

データ駆動型高特性ネオジム磁石の創製

目的@データ連携部会

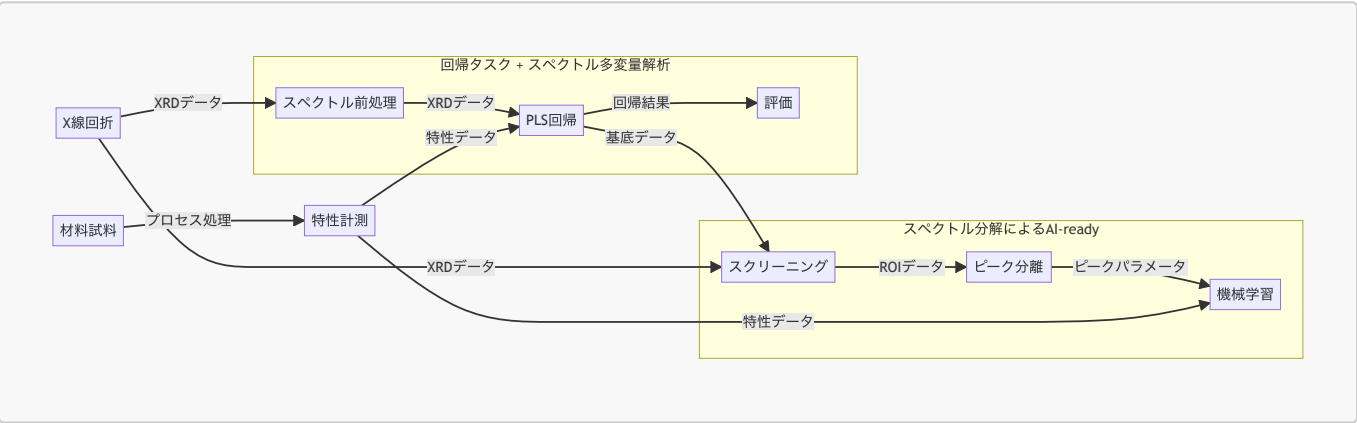
計測データから特性を記述する特徴量の抽出および特徴量化の方法論の確立

- 最大磁積エネルギー $(BH)_{\max}$ とX線回折(XRD)データとの関係に着目して特徴量化を行う。

X線回折データにおける方法論確立のワークフロー

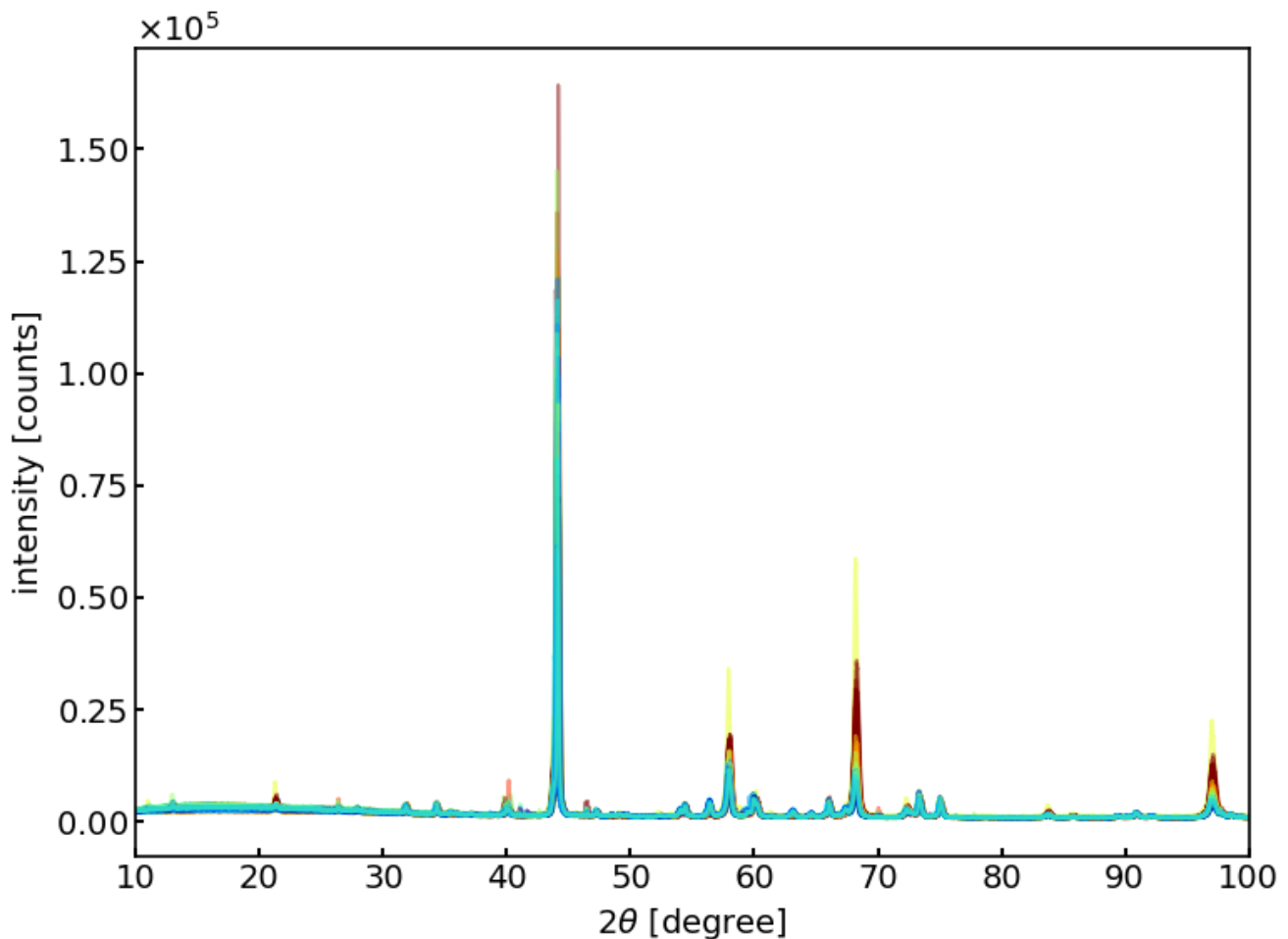
XRDデータにおけるAI-readyワークフローの1事例

XRDデータを全領域においてピーク分離することは困難である。「回帰タスク+スペクトル多変量解析」で材料特性と相関のあるROIの見当をつけ、ROIにおいてスペクトル分解を実施する。得られたピークパラメータを用いて機械学習を行う。

