

機械学習を用いた伝熱制御材料の設計と開発 (マテリアルズインフォマティクス実践)

物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門
情報統合型物質・材料研究拠点 データプラットフォーム

徐一斌

これまでの研究背景

物質・材料データベース

ミクロ、ナノスケール材料熱伝導特性



国立研究開発法人 物質・材料研究機構 が発信する

【お知らせ】アカウントの停止について

「MatNaviサービス利用規約」に違反を行ったとき、または違反した可能性があるとき、事前に登録者に通知または事前同意を得ることなく、MatNaviで提供しているサービスの使用を停止することがあります。

データベース

基礎物性

- ▶ 高分子データベース (PolyInfo)
- ▶ 無機材料データベース (AtomWork)
- ▶ 計算状態データベース (CPDDB)
- ▶ 電子構造計算データベース (CompES-X)
- ▶ 放射性物質の除去・回収技術のためのデータベース (READS)
- ▶ 中性子反応データベース (NeuTran)
- ▶ 界面熱伝達率データベース (ITC)
- ▶ 拡散データベース (Kakusan)
- ▶ 超伝導材料データベース (SuperCon)

NIMS構造材料データシート オンライン

- ▶ クリブデータシート (CDS)
- ▶ 疲労データシート (FDS)
- ▶ 腐食データシート (CoDS)
- ▶ 宇宙関連材料強度データシート (SDS)
- ▶ データシート資料集
- ▶ 金属組織データベース (Kinso)

[印刷物の問い合わせ](#)

エンジニアリング

- ▶ 金属材料データベース (Kinzoku)
- ▶ CCT線図データベース (CCTD)
- ▶ 触媒機能材料データベース (FGMs)

アプリケーションシステム

- ▶ 複合材料熱物性予測システム (CompoTherm)
- ▶ 高分子物性推算システム
- ▶ 金属腐食予測システム (SurfSeg)
- ▶ 界面結合予測システム (InterChemBond)
- ▶ 溶接熱履歴シミュレーション

NIMSからの材料情報

- ▶ 物質・材料研究機構(NIMS)
- ▶ Nanotech Japan

連携機関

- ▶ Matdata.net(Granta Design)
- ▶ MatWeb(Automation Creations Inc.)

ユーザ

新規ユーザ:

MatNaviの利用は無料ですが、ユーザ登録が必要です。(登録・検索・閲覧 無料)

- ▶ [新規ユーザ登録](#) [初めての方へ](#)

登録ユーザ:

利用するデータベースを選択し、各ページの「利用開始」からログインしてください。登録したE-mailアドレスとパスワードが必要です。

- ▶ [パスワードを忘れた方](#) ▶ [退会](#)
- ▶ [登録情報変更](#)

MatNavi Search

MatNavi Search

English only

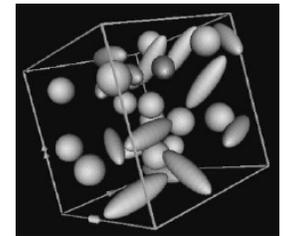
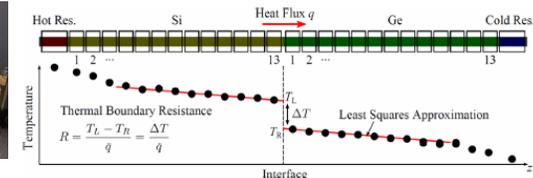
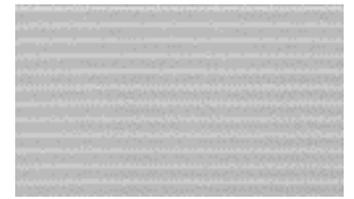
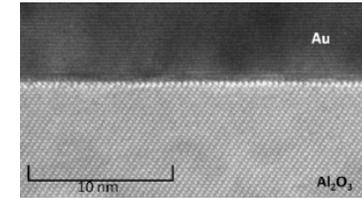
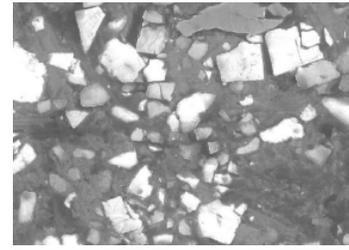
AND OR あいまい検索

利用案内

- ▶ [必須システム環境\(プラグイン\)](#)
- ▶ [利用規約](#)
- ▶ [パンフレットダウンロード](#)
- ▶ [ご意見/ご感想 等](#)



