

変分ベイズ法にもとづくエネルギー分散型 X 線分光法の逆推定方式 Inverse Estimation for Energy Dispersive X-ray Spectroscopy Based on Variational Bayesian Approach

浅原 彰規[†] 刑部 好弘[†] 山本 光哉[†] 森田 秀和[†]
Akinori Asahara Yoshihiro Osakabe Mitsuya Yamamoto Hidekazu Morita

1. はじめに

材料科学分野において「マテリアルズ・インフォマティクス」という IT を用いた統計処理による新材料開発の効率化が活発に行われている[1]。その代表的な取り組みの一つは、機械学習分野で発展した手法を実験データに適用して、従来よりも精緻な情報を得るものである。

本報告では、変分ベイズ法を用いた電子顕微鏡等の EDS(Energy Dispersive X-ray Spectroscopy: エネルギー分散型 X 線分光法[2]) 技術の分析手法を提案する。EDS は、電子線や X 線による照射で発生する X 線のエネルギーと信号量をもとに試料や異物の元素情報を取得する手法である。特に微小領域や微小異物の元素分析に有効な手法であり、金属をはじめとする無機化合物の分析や、断面加工を施した金属層の厚さや化合物層の確認などに利用される。

従来、EDS の X 線を計測した周波数スペクトル分布から元素を自動特定するために、分布のピークを検出し、そのピーク位置と強度とを既知の元素固有のスペクトルデータ(スペクトルライブラリ)と照合することで、物質を特定する。この処理ではピーク位置の精度が低いと物質の特定を誤ってしまうため、ノイズに頑健なピーク抽出が必要となるなど様々なアルゴリズムを組み合わせて精度を上げることになる。

一方、提案手法ではピーク抽出を経由せずに物質特定を行う。本手法では、X 線を表す粒子を仮定し、その挙動をベイズ統計的にモデル化した振る舞いの逆推定により物質の含有率を求める。この推定の事前分布に滑らかさを導入することで、シンプルな処理のみでノイズがあっても高精度な推論ができるのである。

2. 問題設定と関連研究

2.1 EDS の逆推定問題

EDS では、電子線照射により試料中の原子から内殻電子が弾出され、欠損を補うため外殻電子が降下する際に固有の X 線を放出する。

検出器はこの X 線を収集し、エネルギースペクトルとして記録する。図 1 に EDS で取得されるスペクトル分布の例を示す。各元素は固有のエネルギーピークを有するため、図中 Pb や S のような単元素の場合は、ピーク位置と強度を評価することによりその元素を同定できる。図中 PbS のような単元素でない場合は、各元素、図では Pb と S のスペクトル分布の重ねあわせが得られる。

逆推定とはスペクトル分布を元素ごとに分解することに相当する。スペクトル分布はエネルギーに対する輝度値の

[†](株)日立製作所 Hitachi Ltd.

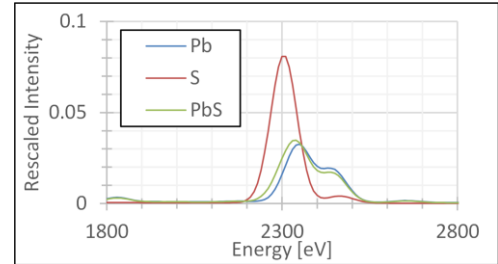


図 1 EDS スペクトルの例(PbS)

分布であるが、X 線のエネルギーは周波数に比例しており、実際に観測される周波数は離散的であるので、元素 i のスペクトルを k 番目の周波数に対応する輝度値列 $\{\eta_{ik}\}$ のように数列として記述できる。すると EDS でえられるスペクトル分布データ S_k は試料の元素の構成比 w_i をもちいて

$$S_k = \sum_i w_i \eta_{ik}$$

のように行列の積で記述できる。計測データから試料の元素分布を得るには、この重ね合わせを逆算し、適切な w_i を求めねばならない。

2.2 従来の逆推定の課題

上述の問題設定は行列 η_{ik} をベクトル $\{w_i\}$ に乗算する形になっているので、 η_{ik} に関する逆行列が計算できれば逆推定ができることになる。ただし、 η_{ik} は一般には正方行列ではないので逆行列は計算できず、特異値分解(SVD)[3][4]を用いて計算される疑似逆行列を用いるなどせねばならない。しかしこの計算では計測のノイズなどは勘案されておらず、精度よく逆推定ができるとは考えにくい。

