

MERIT インターンシップ（国内）報告書

理学系研究科 物理学専攻
林研究室 博士課程2年
MERIT 六期生
池 震棟

- 実施期間

2019年9月2日～2019年11月29日

- 受け入れ先

株式会社日立製作所 中央研究所 研究開発グループ デジタルテクノロジーイノベーションセンター
(指導員：上級研究員 浅原彰規さん)

- テーマ

材料開発における材料計測の高度化に向けた AI/機械学習の応用技術の研究

- 目的

私は今回のインターンシップに参加する目的は以下の通りであった。

1. マテリアルズインフォマティクスについて理解を深める
2. AI または機械学習の技術を身につけ、自身の研究テーマと違う分野の研究を体験して、自身の視野を広げる
3. 企業での研究風景また研究生活を体感する

受け入れ先の三ヶ月間のインターンシップを通じて、実際に技術の磨きができ、視野も広がり、非常に意味がある経験になった。

- 内容

優れる特定の性質を有する新材料を開発する従来の方法としては、今まで研究した物質をデータベースに整理し、経験上の推測または第一原理計算などの大規模計算の検証により、新しい物質を提案して、実際に試作の性質を実験上に確認し、最適な新材料を確定あるいは結果により新たな物質を提案し再確認というアプローチである。しかし、従来手法は物質予測の不確実性があり、大規模計算の検証と実験確認に膨大な時間と経済上のコストがかかって、より効率的な開発方法が求められている。機械学習という技術は、データベース中にあるデータから抽出した特徴量を利用し、統計上特徴量に対する認識パターンのモデルを構築と駆使して、より高速で新たなデータに対応するパターンを認識できるため、マテリアルズインフォマティクス分野における新材料開発の効率向上化にも期待されている。今回のインターンシップの主な内容は、有機物質の性質を効率的に予測かつ優れる性質を有する物質を特定するため、機械学習過程に利用する有機物質を表示する特徴量の予測効果の評価また生成法の構築である。

結果としては、従来方法で生成した有機物質を表示する特徴量に対し、様々な機械学習手法を利用して、物質性質の予測効果を評価した。評価の結果により、従来方法で生成した特徴量は、ある性質を有する物質の特定ができるが、物性の予測効

果がかなり劣ることが分かった。この評価結果を踏まえ、また自身の物性知識も利用して、従来方法で生成した特徴量と異なった、予測効果ありかつ性質から物質を特定可能な新たな特徴量生成法を構築し、機械学習での実装をできた。

- 所感

私自身は今まで職場体験やアルバイトの経験がなくて、長年ずっと学校での経験のままなので、今回のインターンシップを機に、企業での生活と雰囲気を経験できた。インターンシップの研究内容はかなり大学院での研究テーマまた研究手法と違って、一から勉強し、目標を最終的に完成する経験を積んできた。流行りの機械学習の技術をインターンシップに通じ身につけることができ、自身の研究内容の可能性も増えてきた。また、日立製作所を通し、研究企業の開放な研究雰囲気と自由的なコミュニケーション環境を体感し、自身の視野が広がり、進路をより多様化にすることも感じている。最後に、自身の専門知識を利用し具体的な問題に対策を提案した経験ができて、専門知識の重要性を再認識した。

- 謝辞

本インターンシップにあたり、丁寧にご指導くださった浅原さん、鯨井さんをはじめとしたデジタルテクノロジーイノベーションセンターの方々、日常業務の支援をお世話になった日立製作所の社員の方々、またインターンシップ内容について色々調整をしてくださった物性研究所計算物質科学研究センターの有馬さんに感謝いたします。また、今回のインターンシップを快諾してくださった、指導教官の林先生、副指導教官の求先生に御礼申し上げます。最後に、インターンシップ先をご紹介くださった計算物質科学人材養成コンソーシアム（PCoMS）、大学院生活の支援をサポートくださる統合物質科学リーダー養成プログラム（MERIT）に感謝いたします。