無機材料データベース (有償提供)

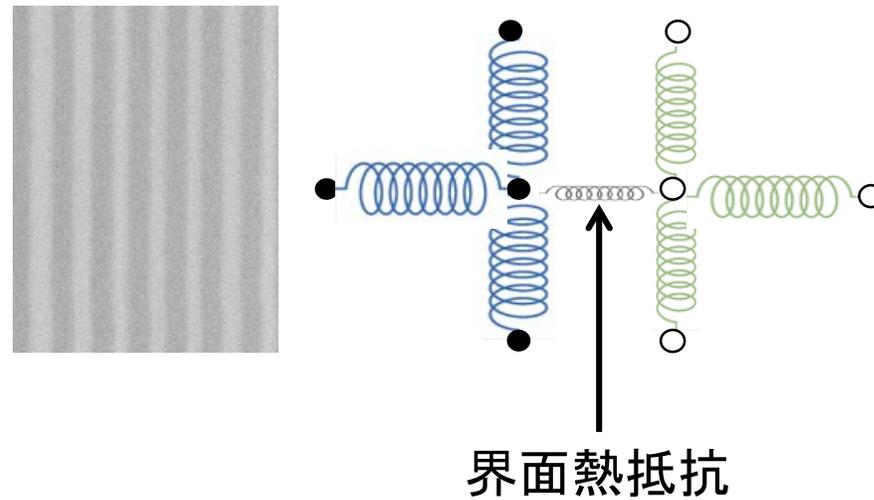


マテリアルズ・インフォマティクス
を用いた伝熱制御・熱電材料の
設計と開発

断熱材料：熱エネルギー有効利用のカギ

従来の断熱材料は、大量な空気を含むことによって低熱伝導率を実現。

本研究の狙い：界面を利用して最小熱伝導率の限界を破る



界面熱抵抗予測の難点

