

小角散乱法データを用いた試料パラメータのベイズ推論

東大新領域^A 高輝度光科学研究セ^B 物材機構^C

林悠偉^A, 片上舜^A, 桑本滋生^B, 永田賢二^C, 水牧仁一郎^B, 岡田真人^A

Bayesian Inference for Small-Angle Scattering Data

^AUniv. Tokyo FS, ^BJASRI, ^CNIMS

Y. Hayashi^A, S. Katakami^A, S. Kuwamoto^B, K. Nagata^C, M. Mizumaki^B and M. Okada^A

本講演では、小角散乱法の計測データから試料のモデルパラメータをベイズ推定する手法を提案する。従来の小角散乱法の計測データ解析法は、解析者による手動でのパラメータ調整や勾配法などを用いた最適化を行う過程を持つ。これらの解析の過程では解析者の主観が入る場合や局所解に陥る可能性があるが、解析結果の信頼度を評価することは難しい。提案する手法は、ベイズ統計の枠組みを用いて計測データからモデルパラメータを確率分布として推定することによってこれらの問題を解決する。本発表では、代表的な試料モデルの人工データを用いた数値実験を通して提案手法の性能評価を行う。数値実験の結果から、提案手法は推定の高い精度や信頼度だけではなく、計測時間や計測データの角度領域の下限に対する解析の限界点に関する視座を与えることを見る。

試料のモデルとして単分散球モデルを用いた数値実験の結果を記す。図 1(a) に、単分散球のモデルを用いて生成した人工データのプロットを示した。このデータからモデルのパラメータである粒子の半径 R_M 、バックグラウンドノイズ b 、計測時間 t を提案手法によって推定する。推定した値でのフィッティング結果を図 1(b) に示す。また、このとき推定した各パラメータの分布のヒストグラムを図 2 に示す。推定の信頼度は得られた分布の統計量や形状から解釈することが出来る。

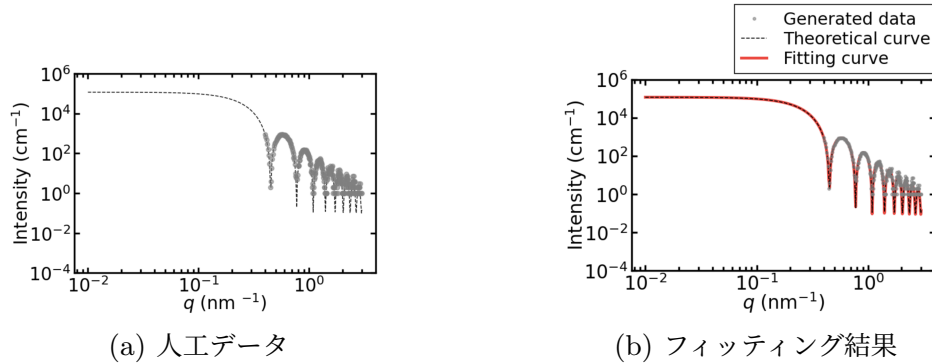


図 1 単分散球モデルの人工データとフィッティング結果

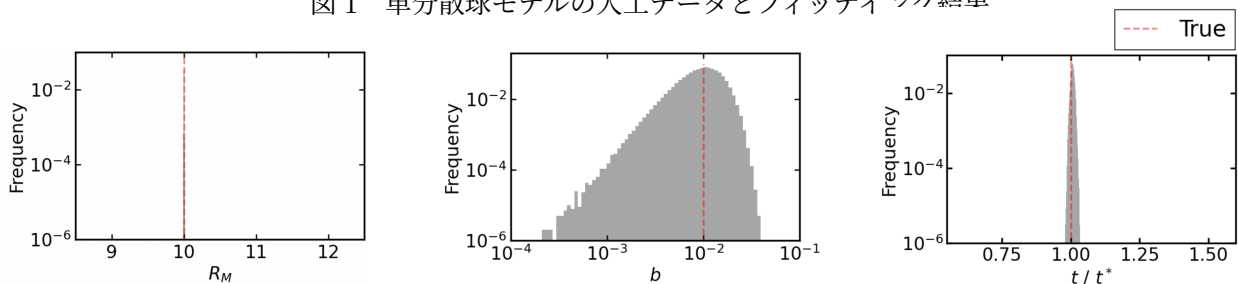


図 2 モデルパラメータの分布のヒストグラム. t^* は計測時間 t の真値を表す。