

# 階層的自然科学と ベイズ推論

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

- 自然への理解を目指す科学には以下の二つのアプローチが存在する。
  - ミクロな基礎方程式からの演繹で、自然を理解できるという要素還元主義
  - ミクロな基礎方程式からの演繹だけでは、自然が理解できないという階層的自然観
- 本スライドでは、後者の階層的自然観の立場をとる。
- ある階層の数理的な記述に関して、その下のレベルからの演繹だけでは記述できないという立場をとる。
- その際には、観測データを解析する基盤技術として、ベイズ推論が必須である。
- 特に、ベイズ推論における、観測データからのモデル選択の数理的手法が本質的である。
- そのモデル選択を用いることで、下の階層とを結びつける階層連関をデータ駆動的に達成することができる。

# 要素還元主義の破綻

- 要素還元主義：ミクロな基礎方程式からの演繹で、自然を理解できるという立場
- 要素還元主義はとても美しい立場であるが、これまでの科学の以下の発展の事例から考えて、要素還元主義は破綻していると言わざるを得ない。
- 事例1：量子力学と電磁気学で第一原理的な方程式が書き下せる物性物理学において、強創刊電子系などの多対効果が無視できない系においては、計算機を使った第一原理計算でも、系の性質を記述することができないという事実がある。
- このような場合は、実験計測使って、系の性質を決めるパラメータをデータ駆動的に決めざるを得ない。
- 事例2：例えば恋愛感情のような高度な認知機能のメカニズムが量子力学や電磁気学から演繹できるとは誰も思わない。

# 階層的自然観に対する 普遍的アプローチは存在するか？

- 階層的自然観に対して、各階層個別にしか研究できないのか？  
各階層に依存せずに、研究することな可能な普遍的枠組みは存在するか？
- 我々は、その普遍的アプローチがベイズ推論であるというパラダイムを提案する。
- 階層によらずに、以下のような状況が存在する。
  - 各階層に応じて、実験データを説明するモデルが存在する。
  - そのモデルは下の階層からユニークに決まるものでなく、各研究者の仮説から提案されている。
  - そのため、ほとんどの場合、モデルは複数提案され、どのモデルが正しいかは、下の階層から要素還元的に演繹で決定できない。
  - そこで、ベイズ推論を用いて、データ駆動的に実験結果をもっとよく説明できるモデルを選択する必要がある。
  - この方法論は、階層によらずにベイズ推論で達成できるというのが、我々の提案するパラダイムである。

# 階層的自然観とベイズ推論に関する実証的研究

- 階層的自然観において、ベイズ推論が普遍的アプローチであるというのは、我々のパラダイム出るので、そのパラダイムを実証するには、そのパラダイムに従った研究が実験データを説明できることを示す必要がある。
- 現在のところ以下のプロジェクトを遂行している。
  - ベイズ計測の提案：計測科学へのベイズ推論の導入
    - SPring-8全ビームラインベイズ化計画
  - マテリアルインフォマティクス
  - 地球科学へのベイズ推論の導入
    - JAMSTEC 桑谷グループ
  - 東大新領域でのベイズ推論水平展開
  - 東大新領域複雑理工でのベイズ推論水平展開

# 階層的自然観とベイズ推論に関する共同研究の募集

- 我々のパラダイムの実証には、多くの分野で、このパラダイムが成功することを示す必要があります。
- それを遂行するには、我々の力だけでは、不十分であることは明らかです。
- 次のスライドにあるような問題を抱えている研究グループで、ベイズ推論に興味を持たれた方は、是非、共同研究することを考えていただきたいと思っています。

# 研究が以下のような状況の時、ベイズ推論は非常に強力です

- スペクトルなどの実験計測データから、数理モデルのフリーパラメータのフィッティングを行なっている
- そのフィッティングの際に、パラメータを手打ちで決めている。最急降下法などを使っているが、うまくいかない。
- フィッティング用のモデルが複数あって、事前にどれを使うかを決めておかないといけない。
- S/Nが悪いデータや欠損データをなんとかした。
- 複数計測の統合を行いたい。
- そのような方は、一度ベイズ推論をお試しくください。