

S1-01



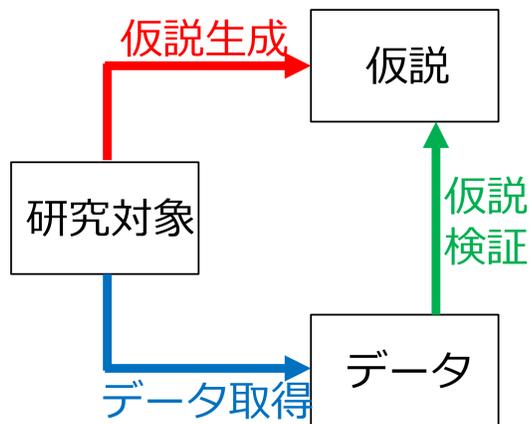
人間とAI  
が紡ぐ未来社会

# データ駆動型AIによる科学的発見とものづくり

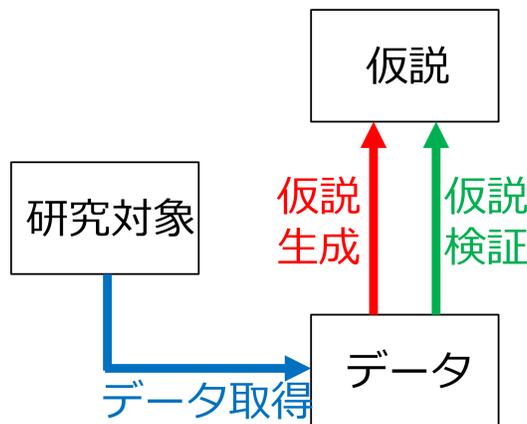
## 情報工学専攻 教授 竹内 一郎

### 概要

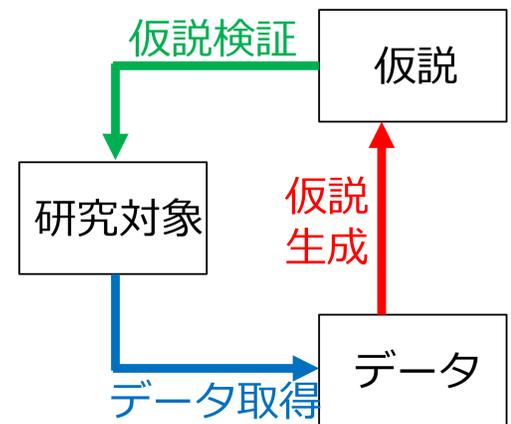
### データ駆動型科学技術の開発



(従来の) 知識駆動型科学



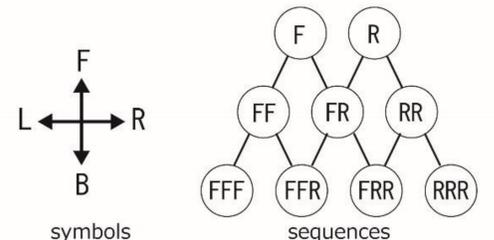
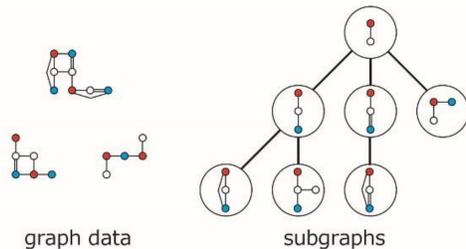
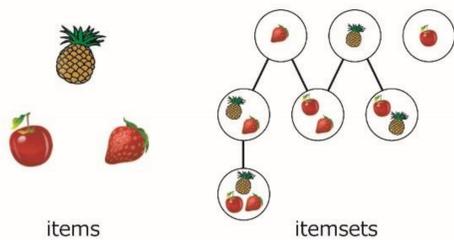
データ駆動型科学



