

データ駆動科学と放射光計測の融合研究

赤井 一郎

熊本大学産業ナノマテリアル研究所

放射光計測は様々な研究分野で重要な役割を担うが、それらへの最新情報科学の有機的な融合は必要不可欠で、その核となる取組みがデータ駆動科学である。データ科学は、データそのものに重点が置かれ、そのデータから情報を抽出する科学であるのに対し、データ駆動科学は、データ科学を用いて対象の研究分野で学理構築や新しい発見を目指すものである。

現在小職は、JST の情報計測 CREST¹⁾の採択課題「データ駆動科学による高次元 X 線吸収計測の革新」の研究代表者を努めている。この研究課題には、SAGA-LS, あいち SR, JASRI の多くの放射光施設研究者、NIMS の研究者、東工大・電通大・神戸大の情報科学の研究者、ならびに熊大の物性研究者に参画いただいております、XAFS 計測のデータ解析にデータ駆動科学を融合して材料のマイクロ物性の深掘り研究を進めるとともに、Spring-8 や PEEM で可能な、デバイス材料における XAFS のオペランド・顕微計測にデータ駆動科学を融合し、デバイス性能（マクロ物性）とその機能を担う物質のマイクロ物性の狭間をシームレスに解析する方法の開発を進めている。XAFS 計測では、電子状態 (XANES)、近距離構造 (EXAFS)、スピン状態 (XMCD) のマイクロ物性が抽出できるが、デバイスでは粒塊や特有のメゾ構造のため、高いマイクロ物性を示す物質が必ずしも高いマクロ物性を示すとは限らない一方、逆にメゾ構造を最適化してデバイス性能の向上も実現できると考えられる。

講演では、XANES や XMCD のスペクトル分解にベイズ推定を組み込んだベイズ分光法^{2,3)}と EXAFS のスパースモデリング^{4,5)}の概要や、リチウムイオン電池のモデル電極デバイスで充電過程を捉えた顕微 XAFS 計測⁶⁾において、デバイスの粒塊構造を安定して識別するマルコフ確率場モデルの適用例⁷⁾を紹介する。これらの研究は、JST, CREST, JPMJCR1861 の支援を受けたものである。

- 1) JST 計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用, https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah28-3.html
- 2) K. Iwamitsu, T. Yokota, K. Murata, M. Kamezaki, M. Mizumaki, T. Uruga, I. Akai, *phys. stat. solidi (b)* **257**, 2000107 (2020).
- 3) T. Yamasaki, K. Iwamitsu, H. Kumazoe, M. Okada, M. Mizumaki, I. Akai, *STAM Method accepted* (2021).
- 4) H. Setoyama, I. Akai, K. Iwamitsu, Y. Miyata, S. Yakura, Y. Igarashi, M. Okada, T. Okajima, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 074602 (2020).
- 5) 赤井一郎、岩満一功、五十嵐康彦、岡田真人、瀬戸山寛之、岡島敏浩, *日本結晶学会誌* **62** 特集 結晶学と情報学の融合, 1 (2020).
- 6) T. Nakamura, T. Watanabe, Y. Kimura, K. Amezawa, K. Nitta, H. Tanida, K. Ohara, Y. Uchimoto, and Z. Ogumi, *J. Phys. Chem. C* **121**, 2118 (2017).
- 7) N. Wada, M. Mizumaki, Y. Seno, Y. Kimura, K. Amezawa, M. Okada, I. Akai, T. Aonishi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 044003 (2021).



データ駆動科学と放射光計測の融合研究

2021年8月23日

熊本大学 産業ナノマテリアル研究所
材料インフォマティクス部門 教授
科学技術振興機構 情報計測CREST
「データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新」研究代表者
赤井一郎



自己紹介

赤井一郎、博士(理学)
・所属: 熊本大学産業ナノマテリアル研究所・材料インフォマティクス部門 教授
・専門分野: 基本的に物理学
➢データ駆動科学
➢情報計測CREST「データ駆動科学による高次元X線吸収計測の革新」2018年10月採択
➢光物性物理学(実験)
・略歴
➢1962年12月 岸和田生まれ
➢1981年4月~1989年3月 大阪市立大学 理学部 物理学科 / MC / DC (中退)
➢1992年6月 博士(理学) 第2656号 大阪市立大学
➢1989年4月~2007年3月 大阪市立大学 理学部助手、1996年4月 講師、1999年4月 助教授
➢2007年4月 熊本大学 衝撃・極限環境研究センター 教授
➢2013年4月~2020年3月 熊本大学 ハルスパワー科学研究所 教授
➢2016年10月~2020年3月 九州シンクロトロン光研究センター 客員主任研究員(併任)
➢2020年4月~現在 熊本大学 産業ナノマテリアル研究所(改組)



