

複数実験結果を用いたベイズ推論によるパラメータ推定

西村 怜^A, 片上 舜^A, 永田 賢二^B, 水牧 仁一朗^C, [†]岡田 真人^A

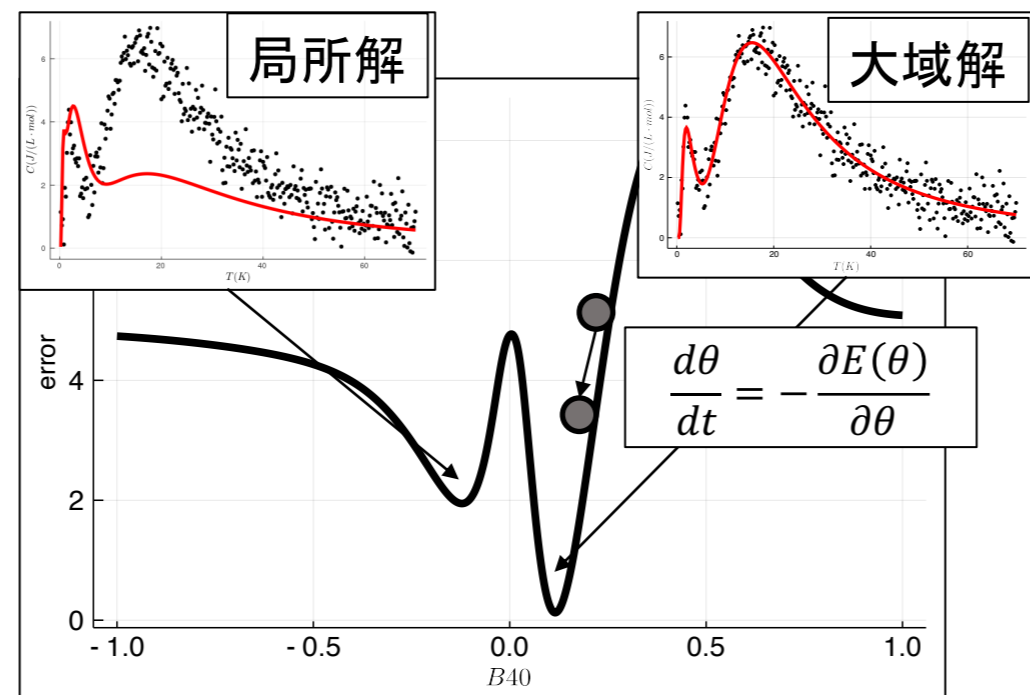
^A東京大学, ^B物質・材料研究機構, ^C高輝度光科学研究センター [†]okada@edu.k.u-tokyo.ac.jp

研究背景

現在、計測技術の発展により多種多様なデータが幅広い分野で獲得されるようになった。物性科学では、観測対象の物性を決定しているパラメータを高い精度で推定するために、複数の方法で測定したマルチモーダルな観測データが得られている。観測データの解析において、以下の問題が存在している。

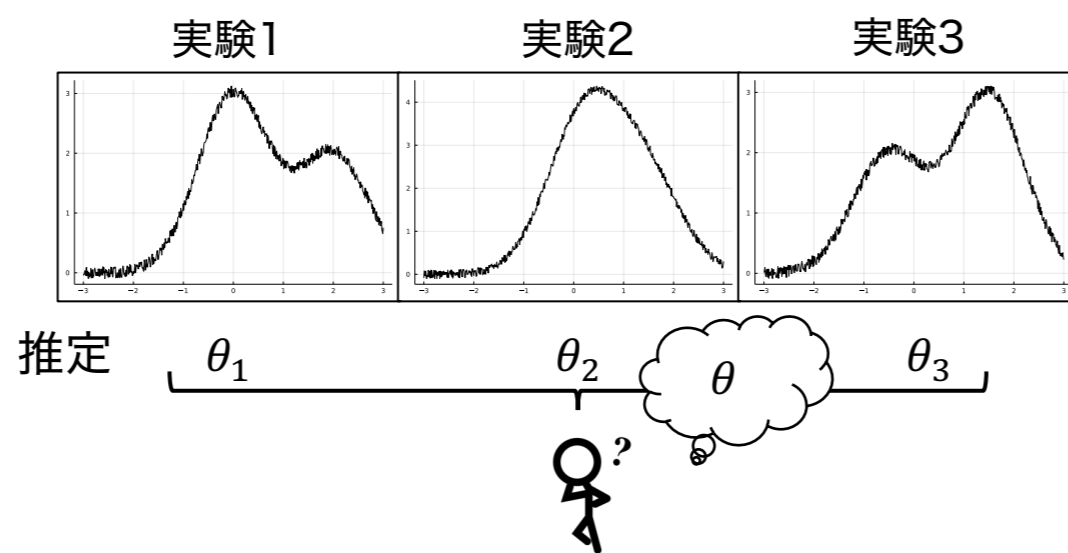
(問題1)