そこで一般的な EDS スペクトルから元素を自動特定するアルゴリズムでは、生データに対して背景除去やノイズフィルタリングなどの前処理や信号の正規化を適用する。そのうえでピーク検出処理により局所的な極大値を抽出し、各ピークのエネルギー位置と強度を既知の元素固有エネルギーリストと照合することで、物質を特定する。この際、重なりや干渉が疑われる場合には、多峰フィッティングや非線形最小二乗法などの統計的手法を適用し、各ピークの寄与を分離し、ピークの信頼度評価や閾値処理により偽陽性を排除するなどして精度を向上する。

これらの従来の EDS は、例えばスペクトルデータにノイズが入っている場合など、ピークを抽出する際に誤検知をしてしまったり、ピーク位置に誤差を生じてしまってマッチングが正しくできなかつたりするなどしてしまう。

そこで本研究では、すべてを確率的事象であるとしてモデル化し、確率推定の方法で物質推定を行うアプローチを

とる。この方式では、従来はピーク位置の検出とマッチングの二段階で行っていた処理を、一度の処理で実行するようになっている。結果的にピーク抽出がノイズに弱いという問題は発生せず、また、ノイズの発生も統計学的に扱って妥当な推定結果を出すことができる。これにより、よりシンプルな処理で処理ができるものと期待される。

3. 提案手法

3.1 確率的推定のモデル

提案手法では EDS のスペクトルデータからその起源を逆推定するために確率論的なモデルを立てて、最尤推定やベイズ推定[6]にもとづき確率論的な逆推定を行う。

EDS では、照射された電子線は試料と相互作用する。そこから放射された X 線が検知され、その輝度の分布がスペクトル分布となる。X 線は、量子力学的には光子と呼ばれる粒子であり、粒子の数がその強度に想到する。光子の振る舞いは量子力学の不確定性に由来するランダムさがあるが、それは量子力学の波動関数に由来する確率分布にしたがっている。確率分布にもとづき光子の検出頻度の分布が決まり、それは X 線の輝度分布と等しい。

そこで提案方式[7]では、放射から観測までの過程を確率的モデルで表現し確率論的に試料のパラメータを推定するアプローチをとる。EDS の過程は、試料への電子線が入射し、元素との相互作用を経て放射された X 線が検出器で検出される過程をたどる。

最初のステップでは、試料へ入射した電子線と元素が相互作用する。この過程を入射粒子が試料に含まれている多数の元素の中から一つを選択して相互作用をする過程とする。このとき、選択された元素が i である確率は、その含有率 r_i に比例すると想定され、すなわち、含有率したがるランダムサンプリングとみなせる。以降ではその選択確率を $\pi_i = \{\pi_0, \dots, \pi_L\}$ と記述する。

次に、放射された X 線検出の過程であるが、これも乱択の過程とみなすことができる。すなわち、元素 i によって放射された粒子は、整数 k でラベル付けされるエネルギーのうち一つをランダムに選択するという過程を経てスペクトルパターンとして検出される。実際に観測される周波数を $\{q_k\}$ とおくと、 q_k の選択確率は元素ごとのスペクトルパターンの強度 $\{\eta_{ik}\}$ に比例する。つまり EDS の過程は、2 つの乱択のプロセスの組み合わせとしてモデル化できる。

ベイズ統計にもとづくと、元素 i が選択されたときの周波数 q_k ごとの検出確率は条件付確率 $P(q_k|i)$ と記述できる。これを求めるには検出された粒子の q_k が既知の場合の i の選択確率 $P(i|q_k)$ が必要であるがベイズの定理により $P(q_k|i)$ を用いて簡単に記述できる。

$$P(i|q_k) = \frac{P(q_k|i)P(i)}{P(q_k)}$$

ここで $P(i)$ は元素選択の事前確率、 $P(q_k)$ は波数に関する事前確率である。 $P(i)$ に関する事前情報がないとすれば一様分布を設定でき、また $P(q_k)$ 元素に依存しない定数であり、規格化定数とみなせる。その場合は事後確率分布は $P(q_k|i) = \eta_{ik}$ を定数倍したものになる。

