

スパースモデリングによる 量子ビームからの潜在構造抽出

Latent-structure extraction from quantum beam based on sparse modeling

岡田 真人

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻

スパースモデリングの基本的な考え方は(1)高次元データの説明変数が次元数よりも少ない(スパース(疎)である)と仮定し, (2)説明変数の個数なるべく小さくなることと, データへの適合とを同時に要請することにより, (3)人手に頼らない自動的な説明変数の選択を可能にする枠組みである. 本講演では, 量子ビームに関するスパースモデリングの具体例として, 分光学のスペクトル分解および, 強相関電子系のハートリー・フォック計算からの有効ハミルトニアンの自動抽出について述べる[1, 2, 3].

スペクトル分解: 1次元の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 K 個の線形和に分解するスペクトル分解について議論する. 我々は, ベイズ推論にもとづき基底関数の数 K を実験データから自動的に抽出する枠組みを提案した[1, 2]. 我々は, この枠組みを計測ノイズが量子性にに基づくポアソン分布に従う場合に拡張し, 量子ビームの量が足りない場合に, どこまで計測結果を信用できるかの, 計測限界を示す理論的枠組みを提案した.

有効ハミルトニアンの自動抽出: 第一原理計算に代表される電子状態の計算結果を, 中性子散乱などの量子ビームの計測結果と比較するには, 古典的なスピンモデルのような有効モデルを経由することが多い. 我々はその一例として, NiGa_2S_4 三角格子系について, 非制限ハートリー・フォック(UHF)近似による電子状態の数値計算データから, 古典的スピンモデルの交換相互作用を何次まで用いるべきかを自動抽出する枠組みを, ベイズ推論をもとに提案した[3]. そこで我々は, 低温で最近接相互作用の符号が 中性子散乱の実験結果と一致することを示した.

[1] K. Nagata, S. Sugita, M. Okada, 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と推定するには?—スペクトル分解とベイズ統計, 日本物理学会学会誌, 69, 12, pp.876-880, 2014.

[3] H. Takenaka et. al., Journal of the Physical Society of Japan, 83, 124706, 2014.