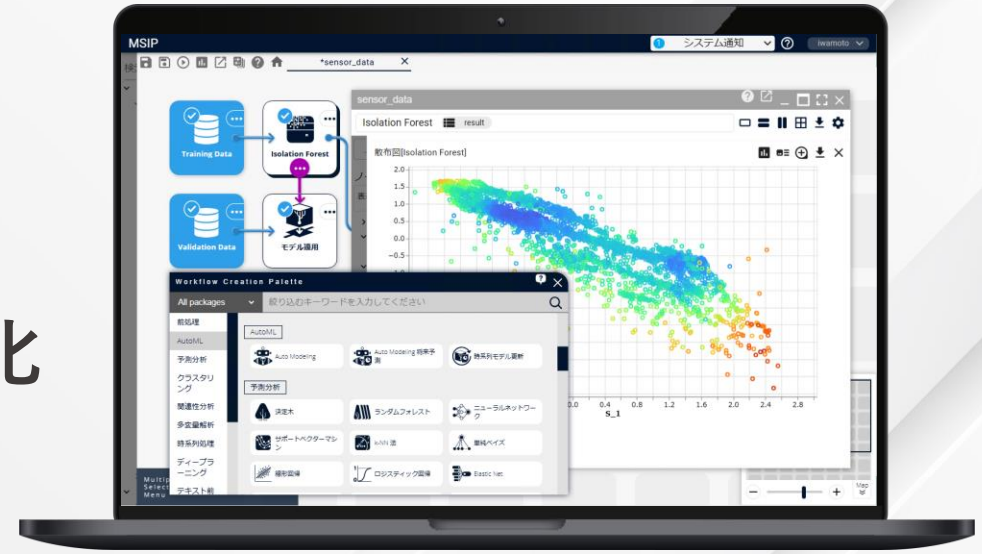
【アルカノ】
Alkano

テクニカルサンプルプロジェクト

ベイズ最適化による
実験パラメータの推薦・最適化



株式会社 NTTデータ数理システム

このプロジェクト について

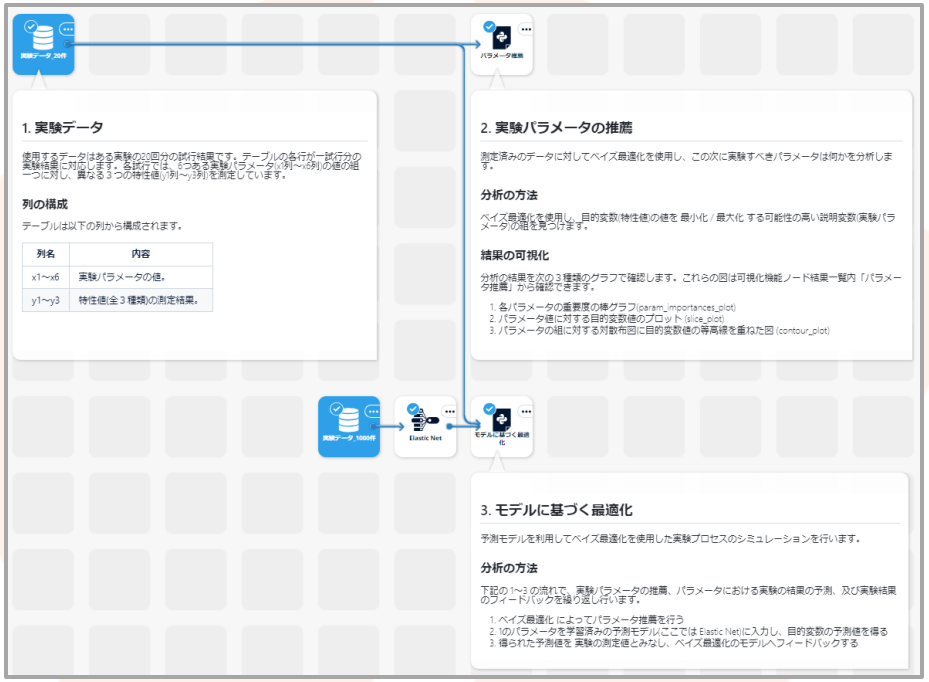
こんな方におすすめします

- マテリアルズインフォマティクスを活用して、最適な素材の配合比や生成条件を求めたい方
- 製造条件 と 製品の特性値 との関連性を分析し、最適な製造条件を明らかにしたい方
- 実験データが少ない場合でも ベイズ最適化 を活用して効率的に最適な製造条件を探りたい方

何をするプロジェクト？

材料開発など一般に試作品を作成するのに大きなコストがかかるケースにおいて、マテリアルズインフォマティクスが注目されています。素材の配合比などの製造条件と製品の特性の関連を実験データから明らかにし、最適な素材の配合比や生成条件を見つけるという試みです。

