

論文の内容の要旨

論文題目 Effects of Measurement Noise on Bayesian Spectral Deconvolution: Degenerate or Not

(ベイズ的スペクトル分解に対する測定ノイズの影響: 縮退か否か)

氏名 徳田 悟

1. はじめに

分光法は物質やエネルギーに関係する全ての科学の中心にある。スペクトルは電子状態や原子の運動を示す。半古典論的な観点からスペクトルは物質の量子的な本質により中心がエネルギー準位である単峰なピークを表す基底関数の重ね合わせへ近似的に還元できる。電子状態や原子の運動に関する情報はスペクトルからピークを同定することで得られる。

スペクトルはシュレーディンガー方程式が示唆する、エネルギー固有値の縮退や分裂を反映する。縮退は外的な摂動によって解け、スペクトルのピークの分裂として観測される。例えば、磁場によるゼーマン効果、電場によるシュタルク効果、結晶場あるいは配位子場によるヤーン・テラー効果、温度や圧力による構造相転移による分裂などが観測されている。スペクトルから縮退の有無を判断することは系の物理的状態の理解に直結する。

バンドギャップが小さいようなデリケートな場合、測定ノイズは縮退しているか否かについての判別に影響を与える。第一原理計算によって分裂が予想される場合でも、測定条件によってはスペクトルからその判別を行うことが困難となる。つまり、本来の縮退とは別に測定ノイズに起因する擬似的な「縮退」が存在する。分光測定は光と物質の相互作用に基づくため、本質的にゆらぎ、すなわちノイズを含む。物質そのものへの興味によるため、第一原理計算は測定を含めたシミュレーションにはなっていない。これが物性物理学を始めとした諸分野における理論と実験の本質的な乖離である。

本論文において、我々は分光法に基づく間接測定の情報科学的側面に着目し、測定ノイズに起因する「縮退」のメカニズムを解明する。縮退しているか否かの判別を行うため、観測スペクトルからエネルギー準位を間接測定する逆問題をベイズ推定に基づいて定式化し、効率的な計算を実現する枠組みを整備する。測定ノイズが推定に及ぼす影響が統計的推測の相転移として現れることを解明する。分散型分光法の物理モデルを考慮することで測定限界を定義し、実験計画の精緻化に対する示唆を与える。

2. ベイズ的スペクトル分解の修正

ベイズ的スペクトル分解[1]の枠組みを修正した。ベイズ的スペクトル分解はベイズ推定に基づき、多峰性の分光スペクトルをピーク分離する方法論である。複雑な分光スペクトルから対象の電子状態や原子の運動を解釈する際、ローレンツ関数やガウス関数などの基底関数でのピーク分離が有効である。しかし、多くの場合、ピーク数は未知である。ベイズ的スペクトル分解ではベイズ自由エネルギーと呼ばれる関数の最小化に基づき、ピーク数を推定する。スペクトルのデータ点、すなわちサンプル数が十分に多いとき、ベイズ自由エネルギーは損失関数と回帰曲線の複雑度(実対数閾値)によって定まる[2]。ピーク数の見積もりが多いほど回帰曲線の自由度が高く、損失は小さくなるが、実対数閾値が大きくなる。このトレードオフの下、データに対してベイズ最適なピーク数が求まる。ノイズ分散の値がそのバランス因子となる。つまり、ノイズ分散の値が不適切であると、このトレードオフのバランスが崩れ、誤ったピーク数が推定される。Nagata らの従来法[1]はノイズ分散を推定不能な枠組みであったため、従来法の定式化を見直し、ピーク数とノイズ分散を同時に推定可能な定式に修正した[3]。アルゴリズムへの実装に関して、修正した定式は従来法と数理的に等価であり、従来法と比較して、計算量の増加やその他の欠点の本質的でないことを示した。加えて、ノイズ分散の推定はパラメータの推定精度の適切な評価につながることを示した。つまり、ピークの位置、強度や幅の推定を通じ、エネルギー準位や緩和時間、原子や分子の数密度といった物理量を標準偏差付きで間接測定できることを示した。

