

ベイズ統合による結晶場ハミルトニアンパラメータ推定

西村怜^A, 片上舜^A, 永田賢二^B, 水牧仁一郎^C, 岡田真人^A
(東大新領域^A、NIMS^B、JASRI^C)

目次

1. 背景
2. モデル紹介
 1. 4f希土類イオンの結晶モデル
 2. ベイズ推論とベイズ統合
 3. 確率モデル
 4. 交換モンテカルロ法による推論
3. 実験
4. 結論

目次

1. 背景

2. モデル紹介

1. 4f希土類イオンの結晶モデル

2. ベイズ推論とベイズ統合

3. 確率モデル

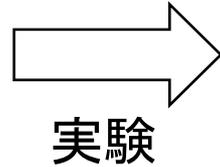
4. 交換モンテカルロ法による推論

3. 実験

4. 結論

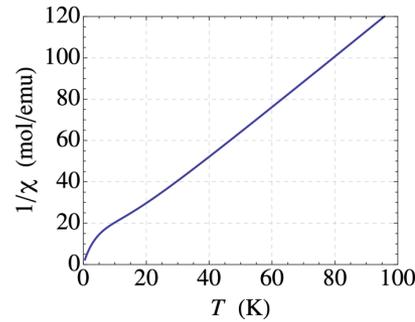
従来のパラメータ推定

対象とする
物理系

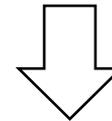
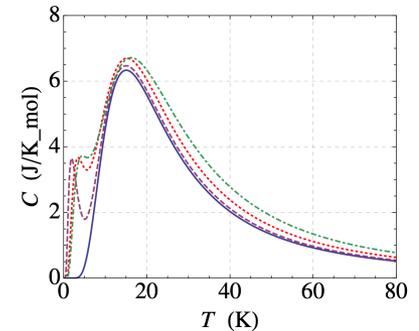


複数の観測データ

磁化率



比熱



物理系を決定するパラメータを推定

従来の解析法の問題点

- ・ 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
- ・ 局所解におちいる可能性が存在する
- ・ 複数の推定結果を主観的に解釈する

ベイズ推論の導入

従来解析法の問題点

- ・ 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
- ・ 局所解におちいる可能性が存在する
- ・ 複数の推定結果を主観的に解釈する



ベイズ推論の導入

- ・ ベイズ推論を用いることで推定値と推定精度両方を得ることができる
- ・ ベイズ推論を用いた統合法（ベイズ統合）を用いることで客観的な同時解析が可能

目次

1. 背景

2. モデル紹介

1. 4f希土類イオンの結晶モデル

2. ベイズ推論とベイズ統合

3. 確率モデル

4. 交換モンテカルロ法による推論

3. 実験

4. 結論

4f希土類イオンの結晶モデル

結晶場ハミルトニアン

$$\text{正方晶} : \hat{H}_{\text{CEF}} = B_{20}\hat{O}_{20} + B_{40}\hat{O}_{40} + B_{44}\hat{O}_{44}$$

