

第8回ナノテクノロジー・材料科学技術委員会
2022年11月24日

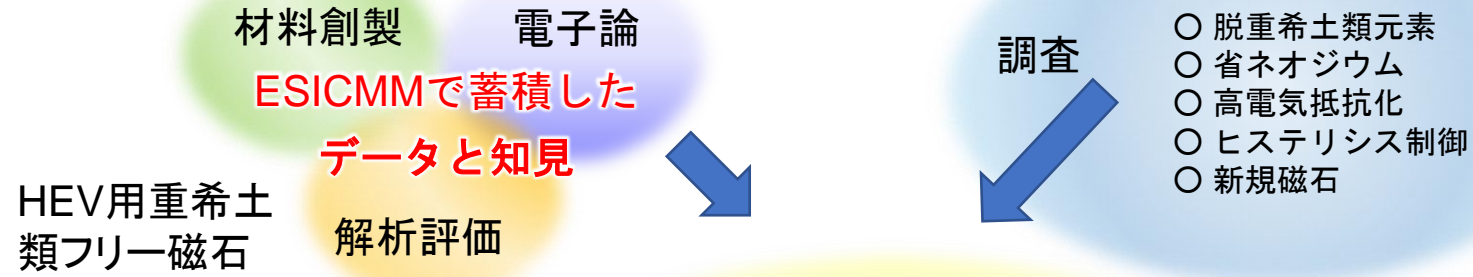
データ創出・活用型磁性材料研究拠点

Digital Transformation Initiative Center for Magnetic Materials (DXMag)

