

物質科学におけるデータ駆動型 アプローチによる知識抽出手法の開発

対象 マテリアルズ・インフォマティクス初心者～上級者、新しい物質発見の手法や最新の研究動向に興味がある方、証拠理論や注意機構を用いたモデリング手法に興味のある方

講師

DAM, Hieu Chi

(北陸先端科学技術大学院大学
知識科学系 教授)

2025. 2. 20 [Thu] 10:00-12:00

オンライン開催 (事前登録制)

本セミナーでは、Dam研究室における物質科学データから知識を抽出するデータ駆動型手法の開発について紹介します。特に、最近の2つの研究トピックに焦点を当てます。

1つ目のトピックでは、物質探索過程の理解を深めるための「物質マップ」について説明します。具体的には、物質のデータをそのまま統合するのではなく、データから構造・物性に関する証拠を抽出し、それを証拠理論 (Dempster-Shafer理論) を用いて統合することで、物質マップを構築し、逐次的に更新する手法について解説します。

2つ目のトピックでは、注意機構の有用性が大規模言語モデルで示されていることを踏まえ、物質科学への応用について議論します。特に、物質の物性・構造データに対して注意機構を活用した物性予測モデルを構築し、その学習過程において、物性の予測においてどの構造が重要かを同時に定量的に解析できる手法について説明します。このモデルは、高い予測精度を持つだけでなく、物性に寄与する重要な構造を直接的に抽出できる点が特徴です。

また、物質科学におけるAI開発の課題についても議論します。一般的なAIモデルは膨大なデータを前提としますが、物質科学の分野では専門性が高く、データ量が限定的です。さらに、新規な物質の発見は、既存のデータと比較すると統計的には外れ値となることが多いですが、その1つのデータが物質科学にとって極めて重要な知見をもたらし、新たな研究の方向性を生み出すという特徴があります。この特性を考慮し、物質科学研究に適した既存の知識を束縛条件としてAIモデルに組み込み、新たな手法を開発する必要があります。本セミナーでは、こうした課題についても考察します。

※事前に参加登録が必要です。右のQRコードもしくは下の参加登録URLにアクセスして下さい。

お申込み締切日時：2月19日(水) 16:00

参加登録URL：

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSe9P8BE6C0jBz88APbkq-b02yMI8Ru8wl9IVmd_46MrJbwbdQ/viewform

【参加登録】



【主催】未来社会創造事業 マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築 (MEEP)

【共催】データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT)

セミナーURL：<https://dxmt.mext.go.jp/news/2689> (DxMTポータルサイト)

お問い合わせ先：DxMTデータ連携部会運営室 (dxmt_office@ml.nims.go.jp)