$$\text{立方晶} : H_{\text{CEF}} = B_{40}(O_{40} + 5B_{44})$$

※等価演算子

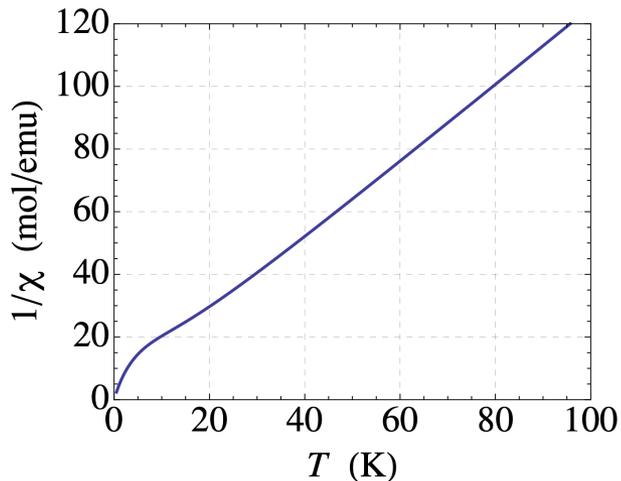
$$\hat{O}_{20} = 3J_z^2 - J(J+1)$$

$$\hat{O}_{40} = 35J_z^4 - 30J(J+1)J_z^2 - 6J(J+1) + 3J^2(J+1)^2$$

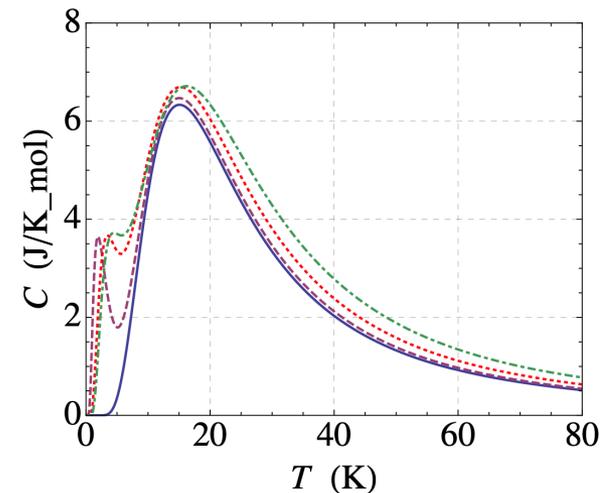
$$\hat{O}_{44} = \frac{1}{2}(J_+^4 - J_-^4)$$

観測データ生成

磁化率

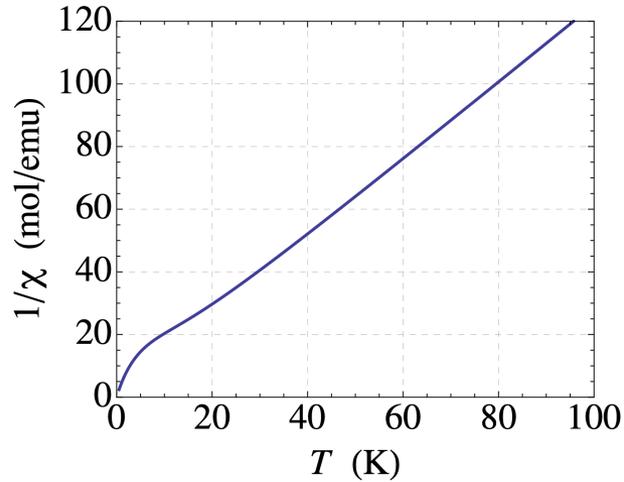


比熱

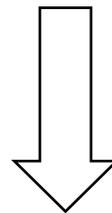
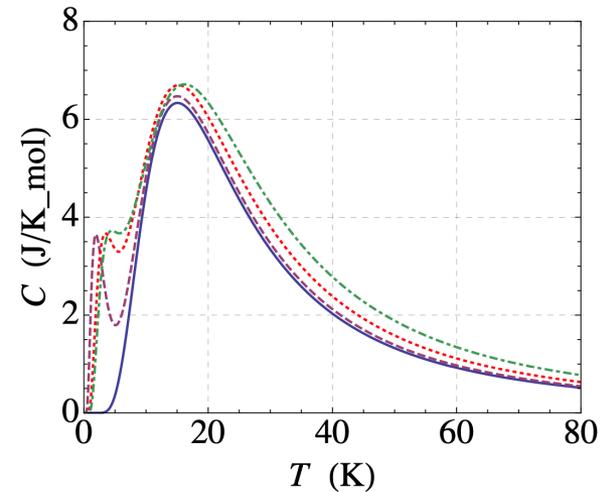


4f希土類イオンの結晶モデル

磁化率



比熱



パラメータの推定

立方晶 : $H_{\text{CEF}} = B_{40}(0_{40} + 5B_{44})$

4f希土類イオンの結晶モデル

磁化率と比熱の値

結晶場と磁場が存在する状態でのハミルトニアン

$$H = H_{\text{CEF}} + g\mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{H}$$

温度 T での磁気モーメントの期待値

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

自由エネルギー

$$F = -k_B T \ln Z$$

エントロピー

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

比熱

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

※ H の i 番目の固有値 : E_i

H の i 番目の固有ベクトル : $|\varphi_i\rangle$

※ $Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T}$ (Z は分配関数)