謝辞

JST, CREST: JPMJCR1861

- ・主たる共同研究者
✓岡島敏浩先生,
✓水牧仁一朗先生,
✓青西亨先生,
✓山崎裕一先生
- ・共同研究者
✓岡田真人先生とそのグループ,
✓五十嵐康彦先生
✓妹尾与志木先生,
✓庄野逸先生,
✓大森敬明先生,
赤井研の皆様。

あいちSR
JASRI
東工大
NIMS



東京大学
筑波大学
SAGA-LS
電通大
神戸大学



物性研究と材料研究の狭間

- ・物性研究
➢機能を担う物質の物性探求
➢高い機能をもつ物質の探索や合成
➢ミクロな物性研究
機械学習によるミクロ物性の深掘り研究
- ・材料研究
➢デバイスにおけるマクロ機能の高度化
➢ミクロ物性だけでは、マクロ機能は決まらない
➢メゾ構造の最適化によるマクロ機能の高度化を目指す
機械学習によるメゾ構造検出とマクロ物性の評価

材料研究で共通した課題
・高いミクロ機能を持った物質が、高いマクロ物性を示すとは限らない
・材料の不均一性がマクロ機能最適化の障害となる
・材料デバイスの劣化・寿命の原因はなにか?
・材料のメゾ構造を最適化して、マクロ機能高度化することも可能。

ミクロ物性とマクロ機能のシームレス解析



ミクロ物性をプローブする放射光X線吸収微細構造(XAFS)

XAFS (X線吸収微細構造) 吸収端 E_0 で原子選択、同時計測。

- ・XANES(X線吸収端微細構造) → 非占有電子への遷移 ➢ 電子状態
- ・EXAFS(広域X線吸収微細構造) → 光電子波の散乱・干渉 ➢ 近距離構造
- ・XMCD(X線磁気円二色性) → スピン選択遷移 ➢ スピン状態



放射光XFAS計測とデータ駆動科学の融合

XAFS(X線吸収微細構造)計測

- XANES, EXAFS, XMCD
- μ -XAFS (顕微計測)

SAGA-LS SPring-8 AichiSR

・データ駆動科学を用いて
先端材料の、ミクロ物性、メゾ構造、マクロ機能の発現をシームレスに解明。

データ駆動科学

- ベイズ分光: ベイズ推定に基づくスペクトル分解。因果律を遡る。
- スパースモデリング(SpM): 原子スケール構造のスパース性をL1正則化でプローブ。
- 視覚的情報(PSS)統計量 + 主成分分析(PCA): 磁区構造テクスチャに隠された物性特徴量の尺度化。
- マルコフ確率場モデル(MRF): 近接類似性に基づくメゾ構造の補足。
- 非負値行列因子分解(NMF): 高次元 μ -XAFSデータを骨の髄まで解析。



データ駆動科学におけるベイズ推定 計測データに基づく学術研究の新しい学理構築法

- これまでの誤差論
「 θ は真値で確定されていて、データ D がノイズで確率的に与えられる」と考える。
- ベイズ推定 K. Nagata, et al., *Neural Netw.* 28, 82 (2012).
「データ D が確定されていて、 θ が確率的に決まる」

| | | |
|------------------|----------------|-----------|
| $f(x_i, \theta)$ | パラメータ θ | データ y_i |
| 誤差論 | 確定的 | 確率的 |
| ベイズ推定 | 確率的 | 確定的 |

$$P(\theta|D) \propto \exp\left(-\frac{N}{\sigma_{data}^2} E(\theta)\right) P(\theta)$$

