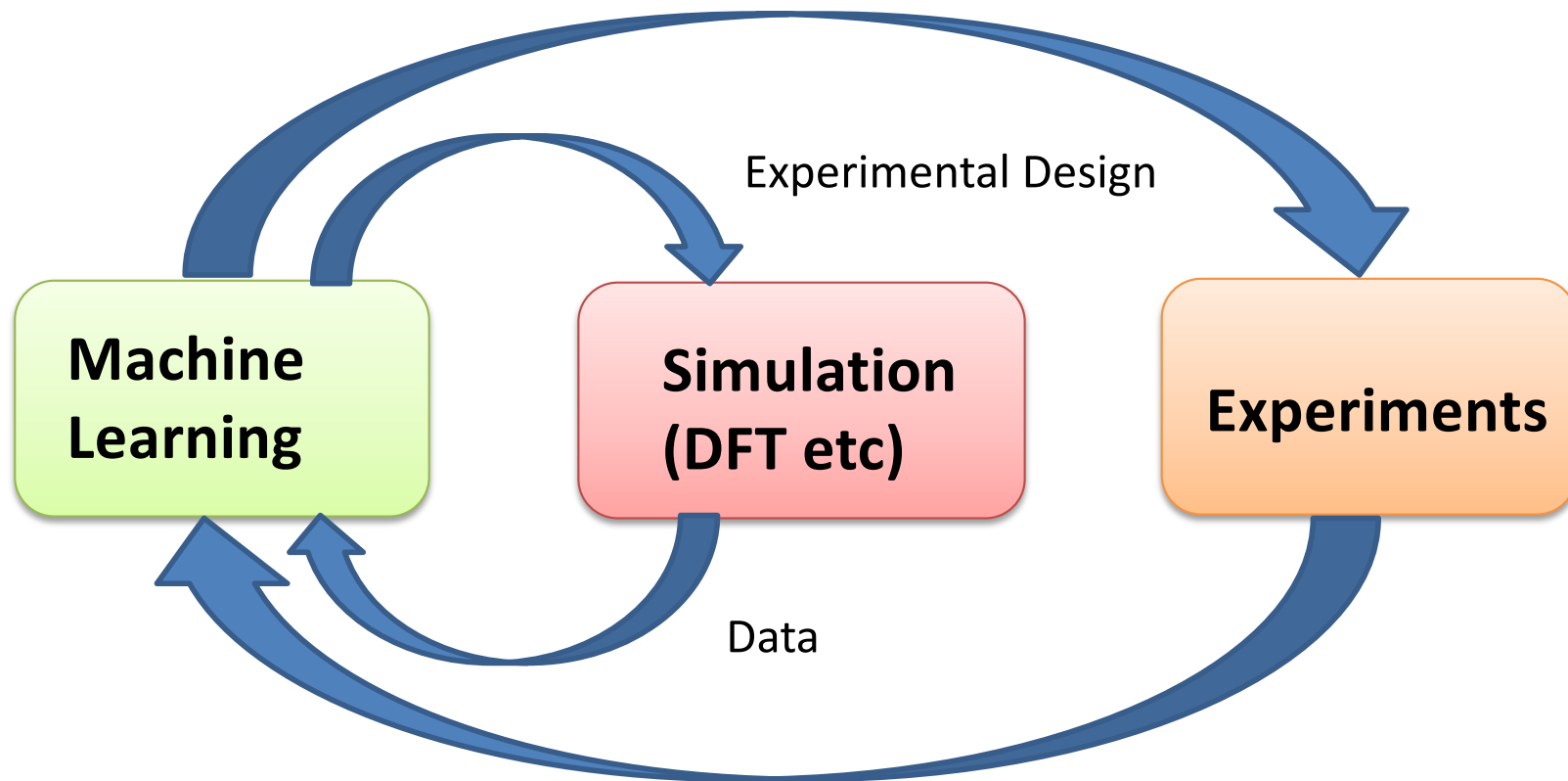


MI2I成果報告会

データ科学チーム

物質・材料研究機構
MI2I データ科学チーム長
津田 宏治

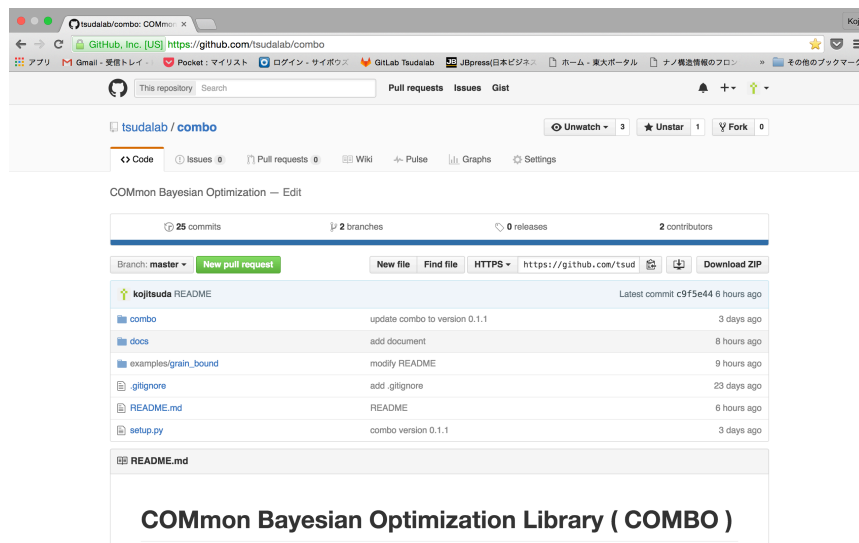
自動的材料開発



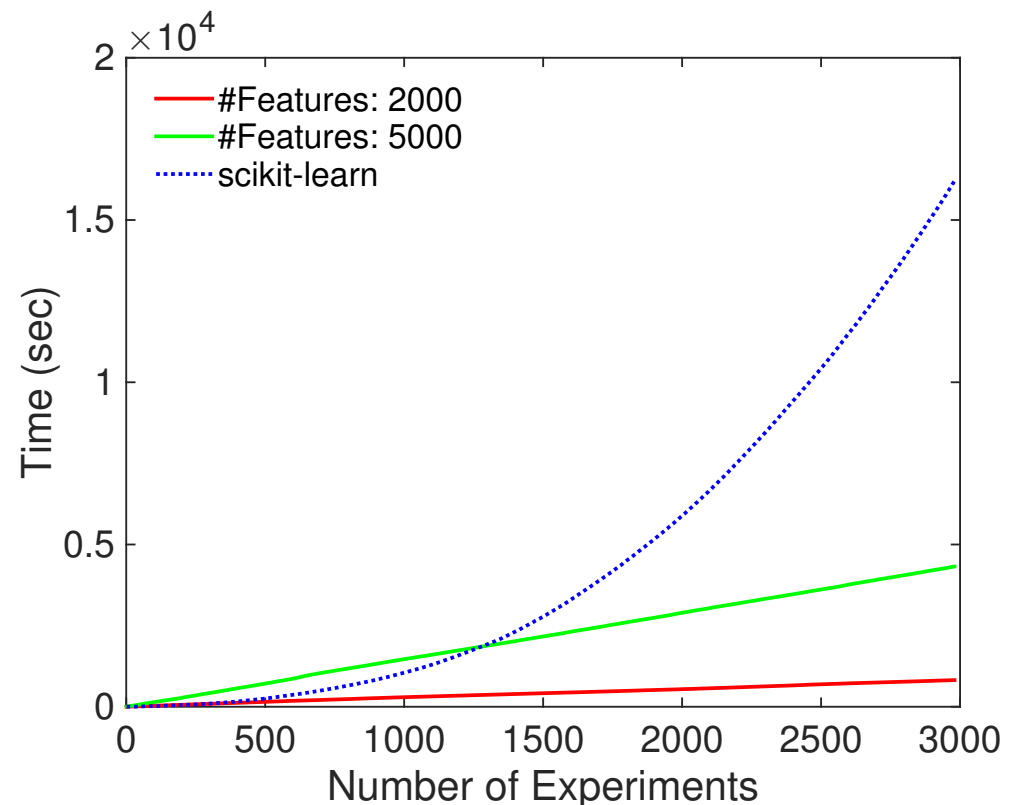
COMBO: ベイズ最適化ツール

<https://github.com/tsudalab/combo>

- データからの学習に基づく実験計画ソフトウェア
- 高速な学習、及び、ハイパーパラメータの自動設定

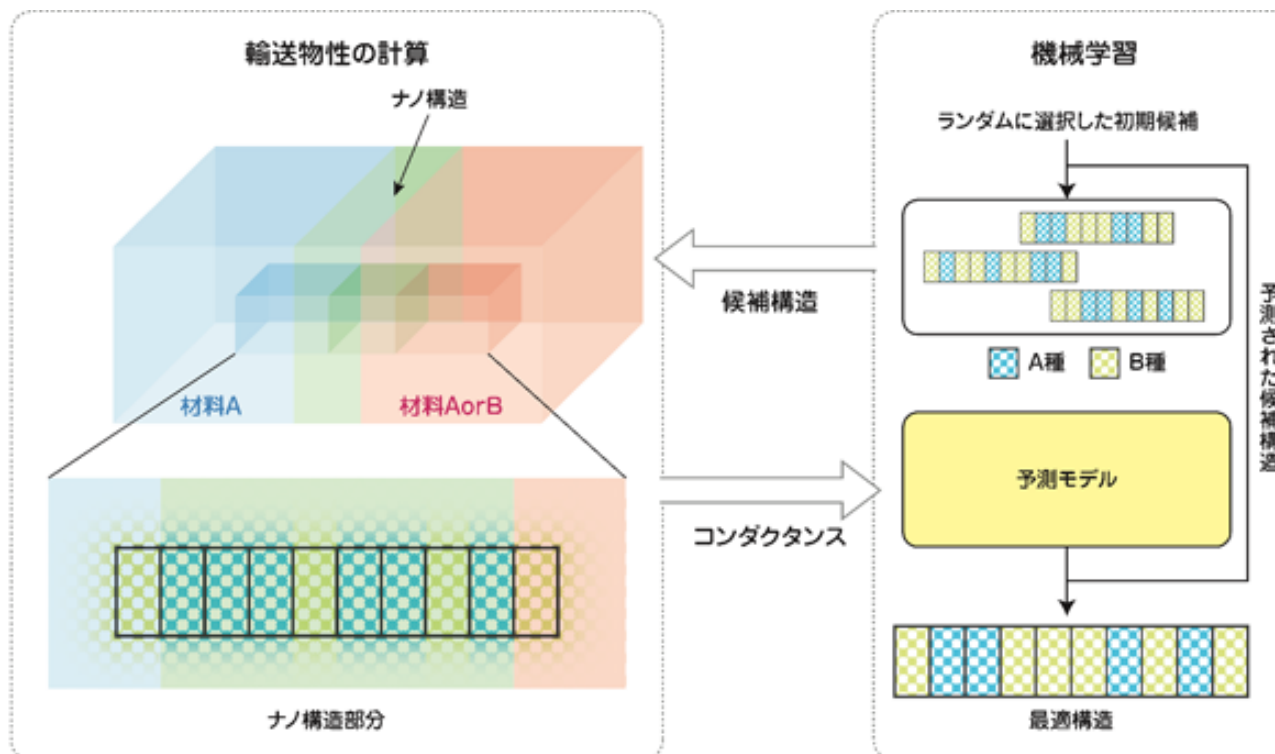


Ueno et al., *Materials Discovery*, 2016.



