物性物理学とベイズ計測
ベイズ計測の理学系研究科への展開

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

日時:2025年2月12日(水) 11:00-12:00
研究棟739講義室
講演のスライドは岡田研HPにて公開予定
https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/lab.html#overview

本セミナーの目的

- 本セミナーでは、物性物理学全般を取り扱えるベイス計測の枠組みを紹介する。
- 本セミナーでは以下を説明する

1. 修士時代の強相関電子系の分光の研究
2. 直線回帰，スペクトル分解，NMRの緩和モード分解，XPSとXASのベイズ統合を紹介し，ベイズ計測の基礎から展開の解説
3. SPring-8全ビームライン計画の紹介
4. 脳神経科学への適用
5. 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望

博士課程進学のすゝめ

- ベイズ計測は物性物理学のような基礎科学だけでなく、民間企業でのR&D(研究開発)にも必須の枠組みであり、単なる就職のためではなく、就職後のキャリアアップにも大変有利である。
- そのため、修士課程修了後に民間就職を希望している学生さんは、博士課程進学を考慮することを強くすゝめる。
- キャリア志向の進学を期待する。

内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

自己紹介

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
  - アモルファスシリン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
  - 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 –)

内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

自己紹介

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
  - アモルファスシリン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
  - 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 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 –)

修士課程の指導教官
小谷章雄先生

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,[†] A. MARCELLI[†] and J. C. PARLEBAS[††]

Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University, Toyonaka 560
[†]Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza", 00185 Roma, Italy
[††]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).

修士課程を終えての感想 (1/4)

希土類化合物のX線光電子分光スペクトル (XPS)とX線光吸収スペクトル(XAS)の理論

The spectra of 3d-XPS and L_3-XAS are expressed as

$$F_{XPS}(E_B) = \sum_f |\langle f|a_c|g\rangle|^2 L(E_B - E_f + E_g), \quad (2)$$

$$F_{XAS}(\omega) = \frac{1}{N}\sum_f |\langle f|\sum_k a_d^+(k)a_c|g\rangle|^2 \times L(\omega - E_f + E_g), \quad (3)$$

where

$$L(x) = \Gamma/[\pi(x^2 + \Gamma^2)]. \quad (4)$$

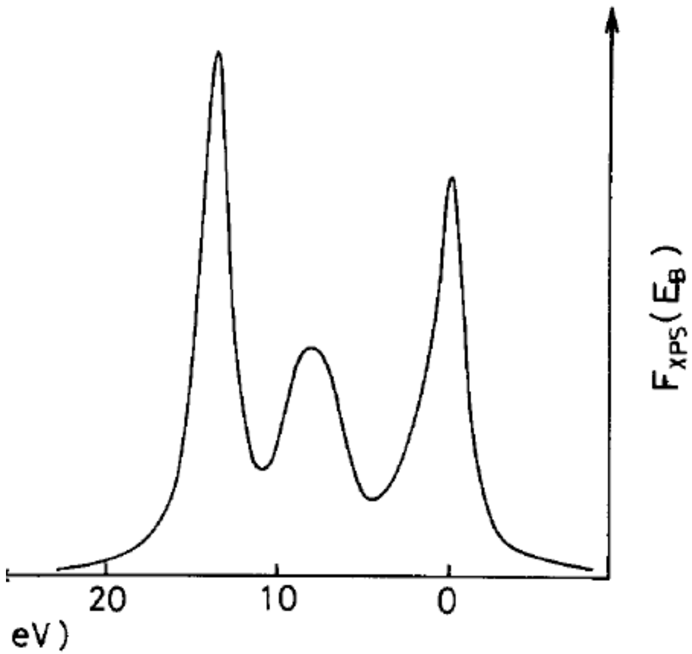


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily.

ヒトがモデルのパラメータをハンドチューンして議論
今回の集中講義の動機 -> ベイズ計測へ

(Kotani, Okada and Okada, 1987)

修士課程を終えての感想 (2/4)

Kotaniの2p-XASのモデル

- Kotaniモデル:
- U_{dc}により5d電子が内殻正孔とエキシトンを形成する
- 5d電子が局在することでCe5dバンドが狭くなり，f電子と相互作用する(U_{fd})
- 結論
  - 絶縁体には必要
  - 金属ではよくわからない

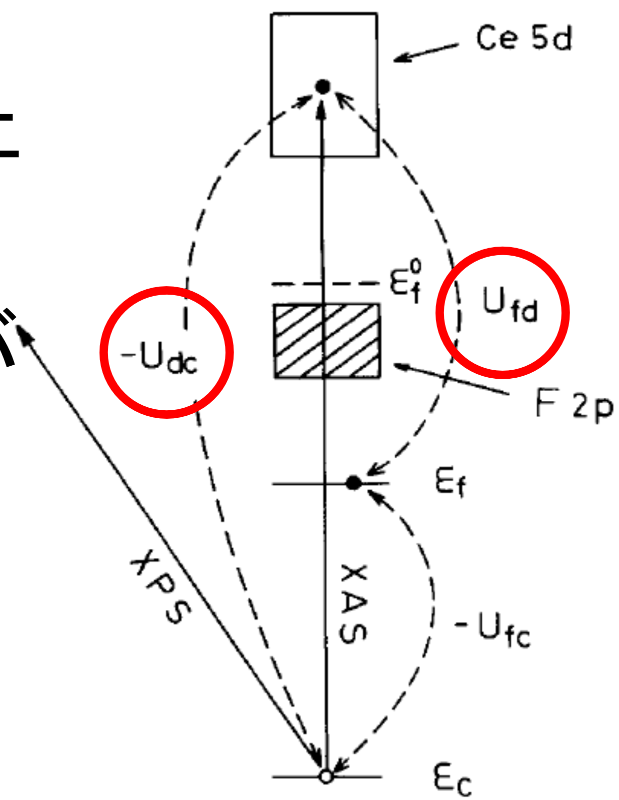
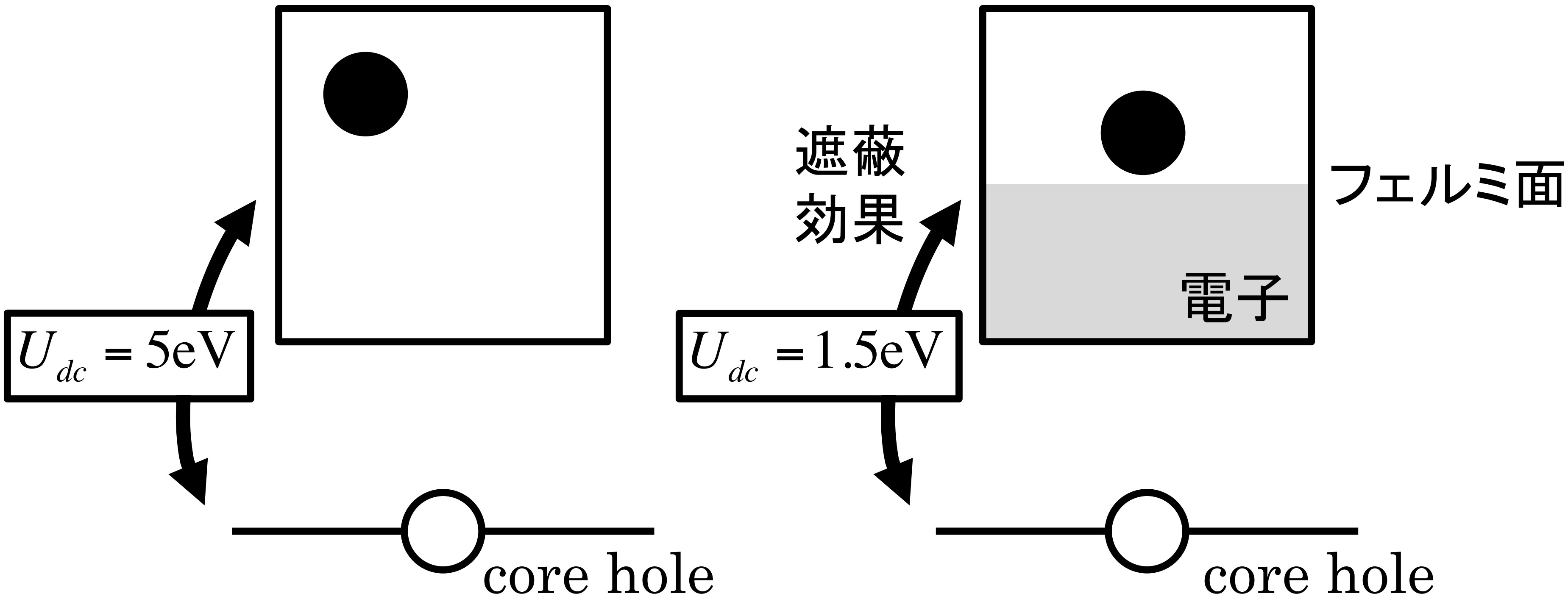


Fig. 1. Model of the present theory describing 3*d*-XPS and L_3-XAS.

