

# 多結晶電子回折像の解析におけるデータ科学的手法の推定モデル

鈴木 健太<sup>†</sup> 鈴木 伸崇<sup>††</sup> 上杉 文彦<sup>†††</sup> 石井 真史<sup>†††</sup>

<sup>†</sup> 筑波大学大学院図書館情報メディア研究科 〒305-8550 茨城県つくば市春日 1-2

<sup>††</sup> 筑波大学図書館情報メディア系 〒305-8550 茨城県つくば市春日 1-2

<sup>†††</sup> 国立研究開発法人物質・材料研究機構 〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

E-mail: <sup>†</sup>s1821619@s.tsukuba.ac.jp, <sup>††</sup>nsuzuki@slis.tsukuba.ac.jp,

<sup>†††</sup>{UESUGI.Fumihiko,ISHII.Masashi}@nims.go.jp

あらまし 結晶構造を同定するには、回折画像における回折図形の解析が必要となる。しかしながら、回折の観測条件や結晶構造の状態等が僅かでも変化すると、同一物質でさえ異なる回折図形が形成されてしまう。故に、人手による解析は多くの時間と手間を要し、かつ正確な評価は極めて困難なものとなる。そこで、深層学習の一種である畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を利用し、回折画像から (結晶情報を数値化した) 構造パラメータを自動で推定する手法を提案する。なお、本稿の解析対象は「多結晶体の電子回折像」、推定対象は「電子線の入射方位 (結晶方位)」とする。評価実験では、三種類の学習方法を用いて推定モデルを生成し、それらの精度 (決定係数  $R^2$ ) を比較した。結果、最も高精度な推定モデルにおいて  $R^2 \approx 0.95$  を算出し、本手法が有効である可能性を確認した。

キーワード 電子回折, 入射方位, 多結晶, 深層学習, CNN, マテリアルズインフォマティクス

## 1 はじめに

結晶を評価する手法の一つに、電子回折法 (ED: Electron Diffraction) [1] が存在する。これは、結晶の表面に電子線を照射して「電子回折像 (画像)」を得た後、その上に描かれている「電子回折図形 (電子回折パターン)」を解析することで、結晶を同定する手法である。類似した手法には、X線を照射するX線回折法 (XRD: X-ray Diffraction) [2] や、中性子線を照射する中性子回折法 (ND: Neutron Diffraction) [3] がある。回折図形は、回折の観測条件や結晶構造の状態などにより様々に変化するが、それらの情報を人手で正確に判断するのは極めて困難である。故に、回折像から結晶情報を自動 (機械) 的に推定することができれば、結晶の評価をより容易に行うことが可能になると考えられる。

一般に、結晶情報は、電子回折法をはじめとした回折実験を通じて解析される。対称性の高い単純な結晶構造ほど、結晶の評価は容易である。他方、対称性の低い複雑な結晶構造の場合は、多数の回折ピークが観測されるため、結晶の評価が困難となる。それ故、計算機を用いた回折パターンシミュレーション [4] [5] がしばしば併用される。これは、様々な結晶情報を数値化した「構造パラメータ」と呼ばれる値を入力とし、シミュレータにかけて画像を生成した後、実際の回折実験で得られた回折像と比較するといった手法 (順問題) である。しかしながら、この手法では、構造パラメータを先に仮定しなければならないため、相応の技術と経験を要する。一方、本研究では、画像を入力とし、構造パラメータの推定を行うことを考える (図 1)。すなわち、上記問題の逆問題となっている。入力する画像は、実際の回折実験によって得られたデータ (回折像) であり、特別な技術や経験を必要としない。

本研究では、深層学習の一種である「畳み込みニューラルネットワーク (以下, CNN)」を利用し、電子回折像を学習させて構造パラメータの推定を行う。なお、構造パラメータには様々な種類が存在するが、今回の推定対象は「電子線の入射方位 (結晶方位)」とする。入射方位は3次元ベクトルである。また、解析対象は「多結晶体の電子回折像」とする。本研究にて扱う多結晶体は、2タイプの単結晶体から構成されているため、二種類の入射方位を有する。それ故、提案手法では、多結晶体の電子回折像から二種類の入射方位を (同時に) 推定する。

