

大規模データに基づく電子物性予測のための深層学習技術の創出

瀧川 一学 (北海道大学・大学院情報科学研究科/化学反応創成研究拠点・准教授)

(H29-H32年度)



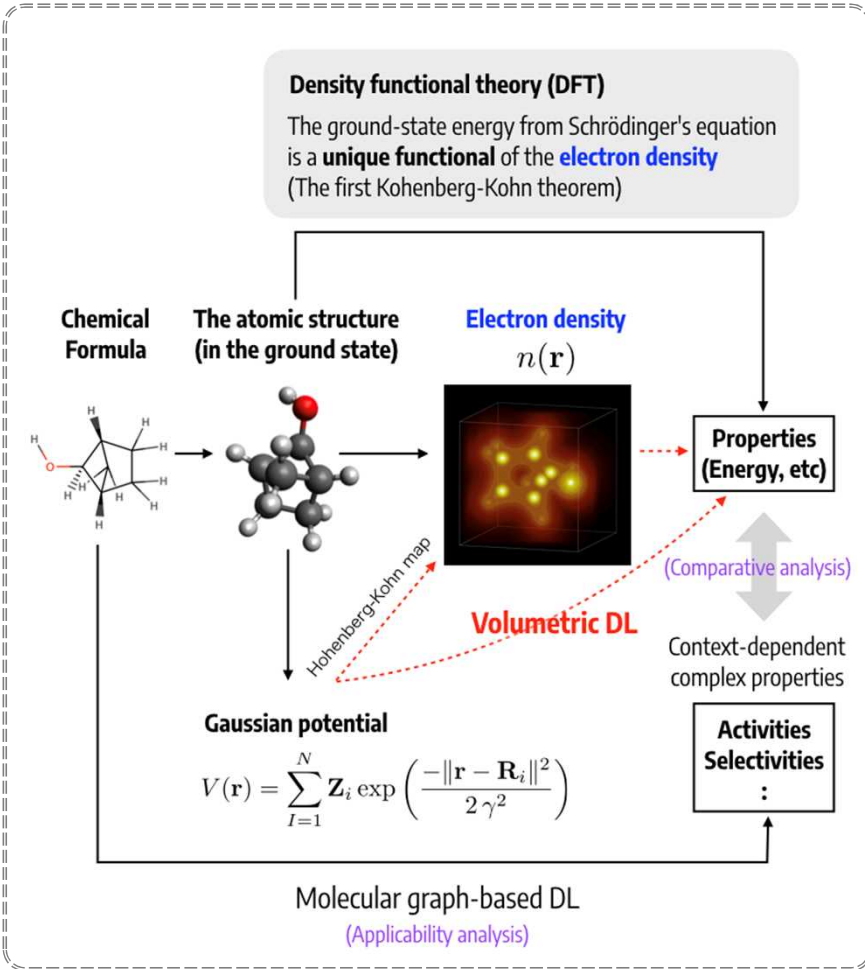
研究の概要

データ駆動型のマテリアルズインフォマティクスにおいて最も労力・時間を要する上、結果に直結する最重要なステップが記述子の設計と選択である。通常、対象が孤立系の有機低分子なのか、結晶なのか、無機固体材料なのか、等に応じて異なる適切な記述子を設計・選択する必要がある、このステップは機械学習モデルの選択以上に結果を左右する。機械学習的な観点では、この状況は初期のコンピュータビジョン分野を思い起こさせる。手書き文字、顔画像、自然風景画像など対象に応じて記述子が開発されてきたが現在では深層学習ベースで大部分置き換わっている。本課題の動機は、マテリアルズインフォマティクス分野におけるこのような汎用性の高い表現として、電子密度表現に着目し、最新のVolumetric深層学習のモデル・知見に基づいて表現学習が可能か、という素朴な疑問である。近年特にインフォマティクスでの活用を念頭に系統的なデータの蓄積も進んでおり、こうした大規模データに対して電子物性を予測するための汎用表現学習を開発する。

研究の成果

本課題では3Dの電子密度表現に対するVolumetric深層学習を用いた電子物性予測技術を開発し、実際に生成した大規模な物性-電子密度データを用いてその性質を分析した。材料計算科学で最も広く使われる密度汎関数法(DFT)の理論的な裏付けとして、Hohenberg-Kohn定理では基底状態の波動関数と基底状態の電子密度の間に一対一写像の存在が保証される。すなわち、基底状態の電子密度が分かれば、エネルギーや波動関数を含むすべての電子物性が一意に決定できるはずである。写像のデータ駆動獲得である機械学習技術を開発・分析する上でこの電子密度表現は重要な意味を持つ。ただし電子密度表現を得るには通常は波動関数を用いる電子状態計算を伴うため、深層学習技術の分析研究とともに、実用的にはさらに簡便な計算で得られる入力表現から電子密度表現を予測する機械学習、あるいはそうした表現から直接的に物性を予測する機械学習も、あわせてVolumetric深層学習の最新技術・知見に基づき開発した。

研究領域「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」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



参考文献・リンク

https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html

(注1) 募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。