修士課程を終えての感想 (3/4)

KotaniとGunnarssonの主張



- 金属では励起電子の緩和プロセスが見えていた.
- 励起の初期にはU_{dc}が絶縁体程度(Kotaniの主張)
- 緩和することで遮蔽効果が効く. U_{dc}=0(Gunnarsonの主張)
- これはまだ決着がついていないと思われる.

修士課程を終えての感想 (4/4)

なにが問題か: モデル選択

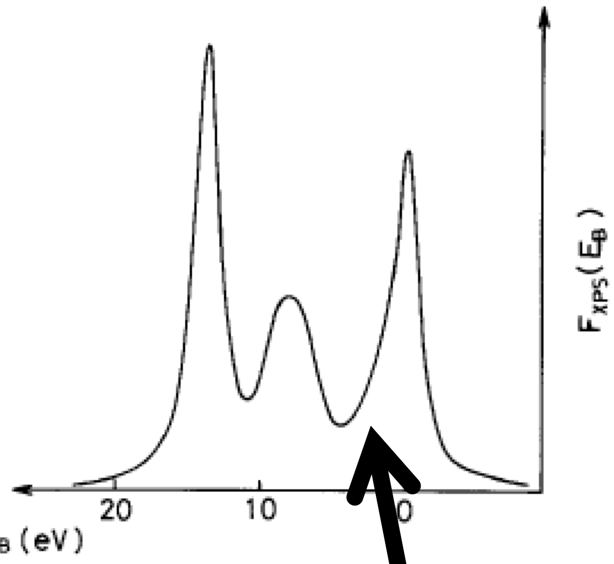
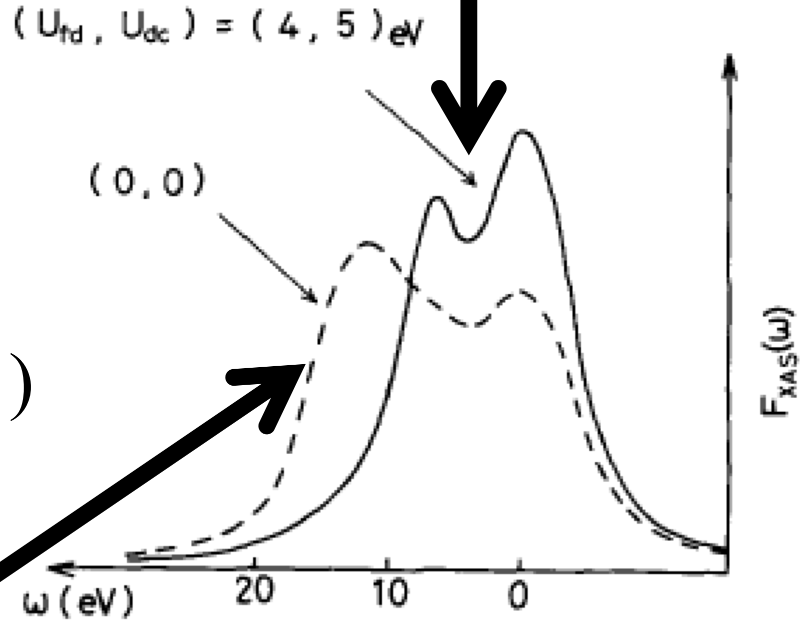


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily.

$$f_{XAS}(x) = f_{XAS}(x \mid \varepsilon_f, V, U_{fc}, U_{ff}, U_{dc}, U_{fd})$$



$$f_{XPS}(E_B) = f_{XPS}(E_B \mid \varepsilon_f, V, U_{fc}, U_{ff})$$

$$f_{XAS}(x) = \int dx' f_{XPS}(x' \mid \varepsilon_f, V, U_{fc}, U_{ff}) g_{5d}(x)$$

内容

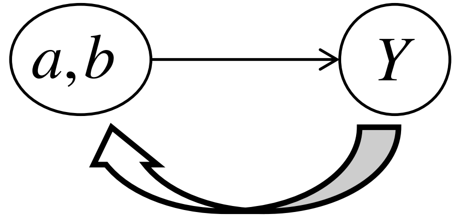
- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

ベイズ計測とは?

ベイズ推論

$$p(Y,a,b)=p(Y\mid a,b)\,p(a,b)=p(a,b\mid Y)\,p(Y)$$

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(a,b\mid Y)$: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

- 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

ベイズ計測と利点の理解のために $y=ax+b$へのベイズ計測の導入

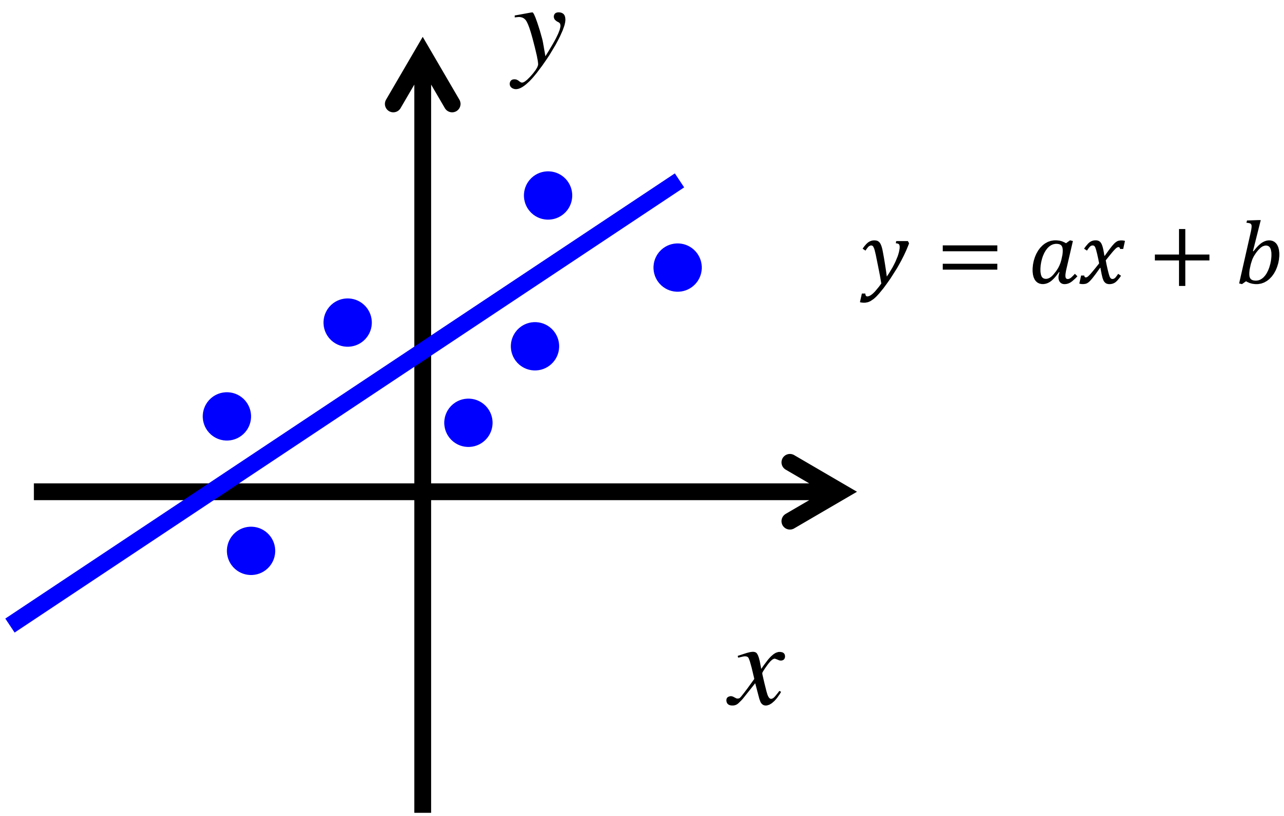
- 最もよく知られていおり、解析的取り合う使いもできるデータ解析手法
- 磁化率、誘電率などの系の線形応答特性を測定する際に、いまでも用いられいる
- $y=ax+b$にベイズ計測を導入し、解析的な取り扱いが可能
- ベイズ計測の利点が解析計算を通して理解可能