3. 統計的推測の相転移

統計的推測の相転移に関する理論的枠組みを整備した。ベイズ推定と統計物理は数理的な構造が等しい。サンプル数は粒子数であり、損失関数がハミルトニアンに対応する。温度に対応する補助変数を導入したベイズ推定の定式の一般化により、統計物理における相転移に対応する現象の存在が示唆されていた[4]。しかし、そもそもベイズ推定における温度は単なる補助変数であり、直接的に意味を持たないことから、統計的推測の相転移について十分な議論がされていなかった。我々は統計力学の比熱に対応する量(ベイズ比熱)をベイズ推定に導入した。ベイズ比熱についてのスケーリング関係を導出することで、温度がノイズ分散のスケール因子であることを解析的に示した。サンプル数が十分に多い極限において、逆温度がサンプル数のスケール因子として働き、ベイズ比熱が実対数閾値に収束することを証明した。以上の理論に則り、数値実験によって、ノイズ分散によるベイズ的スペクトル分解の相転移を発見した。縮退の解けた二準位系を例に、ノイズ分散の大きさを変えた人工データをそれぞれ生成し、ベイズ的スペクトル分解を適用することで、ベイズ比熱が極値をとるノイズ分散を境に、分裂したピークが識別されず、「縮退」したピークが最適解として推定される相転移が解明された。我々はベイズ比熱が極値をとるノイズ分散を転移点、転移点間の領域をベイズ推定の相として定義した。ベイズ的スペクトル分解モデルは動径基底関数ネットワークと呼ばれる典型的なニューラルネットワークと数理的に対応しており、

統計的推測の相転移に関して得られた本結果の知見は深層学習を始めとする、ニューラルネットワークの研究に対する影響も期待される。

4. 分散型分光法の測定限界

統計的推測の相転移に関する理論的枠組みに則り、分散型分光法の測定限界を解明した。3章ではガウスノイズを扱ったが、分散型分光法における光子計数はポアソンノイズが伴う。ポアソンノイズのノイズ分散は検出する光子数、つまり測定時間に依存する。我々は X 線光電子分光における光子計数を想定したベイズ的スペクトル分解の定式化を行い、ベイズ比熱に関するスケール関係を導出した。逆温度が測定時間のスケール因子であることを示した。以上の理論に則り、数値実験によって、測定時間によるベイズ的スペクトル分解の相転移を解明した。3章の結果と同様に、ベイズ比熱が極値をとる測定時間を境に、分裂したピークが識別されず、「縮退」したピークが最適解となる相転移の存在が解明された。測定限界となるフレーム当たりの測定時間を基に、時間分解測定最適なフレームレート設計法を提案した。測定時間が転移点よりも短い場合、被測定系の対称性からエネルギーが縮退しているのか、エネルギーの縮退は解けているが、測定ノイズの影響によって推定量が「縮退」しているように見えるのかを区別できない、という教訓的な帰結を得た。

5. 主たる貢献と今後の展望

我々はスペクトルからエネルギー固有値が縮退しているか否かを判別する逆問題を議論し、測定ノイズが推定に与える影響を研究した。本論文の主たる貢献は次の通りである。

- A) 従来のベイズ的スペクトル分解をノイズ分散が推定可能な枠組みに修正するとともに、ノイズ分散とピーク数を同時推定することの重要性を示した。
- B) ベイズ推定と統計物理の数理的対応を洗い直し、ベイズ比熱という統計量を導入することで、統計的推測の相転移に関する理論的枠組みを整備した。
- C) 測定ノイズの影響によりエネルギー固有値の推定量が「縮退」する現象を発見し、その現象がベイズ的スペクトル分解の相転移であることを解明した。
- D) 分散型分光法の物理モデルを考案し、ベイズ的スペクトル分解の定式を拡張することで、測定時間によるベイズ的スペクトル分解の相転移を解明した。
- E) 被測定系におけるエネルギー固有値の縮退と測定ノイズの影響による推定量としての「縮退」は区別不能という命題を提起した。

本論文が示した結果は統計的推測の相転移についての単なる一例ではあるが、一般に他の測定においてもこうした現象が存在することを示唆する。対象を測定し、得られたデータに基づき推論するという自然科学の営みに問題を提起するだけでなく、データを遡ることで、データ獲得自体、すなわち実験計画への指針を与える可能性を秘めている。また、ヒト

の脳による認知がベイズ推定によって行われているという仮説[5]からの示唆も興味深い。画像からの特徴抽出における相転移の解明は広く自然科学を推し進めるだけでなく、ヒトの視覚情報処理における認知機構の理解にさえつながるかもしれない。

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

[2] S. Watanabe: *Neural Computation* **13** (2001) 899.

[3] S. Tokuda, K. Nagata, M. Okada: arXiv 1607.07590

[4] 渡辺澄夫: *ベイズ統計の理論と応用*, (コロナ社, 2012)

[5] Doya, K. (ed.): *Bayesian brain: Probabilistic approaches to neural coding*, (MIT press, 2007).