機械学習により熱流を制御する ナノ構造物質の最適設計に成功 (2017.4.18 プレスリリース, Physical Review X)

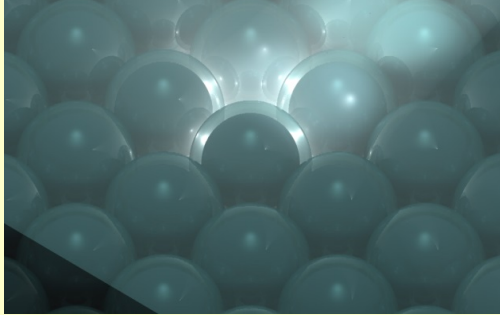
- ナノ構造の熱輸送を計算する手法とベイズ最適化手法を組み合わせることによって、ナノ構造を最適化する新しい手法を開発
- シリコンとゲルマニウムから構成される材料に適用し、全候補数の数%の数の構造を計算するだけで最適構造を同定
- 今後、光や電子デバイスなどの放熱、熱遮蔽による機器保護、熱電変換素子の効率向上に寄与



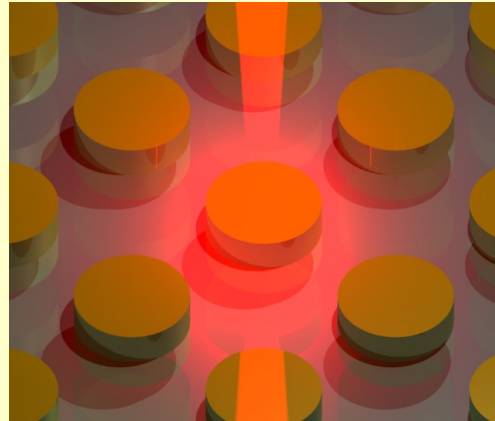
塩見 淳一郎 (東大)

波長選択的熱輻射材料

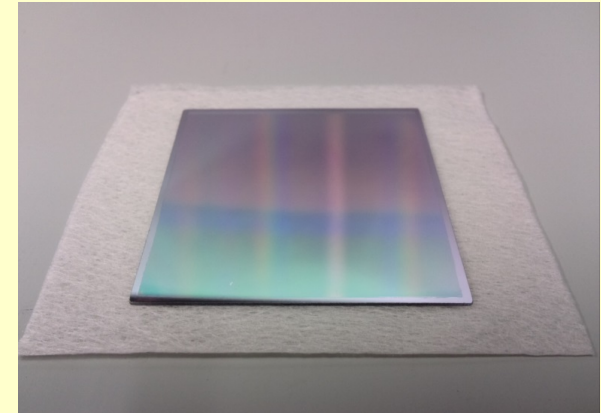
Sakurai Lab (Nigata Univ)
Shiomi Lab (Tokyo Univ)



