

# ベイズ計測

岡田真人

東京大学 大学院新領域創成科学研究科  
物材機構 統合型材料開発・情報基盤部門 (NIMS MaDIS)

# 自己紹介(理論物理)

- 大阪市立大学理学部物理学学科 (1981 - 1985)
- 大阪大学大学院理学研究科物理専攻 (1985 – 1987)
  - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- 三菱電機 (1987 - 1989)
  - 化合物半導体(半導体レーザー)の結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学 (1989 - 1996)
- JST ERATO 川人学習動態脳プロジェクト (1996 - 2001)
- 理化学研究所 脳科学総合研究センター (2001 - 04/06)
- 東京大学・大学院新領域創成科学研究所 複雑理工学専攻 (2004/07 – )

# 共同研究者

永田 賢二 産総研人工知能センター, JSTさきがけ

村岡 恴 東京大学 大学院新領域創成科学研究科

徳田 悟 産総研MathAM-OIL

本武 陽一 東京大学 大学院新領域創成科学研究科

杉田 精司 東京大学 大学院理学系研究科

佐々木 岳彦 東京大学 大学院新領域創成科学研究科

# [情報計測] 計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用

◀ トップに戻る

## | 戰略目標

「材料研究をはじめとする最先端研究における計測技術と高度情報処理の融合」

## | 研究総括



雨宮 慶幸(東京大学 大学院新領域創成科学研究科 特任教授)

## | 副研究総括



北川 源四郎(東京大学 数理・情報教育研究センター 特任教授)

# インテリジェント計測・解析手法の例

- 研究開発に関するロスの削減・物質材料の開発期間の短縮
  - S/N比が低く、ノイズに埋もれたシグナルの顕在化・高精度解析
  - 直接計測が困難な物理量を定量化・可視化
  - 大型研究施設のマシンタイムの効率化
  - 汎用ラボ用の測定機器を用いた高度な構造解析

# [情報計測] 平成29年度採択課題

← トップに戻る

所属・職名は、研究者がresearchmapに登録した情報をそのまま表示しています。（[詳細はこちら](#)）researchmapの登録状況により、情報が最新ではない、あるいは空白に見える場合があります。また、インターネット接続がない状態では表示されません。

## | 岡田 真人

### ベイズ推論とスパースモデリングによる計測と情報の融合

#### | 研究代表者

岡田 真人 



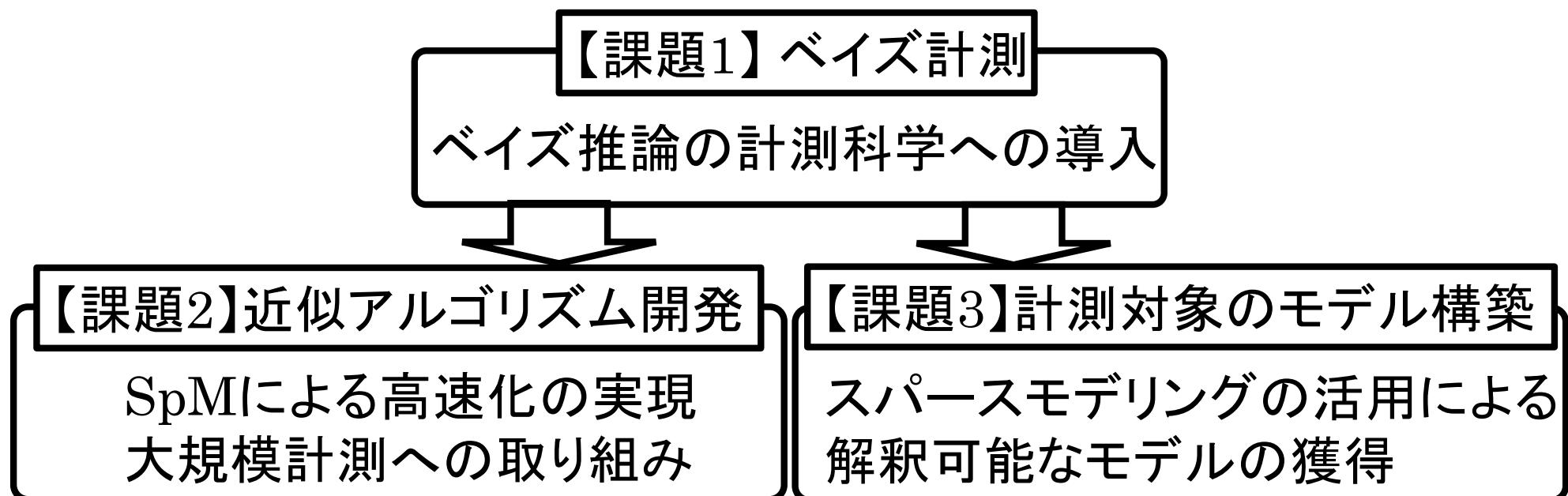
東京大学 新領域創成科学研究科 教授

#### | 主たる共同研究者

長尾 大道 	東京大学 地震研究所 准教授
日野 英逸 	統計数理研究所 モデリング研究系 准教授

# 本研究提案の目的

ベイズ推論を計測科学に導入した**ベイズ計測**により、  
計測科学がどう変わるかの具体例を提示し、その具体  
例の中から、ベイズ計測と呼ぶべき計測の情報数理  
科学的な学理の構築を目指す。



# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・レプリカ交換モンテカルロ法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

# 修士課程の指導教官 小谷章雄先生

Journal of the Physical Society of Japan  
Vol. 56, No. 2, February, 1987, pp. 798-809

## Many Body Effect in Inner Shell Photoemission and Photoabsorption Spectra of La Compounds

Akio KOTANI, Masato OKADA, Takeo JO,  
A. BIANCONI, <sup>†</sup>A. MARCELLI<sup>†</sup> and J. C. PARLEBAS<sup>††</sup>

*Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University,  
Toyonaka 560*

*<sup>†</sup>Dipartimento di Fisica, Università di Roma “La Sapienza”,  
00185 Roma, Italy*

*<sup>††</sup>LMSES, Université Louis Pasteur, 67070 Strasbourg, France*

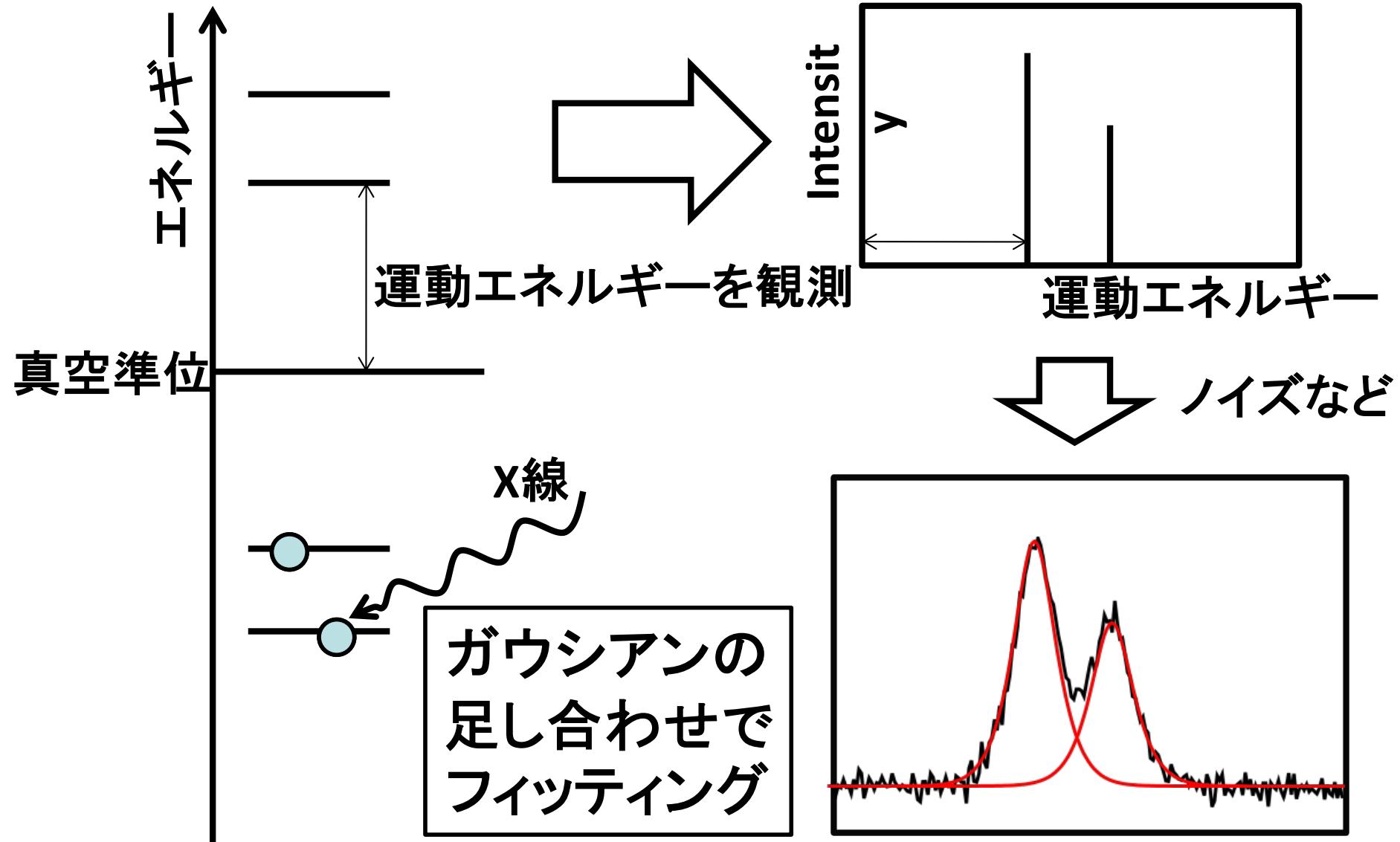
(Received October 14, 1986)

## REFERENCES

1. A. Kotani & Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* **37**, 912 (1974).
2. O. Gunnarsson & Schönhammer, *Phys. Rev.* **B27**, 4315 (1983).
3. A. Fujimori, *Phys. Rev.* **B28**, 2281 (1983).

# X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS)

## X線光電子分光



# 希土類化合物のXPSとXAS

The spectra of 3d-XPS and L<sub>3</sub>-XAS are expressed as

$$F_{\text{XPS}}(E_B) = \sum_f |\langle f | a_c | g \rangle|^2 L(E_B - \underline{E_f + E_g}), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} F_{\text{XAS}}(\omega) &= \frac{1}{N} \sum_f |\langle f | \sum_k a_d^+(k) a_c | g \rangle|^2 \\ &\times L(\omega - \underline{E_f + E_g}), \end{aligned} \quad (3)$$

where

$$L(x) = \underline{\Gamma} / [\pi(x^2 + \underline{\Gamma^2})]. \quad (4)$$

スペクトルで多体効果を見る

(A. Kotani, K. Okada and M. Okada, 1987)

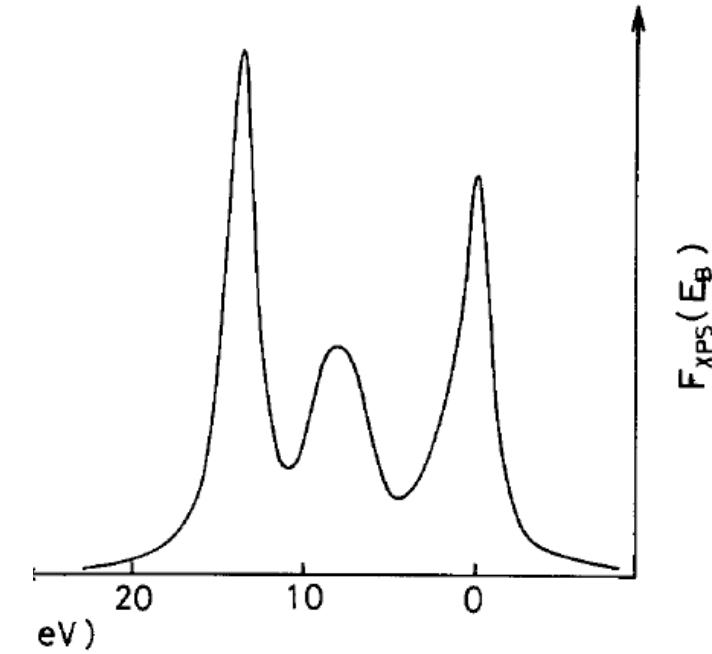


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy  $E_B$  is taken arbitrarily.

ピーケの位置と幅から、対象の物理的性質の考察が可能になる

順モデルからパラメータフィットしてスペクトルを再構成

# Kotani-Joの2p-XASのモデル

- Kotani-Joモデル:
- $U_{dc}$ により5d電子が内殻正孔とエキシトンを形成する
- 5d電子が局在することでCe5dバンドが狭くなり, f電子とそうが作用する( $U_{fd}$ )
- 結論
  - 絶縁体には必要
  - 金属ではよくわからない

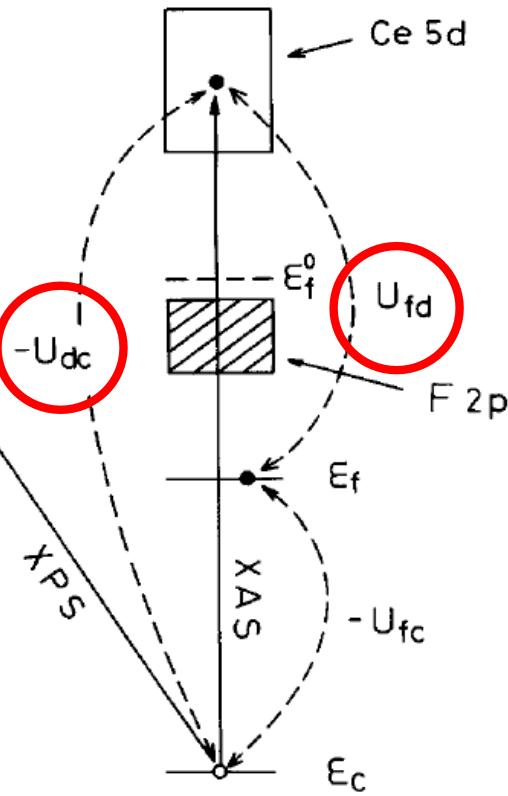
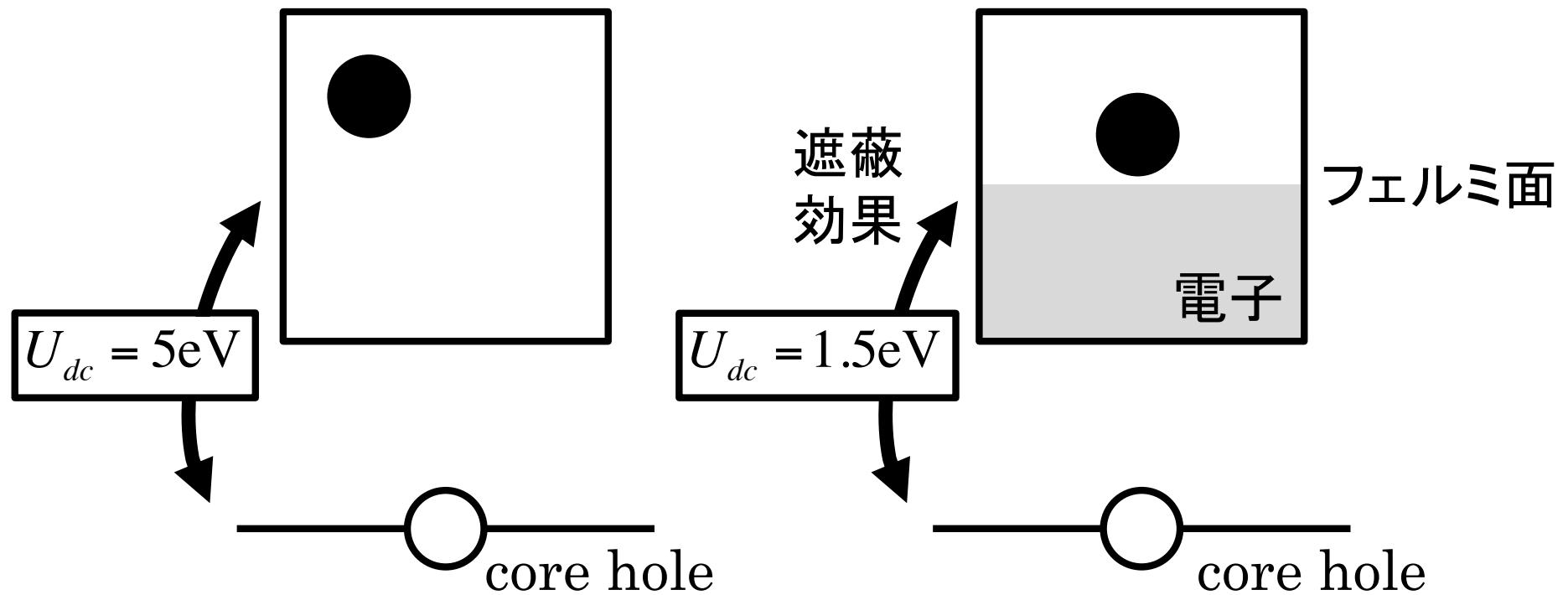


Fig. 1. Model of the present theory describing 3d-XPS and  $L_3$ -XAS.

