



HOKKAIDO UNIVERSITY

AMBITIOUS LEADER'S PROGRAM

Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science

Ambitious 物質科学セミナー

【化学反応創成研究拠点(ICReDD)共催】



量子アニーリングを用いた ブラックボックス最適化 手法と材料科学への応用

田村 亮 博士

物質・材料研究機構 主任研究員

東京大学大学院新領域創成科学研究科 講師



2020年2月13日(木) 16:30~18:00

北海道大学 ICReDD サロン(創成科学研究棟 02-106 室)

物質・材料科学分野におけるブラックボックス最適化の組合せ爆発を回避するために、量子アニーリングを用いたブラックボックス最適化手法を開発した。本手法では、特性予測を行うための機械学習モデルとして、イジングモデルで表すことのできる Factorization machine を採用した。用意した材料データを用いて学習された Factorization machine を量子アニーリングで解くことで、全ての材料候補から予測特性が一番良い候補を高速で選択できる。この選択された材料の特性を実験または計算で特定することで、材料データを更新する。更新した材料データを用い Factorization machine を再学習し、量子アニーリングで新たな材料候補を提案する。この手順を繰り返すことにより、ブラックボックス最適化が実行できる。この手法の有用性を検証するために、放射冷却用メタマテリアル開発を行った。その結果、材料探索時間をこれまでのブラックボックス最適化手法に比べて圧倒的に短縮できることが示せた。また、特性計算を用いた材料探索ではあるが、これまで開発されてきたメタマテリアルに比べて、高い性能を持つ材料を設計することができた。本研究の詳細は、arXiv:1902.06573 にまとめた。

連絡先：北海道大学大学院理学研究院化学部門 小林正人

(Tel: 011-706-3502, E-mail: k-masato@sci.hokudai.ac.jp)