

機械学習による遷移金属二元合金の磁化予測

金村卓郎¹, 白井正文^{1,2}

(¹ 東北大学 電気通信研究所, ² 東北大学 スピントロニクス学術連携研究教育センター)

Prediction of the magnetization in transition-metal binary alloys by means of machine learning

T. Kanemura¹, M. Shirai^{1,2}

(¹ RIEC, Tohoku Univ., ² CSRN, Tohoku Univ.)

はじめに

材料科学と情報工学の融合領域であるマテリアルズ・インフォマティクス¹⁾は、複雑化・多様化する現在の材料探索に大きな貢献をすると期待されている。マテリアルズ・インフォマティクスは、材料の構造や物特性に関するデータを整理し、情報科学に基づいて解析することで、新たな知見を得ようという試みである。

本研究では、機械学習による磁性材料の効率的な探索が可能であることを検証するため、遷移金属二元合金の磁化を予測する機械学習のモデルを構築した。機械学習により予測された磁化の値をデータベースに収録された値と比較することで機械学習の実効性を定量的に評価した。

解析方法

本研究では、データベース Materials Project²⁾に収録された 1,106 種の遷移金属二元合金の物性値を利用して、ニューラルネットワークに基づいた機械学習手法を用いた。データ解析のための言語として Python2.7 を、モジュールには tensorflow³⁾を使用した。

解析結果

データベースから抽出した 995 種の二元合金の物性値を学習データとして機械学習により予測された 111 種の二元合金の磁化の値をデータベースに収録された磁化の値と比較した (Fig. 1 参照)。予測値は実際の値とよい相関 (相関係数: 0.879) を示しており、機械学習の実効性を確認できた。また、学習データの増加と共に機械学習の予測精度が良くなる傾向がある。次に、3d 遷移金属二元合金について磁化の組成比依存性を予測したところ、Fig. 2 に示すように Slater-Pauling 曲線⁴⁾を正しく再現した。

参考文献

- 1) Krishna Rajan, Mater. Today 8 (10), 38 (2005).
- 2) A. Jain, *et al.*, APL Mater. 1, 011002 (2013)
- 3) Mart'ın Abadi, *et al.*, TensorFlow™: Software available from tensorflow.org. (2015)
- 4) J. C. Slater, J. Appl. Phys. 8, 385 (1937).

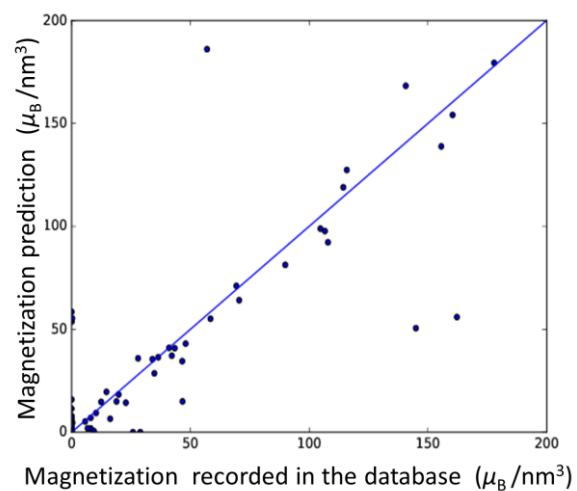


Fig. 1 The correlation between the magnetization predicted by machine learning and that recorded in the database for transition-metal binary alloys.

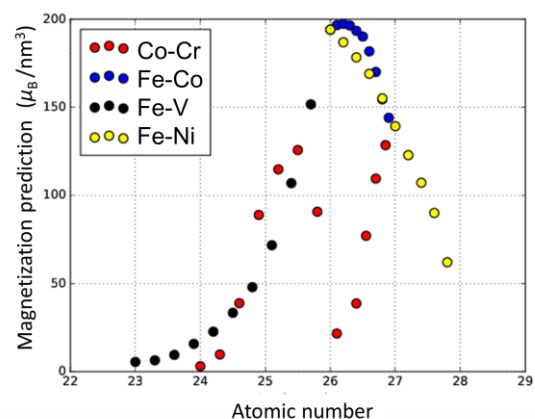


Fig. 2 The magnetization predicted by machine learning for 3d transition-metal binary alloys as a function of averaged atomic number.