

ベイズ計測オープンソースソフトウェアの開発の取り組み

片上 舜

東京大学 新領域創成科学研究科

ベイズ解析は強力なデータ解析手法ですが、その実装にはレプリカ交換モンテカルロ法など高度なサンプリング技術が必要となり、実装コストが高いという課題があります。本講演では、その実装コストを低減し、ベイズ計測をより平易に行うためのオープンソースソフトウェア開発の取り組みについて紹介します。

本講演では、ベイズ計測の実装を容易にするためのオープンソースソフトウェアの開発について紹介する。ベイズ計測は、ベイズ推論を計測科学に適用するための情報数理科学的な枠組みであり、事前知識と観測データを組み合わせて物理パラメータの確率的推定やモデル選択を行う強力な手法である。しかし、その実装にはレプリカ交換モンテカルロ法などの高度なサンプリング技術が必要であり、計算コストや実装の複雑さが高いという問題がある。このため、非専門家がベイズ解析を実践する際の大きなハードルとなっている。

既存のベイズ解析ライブラリは自由度が高く、汎用性があるものの、計測科学への応用を念頭に置いておらず、専門的な設定や実装が必要である。また、データの取り込みやモデルの設定、結果の可視化などのワークフローを自ら構築しなければならず、時間と労力を要する。本ソフトウェアは、これらの課題を解決するために開発しており、計測科学の現場で得られるデータに対して、迅速かつ容易にベイズ解析を行うことができるよう設計している。

本講演では、具体的な応用例として、スペクトル分解[1]の実装をデモンストレーションする。スペクトル分解は、複雑なスペクトルデータを個々のピークに分解し、物質の特性を解析する上で重要な手法である。しかし、従来の解析手法では、モデルの選択やパラメータの推定に主観が入りやすく、解析結果の信頼性に課題があった。本ソフトウェアを用いることで、ベイズ的モデル選択と事後確率推定に基づいた客観的な解析が可能となり、結果の信頼性と再現性が向上する。

また、本ソフトウェアはベイズ統合などの新たな手法も平易に取り込めるように開発を進めている。ベイズ統合は、同一物質に対する複数の実験データを統合的に解析する手法であり、データの相補性を活かして解析精度を向上させることができる。これにより、複雑な物質系の詳細な解析や、新たな物理現象の発見につながる可能性がある。

計測科学以外の分野への応用も視野に入れ、ソフトウェアの機能拡張を行っており、オープンソースとして公開することで、ユーザーコミュニティとの連携を図り、機能の改善や新たな機能の追加を継続的に行っていく。これにより、ベイズ解析の普及と科学の発展に貢献したいと考えている。

参考文献

[1] K. Nagata, Y. Sugita, and M. Okada: Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method. *Neural Networks* **28**, 82–89 (2012).