# KotaniとGunnarssonの主張



- 金属では励起電子の緩和プロセスが見えていた。
- 励起の初期には  $U_{dc}$  が絶縁体程度 (Kotaniの主張)
- 緩和することで遮蔽効果が効く。  $U_{dc}=0$  (Gunnarssonの主張)
- これはまだ決着がついていないと思われる。

# なにが問題か: モデル選択

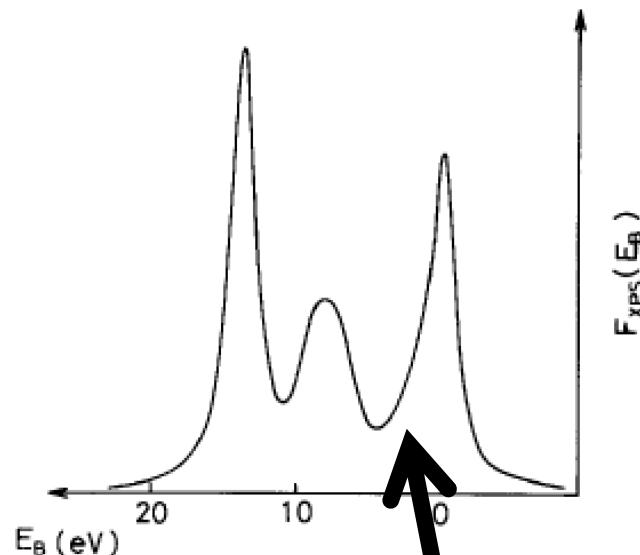
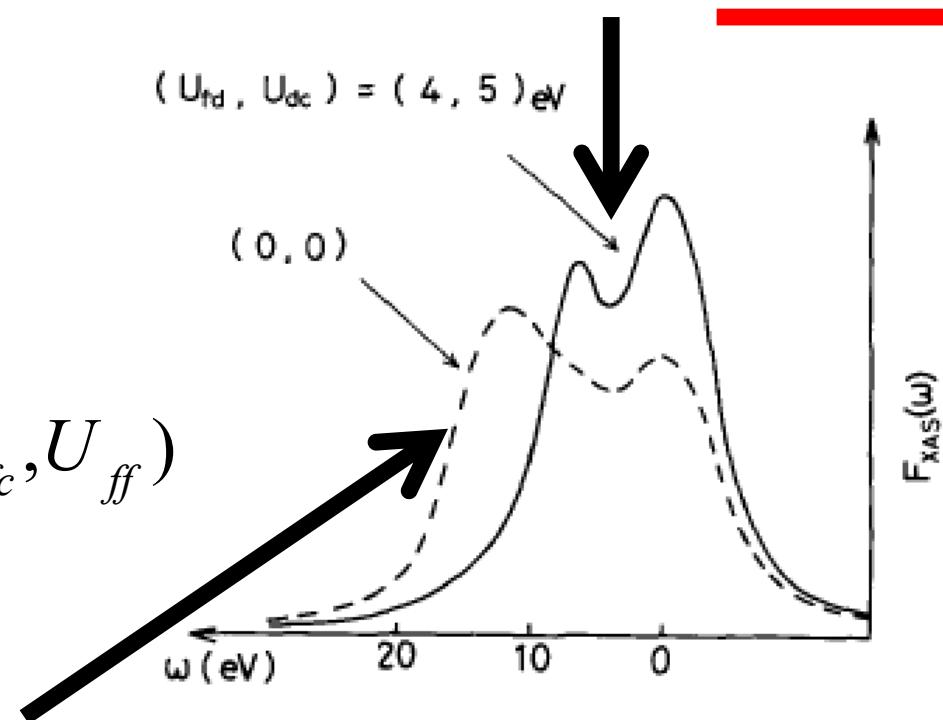


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy  $E_B$  is taken arbitrarily

$$f_{XPS}(E_B) = f_{XPS}(E_B | \varepsilon_f, V, U_{fc}, U_{ff})$$



$$f_{XAS}(x) = \int dx' f_{XPS}(x' | \varepsilon_f, V, U_{fc}, U_{ff}) g_{5d}(x)$$

$$f_{XAS}(x) = f_{XAS}(x | \varepsilon_f, V, U_{fc}, U_{ff}, U_{dc}, U_{fd})$$

$$(U_{fd}, U_{dc}) = (4, 5) \text{ eV}$$

# 希土類化合物の $L_3$ -XASを解析して

- Kotaniの主張:  $U_{dc}$ が必要
  - 結論
    - 絶縁体では5eV程度
    - 金属では1~2eV程度
  - 当時(30年前)感じた問題点
    - 発見法的なパラメータサーチ
    - XPSを決めてからXASを解析
    - 余分なパラメータを導入?
    - オーバーフィット
    - 推定パラメータの誤差評価
- ベイズ的アプローチ, ベイズ統合

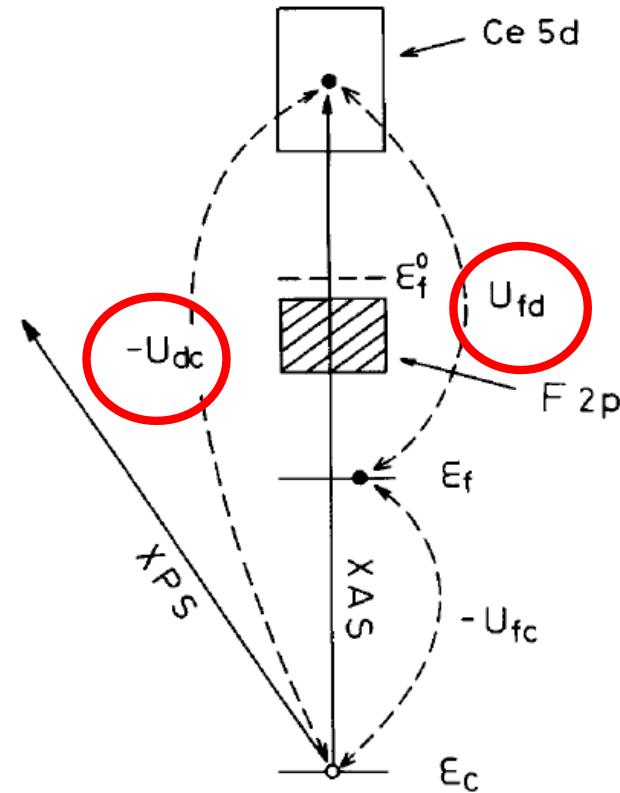
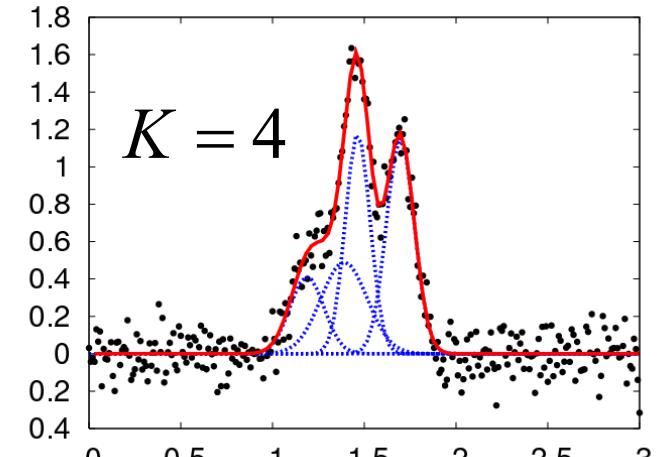
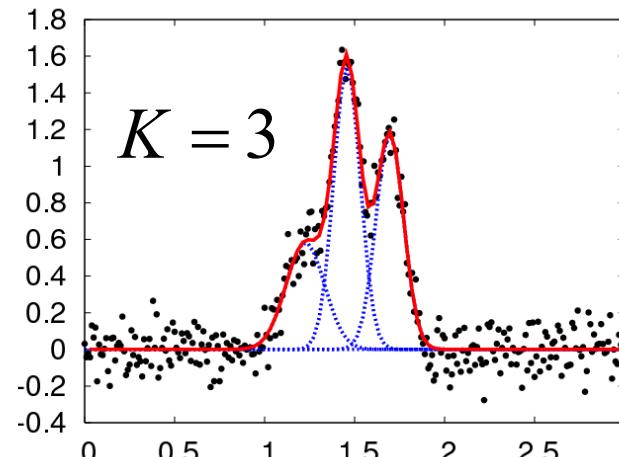
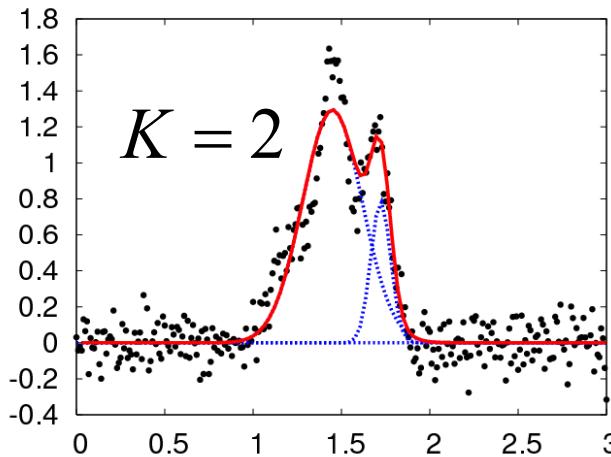
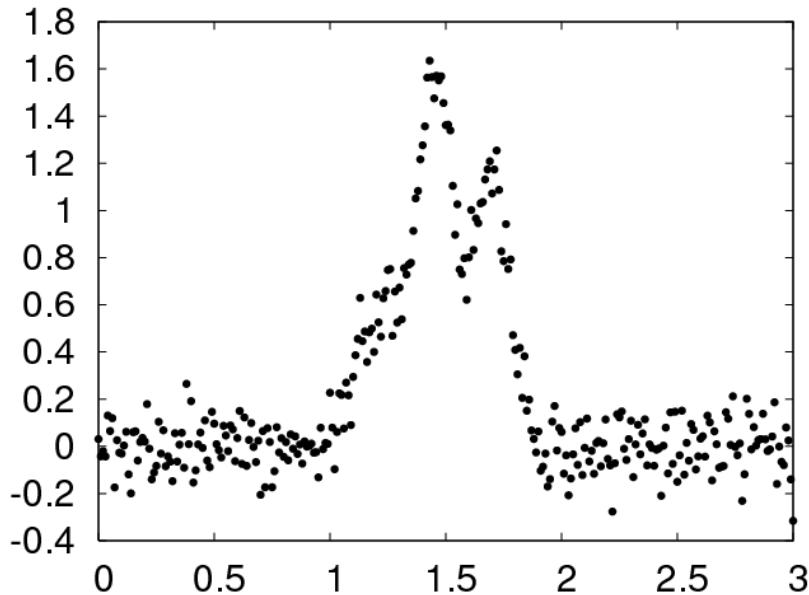


Fig. 1. Model of the present theory describing 3d-XPS and  $L_3$ -XAS.

# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・レプリカ交換モンテカルロ法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

# 例題1:スペクトル分解



Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・レプリカ交換モンテカルロ法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

# スペクトル分解の定式化

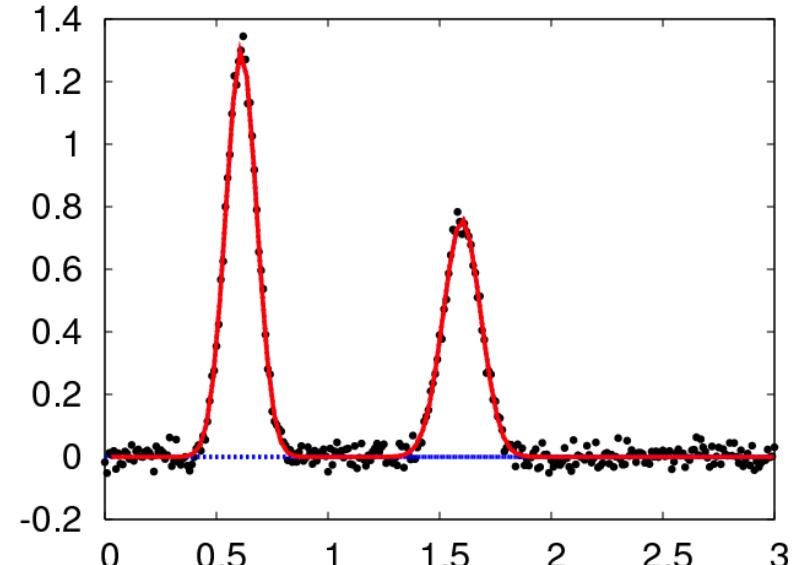
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより、スペクトルデータを近似

観測データ:  $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

$x_i$ : 入力  $y_i$ : 出力

$$f(x; \theta) = \sum_{k=1}^K a_k \exp\left(-\frac{b_k(x - \mu_k)^2}{2}\right)$$

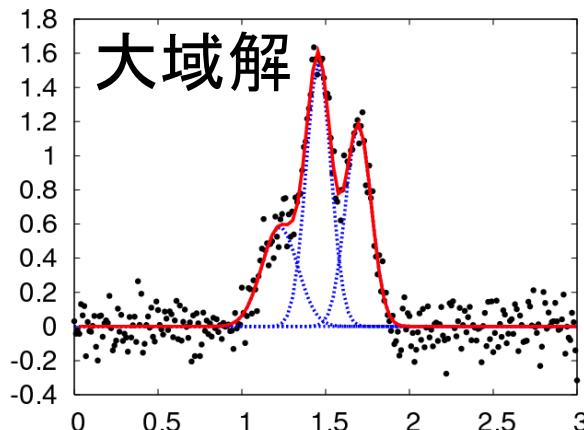
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \dots, K$$



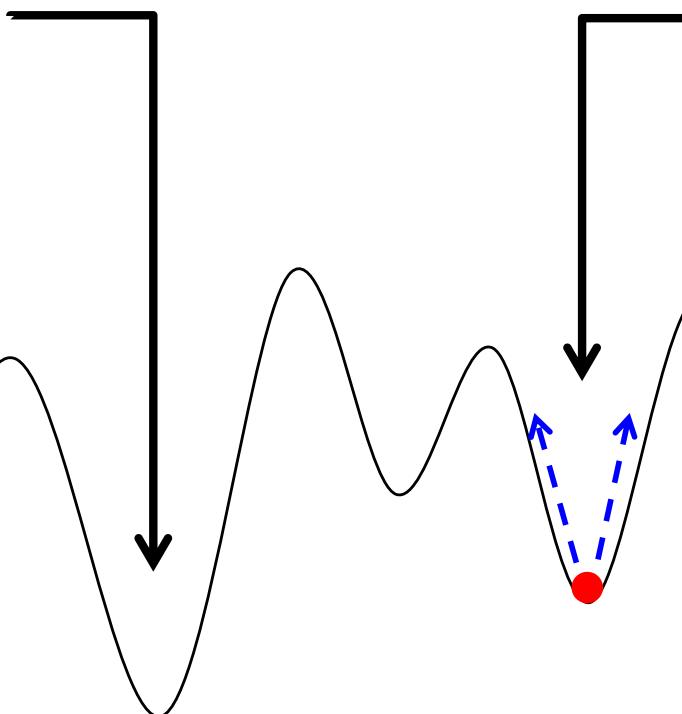
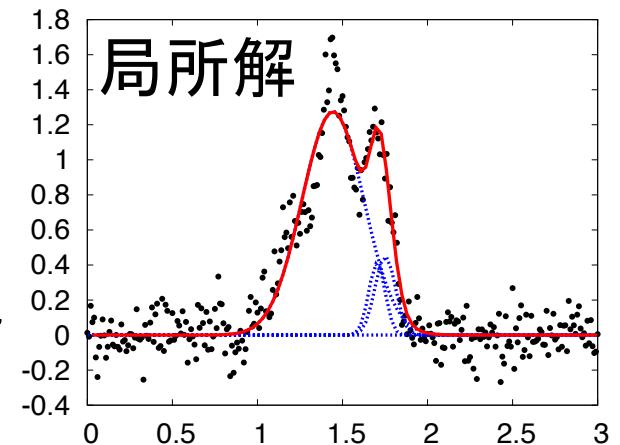
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

