

Oral presentation | 23 Joint Session N "Informatics" : 23.1 Joint Session N "Informatics"

📅 Wed. Sep 18, 2024 1:30 PM - 5:15 PM JST | Wed. Sep 18, 2024 4:30 AM - 8:15 AM UTC 🏢 A24 (TOKI MESSE 2F)

[18p-A24-1~13] 23.1 Joint Session N "Informatics"

Naoka Nagamura(NIMS), Yusuke Hashimoto(東北大), Masahiko Ishida(NEC)

1:30 PM - 1:45 PM JST | 4:30 AM - 4:45 AM UTC

[18p-A24-1]

Exploration of novel crystal structures of titanium oxynitrides via the local formal charge estimation

○Yuta Aoki¹ (1.Schrodinger, K.K.)

1:45 PM - 2:00 PM JST | 4:45 AM - 5:00 AM UTC

[18p-A24-2]

Elucidating Determining Factors of Material Properties Using Combinatorial Optimization of Features

○Noriaki Ozaki¹, Jun Ikeda¹ (1.Murata Mfg.)

2:00 PM - 2:15 PM JST | 5:00 AM - 5:15 AM UTC

[18p-A24-3]

Extrapolative Property Prediction Using Pretrained Models as Feature Extractors

○Tasuku Sugiura^{1,2}, Kiyou Shibata^{1,3}, Naoto Kawaguchi³, Teruyasu Mizoguchi^{1,3} (1.IIS, the Univ. of Tokyo, 2.Mitsubishi Materials Corp., 3.Sch. Eng., the Univ. of Tokyo)

2:15 PM - 2:30 PM JST | 5:15 AM - 5:30 AM UTC

[18p-A24-4]

Material Design Method Using Gradient-Based Inverse Problem Solving to Achieve Desired Crystal Structures and Properties

○Akihiro Fujii¹, Augustin Lu¹, Yoshitaka Ushiku², Satoshi Watanabe¹ (1.Tokyo Univ., 2.OMRON SINIC X Corp.)

2:45 PM - 3:00 PM JST | 5:45 AM - 6:00 AM UTC

[18p-A24-5]

[The 56th Young Scientist Presentation Award Speech] Direct inverse analysis of defect distribution and electron transport in field-effect transistors by tandem neural network

○Masatoshi Kimura¹, Keisuke Ide¹, Hideo Hosono¹, Toshio Kamiya¹ (1.Tokyo Tech)

3:00 PM - 3:15 PM JST | 6:00 AM - 6:15 AM UTC

[18p-A24-6]

Estimation of Thermal Diffusivity and Carrier Lifetime of Si from Laser Heterodyne Photothermal Displacement Signals using Machine Learning

○Shota Urano¹, Tomoki Harada¹, Kentaro Kutsukake², Noritaka Usami², Tetsuo Ikari¹, Atsuhiko Fukuyama¹ (1.Univ. of Miyazaki, 2.Nagoya Univ.)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

3:15 PM - 3:30 PM JST | 6:15 AM - 6:30 AM UTC

[18p-A24-7]

Inverse-problem Approach to Designing Dispersion Properties of 2D Phononic Crystals using Deep Learning and Particle Swarm Optimization Algorithm

○(M2)Yuji Sato¹, Yuri Fukaya¹, Kenji Tsuruta¹ (1.Graduate School of Environmental, Life, Natural Science and Technology, Okayama Univ.)

3:30 PM - 3:45 PM JST | 6:30 AM - 6:45 AM UTC

[18p-A24-8]

Spectral Imaging Analysis of InGaN QWs Using Nonnegative Matrix Factorization

○Kazunori Iwamitsu¹, Kenta Sakai², Zentaro Akase¹, Atsushi A. Yamaguchi², Shigetaka Tomiya¹ (1.NAIST, 2.Kanazawa Inst. of Tech.)

4:00 PM - 4:15 PM JST | 7:00 AM - 7:15 AM UTC

[18p-A24-9]

Interpretable structural evaluation of nanostructures via persistent homology

○Ryuto Eguchi^{1,2}, Wen Yu^{1,2}, Ayako Hashimoto^{1,2} (1.NIMS, 2.Univ. Tsukuba)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

4:15 PM - 4:30 PM JST | 7:15 AM - 7:30 AM UTC

[18p-A24-10]

Development of reliability evaluation for material image prediction using uncertainty

○OU OU¹, Hiroyuki Yamamoto¹, Sayaka Tanimoto¹ (1.Hitachi Ltd. Research & Development Group.)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

4:30 PM - 4:45 PM JST | 7:30 AM - 7:45 AM UTC

[18p-A24-11]

3D Information Analysis of Surface SEM Images using Deep Learning

○(DC)Takamitsu Ishiyama^{1,2}, Koki Nozawa¹, Takashi Suemasu¹, Kaoru Toko¹ (1.Univ. of Tsukuba, 2.JSPS Research Fellow)

4:45 PM - 5:00 PM JST | 7:45 AM - 8:00 AM UTC

[18p-A24-12]

3D Filament Microstructure Analysis of Superconducting Wires Using Deep Learning

○Kosuke Ando¹, Yoshiki Nishiya¹, Tatsunori Ishibashi¹, Yusuke Shimada², Motomune Kodama³, Hideki Tanaka³, Akiyasu Yamamoto¹ (1.Tokyo Univ. Agri. & Tech., 2.Kyushu Univ., 3.Hitachi, Ltd.)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

5:00 PM - 5:15 PM JST | 8:00 AM - 8:15 AM UTC

[18p-A24-13]

Generation of pseudo 3D multicrystalline Si structure using Generative Adversarial Networks

○Takumi Deshimaru¹, Kentaro Kutsukake^{1,2,3}, Hiroaki Kudo⁴, Ryoji Katsube¹, Noritaka Usami^{1,2,5} (1.Grad Eng Nagoya Univ, 2.IMaSS, 3.AIP RIKEN, 4.Grad Info Nagoya Univ, 5.InFuS)

Local formal charge を用いた新規チタン酸窒化物構造の探索 Exploration of novel crystal structures of titanium oxynitrides via the local formal charge estimation

シュレーディンガー(株)¹ °青木 祐太¹

Schrödinger, K.K.¹, °Yuta Aoki¹

E-mail: yuta.aoki@schrodinger.com

可視光応答光触媒による水分解に適したバンド構造を持つ光触媒材料として、新たなチタン酸窒化物構造を得るアプローチを提案する。このアプローチでは、親構造として Ti_nO_{2n-1} ($n \geq 2$) という一連の組成を持つ既存のチタン酸化物系をテンプレート構造として、 $2n-1$ 個の O 原子を 2 個の N 原子で置き換えることで $Ti_nN_2O_{2n-3}$ ($n \geq 2$) という一連の組成の構造を作る。これらの組成においては、いかなる n に対しても Ti の酸化数は+4 に保たれ、Ti にとって最も安定な酸化状態が実現されるとともに、親構造の Ti_nO_{2n-1} とは異なりバンド絶縁体となること、さらにそのバンドギャップは高濃度に存在する N 原子によって TiO_2 などと比べて大きく縮小され、可視光による水分解に適したバンド構造を持つであろうことが期待される。実際に筆者による過去の先行研究においては、最も N 濃度が高くなる $n=2$ のケースにおいて、 Ti_2N_2O が可視光水分解に適したバンド構造を持つことが第一原理計算によって示されている^[1,2]。

このアプローチで得られる構造を第一原理計算によって詳細に調べるにあたっては、 Ti_nO_{2n-1} から $Ti_nN_2O_{2n-3}$ への置換に伴って生成される大量の構造候補から安定な構造を効率的にスクリーニングすることが必要となる。今回筆者は、このスクリーニングのために local formal charge という概念を考案し、それを対象となる Ti 原子周囲の局所環境 (local atomic environment) から算出する方法を提示する。この方法を用いると、第一原理計算による電荷分布計算を行うことなく個々の Ti 原子ごとの formal charge を算出することができるため、 $Ti_nN_2O_{2n-3}$ において実現される Ti の理想的な酸化数+4 (構造全体で平均した酸化状態)と、個々の Ti 原子の局所的な formal charge との乖離を調べることができ、これを用いて安定構造をスクリーニングすることができる。

この local formal charge を用いたスクリーニングによって得られた構造と、そのスクリーニングから外れた構造のエネルギーを第一原理計算によって調べたところ、実際に安定な構造が local formal charge によってスクリーニングできていることが確かめられた。また、それらの構造について第一原理計算によって得られたバンド構造を調べると、 TiO_2 のバンド構造と比べて価電子帯の幅が大きく広がり価電子帯上端が 1 eV 以上上昇し、伝導帯下端の位置をほぼ保ったままバンドギャップを 1 eV 以上縮小できていることが確認できた。このバンド構造は、可視光による光触媒水分解反応に適した構造となっている。

[1] Y. Aoki et al., arXiv:1701.06251 (2017).