このプロジェクトでは、過去の実験データ、すなわち配合比・生成条件などの製造条件に対応する実験パラメータ（説明変数）と特性値（目的変数）の値からベイズ最適化によって特性値が大きくなる（または小さくなる）ような実験パラメータを探索、試すべき製造条件を推薦します。また、実験データから学習した予測モデルを利用した、製造条件の最適化を行います。



© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

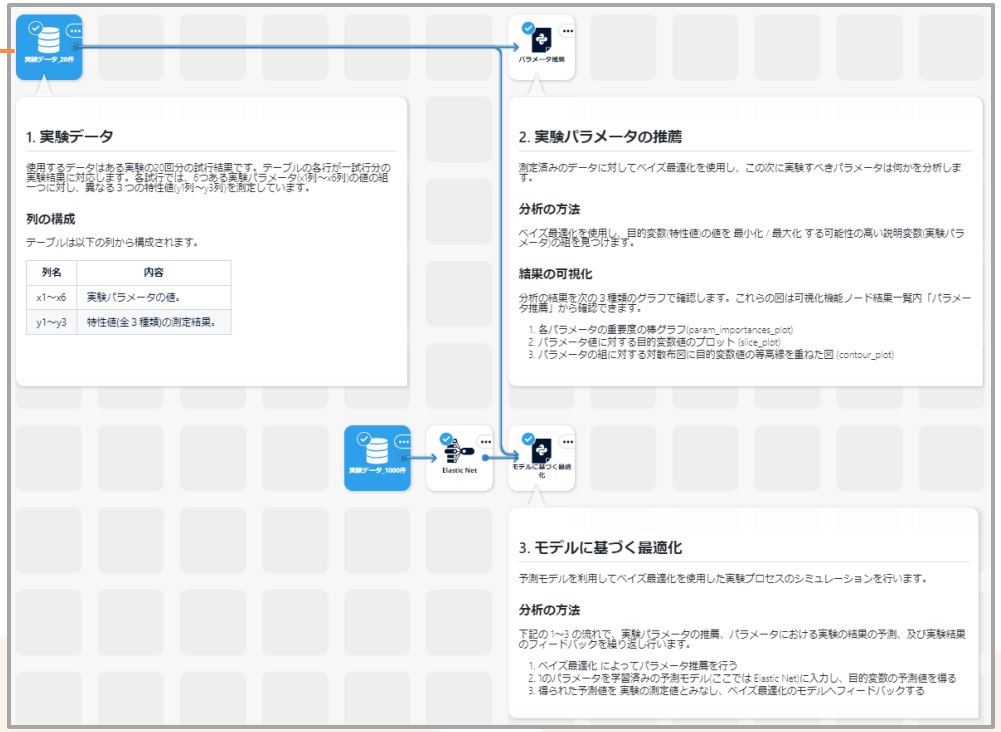
※p.18の「本文書・プロジェクトファイルのご利用にあたって」をお読みのうえ、ご利用ください。

プロジェクト 解説

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

プロジェクト 解説

1.