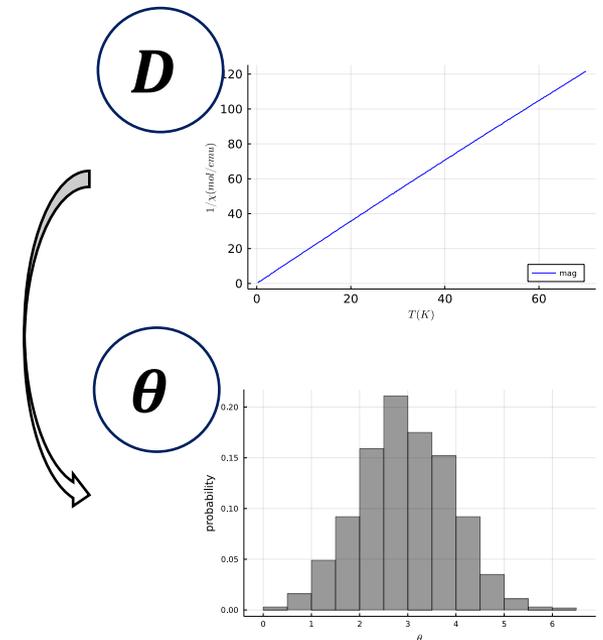
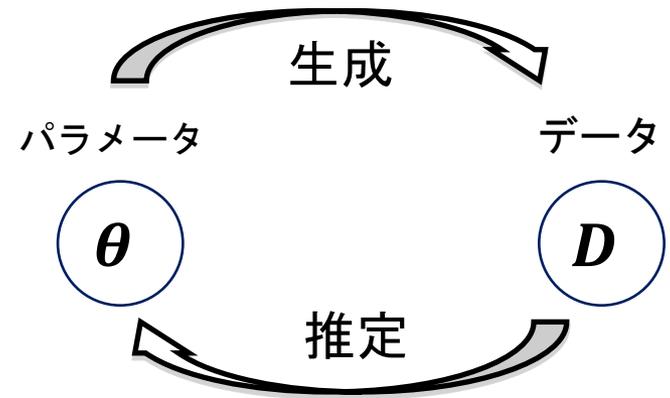
ベイズ推定

- ・ベイズ推論: 計測データの生成を確率モデルとして定式化
- ・ベイズの定理により推定パラメータの事後確率を求める

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{\int p(D|\theta)p(\theta)d\theta}$$

$p(\theta)$: 事前確率分布
 $p(D|\theta)$: 尤度関数
 $p(\theta|D)$: 事後確率分布

- ・パラメータの値と精度の両方を推定可能
- ・全パラメータ空間を自動で探索するため、客観的な解析が可能



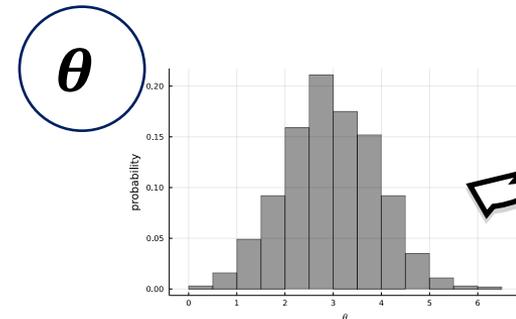
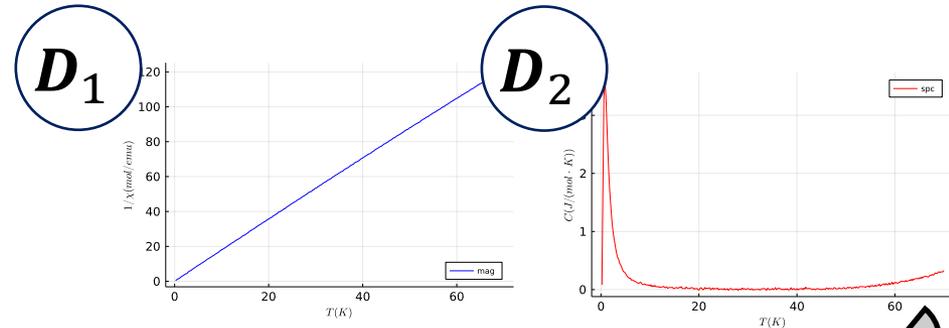
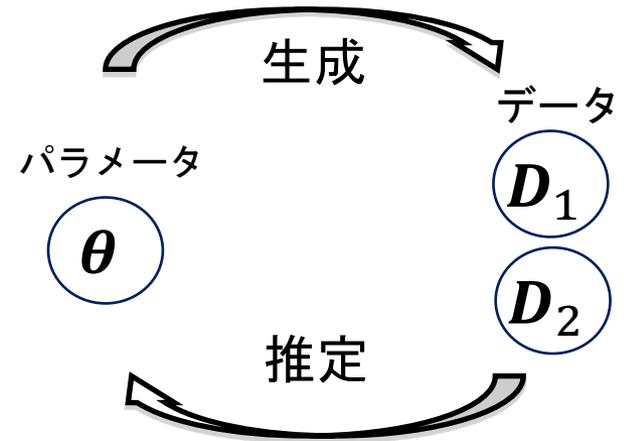
ベイズ統合

