

マテリアルズインフォマティクスを支えるアルゴリズム

Algorithms for Materials Informatics

東大新領域¹, 理研 AIP², 物材機構³ ○津田 宏治^{1,2,3}

University of Tokyo¹, RIKEN AIP², NIMS³, Koji Tsuda^{1,2,3}

E-mail: tsuda@k.u-tokyo.ac.jp

望みの機能を持つ新たな分子・物質を設計することは、科学的・産業的に大きな意義を持つ。重要な対象としては、核酸・タンパク質などの生体高分子や、金属・セラミック・ナノ粒子などの無機物質、創薬で重要な低分子有機化合物などが挙げられる。ベイズ最適化やモンテカルロ木探索などの人工知能技術を用いた自動設計は、近年注目を集めているが、未だ科学界・産業界に浸透しているとは言えない。本講演では、様々な対象の設計問題が、ブラックボックス最適化という共通した数理基盤の上で扱えることを指摘する。さらに、データからの機械学習、膨大な空間を効率的に探索する離散アルゴリズム、物理法則から物性値を正確に予言する第一原理計算、ウェットラボにおける検証実験の強力な組み合わせにより、様々な分子・材料設計問題が解けることを示す。