評価実験では、多結晶  $\text{TiO}_2$  の電子回折像 489,500 枚を、三種類の方法により学習させる。その後、決定係数  $R^2$  を用いて、生成された推定モデルの精度を検証・比較する。なお、多結晶体は複数の単結晶体から成り、その組み合わせに応じて回折像の枚数は急激に増加する。したがって、学習には相当の時間を要する。今回の解析対象は多結晶  $\text{TiO}_2$  であるが、実際の場面においては、多種多様な結晶を解析する必要がある。故に、より短時間で成果を得られる学習方法を確立することは重要な課題である。そこで、「Fine-tuning 的手法を用いた学習方法」を提案する。この方法を用いることにより、比較的短時間で高い精度が得られることを示す。

### (関連研究)

材料科学・工学と情報 (データ) 科学の融合学術分野は、マテリアルズインフォマティクス (MI) [6] として、近年注目されつつある。関連した研究には、階層型クラスタリングを用いてスペクトル (X線や電子線を物質に照射したときの応答) の分類を行う清原らの手法 [7] や、ランダムフォレストを利用してX線回折パターンの分類を行う鈴木らの手法 [8] がある。し

かしながら、著者の知る限り、回帰問題を扱った手法（例えば、本研究のような、回折像から構造パラメータを推定するという手法）はこれまで提案されていない。

### （論文の構成）

本稿の構成は以下の通りである。第2章では、電子回折像の基本事項を述べる。第3章では、提案手法の内容について詳述する。第4章では、評価実験の説明、実験結果の提示及び考察を行う。最後に、第5章にて、本研究のまとめと今後の課題・展望を記す。

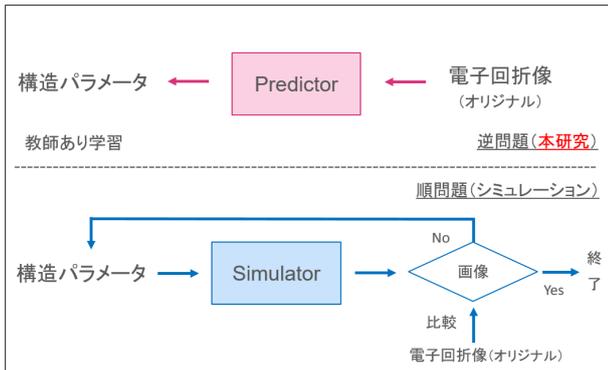


図1 従来手法（順問題）と本手法（逆問題）の対比

## 2 電子回折像

電子回折像とは、結晶の表面に電子線を照射することで生じる、電子回折パターンを画像に落とし込んだものである。電子回折像の例を図2及び図3に示す。

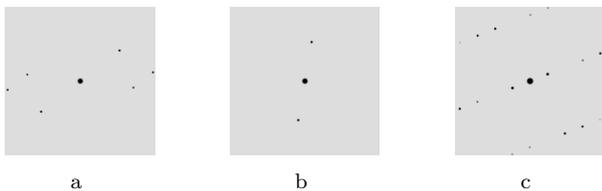


図2 電子回折像（単結晶体）

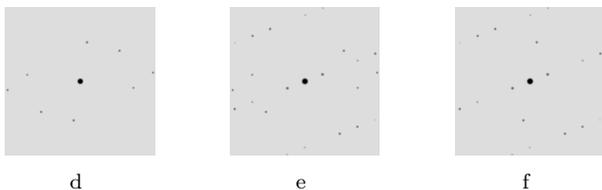


図3 電子回折像（多結晶体）

図2は、いずれも単結晶  $\text{TiO}_2$ （二酸化チタン）の電子回折像であり、電子線の入射方位のみが異なる。図3は、図2の各2枚を0.5:0.5の強度比で合成した、多結晶  $\text{TiO}_2$ の電子回折像（d:aとb, e:aとc, f:bとcの合成画像）である。上図のように、電子回折像には、黒色や灰色の斑点がいくつか写っている。これは回折スポットと呼ばれるものであり、ブラッグの条件 ( $2d \sin \theta_B = n\lambda$ ,  $d$ : 格子面間隔,  $\theta_B$ : ブラッグ角,  $n$ :

自然数,  $\lambda$ : 波長) を満たした電子の回折波によって生成される。複数の回折スポットにより形成される模様は、電子回折図形 [9] と呼ばれる。電子回折法は、電子回折図形（透過光（中心点）とそれら複数の回折スポット間の位置関係）を解析することで、結晶情報の同定を可能にしている。電子回折図形は、電子線の入射方位・物質の種類・結晶構造の状態などによって様々に変化する。また、多結晶は複数の単結晶から構成されており、結晶の種類や強度比などによって無限の組み合わせが考えられる。