ベイズの定理で推定パラメータの事後分布 $p(\theta|D_1, D_2)$ を求める

$$\begin{aligned} p(\theta|D_1, D_2) &= \frac{p(D_1, D_2 | \theta)p(\theta)}{\int p(D_1, D_2 | \theta)p(\theta)d\theta} \\ &= \frac{p(D_1 | \theta)p(D_2 | \theta)p(\theta)}{\int p(D_1 | \theta)p(D_2 | \theta)p(\theta)d\theta} \end{aligned}$$

$p(\theta)$: 事前確率分布
 $p(D_1|\theta), p(D_2|\theta)$: 尤度関数
 $p(\theta|D_1, D_2)$: 事後確率分布

・ 複数のデータを統合的にベイズ推定することで客観的な同時解析が可能



確率モデル

分割モデルの尤度

$$p(\mathbf{D}_1, b_1 | \boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \exp(-N_1 b_1 E_1(\boldsymbol{\theta}))$$
$$p(\mathbf{D}_2, b_2 | \boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp(-N_2 b_2 E_2(\boldsymbol{\theta}))$$

(N : データ数, b : ノイズ強度 (ノイズ分散の逆数), $E(\boldsymbol{\theta})$: 誤差関数)

分割モデルの事後確率分布

$$p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{D}_1, b_1) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \exp(-N_1 b_1 E_1(\boldsymbol{\theta})) \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{D}_1, b_1)}$$
$$p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{D}_2, b_2) = \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp(-N_2 b_2 E_2(\boldsymbol{\theta})) \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{D}_2, b_2)}$$

確率モデル

分割モデルの尤度の積

$$p(\mathbf{D}_1, b_1 | \boldsymbol{\theta}) p(\mathbf{D}_2, b_2 | \boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp(-NbE(\boldsymbol{\theta}))$$

$$N \equiv N_1 + N_2$$

$$b \equiv b_1 + b_2$$

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

ベイズを用いると統合した
誤差関数が数式で導ける

統合モデルの事後確率分布

$$p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, b_1, b_2) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp(-NbE(\boldsymbol{\theta})) \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, b_1, b_2)}$$

ベイズ自由エネルギー

ノイズ分散 b 推定 & モデル選択
→ **ベイズ自由エネルギー**を導入

ベイズの定理

$$p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) = \frac{\overbrace{p(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 | \boldsymbol{\theta})}^{\text{尤度関数}} p(\boldsymbol{\theta})}{\underbrace{\int p(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}}_{\text{周辺尤度関数}}}$$