界面熱抵抗の関係要因分類	例
物理的な要因	界面両側材料の結晶構造、物性
化学的な要因	化学結合、新相の生成
材料的な要因	作製条件、界面構造



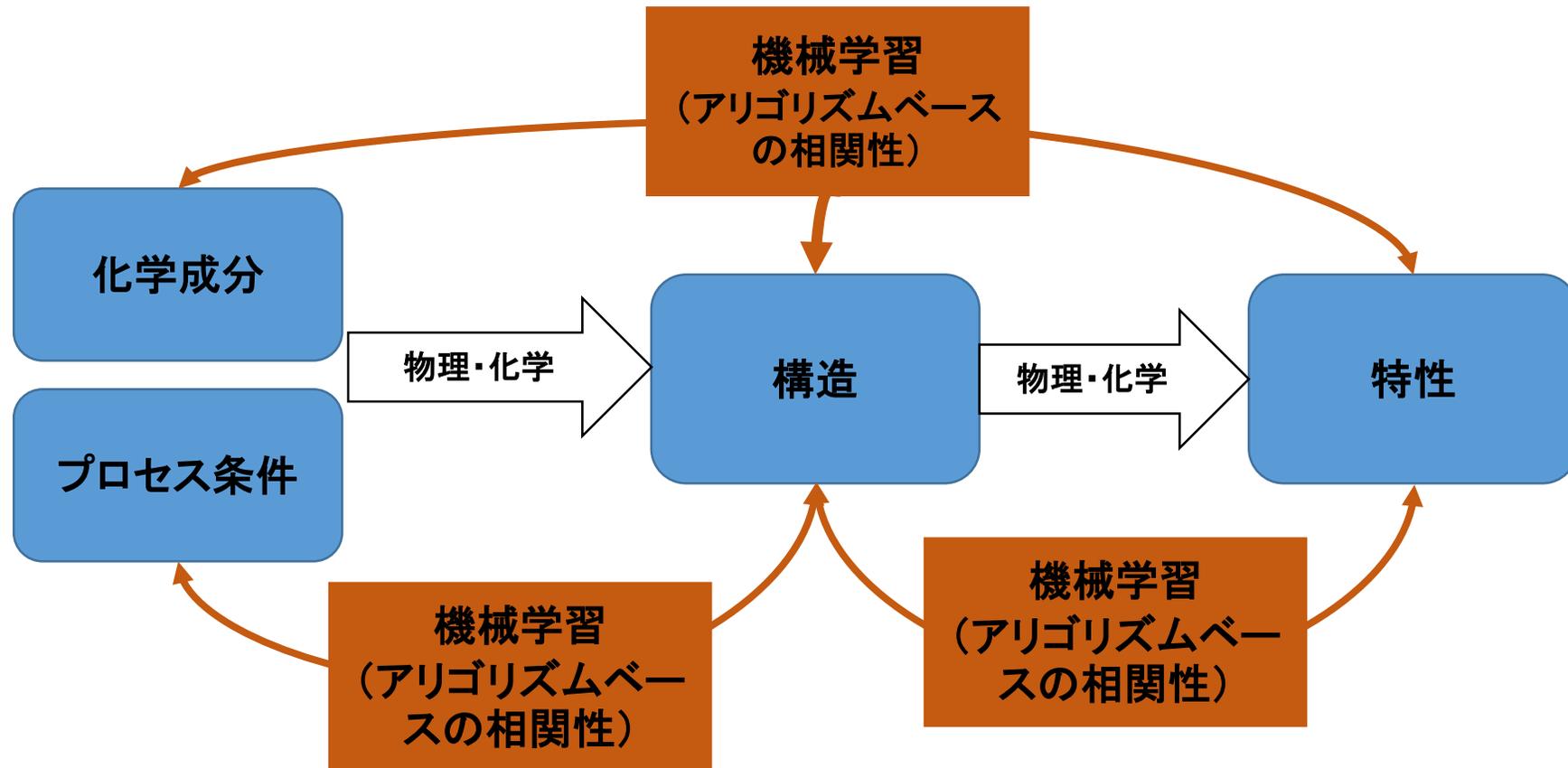
従来のモデリング手法ですべての要因を取り込むのは困難



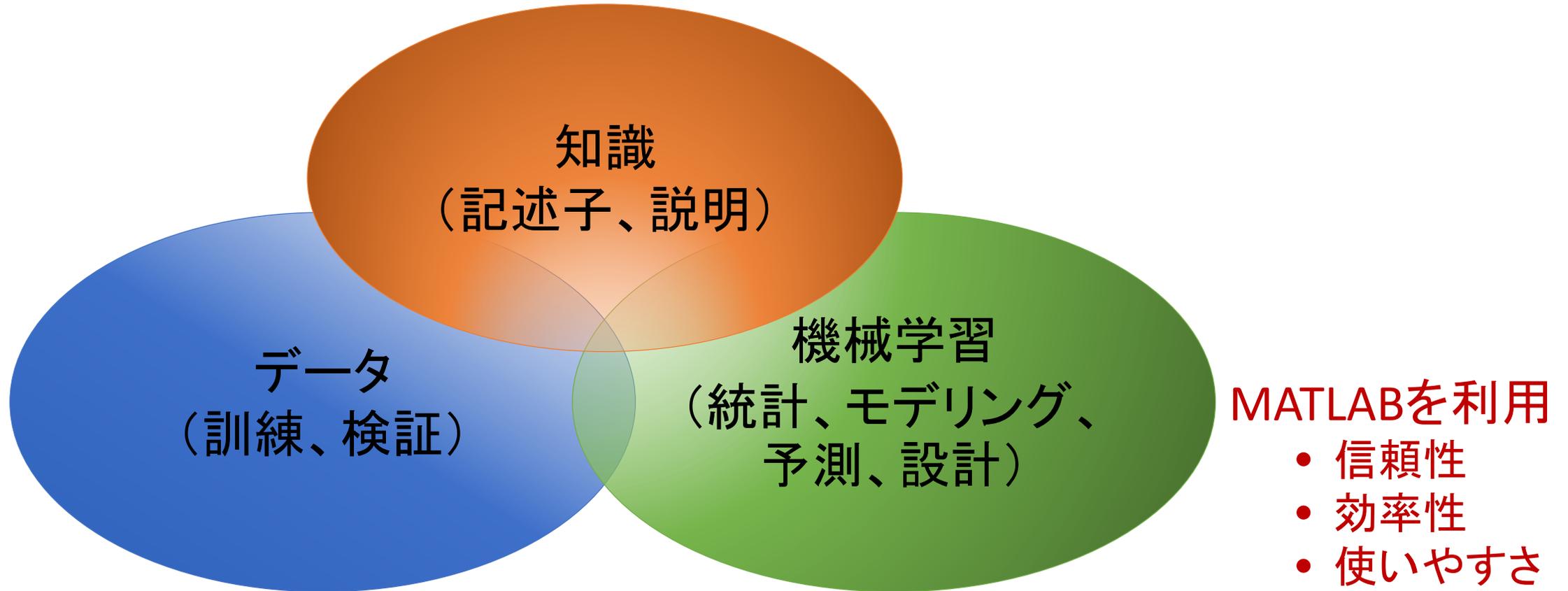
