多目的ベイズ最適化によるコポリマー合成の探索とその解釈

(奈良先端科学技術大学院大学[1]・慶應義塾大[2]・JSR 株式会社[3]) ○山田 大夢[1]・高須賀 聖五[1]・及川 駿登[1]・原嶋 庸介[1]・高山 大鑑[1]・Aniruddha Nag[1]・脇内 新樹[1,3]・安藤 剛[1]・菅原 哲徳[3]・畑中 美穂[2]・宮尾 知幸[1]・松原 崇充[1]・大西 裕也[3]・網代 広治[1]・藤井 幹也[1]

Multi-Objective Bayesian Optimization to Explore and Interpret the Copolymer Synthesis Process ([1]Nara Institute of Science and Technology, [2]Keio University, [3]JSR Corporation) ○ Hiromu Yamada[1], Shogo Takasuka[1], Shunto Oikawa[1], Yosuke Harashima[1], Tomoaki Takayama[1], Aniruddha Nag[1], Araki Wakiuchi[1,3], Tsuyoshi Ando[1], Tetsunori Sugawara[3], Miho Hatanaka[2], Tomoyuki Miyao[1], Takamitsu Matsubara[1], Yu-ya Ohnishi[3], Hiroharu Ajiro[1], Mikiya Fujii[1]

Optimization of process conditions for copolymers has relied on the experience and knowledge of researchers, resulting in problems such as depending on a particular researcher and the time required for process development. To solve this problem, we used a machine learning method to automatically optimize the process conditions to achieve the desired copolymer composition ratio [1]. In this example, we employed a single objective variable, but depending on the application of the synthesized copolymer, it may be necessary to optimize multiple physical properties. Therefore, in this study, we optimized the process conditions using Multi-objective Bayesian optimization. It was shown that optimization for a single objective variable can lead to a variety of possible combinations of process variables to obtain the desired composition ratio, while Multi-objective optimization leads to a unique combination of process variables. Furthermore, to discuss the relationship between process conditions and multiple physical properties, visualization and analysis using the Partial Dependence Plot method also confirmed the conflicting relationship between different properties. Details of the Multi-objective optimization will be presented on the day.

Keywords : Machine Learning; Materials Informatics; Multi-Objective Bayesian Optimization; Polymer Science; Flow Synthesis

コポリマーのプロセス条件の最適化は研究者による経験や知識に依存し、属人化や開発期間の長期化などの問題が生じている。この課題に対して、我々は機械学習手法を用いてコポリマー組成比が所望値になるプロセス条件の自動的な最適化に取り組んだ[1]。この例では、目的変数を単一としたが、コポリマーの用途によっては複数の物性値を最適化する必要がある。そこで本研究では、多目的ベイズ最適化によるコポリマー合成のプロセス最適化に取り組んだ。単一の目的変数に対する最適化では所望の組成比を得るプロセス変数の組み合わせは多様な可能性がありえるが、多目的最適化では一意のプロセス変数の組み合わせになることを示した。さらに、プロセス条件と複数物性値の関係性を論じるために、Partial Dependence Plot 法を用いて可視化と解析を行ったところ、異なる物性間の相反する関係も確認された。多目的最適化の詳細を当日に発表する。

［1］S. Takasuka, et.al., “Bayesian optimization of radical polymerization reactions in a flow synthesis system”(submitted)