

ベイズ推論による 光吸収スペクトルのスペクトル分解

竝河 伴裕^A, 永田 賢二^B, 片上 舜^A, 水牧 仁一朗^C, 岡田 真人^A

^A東京大学, ^B国立研究開発法人物質・材料研究機構,
^C公益財団法人高輝度光科学研究センター

2023年 日本物理学会(3月25日)

目次

1. 光吸収スペクトル
2. 光吸収スペクトルにおけるベイズスペクトル分解
3. 数値実験
4. まとめ

目次

1. 光吸収スペクトル
2. 光吸収スペクトルにおけるベイズスペクトル分解
3. 数値実験
4. まとめ

光吸収スペクトル

- 吸収光子数 n / 入射光子数 $N \rightarrow$ 吸収率 α を測定

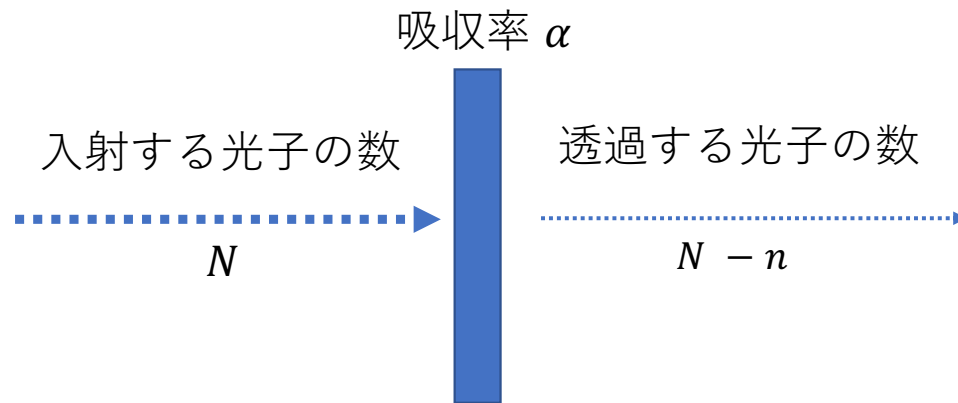


図1: 光吸収の概念図

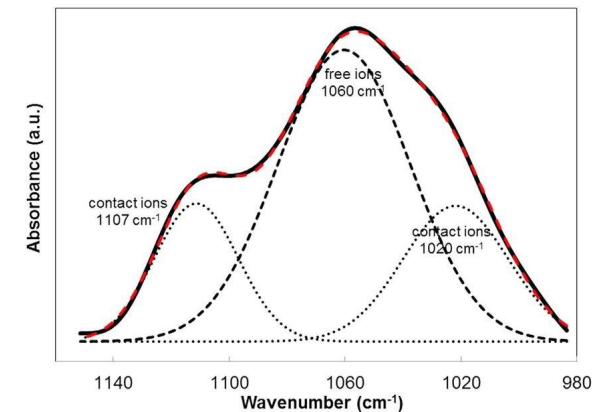


図2: NIRスペクトル

[1] Chai and Isa 2016

光吸収スペクトル

- 物質の性質を調べるために幅広く応用

| 吸収スペクトルの例 | XAS(X線吸収分光) | NIR(近赤外線分光) | IR(赤外線分光) |
|-----------|-------------|--------------|----------------|
| 光の波長 | ~ 1nm | 780nm-2500nm | 2500nm-25000nm |
| 調べる対象 | 電子状態 | 分子振動 | 分子振動 |
| 主な応用先 | 物理学, 材料科学 | 医学, 農学 | 化学, 惑星科学 |