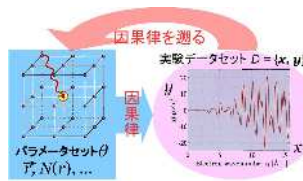
事後確率 事前確率

- ベイズ自由エネルギー-BFE(K):
「情報量規準としてモデル(K)選択」

$$F(K) = -\ln \int \exp\left[-\frac{N}{\sigma_{data}^2} E(\theta, K)\right] P(\theta) d\theta$$

$$P(K|D) \propto P(K) \int \exp\left[-\frac{N}{\sigma_{data}^2} E(\theta, K)\right] P(\theta) d\theta$$

★ データ駆動科学 = データを出発点と考える



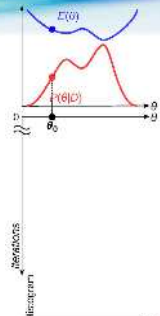
マルコフ連鎖モンテカルロ法(MCMC)

計算時間爆発を解消するアルゴリズム

- 各パラメータに「適当」な初期値 θ_{init} .
- 現在のパラメータの値 θ_t を元にして、何らかの乱数 ε によってパラメータの次の候補 θ' を生成する。
 $\theta' = \theta_t + \varepsilon$
- 確率密度の比 r を評価する
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_t|D)} = \exp\left(-\frac{N}{\sigma_{data}^2} [E(\theta') - E(\theta_t)]\right) \frac{P(\theta')}{P(\theta)} \quad (3.27)$$
- r の大小で、候補値の採択・棄却を確率的に決定し、値の更新をする。
2~4を繰り返して、度数分布 $N(\theta)$ を蓄積する
 $\theta_{init} \rightarrow \dots \rightarrow \theta_{t-1} \rightarrow \theta_t \rightarrow \theta_{t+1} \rightarrow \dots$

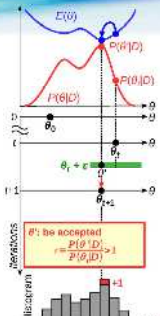
メトロポリス法 - 1

- パラメータ θ_0 の初期値を適当に設定



メトロポリス法 - 2

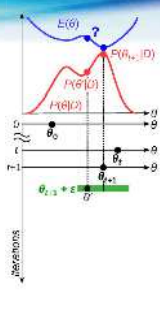
- パラメータ θ_0 の初期値を適当に設定
- 乱数 ε で候補 θ' を生成する $\theta' = \theta_t + \varepsilon$
- 確率密度を比較
● $r > 1$: 無条件で候補を採用
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_t|D)} \xrightarrow{\text{無条件採択}} \theta_t \leftarrow \theta'$$



メトロポリス法 - 3

- パラメータ θ_0 の初期値を適当に設定
- 乱数 ε で候補 θ' を生成する $\theta' = \theta_t + \varepsilon$
- 確率密度を比較
● $r > 1$: 無条件で候補を採用
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_t|D)} \xrightarrow{\text{無条件採択}} \theta_t \leftarrow \theta'$$

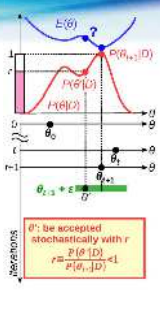
● $r < 1$:
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_{t+1}|D)} < 1$$



メトロポリス法 - 4

- パラメータ θ_0 の初期値を適当に設定
- 乱数 ε で候補 θ' を生成する $\theta' = \theta_t + \varepsilon$
- 確率密度を比較
● $r > 1$: 無条件で候補を採用
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_t|D)} \xrightarrow{\text{無条件採択}} \theta_t \leftarrow \theta'$$

● $r < 1$: 0~1の一樣乱数 $U(0,1)$ と r を比較
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_{t+1}|D)} < 1$$



メトロポリス法 - 5

1. パラメータ θ_0 の初期値を適当に設定
2. 乱数 ε で候補 θ' を生成する $\theta' = \theta_t + \varepsilon$
3. 確率密度を比較
 - $r > 1$: 無条件で候補を採用
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_t|D)} \xrightarrow{\text{無条件採択}} \theta_t \leftarrow \theta'$$
 - $r < 1$: $0 \sim 1$ の一様乱数 $U(0,1)$ と r を比較
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_{t+1}|D)} < 1 \xrightarrow{\text{確率的}} \begin{cases} U < r & \xrightarrow{\text{採択}} \theta_{t+2} \leftarrow \theta' \\ U > r & \xrightarrow{\text{棄却}} \theta_{t+2} \leftarrow \theta_t \end{cases}$$

