解釈可能なスパースモデリング

Interpretable Sparse Modeling

阪大産研、物材機構 MaDIS ○ 小口 多美夫、藤井 将
ISIR, Osaka University; MaDIS, NIMS ○Tamio Oguchi, Hitoshi Fujii
E-mail: oguchi@sanken.osaka-u.ac.jp

データ駆動による物質材料研究の加速、いわゆるマテリアルズ・インフォマティクス（MI）の研究がたいへん活発に報告されるようになった。特に、第一原理計算と機械学習の連携による MI 研究は、計算の自動化等により大規模で均質な物性データの効率的生成が行われ、急速に展開している。機械学習において、ニューラルネット等のディープ・ラーニング手法は複雑で非線形的な相関関係をよく表現するが、その解釈が一般的に困難である。一方、線形回帰に基づく機械学習では比較的単純なモデルが得られるが、その表現力に劣る点が指摘されている。我々は、線形回帰に基づく機械学習における表現力の欠点を解決するために線形独立記述子生成（LIDG）法を提案し [1,2]、解釈可能なスパースモデルの構築を試みている。本講演では、LIDG 法の基本と特徴を述べた後、その適用例として二元化合物半導体における構造のエネルギー差を定量的に表現する解釈可能なスパースモデリングの取組み [3] について紹介する。

本講演に関する研究は、情報統合型物質・材料開発イニシアティブ [4] の支援による。

文献

[1] H. Fujii, T. Fukushima, T. Oguchi, unpublished.
[2] H. Fujii, https://github.com/Hitoshi-FUJII/LIDG
[3] Y. Kanda, H. Fujii, T. Oguchi, unpublished.
[4] https://www.nims.go.jp/MII-I/

© 2019年 応用物理学会