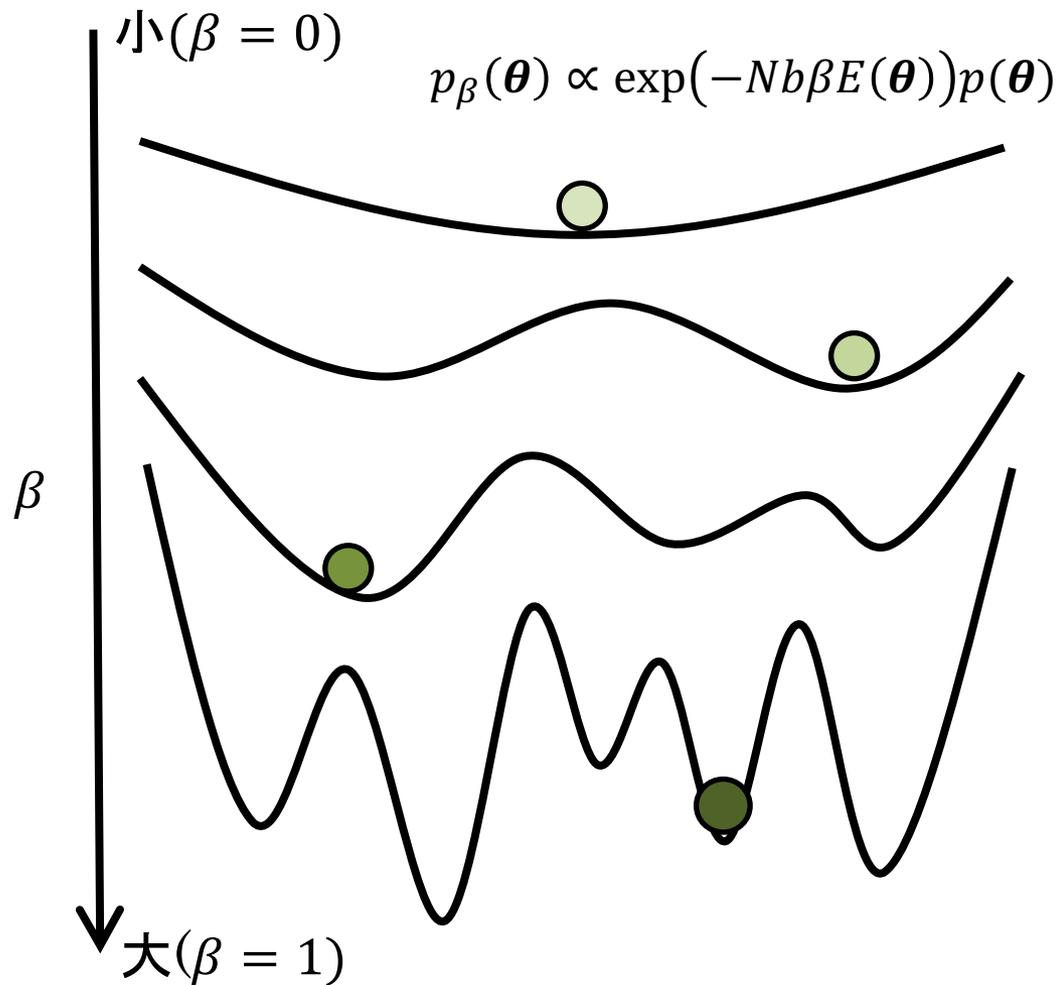
ベイズ自由エネルギー
周辺尤度関数を用いて定義

$$F(b_1) = -\ln Z(\mathbf{D}_1, b_1) = -\ln \int p(\mathbf{D}_1, b_1 | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}$$

$$F(b_2) = -\ln Z(\mathbf{D}_2, b_2) = -\ln \int p(\mathbf{D}_2, b_2 | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}$$

$$F_{\text{int}}(b_1, b_2) = -\ln Z(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, b_1, b_2) = -\ln \int p(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, b_1, b_2 | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}$$

交換モンテカルロ法



交換モンテカルロ法による
サンプリング

- ・ 複数の逆温度 β を導入
- ・ 局所解を避けたサンプリングが可能
- ・ 周辺尤度・自由エネルギーの計算

(Hukushima and Nemoto, 1996)

(Nagata et al, 2012)

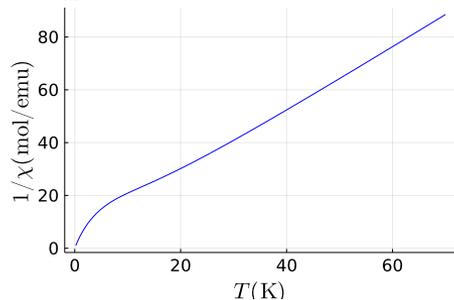
目次

1. 背景
2. モデル紹介
 1. 4f希土類イオンの結晶モデル
 2. ベイズ推論とベイズ統合
 3. 確率モデル
 4. 交換モンテカルロ法による推論
3. 実験
4. 結論

