2024 年 8 月 27 日(水)

ベイズ統合

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

1. はじめに

本解説では，データ統合とは，一つの物質に対して，複数の実験/計測データが存在する場合に，どのように，それら複数の実験/計測データの統合を取り扱う枠組みを解説し，我々の構築した理論[1]の描像を用いて，データ統合をベイズ計測の枠組みで取り扱うベイズ統合を解説する．データ統合の通常法では，複数の実験/計測データの誤差関数をまず定義し，それらの線形和からなるデータ統合の誤差関数を定義する．ここで，線形和の係数は研究者が決めたり，CV(交差検証法)で決めたりしていた．従来法では，データ統合をするという立場でデータ解析が始まっており，データ統合しない場合は全く想定されていなかった．これでは，理論的枠組みとしては不十分である．そこで我々をデータ統合にベイズ計測の枠組みを適用する．

ベイズ計測(Bayesian Measurement)とは，幅広い領域を持つベイズ推論を計測科学に必要な部分だけ取り出したコンパクトな情報科学的枠組みである[2]．ベイズ計測はベイズ計測三種の神器の(1) パラメータの事後確率分布推定[3] (2) モデル選択[3] (3) ベイズ統合[4, 5]から構成される．(2)のモデル選択では，一つの実験/計測データに対して，複数のモデルが存在する場合に適用される．その実験/計測データを説明するのに相応しいモデルを一つ選ぶ枠組みである．(3)のベイズ統合では，一つの物質に対して，複数の実験/計測データが存在する場合に，どのように，それら複数の実験/計測データの統合を取り扱う枠組みである．本解説では，(3) ベイズ統合を解説する．

2. ベイズ統合の理論

ベイズ統合で重要な役割を演ずるのが自由エネルギーと自由エネルギー差である[3]．ベイズ統合ではまず，複数の実験/計測データを統合して，パラメータの事後確率分布や統合した際の自由エネルギーを求める．次に，ベイズ統合した際の自由エネルギーと，複数の実験/計測データを個別にベイズ計測で解析した際の自由エネルギーの和を比較し，その自由エネルギー差が負の場合には，ベイ

ズ統合すべきだと判断する．一方，その自由エネルギー差が負の場合には，ベイズ統合してはいけないと判断する．このようにえ一他統合で重要な役割を演ずるのが自由エネルギー差である．我々は，この解説では詳細は述べないが，このような方針で，計測データ数 N が有限の場合の理論を構築した[1].

3. ベイズ統合のメカニズムの描像[1]

常にデータ統合すべきかどうかをというベイズ統合にとっては根源的な問題をできれば解析的理論で決着をつけたいと思い，解析計算でベイズ計測を取り扱えるほぼ唯一の例として知られる線形回帰モデル $y=ax+b$ を取り上げた．線形回帰モデル $y=ax+b$ の理論は解析計算がしやすいためだけに導入する Toy モデルの理論ではない．このモデルは，系の線形応答を取り扱うための実際的なモデルであるとともに，大学理系の標準的リテラシーで取り扱われるものであるために，ベイズ計測の習得のためのロールモデルでもある．このように，計測データ数 N 有限での数値実験の解明等実際的な問題から，線形回帰モデル $y=ax+b$ の理論構築が始まるのは，大変健全なことである．

ここでは，ベイズ推論の主に自由エネルギーの理論的枠組みを俯瞰する．我々の知る限り，Schwarz により提案された BIC に代表されるように，全ての理論はデータ数 N が無限大の極限の漸近論しか議論していない．このような漸近論では，ここで議論している N が有限である場合を取り扱うことはできない．

そこで私はまず，計測データ数 N が有限の場合に，最も簡単な一変数の線形回帰モデル $y=ax$ で，統合すべきデータが二組の場合に，何がおこるかを，図 1 と 2 に示すような描像(図)を用いて考察した．

図 1 は，二つのデータの生成モデルが同一である場合をしめす．この場合は，直線回帰の係数は，二つのデータで同一の値 a_0 である．データ 1 の係数 a の事後確率分布 $p(a|D)$は，図 1 左のガウス関数のように平均 a^1 のガウス分布に従うことを簡単な計算で示せる[1]．ここで D は，N 個のデータ 1 の観測データの集合である．また，このガウス分布の分散は，$\sigma_0^2\overline{x^2}/N$ である．ここで，σ^2 は観測ガウスノイズの分散であり，$\overline{x^2}$は入力 x_i の 2 乗平均$1/N\sum_{i=1}^{N}x_i^2$である．一方，データ 2 の係数 a の事後確率分布 $p(a|D)$は，図 1 右のガウス関数のように，平均 a^2 のガウス分布に従う．ここで D は，N 個のデータ 2 の観測データの集合である．また，

