

# ベイズ計測と放射光科学

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

本講演のスライドは岡田研HPにて公開

[https://mns.k.u-  
tokyo.ac.jp/lab.html#overview](https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/lab.html#overview)

2025年2月6日フotonファクトリー研究会  
「放射光科学でのDX」

# 自己紹介

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
  - アモルファスシリコンの成長と構造解析
- 大阪大学大学院理学研究科(金森研) (1985 - 1987)
  - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- 三菱電機 (1987 - 1989)
  - 化合物半導体(半導体レーザー)の結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学(福島研) (1989 - 1996)
  - 畳み込み深層ニューラルネット(DCNN)
  - 情報統計力学(ベイズ推論と統計力学の数理的等価性)
- JST ERATO 川人学習動態脳プロジェクト (1996 - 2001)
  - 計算論的神経科学
- 理化学研究所 脳科学総合研究センター 甘利T(2001 - 04/06)
  - ベイズ推論, 機械学習, データ駆動型科学
- 東京大学・大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
  - 情報統計力学、データ駆動科学 (2004/07 - )

# 大阪大学大学院理学研究科(金森研) 指導教官: 小谷章雄先生(城武男先生)

Journal of the Physical Society of Japan  
Vol. 56, No. 2, February, 1987, pp. 798-809

## Many Body Effect in Inner Shell Photoemission and Photoabsorption Spectra of La Compounds

Akio KOTANI, Masato OKADA, Takeo JO,  
A. BIANCONI,<sup>†</sup> A. MARCELLI<sup>†</sup> and J. C. PARLEBAS<sup>††</sup>

*Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University,  
Toyonaka 560*

<sup>†</sup>*Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza",  
00185 Roma, Italy*

<sup>††</sup>*LMSES, Université Louis Pasteur, 67070 Strasbourg, France*

(Received October 14, 1986)

## REFERENCES

1. A. Kotani & Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* **37**, 912 (1974).
2. O. Gunnarsson & Schönhammer, *Phys. Rev.* **B27**, 4315 (1983).
3. A. Fujimori, *Phys. Rev.* **B28**, 2281 (1983).

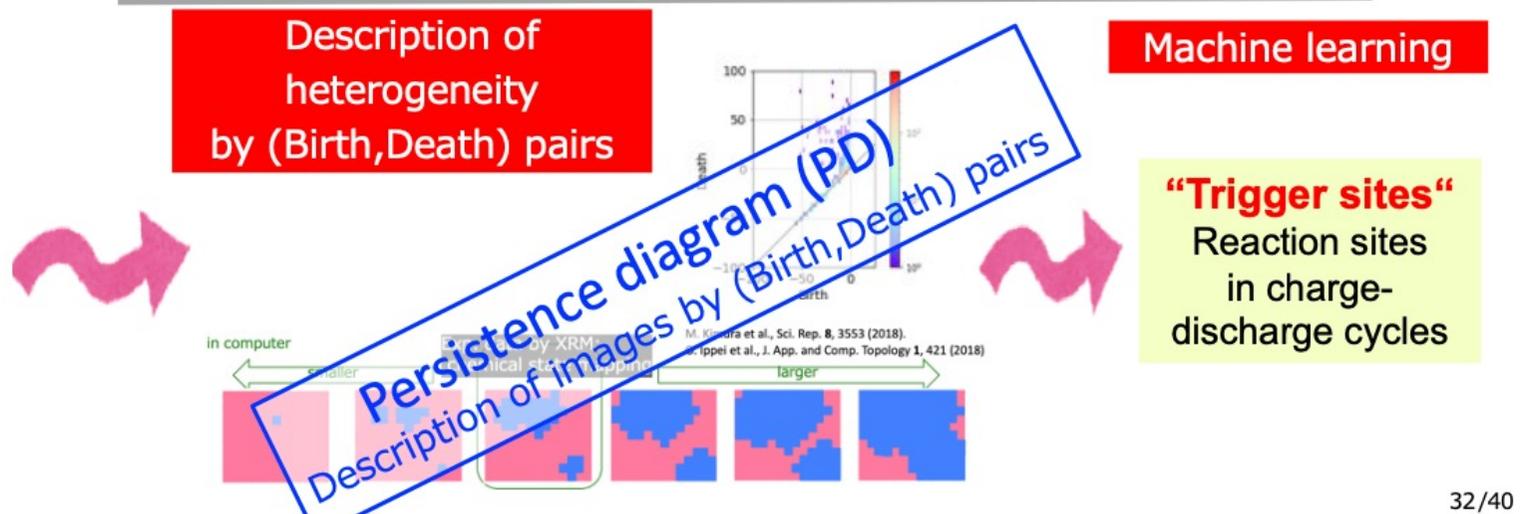
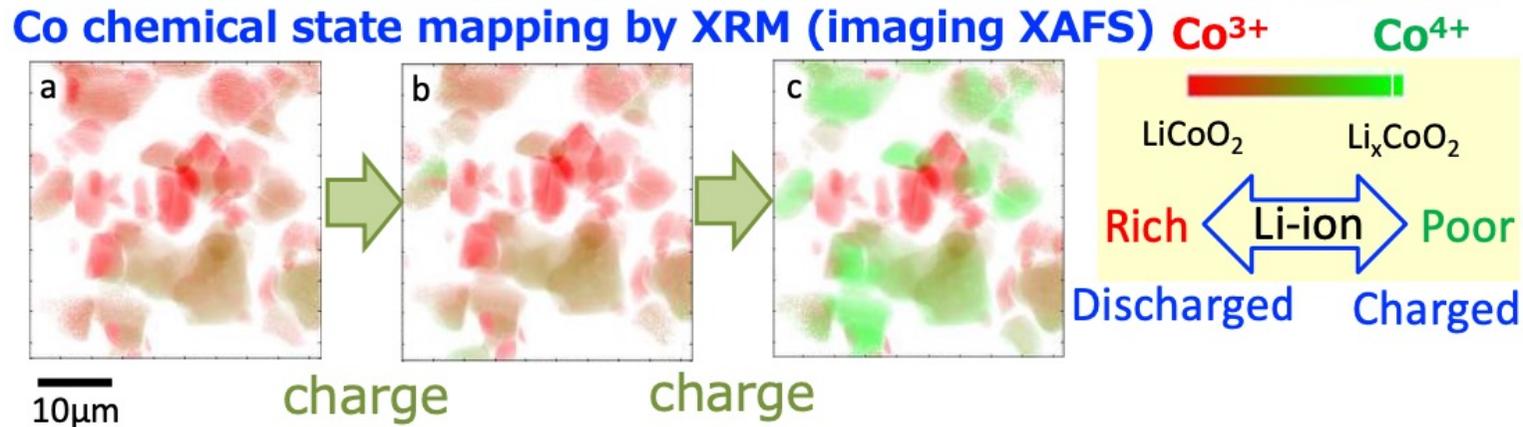
# 本講演の目的

- 計測科学にベイズ推論を適用したコンパクトな体系であるベイズ計測を紹介する。
- ベイズ計測が単なるデータ解析を超えて、実験計画まで影響を与えることを述べる。
- 木村先生と小野先生のご講演に関係する、機能発現の3+1モデルと能動学習に関する研究を紹介する。
- ベイズ計測の普及の鍵である、Spring-8全ビームラインベイズ化計画の現状を述べる。

# 内容

- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開

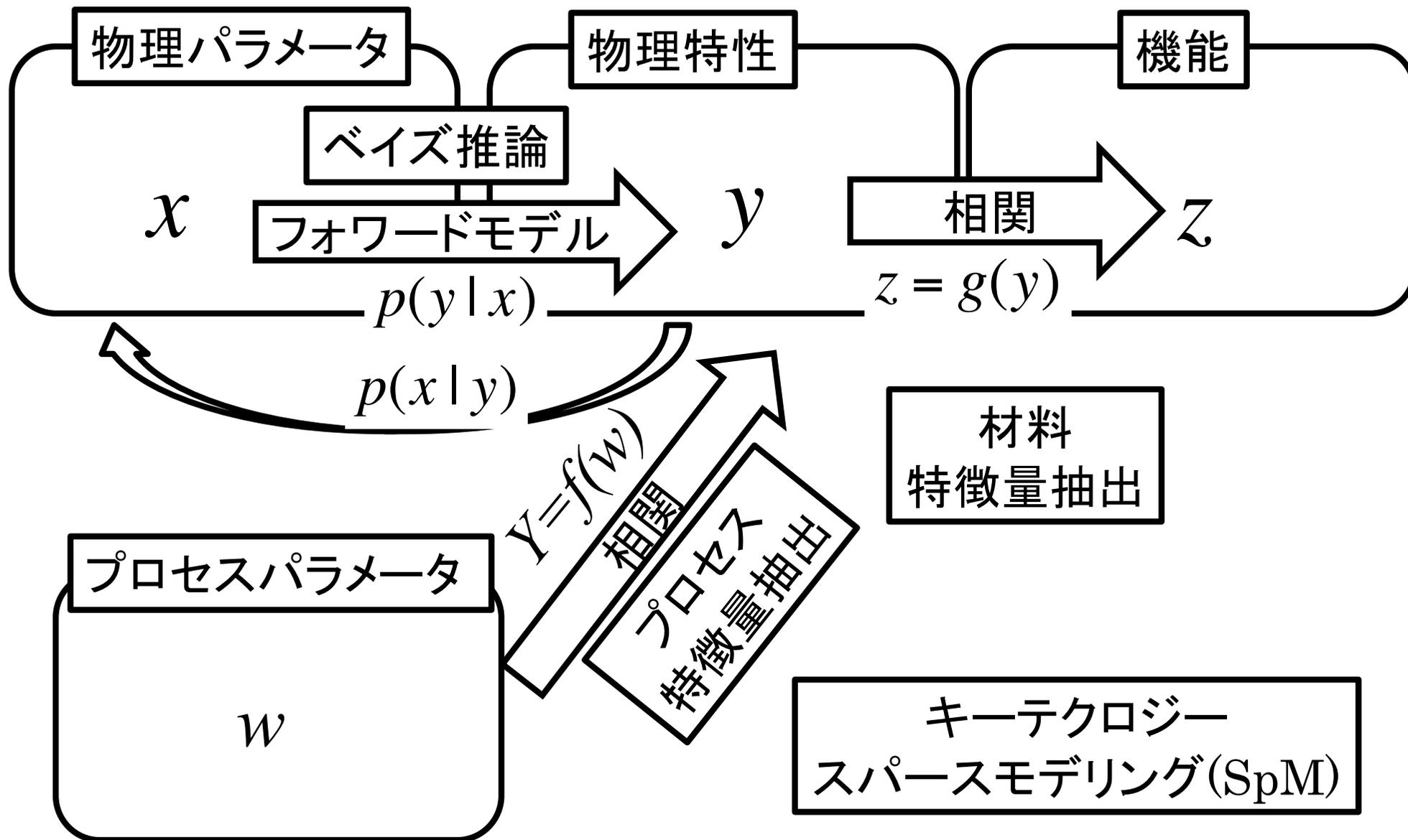
# Cathode electrode of Lithium-ion battery ~*in situ* observation by X-ray microscopy~



32/40

情報計測オンラインセミナー第65回 木村 正雄(高エネルギー加速器研究機構(KEK)・物質構造科学研究所)「X線顕微鏡多次元データのパーシステントホモロジーによる位相的データ解析」より

# 機能発現3+1モデル



Masato Okada, 2024 Nobel Prize in Physics and Chemistry:  
From neural network models to materials engineering, STAM Method, submitted.

# データ駆動科学の 二つの情報数理基盤

- ベイズ推論
  - SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- スパースモデリング
- データ駆動科学
  - これら二つを相補的に使用し、自然科学全般のデータを解析する枠組みを構築