ベイズ計測の利点
$y=ax+b$の取り扱いを通じて

- 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
- 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: 今回は説明を省略
  - 水牧先生の基調講演

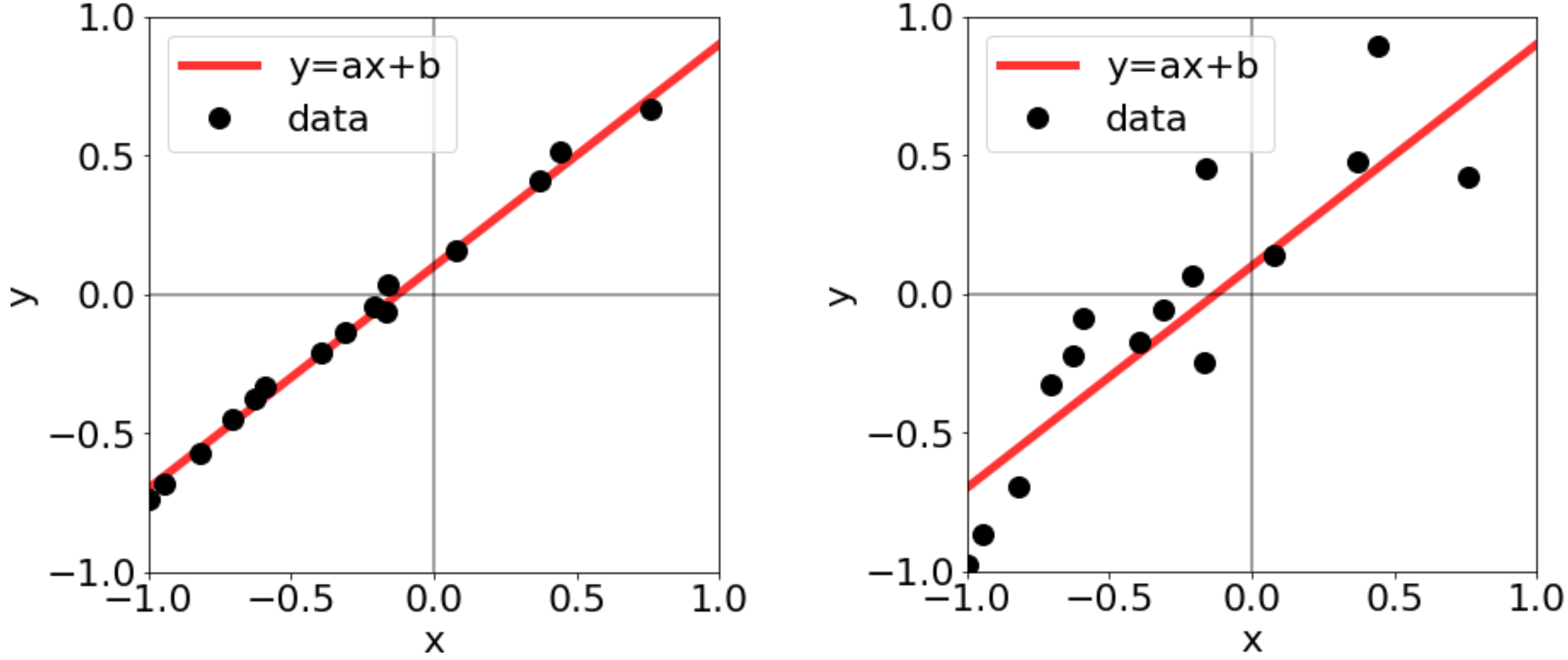
ベイズ計測の利点
$y=ax+b$の取り扱いを通じて

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

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

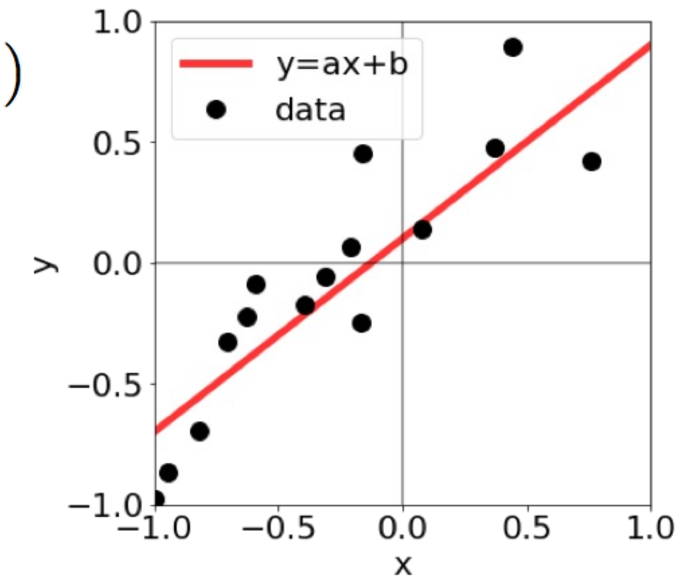
二乗誤差$E(a,b)$を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

$$a_0=\frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}\quad b_0=\overline{y}$$

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

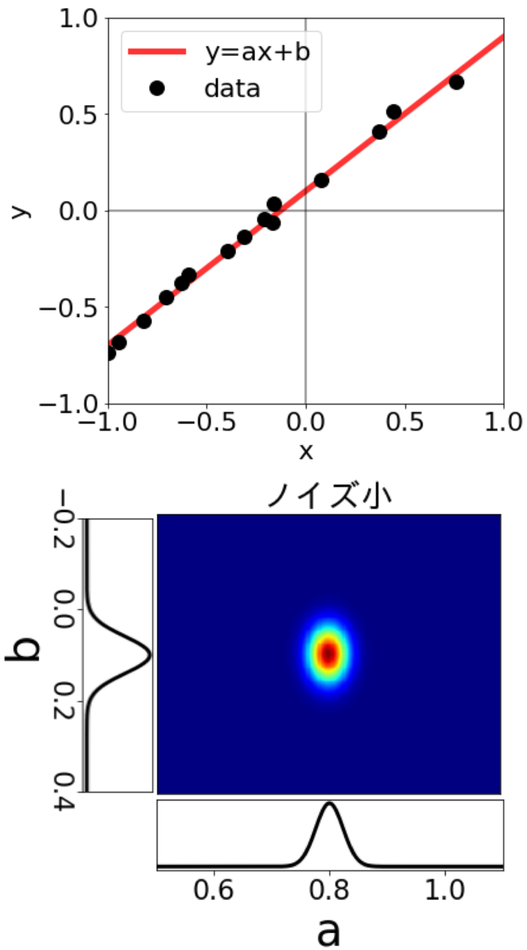


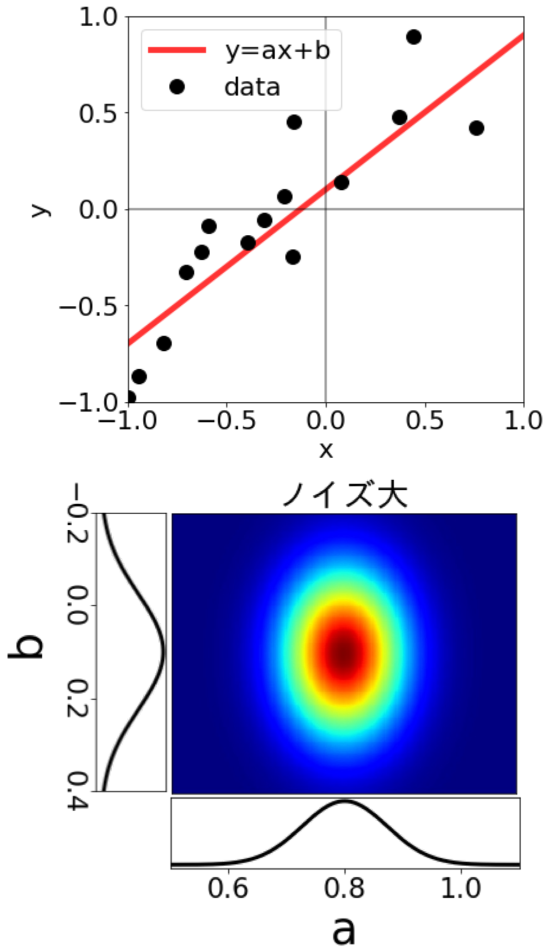
平均：$\overline{y}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i$，分散：$\overline{x^2}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

