

Väitöstiedote

19.12.2019

Koneoppimisesta apua kemian tutkimukseen: tilastollisia menetelmiä satulapisteiden ja minimienergiapolkujen etsintään

Väitöskirjan nimi	Algorithms for Finding Saddle Points and Minimum Energy Paths Using Gaussian Process Regression
Väitöskirjan sisältö	Kemiallisia reaktioita ja muita atomien liikkeisiin perustuvia tapahtumia voidaan tarkastella teoreettisesti atomien koordinaattien muodostamassa moniulotteisessa avaruudessa määritellyn potentiaalienergiapinnan avulla. Energiapinnan paikalliset minimikohdat vastaavat systeemin vakaita tiloja, ja näitä tiloja yhdistävät minimienergiapolut kuvaavat mahdollisia reaktiomekanismeja. Erityisen mielenkiinnon kohteena on usein minimienergiapolun globaali maksimikohta, joka sijaitsee potentiaalienergiapinnan satulapisteessä ja jonka avulla voidaan arvioida kyseisen reaktion aktivoitumisenergiaa ja reaktionopeutta. Minimienergiapolkuja ja satulapisteitä on perinteisesti etsitty potentiaalienergian gradienttivektorien avulla laskettuihin kuvitteellisiin voimiin perustuvilla iteratiivisilla menetelmillä. Koska gradienttivektorin tarkka määrittäminen on usein laskennallisesti raskasta, tulisi aikaisemmista iteraatioista saatu informaatio hyödyntää mahdollisimman tehokkaasti iteraatioiden vähentämiseksi. Tilastollisten mallien avulla energiapinnalle voidaan muodostaa likimääräinen arvio, ja minimienergiapolkua tai satulapistettä voidaan etsiä likimääräiseltä pinnalta. Ratkaisu voidaan tarkistaa uusien tarkkojen havaintojen avulla, joita voidaan puolestaan käyttää mallin tarkentamiseksi mahdollisia seuraavia iteraatioita varten. Tässä väitöskirjassa kehitetään gaussisiin prosesseihin perustuvia koneoppimisalgoritmeja minimienergiapolkujen ja satulapisteiden etsinnän tehostamiseksi. Yksinkertaisten testiesimerkkien perusteella gaussisia prosesseja hyödyntävät menetelmät voivat vähentää tarkkojen havaintojen määrän murto-osaan perinteisten menetelmien vaatimista havaintomääristä.
Väitöskirjan ala	Laskennallinen tiede
Tohtorikoulutettava	Olli-Pekka Koistinen, diplomi-insinööri
Väitöksen ajankohta	9.1.2020 klo 12
Paikka	Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulun E-sali, Otakaari 1, Espoo
Vastaväittäjä	Prof. Thomas Bligaard, Danmarks Tekniske Universitet, Tanska
Kustos	Prof. Aki Vehtari, Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulu, tietotekniikan laitos
Väitöskirjan verkko-osoite	http://urn.fi/URN:ISBN:978-952-60-8851-8
Tohtorikoulutettavan yhteystiedot	Olli-Pekka Koistinen, tietotekniikan laitos olli-pekka.koistinen@aalto.fi, p. +358400246285