

# 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

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

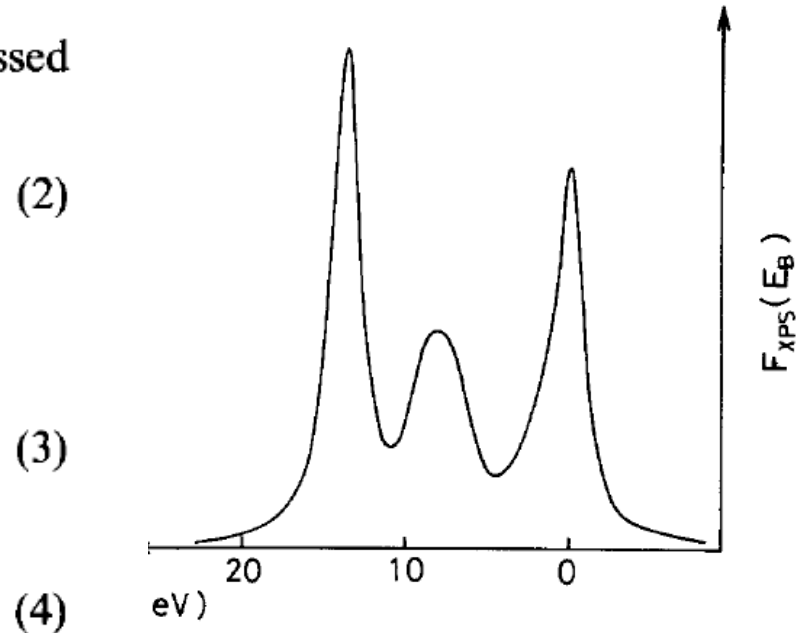


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy  $E_B$  is taken arbitrarily.

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

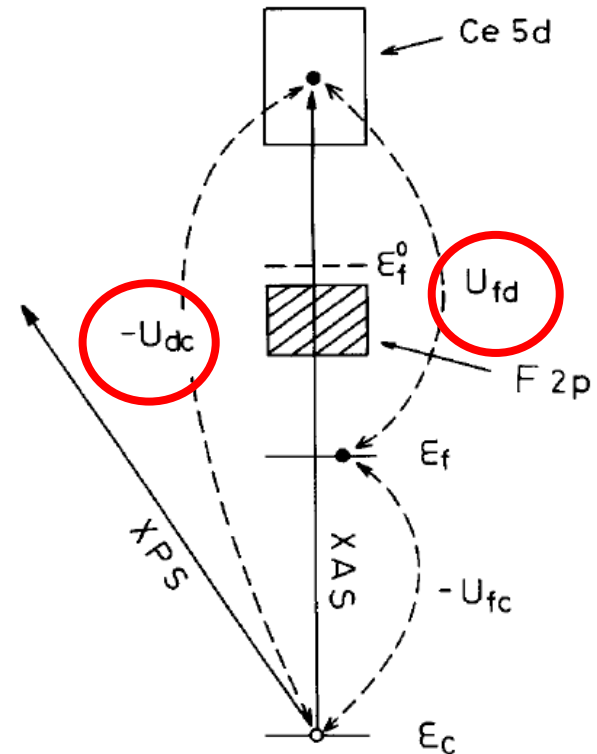


Fig. 1. Model of the present theory describing 3d-XPS and  $L_3$ -XAS.

# 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

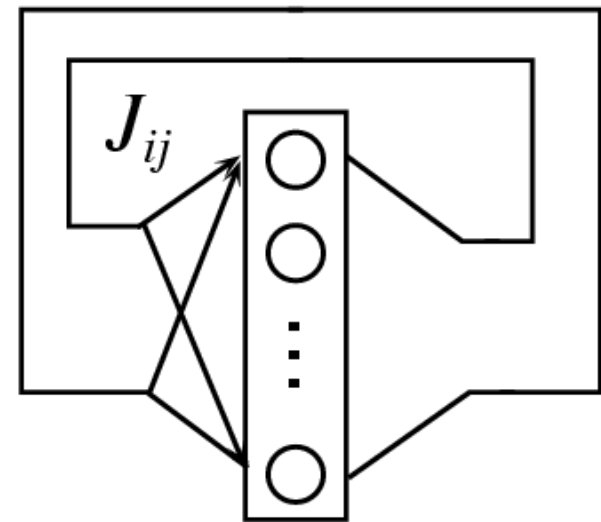
$$\operatorname{sgn}(u) = \begin{cases} +1 & (u \geq 0), \\ -1 & (u < 0), \end{cases}$$