このように、量子力学的な波動として現象を扱うと複雑な過程を、粒子としての性質に着目すると単純化でき、こ

の粒子性に着目したモデルを多粒子が検出された場合に拡張することで、単純な形で定式化できる。

これを多数の粒子の散乱に拡張すると、スペクトルパターンの輝度値は観測された粒子数に対応する。 $0, \dots, K$ でラベル付けされる区画から一つを確率的に選択する試行を多数回繰り返したとき、各区画の選択される回数 $\{n_k\}$ についての確率分布は多項分布(以降、 $\text{Mul}(\cdot)$ と書く)となる。この多項分布のパラメータは $\sum_i \pi_i \eta_{ik}$ であるので、以下のようになる。

$$P(\{n_k\}|\{\pi_i\}) = \text{Mul}\left(\{n_k\}; \sum_i \eta_{ik} \pi_i\right)$$

この確率分布は、元素の構成比が $\{\pi_i\}$ で記述されているときにスペクトルパターン $\{n_k\}$ が得られる確率を意味する。これにベイズの定理を適用し、事後分布を求めると

$$P(\{\pi_i\}|\{n_k\}) = \frac{P(\{n_k\}|\{\pi_i\})P(\pi_i)}{P(\{n_k\})}$$

と書ける。

$P(\{n_k\})$ は $\{\pi_i\}$ に依存しない規格化定数に相当し、また、 $P(\{\pi_i\})$ については事前分布であり、事前確率の前提のおき方によって任意の関数になりうる。

3.2 EM アルゴリズムにもとづく最尤推定

前述の問題設定において事前分布を無情報な一様分布と設定したときの元素構成比の推定は単に $P(\{n_k\}|\{\pi_i\})$ を最大化する最尤推定とみなせる。最尤推定では一般的に、計算の簡単のため対数尤度を最大化する。

$$\ln P(\{\pi_i\}|\{n_k\}) = \ln N! + \sum_k n_k \ln \sum_l \pi_l \eta_{lk} - \sum_k \ln n_k$$

これを最大化する $\{\pi_i\}$ を求めればよいが、 $\{\pi_i\}$ は選択確率なので $\sum_i \pi_i = 1$ を満たさねばならない。そこで Lagrange の未定乗数法を用いて制約つきで最大化する。すると、未定乗 β を用いて

$$\frac{\partial}{\partial \pi_l} \ln P(\{\pi_i\}|\{n_k\}) = \frac{\partial}{\partial \pi_l} \sum_k n_k \ln \sum_j \pi_j \eta_{jk} - \beta = 0$$

を満たす $\{\pi_i\}$ を求めることになる。簡単な計算により β は検知された総粒子数 N に相当すると求まるので

$$\sum_k \frac{n_k \eta_{jk}}{\sum_l \pi_l \eta_{lk}} = N$$

を満たす $\{\pi_i\}$ を求めればよい。

これを EM アルゴリズムと呼ばれる数値計算的な反復法によって解く。まず

$$\frac{\pi_j \eta_{jk}}{\sum_l \pi_l \eta_{lk}} = \frac{P(q_k|j)P(j)}{P(q_k)} = P(j|q_k)$$

であることに着目する。これは周波数 q_k の粒子が観測されたとき、それが元素 j から放射されたものである確率を意味する。

このとき q_k の粒子が $\{n_k\}$ 回観測されたとすると、 j が放射した光子の粒子数の期待値は $m_j = \sum_k n_k P(j|q_k)$ と記述できる。また、 $P(j)$ は π_i と置き換えられる。すると、

$$\frac{\sum_k n_k \eta_{jk}}{\sum_l \pi_l \eta_{lk}} = \frac{m_j}{\pi_j} = N$$

となる。したがって、

$$\pi_j = \frac{m_j}{N} \quad m_j = \sum_k \frac{n_k \pi_j \eta_{jk}}{\sum_l \pi_l \eta_{lk}}$$