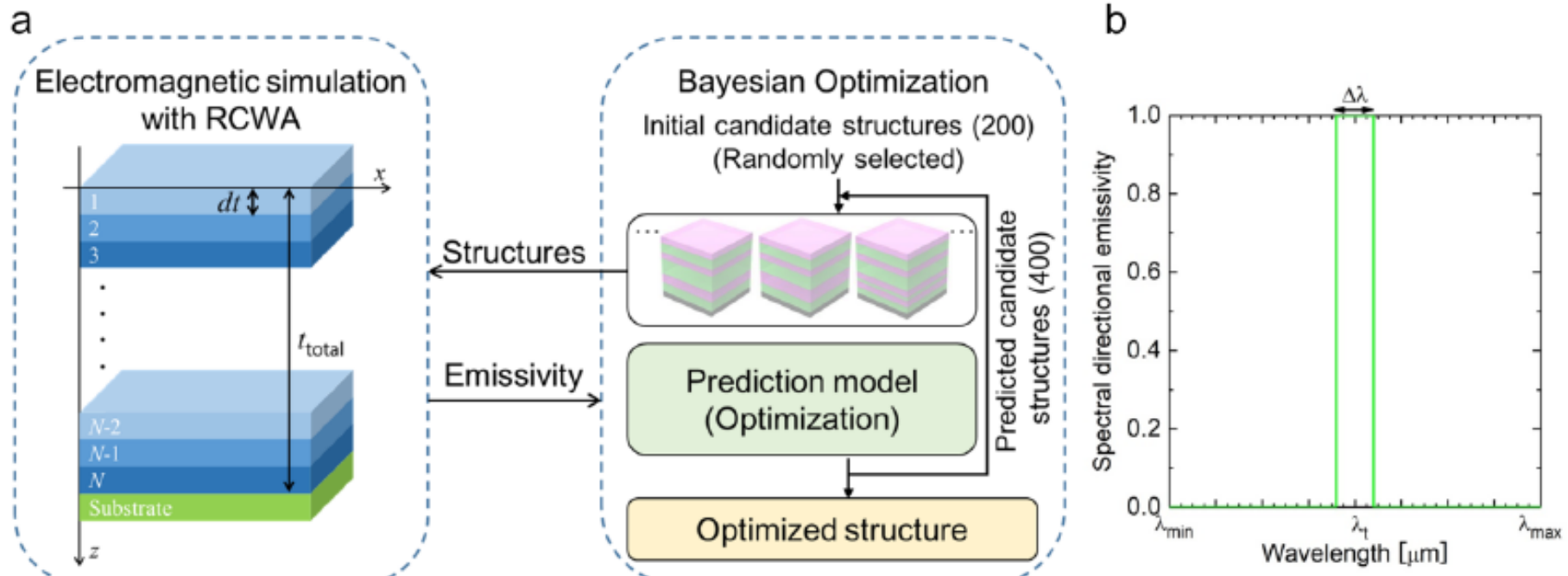
Solar absorber



Sky radiator

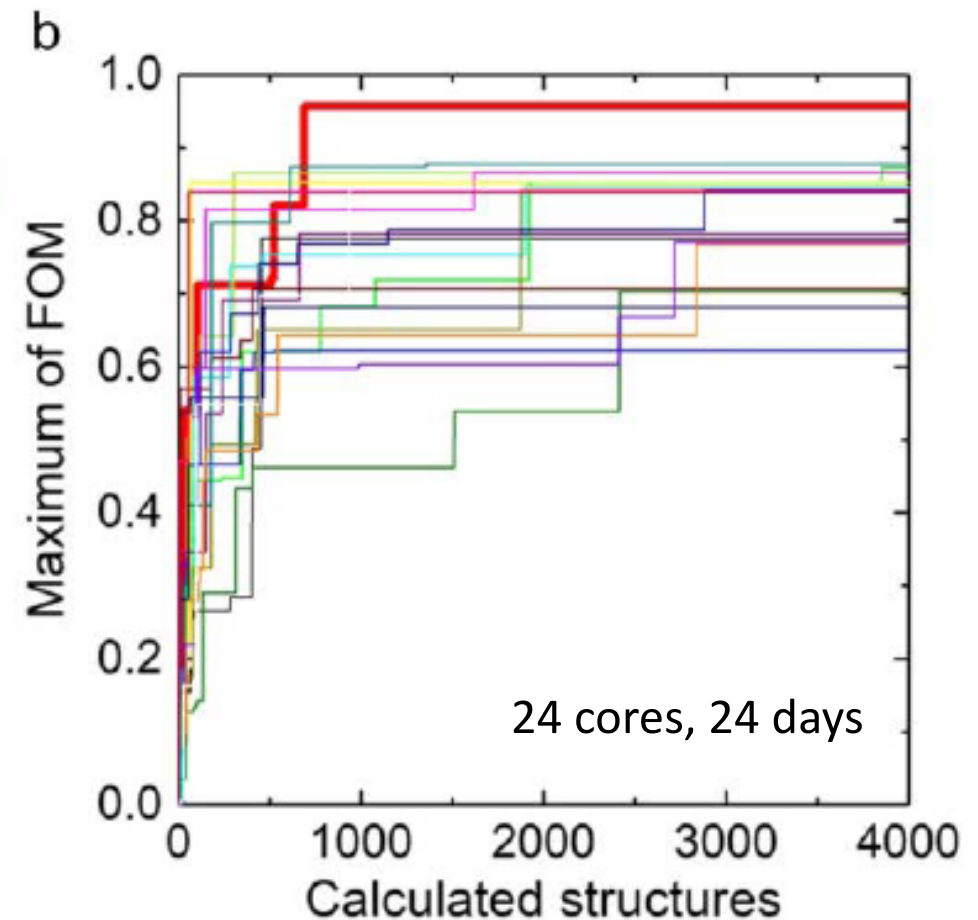
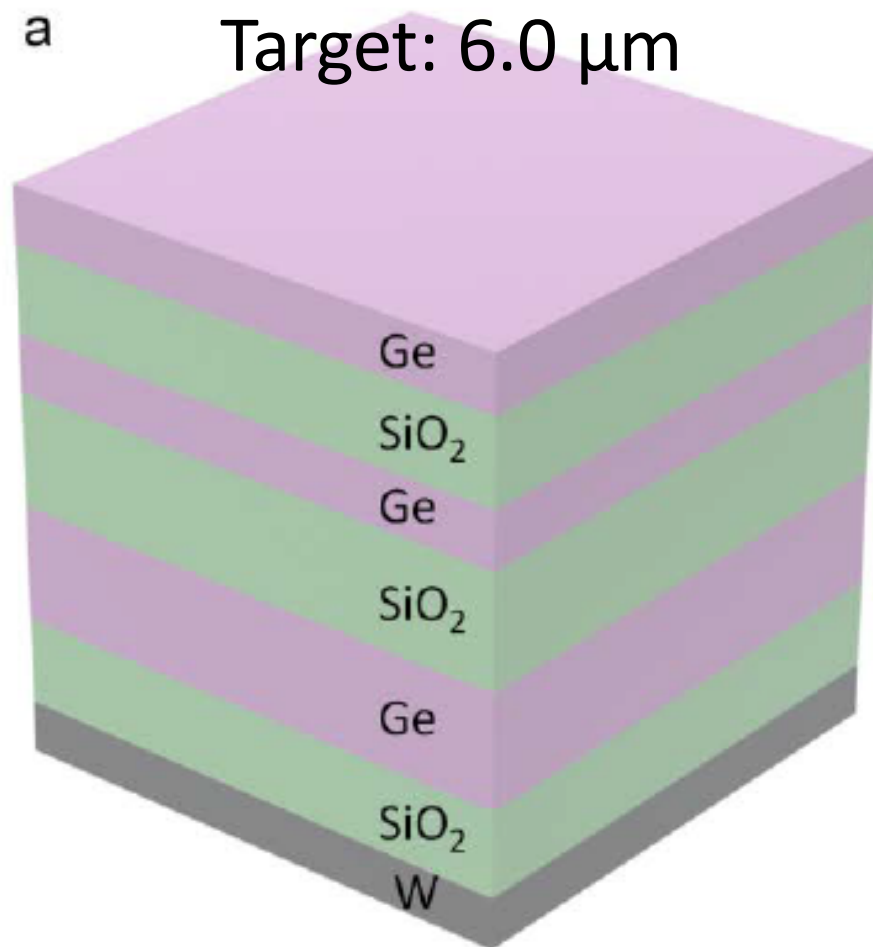


Heater for drying

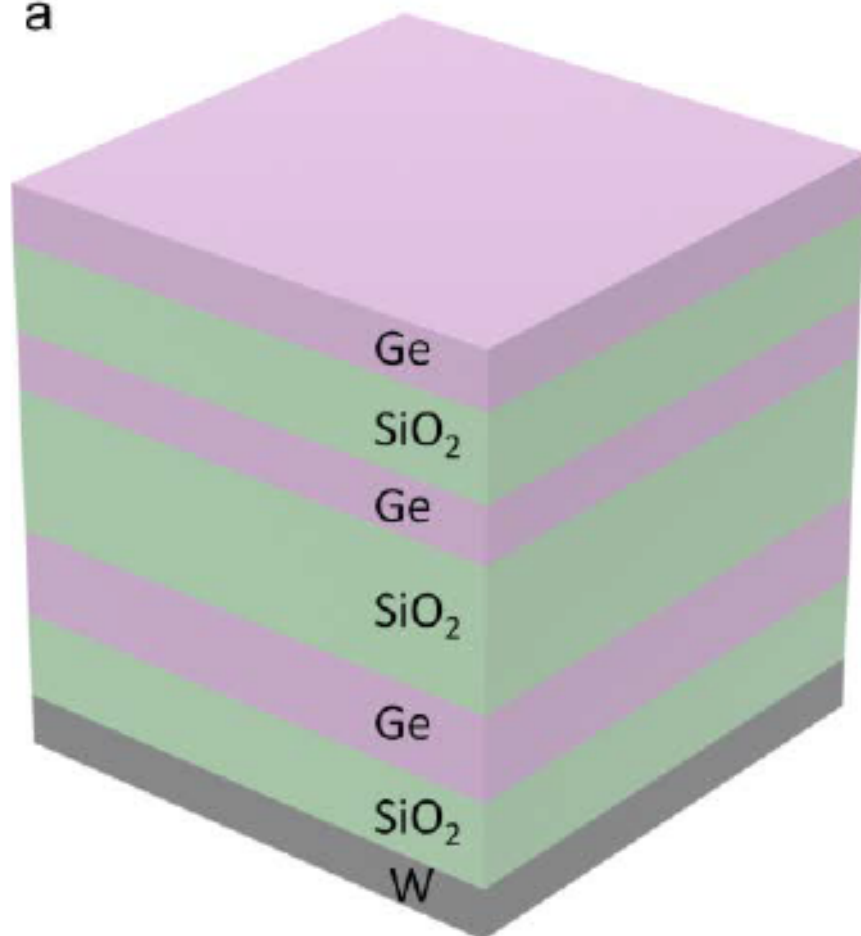


機械学習により求めた最適解

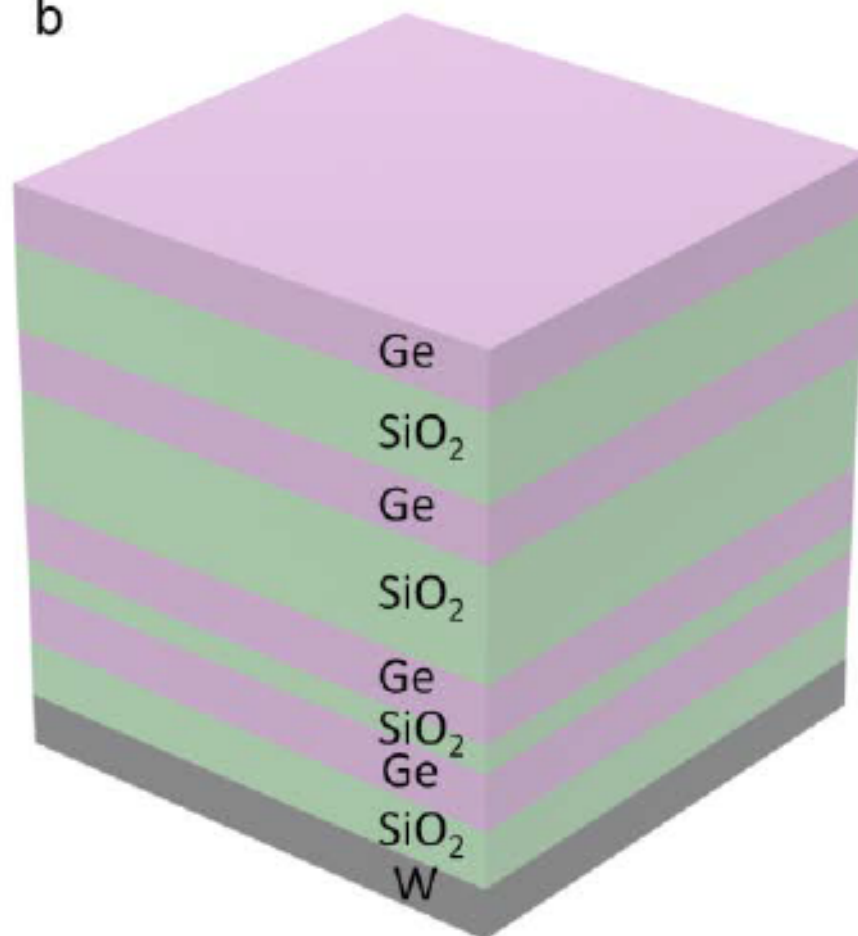
(1.68億回のシミュレーションによりデータ収集: 全体の2.06%)



