

ベイズ計測の基礎から展開へ：
研究スキルの獲得からキャリアプランまで

東京大学・大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻 岡田真人

アブストラクト

本セミナーでは、データ駆動科学の二大情報数理基盤であるベイズ計測の基礎から展開を紹介する。データ駆動科学は階層的な自然観に基づいており、その情報推理基盤はベイズ推論とスパースモデリング(SpM)である。SpMはまだ現象のモデルが構築されておらず、実験データのみから現象論を構築する際に用いられる。物理学におけるSpMの具体例は、ケプラーの法則と前期量子論である。

一方、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、そのベイズ推論を計測科学に適用する際に、必要十分な情報数理的体系であるベイズ計測を中心に解説する。

ベイズ計測は計測過程や物性現象の物理モデルを取り込んだ枠組みとなっている。ベイズ計測には三種の神器と考えられる(1) パラメータの確率分布推定、(2) ベイズ的モデル選択、(3) ベイズ統合の三つからなる。たった三つの三種の神器を駆使することにより、これまでの単なる実験データ解析では到達できなかった計測したデータから対象としている物性現象の起源を解明することができる。

本講演においては、よく知られている直線回帰 $y=ax+b$ の a と b の推定を皮切りに、ベイズ計測の概念とその枠組みを紹介する。まず導入として直線回帰 $y=ax+b$ の最小二乗法の復習をし、ベイズ推論の説明の後、直線回帰 $y=ax+b$ の(1) パラメータの確率分布推定とノイズ分散推定、(2) ベイズ的モデル選択を快適的に取り扱うことで、ベイズ計測の身体化を目指す。

次に、解析的にベイズ計測を行えない典型系としてスペクトル分解を取り扱う。スペクトル分解を例に、通常の実験データ解析手法の従問題点を指摘し、それを系統的に解決するためにベイズ計測をスペクトル分解に導入する。ここでもベイズ計測三種の神器を駆使し、(1) パラメータの確率分布推定を行うとともに、それを用いて観測ノイズに関する計測限界を理論的に議論する。さらに(2) ベイズ的モデル選択で、スペクトルが何本のピークから構成されているかをデータのみから決める、古来から難問とされていた問題がベイズ計測で解決できることを示す。

ひきつづき、NMR、メスバウアー分光、小角散乱などの多様な計測に適用し、これらを普遍的に取り扱うことができることを実証する。その発展として、Spring-8 全ビームラインベイズ化計画を紹介し、どのような戦略のもとベイズ計測を基礎研究から民間企業の開発まで社会実装していくかを述べる。

ここから、本来皆さんが一番知りたい、ベイズ計測を大学院で習得することのメリットを述べる。ベイズ計測を大学院での OJT(On the Job Training)で習

得することにより、研究のスキルは当然のこととし、共同研究の立案とイニシアチブをもった共同研究のハンドリング能力、上司のコントロール力、部下の教育など仕事に必要なスキルが全て習得可能であることを述べ、ベイズ計測習得により、アカデミアから民間企業、はたまた起業まで、広範なキャリアプランの構築が可能であることを述べ、本講演の結びとする。