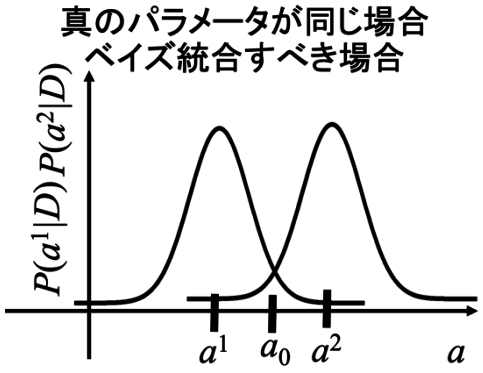


図 1: 真のパラメータが同じ場合で、ベイズ統合すべき場合

このガウス分布の分散も，$\sigma^2\ \overline{x^2}/N$ である．ここで，σ_0^2 は，観測ガウスノイズ n_i の分散である．

図 1 の左右二つのガウス分布の中心である a^1 と a^2 は，観測ガウスノイズの分散 σ^2 が小さい場合や，観測データ数 N が大きい場合，a_0 に近づく．さらに，左右二つのガウス分布の分散も $\sigma_0^2\ \overline{x^2}/N$ であるので，観測ガウスノイズの分散 σ_0^2 が小さい場合や，観測データ数 N が大きい場合，二つのガウス分布はシャープになり，δ 関数に近づいていく．その結果，データ 1 とデータ 2 の係数 a の事後確率分布 $p(a|D)$は，δ 関数が重なったようになり，a^1 と a^2 の推定値は，係数 a の真の値 a_0 に収束していく．これにより，
データ 1 とデータ 2 をベイズ統合すべきである確率がほぼ 1 になるであろう．

次に先ほどとは逆の，観測ガウスノイズの分散 σ_0^2 が大きい場合や，観測データ数 N が小さい場合は，$\sigma_0^2 N$ が大きくなるので，図 1 の左右二つのガウス分布の中心である a^1 と a^2 は，係数 a の真の値 a_0 から大きく外れ出す．さらに，左右二つのガウス分布の分散も $\sigma_0^2 N$ であるので，二つのガウス分布はブロードになる．以上二つの効果から，データ 1 とデータ 2 をベイズ統合しない方が良いという結果が得られる場合が多くなるであろう．

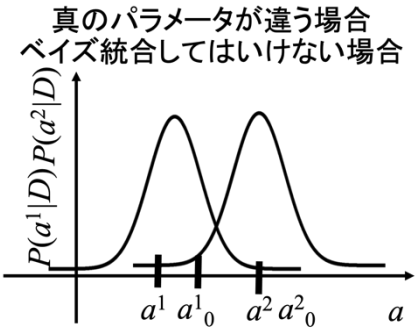


図 1: 真のパラメータが違う場合で、ベイズ統合してはいけない場合

図 2 は，二つのデータの生成モデルが異なっている場合をしめす．この場合は，直線回帰の係数の真の値は，データ 1 に対しては $a^1{}_0$ であり，データ 1 に対しては $a^2{}_0$ である．データ 1 の係数 a の事後確率分布 $p(a|D)$は，図 2 左のガウス関数のように，平均 a^1 のガウス分布に従う [1]．このガウス分布の分散は，$\sigma_0^2\overline{x^2}/N$ であり，データ 2 の係数 a の事後確率分布 $p(a|D)$は，図 1 右のガウス関数のように，平均 a^2 のガウス分布に従う．図 1 と同様に，これらのガウス分布の分散は，σ_0^2/N である．

図 2 の左右二つのガウス分布の分散は $\sigma_0^2\overline{x^2}/N$ であるので，観測ガウスノイズの分散 σ_0^2 が小さい場合や，観測データ数 N が大きい場合，二つのガウス分布はシャープになり，$a^1{}_0$ を中心とする δ 関数と $a^2{}_0$ を中心とする δ 関数の 2 本の δ 関数に近づいていく．その結果，a^1 と a^2 の推定値は，それぞれ別の係数 a の真の値 $a^1{}_0$ と $a^2{}_0$ に収束していく．これにより，データ 1 とデータ 2 をベイズ統合すべきでない確率がほぼ 1 になるであろう．