メトロポリス法 - 6

1. パラメータ θ_0 の初期値を適当に設定
2. 乱数 ε で候補 θ' を生成する $\theta' = \theta_t + \varepsilon$
3. 確率密度を比較
 - $r > 1$: 無条件で候補を採用
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_t|D)} \xrightarrow{\text{無条件採択}} \theta_t \leftarrow \theta'$$
 - $r < 1$: $0 \sim 1$ の一様乱数 $U(0,1)$ と r を比較
$$r \equiv \frac{P(\theta'|D)}{P(\theta_{t+1}|D)} < 1 \xrightarrow{\text{確率的}} \begin{cases} U < r & \xrightarrow{\text{採択}} \theta_{t+2} \leftarrow \theta' \\ U > r & \xrightarrow{\text{棄却}} \theta_{t+2} \leftarrow \theta_t \end{cases}$$

メトロポリス法の実行例 - 2: $P(\theta|D)$

- メトロポリス法: Iteration = 100万回, Burn-In = 10万回

最小二乗法とメトロポリス法との比較

メトロポリス法:
原理的には、初期値に依存せず大域極小解にたどり着く

局所的極小値から解放される
パラメータセット全空間の事後確率が得られる
パラメータセットの確率分布を得ることができる

$$P(\theta|D) \propto \exp\left(-\frac{N}{\sigma_{\text{data}}^2} E(\theta)\right) P(\theta)$$

事後確率 事前確率

レプリカ交換モンテカルロ法

- メトロポリス法
local minimumを脱して、global minimumに達し、一意の平衡分布を得るにはかなりの時間を要する。
- レプリカ交換モンテカルロ法
➢ 逆温度 β を導入

$$P(\theta|D, \beta) \propto \exp\left(-\frac{N}{\sigma_{\text{data}}^2} \beta E(\theta)\right) P(\theta)$$

- 各 β (レプリカ) ← メトロポリス法
- 隣り合うレプリカで状態交換

レプリカ交換モンテカルロ法: 実装

逆温度 β を導入し、局所構造と大域構造を行き来する。

1. 各 β (レプリカ)内は、メトロポリス法で確率的なパラメータ更新を行う
- 2.

$$r = \frac{P(\theta_{\beta_{t+1}}|D, \beta_t)P(\theta_{\beta_t}|D, \beta_{t+1})}{P(\theta_{\beta_t}|D, \beta_t)P(\theta_{\beta_{t+1}}|D, \beta_{t+1})}$$

$$u = \min(1, r)$$

で確率的に交換

交換: $\{\theta_{\beta_{t+1}}, \theta_{\beta_t}\} \leftarrow \{\theta_{\beta_t}, \theta_{\beta_{t+1}}\}$

データ駆動科学におけるベイズ推定 計測データに基づく学術研究の新しい学理構築法

- これまでの誤差論
「 θ は真値で確定されていて、データ D がノイズで確率的に与えられる」と考える。
- ベイズ推定 K. Nagata, et al., *Neural Netw.* 28, 82 (2012).
「データ D が確定されていて、 θ が確率的に決まる」

$$P(\theta|D) \propto \exp\left(-\frac{N}{\sigma_{\text{data}}^2} E(\theta)\right) P(\theta)$$
 事後確率 事前確率
- ベイズ自由エネルギー-BFE(K):
「情報量規準としてモデル(K) 選択」

$$F(K) = -\ln \int \exp\left[-\frac{N}{\sigma_{\text{data}}^2} E(\theta, K)\right] P(\theta) d\theta$$

$$P(K|D) \propto P(K) \int \exp\left[-\frac{N}{\sigma_{\text{data}}^2} E(\theta, K)\right] P(\theta) d\theta$$

★ データ駆動科学 = データを出発点と考える

| $f(x_i, \theta)$ | パラメータ θ | データ y_i |
|------------------|----------------|-----------|
| 誤差論 | 確定的 | 確率的 |
| ベイズ推定 | 確率的 | 確定的 |

XANESのスペクトル分解

吸収端エネルギーで原子を選択
• 価数、配位数、配位子、配位距離、配位構造を抽出したい!

