

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

序論

スペクトル分解 ・ 複数のピークを持つスペクトルを
単一のピーク関数の和で表現

例)

スペクトルデータ

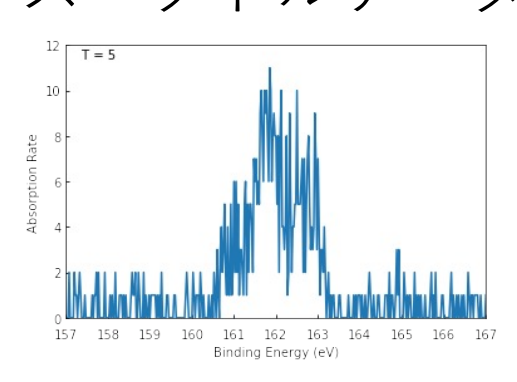


図1: スペクトルデータの例

フィッティング

$$\sum_{k=1}^K a_k \exp\left(-\frac{(x-\mu_k)^2}{\sigma_k^2}\right) + B$$

$\{a_k, \mu_k, \sigma_k\}_{k=1}^K$, B の値を求める.

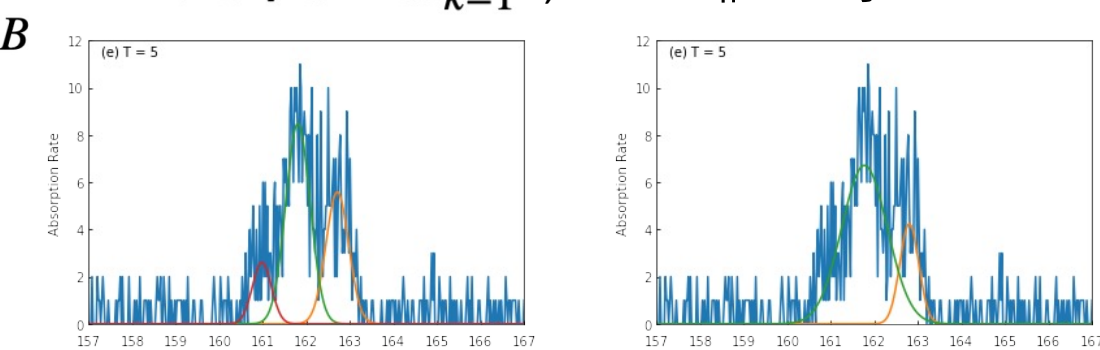


図2: フィッティング, 左がピーク数2, 右がピーク数3

→ パラメータの **信頼区間** や **ピーク数** を決定するには?

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

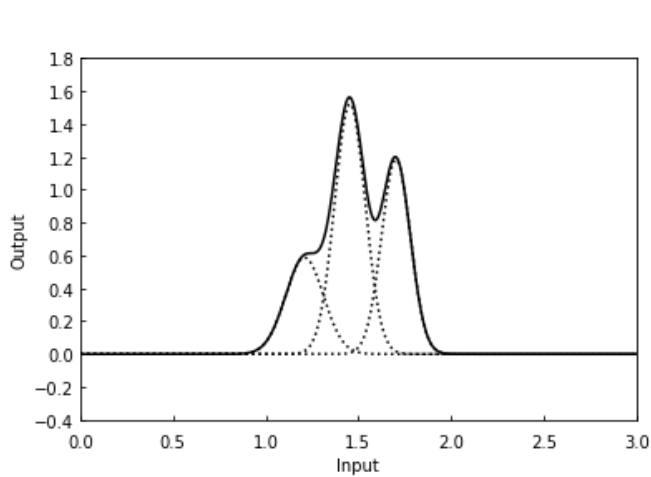
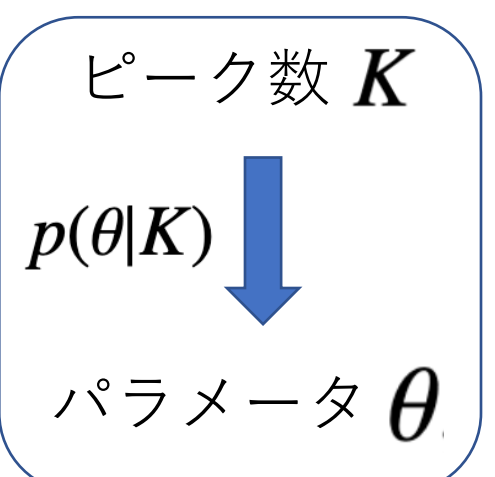


