

# 研究の経緯と それにもとづく研究方針

東京大学 大学院新領域創成科学研究科  
複雑理工学専攻  
岡田真人

# 本スライドのまとめ

- ここにあげている研究方針は、本スライドで紹介した、物理学、脳科学、情報科学、地球惑星科学、生命科学に関する研究成果とそれが示唆する学理から構築されたものである。
- ある特定の学問分野ではなく、上記の幅広い分野の実験と理論を組み合わせた実証的研究を進めた経験から、データには生成過程の見通しがつくものと、つかないものがあることがわかった。
- データの生成過程の見通しがつくものに対しては、ベイズ推論が威力を発揮する。つかないものに関しては、スパースモデリングが必須である。
- この二つのアプローチは、上記の幅広い分野で、普遍的に適用可能である。

# 自己紹介(理論物理学)

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
  - アモルファスシリコンの成長と構造解析
- 大阪大学大学院理学研究科(金森研) (1985 - 1987)
  - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- 三菱電機 (1987 - 1989)
  - 量産工場技術者：化合物半導体（半導体レーザー）の結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学(福島研) (1989 - 1996)
  - ニューラルネットワーク(ディープラーニング)
- JST ERATO 川人学習動態脳プロジェクト (1996 - 2001)
  - 計算論的神経科学
- 理化学研究所 脳科学総合研究センター 甘利チーム (2001 - 04/06)
  - 情報統計力学
  - ベイズ推論，機械学習，データ駆動型科学
- 東京大学・大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻 (2004/07 - )

# 研究の経緯

- 東大着任前と着任後で、研究方針の決定に関与した研究を手短に紹介する
- 東大着任前
  - 物理学: 希土類化合物のX線分光スペクトル解析
  - 情報科学: 情報統計力学
  - 脳科学: 運動知覚の統合
  - 脳科学: サル側頭葉の神経集団ダイナミクスの解析
- 東大着任後
  - 地球惑星科学: 地震波速度構造からの流体分布推定
  - 物理/化学/生命科学/惑星科学: スペクトル分解
  - 情報科学: スパースモデリング
  - 計測科学: ベイズ計測

# 物理学: 希土類化合物のX線分光スペクトル解析

Journal of the Physical Society of Japan  
Vol. 56, No. 2, February, 1987, pp. 798-809

## Many Body Effect in Inner Shell Photoemission and Photoabsorption Spectra of La Compounds

Akio KOTANI, Masato OKADA, Takeo JO,  
A. BIANCONI,<sup>†</sup> A. MARCELLI<sup>†</sup> and J. C. PARLEBAS<sup>††</sup>

*Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University,  
Toyonaka 560*

*<sup>†</sup>Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza",  
00185 Roma, Italy*

*<sup>††</sup>LMSES, Université Louis Pasteur, 67070 Strasbourg, France*

(Received October 14, 1986)

## REFERENCES

1. A. Kotani & Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* **37**, 912 (1974).
2. O. Gunnarsson & Schönhammer, *Phys. Rev.* **B27**, 4315 (1983).
3. A. Fujimori, *Phys. Rev.* **B28**, 2281 (1983).

# 希土類化合物のXPSとXAS

The spectra of 3d-XPS and L<sub>3</sub>-XAS are expressed as

$$F_{\text{XPS}}(E_B) = \sum_f |\langle f | a_c | g \rangle|^2 L(E_B - \underline{E_f} + E_g), \quad (2)$$

$$F_{\text{XAS}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_f |\langle f | \sum_k a_d^+(k) a_c | g \rangle|^2 \times L(\omega - \underline{E_f} + E_g), \quad (3)$$

where

$$L(x) = \underline{\Gamma} / [\pi(x^2 + \underline{\Gamma}^2)].$$

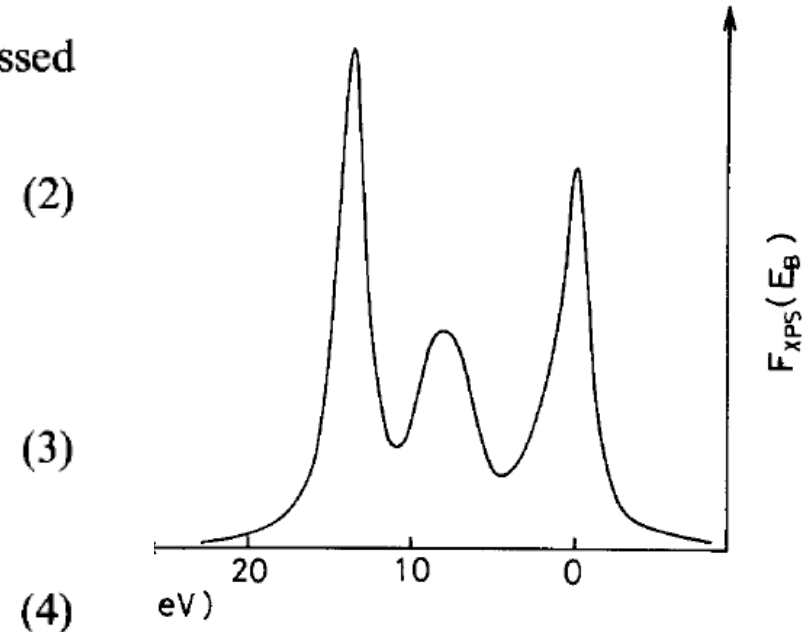


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy  $E_B$  is taken arbitrarily.

スペクトルで多体効果をみる

(A. Kotani, K. Okada and M. Okada, 1987)

ピークの位置と幅から，対象の物理的性質の考察が可能になる

順モデルからパラメータフィットしてスペクトルを再構成

# 希土類化合物の $L_3$ -XASを解析して

- Kotaniの主張：  $U_{dc}$ が必要
- 結論
  - 絶縁体では5eV程度
  - 金属では1~2eV程度
- 当時(35年前)感じた問題点
  - 発見法的なパラメータサー
  - XPSを決めてからXASを解
  - 余分なパラメータを導入?
  - オーバーフィット
  - 推定パラメータの誤差評価

→ ベイズ的アプローチ, ベイズ統合

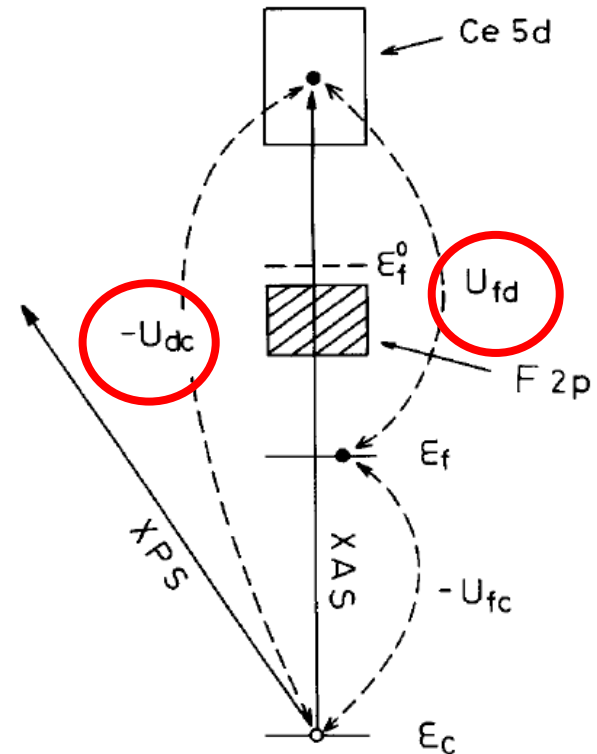


Fig. 1. Model of the present theory describing 3d-XPS and  $L_3$ -XAS.

