

機械学習の最適化応用： 多様な探索問題のためのベイズ最適化

名古屋工業大学 工学専攻
知能情報プログラム
准教授 烏山 昌幸



ブラックボックス最適化

未知の依存関係

入力パラメータ 1
入力パラメータ 2
入力パラメータ 3
...



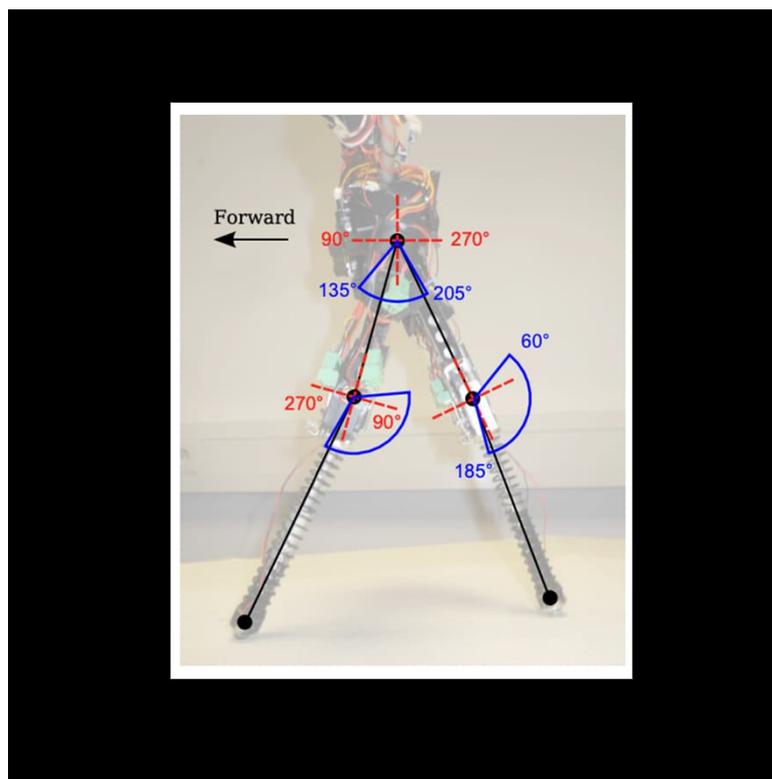
出力 (最適化対象)