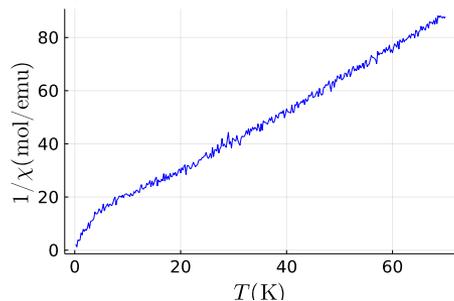
人工データ

磁化率

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

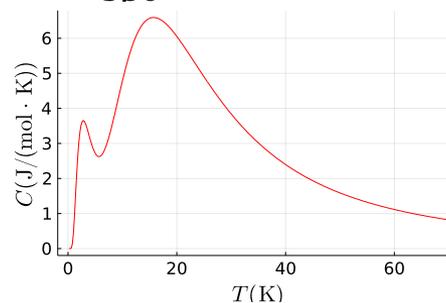


(2) $\sigma_{\text{mag}} = 10^0$

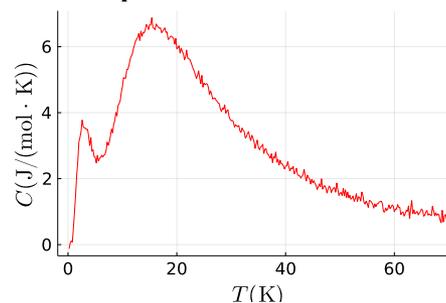


比熱

(1) $\sigma_{\text{spc}} = 10^{-3}$



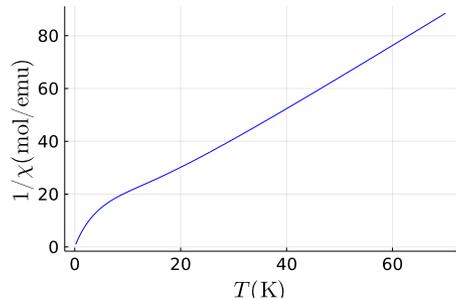
(2) $\sigma_{\text{spc}} = 10^{-1}$



ノイズ推定

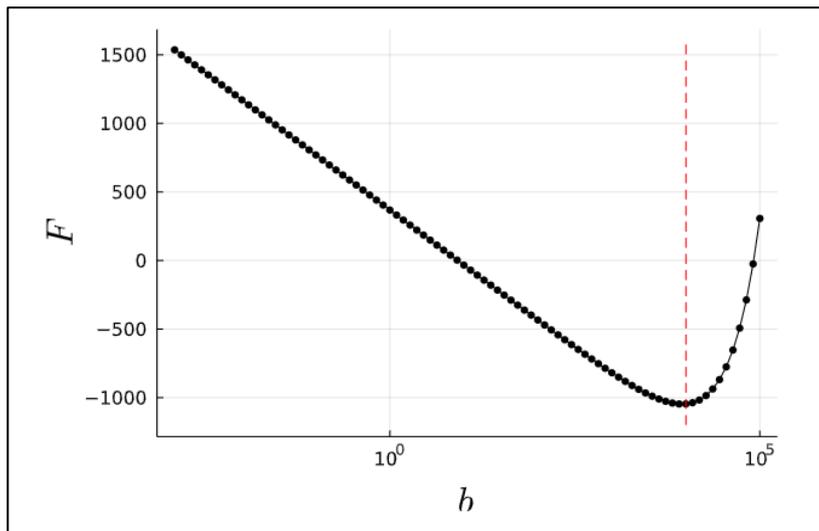
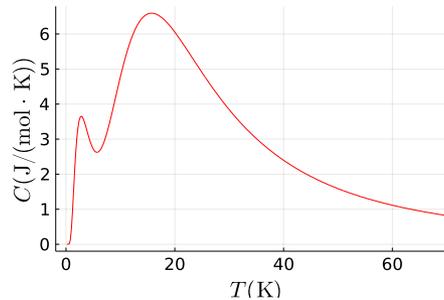
磁化率

