

セミナー: SPring-8 全ビームラインベイズ化計画の現状と将来展望

セミナー趣旨

SPring-8 全 BL ベイズ化計画の現状をもとに将来展望について参加者の皆さまと議論する。今後 SPring-8 の BL へ展開が見込まれるベイズ的階層モデリングについて、片上先生が中性子非弾性散乱、横山が時分割 X 線回折への適用事例を講演する。また、ベイズ推定と相補的な手法として将来的に SPring-8 へ導入予定のスパースモデリング、深層学習、非負値行列因子分解について、五十嵐先生、庄野先生、青西先生、俣田先生が講演する。これらの手法の適用が見込める計測法と解析の現状について鈴木先生と永村先生が講演する。

場所: 東大柏キャンパス基盤棟 2 階共通セミナー室 (2C5, 2C7)

10 月 2 日(火)

10:30-12:00 横山

SPring-8 全 BL ベイズ化計画とベイズ的階層モデリングの展開
(昼休み)

13:00-13:30 片上先生

中性子非弾性散乱計測データに対するベイズ計測

13:30-14:00 青西先生

非負値行列因子分解による顕微 XAFS データ解析

14:00-14:30 五十嵐先生

スパースコーディングに基づくマルチフレーム超解像手法による
効率的な走査型光電子顕微画像解析

14:30-15:00 (休憩)

15:00-15:30 庄野先生

画像処理におけるノイズ除去と深層学習の展開

15:30-16:00 俣田先生

機械学習を用いた磁性薄膜上の磁区パターン解析に関する研究

16:00-16:15 (休憩)

16:15-16:45 鈴木先生

時間分解データに対する新しい計測法・解析法への期待

16:45-17:15 永村先生

Multi-scale, multi-dimension, multi-modal 顕微分光のデータ解析

講演タイトルとアブスト

10:30-12:00 横山

「SPring-8 全 BL ベイズ化計画とベイズ的階層モデリングの展開」

最初に本セミナーの主旨を説明する。その後、JASRI データ駆動科学グループが東大・岡田教授と共同で進めている SPring-8 全 BL ベイズ化計画について、放射光関連領域に与えるインパクトと成果を示す。具体的な研究成果として、ベイズ計測による磁気コンプトン散乱計測の効率化と X 線光電子分光と X 線吸収分光のベイズ統合を紹介する。さらに、今後ますますの需要が見込まれているベイズ的階層モデリングについて、時分割 X 線回折とガス雰囲気 HAXPES への適用事例を用いてその有効性について議論する。

13:00-13:30 片上先生

「中性子非弾性散乱計測データに対するベイズ計測」

本講演では、講演者が博士課程で行った、近年急速に発展している”複雑な計測対象の生成モデル”の典型例の一つである階層モデリングの最初の研究を述べる。中性子非弾性散乱実験で計測される分散関係スペクトルデータを用いて、計測試料のパラメータをベイズ計測に基づき分布推定する。従来より、中性子散乱や X 線散乱などを用いた計測によりエネルギー輸送に関連する性質や物理パラメータを解析する研究が数多く行われてきた。一般的には、計測データから分散関係を推定し、その後物理パラメータを推定するという多段階の解析手法が採用されていたが、本研究ではこの多段階解析をベイズ階層モデリングに基づいてベイズ的に解析可能とした。さらに、従来の多段階解析を行わずに計測データから直接物理パラメータを推定することで、推定精度の向上も実現した。また、計測およびモデルのノイズメカニズムが推定に与える影響についても議論する。

13:30-14:00 青西先生

「非負値行列因子分解による顕微 XAFS データ解析」

本公演では以下の2つの研究を紹介する。

リチウムイオン二次電池は、近年モバイルデバイスや電気自動車など多岐に渡って使用され、その性能向上が求められている。リチウムイオン二次電池は充放電の過程において、空間的に不均一な反応が見られる。この反応不均一性が電池の性能を制約する原因となっており、不均一性の機序の解明が試みられている。そこで、本発表では、リチウムイオン二次電池の Co-K 端の 2D-XAS データに対して、非負値行列因子分解(Non-Negative Matrix Factorization; NMF) を適用し、反応不均一性を視覚化した。先行研究では、二次電池 μ -XAFS データの吸収スペクトルのピークトップエネルギーから活物質の価数の空間分布を視覚化していた。同データは、電池の各位置の吸収スペクトルの差異がとても小さいため、NMF をそのまま適用するのは難しい。そこで、 μ -XAFS データと標準試料の吸収スペクトルとの差分を求め、吸収スペクトルの差異を強調した。そして、片側の因子行列の非負性の制約をなくした改良型 NMF を適用した。Bi-cross-validation に