マテリアルズ・インフォマティクス(機械学習)手法の試み

マテリアルズ・インフォマティクスの特徴

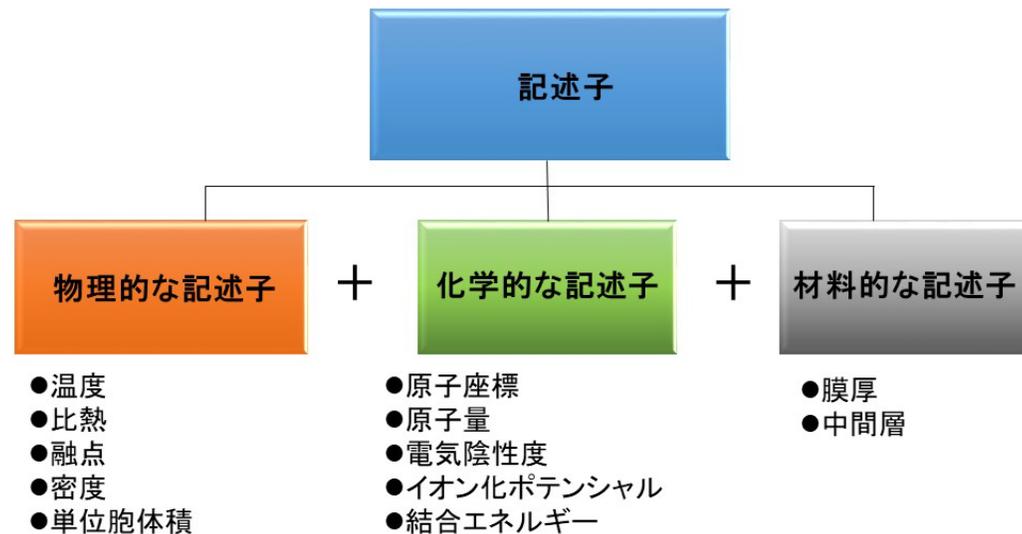
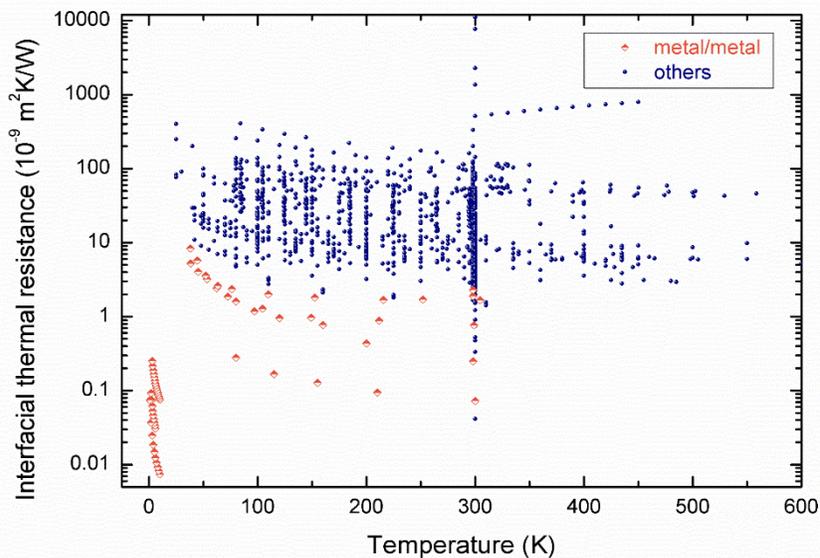
複雑な物理、化学プロセスを無視して、マルチスケール空間・時間で生じた各材料事象間の相関性を見つけ出すことができる。