例)惑星科学

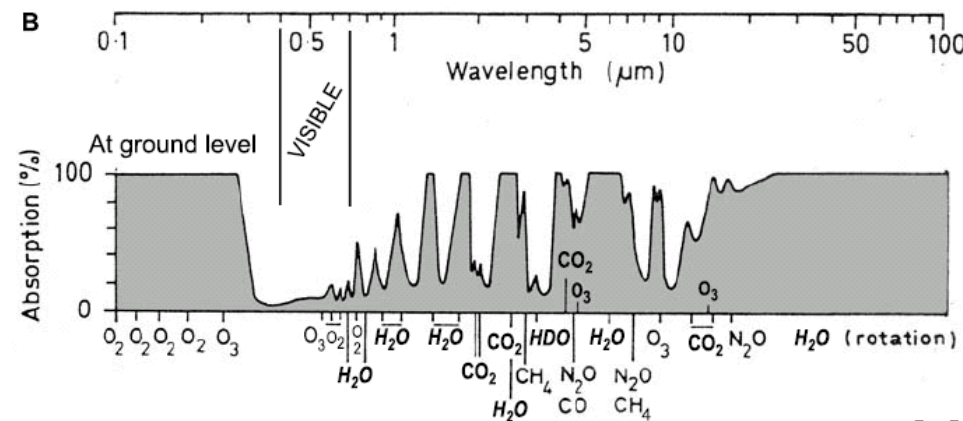


図3: 地球の大気の吸収スペクトル [2] Goody and Yung 1995

従来法によるフィッティング

- 縦軸を吸光度や吸収率として, **二乗誤差最小化**

問題点

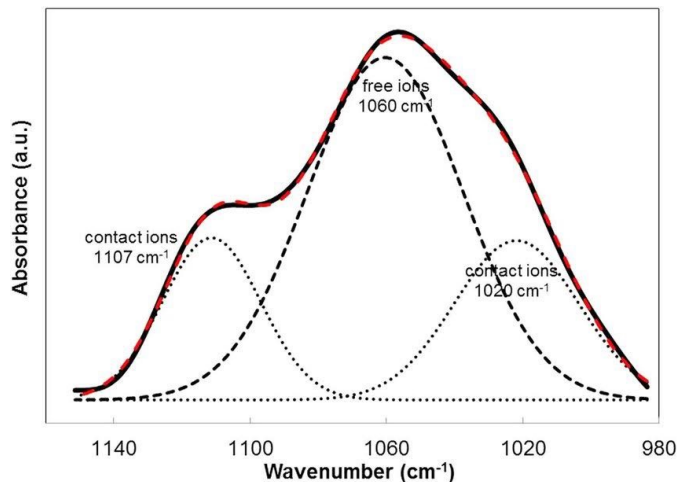


図2: NIRスペクトル
3つのピーク関数でフィッティング
[1] Chai and Isa 2016

- ピーク関数の個数は予め決める
→ **ピーク数の選択に主観**が入り得る.
- フィッティングからパラメータを点推定
→ **パラメータの推定精度**は分からない.
- 最小二乗誤差を用いる
→ **ガウスノイズを仮定**している
→ 吸収率, 吸光度に適切でない

