

論文の内容の要旨

Parameter Distribution Estimation for Physical Models by Bayesian Inference (ベイズ推論による物理モデルに対する パラメータ分布推定)

氏 名 片 上 舜

1. はじめに

近年の観測技術の発達により、自然科学の様々な領域で莫大かつ多様な観測データが得られている。自然科学で観測データを解析する目的は、観測対象の物理現象を解明するために物理情報を抽出することである。現在、データ解析は専門家がデータを確認し、物理モデルを用いて物理量を推定している。しかし、より現実的な現象を解明するため、観測データが大規模化、高次元化したことで物理情報の抽出は困難となった。手動での処理が含まれる解析では、大規模化したデータ全てを十分に活かすことは出来ず、高次元化したデータはしばしば次元削減する必要がある。また、データが複雑化すると同時に解析に用いられる物理モデルが複雑化し、物理モデルそのものを評価する必要がある。さらに、複雑化した物理モデルの物理量として解釈されるパラメータに対して推定精度を求める必要がある。そこで、これらの問題を解決するための解析手法開発が必要とされている。そこで、我々はベイズ推論を用いたパラメータ推定手法を提案し、これらの問題にアプローチする。

自然科学のデータを取り扱う際には、推定の信頼度や性能の評価、様々な条件が推定に与える影響の裏付けが重要となる。ベイズ推定の枠組みによる確率的情報処理は、推定についての理論的な解析に適した処理手法である。ベイズ推定とは、確率的情報処理で広く用いられる枠組みであり、推定対象に対する事前知識を確率分布としてモデル化することで、推定に取り込むことができる[1]。特に自然科学のデータの場合、多くはそのデータ

に関する事前知識が存在するため、ベイズ推定にもとづく手法は有効である。ベイズ推論では大規模なデータは推定精度を向上させ、適切な確率モデルを定めることで、データの形式は問題にならない。また、ベイズ推論で計算されるベイズ自由エネルギーはデータに対する確率モデルの適切さを評価するのに用いることができる。更にベイズ推論によるパラメータ分布推定により分布の広がりや物理量の推定の信頼度として解釈できる。

本研究では、特に非弾性散乱実験から得られるイベントデータおよび画像データの解析手法に着目する。物性物理の分野で、中性子や X 線の非弾性散乱実験から分散関係が観測されている。分散関係は音響伝播、比熱、熱伝導率、超伝導などの解析のために用いられる。近年では、高出力パルス光源と 2 次元位置検出器の組み合わせにより、データ収集効率が大幅に向上し、4SEASON[2]などの実験施設が短時間のうちに大規模な 4 次元イベントデータを獲得できるようになった。現在、イベントデータの分析は、4 次元空間内の指定された領域の 1 次元スペクトルの 2 次元等高線プロットとして視覚化し、推定した分散関係に物理モデルパラメータをフィッティングすることで弾性定数などが推論されている。しかし、フィッティングは可視化できる領域でのみ実行可能であるため、解析は可視化データに制限され、全イベントデータを効率よく利用することは不可能である。そこで、我々は観測ノイズとしてポアソンノイズを導入し、ベイズ推論による高次元のイベントデータから直接モデルパラメータの分布推定する手法を提案する。

また、本研究では画像データを Gaussian Markov random field (GMRF) モデルで取り扱う。MRF モデルは、画像処理でよく使用される確率モデルであり、画像復元や領域分割などの多くの画像処理方法に適用される。GMRF モデルは物理学に基づいており、格子ガスモデルに対応する。そのため、GMRF モデルは統計力学により分析および発展してきた[3]。従来、ハイパーパラメータの最適値は、画像処理のパフォーマンスを向上させるための二次的な要因として推定されてきた[4,5]。GMRF モデルでは、画像の滑らかさを表すハイパーパラメータが拡散係数に対応することが指摘されている[6]。そのため、ハイパーパラメータは画像の潜在変数として不可欠な値であり、信頼性も含めてベイズ推論を用いて推定されている[6,7]。周期的な境界条件を仮定した場合、GMRF モデルの事後確率の計算は解析的に実行できた。しかし、周期性を持たない画像データに対しては、周期性の導入は誤った推論結果に繋がる。そこで、本研究では、周期性を持たない画像データに対しても解析計算可能であることを示し、ベイズ推論による周期性を持たない画像に対するハイパーパラメータ提案手法を提案する。