図3: 生成モデルの概念図

2. 確率モデルから, データ生成

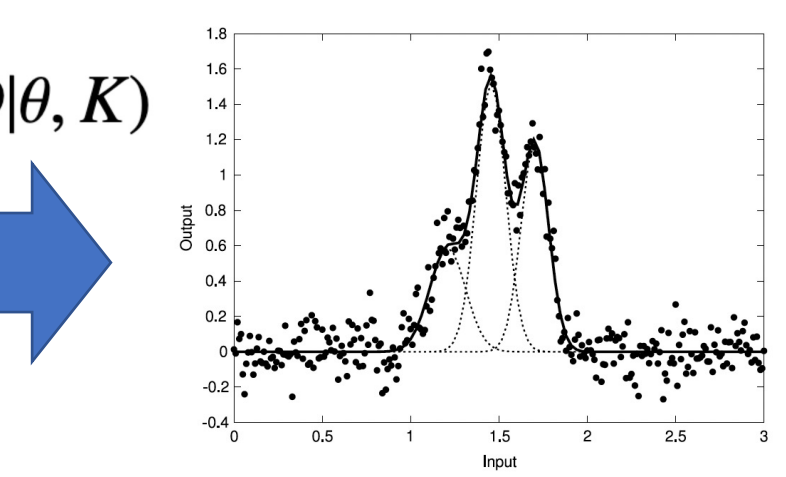


図4: 真値パラメータによる関数形

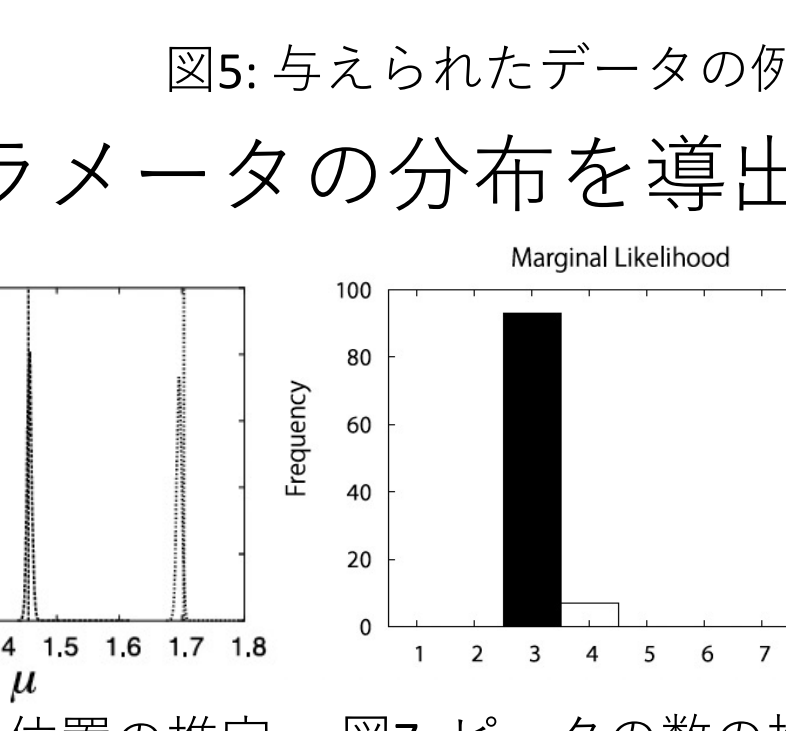


図5: 与えられたデータの例

→ **ベイズの定理** より, ピーク数, パラメータの分布を導出

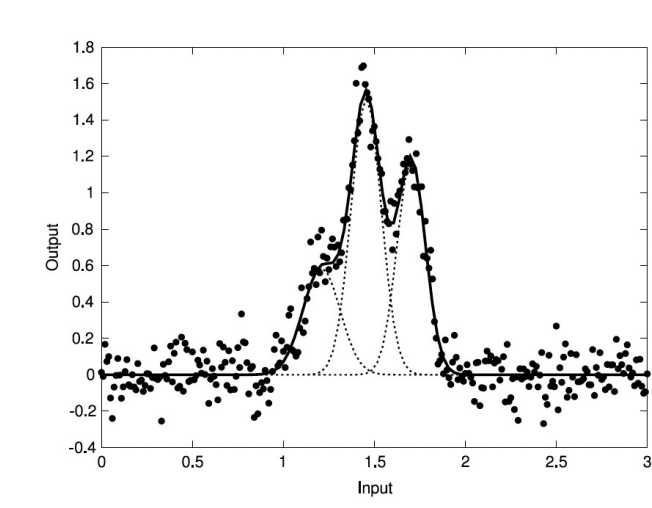


図5: 与えられたデータの例

ベイズ推論

$p(\theta|D, K)$
 $p(K|D)$

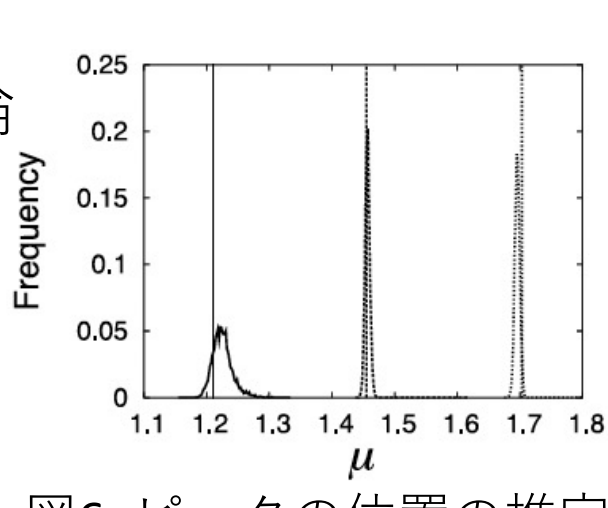


図6: ピークの位置の推定

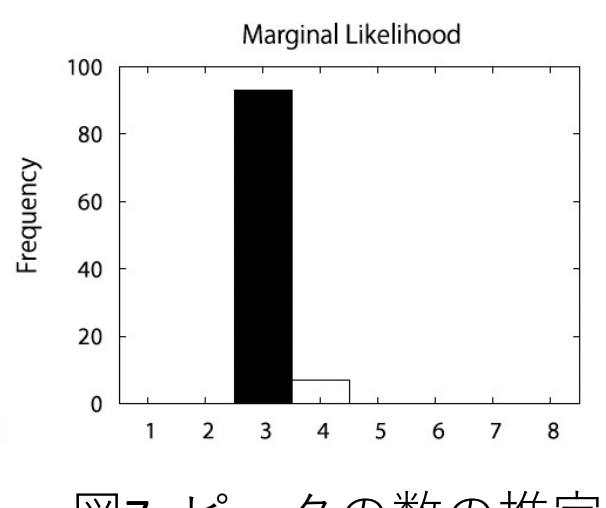


図7: ピークの数の推定

[1] Nagata et al., 2012

確率モデルは **ガウス分布** か **ポアソン分布** を仮定

→ 他の確率モデルが妥当である可能性

目的

二項分布ノイズモデル による
新たなスペクトル分解手法を提案し、
光吸収スペクトルのスペクトル分解 を行う。

定式化

吸収する光子の数 N

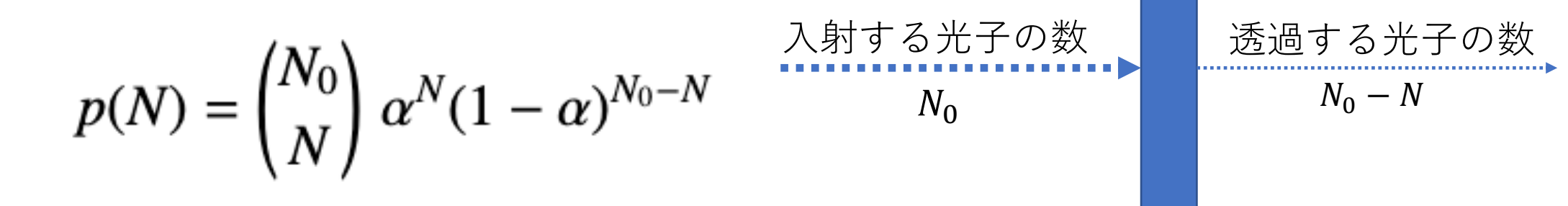


図8: 光吸収の概念図

という **二項分布** に従う。

→ ベイズ推論の枠組みを構築

$$E_{binominal}(\theta, K) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left\{ n_i \log(\max(f(x; \theta, K), 1)) \right. \\ \left. + (N_i - n_i) \log(1 - \max(f(x; \theta, K), 1)) + \log \binom{N_i}{n_i} \right\}$$
$$p(\theta|D, K) \propto \exp(-ME(\theta, K)) p(\theta, K)$$
$$p(K|D) \propto \int \exp(-ME(\theta, K)) p(\theta|K) d\theta$$

手法

交換モンテカルロ法

利点

- ・ 局所最適を乗り越える
 - ・ $p(K|D)$ を, 全ての温度層を使って安定して計算可能
- $$p(K|D) \propto \prod_{l=1}^{L-1} \langle \exp(-M(\beta_{l+1} - \beta_l)E(\theta, K)) \rangle_{p_{\beta_l}(\theta|D, K)}$$

