

令和 6 年 6 月 13 日現在

機関番号：82118

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2019～2023

課題番号：19H00834

研究課題名(和文) X線顕微鏡と応用数学の融合による航空機用複合材料の破壊トリガーサイト特定

研究課題名(英文) Determination of trigger sites for crack formation in aeronautical composite by combining X-ray microscopy and applied mathematics

研究代表者

木村 正雄 (Kimura, Masao)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・教授

研究者番号：00373746

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 35,300,000円

研究成果の概要(和文)：X線顕微鏡による4次元/5次元観察技術(空間(2D or 3D)+エネルギー+時間)を確立し、応力印加条件下で亀裂がいつ、どこで発生するのかをナノスケールで解明することに成功した。本技術を航空機用複合材料であるCFRP(炭素繊維強化樹脂)に適用し、(i)樹脂内でのき裂発生と、(ii)炭素繊維/樹脂界面での剥離、という2つのメカニズムが競合して、ナノスケールで亀裂が発生すること解明した。その具体的な亀裂の発生起点は、炭素繊維の配列乱れにより決まることを発見した。さらに炭素繊維の配列乱れを定量化する方法として、パーシステントホモロジーを用いた位相的データ解析を活用した新たな手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本課題で確立したX線顕微鏡による4次元/5次元観察技術は、従来観察することができなかった「き裂の発生」そのものをナノスケールで解明し、そのマイクロメカニクスの観点からき裂発生メカニズムを初めて提案した点で学術的かつ工学的に非常に意義が大きい。さらに本課題で提案した、X線顕微鏡計測と数理科学・情報科学の融合した解析手法は、ビッグデータに内在する情報をフルに引き出す新たなアプローチとして、様々な観察法や材料への展開が期待できる。

研究成果の概要(英文)：We have successfully developed the 4D/5D\* observation techniques using X-ray microscopes (\*space (2D or 3D) + energy + time), and revealed when and where cracks are initiated under stress at the nanoscale (first in the world). We applied it to CFRP (carbon-fiber reinforced plastic) and revealed the competing two mechanisms: (i) the crack initiation in plastic and (ii) debonding at the interface of carbon fibers and plastic. We combined the information obtained by nanoscopic observation with the one by macroscopic observation and found that the initiation sites are largely affected by the carbon-fiber alignment. Moreover, we have developed a new approach to quantify the carbon-fiber alignment using topological data analysis with persistent homology.

研究分野：材料科学、放射光計測、位相的データ解析

キーワード：X線顕微鏡 X-CT 顕微分光 CFRP パーシステントホモロジー 機械学習 き裂

## 1. 研究開始当初の背景

今後 20 年間 5 兆ドル規模に成長が見込まれる航空機市場は、現在欧米勢が主流で、日本勢が世界シェアアップするには得意とする材料の研究開発がポイントとなる。航空機用複合材料の中で特に重要なのが炭素繊維強化樹脂(CFRP: Carbon Fiber Reinforced Polymer) (図 1)である。

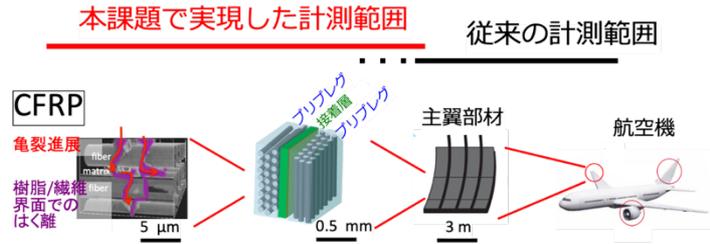


図 1 CFRP のマルチスケール階層構造と本課題で実現したナノ～ミクロスケールの観察技術がカバーする範囲

複合材料には本質的に欠陥や亀裂が内在する。従来の材料力学では、亀裂が進展する条件として、「亀裂拡大により解放される歪みエネルギー  $\geq$  亀裂進展に必要なエネルギー(=表面生成+塑性変形)」、とする古典的力学的な考えをベースにしていることが多かった。そのため歪みの大きさを超音波、X 線、電子線等の様々な方法で計測し、亀裂進展が議論されてきた。

しかし材料内部の亀裂計測の空間分解能が数 mm～数  $\mu$ m 程度に限られるため、ある程度大きく成長した亀裂(数  $\mu$ m～数 mm 以上)に対する研究が中心で、亀裂の発生起点のナノスケールでの挙動(例えば CFRP の炭素繊維/樹脂界面 近傍)はほとんど分かっていない。そのため安全率を掛けてオーバースペックで材料設計されているのが現状であり、結果エネルギーや資源を必要以上に消費する結果になり大きな課題であった。

## 2. 研究の目的

劣化が発生してから「何故生じたか」を事後説明する現状から、「なぜ、そのタイミング/その場所で劣化が生じたか」を事前予測することへパラダイムシフトをするために必要な学術的知見を提供するために、以下の 2 点を研究の目的とした。