$$E(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \theta))^2$$

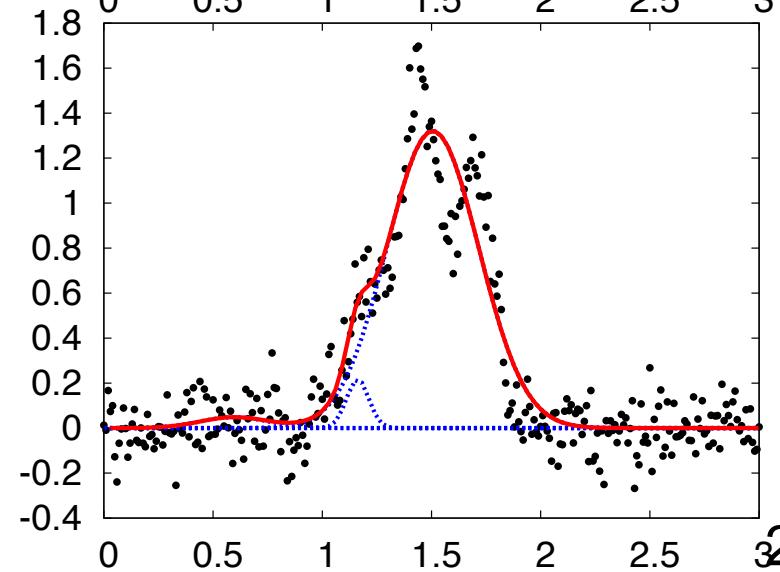
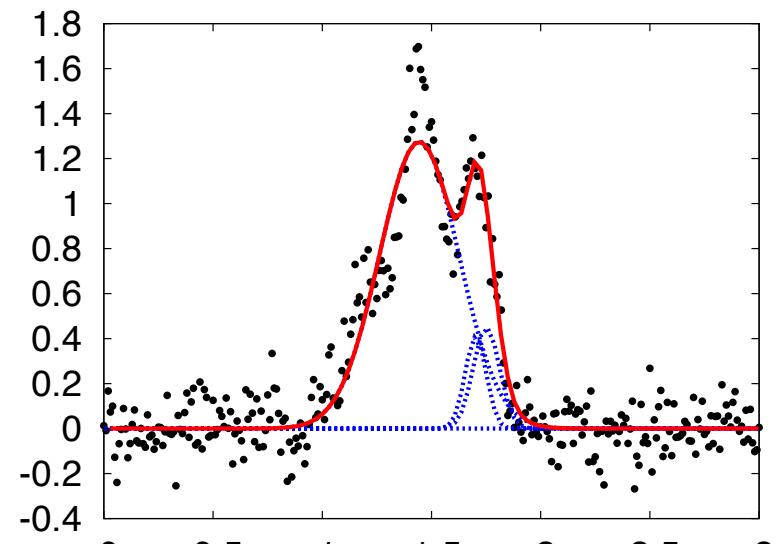
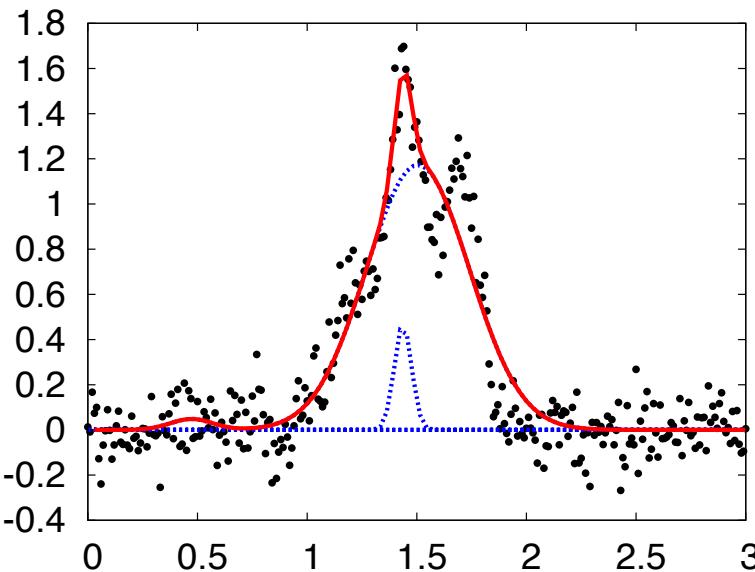
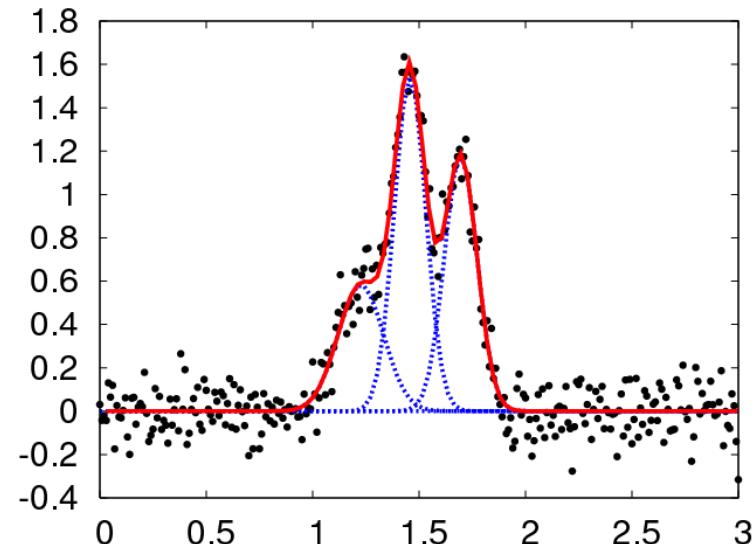
# 誤差関数は局所解を持つ



大域解  
<通常の最適化法>  
e.g., 最急降下法



# ローカルミニマム



# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・マルコフ連鎖モンテカルロ法と交換法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

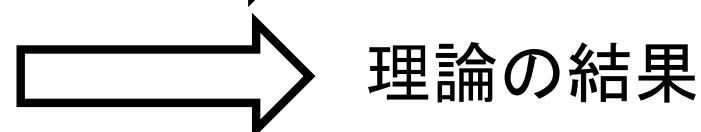
# ベイズ計測

順アプローチ

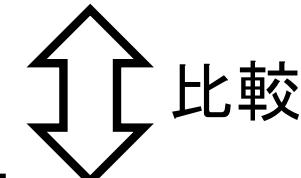
計測データ



モデル



$$p(Y | \theta, K) \text{ 解析計算, 数値計算}$$



逆アプローチ

対象とする  
物理系

系の物理

モデル

$$p(\theta, K)$$

観測過程

計測機器の特性

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

計測データ

全てをモデル化し  
ベイズの定理で因果をさかのぼる

# 確率的定式化

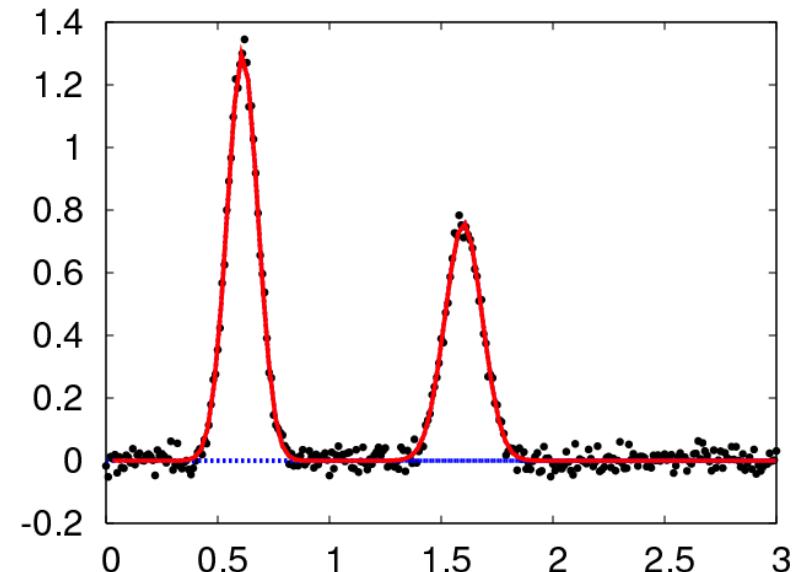
出力は、入力からの応答とノイズの足し合わせにより生成

⇒出力は、確率変数である。

$$y_i = f(x_i; \theta) + \varepsilon$$

ノイズが正規分布であるとすると、

$$p(y_i | \theta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(y_i - f(x_i; \theta)\right)^2\right)$$



それぞれの出力  $y_i$  が、独立であるとすると、

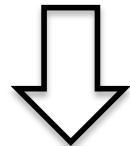
$$p(Y | \theta) = \prod_{i=1}^n p(y_i | \theta) \propto \exp(-nE(\theta)) \quad Y = \{y_1, \dots, y_n\}$$

$$E(\theta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \theta))^2$$

ボルツマン分布

# ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

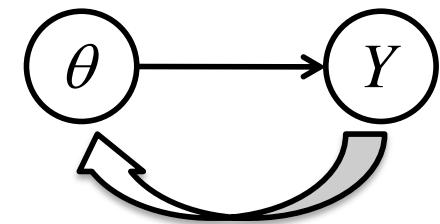
$$p(Y, \theta) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)}$$



<ベイズの定理>

$$p(\theta | Y) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)} \propto \exp(-nE(\theta))p(\theta)$$

生成(因果律)



$p(\theta | Y)$  : 事後確率。データが与えられたもとでの、パラメータの確率。

$p(\theta)$  : 事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。  
これまで蓄積してきた科学的知見

# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・マルコフ連鎖モンテカルロ法と交換法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

# メトロポリス法のアルゴリズム

〈確率分布  $P(\theta)$  に従うサンプリング・アルゴリズム〉

1.  $\theta$  の初期値  $\theta_{(0)}$  を適当に設定する。

2. 現在の点  $\theta_{(t)}$  から、以下の式で候補  $\theta'$  を生成する。

$$\theta' = \theta_{(t)} + \varepsilon \quad \varepsilon : \text{平均}0\text{の一様乱数、正規乱数など}$$

3. 密度の比較により、次の状態  $\theta_{(t+1)}$  を決める。

$$P(\theta_{(t)}) \leq P(\theta') \quad \rightarrow \quad \theta_{(t+1)} = \theta'$$

$$P(\theta_{(t)}) > P(\theta') \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} \text{確率 } r \text{ で } \theta_{(t+1)} = \theta' \\ \text{確率 } 1 - r \text{ で } \theta_{(t+1)} = \theta_{(t)} \end{array} \quad r = \frac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})}$$

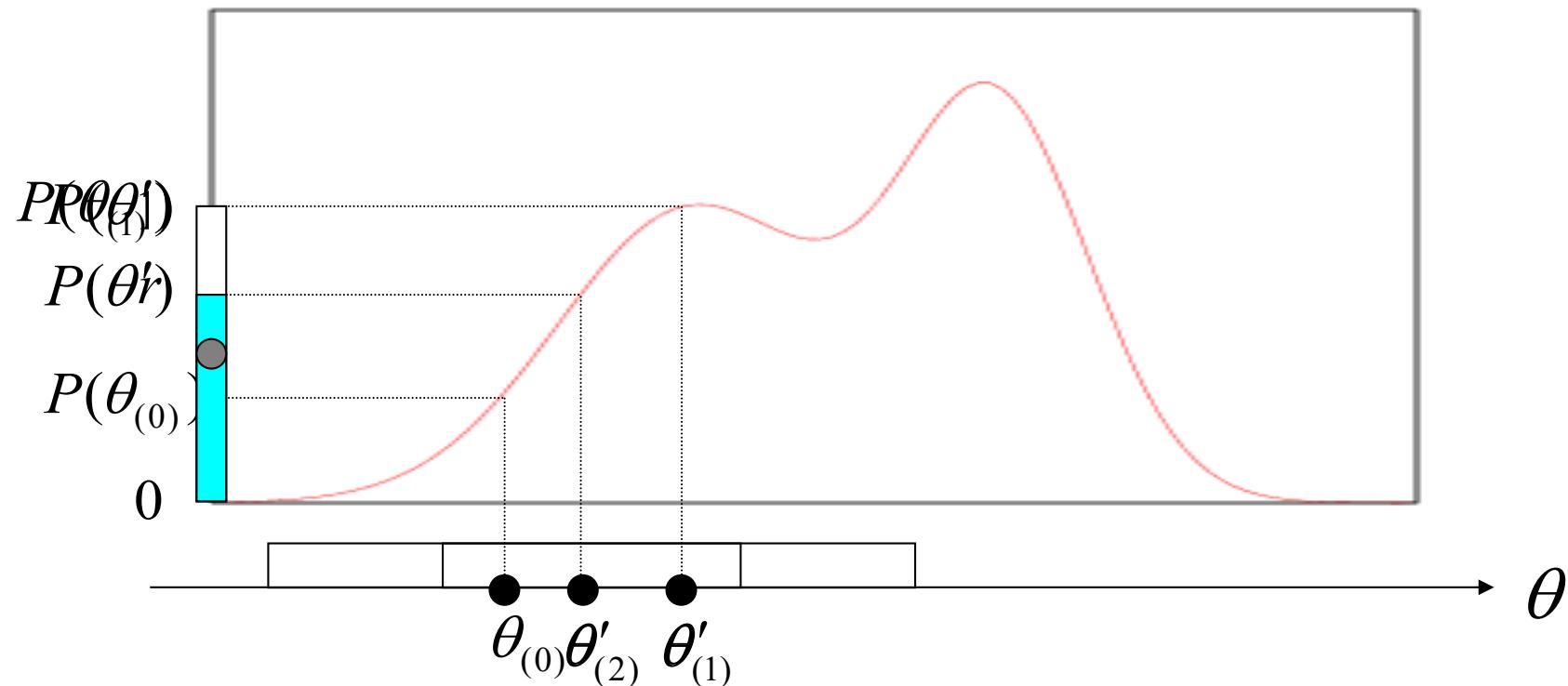
4. ステップ2に戻り、繰り返す。

# メトロポリス法: 計算の簡略化

(例) 以下の確率分布  $P(\theta)$  に従うサンプル生成

3. 確度の増加により逐次更新して候補を生成する。

$$P(\theta_{(t)}) P(\theta_{R_t}(\theta)) \frac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})} + s \xrightarrow{\text{確率 } r \text{ で } \theta_{(t+1)} = \theta'} \xrightarrow{\text{確率 } 1-r \text{ で } \theta_{(t+1)} = \theta_{(t)}} \frac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})}$$

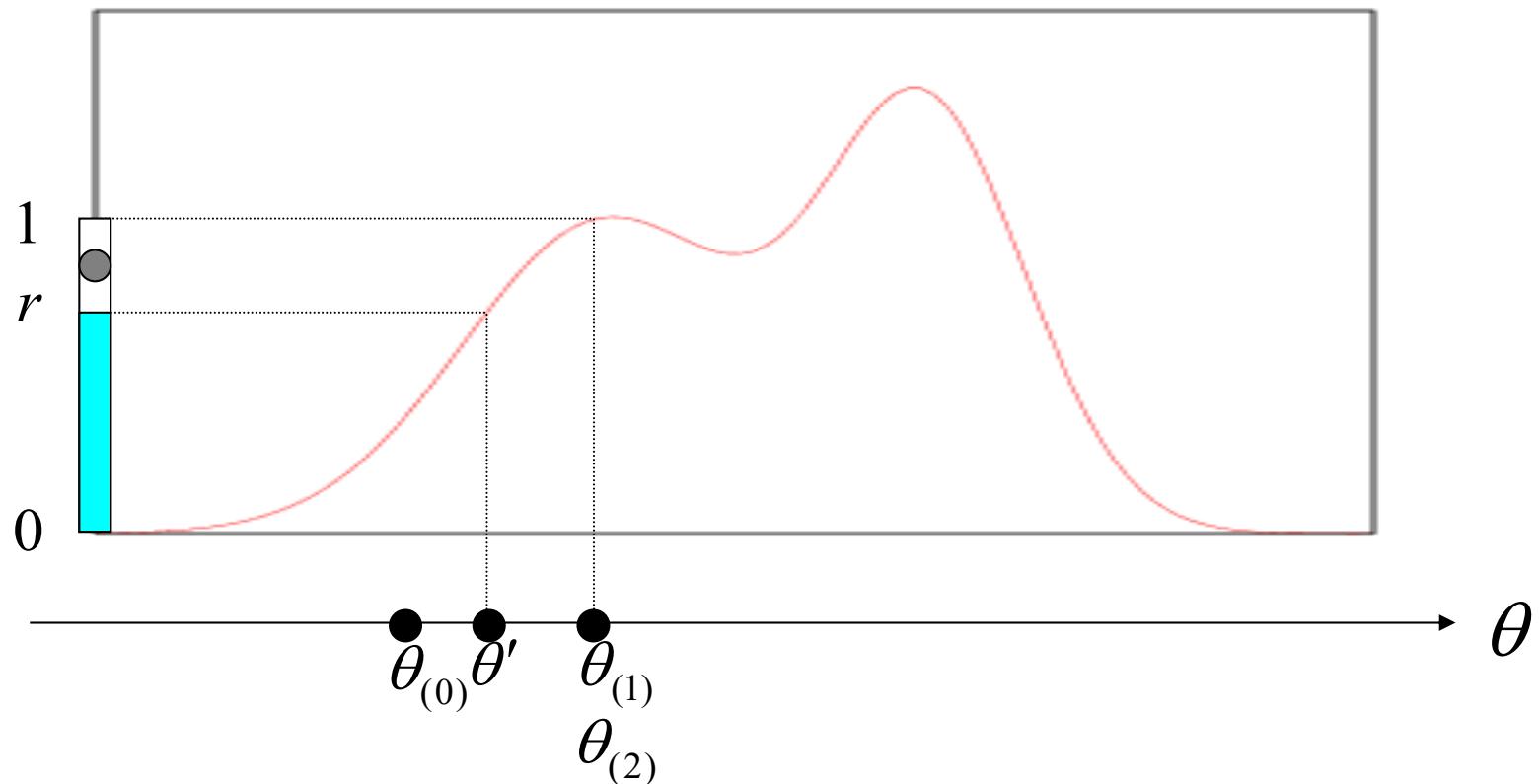


# メトロポリス法

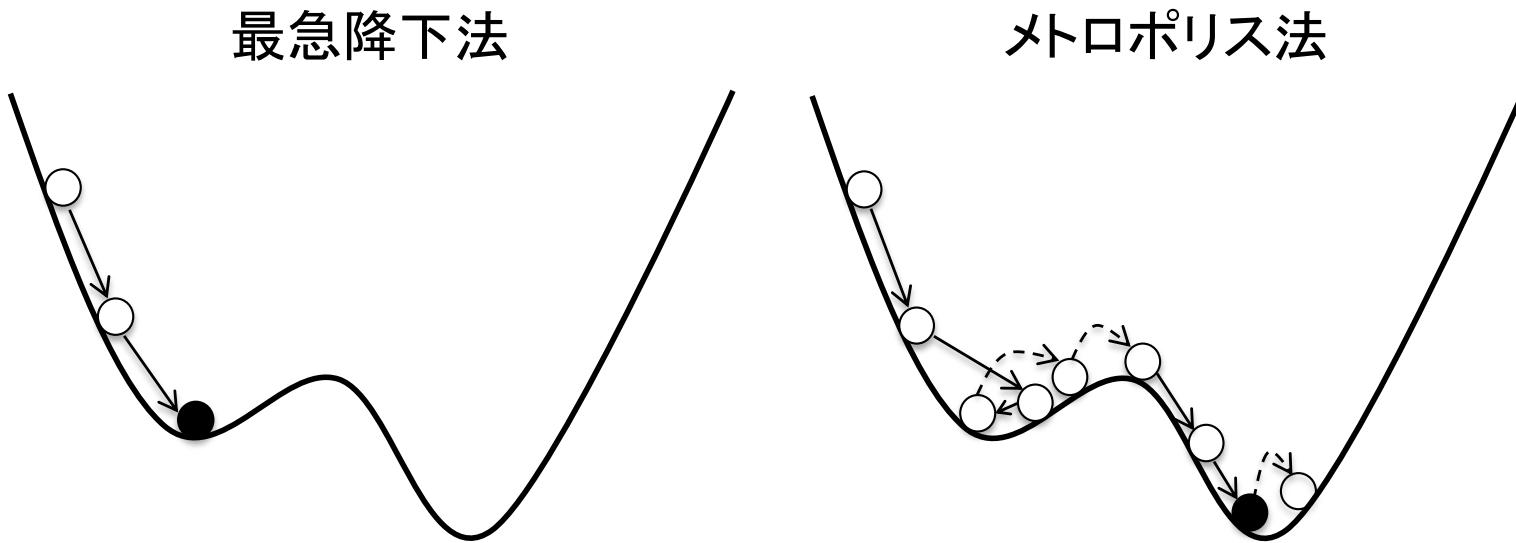
(例) 以下の確率分布  $P(\theta)$  に従うサンプル生成

3. 密度の比較により、次の点  $\theta_{(t+1)}$  を決める。

$$P(\theta_{(t)}) > P(\theta') \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} \text{確率 } r \text{ で } \theta_{(t+1)} = \theta' \\ \text{確率 } 1 - r \text{ で } \theta_{(t+1)} = \theta_{(t)} \end{array} \quad r = \frac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})}$$