従来法によるフィッティング

問題点

4. 吸収率が大きい場合は解析不可能

- 対象物質を変えられない, 扱う波長の範囲が広い(惑星科学)
- ピークが平らになってしまいうケースが存在する
- 最小二乗誤差でフィッティングできない

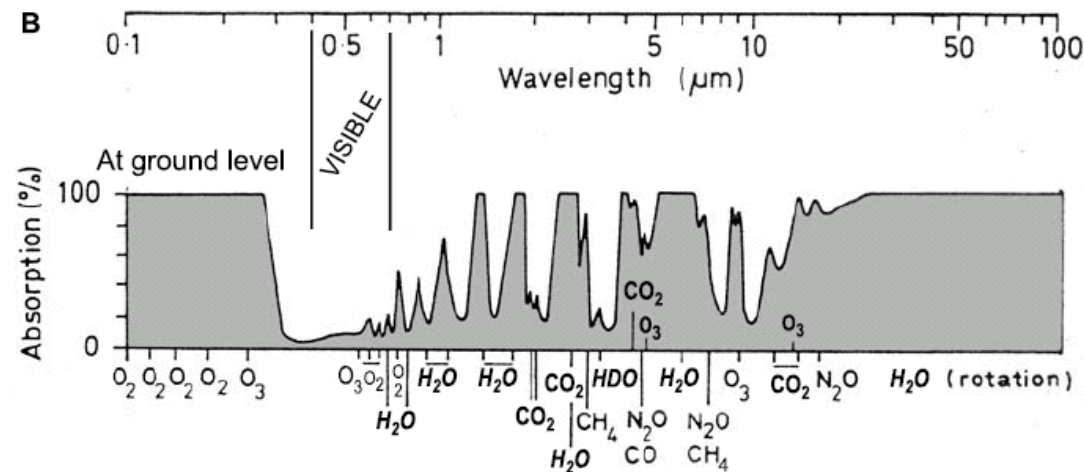


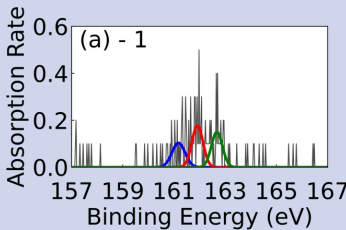
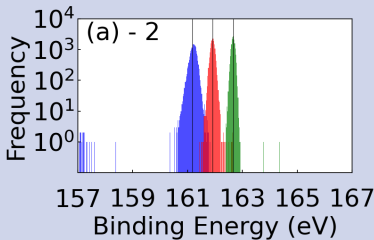
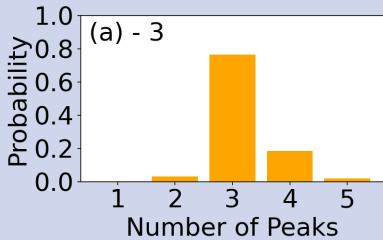
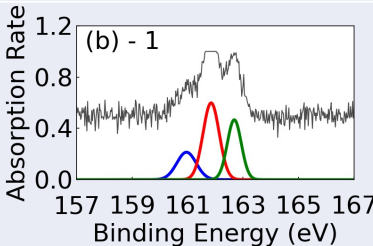
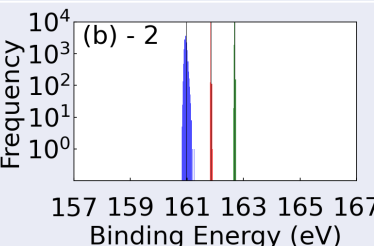
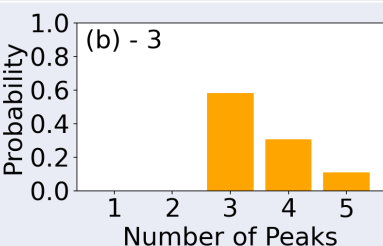
図3: 地球の大気の吸収スペクトル [2] Goody and Yung 1995

目次

1. 光吸収スペクトル
2. 光吸収スペクトルにおけるベイズスペクトル分解
3. 数値実験
4. まとめ

本研究の貢献

- 光吸収スペクトルに対して、**二項分布ノイズモデル**を提案
- 二項分布ノイズを用いた**ベイズスペクトル分解**の構築
- **S/Nの悪いデータ**や**ピーク形状が観測できない**場合に対し、ベイズ推論に成功

| | フィッティング | ピーク位置推定 | ピーク数の推定 |
|------------|--|---|---|
| 吸収率が小さいケース |  |  |  |
| 吸収率が高いケース |  |  |  |

ベイズスペクトル分解

生成モデルを仮定

1. 事前分布から、パラメータ生成

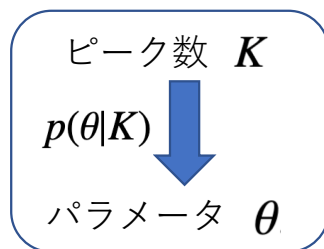


図4: モデルの概念図

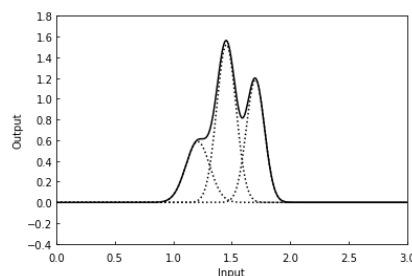


図5: 真値 $f(x; \theta, K)$

データ観測



2. ノイズモデルより、データ生成

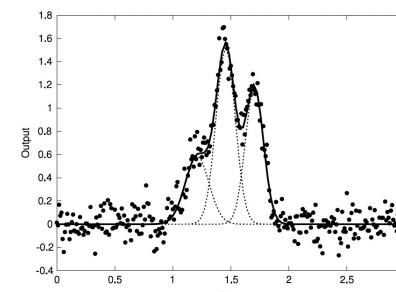


図6: 与えられたデータの例

ベイズの定理による推定

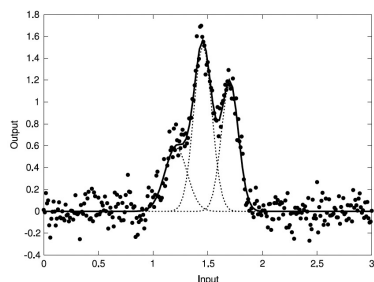


図6: 与えられたデータの例

ベイズ推論

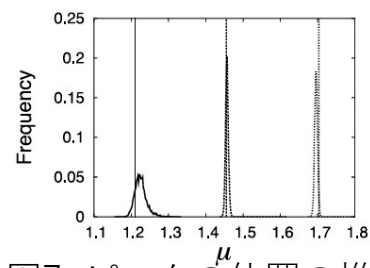
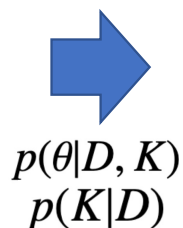