- 入出力の関係性が不明な状態での最適化
- 実は世の中の様々な問題がブラックボックス最適化問題！

ブラックボックス最適化

ロボット歩行実験

入力:
ロボットの調整
パラメータ



出力: 歩行速度

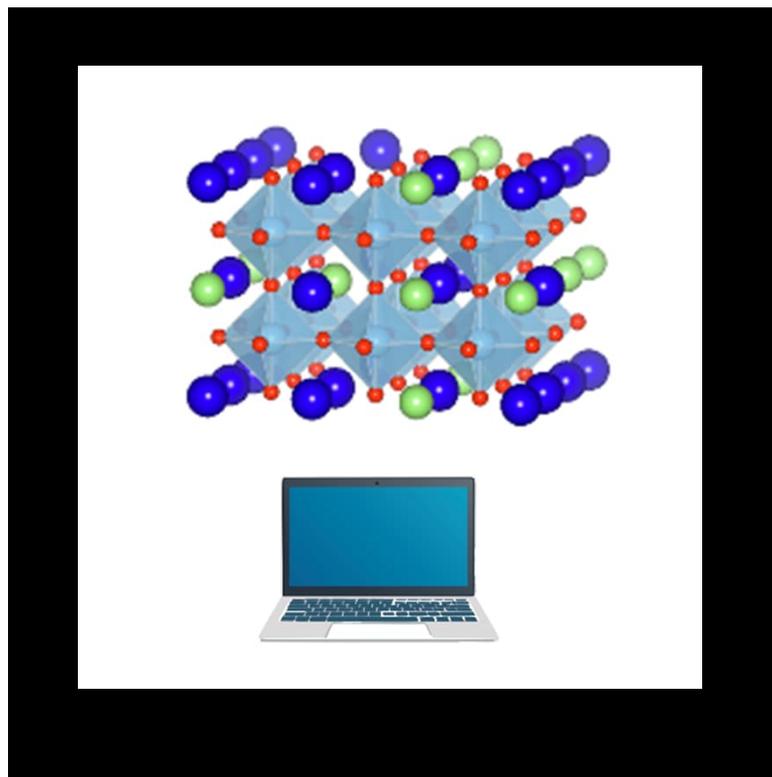
出典) Calandra et al., 2015

例: 歩行ロボットの速度最適化

ブラックボックス最適化

導電シミュレーション

入力:
材料の組成・構造



出力: 導電率

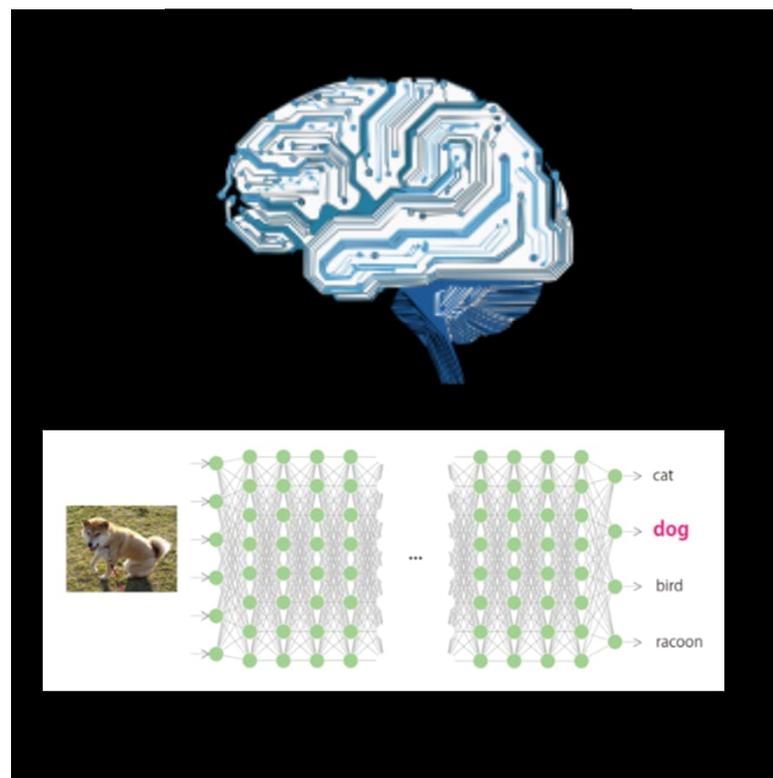
出典) Karasuyama et al., 2020

例: 高導電材料の探索問題

ブラックボックス最適化

ビッグデータによる学習

入力:
AIのチューニング
パラメータ



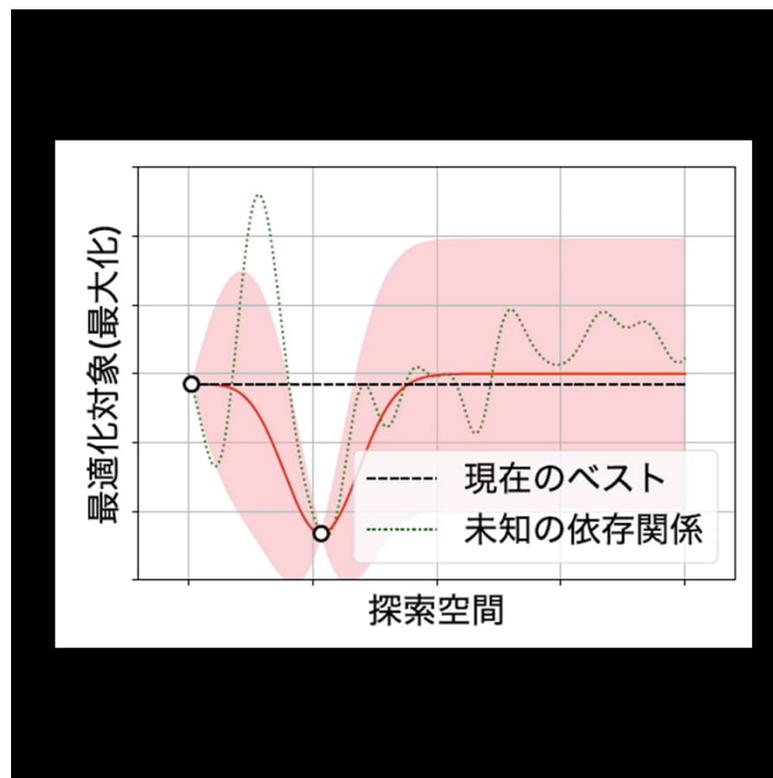
出力: 予測精度

例: AIの学習設定チューニング

ベイズ最適化

機械学習の確率モデルによる 依存関係の推定

入力パラメータ 1
入力パラメータ 2
入力パラメータ 3
...

