

材料データ取得・解析・活用のための ベイズ最適化とスパースモデリング

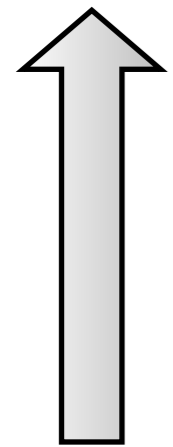
安藤 康伸

AIST, 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

機械学習利用の流れ

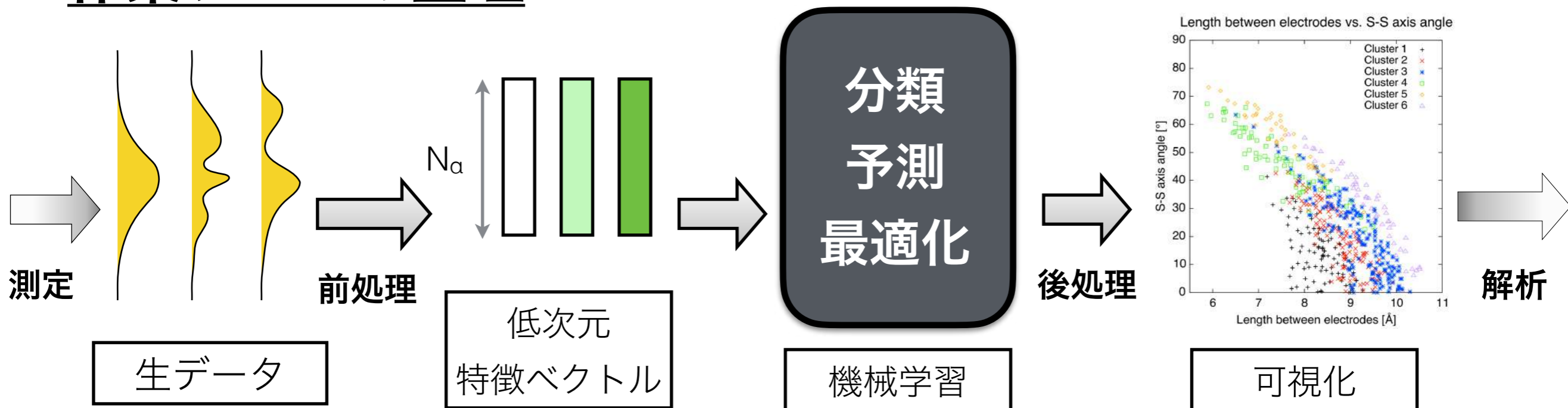
課題設定

最重要ポイント



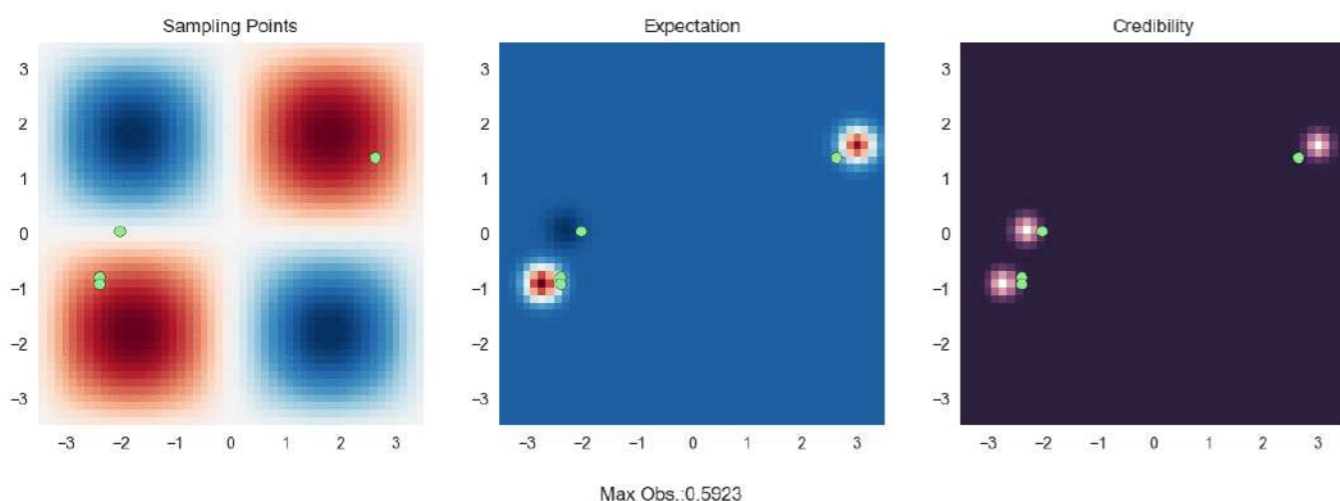
- ✓ 解析によって何が知りたいか？
- ✓ 比較したいデータは何か？（スペクトル・Heatmap etc.）
- ✓ 設定課題が十分ブレイクダウンできているかどうか
- ✓ 機械学習で見込める効果は何か？（高速化・客観化・因子発見など）

