

数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用  
2021 年度採択研究代表者

2022 年度  
年次報告書

本武 陽一

一橋大学 ソーシャル・データサイエンス教育研究推進センター  
准教授

解釈可能 AI によるパターンダイナミクスの数理構造抽出と材料情報学への応用

## 研究成果の概要

本研究課題の目的は、材料科学分野でよくみられる複雑なパターンダイナミクスの物理法則・原理を発見することを試みる科学者をサポートする解釈可能 AI を開発することである。具体的には、機械学習でパターンダイナミクの縮約モデルを構築し、そこから解釈可能情報を抽出する枠組みの開発を目指す。本年度は、縮約モデルを深層ニューラルネットワーク (DNN) で構築するアプローチと、基底関数で構築するアプローチのそれぞれで枠組み開発に着手した。

DNN 型アプローチでは 3 つの枠組みの開発に着手した。1 つ目は、ハミルトニアン・ニューラルネットワーク型のモデルで大自由度な勾配系の縮約ポテンシャルを学習し、そこから解釈可能情報を抽出する枠組みである。枠組みを磁性材料の磁区構造形成過程に適用した結果、学習された縮約ポテンシャルから、既存の縮約モデルの改善法を示唆する解釈可能情報を抽出した。2 つ目は、DNN を用いて材料の破壊断面画像から解釈可能情報を抽出する枠組みである。DNN の予測が外れる実験条件・材料組成から、特異な破壊機序を持つ条件の存在を示唆した<sup>1)</sup>。3 つ目は、力学系で訓練された DNN から系の対称性を推定する枠組みである。研究代表者が開発済みの対称性推定法を拡張することで、ルンゲ・レンツベクトル保存を導く非線形変換に対する対称性推定を実現した。

基底関数型アプローチでは 2 つの枠組みの開発を実施した。1 つ目は、パターンダイナミクスを位相的特徴量の系列として表現し、それらを動的モード分解することで、解釈可能な縮約モデルを構築する枠組みである。大規模な鳥の群れ形成データに枠組みを適用した結果、これまでに抽出できなかった群れの間関係性の抽出に成功しつつある。2 つ目は、データが力学系から生成されると仮定することで、高次元の特徴量空間から効率的に信号次元を抽出する枠組みである。手法を複雑系の時系列データに適用した結果、信号抽出に成功した<sup>2)</sup>。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) [Yoh-ichi Mototake](#), Kaita Ito, Masahiko Demura, “Quantitative Prediction of Fracture Toughness of Polymer by Fractography Using Deep Neural Networks”, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, 2(1), 310-321, 2022.
- 2) [Yoh-ichi Mototake](#), Y-h. Taguchi, “Signal identification without signal formulation,” arxiv:2304.06522, 2023.