ベイズ計測を用いた仮想計測解析（VMA）による実験条件設定

片上　舜
東京大学大学院新領域創成科学研究科　〒277-8561 千葉県柏市柏の葉 5-1-5
永田賢二
国立研究開発法人物質・材料研究機構　〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1
岡田真人
東京大学大学院新領域創成科学研究科　〒277-8561 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

■要旨　計測実験では，実験条件の設定が非常に重要であり，正確なデータの取得や信頼性の高い結果を得ることが求められる。実際の実験では試料の特性や装置の制約など，様々な要素が絡み合って複雑な現象を観測することが難しく，特に計測対象から知識抽出を実現する最適な計測データの統計精度の決定には困難が伴う。そこで，ベイズ計測を用いた仮想計測解析によるアプローチで実験の効率化と信頼性向上を図る手続きをスペクトル解析を例に示す。

1. はじめに

近年，機械学習の急速な進歩とそのサイエンス分野への応用により，新たな展開が生まれている。特に計測科学においては，これまでにない高精度な解析手法や情報処理手法の導入が進んでおり，計測限界の突破と新しい知識の獲得が可能としつつある。本解説では，「ベイズ計測を用いた仮想計測解析（Virtual Measurement Analysis: VMA）による実験条件設定」に焦点を当てる。計測実験では，実験条件の設定が非常に重要であり，正確なデータの取得や信頼性の高い結果を得ることが求められる。しかし，実際の実験では試料の特性や装置の制約など，様々な要素が絡み合って複雑な現象を観測することが難しく，特に計測対象から知識抽出を実現する最適な計測データの統計精度の決定には困難が伴う。ここで，ベイズ計測を利用したVMA が有用であると考える。計測データから計測対象の系の物理モデルをベイズ推論に基づいて抽出する枠組みをベイズ計測と呼ぶ。ベイズ計測は **Fig. 1** に示すように従来手法で用いられる物理モデルと計測機器の特性モデルから計測データの生成過程を確率モデルとして定式化したフォワードモデルを得る。そしてベイズ定理により因果律を遡り，物理モデルパラメータの情報を確率モデルとして得る。ベイズ計測では，データ生成過程を全てモデル化するため，計測シミュレーションを行うことができる。VMA は物理モデルと計測機器の特性モデルを仮定したフォワードモデルからシミュレーションデータを生成し，ベイズ計測によって，計測対象がどの程度適切に推論可能であるかを議論する情報数理的枠組みである。VMA によりどのような実験条件やノイズレベルで物理情報を抽出することが可能なのかを見積もることができる。この解析の意義は，実験の効率化と信頼性向上にある。VMA によって実験条件を最適化することで，試料の特性や装置の制約を考慮しながら，より効率的にデータを収集し，高品質な結果を得ることを可能とする。また，VMA によって得られた知見は，新たな科学的概念の創出にも繋がる。適切な実験条件の選択により，観測されるデータの精度や情報量が向上し，現象の解明や新たな知識の獲得につながることが期待される。本解説では，計測科学におけるベイズ計測を用いた仮想計測解析の例について解説[1,2]し，放射光計測研究者や関心を持つ読者にとって有益な情報を提供することを目指す。

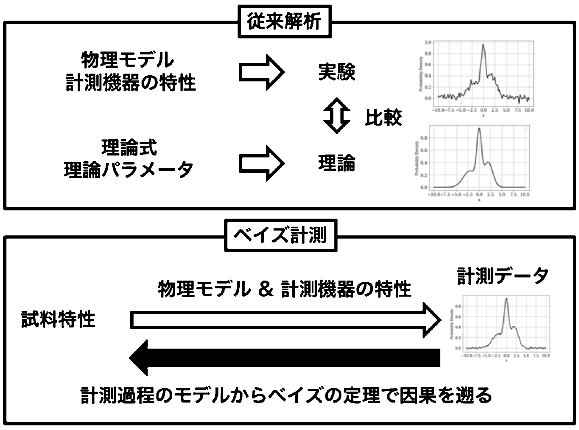

Fig. 1　Conventional Analysis vs. Bayesian Measurement.