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

ベイズ計測の利点
$y=ax+b$の取り扱いを通じて

結論: 神器1 パラメータの事後確率推定





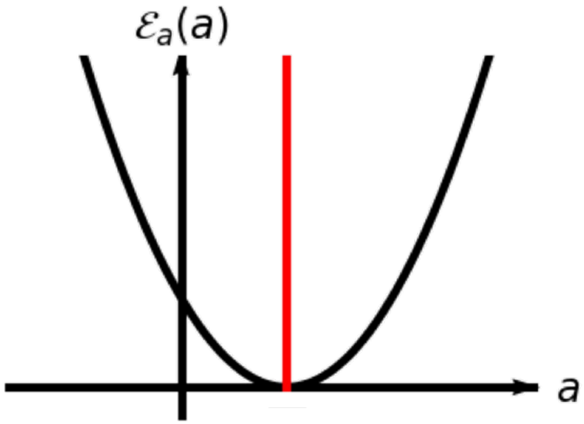
$y=ax+b$の最小二乗法

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

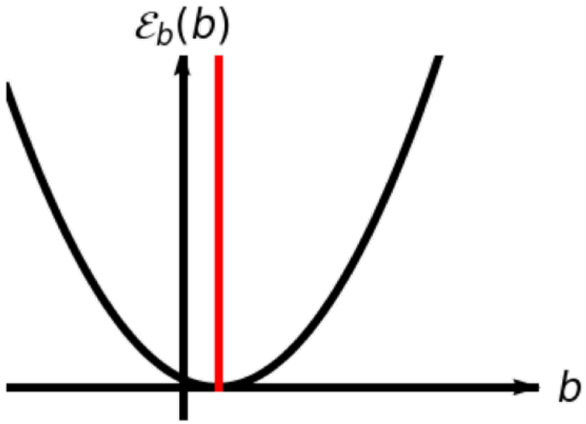
$$a_0 = \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}} \quad b_0 = \overline{y}$$

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

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



$$a_0 = \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}$$



$$b_0 = \overline{y}$$

$y=ax+b$の最小二乗法

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

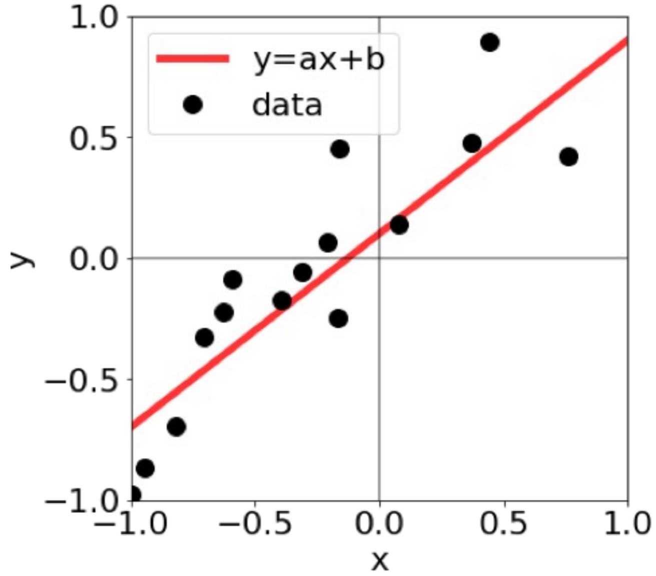
二乗誤差$E(a,b)$を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

$$a_0=\frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}\quad b_0=\overline{y}$$

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



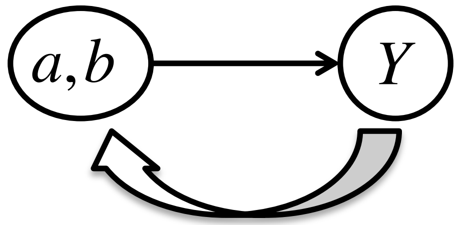
平均：$\bar{y}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i$，分散：$\overline{x^2}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

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

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)

$$p(Y,a,b) = \underline{p(Y \mid a,b)\,p(a,b) = p(a,b \mid Y)\,p(Y)}$$

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(a,b \mid Y)$ ：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)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

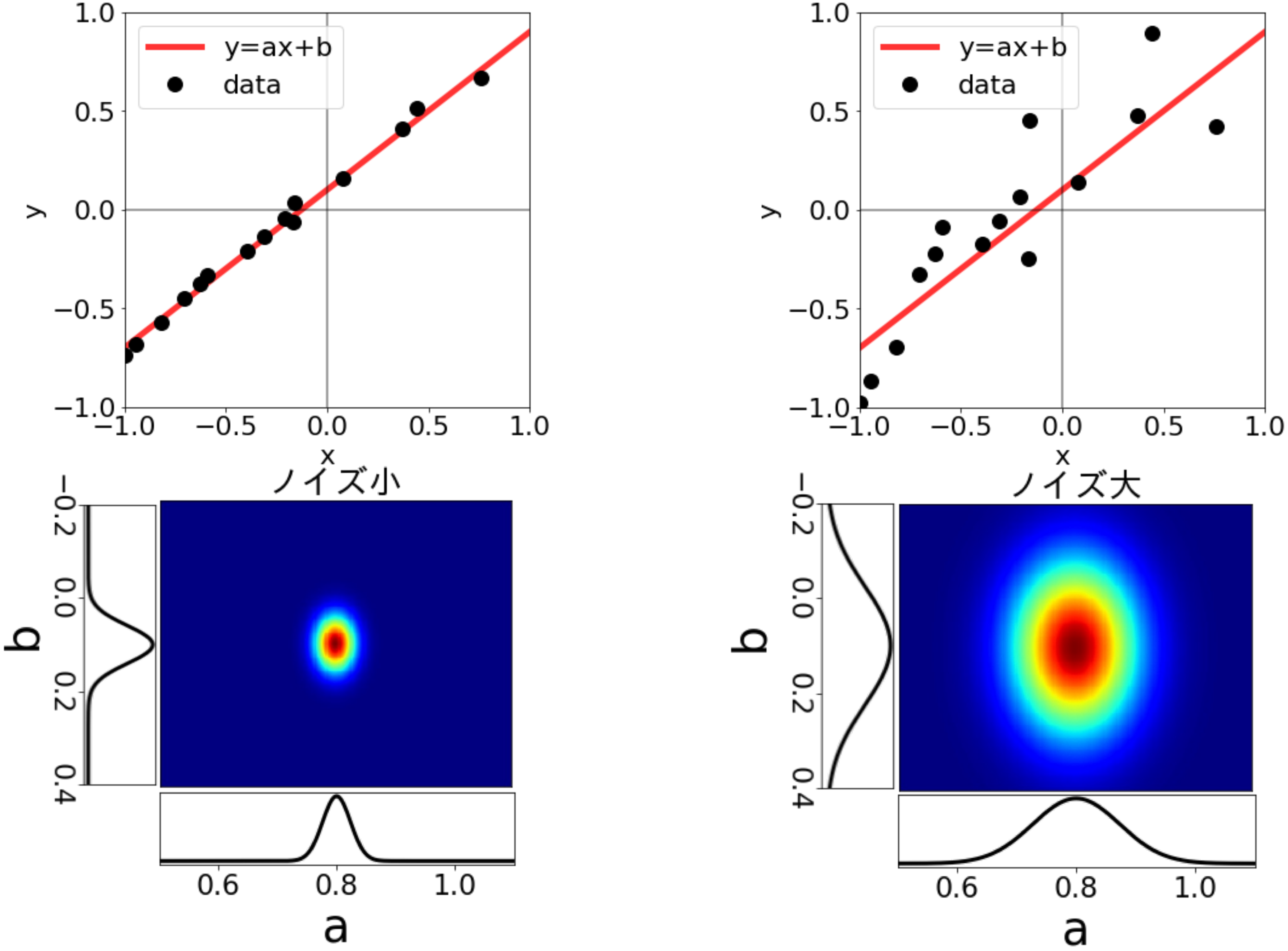
$$p(n_i) = p(y_i|a,b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i-(ax_i+b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