入射方位が自明でないのは、結晶の物理的な切り口面に対して、その面に原子が平行に並んでいるとは限らない（斜めになっている）からである（図4）。すなわち、入射方位とは、結晶の切り口に対する入射方位ではなく、結晶の格子に対する入射方位のことを指している。なお、図4において、カメラ長を  $L$ 、透過光から回折スポットまでの距離を  $R$  とすると、 $\theta_B$  が十分小さい場合は

$$\frac{R}{L} = \tan 2\theta_B \approx 2\theta_B \quad (1)$$

が成立する。

また、ブラッグの条件より、 $\theta_B$  が十分小さい場合は

$$\frac{\lambda}{d} = 2 \sin \theta_B \approx 2\theta_B \quad (2)$$

も成立する。

したがって、(1) 及び (2) 式から、 $R \cdot d = \lambda \cdot L$  ( $\lambda, L$ : 観測装置・条件に依存) を得る。

上式より、 $d$ の算出には  $R$ の測定が必要不可欠なため、結晶構造解析を行う上で  $R$ は重要な要素となる。

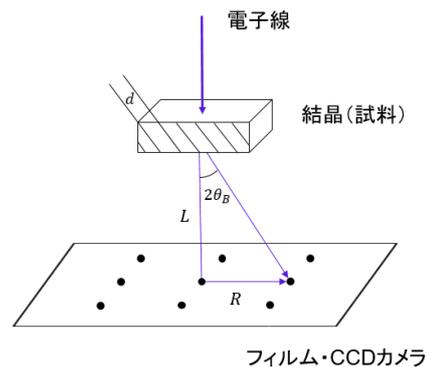


図4 電子回折実験 [10]

## 3 提案手法

本章では、手法の流れ・学習モデルの構築・推定モデルの評価指標・電子回折像の学習方法について説明する。

### 3.1 手法の流れ

本研究では、深層学習の一種である CNN を用いて、電子回折像から構造パラメータを推定する。具体的には、電子回折像と構造パラメータの対を CNN で学習（教師あり学習）し、推定モデルを生成する。その後、得られた推定モデルに対して、未知の電子回折像を入力し、構造パラメータの推定値を出力するという流れである。

本研究の解析対象は「多結晶 TiO<sub>2</sub> (anatase) の電子回折像」とする。これらのデータは全て、「国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS)」より提供されたものである。また、構造パラメータは複数項目（例：結晶の「欠陥」・「伸び」・「不純物」・「格子定数」など）存在するが、今回の推定対象は「電子線の入射方位」とする。入射方位は  $x, y, z$  成分を持った 3 次元ベクトルである。なお、第 1 章で述べたように、多結晶 TiO<sub>2</sub> 電子回折像は二種類の入射方位を持つ。

手法の流れを図 5 に示す。

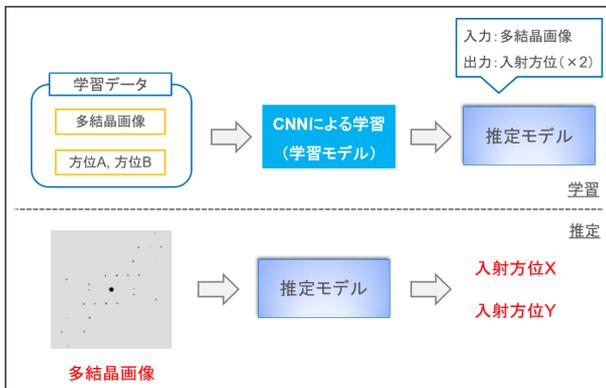


図 5 手法の流れ

図 5 のように、多結晶 TiO<sub>2</sub> 電子回折像と二種類の入射方位 A, B の対を CNN で学習し、推定モデルを生成する。その後、未知の多結晶 TiO<sub>2</sub> 電子回折像を推定モデルに入力し、入射方位の推定値 X, Y を同時に出力する。

当初は、多層パーセプトロン (MLP : Multi-Layer Perceptron) を用いた手法も提案する予定であった。しかしながら、ハイパーパラメータの変更をいくつか試みたものの、学習が一向に収束しなかったため、今回は CNN を用いた手法のみを提案することにした。