作業フローの整理



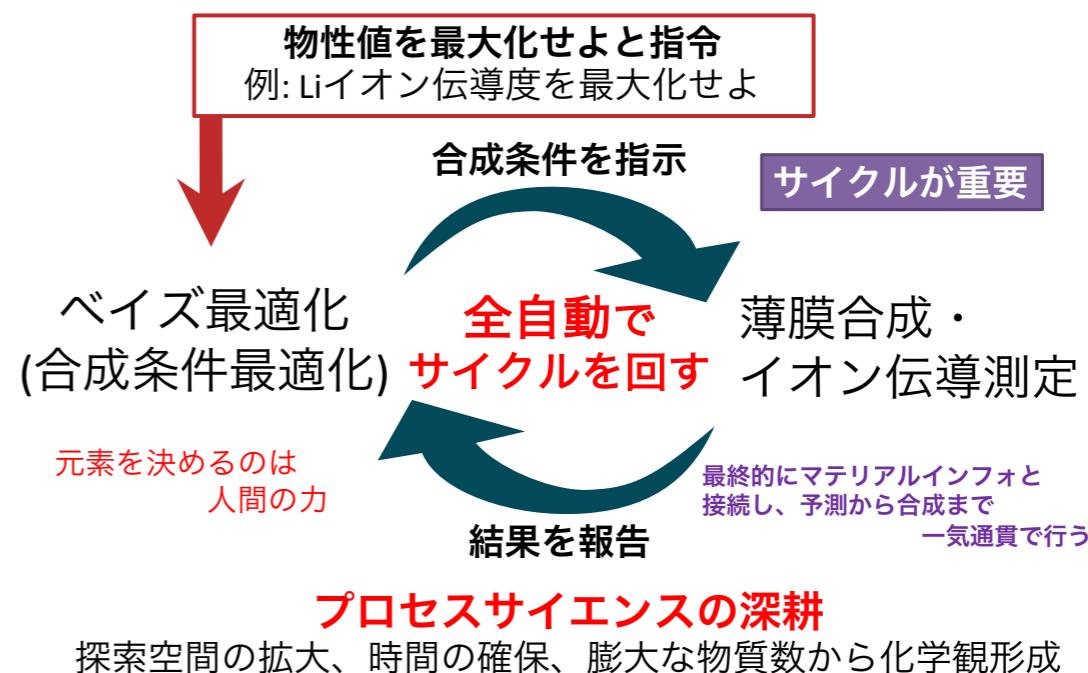
ベイズ最適化を用いたデータ取得

ベイズ最適化



- ✓ 取得データ情報からの予測曲線を作成（回帰）
- ✓ 同時に回帰曲線がどの程度“信用できるか”を可視化したい（分散）
- ✓ 上記二つの「情報」から次の観測点を選びたい（獲得関数）