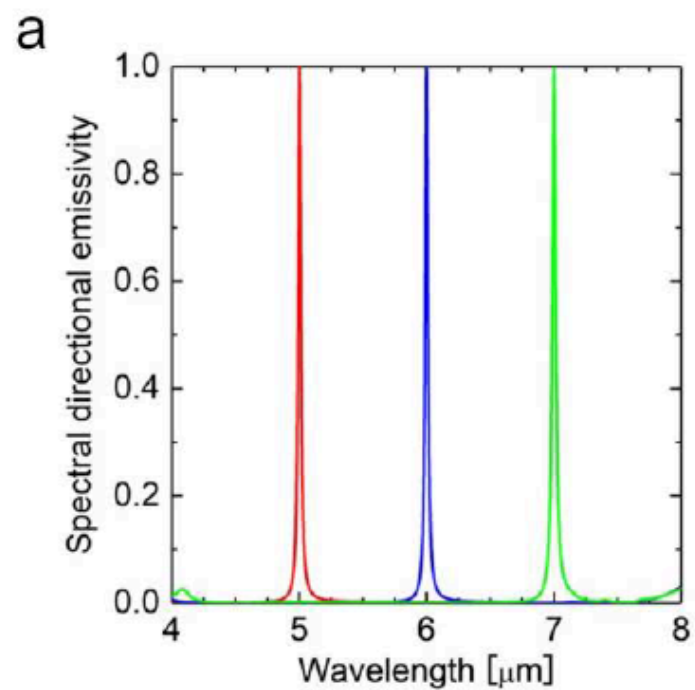
a



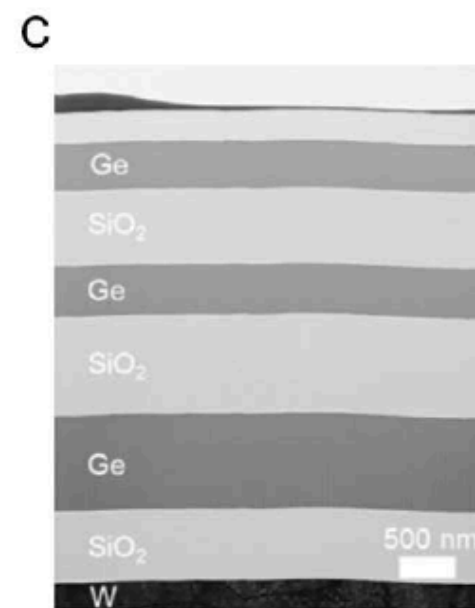
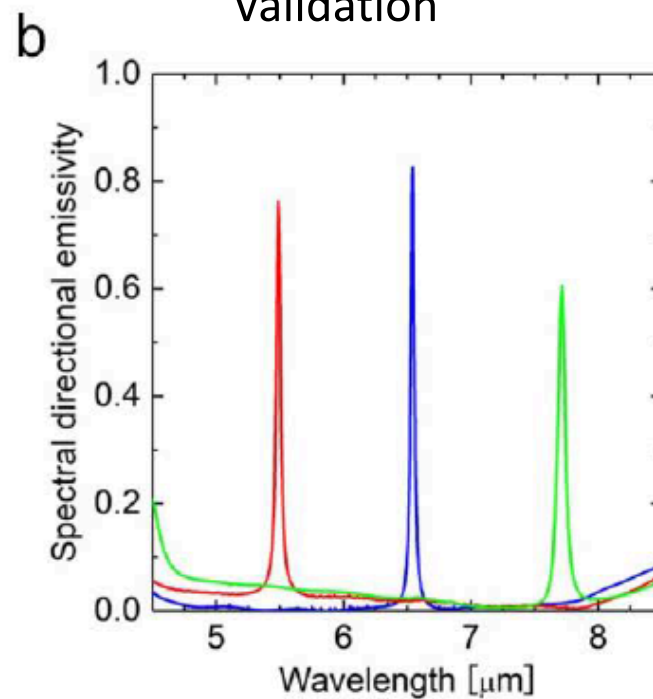
b



Calculated



Experimental Validation



【機械学習と実験の協働による熱電発電特性の向上に成功】

NIMS
高際 良樹



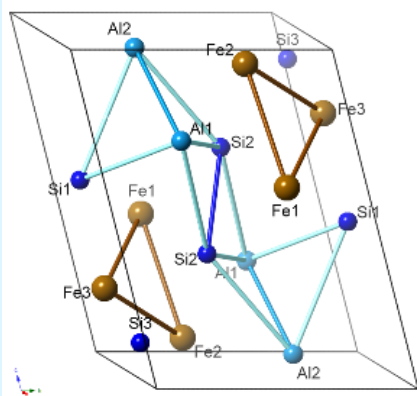
研究成果

200°C以下の排熱を有効活用するありふれた元素のみから構成される熱電発電材料を発見し、「機械学習」により出力特性を40%向上させることに成功。

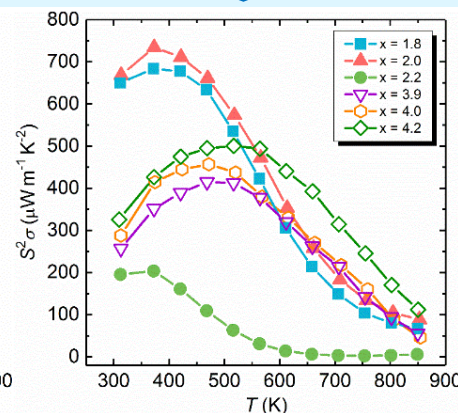
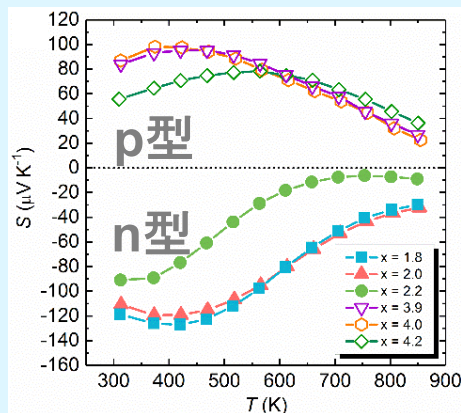
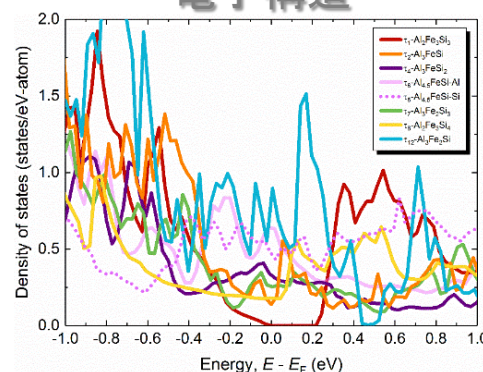
▶▶▶ IoT社会に向けたセンサー用自立電源技術の創出

「究極的に」資源性に優れるAl-Fe-Si新材料の発見

結晶構造

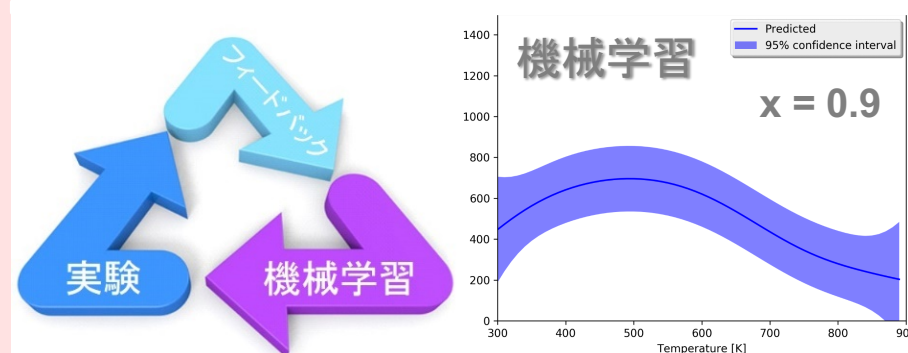


電子構造

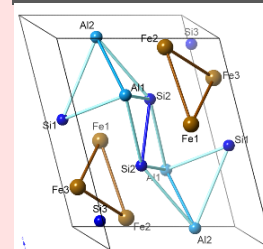


高際良樹, 特願[2017-16628], PCT出願中.
Y. Takagiwa et al., J. Phys. Chem. Solids (2018).