# データ駆動科学の三つのレベル (2016)

## 計算理論(対象の科学, 計測科学)

データ解析の目的とその適切性を議論し, 実行可能な方法の論理(方略)を構築

## モデリング(統計学, 理論物理学, 数理科学)

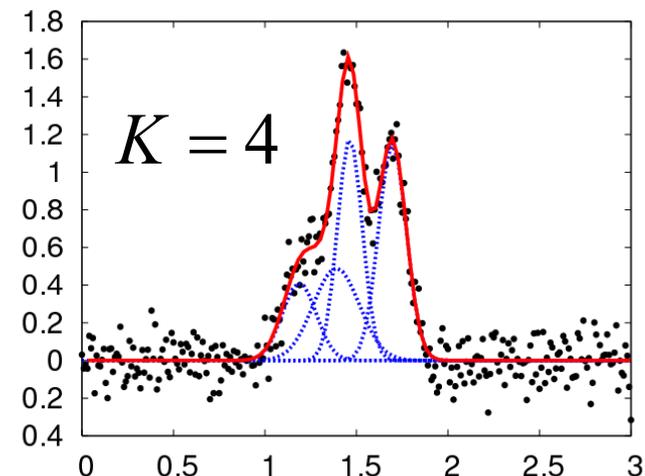
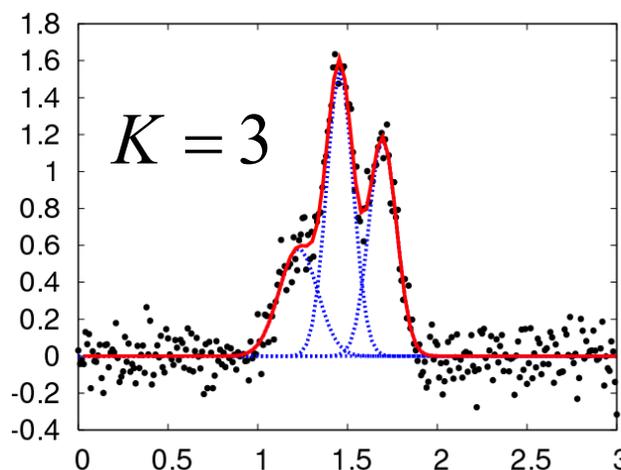
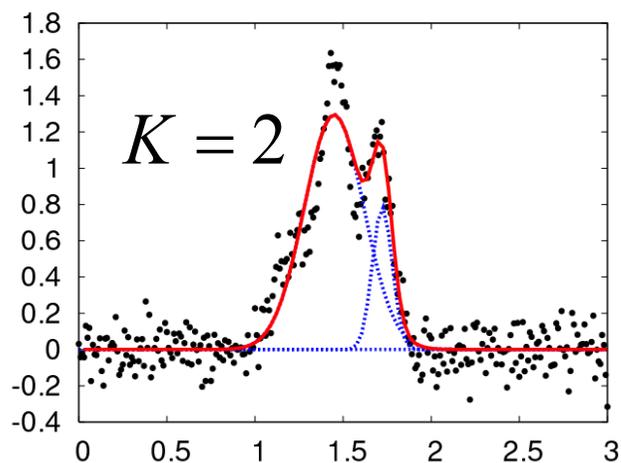
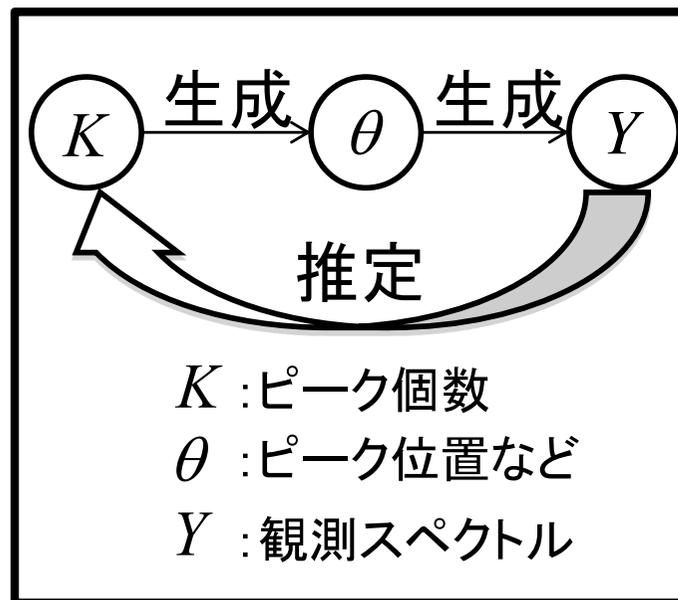
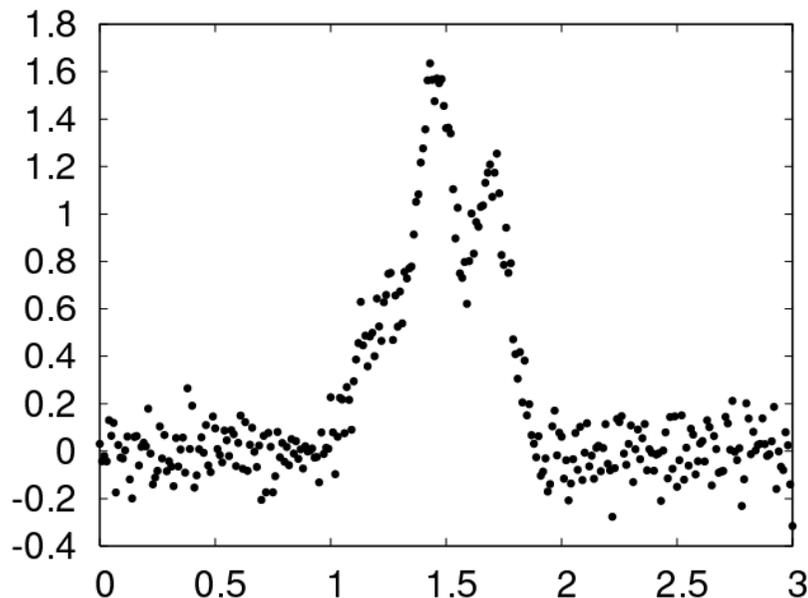
計算理論のレベルの目的, 適切さ, 方略を元に, 系をモデル化し, 計算理論を数学的に表現する

## 表現・アルゴリズム(統計学, 機械学習, 計算科学)

モデリングの結果得られた計算問題を, 実行するためのアルゴリズムを議論する.

Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, “Three Levels of Data-Driven Science”, *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.

# ベイズ的スペクトル分解: $K$ をどう選ぶか



Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# スペクトル分解の三つのレベル (1/2)

## スペクトル分解の計算理論

データ解析の目的: 多峰性スペクトルから背後にある離散電子のエネルギー準位を推定する

データ解析の適切さ: 多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和で表し、その単峰性関数の個数を推定する。

誤差関数の最小化では、単峰性関数が多い方が誤差関数は小さい。そこで統計学の交差検証誤差やベイズ的モデル選択で単峰性関数の数 $K$ を決める。

## スペクトル分解のモデリング

多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和に観測ノイズが付加されて生成するとモデリングする

# スペクトル分解の三つのレベル (2/2)

## スペクトル分解の表現・アルゴリズム

多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和に観測ノイズが付加されて生成するとモデリングし、ベイズ推論を適用することで、 $K$ 個の単峰性関数の大きさ、位置、幅の事後確率を求める。各 $K$ に対して、ベイズ的自由エネルギーを求め、ベイズ的自由エネルギーを最小にする $K$ を求める。その $K$ 個の単峰性関数の位置を、電子のエネルギー準位とする。

Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, “Three Levels of Data-Driven Science”, *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.

Nagata, Sugita and M. Okada, “Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method”, *Neural Networks*, 28, 82-89 2012.

# 内容

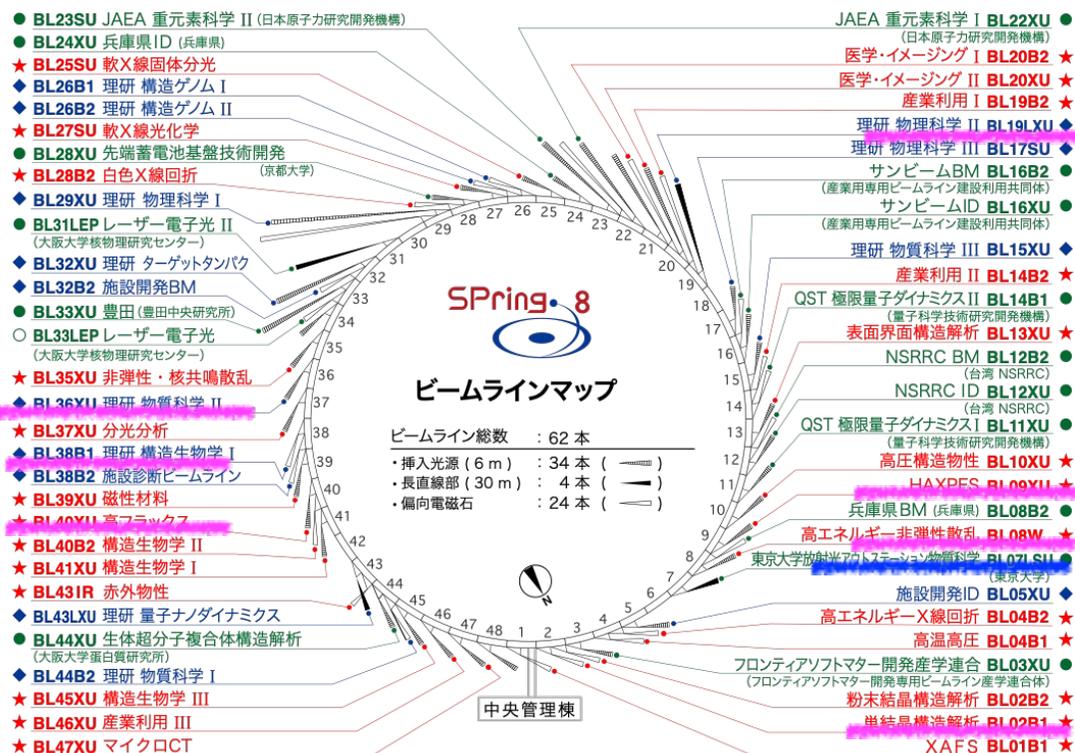
- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開

# SPring-8

- アメリカのAdvanced Photon Source (APS), ヨーロッパのEuropean Synchrotron Radiation Facility(ESRF) と合わせて, **世界3大放射光施設**.
- 理研はSPring-8を「データ創出基盤」であると言っている. **年間延べ1万人**が利用.
- APSやESRFにおいてベイズ計測は導入されていない.
- 放射光におけるベイズ計測に関しては **日本が最先端**である.

# SPring-8全ビームラインベイズ化計画

敬称略



## 情報と放射光研究者のマッチング

- メスバウアー  
BL35XU 岡田研学生+筒井
- 小角散乱  
BL08B2 岡田研学生+桑本  
BL19B2
- XAS測定  
BL37XU 岡田研学生+水牧  
BL39XU

## 放射光ユーザーへの展開

- 時分割XRD  
BL02B2 横山優一+河口彰吾、沙織  
BL10XU ユーザー: 公立大、東工大

赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本

今年(2024)年度中に14BL/26の  
ベイズ化が完了

理事長賞受賞の波及効果により、  
SPring-8全体のミッションとなり、  
ベイズ化実績によりBLが評価される体制へ

年度	2021	2022	2023
導入	2	8	14
全BL	26	26	26

# SPring-8全ビームラインベイズ化計画

- 通常では系統的手法がない、**モデル選択とデータ統合**をベイズ計測で系統的に取り扱う
- フラッグシップ戦略: ベイズ計測をSPring-8に導入し、身近な計測と他の大型計測施設への**起爆剤**とする.
- 2023年度JASRI理事長賞JASRIデータ駆動科学グループ横山優一氏受賞を契機に、全BLにベイズ計測利用の加速へ
- 2024年中に14BL/26のベイズ化が完了し、2025年中に全BLのベイズ化も完了

# SPring-8全ビームライン ベイズ化計画の波及効果

- フラッグシップ戦略もあり、追従施設が続出
- SPring-8/JASRI: 2023年3月7日
- あいちSR: 2023年10月30日
- 日本放射光学会 若手研究会: 2024年9月2日
- 台湾(NSRRC): 2024年9月4日
- 佐賀LS: 2024年10月16日
- 広大HiSOR: 2024年11月18日
- PF: 2025年2月6日

# ベイズ計測の適用例

## 東京大学 岡田研究室

- 事後分布推定 and/or モデル選択
  1. スペクトル分解
  2. X線光電子放出スペクトル(XPS)
  3. X線吸収スペクトル(XAS)
  4. メスバウアー分光
  5. X線小角散乱スペクトル
  6. NMR
  7. 中性子非弾性散乱スペクトル
  8. 比熱
  9. 帯磁率
- ベイズ統合
  1. XPSとXAS
  2. 比熱と帯磁率

## 熊本大学 赤井研究室

- 事後分布推定 and/or モデル選択
  1. フォトルミネッセンススペクトル

## 熊本大学 水牧研究室

- 事後分布推定 and/or モデル選択
  1. XRD

**ベイズ計測の枠組みは様々な計測データに適用できる**  
(シミュレーションはノートPCで実行できる場合が多い)

# 内容

- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- **ベイズ計測**
  - 計測科学の必須条件
  - **ベイズ計測三種の神器**
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開

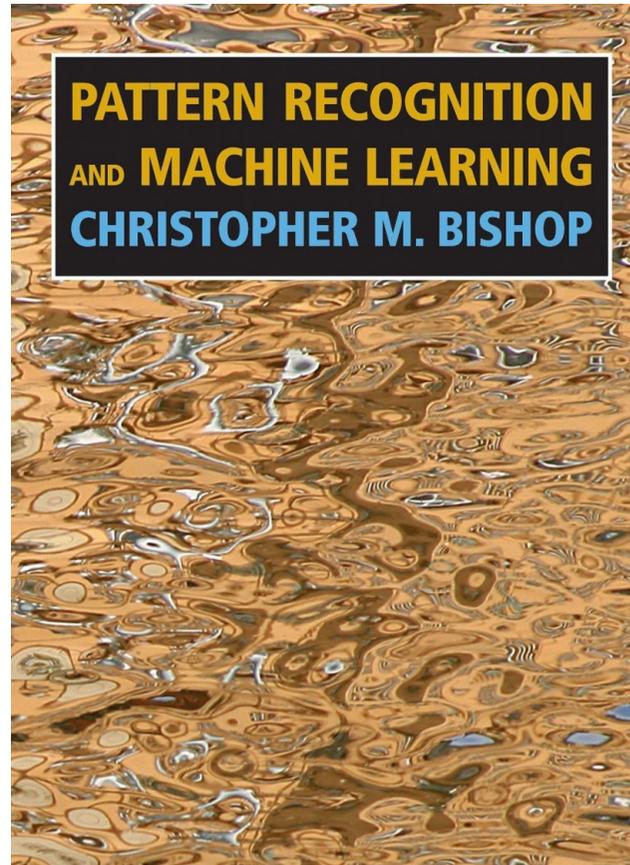
# 計測科学の必須条件

- 数理モデルのフリーパラメータを決める  
系統的枠組み
- 複数モデルをデータだけから選択する  
系統的枠組み
- 同一物質に対する複数の計測データを  
統合する系統的枠組み

# ベイズ計測

- ベイズ推論のうち計測科学に重要な三つの要素からなる情報数理科学的体系で、その三要素は**ベイズ計測三種**の神器と呼ばれる
  1. 物理パラメータの確率分布推定
  2. 同一データを説明する複数モデルをデータのみから選べるベイズ的モデル選択
  3. 同一物質に対する複数の実験データを系統的に統合するベイズ統合
- 従来の最小二乗法によるパラメータフィットでは、1.の物理パラメータの点推定しか行えない
- **パラメータフィットを超えて**: ベイズ計測では、取り扱えることが質的に異なる

# ベイズ推論とベイズ計測は違う



分厚い本を読む必要はない. 分厚い部分のほとんどは近似アルゴリズムの説明

# ベイズ計測の習得法

1.  $y=ax+b$ への解析的計算の適用
2.  $y=ax+b$ への数値計算の適用
3. 1.と2.の結果が一致するのを確認
4. ベイズ的スペクトル分解
5. OJT的に各課題に取り組む

初段に教えを乞うても初段になれず  
五段の教えを乞えば初段になれる

# 内容

- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- **ベイズ計測**
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開

# 線形回帰の可解ベイズ計測

片上舜<sup>A</sup>, 柏村周平<sup>A</sup>, 永田賢二<sup>C</sup>, 水牧仁一郎<sup>C</sup>,  
岡田真人<sup>A</sup>

