

機械学習を用いたギガピクセルイメージング XAFS データの解析

Gigapixel Imaging XAFS data analysis by using machine learning

阪大工¹, 統数研² ○(B)伊藤 優成¹, 武市 泰男¹, 日野 英逸², 小野 寛太¹

Osaka Univ.¹, ISM², °Yusei Ito¹, Yasuo Takeichi, Hideitsu Hino, Kanta Ono

E-mail: yusei_ito@ap.eng.osaka-u.ac.jp

材料の構造と特性との相関を明らかにするためには、ナノスケールからマクロスケールに至るマルチスケールで現象を理解する必要がある。われわれは高分解能かつ超広視野を両立したギガピクセル・X線顕微鏡(G-XRM)の開発を行い、ナノメートルスケールの空間分解能でセンチメートル領域のX線吸収スペクトル(XAS)を測定することに成功した。

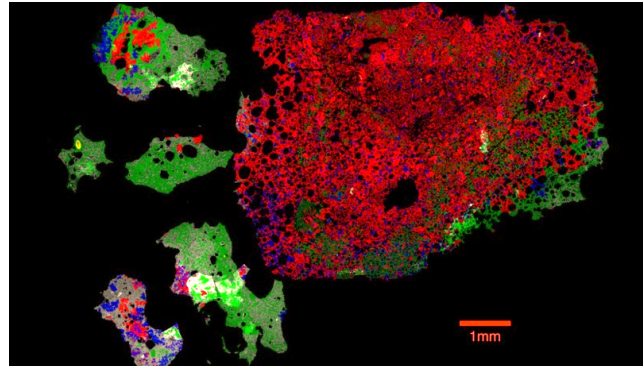


Figure 1. Chemical state clustering from 450M XAFS data with about 500 nm spatial resolution

この装置を用いることで、天然由来の材料のような不均一な物質の局所的な化学状態の情報を見落とすことなく測定することができる。G-XRMでは高分解能かつ超広視野でスペクトルデータを取得するため、そのスペクトル本数は1~10億本となる。このような大規模なスペクトルデータを手動で解析することは不可能であり、機械学習を用いたデータ解析手法が必要不可欠となる[1]。

本研究では不均一なサンプルとして焼結鈷を取り上げ、G-XRMを用いてFe-K吸収端で4.5億本のスペクトルを測定し、機械学習により測定スペクトルを分類することにより、含まれている相を自動で同定し可視化することを試みた。この問題設定では含まれる相の数が未知の教師なし分類問題となっており、ハイパーパラメータである相の数を人為的に与えることなしに分類することは困難である。この問題を解決するため、NIMSが公開している標準スペクトルデータベース[2]を活用して分類を行った。本手法を用いた解析により、従来の解析手法では見落としていた未知の相を見出すことができた。新たに発見した領域でのSEM-EDX測定を行った結果、他の領域とは異なる化学状態をもつ相であることが確認された。

この手法により、未知の化学状態を取り得る系に対して、事前知識なしで高分解能かつ超広視野での化学状態による分類が可能となり、電池材料で起こる不均一な反応の解析などへの展開が期待される。

本研究の一部はJST 未来社会創造事業(JPMJMI21G2)、JSPS 科研費(JP22H05109)、阪大CSRNの支援を受けて行われた。

参考文献

[1] Suzuki, Y., Hino, H., Kotsugi, M. & Ono, K. (2019). npj Computational Materials. 5, 39.

[2] National Institute for Materials Science, “Material Data Repository”, <https://mdr.nims.go.jp>.