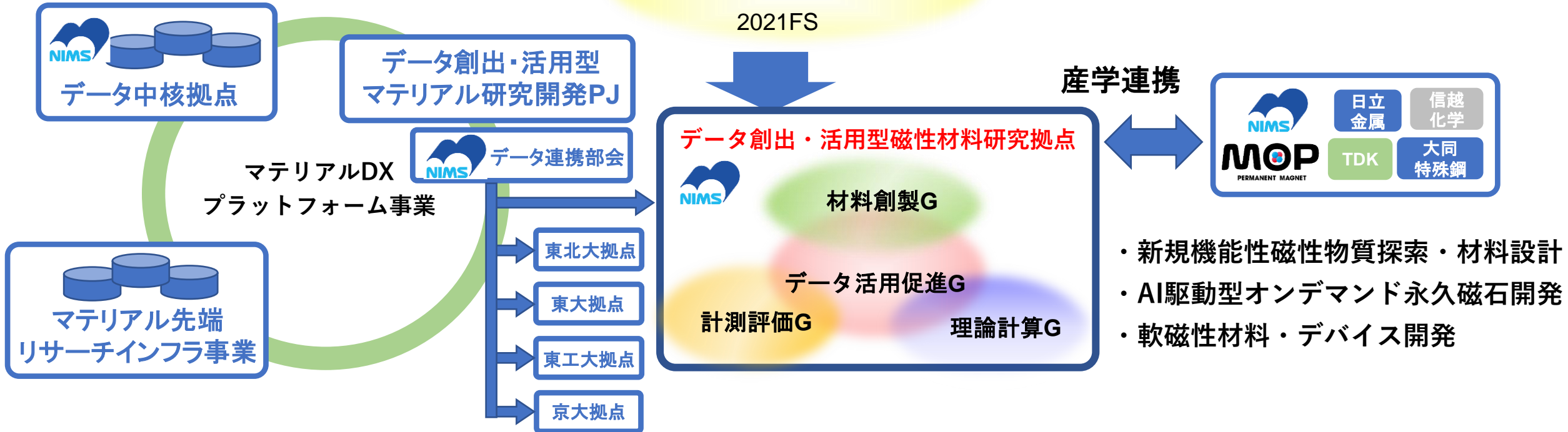
研究代表者：国立研究開発法人物質・材料研究機構 大久保 忠勝



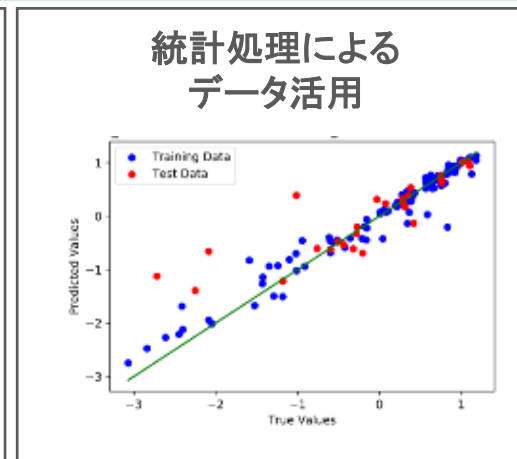
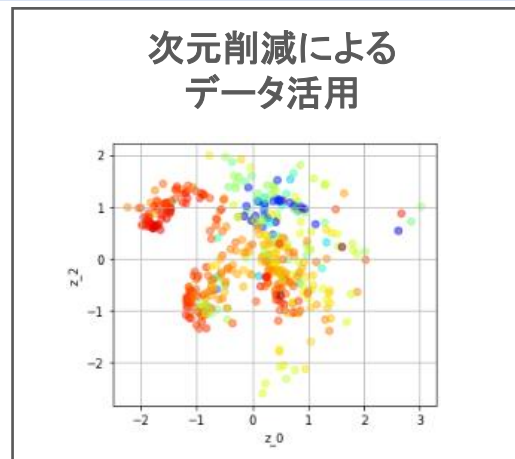
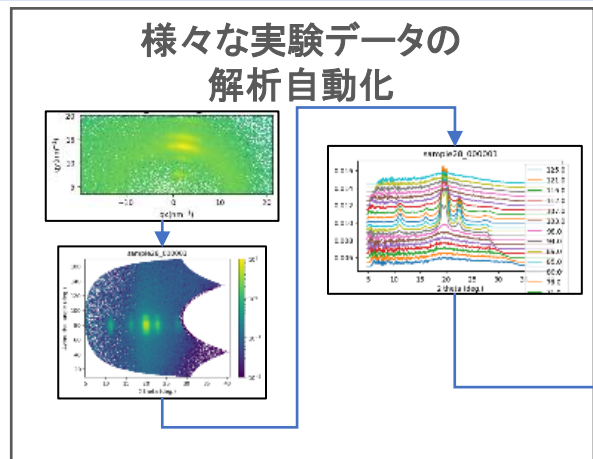
元素戦略磁性材料研究拠点 2009 -2021年度 10年後の磁性材料ニーズ



データ駆動型研究戦略の立案



産業界と連携し10年後の新規用途に対応できる磁性材料開発をデータ駆動型材料開発手法導入により加速、先導



実験

データの創出

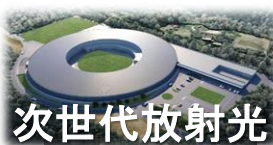
データの蓄積

データの活用

・磁性デバイス
・永久磁石
・軟磁性材料
実験へのfeed back !