[2] Y. Aoki et al., *Phys. Rev. B* **99**, 075203 (2019).

特徴量の組み合わせ最適化による材料特性決定要因の解明

Elucidating Determining Factors of Material Properties

Using Combinatorial Optimization of Features

株式会社村田製作所¹ ◯尾崎 仁亮¹, 池田 潤¹

Murata Manufacturing, Co., Ltd.¹ ◯Noriaki Ozaki¹, Jun Ikeda¹

E-mail: noriaki.ozaki@murata.com

自動車の自動運転や EV 化など、モビリティの電装化に伴い、積層セラミックコンデンサの中でも、動作安定性が高く、摩耗故障を起こしにくい製品への需要が高まっている。本分野でのより良い製品の設計のためには、比誘電率 (ϵ_r) を飛躍的に向上する必要がある、これまでにない新しい材料設計指針が求められている。この実現には、材料特性の決定要因に基づく、根拠ある作業仮説の立案と検証を繰り返すことが有効である。しかし、各種計測や計算による仮説立案は、しばしば時間コストが高い。そこで、筆者らは、材料化学の知見とデータ科学の手法を組み合わせることで、信頼のおける作業仮説を、短時間で得られる手法の開発に取り組んだ。本研究では、特に ϵ_r をターゲットに、材料特性の決定要因を推定し、検証実験を行った。

本研究では、実験により構築したデータセットを用いる。データセット中の一部の材料（既知材料）は、第一原理計算によって、 ϵ_r の決定要因が、特定の局所構造（要因構造）にあることがわかっている。その他の材料（未知材料）については、こうした情報は得られていない。このデータセットに対して、まず、要因構造の定量化を含むような、構造特徴量 $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_0 \ \mathbf{x}_1 \ \dots \ \mathbf{x}_n)^T$ を計算し、線形回帰モデル ($\hat{\epsilon}_r = \mathbf{x}\boldsymbol{\beta}$) を作成した。ここで、 \mathbf{x}_i は、材料 i の特徴量ベクトル $\mathbf{x}_i = \{x(X)\}$ 、(X : 材料 i 中の金属サイト) を表す。続いて、材料 i の ϵ_r の予測値 $\hat{\epsilon}_{r,i} (= \mathbf{x}_i\boldsymbol{\beta})$ について、予測誤差 $(\epsilon_{r,i} - \hat{\epsilon}_{r,i})^2$ が最小化するように、 \mathbf{x}_i を整理（組み合わせを最適化）した (図 1a)。この特徴量を用いて、再び回帰モデルを作成した結果、重要な特徴量は、既知材料に関しては、要因構造を表す特徴量であった。これにより、回帰式は物理的に適切に作成できていると判断した。未知材料については、上記の重要な特徴量の表す局所構造が、要因構造であると推定し、検証実験によって、これを確認した。さらに、新しく材料設計を行い、 ϵ_r を評価した結果、設計した材料群の多くは、既存材料の ϵ_r を上回る値を示した (図 1b)。以上の結果は、既知の材料化学的な知見を基に、特徴量の組み合わせ最適化と線形回帰を用いて、未知材料の特性決定要因を推定できる可能性を示している。

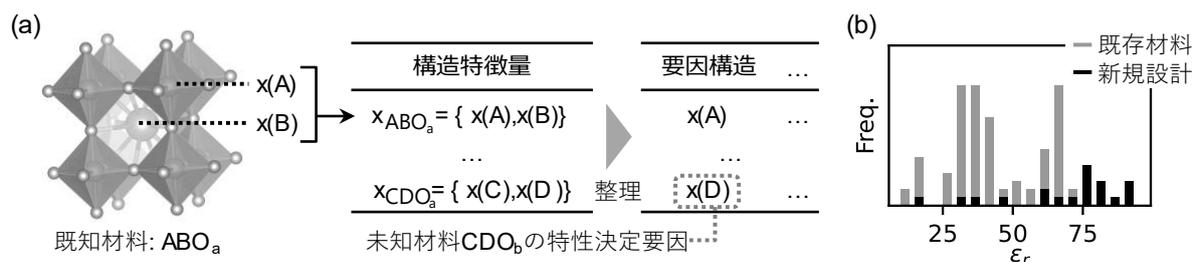


図 1. (a) 本研究で行った特性決定要因推定の概念図. (b) 得られた ϵ_r のヒストグラム.

学習済みモデルを特徴量抽出器として用いた外挿的物性予測の検討

Extrapolative Property Prediction Using Pretrained Models as Feature Extractors

東大生研¹, 三菱マテリアル², 東大院工³

○杉浦 佑^{1,2}, 柴田 基洋^{1,3}, 川口 直登³, 溝口 照康^{1,3}

IIS, the Univ. of Tokyo¹, Mitsubishi Materials Corp.², Sch. Eng., the Univ. of Tokyo³

○Tasuku Sugiura^{1,2}, Kiyou Shibata^{2,3}, Naoto Kawaguchi³, Teruyasu Mizoguchi^{2,3}

E-mail: tsugiura@mmc.co.jp

効率的な材料開発を行うには物性予測を通じたスクリーニングが重要である。特に結晶構造からの物性予測において、近年はグラフニューラルネットワーク(GNN)によって結晶構造を表現したモデルが主流になってきており、高い表現力に基づく高い予測性能を示している^[1-3]。それらのGNNを大規模データで訓練することで、様々なタスクに活用できる基盤モデルが開発されている^[4,5]。一方で実際の材料開発においては汎用的なデータベースに含まれない固有の材料系がターゲットとなることが多い。さらに既知材料の物性値の範囲から外れた予測を行う「物性値の外挿」や既知材料にない物質群について物性値を予測する「物質の外挿」などが求められるが、機械学習モデルの開発では内挿的予測の評価が行われることが多く、外挿的予測は十分に検証されていない。また、表現力の高いモデルでは一般に外挿的予測は困難である。

そこで本研究では基盤モデルが持つ広範な物質の情報とシンプルな回帰モデルを組み合わせた、特徴量抽出と物性値予測の2段階からなる先行研究^[6]の手法が、外挿的予測に有効かどうかを検討した。検証には層間化合物に関する構造・物性データセット^[7]を用いた。このデータセットはホスト及び積層様式の異なる層間化合物の構造188種類とインターカラント48種類から系統的に構築されており、様々な外挿的予測の状況を想定した検証が行える。予測対象の物性値には、インターカレーションエネルギーや生成エネルギー、フェルミエネルギーを用いた。特徴量抽出にはOC20データセット^[4]で学習済みのGNNであるCGCNN^[1], SchNet^[2], DimeNet⁺⁺^[3]を用い、特徴量からの物性予測にはリッジ回帰、サポートベクター回帰を用いた。また、比較のためファインチューニングしたGNNのみによる予測も行った。

内挿的予測では全てのモデルが高い性能を示し、さらにリッジ回帰とサポートベクター回帰を用いたモデルでは物性値の外挿も可能であった。物質の外挿では全てのモデルが精度を落としたもののある程度の性能を示し、物性値と物質群両方の外挿は予測対象によっては困難だった。これらの結果から、本手法は用途によって有力な物性予測手法となりうることを確認された。

