

# 吸収“率”ではなく吸収“量”を対象とした 吸収スペクトルのベイズ的解析

東大理 東大新領域<sup>A</sup>, 熊大技術部<sup>B</sup>, 熊大産ナノ研<sup>C</sup>, NIMS<sup>D</sup>, あいちSR<sup>E</sup>

柏村周平, 片上舜<sup>A</sup>, 岩満一功<sup>B</sup>, 熊添博之<sup>C</sup>, 永田賢二<sup>D</sup>, 岡島敏浩<sup>E</sup>,  
赤井一郎<sup>C</sup>, 岡田真人<sup>A</sup>

## Bayesian analysis of absorption spectra for absorption "quantity" rather than absorption "rate"

*Grad. School of Science, Univ.Tokyo., <sup>A</sup>Grad. School of FS,  
Univ.Tokyo., <sup>B</sup>Tech. Divi, Kumamoto Univ., <sup>C</sup>IINa Kumamoto Univ., <sup>D</sup>  
NIMS., <sup>E</sup>Aichi SR.*

S. Kashiwamura, S. Katakami<sup>A</sup>, K. Iwamitsu<sup>B</sup>, H. Kumazoe<sup>C</sup>, K. Nagata<sup>D</sup>,  
T. Okajima<sup>E</sup>, I. Akai<sup>C</sup>, M. Okada<sup>A</sup>

物質にX線を照射すると、その一部が吸収される。X線の入射強度に応じた吸収強度を吸収スペクトルと呼ぶ。データ処理では、吸収量に対応する量と、入射量に対応する量をそれぞれ観測し、比をとる事で吸収率のスペクトルを算出する。X線吸収端近傍構造(XANES)スペクトルのピーク分離では、この吸収率データを最小二乗法で解析するのが従来手法であった。最小二乗法は、確率的なノイズがガウス分布に従う事を仮定している。一方で、前処理後の吸収率データの揺らぎがガウス分布に従う根拠はない。本発表ではこれを再検討する。

吸収量のデータは単位時間あたり測定される電子数や光子数を数える事で測定されるカウントデータである。単位時間あたりの観測数を数える過程はポアソン過程と呼ばれており、ポアソン分布に従う。本発表では、前処理後の吸収率データを解析するのではなく、吸収量データを解析対象とし、ポアソン分布を尤度に採用したベイズ推論を用いて解析する事を提案する。様々な入射量を仮定した人工データ解析を行い、カウント数が小さくノイズが大きいデータに対しては、提案手法が優れている事を示す。

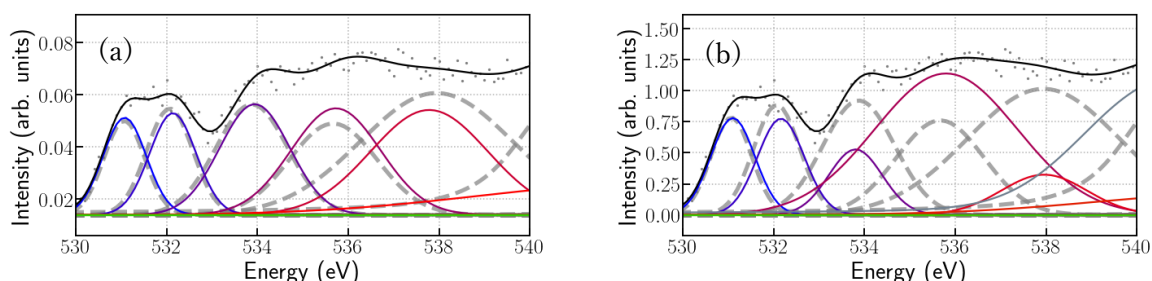


図 1: 人工スペクトルデータをピーク分離した結果。スペクトル真値を灰色破線、推定結果をカラー線でそれぞれ示している。(a)ポアソン尤度を用いた解析の結果。(b)ガウス尤度を用いた解析の結果。