最急降下法では点推定であるため推定精度を評価することが困難である。局所解に陥る可能性がある。



(問題2)

マルチモーダルな観測データが得られているが、各測定は専門的に行われ独自に解析されている。解析者が各結果を考察することで物性情報を抽出している。



目的

- マルチモーダルな観測データを統一的に解釈
- 観測対象の物性決定パラメータを高い精度で推定
- マルチモーダルな観測データにベイズ推論(ベイズ統合)を導入

[1] Y. Yokoyama, et al., (2021).

モデル

4f希土類イオンの結晶モデル

- 結晶場ハミルトニアン(正方晶) $H_{CEF} = B_{20}O_{20} + B_{40}O_{40} + B_{44}O_{44}$ (※ O_{20}, O_{40}, O_{44} はStevens等価演算子) [2] M. T. Hutchings., (1965)

※等価演算子

$$O_{20} = 3J_z^2 - J(J+1)$$

$$O_{40} = 35J_z^4 - 30J(J+1)J_z^2 - 6J(J+1) + 3J^2(J+1)^2$$

$$O_{44} = \frac{1}{2}(J_+^4 - J_-^4)$$

- 磁場をかけた状態のハミルトニアン $H = H_{CEF} - g\mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{H}$

ガウスノイズを加えた人工データ生成

ハミルトニアン $H(B_{20}, B_{40}, B_{44})$

人工データ生成

磁化率

$$\langle \mu \rangle = -g\mu_B \sum_i \frac{e^{-E_i/k_B T}}{Z} \langle \varphi_i | J | \varphi_i \rangle$$

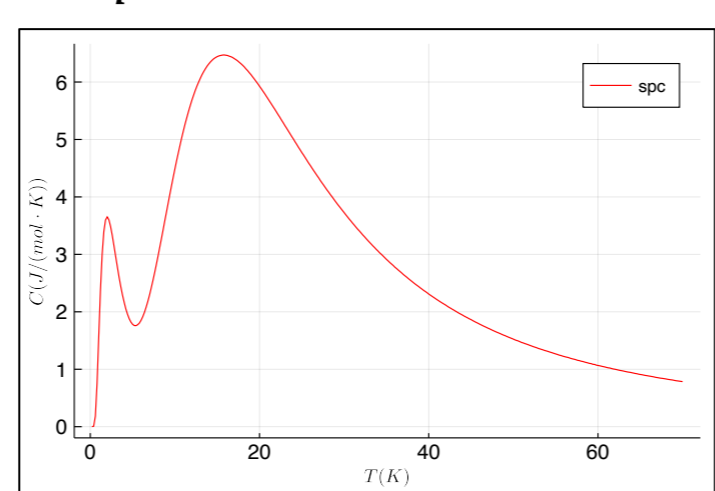
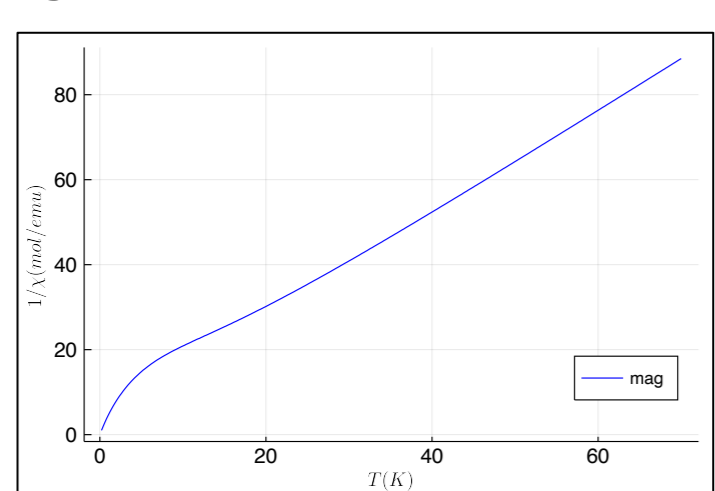
比熱