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

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

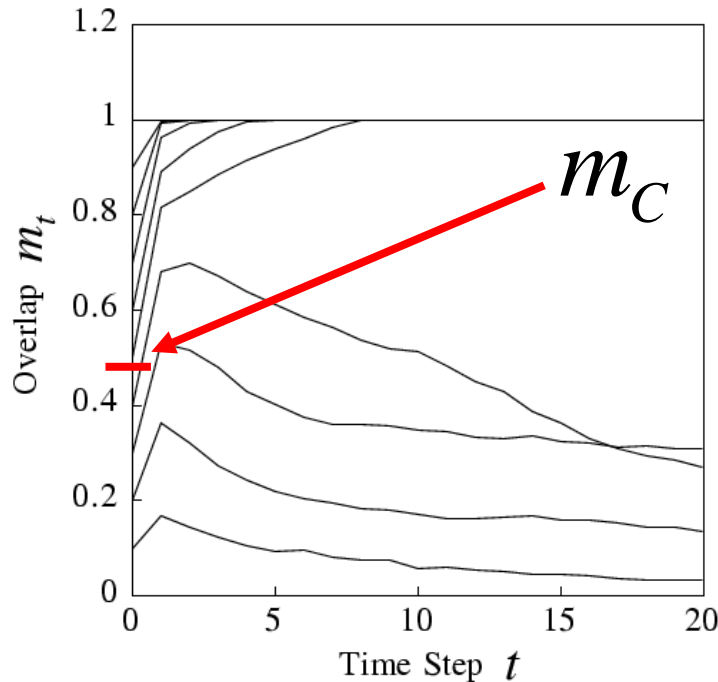


$x(t)$

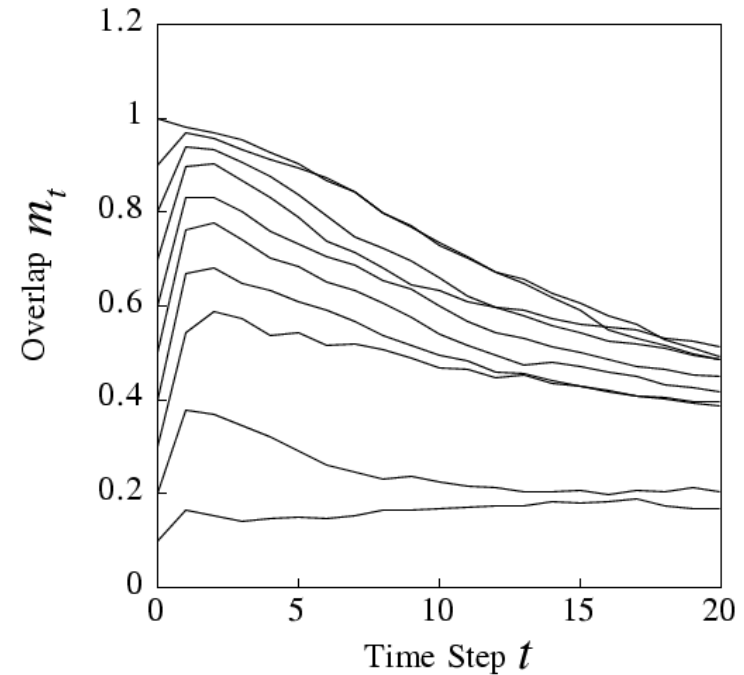
$x(t+1)$



# 記憶容量と引き込み領域



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



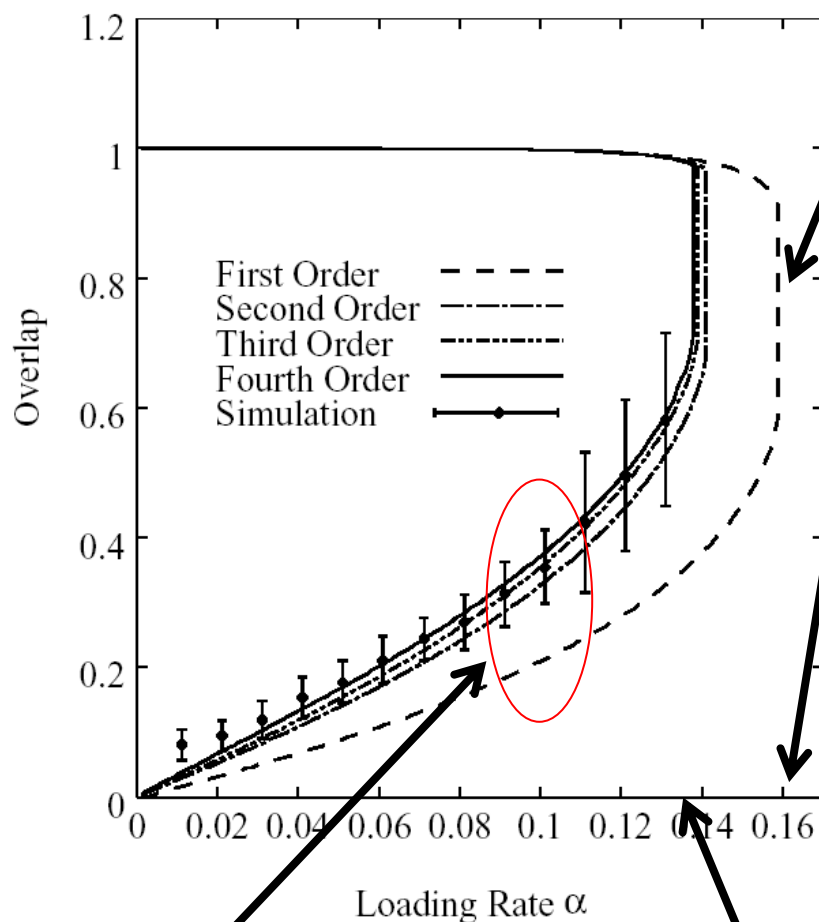
$N = 1000, p = 200, \alpha = p/N = 0.2$

$\alpha = \alpha_C = 0.14$  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)