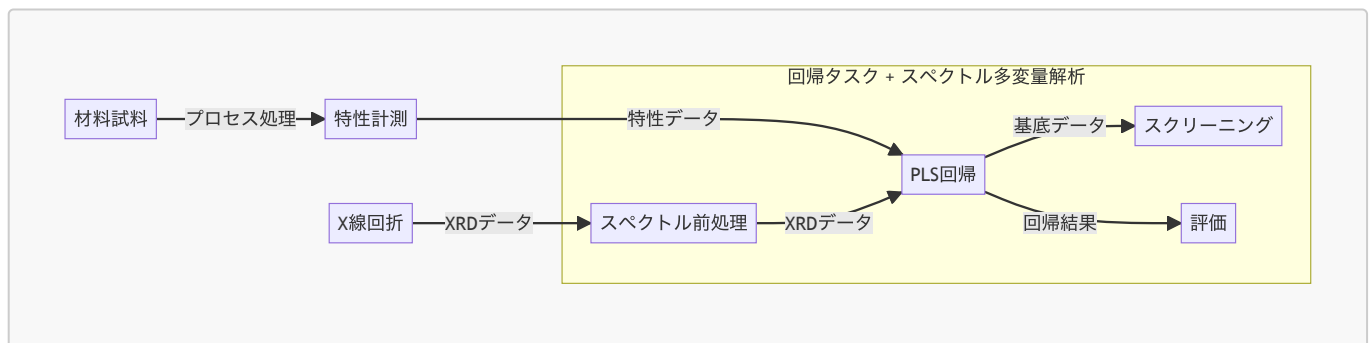


- ※ ノード＝処理, エッジ＝データ
- ※ PLS回帰: 部分的最小二乗回帰
- ※ ROI: 関心領域(Region of Interest)

計測XRDデータ



回帰タスク＋スペクトル多変量解析 | XRDデータにおけるPLS回帰

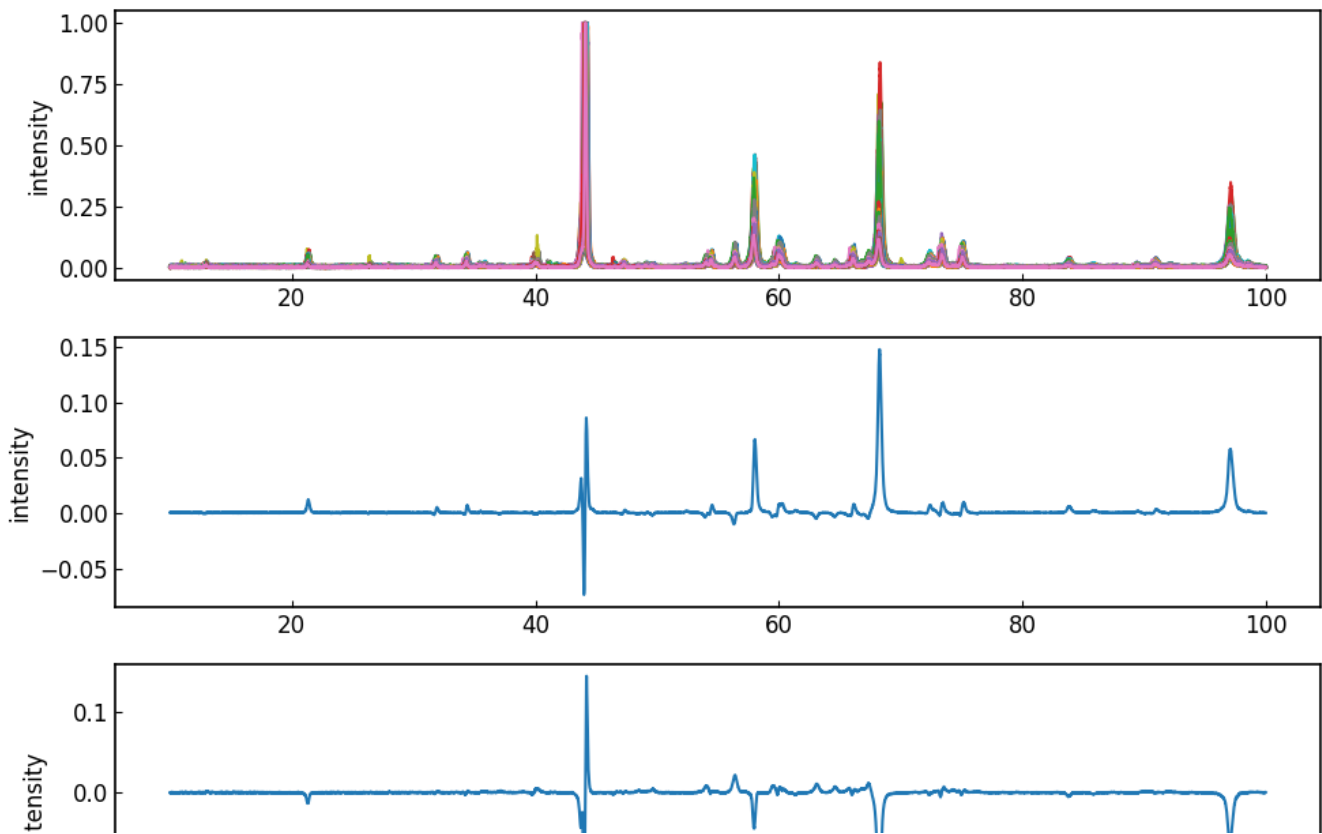
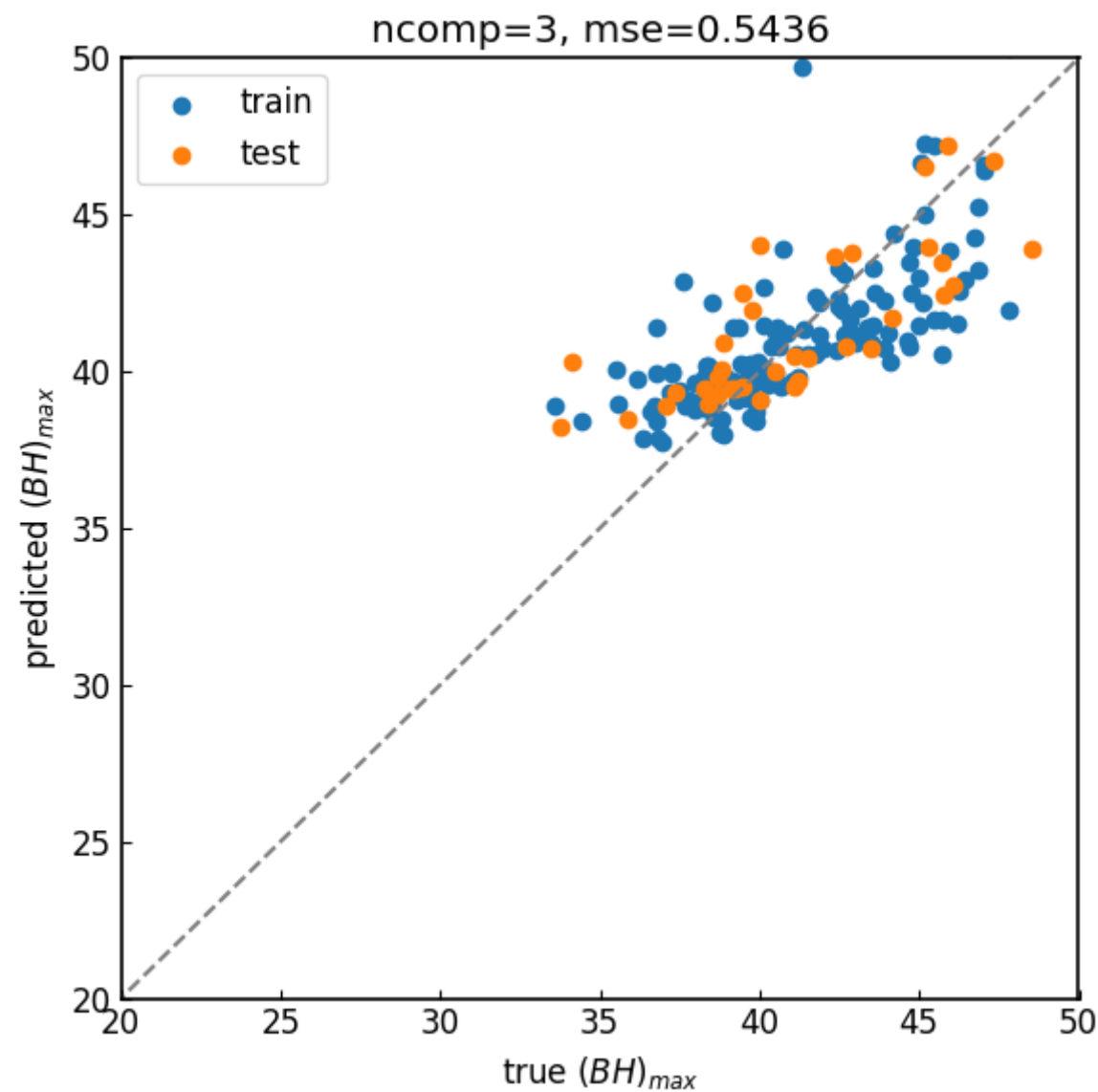