次に先ほどとは逆の，観測ガウスノイズの分散 σ_0^2 が大きい場合や，観測データ数 N が小さい場合は，σ_0^2/N が大きくなるので，図 2 の左右二つのガウス分布の中心である a^1 と a^2 は，それぞれのデータ生成のモデルの係数の真の値 $a^1{}_0$ と

a^2_0 から大きく外れ出す．さらに，左右二つのガウス分布の分散も σ_0^2/N であるので，二つのガウス分布はブロードになる．以上二つの効果から，データ 1 とデータ 2 をベイズ統合した方が良いという結果が偶然得られる場合が多くなるであろう．

以上まとめると，常にデータ統合すべきかどうかをというベイズ統合にとっては根源的な問題をできれば解析的理論で決着をつけるために線形回帰モデル $y=ax+b$ を取り上げた．その結果，ベイズ統合では，真のパラメータが同じ場合で、データ統合すべき場合と真のパラメータが違う場合で、データ統合してはいけない場合のそれぞれに対して，観測ガウスノイズの分散 σ_0^2 が小さい場合や，観測データ数 N が大きい場合，統合するかしないかに対して正しく判断できることを示した．また，観測ガウスノイズの分散 σ^2 が小さい場合や，観測データ数 N が大きい場合，データ統合に関して間違った判断をする場合があることがわかった．また，それぞれの場合の確率を，定量的に議論できるのではないかという可能性があることとがわかった．ここでまとめたように，データ統合に関して，データ統合するかしないかの判断ができるのは，パラメータの確率分布の推定を行っているベイズ統合だけで，通常のデータ統合する前提の手法では，当然それは無理であり，今後のデータ統合に関して，ベイズ統合は必須の情報数理的枠組みであることがわかった．

4.1.2 ベイズ統合の理論[1]

本説では，我々の理論[1]で得られた結果を紹介する．計測データ数 N が有限のケースを取り扱うために，i 番目のデータ x_i ，i 番目のデータに重畳された平均 0 分散 σ_0^2 の観測ノイズ n_i の三つの統計量を導入した．

$$\tau_1 = \frac{1}{N\overline{x^2}}\sum_{i=1}^{N} x_i\, n_i$$

$$\tau_2 = \frac{1}{N}\sum_{\mathrm{i}=1}^{N} n_i$$

$$\upsilon = \frac{1}{N}\sum_{\mathrm{i}=1}^{N} n_i^2$$

ここで x_i は i 番目のデータであり，n_i は i 番目のデータに重畳された平均 0 分散 σ_0^2 の観測ノイズである．また，$\overline{x^2}$は入力の 2 乗平均である

$\overline{x^2} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i^2$ ．また，υはχ二乗分布に従う確率変数である．

二つのモデルが同一でデータ統合した方が良い場合

ここでは，3-1 ベイズ統合のメカニズムの描像との対応を取るために，線形回帰 y=ax について議論する．

まず，二つのモデルが同一でデータ統合した方が良い場合を議論しよう．係数の真の値は a_0=2.0 であり，観測ガウスノイズの平均は 0 で分散は $\sigma_0^2 = 1.0$ であるとする．

図 7 は，ベイズ統合に関する自由エネルギー差 ΔF の確率分布のであり，横軸は ΔF であり，縦軸はその ΔF での確率分布である．自由エネルギー差 ΔF の確率分布をもとめるための積分をサンプル数 100,000 サンプリングで近似している．観測データ数 N は(a) N=5, (b) N=100, (c) N=1000 である．黒の実線は，理論曲線である．

