

機械学習を応用した量子ビームデータ解析

Machine learning application for quantum beam experiments

鈴木雄太^{1,2}、小野寛太^{1,2}

1 総研大 物質構造科学専攻、2 KEK 物質構造科学研究所

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 (ML) 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。

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) を例に、そのデータ解析への ML の応用事例を紹介する[1,2]。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由来する解析結果のバイアスを軽減できると期待される。

1. Ozaki, Y. *et al.* Automated crystal structure analysis based on blackbox optimisation. *npj Computational Materials* **6**, 75 (2020).
2. Suzuki, Y. *et al.* Symmetry prediction and knowledge discovery from X-ray diffraction patterns using an interpretable machine learning approach. *Scientific Reports* **10**, 21790 (2020).