データ駆動型実験計画

これまでは研究者の知識・経験に基づいて研究・開発が行われてきたが、データ駆動型アプローチにより新たな科学的発見とものづくりのための新たなパラダイムが生まれつつある

### 特長



$$f = w_1 \text{(apple, strawberry)} + w_2 \text{(pineapple)} + w_3 \text{(apple, pineapple)} + w_4 \text{(apple, pineapple, strawberry)} + \dots$$

itemset-based prediction model

$$f = w_1 \text{(apple)} + w_2 \text{(pineapple)} + w_3 \text{(apple, pineapple)} + w_4 \text{(apple, strawberry)} + \dots$$

subgraph-based prediction model

$$f = w_1 \text{(FFR)} + w_2 \text{(BRR)} + w_3 \text{(FF)} + w_4 \text{(RFF)} + \dots$$

subsequence-based prediction model

複雑な構造データの組み合わせに基づく仮説の生成と予測モデルの構築

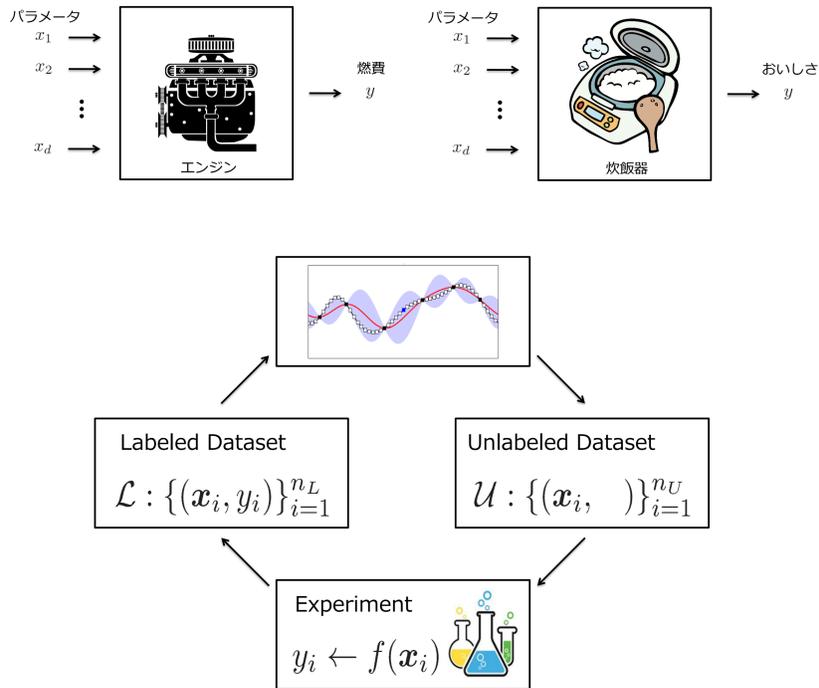
### 本技術が拓く心豊かな未来社会の姿

- 従来の知識駆動型アプローチでは得られないような新しい知識や発見が可能となる
- ものづくりの一部を自動化し、人的資源を生産的なタスクに投入できるようになる
- データ駆動型AIによって得られたシステムの品質保証・安全検証などが可能となる