A 東大新領域, B NIMS, C 熊大

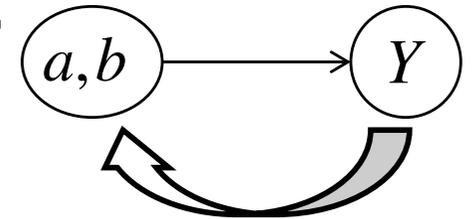
Shun Katakami, Shuhei Kashiwamura, Kenji Nagata,  
Mizumaki Masaichiro and Masato Okada, "  
Mesoscopic Bayesian Inference by Solvable Models  
", <https://arxiv.org/abs/2406.02869>

# ベイズ計測とは？

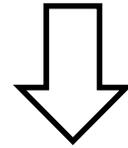
## ベイズ推論

$$p(Y, a, b) = p(Y | a, b) p(a, b) = p(a, b | Y) p(Y)$$

生成(因果律)



<ベイズの定理>



$$p(a, b | Y) = \frac{p(Y | a, b) p(a, b)}{p(Y)} \propto \exp(-nE(a, b)) p(a, b)$$

$p(a, b | Y)$  : 事後確率。データが与えられたもとでの  
物理パラメータの確率。

$p(a, b)$  : 事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。  
これまで蓄積されてきた科学的知見

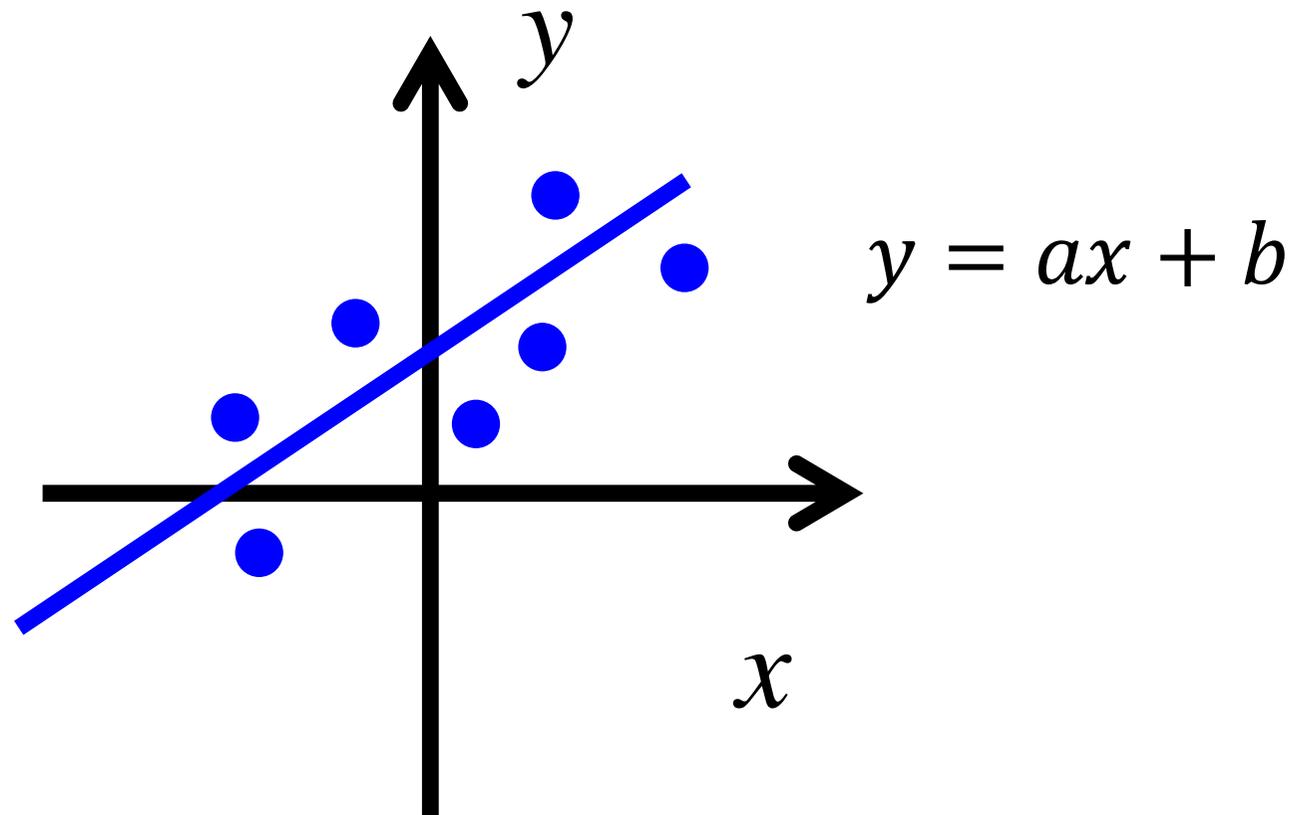
### ベイズ計測三種の神器

1. 物理パラメータの事後確率分布定
2. モデル選択
3. データ統合

# ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

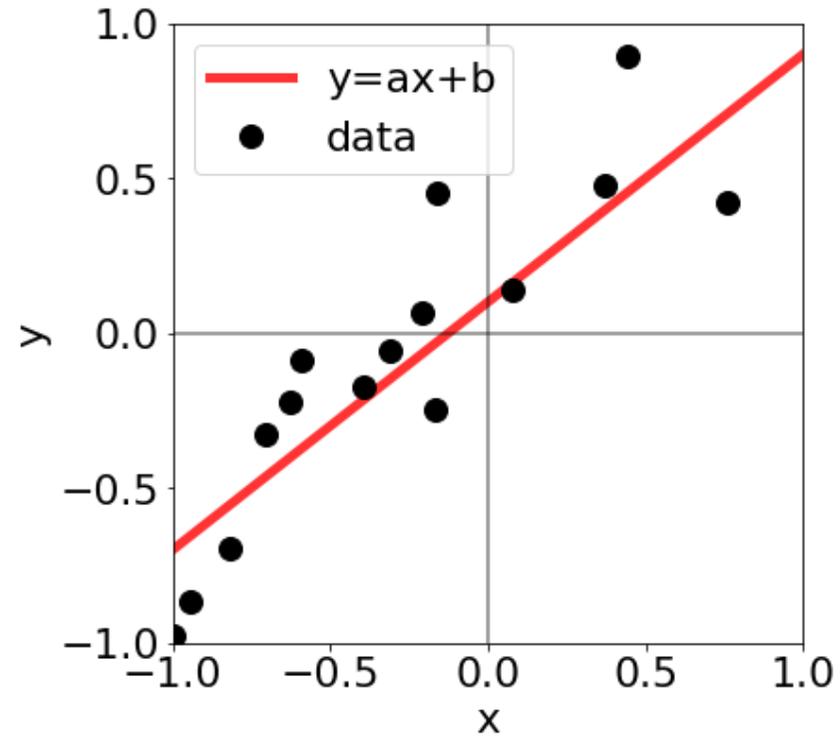
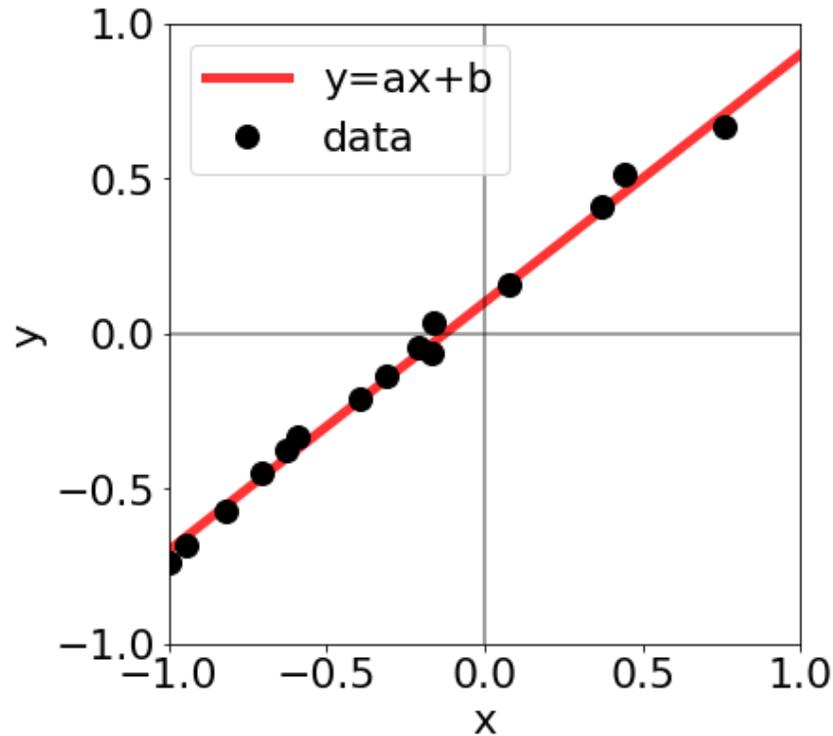
現状でも用いられている最も簡単な例



傾き  $a$  : 系の線形応答、バネ定数、電気伝導度、誘電率

# ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて



この二つの推定精度の違いを数学的に表現したい  
準備として従来手法の最小二乗法

# $y=ax+b$ の最小二乗法

$$E(a, b) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - (ax_i + b))^2$$

二乗誤差 $E(a, b)$ を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

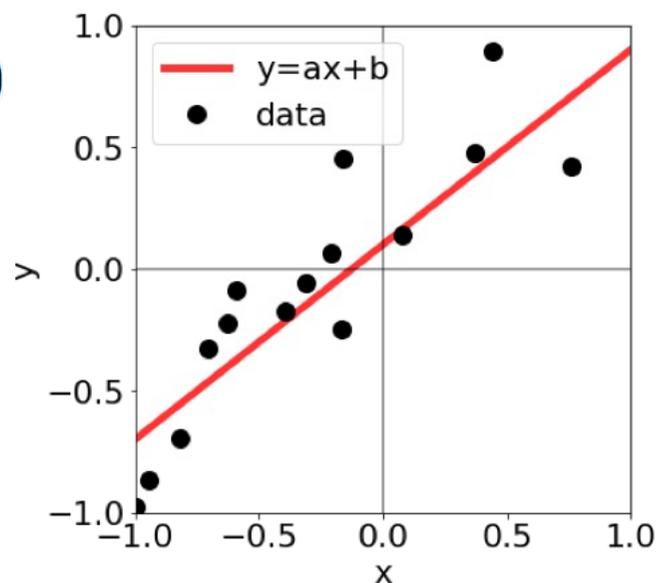
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \text{ とする場合}$$

$$E(a, b) = \frac{1}{2} \left( \overline{x^2} \left( a - \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}} \right)^2 + (b - \bar{y})^2 - \frac{\overline{xy^2}}{\overline{x^2}} - \bar{y}^2 + \bar{y}^2 \right) \quad a_0 = \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}} \quad b_0 = \bar{y}$$

$$= \mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0, b_0) \geq E(a_0, b_0)$$

$$\text{平均: } \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i, \text{ 分散: } \overline{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2$$

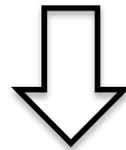
$$\overline{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



# ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定 (1/4)

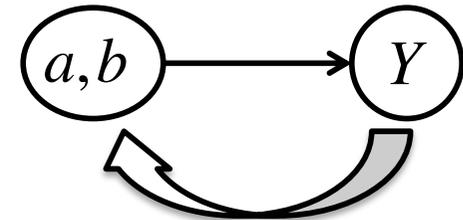
$$p(Y, a, b) = p(Y | a, b) p(a, b) = p(a, b | Y) p(Y)$$

---



<ベイズの定理>

生成(因果律)



$$p(a, b | Y) = \frac{p(Y | a, b) p(a, b)}{p(Y)} \propto \exp(-nE(a, b)) p(a, b)$$

$p(a, b | Y)$  : 事後確率。データが与えられたもとでの, パラメータの確率.

$p(a, b)$  : 事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。  
これまで蓄積されてきた科学的知見

# 神器1: パラメータの事後確率推定 (2/4)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

$$p(n_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{n_i^2}{2\sigma^2}\right)$$