図9: EMCの概念図

数値実験

1. 関数のパラメータ, ピークの数の推定

二項分布によって, データを生成し, ポアソン分布を
確率モデルとした手法[2]と本手法を比較

[2] Nagata et al., 2019

2. 確率モデルの選択

二項分布とポアソン分布によってデータを生成し,
データが二項分布からなる確率を計算。

ピークが0に近い場合

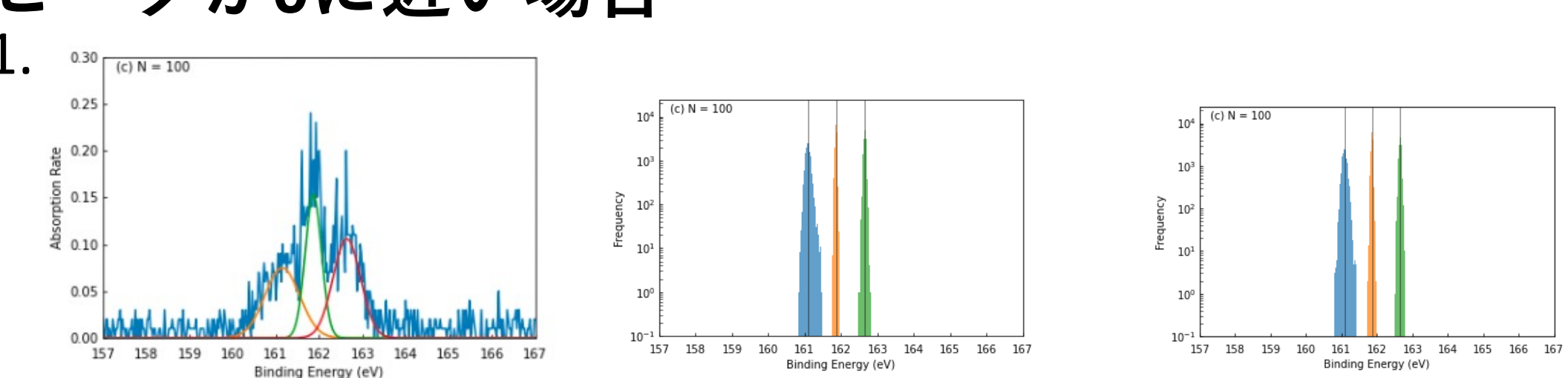


図10: 二項分布に従うデータ

図11: ピーク位置推定, 左: 二項分布, 右: ポアソン分布を仮定

→ ポアソン分布を仮定した場合とほぼ変わらない

2. 二項分布からなるデータを判定できたのは, **36/50**
ポアソン分布からなるデータを判定できたのは, **40/50**

ピークが1に近い場合

