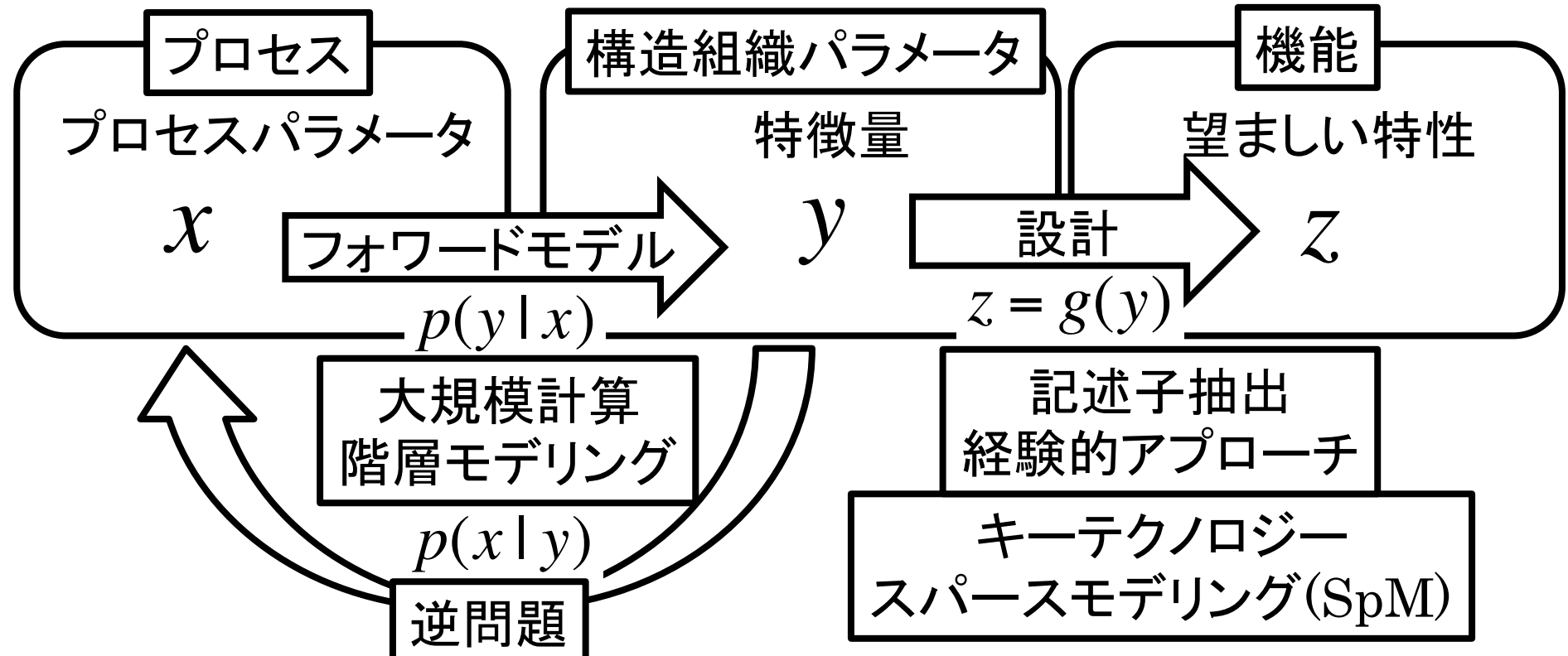


データ駆動型物質材料科学の三つのステップ



キーテクノロジー

- ・有効モデル抽出
- ・ベイズ的モデル選択, スパースモデリング
- ・近似的ベイズ計算
- ・ディープラーニング(第3次ニューロブーム)

©2015

東大岡田研究室

機械学習のキーテクノロジー

- 有効モデル選択
 - 量子古典連関: 伝熱に必要な非調和フォノンの特性を第一原理計算から出す
 - 階層連関: 第一原理計算から分子動力学法の有効パラメータを抽出する
- ベイズ的モデル選択, スパースモデリング
 - 有効モデルのパラメータ数を自動決定する枠組.
 - パラメータ数の指数の計算量が必要なので, 計算爆発する状況ではスパースモデリングを用いる
 - 記述子抽出には必須の技術
- 近似的ベイズ計算
 - 尤度が解析的に求まらない場合にもベイズ推論を行なう枠組
- ディープラーニング
 - 通常のスパースモデリングで抽出できない複雑な記述子を抽出する枠組.
 - 組織の画像データや第一原理計算の基底抽出に必要
- 強化学習, ベイズ最適化
 - 材料探索のクリギングの基礎理論
- 自然言語処理
 - 既存の論文から適切なデータを集める際に必要な技術

©2015

東大岡田研究室