

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 1 日現在

機関番号：17102

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2023

課題番号：20K19889

研究課題名（和文）条件付き独立な観測に基づく統計的推測の理論と実践

研究課題名（英文）Theory and Practice of Statistical Inference with Conditionally Independent Observations

研究代表者

徳田 悟 (Tokuda, Satoru)

九州大学・情報基盤研究開発センター・准教授

研究者番号：50787322

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：条件付き独立な観測に基づく統計的推測の漸近理論を探究すると共に、実践的研究を相補的に行い、知見の利活用と問題意識のフィードバックを図った。理論面ではベイズ推定のスケーリング則を導出した。これを元にベイズ推定が計測データの質や量に応じた複数の状態を取り、状態によってモデルを最良とみなす性質を発見した。実践面では、速度分布関数やバンド構造のベイズ的モデル選択を提案した。複数の候補モデルのうち、実験データに対してどれが妥当かは時に論争になるが、提案法はこうした議論に指針を与える。更に、パターン形成を記述する支配方程式の推定法を提案した。提案法は所望のパターンを定常解とする偏微分方程式を与える。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、先端計測と統計解析の統合的な発展を目指す計測インフォマティクスの領域が勃興している。独立同分布な観測を仮定する統計的推測の漸近理論は推定量の一致性を保証する有用な数理基盤である一方、多くの物理計測はその仮定を満たさない。本プロジェクトでは物理計測を反映して条件付き独立な観測を仮定し、従来理論の拡張を図った。また、計測ノイズの影響を反映する極限を新たに考え、各種統計量のスケーリング関数を導出することで、相転移現象とも呼ぶべき、統計的推測の質的变化を解明した。以上は計測インフォマティクスを推進する重要な知見であるとともに、不規則系の統計力学との数理的な対応の観点でも興味深い示唆を与える。

研究成果の概要（英文）：We conducted exploring theoretical investigations for statistical inference based on conditionally independent observations and complementary practical research to provide feedback on utilizing knowledge and problem awareness.

On the theoretical side, we derived scaling laws for Bayesian inference. They suggest that Bayesian inference incorporates multiple states depending on the quality and quantity of observed data. We discovered properties that determine the model's optimality depending on the state.

On the practical side, we proposed Bayesian model selection methods of velocity distribution functions and band structures. We also proposed a method for estimating the governing equations that describe pattern formation. The proposed method provides a partial differential equation whose steady solution is the desired pattern.

研究分野：統計科学

キーワード：ベイズ推定 条件付き独立性 不確実性定量化 モデル選択 スケーリング則 漸近理論 自己平均性 一致性

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

中心極限定理を基盤とし、Fisher が開拓した統計的推測の漸近理論(正則理論)は観測による実証を礎とする経験科学に一つの統一的保証を与えた。正則理論に立脚し、Akaike や Schwarz が提唱した情報量規準はモデリングに一つの指導原理を齎した。

ニューラルネットワークのような特異モデルでは、中心極限定理が成り立たず、正則理論が適用できない。これは点推定の一意性に関係する。Watanabe は代数幾何学的方法により、特異モデルにも適用できる統計的推測の漸近理論(渡邊理論)を確立した。更に、渡邊理論に立脚し、Akaike や Schwarz の情報量規準を一般化した。しかし、正則理論と同じく、渡邊理論は独立同分布に従う観測を仮定したものであり、相関のある観測には対応していない。

一方で、誤り訂正符号や画像修復のような、相関のある観測に基づく統計的推測における漸近理論は、不規則系の統計力学との数理的な類似性に立脚し、各論的に独自の発展(情報統計力学)を遂げた。相関のある観測を、観測数に比例する自由度のパラメータの下で条件付き独立な観測として扱う、というのが基本的な問題設定である。ここでの漸近理論は大自由度極限を扱う、不規則系の統計力学におけるそれと数理的に等価である。不規則系では、サブマクロな部分系の統計量がマクロな全体系のそれと一致すること(自己平均性)が期待される。同様に、条件付き独立な観測からのサンプル数が十分に多い場合、自己平均的な統計量はサンプルに依らない。こうした対応に立脚し、統計的推測のサンプルに依らない典型評価が可能となる。ここで問題となるのが、パラメータの相関である。大自由度系では個々のパラメータの相関を無視する、平均場近似が有効とされる。しかし、少数自由度系では、個々のパラメータの相関が本質的であり、それを無視できない。