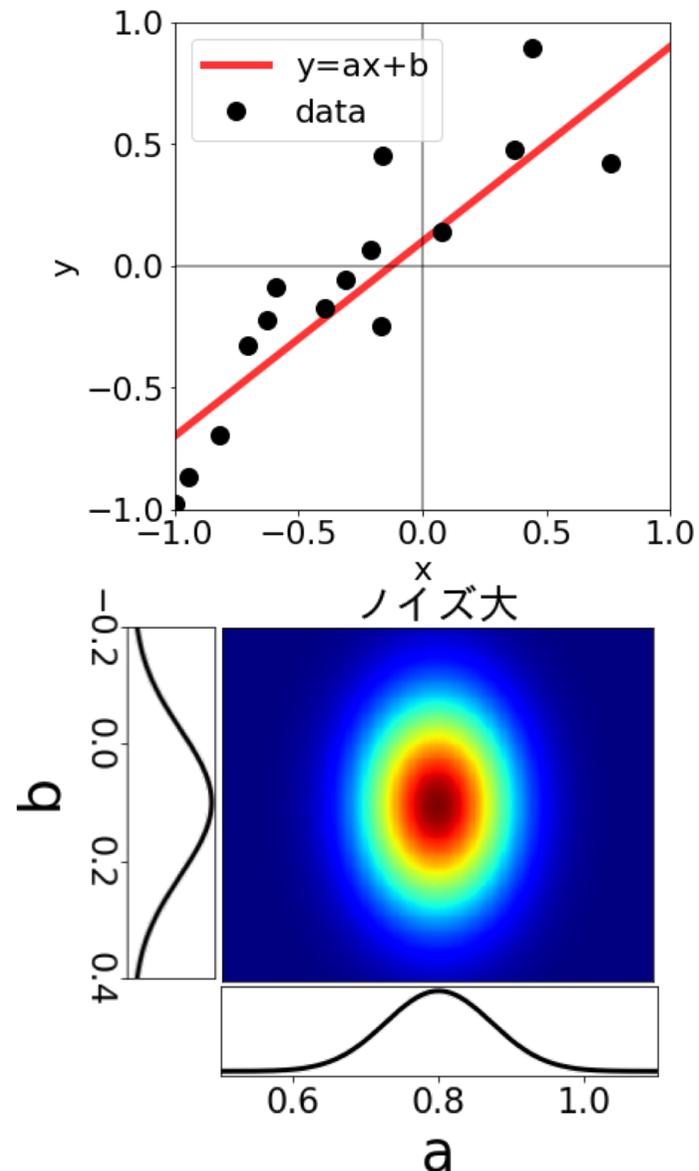
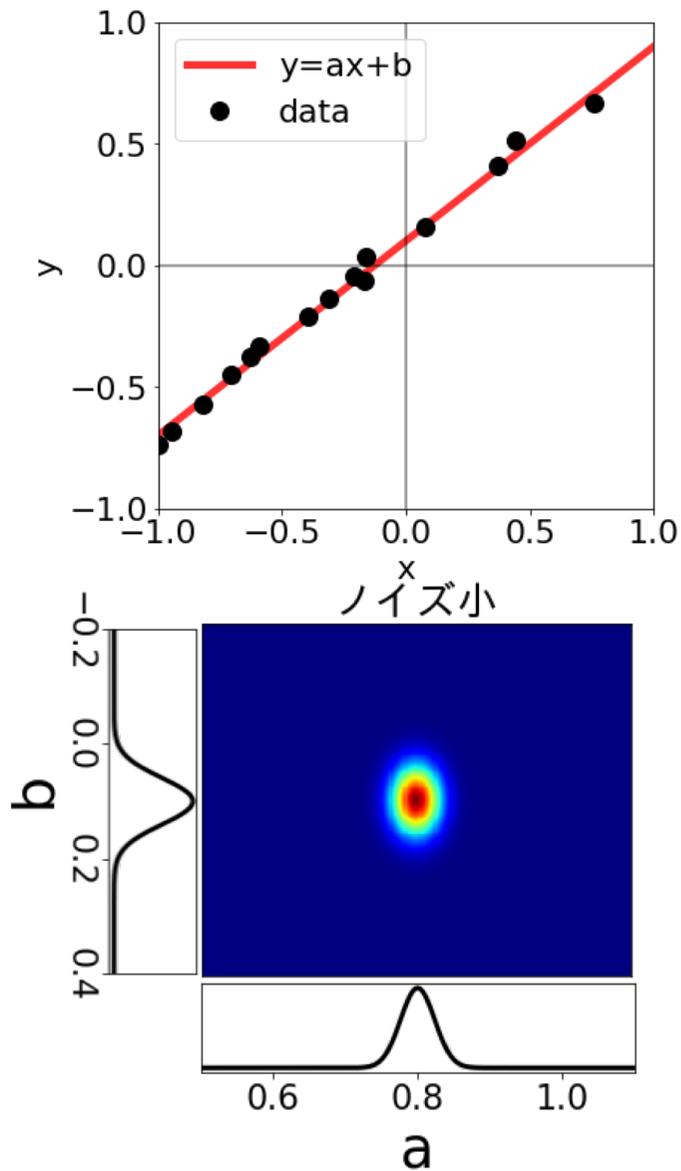
$$p(n_i) = p(y_i|a, b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\begin{aligned} p(Y|a, b) &= \prod_{i=1}^N p(y_i|a, b) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{N}{\sigma^2} E(a, b)\right) \end{aligned}$$

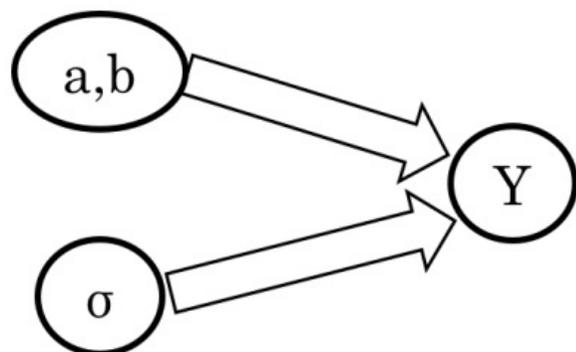
# 神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

$$\begin{aligned} p(a, b|Y) &= \frac{p(Y|a, b)p(a, b)}{p(Y)} \propto p(Y|a, b) \\ &= \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} \left( \mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0, b_0) \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} \left( \mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) \right) \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{N\bar{x}^2}{2\sigma^2} (a - a_0)^2 + \frac{N}{2\sigma^2} (b - b_0)^2 \right\} \end{aligned}$$

# 神器1: パラメータの事後確率推定 (4/4)



# 神器1: パラメータの事後確率推定 ノイズ分散推定

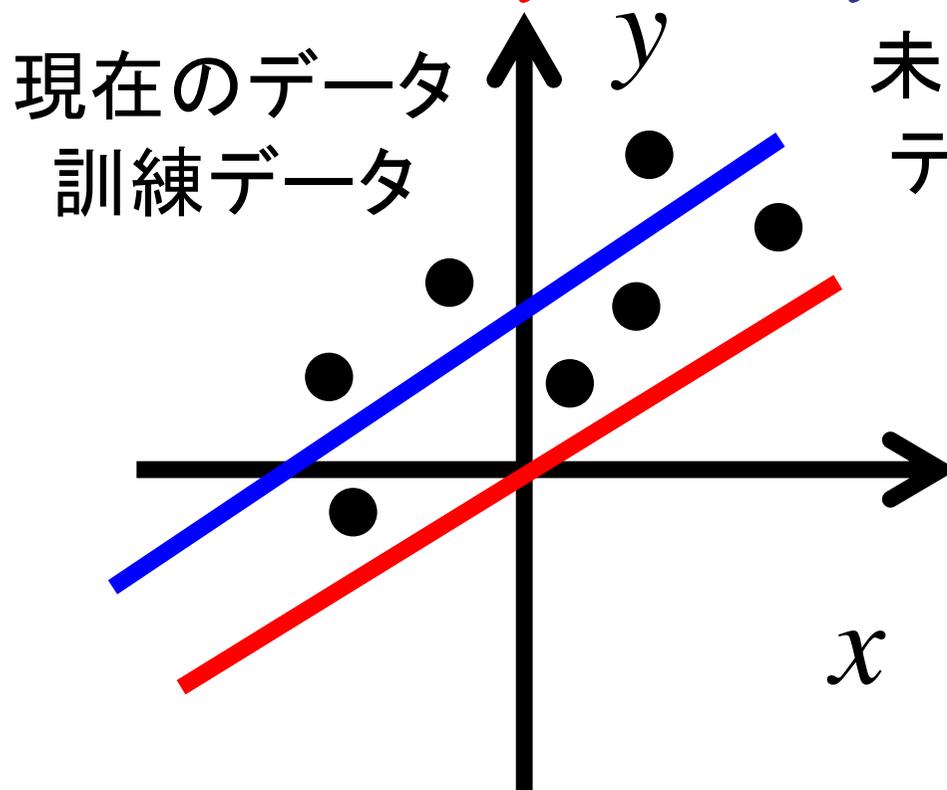


$$\begin{aligned} p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb p(Y|a, b, \sigma^2) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \int dadb \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}E(a, b)\right\} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \left\{ \exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0, b_0)\right) + \int da \exp\left(-\frac{N\bar{x}^2}{2\sigma^2}(a - a_0)^2\right) + \int db \exp\left(-\frac{N}{2\sigma^2}(b - b_0)^2\right) \right\} \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{N-2}{2}} (N^2\bar{x}^2)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0, b_0)\right) \end{aligned} \quad (25)$$

$$\sigma^2 = \frac{NE(a_0, b_0)}{N-2} = \frac{1}{N-2} \sum_{i=1}^N \{y_i - (a_0x_i + b_0)\}^2$$

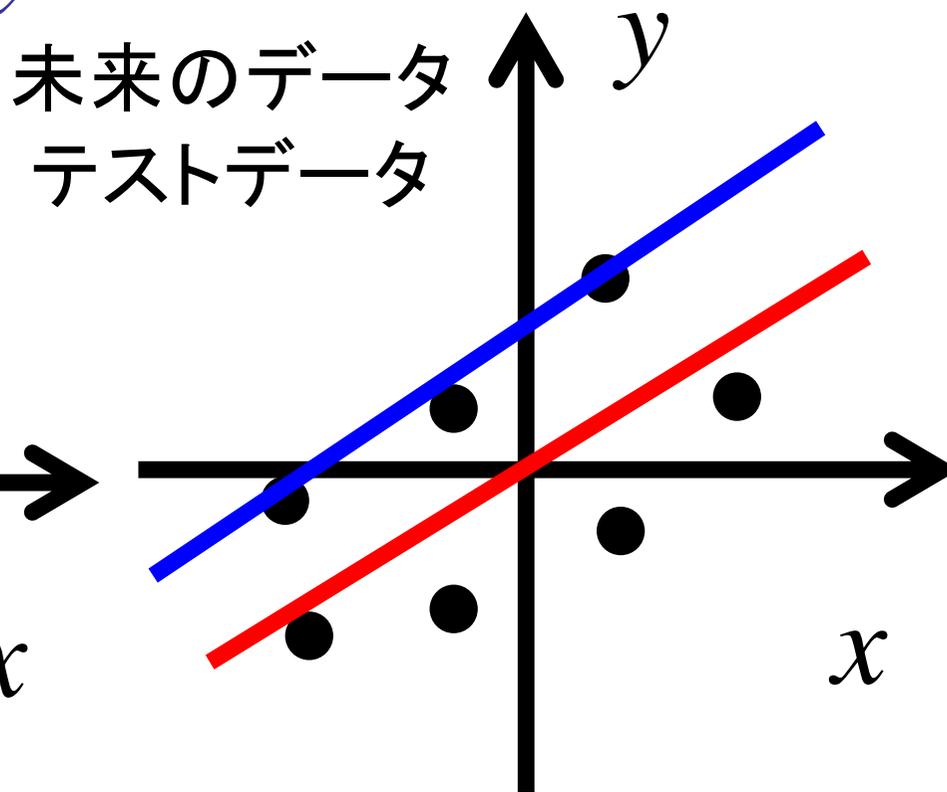
# 問題意識 神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$ か $y=ax+b$ か?



$y=ax+b$ : 訓練誤差小  
訓練誤差

ノイズに過学習



$y=ax$ : 訓練誤差小  
汎化誤差

モデル選択できる理由: 汎化誤差は観測ノイズに依存する

# 神器2: ベイズ的モデル選択

1. 欲しいのは  $p(K|Y)$
2.  $\theta$ がないぞ
3.  $p(K, \theta, Y)$  の存在を仮定

$$p(K, \theta, Y) = p(Y | \theta, K) p(K)$$

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

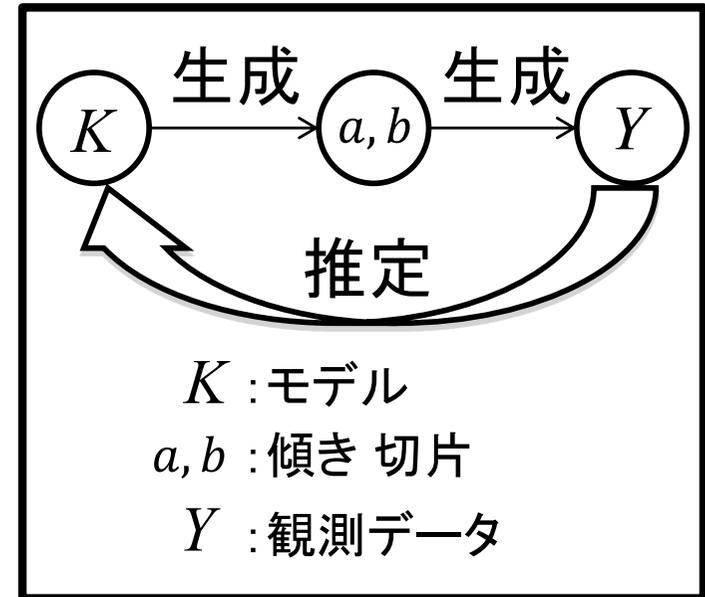
4. **無駄な自由度の系統的消去**: 周辺化, 分配関数

$$p(K, Y) = \int p(K, \theta, Y) d\theta$$

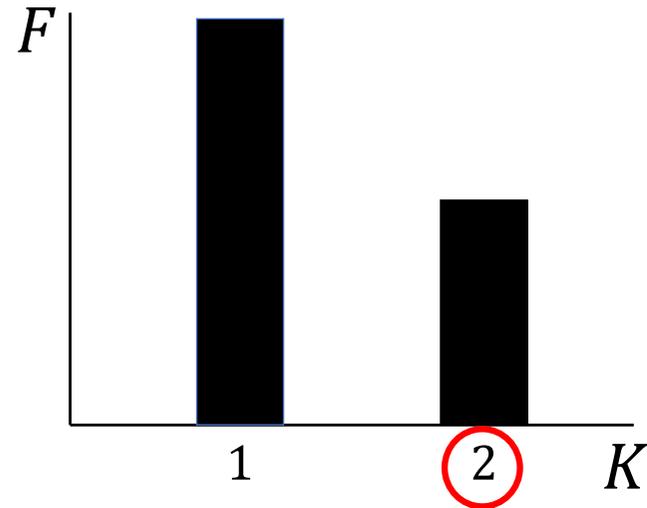
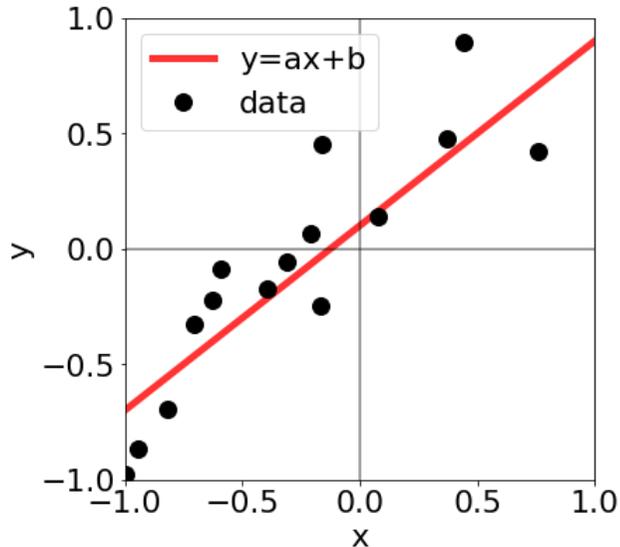
$$p(K | Y) = \frac{p(Y | K) p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

$$F(K) = -\log \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

**自由エネルギー**を最小にするモデル  $K$  を求める.



# モデル選択: 自由エネルギー差



- $K = 1 : y = ax$
- $K = 2 : y = ax + b$

$$F(K=1) = N \left\{ \frac{1}{\sigma^2} E(a_0) + \frac{\log N}{2N} \right\}$$

$$F(K=2) = N \left\{ \frac{1}{\sigma^2} E(a_0, b_0) + \frac{\log N}{N} \right\}$$