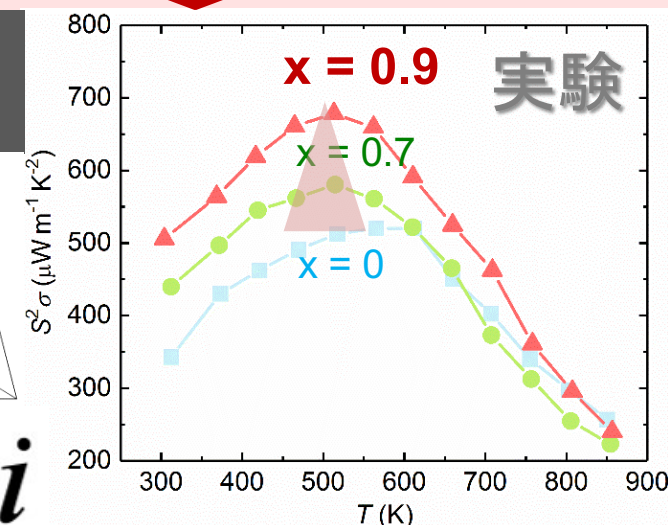
機械学習により中温域の出力特性を40%向上



【熱電研究】 実験+機械学習 の初成功例



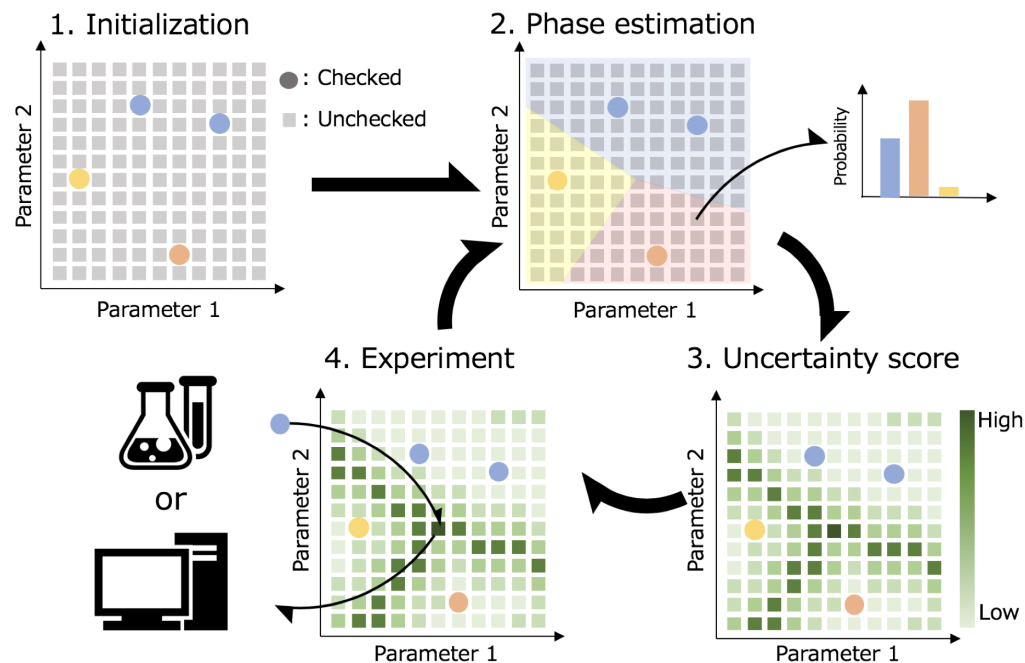
Mi²i



Z. Hou and Y. Takagiwa et al., ACS-AMI

機械学習で相図作成

能動学習におけるUncertainty sampling (US)を
相図作成に適用する.

