

## ■ はじめに

近年大きな期待が寄せられているマテリアルズインフォマティクスにおいて、データ駆動による材料探索を加速し、新材料の発見や材料に関する知識獲得につなげるためには、実験データの生成、蓄積、活用の各フェーズにおいて効果的かつ効率的な手法を確立することが不可欠である。その中でも材料評価は最も重要な要素の1つであり、放射光や中性子などの量子ビームを用いた材料評価を高精度化・高効率化することは材料開発の加速に効果的である。しかしながら、従来の量子ビームを用いた材料評価のための計測実験では、計測データの精度や計測時間の最適化の方法が確立されていないため、実験方法や解析結果が人に依存してしまうという問題があり、これらの問題により、材料評価の高効率化が実現していなかった。

近年の機械学習技術の進展により、量子ビーム計測・解析においても機械学習をはじめとした情報科学を活用することで、飛躍的な高効率化が可能になった。

## ■ 活動内容

### 1. 機械学習による放射光実験の効率化

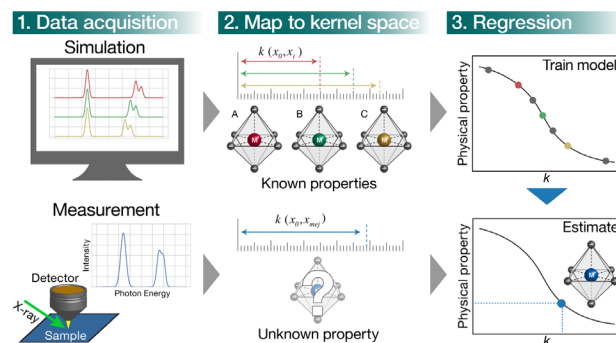
量子ビーム計測の高効率化においては、過去の計測結果に基づき次に計測すべきポイントを決めることが重要である。われわれはガウス過程を用いた機械学習手法により、計測中に能動的に次の最適な計測ポイントを決める adaptive design of experiment という実験計画法を提案した。本手法によりX線スペクトル計測を従来の5倍以上に高速化することが可能となった。

### 2. 機械学習による中性子実験の効率化

中性子実験では十分な計測カウントを得るために長時間の実験が必要となることが多い。そこでわれわれはカーネル法を用いた離散データからの連続関数の予測、二次元検出器の特性を活用した手法による低カウントデータからの高精度での情報抽出を行なった。本手法により、中性子小角散乱実験において、従来の20分の1の計測時間で同等の精度の情報を抽出することに成功した。

### 3. 計測データからの材料パラメータの自動抽出

従来法では計測データのモデルフィッティングを用いて材料パラメータなど所望の情報を取得していた。われわれは計測データの類似性を定める距離尺度を導入することにより、計測データ空間から材料パラメータ空間への写像を簡便な方法で実現することに成功した。



代表発表者 小野 寛太(おの かんだ)  
所 属 高エネルギー加速器研究機構

問合せ先 〒305-0801 つくば市大穂1-1  
TEL:029-864-5659 FAX:029-864-3202  
kanta.ono@kek.jp

■キーワード: (1)マテリアルズインフォマティクス  
(2)量子ビーム実験  
(3)機械学習

■共同研究者: 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  
浅原彰規・日立製作所  
上野哲朗・量研機構