

## 説明可能 AI による熱電材料開発

P58

Thermoelectric materials development by explainable AI

岩崎悠真 iwasakiyuma@nec.com

NEC 中央研究所

AI 囲碁(AlphaGo)や AI 将棋(Ponanza)等による AI ブームの影響から、材料開発の分野でも AI(機械学習)技術を用いた取り組みが盛んにおこなわれている。このような技術領域は、マテリアルズ・インフォマティクスと呼ばれる。

囲碁や将棋などの分野において、機械学習はすでに人間を超越した存在となっているが、材料開発の分野では、これらの領域とは異なり『機械学習さえあればそれでよい』という状態ではない。それは、材料開発で解かなければならない問題は、囲碁・将棋のようなボードゲームで解かなければならない問題に比べてはるかに複雑だからである。そのため、材料開発分野においては、『機械学習と科学者の協創』が非常に重要となる。

しかし、現在この『機械学習と科学者の協創』は非常に限定的なものとなっている。その理由の一つに、機械学習の『ブラックボックス化』が挙げられる。深層学習(ディープラーニング)など性能が良いとされている機械学習モデルの多くはブラックボックスになっており、人間がこのモデルの中を覗き込んだ時に、中がどうなっているか分りにくい。これが、材料開発において『機械学習と科学者の協創』を阻む原因の一つである。もし、機械学習モデルをホワイトボックス化し、科学者がこのモデルの中身を材料学/物理学の知見に基づいて考察することができれば、より多くの情報を機械学習モデルから取得することができ、材料開発がより一層加速するはずである。そのための AI 技術の一つが、説明可能 AI (Explainable AI) である。

本発表では、説明可能 AI の一つである Factorized Asymptotic Bayesian Inference Hierarchical Mixture of Experts (FAB/HMEs, [1])を用いて、異常ネルンスト効果を用いた熱電材料(異常ネルンスト材料, [2])の開発事例を述べる。この FAB/HMEs は、材料開発に適した機械学習の一つであると考えられる。その理由を 3 つ挙げる。1 つ目は機械学習の『説明可能性』である。人間が機械学習モデルの中を見ながら、材料学/物理学の知見を基にして議論することで、材料開発における様々な情報やヒントを得ることができる。2 つ目は『少数データ対応』である。材料データは少量であることが多く、ほとんどの場合、対象とする材料空間に対してスパース(疎)に分布している。そのためこの材料データのスパース性を活用し、自動的に記述子を選択する(対象の材料空間を狭める)ことができる機械学習は、材料開発において非常に便利である。3 つ目は『非線形現象の表現力』が挙げられる。非線形の現象(飽和、相転移, etc.)をフレキ

シブルに記述できる表現力は、正確な機械学習モデルを構築するために重要である。

これら 3 要素を下記のベン図にまとめた。例えば、『少数データ対応』と『説明可能性』を兼ね備える LASSO は、基本的に線形モデルであるため『非線形現象の表現力』には乏しい。一方、高い『非線形現象の表現力』を誇るディープラーニングは、『説明可能性』に欠ける。先の FAB/HMEs は、この 3 要素を備えており、ベン図の中心に位置することができる機械学習技術の一つである。

我々のグループは、この説明可能 AI にコンビナトリアル実験技術とハイスループット第一原理計算技術を組み合わせることで、高熱電効率の異常ネルンスト材料を発見した[3]。

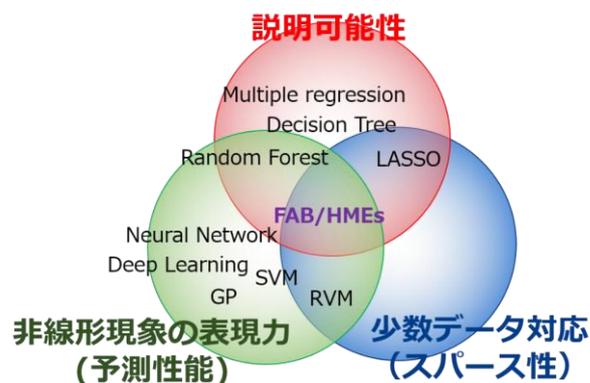


図 説明可能 AI (FAB/HMEs)

#### 【関連プロジェクト】

- ・JST-さきがけ 理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤構築
- ・JST-ERATO 斎藤スピン量子整流

#### 【参考文献】(最大3本)

- [1] R. Eto et al. Fully-Automatic Bayesian Piecewise Sparse Linear Models. in AISTAT (2014)
- [2] Y. Sakuraba et al. Anomalous Nernst Effect in L10-FePt/MnGa Thermopile for New Thermoelectric Applications. Applied Physics Express 6, 033003 (2013)
- [3] Y. Iwasaki et al. Identification of advanced spin-driven thermoelectric materials via interpretable machine learning. npj Comput. Mater. 5, 103 (2019)