(1) 第一の目的は、従来の計測法では無理であった高空間分解能(数 10nm 以下)かつ応力印加下で亀裂がいつどこで発生するか(起点)を観察する計測技術の確立である。CFRP は様々なスケールでの階層構造を有しており(図 1)、亀裂や劣化の起点観察には、特に数 mm 以下の領域でマルチスケール観察が必要となる。そこで放射光 X 線顕微鏡の空間分解能を数 10nm まで高めた顕微鏡観察技術の確立することを目的とした。

(2) 第二の目的が、観察された亀裂起点が、いつどこで、なぜ、そのタイミングと場所で劣化が発生するかを解明する新たなアプローチの提案である。同程度に局所応力が高い部分なら亀裂はどこでもランダムに発生するのか、それとも界面や微細組織に原因があったのであろうか? この問いに迫ることは、これまで提唱されている CFRP での亀裂の発生や進展の競合するメカニズムを情報科学や数理的手法との融合で解明することを目的とした。

## 3. 研究の方法

### (1) 応力下でのマルチスケール X 線顕微鏡の観察技術の確立

CFRP のナノ構造やき裂の発生・進展を (a) 数 10nm～数 mm のマルチスケールで、(b) 構造材料として機能発現している(様々なモードの)応力印加下で、X 線顕微鏡 4D/5D 観察する顕微計測技術を確立した。

具体的には、透過/結像型 X 線顕微鏡(TXM, XAFS-CT)を用いて亀裂の発生を高空間分解能で観察した。同測定では放射光からの硬 X 線ビーム ( $E = 5 \sim 11$  keV)を単色化した後に、ガラスキャピラリーで集光して試料に照射、透過 X 線を Fresnel Zone Plates と光学レンズの組み合わせで拡大結像することで、高空間分解能での X-CT 測定を実現した(図 2)<sup>1,2)</sup>。本研究では、亀裂進展の素反応メカニズムを調べるために、in situ 観察技術を高度化し Mode I(引っ張り)、Mode II(剪断) を分離した応力印加条件での観察を実現した。密度差が小さ

いCFRP界面を観察する計測手法(phase contrast)と、顕微データのデータ処理(water-fall 解析による segmentation 等)により、CFRP でのき裂の発生のナノスケール観察に成功した。

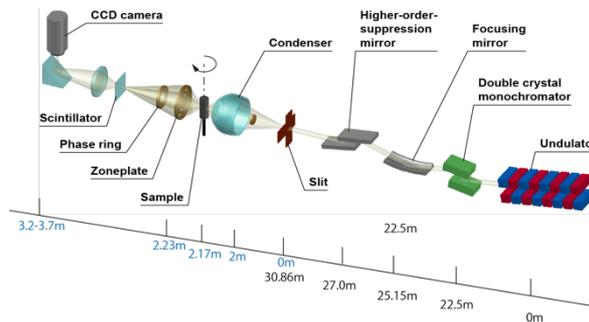


図2 透過/結像型 X 線顕微鏡(TXM, XAFS-CT)の構成図<sup>1,2)</sup>

## (2) パーシステントホモロジーと機械学習を組み合わせた顕微鏡データ解析

パーシステントホモロジーは数学のトポロジーの一つで、不均一性のかたちをマルチスケールかつ定量的に特徴付ける手法である<sup>3)</sup>。近年 タンパク質や急冷金属の構造を座標(点)の集合として捉えてパーシステントホモロジーによる位相的データ解析されている。このアプローチ法を顕微データ(イメージ)に適用し、現状の二次元データから三次元に拡張することで、CFRP のき裂の発生・進展のメカニズム解明に取り組んだ。

具体的には、X 線顕微鏡で測定した 4D/5D 顕微鏡データ に記録された「炭素繊維、マトリックス樹脂、強化微粒子の空間的配置」を パーシステントホモロジーによる位相的データ解析により特徴量を抽出した。試料全体の機械的強度(スカラー量)に対して 機械学習(カーネル法)を行い、亀裂の起点となるトリガーサイトを探索した(図3)<sup>4)</sup>。

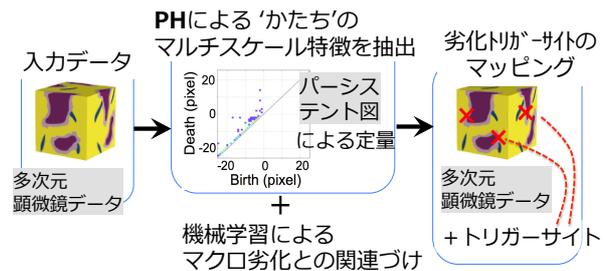


図3 X 線顕微鏡データのパーシステントホモロジーによる位相的データ解析<sup>4)</sup>

## 4. 研究成果

### (1) X 線顕微鏡による 4 次元/5 次元観察技術の高度化

応力印加条件下で亀裂がいつどこで発生するのかをナノスケールで解明する手法開発を進めた。放射光からの硬 X 線ビームを X 線光学素子を用いて拡大結像する結像型 X 線顕微鏡(XAFS-CT)による観察技術を高度化し、高い空間分解能(~50nm)で、応力負荷しながら(in situ)X-CT による観察手法を確立した。CFRP (炭素繊維強化プラスチック)のき裂進展を観察するためには、(a) 炭素繊維、(b) プラスチック、(c) 空気(き裂)という、密度が小さく互いにその値が近い 3 種類の材料を区別する必要がある。そのために、汎用的な吸収コントラストではなく、材料の界面を強調させるための位相イメージングを用いることにより、き裂の進展を明瞭に観察することに成功した。この顕微鏡観察に、異なる応力条件 (Mode I, Mode I+II) 下で X-CT 観察が可能となる in situ 観察技術を組み合わせることで、ナノスケールでのき裂の発生と伝搬の観察を実現した。