大規模施設活用

SPring8

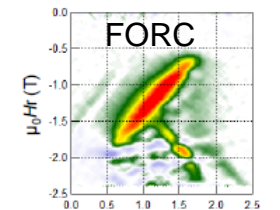


次世代放射光



J-PARC

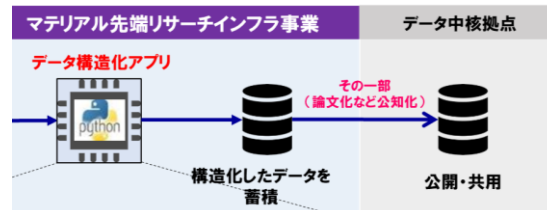
先端計測活用



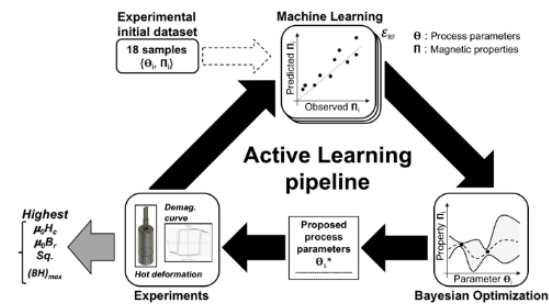
3DAP



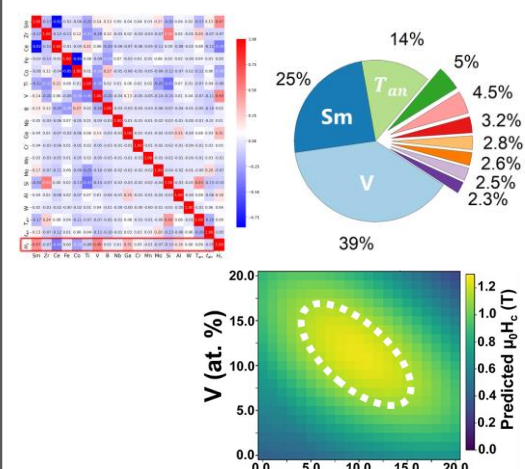
Sample name	Composition (at.%)					N-W Gap	Wheel speed	GK-W Gap	GK Ar Pressure	N Ar Pressure	Ar Purge	Cast Temp.
	Fe	P	Si	C	B							
CG02-13	83.3	7.0	1.0	0.0	8.0	0.25	2000	0.3	0.2	0.03	10	1150
CG02-14	83.3	6.0	2.0	0.0	8.0	0.25	2000	0.3	0.2	0.03	10	1150
CG02-15	83.3	5.0	3.0	0.0	8.0	0.25	2000	0.3	0.2	0.03	10	1150
CG02-16	83.3	4.0	4.0	0.0	8.0	0.25	2000	0.3	0.2	0.03	10	1150
G002-17	83.3	3.0	5.0	0.0	8.0	0.25	2000	0.3	0.2	0.03	10	1150