1. 実験データ

テーブルの各行が 1 回の 実験トライアル を表します。

プロジェクトに含まれる実験データのサンプルでは、実験パラメータ **x1** 〜 **x6** の各組に対して、実験の結果 3 個の測定値 **y1, y2, y3** が得られています。

x6 のみカテゴリのパラメータで、A, B, C の 3 パターンの値を取ります。

実験パラメータ（説明変数）　　特性値（目的変数）

No.	x1 FLOAT	x2 FLOAT	x3 FLOAT	x4 FLOAT	x5 FLOAT	x6 CATEGORY	y1 FLOAT	y2 FLOAT	y3 FLOAT
1	0.490078	2.714404	0.847190	0.419234	1.222351	A	62.393713	-106.173604	108.623842
2	-0.039036	-0.548844	1.205536	1.756116	-0.146349	B	-2.487270	-53.543506	128.502154
3	0.483398	1.667877	-0.438357	0.906356	-0.139521	A	11.004305	-36.856463	-6.649918
4	-1.224763	0.159797	-1.221269	0.973776	0.603333	B	-130.062483	171.085237	-167.677989

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

プロジェクト 解説

2. パラメータ推薦

測定済みの実験データから、ベイズ最適化により 次に実験すべきパラメータセットを推薦します。

実験データを入力し、指定した目的変数の値を 最小化 または
最大化 するような 説明変数の組（パラメータセット）を出力します。

パラメータセットを複数個推薦することも可能です。

また、過去の実験における **実験パラメータ (説明変数) と 指定した特性値 (目的関数) の関係性を把握・分析**するのに有用な各種グラフを出力します（アウトプットを参照）。

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

プロジェクト 解説

3. モデルに基づく最適化

目的変数値を予測するモデルを利用して疑似的に実験結果を生成することで、パラメータ最適化のシミュレーションを行います。

ベイス最適化により推薦されたパラメータで具体的な製造を行うことには手間や時間もかかりますので、前述の「パラメータ推薦」に基づき実験を繰り返し行った場合に、目的変数の値がどのように推移するかをシミュレーションします。

具体的には、下記の 1〜3 を繰り返すことで最適化のシミュレーションを行います。

1. ベイズ最適化 によってパラメータ推薦を行う
2. 得られたパラメータセットを学習済みの予測モデル(ここでは Elastic Net) に入力し、目的変数の予測値を得る
3. 得られた予測値を 擬似的な実験結果 とみなし、ベイズ最適化にフィードバックさせる

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アウトプットの説明

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アウトプット

パラメータ推薦

・推薦されたパラメータセットのテーブル **(params)**

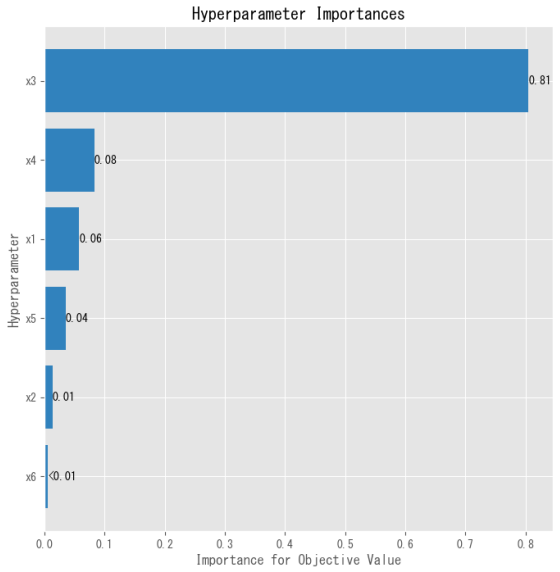
次に実験すべきパラメータセットの候補を示します。

パラメータ推薦-params　列数: 6 行数: 5

No.	x1 FLOAT	x2 FLOAT	x3 FLOAT	x4 FLOAT	x5 FLOAT	x6 STRING
1	-2.353683	-3.364413	-3.529100	4.876562	3.600147	B
2	-2.584907	-4.672002	-3.730249	4.600278	3.388171	B
3	-2.844244	-4.264731	-3.381579	4.283530	3.351371	B
4	-2.583636	-4.648497	-4.188880	4.430508	3.770978	B
5	-2.402014	-4.982059	-3.933545	4.526932	3.780527	B