少ない手数で
最適パラメータ
を発見するため
の手法



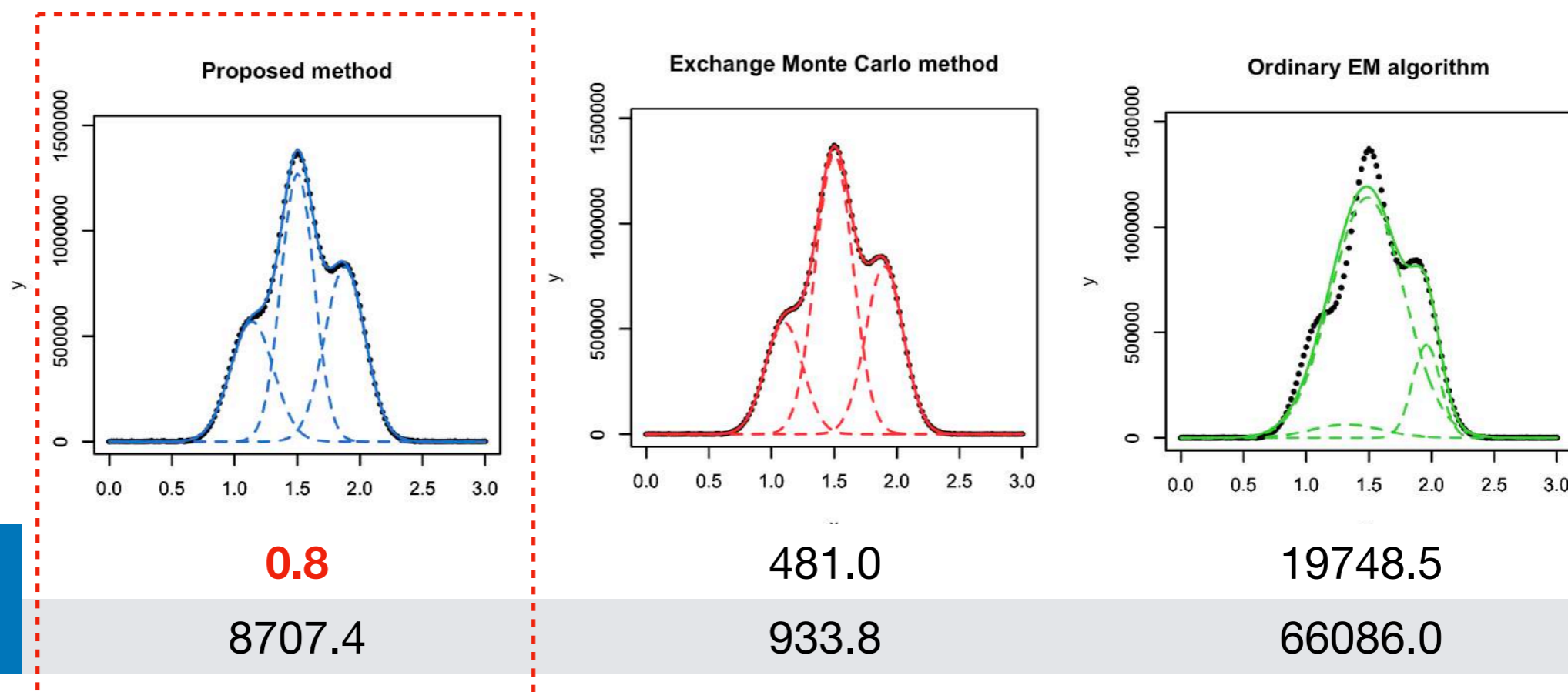
ハードウェアの価値を高めるソフトウェアの開発

- ベイズ最適化のプログラム開発
- 計測データの高速度情報抽出
- データベース構築やデータフローのデザイン
- 実験室におけるIT環境の整備
- 放射光施設との連携
- 「On-The-Fly解析」による計測モニタリング

材料合成プロセスの柔軟な最適化の実現

スペクトルに適したEMアルゴリズムによる解析

通常のEMアルゴリズム：計算負荷が測定イベント数に依存 ← **改善！**



時間[s]

0.8

481.0

19748.5

RMSE

8707.4

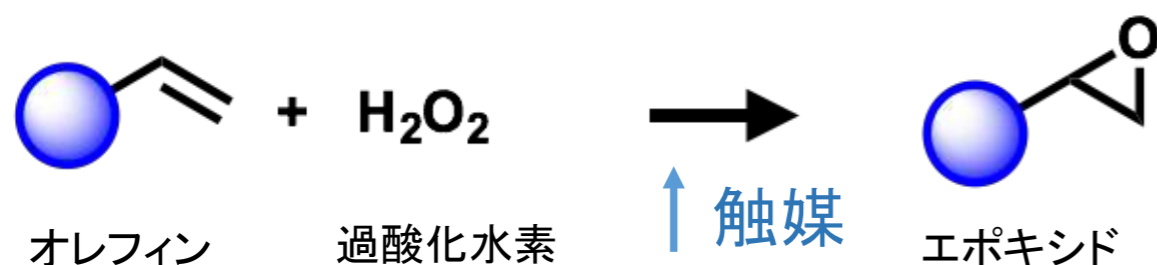
933.8

66086.0

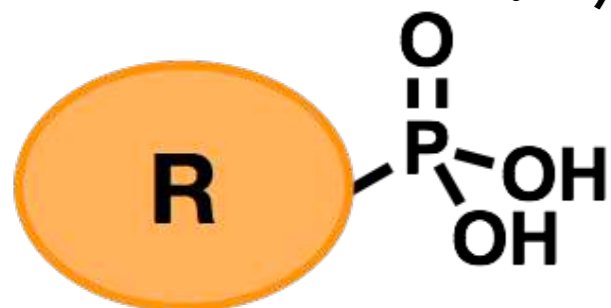
- ランダムな初期値でも安定して動作、極めて低コストでモデル推定（ピーク抽出）が可能
- 初期値を振って最良のモデルを探せばさらに精度をあげられる
- 高ノイズデータ・埋もれたピークに関してはモデリングが困難（事前知識が必要）
- 他のスペクトル形状+バックグラウンド処理にも拡張中