2. ベイズ計測

2.1　これまでの解析における問題点

計測科学で得られる計測データはスペクトルという形式を取る。スペクトル解析の従来解析の概略を **Fig. 1** に示す。従来のスペクトル解析手法では，スペクトルの生成過程の理論式が仮定され，その理論式にあらわれるパラメータを，人手による調整や最急降下法などにより決定する手法が用いられてきた。しかしこの手法にはいくつかの問題点が存在する。まず一つ目の問題点は，解析結果のパラメータ調整における主観性である。手動でパラメータを調整する場合，解析者の主観が介在する余地がある。そのため，異なる解析者や異なる条件下での解析では，得られる結果にばらつきが生じることがある。また，非線形な理論式や複雑なスペクトルの形状を持つ場合には，最急降下法では安定して最適なパラメータを見つけることが難しく，ローカルミニマムに陥る可能性があり，安定した解析が困難となる。

二つ目の問題点は，モデル選択する際の定量的な基準の欠如である。スペクトル解析では，複数の仮説や理論式が存在し，それらの中から現状得られているデータに対して最も適切なモデルを選択する必要がある。理論モデルの自由度が大きいほどスペクトルに対してフィッティング精度は改善する一方で，統計的ゆらぎに過適合しているに過ぎない状況もある。従来の解析手法では，複数の仮説や理論式がスペクトルに対して，統計的ゆらぎを考慮し，どの程度適合しているかを定量的に評価する方法はなかった。

2.2　ベイズ推論による打開

我々はこれらの問題点を解決するために，ベイズ推論を計測科学に導入したベイズ計測を提案した[1,2)]。ベイズ推論は，Thomas Bayes という18世紀の数学者の名前を冠した推論手法であり，計測データから物理過程を推論する普遍的な枠組みを提供する。具体的な VMA によるスペクトル解析への適用例については，3 節および 4 節で詳しく説明する。

ベイズ推論を計測科学に適用する際は，**Fig. 1** に示すようにまず計測データがどのように生成されるかを数式で記述する。この際に，従来の手法で使用される理論式を計測データの生成過程として取り込むことができる。さらに，計測機器の特性である観測過程も考慮することが可能となる。これにより，計測機器の特性まで考慮した確率的な計測データの生成過程をモデル化できる。次に，ベイズの公式を用いて，計測データが与えられた条件下での理論式のパラメータの確率分布を求める。計測データと物理過程との因果関係を統計的に推論することで，より信頼性の高い解析結果が得られる。

ベイズ推論では，レプリカ交換モンテカルロ法を使用することで，誤差関数のローカルミニマムに陥るリスクを回避することができ，推論時に恣意的な介入なしに決定することができる。従来手法では回避が難しかった誤差関数のローカルミニマムやパラメータの恣意的な調整といった問題を克服し，解析結果の客観性と再現性を向上させることができる。これにより，ベイズ計測では従来手法の一つ目の問題点が解決される。さらに，3 節の具体例が示すように，ベイズ推論のモデル選択の取り扱いにより，複数の仮説や理論式を比較し，データに基づいて最も適切なモデルを選択することが可能である。ベイズ推論によるモデル選択は，自由度の異なる仮説や理論式を公平に評価する手法であり，統計的な根拠に基づいた選択を行うことができる。これにより，従来手法の二つ目の問題点も解決される。ベイズ計測は統計的な手法に基づいているため，解析結果の妥当性や信頼性を定量的に評価することも可能である。

3. ベイズ計測を用いた仮想計測解析

3.1　VMA によるスペクトル分解：問題設定

X 線吸収端構造測定（XANES）や X 線光電子分光法（XPS）などに代表される分光計測では，**Fig. 2** に示されるような複数のピーク構造を持つデータが得られる。データに含まれるピーク構造は，計測対象の物質固有の電子状態などを反映しており，**Fig. 3** に示すようにスペクトル解

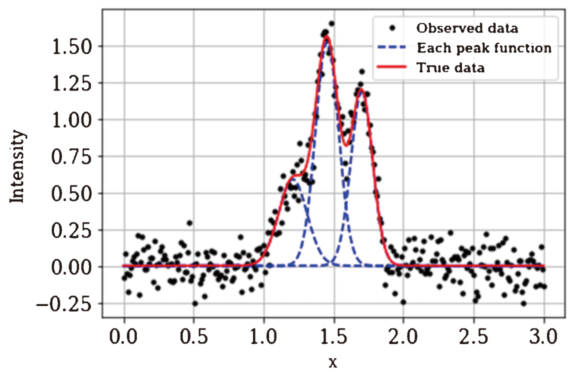

Fig. 2　(Color online) Spectrum Data and Peak Structures.