粒子数の期待値 m_j を求める E ステップと、そのときの最適なパラメータ $\{\pi_j\}$ をもとめる M ステップを交互に繰り返して収束させれば、最尤推定ができる。以降では、これを EM 法とよぶ。

3.3 変分ベイズ法

最尤推定ではなく事後確率最大化を変分ベイズ法(VB 法: Variational Bayes 法)にもとづき実行する方法も考えられる。VB 法は、事後確率最大化を近似的に解く方法としてよく知られている方法である。VB 法では確率分布に近似式を定義し、それが真の分布に収束するように、真の分布と近似分布のカルバック・ライブラー情報量を指標としてそれを最小化するように繰り返し演算する。

確率分布の近似式を $\tilde{P}(\theta), \tilde{P}(Z)$ としたとき VB 法の更新式は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \ln \tilde{P}(\theta) &= E_Z (\ln P(\theta, Z)) + const \\ \ln \tilde{P}(Z) &= E_\theta (\ln P(\theta, Z)) + const, \end{aligned}$$

ここで $E_x(\cdot)$ は x に関する期待値、 θ が確率分布のパラメータ、 Z が観測されていない変数を示す。

これをもとに EDS の VB 法の更新式は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \ln \tilde{P}(\{\pi_i\}) &= E_{z_n} (\ln P(\{\pi_i\}, \{z_n\}, \{n_k\})) + const \quad (1) \\ \ln \tilde{P}(\{z_n\}) &= E_{\{\pi_i\}} (\ln P(\{\pi_i\}, \{z_n\}, \{n_k\})) + const \quad (2) \end{aligned}$$

ここで、 $\{z_n\}$ は n 番目の光子が i 番目の元素由来であれば $z_{ni} = 1$ 、そうでなければ $z_{ni} = 0$ となるベクトルである。

この更新式に現れる $\ln P(\{\pi_i\}, \{z_n\}, \{n_k\})$ は以下の 3 つの項に分解できる。

$$\begin{aligned} \ln P(\{\pi_i\}, \{q_n\}, \{z_n\}) \\ = \ln P(\{\pi_i\}) + \ln P(\{z_n\}|\{\pi_i\}) + \ln P(\{q_n\}|\{z_n\}) \end{aligned}$$

第一項はサンプルパラメータの事前分布であって Dirichlet 分布を用いる(Dir(\cdot, \cdot)と書く)。ハイパーパラメータとして α_{0i} をもちいて以下ようになる。

$$\ln P(\{\pi_i\}) = \ln \text{Dir}(\{\pi_i\}, \{\alpha_{0i}\}) = \sum_i \alpha_{0i} \ln \pi_i$$

第二項は物質の選択確率であって π_i に比例する。

$$\ln P(\{z_n\}|\{\pi_i\}) = \sum_{in} z_{ni} \ln \pi_i + const$$

また第三項は以下ようになる。

$$\ln P(\{q_n\}|\{z_n\}) = \sum_{ni} z_{ni} \ln \eta_{ni} + const$$

したがって、式(1)は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \ln \tilde{P}(\pi_i) &= \sum_i \alpha_{0i} \ln \pi_i + \sum_{ni} E(z_{ni}) \ln \pi_i + const \\ &= \ln \text{Dir} \left(\{\pi_i\}; \left\{ \sum_n \rho_{ni} + \alpha_{0i} \right\} \right) + const \end{aligned}$$

ここで $\rho_{ni} \equiv E(z_{ni})$ とおいた。この式はハイパーパラメータ α_0 を ρ_{ni} を用い修正する形であり、 α_i とおく。

$$\alpha_i = \sum_n \rho_{ni} + \alpha_{0i}$$

同様にして式 (2)は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \ln \tilde{P}(\{z_n\}) &= E_{\{\pi_i\}} (\ln P(\{z_n\}|\{\pi_i\})) + \ln P(\{q_n\}|\{z_n\}) + const \\ &= \sum_{ni} z_{ni} E_{\{\pi_i\}} (\ln \pi_i) + \sum_{ni} z_{ni} \ln \eta_{ni} + const \end{aligned}$$