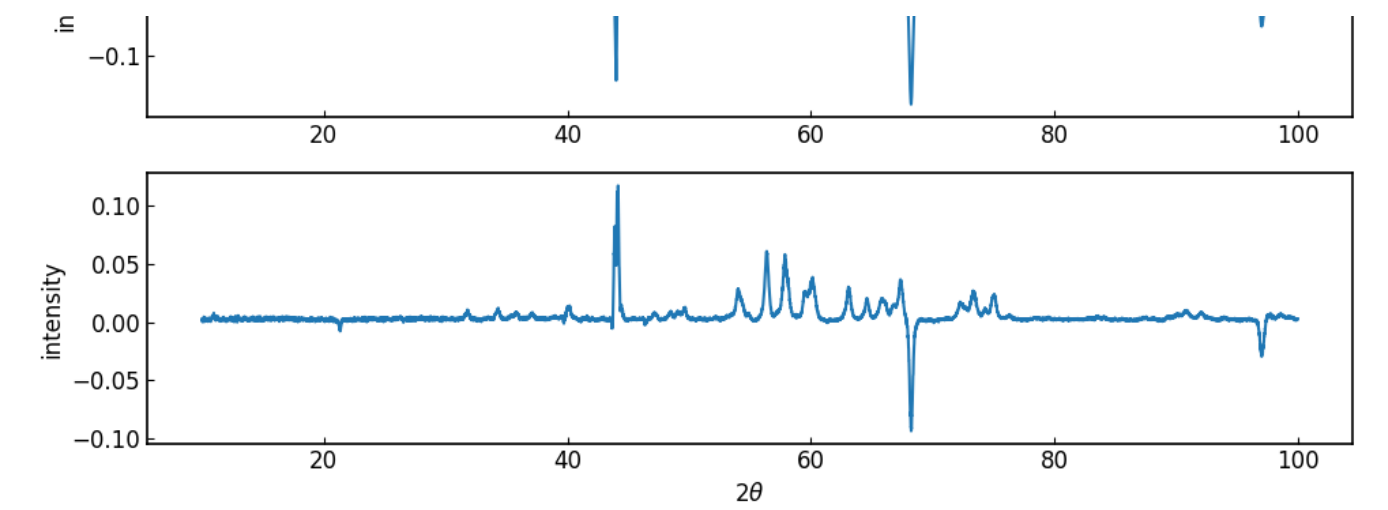
スペクトル前処理

XRDデータにおける多変量解析（ex. PLS回帰）の実施において、重要となるのは、スペクトル前処理である。たとえば、データ分析で最も一般的な平均0・分散1(`sklearn.preprocessing.StandardScaler`)を実施すると、強度が低い領域のノイズが拡大されてしまい、最もらしい分析をすることができない。ここでは、前処理として以下を行った事例の結果を示す。

