

ベイズ推論が切り開く情報計測の地平

東京大学大学院新領域創成科学研究科 岡田真人

国立研究開発法人産業技術総合研究所 永田賢二

本講演では、JST 情報計測 CREST「データ駆動科学による情報計測への支援」についての取り組みについて紹介する。このプロジェクトでは、物質科学・生命科学における計測の情報数理基盤をベイズ推論とスパースモデリング(SpM)に基づき構築することを目的とする(下図)。

計測対象である物質の特性の物理モデル及び、計測機器の特性の物理モデルを定式化できた場合、その計測へベイズ推論を適用することで、観測データを入力として物理モデルのパラメータを推定できる。物質科学・生命科学での分子や結晶などに対する、分光やイメージングなどの多くの計測は、この条件を満たすのでベイズ計測が適用できる。生物学や地学のような、第一原理からの演繹だけでは取り扱えない対象に関しては、SpM で対象を記述する説明因子を自動抽出できることが示されている。その場合、その対象のモデルと計測の物理モデルを統合することで、ベイズ推論を用いることができる。

以上の議論から、ベイズ推論と SpM によって、物質科学・生命科学の計測を幅広く取り扱えることが期待される。この考えに基づき、物質科学・生命科学を貫く横串となる情報数理基盤を構築し、情報計測学とも呼ぶべき計測と情報の融合による新分野創成のロールモデルを構築する。これにより、計測領域間における知識移転の質的向上を目指す。

本講演では、ベイズ計測の実例として、物性物理学や生物学といった様々な分野において、物質の特性を反映する情報として計測されるスペクトルデータへ適用した研究を紹介する[1]。また、LASSO をはじめとした SpM の実現手法は近似手法である為、手法の選択に恣意性を含む問題を実例を通じ紹介し、分析者の主観によらない計測のモデル化の実現に向けて開発された、手法の違いを客観的に評価するための状態密度付き全状態探索(ES-DoS)法についても合わせて紹介する[2]。

[1]K. Nagata, S. Sugita, M. Okada, Neural Network, Vol.28, pp.82-89, 2012.

[2]Y. Igarashi et al., Journal of Physics: Conference Series, in press.