### 3.2 学習モデルの構築

本研究では、単結晶 TiO<sub>2</sub> の学習モデルを起点に、多結晶 TiO<sub>2</sub> の CNN 学習モデルを構築する。なお、単結晶 TiO<sub>2</sub> の学習モデルは図 6 の通りである。



図 6 単結晶 TiO<sub>2</sub> の学習モデル

図 6 は、4 つの畳み込み層（及び 2 つのプーリング層）・2 つの全結合層・1 つの出力層から構成される、7 層の CNN モデル（損失関数：MAE（平均絶対誤差）、最適化手法：Adadelta（Keras のデフォルトパラメータを適用）、バッチサイズ：16、プーリング層 / 全結合層の直後に 0.25 / 0.5 のドロップアウトを挿入）である。ただし、多結晶 TiO<sub>2</sub> は二種類の入射方位を持つため、出力層がもう一つ必要となる。二種類の出力層を持つ学習モデルを図 7 に示す。

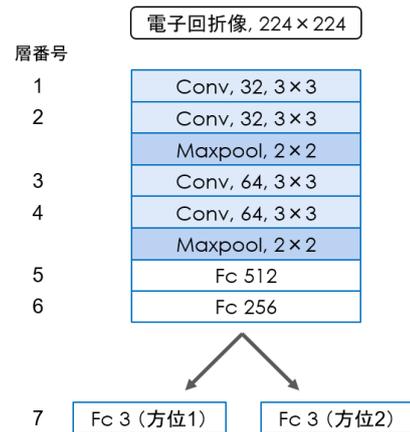


図 7 二種類の出力層を持つ学習モデル

図 7 のモデルで学習を実行したところ、学習データの数がおよそ 100,000 枚（本研究で扱うデータ数は 499,500 枚）を超える場合、サーバ本体のメモリ不足により、プログラムは強制終了されることが判明した。それ故、今回は損失関数や最適化手法のほか、学習データの数（100,000 枚）及び画像サイズ（224 × 224）も固定し、以下の手順に従って学習モデルを構築することとする。

- (1) 4 層（畳み込み層）を起点とし、学習が収束しなくなるまで、以下の検証を繰り返し行う。
- (2) 畳み込み層を 2 層（及びプーリング層を 1 層、0.25 のドロップアウトを 1 つ）追加する。

- (3) 上の結果に対して、最適なバッチサイズ (16, 32, ...) 及び全結合層の層数を決定する。

その際、バッチサイズの算出については、以下の計算式を参考にする。

$$(\text{ユニット数} \times \text{バッチサイズ} + \text{パラメータ数}) \times 8e-9 \quad (3)$$

式 (3) は、ニューラルネットワークの学習に必要な GPU のメモリ量を推定する計算式 [11] である。ユニット数及びパラメータ数は学習モデル構築時に算出可能であり、また、本研究で使用する GPU のメモリは約 11GB であるから、

$$\text{式 (3)} \leq 11 \text{ (GB)} \quad (4)$$

を満たすバッチサイズを全て求めればよいことになる。

また、全結合層 (ユニット数: 1024, 2048, ...) を追加する際は、1 層につき 0.5 のドロップアウトを 1 つ付与することとする。

#### (i) 畳み込み層が 4 層のとき

式 (4) を満たすバッチサイズは、16, 32, 64, 128 であった (ユニット数: 6,273,542, パラメータ数: 102,958,822)。それぞれの値で学習を実行 (100Epoch) したところ、いずれのバッチサイズにおいても、学習は収束した。このとき、1Epoch あたりの学習時間は、各 9 分, 7 分, 5 分, 4 分であった。一般的に、バッチサイズが小さいほど、推定モデルの精度は高くなりやすい。しかしながら、今回は推定モデルの精度だけでなく学習時間も考慮し、バッチサイズを 128 に設定することとした (MNIST の手書き文字 (60,000 枚) も、バッチサイズは 128 に設定されている。また、100,000 枚という学習データに対して、16~128 の差が推定モデルの精度に大きな影響を与えるとは考えにくい)。

一方、全結合層 (ユニット数: 1024) を 1 つ追加すると、サーバ本体のメモリ不足により、プログラムが動作しなかった (学習モデルのパラメータ増加に伴い、データを一括で読み込むことができなくなった) ため、検証を断念することとした。