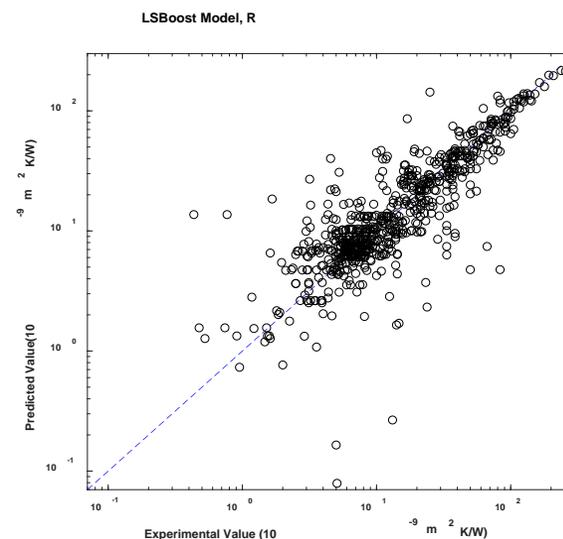
マテリアルズ・インフォマティクスの三要素



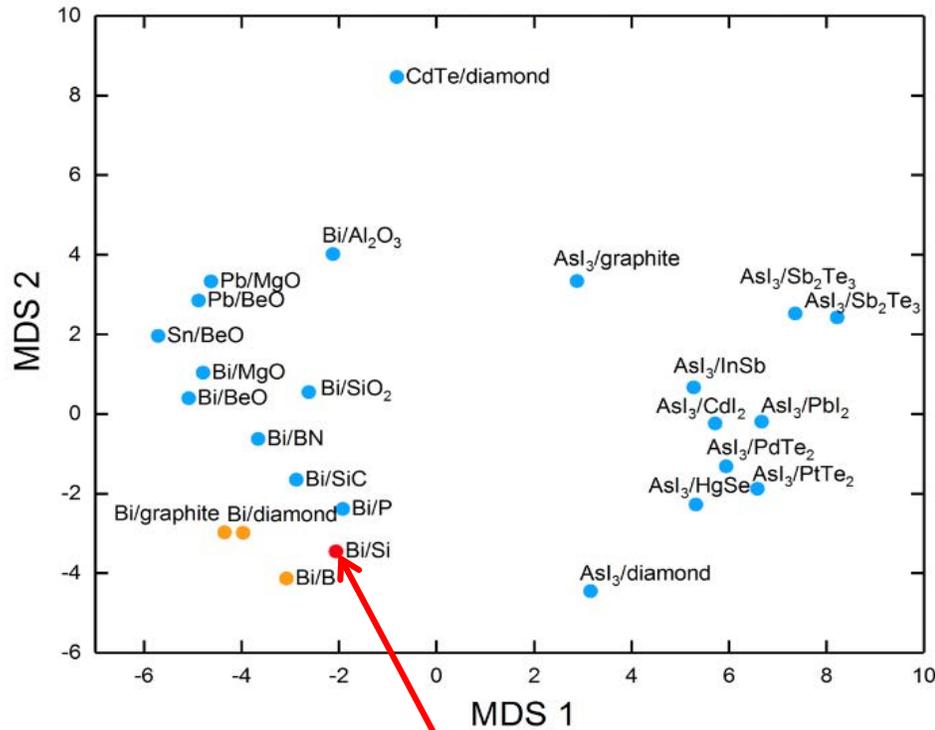
界面熱抵抗の機械学習モデル



Algorithms	R	R ²	RMSE
All descriptors			
LSBoost	0.958	0.919	8.944
SVM	0.938	0.879	10.897
GPR	0.957	0.916	9.073