【参考文献】

- | | |
|---|--|
| [1] T. Xie <i>et al.</i> , Phys. Rev. Lett. 120 , 145301 (2018). | [4] L. Chanussot <i>et al.</i> , ACS Catal. 11 , 6059 (2021). |
| [2] K. T. Schütt <i>et al.</i> , J. Chem. Phys. 148 , 241722 (2018). | [5] I. Batatia <i>et al.</i> , arXiv:2401.00096v1. |
| [3] J. Gastegger <i>et al.</i> , the Machine Learning for Molecules Workshop at NeurIPS (2020). | [6] K. Nishio <i>et al.</i> , Appl. Phys. Express 17 , 037002 (2024). |
| | [7] N. Kawaguchi <i>et al.</i> , ACS Phys. Chem Au 4 , 281 (2024). |

勾配ベースの逆問題解法により所望の構造と物性を有する結晶を得る マテリアルデザイン手法

Material Design Method to Obtain Crystals with Desired Properties and Structures Using Gradient-Based Inverse Problem Solving

東京大学¹, オムロンサイニクエクス²

○ 藤井亮宏¹, Anh Khoa Augustin Lu¹, 牛久祥孝², 渡邊聡¹

University of Tokyo¹, OMRON SINIC X Corporation²

○ Akihiro Fujii¹, Anh Khoa Augustin Lu¹, Yoshitaka Ushiku², Satoshi Watanabe¹

E-mail: akihiro.fujii@cello.t.u-tokyo.ac.jp

機械学習はマテリアルデザインの強力な手法である。特に近年、コンピュータビジョン分野で成功を収めた条件付き生成モデルを用いて所望の物性をもつ材料を生成する研究が活発に進められている。しかし、条件付き生成モデルでは生成された材料が所望の物性をもつとは限らず、また生成モデル自体は生成材料の物性を評価できない。さらに、生成された材料が電気的中性条件を満たす保証もなく、ある特定の結晶構造を生成するには専用のデータセットで学習する必要がある。

以上の状況に鑑み、本研究では勾配ベースの逆問題解法 [1] を用い、誤差逆伝播を用いて入力情報を直接最適化することにより、所望の物性と構造をもつように結晶を最適化する手法を提案する。具体的には、物性を予測する汎用的な深層学習モデルを用いて予測された物性値と目標物性値の差分を損失として定義し、適当に初期化した結晶構造の結晶ベクトル、原子ごとの座標、原子種を損失の勾配を用いて最適化する (Fig.1 (left))。物性予測モデルの予測値をもとに最適化を行うため、モデルの精度の範囲で候補材料の物性が保証される。なお、原子種はそのままでは微分できないため、微分可能な原子分布に変換して最適化する手法 [2] を採用する。

本手法の利点は、最適化の際にさまざまな条件を適応的に課せることである。例えばペロブスカイト型結晶構造を最適化したい場合は、A,B,X の各サイトの電荷を 1:2:-1、結晶ベクトルの成す角を 90° に保つ必要がある。この場合、まずランダムなペロブスカイト構造を初期値とし、結晶軸長さと原子座標、原子分布を最適化対象にして結晶軸の成す角度は 90° で固定する。原子分布は各サイトそれぞれで、許される電荷をもつ原子のみで構成される原子分布 (例:A サイトは 1 価の陽イオンになる原子のみで構成) を適用する。これにより、従来の条件付き生成モデルと異なり、本手法は電気的中性条件を容易に満足でき、専用データセットで再学習せずともペロブスカイト構造を維持したりしたまま、所望の物性をもつように結晶構造を最適化できる。

例として、バンドギャップを予測する学習済み深層学習モデルを用いて所望のバンドギャップをもつようにペロブスカイト構造の最適化を行なった (Fig.1 (right))。学習済みモデルとしてさまざまな結晶を含む Materials Project で学習した Crystalformer[3] を用い、バンドギャップが目標値 1.00 ± 0.02 eV または 3.00 ± 0.02 eV となるように結晶を最適化した。その結果、バンドギャップが指定範囲内に収まる材料候補 BaCeOS₂(予測値 1.02 eV) および CsYbF₂Cl(予測値 3.02 eV) を提案できた (括弧内は Crystalformer によるバンドギャップの予測値)。

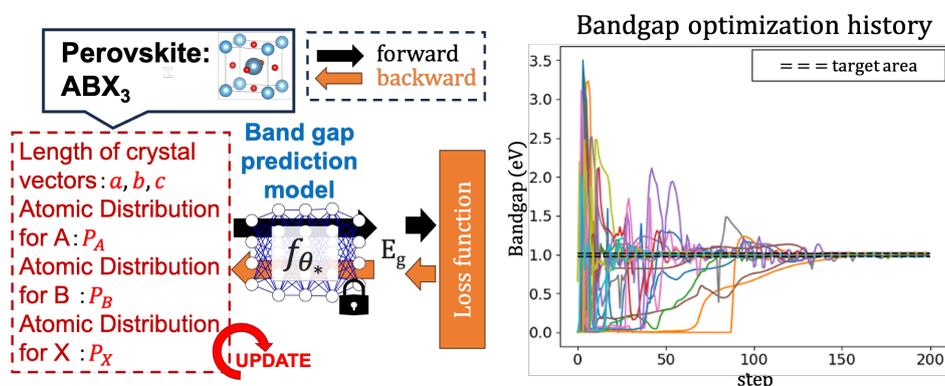


Fig. 1: (left) Overview of our method. (right) History of perovskite optimization to achieve a band gap of 1.00 ± 0.02 eV.

[1] Fujii, A., et al. arXiv preprint arXiv:2304.13860 (2023). [2] Fujii, A., et al. arXiv preprint arXiv:2403.13627 (2024). [3] Taniai, T, et al. arXiv preprint arXiv:2403.11686 (2024).

タンデムNNによる薄膜トランジスタの欠陥分布・電子伝導の逆問題解析

Direct inverse analysis of defect distribution and electron transport in field-effect transistors by tandem neural network

東工大¹, °木村 公俊¹, 井手 啓介¹, 細野秀雄¹, 神谷 利夫¹

Tokyo Tech¹, °Masatoshi Kimura¹, Keisuke Ide¹, Hideo Hosono¹, Toshio Kamiya¹

E-mail: m-kimura001@outlook.jp

【はじめに】材料・デバイス開発では、測定結果から物性などを知る逆問題を解く必要が出てくる。例えば半導体デバイスの改良・開発では、「デバイスの電気特性を測定し、構成する半導体物性を抽出してフィードバックする」というサイクルを回すため、逆問題をいかに効率的に解けるかが重要である。しかし逆問題を解く汎用的手法は未確立であり、試行錯誤的な計算を必要とする非線形最適化によるパラメータ解析が行われている。また、半導体デバイス特性を再現するパラメータは多値性を持つことが多い。私たちは、半導体薄膜トランジスタ (TFT) の解析を題材とし、機械学習によりこの多値逆問題を直接解く手法の開発を行った。今回は、多値性が及ぼす影響を詳細に検討し、また逆問題で得られた解について、TFT 特性の再現性を検討した。

【方法】様々な特性をもつ TFT をデバイスシミュレーションで計算し、1000 個の訓練データを収集した後、多層ニューラルネットワーク (NN) により TFT 特性の予測 (順解析) と半導体物性の予測 (逆解析) を行った。単純な逆解析は多値問題になるため、逆解析モデルの後ろに順解析モデルを接続し、その誤差を最小化する逆解析モデル (Tandem NN) を構築した (Fig 1 a)。また、このモデルを用いて、TFT の電流電圧 (IV) 特性の実測値から半導体物性を逆解析したのち、デバイスシミュレーションによって TFT 特性の再現性を調べた (Fig 2 a)。

