

ベイズ推論と物性科学

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
岡田真人

18世紀の数学者 Thomas Bayes の名を冠するベイズ推論は、計測データ y とその原因となる物理過程 x に関して、ベイズの公式で因果律を遡ることで y から x を推論する普遍的な枠組みである。物性科学では系のハミルトニアンを仮定し、因果律に従い順方向にデータを解釈する研究が主流である(順アプローチ)。我々は物性科学の新たな展開の一つとして、ベイズ推論を用いて逆方向に、データ y から物理過程 x を推論するアプローチ(逆アプローチ)が必要であると確信している。

本講演では、その一例として、多峰性スペクトルをガウス関数のような単峰性の基底関数の線形和に分解するスペクトル分解に関するベイズ推論を紹介する。スペクトル分解では、基底関数の個数 K をいかに決めるかが重要な問題である。この最適な K を選ぶことを統計学ではモデル選択とよぶ。我々はベイズ推論に基づき、基底関数の数 K をデータのみから推定する理論的枠組みを提案した[1,2,3]。本講演では、X線光電子分光(XPS)に関するモデル選択の問題を取り扱うとともに、時間分解 XPS を想定し、[1,2]の枠組みを拡張し、計測時間の短縮から生じる光電子の離散性ノイズの取り扱いも議論する[4]。

さらに、ベイズ推論にもとづく有効ハミルトニアンのモデル選択の例として、表面物性の走査型トンネル顕微鏡(STM)画像[5,6]、強相関電子系のスピン流体[7]をとりあげ、最後に今後の物性科学とベイズ推論についての展望を述べる。

- [1] K. Nagata, S. Sugita and M. Okada: Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method. *Neural Networks*, **28**, 82-89, 2012.
- [2] 永田賢二, 杉田精司, 佐々木岳彦, 岡田真人: 実験データからピークの数推定するには? — スペクトル分解とベイズ統計 —, 日本物理学会誌, (印刷中)
- [3] S. Tokuda, K. Nagata and M. Okada: A numerical analysis of learning coefficient in radial basis function network, *IPSSJ Trans. on Math. Model. Appl.*, **6**, 117-123, 2013.
- [4] 永田賢二, 村岡怜, 佐々木岳彦, 岡田真人, ベイズ推定に基づくスペクトル分解と必要最小計測時間の推定について, 信学技報, NC2013-109, pp.121-126, 2014年
- [5] 岸本真和, 永田賢二, 岡田真人, 福島孝治: 画像修復におけるハイパーパラメータ推定と誤差評価, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年
- [6] Y. Nakanishi-Ohno, K. Nagata, H. Shouno and M. Okada: Distribution estimation of hyperparameters in Markov random field models, *J. Phys. A: Math. Theor.* **47**, 045001, 2014.
- [7] H. Takenaka, K. Nagata, T. Mizokawa and M. Okada: Model selection of NiGa₂S₄ triangular lattice by Bayesian inference, submitted to *J. Phys. Soc. Jpn.*