アクティブラーニング手法の簡易利用

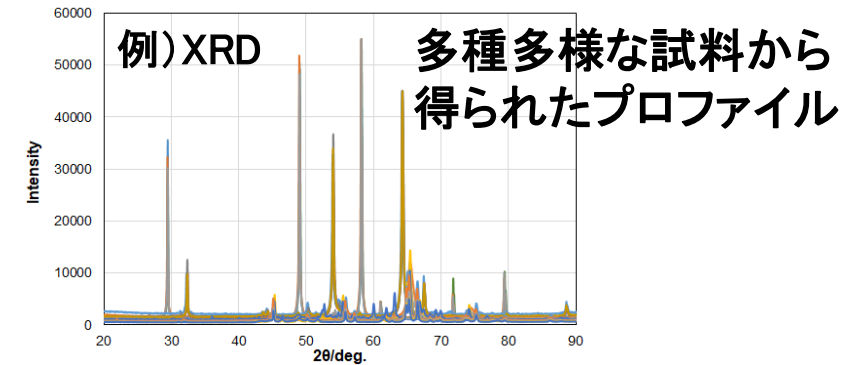


マテリアルズインフォマティクス

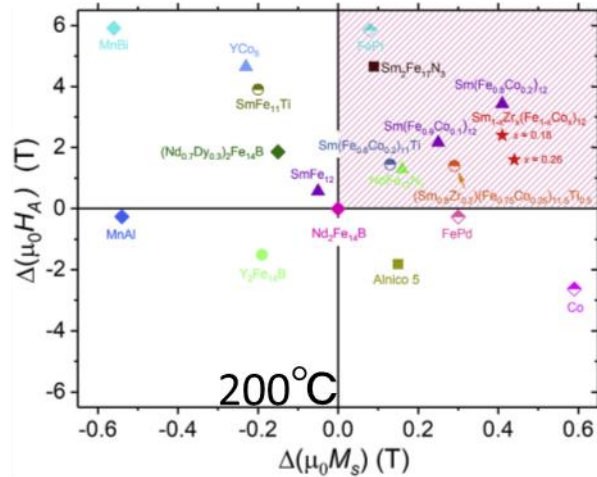


課題: マルチスケール、多種・多様なデータを、どのように機械学習で活用するのか

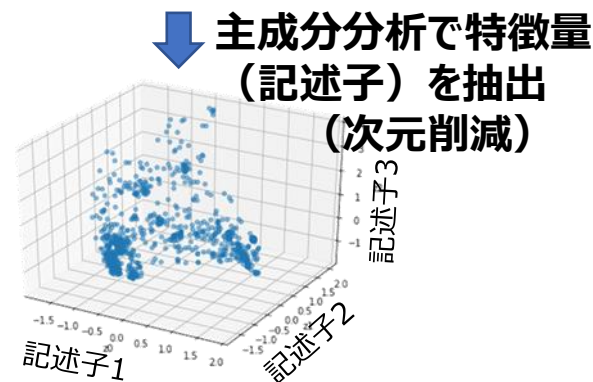
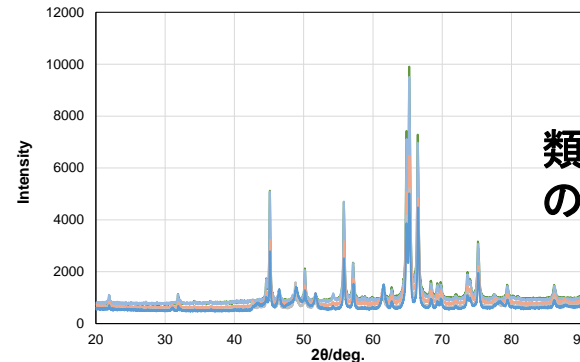
ID	組成	プロセス	M_S	H_A	T_C	DOS	SEM	XRD		
								特徴量1	特徴量2	特徴量3
1	76.0	600	0.4	5.3	310			0.28	0.67	0.21
2	78.0	550	0.3	5.0	320			0.30	0.58	0.19
3	74.0	550	0.5	6.1	305			0.42	0.71	0.17
4	75.0	450	0.3	4.3	303			0.34	0.69	0.15
⋮										



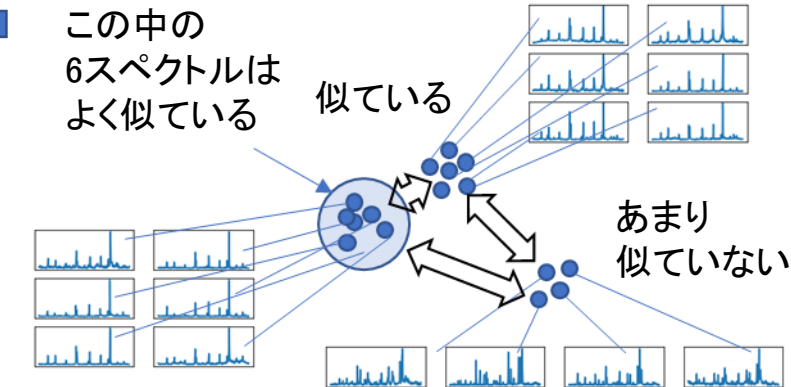
従来:



様々な磁石化合物の磁化と異方性磁場。
温度200°Cの実験データ。



スペクトルの類似性をマップ化 (UMAP, t-SNE...)



どのような種類のデータでも一元的に蓄積 ⇒ 機械学習可能

DFT
XRD ...

特徴量

サンプル名	永久磁石 データ						
		軟磁性 データ					
			...				