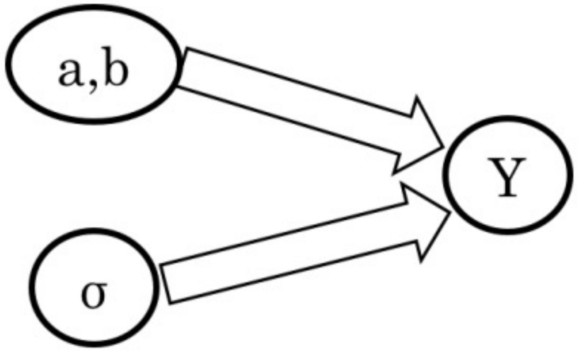
神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

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

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



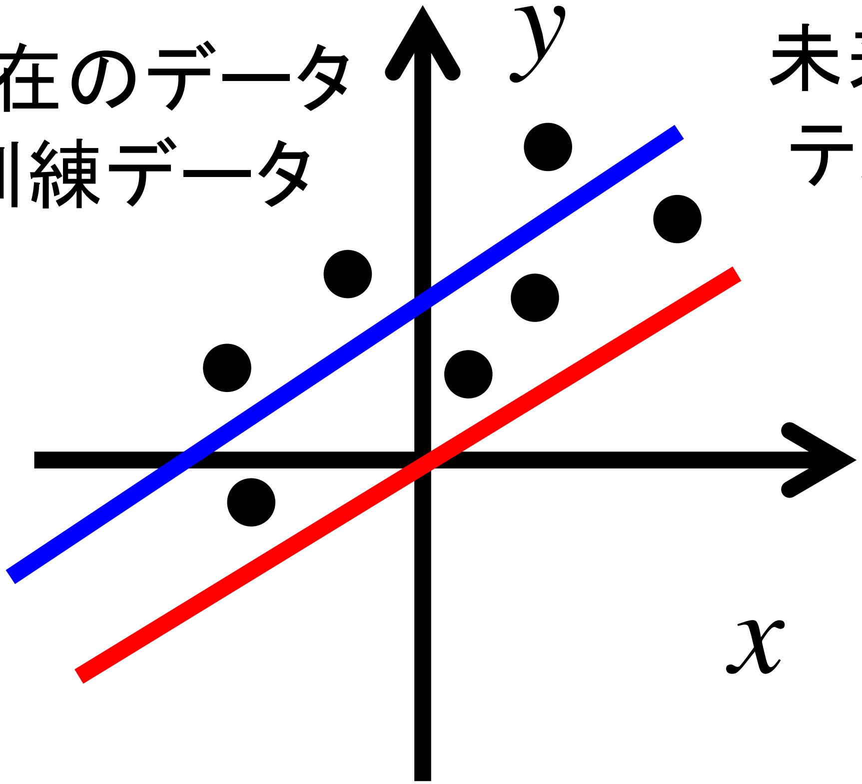
$$
\begin{aligned}
p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb\, p(Y|a,b,\sigma^2) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \int dadb \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \left\{\exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0,b_0)\right) + \int da \exp\left(-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2\right)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

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

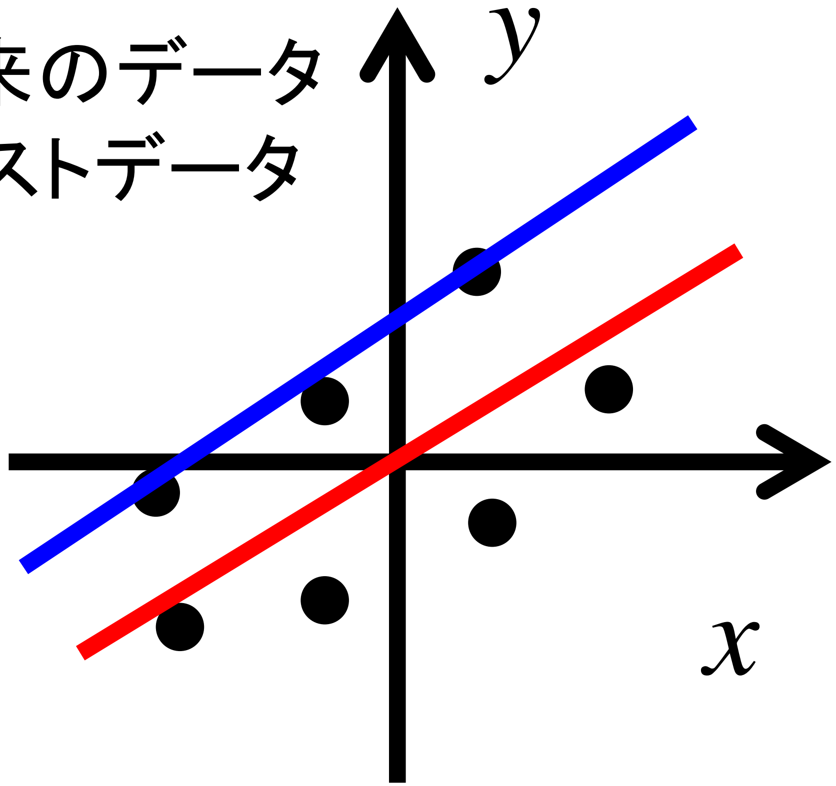
問題意識　神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$か$y=ax+b$か?

現在のデータ
訓練データ



未来のデータ
テストデータ



$y=ax+b$: 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. θがないぞ

3. $p(K,\theta,Y)$ の存在を仮定

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

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

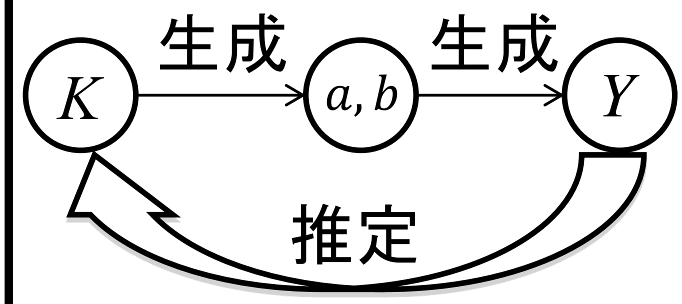
4. 無駄な自由度の系統的消去：周辺化，分配関数

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

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

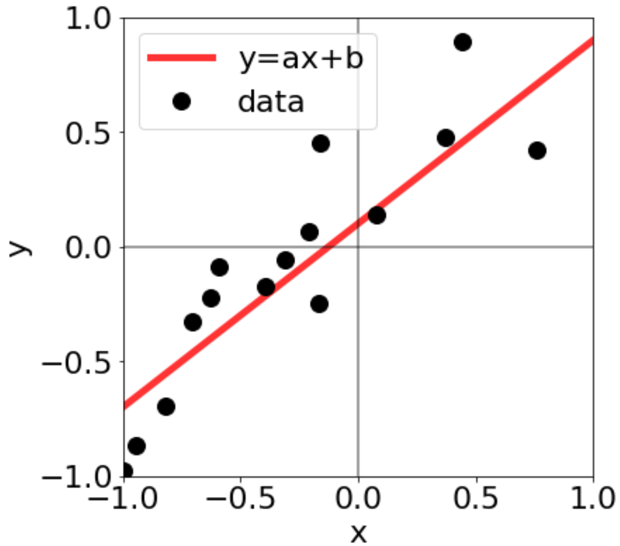
$$F(K) = -\log\int \exp(-nE(\theta))\,p(\theta)\,d\theta$$

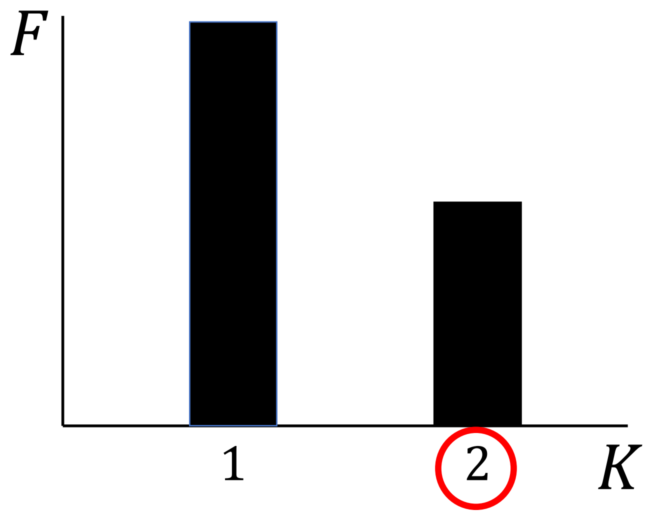
自由エネルギーを最小にするモデル K を求める.



