

計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の  
開発と応用

2018 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書
------------------

赤井 一郎

熊本大学 産業ナノマテリアル研究所

教授

データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新

## § 1. 研究成果の概要

磁石や二次電池材料の材料研究では、機能物質のマイクロ物性と、マクロ機能の特徴づけるデバイスのメゾ構造・マクロ機能の解明が要である。本研究では、それらの研究で行われる X 線吸収微細構造 (XAFS) とその顕微計測 ( $\mu$ -XAFS) にデータ駆動科学を融合する。まず XAFS 計測に基づくマイクロ物性解析の深化を進め、 $\mu$ -XAFS データでは、メゾ構造を捉える方法とマクロ物性を抽出する解析法を深化させ、それらを融合してマイクロ物性とマクロ機能を総合的解析する方法を開発する。

XAFS 解析では、X 線吸収端近傍構造・磁気円二色性の解析に、ベイズ推定を組み込んだベイズ分光法を適用して様々な材料物質のミクロな電子状態と磁性材料のスピン状態の分解抽出法を確立し、さらに材料のミクロな磁性を表す磁気モーメントの定量解析法も構築した。一方広域 X 線吸収微細構造には、二体多重散乱を表す基底関数を用いて、ベイズ自由エネルギーを情報量規準としたスパースモデリング解析法を開発し、光機能をもつ薄膜デバイスのマイクロ構造を解明した。

リチウムイオン電池モデル電極の充電過程におけるメゾ構造を捉えるため、XY スピンの自由度を持つマルコフ確率場法を開発し、 $\mu$ -XAFS データから粒塊等のメゾ構造を捉えることに成功した。また、この  $\mu$ -XAFS 多次元データを空間構造とスペクトル構造へ分解する改良型直交非負値行列因子分解法を開発し、分解されたスペクトル構造にイオン伝導に関わる電子軌道混成の情報が含まれていることを明らかにした。一方磁性材料では、磁区パターンから磁性を支配する物性量を抽出するため、心理特徴量に基づいた画像統計量の主成分解析を行い、その主成分特徴量が磁区パターンの定量的尺度となることを明らかにした。さらに畳み込みニューラルネットワークを用いた逆問題解法を構築し、磁区パターンから磁気異方性を推定することに成功した。

## § 2. 研究実施体制

### (1) データ駆動科学グループ

- ① 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）
- ② 研究項目
  - ・他のグループと協力し、研究全体の方向づけを行う。
  - ・広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) のスパースモデリングによるマイクロ構造の抽出。
  - ・X 吸収端近傍構造 (XANES)、X 線磁気円二色性 (XMCD) のベイズ分光による、電子状態・スピン状態の物性量の抽出。

### (2) X 線吸収計測・統合解析グループ

- ① 主たる共同研究者：妹尾 与志木（佐賀県地域産業支援センター 九州シンクロトロン光研究センター 所長）
- ② 研究項目
  - ・多角的な X 線吸収微細構造 (XAFS) 計測を行い、データ駆動科学にもとづく解析法を適用。
  - ・様々な結晶系の EXAFS 計測と物性特徴量の抽出。
  - ・軟 X 線領域の XANES 計測と解析。

### (3) メゾスケール計測・機能解析グループ

- ① 主たる共同研究者：水牧 仁一朗（高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 主幹研究員）
- ② 研究項目
  - ・心理特徴量にもとづく磁区パターンの定量評価法の確立。
  - ・異種計測情報のベイズ統合法の確立。

### (4) 特徴量画像解析グループ

- ① 主たる共同研究者：青西 亨（東京工業大学 情報理工学院 准教授）
- ② 研究項目
  - ・XY スピンマルコフ確率場による  $\mu$ -XAFS データの領域識別。
  - ・改良型直交非負値行列因子分解法によるスペクトル特徴量の空間マッピング。
  - ・畳み込みニューラルネットワークによる磁区パターン形成の逆問題解法。
  - ・リチウムイオンモデル二次電池の内部電流分布推定のためのマルコフ確率場の開発。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Spectral Analysis of X-Ray Absorption Near Edge Structure in  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Based on Bayesian Spectroscopy”, *phys. stat. solidi (b)* **257**, 2000107/1-6 (2020).
- 2) “Bayesian Integration for Hamiltonian Parameters of X-ray Photoemission and Absorption Spectroscopy”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 034703/1-8 (2021).
- 3) “Performance of Region-Based Markov Random Field with XY Spins”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 044003/1-14 (2021).
- 4) “Texture Analysis of Magnetic Domain Images Using Statistics Based on Human Visual Perception”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 044705/1-8 (2021).
- 5) “Obtaining Underlying Parameters from Magnetic Domain Patterns with Machine Learning”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 014705/1-9 (2021).