

データ統合型材料物性研究部門

Division of Data-Integrated Materials Science

昨今、機械学習が社会的にも大きな注目を集めている。機械学習の物質科学研究への応用の可能性も盛んに研究されており、多くの有望な結果が報告されている。背景には、この考え方が、基礎科学の産業応用を加速させるうえでのカギとなるという期待感がある。当部門では、実験と数値計算をデータ科学的手法によって統合し、電子相関の理解に基づいて、革新的な機能を持つ材料の物性予測・探索手法を開発することを目的としている。実験結果と数値計算結果の単純な比較や実験の理論計算による解釈にとどまらず、両者を同時に用いることによって、実験・数値計算それぞれ単独ではなしえない成果を挙げることを目指している。これによって、スピントロニクス材料、超伝導材料などの探索を進めている。

Recently, machine learning has attracted a lot of social attention. The possibility of applying machine learning techniques to material science research is also actively studied, and many promising and interesting results have been reported. The expectation is that this idea, which is called materials informatics, will be the key to accelerating the industrial application of basic science. The division aims at developing new methods for prediction of physical properties of innovative materials, based on the understanding of electron correlation, by integrating experiments and numerical calculations through data-scientific approaches. While conventionally we have been comparing experimental results with numerical ones, interpreting the former by the latter, the new goal is to achieve something that cannot be done by experiment or numerical calculation alone, by using both of them simultaneously. In this way, we are efficiently searching for a wide variety of new functional materials, such as spintronic materials and superconductors.

乾研究室

Inui Group

研究テーマ Research Subjects

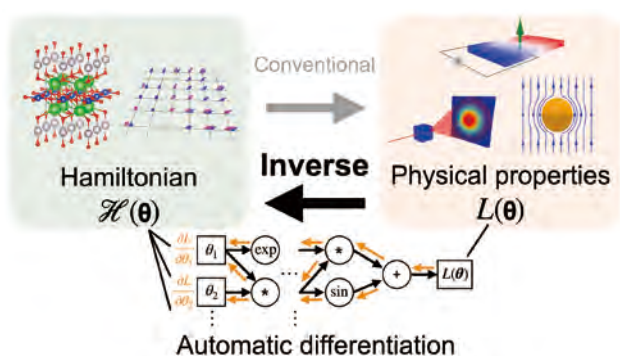
- 1 目的の性質を持つ物質や条件の逆設計手法の開発
Developing inverse design methods to create materials and conditions with specific desired properties
- 2 大量のパラメータを用いた高速なデータ同化
Fast data assimilation with large number of parameters
- 3 物性物理における数値計算研究
Numerical Studies in Condensed Matter Physics



特任准教授 乾 幸地
Project Associate Professor INUI, Koji

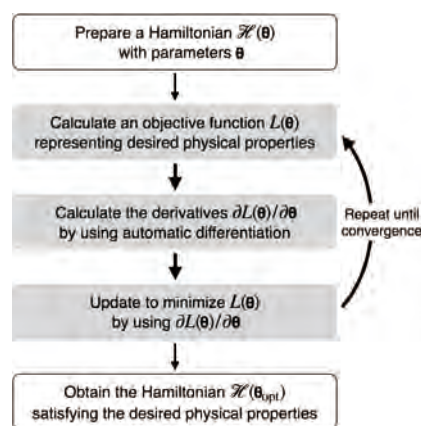
我々は逆解析・逆設計手法の開発に取り組んでいる。一般的な計算科学による物質研究では、特定の物質や条件に対して少数のパラメータを変えながらシミュレーションを実行し、こういったパラメータにおいてほしい状態が実現するのを探る。しかしながら、こういった方法では、事前に人が条件を絞り込む必要があるため、新規な物質や状態を見つけることは難しい。本研究室では、逆解析・逆設計を用いたアプローチによって、先にほしい性質を決め、それが実現する系を求める手法の開発を行っている。特に、機械学習でよく使われている自動微分による大量のパラメータの制御を用いた研究に力を入れている。こういった逆解析・逆設計を用いることによって、これまで人間が想定出来なかったような新しい物質やメカニズムの発見を目指して研究を進めている。

In our laboratory, we are pioneering the development of inverse analysis and design methods for computational materials research. Traditional approaches typically involve simulations with a limited set of parameters for specific substances or conditions, focusing on identifying parameter regions that achieve desired states. However, this method often falls short in discovering novel substances and states due to its reliance on predefined conditions. To overcome these limitations, we employ inverse design techniques. These begin by defining the desired properties and then identifying systems that can realize these properties. A key aspect of our research is the use of automatic differentiation, a powerful tool frequently utilized in machine learning, which allows for the control of a large number of parameters. By integrating inverse analysis and design, we aim to uncover new substances and mechanisms previously unexplored. This innovative approach holds the potential to revolutionize the field by enabling the discovery of groundbreaking materials and processes.



目的とする物性からそれを実現するモデルを構築する逆問題における手法の概念図。目的の物性を表す関数 L を最適化するように、モデル中の変数 θ を自動微分を用いて最適化します。

Schematic illustration of the method to solve the inverse problem of constructing a model that achieves the desired physical properties. The parameters θ in the model are optimized using automatic differentiation so as to optimize the function L that represents the desired physical property.



自動微分を用いた逆設計アルゴリズムのフローチャート。

Flowchart of the inverse design algorithm by using automatic differentiation.