【結果】記述子と目的変数を入れ替えた単純な逆解析では、半導体物性の予測精度は低いが、Tandem NN を用いた逆解析により、 $R^2 \sim 0.99$ の高精度で TFT 特性を再現可能な半導体物性を予測できた (Fig 1 b)。また、TFT 特性に与える影響の強さが多値性として反映されており、どの半導体物性が TFT 特性を決める上で重要であるか可視化できるとともに、影響の大きな半導体物性の値を高精度に逆解析できることがわかった (Fig 1 c)。本モデルを TFT の実験データの解析に応用すると、理想的なデバイスだけでなく、性能の悪いデバイスに対しても、高精度・高速に半導体物性を逆解析できることが実証された (Fig 2 b, c)。本手法は、半導体デバイスに限らず、一般的な多値逆問題解析にも応用できると期待される。

【謝辞】本研究は文部科学省 データ送出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト #JPMXP112268340 の支援により実施した。

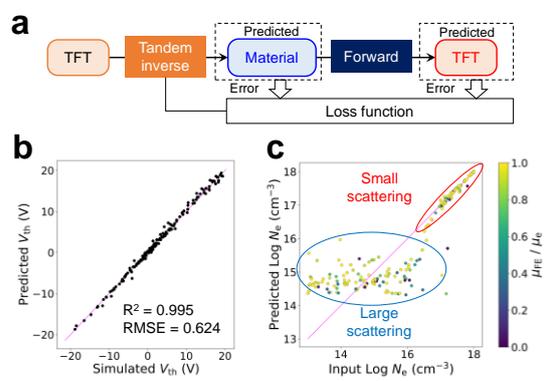


Figure 1: Inverse problem analysis with Tandem NN. (a) Tandem NN architecture. (b) Prediction accuracies of TFT characteristics (threshold voltage, V_{th}). (c) Correlations between input and predicted semiconductor properties (electron density, N_c). Symbol colors indicate the field effect mobility.

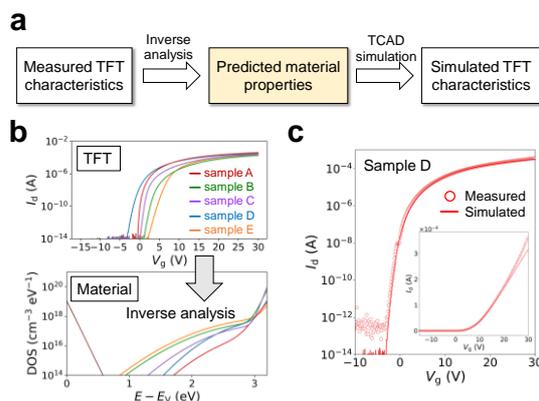


Figure 2: (a) Workflow of direct analysis of semiconductor properties, (b) measured TFT characteristics and predicted semiconductor properties (defect distributions), and (c) comparison between measured and simulated IV characteristics of TFTs.

機械学習を用いた光ヘテロダイン光熱変位信号からの

Si の熱拡散率とキャリア寿命の推定

Estimation of Thermal Diffusivity and Carrier Lifetime of Si from
Laser Heterodyne Photothermal Displacement Signals using Machine Learning宮崎大工¹, 名大院工², °浦野 翔大¹, 原田 知季¹, 沓掛 健太郎²,
宇佐美 徳隆², 碓 哲雄¹, 福山 敦彦¹Univ. of Miyazaki¹, Nagoya Univ.², °Shota Urano¹, Tomoki Harada¹, Kentaro Kutsukake²,Noritaka Usami², Tetsuo Ikari¹, Atsuhiko Fukuyama¹

E-mail: hk20003@student.miyazaki-u.ac.jp

【はじめに】半導体の微細化や集積化に伴う発熱量の増加が問題であり、発熱の抑制には物性値の適切な評価が重要である。そこで、励起光照射により生じた光励起キャリアの非発光再結合時に発生する熱による試料表面の熱膨張変位を測定してキャリアや熱物性を評価する光ヘテロダイン光熱変位 (LH-PD) 法を開発した^[1]。得られた変位量の時間変化を数値計算によってフィッティングすることで物性値を算出できるが、関係する物性値が多く算出には数十時間を要する。そこで本研究では、機械学習を用いて短時間に物性値を推定する。

【機械学習モデル】熱拡散率、キャリア寿命、キャリア移動度をランダムに変化させた数値計算を実施し、変位量の時間変化を算出した。機械学習では、数値計算結果である変位量の時間変化から熱拡散率とキャリア寿命を推定するモデルを構築した。キャリア移動度は入力パラメータとし、モデルは全結合ニューラルネットワークを採用した。詳細は以下の通りである。

- (i) 入力層に 500 個のニューロンを用意し、変位量の時間変化を入力した。移動度は中間層に入力した。
- (ii) 活性化関数は正規化線形関数を採用した。
- (iii) 出力層は 2 個のニューロンを用意し、推定する熱拡散率とキャリア寿命を出力させた。

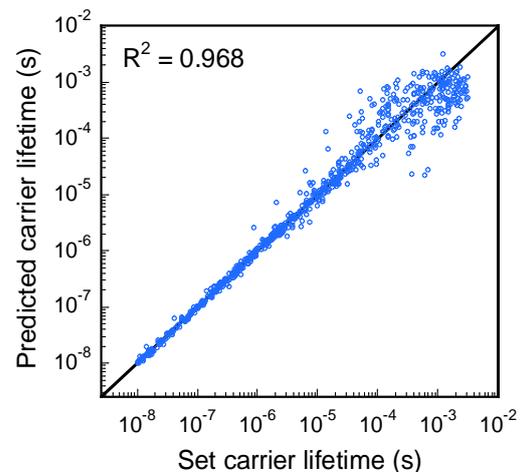


Fig.1 Prediction results of carrier lifetime

【結果と考察】 Fig.1 にキャリア寿命の予測結果を示す。図中の対角線は設定値と予測値が等しく、データが対角線に近いほど予測が正確であることを表す。キャリア寿命の決定係数 (R^2) は 0.968 となり、Fig.1 に示すように 10^{-5} s 以上の範囲で予測誤差が増加した。これは、数値計算においてキャリア寿命が長くなると変位量の時間変化に差が現れないためである。一方で熱拡散率の R^2 は 0.999 と高精度に推定できた。なお、機械学習を用いた物性値推定に要する時間は約 0.05 秒であり従来の方法で要していた時間と比較して大幅に短縮が出来た。

また、LH-PD 法はマッピング測定が可能なたため当日は本モデルを適用して物性値マッピングに変換させた結果についても報告する。

[1] T. Harada *et al.*, J. Appl. Phys. **131**, 195701 (2022).

深層学習モデルと粒子群最適化アルゴリズムを組み合わせた 2次元フォニック結晶の分散特性に関する逆問題解析

Inverse-problem Approach to Designing Dispersion Properties of 2D Phononic Crystals using Deep Learning and Particle Swarm Optimization Algorithm

岡山大院環境生命自然¹ ○(M2)佐藤 雄治¹, 深谷 優梨¹, 鶴田 健二¹

Graduate School of Environmental, Life, Natural Science and Technology, Okayama Univ.¹,

[○]Yuji Sato¹, Yuri Fukaya¹, Kenji Tsuruta¹

E-mail: tsuruta@okayama-u.ac.jp

フォニック結晶(PnC)^[1]の設計において、トポロジー最適化^[2]やモンテカルロシミュレーション^[3], その他最適化手法^[4]によってバンドギャップ(BG)の大きさを最大化する研究が多く行われてきた。一方, 所望の周波数帯・大きさのBGを持つPnCの構成材料・構造等を探索する“逆問題解析”を試みるのは困難であり, 近年の人工知能技術の発展に伴ったアプローチが注目されている。しかし, 単なる機械学習では, 特定のPnCからBGの周波数帯・大きさを予測する順問題しか解決できず, その反対である逆問題はブラックボックス最適化問題を解く必要があり, 容易ではない。(これらの関係性をFig1(a)に示す。)本研究では, 逆問題を解くための手法として粒子群最適化アルゴリズムを採用し, 所望のBGの周波数帯・大きさをそれぞれ設定, 有用なPnCの材料・構造パラメータを逆問題的に探索する方法論を構築した。

本研究では, 正方格子状の2次元PnCを考える。まず, 材料・構造パラメータを変化させて, それに対応するBGデータを収集した。続いて, 深層学習モデルを構築し, 学習を行った結果, 順方向BG予測において決定係数0.999と優れた学習結果を得ることを確認した。次に, この学習済みのモデルを適用して, 所望のBGを設定し, 粒子群最適化アルゴリズム(Fig1(b))で逆問題解析を行った。そのパラメータ探索過程をFig1(c)に示す。探索して得た材料・構造パラメータをもとにバンド計算を行った結果, 誤差率0.1%前後で逆問題が解けていることを確認した。講演では, 逆問題解析手法の詳細や, 形状の自由度を増やした際の機械学習手法についても報告する。

参考文献: [1]M.S.Kushwaha *et al.*, *Phys.Rev.Lett.* **71**, 2022(1993). [2]X.Zhang *et al.*, *Comput. Mater. Sci.* **160**, 159(2019). [3] R.Pourabolghasem *et al.*, *J.Appl.Phys.* **116**, 013514(2014). [4] B.Huang *et al.*, J.Cui, *Appl.Phys.Express* **10**, 037301(2017).

