

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(探索研究)

令和元年度 研究開発年次報告書

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2年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(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

- ・本格研究に必要な実施体制の確立
- ・最適な計測条件を自動で策定する方法論の確立
- ・シグナル／ノイズ比の低い計測データからの情報抽出
- ・計測データ解析の自動化
- ・深層学習を用いたマルチスケール・マルチモーダル計測データの統合

(2)「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

- ・最適な計測条件を自動で策定する方法論の確立

(3)「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

- ・最適な計測条件を自動で策定する方法論の確立
- ・シグナル／ノイズ比の低い計測データからの情報抽出

(3)「牛久」グループ(オムロン サイニックエックス株式会社)

① 主たる共同研究者:日野 英逸 (オムロン サイニックエックス株式会社、Principal Investigator)

② 研究項目

- ・深層学習を用いたマルチスケール・マルチモーダル計測データの統合

§2. 研究開発実施の概要

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構築のため、2019年度は本格研究に必要な実施体制の確立および本格研究にあたって必要な要素技術の検証を中心に行なった。本格研究に必要な実施体制の確立については、領域内研究者との議論をもとに実施体制をほぼ確立することができた。要素技術の検証については、既存の個別の計測手法(X線回折、

X線小角散乱、中性子回折、中性子小角散乱、透過型電子顕微鏡、走査型電子顕微鏡、X線顕微鏡など)について、数理科学を活用することにより、最適な計測条件を自動で策定する方法論の確立、シグナル／ノイズ比の低い計測データからの情報抽出、計測データ解析の自動化に関する研究を行った。さらに、深層学習を用いたマルチスケール・マルチモーダル計測データの統合を実証するための研究を行った。特筆すべき成果として、材料科学で最も重要な評価手法の一つである結晶構造解析(X線・中性子回折)について、数理最適化技術を用いて完全自動化することに成功した(文献1)。また、中性子回折実験においてはシグナル／ノイズ比の低い計測データからの情報抽出が課題であったが、実験と第一原理計算の融合により、高精度で情報抽出を行い、さらにはオンデマンドでの物質設計に繋がられることを実証した(文献2)。

[1] Automated crystal structure analysis based on blackbox optimization, Yoshihiko Ozaki, Yuta Suzuki, Takafumi Hawaii, Kotaro Saito, Masaki Onishi & Kanta Ono, npj Comput Mater 6, 75 (2020)

[2] (Sm,Zr)Fe₁₂xMx (M=Zr,Ti,Co) for Permanent-Magnet Applications: Ab Initio Material Design Integrated with Experimental Characterization, Munehisa Matsumoto, Takafumi Hawaii, and Kanta Ono, Phys. Rev. Applied 13, 064028 (2020)