式の中の $E_{\pi_i}(\ln \pi_i)$ は $\ln \pi_i$ の Dirichlet 分布に関する期待値であり、 $\hat{\alpha} \equiv \sum \alpha_i$ とおくと以下ようになる。

$$E_{\pi_i}(\ln \pi_i) = \Psi(\alpha_i) - \Psi(\hat{\alpha})$$

ここで $\Psi(\cdot)$ はダイガンマ関数である。これを用いて式(2)は以下ようになる。

$$\ln \tilde{P}(z_n) = \sum_{in} z_{ni} (\Psi(\alpha_i) - \Psi(\hat{\alpha}) + \ln \eta_{ni}) + const$$

ρ_{ni} は z_{ni} の期待値であるので、 $\tilde{P}(z_n)$ を用いて計算でき、以下が得られる。

$$\begin{aligned} \ln \rho_{ni} &= \Psi(\alpha_i) - \Psi(\hat{\alpha}) + \ln \eta_{ni} + const \\ \alpha_i &= \sum_n \rho_{ni} + \alpha_{0i} \end{aligned}$$

この 2 つの式の繰り返しによって事後分布のハイパーパラメータが求まる。

これをもとに、波数 q_k 別の粒子数 n_k 、すなわち EDS のスペクトルを用い、式を再整理すると以下の式になる。

$$\begin{aligned} \ln \rho_{ki} &= \Psi(\alpha_k) - \Psi(\hat{\alpha}_k) + \ln \eta_{ki} \\ \alpha_i &= \frac{\sum_k n_k \rho_{ki}}{\sum_k \rho_{ki}} + \alpha_{0i} \end{aligned}$$

これを繰り返し計算して収束させて得られた α_i をもちいで π_i の確率分布の近似を得られる。

$$\tilde{P}(\pi_i) = \text{Dir}(\{\pi_i\}; \{\alpha_i\})$$

この分布の最頻値 $\alpha_i/\hat{\alpha}$ を π_i の事後確率最大化による推定値とすることができる。

4. 実験

4.1 実験条件

提案方式の有効性を検証するために、シミュレーションデータを用いてその性能を評価した。本実験では、DSTA-II[8]というシミュレーションソフトウェアを用いて、以下の2種類のEDSデータセットを生成した。

1. **単体データセット**: 周期表の B から Am までの 91 元素 (例: B, C, Fe, Pb, Ag, U, Pu など) を対象としたスペクトルデータ
2. **化合物データセット**: 最大 5 つの元素から構成される 10 種類の化合物のスペクトルデータ。

図 2 に単体データセットの Pb, Fe, Ti, B のスペクトル信号を再スケールした結果を示す。縦軸は相対強度 (信号の合計値を 1.0 に設定)、横軸はエネルギー (単位は電子ボルト、eV) である。図から、各元素のスペクトルが特徴的であることがわかる。

化合物データセットとしては、比較のため、ノイズなし、小ノイズ、大ノイズの3種を作成した。この際、S/N 比を低下させるため、大ノイズのシミュレーションでは電流を減少させた。図 3 は PbS のデータを示す。ノイズが信号より十分小さく、元素を特定可能であることが期待される。

このデータを用いて VB 法、SVD、および EM 法により逆推定を行い、結果を比較した。VB 法と EM 法では 100 回の反復計算とし、VB 法のハイパーパラメータはすべて 1.0 と設定した。

推定結果のうち大きな成分は、化合物を構成する元素を示すが、元素の数は特定できない。そこで元素の種類数は真値と等しいとした。例えば、推定対象が PbS である場合、元素数は 2 に設定される。推定された元素が真値と完全に一致した場合、推定が正しいと判断される。