#### (ii) 畳み込み層が 6 層のとき

式 (4) を満たすバッチサイズは、(i) と同様、16, 32, 64, 128 であった (ユニット数: 7,176,710, パラメータ数: 51,800,038)。しかしながら、いずれのバッチサイズにおいても、学習は収束しなかった。また、全結合層 (ユニット数: 1024) を 1 つ追加しても、学習は一向に収束しなかった (こちらの場合は、プログラムが動作した)。

したがって、多結晶  $\text{TiO}_2$  電子回折像の学習モデルは、4 つの畳み込み層 (及び 2 つのプーリング層)・2 つの全結合層・1 つの出力層から構成される、7 層の CNN モデルである (図 7 と同様)。損失関数は MAE、最適化手法は Adadelata、バッチ

サイズは 128 であり、プーリング層 / 全結合層の直後に 0.25 / 0.5 のドロップアウトを挿入している。また、GPU の必要メモリ量は約 7GB である。

### 3.3 推定モデルの評価指標

本研究では、推定モデルの評価指標として「決定係数  $R^2$ 」を採用する。これは、推定 (回帰) モデルの当てはまりの良さ (度合い) を測る指標であり、1 に近いほど良い精度であることを示す (値域は 1 以下の実数であるが、多くの場合、0 ~ 1 の範囲に収まる)。

ここで、実測値の平均値を  $[\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}]$ 、実測値を  $[x_i, y_i, z_i]$ 、推定値を  $[\hat{x}_i, \hat{y}_i, \hat{z}_i]$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) とすると、決定係数  $R^2$  は式 (5) で表される。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \{ (x_i - \hat{x}_i)^2 + (y_i - \hat{y}_i)^2 + (z_i - \hat{z}_i)^2 \}}{\sum_{i=1}^n \{ (x_i - \bar{x})^2 + (y_i - \bar{y})^2 + (z_i - \bar{z})^2 \}} \quad (5)$$

#### (参考指標)

第 4 章の評価実験では、決定係数  $R^2$  の値が最も高い推定モデルに対して、「平均絶対誤差 MAE (Mean Absolute Error)」と「標準偏差  $\sigma$ 」を適用し、推定精度の偏り具合を確認する。

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (|\hat{x}_i - x_i| + |\hat{y}_i - y_i| + |\hat{z}_i - z_i|) \quad (6)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_i - MAE)^2} \quad (7)$$

ただし、 $a_i = |\hat{x}_i - x_i| + |\hat{y}_i - y_i| + |\hat{z}_i - z_i|$  とする。

### 3.4 電子回折像の学習方法

当初、全データの逐次読込による学習方法を検討したが、700Epoch で実行した場合、おおよそ 167 時間 (7 日) がかかることが判明した。そのため、本研究では、Fine-tuning 的手法を用いた学習方法を提案する。Fine-tuning とは、既存の推定モデル (学習済みモデル) の重みを初期値とし、一部の層を再学習させる (重みの再調整を行う) ことで、新たに推定モデルを生成する手法である。これにより、精度の高い推定モデルが短時間で生成可能となる。具体的な手順を以下に示す。

- (1) 多結晶  $\text{TiO}_2$  の電子回折像 489,500 枚を 5 等分し、学習データ 1 ~ 5 を作成する。
- (2) 学習データ 1 の学習を行い、推定モデル 1 を生成する (500Epoch)。

- (3) 推定モデル 1 の重みを用いて、学習データ 2 の学習を行い、推定モデル 2 を生成する (50Epoch)。
- (4) 推定モデル 2 の重みを用いて、学習データ 3 の学習を行い、推定モデル 3 を生成する (50Epoch)。
- (5) 推定モデル 3 の重みを用いて、学習データ 4 の学習を行い、推定モデル 4 を生成する (50Epoch)。
- (6) 推定モデル 4 の重みを用いて、学習データ 5 の学習を行い、推定モデル 5 を生成する (50Epoch)。
- (7) 推定モデル 5 の精度を測定する。

電子回折像は単純 (スパース) なデータであるため、一部の学習データからでも、おおよその特徴は抽出可能と考えられる。

なお、今回は全結合層以降を新しい層に付け替えること (一般的な Fine-tuning の手法) はせず、既存の層を再学習することとする。これには、一部の学習データに特化した推定モデルではなく、全ての学習データを網羅した推定モデルを生成したいという意図がある。また、再学習の対象は全結合層以降とする。層の前半部分は、データの一般的な特徴を捉えているため、再学習の必要性が薄い。他方、層の後半部分では、データの具体的な特徴を捉えている。それ故、層の後半部分のみを再学習させることで、新しいデータへの適合がより容易になる。