データのみからモデルを選択できる

# まとめ: ベイズ計測三種の神器 $y=ax+b$ の解析取り扱いを通じて

- 従来の最小二乗法
  - 1. 物理パラメータの点推定
- ベイズ計測: 三種の神器
  1. 物理パラメータの確率分布推定
  2. データからのベイズ的モデル選択
  3. ベイズ統合: 次の水牧先生のご講演

# 内容

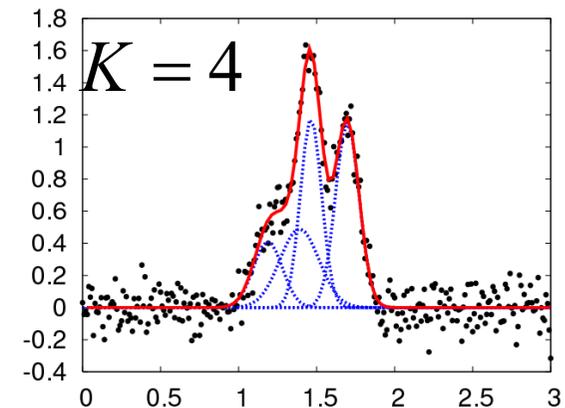
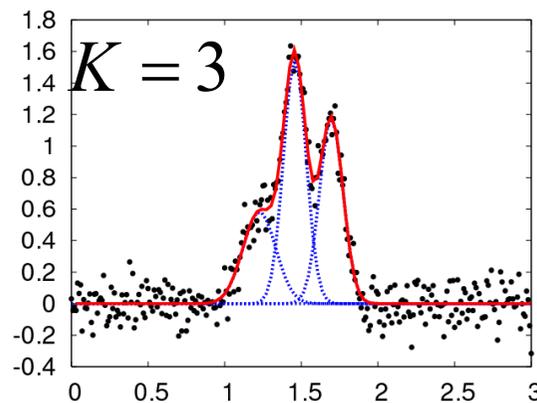
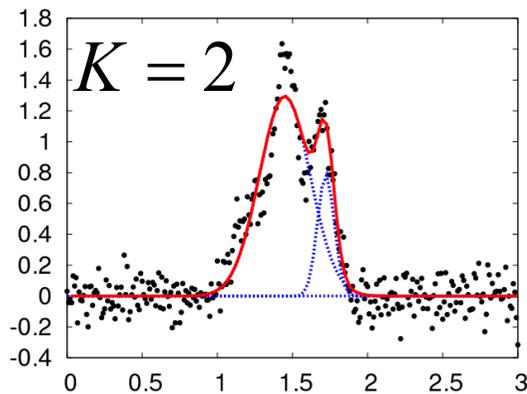
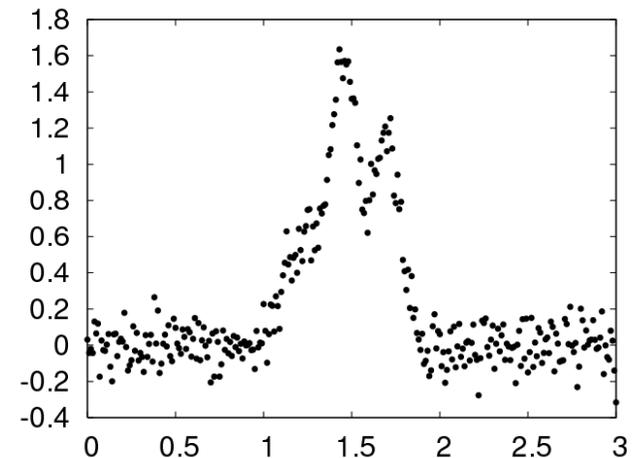
- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- **スペクトル分解**
- 能動計測
- まとめと今後の展開

# スペクトル分解

永田賢二， 杉田誠司， 岡田真人  
東大新領域

Kenji Nagata, Seiji Sugita and Masato Okada,  
"Bayesian spectral deconvolution with the  
exchange Monte Carlo method", *Neural  
Networks*, 28, 82-89 (2012)

# ベイズ的スペクトル分解



Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# スペクトル分解の定式化

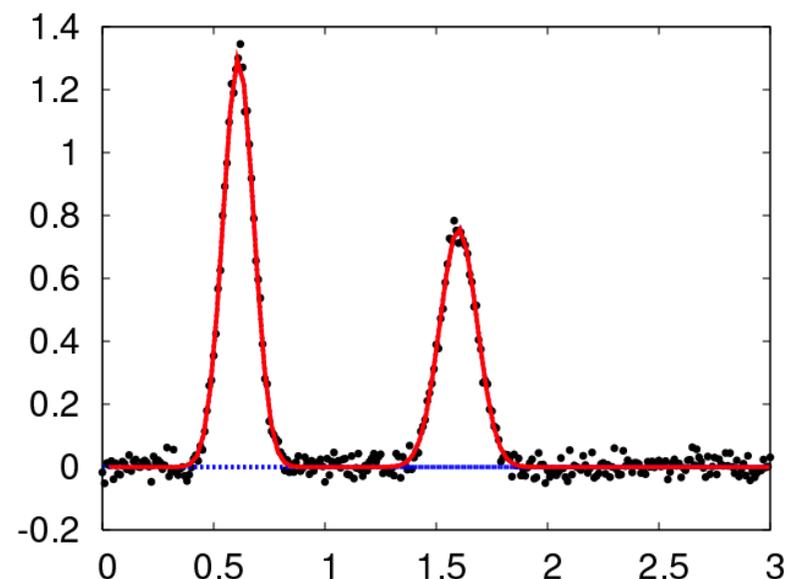
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより, スペクトルデータを近似

観測データ:  $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

$x_i$ : 入力  $y_i$ : 出力

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

$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \dots, K$$

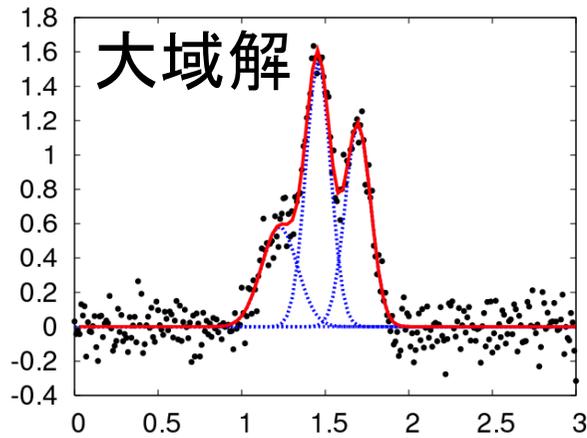


二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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

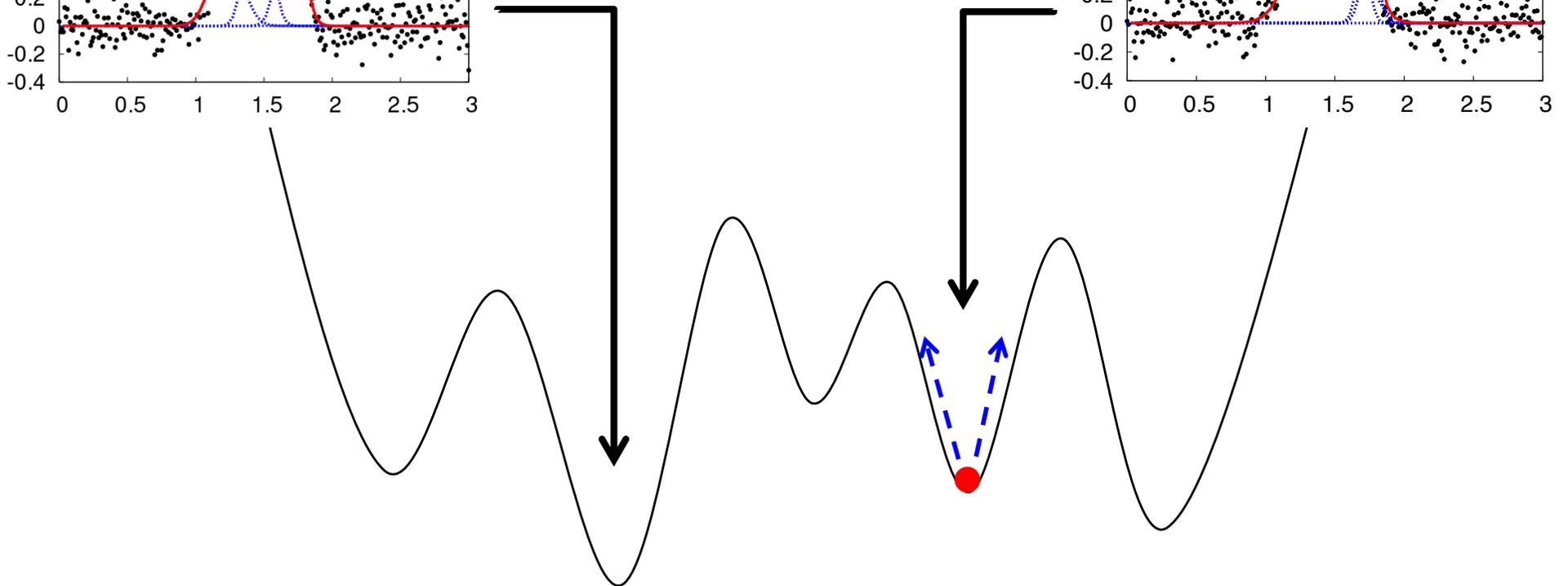
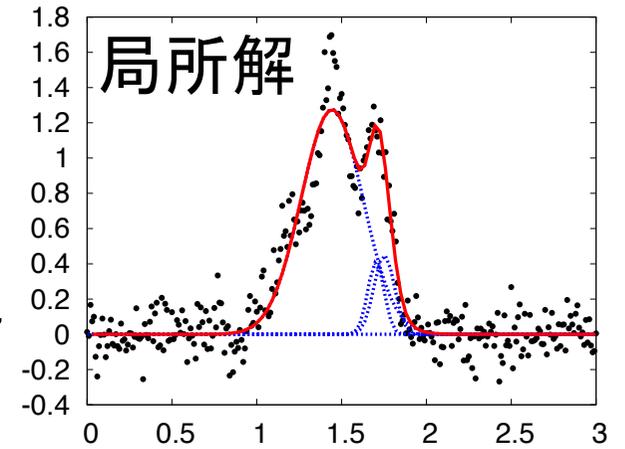
# スペクトル分解従来法: 最急降下法

## 誤差関数は局所解を持つ



<通常の最適化法>

e.g., 最急降下法

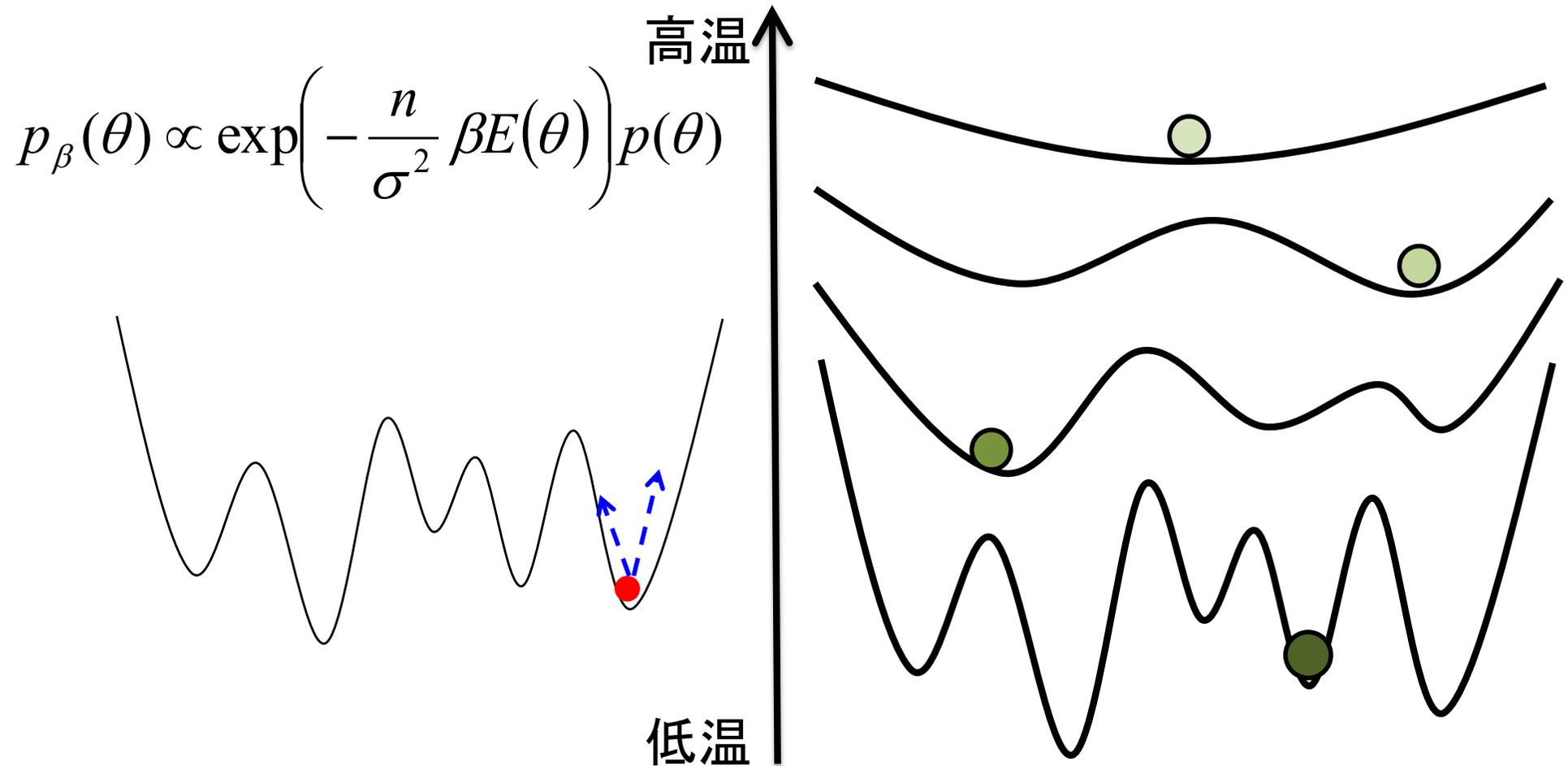


# モンテカルロ法の適用

## レプリカ交換モンテカルロ法

メトロポリス法

レプリカ交換モンテカルロ法



K. Hukushima, K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996).

# モンテカルロ法の適用

## レプリカ交換モンテカルロ法のアルゴリズム

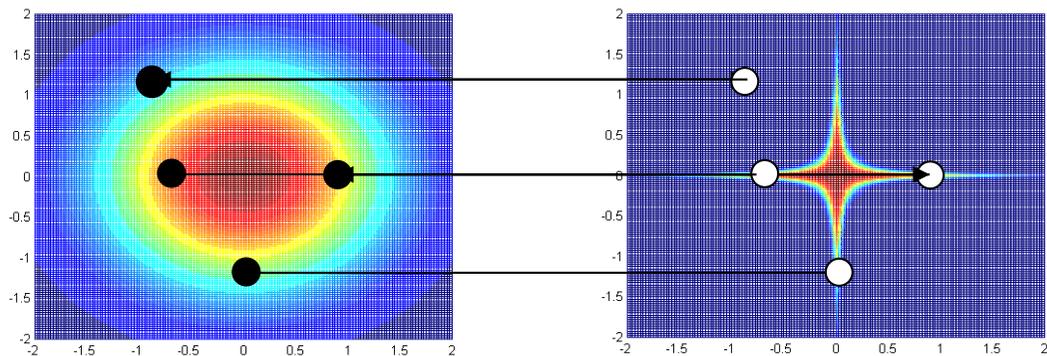
1. それぞれの確率分布について、メトロポリス法で状態の更新

$$\theta_l \Rightarrow \theta'_l$$

2. 隣り合った分布で状態の交換を行う。  $\{\theta_l, \theta_{l+1}\} \Rightarrow \{\theta_{l+1}, \theta_l\}$