従来法の問題点

- 吸収ステップtail: スプライン関数
 > 物理的根拠がない。
 > 解析に恣意性が残る。
- 初期値に依存した解:
 > 得られた解の統計的検証が得られない。
- 点推定:
 > 推定された物性パラメータの統計精度(誤差)評価が出来ない。

XANESのベイズ分光

XANESの新たなスペクトル分解法の確立
• 吸収端選択原子: 価数、配位数、配位子、配位距離、配位構造を抽出

モデル選択結果 $K=13$

スペクトル成分

- ステップ

$$H \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{E - E_0}{\Gamma/2} \right) \right]$$
- ホワイトライン

$$\text{psdVoigt}(E; A, E_0 + \Delta E, \omega, \eta)$$
- Pre-edge / 他ピーク

$$\text{Gauss}_k(E; F_k, E_{0k}, W_k)$$

$$\sum_{k=1}^K \text{Gauss}_k(E; F_k, E_{0k}, W_k)$$

モデル選択
• Gauss_kの成分数: K

XANESのベイズ分光

XANESの新たなスペクトル分解法の確立
• プリエッジのスペクトル分解のロバスト性

モデル選択の事後確率 $P(K|D)$

一任意性の残らないプリエッジのスペクトル分解

XMC-Dのベイズ分光で、隠れた元スペクトルを再現

原因(左回りXASスペクトル) → 因果律 → 結果(XMCDスペクトル)

因果律を遡って 隠れた元スペクトルを再現

ベイズ分光法

ニッケルフェライトNiFe₂O₄を想定したXA/XMCDスペクトル

人工スペクトルを対象に、ベイズ分光法の有効性を示す。

> Ni²⁺のL_{2,3}端

$$\mathcal{I} = \sum_{\sigma} \sum_{m\sigma} \epsilon_{\sigma}^{\dagger}(\Gamma) d_{\Gamma, \sigma}^{\dagger} a_{\Gamma, \sigma} + \sum_{m\sigma} \sum_{m'\sigma'} \epsilon_{\sigma}^{\dagger}(\Gamma) d_{\Gamma, \sigma}^{\dagger} p_{m, \sigma} p_{m', \sigma'}$$

$$+ \sum_{\sigma} \sum_{m\sigma} \epsilon_{\sigma}^{\dagger} a_{\Gamma, \sigma}^{\dagger} a_{\Gamma, \sigma} + \sum_{\sigma} \sum_{m\sigma} \frac{V(\Gamma)}{\sqrt{N}} (d_{\Gamma, \sigma}^{\dagger} a_{\Gamma, \sigma} + a_{\Gamma, \sigma}^{\dagger} d_{\Gamma, \sigma})$$

$$+ U_{dd} \sum_{(m\sigma)(m'\sigma')} |d_{\Gamma, \sigma}^{\dagger}| |d_{\Gamma, \sigma'}|^2$$

$$- U_{dc}(2p) \sum_{(m\sigma)(m'\sigma')} d_{\Gamma, \sigma}^{\dagger} d_{\Gamma, \sigma'} (1 - p_{m, \sigma}^{\dagger} p_{m', \sigma'})$$

• 計測データを模倣して
 > 正規分布ノイズを重畳
 > ローレンツ形状(幅1 eV)で畳み込み

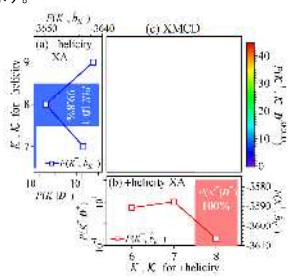
ニッケルフェライトNiFe₂O₄を想定 モデル選択(スペクトル成分数の推定)

STAM: Methods 4, 75 (2021).

- 人工スペクトルを対象に、ベイズ分光法の有効性を示す。
- >Ni²⁺のL_{2,3}端

モデル選択(スペクトル成分数の推定) P(K|D)

- 元の-/+ヘリシティX線吸収(XA)スペクトル
 - >-ヘリシティXA 8成分
 - >+ヘリシティXA 8成分
- ローレンツ幅(1eV)内での遷移成分の統合は
おこなうが、ノイズ強度を超える成分は全て抽出
- XMCDスペクトル
 - >-ヘリシティ成分 9成分
 - >+ヘリシティ成分 8成分



26

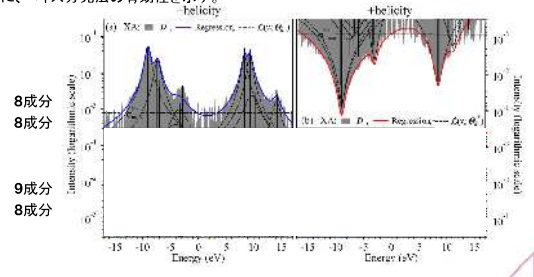
ニッケルフェライトNiFe₂O₄を想定 再現スペクトル

STAM: Methods 4, 75 (2021).