確立した観察技術を用いて CFRP におけるき裂の発生、進展の挙動を調べたところ、マイクロ・ナノスケールでのき裂の発生・進展挙動は、マクロスケールから予想される「応力集中している場所からき裂が発生する」といった単純なものではなく、(i)樹脂内でのき裂発生と、(ii)炭素繊維/樹脂界面での剥離、が競合して進行していることが新たに明らかになった。(i),(ii)の 2 つのモードがき裂起点となることは、力学工学や材料力学の様々なモデル計算から予測されていたが、それらをマイクロ・ナノスケールで実際に直接観察できた<sup>5-7)</sup>のは世界初である。

Mode I(引っ張り)応力でのマイクロ・ナノスケールでのき裂の発生・進展挙動は、(i)樹脂内でのき裂発生と、(ii)炭素繊維/樹脂界面での剥離、が競合して進行し、どちらが優位になるかは、炭素繊維の配列に大きく依存していることが新たに判明した。炭素繊維が離散的に配列し炭素繊維間の距離  $d$  が  $d \geq 1/2r$  ( $r$ : 炭素繊維の半径)程度程度の領域では、上記メカニズム(i)でのき裂発生、炭素繊維が密に配列し  $d < 1/2r$  程度の領域では、メカニズム(ii)でのき裂発生が主体となることが初めて判明した (図 4) <sup>6)</sup>。

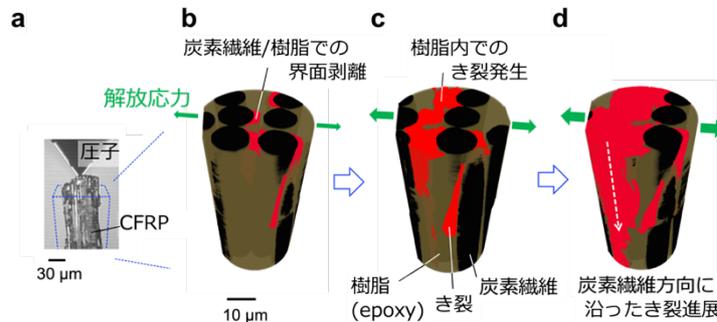


図 4 確立した X 線顕微鏡で観察した応力印加下(Mode I)でのき裂の発生・進展挙動 <sup>6)</sup>

Mode I+Mode II (剪断) の混合モードでの、亀裂の発生・進展のメカニズムを検討したところ、Mode I と同様に、(i)樹脂内でのき裂発生と、(ii)炭素繊維/樹脂界面での剥離、が競合して、き裂発生が発生し伝搬していくメカニズムを、初めてナノスケールで解明した。Mode I との違いは、界面で発生したき裂が樹脂内に進展していく際剪断応力に沿った方向に伝搬していく挙動であり、その結果この応力モードで特徴的な **hackle** と呼ばれるき裂の形成過程を初解明した (図 5) <sup>7)</sup>。

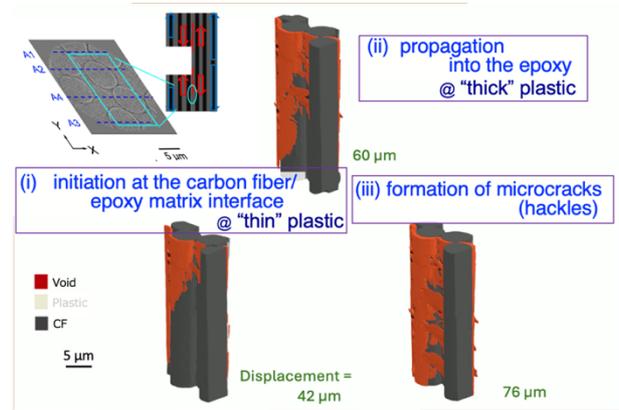


図 5 X 線顕微鏡で観察した応力印加下 (Mode I+II) でのき裂の発生・進展挙動

発生した亀裂が進展してマクロのクラックへと成長するプロセスは、応力モードで異なることが明らかになった。その結果を、有限要素法を用いたマイクロメカニクスによる力学的な定量評価と合わせて検討したところ、局所の応力値だけでなく応力三軸度が大きな支配因子であることが判明し <sup>8)</sup>、CFRP の製造最適化の指針となる重要な情報を得た。

