

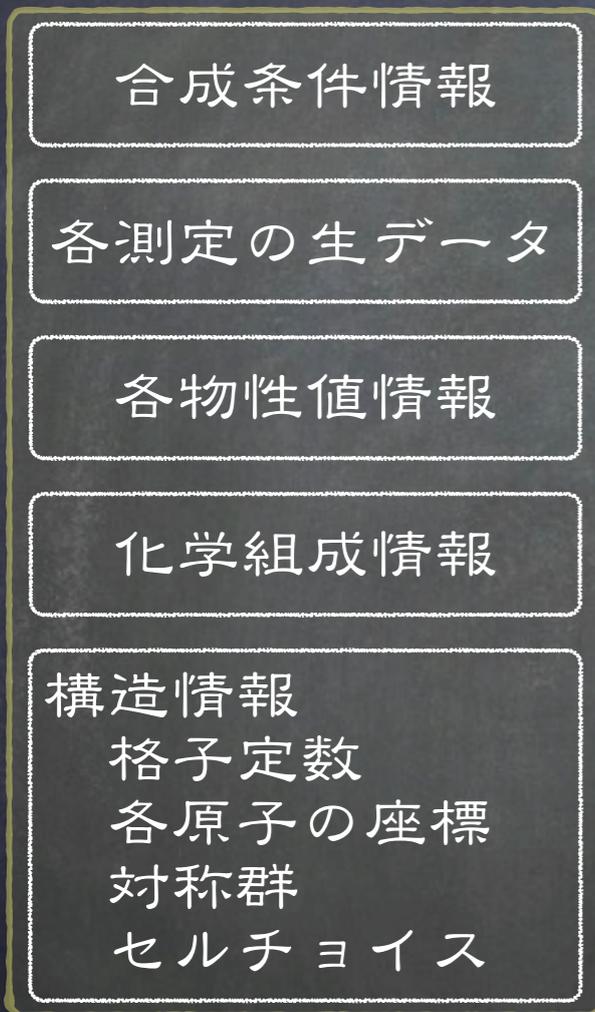
マイニングマテリアルデータ

応用性

線形モデル
混合線形モデル
サポートベクトルマシン
ガウス過程
ニューラルネットワーク

全エネルギー
磁気モメント
磁気相転移温度

材料のデータ



記述子による表現

特徴量ベクトル
(x_1, x_2, \dots, x_m)

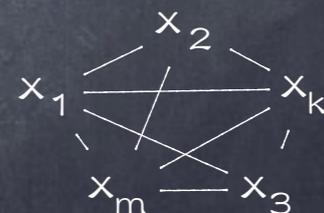
予測解析

物性値予測

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_m)$$

離散的情報 → 関数として知識化
解析的な探索・解析が可能

構造物性相関構造を
整理・可視化



新たな知識

記述解析

線形・非線形次元削減
Graphical LASSO
非線形回帰による
変数組み合わせ選択

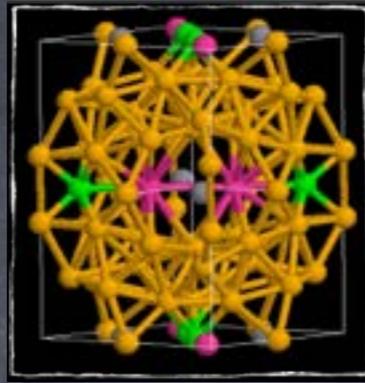
潜在変数抽出

特徴量間相関構造
(線形・非線形相関)

新たな知識・洞察

構造情報

格子定数
各原子の座標
対称群
セルチョイス



材料の構造記述子 (1)

記述子の必要条件

① 不変性

- 並進・回転の不変性
- 同種原子入れ替えの不変性
- 結晶単位構造の取り方の不変性

② 情報量の制御

- 完全性 (解析の目的のために十分な情報を担保する)
- 単射性 (別の二つの構造が異なった記述ベクトルに写像される)

望ましい性質

① 構造に逆変換・推定可能

- 最適化された記述子の情報を基にして、設計すべき材料の構造を推定できる

② 物理化学の意味付け可能

- 記述子で記述されるデータから得られる知識や洞察が既存の物理化学の知識表現で説明できる