- 人工スペクトルを対象に、ベイズ分光法の有効性を示す。
- >Ni²⁺のL_{2,3}端

再現スペクトル

- 元のXAスペクトル
 - >-ヘリシティXA 8成分
 - >+ヘリシティXA 8成分
- XMCDスペクトル
 - >-ヘリシティ成分 9成分
 - >+ヘリシティ成分 8成分



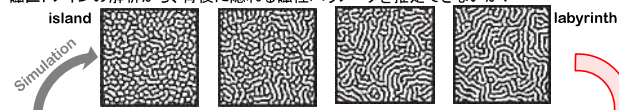
27

磁区ドメインを支配する物理モデル

J. Phys. Soc. Jpn. 90, 044705 (2021).

電通大・庄野先生

- 磁区ドメイン (人が見て、島構造/迷路構造を判断一定性的議論に留まる)
- 磁区ドメインの定量的評価はできないか?
- 磁区ドメインの解析から、背後に隠れる磁性パラメータを推定できないか?



- 時間依存ギンツブルグ-ランダウ(TDGL)方程式
磁区パターン(磁気モーメント: $\phi(r)$)の形成ダイナミクスのモデル (時間発展)

$$\frac{\partial \phi(r)}{\partial t} = \alpha \lambda(r) [\phi(r) - \phi(r)^3] + \beta \nabla^2 \phi(r) - \gamma \int dr' \phi(r') G(r, r') + h(t) \dots$$

$\lambda(r) = 1 + N(0, \sigma = 0.3)$

α 異方性パラメータ
 β 近距離相互作用(強磁性)
 γ 長距離相互作用(反強磁性)
 $h(t)$ 外部磁場(= $h_0 - vt$)

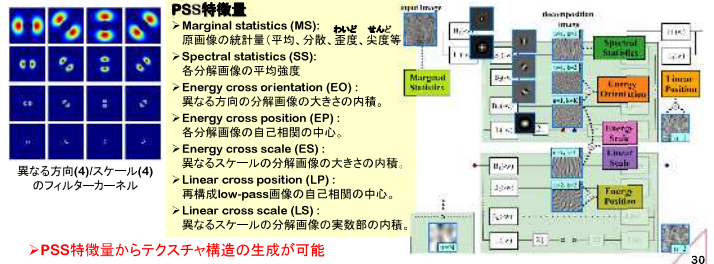
29

Portilla-Simoncelli 統計量 (PSS)

J. Phys. Soc. Jpn. 90, 044705 (2021).

電通大・庄野先生

- 「人間の視覚認知」に基づく、高次テクスチャ特徴量
- >画像のフーリエ空間で、フィルタ処理された分解画像のテクスチャ統計量



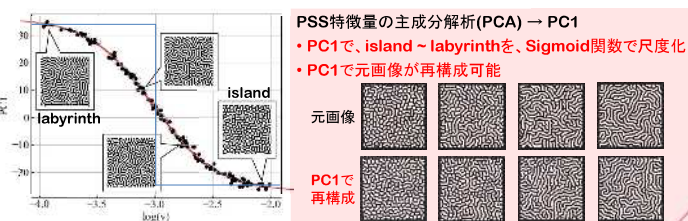
30

磁区パターン 島状~迷路状を、Sigmoid関数で尺度化

J. Phys. Soc. Jpn. 90, 044705 (2021).

電通大・庄野先生

- 磁区パターン (人が見て、島構造/迷路構造を判断一定性的議論に留まる)
- 磁区パターンの定量的評価はできないか?
- 磁区パターンの解析から、背後に隠れる磁性パラメータを推定できないか?



