

自己符号化器による未知試料の XRD 生成 XRD generation for unknown samples in Auto-Encoder

○内村 慶舟¹、矢野 正雄²、木本 博行²、本郷 研太^{1,3,4}、前園 涼¹、
(1.北陸先端大、2.トヨタ、3.物材機構、4. JST さきがけ、)

○Keishu Utimula¹, Masao Yano², Hiroyuki Kimoto², Kenta Hongo^{1,3,4}, and Ryo Maezono¹
(1.JAIST, 2.TOYOTA, 3.NIMS, 4.PRESTO, JST)

E-mail: mwkumk1702@icloud.com

目的の物性値に近づけるために、組成比をわずかに変えながら合成を行うことは、一般的に多くの時間とコストを要する。そういった場面には、第一原理計算を利用したハイスループット探索が期待されるが、組成比の変化が数%以下である場合、計算に必要とされるスーパーセルは非常に大きなものとなり、こちらも計算コストが大きくなる。ところで、実験で合成された未知試料を解析する際には、X線回折(XRD)が古くから使われており、そこから得られる情報は、格子定数だけでなく、歪や結晶子径など多岐にわたる。与えられた組成から、直接XRDを生成する事ができれば、合成や、計算の過程を経ることなく格子定数等を知ることが可能となるが、一般的にこれは不可能である。

今回我々は、この問題に対してニューラルネットワークの適用が非常に有用であることを見出した。本研究では、ニューラルネットワークを用いて、組成とXRDの関係を学習することで、与えられた組成からXRDを生成することを目的とする。まず我々は、磁石合金 $[\text{Sm}_{(1-y)}\text{Zr}_y]\text{Fe}_{12-x}\text{Ti}_x$ の異なる組成 (x, y) の10種類の組成に対して、対称性の観点から考え得る非等価な構造モデルを150個用意し、密度汎関数法を用いて構造最適化を行った。その後、そこから得られるXRDをシミュレーションによって生成し、これが実験で得られる放射光XRDの結果と対応していることを確認した後、そのXRDを入出力とした自己符号化器を構築した。自己符号化器は、ニューラルネットワークを用いて次元圧縮を行う手法で[1]、近年では、これを用いて画像等の特徴量(圧縮され

た入力データ)を抽出する研究などが行われている[2]。XRDを2次元に圧縮するように「学習させた」自己符号化器を使って、圧縮されたXRDを2次元平面(特徴量空間)にプロットしたところ、それらが組成ごとにクラスタリングされていることが明らかになった。すなわち、近い組成から得られたXRDは、特徴量空間の近い位置にマッピングされ、遠い組成から得られたXRDは遠い位置にマッピングされる。これは、特徴量空間の各点に組成的な意味を持たせることが可能であることを意味する。実際に、学習に用いたデータの組成情報から、特徴量空間の各点の組成情報を予測したものを図1に示す。この特徴量空間の組成マップをもとに、ある組成に対応する二次元データを復号すれば、その生成に対応したXRDを生成することができる。実際に復号したものを図2に示す。細かいピークまで綺麗に再現されていることが確認できる。

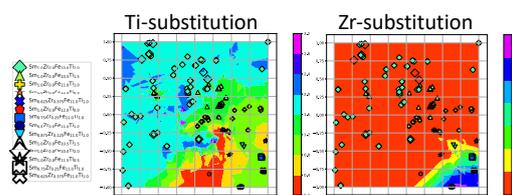


図1: 特徴量空間(2次元)の各点の持つ組成情報を学習用のデータから予測し、予測された組成をカラーマップで表示したもの。

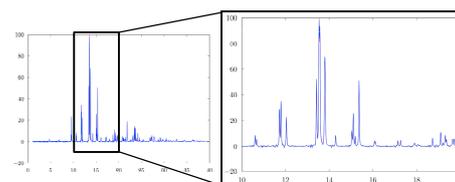


図2: 入力されたXRDと復号化されたXRDの比較。細かいピークまで綺麗に復元されていることがわかる。

引用文献

1. G. E. Hinton and R. R. Salakhutdinov, Science 313, 504 (2006).
2. R. Salakhutdinov and G. Hinton, Int. J. Approx. Reason. 50, 969 (2009).