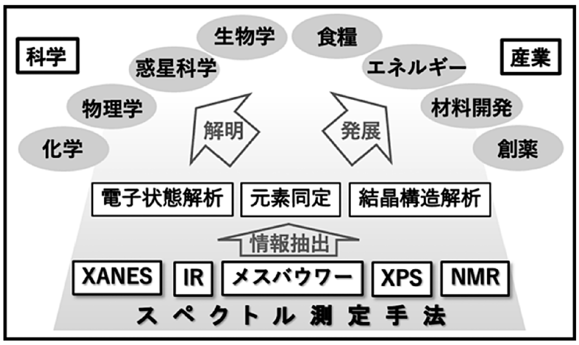

Fig. 3　Spectrum Measurement and Its Applications.

析は元素の含有量や化合物状態などを知る手がかりとして利用される。これらの混合ピーク構造データから知識抽出をするためには，何らかのピーク構造を持つ理論モデルでフィッティングを行い，各ピーク構造に関する特性を推定する必要がある。この問題をスペクトル分解という。スペクトル分解をVMAしていくにあたり，問題設定を本節で整理していく。

一般にスペクトル関数 $S(x;\theta)$ はピーク構造由来の理論モデル $f(x;\theta)$ と計測機器の特性などから計測データに含まれるバックグラウンド由来の $B(x;\theta)$ の重ね合わせで記述できる。

$$S(x;\theta)=f(x;\theta)+B(x;\theta) \tag{1}$$

簡単のため，$B(x;\theta)=0$ としてバックグラウンドを考慮せず進める。ここでは，ピーク関数は以下のようなガウス関数の足し合わせとして考えてみよう。

$$f(x;\theta)=\sum_{k=1}^{K} a_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu_k)^2\right) \tag{2}$$

ここで，a_k はピーク強度，μ_k はピーク位置，σ_k はピークの幅を表すパラメータである。そのため，ピーク構造が持つ全体としてのパラメータは $\theta=\{a_k,\mu_k,\sigma_k\}_{k=1}^{K}$ とかける。このパラメータをデータ $D=\{x_i,y_i\}_{i=1}^{N}$ にフィットさせるために，最小二乗法などでも知られるように以下の二乗誤差 $E(\theta)$ を最小にする枠組みがよく用いられる。

$$E(\theta)=\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i-f(x_i;\theta)\}^2 \tag{3}$$

この最適化の枠組みには，2つの問題が存在する。まず，局所最適の問題がある。一般的に上記の二乗誤差を最小化するパラメータはピーク関数の非線形性などが原因で解析的に計算することは困難であるため，最急降下法などの手法を用いて初期値を設定し，パラメータを局所的に更新して最適解を求める手法が使用される。しかし，誤差関数は局所最適な構造を持っているため，大域解を得ることはできず，局所解にトラップされることがよくある。多くの初期値を試すことで一部回避することはできるが，適切な初期値の値や，多くの初期値で得られた最適解が本当に大域的な最適解であることを保証することはできない。また，もう一つの問題は，ピークの個数を客観的に決定する方法である。あらかじめピークの個数が分かっている場合は，最小二乗誤差を使用してパラメータを推定する枠組みが適切に機能する場合がある。しかし，ピークの個数を同時に決定しようとすると問題が生じる。ピークの個数を増やすにつれて，ピーク構造由来の理論モデル $f(x;\theta)$ は任意の関数形状を近似することが可能となる。その結果，二乗誤差 $E(\theta)$ を最小化することができるが，これは観測による統計的ゆらぎ–ノイズの影響を除去できておらず，適切な知識抽出となっていない。このように，ピークの個数を含め，理論モデルのパラメータをデータから適切に同時決定する枠組みを，「モデル選択」と呼ぶ。モデル選択を行うためには，データとモデルの誤差を最小化する枠組みだけでは計測ノイズの影響を考慮できていないため，別のアプローチが必要とされる。

別のアプローチの1つがベイズ推定である。ベイズ推定のアプローチでは，データ生成プロセスを確率的にモデル化し，ベイズの定理を利用してデータが与えられた条件からピークの個数やパラメータなどを推定できる。この枠組みには，モデル選択の優位性があるだけでなく，確率の観点からパラメータの推定も行われるため，推定値だけでなく信頼区間も求めることができるという利点がある。