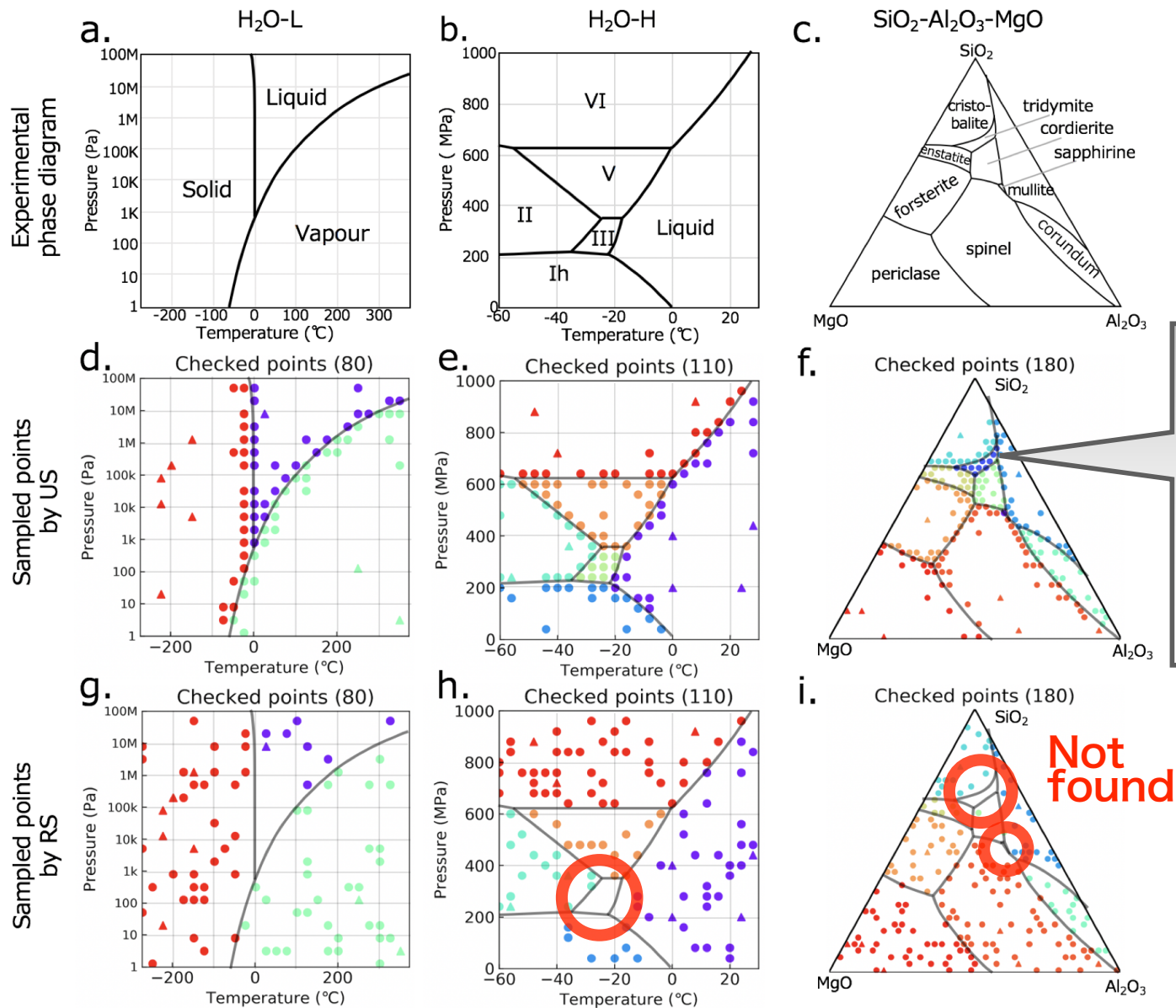


利点 1 :
サンプリング数を20%に削減

利点 2 :
新しい相を高速に発見

K. Terayama, R. Tamura, Y. Nose, H. Hiramatsu, H. Hosono,
Y. Okuno, and K. Tsuda,
Phys. Rev. Materials 3, 033802 (2019).

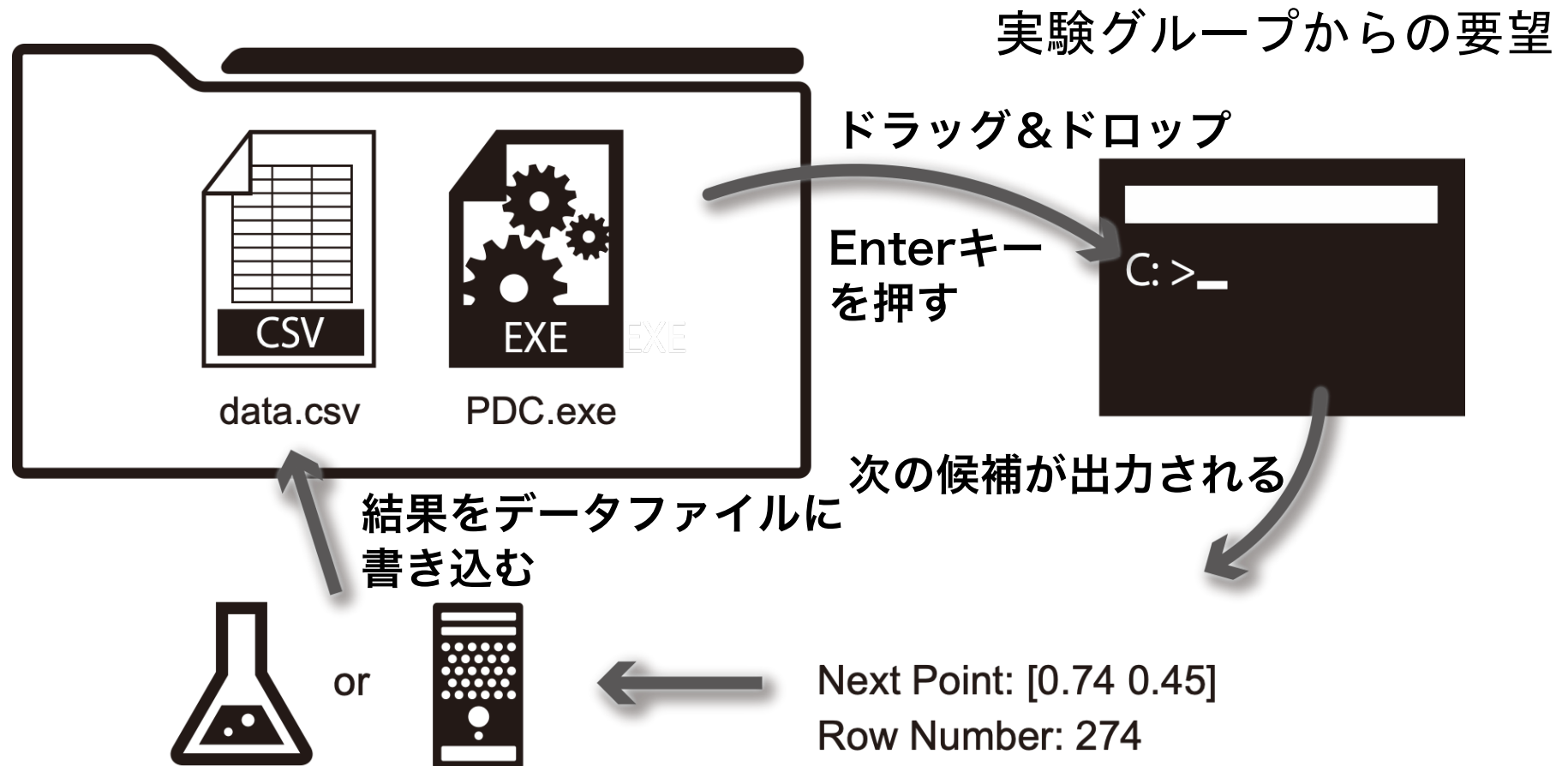
デモンストレーション



USを用いると、
相境界の近傍を
サンプリングする。
小さな相も見つける
ことができる。

Windowsでベイズ最適化, 相図作成

ベイズ最適化(COMBO), 相図作成効率化手法(PDC)を
PythonのインストールなしにWindowsで実行



K. Terayama, K. Tsuda, and R. Tamura,
Jpn. J. Appl. Phys. 58, 098001 (2019).

データファイルの用意

data.csv

1	相番号	温度	圧力	...
2		0.0	10	...
3	0 (固相)	0.2	9.7	...
4		0.4	9.4	...
5		0.6	9.1	...
6		0.8	8.8	...
7	1 (液相)	1.0	8.5	...
8		1.2	8.2	...
9	1 (液相)	1.4	7.9	...
10	0 (固相)	1.6	7.6	...
11		1.8	7.3	...
12		2.0	7.0	...
13	0 (固相)	2.2	6.7	...
14	⋮	⋮	⋮	

この空欄から、
次の候補が選択
される。

PDC.exe:
相の番号
(整数で入力)

候補の
↓
羅列

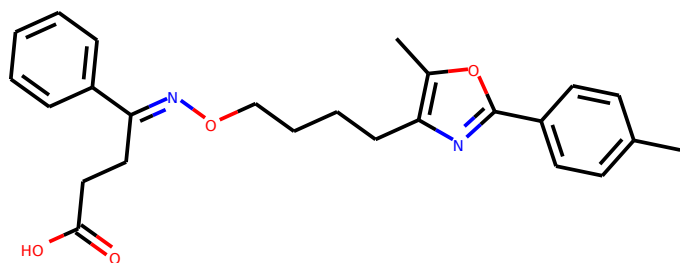
相図を描きたい
空間を用意

目的変数

説明変数(何次元でもOK)

新規化合物生成

機械学習(予測)



Properties:

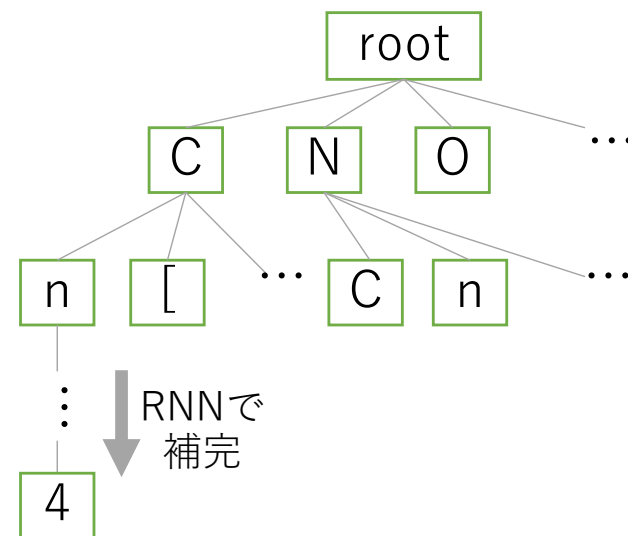
Binding Score
Bio Activity
ADMET

...

望ましい性質&
正しい(存在可能な)化合物の生成

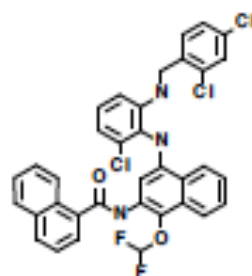
ChemTS: MCTS and RNN

- SMILES文字列の探索木
- 最初はRootのみ
- MCTSを用いて探索木を徐々に伸ばす
- 中間ノードは、SMILESのprefixに対応
- RNNを用いて完全なSMILESに補完する

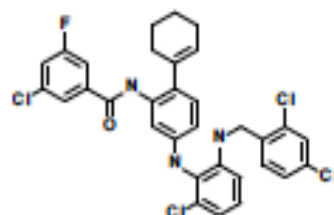


有効なSMILES生成の確率が高い(40%超)
高速な生成が可能

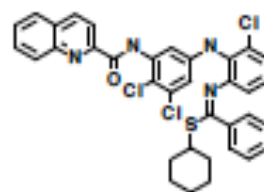
SMILES representation	<i>J</i>
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2Nc2ccc(Cl)cc2Cl)c2cccc2c1OC(F)F)c1cccc2ccccc12</chem>	6.56
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2Nc2ccc(Cl)cc2Cl)ccc1C1=CCCCC1)c1cc(F)cc(Cl)c1</chem>	6.43
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2N=C(SC2CCCCC2)c2cccc2)cc(Cl)c1Cl)c1ccc2ccccc2n1</chem>	6.34
<chem>O=C(Nc1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)ccc1Nc1cc(Cl)ccc1Cl)c1ccc(Cl)cc1</chem>	6.33
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2Cl)c(Cl)cc1Br)N(c1ccccc1)c1ccc(Cl)cc1</chem>	6.26
<chem>O=C(Nc1cc(Oc2c(Cl)cccc2Oc2ccc(-c3ccccc3)cc2)ccc1Cl)c1ccccc1</chem>	6.19
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2Cl)c(Cl)c(C(=O)N(Cc2ccccc2)c2cccc2)c1Cl)c1ccccc1F</chem>	6.08
<chem>O=C(Nc1cc(Oc2ccc(Cl)cc2Cl)cc(Cl)c1Cl)c1ncc1-c1ccc(Sc2ccccc2)cc1</chem>	6.007
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2Nc2ccc(Cl)cc2Cl)c2ncccc2c1Cl)c1ccc(Cl)cc1</chem>	6.0067
<chem>O=C(Nc1cc(Nc2c(Cl)cccc2Nc2ccc(Cl)cc2)c(Cl)cc1Cl)c1cc(F)ccc1Cl</chem>	6.0062