図7: ピークの位置の推定

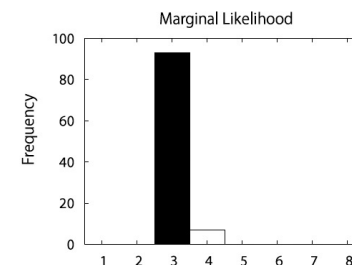


図8: ピークの数の推定

[3] Nagata et al., 2012

光吸収と二項分布ノイズモデル

吸収する光子の数 n

$$p(n) = \binom{N}{n} \alpha^n (1 - \alpha)^{N-n}$$

という **二項分布** に従う.

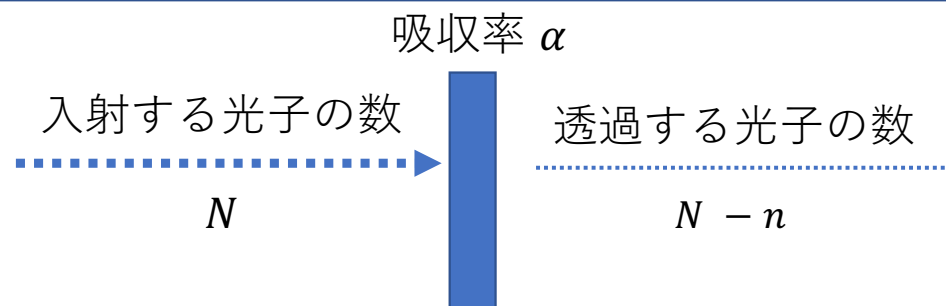


図1: 光吸収の概念図

→ **二項分布に基づいたベイズ推論の枠組みを構築**

計算



$$E(\theta, K) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left\{ n_i \log(\min(f(x_i; \theta, K), 1)) + (N_i - n_i) \log(1 - \min(f(x_i; \theta, K), 1)) + \log \binom{N_i}{n_i} \right\}$$

$$p(\theta|D, K) \propto \exp(-ME(\theta, K)) p(\theta, K) \quad p(K|D) \propto \int \exp(-ME(\theta, K)) p(\theta|K) d\theta$$

(M は計測点の個数, N_i , n_i は光子エネルギー x_i に対応する入射光子数, 吸収光子数)