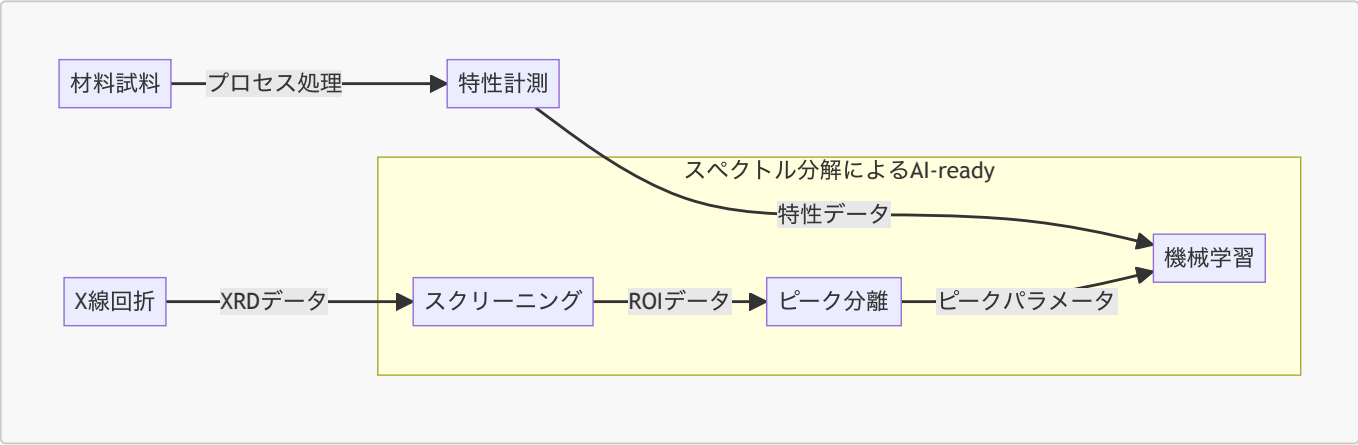
実施したスペクトル前処理

- BGの除去
- 最大高さで規格化
- 平均引き





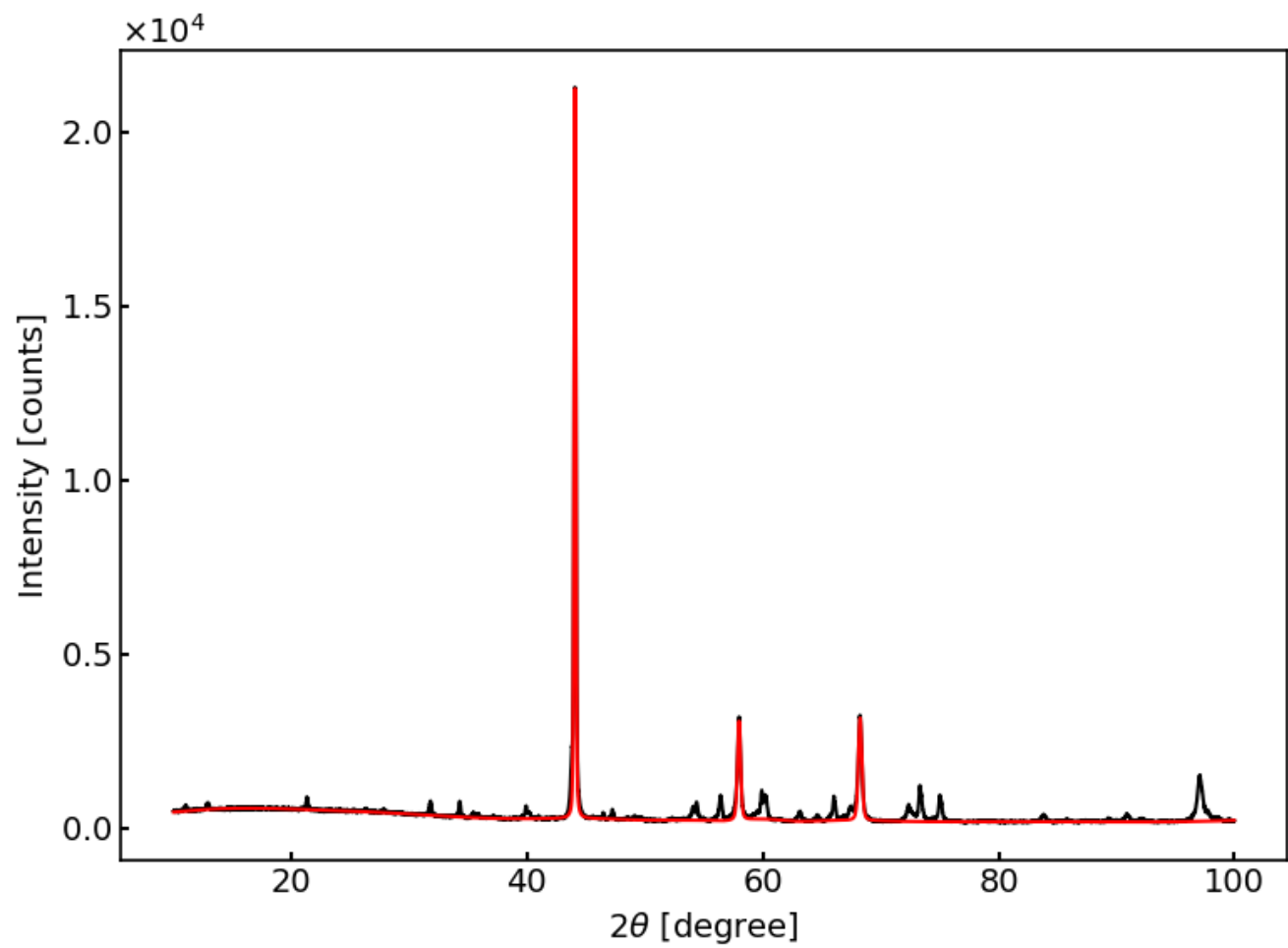
ROIデータにおけるスペクトル分解の事例

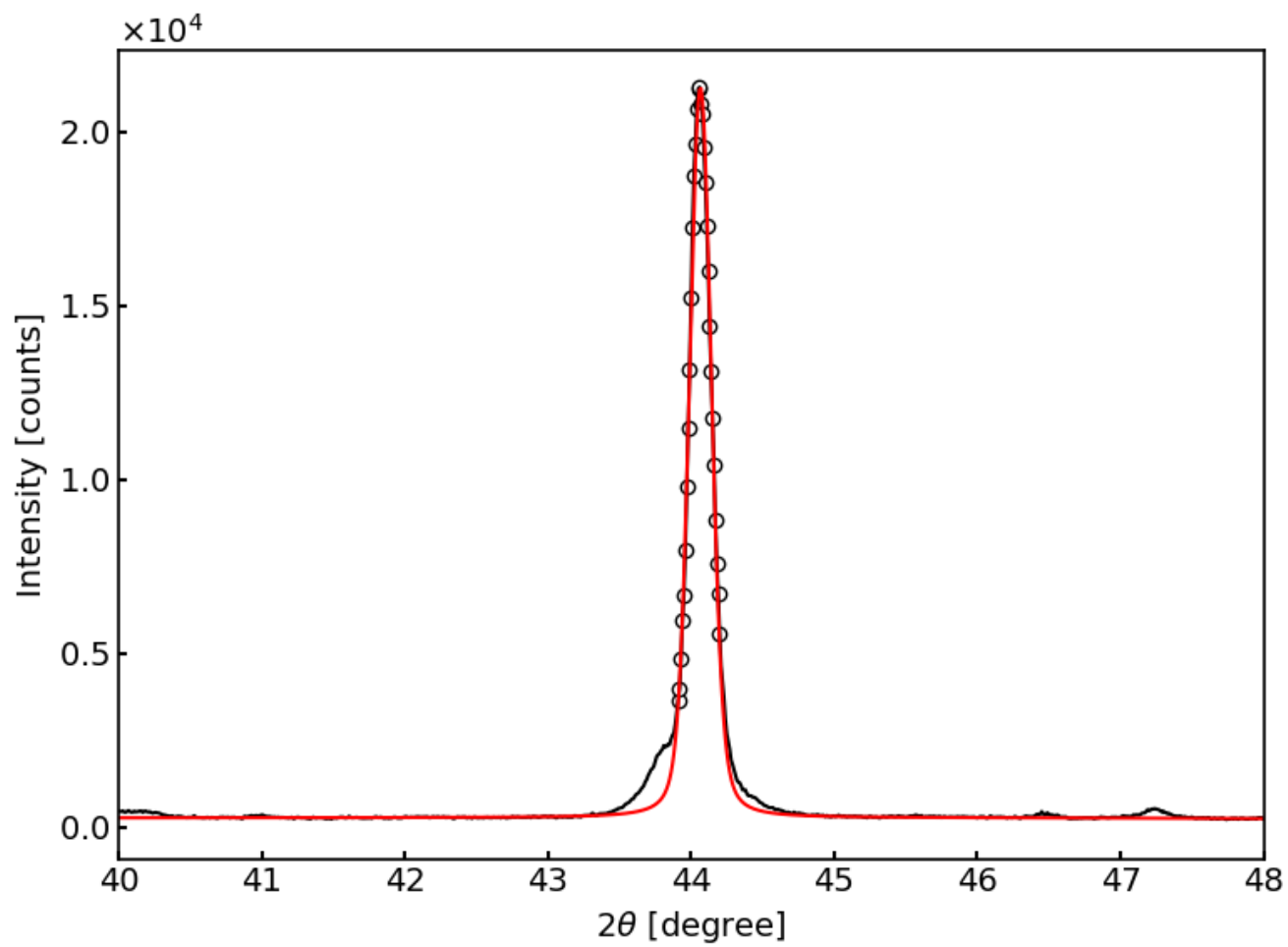


「回帰タスク+スペクトル多変量解析」において抽出された基底データから強度が強いピークの情報で $(BH)_{\max}$ をある程度、回帰できることが確認された。そこで、強度が強いピークに着目してROIを定義していく。

