

MA 抽出のためのフッ素系スーパー溶媒の探査

(4) MA 抽出のためのフッ素系スーパー溶媒探索問題における機械学習応用の展望

Exploration of Fluorinated Super-Solvent for Minor Actinide extraction

(4) Prospects of Machine Learning Approach on Exploration of Fluorinated Super-Solvent for Minor Actinide extraction

*松井孝太¹, 中瀬正彦², 針貝美樹², 渡邊真太², 田端千紘³, 山村朝雄³, 小林徹⁴, 塚本泰介⁵, 柿木浩一⁵, 島田隆⁵

¹名大, ²東工大, ³京大, ⁴原子力機構, ⁵三菱重工

観測されたデータから未知の入出力関係に対する予測モデルを効率的に推定するための方法論である機械学習を用いて MA 抽出のための溶媒探索の実験を効率化する方法を検討する。

キーワード: 機械学習, 統計的実験計画, 溶媒探索, ケモインフォマティクス

- 1. 緒言** 本研究で扱うフッ素系スーパー溶媒探索問題では、ある候補溶媒に対して各抽出条件に対する抽出率を網羅的な実験によって同定するには膨大なコストを要する。そこで、機械学習モデルに基づいて次に実験を行いデータを観測すべき条件を自動的に決定する統計的実験計画を利用して実際に測定実験を行う条件を絞り込むことでコストの削減と実験の効率化を目指す。
- 2. 方法** 教師データの少ない問題に対しては、その問題に対する事前知識を取り入れたモデルを用意し逐次的にデータの観測とモデルの更新を繰り返すベイズ機械学習のアプローチが特に有効である。本研究では、ガウス過程モデルによって溶媒と抽出の条件を入力、その条件における MA の抽出率を出力とするような系を近似する (図 1)。ガウス過程は、ある条件における抽出率の推定値のみでなく、その推定の不確実性を同時に評価することができるモデルであり、その不確実性を利用して次に実験すべき条件を提案させることができる (図 2)。詳細は当日報告する。

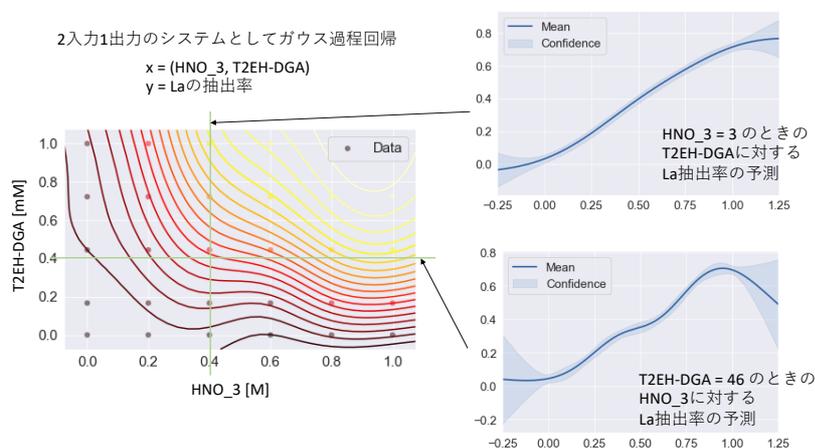


図 1 機械学習による La 抽出率のモデル化

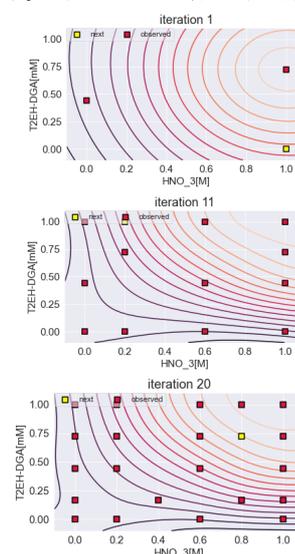


図 2 機械学習モデルに基づく測定実験の実験計画

- 3. 謝辞** 本研究は R3 年度に採択された文科省原子力システム公募(若手)、「MA 抽出のためのフッ素系スーパー溶媒の探査」のもとで 3 年間の事業として実施している。

*Kota Matsui¹, Masahiko Nakase², Miki Harigai², Shinta Watanabe², Chihiro Tabata³, Tomoo Yamamura³, Tohru Kobayashi⁴, Taisuke Tsukamoto⁵, Koichi Kakinoki⁵, Takashi Shimada⁵.

¹Nagoya Univ, ²Tokyo Tech., ³Kyoto Univ, ⁴JAEA., ⁵MHI.