① 共通するデータを抽出

② 共通する計測・
計算データを利用

1. 拠点内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。

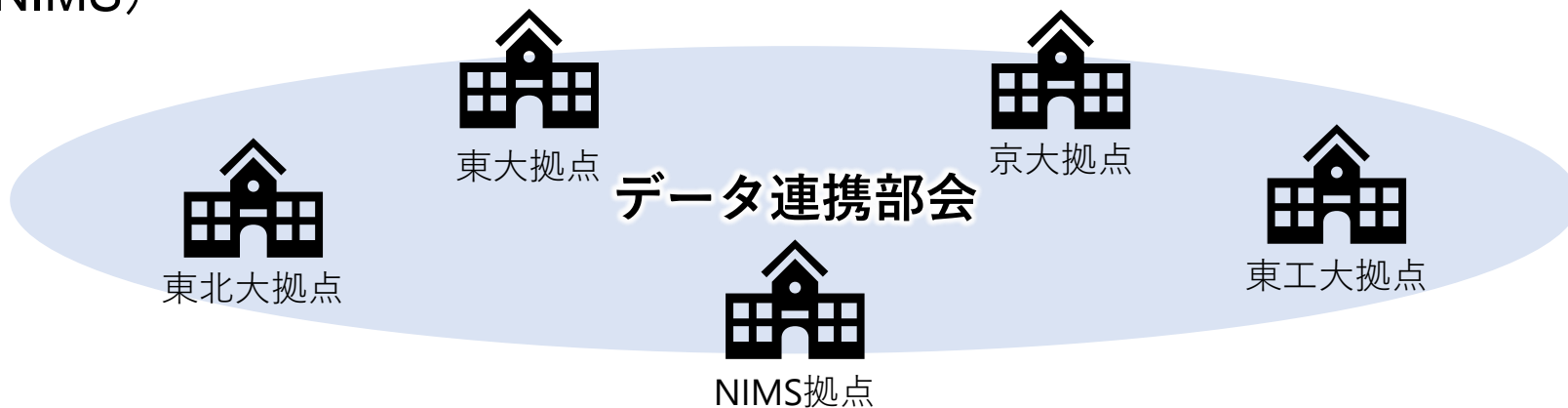
2. 個別データ間の関連性を考慮していないため、非対角成分にデータが無く、データ解析ができない。

3. 非対角成分にデータを与えるため、
① 個別データ間で共通するデータを抽出する。(データの共通リスト化)
② 個別データ間で共通する計測手法や計算データを利用する。

⇒大量に蓄積される、異なる性質のデータを利用した解析の実施が可能に。

拠点の全データを融合させたテーブル

責任者：出村 雅彦(NIMS)



中核機関
(NIMS)
の
役割

5拠点と連携して以下の業務を実施する：

- **データ連携部会の運営**：プログラム運営委員会の方針の下、運営
- **共通課題に対する技術開発・支援**：共通技術課題を抽出し、技術開発・支援を実施。拠点間に横展開するとともに、広く共用化して、日本全国の研究力向上に貢献
- **データ駆動人材育成**：セミナー・講習会・素材開発
- **事業広報**：データ駆動型材料研究の有効性をアピール
- **関連事業連携**：データ中核拠点、ARIM、HPC・大型設備等