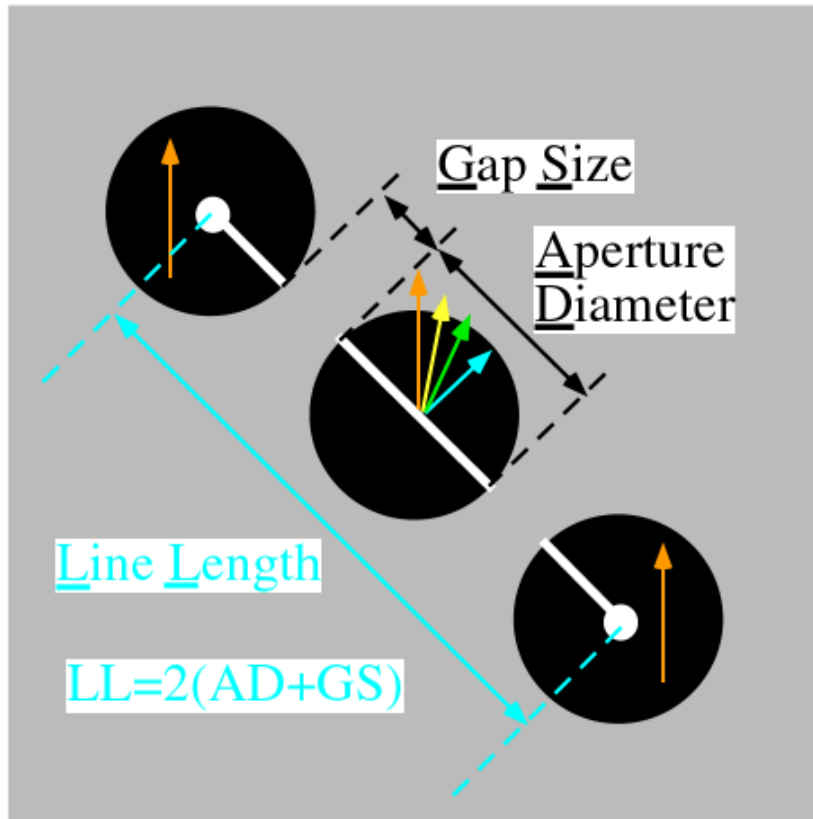


引き込み領域の境界

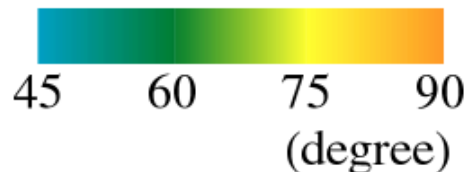
レプリカ法

- 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

# 脳科学: 運動知覚の統合



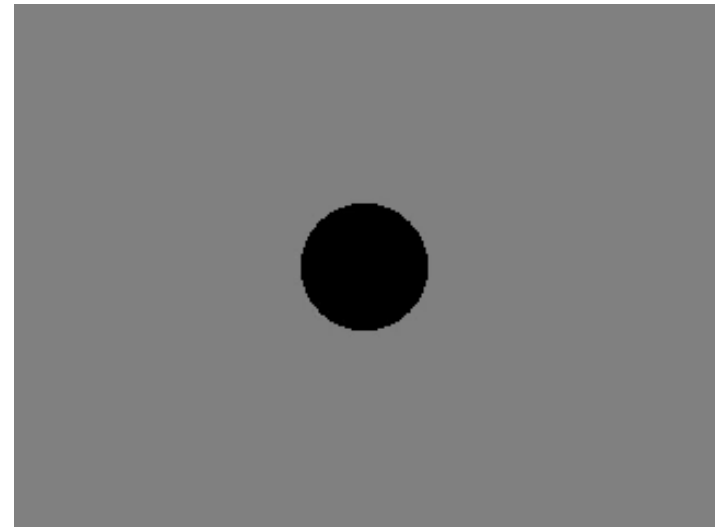
Motion direction



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

