

# ディープカーネルラーニングを用いたベイズ最適化による材料探索

## Bayesian optimization with gaussian process assisted by deep learning for material designs

東北大金研<sup>1</sup> ◯清原 慎<sup>1</sup>, 熊谷 悠<sup>2</sup>

IMR, Tohoku Univ.<sup>1</sup>,

E-mail: sin@tohoku.ac.jp

### [研究背景]

ベイズ最適化は、広大な材料空間の効率的な探索を可能にする強力な手法であり、現在では材料探索において広く使われるようになってきている。しかし、従来のガウス過程に基づくベイズ最適化の効率は、記述子の選択に大きく依存する。そこで本研究では、ディープラーニングとガウス過程を組み合わせたディープカーネルラーニングを構築し、ベイズ最適化に利用した。本手法を、(1)結晶構造情報が利用可能な第一原理計算データ、(2)組成情報のみが利用可能な実験データに適用し、様々な条件下におけるディープカーネルラーニングを用いたベイズ最適化の効率を評価し、新たな材料探索手法の構築した。

### [研究手法]

本研究で使用したDKLのアーキテクチャはCGCNN[1](結晶グラフ畳み込みニューラルネットワーク)とGP(ガウス過程)の2つのコンポーネントから構成されている。入力された結晶の情報はCGCNNパートでベクトル化され、その後GPのカーネルへの入力として使用される。

本研究の探索フローを図1に示す。少数のランダムに選択したデータから探索を開始し、ベイズ最適化を行う。上述のように、比較のため通常のGPによる探索も行った。通常のGPでは、ランダムフォレストと *permutation importance* により重要と評価された記述子だけを使用した[2]。ベイズ最適化の効率は、初期データに大きく依存するため、最適化を50回行い、収束までのサイクル数の平均値で探索効率を評価した。

### [結果]

上記の手法を用いて、第一原理計算により得られた922種類の物質の中から、最大のバンドギャップを有する物質の探索を行った。初期のデータ点を10点とした場合、従来のGPによる探索では、平均75回で最大値を発見することができた(初期のデータ点を含まない)。一方で、DKLでは平均21回で最大値を発見することができた。

### [参考文献]

1. T. Xie *et al.*, PRL (2018), 2. A. Takahashi *et al.*, STAM:Methods (2022)