より要素数の決定を行い、異なる吸収スペクトルをもつ複数領域に分解し、反応不均一性の空間構造を視覚化した。価数分布と対応する要素も検出できていることを確認した。また、分解した吸収スペクトルに対してベイズ分光を適用し、物理特徴量を抽出し、特徴量の空間マップを得るを試みている。

複数の化合物の混合物に対して顕微 XAFS 計測を実施し、得られたハイパースペクトルデータから、混合物内の化合物同定とその空間分布の推定が行われている。これまでの一般的な推定手法では、計測データの各画素のスペクトルに対して、候補となる化合物の標準スペクトルからなる線形荷重和モデルを回帰し、その推定荷重から各画素の化合物ごとの割合を求め、全画素でこれを行うことで化合物の空間分布を推定している。この手法の問題点は、画素ごとの推定によりノイズに弱く、推定結果の信頼度が不明瞭であり、混合物内の化合物のスペクトルが変動する場合や候補となる化合物が不明瞭な場合に対処できないことである。これらの問題を解決するため、階層ベイズ型非負値行列因子分解により、混合物内の化合物分布推定を試みる。低ランク行列分解によりノイズに頑強であり、事後確率の計算により推定結果の信頼度を示せ、事前確率に候補化合物の標準スペクトルを導入することでスペクトルの変動に対処でき、モデル選択による混合物内の化合物の同定も可能となる。我々は、巨大なハイパースペクトルデータの高速処理を実現するため、変分ベイズ法による近似的なフルベイズ推定アルゴリズムを構築した。CuO と Cu₂O などの標準スペクトルを用いて、顕微 XAFS の実データを模した人工データを作成し、従来手法と提案手法で各化合物の空間分布を推定し、空間分布の真値と推定値の比較により、各手法の推定精度を評価した。ノイズ強度が高く、スペクトルが確率的に変動している場合、提案手法は従来手法よりも高い精度で、各化合物の空間分布を推定することに成功した。また、人工データにおいて、提案手法の変分自由エネルギーに基づくモデル選択により、化合物の同定に成功している。実データにおいても、従来手法と同様に、提案手法は化合物ごとの分布の推定ができている。

14:00-14:30 五十嵐先生

「スパースコーディングに基づくマルチフレーム超解像手法による効率的な走査型光電子顕微画像解析」

ナノ構造抽出において、シンクロトロン放射や電子顕微鏡技術は、長時間露光による放射線損傷やチャージングアーティファクトが問題となる。本研究では、スパースコーディングを用いた多フレーム超解像手法を提案し、走査型光電子顕微画像顕微鏡(3D-Nano ESCA)による画像の解像度を向上させる。この手法は、少量の低解像度画像から高解像度画像を再構築し、露光時間を短縮することで放射線の影響やサンプルの劣化を抑制する。提案手法は、走査型光電子顕微画像顕微鏡(3D-Nano ESCA)による画像解析にとどまらず、電子顕微鏡など他の高解像度イメージング技術にも応用可能である。

15:00-15:30 庄野先生

「画像処理におけるノイズ除去と深層学習の展開」

計測科学分野において、画像処理技術は微細構造の観察や、対象物の定量的評価、異常検知など、さまざまな応用において不可欠なツールである。しかし、画像取得時に生じるノイズは、撮影条

件(低照度や高倍率観察など)や計測装置の特性(電子ノイズ, 放射線量の影響など)に起因し, 観察結果や解析精度に大きな影響を及ぼす. 従来のノイズ除去手法としては空間フィルタリング手法や周波数領域でのノイズ抑制手法が一般的であったが, これらの手法はエッジ情報の損失や構造の劣化を引き起こしやすく, 微細な構造解析においては限界が存在する.

本講演では, こうした課題を克服するために導入された深層学習を用いたノイズ除去技術の発展について紹介する. 例えば, Denoising Convolutional Neural Network (DnCNN)や、教師なし学習による Noise2Noise などの各種モデルとその原理について解説する. これらの手法は、従来のフィルタリング手法では困難であった微細構造の保護とノイズ抑制を同時に実現し, X 線 CT 画像など、高精度な観察が求められる応用分野で有効性を発揮する.