統計的推測、特にベイズ推測では、パラメータも観測もそれぞれが確率変数として扱われ、それぞれの相関を考慮する必要がある。しかし、パラメータの相関と観測の相関を共に考慮した統計的推測の漸近挙動は十分に議論されていなかった。

2. 研究の目的

独立同分布に従う観測に基づく統計的推測において成立する渡邊の漸近理論を条件付き独立な観測へ対応するように拡張し、その適用範囲を広げる。

3. 研究の方法

不規則系の統計力学の知見を元に、条件付き独立な観測に基づく統計的推測の数理基盤を整備すると共に、条件付き独立な観測の例である画像や時系列を対象とした実践的研究を相補的に行い、知見の利活用と問題意識のフィードバックによる研究の好循環を図る。

4. 研究成果

理論面では以下の成果を得た。

・計測データの量や質に対するベイズ推定のスケールリング則を解明

条件付き独立な観測に基づく統計的推測において成り立つスケールリング則を導出した。ベイズ情報量規準(BIC)はデータの量や質による影響を無視できる極限での近似によって導出される。しかし、本来それらがベイズ推定にどう影響するかはBICの発見から40年以上に渡り未解明だった。研究代表者らの共同研究グループはベイズ推定と統計物理学の数学的な対応に着目し、理論解析を進めることで、計測データの量や質に対するベイズ推定のスケールリング則を初めて明らかにした。これを元にベイズ推定が計測データの質や量に応じた複数の「状態」を取り、状態毎に異なるモデルを最良とみなす性質を発見した。

実践面でもいくつかの成果を得た。代表的な三つを以下に記す。

・ベイズ推定を用いた速度分布関数の解析法を開発

ベイズ推定に基づく速度分布関数のモデル選択を提案した。磁化プラズマにおけるイオン速度分布関数はレーザー誘起蛍光法によってスペクトル(二次元画像)として観測される。これは数理的には条件付き独立な観測とみなせる。提案法では速度分布関数の妥当性を周辺尤度に基づいて評価する。理論モデルである複数の候補のうち、実験データに対してどれが妥当なものかはしばしば論争になるが、提案法はこうした議論に一つの指針を与える。研究代表者らの共同研究グループは、直線磁化プラズマ実験装置から得られたデータに提案法を適用し、その有効性を実証した。

・ベイズ推定を用いた新たな電子構造の解析法を開発

物質の電子状態に関する網羅的なモデリングを提案した。固体の表面電子状態は角度分解光電子分光によって光電子スペクトル(二次元画像)として観測される。これも数理的には条件付

き独立な観測とみなせる。提案法では、バンド構造をパラメトリックに、自己エネルギーや行列要素などをノンパラメトリックに記述し、それらをセミパラメトリック推定する。バンド構造に関する複数の有効モデルのうち、実験データに対してどれが妥当かはしばしば論争になるが、提案法は周辺尤度に基づくモデル選択によってこうした議論にも一つの指針を与える。研究代表者らの共同研究グループは、トポロジカル絶縁体的一种である $\text{TlBi}(\text{S}, \text{Se})_2$ の表面電子状態に関するデータに提案法を適用し、ディラック電子の質量を正確に決定した。同物質中のディラック電子に有限の質量があるかは 10 年来の論争であり、本成果は一つの解を与えた。