・各パラメータの重要度 **(param_importances_plot)**

各パラメータの目的変数への影響度を示します。



以降の結果は、目的変数を **y1**,
最適化の方向を **最小化** とした場合のものです。

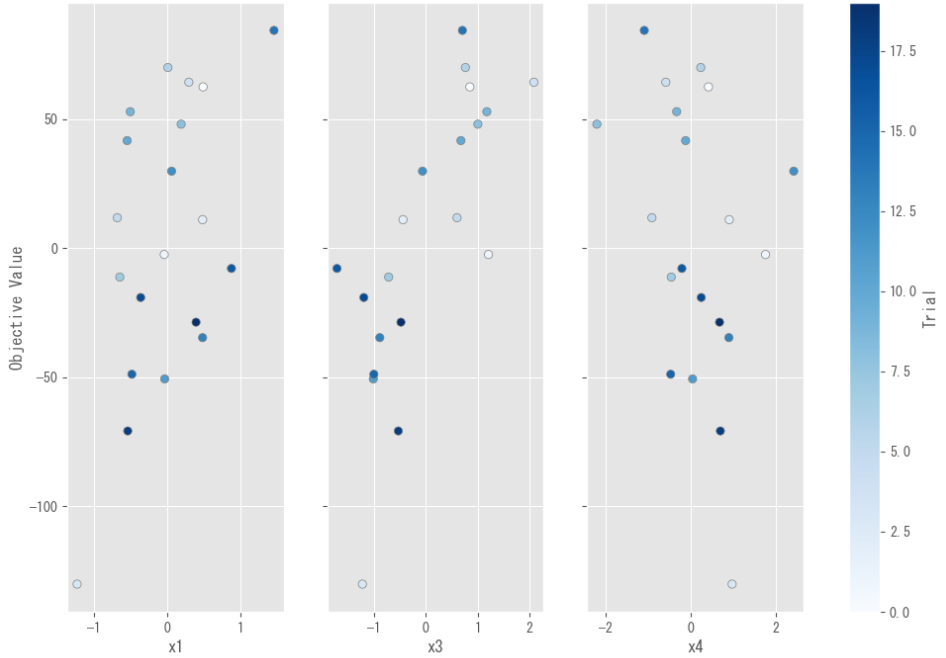
© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アウトプット