# 研究のまとめと研究方針への影響 (1/2)

- 研究のまとめ

- 第一原理からの演繹が可能そうな物理学においても、第一原理から決まらない系が存在することを学んだ。
- そのような系へのアプローチとして有効モデルを用いたを修士課程で取り組んだ
- 最初は、先輩が提案した有効モデルをベースに、新たな物質に適用するのがつまらなかった。なぜなら、具体的な日々の営みとしては、スペクトルデータを再現するようなパラメータを探す、パラメータフィットだけで、スケールの小さい仕事だと思っていた。
- 修士課程の研究を進めるうちに、第一原理からの演繹が不可能な系への有効モデルの概念がわかってきて、有効モデルの正しさを証明するためには、一つの有効モデルが多くの物質の特性を記述なのであることを示す必要があることがわかった。
- そのためには、修士課程での現状の手打ちによるパラメータフィットや匍匐前進的な実験データの統合などを改善する系統的手法の必要性を感じた



# 研究のまとめと研究方針への影響 (2/2)

- 研究方針への影響

- これらの考察が、現在の階層的自然観にもとづくベイズ推論の導入に繋がっている。そのような意味で、自身の研究のターニングポイントになる研究テーマであった
- 修士課程で、金森研で他にやっていた、バンド計算などの第一原理計算や厳密解の研究をやっていたら、階層的自然観にもとづくベイズ推論の導入に至らなかったと思う。
- 誤差関数のローカルミニマムや複数実験の統合など、ベイズ推論とレプリカ交換モンテカルロ法でなければ解決できない、難しい問題を取り扱っていたことを、今となっては認識している。
- 2023年の現代から35年前の研究で、その当時、ベイズ推論の導入をやっている、計算機の性能が追いつかず失敗していたと思う。

# 情報科学: 情報統計力学

## 自己相関型連想記憶モデル

### 平均場Isingスピン系

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N J_{ij} x_i x_j$$

$$x_i := \operatorname{sgn} \left( \sum_{j \neq i}^N J_{ij} x_j \right)$$

$T=0$ でのGlauberダイナミクス

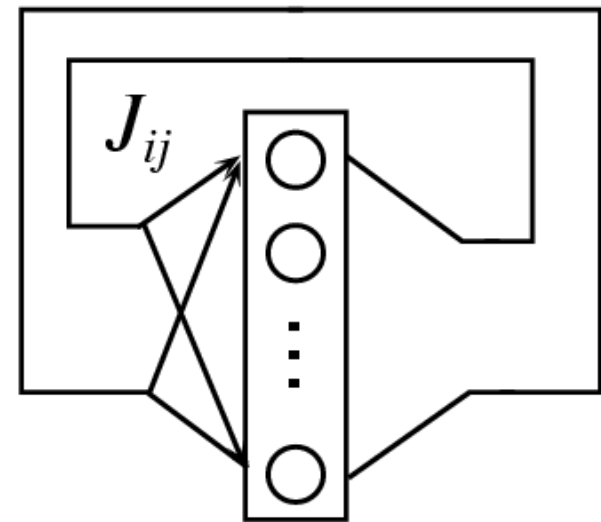
$$\operatorname{sgn}(u) = \begin{cases} +1 & (u \geq 0), \\ -1 & (u < 0), \end{cases}$$

記憶パターン  $\xi^1, \xi^2, \xi^3, \dots, \xi^p$   
 $p$ 個の  $N$ 次元ベクトル

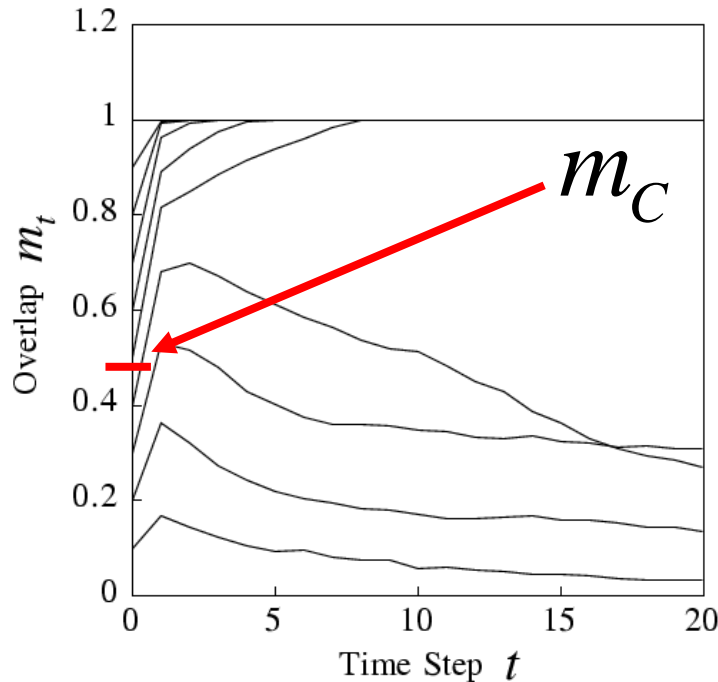
ル  $\Pr[\xi_i^\mu = \pm 1] = \frac{1}{2}$

ヘブ学習

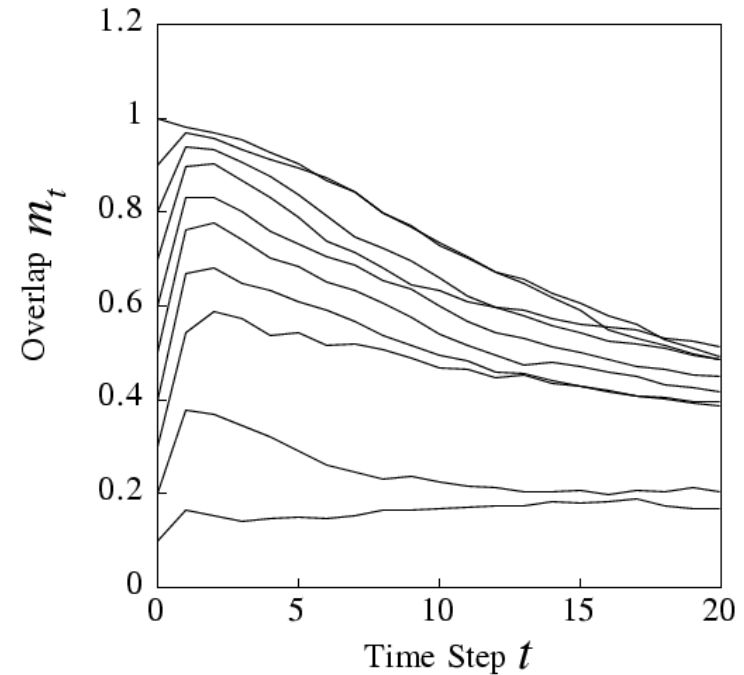
$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu$$