4.2 実験結果

表 1 に本実験の結果を示す。表中、真値の行に推定結果としてあるべき元素を示す。推定結果とこれを比較するこ

とで精度が計算される。

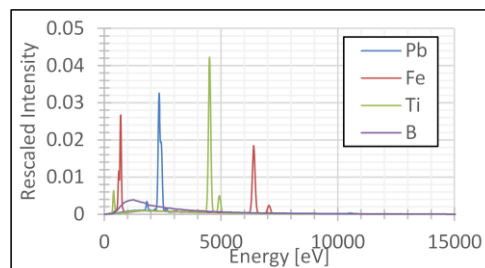


図 2 EDS データセットの例

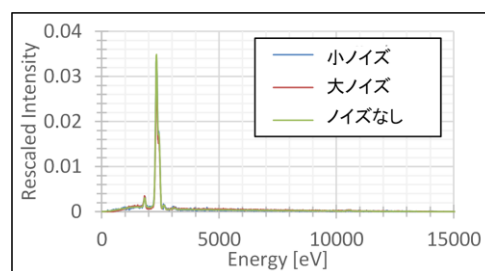


図 3 ノイズの比較

VB 推定法は非常に優れた性能を示し、ノイズのないデータおよび低ノイズデータにおいてすべて正解し、大ノイズデータにおいても誤りは 2 件のみであった。一方、SVD はほぼ失敗といえる結果であった。EM 法では、対象化合物の約半数が正しく推定された。

全体的な傾向として MoS のように 2 元素の化合物の推定精度が高い一方、Ti(BaSi₂O₅)₉ のように元素数の多い化合物は不正確であった。これは元素数の多い化合物はスペクトル分布が複雑なためと考えられる。

4.3 考察

SVD による EDS の推定結果は非常に低い正確性を示した。その原因として、SVD が結果を正の値に制約しないことが挙げられる。実際に、SVD 推定法の結果として得られた元素比率には約 50 個の負の値が含まれていた。

一方、EM 法の結果はおおよそ半数が推定でき、特に 2 元素の物質の精度が高い。ただし PbS については推定ができていなかった。

PbS と特に正解率の高い MoS を比較すると、主な違いはピークの数にある。図 1 にて示した PbS のスペクトルと比較するため、MoS のスペクトルを図 4 に示す。両者はとも

表 1 実験結果 (灰色セルは不正解)

物質	PbS	MoS ₂	SrWO ₄	BaTiSi ₃ O ₉	Ti(BaSi ₂ O ₅) ₉	TiO ₂	Cr ₂ O ₃	TiN	VN	Fe ₃ C	精度
真値	Pb,S	Mo,S	O,Sr,W	Ba,O,Si,Ti	Ba,O,Si,Ti	O,Ti	Cr,O	N,Ti	N,V	C,Fe	
ノイズなし											
VB	Pb,S	Mo,S	O,Sr,W	Ba,O,Si,Ti	Ba,O,Si,Ti	O,Ti	Cr,O	N,Ti	N,V	C,Fe	10/10
SVD	Ge,Th	Mo,S	Nd,Th,Yb	Cd,Ga,Ge,Nd	Cd,Ga,Ge,Nd	Cd,Th	Th,Yb	Ge,Th	Nd,Th	Nd,Th	1/10
EM	Mo,S	Mo,S	O,Si,Sr	O,Rb,Si,Ti	O,Rb,Si,Ti	O,Ti	Cr,O	N,Ti	N,V	F,Fe	5/10
小ノイズ											
VB	Pb,S	Mo,S	O,Sr,W	Ba,O,Si,Ti	Ba,O,Si,Ti	O,Ti	Cr,O	N,Ti	N,V	C,Fe	10/10
SVD	Pb,Th	Mo,S	Nd,Th,Yb	Cd,Ga,Ge,Nd	Cd,Ga,Ge,Nd	Nd,Th	Th,Yb	Ge,Th	Nd,Th	Nd,Th	1/10
EM	Mo,S	Mo,S	Si,Sr,W	O,Rb,Si,Ti	O,Rb,Si,Ti	O,Ti	Cr,O	N,Ti	N,V	F,Fe	5/10
大ノイズ											
VB	Pb,S	Mo,S	O,Sr,W	Ba,O,Si,Ti	Ba,Si,Ta,Ti	O,Ti	Cr,O	Kr,Ti	N,V	C,Fe	8/10
SVD	As,Pb	Nd,Th	Nd,Th,Yb	Cd,Ga,Ge,Nd	Ga,Ge,Nd,Th	Ge,Yb	Th,Yb	Nd,Th	Ge,Th	Fe,Ga	0/10
EM	Mo,S	Mo,S	O,Si,Sr	O,Rb,Si,Ti	O,Rb,Si,Ti	O,Ti	Cr,O	Ba,Ti	N,V	F,Fe	4/10