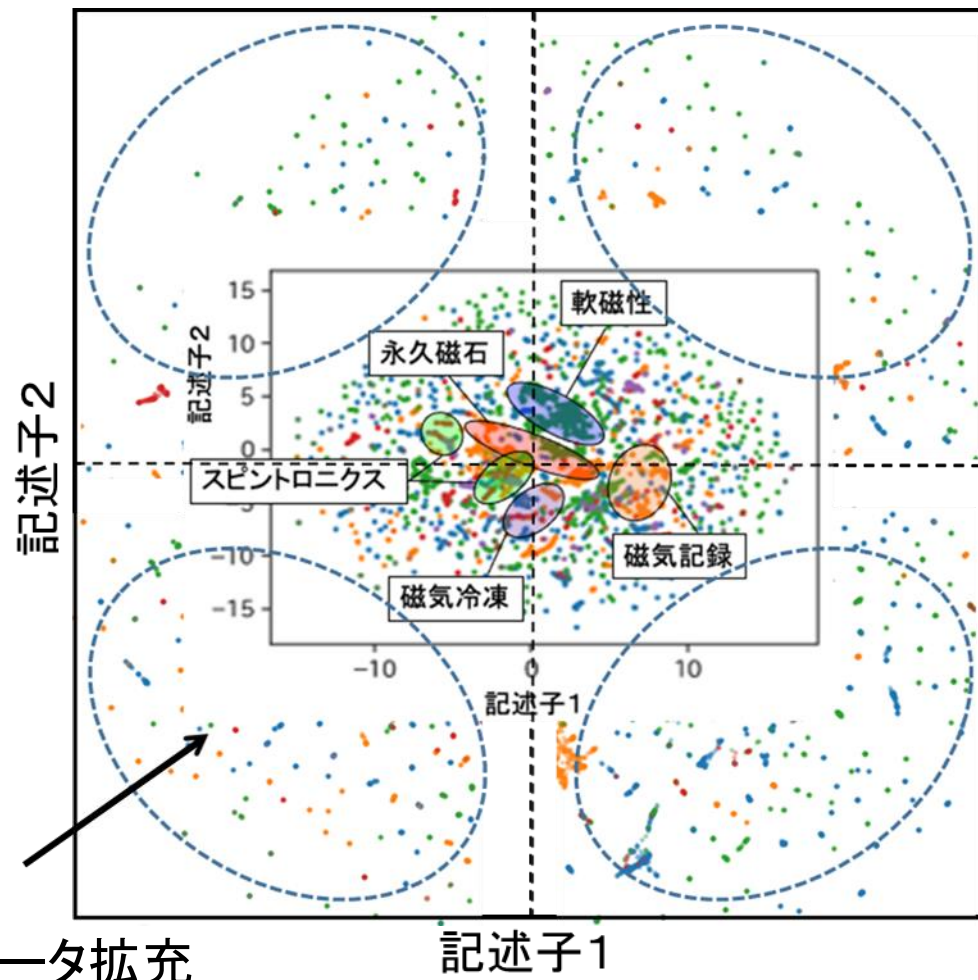
再委託

連携機関
(東大物性研)

- 計算・データ基盤の技術開発
- 事業広報の一部
- HPC、大型設備連携

PL: 三宅隆 (産総研)

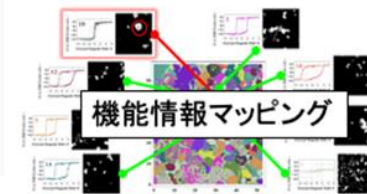
磁性材料の類似性を表現する磁性材料マップ



実験によるデータ拡充



マルチモーダル計測・自動解析手法



シミュレーションによるデータ拡充

計算量up

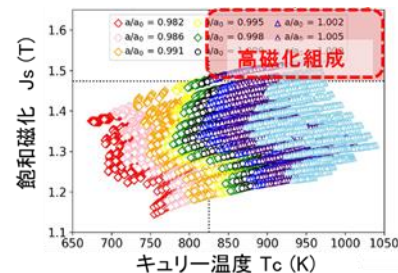
スパコン 富岳



計算速度up

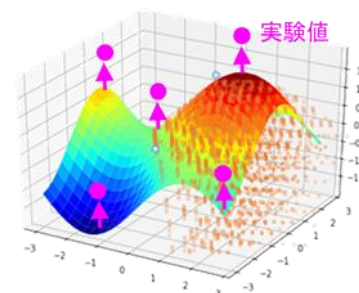
東大物性研開発

KKR-CPA法



データ同化

(精度補正)