# 記憶容量と引き込み領域



$$N = 1000, p = 120, \alpha = p / N = 0.12$$



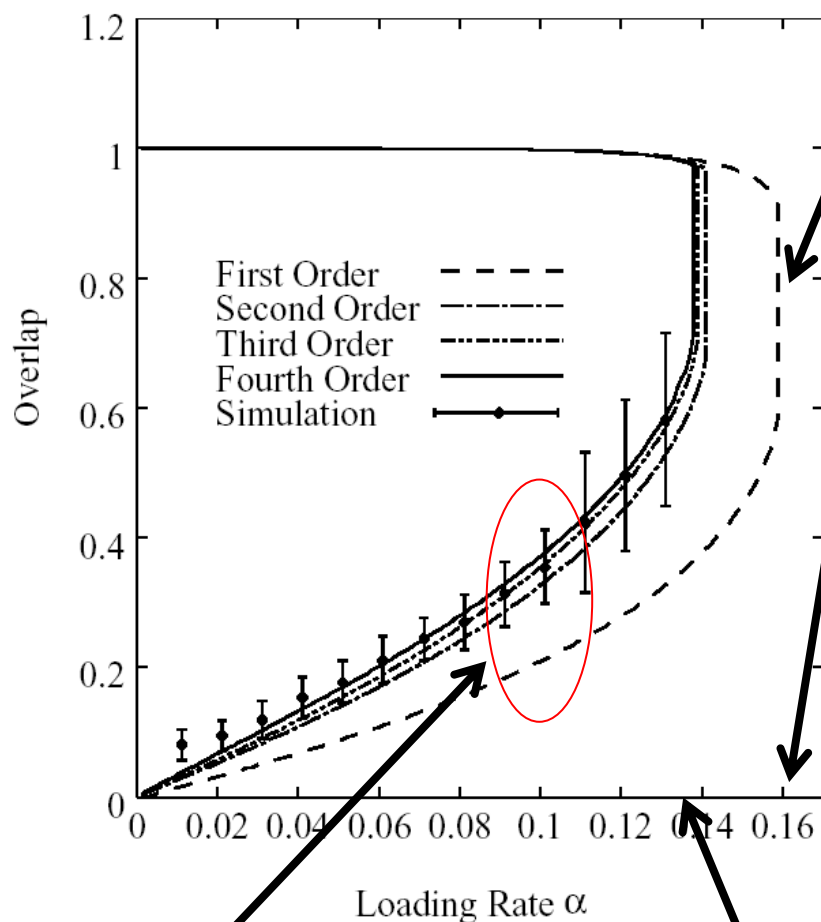
$$N = 1000, p = 200, \alpha = p / N = 0.2$$

$\alpha = \alpha_C = 0.14$  で記憶パターンが不安定化→1次相転移  
平衡統計力学（スピングラス，レプリカ法）

$m_C$  記憶パターンの引き込み領域  
緩和の統計力学（スピングラス）

# Okada, *Neural Networks*, 1995

(Amari and Maginu, 1988)



引き込み領域の境界

レプリカ法

- レプリカ法と Amari-Maginu 理論の矛盾を解消
- 日本神経回路学会奨励賞 (97年度), 研究賞(94,96年度)
- 緩和計算は脳で行われているのか? → 神経科学
- 理論に他の工学応用はないのか? → 情報統計力学

# 研究のまとめと研究方針への影響

- 研究のまとめ
  - 学位論文の仕事
  - 自己相関型連想記憶モデルだけでなく、通信工学のCDMAの復調ダイナミクスにも応用可能
  - 平衡統計力学を用いた情報理論(歪みありデータ圧縮)の仕事もあった・
  - これらの実績をベースに、次のスライドの複雑理工学専攻のジョブインタビューの決めスライド
- 研究方針への影響
  - 複雑理工着任後は、マクロな系の情報統計力学で、複雑系基盤技術が達成されると思っていたが、情報統計力学は実験データの解析には無力であった。
  - そこで情報統計力学のベースにあるベイズ推論にスイッチした。

# 複雑理工学専攻面接の決めスライド

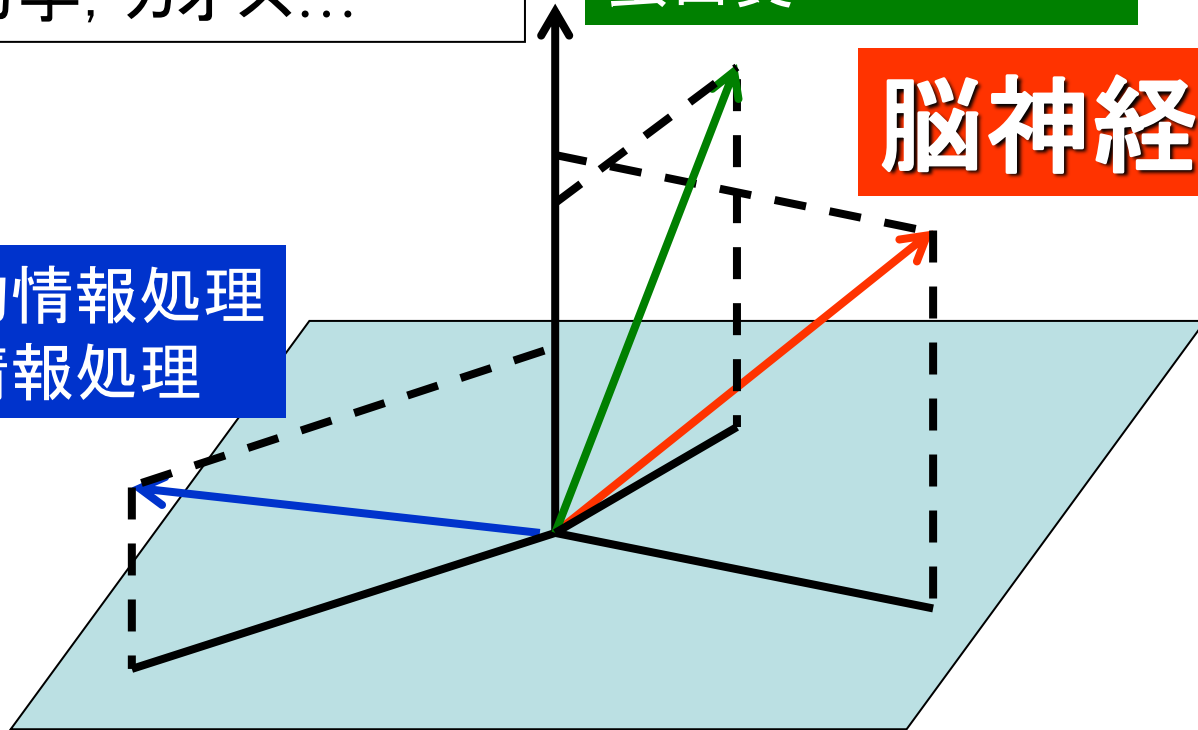
## 研究スタイル

非可解性(計算物理的手法)  
非線形動力学, カオス...