# 最急降下法との比較

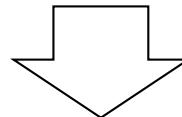


- ・メトロポリス法だと、局所解から脱却する可能性がある。
- ・十分な更新を行うと、以下のボルツマン分布からのサンプリングと見なせる。

$$p(\theta) \propto \exp(-\beta E(\theta))$$

# メトロポリス法の問題：遅い緩和

メトロポリス法の基本は、「少し変えて、選ぶかどうかを確率的に決める。」

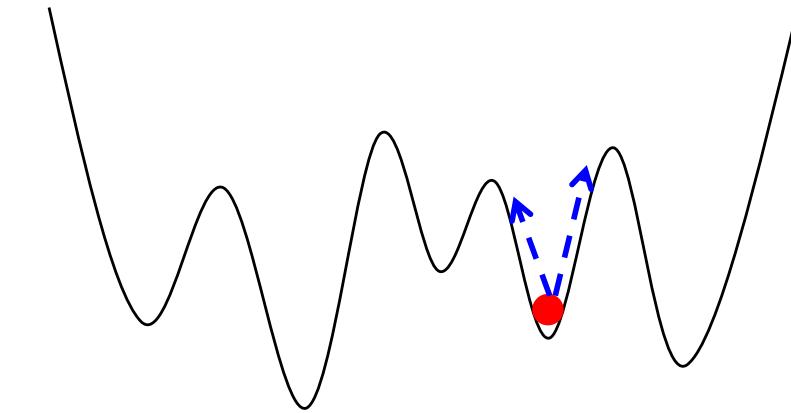
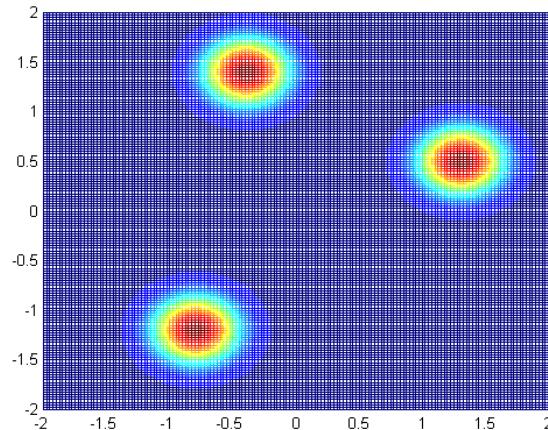


ある確率分布に対しては、ものすごく効率が悪くなってしまう。

(例) 密度の高い領域が、いくつもあり、互いに離れている場合

(多峰性のある確率分布)

$$p(\theta) \propto \exp(-\beta E(\theta))$$



最適化における、ローカルミニマムの問題と同じである。

# レプリカ交換モンテカルロ法のアルゴリズム

1. それぞれの確率分布について、メトロポリス法で状態の更新

$$\theta_l \Rightarrow \theta'_l$$

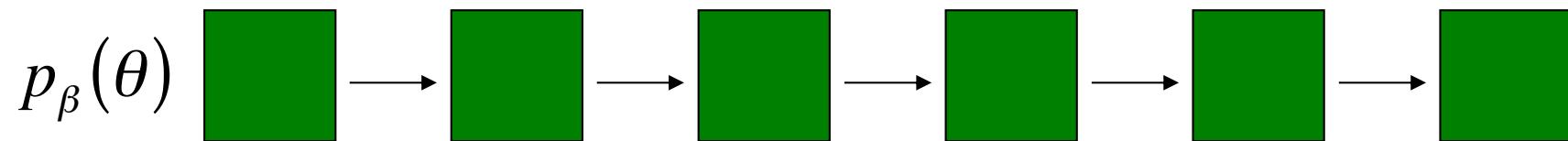
2. 隣り合った分布で状態の交換を行う。 $\{\theta_l, \theta_{l+1}\} \Rightarrow \{\theta_{l+1}, \theta_l\}$

$$u = \min(1, r) \quad r = \frac{p_{\beta_l}(\theta_{l+1}) p_{\beta_{l+1}}(\theta_l)}{p_{\beta_l}(\theta_l) p_{\beta_{l+1}}(\theta_{l+1})}$$

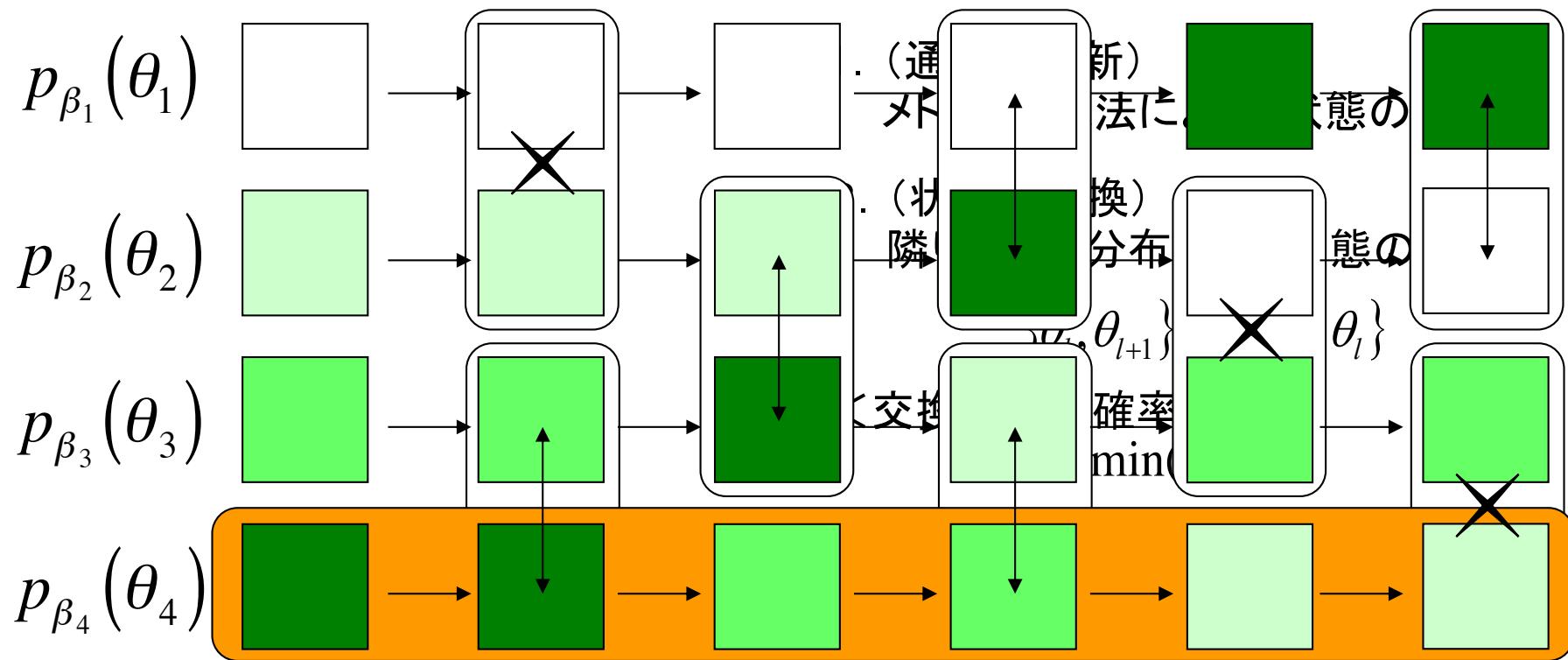
$u$ : 状態の交換を行う確率

# レプリカ交換モンテカルロ法のイメージ

<メトロポリス法>



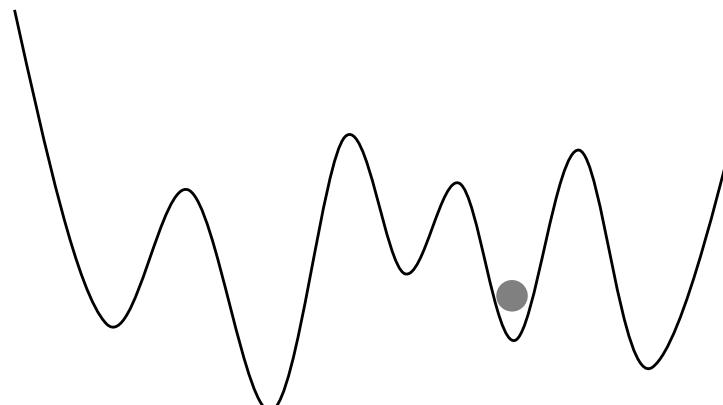
<レプリカ交換モンテカルロ法>



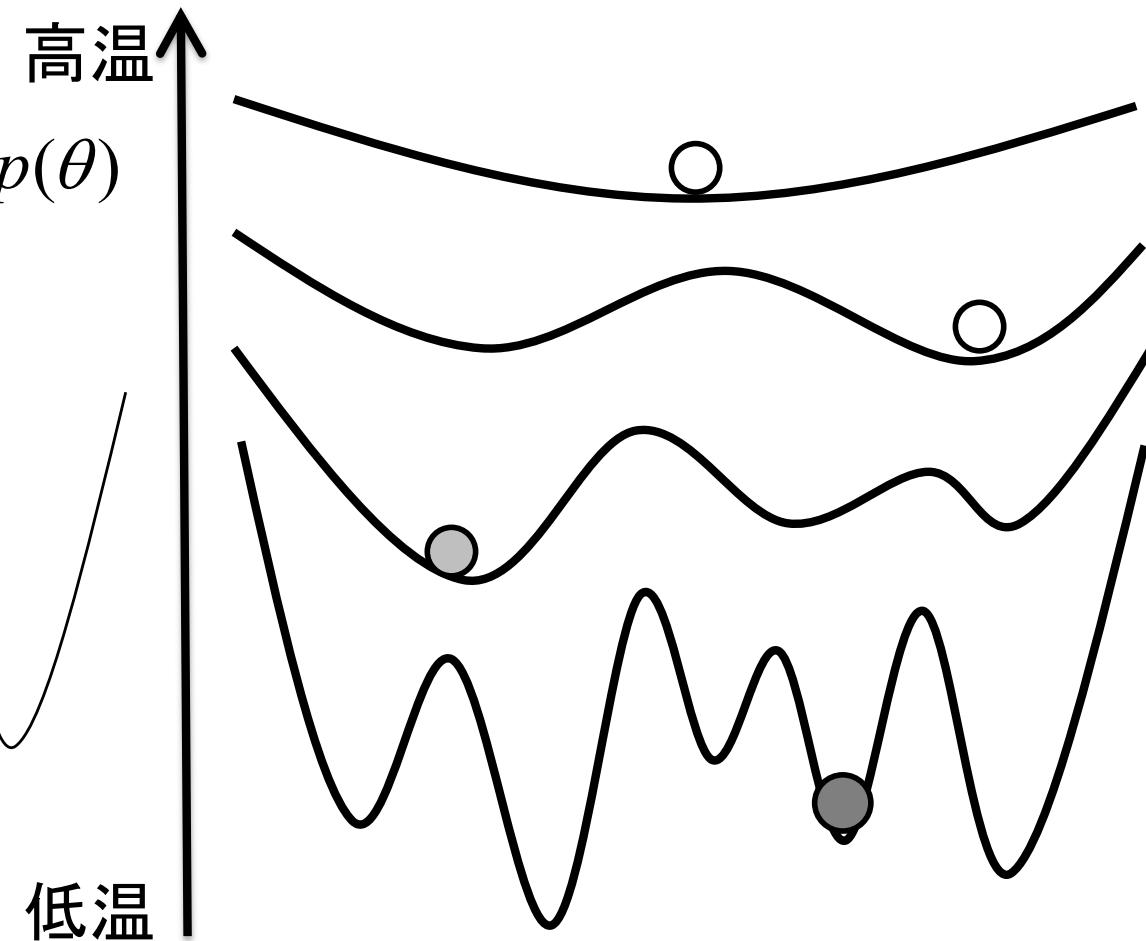
# レプリカ交換モンテカルロ法 ランダムスピニ系の知見から

メトロポリス法

$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta)$$

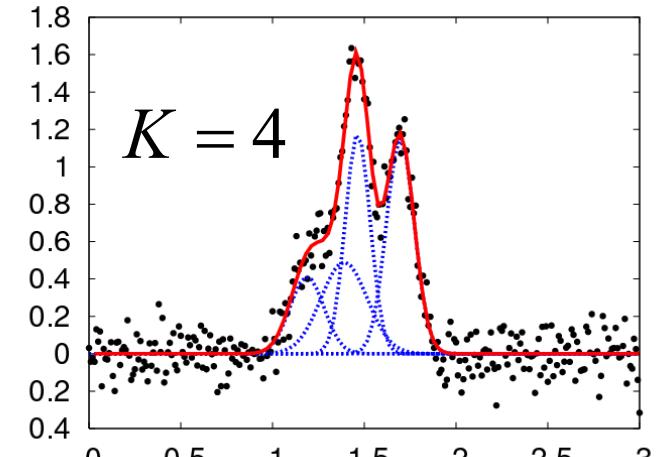
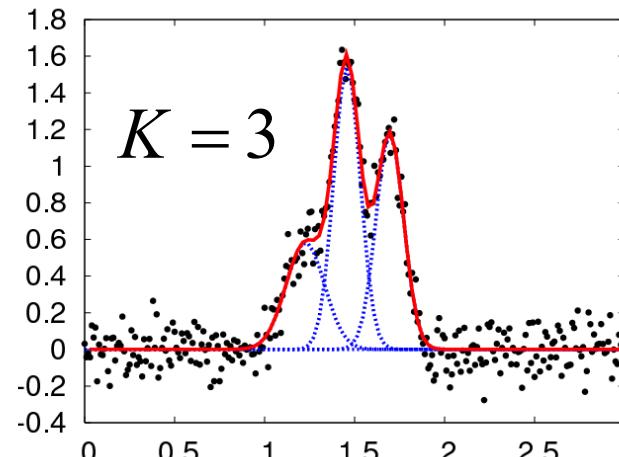
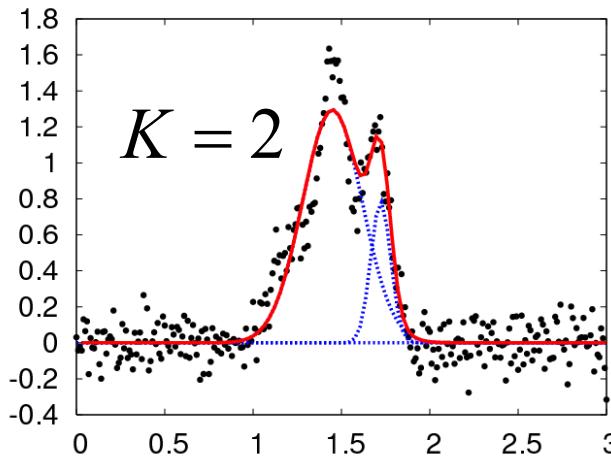
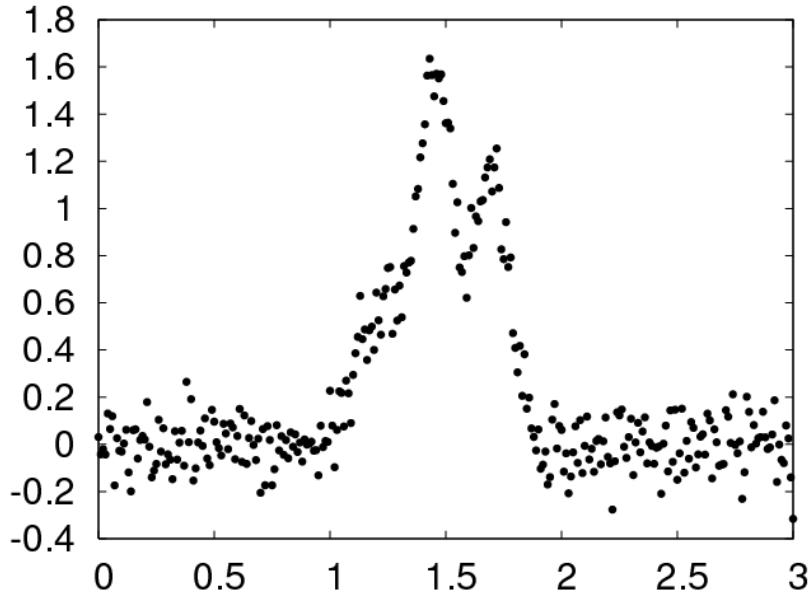


