

## (5) ポスター発表

P57

# SPring-8 兵庫県ビームラインにおける企業と連携したデータ駆動解析技術の実装

Data-driven approach in industrial applications of synchrotron analyses at Hyogo-prefectural beamlines in SPring-8

高山裕貴 takayama@sci.u-hyogo.ac.jp

ひょうご科学技術協会放射光研究センター、兵庫県立大学大学院物質理学研究科

### 1. 現在の取り組み状況

兵庫県ビームラインでは、SPring-8 の高輝度放射光を利用した精密計測技術により、産業界のものづくりを支援してきた。新たな産業支援として、データ駆動的なものづくりスキームの構築を目指し、計測、計算科学、情報科学を融合利用したマテリアルズ・インフォマティクス(MI)を推進している。この活動は、国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS)のプロジェクトである「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>): “Materials research by Information Integration” Initiative)」との連携の下、大阪大学産業科学研究所(NIMS サテライト拠点代表:小口多美夫教授)と連携・協力し MI 社会実装のサテライト拠点として実施している。この取り組みにおいて、兵庫県ビームラインは放射光計測環境を整備するとともに企業との連携による概念実証実験を行っている。また、平成 30 年度から兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス研究会を立ち上げ、活用事例の講演会や機械学習・バンド計算実習による人材育成、啓蒙活動も実施している。

放射光計測環境の整備として、計測ハードの強化、特に SPring-8 が創出するハイクオリティなデータを高効率で収集するシステムの導入を進めており、多検体試料を自動で交換・計測するシステム、その場観察・オペランド計測のためのシステム整備を行っている。計算資源においても、ビームライン周辺へのハード整備を行っており、計測からデータ駆動解析をスムーズに実行できる環境を整えつつある。

MI の社会実装として、企業ユーザーと連携し、3 件の概念実証実験を実施してきた。1 件目は、二次電池を対象とした、スパースモデリングによる充放電特性の鍵因子抽出実験である(連携企業:株式会社コベルコ科研)。充放電中の二次電池のオペランド計測で得た、膨大な X 線回折および XAFS(X 線吸収微細構造)スペクトルデータに対して、データ駆動的に因子抽出を行った。2 件目は、XAFS スペクトルから注目元素の配位状態/電子状態を直接導くことを目的とした実験である(連携企業:株式会社富士通研究所)。従来法では解析が困難な二次電池向け高次化合物について、実験計測データに加えて、シミュレーションデータも活用し、深層学習によるモデル構築を試みている。3 件目は、スペクトル画像からの鋼材腐食(サビ)メカニズムの解明と劣化状態評価を目的とした実験である(連携企業:株式会社神戸製鋼所)。二次元位置分解 XAFS 測定で取得した鋼材表面のスペクトル画像データにソフト直交制約非負値行列因子分解法[1]を適用することで、鋼材表面の局所構造・酸化状態分布を可視化した。

### 2. 今後の計画

放射光計測へのデータ駆動解析の実装に向けて、機械学習を用いたスペクトル画像からの特徴量可視化技術や、深層学習・圧縮センシングを活用した低照射線量での計測技術の開発・導入に取り組み始めている。また、MI の社会実装に向けて、企業ユーザーと連携した概念実証実験を引き続き実施していく。次のステップとして、放射光計測データだけでなく、ラボ装置から得られる物性データ、製造プロセスデータ等の材料のメタデータを加えたビッグデータについて、データ解析、データ蓄積ならびに材料・製品開発への応用やビジネス戦略への活用を計画している。

今後は、希望する企業ユーザーと連携し、企業側の具体的なものづくりの課題解決を行う体制を整えていく。データ利用の戦略相談から始めて、データ収集、データ加工処理、データ分析、予測モデルの構築と可視化、事業応用といったビジネスサイクルを試行しつつ、ユーザーニーズに合わせたソリューション・メニューを提供する産業界支援の拠点実現を目指す(図)。

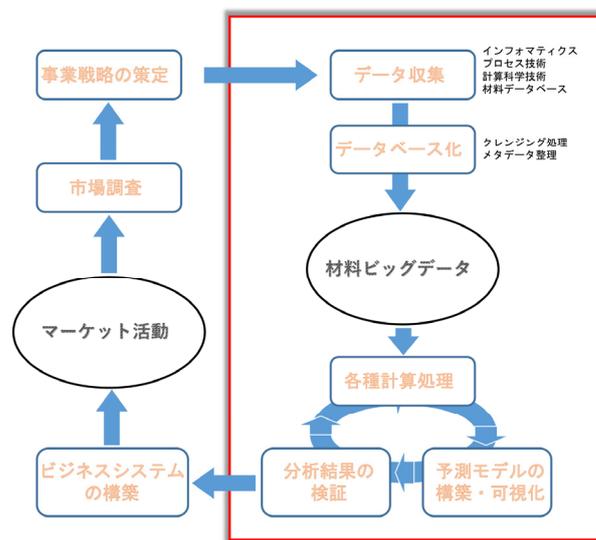


図 兵庫県ビームラインにおける産業支援スキーム

#### 【共著者(所属)】

伊藤聡(NIMS)、小口多美夫(大阪大学産研)、兵庫県庁、漆原良昌、桑本滋生、李雷、横山和司(以上、ひょうご科学技術協会放射光研究センター)

#### 【関連プロジェクト】

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

#### 【参考文献】

[1] M. Shiga et al., Ultramicroscopy, 170, 43-59, 2016.