

# ガウス過程回帰による X 線スペクトル測定の効率化

量子科学技術研究開発機構 上野 哲朗  
統計数理研究所 日野 英逸  
高エネルギー加速器研究機構 小野 寛太

## はじめに

物性の解明や新規材料、高機能材料の開発を目的とする物質・材料研究において、これらの電子状態を調べることは非常に重要である。最近マテリアルズ・インフォマティクスとして物質・材料科学へ機械学習などの情報科学的手法の応用が進んでおり、大量の実験データを効率的に取得するための計測技術が求められている。

## X 線スペクトル測定

X 線スペクトル測定は電子状態を調べるために一般的に用いられており、試料に X 線を照射した際の応答をスペクトルとして計測する実験手法である。我々は X 線スペクトル測定のうち、X 線磁気円二色性(XMCD)スペクトル測定と X 線吸収スペクトル(XAS)測定に着目し、ガウス過程回帰を用いた適応型実験デザインによる測定の効率化を試みた。XMCD スペクトルを解析することで物質のミクロな磁氣的性質(スピン磁気モーメントと軌道磁気モーメント)を定量評価することができる。XAS スペクトルには物質中のイオンの価数や配位数などの情報が含まれる。

## ガウス過程回帰を用いた適応型実験デザイン

XMCD スペクトル測定では、試料に照射する X 線のエネルギーを変えながら吸収強度や透過強度を計測する。計測するエネルギー点数を減らすことで測定を効率化することができる。適応型実験デザインでは、ガウス過程回帰を用いて計測データを学習し、スペクトルを予測することで計測すべきエネルギー点を自動決定する。計測・予測・磁気モーメント評価のサイクルを磁気モーメントが収束するまで繰り返す。適応型実験計画法を用いることで、従来に比べて5分の1程度の計測エネルギー点数で磁気モーメントを同等の精度で導出することがわかった[1]。XAS スペクトル測定の適応型実験デザインでは、スペクトル同士の距離を収束の指標とすることによって方法論を一般化した。さらにベイズ的な事前知識の導入による効率化が可能であることがわかった[2]。

## 参考文献

- [1] T. Ueno, H. Hino, A. Hashimoto, Y. Takeichi, M. Sawada, and K. Ono, npj Comput. Mater. **4**, 4 (2018).
- [2] T. Ueno, H. Hino, and K. Ono, IEEE International Magnetism Conference (Intermag 2018), EV-05 (2018).