遺伝子ネットワーク  
蛋白質

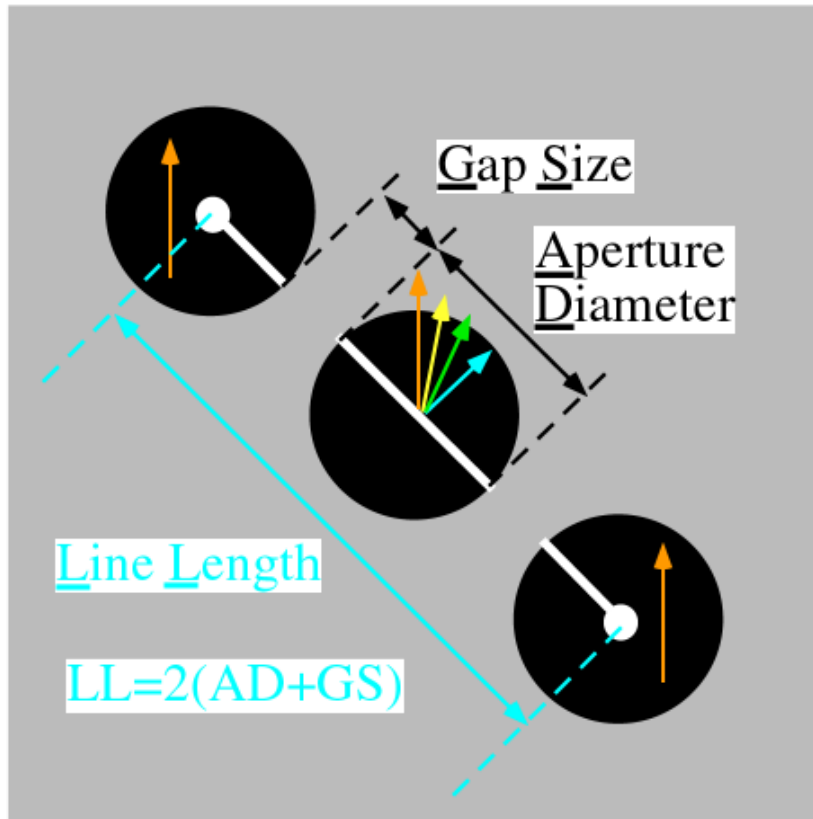
確率的情報処理  
量子情報処理

脳神経科学

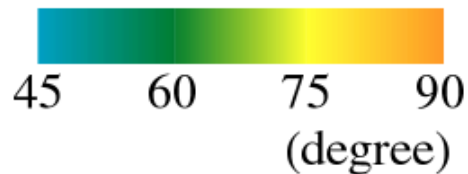


可解モデル: Isingスピン系, 平衡統計力学, 緩和の統計力学  
共通の数理, 共通のテクニック

# 脳科学: 運動知覚の統合



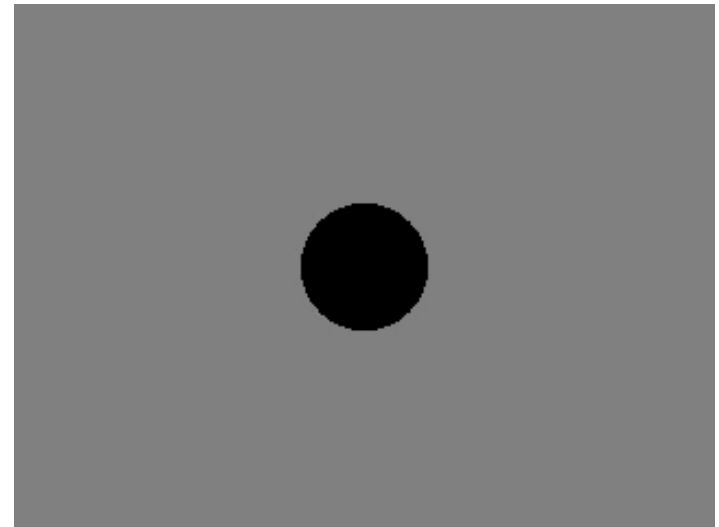
Motion direction



The three line segments seen through the apertures appear to be part of a single line segment.