15:30-16:00 俣田先生

「機械学習を用いた磁性薄膜上の磁区パターン解析に関する研究」

様々な工業的応用のある磁性薄膜の特性を磁区パターン画像から推定するため、磁区パターンの発生過程をシミュレーションして得た磁区パターンとシミュレーションパラメータのデータセットを作成し、機械学習を用いて磁区パターンからパラメータを回帰分析した。畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network, CNN) 及びカーネルリッジ回帰 (Kernel Ridge Regression, KRR)を用いた。精度の面では CNN が KRR を上回った一方、KRR には学習に用いた特徴量を物理的に解釈できるという利点があった

16:15-16:45 鈴木先生

「時間分解データに対する新しい計測法・解析法への期待」

近年の超高速技術の発展に伴って、物質の過渡的な伝導率、バンド構造、結晶構造などの物理量がフェムト秒の時間分解能で計測できるようになってきた。時間変化を捉えるために、データ量は膨大となるため、より高効率な計測法が求められている。また、非平衡状態であるためにモデルが厳密には確立していないのが現状である。講演では、講演者が行ってきた様々な時間分解計測について紹介し、具体例を交えてデータ科学に期待することについて議論する。

16:45-17:15 永村先生

「Multi-scale, multi-dimension, multi-modal 顕微分光のデータ解析」

※アブストは次のページです。

Multi-scale, multi-dimension, multi-modal 顕微分光のデータ解析

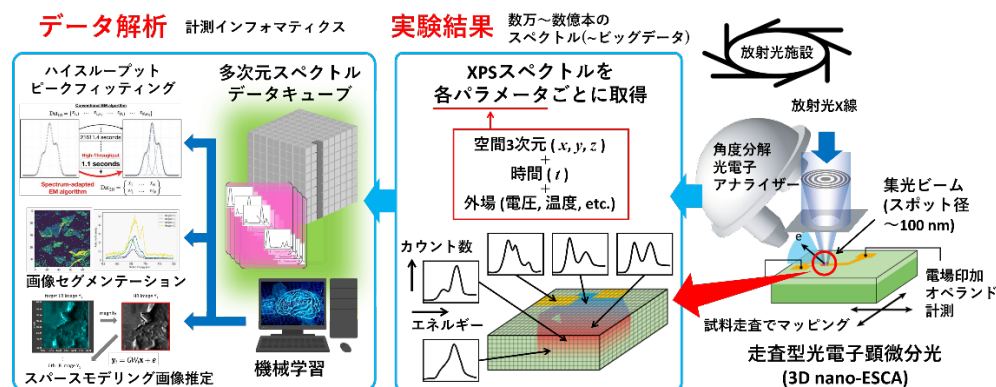
NIMS, 東京理科大 永村 直佳

E-mail: NAGAMURA.Naoka@nims.go.jp

グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドといった層状化合物やナノワイヤー、ナノドットといった低次元ナノ材料を半導体デバイス微細構造に応用するにあたり、デバイス特性を大きく左右する表面・界面の局所的な化学状態や電子状態を評価するには、高空間分解能の顕微分光が有用である。我々は放射光オペランド顕微X線光電子分光(XPS)や多探針オペランド顕微ラマン分光システム(MORINGA)など、独自開発した顕微分光装置を活用して、ナノ材料デバイス構造の構造や局所電荷移動の評価を実施している[1-3]。これから顕微分光分析は、高空間分解能かつ大面積のマルチスケール分析や、時空間分割で外場を掃引するオペランド計測での多次元分析、種々の顕微分光計測を比較するマルチモーダルな物性評価の傾向が加速し、さらに膨大なスペクトルマッピングデータを扱う必要がある。

スペクトルの正確なピーク分離にはレプリカ交換モンテカルロ法を用いたベイズ推定[4]などが活用できるが、データ量の多い顕微分光計測データをリアルタイム解析するためには、計算コストを低減する必要がある。そこで我々は、スペクトルを混合確率分布とみなし、EM アルゴリズムでパラメータを最尤推定する機械学習スペクトルピーク分離パッケージ EMPeaks の開発を進めている[5-6]。また、計測時の熱ドリフトやチャージング低減のために、複数枚の低解像度顕微分光画像から高解像度の低解像度顕微分光画像を復元する試みにも取り組んでいる[7]。

講演では、上記の顕微分光計測技術やデータ解析技術の紹介(図 1)に加え、今後取り組んでいきたい研究計画や現状の課題についても紹介する予定である。



【参考文献】

- [1] N. Nagamura *et al.*, Carbon 152, 680 (2019). [2] M. Okada *et al.* APL Materials **9**, 121115 (2021). [3] K. Nakamura *et al.* ACS Appl. Mat. Int. **12**, 51598 (2020). [4] K. Nagata, *et al.*, Neural Networks, **28**, 82 (2012). [5] T. Matsumura, *et al.*, Sci. Tech. Adv. Mat.(STAM), **20**, 733 (2019)., STAM Methods, **4**, 2373046 (2024). 他 [6] EMPeaks (PyPI) : <https://pypi.org/project/EMPeaks/>, <https://researchmap.jp/naganao/%E8%B3%87%E6%96%99%E5%85%AC%E9%96%8B> [7] 当日の五十嵐氏の講演参照