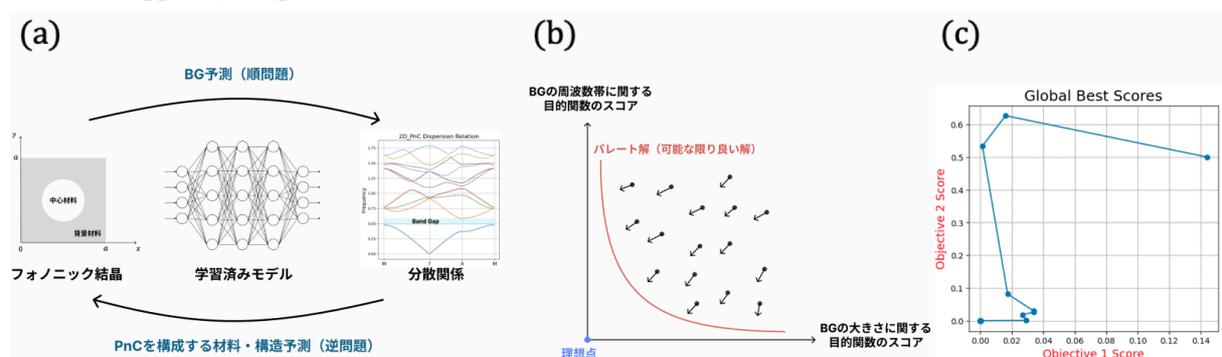


Fig1(a) Relationship between forward and inverse problems in PnC and BG applying machine learning models. **(b)** Diagram of particle swarm optimization algorithm. **(c)** Parameter exploration with particle swarm optimization algorithm.

非負値行列因子分解を活用した InGaN 量子井戸構造の マルチモーダル発光スペクトルイメージング解析

Spectral Imaging Analysis of InGaN QWs Using Nonnegative Matrix Factorization

奈良先端大¹, 金沢工大²

○岩満 一功¹, 坂井 健太², 赤瀬 善太郎¹, 山口 敦史², 富谷 茂隆¹

NAIST¹, Kanazawa Inst. of Tech.²,

○Kazunori Iwamitsu¹, Kenta Sakai², Zentarō Akase¹, Atsushi A. Yamaguchi², Shigetaka Tomiya¹

E-mail: k.iwamitsu@naist.ac.jp

化合物半導体デバイスにおける所望の電子物性・光物性を実現するために、混晶組成の制御を通じて行われるバンドギャップエンジニアリングは極めて重要な技術である。III族窒化物半導体は、原理的に深紫外から赤まで広範囲な波長域の発光デバイスを実現できる可能性がある。しかしながら、発光デバイスとして高い発光効率が得られているのは、近紫外から緑色程度の波長域であり、それより短いもしくは長い波長域では急激にその発光効率が低下する[1]。これは、点欠陥や転位などの結晶欠陥の影響に加え、発光層として用いられる InGaN 量子井戸においては、In 組成の増加に伴い非混和性の影響が大きくなるため、ポテンシャルや歪分布の不均一程度が大きくなる[2]などの様々な要因が考えられるなど、これまで多くの研究がなされているものの、いまだ不明点が多い。このために、複数の評価・計測手法を用いて多角的視点で解明する必要がある。

そこで本研究では、InGaN 量子井戸層における In 組成ゆらぎとキャリアの振る舞いを解明するために、フォトルミネッセンス(PL)およびカソードルミネッセンス(CL)といった異なる計測手法の発光スペクトルイメージング測定を実施・組み合わせ、それらのデータを統計的に解析した結果を報告する。まず初めに、図中左に示される様な、InGaN 単一量子井戸の PL スペクトルイメージングデータ X を空間構造 x, y における統計解析を行う事で、PL 発光強度の空間分布に斑がある事を確認した。その空間軸 x, y とエネルギー軸 E で構成される高次元なイメージングデータから物性特徴量の空間分布を得るために、解析対象 X を二軸に低次元化する。更にスペクトルは空間軸 x, y で指定される各ピクセルに対し

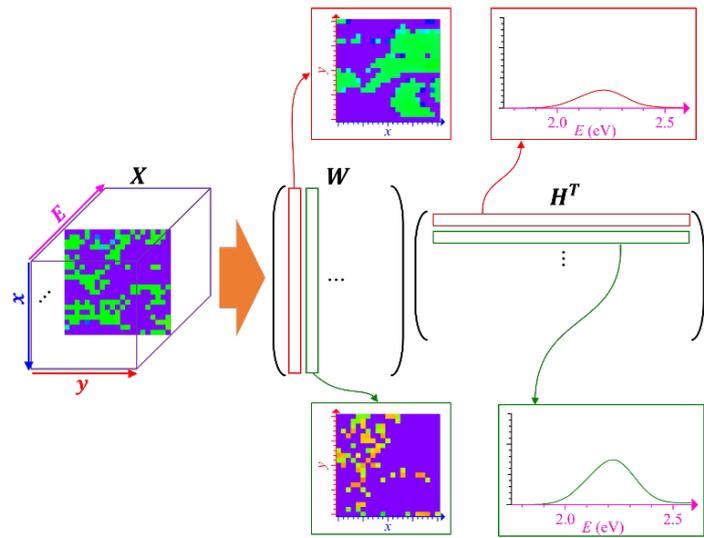


図: 片側直交性非負値行列因子分解[3]による $\text{In}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{N}$ 単一量子井戸構造 PL スペクトルイメージングデータ解析

て大きな変化を示さず、ピークの位置・強度が僅かに変化しているのみである。よって、その微弱なスペクトル変化を検出するために、解析対象 X をスペクトル平均との差分スペクトルに変換し、片側直交性非負値行列因子分解[3]を実行した。その因子分解によって、空間構造 W ・スペクトル構造 H^T に分離・抽出される各モードでの情報を統計的評価する事で、材料固有の物理的現象に即した解釈が可能となる。

講演では発光スペクトルイメージングデータに対して片側直交性非負値行列因子分解に適用した結果を報告する。その抽出された物性特徴量・その空間分布は PL・CL 計測それぞれで得られるので、異なる計測データの包括的解釈についても議論する。

[1] K. Mori-Tamamura et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, 105501 (2023).

[2] T. Kunikiyo et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SCCB05 (2019).

[3] H. Tanimoto et al., *J. Phys. Commun.* **5**, 115005 (2021).