ピーク分離の結果

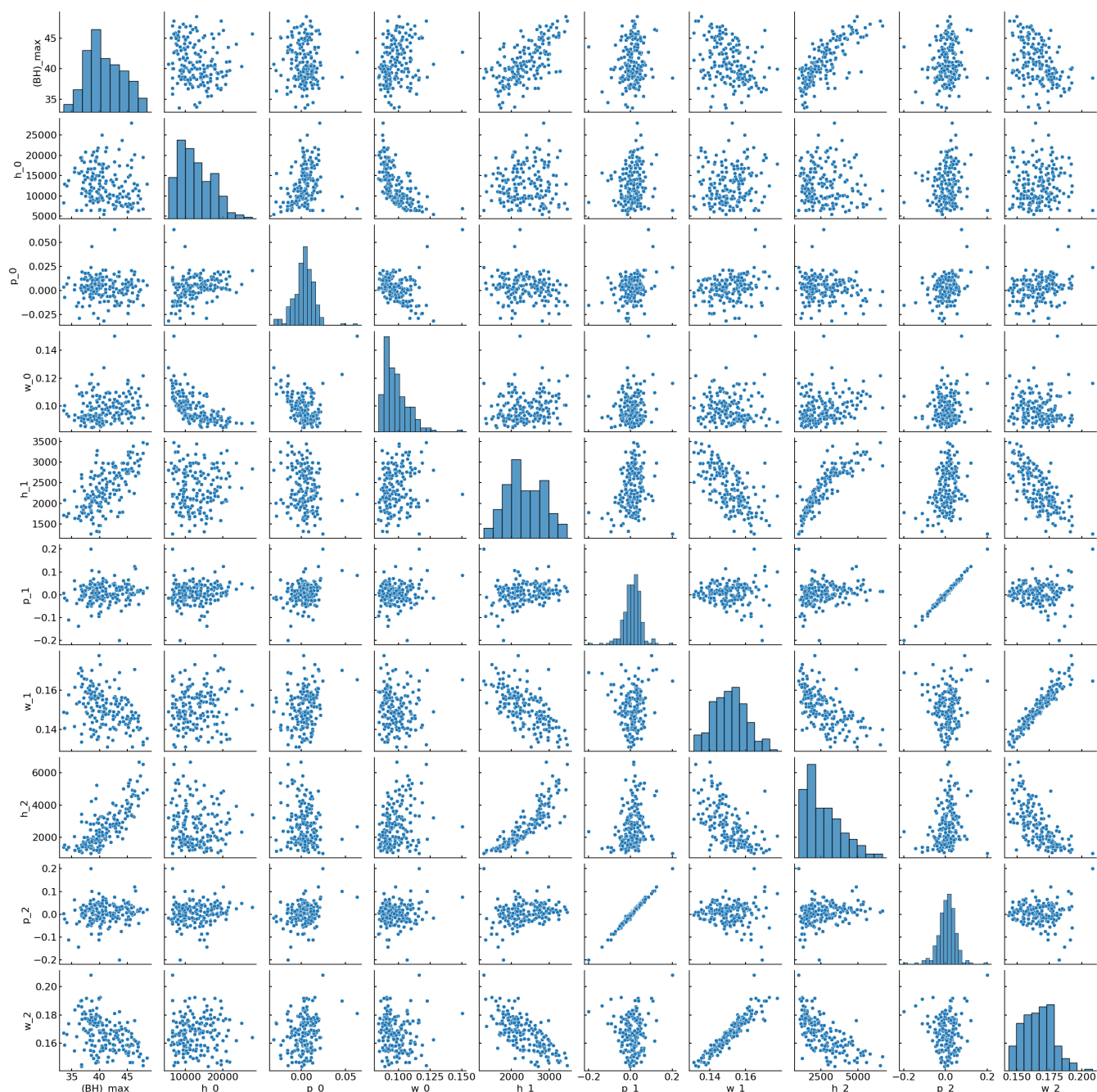
今回の事例では、ピークサーチされた点のまわりのN点をROIとして定義した。ROIにおいてピーク分離した結果を示す。