## (2)走査型 X 線顕微鏡(STXM)を用いた観察技術の高度化

CFRP 中の炭素の化学状態をナノスケールでマッピングする技術を確認し、炭素繊維内の黒鉛微結晶の C=C 結合由来の  $\pi$  軌道の配向分布を可視化することに成功した。CFRP は配向性の高い材料であり、炭素繊維内の黒鉛微結晶の C=C 結合由来の  $\pi$  軌道の配向分布を定量化するために、回転試料台を用いた観察技術を確認した。

そして、き裂進展に重要となることが判明した「炭素繊維/樹脂界面」の理解のためにフェノキシ樹脂とナイロン 12 を混合したポリマーアロイについて、種類の異なる相溶化剤を添加し、走査型 X 線顕微鏡(STXM)を用いて炭素の化学状態をナノスケールでマッピングすることにより、その微細構造の変化を明らかにした <sup>9)</sup>。観察されて化学状態の不均一はマクロの機械的特性に大きな影響を持つと考えられる。これは CFRP の炭素繊維と樹脂の界面の接着挙動を制御するために重要な知見を与える。

### (3)顕微鏡ビッグデータの応用数学による解析

本課題で達成したマルチスケールの観察技術により、(i)樹脂内でのき裂発生と、(ii)炭素繊維/樹脂界面での剥離、が競合して、亀裂の発生を決めているというナノスケールでのメカニズムが解明された。さらに二つの競合するメカニズムを決める因子として、炭素繊維の配列や、亀裂の‘かたち’が重要であることが解明された。その定量化のために、パーシステントホモロジーを用いたイメージデータの位相的データ解析法を開発し、亀裂の‘かたち’を記述する特徴量を抽出してトリガーサイト (trigger site) の解明につなげた。

具体的には、従来 X 線顕微鏡の画像データについて、パーシステントホモロジーの解析の対象が二次元データに限られていた課題を解決し、4D/5D データに適用できるように解析アルゴリズムの高度化と計算プログラムの開発を実施した。酸化物の三次元顕微鏡データを用いて、その解析が可能であることを実証した<sup>10)</sup>。同時に、人間が 4D/5D データを理解するためのツールとして、X 線顕微鏡で得られた多次元のビッグデータを VR(仮想空間)技術を用いて可視化することに取り組み、その可視化のためのプログラム・システム開発を行った<sup>11)</sup>。

当初予定していた耐環境性セラミックコーティング (EBC) の観察については、試料の製造が困難であることが判明し(2020 年 5 月頃)、代替として鉄系酸化物の還元過程の X 線顕微鏡観察に取り組むこととした。開発した X 線顕微鏡技術による応用展開として、鉄系複合酸化物 (Fe-Ca-O の複合酸化物) の還元に伴う鉄の化学状態の変化を硬 X 線分光顕微鏡で可視化し、得られたギガバイトのビッグデータの解析技術の開発を行った<sup>12)</sup>。

これにより、4次元のビッグデータ(空間 3D+時間)と、応用数学(パーシステントホモロジー)とを用いた位相的データ解析を組みあわせ、破壊につながるトリガーサイト (trigger site) を特定するための方法論を確立することができた (特許出願中、詳細は後日報告)。

#### <引用文献>

- [1] M. Kimura, Y. Takeichi, T. Watanabe, Y. Niwa, and K. i. Kimijima: The Chemical Record **19**, 1462 (2019).
- [2] Y. Niwa, Y. Takeichi, T. Watanabe, and M. Kimura: AIP Conference Proceedings **2054**, 050003 (2019).
- [3] I. Obayashi, Y. Hiraoka, and M. Kimura: Journal of Applied and Computational Topology **1**, 421 (2018).
- [4] M. Kimura, I. Obayashi, Y. Takeichi, R. Murao, and Y. Hiraoka: Scientific Reports **8**, 3553 (2018).
- [5] M. Kimura, T. Watanabe, Y. Takeichi, and Y. Niwa: Scientific Reports **9**, 19300 (2019).
- [6] T. Watanabe, Y. Takeichi, Y. Niwa, M. Hojo, and M. Kimura: Composites Science and Technology **197**, 108244 (2020).
- [7] M. Kimura, T. Watanabe, S. Oshima, Y. Takeichi, Y. Niwa, Y. Seryo, and M. Hojo: Composites Science and Technology **230**, 109332 (2022).
- [8] S. Oshima, Y. Seryo, M. Kimura, and M. Hojo: Composites Science and Technology (submitted) (2024).
- [9] T. Harano, T. Yoshioka, S. I. Sakurai, H. Ohara, S. Origuchi, J. Mukudai, Y. Takeichi, S. Yamashita, H. Takahashi, H. Yoshino, K. Adachi, and M. Kimura: AIP Conf. Proc. **2990**, 020013 (2023).
- [10] I. Obayashi and M. Kimura: JSIAM Letters **14**, 151 (2022).
- [11] H. Igarashi, D. Kido, Y. Ishii, A. Okamoto, and M. Kimura: Journal of Synchrotron Radiation (submitted) (2024).
- [12] Y. Ito, Y. Takeichi, Y. Niwa, and M. Kimura: ISIJ International (submitted) (2024).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計19件（うち査読付論文 19件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 17件）

