

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

H28年度採択研究者

2018年度 実績報告書

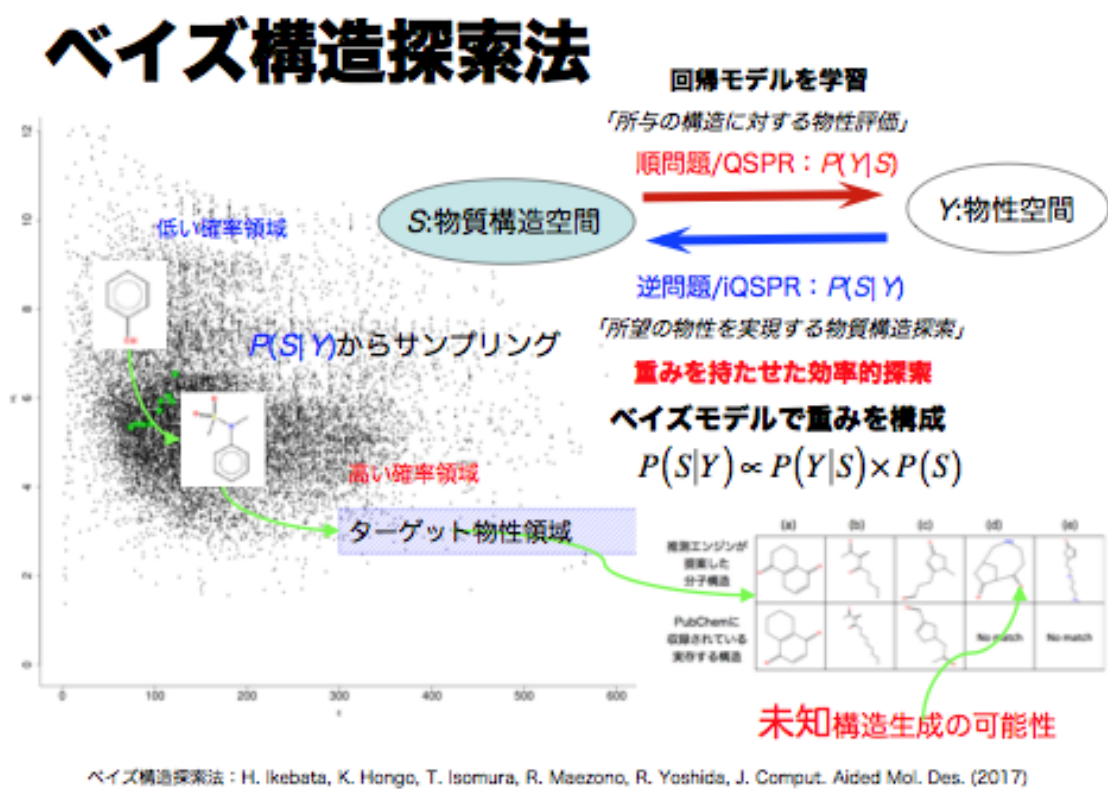
本郷 研太

北陸先端科学技術大学院大学情報社会基盤研究センター
准教授

ベイズ事後分布を探索重みに活用した物質構造探査の予測性向上

§ 1. 研究成果の概要

「物性の第一原理計算」と「機械学習などのデータ科学」との融合展開「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」における最重要課題は、「所望の物性を実現する構造を予測する事」である。本研究は、「物質構造空間」での膨大な可能性の中から、効果的に候補を絞り込んで「所望の物性レンジ」に属する新規物質の効率的探索を行うために、ベイズ逆問題の定式化を採用する。このベイズ構造探索法では、構造から物性を予測する回帰モデルを逆にたどり、「化合物らしさ」の事前情報を統計的重み付け(事前分布)とすることで、既知化合物からの効率的探索を超えて、未知化合物の探索を可能とする。特に、事前分布構築に必要となる、化合物候補の自動生成モデルとして、自然言語処理分野で利活用されているN-gramモデルを採用している。本研究は、これまでに、ベイズ構造探索法のプロトタイプ実装を完了し、有機太陽電池用途の化合物データベースを利用して、新規太陽電池材料の探索を行っている。



§ 2. 研究実施体制

①研究者:本郷 研太 (北陸先端科学技術大学院大学情報社会基盤研究センター 准教授)

②研究項目

- ・ 実データを用いたベイズ構造探索の実施
- ・ 物性予測モデル(順問題)の改善