SPring-8におけるデータ解析の最前線

～非周期パターン画像特徴量の定量化～

水牧仁一朗(JASRI)

X線光源の発展により、コヒーレントX線を用いた測定技術が大きく進展している。例えば、コヒーレント回折イメージング(CDI)・タイコグラフィーなどの顕微測定が、X線自由電子レーザー(XFEL)施設やSPring-8をはじめとする放射光施設などで可能となっている。空間分解能は非常に向上し、数nm程度であり、時間分解能は数fsまで到達している。特にCDIの場合、照射された領域の全ての情報が回折像に含まれるため、時間分解によるダイナミクス測定を行いやすいという利点がある。放射光施設の場合、X線のエネルギーを選択することで元素選択的な情報が空間座標や時間に紐づけられ、材料の機能発現のミクロな起源を探ることが可能である。このような発展により放射光計測においても、画像データの重要性は年々増している。しかしながら電池材料や磁性材料といった材料の機能発現に関わる構造を見つける保磁力やイオン導電率など機能を特徴づける物理量と画像データの特徴量との相関はよくわかっておらず、機能発現のミクロな起源を特定するには至っていない。これは、画像データが高次元情報であり、人間が現象の本質を「理解」しやすい「構造」とはなっていないからである。そこで、JASRIにおいては、画像データをこの「理解」しやすい「構造」にするために画像データを処理し、「理解」したい現象をあらわす特徴量を抽出する解析手法を開発・研究を行っており、画像データから物性量を推定する方法も提案している。

本講演では時間発展ギンツブルグランダウ(TDGL)方程式を用いて磁区パターンの人工データを作成し、それを解析対象とし、物性量の推定や画像データの違いの定量化について報告する。