1. 著者名 Masao Kimura, Toshiki Watanabe, Sota Oshima, Yasuo Takeichi, Yoshihiro Niwa, Yuji Seryo, Masaki Hojo	4. 巻 230
2. 論文標題 Nanoscale in situ observation of damage formation in carbon fiber/epoxy composites under mixed-mode loading using synchrotron radiation X-ray computed tomography	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Composites Science and Technology	6. 最初と最後の頁 109332
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.compscitech.2022.109332	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Ippei Obayashi and Masao Kimura	4. 巻 14
2. 論文標題 Persistent homology analysis with nonnegative matrix factorization for 3D voxel data of iron ore sinters	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 151-154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.151	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Watanabe Toshiki, Takeichi Yasuo, Niwa Yasuhiro, Hojo Masaki, Kimura Masao	4. 巻 197
2. 論文標題 Nanoscale in situ observations of crack initiation and propagation in carbon fiber/epoxy composites using synchrotron radiation X-ray computed tomography	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Composites Science and Technology	6. 最初と最後の頁 108244 ~ 108244
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.compscitech.2020.108244	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Suzuki Anna, Miyazawa Miyuki, Minto James M., Tsuji Takeshi, Obayashi Ippei, Hiraoka Yasuaki, Ito Takatoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Flow estimation solely from image data through persistent homology analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 17948
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-97222-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 木村正雄、渡邊椋樹、武市泰男、丹羽尉博、原野貴幸、村尾玲子	4. 巻 26
2. 論文標題 放射光X線顕微鏡を用いた炭素繊維強化プラスチック (CFRP) の計測 -き裂進展の非破壊観察、および、炭素の化学状態観察-	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 検査技術	6. 最初と最後の頁 56-61
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kimura, M., Watanabe, T., Takeichi, Y., Niwa, Y.	4. 巻 9
2. 論文標題 Nanosopic origin of cracks in carbon fibre-reinforced plastic composites	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Sci. Rep.	6. 最初と最後の頁 19300
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-55904-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Harano, T., Takeichi, Y., Usui, M., Arai, Y., Murao, R., Negi, N., Kimura, M.	4. 巻 10
2. 論文標題 Observation of Distribution of $\pi$ -Orbital-Oriented Domains in PAN- and Pitch-Based Carbon Fibers Using Scanning Transmission X-ray Microscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Sciences	6. 最初と最後の頁 4836
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/app10144836	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kimura Masao, Watanabe Toshiki, Oshima Sota, Takeichi Yasuo, Niwa Yasuhiro, Kitazawa Rumi, Ishii Tomohiro, Seryo Yuji, Hojo Masaki	4. 巻 2990
2. 論文標題 Nano-to macroscale In Situ observation of microcrack formation in carbon fiber-reinforced plastic under loading using synchrotron transmission X-ray microscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 AIP Conf. Seri.	6. 最初と最後の頁 20008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0169168	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Minamitani Emi, Shiga Takuma, Kashiwagi Makoto, Obayashi Ippei	4. 巻 156
2. 論文標題 Topological descriptor of thermal conductivity in amorphous Si	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 244502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0093441	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Obayashi Ippei, Nakamura Takenobu, Hiraoka Yasuaki	4. 巻 91
2. 論文標題 Persistent Homology Analysis for Materials Research and Persistent Homology Software: HomCloud	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 91013
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.091013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Obayashi Ippei, Nakamura Takenobu, Hiraoka Yasuaki	4. 巻 91
2. 論文標題 Persistent Homology Analysis for Materials Research and Persistent Homology Software: HomCloud	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 91013
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.091013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Minamitani Emi, Shiga Takuma, Kashiwagi Makoto, Obayashi Ippei	4. 巻 40
2. 論文標題 Relationship between local coordinates and thermal conductivity in amorphous carbon	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Vacuum Science & Technology A	6. 最初と最後の頁 33408
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1116/6.0001744	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Harano Takayuki, Yoshioka Takahiro, Sakurai Shin' ichiro, Ohara Hiroaki, Origuchi Sakura, Mukudai Jun, Takeichi Yasuo, Yamashita Shohei, Takahashi Hiroyuki, Yoshino Hideaki, Adachi Kyoko, Kimura Masao	4. 巻 2990
2. 論文標題 Effect of the compatibilizer on the morphology of a phenoxy-resin/nylon-12 polymer alloy: A scanning transmission x-ray microscopy study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 AIP Conf. Seri.	6. 最初と最後の頁 20013
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0168123	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Obayashi Ippei	4. 巻 7
2. 論文標題 Stable volumes for persistent homology	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied and Computational Topology	6. 最初と最後の頁 671 ~ 706
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s41468-023-00119-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Obayashi Ippei, Yoshiwaki Michio	4. 巻 70
2. 論文標題 Field Choice Problem in Persistent Homology	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Discrete & Computational Geometry	6. 最初と最後の頁 645 ~ 670
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00454-023-00544-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Minamitani Emi, Obayashi Ippei, Shimizu Koji, Watanabe Satoshi	4. 巻 159
2. 論文標題 Persistent homology-based descriptor for machine-learning potential of amorphous structures	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 84101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0159349	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Asashiba Hideto, Escolar Emerson G., Nakashima Ken, Yoshiwaki Michio	4. 巻 6-7
2. 論文標題 On approximation of 2D persistence modules by interval-decomposables	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computational Algebra	6. 最初と最後の頁 100007 ~ 100007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jaca.2023.100007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Asashiba Hideto, Escolar Emerson G., Nakashima Ken, Yoshiwaki Michio	4. 巻 227
2. 論文標題 Approximation by interval-decomposables and interval resolutions of persistence modules	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Pure and Applied Algebra	6. 最初と最後の頁 107397 ~ 107397
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpaa.2023.107397	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Asashiba Hideto, Buchet Micka?l, Escolar Emerson G., Nakashima Ken, Yoshiwaki Michio	4. 巻 105-106
2. 論文標題 On interval decomposability of 2D persistence modules	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Geometry	6. 最初と最後の頁 101879 ~ 101879
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.comgeo.2022.101879	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計57件 (うち招待講演 18件 / うち国際学会 15件)