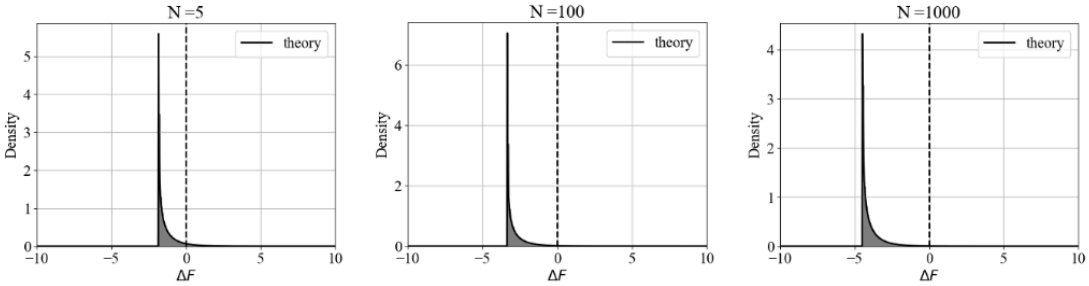
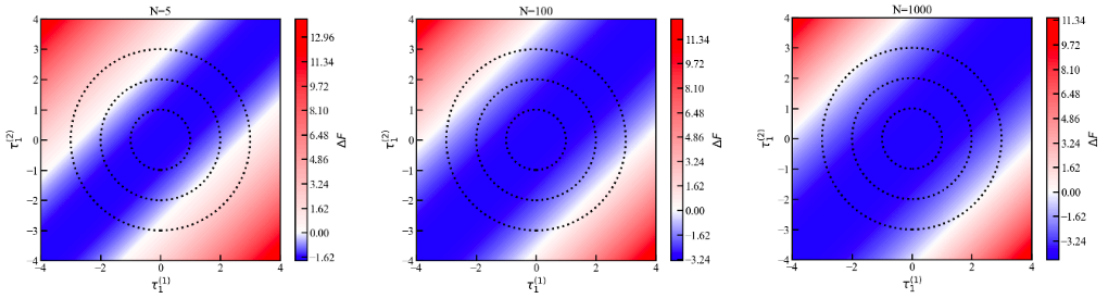


図 7: サンプル数 100,000 でのベイズ統合に関する自由エネルギー差 ΔF の確率分布である． a_0=2.0, $\sigma_0^2 = 1.0$ で、観測データ数 N は(a) N=5, (b) N=100, (c) N=1000 である．黒の実線は，自由エネルギー差の確率分布の理論曲線である．



(a) (b) (c)

図 8: (a) N=5, (b) N=100, (c) N=1000 に関する，$a^{(1)}$=2.0 と $a^{(2)}$=2.0 の時の自由エネルギー差 ΔF の τ_1 と τ_2 に対するヒートマップである．中央の半径 1, 2, 3 の三つの円は，τ_1 と τ_2 の二次元ガウス分布を表す．τ_1 と τ_2 の半径 1 の円は 39%を表し，径 1 の円は 86%を表し，半径 3 の円は 98%を表す．

図 7 (a), (b), (c)を比較すると，(a)の N=5 では，自由エネルギー差 ΔF の確率分布は若干正の部分を持ち，データ統合した方が良い場合であるにも関わらず，ベイズ統

合の結果はデータ統合してはいけないと判断する場合が若干ある. 図 7 (b) N=100 や (c) N=1000 になると, 自由エネルギー差ΔFの確率分布はすべて負のところにのみ値を持ち, ベイズ統合の結果は, データ統合せよと正しく判断されている. ここから, 実際の実験計測でも, 計測点数が 100 以上であれば, 正しくデータ統合するか否かが判断モデル選択できることがわかる.

図 8 は, ベイズに統合に関する, τ_1とτ_2に依存する自由エネルギー差ΔFの確率分布を理論的に求めた 2 次元ヒートマップである. 図 8 (a), (b), (c)とも, ヒートマップが斜めになっているのは, 3-1 ベイズ統合のメカニズムの描像の図 1 の二つのパラメータの事後分布が同時に同じ方向に動いた時に, ベイズ統合の自由エネルギー差ΔFが変わらないことを表している. 図 7 と図 8 の(a), (b), (c)がそれぞれ対応する. 図 8 (a)の N=5 では, 中央の青い帯が N=100 や N=1000 に比べて狭いので, 自由エネルギー差ΔFは正の部分を持ち, データ統合をするべき場合であるが, しないように間違えて判断する場合が生じる. これが図 7 (a)で, 自由エネルギー差ΔFが正の確率を若干持つことに対応する. 図 8 (b)の N=100 や(c)の N=1000 になると, 自由エネルギー差ΔFはすべて負の値を持ち, データ統合すべきと正しく判断している. 図 8 は, τ_1とτ_2を積分消去していない分, 図 7 よりも, モデル選択の結果を定性的に理解しやすくなっている. このため, 図 8 は 3-1 のベイズ統合メカニズムの描像との対応が非常に明白で分かりやすい.