## 4 評価実験

本章では、評価実験の概要と結果について述べる。その後、得られた実験結果に基づき、考察を展開する。

### 4.1 実験概要

ホールドアウト検証を利用する。499,500 枚のうち、489,500 枚を学習データ、10,000 枚をテストデータに割り当てる。次に、489,500 枚の学習データを 8 (訓練) : 2 (検証) に分割し、700Epoch で学習を行う。そして、検証データにおける 2 つの MAE (損失) の合計が最も小さいモデルを、推定モデルとして採用する (Keras の「ModelCheckpoint」機能を適用)。最後に、テストデータを入力し、推定モデルの精度 (テストデータ 10,000 枚に対する (入射方位 1, 2 それぞれの)  $R^2$ ) を算出する。このとき、 $R^2$  の値が大きい推定モデルほど、高精度であるとする。また、 $R^2$  の値が最も大きい推定モデルに対して、MAE 及び  $\sigma$  を適用し、推定精度の偏り具合を調査する。なお、学習データとテストデータの中身 (多結晶  $\text{TiO}_2$  電子回折像のバリエーション) は等しい。

学習時間を短縮するにあたり、解像度を小さくした電子回折像を学習させるという方法も考えられる。本実験では、これらをベースラインとして、3.4 節との精度比較を行う。具体的には、以下の三種類の学習方法を用いて推定モデルを生成し、それらの精度 ( $R^2$  の値) を検証する。

- (1) 489,500 枚を 5 等分 (97,900 枚  $\times$  5) して Fine-tuning 的学習 …… 3.4 節を参照
- (2)  $56 \times 56$  に縮小して一括学習
- (3)  $28 \times 28$  に縮小して一括学習

### (実験環境)

- サーバ本体の OS : Ubuntu 16.04.3 LTS(GNU/Linux 4.4.0-97-generic x86\_64)
- サーバ本体のメモリ (RAM) : 32 GB
- CPU : Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v4 @ 2.10GHz (8 cores)
- GPU : GeForce GTX 1080 Ti (11 GB)

## 4.2 実験結果

各推定モデルにおける決定係数  $R^2$  の値を表 1 に示す。

表 1 各推定モデルの精度 ( $R^2$ )

学習方法	入射方位 1	入射方位 2
(1)	<b>0.9476</b>	<b>0.9488</b>
(2)	0.9161	0.9151
(3)	0.5156	0.5095

続いて、700Epoch における各々の学習時間 (3 桁まで表示) を表 2 に示す。

表 2 700Epoch の学習に要した時間

学習方法	時間 (h)
(1)	47.1
(2)	19.8
(3)	8.37
逐次読込	167

表 1 より、 $R^2$  の値が最も大きいのは、入射方位 1, 2 とともに学習方法 (1) の推定モデルであった。その値はおおよそ 0.95 と非常に高い一方で、学習方法 (3) の推定モデルは、他 2 つの推定モデルよりも精度が著しく低かった。

また、表 2 より、各々の学習時間は逐次読込と比較して大幅に短いことが伺える。

ここで、最も精度が高かった学習方法 (1) の推定モデルに対し、平均絶対誤差 MAE、標準偏差  $\sigma$ 、AE (各データの絶対誤差) の範囲 (実測値が 3 桁のため、小数第四位で四捨五入) を算出する。結果は表 3 の通りである。

表 3 推定モデル (1) の精度 (MAE,  $\sigma$ )

(参考)	入射方位 1	入射方位 2
MAE	0.2292	0.2302
$\sigma$	0.4470	0.4396
AE の範囲	0.00 ~ 4.65	0.00 ~ 4.68

上記の結果を踏まえ、以下に考察を記す。

### 4.3 考察

4.2 節で述べた通り、Fine-tuning 的手法を用いた学習方法 (1) が、最も高精度な推定モデルを生成した。その値は  $R^2 \simeq 0.95$  と 1 に近く、概ね良い精度が得られていると考えられる。また、画像サイズを縮小して一度に全てのデータを学習させたとしても、推定精度の高いモデルが生成できるとは限らないということが伺える。

