

論文の内容の要旨

論文題目 Bayesian Modeling of Lattice System Measurement
for Latent Parameter Estimation
(潜在パラメータ推定を目的とする格子系観測のベイジアンモデリング)

氏名 坂本 浩隆

自然科学と工学は相補的な発展を遂げてきた。計算機によるシミュレーションや極限的な観測機器が明らかにした科学的事実は大きなインパクトを持って受け入れられ、また自然科学は常に工学の発展の目標と基礎を与えてきた。しかし、自然科学における工学技術はもはや単なる技術を超えて自然科学における比重を増しつつある。例えば、材料工学で撮影される顕微鏡写真は材料の機能と構造の関連を明らかにする一方で、解析に要するコストは重く人的資源を圧迫している [J. Simmons+ (2008)]。また技術の発展に伴った高額な観測機器の導入には予め十分な性能評価が求められる。このような現状を顧みて本論文では、Engineering for Science の観点から、自然科学の観測にとって重要な2つの目的について述べる。1つは観測対象の潜在パラメータ推定、もう1つが観測および観測対象のモデル化と結びついた実験計画法の提案である。

自然科学における観測とは、すなわち画像データの取得であると言える。自然現象は連続かつ近接相互作用を持ち、画像データはその近接相互作用を観測したものだからである。連続な実空間中の近接相互作用は、離散的なサンプリングを通して観測される。この観測は2つの手法に基づいて行われてきた。まず1つは連続な実空間から得た離散的な観測点を、実空間中にそのまま配置する実空間観測である。このように撮像された画像はグラフィカルモデル、特に格子状のグラフとして表現することができ、空間的な近さは画素値の相互作用としてモデルに取り込まれる。もう1つは実空間中の連続性を電磁波や中性子の散乱に基づいてフーリエ変換し、運動量空間中に値をマップするフーリエ観測である。スペクトルデータは現在では運動量空間の連続した点上の観測結果を並べたイメージングデータとして処理が行われている。このような観測はもともと固体結晶の解析のために行われてきた。固体結晶解析で目的となるのは特に結晶の対称性の解析と結晶格子の相互作用パラメータ推定である。本論文では、実空間観測とフーリエ観測双方を扱う。

画像データは近接相互作用を反映して複雑な構造を持ちうるが、それ故にこれまで目視による定性的評価が多く行われてきた。我々の目標である画像の潜在パラメータ推定とは、画

像データを用いて観測対象のモデルを得ることである。我々が持つ仮説を反映した複数のモデルから適するものをデータに基づいて選択し、モデルに含まれる潜在パラメータを決定することで、観測データを定量的に評価したと言える。本論文では特に、画像データに基づく潜在パラメータの決定を取り扱う。また潜在パラメータの推定の際、推定の信頼度を評価することも重要な目的である。本論文では、信頼度の解析を通じて観測データの処理や観測法が潜在パラメータ推定に与える影響を評価し、適切な観測や処理を考察する。

本論文では、ベイズ推定に基づいて画像データから観測対象の潜在パラメータを推定し、推定された値の信頼度を評価する。ベイズ推定は事前分布と呼ばれる確率分布を仮定することで、我々が対象に対して持っているモデルを自然に推定に取り込むことができる。データが生成される過程をモデル化することで、観測過程での処理が与える影響を評価することも可能になる。データに基づく潜在パラメータの事後確率分布を推定することで、潜在パラメータ推定と信頼度の評価を行うことができる。

本論文中の研究では、潜在パラメータ推定とその信頼度に基づいて観測モデルを評価する枠組みを研究するため、すべて人工データに基づく検証を行った。ベイズ推定による事後確率分布推定は計算コストがかかるため、実用上は近似推定もよく利用されている。本論文では、観測モデルの影響を近似計算による影響と分離して評価するために、事後分布推定の際には解析解に基づく厳密な推定や、事後確率分布の形状に近似的な制約を課さないサンプリングに基づく計算法で推定を行った。

第3章、第4章、第5章では、実空間画像を格子モデルとしてとらえ、格子の相互作用パラメータを推定し、信頼度評価を行った。我々は格子モデルによって撮像対象の空間的な滑らかさをモデル化するマルコフ確率場 (MRF) [S. Geman+ (1984), J. Besag (1974)] を用いた。MRFモデルは確率モデルであり、ベイズ推定による解析が行われている。MRFモデルでは画像を格子上のグラフィカルモデルとして表現し、画素値はグラフのノード、画素値間の相関を表す相互作用はグラフのエッジとして表現される。Nakanishiらは、グレースケール画像のモデルであるGauss MRFと拡散方程式の対応を示し、拡散係数と対応するガウス MRFモデルのハイパーパラメータ (潜在パラメータ) を分布推定する手法を提案した[Y. Nakanishi+ (2014)]。