・パターン形成のダイナミクスを記述する支配方程式の推定法の開発

パターン形成のダイナミクスを記述する支配方程式の推定を提案した。結晶や準結晶のように長距離秩序を持ったパターンは偏微分方程式の定常解として現れることが知られている。提案では、条件付き独立な観測として得られた所望のパターンの一枚の画像から逆に、具体的な方程式形とそのパラメータをベイズ推定によって求める枠組みを示した。類似研究ではパターンの形成過程を表す時系列データを用いており、妥当性の検証も ground truth がある状況で行われている。それに対し、提案ではデータは定常解となるパターン画像だけであり、検証も ground truth がない状況で行っている。こうした数理的な先進性の助けもあり、dodecagonal 準結晶となる 3 次元的構造を定常解として持つ偏微分方程式を新たに発見した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Nishizawa T, Tokuda S, Kobayashi T, Tanaka K, Funaba H, Yamada I, Takemura Y, Tokuzawa T, Yasuhara R, Uehara H, Ida K, Takahashi H, Kawachi Y, Inagaki S, Kado S, Sasaki M, Fujisawa A	4. 巻 65
2. 論文標題 Estimation of plasma parameter profiles and their derivatives from linear observations by using Gaussian processes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Plasma Physics and Controlled Fusion	6. 最初と最後の頁 125006 ~ 125006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6587/ad074a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Goto Kenta, Nakanishi Kyoka, Tani Fumito, Tokuda Satoru	4. 巻 3
2. 論文標題 Chemical reaction in a liquid-liquid phase separated multiple droplet: Synchronization of color change dynamics with droplet movement	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Droplet	6. 最初と最後の頁 e93
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/dro2.93	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tokuda Satoru, Nagata Kenji, Okada Masato	4. 巻 4
2. 論文標題 Intrinsic regularization effect in Bayesian nonlinear regression scaled by observed data	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.043165	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yoshinaga Natsuhiko, Tokuda Satoru	4. 巻 106
2. 論文標題 Bayesian modeling of pattern formation from one snapshot of pattern	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.106.065301	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 TOKUDA Satoru, NAKANISHI Takeshi, SATO Takafumi	4. 巻 66
2. 論文標題 Exhaustive Analysis of Angle-resolved Photoemission Spectra Based on Bayesian Inference	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Vacuum and Surface Science	6. 最初と最後の頁 152 ~ 157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/vss.66.152	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tokuda Satoru, Souma Seigo, Segawa Kouji, Takahashi Takashi, Ando Yoichi, Nakanishi Takeshi, Sato Takafumi	4. 巻 4
2. 論文標題 Unveiling quasiparticle dynamics of topological insulators through Bayesian modelling	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 170
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42005-021-00673-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Watanabe A., Tokuda S., Mizuta Y., Miyamoto S., Nakanishi T., Furukawa H., Minagawa H.	4. 巻 305
2. 論文標題 Toward automated non-destructive diagnosis of chloride attack on concrete structures by near infrared spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Construction and Building Materials	6. 最初と最後の頁 124796 ~ 124796
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.conbuildmat.2021.124796	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tokuda S., Kawachi Y., Sasaki M., Arakawa H., Yamasaki K., Terasaka K., Inagaki S.	4. 巻 11
2. 論文標題 Bayesian inference of ion velocity distribution function from laser-induced fluorescence spectra	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 20810
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-00138-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 渡部愛理, 古川祐光, 皆川浩, 宮本慎太郎, 徳田悟, 水田優子, 中西毅
2. 発表標題 近赤外分光を用いたコンクリート構造物の非破壊診断技術
3. 学会等名 第38回近赤外フォーラム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳田悟
2. 発表標題 ベイズ推定に基づく定量的数理モデリング
3. 学会等名 九州大学応用力学研究所 RIAMフォーラム2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 徳田悟
2. 発表標題 ベイズ推定に基づく数理モデリングの精緻化
3. 学会等名 令和3年第1回 日本大学人工知能リサーチグループ講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 徳田悟、河内裕一、佐々木真、荒川弘之、山崎広太郎、寺坂健一郎、稲垣滋
2. 発表標題 磁化プラズマにおけるイオン速度分布関数のベイズ推定
3. 学会等名 第38回 プラズマ・核融合学会 年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 徳田悟、河内裕一、佐々木真、荒川弘之、山崎広太郎、寺坂健一郎、稲垣滋
2. 発表標題 定常状態プラズマにおけるイオン速度分布関数のベイズ推定
3. 学会等名 波・流れ・乱流のセンシング・マイニング・モデリング研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳田悟
2. 発表標題 ベイズ推定に基づく磁化プラズマの流体モデリング
3. 学会等名 第45回IBISML研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳田悟、河内裕一、佐々木真、荒川弘之、山崎広太郎、寺坂健一郎、稲垣滋
2. 発表標題 磁化プラズマにおけるイオン速度分布関数のベイズ的モデル選択
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会（2022年）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 寺坂健一郎、吉村信次、荒巻光利、徳田悟
2. 発表標題 光渦LIFの原理実証に向けたビームモード・形状の検討
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会（2022年）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳田悟
2. 発表標題 定常状態におけるイオン速度分布関数のベイズ推定
3. 学会等名 プラズマインフォマティクス研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 義永那津人、徳田悟
2. 発表標題 ベイズ推定を用いた目的の相分離パターンの支配方程式の推定
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<ul style="list-style-type: none"> ・計測データの量や質に対するベイズ推定のスケーリング則を解明 https://www.kyushu-u.ac.jp/ja/researches/view/852/ ・ベイズ推定を用いた新たな電子構造の解析法を開発 https://www.jst.go.jp/pr/announce/20210727-4/index.html ・ベイズ推定を用いた速度分布関数の解析法を開発 https://www.kyushu-u.ac.jp/ja/researches/view/676/

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------