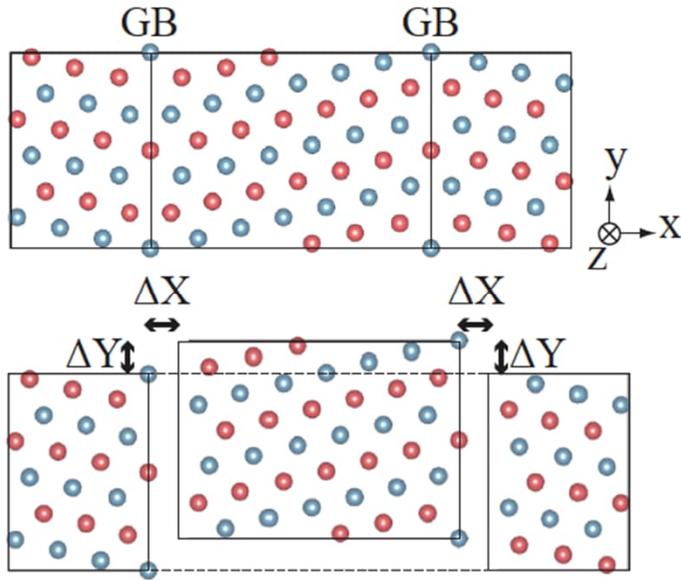


出力 (最適化対象)

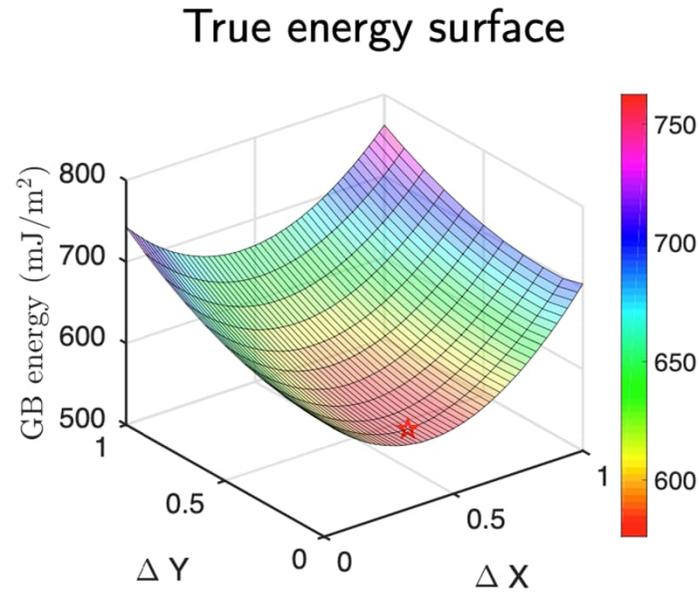
- ブラックボックスな関係性を確率モデルで推論しながら探索
- 時間的・金銭的コストのかかるデータ計測を最低限に抑えて最適化

例

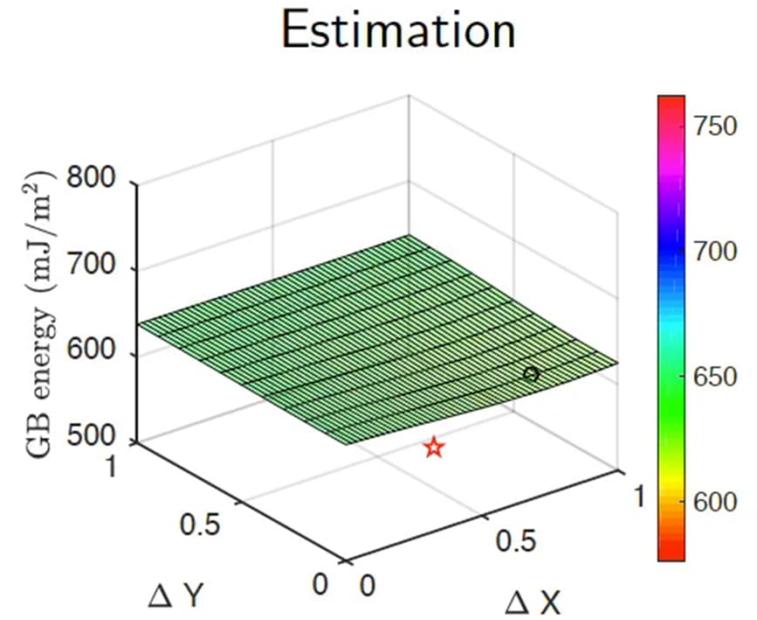
- 結晶構造探索問題での適用例(出典: Yonezu, Karasuyama, et al., 2018)