3.2 ベイズ推定によるスペクトル解析

上記のスペクトル分解をベイズ推論で取り扱うためには2節で述べたように，まず計測過程の理論式を書き下す必要がある。ピーク構造のモデルは式(1)で記述できていたので，データが得られるまでの確率的な計測過程を示す必要がある。

スペクトルデータの出力 y は，スペクトル関数 $S(x;\theta)$ にノイズ ϵ が加算されて計測されるとする。すなわち

$$y=S(x;\theta)+\epsilon \tag{4}$$

と書ける。ここでも前節同様にバッググラウンドを $B(x;\theta)=0$ として

$$y=f(x;\theta)+\epsilon \tag{5}$$

と書くことにする。ノイズは観測ごとに変動するため，その同定は困難である。そこで，ノイズを確率変数と見なすことにし，確率的なモデル化を導入する。たとえば，ノイズ ϵ が平均0，分散1のガウス分布から生成されると仮定すると，出力 y の確率分布は以下のように表現できる。

$$p(y\mid x,\theta,K)\propto\exp\left(-\frac{1}{2}(y-f(x;\theta))^2\right) \tag{6}$$

ここで，確率分布 $p(y|x,\theta,K)$ は，「条件付き確率」と呼ばれる。条件付き確率 $p(y\mid x,\theta,K)$ の意味は，入力 x，パラメータ θ，ピーク個数 K が与えられたもとでの出力 y の確率である。各計測点に加算されるノイズが独立に決定されると仮定すると，データセット $D=\{X,Y\}=\{x_i,y_i\}_{i=1}^{N}$ に対する同時条件付き確率は

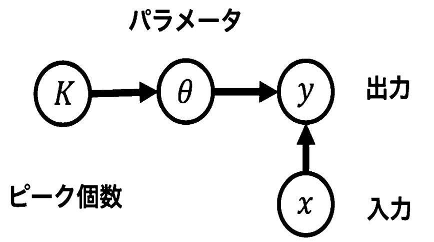

Fig. 4　Graphical Model of Spectrum Measurement.

$$p(Y|X,\theta,K)=\prod_{i=1}^{n}p(y_i|x_i,\theta,K)$$
$$\propto \exp(-nE(\theta)) \tag{7}$$

となる。この確率を最大化することと，二乗誤差を最小化することは同等である。ここまでの記述では，出力Yだけが確率変数であり，推定の対象であるパラメータ θ やピークの個数Kは固定された値として扱われている。しかし，ベイズ推定では，これらの推定対象も確率変数として扱う。そのため，条件付き確率 $p(Y|X,\theta,K)$ ではなく，同時確率分布をモデル化する必要がある。これは各変数の因果関係を **Fig. 4** に示すようなグラフィカルモデルに従って適切にモデリングすることで実現できる。

ピークの個数 K が確率分布 $p(K)$ に従い決定される。次に，パラメータ θ はピークの個数 K に依存するため，パラメータ θ は条件付き確率 $p(\theta|K)$ に従い生成される。そして，入力 X に対する出力 Y が条件付き確率 $p(Y|X,\theta,K)$ で生成される。これらの変数間での因果関係を仮定することで，同時確率分布は以下のように書くことが出来る。

$$p(Y,\theta|X,K)=p(Y|X,\theta,K)p(\theta|K) \tag{8}$$
$$p(Y,\theta,K|X)=p(Y|X,\theta,K)p(\theta|K)p(K) \tag{9}$$

この同時確率分布を用いることで，推定したい変数の確率を導出することが可能となる。モデルパラメータの推定を行う場合は，以下の事後確率分布を計算する。

$$p(\theta|X,Y,K)=\frac{p(\theta,Y|X,K)}{p(Y|X,K)}$$
$$=\frac{p(Y|X,\theta,K)p(\theta|K)}{p(Y|X,K)}$$
$$\propto \exp(-nE(\theta))p(\theta|K) \tag{10}$$

