

Seminar

分光法にまつわる逆問題の数理： データ解析から実験計画まで

徳田 悟 氏

(産総研・東北大

数理先端材料モデリング オープンイノベーションラボラトリ)

10月16日(月) 16:00-17:00

理学研究科合同B棟821号室

エネルギー準位は対象の物性を司る情報であり、我々は種々の分光法によってそれを知ることができる。しかし、測定したスペクトルからエネルギー準位を目視で識別することはしばしば難しい問題となる。準位数を仮定し、ピークフィッティングを行うことでそれを識別することが常であるが、実際は準位数自体が未知であり、それが知りたいという状況に度々遭遇する。本講演ではスペクトルから準位数自体をも推定した上で、エネルギー準位を求める逆問題をベイズ推定に基づき定式化し、それを解く枠組み(ベイズ的スペクトル分解)を紹介する。また、統計力学とベイズ推定の数理的な対応に基づき、この枠組みを数値的に解析することで、測定ノイズがある大きさを超えると推定される準位数が誤った解になる現象(ベイズ推定の相転移)を説明する。さらに、分散型分光法の物理モデルを考慮することで、正しい準位数を導くために必要な測定時間(測定限界)を評価し、実験計画に生かす可能性について述べる。

連絡先: 理学研究科物理学専攻 石原純夫

TEL.: (Ext) 6436

e-mail: ishihara@cmpt.phys.tohoku.ac.jp