K ：モデル
a, b ：傾き 切片
Y ：観測データ

モデル選択: 自由エネルギー
$y = ax$か$y = ax + b$か?





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

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

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

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

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 (XPSとXASの統合)

内容

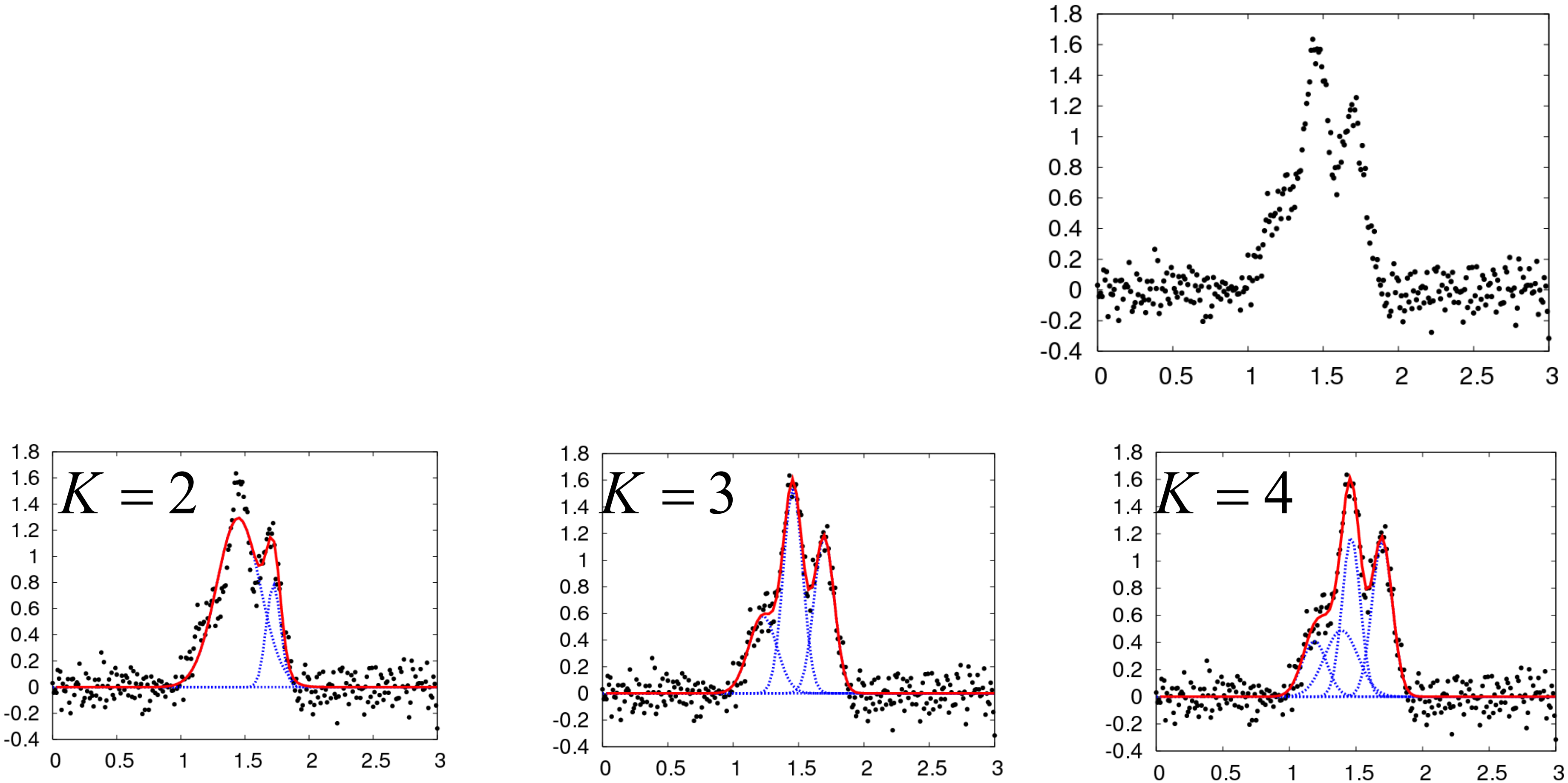
- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

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 Network*s 2012

スペクトル分解の定式化

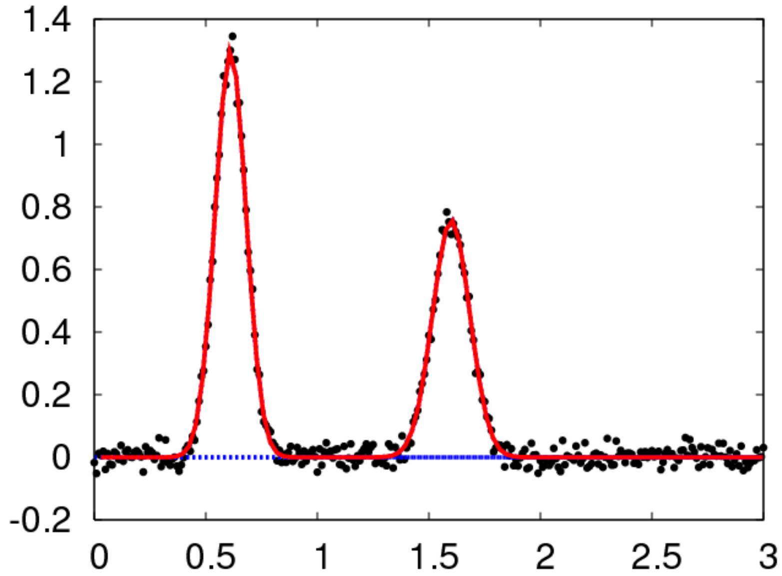
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i : 入力　y_i : 出力