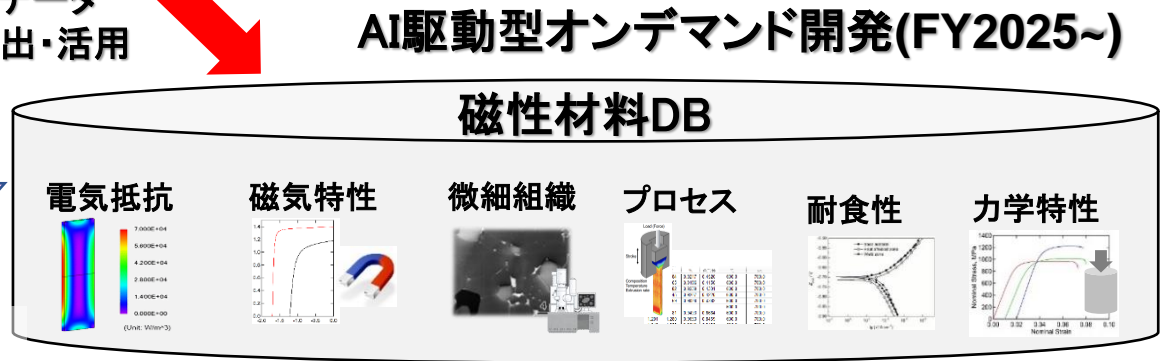
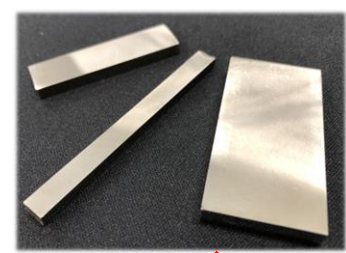
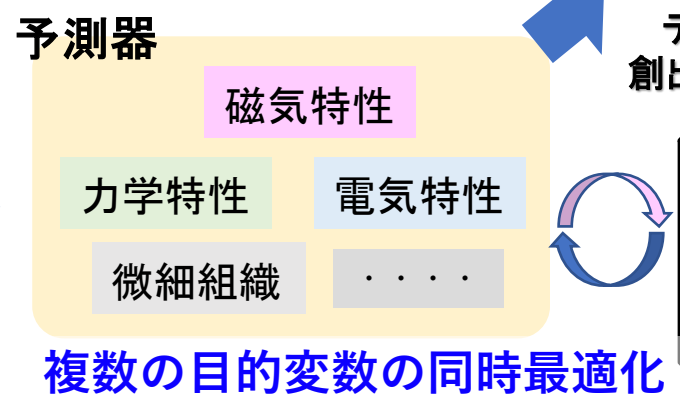
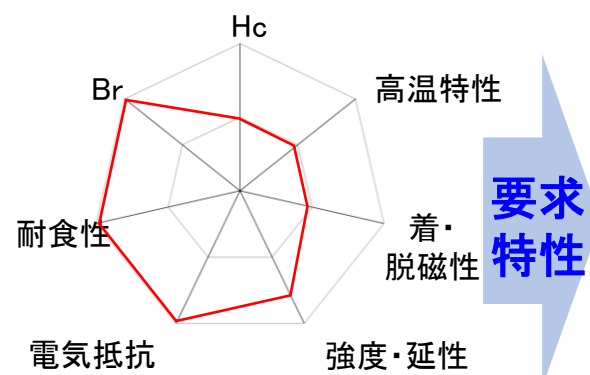
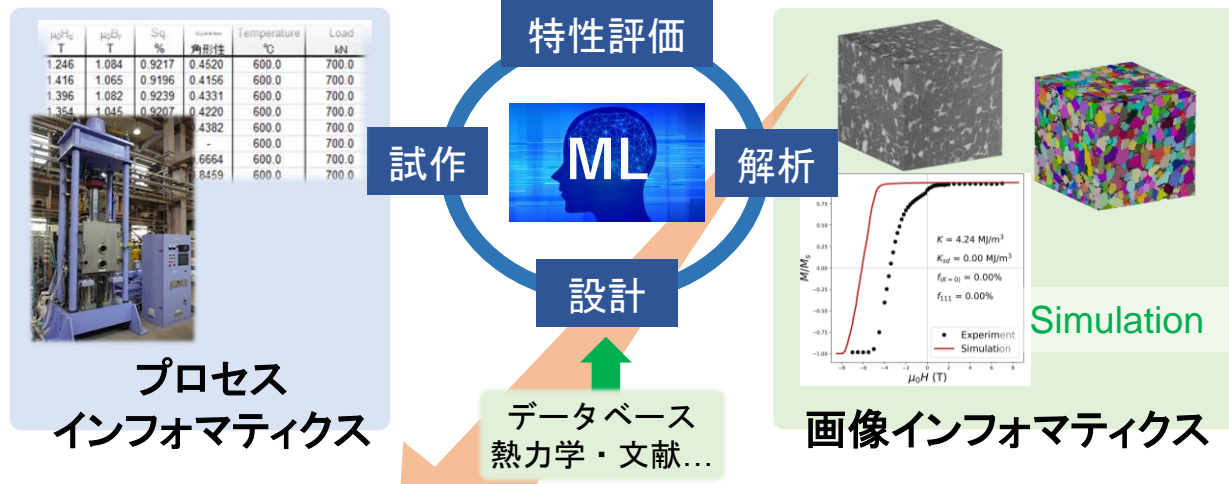
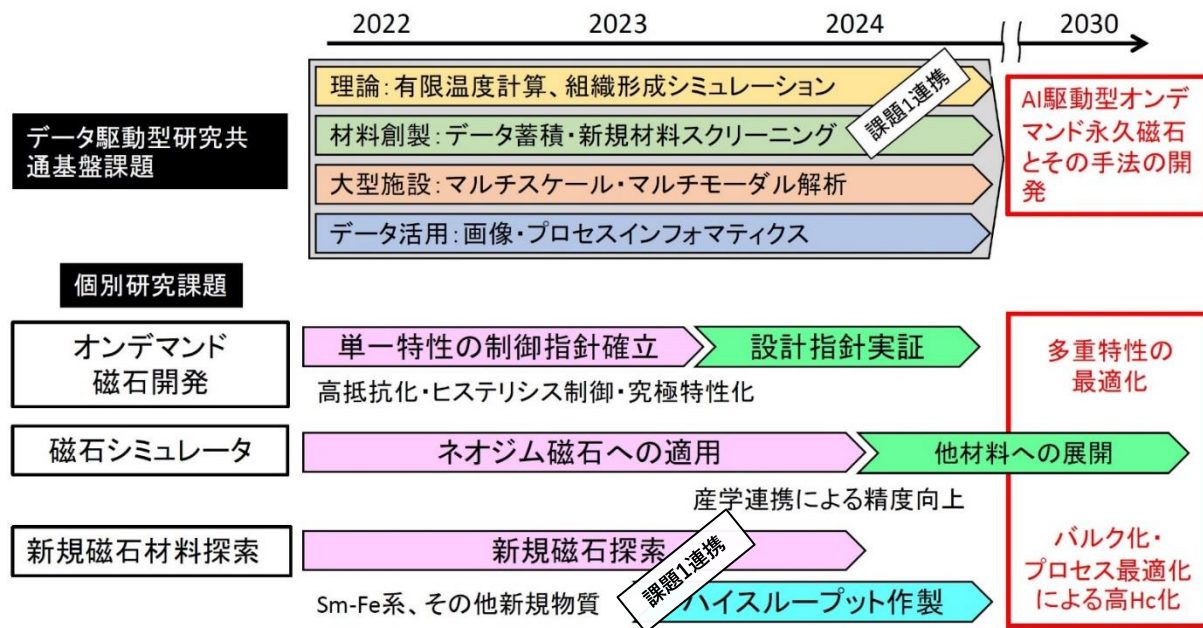


