

## 放射光実験のデジタル化を目指した超大規模計測とデータ解析基盤の構築

小野寛太<sup>1,2</sup>, 武市泰男<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 大阪大学大学院工学研究科物理学系専攻

<sup>2</sup> 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所

放射光科学におけるデジタルトランスフォーメーション (DX) を推進し、放射光実験の自律化に向けた基盤技術を構築することを目的として、高空間分解能と超広視野を両立したギガピクセル X 線顕微鏡を開発し、ベイズ最適実験計画に基づく合理的かつ効率的な実験計画の自動策定と、機械学習を活用した超大規模スペクトルデータの自動解析手法を確立した。

近年、機械学習とロボット技術の発展により、物質科学・材料実験の自動化・自律化が急速に進展している。放射光科学においては、輝度の高い放射光光源と最先端の計測機器から得られる大量の計測データを効率的に取得・解析し、物質科学の新しい知見を得るための仕組みの構築が喫緊の課題となっている。われわれの研究グループでは、放射光科学を始めとした量子ビーム科学におけるデジタルトランスフォーメーション (DX) を念頭に置いて、さまざまなアプローチからの研究を行なっている。

われわれは高空間分解能と超広視野を両立した顕微分光による物質・材料科学を展開するため、ギガピクセル X 線顕微鏡 (Gigapixel X-ray Microscope: G-XRM) を独自に開発した。G-XRM では、1 回の実験で 10 億本オーダーのスペクトルデータを取得することが可能である。このような超大規模放射光計測データの取得と解析には、主に 2 つの課題が存在する。一つは放射光実験における超大規模計測において、限られたビームタイムを最大限に活用するための最適実験計画を策定する手法の確立である。もう一つは、10 億本オーダーのスペクトルデータを現実的な時間で解析し、物質・材料科学の有用な知見を得る手法の開発である。

これらの課題に対し、われわれはベイズ最適実験計画に基づき、スペクトル計測における計測点の数、計測すべきエネルギー (波長) および計測点での計測時間を合理的に選択する枠組みを新たに構築した。また、人手による解析が不可能となる膨大な数のスペクトルから、物質の局所的な化学状態や構造に関する情報を効率的に抽出するデータ解析手法も確立した[1]。

講演では、放射光実験の自律化における現状の課題を整理するとともに、将来の自律型放射光実験の実現に向けた展望について議論する。

[1]

Y. Ito *et al.*, *Scientific Reports* **14**, 22549 (2024).