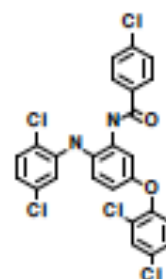
J = 6.56



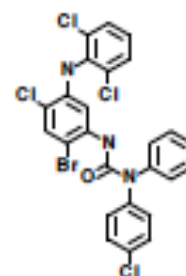
J = 6.43



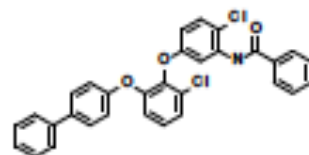
J = 6.34



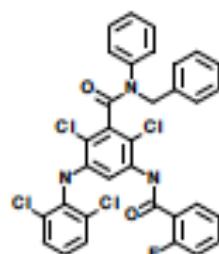
J = 6.33



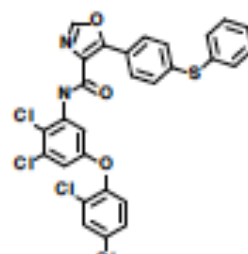
J = 6.26



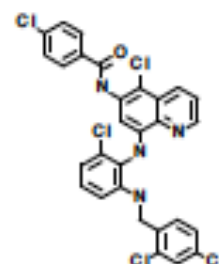
J = 6.19



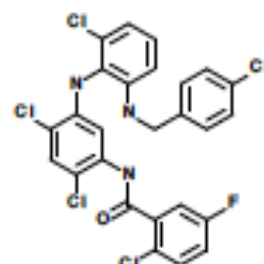
J = 6.08



J = 6.007



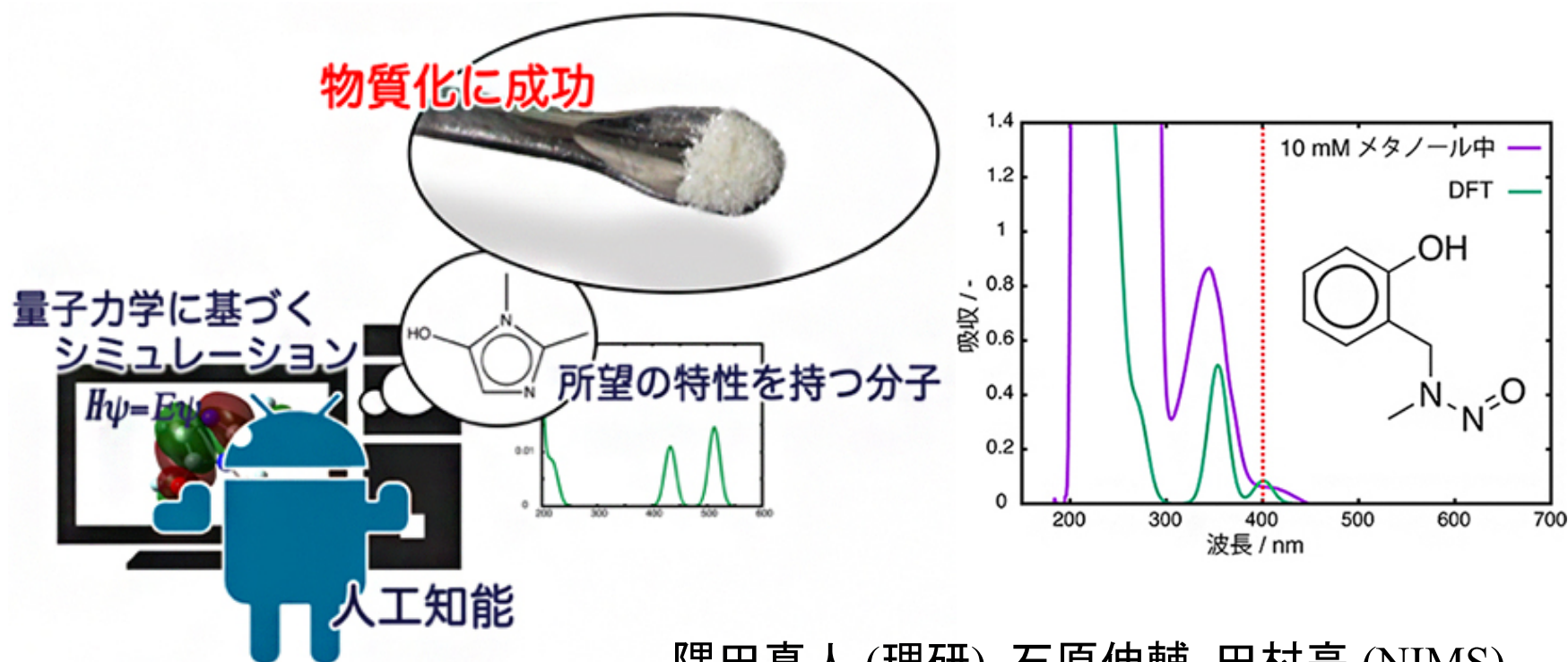
J = 6.0067



J = 6.0062

AIによる有機分子の設計とその実験的検証に成功 —有機エレクトロニクスなど機能性分子の設計に道筋— (2018.8.24 プレスリリース, ACS Cent Sci)

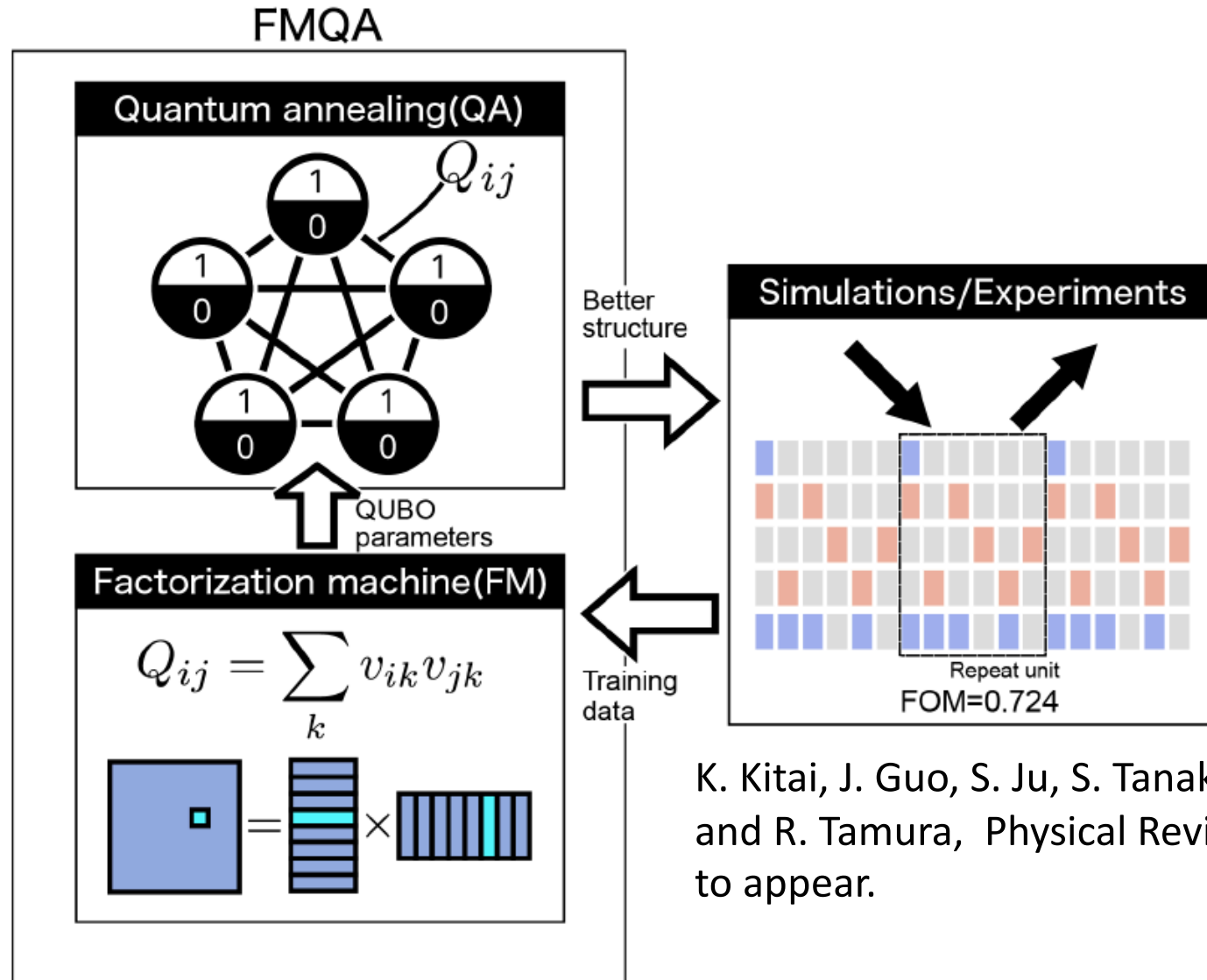
- 光の吸収波長をターゲットに、人工知能(AI)を用いて、所望の特性を持ちかつ合成可能な有機分子の設計に成功
- 「深層学習によるAI技術」と「量子力学に基づいた分子シミュレーション技術」の組み合わせ (ChemTS, STAM 2017)
- 数個の分子を実際に合成して所望の特性があることを確認



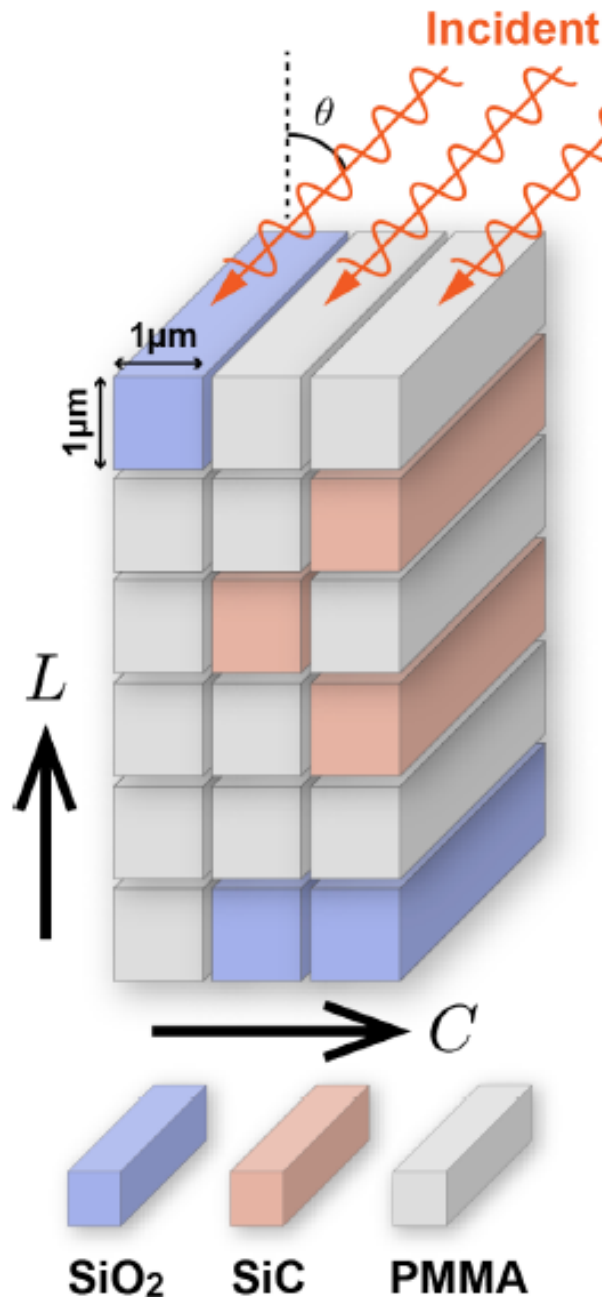
隅田真人 (理研), 石原伸輔, 田村亮 (NIMS)

