

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新
2. 研究代表者： 赤井 一郎（熊本大学産業ナノマテリアル研究所 教授）
3. 中間評価結果

本課題では、マイクロ物性を観測できるX線吸収微細構造(XAFS)スペクトルと、デバイスのメゾ構造を捉える μ -XAFSデータに、ベイズ分光、スパースモデリング、マルコフ確率場モデル、非負値行列因子分解等を融合し、マイクロ物性と材料のメゾ構造・マクロ機能をシームレスに解析する方法を開発して、電池や磁石など材料の機能高度化に貢献することを目的とした。

データ駆動科学の適用例として、X線吸収スペクトルのベイズ分光法解析や、磁区ドメインのデータ駆動型解析の研究が着実に進められ、基礎研究における個別の成果を既に挙げている。XAFSは得られる情報や解析法に曖昧さのある手法であるが、情報科学を取り入れ定量的な議論を可能とし、どの放射光施設のデータであっても定量的な議論が可能になったことは大きな成果である。また、ベイズ統合による解析は新たなサイエンスを生み出せると考えられる。

データ駆動科学の個別の適用例については、今後も成果が見込まれる一方で、社会的・経済的に大きなインパクトをもつ目標を定めて、チーム全体が連携した形で研究を遂行することも望まれる。最終目標として、材料・物性科学の重要テーマに挑むことと合わせて、解析手法・解析プログラムを放射光計測の世界的スタンダードとする方向も目指して欲しい。

以 上