レプリカ交換モンテカルロ法



K. Hukushima, K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996).

# 例題1:スペクトル分解

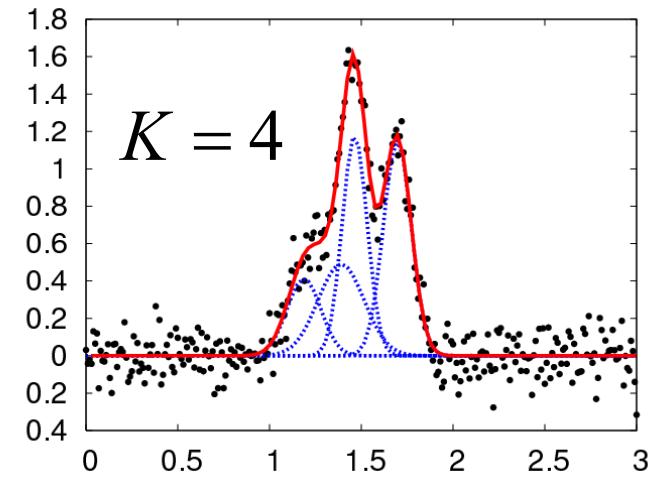
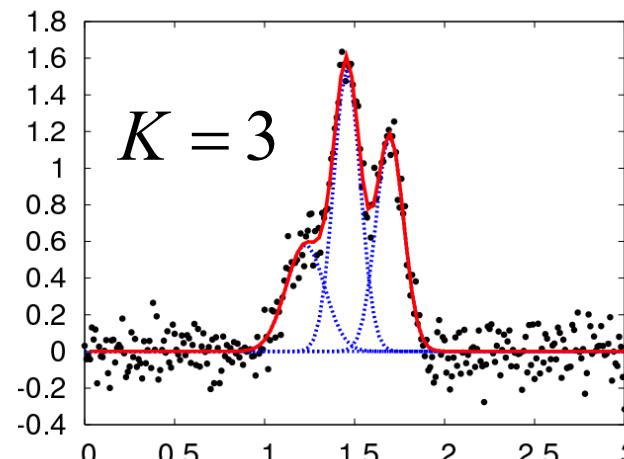
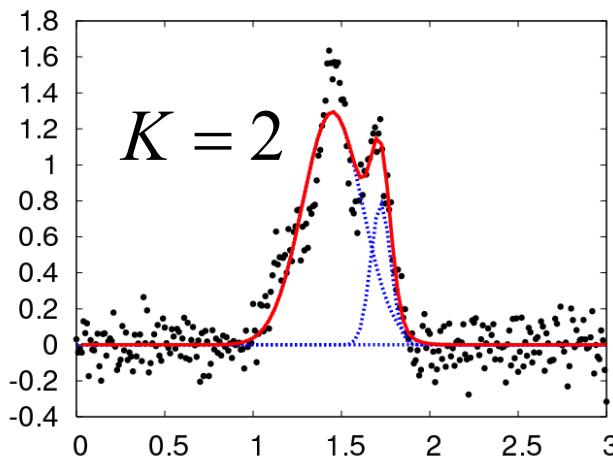
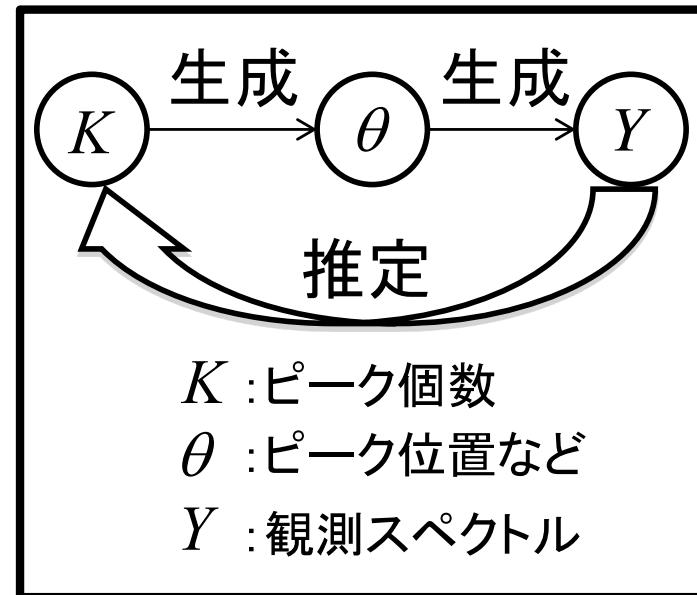
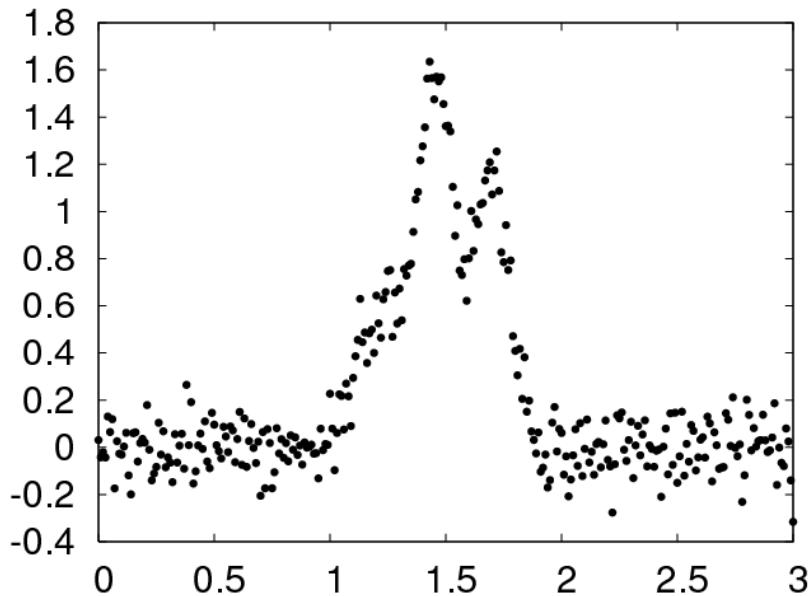


Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・マルコフ連鎖モンテカルロ法と交換法
- ・**モデル選択**
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

# より深い構造をさぐる: モデル選択



Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# 今日一番のスライド

1. 欲しいのは  $p(K|Y)$

2.  $\theta$ がないぞ

3.  $p(K, \theta, Y)$  の存在を仮定

$$p(K, \theta, Y) = p(Y|\theta, K)p(K)$$

$$p(Y|\theta, K) = \prod_{i=1}^n p(y_i|\theta) \propto \exp(-nE(\theta))$$

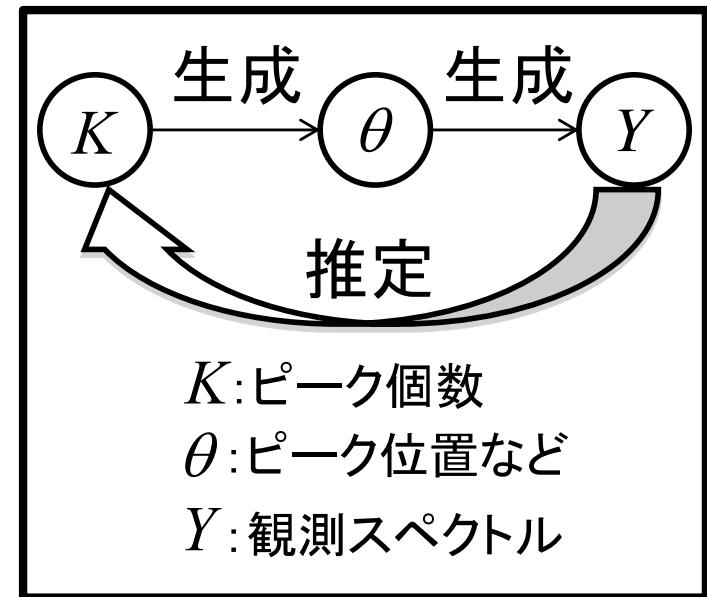
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

$$p(K, Y) = \int p(K, \theta, Y) d\theta$$

$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

$$F(K) = -\log \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

自由エネルギーを最小にする個数  $K$  を求める。



# 自由エネルギーの数値的計算法 レプリカ交換法の性質を巧妙に使う

$$F = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)\right) p(\theta) d\theta$$

自由エネルギー:

以下のように、補助変数  $\beta$  を導入する。  $\beta$ : 逆温度

$$F_\beta = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta) d\theta \quad (F_{\beta=0} = 0)$$

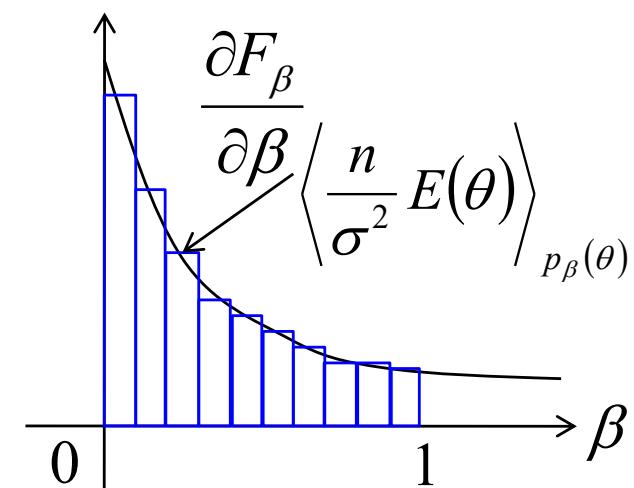
$$F = F_{\beta=1} = \int_0^1 d\beta \frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$$

たくさんの温度でのシミュレーションが必要

$\rightarrow$  各温度でのエネルギー平均(すでにやってる)

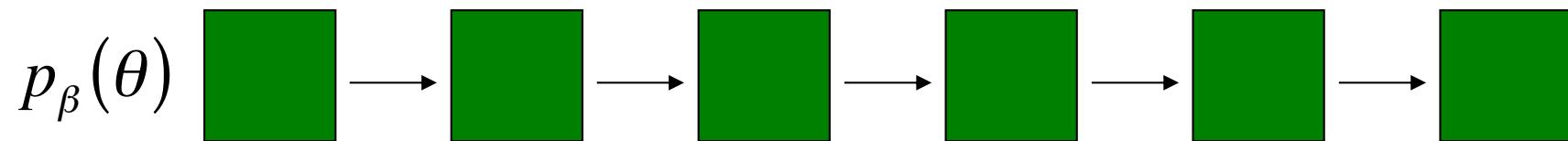
$\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$  ... 確率分布  $p(\theta; \beta)$  に従う  
 $\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$  ... 二乗誤差  $\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)$  の期待値

$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta)$$

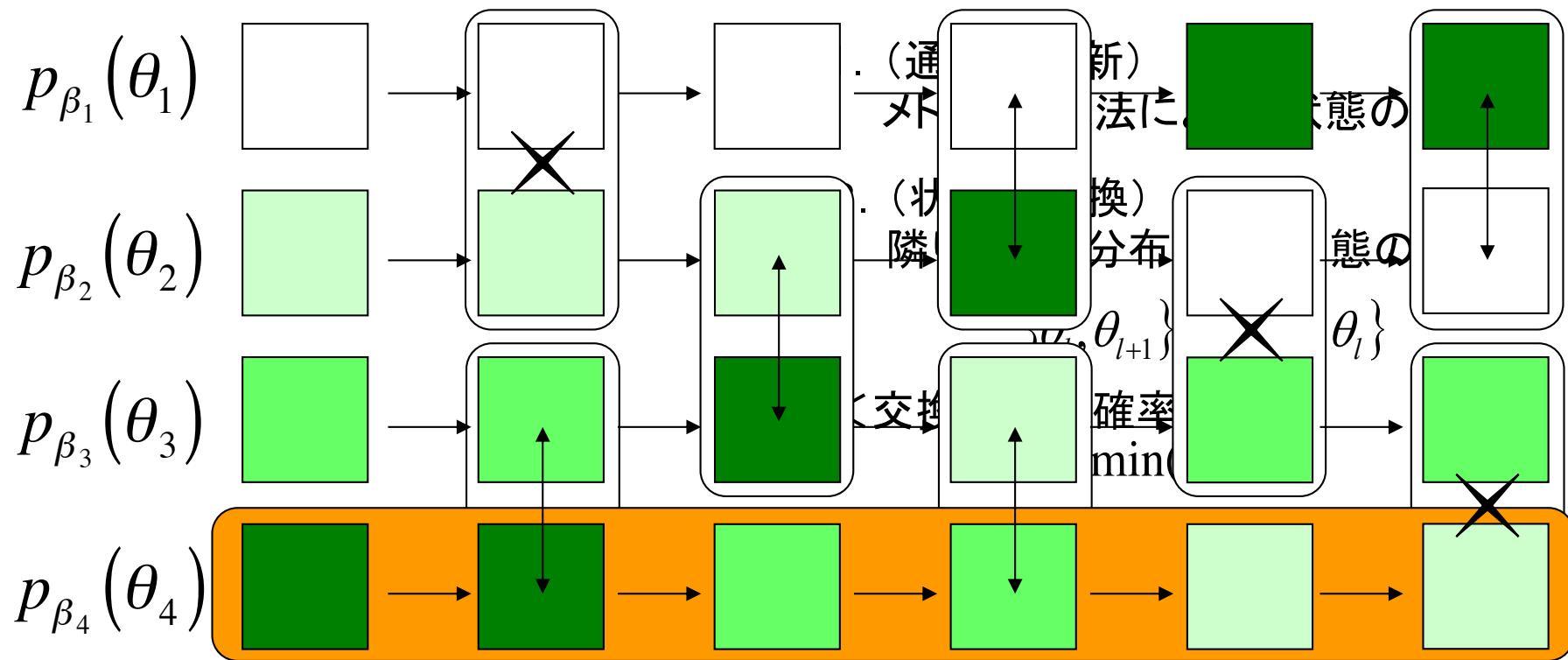


# レプリカ交換モンテカルロ法のイメージ

<メトロポリス法>



<レプリカ交換モンテカルロ法>



# 自由エネルギーの数値的計算法 レプリカ交換法の性質を巧妙に使う

$$F = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)\right) p(\theta) d\theta$$

自由エネルギー:

以下のように、補助変数  $\beta$  を導入する。  $\beta$ : 逆温度

$$F_\beta = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta) d\theta \quad (F_{\beta=0} = 0)$$

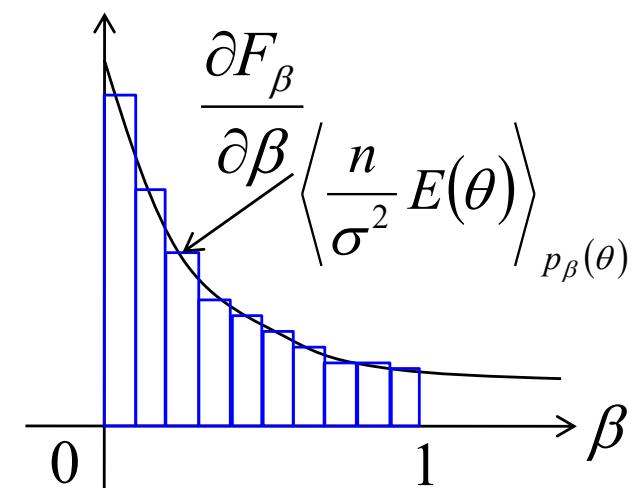
$$F = F_{\beta=1} = \int_0^1 d\beta \frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$$

