

機械学習による量子ビーム実験の高効率化

Optimization of the design of quantum beam experiments using machine learning

小野寛太
KEK-物構研

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。

1. 機械学習によるX線スペクトル計測の効率化 [1]

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定す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定する 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. 機械学習による散乱実験の効率化

中性子散乱実験をはじめとする散乱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。

[1] T. Ueno et al., npj Computational Materials 4, 4 (2018)