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

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

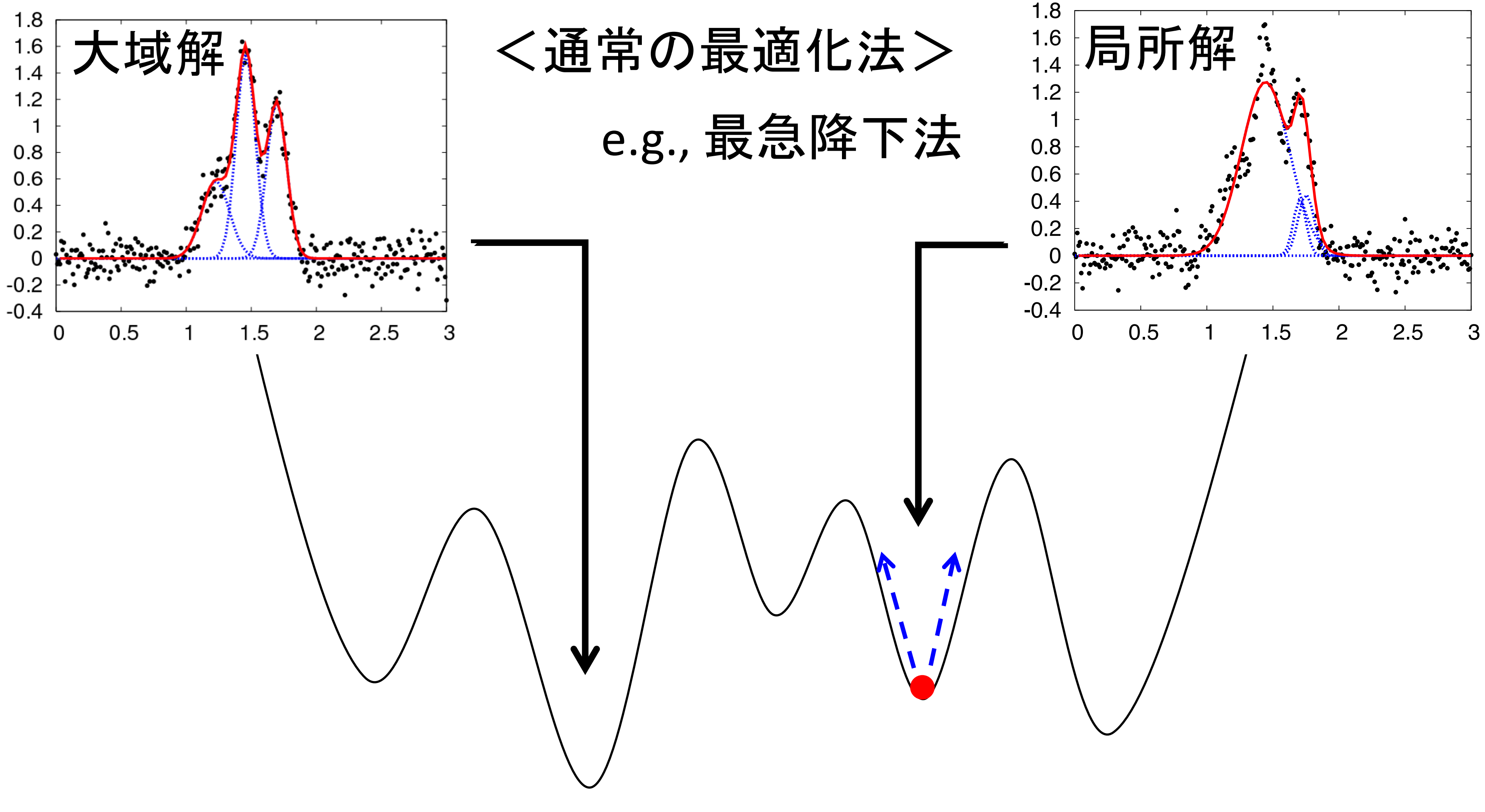


二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

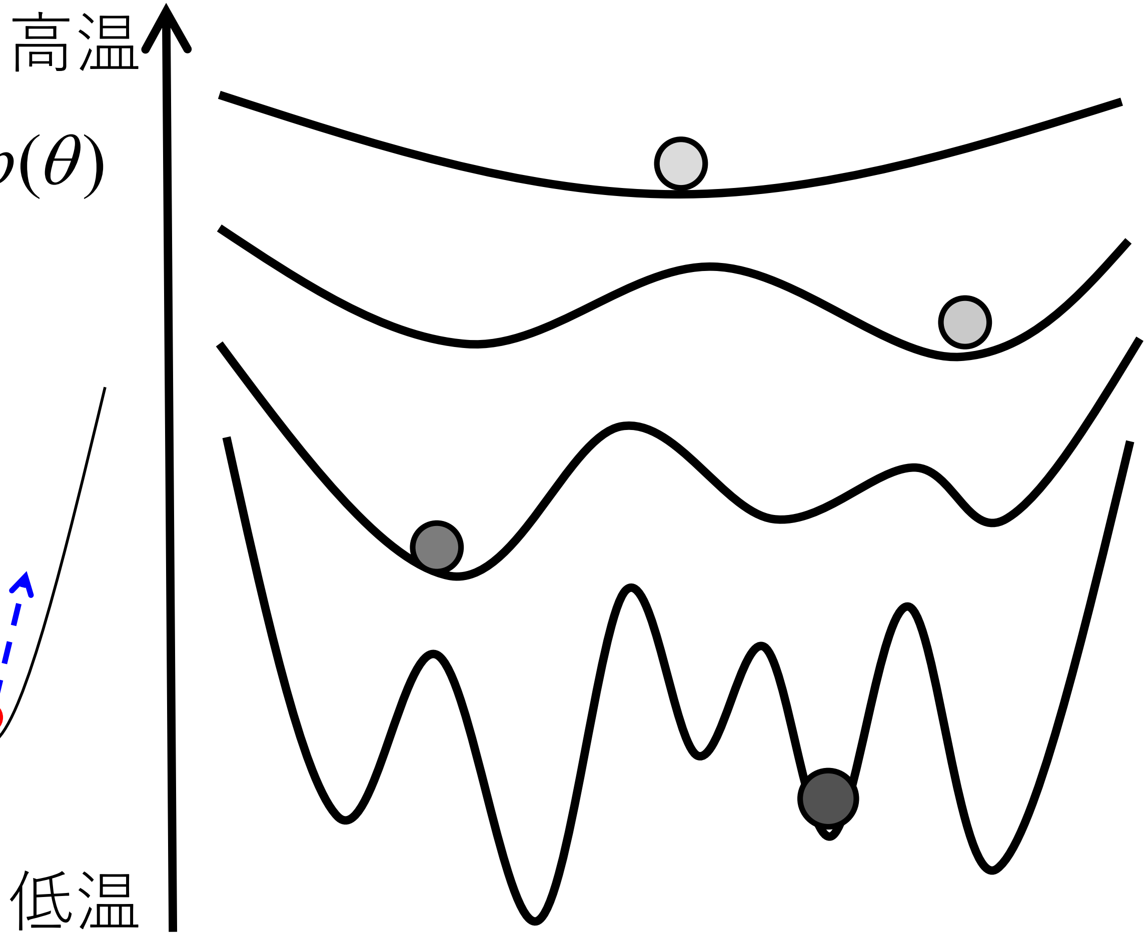


モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

メトロポリス法

$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2}\beta E(\theta)\right)p(\theta)$$

レプリカ交換モンテカルロ法



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

モデル選択: 自由エネルギーの導入

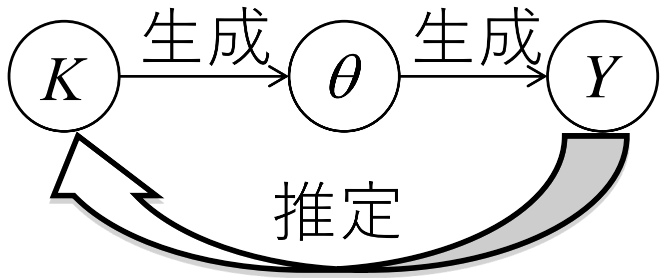
1. 欲しいのは $p(K|Y)$

2. θがないぞ

3. $p(K,\theta,Y)$ の存在を仮定

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

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



K：ピーク個数
θ：ピーク位置など
Y：観測スペクトル

4. 無駄な自由度の系統的消去：周辺化，分配関数

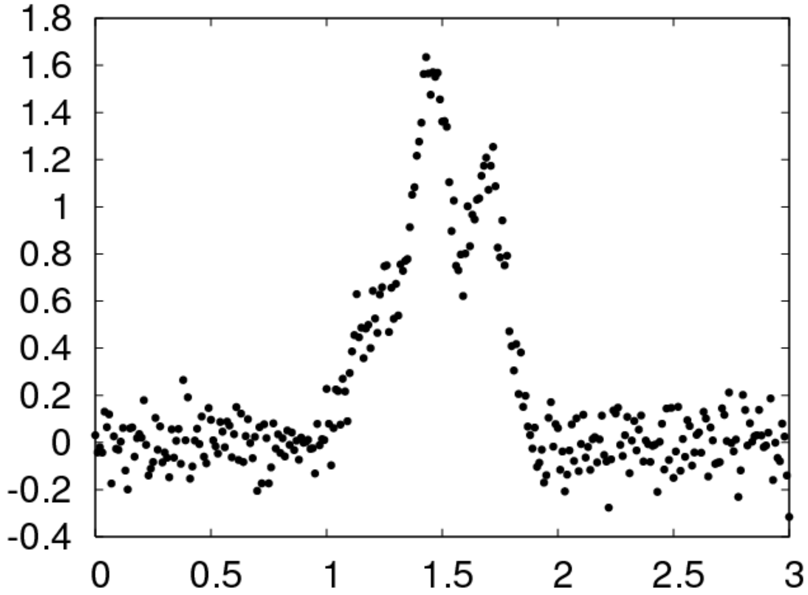
$$p(K,Y) = \int p(K,\theta,Y)d\theta$$

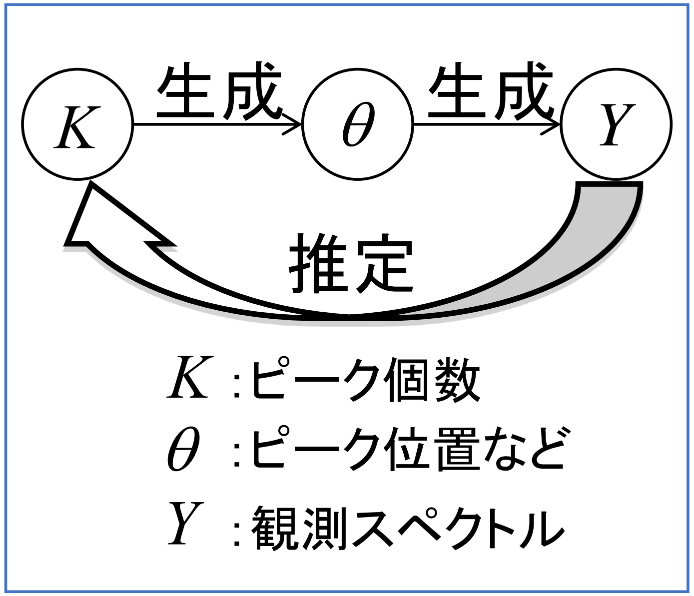
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)d\theta$$