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

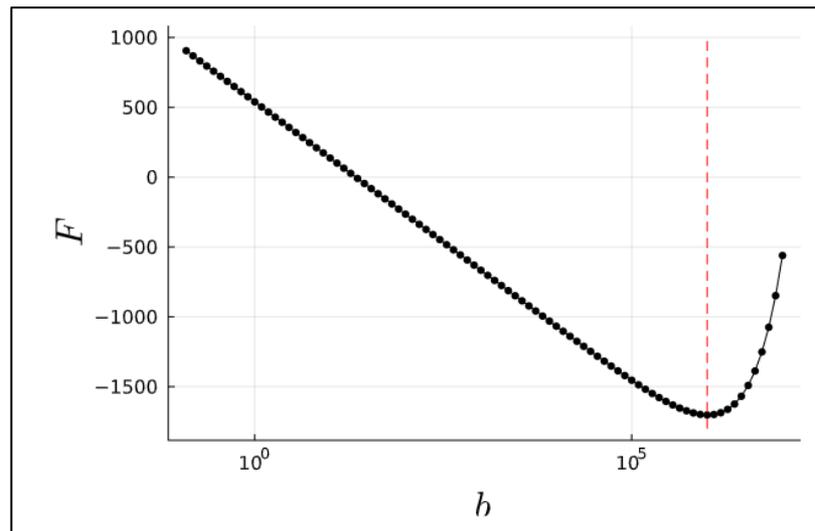


比熱

(1) $\sigma_{\text{SPC}} = 10^{-3}$



推定値 $b = 8.1113 \times 10^3$
真値 $b = 10^4$



推定値 $b = 10^6$
真値 $b = 10^6$

事後分布

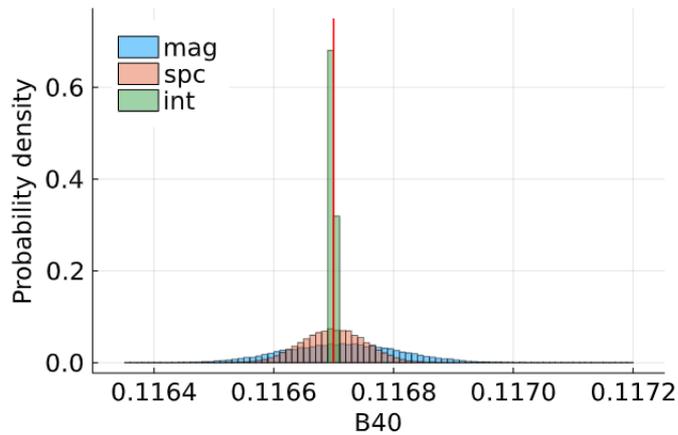
結晶場ハミルトニアン

$$H_{\text{CEF}} = B_{40}(0_{40} + 5B_{44})$$

(1)

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

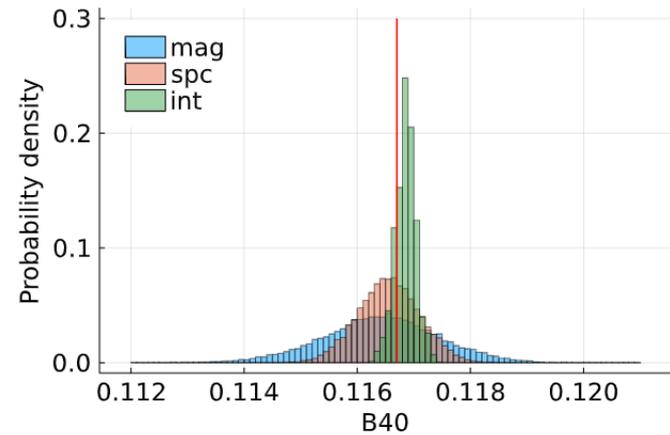
$$\sigma_{\text{spc}} = 10^{-3}$$



(2)

$$\sigma_{\text{mag}} = 10^0$$

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



統合により分布幅が減少→推定精度向上

目次

1. 背景
2. モデル紹介
 1. 4f希土類イオンの結晶モデル
 2. ベイズ推論とベイズ統合
 3. 確率モデル
 4. 交換モンテカルロ法による推論
3. 実験
4. 結論

結論

✓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