

AIMaP 研究集会等実施報告書

(Part 1/4) 名称・重点テーマ・キーワード等

項目	内容
名称	情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI ² I) チュートリアルセミナーシリーズ 第10回 「マテリアルズ・インフォマティクスの基本原則と手順」
採択番号	2019A004
重点テーマ	マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の基本となる機械学習の原則や材料ドメインに適用する際の手順を整理・再認識し、次のステージを展望する。
キーワード	材料探索、機能発現機構解明、データ科学手法、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)、材料データ規模(不足)、機械学習
主催機関	国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS) 共催：文部科学省科学技術試験研究委託事業 AIMaP (受託拠点：九州大学IMI) 後援：大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所 協力：国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)
運営責任者	NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS) 情報統合型物質・材料研究拠点 ・副プロジェクトリーダー：真鍋明 ・拠点マネージャー：河西純一
開催日時(開始)	2019/09/09 13:30
開催日時(終了)	2019/09/09 17:10
開催場所	JST 東京本部別館1階ホール (東京都千代田区五番町7 K's五番町)

項目	内容														
最終 プログラム	<p>セミナーのウェブ募集開始段階から多数の応募登録があり期限前に定員枠を超えキャンセル待ちへ。本セミナーへの期待が感じられた。</p> <p>セミナー当日は、残念ながら台風15号通過直後の公共交通機関の混乱があり30分開始時間を遅らせる対応とした。</p> <p style="text-align: center;">プログラム:開始時間を30分繰り下げ後のプログラム</p> <table border="1" data-bbox="375 571 1380 1288"> <tr> <td data-bbox="375 571 582 627">13:00</td> <td data-bbox="582 571 1380 627">受付開始</td> </tr> <tr> <td data-bbox="375 627 582 739">13:30-13:45</td> <td data-bbox="582 627 1380 739"> 趣旨説明 真鍋明 (MI²I 副プロジェクトリーダー) </td> </tr> <tr> <td data-bbox="375 739 582 907">13:45-15:15</td> <td data-bbox="582 739 1380 907"> MIの基本原則は何か 寺倉清之 (産業技術総合研究所 名誉リサーチャー) 質疑・応答 </td> </tr> <tr> <td data-bbox="375 907 582 963">15:15-15:30</td> <td data-bbox="582 907 1380 963">休憩</td> </tr> <tr> <td data-bbox="375 963 582 1131">15:30-17:00</td> <td data-bbox="582 963 1380 1131"> MIの手順 反復5ステップ ダム ヒョウ チ (北陸先端科学技術大学院大学 准教授) 質疑・応答 </td> </tr> <tr> <td data-bbox="375 1131 582 1243">17:00-17:10</td> <td data-bbox="582 1131 1380 1243"> 閉会挨拶 伊藤聡 (MI²I プロジェクトリーダー) </td> </tr> <tr> <td data-bbox="375 1243 582 1288">17:10</td> <td data-bbox="582 1243 1380 1288">閉会</td> </tr> </table>	13:00	受付開始	13:30-13:45	趣旨説明 真鍋明 (MI ² I 副プロジェクトリーダー)	13:45-15:15	MIの基本原則は何か 寺倉清之 (産業技術総合研究所 名誉リサーチャー) 質疑・応答	15:15-15:30	休憩	15:30-17:00	MIの手順 反復5ステップ ダム ヒョウ チ (北陸先端科学技術大学院大学 准教授) 質疑・応答	17:00-17:10	閉会挨拶 伊藤聡 (MI ² I プロジェクトリーダー)	17:10	閉会
	13:00	受付開始													
	13:30-13:45	趣旨説明 真鍋明 (MI ² I 副プロジェクトリーダー)													
	13:45-15:15	MIの基本原則は何か 寺倉清之 (産業技術総合研究所 名誉リサーチャー) 質疑・応答													
	15:15-15:30	休憩													
	15:30-17:00	MIの手順 反復5ステップ ダム ヒョウ チ (北陸先端科学技術大学院大学 准教授) 質疑・応答													
	17:00-17:10	閉会挨拶 伊藤聡 (MI ² I プロジェクトリーダー)													
	17:10	閉会													
	参加者数	<p>関係者(講師、運営担当)を除き 99 名 数学・数理科学:0 人, 諸科学: 20 人, 産業界: 79 人, その他: 0 人 所属機関別:企業 79 人、大学 2 人、公的機関 18 人</p>													
		<p>関係者含め、111 名(欠席:34 名) 数学・数理科学:1 人, 諸科学: 28 人, 産業界: 79 人, その他: 3 人 所属機関別:企業 79 人、大学 3 人、公的機関 29 人</p>													