第3章では、先行研究で提案されたガウスMRFモデルの潜在パラメータ事後分布推定に対して性能評価を行う [H. Sakamoto+ (2016)]。我々は画像ごとに定義される負の対数事後分布の画像データに対する配位平均を導出した。画像データに対する配位平均を取ることで、真の画像の生成モデルが定まったときのモデルパラメータ分布を厳密に評価することが可能になった。この配位平均の分布はデータ量の増加に伴って縮小し、理論的解析が先行研究を裏付けることを確認した。本研究で得られた配位平均は、真のモデルを既知であったときのデータに基づく推定の信頼度を示す。仮に真のモデルが既知であったとしても、データに基づいてモデルパラメータ推定を行う限り、推定は分散を持って推定される。本研究の結果は、モデルに基づく実空間観測画像データの潜在パラメータ推定と信頼度評価の基礎となる。

第4章では、観測に伴う空間的ダウンサンプリングがガウスMRFのモデルパラメータ推定に与える影響評価を行った。空間的ダウンサンプリングは連続な撮像対象を離散的素子によって撮像する以上避けられない現象である。我々はガウスMRFモデルに基づくベイズ推定に、空間的ダウンサンプリングを組み込み、モデルパラメータ推定に及ぼす影響を評価した。事後確率分布を推定する数値実験により、空間的ダウンサンプリングが撮像対象の次元に依存するバイアスを生じさせうることを示し、ダウンサンプリングが格子モデルの構造に与える影響を考察した。本研究は、観測が推定に与える影響を空間的なサンプリングという観点から扱い、その影響が推定値の分散ではなく偏りとして現れることを示した点で、モデルに基づく実空間観測画像データの定量評価に重要な示唆を与える。

第5章では、MRFモデルによる画像解析に対する平均操作の影響評価を行った[H. Sakamoto+ (2018)]。前処理としての平均操作はトレードオフを伴っている。すなわち、画像の平均化は処理後の画像の観測精度を向上させる一方で、画像の枚数を減少させる。我々は画像の生成過程をガウスMRFモデルによって定式化し、ベイズ推定に基づく潜在パラメータ事後確率分布推定と画像修復タスクに対して画像の平均化が及ぼす影響を評価した。ここでは3つの主要な結果がある。1. 潜在パラメータが予め定まっていた場合の画像修復タスクは平均処理の影響を受けないこと。2. 平均操作は潜在パラメータの推定精度を低下させること。3. 潜在パラメータの推定を伴う場合には、平均操作は画像処理タスクの性能を低下させることである。本研究は画像解析に対して画像の平均操作という基本的な前処理が悪影響を与えうることを示している。本章の内容は観測とモデルを含めた実験計画を行うことで前処理の影響を適切に評価する必要性を示す。

第6章ではフーリエ観測に基づく結晶の格子振動の分散関係観測データを扱う。空間的な原子の配置である結晶格子モデルと、原子間に存在する相互作用の強さ（潜在パラメータ）が重要な推定対象である。従来の散乱体の構造解析では、モデルから計算された強度分布を直接目視で比較するか、強度分布から得られる統計値同士を比較するという手法が取られていた。近年の観測技術の向上によって得られた大量かつ高次元のデータを目視による従来法で解析することは困難であった。

本論文では、フーリエ観測に基づく格子モデルパラメータをベイズ推定する。これまで、スペクトルデータから観測対象の潜在パラメータを推定する先行研究[S. Murata+ (2016), T. Kasai+ (2016)]はあったが、格子結晶の相互作用パラメータ推定は行われてこなかった。

我々は2つのアルゴリズムによる高次元スペクトルデータ解析手法を提案する。提案法のうち1つは目視による従来法同様、1次元スペクトルデータのベイズスペクトル分解によるスペクトルピーク位置推定を経てモデルパラメータを推定する間接法である。分散関係データに存在するピークの縮退によって先行研究で提案されていたベイズスペクトル分解[K. Nagata+ (2012)]が有効でない場合があることを示し、この問題の対処として事前分布を変更したベイズスペクトル分解を提案する。

もう1つの提案法は高次元スペクトルデータ全体を格子パラメータ推定に利用する直接法である。本研究ではデータの信頼度評価の観点と潜在パラメータ推定の精度から直接法の利

点を示す．また事後分布の解析によって，格子モデルパラメータのベイズ推定において適切な運動量空間のサンプリング手法を評価する手法を提案する．本研究は目視によらない高次元データによる潜在パラメータ推定法の提案に加え，ベイズ推定によるモデル化を通じてフーリエ観測における運動量空間中の観測点の選択という実験計画上重要な示唆を与えている．