たくさんの温度でのシミュレーションが必要

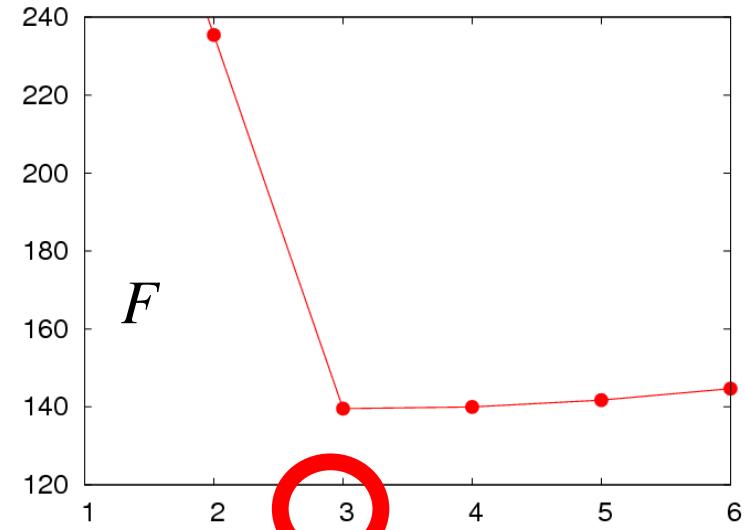
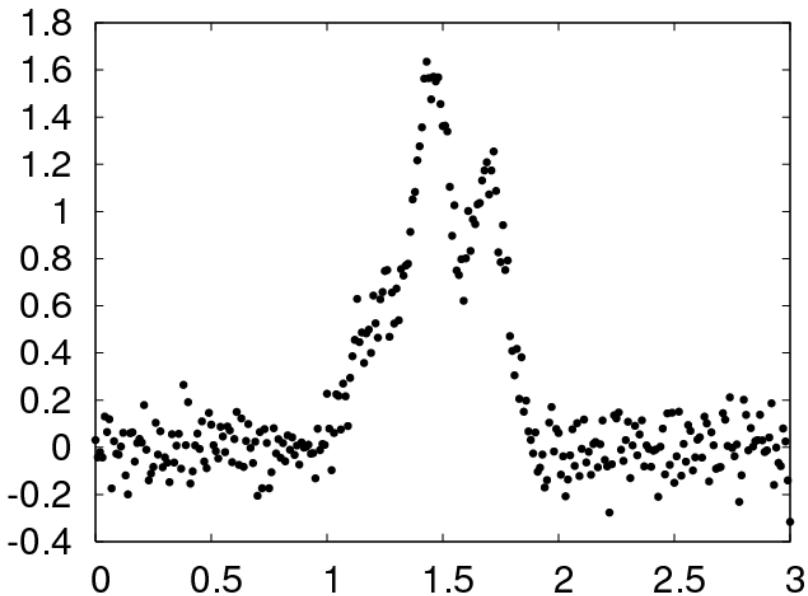
$\rightarrow$  各温度でのエネルギー平均(すでにやってる)

$\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$  ... 確率分布  $p(\theta; \beta)$  に従う  
 $\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$  ... 二乗誤差  $\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)$  の期待値

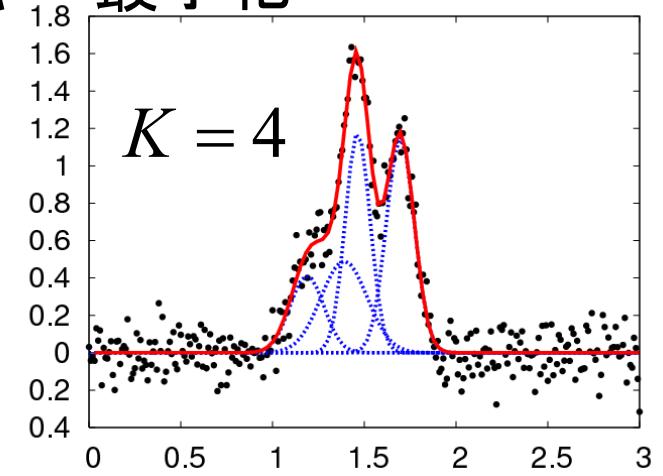
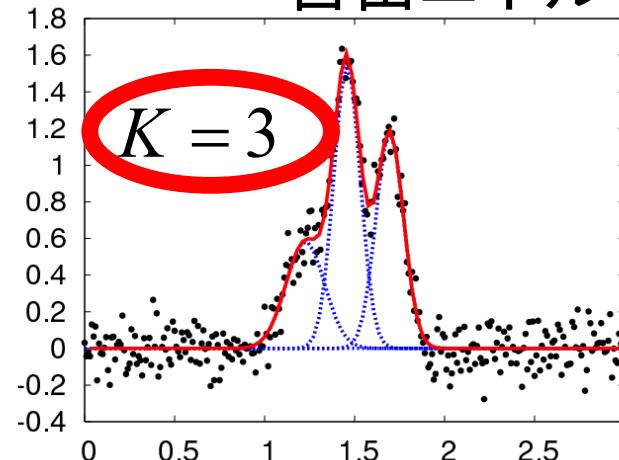
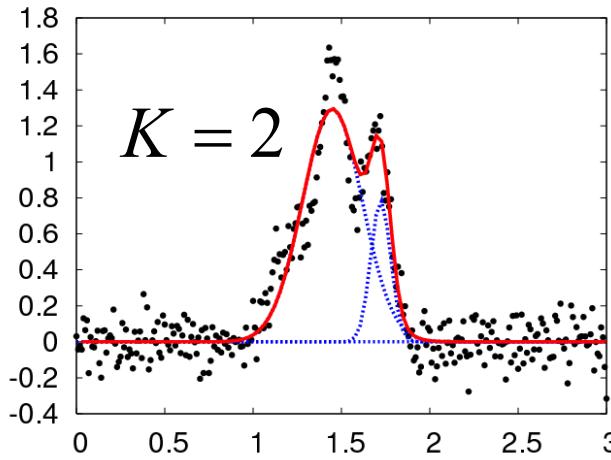
$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta)$$



# 例題1:スペクトル分解



最適な  $K$  をデータだけから決める  
自由エネルギー最小化



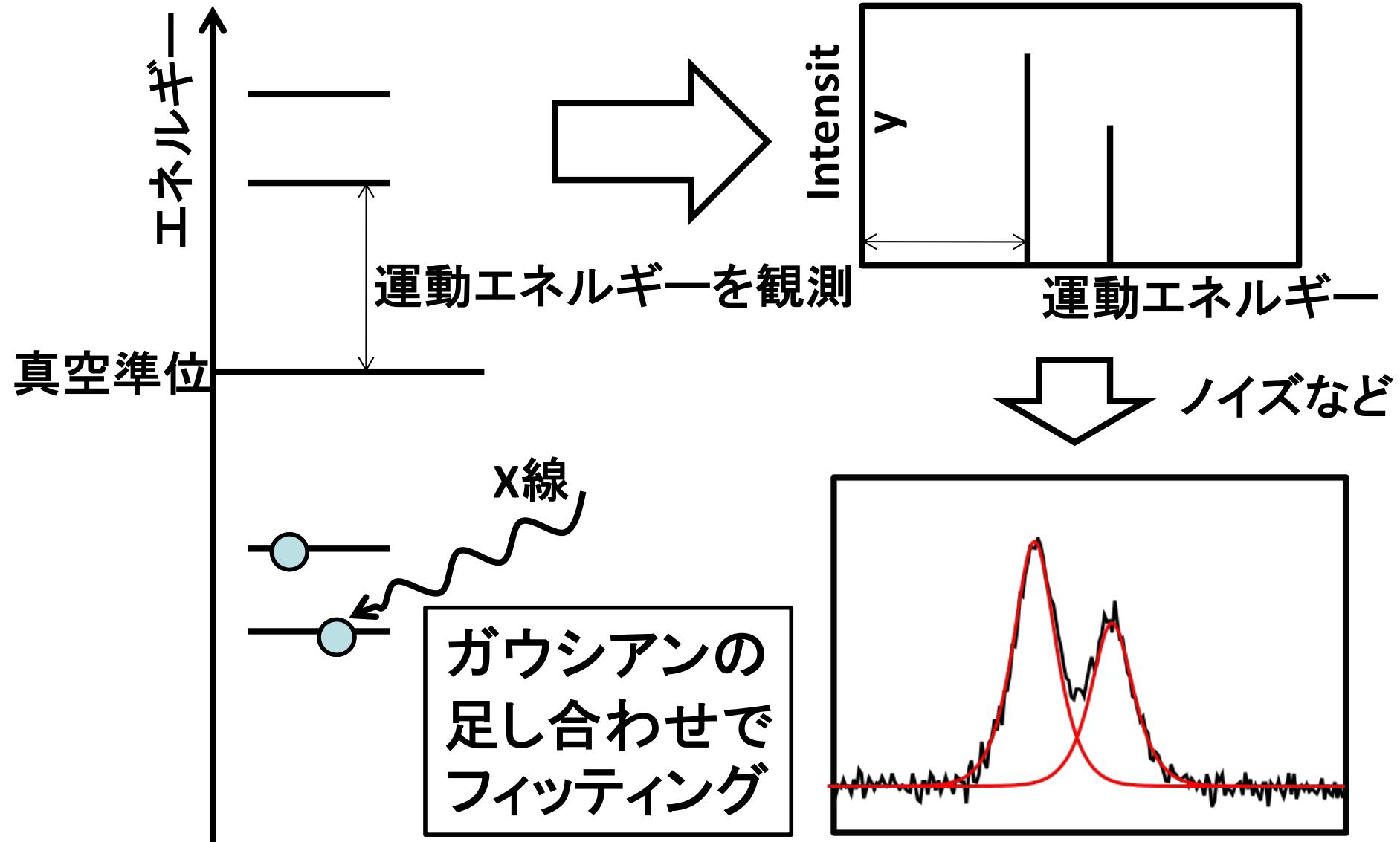
Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# 内容

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・マルコフ連鎖モンテカルロ法と交換法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ

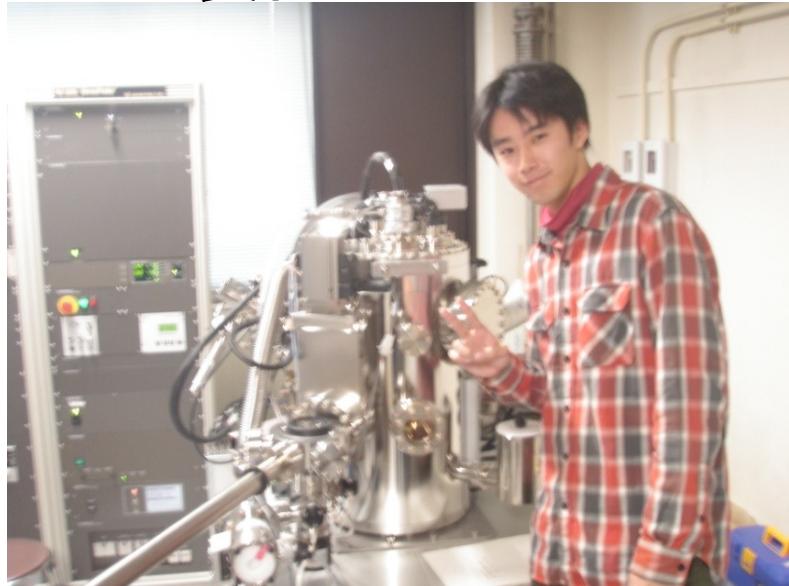
# X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS)

## X線光電子分光



# XPS測定

XPS装置 村岡 恼



佐々木岳彦

試料



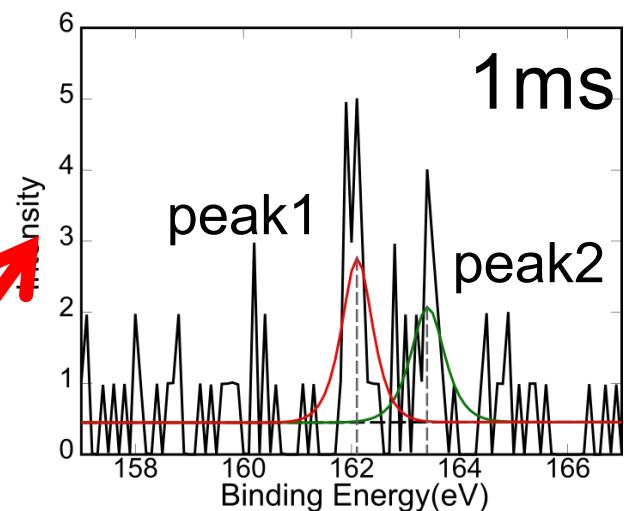
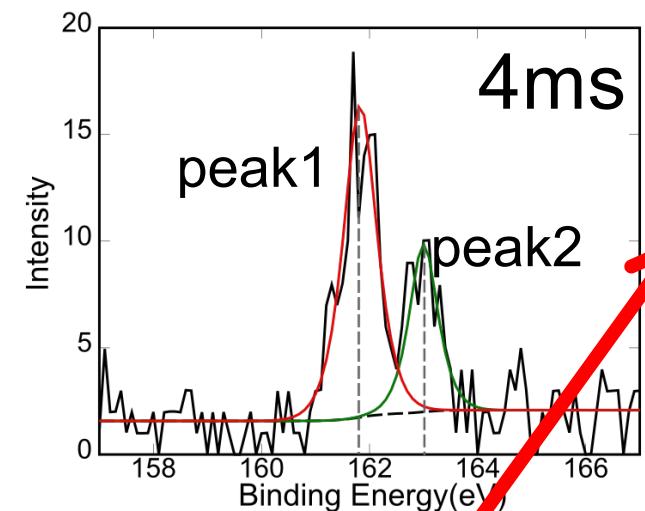
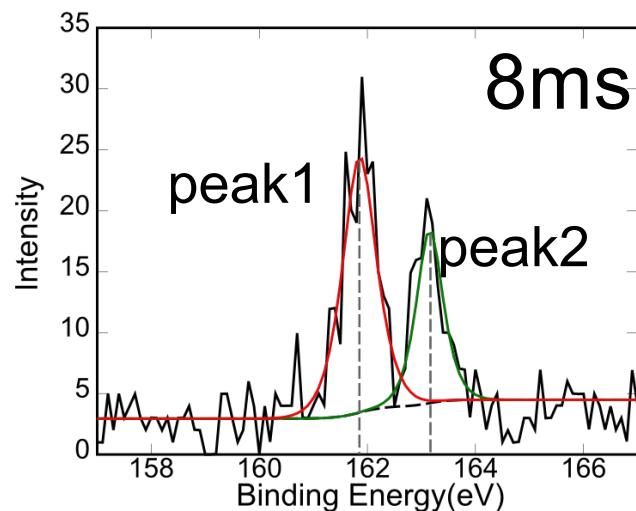
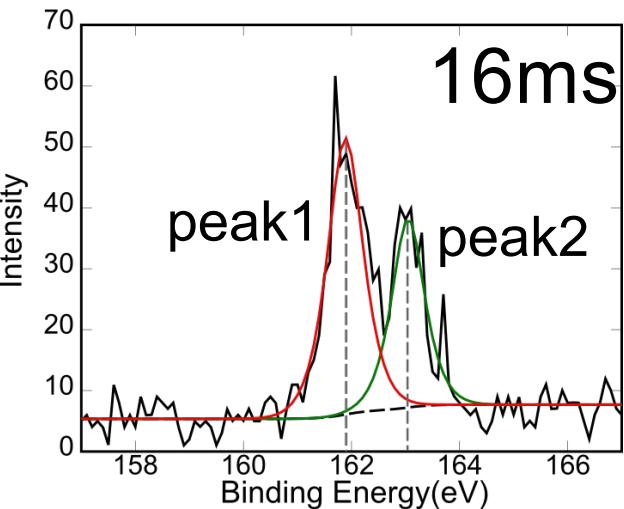
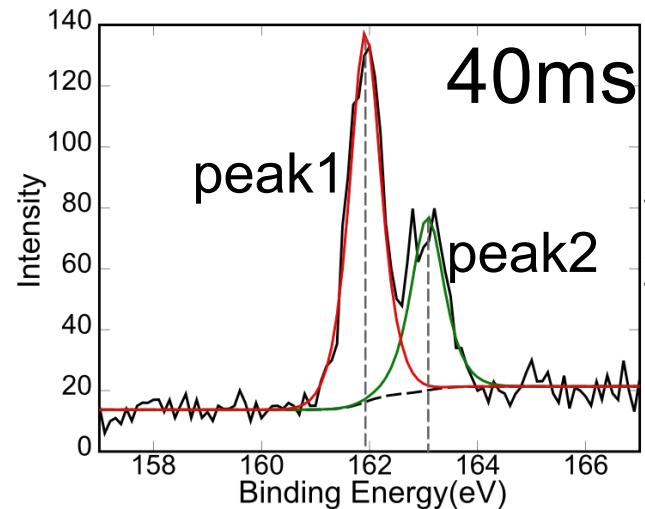
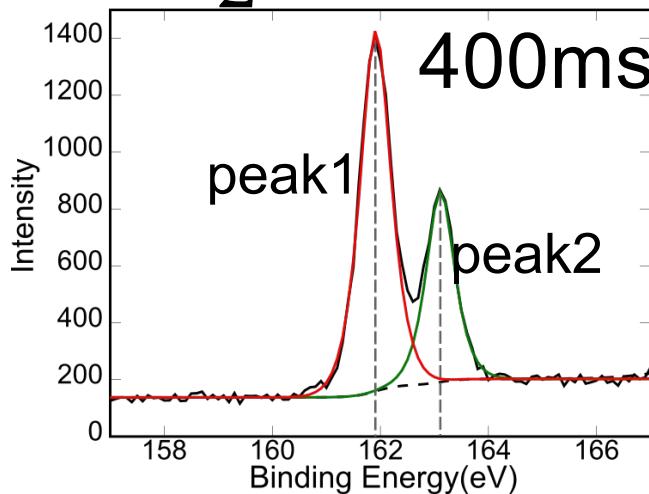
試料は粉末の二硫化モリブデン(MoS<sub>2</sub>)  
カーボンテープ上に固定  
X線源はモノクロAlK $\alpha$   
電子銃による帯電補正