ピークパラメータの相関プロット

ピークパラメータ間および目的変数との散布図プロット



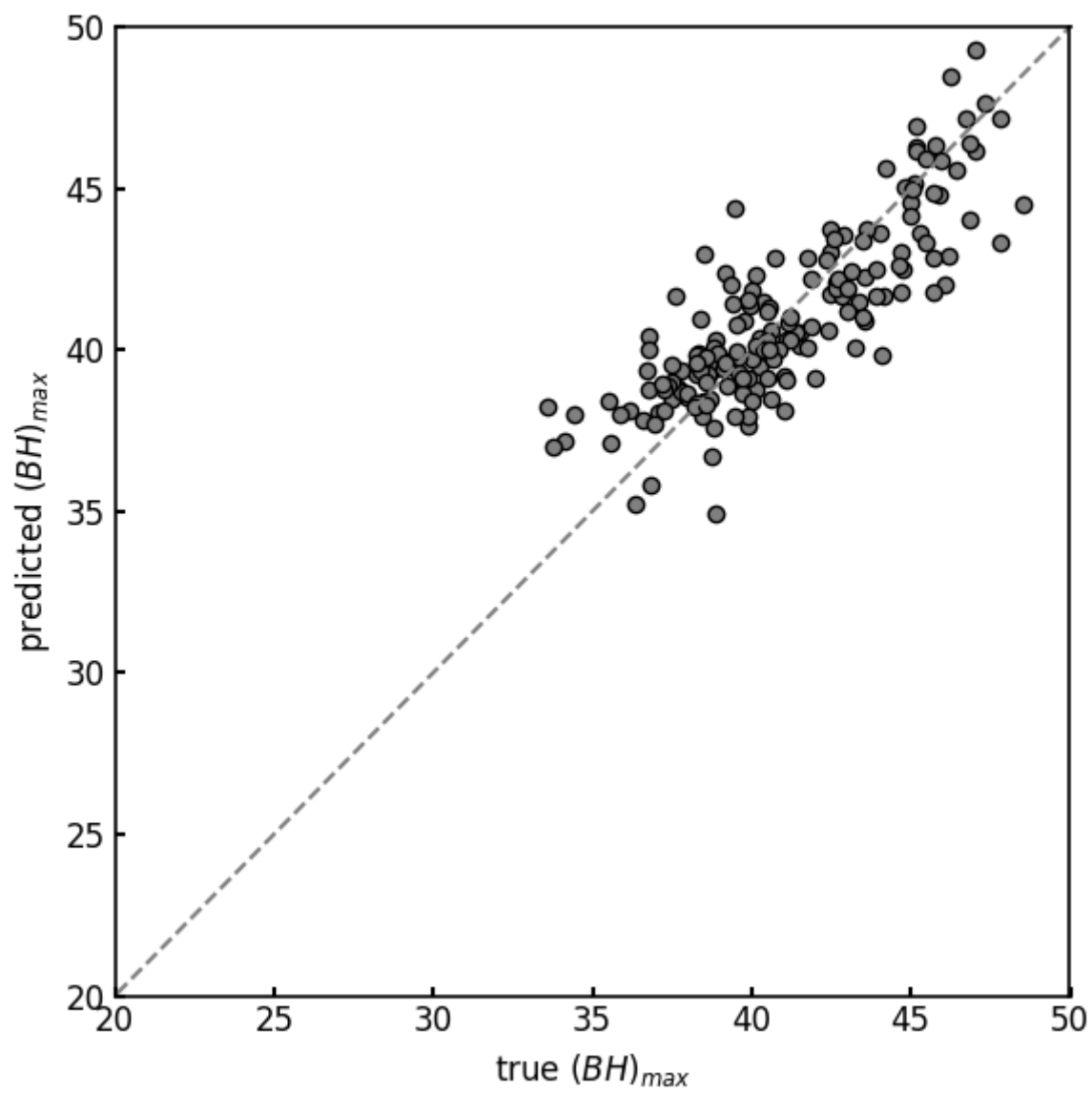
Bayesian Model Averaging (BMA)による特徴量選択

ピークパラメータを用いた回帰結果

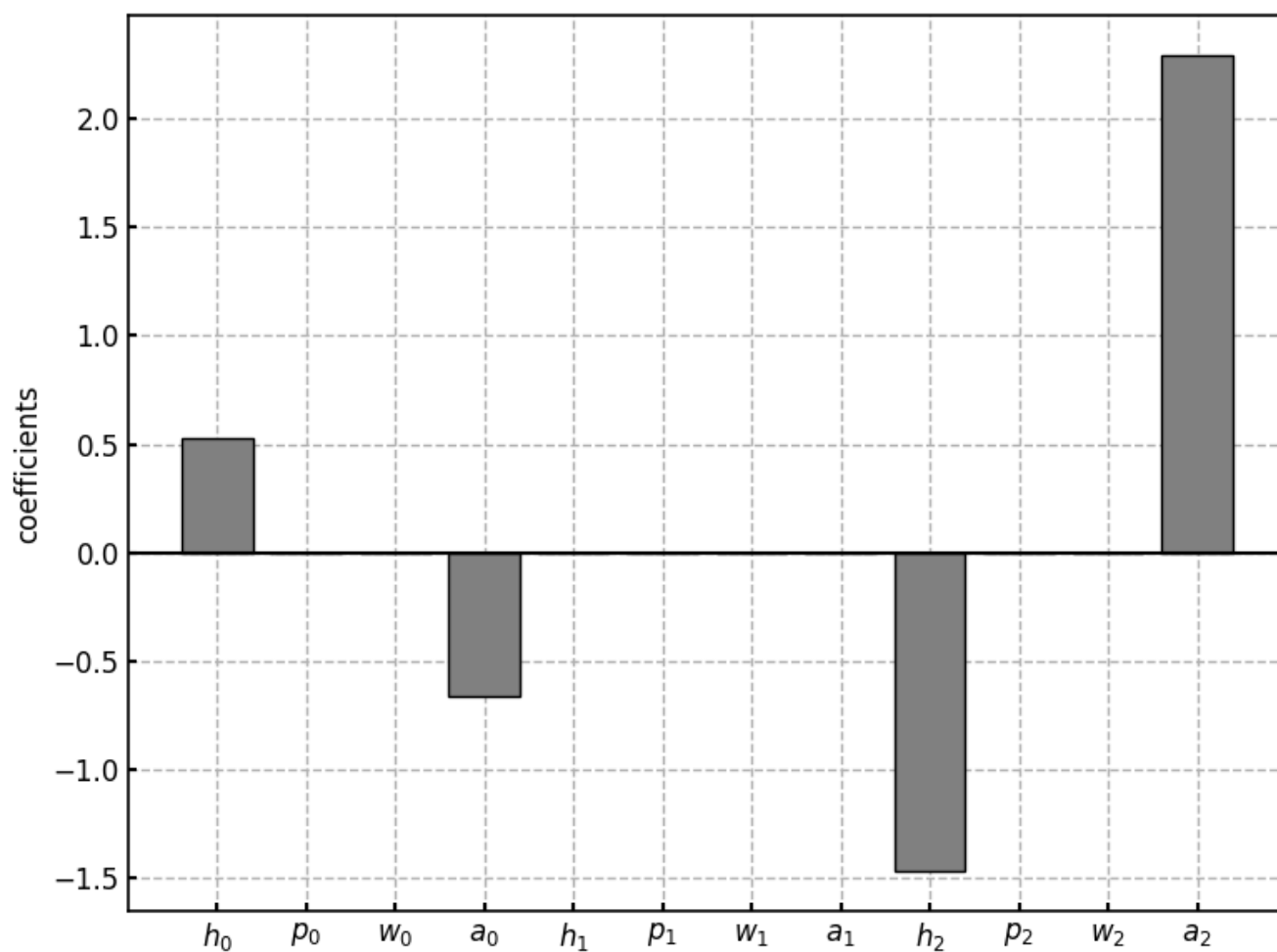
特徴量（ピークパラメータ）：