目次

1. 光吸収スペクトル
2. 光吸収スペクトルにおけるベイズスペクトル分解
3. 数値実験
4. まとめ

問題設定

入射光子数はS/N比に関係 → **入射光子数と推論結果の関係を調べる**

吸収率が小さい場合, **吸収率が大きい場合**とでそれぞれ実験

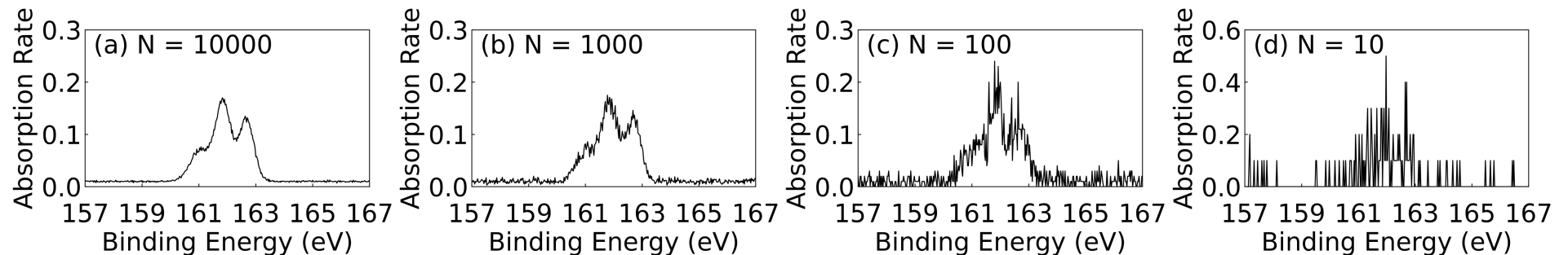