二つのモデルが異なり, データ統合しない方が良い場合

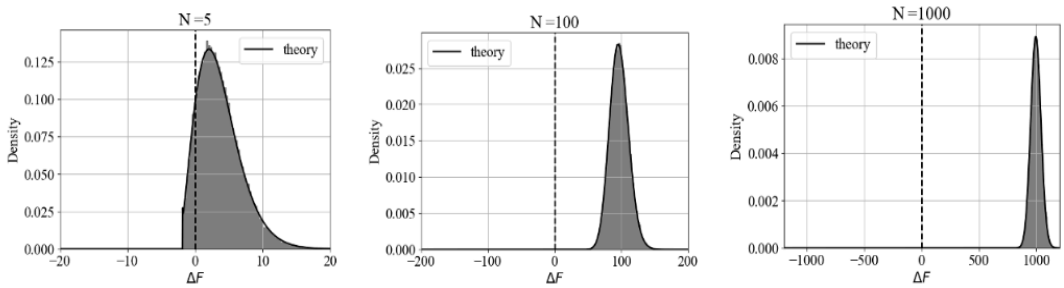
次に, 二つのモデルが異なり, データ統合しない方が良い場合を議論しよう. 二つのデータを生成した線形回帰モデル $y=ax$ の係数の真の値を $a^{(1)}$=2.0 と $a^{(2)}$=2.0 とし, 観測ガウスノイズの平均は 0 で分散は $\sigma_0^2 = 1.0$ であるとする.

図 9 は, ベイズ統合に関する自由エネルギー差ΔFの確率分布のであり, 横軸はΔFであり, 縦軸はそのΔFでの確率分布である. 自由エネルギー差ΔFの確率分布をもとめるための積分をサンプル数 100,000 サンプリングで近似している. 観測データ数 N は(a) N=5, (b) N=100, (c) N=1000 である. 黒の実線は, 理論曲線である. 図 9 (a), (b), (c)を比較すると, (a)の N=5 では, 自由エネルギー差ΔFの確率分布は負の部分を持ち, データ統合しない方が良い場合である関わらず, ベイズ統合の結果はデータ統合すると判断する場合がある. 図 9 (b) N=100 や(c) N=1000 になると, 自由エネルギー差ΔF の確率分布はすべて正のところにのみ値を持ち, ベイズ統合の結果は, データ統合してはいけないと正しく判断されている. ここから, 実際の実験計測でも, 計測点数が 100 以上であれば, 正しくデータ統合するか否かが判断できることがわかる.

図 10 は, ベイズに統合に関する, τ_1とτ_2に依存する自由エネルギー差ΔFの確率分布を理論的に求めた 2 次元ヒートマップである. 図 10 (a), (b), (c)とも, ヒートマッ

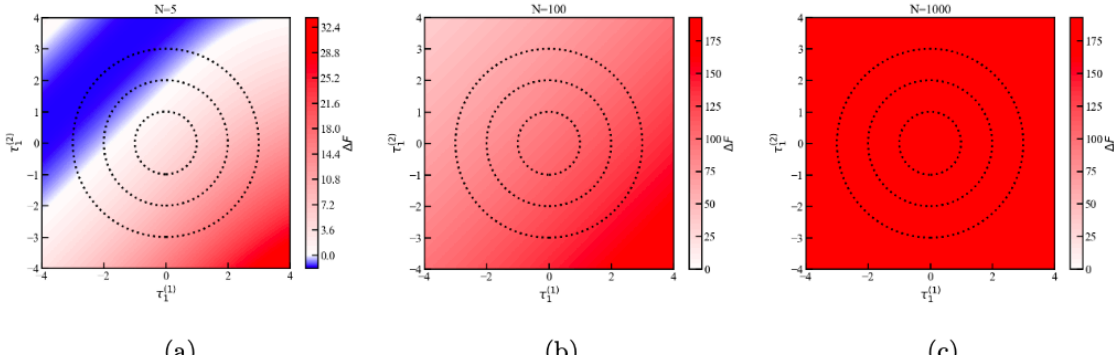
プが斜めになっているのは，3-1 ベイズ統合のメカニズムの描像の図 2 の二つのパラメータの事後分布が同時に同じ方向に動いた時に，ベイズ統合の自由エネルギー差 ΔF が変わらないことを表している．図 9 と図 10 の(a), (b), (c)がそれぞれ対応する. 図 10 (a)の N=5 では，青い帯が左上にある. これは，τ_1 が正でと τ_2 が負の場合に，3-1 ベイズ統合のメカニズムの描像の図 2 の二つのガウス分布が重なり合って，自由エネルギー差 ΔF が負になり，同一データで統合すべきだとだと誤って判断してしまうことを表現している．図 10 (b)の N=100 や(c)の N=1000 では，青い帯が図では見えないぐらいに原点より離れるので，自由エネルギー差 ΔF は常に正の部分を持ち，データ統合をすべきでないと判断する.