富岳を活用しデータを大量に蓄積 ⇒ データ同化で精度補正
1週間で1万組成程度の第一原理計算が可能 (普通にやると1年以上)

磁性材料マップを拡張することで新たなデータ空間が創出され、
拡張した領域での内挿により新規磁性物質創出につなげる

PL: 高橋有紀子 (NIMS)

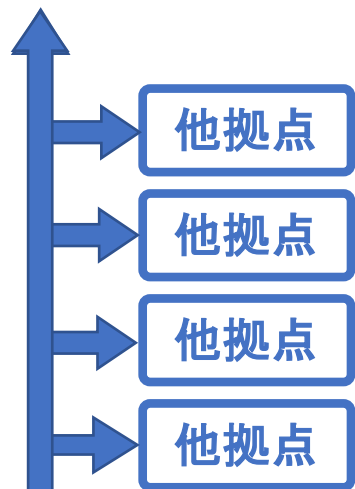
データ駆動型磁石シミュレータ (~FY2024)



「データ駆動型磁石シミュレータ」を開発し、AI駆動型オンデマンド永久磁石開発を推進

データ中核拠点

データ連携部会



データ創出・活用型磁性材料研究拠点

サンプル名	特徴量		DFT	XRD	...
	永久磁石データ	軟磁性データ			
	① 共通するデータを抽出				
		② 共通する計測・計算データを利用			
	...				

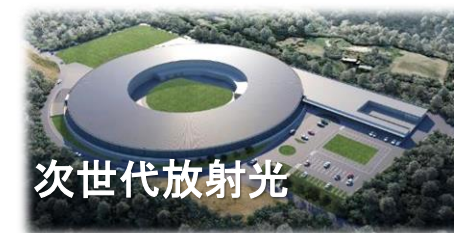
データ創出・活用

新規磁性物質

磁石

軟磁性材料

マテリアル先端
リサーチインフラ事業



10年後の新規用途に対応できる磁性材料開発をデータ駆動型材料開発手法導入により加速、先導