

量子ビーム計測データ解析における機械学習の応用

○鈴木 雄太^{1,2*}, 小野 寛太^{1,2}

¹総合研究大学院大学 高エネルギー加速器科学研究科, ²高エネルギー加速器研究機構

Machine learning applications for data analysis in quantum beam experiments

○Yuta Suzuki^{1,2*} and Kanta Ono^{1,2}

¹ SOKENDAI, ² High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

現代の材料開発は、1.実験デザイン、2.材料合成、3.物性測定およびデータ解析のステップからなり、このサイクルを回して材料開発が進められる。近年では、機械学習や情報処理技術を材料科学に応用する Materials Informatics (MI) の急激な発展が、材料科学の現場に変化をもたらしつつある。上記ステップ 1 については数理最適化を用いた材料組成や実験計画の最適化が盛んに研究されているほか、2 についてはロボットを用いた自動合成、多数の組み合わせを網羅的に探索できるコンビナトリアル合成法、自然言語処理を用いた文献解析による合成条件推定などの試みが提案され、分野によって差はあれども、MI を用いた実験が徐々に普及しつつある。一方、ステップ 3 にあたる物性測定およびデータ解析においては、測定そのものは当初より効率化の対象とみなされ自動測定技術や高性能検出器などが研究されてきたこととは対照的に、データ解析、すなわち計測データからの材料特性推定は、熟練した研究者が手作業で進めるべき仕事と認識され、大部分が従来通り人間による試行錯誤に頼っている。このためデータ解析が材料開発における時間的ボトルネックの一つとなっているほか、ハイスループット測定が普及した今、手作業によるデータ解析ではそのデータを十分に活用できない。そこで我々は機械学習を用いた効率的なデータ解析手法の研究に取り組んでいる。

計測データの解析に機械学習を応用するにあたってはいくつかの課題が挙げられる。最大の課題は、学習のために利用可能なデータが比較的小さく、また実験によるデータ取得コストが高い点にある。そのため現在はシミュレーションによりデータを用意することが主流だが、実世界における実験とのギャップが新た

な課題となる。加えて、見過ごされがちな点であるが、材料科学においては普遍的なタスクが少なく各論になりがちで、アイデアの共有や競争がしづらいことも MI の発展と普及を難しくしていると考える。また実用のためには様々な測定条件への対応、エッジ (=実験室) での on-the-fly 処理が必要といった制約が課せられる場合もあり、問題設定や手法の選定には工夫が必要とされる。

本講演では、これらの背景について触れながら、物性測定技術のうち広範な分野で一般的に用いられる粉末 X 線回折法 (XRD) および X 線吸収分光法 (XAS) を例に、そのデータ解析への機械学習の応用事例を紹介する。XRD については、リートベルト法による結晶構造精密化をブラックボックス最適化の問題として定式化し自動化した研究¹を紹介する。XAS については、データの性質とスペクトル同士の類似度に注目することで XAS からの物理量推定を自動化した研究²を紹介する。これらの研究で提案した手法を用いることで、単にデータ解析を省力化・高速化するのみならず、主観的な判断が必要とされる操作を減らし、人間のクセや思い込みによる解析結果のバイアスを軽減できると期待される。今後はこれらの手法を発展させ、材料解析における熟練者の直感の具体化や、これまでは特徴づけや計測が難しかった材料特性の解析、計測とデータ解析が融合した材料解析法の開発など、機械学習を用いた材料の理解というビジョンの実現に向け、さらに研究を推進していく。

文 献

- 1) Ozaki, Y. *et al. npj Comput. Mater.* **6**, 75 (2020).
- 2) Suzuki, Y., Hino, H., Kotsugi, M. & Ono, K. *npj Comput. Mater.* **5**, 39 (2019).

*E-mail: ysuz@post.kek.jp