この事後確率分布を最大になるようにパラメータを推定する方法を事後確率最大化（Maximum A Posteriori, MAP）推定と呼ぶ。ここでの事後確率という呼称は，データを観測したのちに因果を遡って得られる確率であるということである。一方で，確率分布 $p(\theta|K)$ はデータが観測される前に決定されているべき値の確率であるので，事前確率と呼ぶ。事前確率が一様分布として扱う場合，式(10)からMAP推定は誤差関数最小化と等価となることがわかる。ベイズ推定では，パラメータ推定が事後確率分布を得ることで進められる。そのため，最適なパラメータの推定のみならず，事後確率分布を見ることで，パラメータの推定精度やパラメータの対称性，信頼区間などを議論できるようになる。

またピーク個数Kについては，以下の事後確率を計算することで推定できる。

$$p(K|X,Y)=\frac{p(Y,K|X)}{p(Y|X)}$$
$$=\frac{\int p(Y,\theta,K|X)d\theta}{p(Y|X)}$$
$$\propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta|K)d\theta \tag{11}$$

式(11)に現れる積分項は情報統計熱力学における分配関数に対応する。そこで，慣習に従い，分配関数の負の対数を取ることでベイズ自由エネルギーを以下のように定める。

$$F(K)=-\log\int \exp(nE(\theta))p(\theta|K)d\theta \tag{12}$$

ピーク個数に関しての事前情報や予測がない場合は K に関して無情報となるので，事前分布 $p(K)$ は一様分布とする。このとき，ベイズ推定によるピーク個数の事後確率最大化は，式(11)よりベイズ自由エネルギー最小化と等価になることがわかる。つまり，ベイズ自由エネルギーが候補となるピーク個数に対して計算することでピーク個数の選択，モデル選択が可能になる。
ここまでで，スペクトル分解を例にベイズ推定でのパラメータ推定とモデル選択は事後確率を計算することで達成できることを見た。式(10)，(11)に現れるような事後確率は一般的には解析計算することは困難である。事後確率計

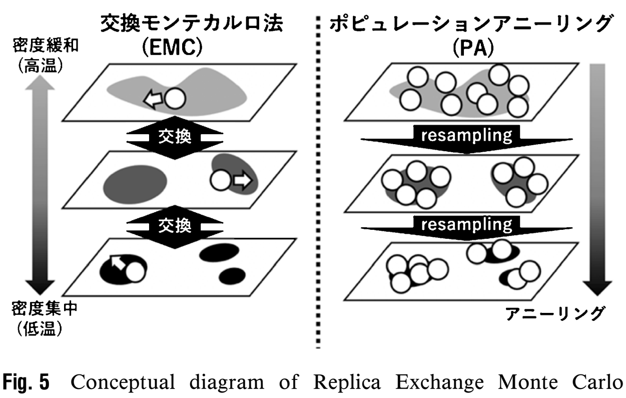

Fig. 5　Conceptual diagram of Replica Exchange Monte Carlo (EMC) and Annealing methods. The left side represents sampling using the Exchange Monte Carlo method, while the right side represents sampling using the Annealing method.

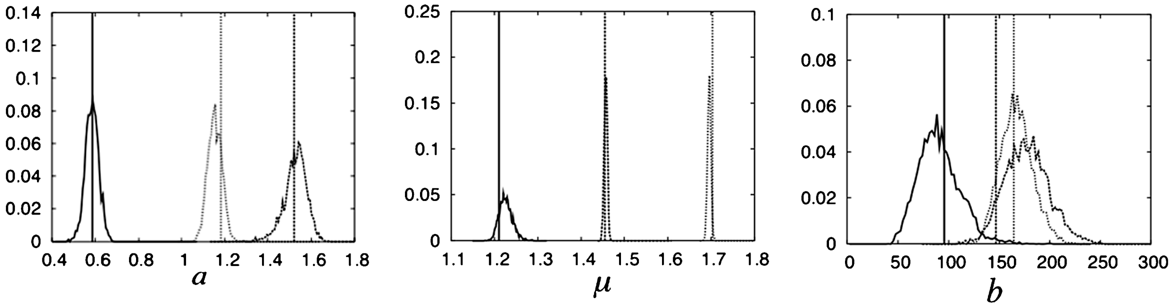

Fig. 6 Parameter estimation results of spectrum decomposition. From left to right: posterior probabilities of peak intensity, peak position, and peak width parameters. Vertical lines represent the true values of each parameter.

