

ベイズ計測と放射光科学

岡田真人

東京大学大学院新領域創成科学研究科

ベイズ計測とはベイズ推論を計測科学に適用する際に必要十分な要素を集めた情報数理体系である。ベイズ計測を放射光科学に適用することにより、従来では考えられなかったデータ解析を行なえたり、計測分野を超えた知識伝播が可能となることを述べ、放射光科学におけるデータサイエンスを用いた最先端計測解析に関する展望を述べる。

本講演では、統計学のベイズ推論を計測科学向けにコンパクトな形で再構成した情報数理科学的体系であるベイズ計測と、そのベイズ計測の放射光科学への展開を議論する。ベイズ計測は、三種の神器と呼ばれる、(a) 物理パラメータの事後確率推定、(b) 同一データを説明する複数モデルをデータのみから選べるベイズ的モデル選択、(c) 同一物質に対する複数の実験データを系統的に統合するベイズ統合の三つの要素から構成される。特に(b)のベイズ的モデル選択と(c)のベイズ統合は、計測科学上必須であるにもかかわらず、これまでの全ての解析手法が取り扱えなかった対象である。

直線回帰 $y=ax+b$ にベイズ計測を導入し、従来の最小二乗法によるパラメータフィットと何が違うかを平易に説明する¹⁾。次に図1の多峰的スペクトルを図2のように単峰関数の線形和で表すスペクトル分解を、非線形な計測系の典型例として取り上げる。非線形な計測系では、上記の線形回帰のように解析的にベイズ計測を行うことができない。そこで数値計算のレプリカ交換モンテカルロ法を用いて、(a) 事後確率推定と(b)図2の中で適切な K を求めるベイズ的モデル選択を行う^[1]。

スペクトル分解で用いた手法は、全ての分光スペクトル解析に用いることができる。そこで我々は、SPRING-8 全ビームラインベイズ化計画を立案し、2024 年度中に JASRI が担当する 26 本のビームラインのうち半数以上の 14 本にベイズ計測を導入する予定である。直線回帰やスペクトル分解だけでなく、ビームラインの担当者が日々扱っている対象に対し、ベイズ計測が質的に異なるメリットがあることを示し、ベイズ計測を一気に SPRING-8 に普及する作戦である。その具体例として、私の学生が主に進めたメスbauer分光、小角散乱を紹介する。

最後に、放射光科学におけるデータサイエンスを用いた最先端計測解析に関する展望を述べる。

参考文献

- [1] Nagata, Sugita and Okada: Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method. *Neural Networks*, 28, 82-89, 2012.

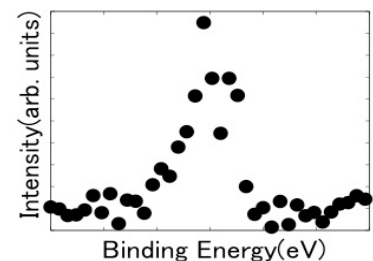


図1：多峰的スペクトル

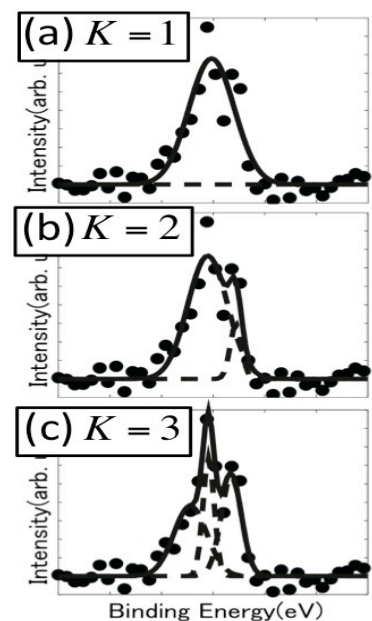


図2：モデル選択