

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

2017 年度採択研究者

2018 年度 実績報告書
------------------

星野 学

科学技術振興機構

さきがけ研究者

高分解能データの統計的推定による超高精細結晶構造解析の開拓

## § 1. 研究成果の概要

本研究課題は、被験試料の放射線損傷や X 線光子数低下 (X 線強度低下) によって少数しか計測できない回折データから、統計数理解析を応用することで、計測実験では得られない多数の回折データを発生させることを目指している。

2018 年度は、回折理論に基づいた回折データの統計モデリングを考案し、実装を行なった。まず、回折理論を検討することによって、回折データの分布関数に内在する物理パラメータを明確にした。次に、実際に計測した少数の回折データから上記の物理パラメータを推定するために、統計解析を応用した技術開発を行なった。開発した技術を用いて、計測データから実際にパラメータを推定し、回折データ分布のモデリングを達成した。

モデリング達成に続き、計測不可能な回折データを発生させる技術開発を行なった。計測した回折データの一部を用いてモデリングを行い、モデルからデータをサンプリングする情報技術を用いて発生させたデータと、モデリングから除外した計測データの比較を行なったところ、発生データと計測データが計測誤差の範囲内で一致することが確認できた。

加えて、実際の結晶構造解析研究の場面で直面する困難を想定し、上記の技術を事前に数分で計測する回折データから、長時間の計測および解析結果を判定する技術として実用した。

## § 2. 研究実施体制

①研究者:

星野学 (科学技術振興機構 さきがけ研究者)

②研究項目

- X線回折データの計測
- X線回折データと統計数理技術の融合設計
- 融合技術の実装
- 計測試料の調整
- 研究のとりまとめ