パラメータ推薦

各パラメータ値 に対する 目的変数値 のプロット

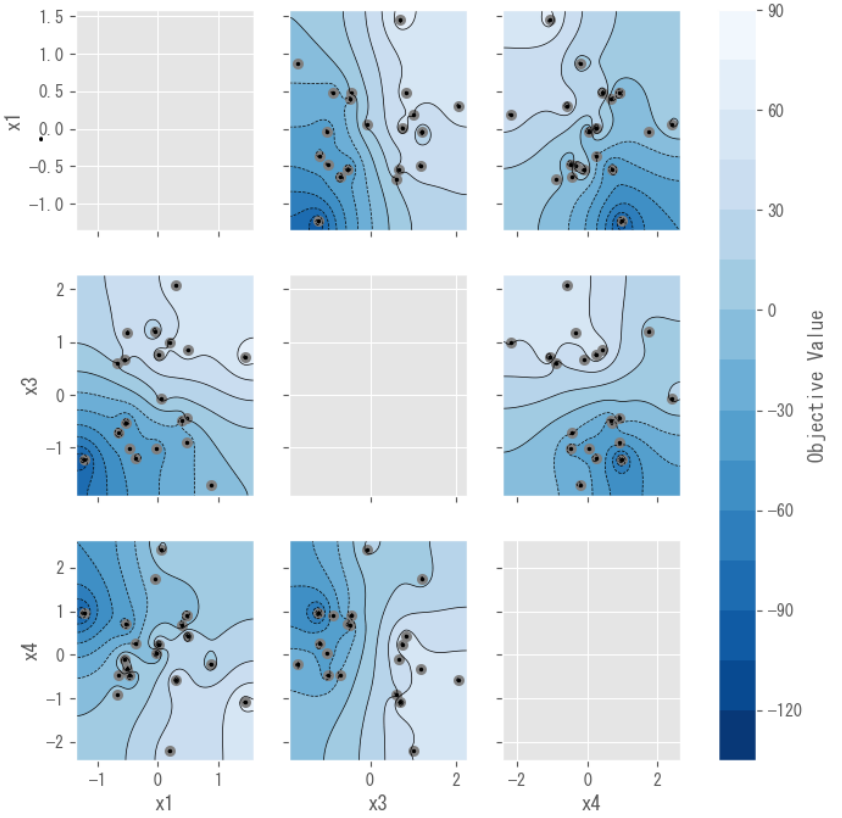
(slice_plot)