$$u = \min(1, r) \quad r = \frac{p_{\beta_l}(\theta_{l+1})p_{\beta_{l+1}}(\theta_l)}{p_{\beta_l}(\theta_l)p_{\beta_{l+1}}(\theta_{l+1})}$$

$u$ : 状態の交換を行う確率



<Case1>  $r$  :小

<Case2>  $r$  :大

<Case3>  $r \approx 1$

# モデル選択: 自由エネルギーの導入

1. 欲しいのは  $p(K|Y)$

2.  $\theta$ がないぞ

3.  $p(K, \theta, Y)$  の存在を仮定

$$p(K, \theta, Y) = p(Y | \theta, K) p(K)$$

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

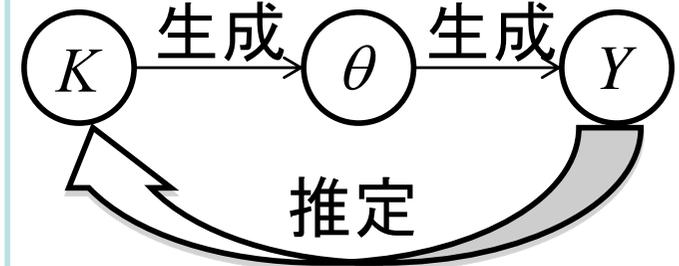
4. **無駄な自由度の系統的消去**: 周辺化, 分配関数

$$p(K, Y) = \int p(K, \theta, Y) d\theta$$

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

$$F(K) = -\log \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta = \boxed{E - TS}$$

**自由エネルギー**を最小にする個数  $K$ を求める.

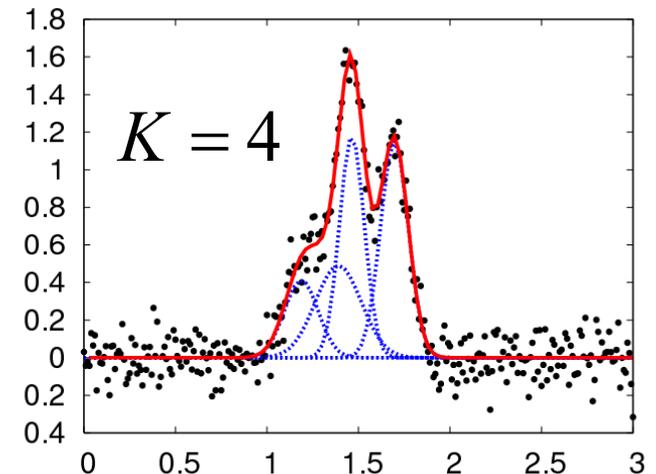
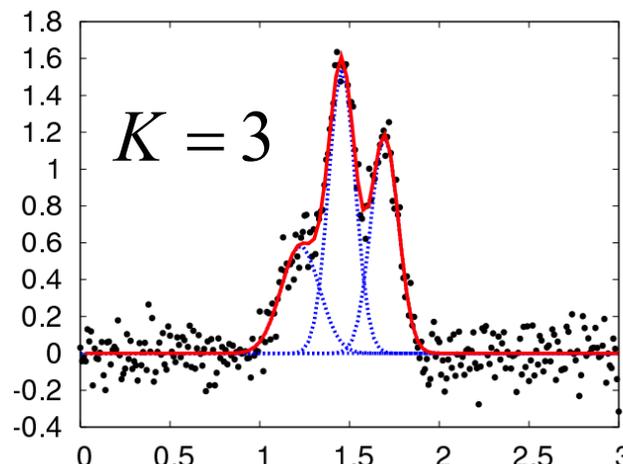
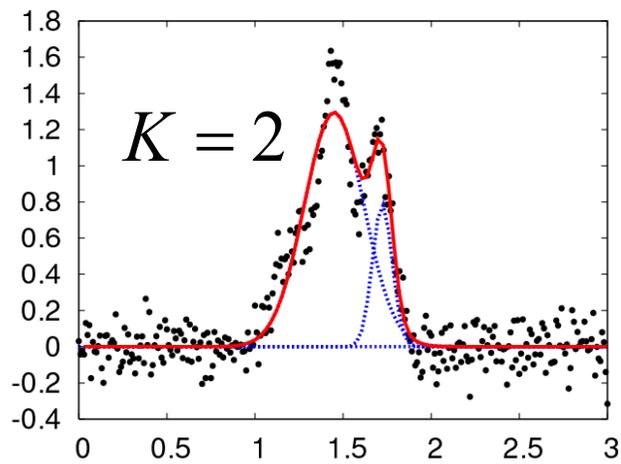
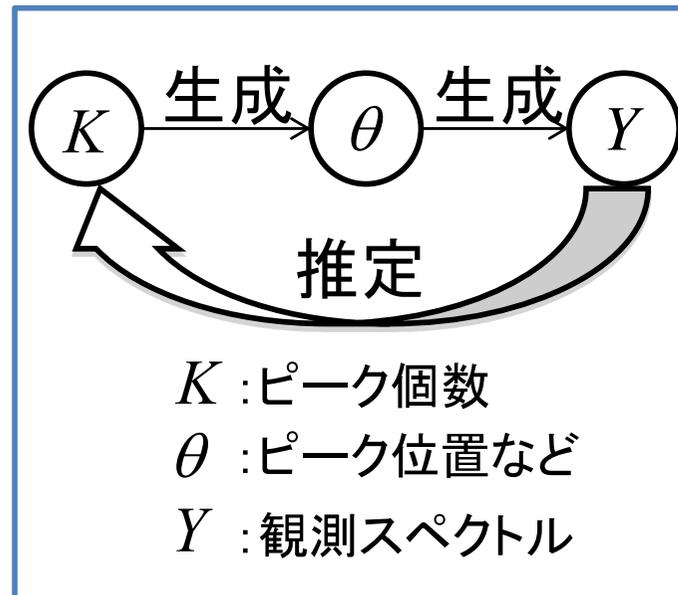
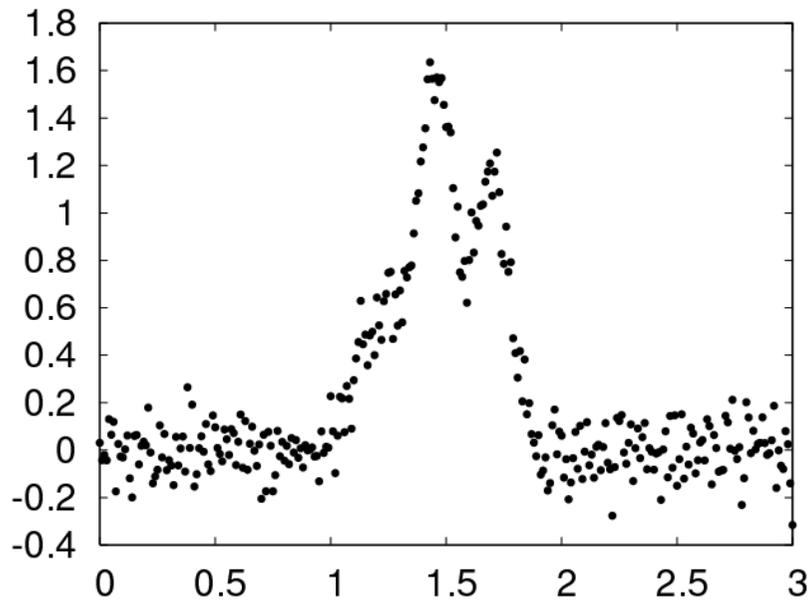


$K$ : ピーク個数

$\theta$ : ピーク位置など

$Y$ : 観測スペクトル

# モデル選択: $K$ をどう選ぶか

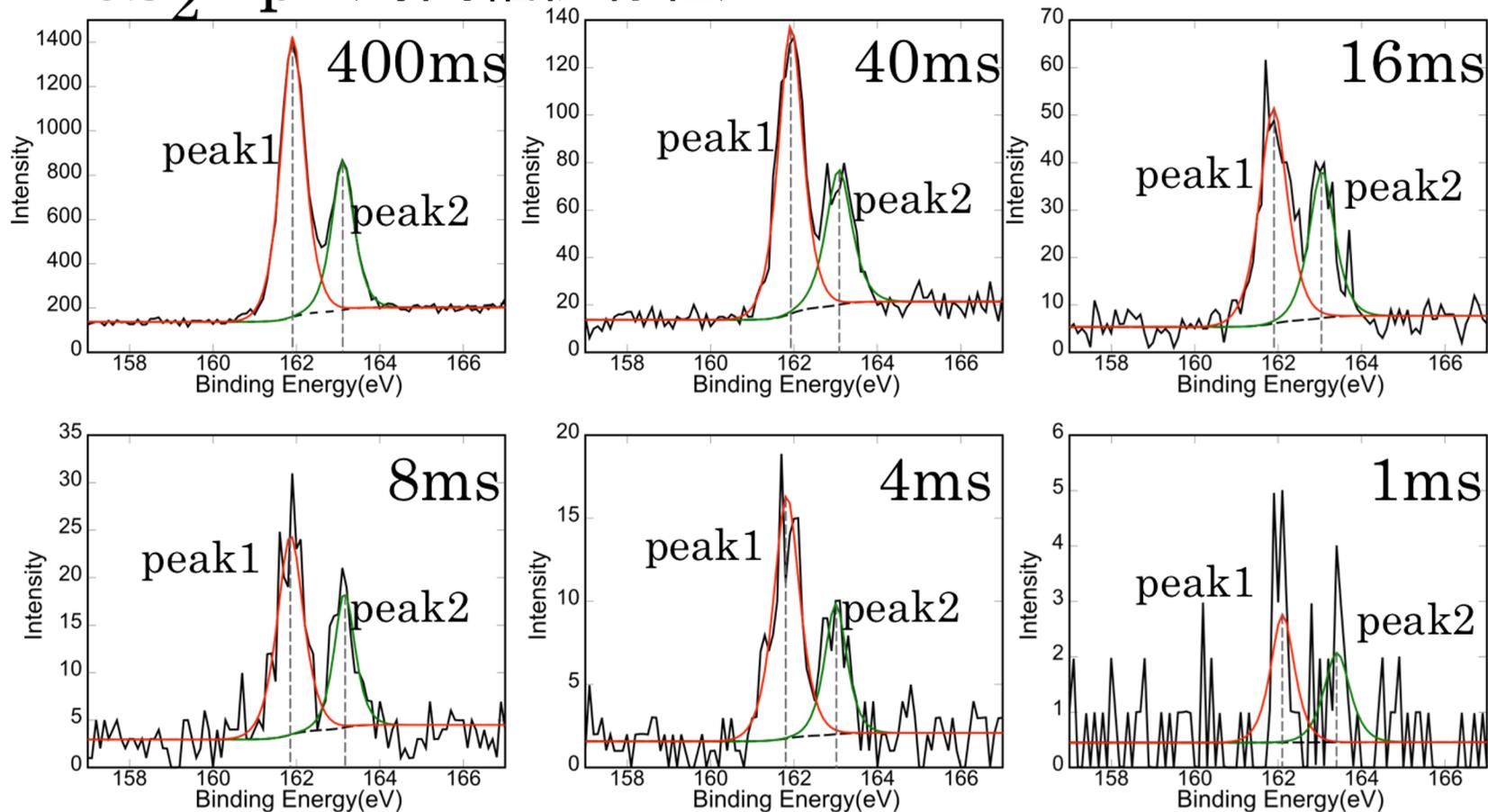


Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

# 計測限界の理論的取り扱い (4/9)

(Nagata *et al.* 2019)