量子アニーリングによる材料設計FMQA

<https://github.com/tsudalab/fmqa>



K. Kitai, J. Guo, S. Ju, S. Tanaka, K. Tsuda, J. Shiomi, and R. Tamura, Physical Review Research, 2020, to appear.



Designing even more complex thermal radiator

- Collection of quadrangular columns
- Three base materials: SiO_2 , SiC , PMMA
- Fit spectrum to atmospheric window
- Search Space Size : 3^{LC}

Quantum annealing



- Quadratic Unconstrained Binary Opt. (QUBO)

$$\min_{\mathbf{z} \in \{-1, 1\}^m} \sum_i h_i z_i + \sum_{i < j} g_{ij} z_i z_j$$

- D-wave 2000Q
 - Annealing time 170 μs , up to 64bits (dense)
 - Machine in Canada, used from Japan via API

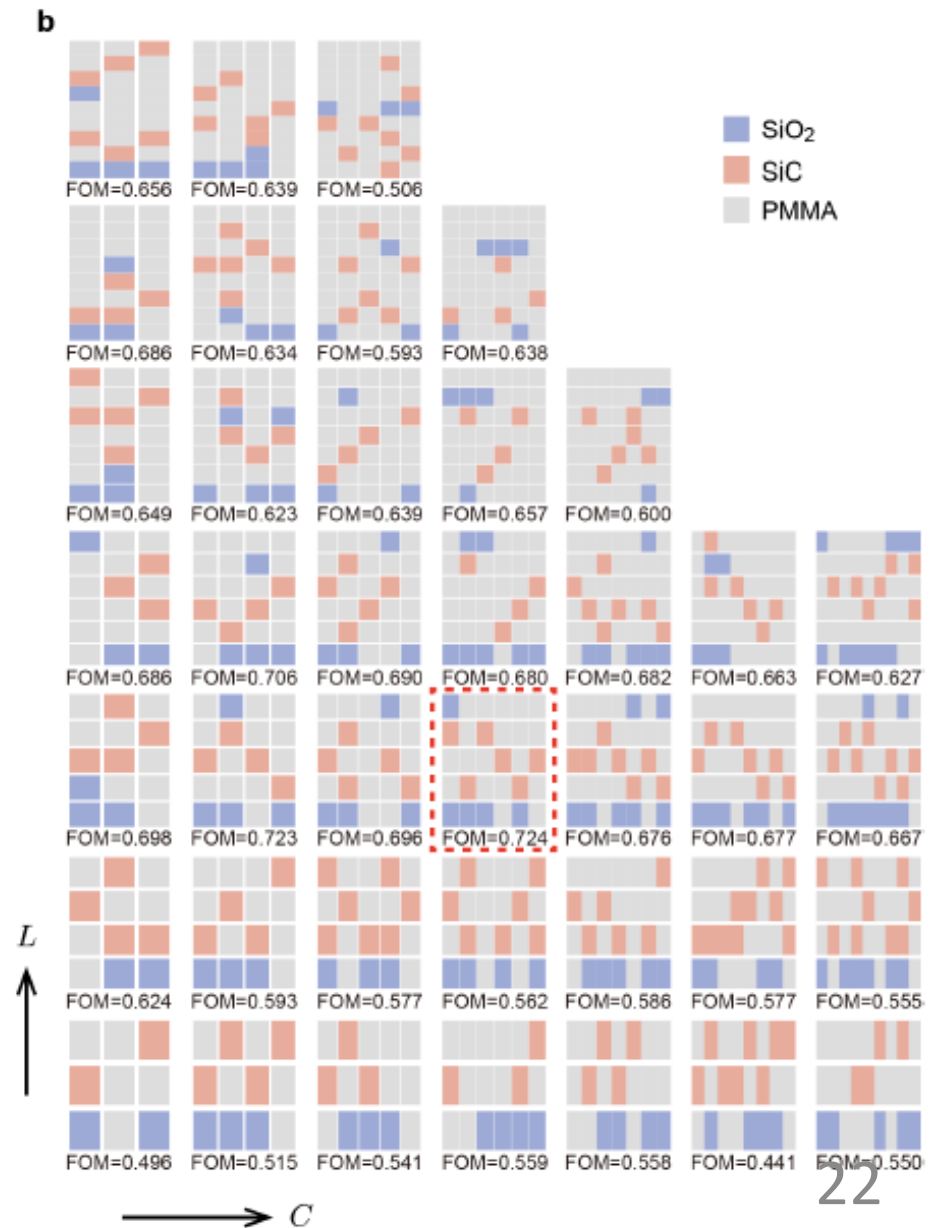
Using QA for black-box optimization

- Gaussian Process not compatible with QUBO
- **Factorization machine** (Rendle, 2010) as surrogate model

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N w_i x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^K v_{ik} v_{jk} x_i x_j,$$

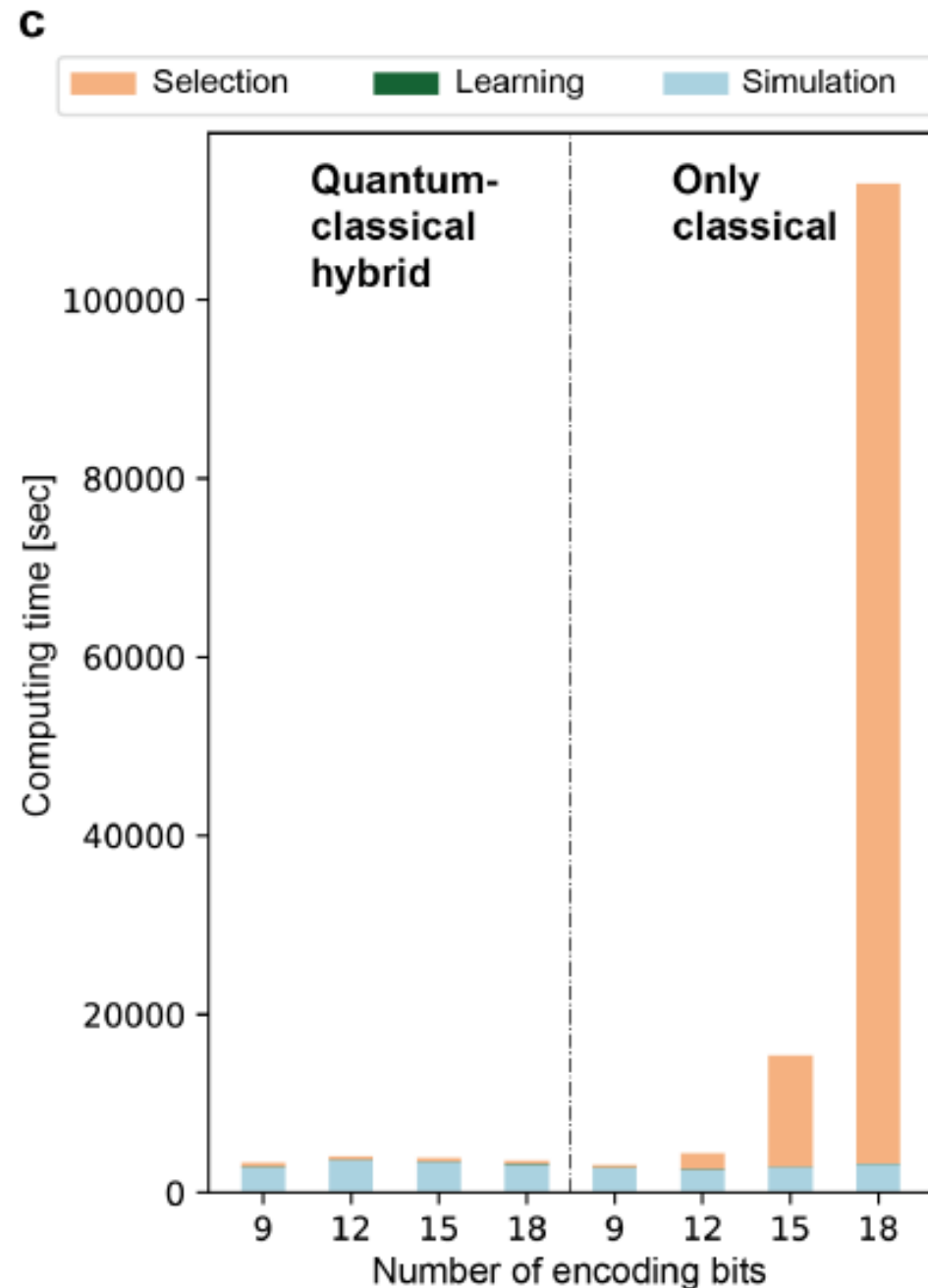
- Learn $\mathbf{v}, \mathbf{w}$ from training data, then optimize $\mathbf{x}$ with D-wave
- 50 annealing runs, take consensus

The best structure we found



Comparison with exhaustive search

- Simulation time
 - Spectrum computation
- Learning time
 - Factorization machine training
- Selection time
 - Finding the next structure to try



まとめ

- 機械学習による自動材料設計の研究は、この5年間で飛躍的に進展した
- 既存知識に基づいて、人間が設計すると似たようなものばかりができるという閉塞感打破
- 今後は、実験機器をAI対応する必要
 - 多種多様な材料を高速に試作、評価できる
 - ロボットなどを用いて、人間の介入なしにメンテナンス可能