項目	内容
当日の論点	<p>マテリアルズ・インフォマティクスのコア(基本)となる概念は何か？ どのように進化していくべきか？</p>
研究の現状と課題(既にできていること、できていないことの切り分け)	<p><総括> 物質表現である記述子と推論アルゴリズムの現状と課題について紹介された。</p> <p><要旨></p> <p>1) 無機系化合物に対する3次元結晶構造を完全に表現する記述子はなく、紹介したいくつかも構造記述子と元素記述子の併用で表現している。大きな課題である。</p> <p>2) アルゴリズムとしては反転定理が利用できる点、ならびに確率分布としての表現が可能なベイズ推論が有効な手段である。一方、万能近似関数であるニューラルネットは材料問題においても優れた性能を示している。材料データは多くの場合 Small であることが多く能動学習、転移学習の進展が期待される。</p> <p><前半について> 逆問題としての物質設計を例として基本原則を詳細に解説した。 その物質の逆問題の解法例としては、①物質表現、②特性モデル、③特性シミュレーションによる順方向推定、④ベイズ反転定理による逆方向推定となる。</p> <p>① 物質表現: Dam らの OFM、文書推論をヒントとした Atom2Vec、グラフ表現としての CGCNN を詳細に説明</p> <p>② 回帰等の機械学習部分(今回、個別アルゴリズムについては説明省略)</p> <p>③ 自動計算プラットフォームである AiiDA の事例を紹介</p> <p>④ Bayes 推論として説明</p> <p>次に多くの材料問題で直面する Small Data 問題への対応策を解説。 基本対応策である a)能動学習、b)転移学習、c)生成モデルのうち、特にb)の Polymer における転移学習事例を紹介した。</p> <p>今後の展望として不確かさを組み込めるベイズ深層学習ならびに組合せ最適化の高速化を実現する量子アニーリングを紹介し、今後の大きな課題として単に効率化の手段としての MI ではなく、科学的理解の深化の方法論としての MI への期待を述べた。</p> <p><後半について> 限られたデータであることが多い材料問題においては、データインスタンスの選択が選択者の意図を反映してしまう。偏ったデータや混合分布データは誤った結論を導くリスクがある。それを防止し、より合理的な結論を導くためには以下の5ステップを繰り返すことが必須である。5ステップは、①問題提起、②記述子の選定、③解析手法の選定、④解析結果の評価、⑤最終成果の展開。</p> <p>このことを以下の3事例に基づき詳細に解説した。</p> <p>事例1. 希土類・遷移金属2元合金のキュリー温度を決める要因理解 事例2. OFM 記述子創成と希土類・遷移金属2元合金の形成エネルギーの予測 事例3. Pt/Ce₂Zr₂O_x 排気ガス触媒の反応機構解明</p>

新たに明らかになった課題	機械学習は基本的に用いたデータからしか学習できない。データ採取の意図に支配されるので選択データの偏在起因のバイアスと外挿の限界をいかに克服するかは大きな課題である。
今後解決すべきこと、今後の展開・フォローアップ	<p>Robotic Process Automation 自動化による研究業務の効率化という観点だけでなく、科学そのものの深化につなぐ方法論としての活用を考えていく必要がある。</p> <p>なお教育目的としてのチュートリアルセミナーとしての課題は以下： アンケートからは「基本原則」というセミナータイトルから入門的な内容を期待して来場された MI 初心者にはレベルが高かった。本企画は2016年からの全10回のシリーズ講演として実施してきているが、最終回である今回の参加者の多くが初回参加者であった。過去の講演映像ならびに講演資料については、講演者のご了解を得て、法人内の教育目的・複写不可を条件に DVD 配布を可能としている。今後、全10回の個別内容を探索できる簡単な索引を作成し DVD ボックスとし、再利用しやすい形態を準備する予定である。</p>

項目	内容
添付写真 1	<p>第10回 MI² チュートリアルセミナーシリーズ 第10回</p> <p>「マテリアルズ・インフォマティクスの基本原則と手順」</p> <p>https://www.nims.go.jp/MII-I/event/tutorial2019_10.html</p> <p>2019年 日時 9月9日 月 13:00-16:40</p> <p>参加無料 要申込</p> <p>場所: JST東京本部別館1階ホール 東京都千代田区五番町7 K's五番町</p> <p>主催: 物質・材料研究機構(NIMS)統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)情報統合型物質・材料研究拠点(CMI) 共催: 文部科学省科学技術振興研究委託事業 AIMaP (委託拠点:九州大学IMD) (※) 後援: 情報・システム研究機構 統計数理研究所 協力: 科学技術振興機構(JST)</p> <p>材料探索や機能発現機構解明におけるデータ科学手法の活用という新たな研究領域は、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)として広く認識され、産業界でもMIを活用しようという段階になりつつあります。今後、次々と高度で洗練された手法・事例が登場してくると期待される一方、オープンであることが発展の駆動力であるデータ科学カルチャが浸透しにくい状況や、巨大な探索空間に比して圧倒的に不足している材料データ規模など、乗り越えるべき課題も多い。ここで一歩踏みとどまり、基本となる機械学習の原則や材料ドメインに適用する際の手順を整理・再認識し、次のステージを展望することが今回の企画趣旨となります。</p> <p>～なお、2016年に開始した本チュートリアルシリーズは今回が最終回となります。</p> <p>前半 「MIの基本原則は何か」 講師: 寺倉 清之 産業技術総合研究所 名誉リサーチャー 北陸先端科学技術大学院大学 フェロー 東京大学 名誉教授</p> <p>後半 「MIの手順 反復5ステップ」 講師: ダム ヒョウチ 北陸先端科学技術大学院大学 准教授</p> <p>問い合わせ先: 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS) 情報統合型物質・材料研究拠点 E-mail: mii-i@ml.nims.go.jp</p> <p>※: AIMaP: 数学アドバンスドイノベーションプラットフォーム / Advanced Innovation powered by Mathematics Platform IMI: マス・フォアインダストリ研究所 / Institute of Mathematics for Industry</p> <p>Logos: MaDIS, Mi², AIMaP, JST</p>
添付写真 2	<p>13:30-13:45 真鍋明 趣旨説明 MIの現状把握としてMGIを事例に現状を解説し今回の企画趣旨を説明。</p>

添付写真 3	<p>13:45-15:15 寺倉清之 前半「MIの基本原則は何か」</p> 
添付写真 4	<p>15:30-17:00 ダムチョウチ 後半「MIの基本手順 反復5ステップ」</p> 
添付写真 5	<p>17:00-17:10 伊藤聡 閉会挨拶</p> <ul style="list-style-type: none">・過去のセミナー内容における数理的背景を説明。・関連する複数のセミナーコースを紹介した。 

(20190614 Ver.)