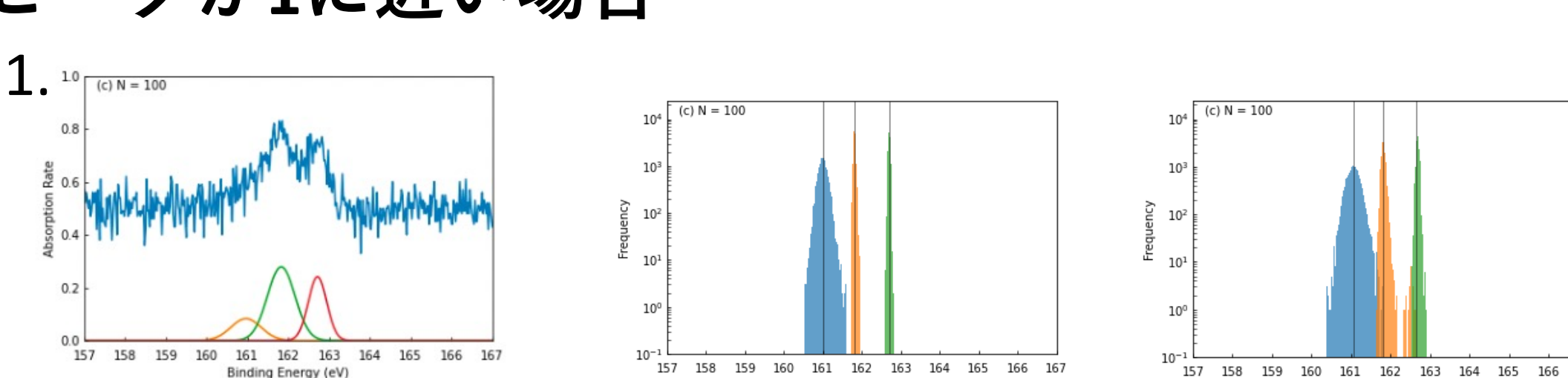


図12: 二項分布に従うデータ

図13: ピーク位置推定, 左: 二項分布, 右: ポアソン分布を仮定

→ **二項分布を仮定すると精度が高い**

2. 二項分布からなるデータを判定できたのは, **50/50**
ポアソン分布からなるデータを判定できたのは, **50/50**

ピークが1を超える場合

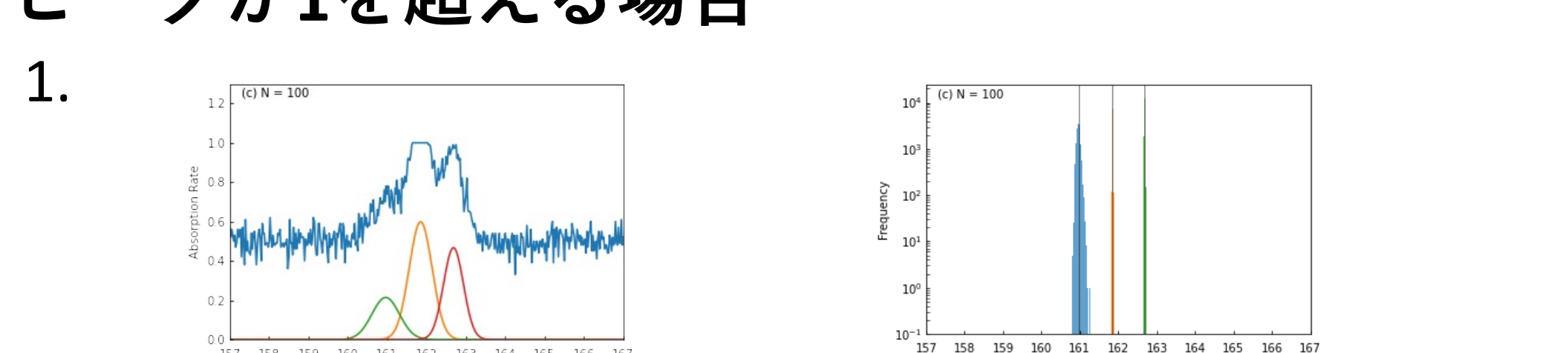


図14: 二項分布に従うデータ

図15: 二項分布を仮定し, ピーク位置推定

→ **吸収率が1を超える場合でも推論可能.**

まとめ

- ・ 光吸収スペクトルの二項分布によるスペクトル分解.
吸収率が小さい場合はポアソン分布でも構わない
吸収率が大きい場合は **二項分布で考えるのが良い**
→ 今後, 現実データに対して適用し, 効果を確認する。