

近似的ベイズ計算による岩石-水相互作用における表面積モデル選択

Approximate Bayesian Computation of surface-area model selection in water-rock interactions

*福島 孝治¹、岡本 敦²、桑谷 立³、大森 敏明⁴*Koji Hukushima¹, Atsushi Okamoto², Tatsu Kuwatani³, Toshiaki Omori⁴

1. 東京大学大学院総合文化研究科、2. 東北大学大学院環境科学研究科、3. 国立研究開発法人 海洋研究開発機構、4. 神戸大学大学院工学研究科

1. Department of Basic Science, University of Tokyo, 2. Graduate School of Environmental Studies, 3. Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, 4. Graduate School of Engineering, Kobe University

岩石-水相互作用の理解は地球表面での岩石形成ダイナミクスを理解する上で最も基本的かつ重要な要素である。しかしながら、例えば実験室系とフィールドでは運動速度の評価値に数桁もの違いがしばしば生じ、相互作用および運動論の正しい理解には至っていない。その原因の一つには様々な地質学的環境における反応表面積の評価の不定性が挙げられる。それを解決するために、実験室系やフィールドにおいて比較的容易に得られる反応溶液データから反応速度定数を正しく評価する方法の確立が望まれる。特に反応の表面積モデルの同定も可能な解析手法が運動速度の理解へつなげるために重要である。

我々は化学反応の部分観測データから反応速度定数を推定する近似的ベイズ計算 (Approximate Bayesian Computation, ABC) を用いた方法を提案する。ABCは近年機械学習の分野で、尤度関数の評価が難しい推定問題に対して、シミュレーションにより近似的評価を行う効果的な方法として注目されている。実験室系でも行える最も単純な化学反応モデルとして、反応物 → 中間生成物 → 生成物を考える。化学反応式はそれぞれの成分濃度の常微分方程式で与えられ、反応速度定数と初期条件を指定すれば時間発展を数値的に求めることは容易である。一方、観測ノイズを考慮した尤度関数の評価は非自明である。特に、中間生成物の時間発展の観測データを部分的にしか得られない状況において、観測データから反応速度定数のベイズ推定が行いたい。本研究では、中間生成物の人工データに対して、ABCの幾つかの技法の中でポピュレーション型モンテカルロ法による計算を用いて、それぞれの反応速度定数が正しい推定できることを示す。また、反応速度定数の推定だけでなく、幾つかの表面積モデルの候補からABCを基礎としたモデル選択を試みる。この方法ではベイズ因子が各モデルのポピュレーション比として求めることができる。発表では、入力データのサンプル数やノイズ強度による推定精度や推定限界の影響について詳しく調べた結果を報告する。

キーワード：岩石-水相互作用、近似ベイズ計算、表面積モデル

Keywords: water-rock interactions, Approximate Bayesian Computation, surface-area model