前述の重要度が上位のパラメータについてプロットを描画します。

x1, x3 が小さくなると目的変数値が良くなる（小さくなる）ことがわかります。

パラメータ間の対散布図に、目的変数値の等高線を図示したプロット **(contour_plot)**

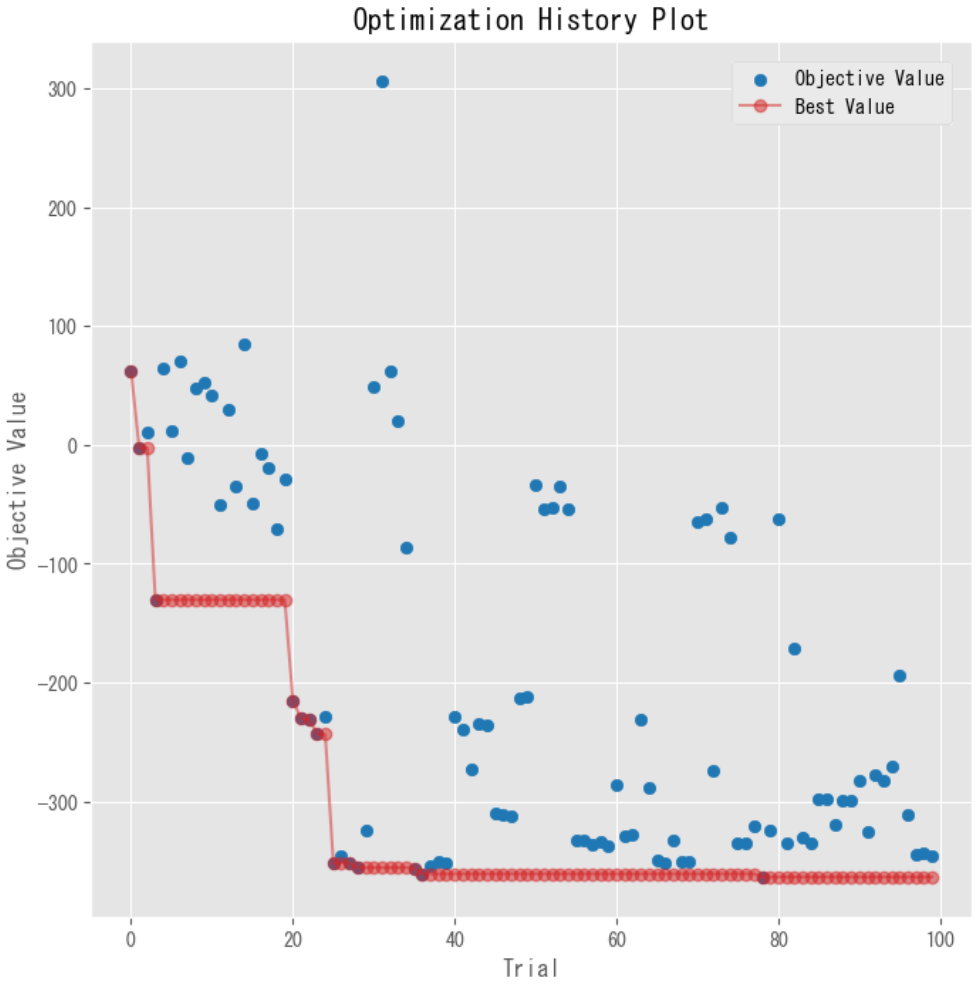


© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アウトプット

モデルに基づく最適化

・試行回数と目的変数値の推移のプロット (**history_plot**)



青点が各試行における目的変数値、赤線がその時点での目的変数値のベストを示します。

右図は試行回数を 100 とした場合のシミュレーション結果です。試行回数が増えるにしたがい目的変数値が下がる傾向にあり、ベイズ最適化によって、より良いパラメータセットを探索できていることが分かります。

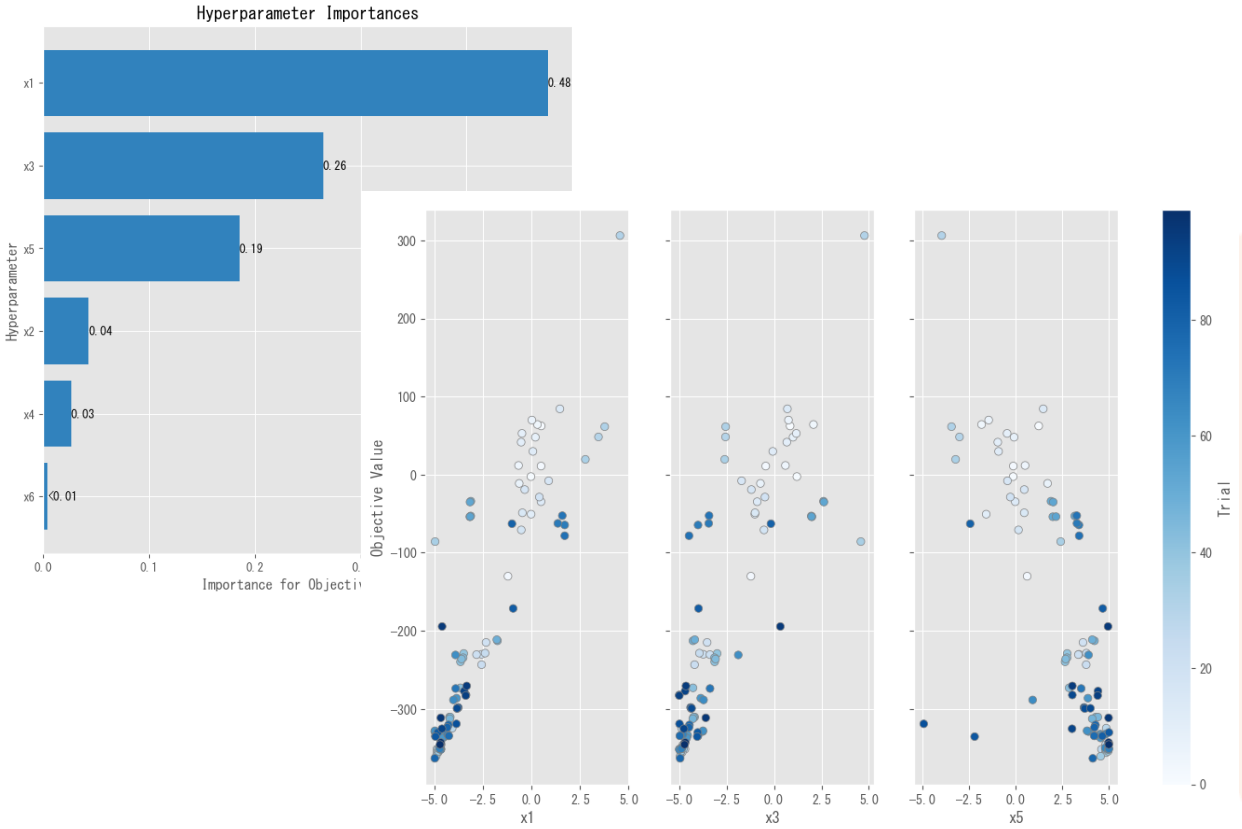
また、25回目以降はベスト値がほとんど更新されておらず、これ以上試行回数を増やしても改善しない（解が収束している）ことが予想されます。