ベイズ推論では一般的に事後確率の計算は困難であり、数値的近似解法に頼らざるを得ない。近似計算法として、変分推論法やビリーフプロパゲーション、マルコフ連鎖モンテカルロ法などが提案されている[8,9,10,11]。変分推論法やビリーフプロパゲーションは近似手法のため、推定された事後分布が真の事後分布と一致する保証はない。マルコフ連鎖モンテカルロ法はサンプリング手法であるため、十分にサンプリングを行うことで、真の事後分布に収束する。しかし、マルコフ連鎖モンテカルロ法は繰り返し数値計算が必要となるため、計算量が多く高速な解析を行うことができなくなる。そのため、計算コストの低減、計算効率の向上を図る必要がある。そこで、本研究では、解析計算困難なベイズモデルに対する高速なパラメータ分布推定手法を提案する。ここでは、解析計算可能な GMRF モデルを用いて、性能検証を行う。

本論文の構成は図 1 に示すように、2 章で非弾性散乱実験から得られるイベントデータに対するベイズ推論を用いた解析手法を提案し、3 章では境界条件を持たない GMRF モデルの解析手法を示す。そして、4 章では、ベイズ推論の高速なパラメータ分布推定手法を提案し、5 章で結論を述べる。

2. ポアソン過程を用いた分散関係観測データに対するベイズパラメータ推定

2章では、分散関係観測データに対するベイズパラメータ推定手法を提案する。先行研究として、我々は分散関係観測ノイズのモデルとしてガウスノイズを導入し、物理モデルパラメータを推論する手法を提案した[12]。イベントデータの揺らぎはポアソン過程に従うことが知られている。そこで、本研究では物理モデルとして体心立方格子モデルを、観測ノイズとしてポアソンノイズを導入し、パラメータを推定する手法を提案する。数値実験により、先行研究の手法と提案手法を比較し、ベイズ推定の精度と信頼性の点で、提案手法が観測時間の短いデータについて以前の研究手法よりも優れていることを示した。

3. 境界条件を持たない Gaussian Markov random field モデルの解析

3章では、境界条件を持たない GMRF モデルの解析的ベイズパラメータ推定手法を提案する。先行研究で、GMRF モデルに周期性を導入することで、解析的に GMRF モデルを取り扱えることが示された[6,7]。しかし、全ての画像が周期性を持つわけではないので、境界条件を持たないパラメータ推定手法を構築する必要がある。境界条件を仮定しない GMRF モデルの誤差関数に含まれる画像の滑らかさを扱う項は、力学系における自由端ばねモデルの弾性エネルギーと等価である。本研究では、力学における解析手法を利用することで、境界条件を持たない GMRF モデルを用いた画像修復とハイパーパラメータ分布推定の解析を行う。数値実験により、周期性を仮定した既存手法が周期性を持つ画像に対して性能を発揮するのに対して、提案手法は、境界条件の影響に左右されず、推定性能を保つことを示した。

4. ガウス過程とベイズ最適化を用いたベイズハイパーパラメータ推定

4章では、ベイズパラメータ推定の近似的高速化手法を提案する。物理量推定においては、最適値のみならず推定の信頼度を含めた推論が必要とされる。パラメータの推定分布を物理系におけるパラメータのエラーバーとして解釈することで、パラメータ推定の信頼度を評価できるため、分布推定は有効である。しかし、ベイズ事後確率分布の計算は一般的に困難であり、効率的な分布推定手法が求められる。そこで、情報科学の分野で機械学習手法の性能改善のためのパラメータ選択に利用されているベイズ最適化とデータ補間に利用されるガウス過程を用いて、少数サンプリングから効率的にベイズパラメータの推定分布および最適値を得る手法を提案する。ガウス過程を用いて少数サンプリングからパラメータの分布推定を行い、ベイズ最適化を用いて、少数サンプリングからパラメータの最適値探索を行った。またベイズ最適化をサンプラーとして用いて、ガウス過程により補間することで、より少数のサンプリングからパラメータ分布推定を行った。また数値実験により解析的に計算可能な GMRF モデルのベイズ事後確率分布を用いることで、提案手法の性能を評価した。