続いて、表 3 を確認すると、 $MAE < \sigma$  になっていることがわかる。これは、テストデータの推定結果に極端な偏りが生じている可能性を示している。事実、入射方位 1, 2 の AE が (双方ともに) MAE 以下であるデータは、10,000 枚中 7,782 枚も存在した。すなわち、残り 2 割のデータの中に大きな外れ値が含まれていると推測される。逆に、それらの結果を利用して、推定精度の高いデータと低いデータを特定できれば、推定モデルの精度を効率的に改善することが可能になると思われる。

最後に、推定モデルの精度評価について言及する。今回、入射方位 1, 2 の  $R^2_{max}$  (最大値) は、偶然にも同一のモデルで算出された。しかしながら、そうではない可能性も当然起こり得るため、厳密性に欠ける部分があった。また、一部のデータについては、入射方位 1, 2 が逆に推定されていたため、測定方法の見直しが必要であると考えられる。これらの点に関しては、今後の課題とする。

## 5 おわりに

本研究では、結晶の評価をより容易に行うため、電子回折像から構造パラメータを自動 (機械) 的に推定する手法を提案した。今回は多結晶  $TiO_2$  の電子回折像を CNN で学習し、得られた推定モデルを用いて、電子線の入射方位を二種類同時に推定した。評価実験では、三種類の学習方法を用いて、推定モデルの精度を比較した。その結果、「Fine-tuning 的手法を用いた学習方法」が最も効果的であり、その精度は  $R^2 \simeq 0.95$  と非常に高いことが判明した。一方で、推定結果は極端に偏っており、その原因は、テストデータの 2 割に存在する非常に大きな外れ値により生じていることが示唆された。逆に、約 8 割のデータについては、本手法が有効である可能性を示すことができた。

今後の課題は、推定精度の高いデータと低いデータを分析し、推定モデルの精度を効率的に改善すること、より厳密な精度評価を行うことの 2 点である。

## 文 献

- [1] 小山泰正, 松井良夫. これから電子顕微鏡を始める人へ (2) 電子回折の基礎 X 線回折との違いを理解しよう. 日本結晶学会誌, Vol. 39, No. 4, pp. 271–278, 1997.
- [2] MF Toney. X-ray Diffraction. *LE Fitzpatrick, CR Brundle, CA Evans Jr, & S. Wilson (Comp. & Ed.), Encyclopedia of Material characterization*, pp. 198–213, 1992.
- [3] 平川金四郎. 中性子線回折. 応用物理, Vol. 43, No. 2, pp. 110–120, 1974.
- [4] Joel Reid, David Crane, Justin Blanton, Cyrus Crowder, Soorya Kabekkodu, and Tim Fawcett. Tools for Electron Diffraction Pattern Simulation for the Powder Diffraction File. *Microscopy Today*, Vol. 19, No. 1, pp. 32–37, 2011.
- [5] S Weber. XRDIFF: simulation of X-ray diffraction patterns. *Journal of Applied Crystallography*, Vol. 30, No. 5, pp. 565–566, 1997.
- [6] 伊藤聡. 日本のマテリアルズインフォマティクス研究 (特集マテリアルズインフォマティクス). 人工知能: 人工知能学会誌: journal of the Japanese Society for Artificial Intelligence, Vol. 34, No. 3, pp. 325–329, 2019.
- [7] 清原慎, 溝口照康. 機械学習を活用した界面構造探索とスペクトル解析 (特集マテリアルズインフォマティクス). 人工知能: 人工知能学会誌: journal of the Japanese Society for Artificial Intelligence, Vol. 34, No. 3, pp. 345–350, 2019.
- [8] 鈴木雄太, 日野英逸, 小嗣真人, 小野寛太. 機械学習を用いた X 線回折パターンの分類. 日本物理学会講演概要集 73.1, pp. 2526–2526. 一般社団法人日本物理学会, 2018.
- [9] 山本直紀. これから電子顕微鏡を始める人へ (3) 電子回折図形を見てみよう. 日本結晶学会誌, Vol. 39, No. 4, pp. 279–288, 1997.
- [10] MST | 一般財団法人材料科学技術振興財団. [ED] 電子回折法. <https://www.mst.or.jp/method/tabid/149/Default.aspx>, (参照 2019-11-27).
- [11] SONY. Neural Network Console (チュートリアル: 最適な学習実行環境の選び方). <https://support.dl.sony.com/docs-ja/2018/>, (参照 2019-12-23).