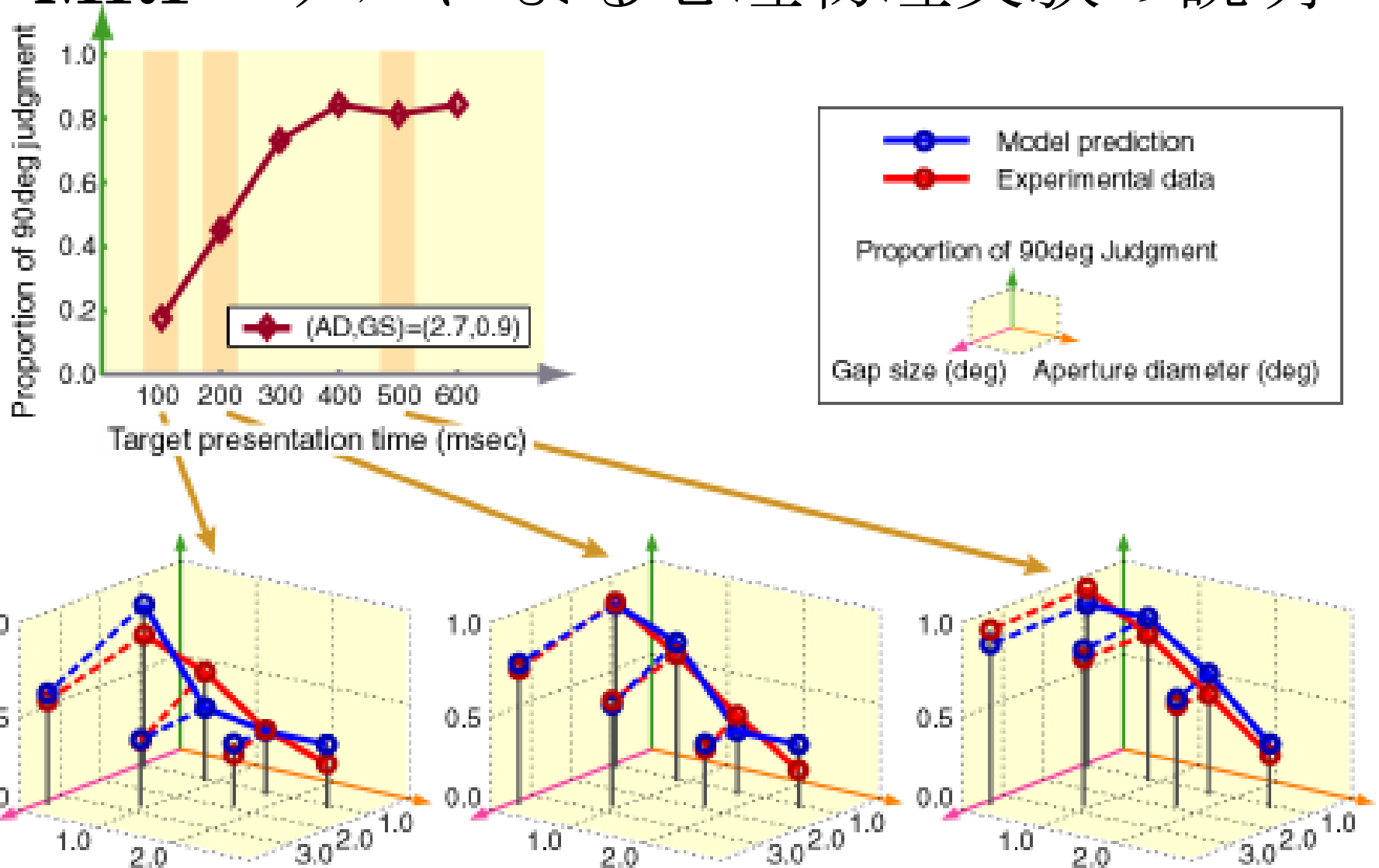


# 提案モデル

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

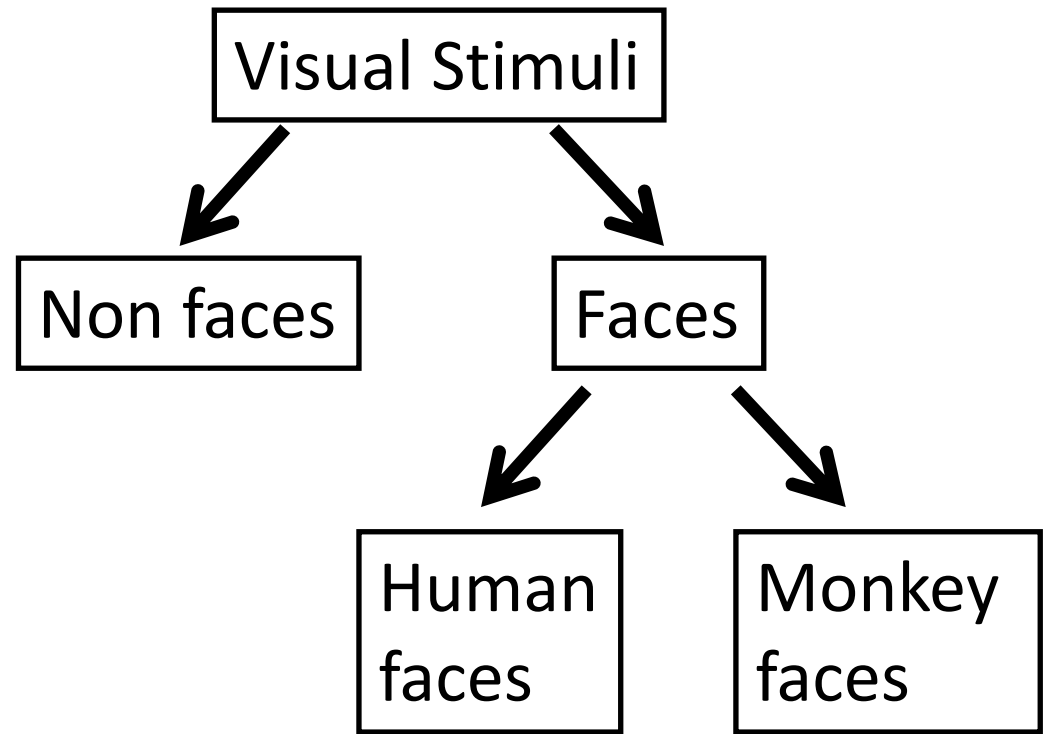
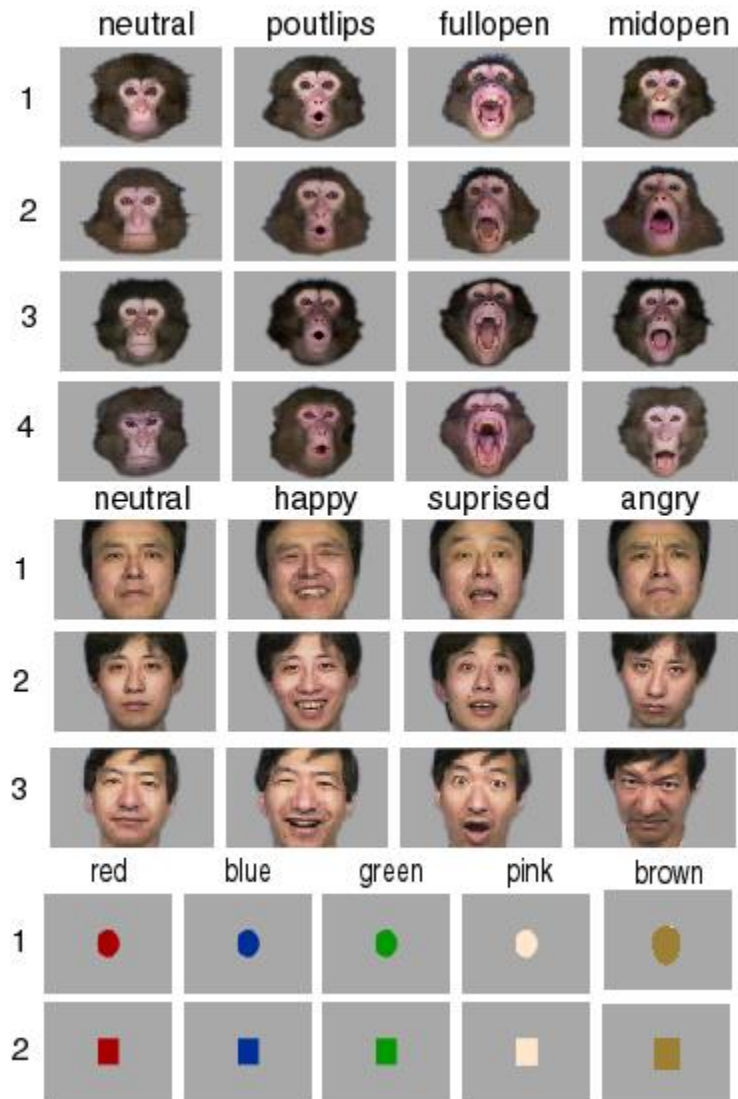
- $\mathbf{N}(s)$  : Normal vector at coordinate  $s$
- $\mathbf{V}(s)$ : Velocity vector estimate at coordinate  $s$
- $V^N(s)$  : Observed value of the normal component of the velocity vector at coordinate  $s$
- $\lambda_v, \lambda_b$  : Regularization parameters
- $b(s)$ : Binding signal
- $I_v$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