- h: hight
- p: position
- w: width
- a: area

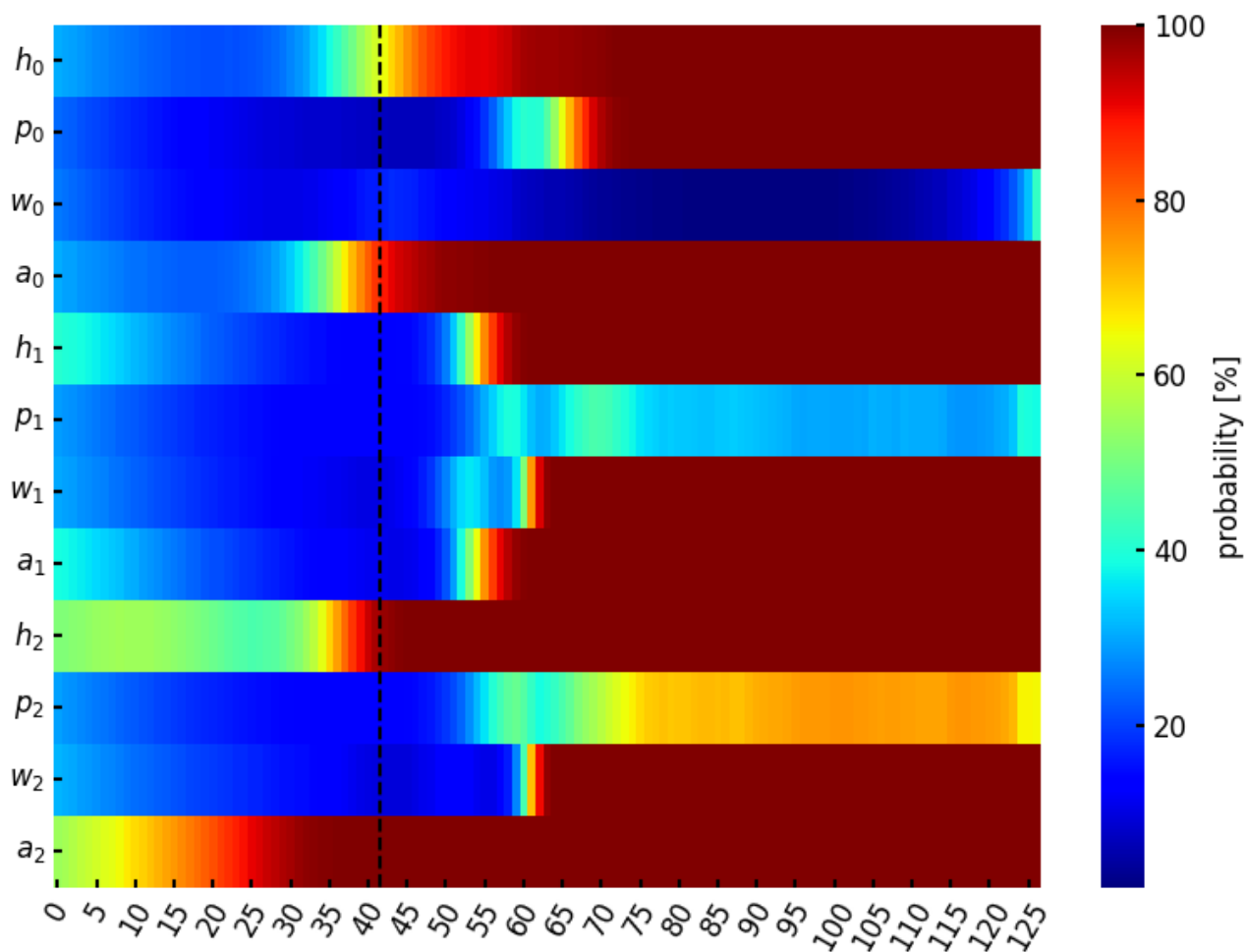
サフィックスはピークIDに対応する。



回帰における重み係数



ノイズレベルに対する特徴量選択



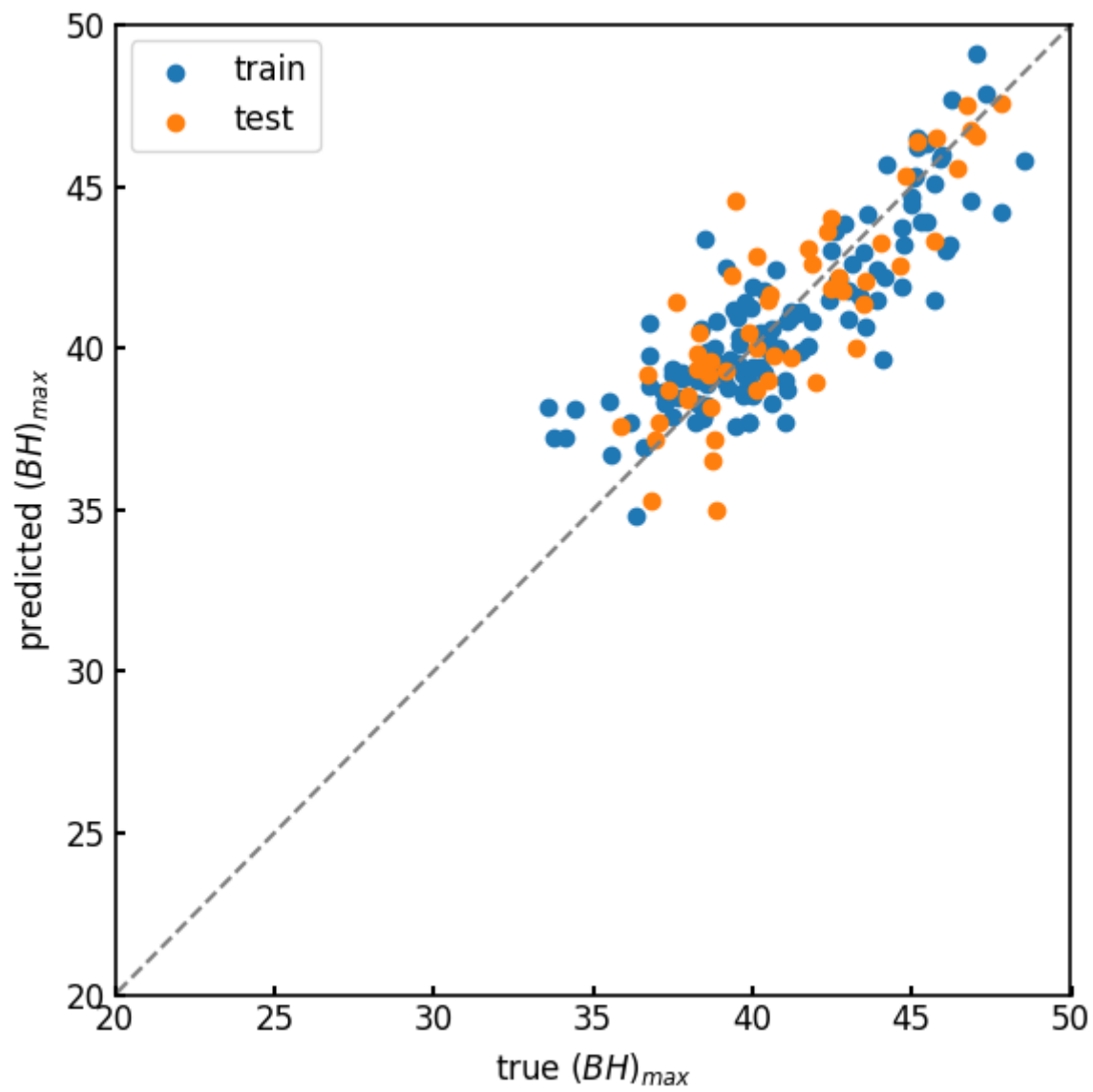
LASSOによる特徴量選択(参考)