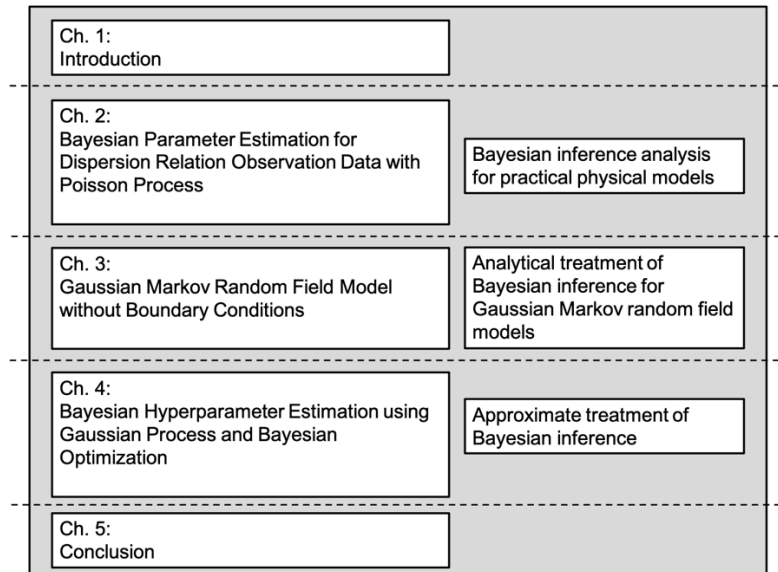


図 1 本論文の構成

参考文献

- [1] Christopher M Bishop. Pattern recognition and machine learning. springer, 2006.
- [2] Mitsutaka Nakamura, Ryoichi Kajimoto, Yasuhiro Inamura, Fumio Mizuno, Masaki Fujita, Tetsuya Yokoo, and Masatoshi Arai. First demonstration of novel method for inelastic neutron scattering measurement utilizing multiple incident energies. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 78, No. 9, pp. 093002–093002, 2009.
- [3] Hidetoshi Nishimori. Statistical physics of spin glasses and information processing: an introduction, Vol. 111. Clarendon Press, 2001.
- [4] Kazuyuki Tanaka. Statistical-mechanical approach to image processing. Journal of Physics A: Mathematical and General, Vol. 35, No. 37, p. R81, 2002.
- [5] Kazuyuki Tanaka and DM Titterington. Statistical trajectory of an approximate em algorithm for probabilistic image processing. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 40, No. 37, p. 11285, 2007.
- [6] Yoshinori Nakanishi-Ohno, Kenji Nagata, Hayaru Shouno, and Masato Okada. Distribution estimation of hyperparameters in markov random field models. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 47, No. 4, p. 045001, 2014.
- [7] Hirotaka Sakamoto, Yoshinori Nakanishi-Ohno, and Masato Okada. Theory of distribution estimation of hyperparameters in markov random field models. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 85, No. 6, p. 063801, 2016.
- [8] Seiji Miyoshi and Masato Okada. Image restoration and segmentation using region-based latent variables: Bayesian inference based on variational method. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, No. 1, p. 014802, 2010.
- [9] 田中和之. 確率モデルによる画像処理技術入門. 森北出版, 2006.
- [10] 汪金吉, 田栗正章, 手塚集, 樺島祥介, 上田修功. 統計計算 i 確率計算の楽しい手法, 2003.
- [11] 伊庭幸人, 種村正美, 大森裕浩, 和合肇, 佐藤整尚, 高橋明彦. 計算統計 II マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺. 岩波書店, 2005.
- [12] Hirotaka Sakamoto, Shun Katakami, Kensuke Muto, Kenji Nagata, Taka-hisa Arima, and Masato Okada. Bayesian parameter estimation using dispersion relation spectra. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 89, No. 12, p. 124002, 2020.