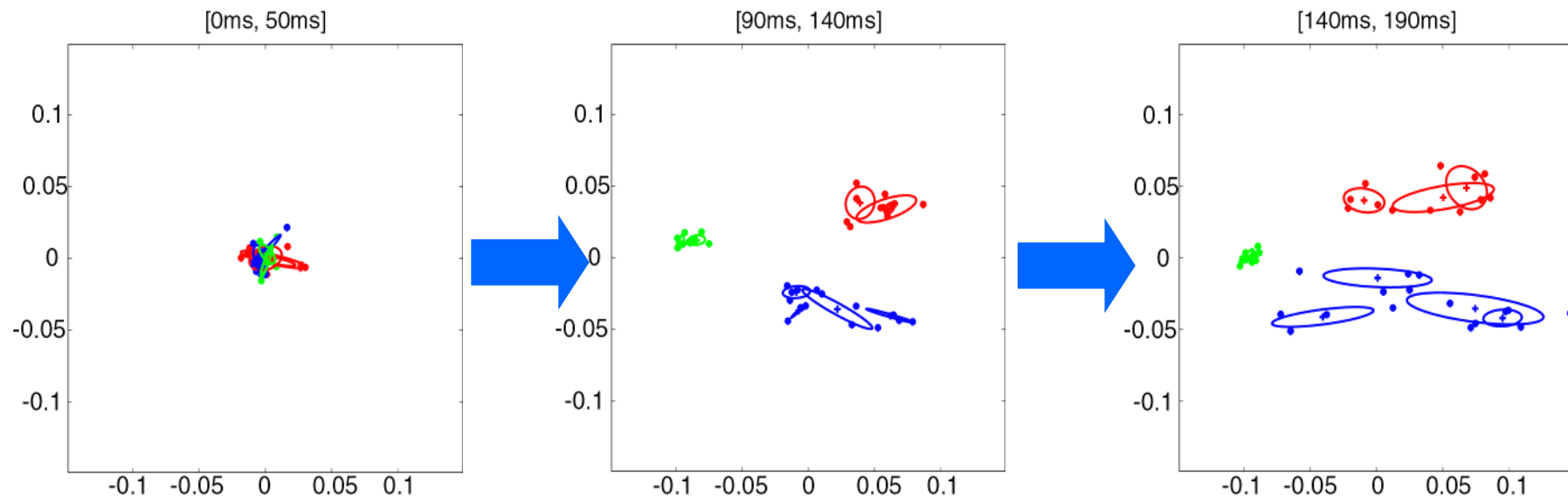
# 脳科学: サル側頭葉の神経集団ダイナミクスの解析



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

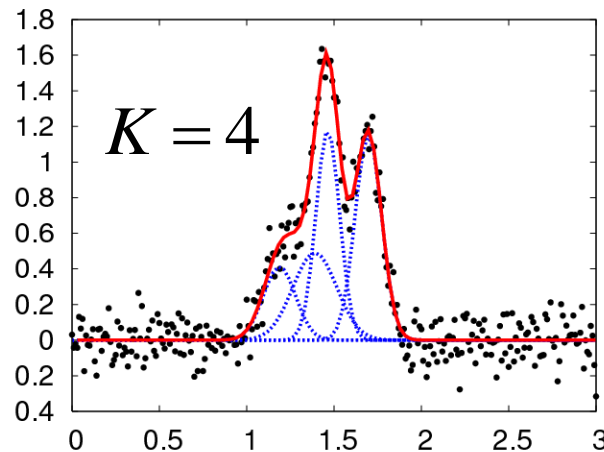