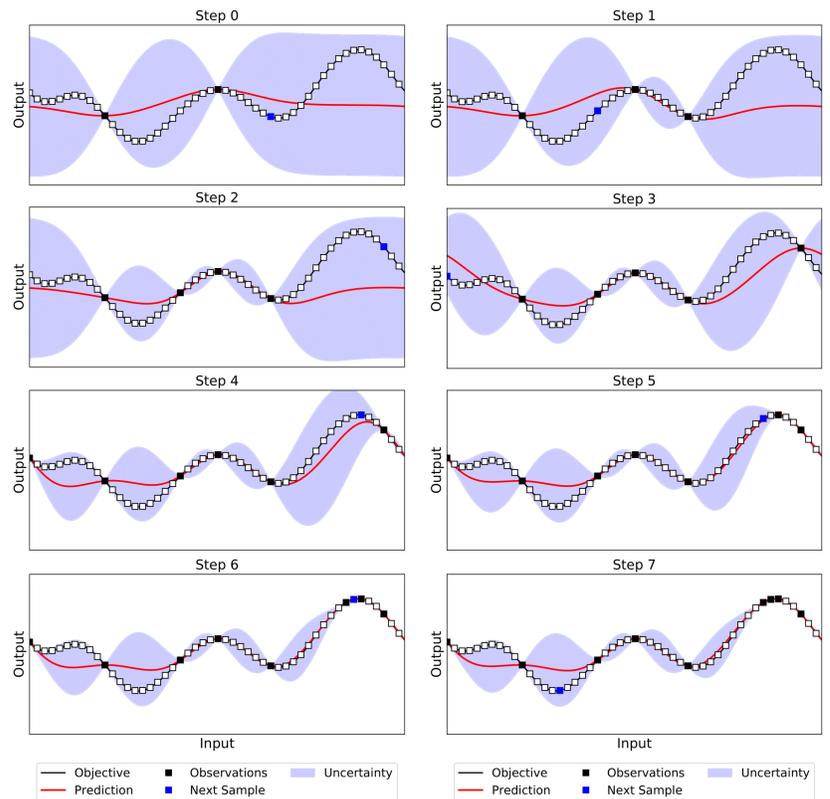
### 求める連携先とメッセージ

- 研究開発フェーズにおいてデータ駆動型アプローチの利用を検討中の企業
- データ駆動型AIの導入によってものづくりの自動化・効率化を目指す企業
- 機械学習エンジニアの育成のとりくみを始め、さらなる発展を目指す企業

# 特長が発揮される仕組み



能動学習 (Active Learning) によるデータ駆動型実験計画のイメージ図

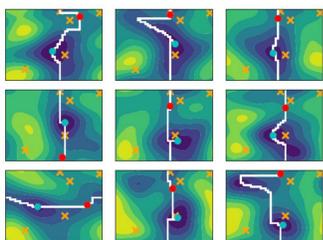
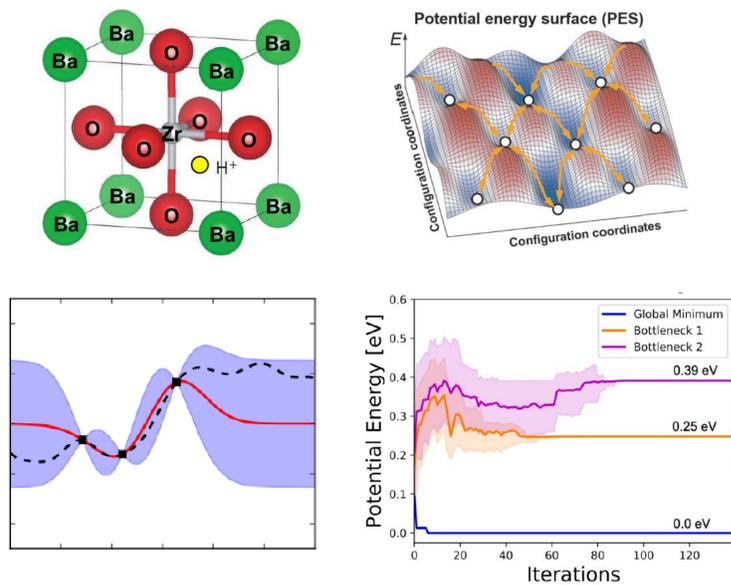