算を数値的に実行可能とするためによく用いられるのが，レプリカ交換モンテカルロ法[5]である。これは，アニーリング法と類似した性質を有したサンプリング手法であり，高温状態から低温状態を複数の温度条件でサンプリングし，途中に各温度間で状態の交換を行う（**Fig. 5**）。最低温度が求めたい事後確率であり，最高温状態は関数形状が既知の事前分布である。温度パラメータを導入することで，この事後確率と事前確率の間を滑らかに接続し，サンプリングする。これによって局所最適解の状態がトラップされる問題を回避することができ，事後確率分布の計算やベイズ自由エネルギーの計算を実行できる。

Fig. 2 のスペクトルデータに対して VMA によりパラメータ推定した結果を **Fig. 6** に示す。**Fig. 2** のスペクトルデータはピーク個数が 3 であり，左から各ピーク強度，各ピーク位置，各ピーク幅パラメータの事後確率を示す。ここからピーク強度およびピーク位置パラメータの事後確率は分布幅が小さく高い推定精度を示しているのに対して，ピーク幅の事後確率は分布幅が大きく推定性能が低いことがわかる。

このようにしてベイズ推定はデータから信頼度付きでパラメータ推定，モデル選択を可能とした。また，実計測データに対してのベイズ推論による解析の前に VMA は実行出来た。これは，実際の計測を行う前に理論モデルを設定し VMA を行うことで，実験データを模倣した人工データからどの程度の信頼度を持って推論ができるかを見積もることができる。例えば，今回のピーク強度の事後確率の分布幅が0.05程度では信頼性に欠けるという結論をつけるのであれば，確度が高くなるようにノイズ低減したデータで VMA を行い，ベイズ推定をするのに十分な統計精度はどの程度のデータなのかを見積もれる。これから行う実験計測の目標とする統計精度や既に得られているデータを取り直す再実験を促すといった指針としてベイズ計測による VMA は機能しうる。

4. ベイズ計測を用いた VMA による推定限界

ベイズ推定による解析は解析者に適切な情報抽出が可能となる計測限界の見積もりを与えることもできる[2,4]。ここでは中性子非弾性散乱実験で得られるスペクトルデータの解析を例に見る。中性子非弾性散乱実験では中性子が物質に衝突したときのエネルギーと運動量の変化のスペクトルデータを得ることができる。そこには，原子や分子の運動状態を表す，固体内部のフォノン（格子振動）の分散関係の情報が反映されている。非弾性散乱実験は中性子線のみならず放射光 X 線でも可能であり観測強度の差異を除いて同様のスペクトルデータを得ることができる。ここでのスペクトルデータは物理モデルの運動方程式から決定される分散関係を中心としたローレンチアンの重ね合わせにノイズが加算されたものとして確率モデル化することができ，ベイズ推定が実施可能である。**Fig. 7** の上段は格子定数 a の体心立方格子構造を持つ結晶の運動量空間の第一ブリルアンゾーン（$\Gamma[0, 0, 0] \rightarrow H[0, 0, 2\pi/a] \rightarrow N[0, \pi/a, \pi/a] \rightarrow P[\pi/a, \pi/a, \pi/a] \rightarrow \Gamma[0, 0, 0]$）上の中性子非弾性散乱スペクトルデータである。どれも同じ条件での体心立方格子結晶を試料とした計測過程に従って生成されているが，計測時間が異なるため，S/N 比が異なることがわかる。計測対象の特性を把握する上で重要な分散関係が計測データにあらわれていることがわかるが，異なる S/N 比が原因で分散関係の確信度も変化していることが定性的にみてとれる。本節では，中性子非弾性散乱スペクトルデータに対するベイズ推定の流れ[3,4]を見ることで推定の確信度が定量的に表現できることを示すとともに，その推定限界について見る。

前節でのノイズメカニズムは簡単のため平均 0 分散 1 のガウスノイズを仮定した。しかし，今回のような物理計測の場合，ノイズ分散が強度に依存して一定であることはない。そこで，本節ではより物理計測に則したノイズを確率モデル化する。ここで，非弾性散乱スペクトルの計測原理に立ち返ると，計測される強度は，各運動量，エネルギーに対する中性子のカウントデータとなっている。このような確率的に発生する事象のカウントデータは，ポアソン過程に従う。そこで式(6)の確率モデルを以下のようにポアソン分布で書き換える。