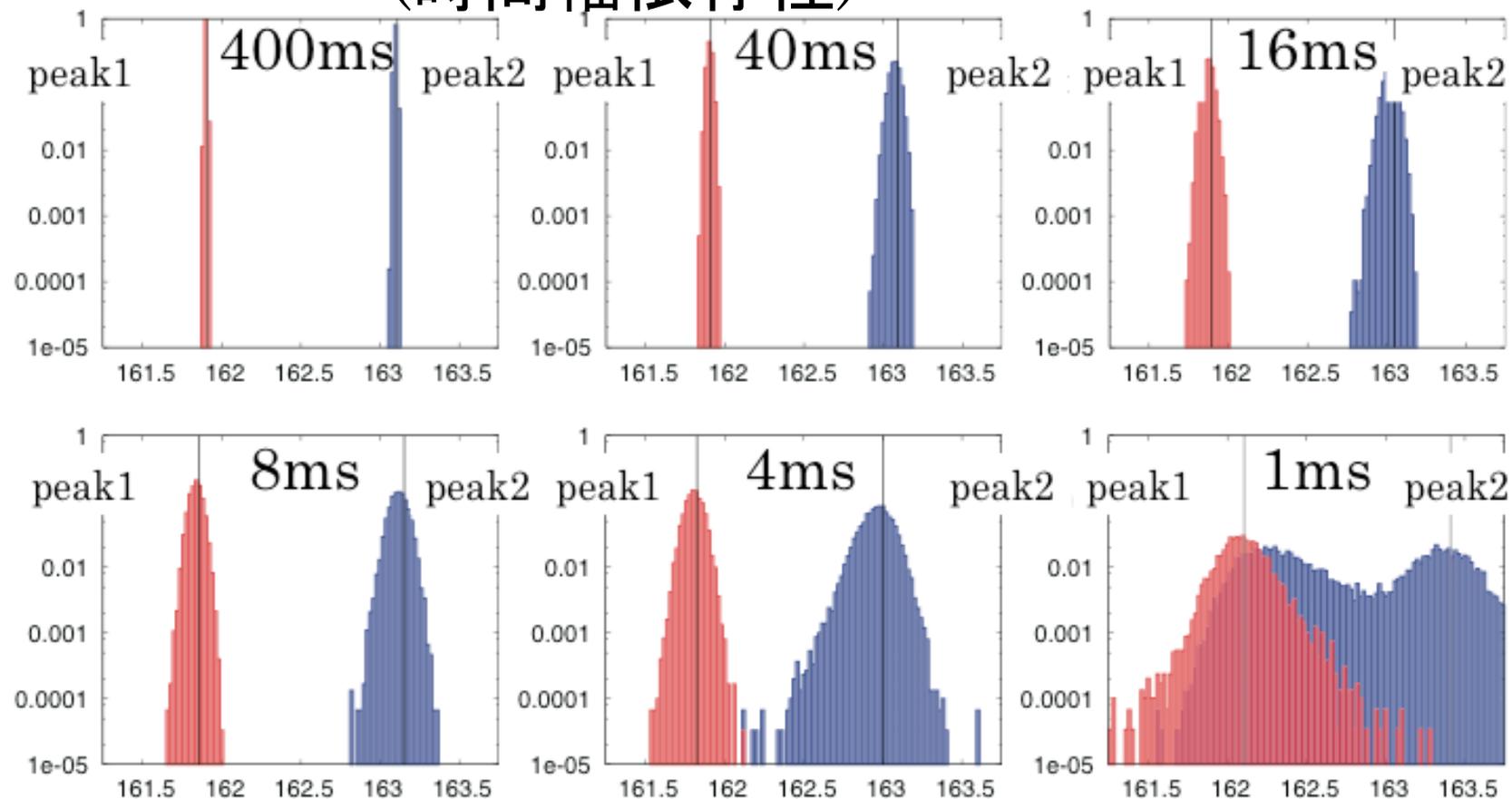
## MoS<sub>2</sub> 2p (時間幅依存性)



# 計測限界の理論的取り扱い (6/9)

## (Nagata *et al.* 2019)

ベイズ計測: ベイズ推論によって,  
ピーク位置のベイズ事後確率を計算  
(時間幅依存性)

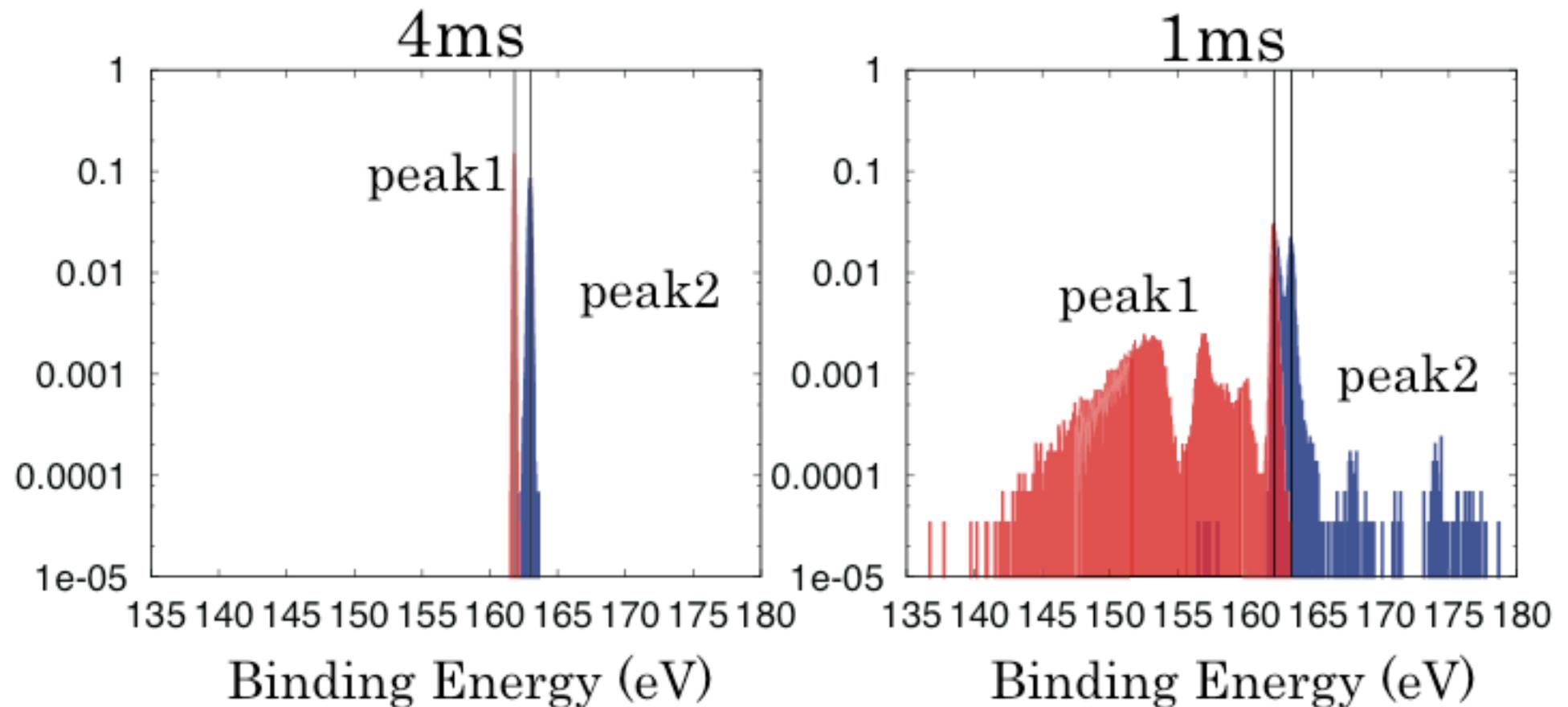


# 計測限界の理論的取り扱い (7/9)

(Nagata *et al.* 2019)

ベイズ計測: ベイズ推論によって,  
ピーク位置のベイズ事後確率を計算

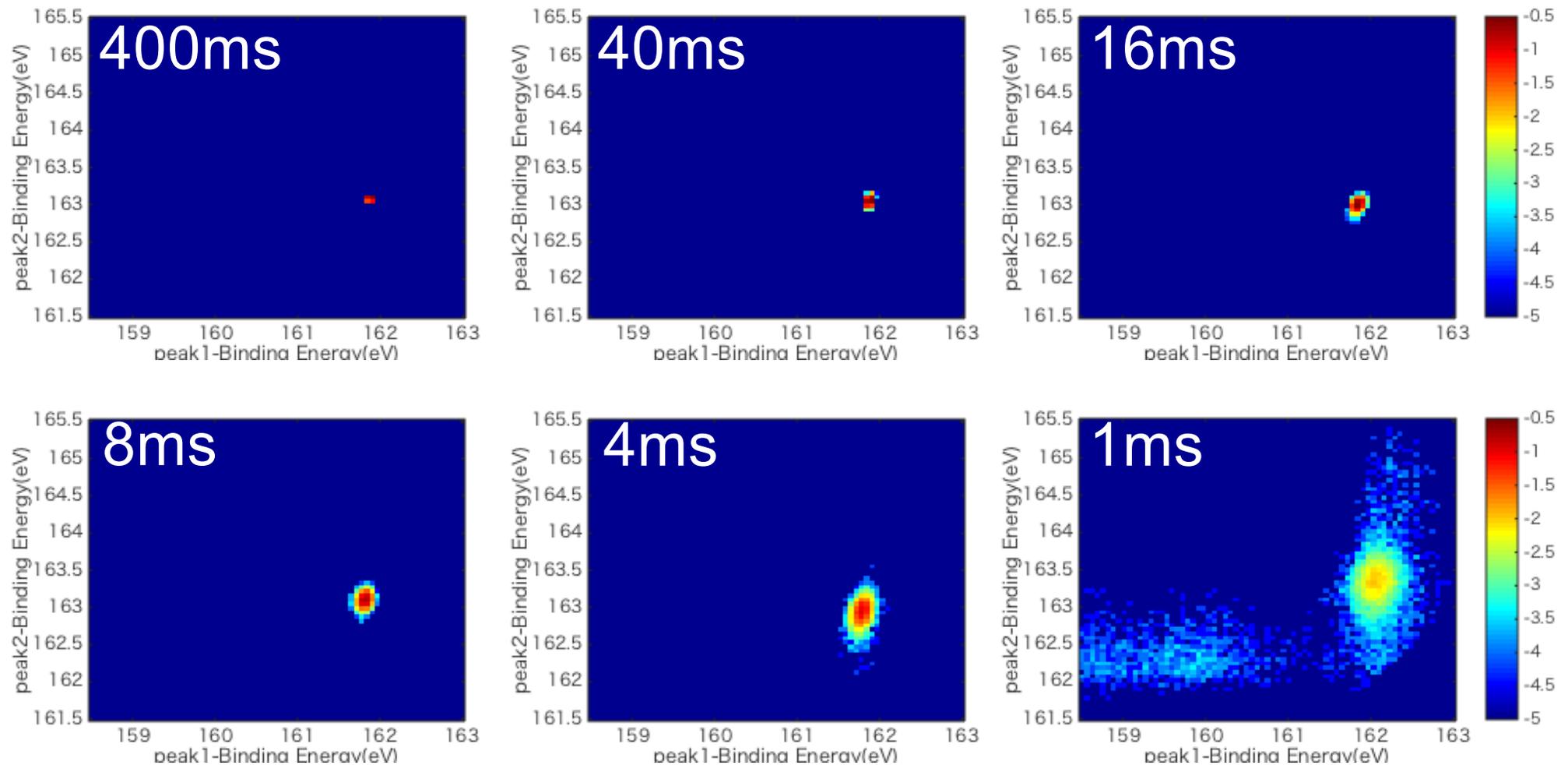
(時間幅依存性)



# 計測限界の理論的取り扱い (8/9)

(Nagata *et al.* 2019)

## MoS<sub>2</sub> 2p



ここまで

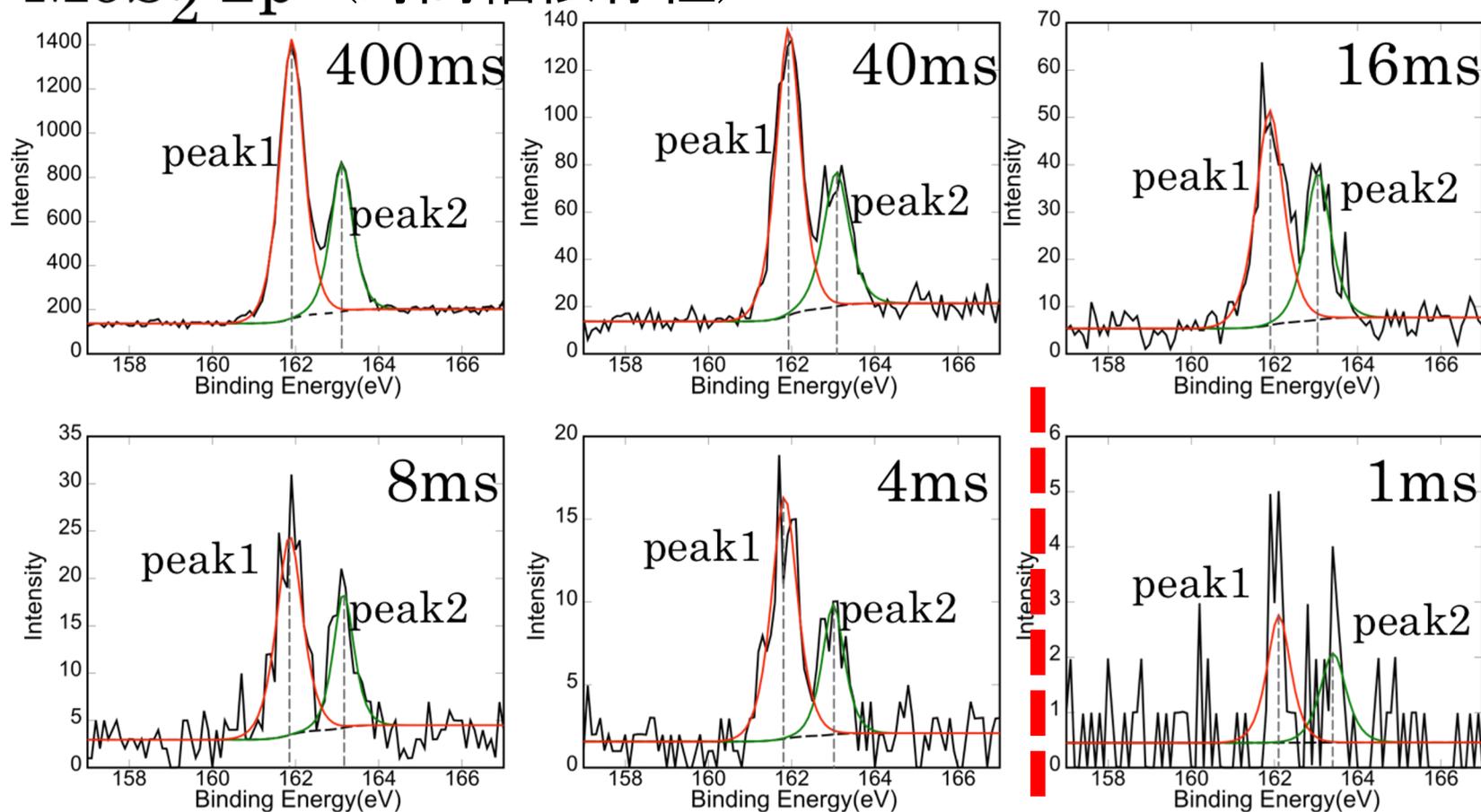
# 計測限界の理論的取り扱い (9/9)