ベイズ最適化 (実験を繰り返しながらブラックボックス関数を最大化する方法) のイメージ図

## データ駆動型実験計画法の枠組

# 技術の特長の根拠となる実験データ等

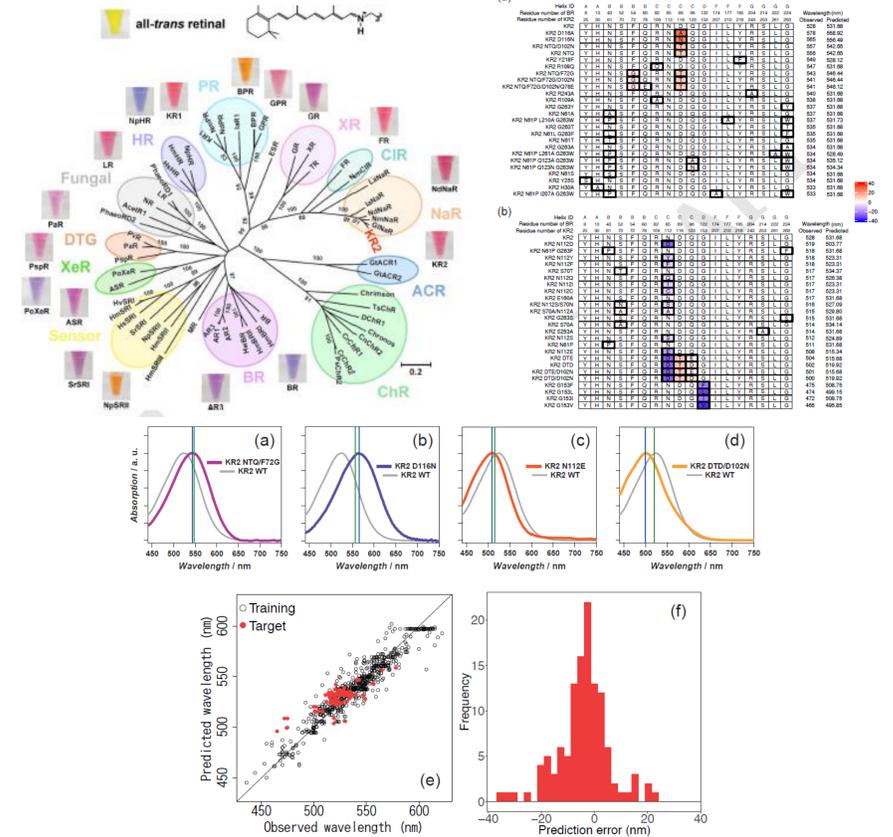
### 「プロトン伝導体の伝導度推定」



結晶	網羅的	選択的	Efficiency
LaAlO <sub>3</sub>	220	78	0.355
LiGaO <sub>2</sub>	317	101	0.319
CsAlO <sub>2</sub>	335	91	0.272
LiBO <sub>2</sub>	575	75	0.130
BaTiO <sub>3</sub>	720	107	0.149
Si <sub>3</sub> Ti <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	970	167	0.172
Li <sub>3</sub> NbO <sub>4</sub>	1150	101	<b>0.088</b>
BaAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	1480	111	<b>0.075</b>
CaTiO <sub>3</sub>	1816	167	<b>0.092</b>
Li <sub>2</sub> ZrO <sub>3</sub>	5760	286	<b>0.050</b>

限られたポテンシャルエネルギー曲面 (PES) のデータからプロトン伝導度 (燃料電池材料特性の指標) を効率的に推定

### 「光吸収型タンパク質の吸収波長予測・制御」



光吸収型タンパク質の吸収波長をアミノ酸配列に基づいて機械学習で予測・制御

# 文献・特許の情報

- Kanamori K. et al. Exploring a potential energy surface by machine learning for characterizing atomic transport. Physical Review B: vol.97, paper no.125124 (2018)
- Karasuyama M. et al. Understanding colour tuning rules and predicting absorption wavelengths of microbial rhodopsins by data-driven machine-learning approach. Scientific Reports: vol.8, paper no.15580 (2018)

## 【お問合せ】 名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627 FAX:052-735-5542

E-mail: nitfair@adm.nitech.ac.jp URL: <https://technofair.web.nitech.ac.jp/>