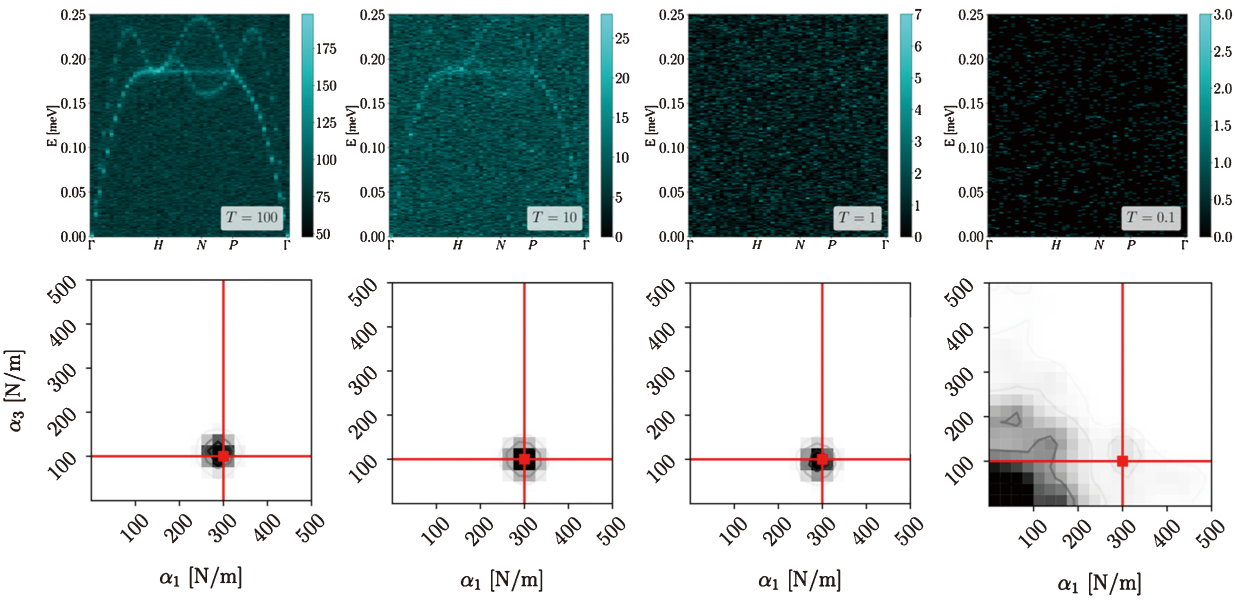

Fig. 7 (Color online) Neutron Inelastic Scattering Spectrum Data and Bayesian Estimation Results of Interaction Constants in a Crystal with a Body-Centered Cubic Lattice Structure. The upper panel displays the neutron inelastic scattering spectrum data corresponding to each measurement time, while the lower panel shows the posterior probability distribution of the elastic constants estimated using Bayesian inference from the data at each measurement time. The intersection points of the red lines indicate the true values of the parameters.

$$p(y\,|\,x,\theta,K)=\frac{S(x;\theta)\exp(-S(x;\theta))}{y!} \tag{13}$$

このようにポアソンノイズモデルを導入することで前節同様に，事後確率分布やベイズ自由エネルギーを適切にベイズ推定することが可能になる。

Fig. 7には，体心立方格子構造を持つ結晶の中性子非弾性散乱スペクトルデータ（上段）と弾性定数のベイズ推定結果（下段）を示してある。ここでは，紙面の都合上，推定パラメータの一部である第一近接相互作用，第三近接相互作用を推定した結果のみ記載する。**Fig. 7**上段の中性子非弾性散乱スペクトルデータを見ると，非弾性散乱実験から計測できる分散関係を確認出来る。計測時間 $T=100$, 10までは分散関係を肉眼でも捉えることができるが，計測時間 $T=1$, 0.1に対してはS/N比の影響で分散関係を人の目では認識することが難しい。**Fig. 7**下段の相互作用定数の推定結果をみると，計測時間 $T=100$, 10のデータからだけでなく，驚くべきことに計測時間 $T=1$ からも適切にパラメータの真値を推論できていることがわかる。計測時間 $T=0.1$の計測データからの推定結果は，パラメータの真値にピークは持たず広い範囲に広がった確率分布となっており適切に推定できていない。ここから，$T=1$ と $T=0.1$の間に推定限界が存在することがわかる。このようにベイズ推定では推定分布から推定限界を見積もることも出来る。

