

(5) ポスター発表

機械学習を用いた量子ビーム実験の効率化

P60

High-throughput quantum beam experiments with machine learning

小野寛太 kanta.ono@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構

マテリアルズインフォマティクス(MI)の発展に伴い、AI 技術(インフォマティクス技術)を用いて材料設計・創製から材料機能の評価・解析にわたる材料研究開発の全てのプロセスを効率化、自動化、高精度化する試みが進展している。材料の評価・解析においては、機械学習を用いることにより、所望の物理量を最適かつ最短時間で計測することが可能になり、計測の自動化と合わせてハイスループット化が実現すると考えられる。計測のハイスループット化が進む一方で、計測データ解析は熟練した専門家により人手で行われている場面がほとんどであり、材料の研究開発の時間的ボトルネックとなっている。われわれは機械学習手法を用いて、量子ビーム計測およびデータ解析の最適化・自動化・高速化に取り組んでいる。このような量子ビーム実験の効率化は、ラボの計測機器や小型中性子施設のようにビーム強度が弱く、ノイズの多いシグナルから情報抽出を行わなければならない現場威力を発揮すると考えられる。また、現状でも十分なビーム強度が得られている放射光施設や大型中性子施設などにおいても、従来と比べて極めて短時間で情報抽出を行うことが可能になることで、オペランド計測が可能になると期待される。このように、機械学習を活用した高効率計測・解析により、研究者の労力を減らすことができるだけでなく、熟練した専門家しか出来なかった材料計測・解析が誰にでも可能になるコモディティ化が進み、さらに計測・解析結果の再現性が担保されるため、材料科学の進展に欠かせない技術になりうる。

われわれは下記のテーマについて研究を行っている。

1. 適応型実験計画を用いた量子ビーム実験計画の最適化
機械学習技術の一種であるガウス過程回帰(Gaussian process regression)を用いた適応型実験計画法によるXMCD スペクトル計測の効率化を行い、従来法と比べて5分の1の計測時間でも従来と同等の精度で磁気モーメントを定量評価できることを明らかにした。

2. 統計的手法を用いた量子ビーム実験の効率化

材料の微細構造評価に用いられる小角散乱実験について、散乱パターンを確率密度分布と捉え、計測により得られる二次元検出器の各ピクセルの強度から真の小角散乱パターンを推定する手法を提案した。カーネル密度推定(KDE : Kernel Density Estimation)を用いることにより、従来法と比べて10倍に効率化できることが明らかになった。

3. 量子ビーム計測データからの物理量の自動抽出

似た物理量に対応するスペクトルは似ているという仮定のもと、多次元尺度構成法(MDS : Multi-Dimensional Scaling)によってスペクトル同士の類似性を2次元で可視化した。このことにより、計測スペクトルが含む物理量をデータの類似性から推定する方法論を提案した。

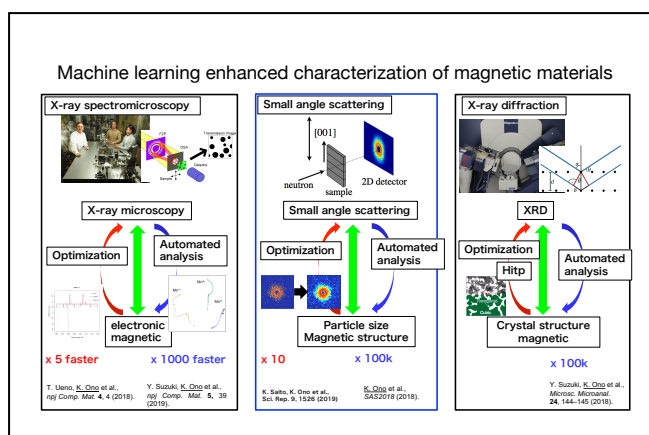


図 機械学習を用いた量子ビーム実験の効率化

【共著者(所属)】

上野哲朗(QST)・日野英逸(統数研)・斉藤耕太郎(KEK)・鈴木雄太(KEK)・矢野正雄(トヨタ自動車)・庄司哲也(トヨタ自動車)・森田秀和(日立製作所)・森田秀和(日立製作所)・浅原彰規(日立製作所)

【関連プロジェクト】

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>磁性材料拠点

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(Mi2i)

JST 未来社会創造事業共通基盤領域

【参考文献】

- [1] T. Ueno, K. Ono, et. al, npj Computational Materials 4, 4 (2018)
- [2] K. Saito, K. Ono, et. al, Sci. Rep. 9, 1526 (2019)
- [3] Y. Suzuki, K. Ono, et al., npj Computational Materials 5, 39 (2019).