

EM アルゴリズムによるスペクトルデータの高速ピークフィッティング

○松村 太郎次郎^{1*}

¹ 国立研究開発法人 産業技術総合研究所

High-throughput peak fitting method for spectral data by EM algorithm

○Tarojiro Matsumura^{1*}

¹ National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

分光分析装置の発展に伴って、試料の広範囲を探索対象とした高精度で大量のスペクトルデータが手に入るようになってきている。しかし、ピークフィッティングのようなスペクトルデータ解析においては、フィッティングモデルのパラメータ推定に煩雑な作業を要することが研究サイクルのボトルネックとなっており、実際に調べられる領域が制限されてしまうという問題が生じている。

本講演では、上記のボトルネックを解消する効率的なピークフィッティング手法の一つとして、講演者らがこれまで取り組んできた EM アルゴリズム (Expectation-Maximization algorithm) の枠組みを応用したスペクトルデータの高速・自動ピークフィッティング手法¹、および、ECM アルゴリズム (Expectation-Constrained Maximization algorithm) の枠組みによる手法の拡張²について紹介する。

この手法ではスペクトルデータの強度データをそれに対応する測定エネルギーステップの重みとして取り扱うことで、スペクトルデータの一次元への変換を行うことなく、EM アルゴリズムの枠組みで高速なピークフィッティングを実行可能にした。さらに、この手法では扱えるフィッティングモデルが Gauss 分布に限定されるため、多様なスペクトルデータ解析へ適応することが難しいという課題があった。この課題への対応として、一般化された EM アルゴリズムの 1 形式である ECM アルゴリズムの枠組みを導入することで、フィッティングモデルとしてよく利用される Pseudo-Voigt 分布や非対称分布である Doniach-Šunjić 分布を用いたピークフィッティングが実行可能となった。今回は、これらの解析手順についての解説とスペクトルデータ解析への適用事例の紹介を中心とした話題提供を行う。

文 献

- 1) T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata and Y. Ando: Y. Sci. Tech. Adv. Mater., **20**, 733-745 (2019).
- 2) T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata and Y. Ando: in preparation.

*E-mail: matsumura-tarojiro@aist.go.jp