

ベイズ推定に基づくスペクトルデータからの情報抽出

永田賢二

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/JST さきがけ「数学協働」

分光計測により得られる複雑なピーク構造を持つスペクトルデータをガウス関数などの単峰な基底関数の重ね合わせにより回帰するスペクトル分解は、分光データから背後に潜む物理構造を抽出する上で重要である。本講演では、ベイズ推定に基づくスペクトル分解¹の手法について解説する。

一般的にスペクトル分解を行う上で、二つの問題がある。一つは、基底関数の非線形性やモデルの階層性に起因する局所最適解の問題である。もう一つは、基底関数の個数を与えられたデータのみからいかにして客観的に決定するかの問題である。本講演で取り扱うベイズ推定の枠組みでは、データが取得されるプロセスを確率的にモデル化し、ベイズの定理に基づき因果関係を遡ることで推定を行う。この推定法を利用することで、ピーク位置などの基底関数のパラメータだけでなく、基底関数の個数まで推定することが可能となる。また、アルゴリズムとして、レプリカ交換モンテカルロ法を利用することで、局所最適解を避け大域的な最適解を高い確率で探索することが可能となる。

下図は、ベイズ推定を利用したスペクトル分解の一例である。左上の図は、ピーク構造が3つであることを仮定して人工的に生成したスペクトルデータである。これにベイズ推定を適用すると、右上の図のように、観測データセット Y が与えられたもとで基底関数の個数 K の条件付き確率を数値的に求めることが可能になる。この結果に基づき、 $K=3$ のときが確率最大であることがわかり、 $K=3$ が適切であると推定することができる。

本講演では、ベイズ推定の枠組みおよびそれを実現するアルゴリズムであるレプリカ交換モンテカルロ法についてできるだけ平易に実例を交えながら解説を行う。

[1]K. Nagata, S. Sugita and M. Okada, Neural Networks, **28**, 82-89 (2012).