5. まとめと今後の展開

本解説では，**Fig. 2**，**Fig. 7**に示されるようなスペクトル分解および中性子非弾性散乱データを例にとり，ベイズ計測によるベイズ計測を用いたVMAによるパラメータ推定，モデル選択，推定限界について説明した。

ベイズ計測の導入により，従来手法では解決が難しかった問題点を克服できる。まず，ローカルミニマムの問題に対しては，ベイズ推論によるレプリカ交換モンテカルロ法が効果的であり，解析者の主観に依存しないパラメータの推定が可能となる。さらに，パラメータの推定には点推定ではなく事後分布の推定が行われるため，計測限界の定量的な議論までも可能となり，計測時間の削減などへの期待ができる。また，モデル選択の問題についてもベイズ推論が有効である。モデル選択の枠組みでは，自由エネルギーの最小化を通じて最適なモデルが決定される。これにより，データの説明度とモデルの複雑さのトレードオフを考慮しながら，適切なモデルを選択することが可能となる。ベイズ計測は，単に計測のための理論式を決定するだけでなく，物質やシステムに対する複数のモデルの中で，データを最もよく説明するモデル「有効モデル」を決定することを意味する。ベイズ計測の進展により，計測データから有効モデルを選択する試みが進むことが期待される。

ベイズ計測を実行するためにはレプリカ交換モンテカルロ法の実装をする必要がある。本手法は計算量が大きく適切なメモリ管理と並列化によって現実時間での実行を可能としている。効率的なメモリ運用や実行速度の高速化が実

装時に要求されるため実装の技術面でのコストが高い。そのため，各問題に都度個別に効率的なレプリカ交換モンテカルロ法を実装することは計測科学者にとっては負担であり，ベイズ計測の普及の妨げとなっている。ベイズ計測自体は事後分布を計算することができれば実現できるので実装の大部分は共通する。そこで，現在我々は計測科学者向けの高速なベイズ計測ライブラリを開発している。今後は，本ライブラリを用いたベイズ計測の解析における普及および一般化を推し進めていく。

参考文献

1) K. Nagata, S. Sugita and M. Okada: Neural Netw. **28**, 82 (2012).
2) K. Nagata, R. Muraoka, Y. Mototake, T. Sasaki and M. Okada: J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 044003 (2019).
3) H. Sakamoto, S. Katakami, K. Muto, K. Nagata, T. Arima and M. Okada: J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 12 (2020).
4) S. Katakami, H. Sakamoto, K. Nagata, T. Arima and M. Okada: Physical Review E **105**, 065301 (2022).
5) K. Hukushima and K. Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1604 (1996).

著者紹介

片上　舜
東京大学大学院新領域創成科学研究科　助教
E-mail: katakami@mns.k.u-tokyo.ac.jp
専門：データ駆動科学
［略歴］
令和3東京大博士後期課程修了。以降，現職．博士（理学）。

永田賢二
国立研究開発法人物質・材料研究機構　主任研究員
E-mail: Nagata.Kenji@nims.go.jp
専門：データ駆動科学
［略歴］
平20東工大博士後期課程修了。以降，東大新領域助教，産総研主任研究員を経て現職。博士（工学）。

岡田真人
東京大学大学院新領域創成科学研究科　教授
E-mail: okada@edu.k.u-tokyo.ac.jp
専門：データ駆動科学
［略歴］
昭60大阪市大卒，昭62阪大前期博士課程修了。㈱三菱電機，阪大基礎工助手，JST研究員，理化学研究所副チームリーダーを経て現職。博士（理学）。

Experimental condition setting using Virtual Measurement Analysis (VMA) with Bayesian measurement

Shun KATAKAMI　Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Kashiwa, Chiba 277–8561, Japan
Kenji NAGATA　National Institute for Materials Science, Tsukuba, Ibaraki 305–0047, Japan
Masato OKADA　Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Kashiwa, Chiba 277–8561, Japan

Abstract　In measurement experiments, setting the experimental conditions is crucial as it is necessary to obtain accurate data and reliable results. In actual experiments, various factors such as the characteristics of the sample and constraints of the equipment make it challenging to observe complex phenomena. Determining the optimal statistical accuracy of measurement data, especially for extracting knowledge from the measurement target, poses difficulties. Therefore, we demonstrate the procedure for enhancing the efficiency and reliability of experiments using Virtual Measurement Analysis (VMA) with Bayesian measurement, taking spectral analysis as an example.