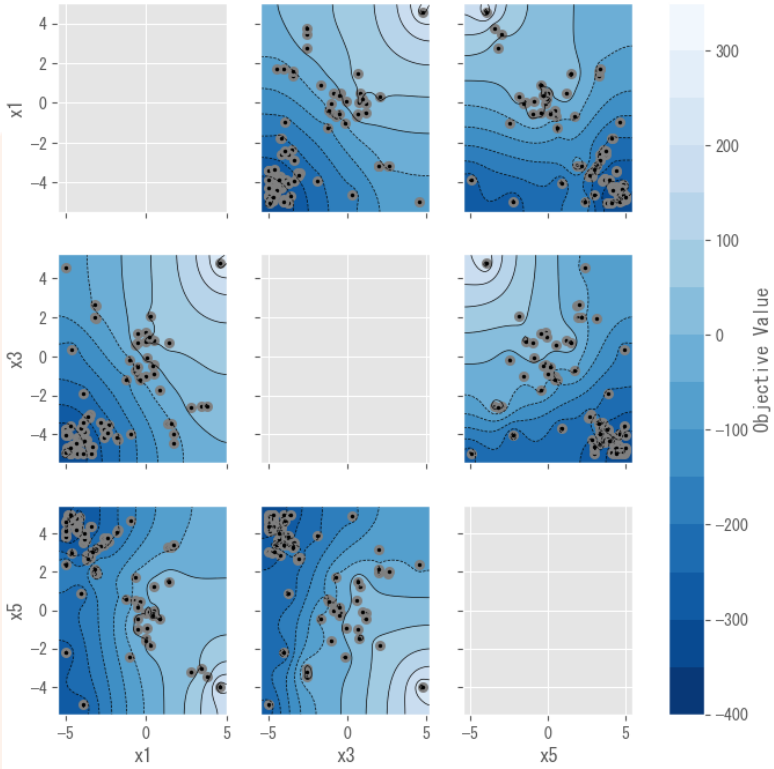
© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アウトプット

モデルに基づく最適化

最適化の過程で得られた擬似的な実験データ について、 パラメータ (説明変数) と 特性値 (目的関数) の関係性を把握するための各種グラフを出力します（内容は「パラメータ推薦」 と同様です）。





© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アイコンの設定

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アイコンの設定

パラメータ推薦

【変数の設定】
最適化したい 目的変数 とその方向（最小化 または 最大化）、説明変数（実験パラメータ）を選択します。
注意： 説明変数の探索範囲を下記の スクリプト編集エリア にて指定してください

【最適化アルゴリズムの設定】
最適化の手法は **TPE, GP-EI, Random** を選択可能です
(詳細は 最適化の手法：概要 と 特徴 を参照)

パラメータの探索範囲を指定

```
## ---  説明変数の探索範囲  --- ##

#   数値(実数値)の場合：("num", [最小値, 最大値])
#   カテゴリの場合：("cat", [候補1, 候補2, ...])
X_ranges = {
    "x1": ("num", [-5, 5]),
    "x2": ("num", [-5, 5]),
    "x3": ("num", [-5, 5]),
    "x4": ("num", [-5, 5]),
    "x5": ("num", [-5, 5]),
    "x6": ("cat", ["A", "B", "C"])
}
```

