マテリアルズ・インフォマティクスにおける 記述問題、予測問題、提案問題

Descriptive, predictive and prescriptive problems on materials informatics

物材機構[1]　○木野 日織[1]

NIMS[1]

E-mail: kino.hiori@nims.go.jp

マテリアリズ・インフォマティクスの問題は大きく分けて記述問題, 予測問題と提案問題に分けられる。いずれの問題もデータを用意するところから始まるが、まずは記述問題としてどの記述子が目標変数をうまく説明するかを解析する必要がある。一度記述子で回帰可能なことが分かると次に予測問題として目標変数への予測能を上げることを目的とできる。これらは一つ一つの予測モデルを作成することを目的としたが、提案問題では目的のために次に何を行うべきかの意思決定を自動的に行う。

最初に、これらに関しての我々の取り組みを紹介する。１）記述問題としてキューリー温度の予測能を上げるために必要な記述子に関する研究を行った。全探索を行うとほぼ同等の回帰性能を持つ回帰モデルが多数存在することがわかる。これらのモデルにおいて記述子の重要性を記述子同士の類似度を最大限利用することにより評価した。２）予測問題では第一原理計算によるポテンシャルエネルギー表面を第一原理と同じく原子種類と原子の配置だけを記述子として古典ポテンシャルを作成できることが知られているが、更にデータ空間を分割することにより回帰性能を上げた研究を紹介する。３）提案問題ではベイズ最適化を用いた。第一原理計算による構造探索を自動化し、最も安定な構造を多数の初期構造からより少ない構造探索試行回数により発見した研究を紹介する。

提案問題は人間の介入が少なくなりいわゆる人工知能（AI）的な作業を行うが、それが他の研究より上位の研究というわけではなくむしろ全ての過程は相補的である。また、全ての過程が AI で自動的に行われるということはなく、特に、専門家の持つ知識は AI によっては置き換えることは当面はできない。専門家は具体的な様々な問題、解決方法を持つが専門用語が異なるために通常の言語では意思疎通が難しいが、その知識を如何に平易な形で取り出しすばやく意思疎通を図るかはある明確な目的があるプロジェクトでは重要だろう。知識の表出と理解のために機能オントロジに基づく分解木を上の研究に対して適用し説明を行った事例を紹介する。

© 2018年 応用物理学会