

# ベイズ的スペクトル分解の数理—測定ノイズによる推定の相転移—

東京大学大学院新領域創成科学研究科

徳田 悟

## Mathematical Principle of Bayesian Spectral Deconvolution: Phase Transitions of Statistical Estimation by Measurement Noise

*Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo*

**Satoru Tokuda**

物質の持つ量子性からスペクトルはエネルギー準位を中心とする単峰な基底関数の線形和に近似的に還元できる。スペクトルはシュレーディンガー方程式が示唆するように、二つ以上の異なる状態が同様の固有エネルギーに対応する、縮退を反映する。縮退は外的摂動によって系の対称性が破れた際に解け、スペクトルにおいてピークの分裂として観測される。分裂したピーク間のギャップが小さいようなデリケートな状況において、測定ノイズはピークの同定に深刻な影響を与える。測定ノイズが大きいことで分裂しているはずのピークがあたかも「縮退」していると誤認識してしまう状況が存在する。本講演では、分光法に基づくエネルギー準位の間接測定を定式化し、介在する情報処理の側面に着目することで、「縮退」を招く誤認識の機構を説明する。まず、ベイズ的スペクトル分解と呼ばれる、スペクトルからエネルギー準位を推定する逆問題を定式化する [1, 2]。ベイズ推定を導入し、ノイズ分散や準位数が未知の状況において、それらを推定する数理的な機構を説明する。次に、ベイズ推定と統計物理の数理的な共通性に視点を広げ、ベイズ推定の相転移を説明する数理的基盤を整備する [3]。間接測定のシミュレーションを通じて、測定ノイズによる「縮退」の誤認識がベイズ推定の相転移であることを示す。最後に、分散型分光法に着目し、その物理モデル化を考慮することで、この測定法が持つ本質的な測定限界を示す [4]。標準量子限界と呼ばれる、シグナルとノイズの区別がつかなくなる測定限界がこれまでよく知られてきた。測定ノイズによる「縮退」の誤認識が起こる状況では、二つのシグナル各々の区別がつかなくなる、ベイズ推定の相転移に起因する測定限界がこれとは別に存在することを示す。

## 参考文献

- [1] Kenji Nagata, Seiji Sugita and Masato Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks*, **28**, 82-89, 2012.
- [2] Satoru Tokuda, Kenji Nagata and Masato Okada, Simultaneous Estimation of Noise Variance and Number of Peaks in Bayesian Spectral Deconvolution, *Journal of the Physical Society of Japan*, **86**(2), 024001, 2016.
- [3] Satoru Tokuda, Kenji Nagata and Masato Okada, *in preparation*.
- [4] Satoru Tokuda, Kenji Nagata and Masato Okada, *in preparation*.