

中性子材料計測データへの機械学習手法の活用

(日本原子力研究開発機構) ○巽 一徹

Application of machine learning methods to neutron scattering data for materials analyses
(Japan Atomic Energy Agency) ○Kazuyoshi Tatsumi

Large user experimental facilities are trying to apply data driven science procedures such as machine learning and AI on their measured data so as to improve their measurements and analyses abilities. This presentation introduces an example application of data-driven science on the neutron experimental data measured at J-PARC MLF.

A list of the detector array positions and time of detection of each detected neutron is recorded in pulsed neutron experimental facilities. We considered the contents in the list as Poisson point processes and optimized the bin-widths of the inelastic neutron scattering (INS) momentum and energy histogram and the kernel widths of the kernel density estimation on the quasi-elastic neutron scattering (QENS) energy profile, according to the references¹⁻³.

The optimal bin-widths on the INS data of a single crystal copper were obtained on the actual data sets as well as the virtual data sets of different total counts, which will help to design efficient measurement. The method will statistically validate the existence of an unknown faint spectral feature, as well.⁴

Energy profiles of probability densities on the QENS of Nafion samples were estimated. Fitting uncertainties in the half width half maximum of the Lorentzian components on the estimated densities were smaller by a factor than those on the histograms.⁵

Keywords : Data-driven science; Histogram bin-widths; Kernel band widths in kernel density estimation, neutron scattering; Poisson point process

大型共用実験施設では、機械学習・AI等のデータ駆動科学手法の計測データへの適用が分析の向上を目指し進められてきている。本発表では、J-PARC MLFの中性子散乱実験へのデータ駆動科学の適用例を紹介する。

個々の散乱中性子の検出器素子位置や検出時間等のリストを記録する方式が同施設では採られている。データ系列をポアソン点過程とみなし、ヒストグラムのビン巾やカーネル密度推定のカーネル巾を、測定データのみで最適化する方法¹⁻³を用いた。

得られている INS データとカウント数の異なる仮想データにおいても運動量とエネルギーの計4種のビン巾の最適値をコスト関数の外挿でよく推定した⁴。未知の微弱スペクトル形状の検証のほか、計測時間最適化が期待される。

カーネル巾局所最適化するカーネル密度推定法でナフィオンの QENS のエネルギープロファイルを推定した。更にカーブフィッティングを推定結果に行って得たローレンチアン半値半幅の不確さはヒストグラムを用いる場合より数倍小さかった⁵。

1) Shimazaki, H. & Shinomoto, S. (2007). *Neural Computation*, **19** 1503. 2) Muto, K. et al. (2019). *J. Phys. Soc. Jpn.*, **88**, 044002. 3) Shimazaki, H. & Shinomoto, S. (2010). *J. Comput. Neurosci.* **29**, 171. 4) Tatsumi, K. et al. *J. Appl. Cryst.*, submitted. 5) Tatsumi, K. et al. *MLF annual activity report 2020*.