

ベイズ計測による計測科学の情報数理基盤

五十嵐康彦¹, 竹中光², 永田賢二³, 岡田真人^{1,2}

¹ 国立研究開発法人物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)

² 東京大学 大学院新領域創成科学研究科

³ 国立研究開発法人産業技術総合研究所 人工知能研究センター

本講演ではベイズ的スペクトル分解をロールモデルとして、計測科学にベイズ推論の枠組みを導入したベイズ計測と、ベイズ計測にもとづく VMA(仮想計測解析: Virtual Measurement Analysis)を提案する[1].

図にベイズ計測と従来の計測手法の関係を示す. 従来手法では, 対象の物理モデルと計測モデルを用いて, 計測の結果を理論的に予測し, 仮定した物理モデルが正しいかを議論する. 従来手法では通常, 物理モデルのパラメータをなんらかの手法で最適化し, 実験データの結果をフィッティングする.

ここで計測には誤差がつきものであることを思い出そう. 計測ノイズの分散が大きい場合は, 物理モデルのパラメータの精度に影響をあたえることは容易に推測できるが, 従来の方では, 物理モデルのパラメータを求めることはできても, そのパラメータの精度を議論することはできない. さらに, 図に示すマルチピークスpektrルの分解では計測データ Y だけから, ピーク数 K を決める必要があるが, 従来手法ではピーク数 K を決めてから, モデルのパラメータを決定するため, 原理的にピーク数 K を決めることができない.

以上の考察から我々は, 計測データから計測対象の系の物理モデルを抽出するために, 計測科学にベイズ推論を導入する必要性を指摘してきた[2, 3]. この枠組みを, 我々はベイズ計測と名づけた[1]. ベイズ計測は, (1) 従来手法で用いられる物理モデルと計測モデルから, 計測データの生成モデルを確率モデルとして定式化し, 因果律を表現する. (2) ベイズの定理で事後確率を求め因果律を遡り, 系の物理モデルのパラメータの全ての情報を確率モデルとして抽出する. さらにベイズ計測では, 物理モデルと計測モデルを用いて, 計測シミュレーションが可能である. VMA(仮想計測解析: Virtual Measurement Analysis)とは, (1) 物理モデルと計測モデルを仮定し, (2) 計測データを計測シミュレーションでもとめ, (3) その事後確率を用いて, (1)で仮定した計測対象がどの程度正確に予想できるかを議論する情報数理的枠組みである[1].

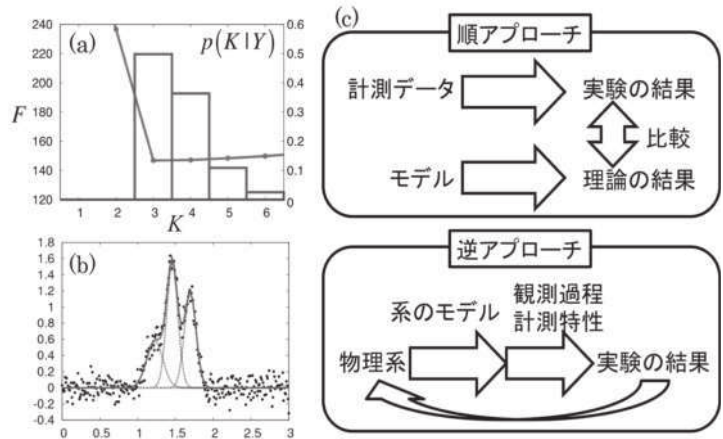


図: ベイズ計測と従来法の関係

[1]. 五十嵐康彦, 竹中光, 永田賢二, 岡田真人, 応用統計学, **45(3)** pp. 75-86, 2016.

[2]. Nagata, Sugita and Okada, *Neural Networks*, **28**, pp.82-89, 2012.

[3]. Iwamitsu, Aihara, Okada and Akai, *JPSJ*, **85**, 094716, 2016.

ベイズ計測による計測科学の情報数理基盤

岡田真人

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
物質・材料研究機構(NIMS)
統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)

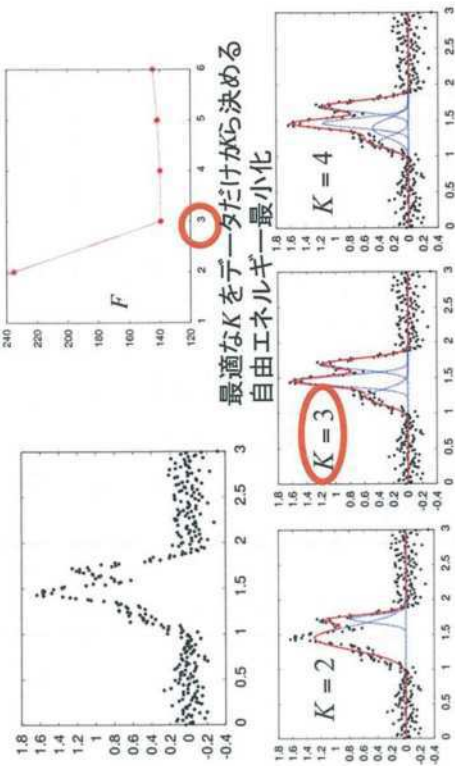
内容

- 自己紹介
- 希土類化合物のXPSとXASの理論とその問題点
- ベイズ的スペクトル分解
- ベイズ計測とVMA(仮想計測解析)の提案
- まとめ

自己紹介(理論物理学者)

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
 - アモルファスシリコンの成長と構造解析
- 大阪大学大学院理学研究科(金森研) (1985 - 1987)
 - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- 三菱電機 (1987 - 1989)
 - 量産工場技術者: 化合物半導体(半導体レーザー)の結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科(福島研) (1989 - 1996)
 - ニューラルネットワーク(ディープラーニング)
- JST ERATO 川人学習動態脳プロジェクト (1996 - 2001)
 - 計算論的神経科学
- 理化学研究所 脳科学総合研究センター 甘利チーム (2001 - 04/06)
 - 情報統計力学
- 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
 - ベイズ推論, 機械学習, データ駆動型科学
- 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
 - 物質科学(強相関電子系, 表面, 地球惑星科学) (2004/07 -)
- 物質・材料研究機構(NIMS) (2015/8/1 -)

スペクトル分解



Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

