

大阪科学・大学記者クラブ 御中  
(同時提供先：文部科学記者会、科学記者会)



2022年12月23日  
大阪公立大学

## ベイズ統計を用いてスペクトルを予測！ 蛍光 X 線分析の測定時間の短縮に成功

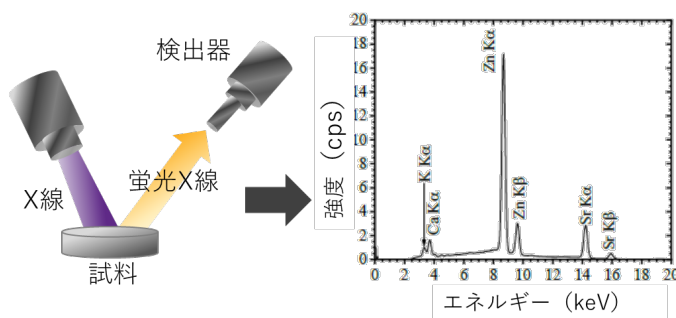
### <ポイント>

- ◇蛍光 X 線分析にベイズ推定<sup>\*1</sup>を応用しスペクトルを予測することで、測定時間を大幅に短縮することに成功。
- ◇工業製品や有害廃棄物のベルトコンベア上での分析など、蛍光 X 線分析の迅速化が期待。

### <概要>

大阪公立大学 大学院工学研究科の松山 嗣史特任助教、中江 理紀大学院生（大阪市立大学大学院 前期博士課程 2 年）、辻 幸一教授と日本原子力研究開発機構の共同研究グループは、蛍光 X 線分析にベイズ推定を応用することで、ガラス標準試料<sup>\*2</sup>に 1 時間蛍光 X 線を照射して得られたスペクトルと同等の分析結果を得るために必要な測定時間を、7 秒から 3 秒まで、4 秒縮めることに成功しました。

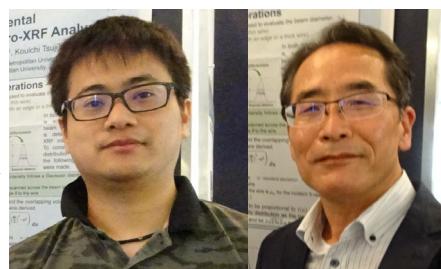
蛍光 X 線分析は、試料に X 線を照射して得られたスペクトルから元素の同定や存在量を解析する手法で、多くの元素を同時に検出することができます。元素を正確に同定するため、通常は 10 分ほど X 線を照射し精度の高いスペクトルを取得しますが、さまざまな場面で計測時間の迅速化が求められています。



今回確立したベイズ推定を用いたスペクトル予測を応用することで、ベルトコンベアで移動する工業製品や有害物質を含んだ廃棄物試料などの迅速な分析や化学反応過程のモニタリングが可能になると期待できます。

本研究成果は、Elsevier が刊行する国際学術誌「Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy」のオンライン速報版に、2022 年 12 月 1 日に掲載されました。

今回の研究によって短時間の計測で蛍光 X 線スペクトルを予測できる可能性を示すことができました。蛍光 X 元素分析の高速性を生かして、材料分析の高効率化や環境モニタリングなど多くの分野に適用されることを期待しています。



松山 嗣史特任助教(左)、辻 幸一教授(右)

## <研究の背景>

エネルギー分散型の蛍光 X 線分析は非接触・非破壊分析である特徴を生かして、材料分析や環境分析の分野で広く利用されています。しかし、通常の蛍光 X 線分析には 5 分から 10 分程度を要しており、より迅速な手法が開発できれば、蛍光 X 線分析法が各段に普及するのではないかと考えてきました。

## <研究の内容>

本研究では分析化学と情報科学との融合を試みました。具体的にはベイズ推定の手法を取り入れましたが、これまでベイズ推定を蛍光 X 線スペクトル予測に適用した例は報告されていませんでした。図は、ガラス標準試料の蛍光 X 線スペクトルにベイズ推定を適用した結果です。左のスペクトルは一般的によく用いられる計数率<sup>※3</sup>の結果です。1 s 測定のスペクトル（黒線）は、3600 s 測定のスペクトル（赤線）から大きく外れていることが分かります。この場合、3600s 測定のスペクトルと同等の分析結果を取得するには 7s かかります。

右図はベイズ推定を適用した場合の結果です。1 s 測定でも 3600 s 測定のスペクトルと非常に近いスペクトルを取得でき、3600s 測定のスペクトルと同等の分析結果は 3s の測定で取得できるため、ベイズ推定を用いない場合に比べて計測時間を 4s 短縮することに成功しました。

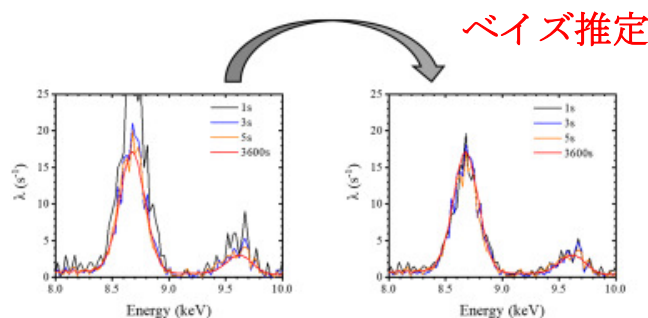


図 ベイズ推定を用いて解析した蛍光 X 線スペクトル  
(投稿論文のグラフィカルアブストラクトより)

## <期待される効果・今後の展開>

迅速に非接触・非破壊的に元素分析が可能となれば、ベルトコンベアなどで移動する工業製品や廃棄物試料の分析ができる、化学反応過程をモニタリングできる、環境分析においてモニタリング解析できるなど、多くの分野に普及する可能性があります。

今後は、スペクトルにおけるピークとバックグラウンドの短時間での見極め方や微量元素分析への適用可能性など基礎検討が必要です。

## <資金情報>

本研究の一部は科研費（基盤研究 B）の支援および日本原子力研究開発機構との共同研究として行われました。

## <用語解説>

- ※1 ベイズ推定…条件付き確率に基づき推定する方法。尤度（ゆうど）関数と事前分布をもとに事後分布を算出し、観測された事象から、推定したい事象を推論する。
- ※2 標準試料…標準試料はそれを構成する各元素の化学分析値が保証されている物質である。分析法の妥当性評価に用いることができる。
- ※3 計数率…蛍光 X 線強度を測定時間で割ったもの。その単位は cps である。

<掲載誌情報>

【発表雑誌】 Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy

【論文名】 Spectrum prediction in X-ray fluorescence analysis using Bayesian estimation

【著者】 Tsugufumi Matsuyama, Masanori Nakae, Masashi Murakami, Yukihiro Yoshida, Masahiko Machida, Kouichi Tsuji

【掲載 URL】 <https://doi.org/10.1016/j.sab.2022.106593>

【研究に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 大学院工学研究科  
特任助教 松山 嗣史 (まつやま つぐふみ)

教授 辻 幸一 (つじ こういち)

TEL: 06-6605-2770

06-6605-3080

E-mail : [t-matsuyama@omu.ac.jp](mailto:t-matsuyama@omu.ac.jp)

[k-tsuji@omu.ac.jp](mailto:k-tsuji@omu.ac.jp)

【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課

担当：竹内

TEL : 06-6605-3411

E-mail : [koho-list@ml.omu.ac.jp](mailto:koho-list@ml.omu.ac.jp)