$$C = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)$$

ガウスノイズ

(1) $\sigma_{\text{mag}} = 10^{-2}$

(1) $\sigma_{\text{spc}} = 10^{-2}$



(2) $\sigma_{\text{chi}} = 10^{-1}$

(2) $\sigma_{\text{chi}} = 10^{-1}$

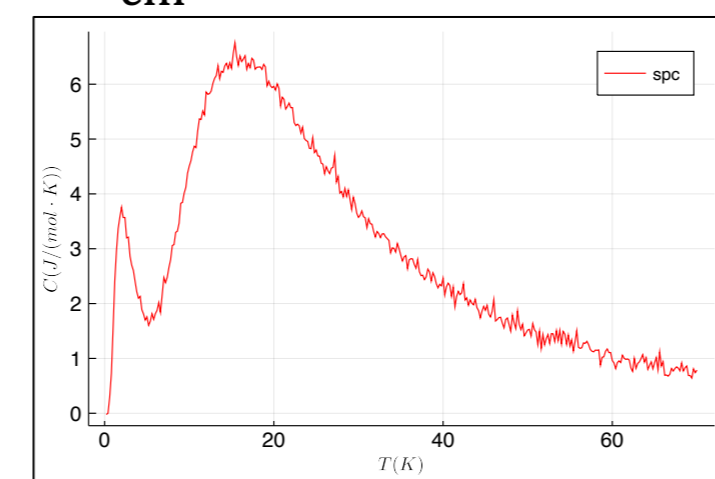
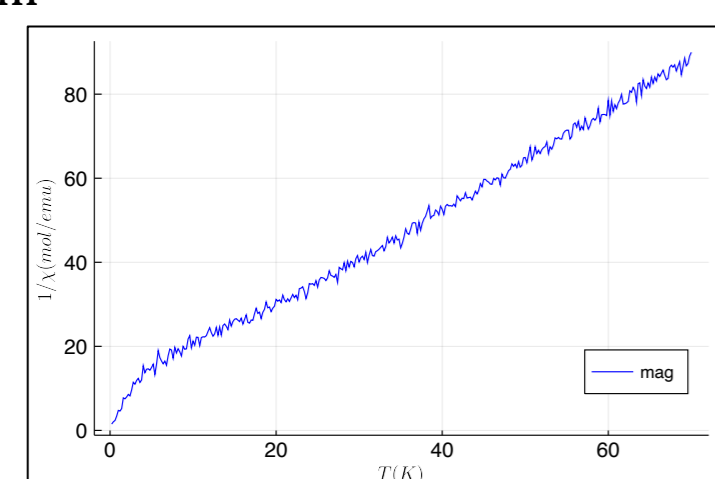


図1. ガウスノイズを付与した磁化率(左)と比熱(右)人工データ

手法

ベイズ統合

- データ生成 $y_i = f_k(x_i; \theta) + \varepsilon_i, \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2 = b^{-1})$
- ガウスノイズを加えたデータセット (D_1 :磁化率, D_2 :比熱)

$$D_1 = \{x_i, y_{1,i}\}_{i=1}^{N_1}, D_2 = \{x_i, y_{2,i}\}_{i=1}^{N_2}$$

- 尤度 $p(D_k | b_k, \theta) = \left(\frac{b_k}{2\pi}\right)^{N_k/2} \exp(-N_k b_k E_k(\theta))$
- ベイズ推論事後分布

$$p(\theta | D_k, b_k) = \frac{1}{Z(D_k, b_k)} \left(\frac{b_k}{2\pi}\right)^{N_k/2} \exp(-N_k b_k E_k(\theta)) p(\theta)$$

- ベイズ統合事後分布

$$p(\theta | D_1, D_2, b_1, b_2) = \frac{1}{Z(D_1, D_2, b_1, b_2)} \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{N_1/2} \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{N_2/2} \exp(-NbE(\theta)) p(\theta)$$

$$N = N_1 + N_2, b = b_1 + b_2, E(\theta) = \frac{N_1 b_1}{N b} E_1(\theta) + \frac{N_2 b_2}{N b} E_2(\theta)$$

※交換モンテカルロでサンプリングを行う

[3] K. Hukushima and K. Nemoto, (1996).

