


<p>理学・工学</p>	<p>【代表的な研究テーマ】 □ <b>ビッグデータの機械学習による材料探索</b></p>
<p><b>key word</b></p>	<p><b>課題解決に役立つシーズの説明</b></p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>■ 物理化学</li> <li>■ 無機材料化学</li> <li>■ 固体物性</li> <li>■ 元素科学</li> <li>■ 機械学習</li> <li>■ データサイエンス</li> </ul>	<p>近年、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)という分野が広がっています。MIとは、物質に関する大量のデータから、物性を予測するという、データサイエンスの手法です。これを用いると、従来の方法と比べて短時間で物性の最適化することが可能になります。近年、コンピューターの能力が飛躍的に向上したことに加えて、大量のデータ(ビッグデータ)を利用できるようになったため、MIが注目を集めています。私たちは、MIを支える基盤技術の一つである機械学習を用いてビッグデータを解析するという、機能性材料の新しい物性探索方法を提案しています(図1)。</p>
	<p>私たちは、複雑系の代表である無機アモルファス材料の物性予測がビッグデータの機械学習により可能であることを発見しました(Tokuda et al., AIP Advances, accepted for publication)。30万ガラス種のデータベースを用いて、一切の仮定条件をおくことなく、組成情報のみから物性予測することに成功しました。従来の予測では、回帰分析が用いられていました。この方法では、物性がどのように組成に依存するのか(1次関数なのか、2次関数なのかなどのように事前にどのような式になるのか)を知っておく必要がありました。しかし、実際にどのように物性が組成に依存するかを事前に知ることは困難です。そこで、私たちは、事前に式の形を指定する必要がなく、むしろ機械(コンピュータ)そのものが予想式を作ることができるガウス過程回帰を用いて、予測することに成功しました(図2)。また、ディープラーニングを用いた物性予測も行っています。</p>
<p><b>徳田 陽明</b> Yomei Tokuda</p>	<p>私たちは、複雑系の代表である無機アモルファス材料の物性予測がビッグデータの機械学習により可能であることを発見しました(Tokuda et al., AIP Advances, accepted for publication)。30万ガラス種のデータベースを用いて、一切の仮定条件をおくことなく、組成情報のみから物性予測することに成功しました。従来の予測では、回帰分析が用いられていました。この方法では、物性がどのように組成に依存するのか(1次関数なのか、2次関数なのかなどのように事前にどのような式になるのか)を知っておく必要がありました。しかし、実際にどのように物性が組成に依存するかを事前に知ることは困難です。そこで、私たちは、事前に式の形を指定する必要がなく、むしろ機械(コンピュータ)そのものが予想式を作ることができるガウス過程回帰を用いて、予測することに成功しました(図2)。また、ディープラーニングを用いた物性予測も行っています。</p>
<p>教育学部 教授</p>	<p>教育学部 教授</p>
<p><b>【プロフィール】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・1996年 京都大学工学部卒業</li> <li>・2001年 京都大学工学部研究科研究指導認定</li> <li>・2001年 日本学術振興会 特別研究員(玉尾 COE)</li> <li>・2003年 科学技術振興事業団 研究員</li> <li>・2003年 京都大学化学研究所 助手, 同准教授</li> <li>・2016年 滋賀大学教育学部 准教授</li> <li>・2018年 滋賀大学教育学部 教授</li> </ul>	<p>今回用いたガウス過程回帰は非常に汎用性の高い手法ですので、対象とする物質や物性を選びません。また、公開されているデータだけではなく、独自に収集したデータを用いることも可能です。また、物性値のような連続データだけではなく、成功/失敗というような非連続的なデータを用いることも可能です。</p> <p>材料探索は、材料に対する直感や科学的な知見に加えて、場合によってはトライアル&amp;エラーによることもあります。そのような場合に、目的とする物性のビッグデータの機械学習を用いることは、開発コストの削減や廃棄物の低減などの環境負荷の低減につなげることができます。今回お示した例は無機ガラスの物性探索でしたが、金属やセラミックス、高分子、医薬品などの分野でも利用することができます。</p>
<p><b>【主な社会的活動】</b> (2016年現在)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・日本セラミックス協会 関西支部行事企画委員</li> <li>・ニューセラミックス懇話会 理事</li> <li>・ニューガラスフォーラム 特別会員</li> <li>・滋賀県科学教育振興委員会 委員</li> <li>・青少年のための科学の祭典 滋賀大会事務局</li> </ul> <p><b>【連絡先】</b> tokuda@edu.shiga-u.ac.jp http://chem.edu.shiga-u.ac.jp</p>	<p><b>企業・自治体へのメッセージ</b></p> <p>研究開発現場でノウハウに頼りがちだと感じている企業様、これまでの研究開発の手法に限界を感じている企業様との共同研究を希望しています。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・材料開発に関する共同研究を希望します</li> <li>・金属やセラミックス、高分子等の様々な材料についての研究が可能です</li> <li>・機械学習のみではなく、研究開発全般に関する共同研究も可能です</li> </ul> <p>これまでの実績として、様々な企業様との共同研究を行ってきました(R2年度は2件)。共同研究の進め方や秘密保持についての知見もあります。共同研究を検討している段階でのご連絡も歓迎します。研究シーズを具体的に説明しますので、その上でご判断ください。</p>

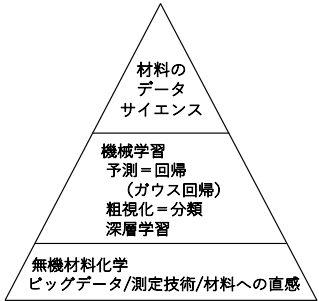


図1 材料化学のデータサイエンス

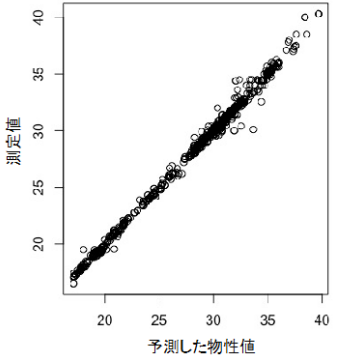


図2 予測値 vs 測定値。原点を通る直線になっているので、正しく予測できたといえる。