図9: **吸収率が小さい場合**の人工データ

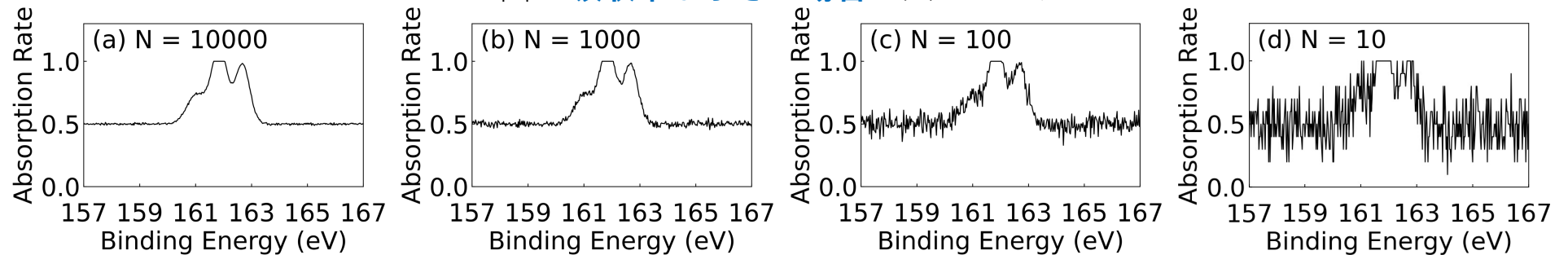
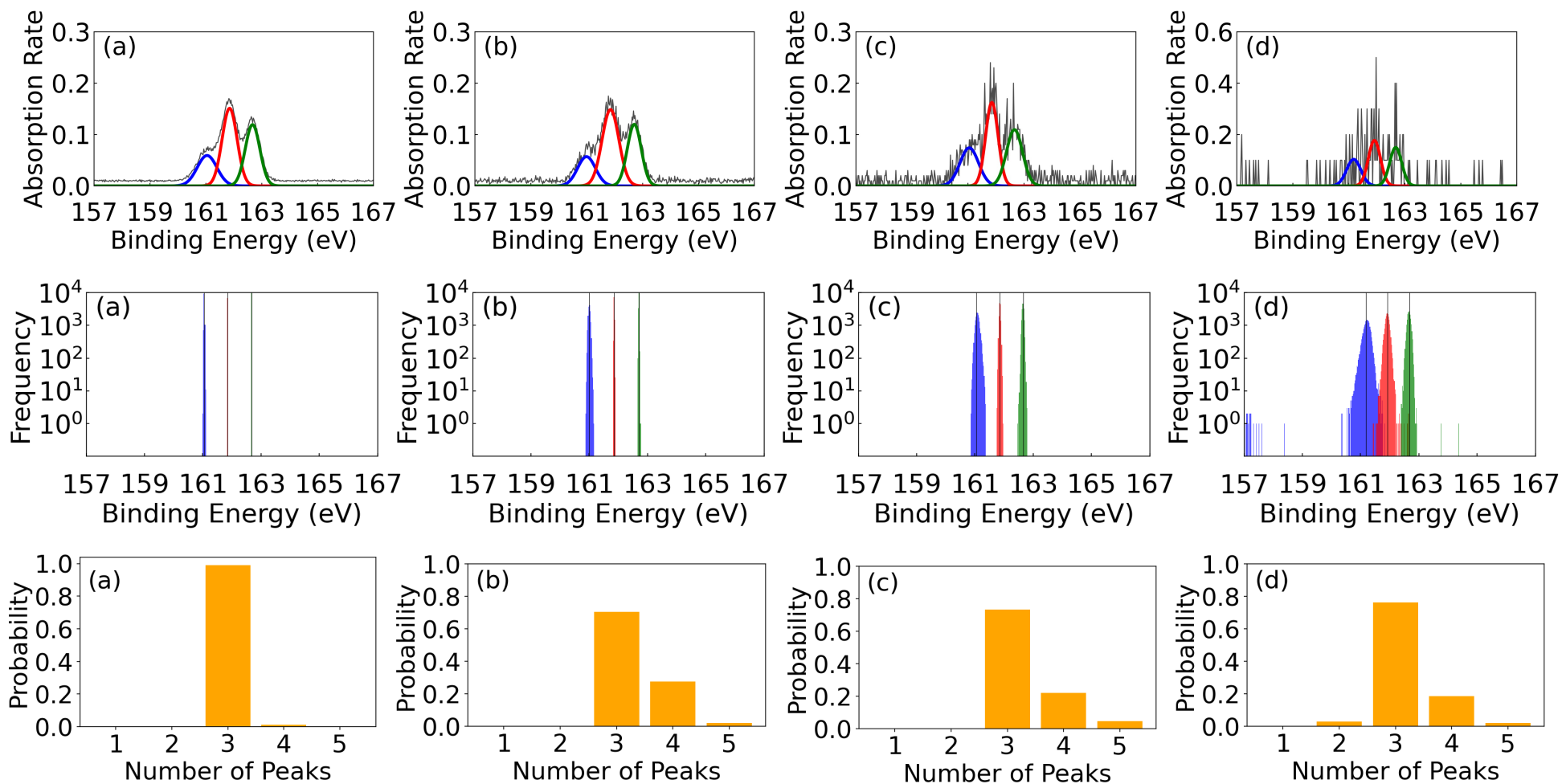
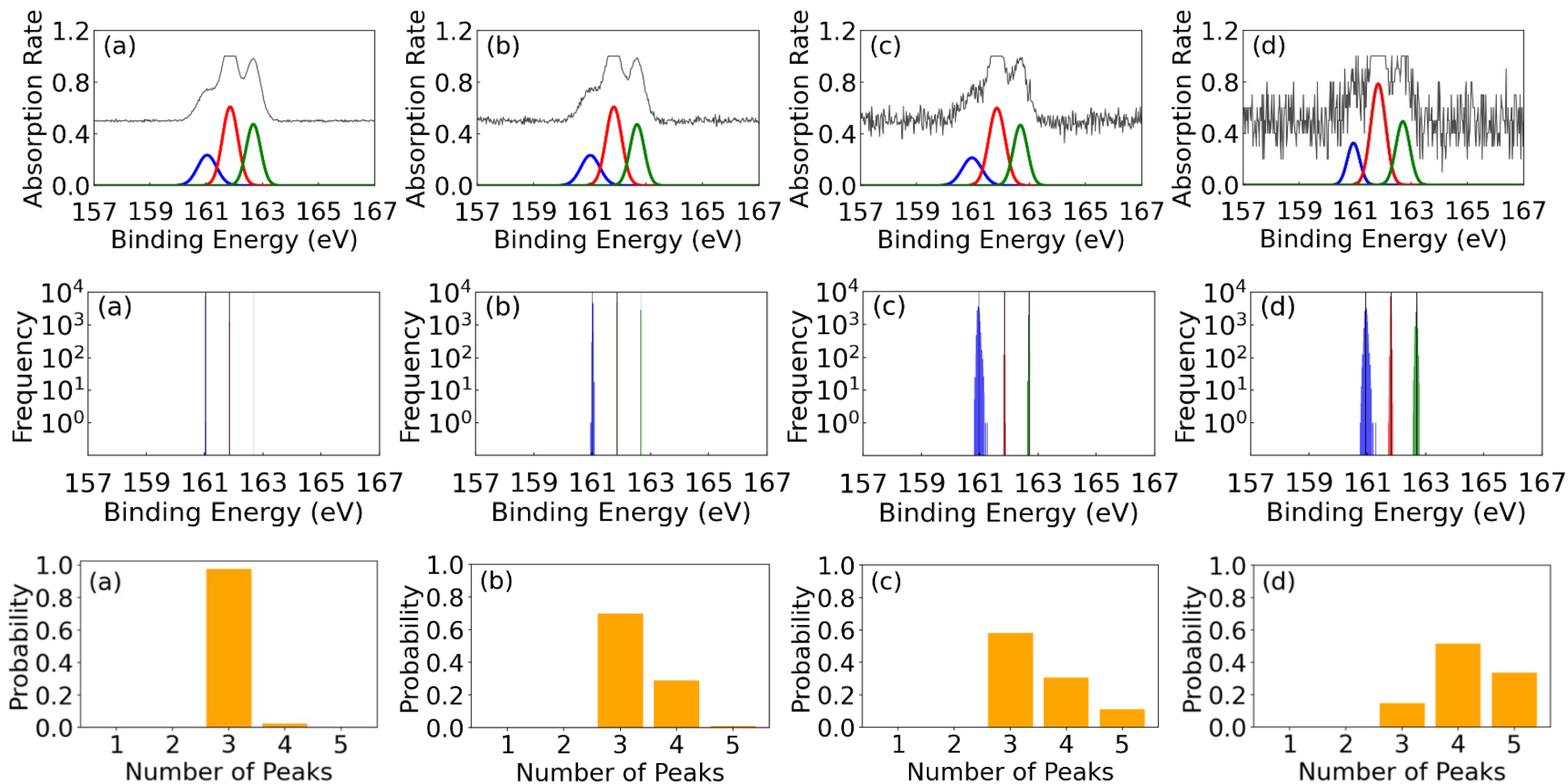