結晶構造モデル



未知の
エネルギー曲面

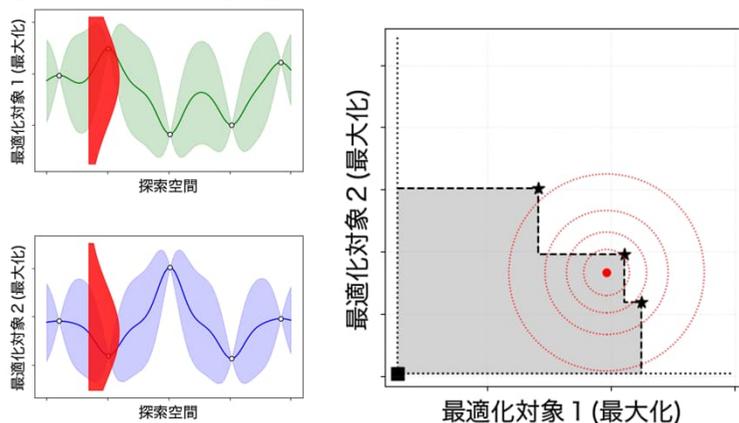


機械学習モデル

多様な探索問題

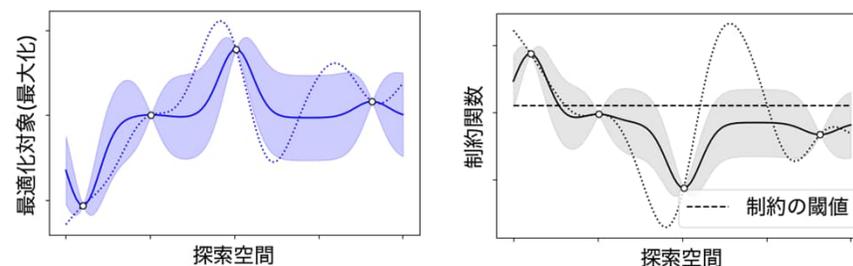
最適化対象が複数ある場合

例: 電池材料の導電率・エネルギーの同時最適化



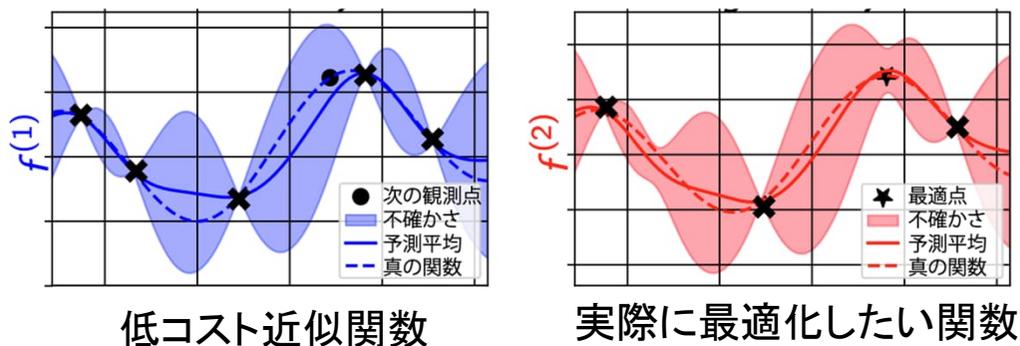
制約条件がある場合

例: 有害物質排出量の制約のもとで燃費最大化



近似情報がある場合

例: シミュレータと実実験



人間の好みに関わる場合

今回はBよりAが良いかな

デザインA

スピード: 10
省エネ性: 5
重量: 4

デザインB

スピード: 8
省エネ性: 7
重量: 5

などなど

求める連携先・メッセージ

- 機械学習を単に予測のみに使うのではなく、そこからの最適化を考えるのがベイズ最適化であり、様々な分野で使われ始めています
 - 様々な科学分野(材料, 化学, 生物学, ...)
 - 工業製品最適化(ロボティクス, 航空工学, ...)
- 私たちの研究室では,
 - **ベイズ最適化に関して基礎数理から応用まで様々な研究を行ってきました**
 - **また, 最適化に限らず汎用的な機械学習・AIによるデータ分析を専門としており, 機械学習・AIのトップ会議での発表実績があります (ICML, NeurIPS, AAI, KDDなど)**
- AI・機械学習全般によるデータ解析に関する技術相談が可能です

本技術に関する情報

試作品の状況

未定

研究フェーズ



文献・特許の情報

- [M. Karasuyama](#), H. Kasugai, T. Tamura, and K. Shitara, Computational Design of Stable and Highly Ion-conductive Materials using Multi-objective Bayesian Optimization: Case Studies on Diffusion of Oxygen and Lithium, *Computational Materials Science*, vol.184, 109927, 2020.
- T. Yonezu, T. Tamura, I. Takeuchi, [M. Karasuyama](#), Knowledge-Transfer based Cost-effective Search for Interface Structures: A Case Study on fcc-Al [110] Tilt Grain Boundary, *Physical Review Materials* (IF in 2018 = 2.926), vol.2 no.11, 113802, 2018.
- S. Takeno, H. Fukuoka, Y. Tsukada, T. Koyama, M. Shiga, I. Takeuchi, and [M. Karasuyama](#), Multi-fidelity Bayesian Optimization with Max-value Entropy Search and its Parallelization, *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning (ICML 2020)*, PMLR 119:9334-9345, 2020

【お問合せ】

名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627

E-mail: nitfair@adm.nitech.ac.jp

URL: <https://technofair.web.nitech.ac.jp/>