パーシステントホモロジーを用いた微細組織の解釈可能な構造評価

Interpretable structural evaluation of nanostructures via persistent homology

物材研¹, 筑波大² ○(D)江口琉斗^{1,2}, Yu Wen^{1,2}, 橋本綾子^{1,2}

NIMS¹, Univ. Tsukuba², °Ryuto Eguchi^{1,2}, Wen Yu^{1,2}, Ayako Hashimoto^{1,2}

E-mail: EGUCHI.Ryuto@nims.go.jp

近年、パーシステントホモロジー(PH)という数学的な枠組みによって、原子スケールからナノスケールといった幅広いスケールで材料構造情報の定量化が可能になった。PHでは、データ内の「穴」構造の生成・消滅のスケールとそれらの頻度を2次元ヒストグラムに示した、パーシステント図(PD)によって構造が表現される。本研究では、PHを走査型透過電子顕微鏡(STEM)画像へ適用した。一般的に、PD解析においては次元削減により構造情報が抽出されるが、本研究では解釈性を高めるため、PDから直接的に解釈可能な特徴量を抽出し、それらによる構造評価を行った。

対象画像データはPtとCeO₂の2相複合材料のSTEM像である。この材料は合成条件(温度・CO/O₂ガス雰囲気)によって迷路状構造や縞状の異なる形態を示す。STEM画像は2値化処理した後、CeO₂相に注目してPD解析した。

0次のPDからはCeO₂のドメインの数・縞の幅や長さ、1次のPDからはCeO₂のリング・湾状構造の個数情報を特徴量として抽出できた。それら特徴量を用いたランダムフォレストによる画像分類の結果、CeO₂の縞の幅と湾状構造の個数が重要な特徴量であることが分かった。更に、これら2つの特徴量で散布図を作成することで、Fig.1のようにPt/CeO₂の微細構造が合成条件ごとに分類可能であることが分かった。つまり、本研究で抽出した解釈可能な特徴量は構造評価に有効に働き、さらには物理的な議論にも有効であることが示唆された。

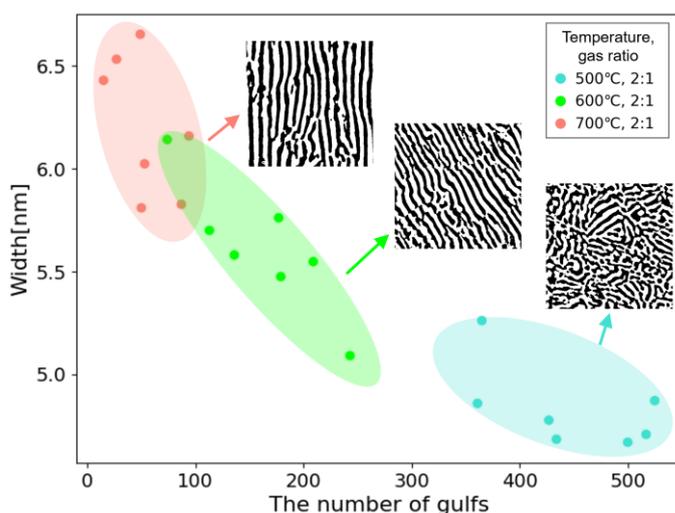


Fig.1 Scatter plot of the number of gulfs and the width of CeO₂ phase in three Pt/CeO₂ nanostructures at different annealing temperatures and identical gas ratio. The three nanostructures could be well-classified (colored) by the interpretable features.

不確実性を活用した材料画像予測の信頼性判定技術の開発

Development of reliability evaluation for material image prediction using uncertainty

日立製作所 研究開発グループ ◦王 宇, 山本 浩之, 谷本 明佳

Hitachi Ltd. Research & Development Group. ◦Yu Wang, Hiroyuki Yamamoto, Sayaka Tanimoto

E-mail: yu.wang.rb@hitachi.com

[背景]

近年、新材料・デバイスの開発を加速する方法としてマテリアルズインフォマティクス(MI)の適用が進められている。材料特性を予測するモデル構築のためには、組織画像からの特徴量抽出は重要な課題であり、機械学習による領域分割(セマンティックセグメンテーション、SS)が有効な手段である(入力画像: Fig. 1(a)、予測結果: Fig. 1(b))。更に、Monte Carlo Dropout(MCD)^[1-3]を適用した SS モデルの使用により「不確実性」を算出し、それを可視化した「不確実性マップ」を参照することで(Fig. 1(c))、予測結果を誤った可能性がある領域をある程度判別できる。しかし、不確実性指標は連続的であり、確認対象が明確でないためユーザー側の作業負担が大きい。本研究では、従来は属人性であった不確実性の閾値(予測の信頼度が低い領域)の自動算出手法を開発した。

[実験]

Fe 基熱間圧延ロール金属材の電子顕微鏡画像(反射電子像と二次電子像)を用い、MCD を適用した SS モデルによる評価検証を行った。MCD を適用した SS で複数回の予測を行い、全画素について各クラス(各相)の判定確率の分布を得た。判定確率の分布において複数のクラスの分布の重なり度合の特徴に基づき、該当画素の予測結果の信頼度を分類した(Fig. 1(f), (g))。例えば、複数のクラスの分布が一定値以上重なっている場合は、予測信頼性が低い画素と判定する(Fig. 1(f))。

[結果・考察]

新たな不確実性指標を用い、予測結果の信頼性が高い領域(Fig. 1(d)の白)、信頼性が低い領域(Fig. 1(e)の白)に分類した。予測結果の信頼性が低い領域を参照し、従来の不確実性マップ(Fig. 1(c))と比べ、特徴解析として使用する画像の確認作業を大幅に効率化できることを実証した。また、予測結果の信頼性が低い領域を参照し、教師画像を修正した後、予測正解率が向上した。

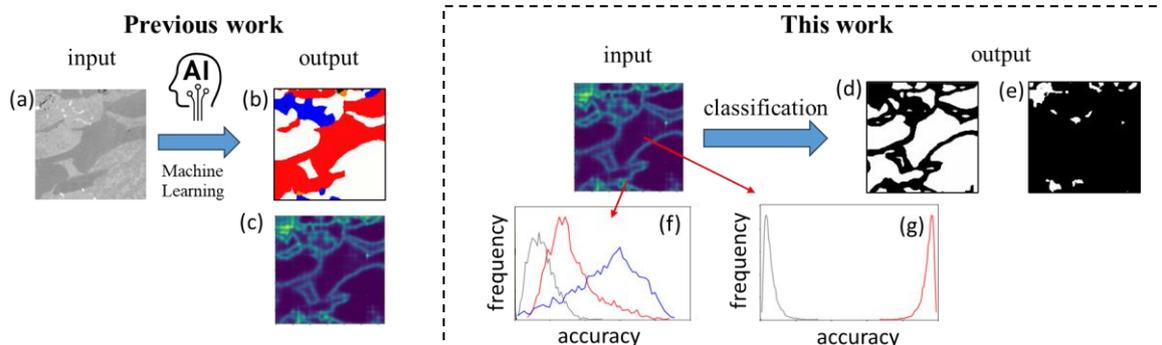


Fig. 1 Prediction results and uncertainty level classification. (a) Input SEM image, (b) Prediction results, (c) Uncertainty map (d) Uncertainty map (high reliability area), (e) Uncertainty map (low reliability area). (f) An example of probability distribution of low prediction reliability and (g) high prediction reliability.

[1] Y. Gal *et al.*, ICML, 2016. [2] R. Seoh, arXiv: 2007.01720. [3] K.Zou *et al.*, Meta-Radiology 1 (2023) 100003.