図10: **吸収率が大きい場合**の人工データ

吸収率が小さい場合



吸収率が大きい場合



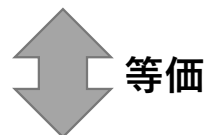
まとめと今後の課題

- 光吸収スペクトルのベイズスペクトル分解
 - 二項分布ノイズモデルによるベイズスペクトル分解が適切
 - ✓ 精度付きパラメータ推定やピーク数選択が可能
 - ✓ ピーク形状が観測できない場合にも推論できる
- 今後の展望
 - 現実データ(XAS, NIR, IRなど) に対して, 適用を行う.

補足(ガウスノイズと二乗誤差)

二乗誤差最小化

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^M \left(\frac{n_i}{N_i} - f(x_i; \theta) \right)^2$$



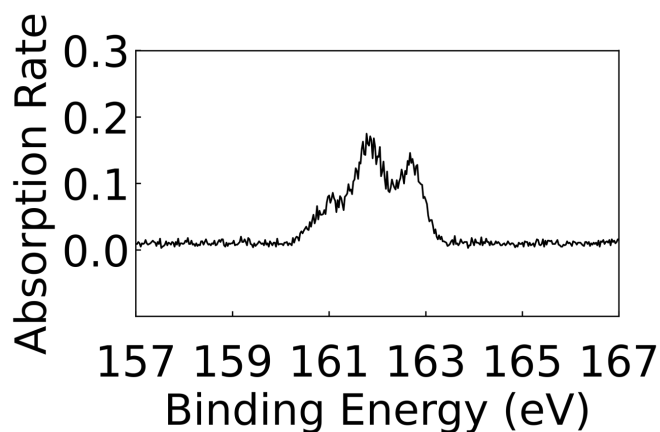
最尤推定 (分散が一定値であるガウスノイズ)

$$\min_{\theta} \prod_{i=1}^M \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left(-\frac{\left(\frac{n_i}{N_i} - f(x_i; \theta) \right)^2}{2\sigma^2} \right) \right\}$$

補足(ガウスノイズと二項分布ノイズ)

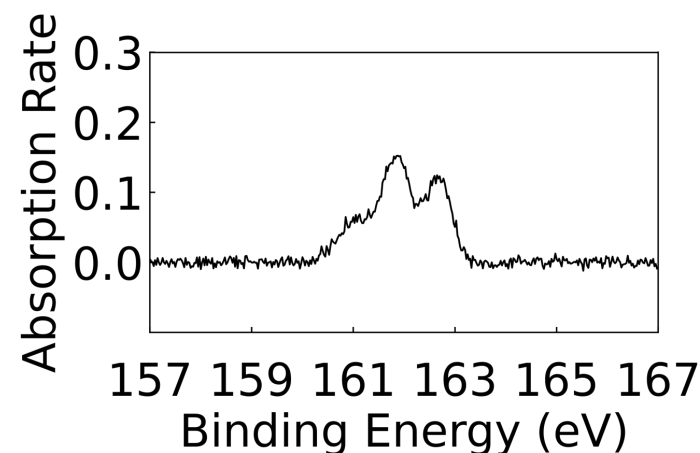
- ・ **ガウスノイズ**と**二項分布ノイズ**の違い

二項分布ノイズに従うデータ



ノイズの強度: $\sqrt{\frac{\alpha(1-\alpha)}{N}}$

ガウスノイズに従うデータ



ノイズの強度: 一定

吸収率が0以下や1以上になりうる