

# 超基礎からのベイズ最適化

津田 宏治

東京大学大学院新領域創成科学研究科  
〒277-8561 柏市柏の葉 5-1-5 基盤棟 CB02

E-mail:tsuda@k.u-tokyo.ac.jp

キーワード: マテリアルズ・インフォマティクス、データ科学

材料・物質の設計の問題は、未観測の関数を最適化するブラックボックス最適化として表現できることがあります。ブラックボックス最適化では、入力を設計して、それをブラックボックスに与え、出てくる出力を元に、中にある関数を推定します。同時に、次に、どんな入力を与えるかを自動的に設計する必要があります。ここで大事なのは、ブラックボックス関数に入力を与えて評価する回数を最小にするということです。なぜなら、ブラックボックスの実態は、時間のかかる第一原理計算や、合成実験であるため、時間的・金銭的成本がかかるからです。ブラックボックス最適化の手法には、遺伝的アルゴリズムなどの進化的計算や、強化学習といった方法がありますが、今回は、性能の高いベイズ最適化という方法について解説します。

基礎編においては、簡単なベイズ推論の入門を行ったあと、ガウス過程の理論を紹介します。応用編では、粒界構造最適化や、Si-Ge ナノ構造の自動設計などへの応用についてお話しします。また、ベイズ最適化の python パッケージである COMBO[1]の使い方についても、実例を元に解説します。さらに、まだデータサイエンスのプロジェクトの進め方に詳しくない方のために、データサイエンスのプロジェクトが実際どういう風に進んでいくのか、また、失敗を防ぐためのポイントなどについて率直に述べたいと思います

[1] T. Ueno, T.D. Rhone, Z. Hou, T. Mizoguchi and K. Tsuda, COMBO: An Efficient Bayesian Optimization Library for Materials Science, Materials Discovery, 2016, published online.