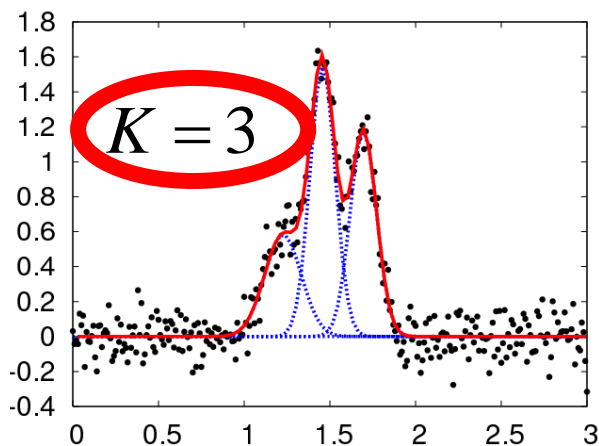
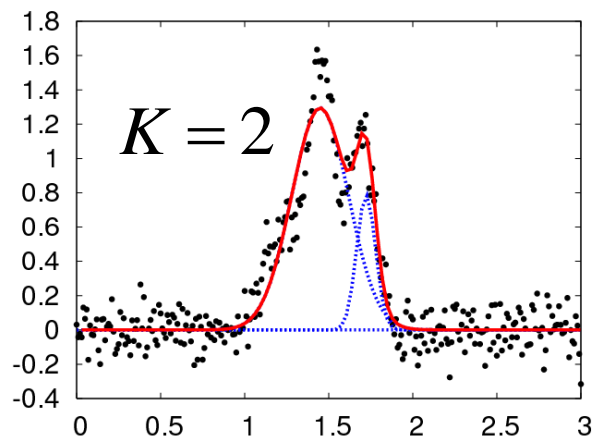
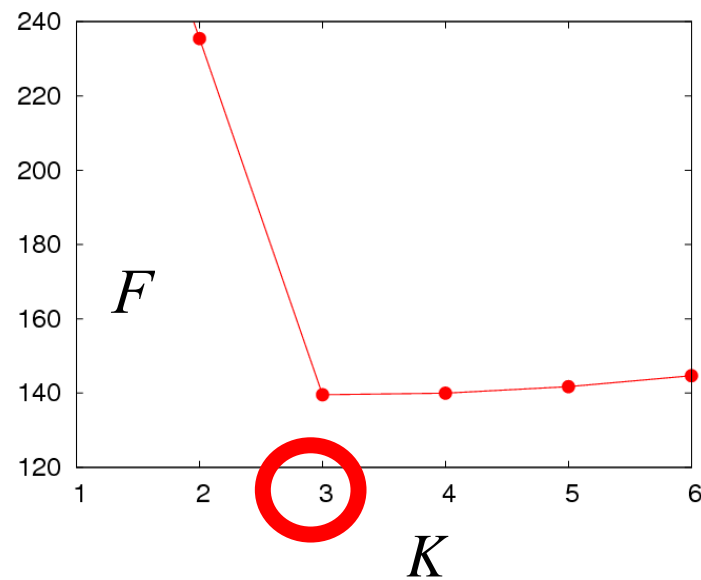
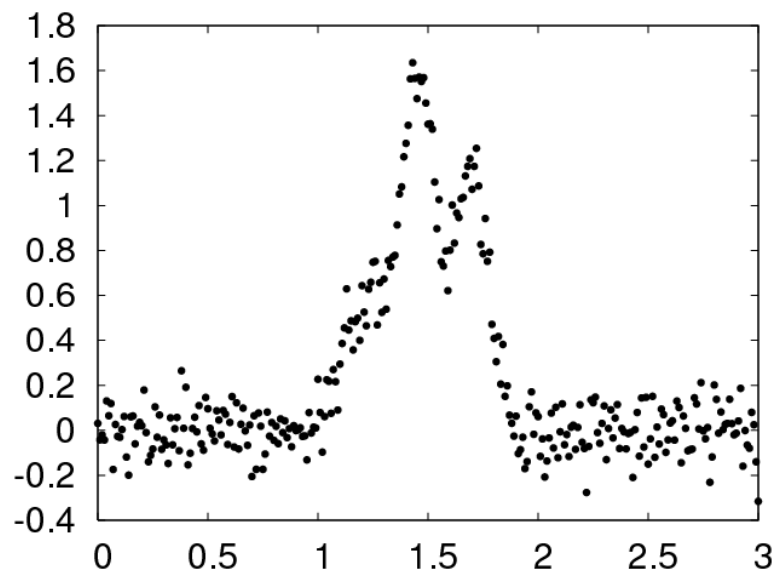
# 地球惑星科学: 地震波速度構造 からの流体分布推定

