

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
終了報告書(探索研究)

令和2年度
終了報告書

令和元年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：小野 寛太]

[高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所・准教授]

[研究開発課題名：数理科学を活用したマルチスケール・マルチモーダル構造
解析システム]

実施期間：令和元年11月1日～令和3年5月31日

§ 1. 研究実施体制

(1) 小野グループ(高エネルギー加速器研究機構)

① 研究開発代表者: 小野 寛太 (高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所、准教授)

② 研究項目

- ・マルチスケール・マルチモーダル構造解析システムの設計
- ・計測の自律化
- ・自動データ解析

(2) 日野グループ(統計数理研究所)

① 主たる共同研究者: 日野 英逸 (統計数理研究所、教授)

② 研究項目

- ・計測における能動学習の理論
- ・統計的機械学習の計測への応用

(3) 牛久グループ(株式会社オムロンサイニックエックス)

① 主たる共同研究者: 牛久 祥孝(株式会社オムロンサイニックエックス、Principal Investigator)

② 研究項目

- ・マルチモーダル変換の研究
- ・深層学習の材料科学への応用

(4) 上野グループ(量子科学技術研究開発機構)

① 主たる共同研究者: 上野 哲朗(量子科学技術研究開発機構量子ビーム科学部門、主任研究員)

② 研究項目

- ・量子ビーム実験
- ・マルチスケール・マルチモーダル構造解析システムの実施

§ 2. 研究実施の概要

高付加価値を持つ材料の研究開発は、わが国の産業を支える基盤として、今後の進展が期待される。革新的な材料開発のためには、原子レベルで物質の結晶構造や局所構造をマイクロに知ることだけでなく、微細組織や界面などメゾスケール構造、さらには材料(素材)として用いられるマクロスケールに至る階層的な不均一構造の情報を明らかにし知識へと転換することにより、マルチスケールでの階層的不均一構造と材料特性との相関を解き明かすことが不可欠である。

将来の計測・分析技術においては、その計測から(学術的あるいは産業的に)どれだけの価値が生み出

されるか、という指標が重要となる。われわれは材料の計測・分析においても異なる計測手段を統合し最適な材料評価サービスを提供することが重要であると考え、CaaS (Characterization as a Service)の概念を提唱する。従来はモダリティ（異なる計測・シミュレーション）ごとあるいはスケールごとに行われていた計測・解析を統合しマルチスケール・マルチモーダル解析を可能にすることで圧倒的に高い価値を生み出すことが可能になると考えた。そこで本研究では最新の**数理科学を活用**したマルチスケール・マルチモーダル構造解析システム（CaaS）の開発を行なった。

本研究で実施した研究は下記のとおりである。

- 適応型実験デザイン：最適な計測条件を自動で策定する方法論の確立

実験者が計測実験を行う前に持っていた「事前知識」、すなわち関連する論文などの文献や理論シミュレーションから得られる知識を実験計画に盛り込むことである。この「事前知識」を実験計画に盛り込んだ全く新しい実験デザイン法を開発した

- シグナル／ノイズ比の低い計測データからの情報抽出

シグナル／ノイズ比が低い計測データからの情報抽出に、第一原理電子状態計算による理論データを援用することにより、従来は解析不可能であった計測データ解析を可能にした[1]。

- 計測データ解析の自動化

結晶構造解析の問題が、機械学習においてモデルのチューニングを自動化するハイパーパラメータ最適化問題と類似していることを見出し、ブラックボックス最適化の枠組みを導入することで、熟練者を越えた結晶構造解析を自動で行う解析システムを構築した[2]。また、機械学習を用いて回折データから空間群を推定するシステムを構築した[3]。

[1] M. Matsumoto, T. Hawai, and K. Ono, Phys. Rev. Applied 13, 064028 (2020).

[2] Y. Ozaki, Y. Suzuki, T. Hawai, K. Saito, M. Onishi, and K. Ono, npj Computational Materials 6, 75 (2020).

[3] Y. Suzuki, H. Hino, T. Hawai, K. Saito, M. Kotsugi, K. Ono, Sci. Rep. 10, 21790 (2020).