スペースモデリングによる触媒活性予測

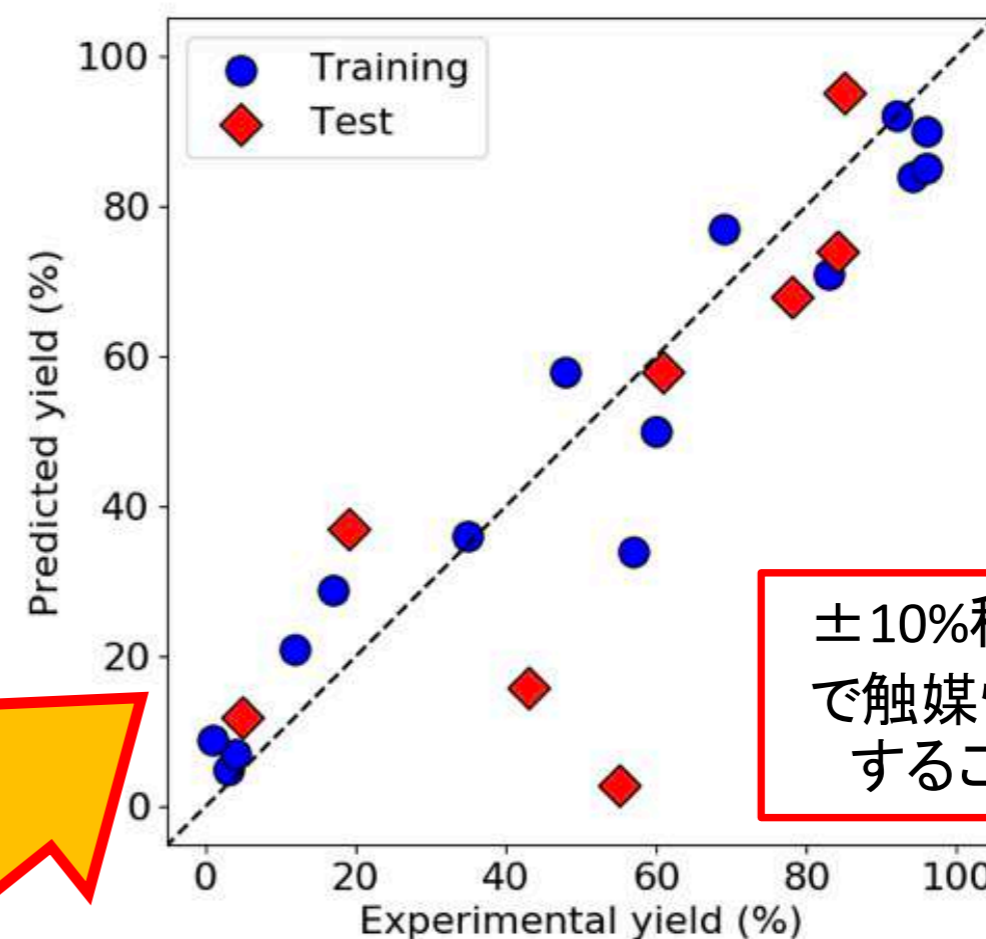
高活性ホスホン酸触媒をシミュレーションからデザインすることに成功 (矢田・安藤・永田)



- ・ タングステン触媒
- ・ 相間移動触媒
- ・ ホスホン酸触媒



エポキシド高収率な
ホスホン酸の側鎖R
を予測したい



±10%程度の精度
で触媒性能を予測
することに成功

量子化学計算
によって触媒を
数値化

実験によって
触媒性能を評
価

AI技術で関連付)

- ・ 実験をせずに高収率触媒を予測・性能を実証
- ・ 専門家の勘を再現することに成功
- ・ AI, 機能材料, 触媒科学3センター連携による成果

課題設定と基礎の重要性

全員が機械学習の専門家になる必要はない

- ✓ 先端アルゴリズム開発などハードルが高すぎる
- ✓ まず初歩的なことさえ理解できれば、先端研究をある程度フォローできる
- ✓ 必要なのは、専門家と「会話」ができること（市民権）

課題設定こそ研究者の真骨頂

- ✓ 機械学習の専門家に「物性・材料」の理解を前提にするのは酷
- ✓ 自分たちの専門性を活かした「課題設定」こそ、物性科学者がやるべきこと
- ✓ 課題解決に必要な機械学習の技術に当たれば最高

機械学習の流儀を嗜み（市民権の獲得）、専門家とコミュニケーションしながら自らの課題を解決することが理想