図 10 は，τ_1 と τ_2 を積分消去していない分，図 9 よりも，モデル選択の結果を定性的に



(a) (b) (c)

図 9: サンプル数 100,000 でのベイズ統合に関する自由エネルギー差 ΔF の確率分布である． $a^{(1)}$=2.0, $a^{(2)}$=4.0 σ_0^2 = 1.0 で，観測データ数 N は(a) N=5, (b) N=100, (c) N=1000 である. 黒の実線は，自由エネルギー差の確率分布の理論曲線である.



(a) (b) (c)

図 10: (a) N=5, (b) N=100, (c) N=1000 に関する，$a^{(1)}$=2.0, $a^{(2)}$=4.0 の時の自由エネルギー差 ΔF の τ_1 と τ_2 に対するヒートマップである. 中央の半径 1, 2, 3 の三つの円は，τ_1 と τ_2 の二次元ガウス分布を表す. τ_1 と τ_2 の半径 1 の円は 39%を表し，径 1 の円は 86%を表し，半径 3 の円は 98%を表す.

理解しやすくなっている. このため, 図 10 は 3-1 のベイズ統合メカニズムの描像との対応が非常に明白で分かりやすい.

2. まとめ

本解説では, ベイズ計測(Bayesian Measurement)の三種の神器のうち，(3) ベイズ統合[4, 5]の解説を行なった．ベイズ統合の両方で重要な役割を演ずるのが自由エネルギーと自由エネルギー差である[3].

データ統合の基本的課題としては，データ統合すべきかどうかをというベイズ統合にとっては根源的な問題を取り扱った。我々は, 解析計算でベイズ計測を取り扱えるほぼ唯一の例として知られる線形回帰モデル $y=ax+b$ を取り上げた．線形回帰モデル $y=ax+b$ の理論は解析計算がしやすいためだけに導入する Toy モデルの理論ではない．このモデルは, 系の線形応答を取り扱うための実際的なモデルであるとともに，大学理系の標準的リテラシーで取り扱われるものであるために，ベイズ計測の習得のためのロールモデルでもある．

本解説では, $y=ax+b$ を例にして，データ統合すべき場合と，すべきでない場合の描像を描いた．これにより，ベイズ統合を用いれば，データ統合すべきかどうかをというベイズ統合にとっては根源的な問題を，ベイズ計測の枠組みで取り扱うことできることを解説した．

参考文献

[1] Katakami, Kashiwamura, Nagata, Mizumaki and Okada, “Mesoscopic Bayesian Inference by Solvable Models”
https://arxiv.org/abs/2406.02869
[2] Nagata, Muraoka, Mototake, Sasaki and Masato Okada, “Bayesian Spectral Deconvolution Based on Poisson Distribution: Bayesian Measurement and Virtual Measurement Analytics (VMA)”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 88(4) 044003 - 044003 (2019)
[3] Nagata, Sugita and Okada, “Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Ca rlo method”, *Neural Networks*, **28**, 82-89 (2012)
[4] Yokoyama, Uozumi, Nagata, Okada, and Mizumaki, “ Bayesian Integration for Hamiltonian Parameters of X-ray Photoemission and Absorption Spectroscopy”, *Journal of the Physical Society of Japan*,**90**, 034703, (2021)
[5] Nishimura, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada, "Bayesian Integration for Hamiltonian Parameters of Crystal Field", *Journal of the Physical Society of Japan* **93**, 034003, (2024)
[6] Schwarz, “Estimating the dimension of a model”, *Ann. Stat.*, **6**, 461, (1978)

謝辞
[1]の理論を共同で研究してくださった東京大学大学理学系研究科物理学専攻博士課程 2 年柏村周平氏，国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS)主任研究員永田賢二博士，熊本大学理学部物理学科水牧仁一朗教授に深く感謝する．