

CREST「情報計測」(1) 「ベイズ統計スペクトル分解」

赤井 一郎 Ichiro Akai

熊本大学 産業ナノマテリアル研究所



ミクロ物性を解明する物性研究と、デバイス開発と最適化を行う材料研究の両輪によって、材料のデバイス応用研究が進められる。ミクロ物性研究では、電子・スピン状態や原子スケールの近距離構造を捉えるために放射光を用いたスペクトル計測がなされ、そのスペクトル分解はミクロ物性解明の重要な方法である。一方、放射光計測法の発展に伴いデバイスのメゾ構造を捉える顕微計測やオペランド計測が実現され、スペクトル軸に加えて空間や時間軸を含む高次元ビッグデータの計測も可能となっている。

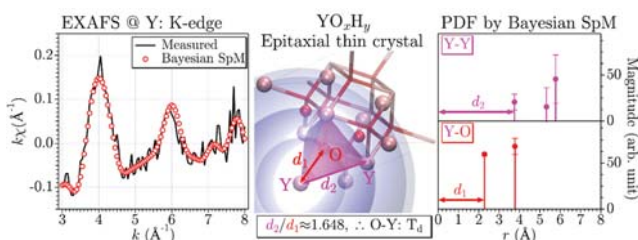
ベイズ統計スペクトル分解法(ベイズ分光法)は、ベイズ推定の枠組みを組み込んだスペクトル解析法で、因果律の原因と結果の同時確率を考え、ベイズの定理に基づいて結果である計測データを起点として因果律を遡り、原因であるミクロ物性の統計情報を得る新しいスペクトル解析法で、材料研究においてさまざまな課題を解決し、新たな発見を導くことができる。

スペクトル分解で用いられるモデル関数には、物性を特徴づけるパラメータが非線形に含まれるため、パラメータ空間内で誤差関数は多数の局所極小解を持つ。そのため最小二乗法で得られる解は、パラメータ空間探索の初期値に依存してしまう本質的な問題がある。ベイズ分光法ではレプリカ交換モンテカルロ法を用いて大域的最適解の高速探索を実現して、全ての推定パラメータの統計分布(事後確率分布)を評価し、事後確率最大化に基づいてモデル関数の選択も可能である。

講演では、ベイズ分光法の概要と、材料のミクロ構造解析のために計測される広域X線吸収微細構造(EXAFS)の解析にスパースモデリングとベイズ推定を融合させた新解析法や、高次元ビッグデータである顕微X線吸収スペクトルイメージ(2D-XAS)

から、デバイス機能を担うミクロな電子状態の空間分布を評価する方法について紹介する。EXAFSの新解析法では、配位原子の元素種を識別した上で、正しい原子間距離で、最近接以遠の長距離構造を高いノイズ耐性で解析することが可能となり、X線吸収量が少ない薄膜材料においてもミクロ構造の解析が可能となる。2D-XASの解析では、微弱なスペクトル変化も分解可能な片側直交非負値行列因子分解法とベイズ分光法を融合し、リチウムイオン電池モデル電極においてイオン伝導に寄与するミクロな電子状態の空間分布の評価が可能となった。

本講演の成果は、JST、CREST、JPMJCR1861の支援を受けた研究に基づく。



連名者・連携機関

岡島敏浩・あいち SR、水牧仁一朗・JASRI、青西亨・東工大、山崎裕一・物材機構 NIMS

参考文献

[1] AIP Adv. 11, 125013 (2021). [2] J. Phys. Commun. 5, 115005 (2021). [3] STAM: Method 1, 75 (2021).

関連 WEB

<https://www.kumamoto-u.ac.jp/whatsnew/sizen/20211210>
<https://www.kumamoto-u.ac.jp/whatsnew/sizen/20210709>