深層学習による表面 SEM 像の三次元情報解析 3D Information Analysis of Surface SEM Images using Deep Learning

筑波大院 数理物質¹, 学振特別研究員² 石山隆光^{1,2}, 野沢公暉¹, 末益崇¹, 都甲薫¹

Univ. of Tsukuba¹, JSPS Research Fellow² T. Ishiyama, K. Nozawa, T. Suemasu, and K. Toko

E-mail: ishiyama.takamits.ta@alumni.tsukuba.ac.jp

【はじめに】 表面加工や積層技術の高度化に伴い、高速かつ汎用的な表面測定技術の開発が求められている。従来の原子間力顕微鏡 (AFM) は、走査測定に数分を要する上、急激な凹凸変化 (Fig. 1(a) 枠内) に弱い。そこで本研究では、画像認識 AI (Fig. 1(b)) を用いることで、短時間で広域の情報を取得できる走査電子顕微鏡 (SEM) 像から、試料の表面粗さ (RMS) と最大高さ (Height) の予測を試みた (Fig. 1(c))。

【実験方法】 成膜条件を調整し表面様態を変化させた Al 膜 (膜厚 50–200 nm、堆積温度 室温–600 °C) に加え、Ag (膜厚 50 nm、室温堆積) と Cu 膜 (膜厚 50 nm、室温堆積) をそれぞれ 1 試料ずつ、単結晶 Si 基板上にスパッタ成膜した。その後、各試料につき、5 μm 四方の SEM 像を 120 枚、AFM 像を 4 枚取得した。続いて、ImageNet[1]の学習済み ResNet-34[2]をベースとした機械学習 (ML) モデルに、SEM 画像を入力として、対応する試料の RMS 及び Height を学習させた。この際、Al 膜のうち 15 枚は 3-fold 交差検証の訓練データとして、残り 1 枚の Al 膜と、Ag および Cu 膜はテストデータとして用いた。

【結果・考察】 Fig. 2(a,b) に示す学習曲線より、50 エポック程度で損失関数が収束したことが判る。どの fold においても、training と validation の誤差の乖離は小さく、RMS および Height の決定係数 R^2 は ~ 0.9 と高い値を示した。ML モデルが表面凹凸の認識性能を獲得したと推察される。その汎化性能を検証するため、学習した AI とは別材料である Ag および Cu 膜を用いて評価を行った。Fig. 3(c,d) に示す試料表面の高さ分布は Ag と Cu で大きく異なり、評価用のデータとして適切と言える。SEM 像から予測された RMS_{SEM} 、 $\text{Height}_{\text{SEM}}$ は、AFM 測定で得られた値 (RMS_{AFM} 、 $\text{Height}_{\text{AFM}}$) とよく一致し、ML モデルは材料に依存しない高い汎化性能を示した。その上、この ML モデルはラップトップを用いながらも、1 秒未満の高速推論を実現した。以上、本研究は、AI 時代のパラダイムシフトを迎えた電子顕微鏡の新しい姿を提示し、材料工学における表面測定技術の発展に大きく貢献するものである。

[1] O. Russakovsky *et al.*, *IJCV*, **115**(3), pp.211-252 (2015).

[2] K. He *et al.*, *Proc. IEEE Conf. CVPR*, pp.770-778 (2016).

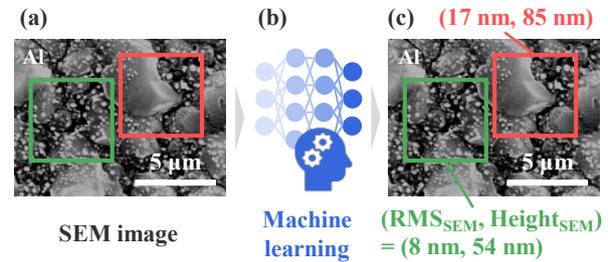


Figure 1. (a) SEM image of the Al test-sample surface. (b) Schematic diagram of the machine learning. (c) Predicted values of RMS_{SEM} and $\text{Height}_{\text{SEM}}$ within the specified regions, using the model trained. The predictions are made on regions marked in the SEM image.

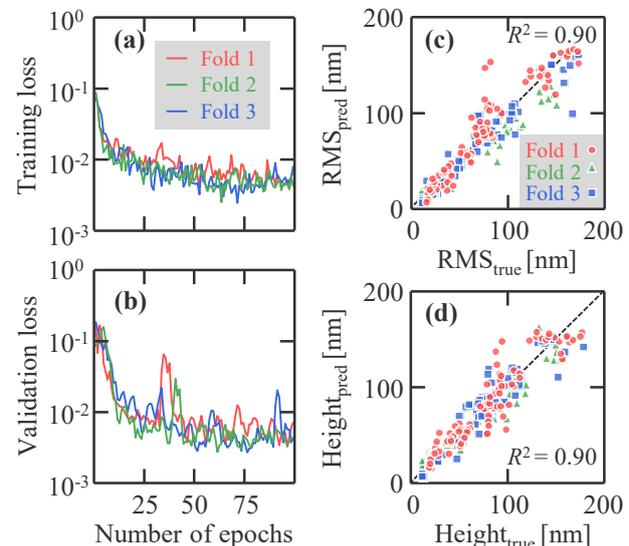


Figure 2. (a) Training and (b) validation loss convergence for the machine learning model trained on Al samples. Comparison of RMS and Height predictions from SEM data with measurements obtained from AFM data, including R^2 . Red, green, and blue colors correspond to the different cross-validation folds.

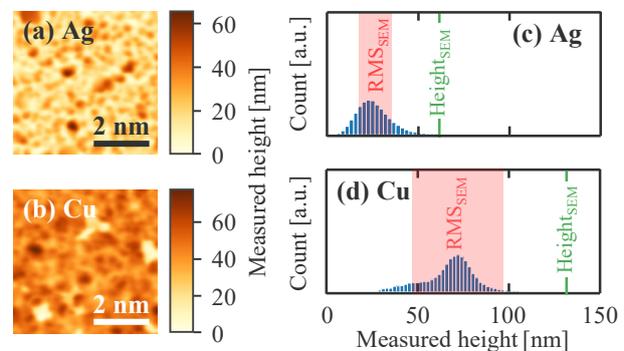


Figure 3. AFM images of the (a) Ag, and (b) Cu film surface used for testing. Histogram of the height distribution in the (c) Ag, and (d) Cu AFM image. The red area represents RMS_{SEM} , and the green line indicates the $\text{Height}_{\text{SEM}}$.

深層学習を活用した超伝導電線の 3D フィラメント微細構造解析

3D Filament Microstructure Analysis of Superconducting Wires Using Deep Learning

東京農工大学¹, 九州大学², 日立製作所³ ○(B)安東 昂亮¹, 西谷 慶輝¹,

石橋 辰則¹, 嶋田 雄介², 児玉 一宗³, 田中 秀樹³, 山本 明保¹

Tokyo Univ. Agri. & Tech.¹, Kyushu Univ.², Hitachi, Ltd.³, °Kosuke Ando¹, Yoshiki Nishiya¹,

Tatsunori Ishibashi¹, Yusuke Shimada², Motomune Kodama³, Hideki Tanaka³, Akiyasu Yamamoto¹

E-mail: s216621y@st.go.tuat.ac.jp

[背景] ニホウ化マグネシウム (MgB_2) は高い超伝導転移温度を持つため、希少な寒剤を必須とすることなく、冷凍機冷却や液体水素温度で応用可能な材料として期待されている。 MgB_2 は多結晶型の超伝導材料であるため結晶配向のプロセスが不要であり、超伝導前駆体粉末を内封した金属シース管に対して冷間加工を行った後に、熱処理を施して超伝導化する Powder-in-tube (PIT) 法による長尺超伝導電線の製作が可能である。近年では変動磁場応用向けにマルチフィラメント化が施された長尺電線の研究開発が進められているが[1]、超伝導フィラメント数の増大と径の縮小にともない臨界電流性能が減少するケースが報告されている。一方、我々は、医用画像処理[2]等にも応用される深層学習手法の一つであるセマンティックセグメンテーションに着目し、複雑な微細構造を持つ多結晶材料に対して高い精度で構成相を識別したことを報告している[3]。

本研究では、 MgB_2 超伝導電線のフィラメント構造の三次元解析を目的として、FIB-SEM による三次元観察データに深層学習を用いて微細構造の定量化を行った。

[方法] 解析対象の試料には研究開発中の超伝導マルチフィラメント電線[4]を用いた。Fig. 1(A)に電線の断面構造を示す。径が約 $10 \mu\text{m}$ の超伝導フィラメント 51 本が円周状に配置されており、この中の数本のフィラメントが存在する領域(B)に対して FIB-SEM 観察を行った。教師データセットとして FIB-SEM より得た二次電子像(B)と、その画像に対し手動で相識別を行ったものを用いた。深層学習モデルには、Encoder - Decoder モデルに基づく U-Net[2]を用いた。

