

## 計測インフォマティクスに向けた2次元X線回折解析プログラムの開発 Software Development for 2D-X-Ray Diffraction Data Analysis Aiming to Time Efficient Measurement

早大先<sup>1</sup>, 物材研<sup>2</sup> ◯山下 晶洸<sup>1, 2</sup>, 長田 貴弘<sup>2</sup>, 柳生 進二郎<sup>2</sup>, 朝日 透<sup>1</sup>, 知京 豊裕<sup>2</sup>

Waseda Univ.<sup>1</sup>, NIMS<sup>2</sup>, ◯Akihiro Yamashita<sup>1,2</sup>, Takahiro Nagata<sup>2</sup>, Shinjiro Yagyū<sup>2</sup>, Toru Asahi<sup>1</sup>

Toyohiro Chikyow<sup>2</sup>

E-mail: yacfcj@asagi.waseda.jp

機械学習をはじめとした情報関連技術を材料科学へ応用したマテリアルズインフォマティクスが近年注目を集めている。この取り組みを進めていく上では膨大なデータを必要とすることが多く、この要請に応えるために、比較的短時間で試料を合成、測定、評価するハイスループット実験等の取り組みが行われている。ハイスループット実験では、試料位置により組成が異なるコンビナトリアル手法を用いることで合成の実質的な短時間化を実現している。しかしながらコンビナトリアル試料の場合は測定点が複数あるために測定時間が長くなる。この測定時間を短くする取り組みの一つが、情報関連技術を用いて効率的な測定を目指す計測インフォマティクスである。我々は評価手法の一つであるX線回折の効率的な測定を実現するための研究を行っている。特に結晶構造や結晶性等の情報も得られる2次元検出器を対象としている。

計測に機械学習などを用いる際の障壁の一つに、測定データのファイル形式があげられる。多くのメーカーでは生の測定データを独自のファイル形式で保存しており、そのために既存の機械学習ライブラリを活用することが難しくなっている。そこで我々は、今後の機械学習への応用を見据え、データ科学や機械学習向け言語であるJuliaで読み込めるプログラムを開発した。このプログラムにより一つの測定データから様々な情報を取り出したりグラフを作成したりできるようになり、Fig.1(a)がその概略図である。そして現在は得られた像の特徴抽出について検討している。例えばコンビナトリアル材料では、複数の測定点でFig.1(b)のようなリング状の像が得られる。(この像はデバイシェラーリングの一部であり、測定点が多結晶であることを示している。横軸は回折角 $2\theta$ 、縦回転軸は結晶の傾き角 $\chi$ である。) 効率的に試料を評価するためには、各測定点で得られた特徴を抽出し、数枚の画像で俯瞰できることが望ましい。この抽出手法の検討・開発を我々は現在取り組んでおり、我々が開発したプログラムとこれらの取り組みについて報告する。

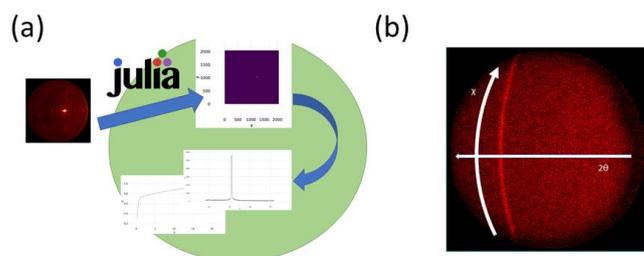


Figure 1 (a) 2D-XRD Data handling flow. (b) Example of 2D-XRD image.