→ Integration of remote visual information

Use reliable information even if it is far away



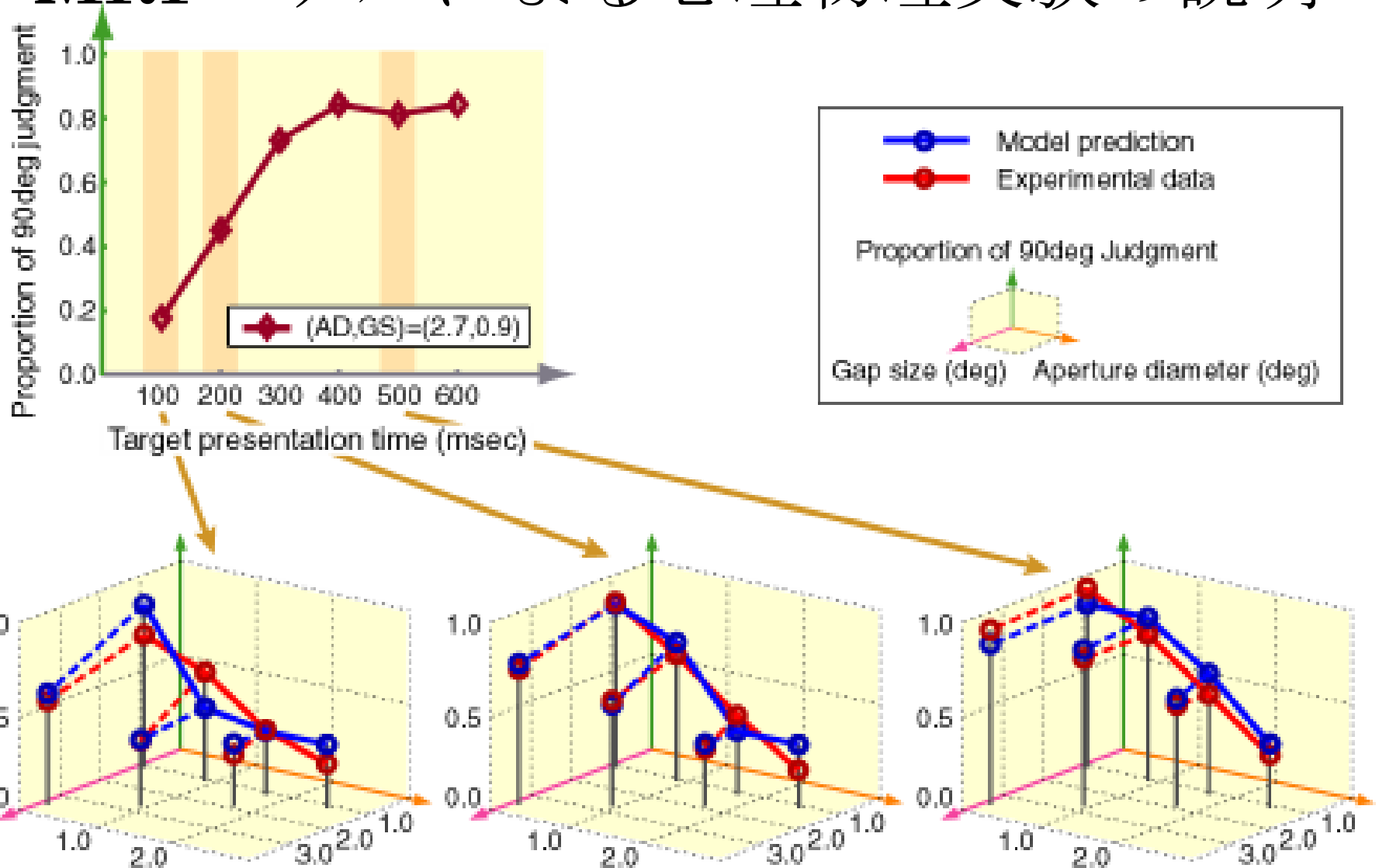
# 提案モデル

$$f(\{\mathbf{V}(s), b(s)\}) = \int_{I_v} ds \left( \mathbf{V}(s) \cdot \mathbf{N}(s) - V^N(s) \right)^2 \\ + \lambda_1 \int_{I_v + I_o} ds b(s) \left( \frac{\partial}{\partial s} \mathbf{V}(s) \right)^2 + \lambda_2 \int_{I_v + I_o} ds \left( \frac{\partial}{\partial s} b(s) \right)^2$$

- $\mathbf{N}(s)$  : Normal vector at coordinate  $s$
- $\mathbf{V}(s)$ : Velocity vector estimate at coordinate  $s$
- $V^N(s)$  : Observed value of the normal component of the velocity vector at coordinate  $s$
- $\lambda_v, \lambda_b$  : Regularization parameters
- $b(s)$ : Binding signal
- $I_v$  : Visible area,  $I_o$  : occluded area



# MRFモデルによる心理物理実験の説明



(Okada, Nishina and Kawato, 2003)

# 研究のまとめと研究方針への影響

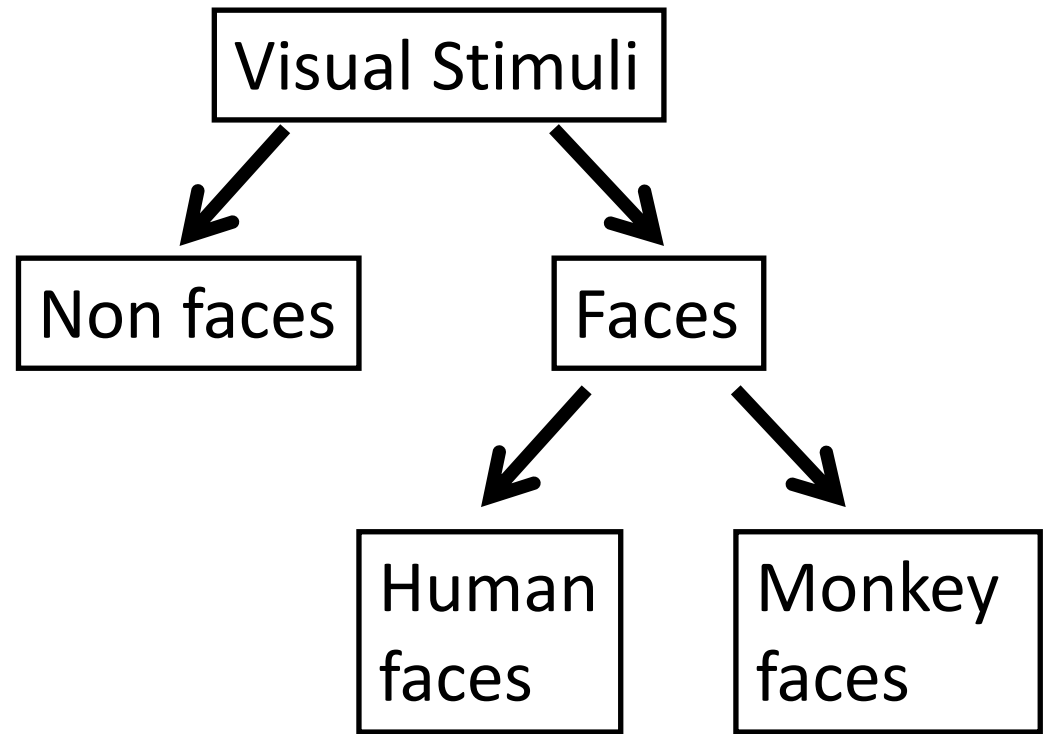
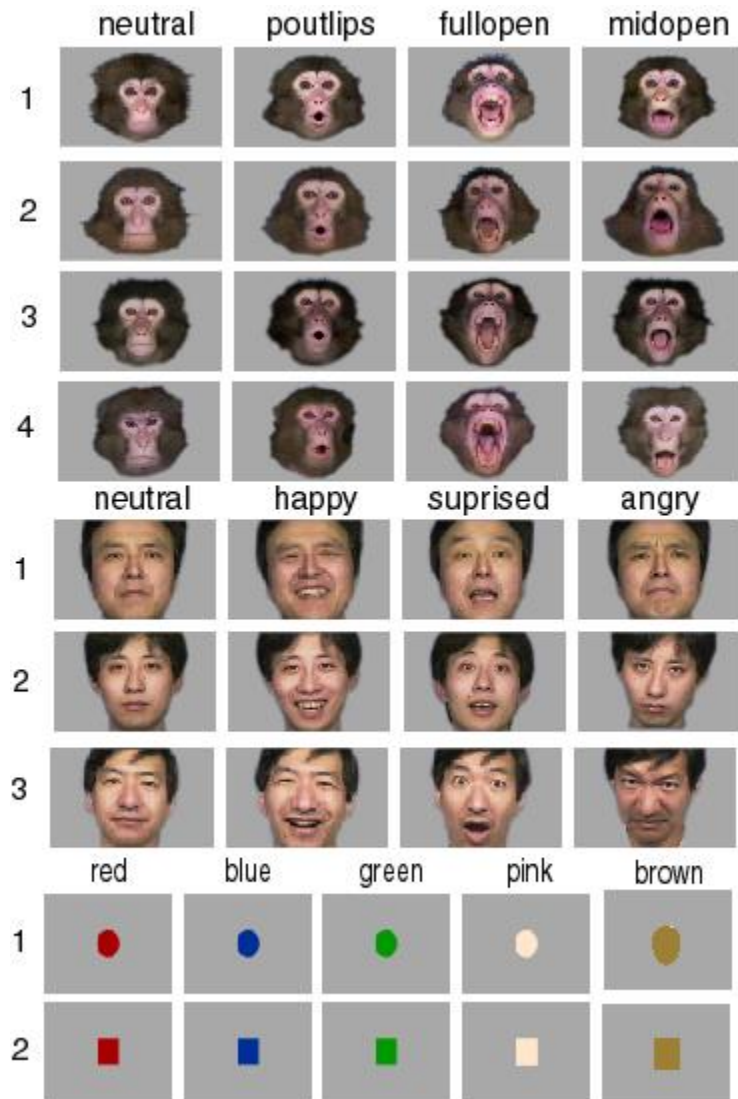
- 研究のまとめ

