

理学研究科セミナー

物性物理学とベイズ計測

ベイズ計測の理学研究科への展開

研究棟739号室 2/12(水)11:00-12:00

講師: 岡田 真人

(東京大学 大学院新領域創生科学研究科)

本セミナーでは、物性物理学全般を取り扱うことができるベイズ推論の枠組みを紹介する。ベイズ推論は、系の性質がある程度わかり、系を記述する数理モデルが複数に絞られている時に威力を発揮する。本セミナーではベイズ推論が自然科学全般を記述する普遍的な数理情報基盤であることを述べる。

その具体例として、私がお阪大学大学院理学研究科物理学専攻の修士課程時代に金森研で行った希土類化合物のX線光電子放出スペクトル(XPS)とX線吸収スペクトル(XAS)のデータ解析を紹介する[1]。そこではXPSとXASを説明する有効ハミルトニアン決定と、XPSとXASのデータ統合を行う必要があった。40年前の当時は、これらの有効ハミルトニアン決定とデータ統合に関して、有効な指針がなかった。これは40年間の昔話ではなく、現代も40年前と全く同じ状況である。

私は、これは単に物性物理学だけでなく、物理学はたまた自然科学の方法論の重大な欠点だと自覚し、自然科学にベイズ推論を導入する必然性を指摘してきた。そこで、我々は計測科学へのベイズ推論を適用し、その理論的枠組みをベイズ計測と名付けた。

本セミナーでは、 $y=ax+b$ の線形回帰 [2] とスペクトル分解 [3] を用いてベイズ計測を紹介する。さらに、NMRの緩和モード分解[4]、強相関電子系のXPSとXASのベイズ統合[5]などベイズ計測が幅広い分野で有効であることを示し、SPring-8全ビームラインベイズ化計画[6]で放射光化学を刷新できることを示す。

最後にベイズ計測は物質科学だけでなく生命科学にも有効であることを具体例[7]で示し、兵庫県立大理学研究科をまたがる新たな枠組みたることを示す。

[1] Kotani, Okada, Jo, Bianconi, Marcelli and Parlebas, , *JPSJapan*, **56**(2), 798-809, (1987)

[2] Katakami, Kashiwamura, Mizumaki and Masato Okada, <https://arxiv.org/abs/2406.02869>

[3] Kenji Nagata, Seiji Sugita and Masato Okada, *Neural Networks*, **28**, 82-89 (2012)

[4] Ueda, Katakami, Yoshida, Koyama, Nakai, Mito, Mizumaki and Okada, *JPSJ*, **92**, 054002 (2023)

[5] Yokoyama, Uozumi, Nagata, Okada and Mizumaki, *JPSJ*, **90**, 034703, (2021)

[6] <https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/pdf/SP8project.pdf>

[7] Matsumoto, Okada, Sugase-Miyamoto, Yamane and Kawano, *Cerebral Cortex*, **15**, 1103-1112, (2005)

お問い合わせ先: 和達大樹 (大学院理学研究科) wadati@sci.u-hyogo.ac.jp