

論文審査の結果の要旨

氏名 徳田 悟

本論文は5章からなり、分光スペクトルからエネルギー準位が縮退しているか否かを判断する際に測定ノイズの影響による誤認識が起こること、及びその変化の閾値を情報処理の側面から論じている。

第1章では、研究の背景と目的、本論文の採るアプローチが述べられている。背景として、分光法は光と物質の相互作用を用いたエネルギー準位の観測であると量子力学的に説明でき、観測したスペクトルからエネルギー準位の縮退や分裂を判断することが系の対称性の理解に繋がることを言及している。しかし、問題として、測定ノイズの介在によりスペクトルの微細構造に対する誤認識が起こることを示唆している。目的として、誤認識のメカニズムを情報処理の観点から説明することを掲げている。目的達成のために本論文が採る、間接測定シミュレーションというアプローチが概説されている。順問題及び逆問題の定式化が示され、逆問題の不良設定性に関する言及が為されている。

第2章では、分光法によって物質のエネルギー準位を間接測定する際の逆問題に関しベイズ推定に基づく定式化を与え、シミュレーションを通じて、ノイズ分散を推定する意義を示している。測定したスペクトルから準位数を推定し、基底関数の重ね合わせによる回帰を通じて、エネルギー準位や系の温度、原子の数密度といった情報を抽出する枠組みとしてベイズ的スペクトル分解が知られている。本章では、従来の枠組みが測定データの持つノイズ分散の推定ができず、それを過大あるいは過少評価してしまうことで準位数の誤推定を起こすことを問題提起している。この問題に対する一つの解として、従来の枠組みにおける定式化をベイズ統計に基づく素直な定式化に修正し、ノイズ分散と準位数の同時推定が可能な枠組みを提案した。シミュレーションを通じ、実際にその有効性を示した。

第3章では、統計物理とベイズ推定の数理的対応に基づき、測定ノイズの影響による逆問題の解の変化に理論的解釈を与えている。これまでにも、ベイズ推定は統計物理との数理的な対応が議論され、その定式に逆温度に対応する補助変数を導入した一般化が知られている。しかし、その補助変数の意味や統計物理における相転移に対応する現象については十分な議論がなされていなかった。本章では、ベイズ推定の特異学習理論と統計物理との接続を図る形で、ベイズ比熱という新たな統計量を導入した。ベイズ比熱のスケリング解析を行い、逆温度がノイズ分散のスケール因子であることを示した。シミュレーションにより、ノイズ分散によるベイズ的スペクトル分解の相転移を解明し、ベイズ比熱が推定の相転移に関する指標であることを示した。同様にスペクトル分解の相図を明らかにした。

第4章では、分散型分光法の物理モデルを定式化し、測定時間によるベイズ的スペクトル分解の相転移を明らかにしている。これまで、分散型分光法による時間分解測定が持つフレームレートと各フレームの信号雑音比との間のトレードオフが知られている。このトレードオフを最適化することで高精度な時間分解測定が可能になる。本章では、先行研究で示唆されていた、測定時間によるベイズ的スペクトル分解の相転移の存在を前章の理論を適用することで裏付けた。分散型分光法の物理モデルに関するベイズ比熱のスケーリング解析を行い、測定時間に関する外挿公式を導出した。シミュレーションにより、測定時間に関する相転移が起こることを明らかにし、測定時間の転移点を基準とする時間分解測定フレームレート設計に示唆を与えた。測定時間による相転移から標準量子限界よりも厳密な測定限界となる測定時間の存在を示した。

第5章では、本論文の貢献と今後の展望が述べられている。数理科学および計測科学の両面からそれらが論じられている。

なお、本論文第2～4章は永田賢二、岡田真人との共同研究であるが、論文提出者が主体となって全ての解析およびシミュレーションを行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（科学）の学位を授与できると認める。

以上1680字