1. 発表者名 瀬領勇司, 大島草太, 宮木孝輔, 木村正雄, 渡邊稔樹, 北條正樹, 西川雅章, 松田直樹
2. 発表標題 CFRPの微視的構造がき裂先端近傍の三軸応力状態に及ぼす影響
3. 学会等名 日本複合材料会議 (JCCM-12)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Seryo, Sota Oshima, Kosuke Miyaki, Masao Kimura, Toshiki Watanabe, Masaki Hojo, Masaaki Nishikawa, and Naoki Matsuda
2. 発表標題 Mesoscopic triaxial stress state analysis to explain the influence of interfiber distance on microscopic damage at the crack tip in high-resolution CT observation of CFRP
3. 学会等名 1st Virtual ESIS TC4 Conference on Fracture of Polymers, Composites and Adhesives (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大林一平, 木村正雄
2. 発表標題 焼結鈳3次元CT画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析
3. 学会等名 日本応用数理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masao Kimura, Toshiki Watanabe, Sota Oshima, Yasuo Takeichi, Yasuhiro Niwa, Yuji Seryo, Masaki Hojo
2. 発表標題 Nanoscale in situ observation of microcrack formation in carbon fiber-reinforced plastic (CFRP) under loading using synchrotron TXM
3. 学会等名 15th International Conference on X-ray Microscopy (XRM2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takayuki Harano, Takahiro Yoshioka, Shinichiro Sakurai, Hiroaki Ohara, Sakura Origuchi, Jun Mukudai, Yasuo Takeichi, Shohei Yamashita, Hiroyuki Takahashi, Hideaki Yoshino, Kyoko Adachi, Masao Kimura
2. 発表標題 Effect of the compatibilizer on the morphology of a phenoxy-resin/nylon-12 polymer alloy: A scanning transmission X-ray microscopy study
3. 学会等名 15th International Conference on X-ray Microscopy (XRM2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shohei Yamashita, Jumpei Yahiro, Daisuke Wakabayashi, Yasuo Takeichi, Masao Kimura
2. 発表標題 New Design of a Non-atmospheric Transport System for compact STXM at Photon Factory
3. 学会等名 15th International Conference on X-ray Microscopy (XRM2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 焼結鈳3次元CT画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析
3. 学会等名 RIMS Workshop Mathematical methods for the studies of flow, shape, and dynamics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 Volume-optima cycles and stable volumes for persistent homology
3. 学会等名 RIMS 共同研究 一般位相幾何学の動向と諸分野との連携 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 Stable volumes for persistent homology
3. 学会等名 Einstein Semester on Geometric and Topological Structure of Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大林 一平, 木村 正雄
2. 発表標題 焼結鈳3次元CT画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 原野貴幸、武市泰男、大東琢治、信藤大祐、根本英治、若林大佑、山下翔平、村尾玲子、木村正雄
2. 発表標題 cSTXMでの試料回転ホルダーの開発と炭素 軌道配向イメージング
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会 放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山下翔平、八尋淳平、藪田ひかる、癸生川陽子、高橋嘉夫、若林大佑、武市泰男、木村正雄
2. 発表標題 PF BL-19Aにおける大気非暴露STXMの開発
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会 放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 木村正雄, 渡邊稔樹, 石井友弘, 丹羽尉博, 武市泰男
2. 発表標題 放射光X-CT顕微鏡によるCFRPの亀裂進展観察 II
3. 学会等名 日本複合材料会議 (JCCM-12)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 木村正雄、渡邊稔樹、内山智貴、山本健太郎、君島堅一、武市泰男、丹羽尉博、内本喜晴
2. 発表標題 X線顕微鏡を中心とした航空機材料の機能マッピング
3. 学会等名 2020量子ビームサイエンスフェスタ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 木村正雄
2. 発表標題 放射光を用いた材料研究-特にX線顕微鏡を用いた航空機用構造材料(CFRP, EBC)の観察を中心に-
3. 学会等名 第2回 次世代材料技術動向研究会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木村正雄
2. 発表標題 PFでのXAFS高度化、マルチスケール顕微法、データ集積・解析
3. 学会等名 PF研究会 「XAFS・X線顕微鏡分光分析分野でのIMSS, PF戦略的利用に関する研究会」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡邊稔樹、武市泰男、丹羽尉博、木村正雄
2. 発表標題 高分解能 CT を用いた開口またはせん断応力下における CFRP 内のき裂進展の in situ 観察
3. 学会等名 第33回日本放射光学会年会 放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 木村正雄
2. 発表標題 X線顕微鏡を用いた材料機能のheterogeneityの観察とパーシステントホモロジーによる解析
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 A Framework for Machine Learning with Persistent Homology
3. 学会等名 POSTECH MINDS Seminar Series on Data Science, Machine Learning and Scientific Computing (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山下 翔平, 若林 大佑, 武市 泰男, 田中 宏和, 豊島 章雄, 木村 正雄
2. 発表標題 フォトンファクトリーにおける軟X線顕微分光ビームラインの開発と特殊なサンプル分析に向けた装置の高度化
3. 学会等名 Optics & Photonics Japan 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 木村 正雄
2. 発表標題 X線顕微鏡による焼結鈳のheterogeneity観察と(big data)解析
3. 学会等名 日本鉄鋼協会I型研究会 「高品質焼結鈳の鈳物組織マルチスケール評価」第4回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山下 翔平、若林 大佑、武市 泰男、木村 正雄
2. 発表標題 軟 X線顕微分光によるマルチモード分析
3. 学会等名 第40回PFシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大林一平, 木村正雄
2. 発表標題 焼結鈳3次元CT画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析
3. 学会等名 日本応用数理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masao Kimura, Toshiki Watanabe, Sota Oshima, Yasuo Takeichi, Yasuhiro Niwa, Yuji Seryo, Masaki Hojo
2. 発表標題 Nanoscale in situ observation of microcrack formation in carbon fiber-reinforced plastic (CFRP) under loading using synchrotron TXM
3. 学会等名 15th International Conference on X-ray Microscopy (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takayuki Harano, Takahiro Yoshioka, Shinichiro Sakurai, Hiroaki Ohara, Sakura Origuchi, Jun Mukudai, Yasuo Takeichi, Shohei Yamashita, Hiroyuki Takahashi, Hideaki Yoshino, Kyoko Adachi, Masao Kimura
2. 発表標題 Effect of the compatibilizer on the morphology of a phenoxy-resin/nylon-12 polymer alloy: A scanning transmission X-ray microscopy study