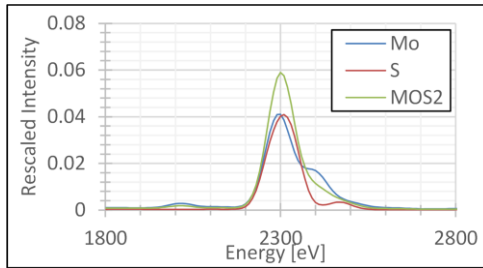


図 4 MoS のスペクトル分布

に 2300eV 付近に大きなピークを持つが、PbS はさらに 2450eV 付近に別のピークを持っている。元素単体のスペクトル分布を確認すると、両化合物に共通する元素である S は 2300eV 付近に極大ピークを持つのに加えて、2400eV 付近に極小のピークを持つ。一方、Pb が 2450eV 付近にピークを持つのに対し、Mo は 2400eV 付近にピークを持つ。結果として MoS では Mo と S の極小ピークが互いに打ち消し合い、結果としてピークが 1 つしか現れないという特徴的な挙動をしている。

このように特徴が明確な化合物については、SVD や EM 法を用いても正確な推定が可能であると考えられる。しかし、PbS のような場合は必ずしも精度が高くない。それに対して VB 法はノイズがあっても数値的に高い精度を保持できるため、PbS のような化合物に対しても正確な結果を得られることが推測される。

5. おわりに

本報告では EDS の X 線を計測した周波数スペクトル分布から元素を自動特定するために確率論的なモデルを策定し、特に変分ベイズ法を適用することで高精度な元素特定が可能であることシミュレーションにて示した。

今後の課題としては、まず元素数の特定方法が必要であると考えられる。今回の評価では元素数を指定せずに推定し、精度の評価においては真の元素数が判明している状態で精度評価した。しかし実際の実験では真の元素数がわかっているとは限らないため、変分ベイズ法の処理過程で元素数を推定することも必要となる。また、実用化のためには実際の計測データを用いた評価も期待される。

これにより実計測において本手法が材料科学の発展に有益な効果をもたらしたならば、幸いである。

参考文献

- [1] 寺倉清之. “マテリアルズインフォマティクスの現状と将来: 趣旨説明”. 第 70 巻, p. 3110. 一般社団法人日本物理学会, 2015.
- [2] Ana Violeta Girão, Gianvito Caputo, Marta C. Ferro, Chapter 6 - Application of Scanning Electron Microscopy–Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy (SEM-EDS), Editor(s): Teresa A.P. Rocha-Santos, Armando C. Duarte, Comprehensive Analytical Chemistry, Elsevier, Volume 75, 2017, Pages 153-168.
- [3] Weisstein, Eric W. Singular Value Decomposition. From MathWorld–A Wolfram Web Resource, <https://mathworld.wolfram.com/SingularValueDecomposition.html> (viewed at Jul. 2024)
- [4] V.A. Solé, E. Papillon, M. Cotte, Ph. Walter, J. Susini, “A multiplatform code for the analysis of energy-dispersive x-ray fluorescence spectra,” Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 62(1):63–68, 2007
- [5] L Reimer. “scanning electron microscopy: Physics of image formation and microanalysis, second edition”. Measurement Science and Technology, Vol. 11, No. 12, p. 1826, dec 2000.

- [6] C. M. ビショップ. “パターン認識と機械学習(下) ベイズ理論による統計的予測”. シュプリンガー・ジャパン, New York, 2008.
- [7] Akinori Asahara, Yoshihiro Osakabe, Yamamoto Mitsuya, Hidekazu Morita, “Variational Bayes Decomposition for Inverse Estimation with Superimposed Multispectral Intensity,” arXiv:2411.05805 [cs.LG]
- [8] Nicholas W. M. Ritchie. NIST DATS-II, <https://www.cstl.nist.gov/div837/837.02/epq/dtsa2/index.html> (viewed at Jul. 2024)