ピークパラメータを用いた回帰結果

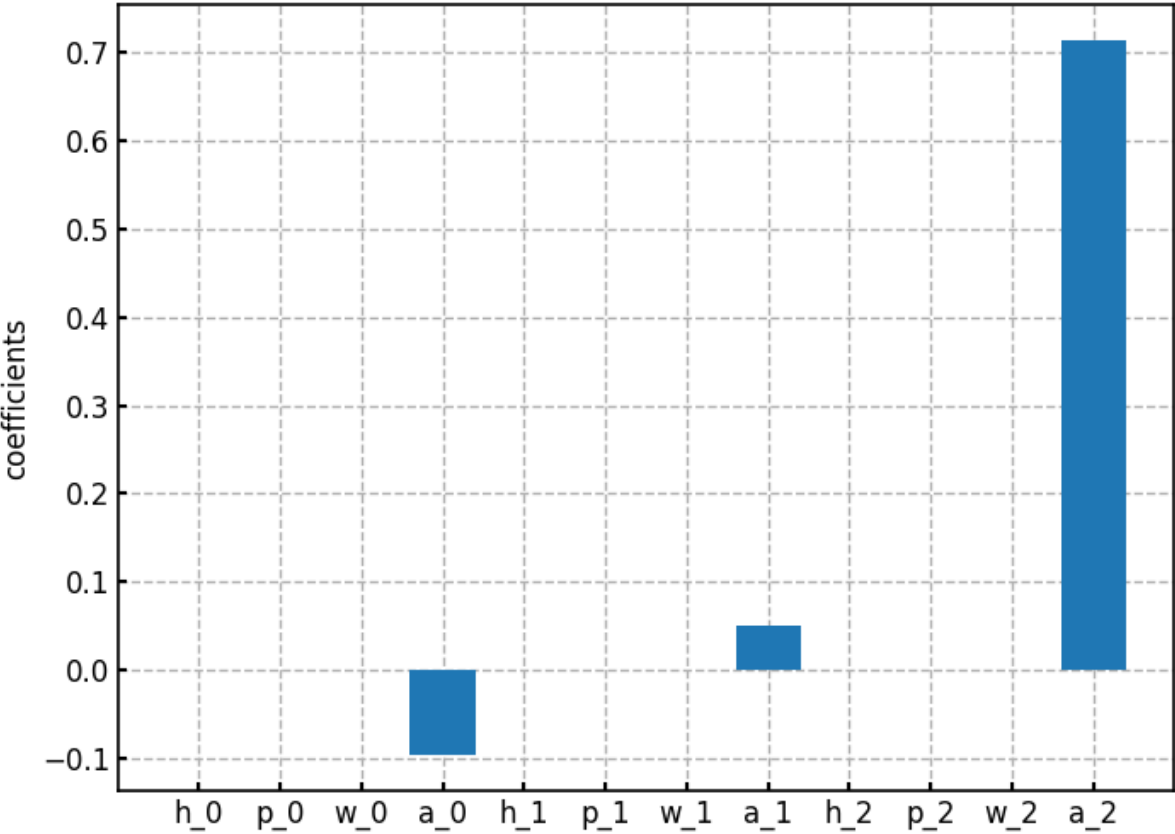
特徴量（ピークパラメータ）：

- h: hight
- p: position
- w: width
- a: area

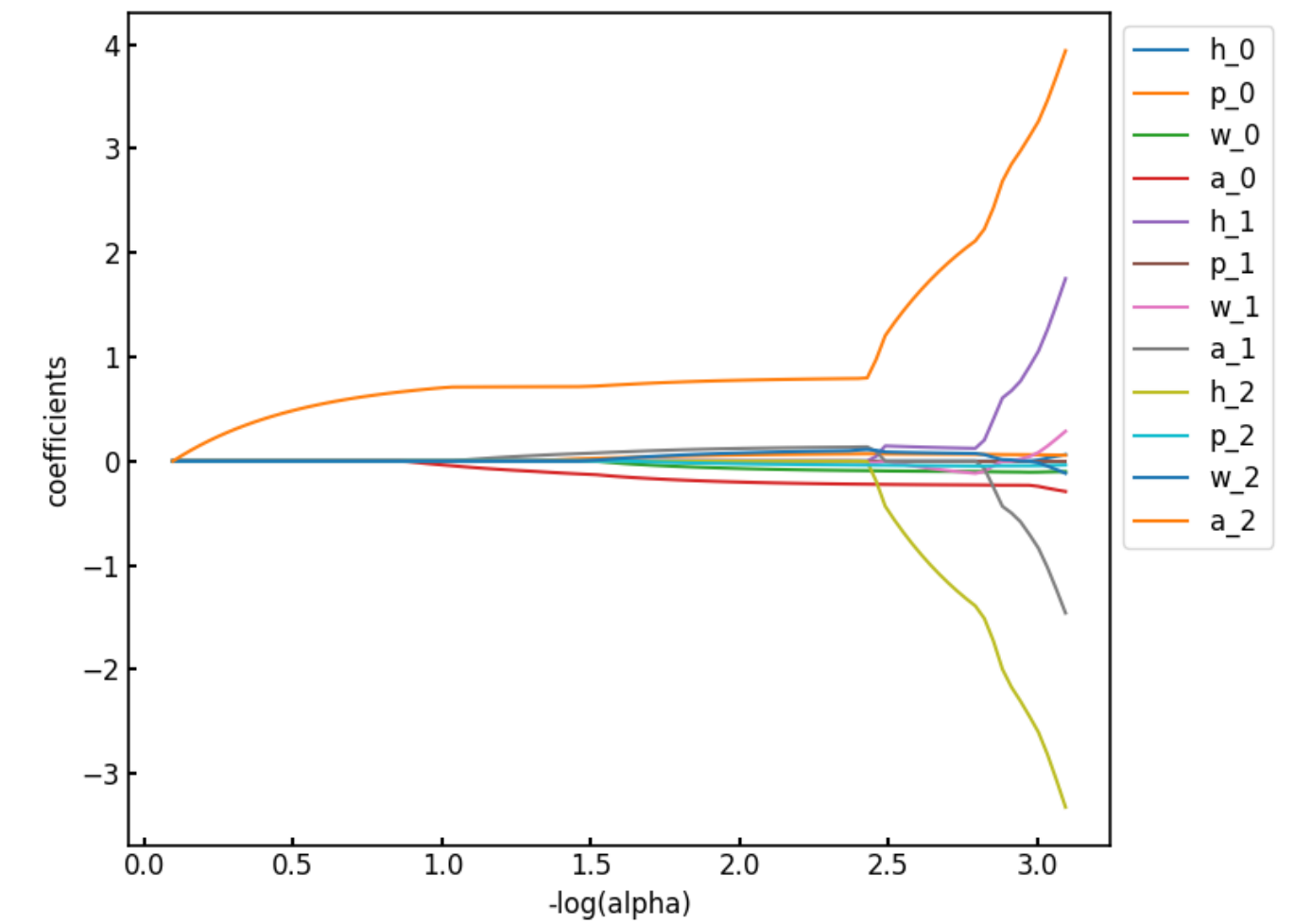
サフィックスはピークIDに対応する.



回帰における重み係数



LASSOの解パス



スペクトル微細構造の活用

