

Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2021

spectrum adapted EM アルゴリズムによるスペクトルデータの 高効率ピークフィッティング

○松村 太郎次郎^{1*}¹ 国立研究開発法人 産業技術総合研究所

Spectrum adapted EM algorithm for high-throughput peak fitting analysis of spectral data

○Tarojiro Matsumura^{1*}¹ National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

近年の分光分析装置の発展によって、高精度な分光分析を試料の広範囲にわたって精緻に実行することが可能になっている。

しかし、膨大なスペクトルデータが出力されるため、得られたスペクトルデータの解析作業が手に負えないという問題が無視できなくなっている。一般に、ピークフィッティングのようなスペクトルデータ解析では、フィッティングモデルのパラメータ探索などに煩雑な試行錯誤を要する。大量のスペクトルデータに対してこのような試行錯誤を行うには膨大な手間と時間が必要となるため、実際に取り扱えるデータの規模が制限されてしまう。

スペクトルデータの解析作業を効率化するために、発表者らは機械学習で利用される EM アルゴリズムを応用し、大量のスペクトルデータを効率良く解析する手法として spectrum adapted EM algorithm を提案した¹。この手法ではスペクトルデータの測定エネルギーステップに対応した強度をデータの重みとして取り扱う。これによって、スペクトルデータの一次元への変換を行うことなく、計算挙動が安定したピークフィッティングを高速で行えるようになった。さらに、最近では拡張手法として spectrum adapted ECM algorithm² を提案し、一般によく利用される Pseudo-Voigt 分布や非対称分布である Doniach-Šunjić 分布を用いたピークフィッティングが実行可能となった。

本発表では、まず、spectrum adapted EM algorithm の理論的な背景について説明する。続いて、スペクトルデータを模した人工データセットおよび、XPS によって採取された実スペクトルデータセットへの適用事例を紹介する。これに続いて、拡張手法である spectrum adapted ECM algorithm を紹介する。最後

に、実際の分析作業を想定した発展的なピークフィッティング課題として、バックグラウンド処理や分離ピーク数の最適化に関する最近の取り組みについて話題提供を行う。

文 献

- 1) T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata and Y. Ando: *Sci. Tech. Adv. Mater.*, **20**, 733-745 (2019).
- 2) T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata and Y. Ando: *Sci. Tech. Adv. Mater. Methods*, **1**, 45-55 (2021).

*E-mail: matsumura-tarojiro@aist.go.jp