

High-throughput スペクトルデータ解析手法の開発と 材料科学への応用

松村 太郎次郎*

Development of a high-throughput method for spectral data analysis and its application to materials science

Tarojiro Matsumura*

- * 国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター
- * Research Center for Computational Design of Advanced Functional Materials, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
E-mail:matsumura-tarojiro@aist.go.jp

和文要旨

近年の分光分析技術の発展によって、対象の広範囲から精緻なスペクトルデータが取得できるようになっている。その一方で、膨大なスペクトルデータが出力されるため、解析作業が手に負えないという問題が顕在化している。この問題を解決し、解析作業の自動化を実現すべく、発表者らは High-throughput なスペクトル解析手法の開発を目的として、expectation-maximization (EM) アルゴリズムを応用した spectrum adapted EM algorithm を提案した。最近では、spectrum adapted expectation-conditional maximization (ECM) algorithm や spectrum adapted maximum a posteriori (MAP)-ECM algorithm といった拡張手法を提案し、バックグラウンド除去や分離ピーク数選択にも対応可能なスペクトル解析技術の開発を推進している。本発表では、まず、開発手法の理論背景を説明し、人工スペクトルデータ解析を通じた開発手法の振る舞いを紹介する。続いて、材料データへの応用として、X線光電子分光法、ラマン分光法、レーザー誘起ブレイクダウン分光法への適用事例を紹介する。最後に、最近の取り組みとして、開発手法のツール化や将来的な発展の方向性について話題提供を行う。

English Abstract

Recent development of spectroscopic technique has enabled the acquisition of high quality spectral data across a wide range of materials. However, as the number of spectral data grows, handling and analyzing these datasets has become increasingly challenging. To address this issue, we propose a high-throughput spectral data analysis method that applies the expectation-maximization (EM) algorithm commonly known in machine learning, adapted here as the "spectrum-adapted EM algorithm." In recent works, we have introduced extended methods such as the "spectrum-adapted expectation-conditional maximization (ECM) algorithm" and the "spectrum-adapted maximum a posteriori (MAP)-ECM algorithm," further enhancing high-throughput peak fitting method by addressing tasks such as background removal and selecting the number of separated peaks. In this presentation, I will first introduce the theoretical backgrounds of the developed methods, followed by examples of their application to synthetic spectral data. Subsequently, for real data applications, we will present case studies in the analysis of spectral data collected by X-ray photoelectron spectroscopy, Raman spectroscopy, and laser-induced breakdown spectroscopy. Finally, we will provide recent topics to develop the software package and discuss future directions of the high-throughput spectral data analysis method.