

## ベイズ分光におけるハイパーパラメータ自動調整アプリケーションの開発と光電子分光への適用

### Development of hyperparameter automatic tuning application on Bayes spectroscopy and application for HAXPES analysis

ひょうご科学技術協会 放射光研究センター<sup>1</sup>, スプリングエイトサービス<sup>2</sup>,

高輝度光科学研究センター<sup>3</sup>, ○吉村 真史<sup>1,2</sup>, 竹田 晋吾<sup>1,2</sup>, 横山 優一<sup>3</sup>, 水牧 仁一朗<sup>3</sup>

Hyogo Sci. and Tech. Assoc. SR Center<sup>1</sup>, SPring-8 Service<sup>2</sup>, JASRI<sup>3</sup>,

○Masashi Yoshimura<sup>1,2</sup>, Shingo Takeda<sup>1,2</sup>, Yuichi Yokoyama<sup>3</sup>, Masaichiro Mizumaki<sup>3</sup>

E-mail: yoshimura@hyogo-bl.jp

光電子分光等の測定データに対してベイズの自由エネルギーを用いたモデル選択によるピーク数推定の手法(ベイズ分光)が提案されている[1][2]。良好な推定結果を得るには、フィッティングパラメータの探索で遷移確率を適切なハイパーパラメータで制御する必要があるが、その調整は試行錯誤を繰り返して行われている。我々は、ハイパーパラメータを遷移確率を指標として自動調整するアプリケーションを開発した。適応例として Polyethylene terephthalate(PET)の C 1s 光電子スペクトルのピーク数推定とピークフィッティングを行った。測定は Ga-K $\alpha$ 線源(9.25 keV)硬 X 線光電子分光装置を用いて行った。ベイズ分光に必要な事前分布等の情報は測定データより自動算出した。ピーク数 1~6 本の Voigt 関数をモデルとし、それぞれのモデルでハイパーパラメータの自動調整を行い、ベイズの自由エネルギーを取得した(Fig.1)。ピーク数 4 の場合に自由エネルギーが最小となり、これは C-C, C-O, O-C=O,  $\pi \rightarrow \pi^*$ に対応しており、適切なピーク数を選択できている。各ピーク位置の事後確率分布が Fig.2 の様に得られ、事後確率分布の分散幅の精度でフィッティングパラメータを推定できている。開発した自動調整アプリケーションはモデル関数を変更することで、光電子スペクトル以外にも様々な測定手法へ適用することができる。

[1] K. Nagata, S. Sugita, M. Okada: Neural Networks **28**, 82(2012)

[2] K. Iwamitsu, Y. Furukawa, M. Nakayama, M. Okada, I. Akai: J. Lumin. **197**, 18(2018)

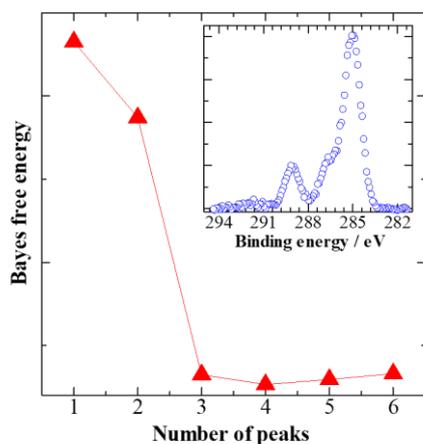


Fig.1 Bayes free energy of each model. The inside is C 1s spectrum of polyethylene terephthalate measured by laboratory HAXPES.

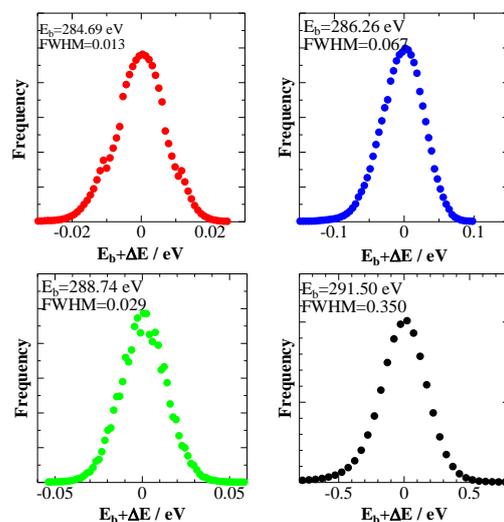


Fig.2 Posterior probability distributions of peak energy.