- 桑谷先生からスライドをもらうs





# 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

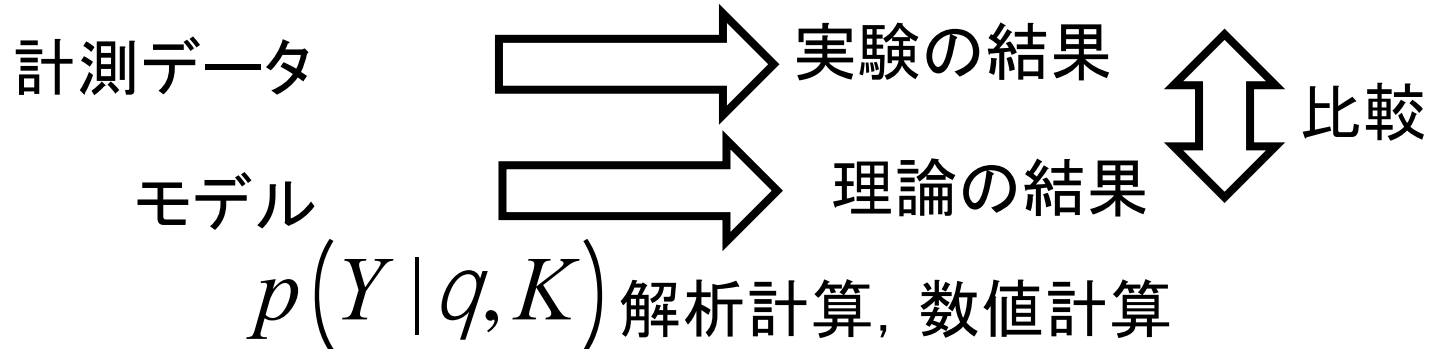
# 情報科学: スパースモデリング

スパースモデリング基本的な考え方は

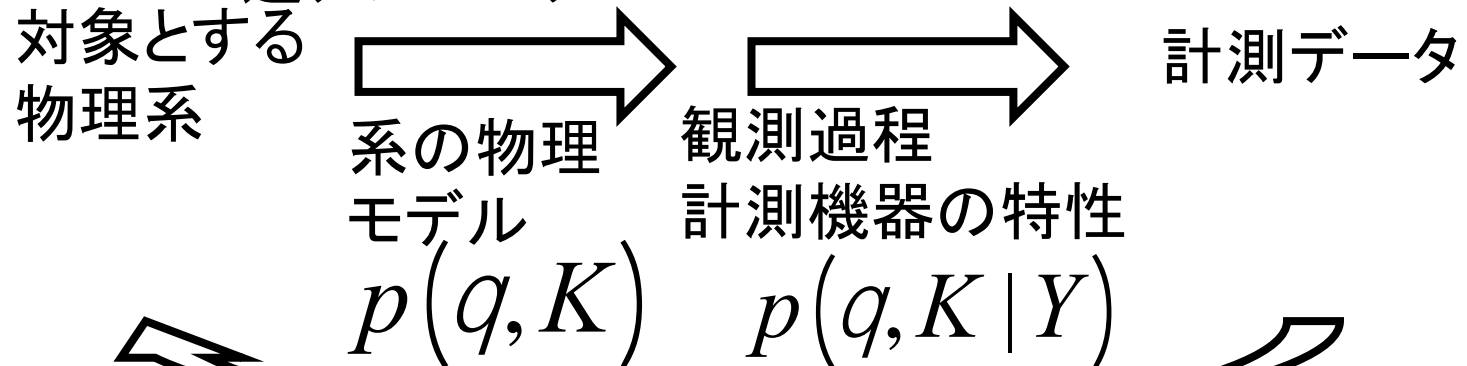
- (1)高次元データの説明変数が次元数よりも少ない(スパース(疎)である)と仮定し,
- (2)説明変数の個数になるべく小さくなることと、データへの適合とを同時に要請することにより,
- (3)人手に頼らない自動的な説明変数の選択を可能にする枠組みである.

# 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