

ベイズ統合とベイズ階層モデリング

水牧仁一朗¹

¹ 熊本大学理学部理学科物理コース

放射光科学にベイズ推定の技術を導入することで得られるメリットについて講演を行う。特にマルチモーダル測定データ群やオペランド時分割測定データに対して、ベイズ推定がデータの理解を深めるのに有力であることを示す。

近年の放射光技術の発展により、異なった計測を同時に行うマルチモーダル測定やデバイス動作中や反応進行中での測定いわゆるオペランド測定が可能となっている。これらのデータからそこに潜む物性や化学反応を人間の理解できる形で抽出することが重要であり、喫緊の課題である。我々はその課題を、ベイズ統計に基づき、マルチモーダル測定データの統合にはベイズ統合を、オペランド計測に対してはベイズ階層モデリングを用いることで克服することを目指している。

ベイズ統合については、異なった計測に X 線吸収分光(XAS)と X 線光電子分光(XPS)の例を紹介する。XAS や XPS は物質の電子状態を研究する有力な測定手法である。測定で得られた XAS や XPS スペクトルを、解析することにより着目している軌道のクーロン相互作用 U や電荷移動エネルギー Δ 、結晶場エネルギー $10Dq$ といった物理量を推定することが可能である。これまでは、各測定で別々に物理量を推定してきたが、この方法では属人的な統合である点に問題があるため、我々は XAS と XPS スペクトルを同時に扱い上記物理量を属人的な要素を排除し、推定する方法を開発した[1]。また統合するべきか否かをベイズ自由エネルギーを用いて評価した。

ベイズ階層モデリングについては、時分割 X 線回折測定データを例に紹介する。データとしては SPring-8 BL02B2 の X 線回折によって、333 ミリ秒の時間間隔で連続的に観測したものをを用いた。このデータは、典型的な多孔性材料の CPL-1 にアルゴンガスが取り込まれる過程を観測したものである。開発した解析法をデータ解析に適用した結果気体の導入時刻とダイナミクスの開始時刻との間の時間差を明らかにし、開始時刻をデータから推定することの重要性を実証するとともに、反応モデルを本解析手法を用いてモデル選択することが可能であることも実証した。

当日の講演では、上記 2 つの話題を具体的な方法も含めて紹介し、ベイズ推定を解析に利用する契機となることを期待したい。

[1] Y. Yokoyama, T. Uozumi, K. Nagata, M. Okada and M. Mizumaki, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 034703 (2021).

[2] Y. Yokoyama, S. Kawaguchi, and M. Mizumaki, Sci. Rep. **134**, 1233 (1982).