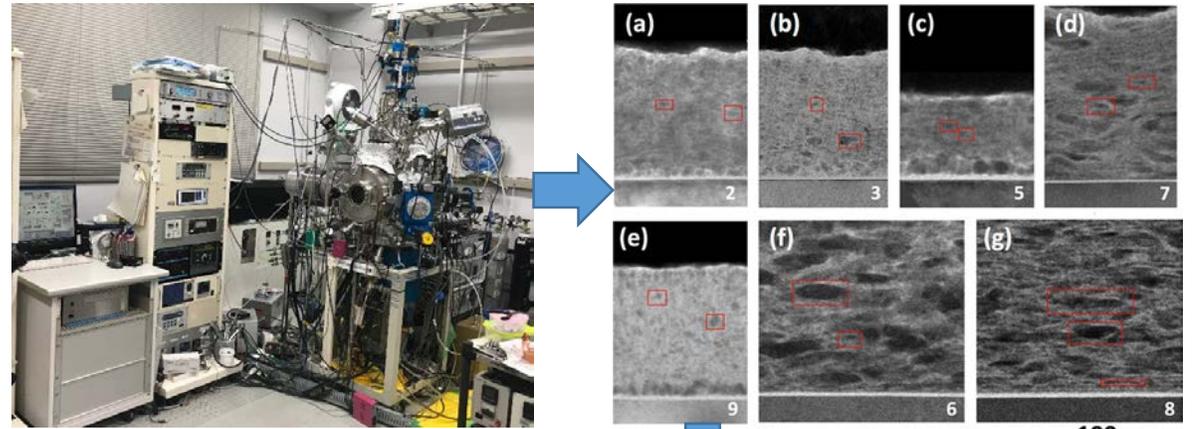


機械学習モデルを用いて 80,000種類以上の界面から 絞り出した高熱抵抗候補

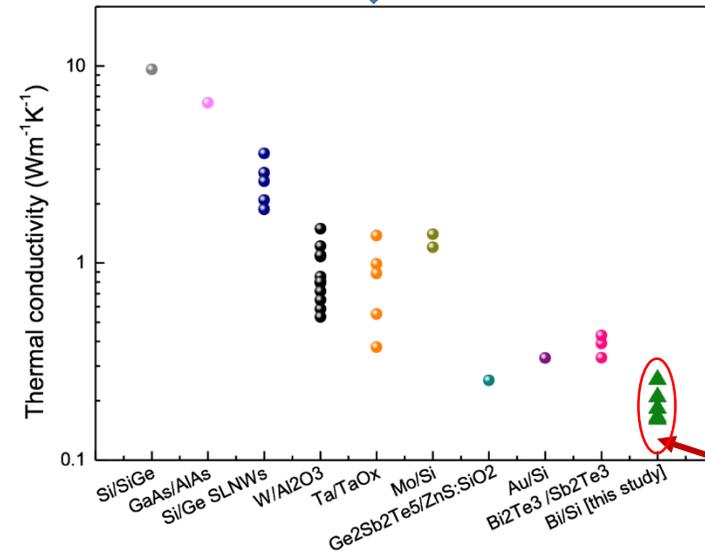


成膜しやすさや、界面安定性などを考慮し、
実験検証の対象として選択

Bi/Siナノ複合薄膜を用いた実験検証



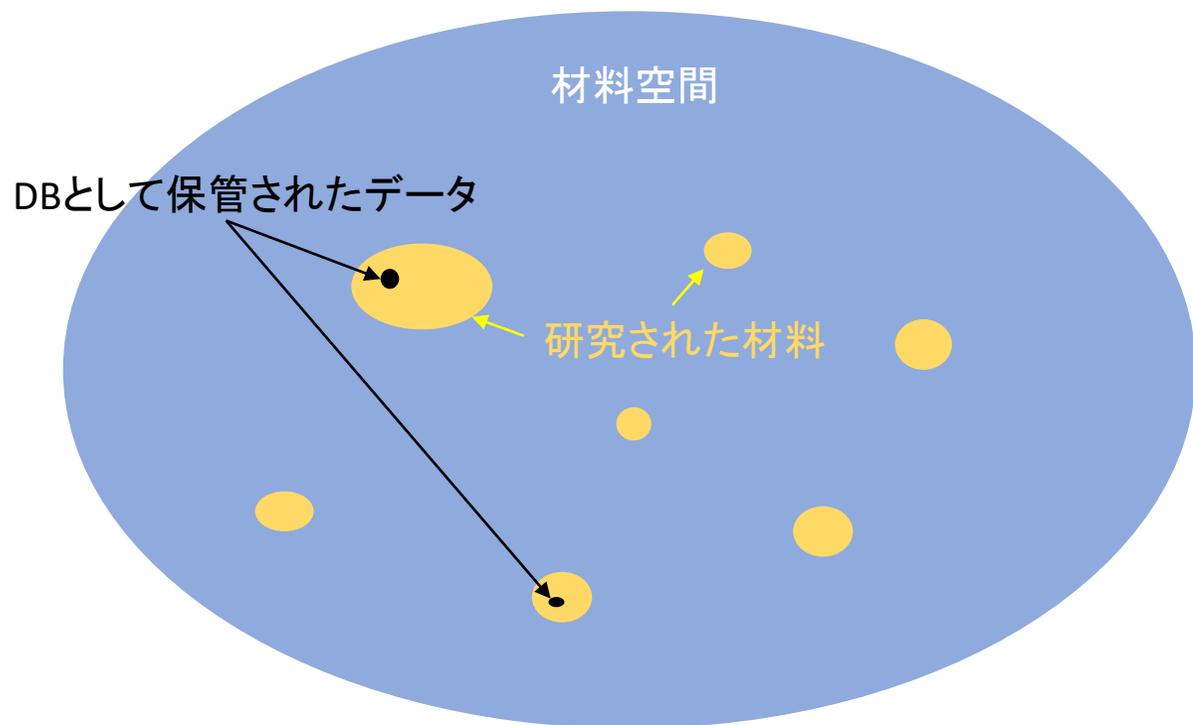