1ステップあたりの測定時間は  
400ms, 40ms, 16ms, 8ms, 4ms, 1ms  
の6条件で測定

東大工学部9号館・強力X線実験室

# 例題2: 時間分解XPS どこまで時間窓を小さくできるか

MoS<sub>2</sub> 2p



ここまで

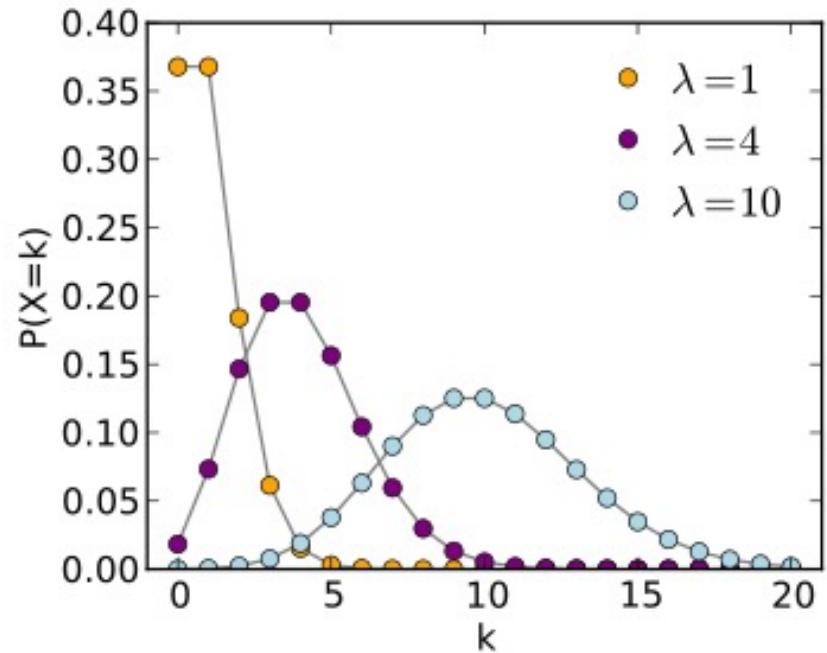
# XPS測定におけるノイズ

XPS測定で、データに乗るノイズはポアソン分布に従う

$$P(I = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$$

ポアソン分布では、平均=分散=λ

➡  $\frac{\text{信号強度}}{\text{ノイズ}} = \frac{I(E)}{\sqrt{I(E)}}$



となるので、信号強度が小さくなるほどノイズの大きさが相対的に大きくなる

では、どこまで信号強度が下がっても、真のピークを推定できるのかということが、今回明らかにしたい点である

# ベイズ推論の拡張性

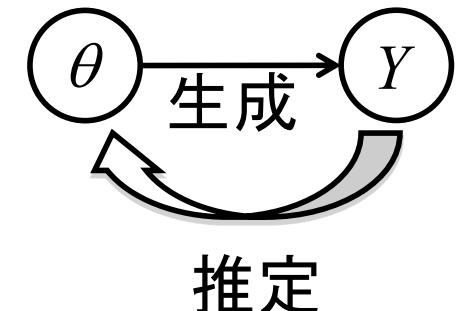
光電子の量子性を考慮する(ポアソン分布)

■ 事後確率:  $p(\theta | Y) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)}$   $Y = \{y_i\}_{i=1}^n$

$$p(\theta | Y) = \frac{1}{p(Y)} \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)\right) p(\theta)$$

これまでの

$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \theta))^2$$



$\theta$ : ピーク位置など

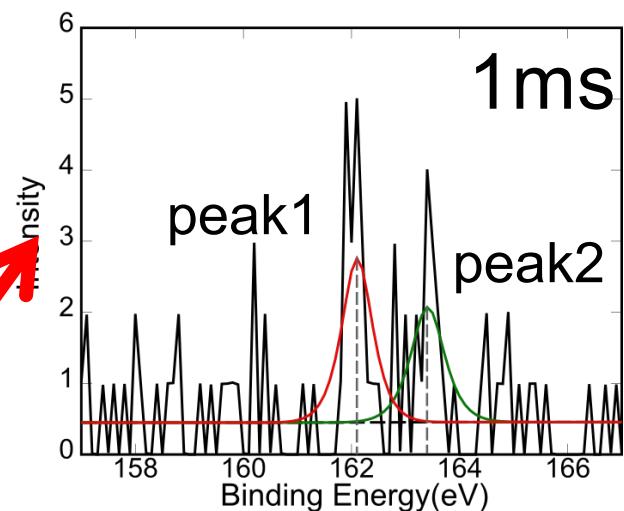
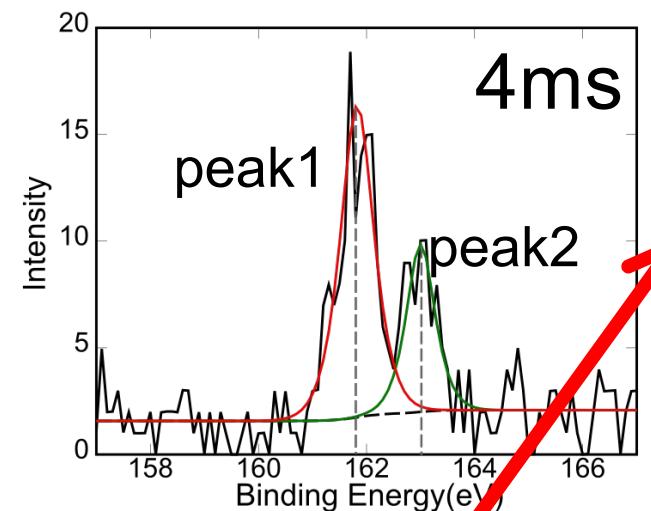
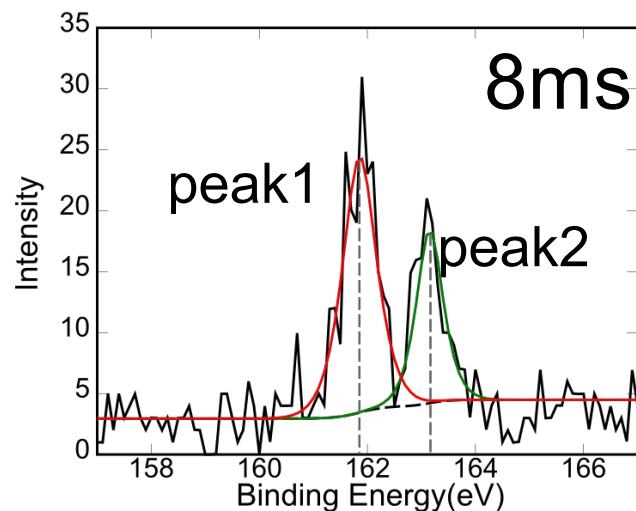
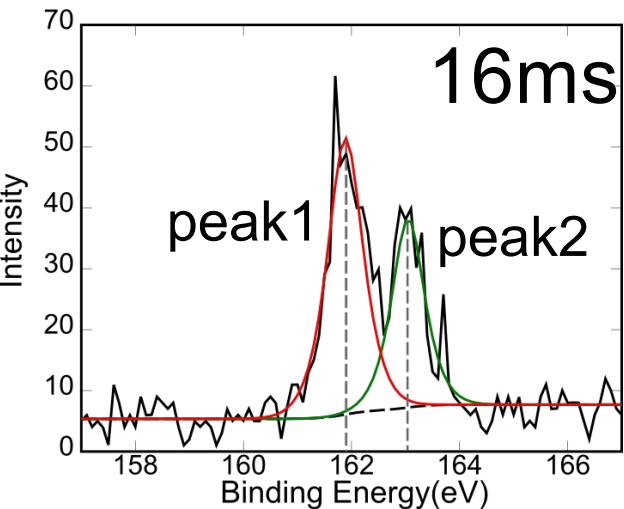
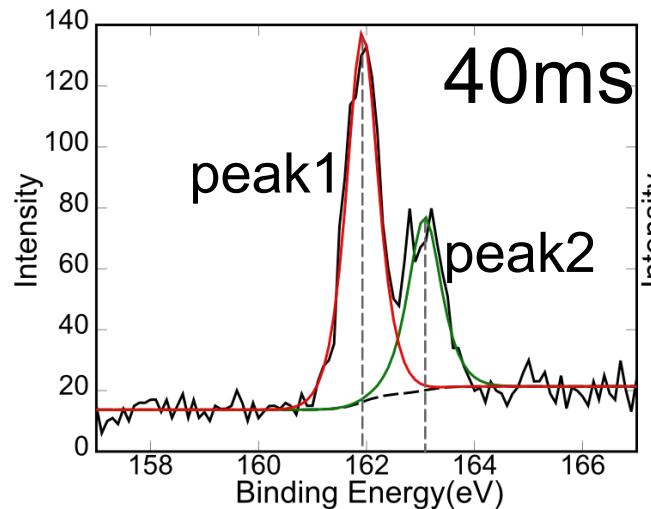
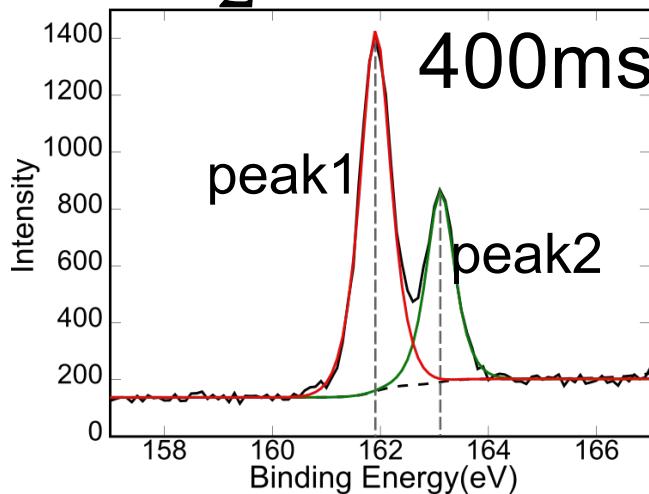
$Y$ : 観測スペクトル

$$E(\theta) = \sum_{i=1}^n \left( y_i \log f(x_i; \theta) + f(x_i; \theta) + \sum_{j=1}^{y_i} \log(j) \right)$$

に変更するだけ

# 例題2: 時間分解XPS どこまで時間窓を小さくできるか

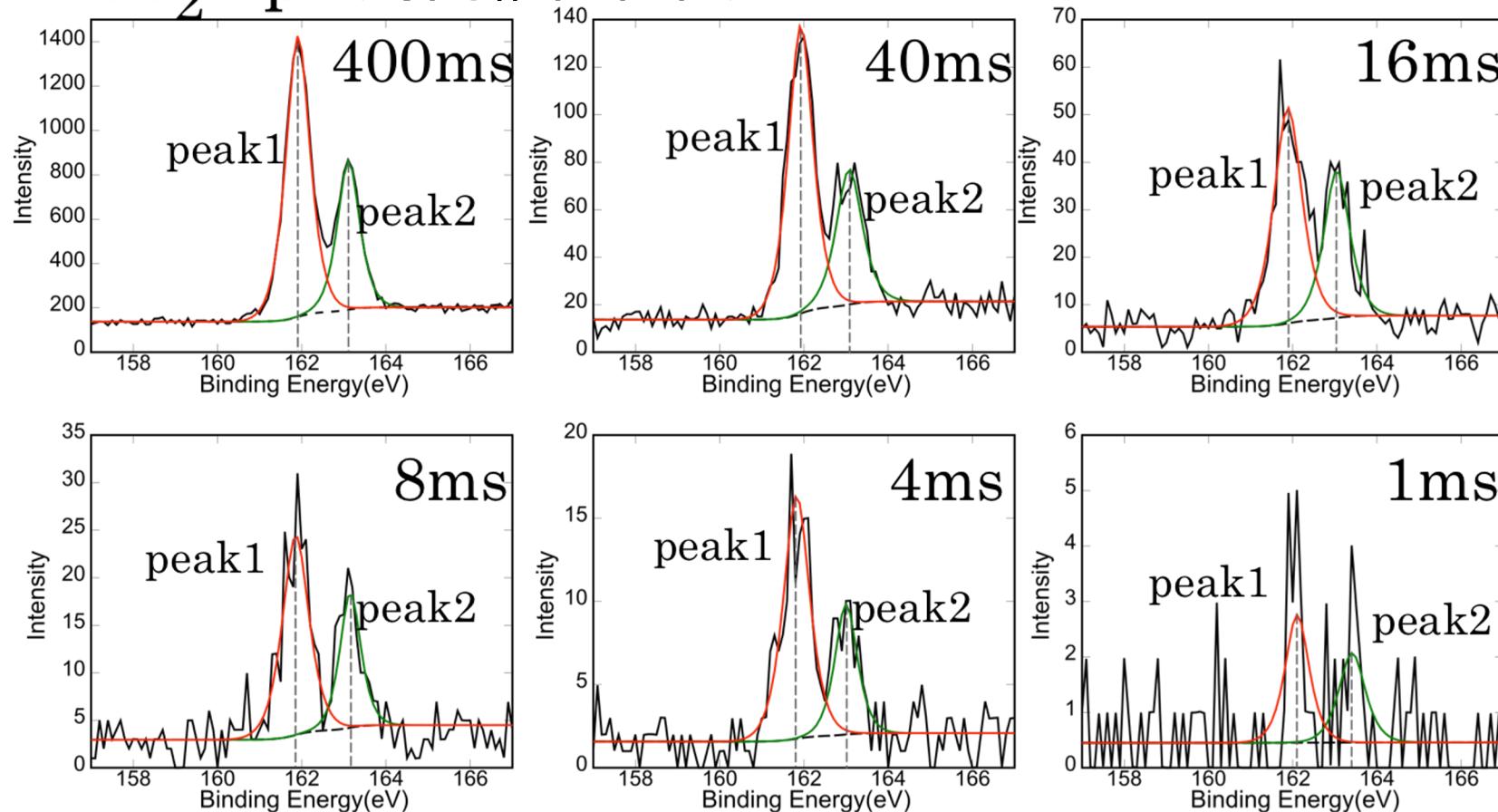
MoS<sub>2</sub> 2p



ここまで

# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* in press)

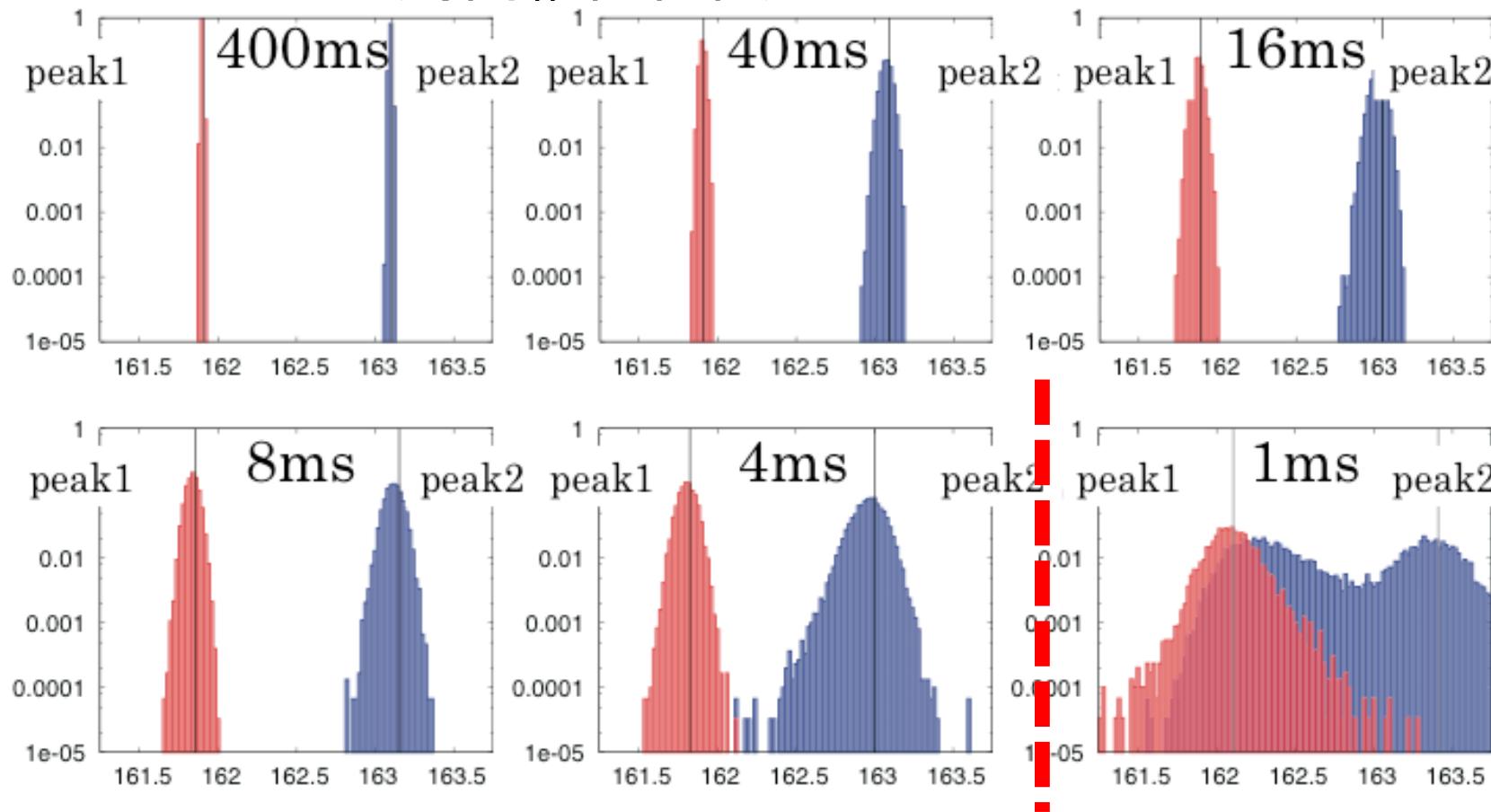
MoS<sub>2</sub> 2p (時間幅依存性)



# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* in press)

ベイズ計測: ベイズ推論によって、ピーク位置のベイズ事後確率を計算

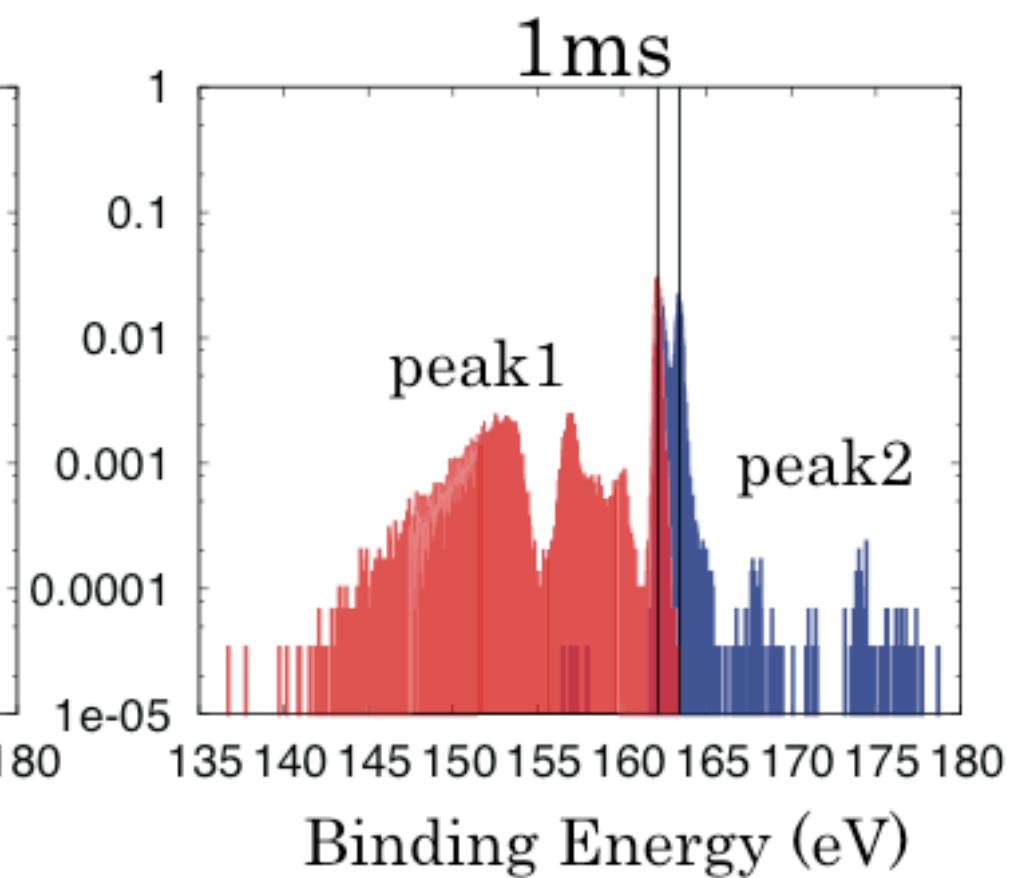
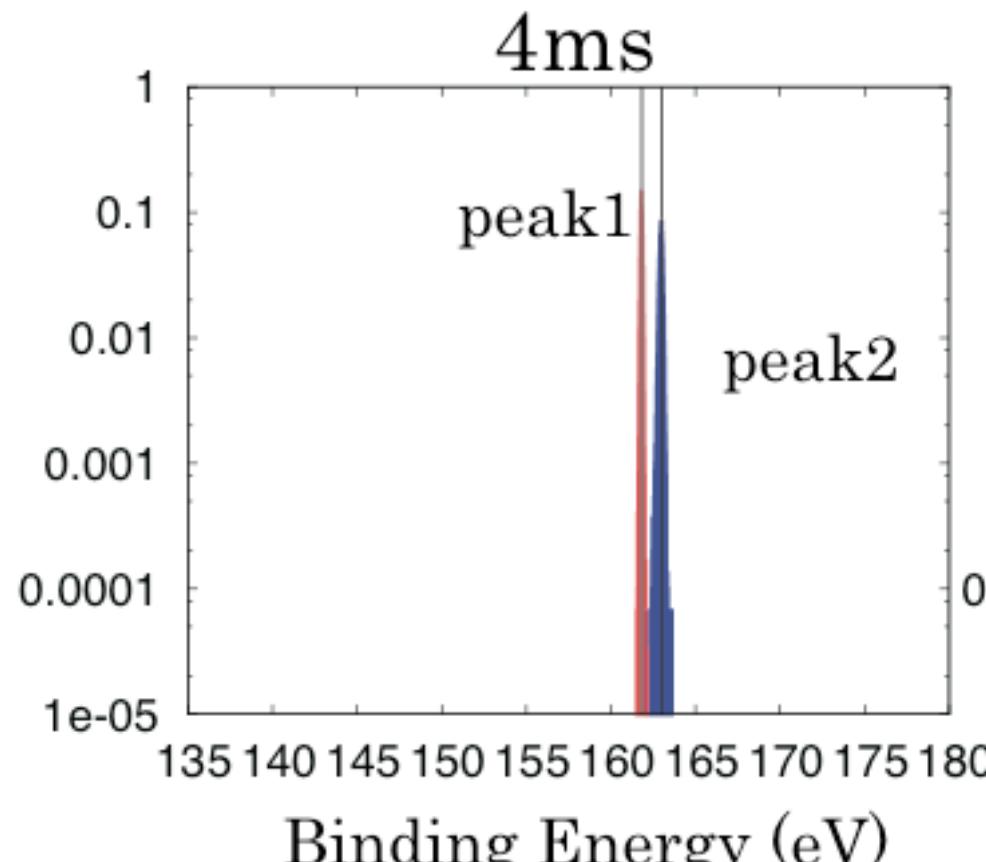
(時間幅依存性)



# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* in press)

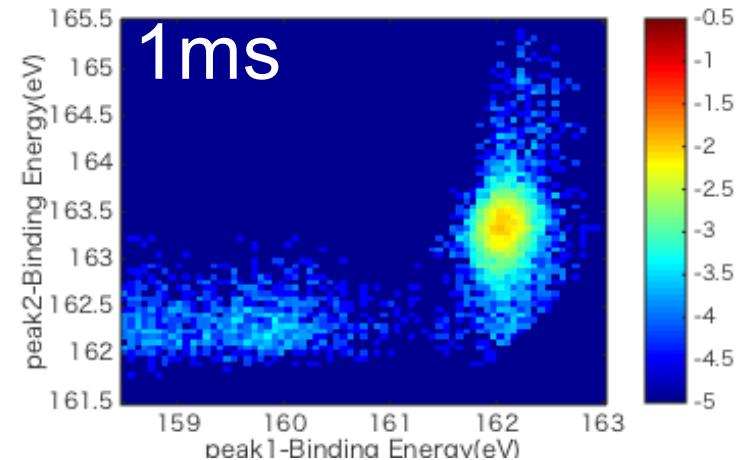
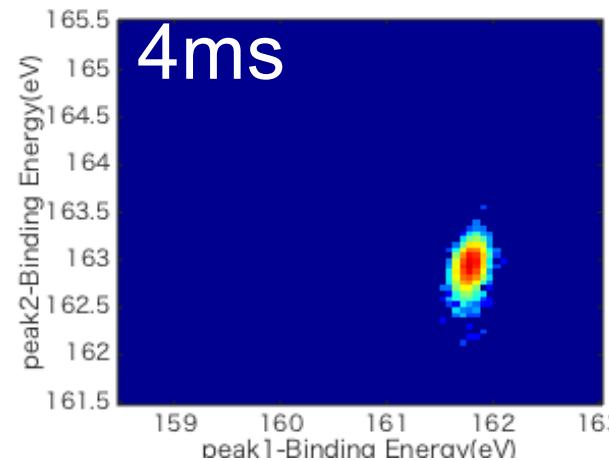
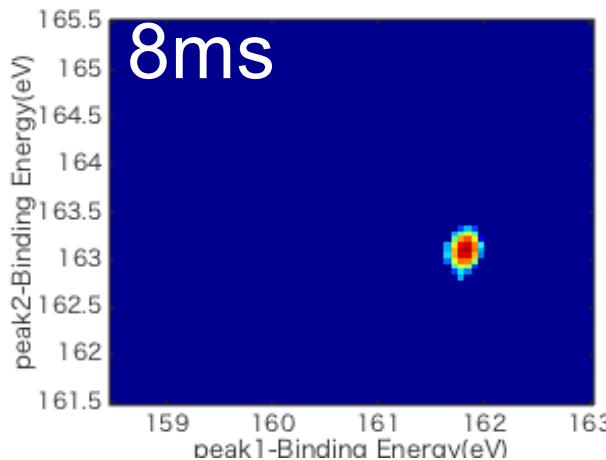
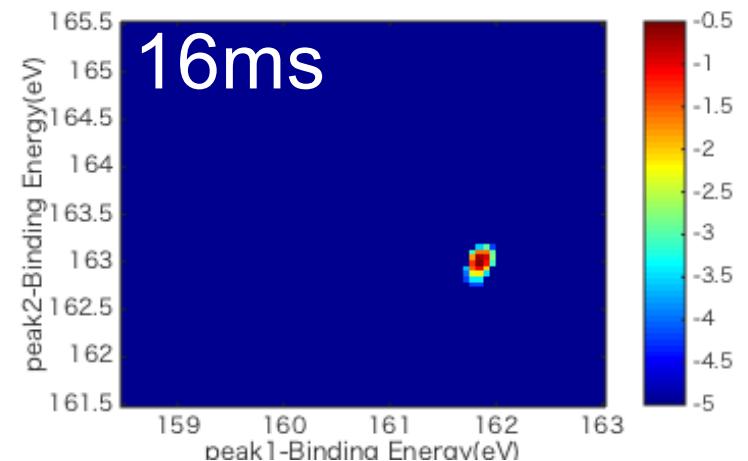
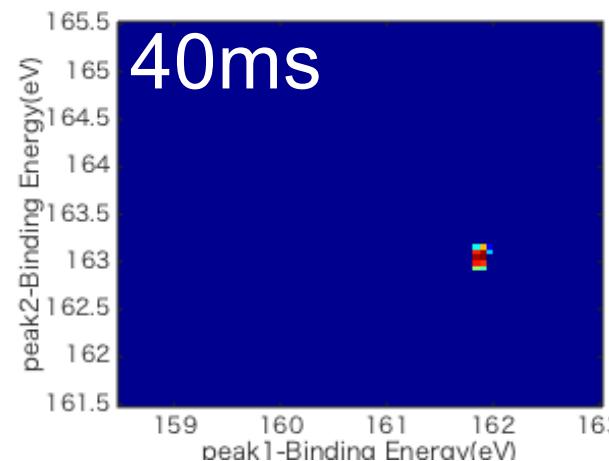
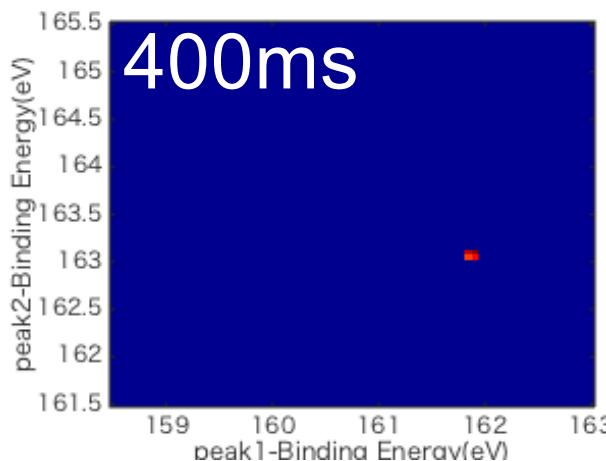
ベイズ計測: ベイズ推論によって、ピーク位置のベイズ事後確率を計算

(時間幅依存性)



# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* in press)

MoS<sub>2</sub> 2p



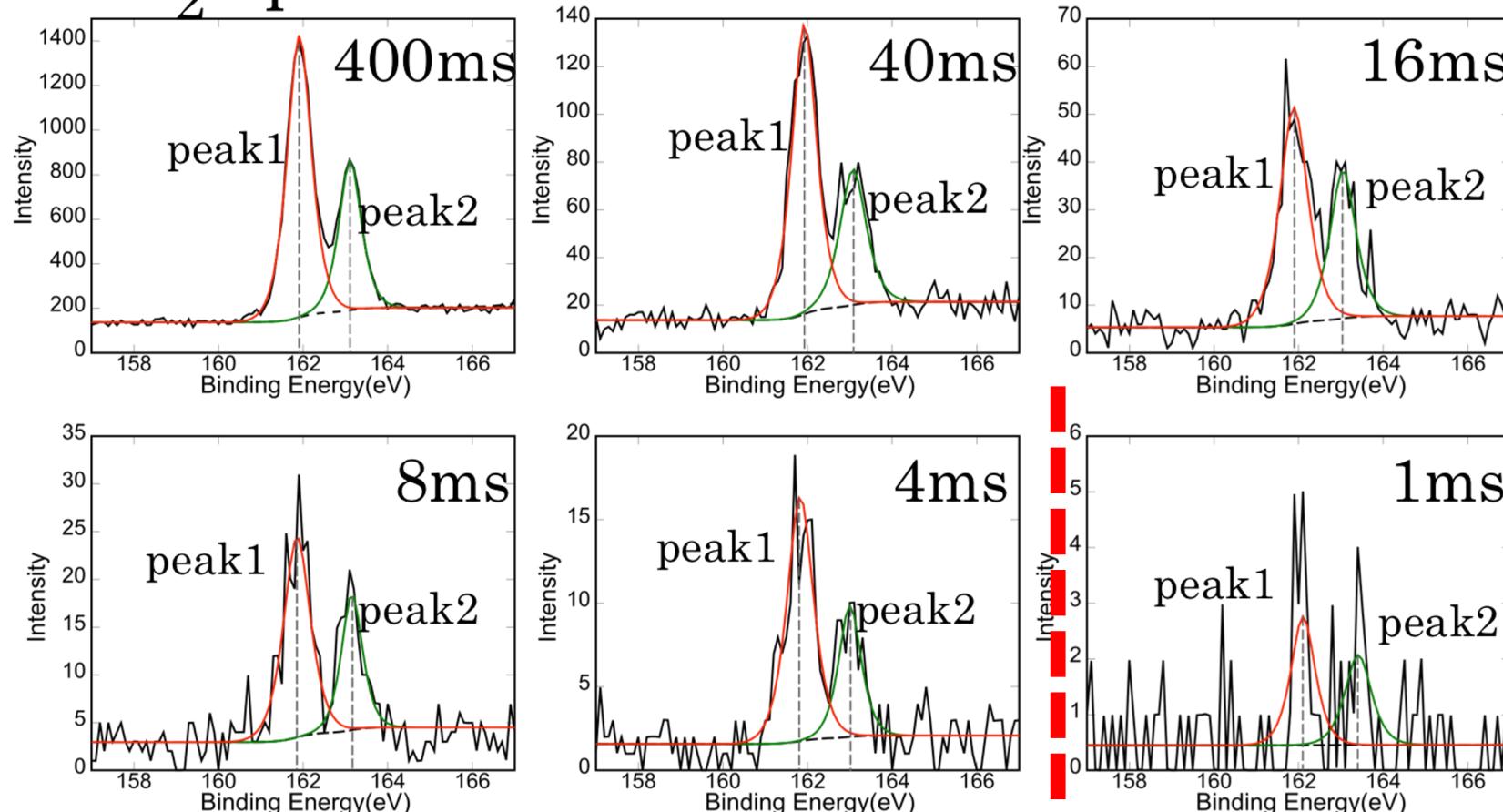
ここまで

# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* in press)

ベイズ計測: ベイズ推論によって、ピーク位置のベイズ事後確率を計算

戦略目標: 計測限界を定量的に評価できる枠組みの提案

MoS<sub>2</sub> 2p (時間幅依存性)



# インテリジェント計測・解析手法の例

- 研究開発に関するロスの削減・物質材料の開発期間の短縮
  - S/N比が低く、ノイズに埋もれたシグナルの顕在化・高精度解析
  - 直接計測が困難な物理量を定量化・可視化
  - 大型研究施設のマシンタイムの効率化
  - 汎用ラボ用の測定機器を用いた高度な構造解析

# まとめ

- ・自己紹介
- ・希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ・スペクトル分解
- ・スペクトル分解の従来法
- ・ベイズ推論
- ・マルコフ連鎖モンテカルロ法と交換法
- ・モデル選択
- ・XPSへの展開:ポアソンノイズへの拡張
- ・まとめ