3. 学会等名 15th International Conference on X-ray Microscopy (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shohei Yamashita, Jumpei Yahiro, Daisuke Wakabayashi, Yasuo Takeichi, Masao Kimura
2. 発表標題 New Design of a Non-atmospheric Transport System for compact STXM at Photon Factory
3. 学会等名 15th International Conference on X-ray Microscopy (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 位相的データ解析 - 理論, ソフトウェア, 応用
3. 学会等名 Topology Meets Data (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 パーシステントホモロジーによるデータ解析 - 理論, 応用, ソフトウェア
3. 学会等名 ST数学関連3領域連携WS「情報科学と拓く新しい数理科学」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 Stable volumes for persistent homology
3. 学会等名 TDA Week (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 3D Data Analysis of X-Ray CT Images with Persistent Homology and Nonnegative Matrix Factorization. Perspectives on Artificial Intelligence and Machine Learning in Materials Science
3. 学会等名 Perspectives on Artificial Intelligence and Machine Learning in Materials Science. (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 3D data analysis of X-Ray CT images with persistent homology and NMF
3. 学会等名 The 2nd POSTECH MINDS Workshop on Topological Data
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 アモルファス物質の熱伝導率のパーシステントホモロジーによる解析
3. 学会等名 統計関連学会連合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 Stable volumes for persistent homology
3. 学会等名 MIMS/CMMA トポロジーとその応用融合研究セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大林一平, 南谷 英美
2. 発表標題 パーシステンス図を記述子としたアモルファスの機械学習ポテンシャルについて
3. 学会等名 日本応用数理学会第19回研究部会連合発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ippei Obayashi
2. 発表標題 Stable volumes for persistent homology
3. 学会等名 AATRN online seminar
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 PHソフトウェアHomCloudの最新状況と応用
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大林 一平, 木村 正雄
2. 発表標題 焼結鈳3次元CT画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 パーシステントホモロジーによるデータ解析ソフトウェアHomCloud
3. 学会等名 マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究 - 位相的データ解析の理論と応用
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ippei Obayashi.
2. 発表標題 A data analysis framework with linear models and persistent homology
3. 学会等名 TDA Week 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大林一平
2. 発表標題 パーシステントホモロジーの材料科学への応用
3. 学会等名 ワークショップ「データサイエンスと幾何学の物性への応用」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大林一平, 南谷 英美
2. 発表標題 パーシステンス図を記述子としたアモルファスの機械学習ポテンシャルについて
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 木村正雄
2. 発表標題 X線顕微法で計測された多次元データへのパーシステントホモロジーの応用
3. 学会等名 Material Meets Data (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 木村正雄, 城戸大貴, 渡邊稔樹, 石現, 丹羽尉博, 内本喜晴
2. 発表標題 5次元データ可視化システムの開発
3. 学会等名 第37回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 山下翔平、武市泰男、木村正雄
2. 発表標題 PF 軟X線顕微分光ビームライン (BL-19A/B) の高度化と応用研究
3. 学会等名 第37回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Masao Kimura, Ippei Obayashi, Daiki Kido, Yasuhiro Niwa, Toshiki Watanabe, Yasuo Takeichi, Xichan Gao, Kazuto Akagi, Yasuaki Hiraoka
2. 発表標題 Finding “trigger sites” of reactions among the heterogeneity of materials by using X-ray microscopy and persistent homology analysis
3. 学会等名 MRM2023/IUMRS-ICA2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masao Kimura, Ippei Obayashi, Daiki Kido, Yasuhiro Niwa, Xichan Gao, Kazuto Akagi
2. 発表標題 Finding “trigger sites” of reactions among heterogeneous materials from X-ray microscopic big data using persistent homology
3. 学会等名 TMS 2024, 153rd Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 木村正雄、城戸大貴、石田貴也、西川琢斗、杉村悠樹、稲田康宏、伊藤優成、武市泰男、Mayrene Uy、丹羽尉博、石井友弘、山下翔平、渡邊稔樹、吉田一貴、吉田健太、岡本敦
2. 発表標題 マルチスケールX線顕微法のデジタルツイン解析による高度化
3. 学会等名 2023年度量子ビームサイエンスフェスタ
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 山下翔平、若林大佑、武市泰男、木村正雄
2. 発表標題 軟X線顕微分光のマルチモード分析に向けた取り組み
3. 学会等名 2023年度量子ビームサイエンスフェスタ
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Hideto Asashiba, Emerson G. Escobar, Ken Nakashima, and Michio Yoshiwaki
2. 発表標題 Approximation by interval-decomposables and interval resolutions of 2D persistence modules
3. 学会等名 TDA Week 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中島 健
2. 発表標題 連結PDの理論とその実用化へ向けた取り組み
3. 学会等名 杉本代数セミナー（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中島 健
2. 発表標題 連結PDで見る秩序構造の変化
3. 学会等名 TDA-MI workshop 2022（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中島 健
2. 発表標題 区間分解による近似の理論とその実践
3. 学会等名 岡山応用数学セミナー（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hideto Asashiba, Emerson G. Escolar, Ken Nakashima, and Michio Yoshiwaki
2. 発表標題 Approximation by interval-decomposables and interval resolutions of 2D persistence modules
3. 学会等名 日本数学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hideto Asashiba, Emerson G. Escolar, Ken Nakashima, and Michio Yoshiwaki
2. 発表標題 可換梯子型パーシステンス加群の表現論的区間分解の計算法
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hideto Asashiba, Emerson G. Escolar, Ken Nakashima, and Michio Yoshiwaki
2. 発表標題 Approximation by interval-decomposables and interval resolutions of persistence modules
3. 学会等名 第54回環論および表現論シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuaki Hiraoka, Ken Nakashima, Ippei Obayashi, and Chenguang Xu
2. 発表標題 Computing interval decompositions/approximations for commutative ladder persistent homology 日本応用数理学会 第18回 研究部 会連合発表会, オンライン, Mar. 9, 2022
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中島 健
2. 発表標題 区間近似による2次元パーシステント図の描出とその応用
3. 学会等名 若手数学者交流会
4. 発表年 2022年