- ベイズ推論とマルコフランダムフィールド(MRF)を用いた計算論的神経科学の研究
- ベイズ推論の最大事後確率推定を求めるアルゴリズムとして最急降下法を用いた。
- 最急降下法のダイナミクスと心理物理学実験データはよく一致した。
- ベイズ推論とMRFはヒトの初期視覚の特性のモデルであることを確信した。

- 研究方針への影響

- 後述のMRFにもとづく地殻流体分布推定のアイデアのもとになった研究
- そう言った意味で、ベイズ推論のもとづくデータ駆動科学のアイデアのもとになる研究

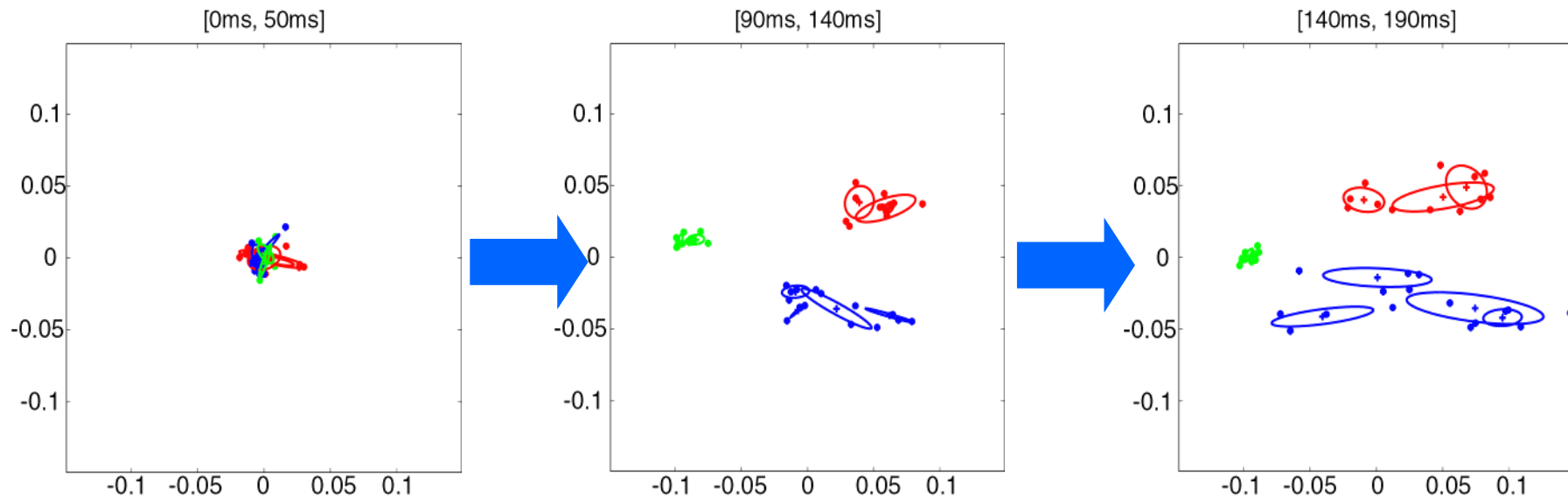
# 脳科学: サル側頭葉の神経集団ダイナミクスの解析



Identity  
Expression

(Sugase, Yaname, Ueno and Kawano, *Nature*, 1999)

# サル側頭葉の神経集団ダイナミクス



- Global categorization is occurred in [90ms, 140ms]  
(Monkey vs. Human vs. Shape)
  - Finer categorization is occurred in [140ms, 190ms]  
(Monkey expression, Human individual, Shape form)
- Hierarchical relationship among visual stimuli is encoded by dynamics of the neuronal population

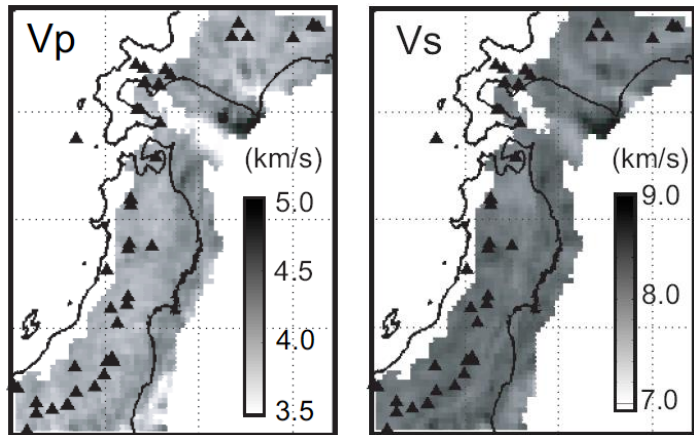
# 研究のまとめと研究方針への影響

- 研究のまとめ
  - 実験データの生成モデルが全くわからない系からのデータ解析
  - そう言った意味で、ベイズ推論では取り扱うとができない。
  - 入力画像に埋め込まれた階層構造が、実験データを主成分分析でスパース化する事で、実験データに階層構造が埋め込まれていることを示した仕事
- 研究方針への影響
  - データの生成モデルがないためにベイズ推論で取り扱えないデータを取り扱うための、普遍的な枠組みを提案している。
  - 新学術領域スパースモデリングを提案する根拠となったとても重要な仕事

# 地球惑星科学: 地殻流体分布推定

$$E(\phi, \alpha; \theta, V_P, V_S) = \frac{1}{2\sigma_P^2} \sum_{i=1}^N (V_P^i - f_P(\phi^i, \alpha^i))^2 + \frac{1}{2\sigma_S^2} \sum_{i=1}^N (V_S^i - f_S(\phi^i, \alpha^i))^2 \\ + \frac{1}{2\sigma_\phi^2} \sum_{i \sim j} (\phi^i - \phi^j)^2 + \frac{1}{2\sigma_\alpha^2} \sum_{i \sim j} (\alpha^i - \alpha^j)^2$$

