

X線分光スペクトル計測の効率化に向けたデータ科学的アプローチ

石上啓介^{1,2}

¹JASRI/SPring-8, ²ESICMM/NIMS

近年の実験系材料研究においては、伝統的な計測・解析手法と情報学の「機械学習」や「数理統計」を組み合わせ、高精度化・高効率化する手法が注目を浴びている。これがきっかけとなり、分光スペクトル計測においても「数理統計」に基づく計測高効率化の研究がなされてきた。これは解析に「機械学習」を適用する際に必要十分な量のデータを「数理統計」で効率的に計測するという戦略に基づくものであり、計測インフォマティクスと呼ばれている。この一例が、Uenoらによる吸収分光スペクトル形状を測定中にガウス回帰過程(GPR)を用いて逐次学習・予測し、予測分散の大きなエネルギー領域へ適応的に励起光エネルギーを変化させて計測する適応型実験計画法[1,2]である。さらに Wakabayashi らはこれを改良し、スペクトル強度の大きなエネルギー領域にも高い優先度を与える評価関数を提案した[3]。しかしながら、これらの先行研究においては、励起光エネルギー変化の単調性は保証されていなかったため、時間コストの高いバックラッシュ解消を伴う分光器駆動を避けられなかった。そこで本研究では、励起光エネルギー変化の単調性を保証しつつ、スペクトル強度の変化に追従して適応的に測定エネルギーを決定するマルコフ過程型オンザフライ回帰推定(MP-ORE)分光計測手法を提案し、その実装と実証実験を行った。

実験は軟X線ビームライン BL25SU の磁気円二色性(MCD)分光測定装置を用いて行った。キッカーにより円偏光ヘリシティを 1Hz で切り替え、各ヘリシティで信号強度積算時間を 1 秒とした。図 1 はフェリ磁性 Sr₃Fe₅O₁₂ 粉末(a,b)と反強磁性 MnO 粉末(c,d)の X 線吸収分光(XAS)・MCD スペクトルを、テスト測定後に熟練者が決定したエネルギーステップと MP-ORE がオンザフライで決定したエネルギーステップで測定し、エネルギーに対する測定回数変化を比較したものである。MP-ORE の決定したエネルギーステップは熟練者に対しておおむね一致しており、特に MCD 強度の弱い反磁性 MnO 粉末の場合は熟練者よりも約 20%少ない測定点数で計測が完了した。

【謝辞】

本研究は元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM) グラント番号 JPMXP0112101004 の支援を得て実施されました。放射光実験は SPring-8 BL25SU にて課題番号 2021B1020 のもとで実施されました。

【文献】

- [1] T. Ueno *et al.*, *npj Computational Materials* **4**, 4 (2018).
- [2] T. Ueno *et al.*, *npj Computational Materials* **7**, 139 (2021).
- [3] Yuki K. Wakabayashi *et al.*, *Appl. Phys. Express* **11**, 112401 (2018).

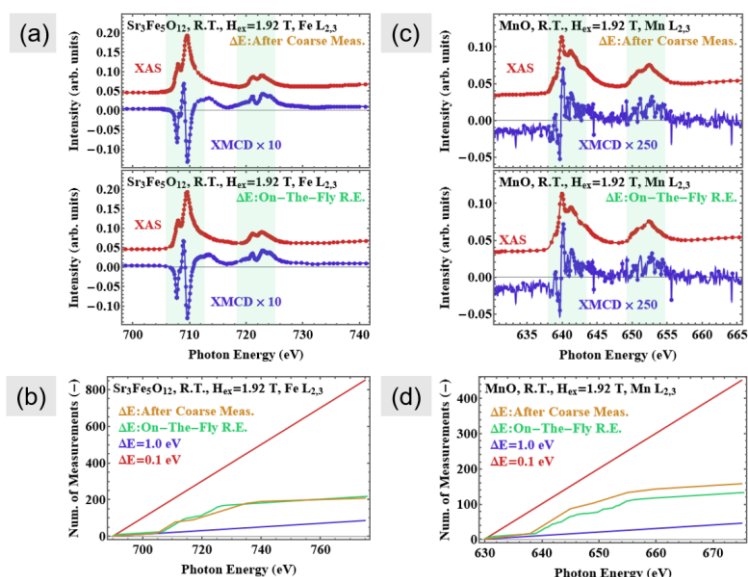


図 1 エネルギーステップ決定法の違いによる XAS, MCD スペクトル (上段: 事前に粗いエネルギーステップで測定したスペクトルに基づいて熟練者が決定、下段: MP-ORE による逐次決定)とエネルギーに対する測定回数の比較。試料はフェリ磁性 Sr₃Fe₅O₁₂ 粉末(a,b)および反強磁性 MnO 粉末(c,d)。