## 〔図書〕 計1件

1. 著者名 池 祐一、E.G. エスカラ、大林 一平、鍛冶 静雄	4. 発行年 2023年
2. 出版社 サイエンス社	5. 総ページ数 272
3. 書名 位相的データ解析から構造発見へ：パーシステントホモロジーを中心に	

## 〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 炭素繊維強化樹脂(CFRP)の炭素繊維配置の定量評価方法	発明者 木村正雄、城戸大貴、GAO Xichan, 赤木和人	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、手続き中	出願年 2024年	国内・外国の別 国内

## 〔取得〕 計0件

## 〔その他〕

-

## 6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	丹羽 尉博 (Niwa Yasuhiro) (00743709)	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・助教 (82118)	
研究分担者	大林 一平 (Obyashi Ippei) (30583455)	岡山大学・AI・数理データサイエンスセンター・教授 (15301)	
研究分担者	武市 泰男 (Takeichi Yasuo) (40636461)	大阪大学・大学院工学研究科・助教 (14401)	
研究分担者	渡邊 稔樹 (Watanabe Toshiki) (90851428)	京都大学・人間・環境学研究科・特定助教 (14301)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	中島 健  (Nakashima Ken)  (60935401)	島根大学・学術研究院機能強化推進学系・助教    (15201)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関