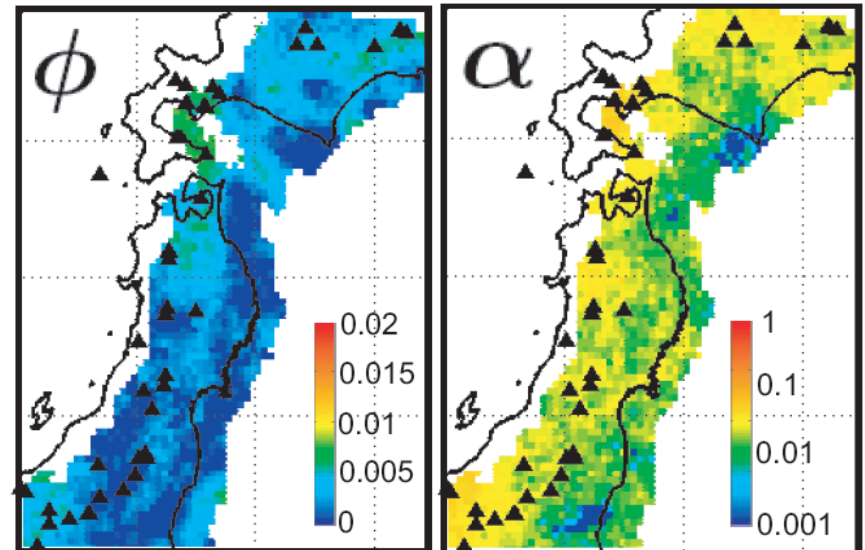
## 地震波速度 ( $V_P$ , $V_S$ )



Depth=40km (Matsubara et al. 2008)

岩相と流体相を仮定

## 流体分布: $\phi$ (流体量), $\alpha$ (流体の形状)



Kuwatani et al. (2014, *Earth Planets Space*)

# 研究のまとめと研究方針への影響

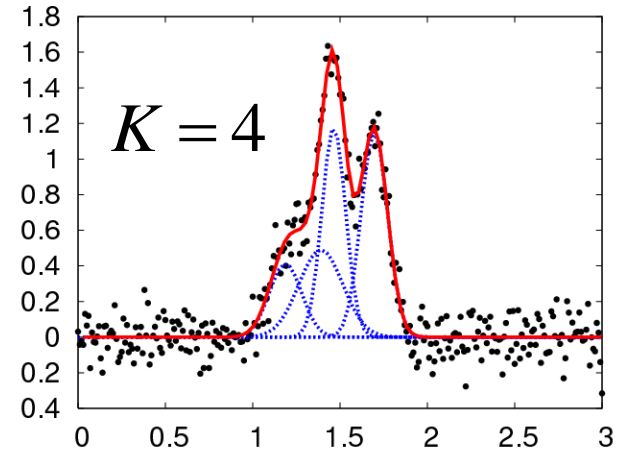
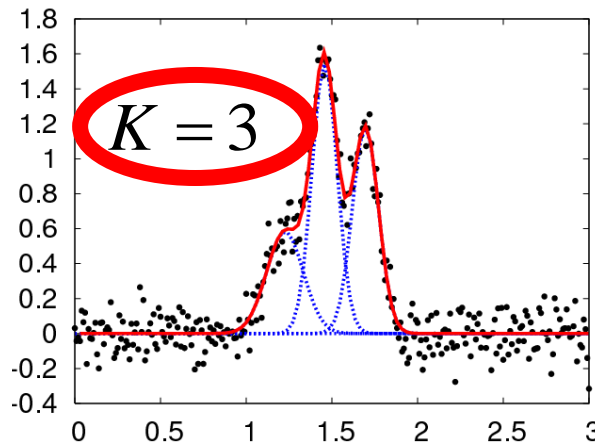
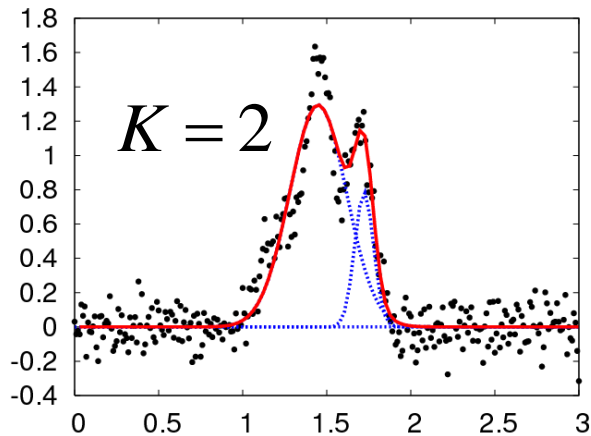
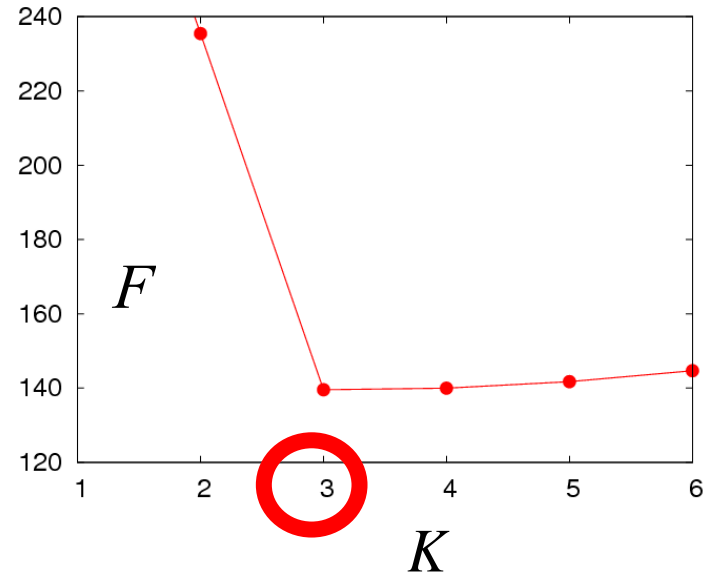
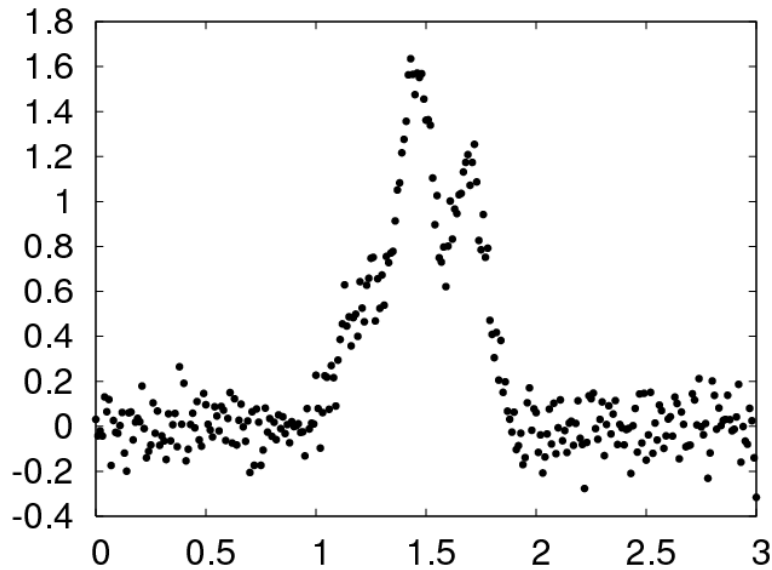
- 研究のまとめ

