

## 物質合成に適したベイズ最適化のハイパーパラメータの探索

### Search for the hyperparameters of Bayesian optimization for materials synthesis

東工大物質理工<sup>1</sup>、JST さきがけ<sup>2</sup>、東工大理<sup>3</sup>、産総研<sup>4</sup>、東工大 TAC-MI<sup>5</sup>、東工大情報理工<sup>6</sup>

○中山 亮<sup>1</sup>、清水 亮太<sup>1,2</sup>、芳賀 太史<sup>3</sup>、木村 武史<sup>1</sup>、安藤 康伸<sup>4</sup>、

安尾 信明<sup>5</sup>、関嶋 政和<sup>6</sup>、一杉 太郎<sup>1</sup>

Tokyo Tech<sup>1,3,5,6</sup>, JST-PRESTO<sup>2</sup>, AIST<sup>4</sup>

°(PC)Ryo Nakayama<sup>1</sup>, Ryota Shimizu<sup>1,2</sup>, Taishi Haga<sup>3</sup>, Takefumi Kimura<sup>1</sup>, Yasunobu Ando<sup>4</sup>,

Nobuaki Yasuo<sup>5</sup>, Masakazu Sekijima<sup>6</sup>, Taro Hitosugi<sup>1</sup>

E-mail: nakayama.r.ad@m.titech.ac.jp

**[序]:** 近年、第一原理計算や機械学習・人工知能を活用することで、高い機能性を持つ新物質の予測が進んでいる。しかし、実際に新物質を合成するためには、多元素からなる物質の組成や温度、圧力といった複数の合成パラメータを多次元空間内で最適化する必要がある。そのため、ベイズ最適化などの手法を用いて、実験条件を効率よく最適化することは新材料開発において急務である。ベイズ最適化においては、ハイパーパラメータを適切な数値で設定することで、少ない実験回数で最適な合成条件を見つけることが可能となる。しかし、実際の物質合成条件に即してベイズ最適化を検証した例は少なく、材料探索に適したハイパーパラメータの値に関する議論は十分にされていない。そこで本研究では、実験を模した一次元モデル関数に対してベイズ最適化を適用し、ハイパーパラメータを物質合成向けに最適化することを目的とした。

**[手法]:** 具体的な実験系に対応するために、200–1200°C の合成温度範囲で最大の物性値が得られる温度を探索することを想定した。探索空間(51 グリッド)において、ピーク高さ 1.2, 0.7, 0.3 の 3 種のガウシアンピークを足し合わせたモデル関数を作成した(Fig. 1)。これら 3 種のガウシアンピークはそれぞれ、最大値ピーク、局所解ピーク、バックグラウンドに対応する。本研究では、最大値ピークを与えるガウシアンピークの標準偏差の値をプロセスウィンドウ( $P_w$ )として定義した。 $P_w = 100, 60, 40^\circ\text{C}$  の一次元モデル関数に関して、それぞれピーク中心温度の異なる 100 個の関数を生成し、検証を行った。ベイズ最適化には Python の GPy パッケージを利用し、RBF カーネルや獲得関数(UCB)のハイパーパラメータである Lengthscale, Variance,  $\kappa$  を変化させて、出来るだけ少ない回数で Global maximum を見つけることができる条件を探索した。

**[結果]:**  $P_w = 100^\circ\text{C}$  の一次元モデル関数に関して、Length scale = 3 (グリッド), Variance = 1,  $\kappa = 10$  としてベイズ最適化を行った際に、最適化に要した回数のヒストグラムを Fig. 2 に示す。この条件において、90% のモデル関数が最大値に到達可能な合成回数(=  $N_{90\%}$ )は 10 回となった。 $P_w = 100, 60, 40^\circ\text{C}$  の一次元モデル関数に関して、この  $N_{90\%}$  が小さくなる条件を探したところ、Lengthscale = 1, Variance = 1,  $\kappa = 10$  が最適値となり、 $P_w = 100^\circ\text{C}$  の一次元モデル関数における  $N_{90\%}$  は 9 回となった。

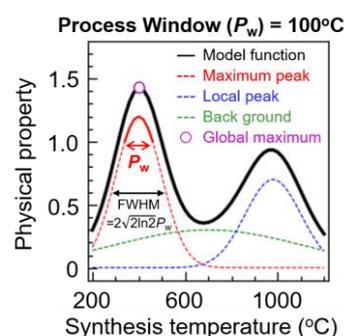


Fig.1 One-dimensional model function for the simulation of material synthesis.

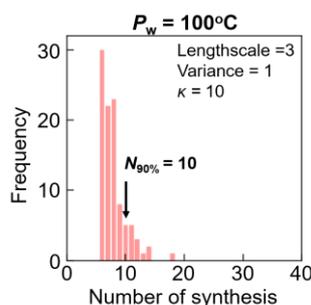


Fig.2 Example of a histogram of the number of synthesis required for optimization