

ナノシート収率予測のための少数の化学実験データにおけるベイズ推論を用いた変数選択の信頼性評価

(筑波大院システム情報工¹・慶大理工²・東大院理³・東大院新領域⁴) ○並内 優樹¹・北村 優佳²・大日方 孝輝³・緒明 佑哉²・岡田 真人⁴・五十嵐 康彦¹

Reliability evaluation of variable selection using Bayesian inference in a small number of chemical experimental data for nanosheet yield prediction (¹*Degree Programs in Systems and Information Engineering, University of Tsukuba*, ²*Faculty of Science and Technology, Keio University*, ³*Graduate School of Science, The University of Tokyo*, ⁴*Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo*) ○Yuki Namiuchi,¹ Yuka Kitamura,² Koki Obinata,³ Yuya Oaki,² Masato Okada,⁴ Yasuhiko Igarashi,¹

We have extracted a few important variables for yield of the nanosheets using sparse modeling. As often happens in chemical experiments, the small number of experimental data can lead to the variations in the extracted variables by the sparse modeling. Using Bayesian inference, we achieve sparse modeling with confidence for small numbers of data by quantitatively assessing the important variable. We verified the reliability of the variable selection using nanosheet synthesis experiment data and virtual data generated from the above data with known important variables. As a result, the value of the probability index was higher for the known important variables in the hypothetical data and for the chemically plausible variables in the synthetic experimental data.

Keywords : Nanosheet, Machine Learning, Sparse Modeling, Bayesian Interface

これまで我々はナノシート合成収率に対するスパースモデリングの解析結果を可視化することで重要変数を抽出してきた¹⁾。しかし少数の実験データにおいては可視化の結果がデータによって変動し、重要変数についての定量化が必要となる。そこで本研究ではベイズ推論に着目し、変数選択に定量的な確率指標²⁾を導入した。ナノシート合成実験データ及び前記データより生成した重要変数が既知な仮想データを対象に、指標によるナノシート合成実験データの変数選択の信頼性を検証した。その結果、仮想データでは既知な重要変数、合成実験データでは化学的に妥当な変数の確率指標の値が高くなった。

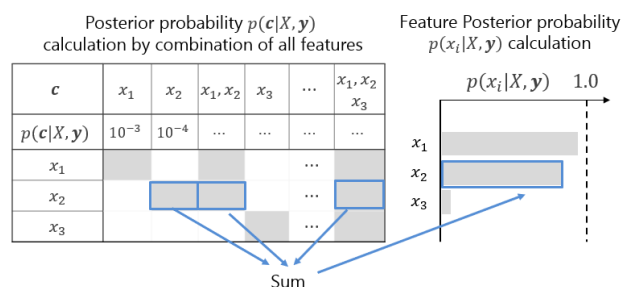


Fig. 1 ベイズ推論による変数選択のための確率指標計算の概要.

- 1) G. Nakada, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Adv. Theory. Simul.*, **2019**, 2, 1970014
- 2) K. Obinata, T. Nakayama, A. Ishikawa, K. Sodeyama, K. Nagata, Y. Igarashi, *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **2022**, 2, 355