[結果] 観察した 1232 枚の画像を元に深層学習により相識別、及び三次元再構築を行い(C)、FIB-SEM の定量化及びフィラメント内部構造の可視化に成功し、フィラメントの傾斜や一部の内部欠陥がフィラメント長手方向に連なる様子などが確認できた。

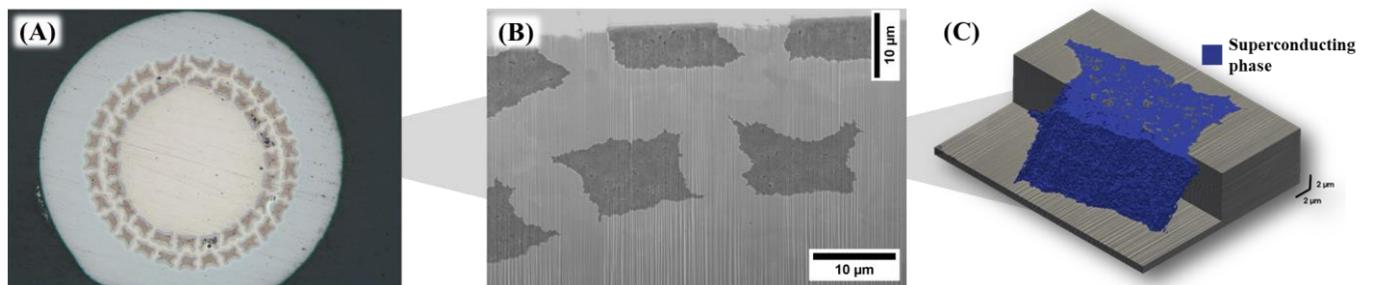


Fig. 1 Multiscale structure of MgB_2 superconducting multi-filamentary wire fabricated by the PIT method.

(A) Optical image, (B) Secondary electron image, (C) 3D reconstruction of superconducting phase.

[謝辞] 本研究の一部は JST CREST (JPMJCR18J4)、科研費(JP21H01615)の支援により行われた。

[参考文献]

[1] H. Tanaka *et al.*, *J. Cryo. Super. Soc. Jpn.* **56**, 327 (2021) [2] O. Ronneberger *et al.*, *Proc. MICCAI* **9351** (2015)

[3] Y. Hirabayashi *et al.*, *npj Comput. Mater.* **10**, 46 (2024) [4] M. Kodama *et al.*, *Supercond. Sci. Technol.* **34**, 025018 (2021)

GAN を活用した擬似的な三次元多結晶 Si 組織の生成

Generation of pseudo 3D multicrystalline Si structure using Generative Adversarial Networks

名大院工¹, 名大未来研², 理研 AIP³, 名大院情報⁴, 名大未来機構⁵○(M2) 弟子丸 拓巳¹, 沓掛 健太郎^{1,2,3}, 工藤 博章⁴, 勝部 涼司¹, 宇佐美 徳隆^{1,2,5}Grad. Eng., Nagoya Univ.¹, IMASS², AIP, RIKEN³, Grad. Info.⁴, InFuS⁵ Nagoya Univ.○Takumi Deshmaru¹, Kentaro Kutsukake^{1,2,3}, Hiroaki Kudo⁴, Ryoji Katsube¹, Noritaka Usami^{1,2,5}

E-mail: deshmaru.takumi.k1@s.mail.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

多結晶材料の特性や性能は結晶粒界分布や粒形状といったマイクロ構造に大きく依存する。そのため、優れた性能を持った多結晶材料作製のためには組織と特性の関係性の解明や制御、デザインが重要である。組織と特性の関係性解明に関する研究では三次元ボロノイ図で表現した多結晶組織に対する特性予測や物理シミュレーションが主流であるが、ボロノイ図では正確に組織を再現できない場合がある。例えば本研究のモデル試料である一方向凝固法で成長させた多結晶 Si は成長方向・高さが重要な情報であるため、等方性を持つボロノイ図での再現は適さない。また、フェーズフィールドシミュレーションをはじめとした計算科学的手法では物理法則や経験則に基づき戦略的に結晶組織を作製する。そこで、本研究ではより高速で網羅的な多結晶組織作製を可能とすることを目的とし、画像生成 AI のひとつである敵対的生成ネットワーク (GAN) の活用により結晶粒界分布・粒形状・方位・成長高さ情報を含む三次元多結晶組織の生成手法を構築した。

2. 実験方法

使用したサンプルはハイパフォーマンス多結晶 Si インゴットから 180 μm 間隔で切り出した 15.6 cm 角のウエハ 30 枚である。これらの Si ウエハについて独自の輝度測定装置で入射光を水平方向に 360° 回転させて撮影し、結晶方位を反映した輝度プロファイルを取得した。LSTM ニューラルネットワークと全結合層で構成された結晶方位推定モデルに輝度プロファイルを入力することで大面積での結晶方位マッピングを行った[1]。取得した方位画像には結晶粒界分布や粒形状、方位情報が含まれる。15.6 cm 角のウエハ 30 枚から 2.6 cm 角にランダムクローズした方位画像 1300 枚を使用し、GAN モデルの一種である StyleGAN2-ADA を訓練した。ADA と呼ばれる訓練過程の段階に応じてデータ拡張の適応量を調整する手法が採用された本モデル

は少ない教師画像でも訓練が可能である[2]。訓練後はノイズからバラエティ豊富な方位画像を生成できる。次に、15.6 cm 角の方位画像 30 枚から作成した 180 μm の等間隔な 2.6 cm 角の方位画像ペア 900 組を使用し、画像から画像へのマッピングを学習する pix2pix を訓練した[3]。訓練後は入力 of 180 μm 上方の方位画像を出力できる。Fig. 1 に示すようにノイズから最下端の方位画像を生成し、上方の方位画像の予測を繰り返し積層させることで擬似的な三次元多結晶 Si 組織の生成を可能とした。

3. 結果と考察

ノイズから生成した方位画像、180 μm 上方の方位画像、30 枚の方位画像を積層させた多結晶 Si 組織とその断面の一例を Fig. 1 に示す。結晶粒界分布や粒形状、方位情報を含んだ多結晶組織の生成に成功した。一度モデルの訓練を終えてしまえば、大量に擬似的な三次元多結晶組織を生成することが可能である。一方で、Fig.1 の組織断面図からも見て取れるように結晶方位が不自然な変化を示す領域があり、組織成長の連続性には課題が残る。今後は pix2pix への入力を 2 枚のペア画像ではなく複数枚の方位画像を重ねたセットにすることで、組織の連続性の精度向上を図る。この提案手法は他材料・組織に展開でき、様々な結晶組織の網羅的かつ迅速な解析を可能にすることで高機能材料の開発に貢献しうる。

【謝辞】

本研究は JST CREST(JP MJCR17J1)支援のもと行われた。

【参考文献】

- [1] K. Hara *et al.*, APL Mach. Learn. **1** 026113 (2023)
- [2] T. Karras *et al.*, Advances in neural information processing systems **33**, 12104-12114 (2020)
- [3] P. Isola *et al.*, IEEE Conference on CVPR 2017, 1125-1

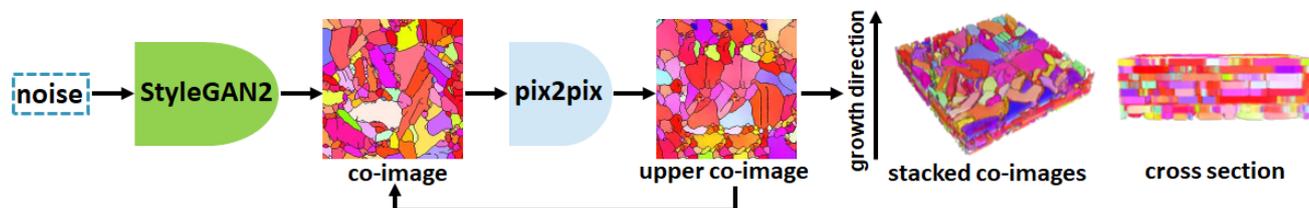


Fig. 1. Overview process of pseudo 3D multicrystalline Si structure generation.