- ベイズ自由エネルギー

→ノイズ推定, モデル選択に使用

$$F_1 + F_2 = -\ln Z(D_1, b_1) - \ln Z(D_2, b_2) \text{ vs } F = -\ln Z(D_1, D_2, b_1, b_2)$$

数値実験

- 2種類のノイズ強度の人工データを作成(図1)
- ノイズ推定
- 交換モンテカルロ法によるパラメータサンプリング
- ベイズ推論(1種類データ)とベイズ統合(2種類データ)での推定精度の比較, モデル選択

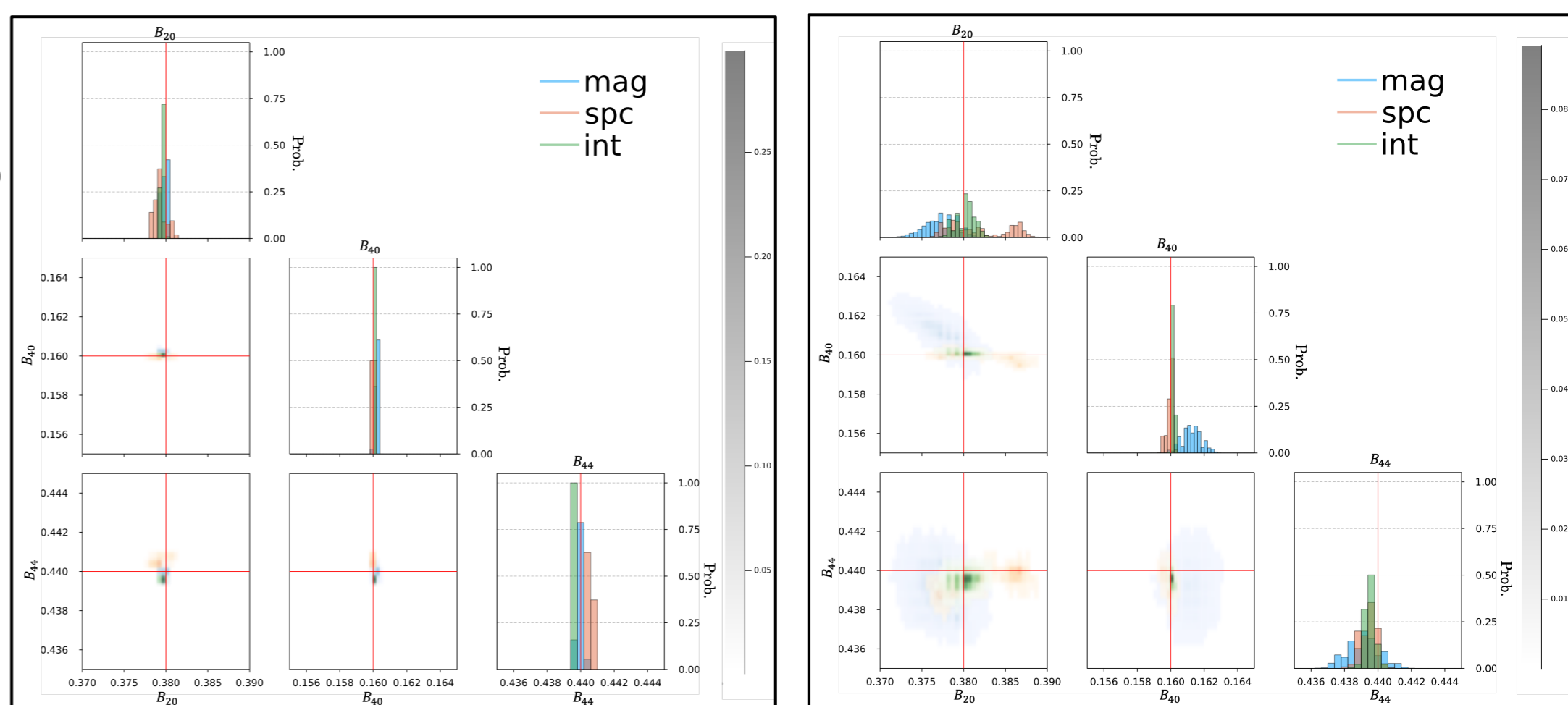


図2. 事後確率分布. [(1)ノイズ小, (2)ノイズ大]

表1. ベイズ自由エネルギーの比較.

	磁化率	比熱	統合	(磁+比)
(1)	-1276	-2034	-3386	-3310
(2)	-374	-1058	-1461	-1432

- ノイズ増大による信頼度の減少
- 統合後の事後確率分布幅が減少→統合による推定精度の向上
- ベイズ自由エネルギーの比較→統合モデルが選択

まとめ

- ✓異種計測へのベイズ統合の提案
→磁化率・比熱の異種計測結果を客観的に解釈
- ✓4f希土類イオンの正方晶に適用
→情報を統合することで推定精度が向上
→統合モデルが選択