- 物理学や脳科学以外の分野への初めての進出
- 案外他の分野でも、ベイズ推論やマルコフランダムフィールド(MRF)モデルが使えるのではないかと思った研究
- 特に、脳科学では、MRFは自然画像の生成モデルとは考えられないので、苦しい立場だったけど、データ駆動科学で、MRFがデータの生成モデルかどうかははっきりするので、脳科学に比べてベイズ推論やMRFが使いやすい環境にあることがわかった。

- 研究方針への影響

- 菅生さんのデータ解析とともに、新学術領域スパースモデリング提案する自信がついた研究。
- 岡田研が理論脳科学からデータ駆動科学へ研究対象を広げることができるようになって、ターニングポイントの研究

# 物理/化学/生命科学/惑星科学: スペクトル分解



Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012



# 研究のまとめと研究方針への影響

- 研究のまとめ
  - ベイズ推論による計測科学であるベイズ計測のロールモデル
  - 私がベイズ推論の必要性を感じた強相関電子系では、広い分野の人に影響を与えることができないと考えた上で提案した枠組み
  - 誤差関数のローカルミニマムをもち、モデル選択も必要になるなど、今後の発展の雛形になるベイズ推論の技術が全て必要なテーマ
- 研究方針への影響
  - 階層的自然観におけるベイズ推論へとつながるインパクトの高い研究
  - $y=ax+b$ の線形回帰モデルとスペクトル分解を習得すれば、すぐにベイズ推論を実践的に使えるようになる。教育効果も抜群のテーマ

# 情報科学: スパースモデリング

スパースモデリング基本的な考え方は

- (1)高次元データの説明変数が次元数よりも少ない(スパース(疎)である)と仮定し,
- (2)説明変数の個数になるべく小さくなることと、データへの適合とを同時に要請することにより,
- (3)人手に頼らない自動的な説明変数の選択を可能にする枠組みである.

# 研究のまとめと研究方針への影響

- 研究のまとめ

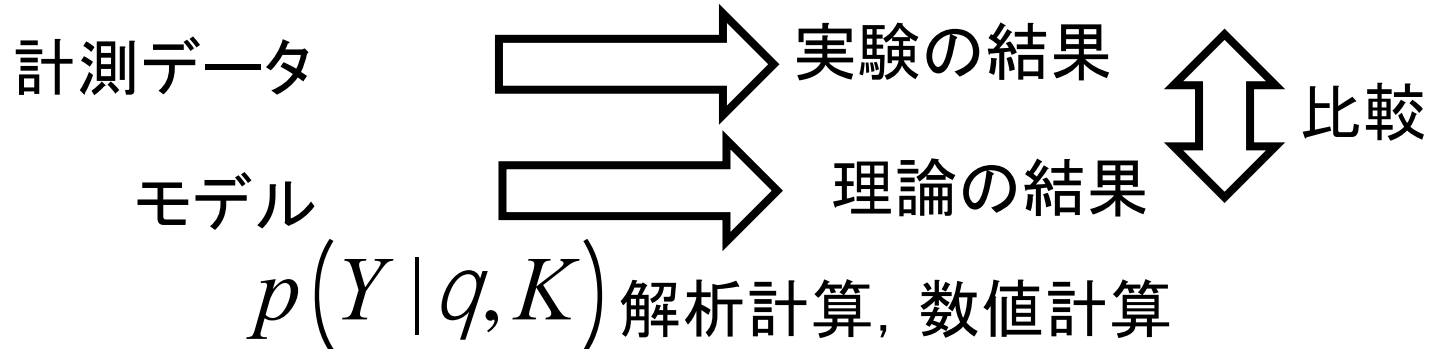
- ベイズ推論を用いることができない、データの生成過程が明らかでない場合に適用可能な唯一のアプローチ
- 計算量の観点から、LASSOなどの近似手法がよく研究されているが、データ駆動科学の立場からは、近似アルゴリズムは好ましくない。
- 全状態探索とともに、レプリカ交換モンテカルロ法を用いた近似的全状態探索が我々のグループから提案されたことにより、データ駆動科学のキーテクノロジーとなる。

- 研究方針への影響

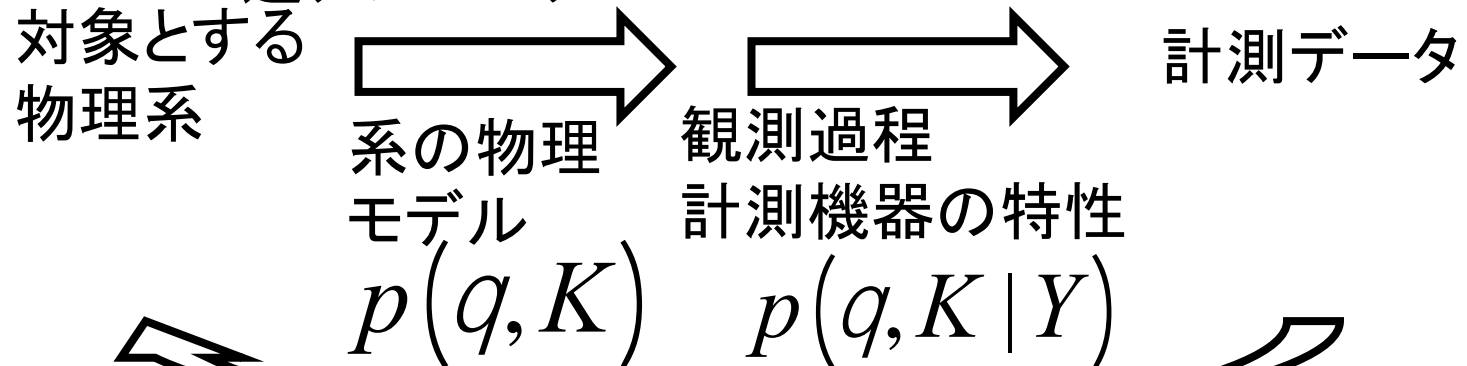
- ベイズ推論とともに、データ駆動科学の数理情動的な基盤技術
- 世間では、スパースモデリングと言え、LASSOによる画像処理のイメージが強く、データ駆動科学に必須であるという印象は薄いのが残念である。

# 計測科学: ベイズ計測

## 順アプローチ



## 逆アプローチ



全てをモデル化し  
ベイズの定理で因果をさかのぼる

# 研究のまとめと研究方針への影響

- 研究のまとめ

- ベイズ推論を計測科学の適用したベイズ計測を提案
- 岡田**CREST**ベイズ推論とスパースモデリングによる計測と情報の融合では、ベイズ計測の学理を構築した。
- 大きな成果の一つは、 $y=ax+b$ の線形回帰モデルは、サンプル数有限の場合のメゾスコピックなレベルで可解モデルであることを示した。これは今後、教科書に載るレベルの基礎になると予想している。

- 研究方針への影響

- 階層的自然観によるベイズ推論のロールモデルの一つである**SPring-8**全ビームラインベイズ化計画の基礎である。