実測熱伝導率と既
知のナノ複合材料
との比較



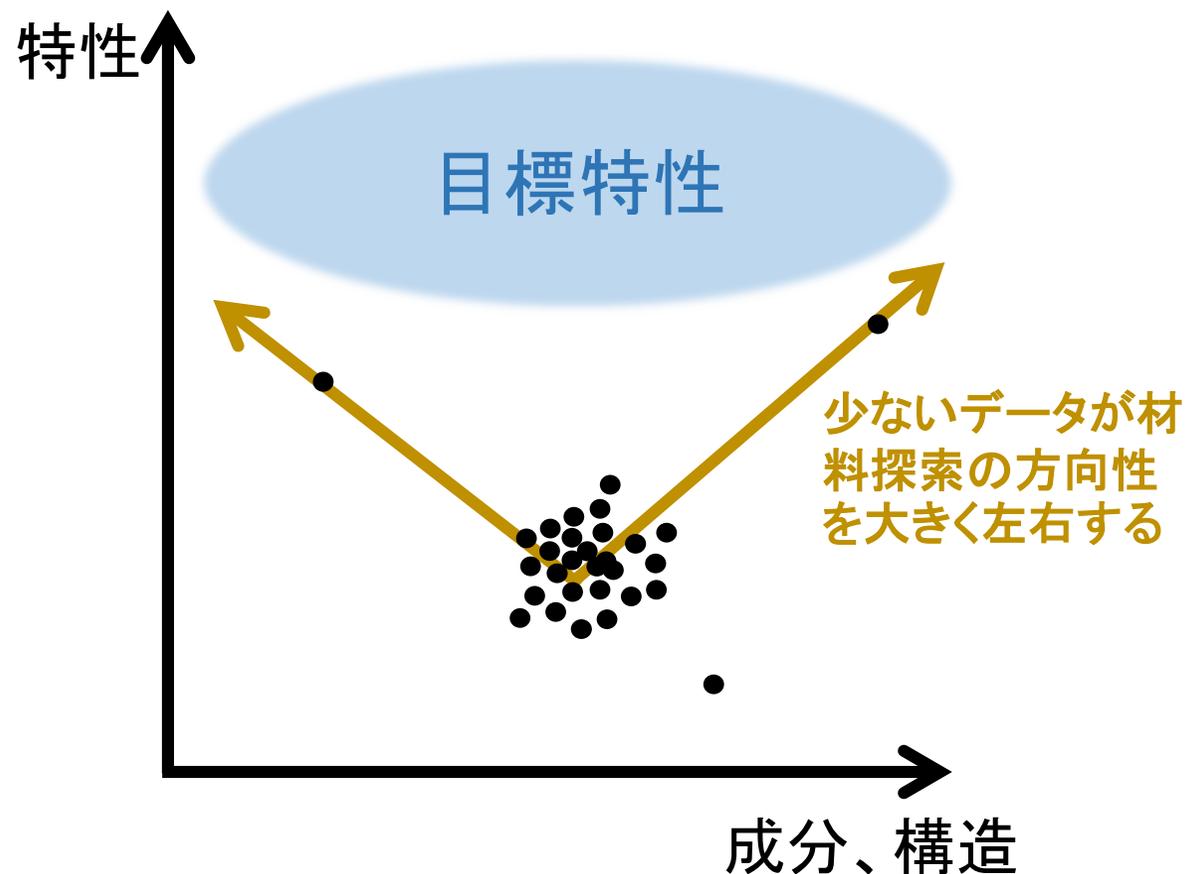
本研究の結果
 $\lambda_{\min} = 0.16$ W/Km

マテリアルズ・インフォマティクスの課題

データ不足



データ品質問題



Small data 戦略

1. 物理・化学・経験に基づいた記述子選択



2. データの相関性を利用したデータの代用、補完、転移学習