▶ をクリックしてスクリプト編集エリアを開きます

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

アイコンの設定

モデルに基づく最適化

「パラメータ探索」と同様、変数の設定を行ってください。

最適化の最大トライアル回数を指定します。

サンプルプロジェクトでは、ベイズ最適化の初期化のために、20件の実験データを初期トライアルとして入力しています。

初期データを入力しない場合、または初期データがこの件数に満たない場合は、初期化のためランダムサーチを行います。

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

補足情報

技術的な情報や利用規約について

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

最適化の手法：概要 と 特徴

TPE (Tree-structured Parzen Estimator)

目的変数値が 上位の群 と 下位の群 の 2つ に分けて、(上位の群に入る確率) / (下位の群に入る確率) が最大となるような 説明変数（パラメータ）を選ぶことで最適化を行います。
説明変数が多い場合 や カテゴリ変数が多い場合 に特に有効です。 計算が比較的高速でサンプル数が多い場合にも適用しやすいです。

GP-EI

ガウス過程 (GP; Gaussian Process) により説明変数と目的変数の関係をモデル化し、目的変数値の改善度合いの期待値 EI (Expected Improvement) が最大となるような説明変数（パラメータ）を選ぶことで最適化を行います。
説明変数が多くなく（数次元程度）、かつ連続変数が多い場合 に特に効果が高いですが、計算コストは高めです。

Random

ランダムサーチにより説明変数（パラメータ）を選択します。
無作為にサンプリングを行うので、説明変数と目的変数の関係性を純粋に見たい場合におすすめです。

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

技術情報

本サンプルプロジェクトでは、 Optuna (https://optuna.org/) を利用して、パラメータ推薦や最適化の実行、およびグラフの出力処理を実装しています。

TPE の実行には Optuna 標準の TPESampler を、 GP-EI の実行には BoTorch (https://botorch.org/) をエンジンとした BoTorchSampler を使用しています。
BoTorch に実装された GP-EI は、モンテカルロ法 やディープラーニングのフレームワーク PyTorch の活用により、従来の GP-EI でネックとなっていた計算効率やスケーラビリティを大きく向上させたものとなっています。

各アルゴリズムの詳細については、以下のドキュメントからご参照ください。

- TPE

  https://optuna.readthedocs.io/en/stable/reference/samplers/generated/optuna.samplers.TPESampler.html#optuna.samplers.TPESampler
- GP-EI

  https://optuna.readthedocs.io/en/stable/reference/generated/optuna.integration.BoTorchSampler.html#optuna.integration.BoTorchSampler

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

本文書・プロジェクトファイルのご利用にあたって

本文書ならびにプロジェクトファイルは、（株）NTT データ数理システム （以下「弊社」）が開発・販売する分析プラットフォーム Alkano についての情報提供として弊社が作成を行ったものです。

プロジェクトファイルは、ご利用者様の責任のもとで改変して利用することができますが、これに対するリバースエンジニアリングを禁じます。また、本文書ならびにプロジェクトファイルのご利用に際して、ご利用者様および第三者に損害が発生したとしても、弊社は責任を負わないものとします。

プロジェクトファイルは、その中に同梱されているデータを利用し、本文書内で解説している設定可能なパラメータで動作させた場合についてのみ、弊社にて動作の検証を行っております。これを超えるような状況における動作は保証いたしません。

本プロジェクトファイル は、MSIP1.10.0 および Alkano1.4.0 にて動作確認を行っております。

© 2025 NTT DATA Mathematical Systems Inc.

【アルカノ】

Alkano

データ活用の確かなパートナー

お問い合わせ・詳細:
株式会社NTTデータ数理システム
https://www.msi.co.jp/solution/alkano/