(Nagata *et al.* 2019)

ベイズ計測: ベイズ推論によって, ピーク位置のベイズ事後確率を計算

戦略目標: **計測限界を定量的に評価**できる枠組みの提案

MoS<sub>2</sub> 2p (時間幅依存性)



# Take Home Message

## ベイズ計測のインパクト

従来法: ポストプロセスとしての解析

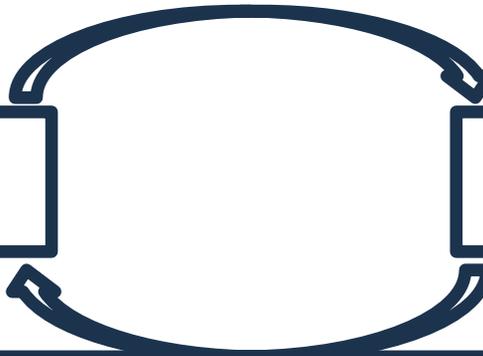
計測



解析

提案法: 計測と解析の双方向的相互作用

計測



解析

放射光科学のパラダイムシフト  
キャリアアップの千載一遇のチャンス

# 内容

- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開

# 能動学習

竝河伴裕<sup>A</sup>, 永田賢二<sup>B</sup>, 水牧仁一郎<sup>C</sup>,  
片上舜<sup>A</sup>, 岡田真人<sup>A</sup>

A東大新領域、BNIMS, C熊大

Tomohiro Nabika, Kenji Nagata, Masaichiro  
Mizumaki, Shun Katakami and Masato Okada

"Bayesian active learning with model selection for  
spectral experiments" *Scientific Reports*, 14,  
3680(2024)

# ガウス過程回帰による能動学習

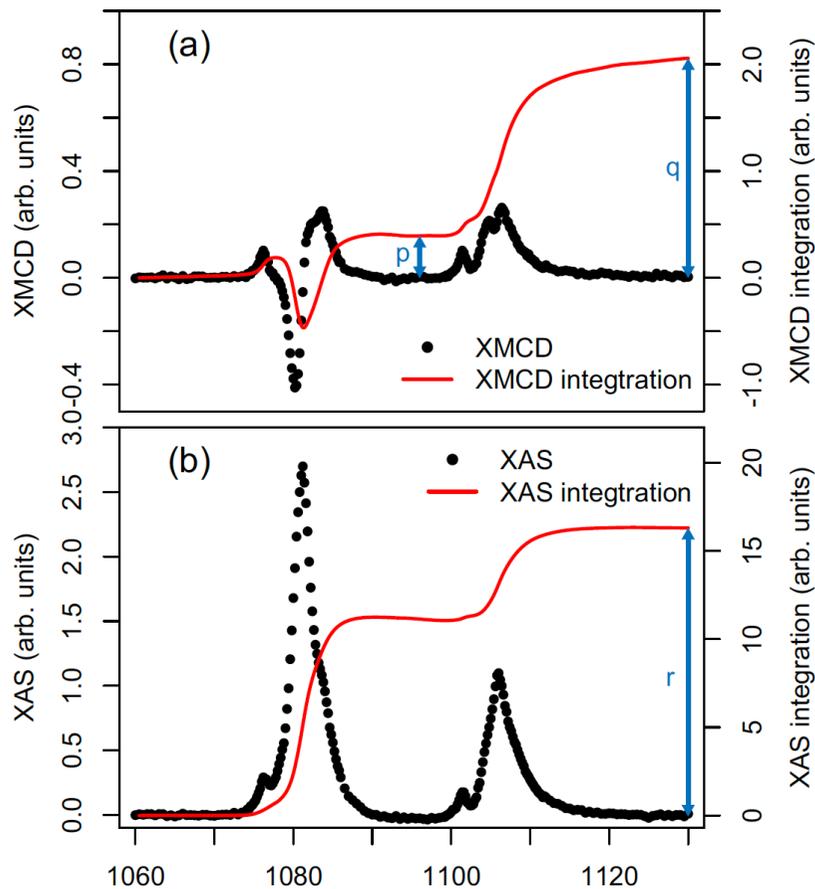
X線磁気円二色性(XMCD)

目的:  $p, q, r$ から物理量を推定

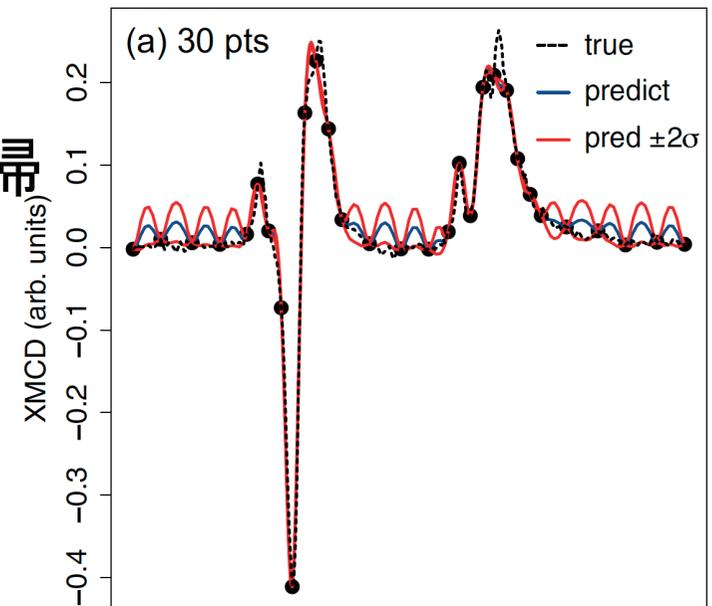
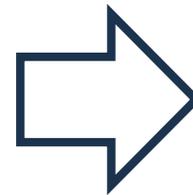
ガウス過程回帰で

推定精度の低い点

→ 次に測定を行う点とする



ガウス過程回帰  
 $f(x)$ を推定



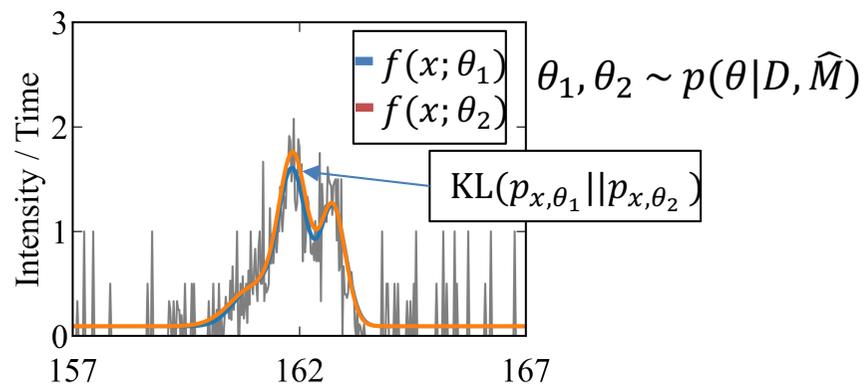
[Ueno et al., 2018]

# 物理モデル(パラメトリックモデル) を用いた能動学習

## ベイズ事後確率分布を利用した能動学習

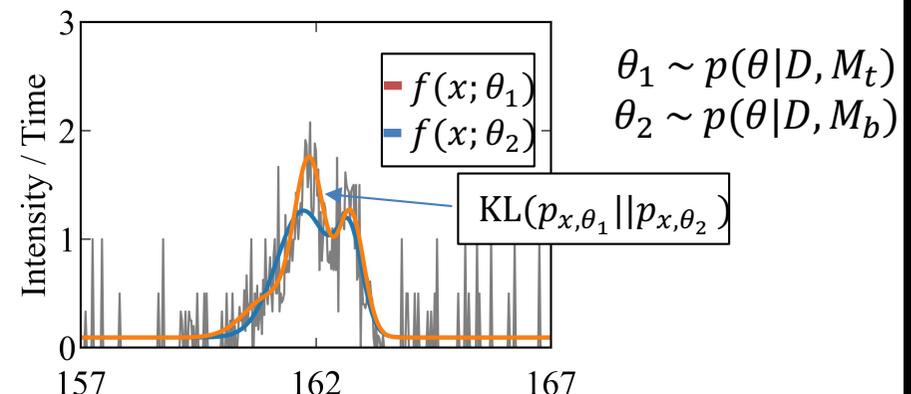
### 選択基準 ①

$J'_1(x)$ :  $\hat{M}$  フィッティングのずれ



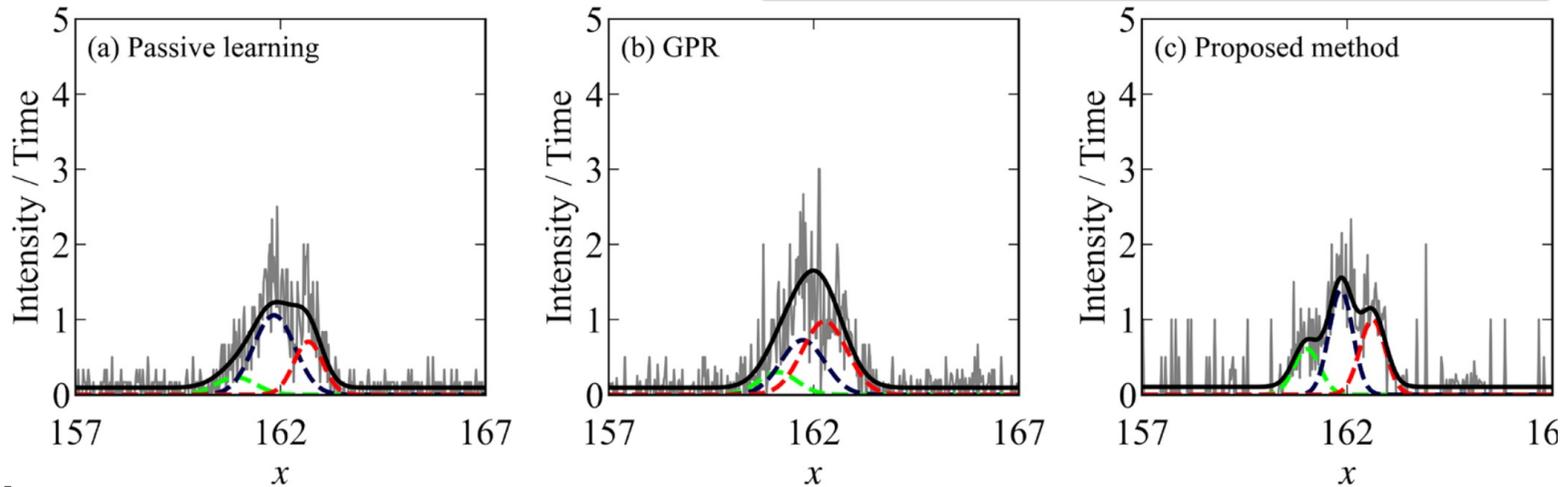
### 選択基準 ②

$J'_2(x)$ :  $M_b, M_t$  のフィッティングのずれ

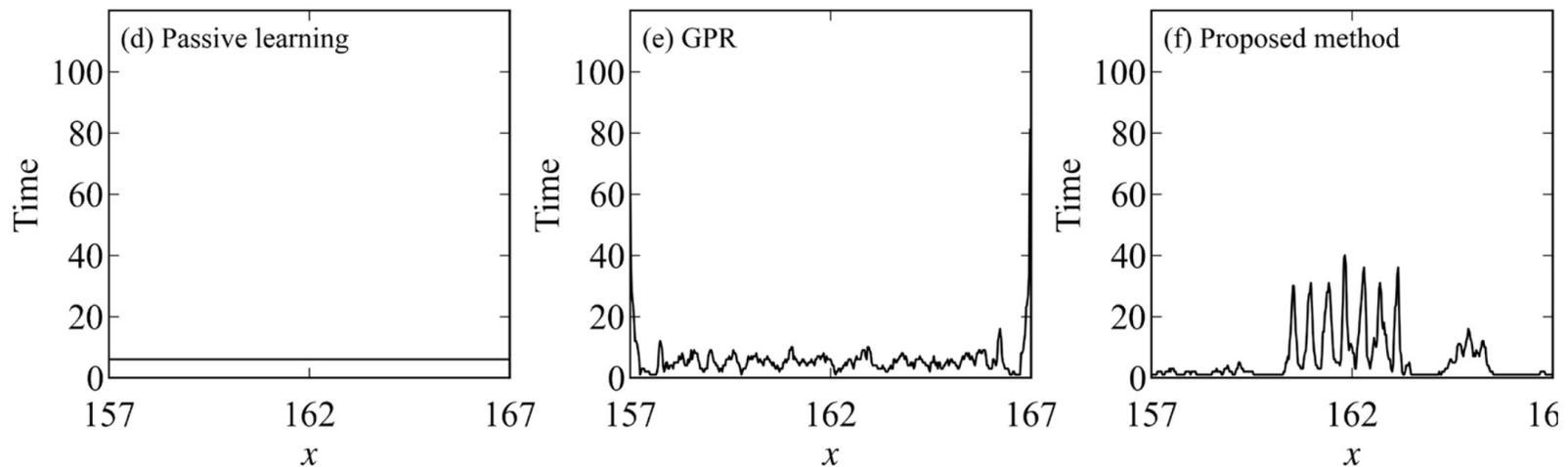


# 提案手法とガウス過程回帰の比較

カウント回数/計測時間



計測時間



等時間

ガウス過程回帰

提案手法

# 内容

- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開

# まとめ

- 自己紹介
- データ駆動科学の三つのレベルと機能発現の3+1モデル
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- スペクトル分解
- 能動計測
- まとめと今後の展開