

## XAI による水素化物超伝導材料の組成探索

## Exploration of Superconducting Hydrides with Explainable AI (XAI)

京大工 ○(B)徳山 和映, 増田 太一, 宮本 奏汰, 田辺 克明

Kyoto Univ. ○Kazuaki Tokuyama, Taichi Masuda, Souta Miyamoto, Katsuaki Tanabe

E-mail: tanabe@cheme.kyoto-u.ac.jp

水素化物超伝導材料は高压下で高い臨界温度 ( $T_c$ )を示し, 室温超伝導の実現に有望である. しかし, 一般的な二元水素化物は金属状態として安定化させるために  $10^2$  GPa オーダーの圧力が必要になる. そこで, 水素化物を三元系にすることで安定化圧力の低減が期待されている<sup>[1]</sup>. 本研究では, データ駆動型手法と XAI (説明可能な AI) <sup>[2]</sup> を活用し, 解釈性を高めた機械学習モデルの構築を行った. また, このモデルを用いて三元水素化物の有望な組成と組成比の効率的な探索を行った.

2007–2024 年の二元・三元水素化物の文献値約 2,000 件と国立研究開発法人物質・材料研究機構の超伝導材料データベースの実験値約 13,000 件<sup>[3]</sup>を用いた. 水素化物のデータセットの散布図を Fig. 1 に示す. 221 個の物理化学的特徴量をもとに, 主にツリー系の機械学習モデルを構築し, ダブルクロスバリデーション(ダブル CV)によってモデルの予測精度を評価した.

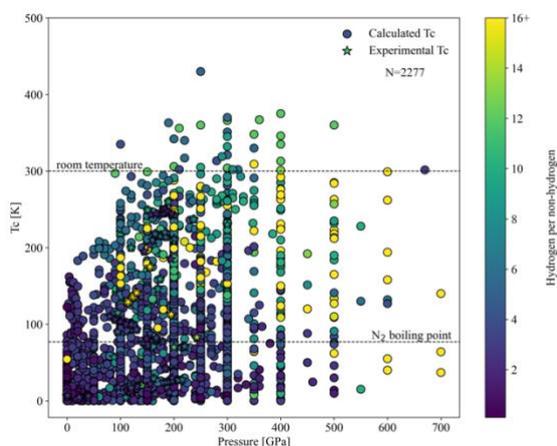


Fig. 1 The critical temperatures of binary and ternary hydrides at various pressures.

ダブル CV の結果を Table 1 に示す. また, 予測性能が最も良かったエクストラツリー(ET)モデルについて, SHapley Additive exPlanations (SHAP)による特徴量重要度の解析を行った結果

を Fig. 2 に示す.

Table 1 Comparison of predictive accuracy across models using double cross-validation.

Model	R <sup>2</sup>	RMSE [K]
LR	0.523	56.87
SVR	0.713 ± 0.056	44.03 ± 3.81
RF	0.773 ± 0.050	39.15 ± 4.08
ET	0.778 ± 0.049	38.67 ± 4.04
GBR	0.769 ± 0.045	39.48 ± 3.58
LGBM	0.772 ± 0.053	39.15 ± 4.35
XGB	0.775 ± 0.049	38.94 ± 4.12
CatBoost	0.775 ± 0.045	38.95 ± 3.62

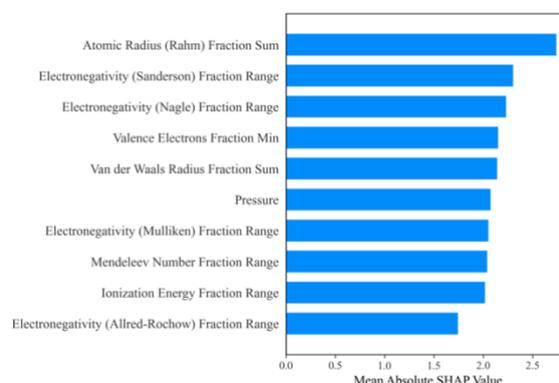


Fig. 2 SHAP plot summarizing top 10 important features.

モデルにて重要度の高かった, 原子半径や電気陰性度は, より低い圧力で高い臨界温度を実現するために重要な要素であると指摘されている<sup>[1]</sup>. このモデルを用いた三元水素化物の材料探索の結果, およびデータセットの種類を拡張することによる予測精度の影響などについて当日報告する.

## 参考文献

- [1] L. Boeri et al., J. Phys. Cond. Matter 34, 183002 (2022).
- [2] T. Masuda and K. Tanabe, J. Appl. Phys. 136, 175703 (2024).
- [3] J. Zhang et al., J. Energy Chem. 78, 232 (2023).