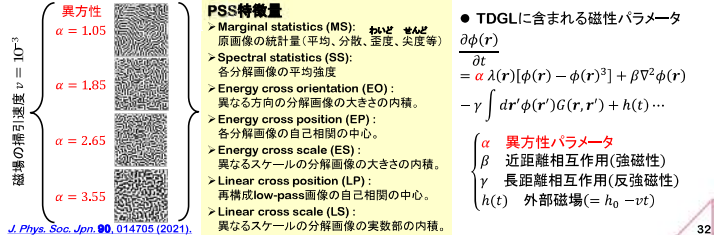
31

磁区パターン(島状~迷路状) →磁性パラメータの推定

J. Phys. Soc. Jpn. 90, 044705 (2021).

電通大・庄野先生

- 磁区パターン (人が見て、島構造/迷路構造を判断一定性的議論に留まる)
- 磁区パターンの定量的評価はできないか?
- 磁区パターンの解析から、背後に隠れる磁性パラメータを推定できないか?



32

磁区パターン(島状~迷路状) →磁性パラメータの推定

J. Phys. Soc. Jpn. 90, 044705 (2021).
電通大・庄野先生

磁区パターン (人が見て、島構造/迷路構造を判断→定性的議論に留まる)

- 磁区パターンの定量的評価はできないか?
- 磁区パターンの解析から、背後に隠れる磁性パラメータを推定できないか?

● TDGLに含まれる磁性パラメータ

$$\frac{\partial \phi(r)}{\partial t} = \alpha \lambda(r) [\phi(r) - \phi(r)^3] + \beta \nabla^2 \phi(r) - \gamma \int dr' \phi(r') G(r, r') + h(t) \dots$$

$$\lambda(r) = 1 + N(0, \sigma = 0.3)$$

(a) $\log v = -2$
 $R^2 = 0.982$

(b) $\log v = -3$
 $R^2 = 0.999$

(c) $\log v = -4$
 $R^2 = 0.999$

異方性パラメータ α の推定を実現

- TrainデータのPC1で α を線形回帰
- Train : Test = 2 : 8でも高いロバスト性

データ駆動型社会を担う人材育成プログラム @ 熊本大学自然科学教育部

2021年10月からスタート(仮開講)
「データ駆動型社会を担う」でググってください

Webページ

- <https://www.fast.kumamoto-u.ac.jp/gjec/datakudo/>
- <http://phys.iina.kumamoto-u.ac.jp/dds/index.html>

企業の技術者を含む学外者を広く受け入れます。

問い合わせ / 受講申請
ddsoffice@kumamoto-u.ac.jp

データ駆動型社会を担う人材育成プログラム @ 熊本大学自然科学教育部

- データ駆動科学概論と実践
熊本大学 計算科学振興財団 赤井一郎, 伊藤 聡先生
- 「データ駆動科学入門」
東京大学 岡田真人先生
- 「機械学習概論と判別・クラスター分析」
統計数理研究所 日野英逸先生
- 「データ駆動科学を用いた物質科学」
東京大学 福島孝治先生
- 「数理地球科学の基礎と応用」
海洋研究開発機構 桑谷 立先生
- 「データ同化の基礎と応用」
東京大学 長尾大道先生
- 「パターン認識と深層学習の基礎と応用」
電気通信大学 庄野 遼先生
- 「地盤工学における機械学習 基礎と応用」
岡山大学 珠玖隆行先生
- データ駆動科学H (検討中)
- データ駆動科学I (検討中)

放射光XFAS計測とデータ駆動科学の融合

XFAS(X線吸収微細構造)計測

- XANES, EXAFS, XMCD
- μ -XAFS (顕微計測)

→ データ駆動科学を用いて
先端材料の、マイクロ物性、メゾ構造、マクロ機能の発現をシームレスに解明。

データ駆動科学

- ベイズ分光:** ベイズ推定に基づくスペクトル分解。因果律を遡る。
- スパースモデリング(SpM):** 原子スケール構造のスパース性をL1正則化でプローブ。
- 視覚的情報(PSS)統計量 + 主成分分析(PCA):** 磁区構造テクスチャに隠された物性特徴量の尺度化。
- マルコフ確率場モデル(MRF):** 近接類似性に基づくメゾ構造の補足。
- 非負値行列因子分解(NMF):** 高次元 μ -XAFSデータを骨の髄まで解析。