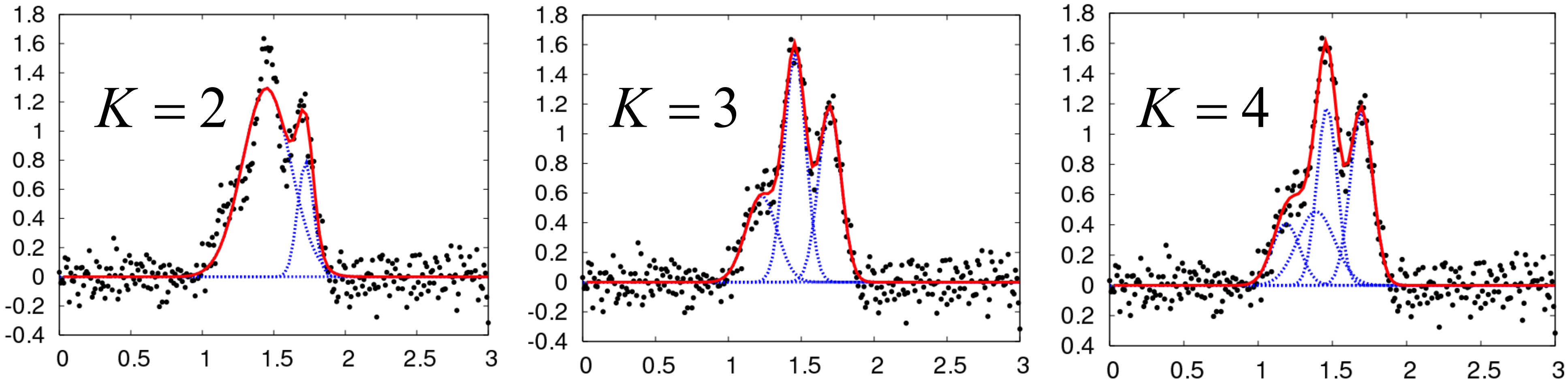
$$F(K) = -\log\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)d\theta = \boxed{E-TS}$$

自由エネルギーを最小にする個数K を求める.

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

内容

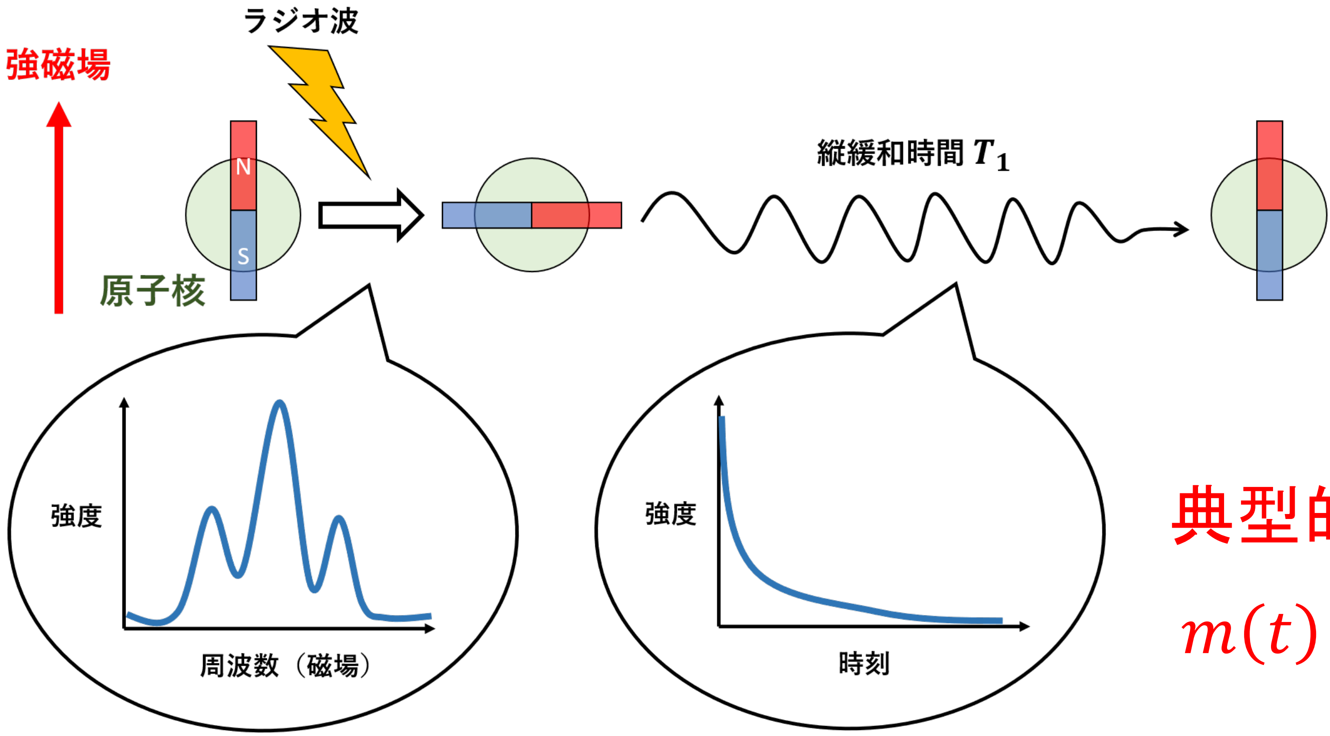
- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

核磁気共鳴法へのデータ駆動科学的手法の開発

上田朔[A]，片上舜[A]，吉田章吾[B]，中井祐介[B]，
水戸毅[B]，水牧仁一朗[C]，岡田真人[A]
A 東大新領域，B 兵庫県立大理学研究科，C JASRI

Ueda, Katakami, Yoshida, Koyama, Nakai, Mito, Mizumaki and Masato Okada, "Bayesian approach to T_1 analysis in NMR spectroscopy with applications to solid state physics", *Journal of the Physical Society of Japan*.92, 054002 (2023)

NMR測定



NMRスペクトル

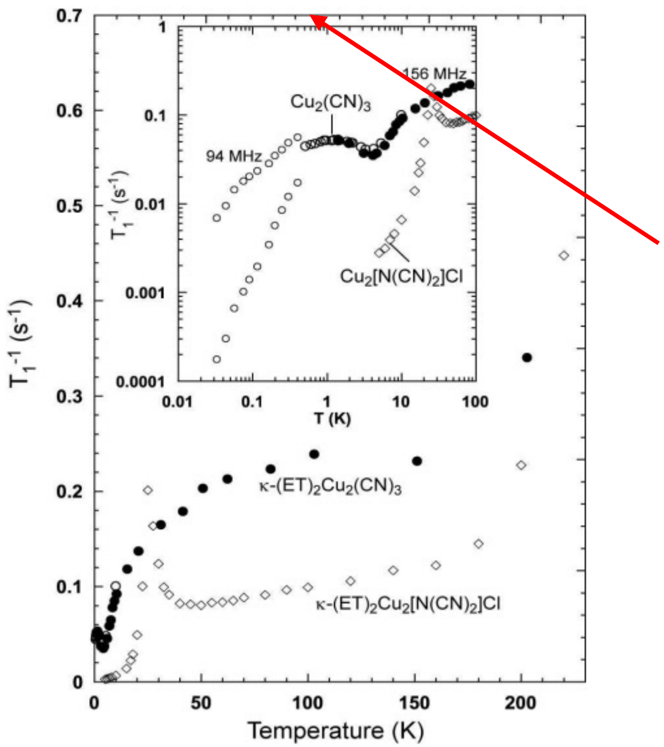
核スピン格子緩和曲線

典型的には

$$m(t) \propto \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)$$

核スピン格子緩和 – 多成分の場合

例：量子スピン液体のNMR測定では，高温側では単一の指数関数でフィッティングできていた核スピン格子緩和曲線が，低温では2つの指数関数の和に分裂することが報告されている。



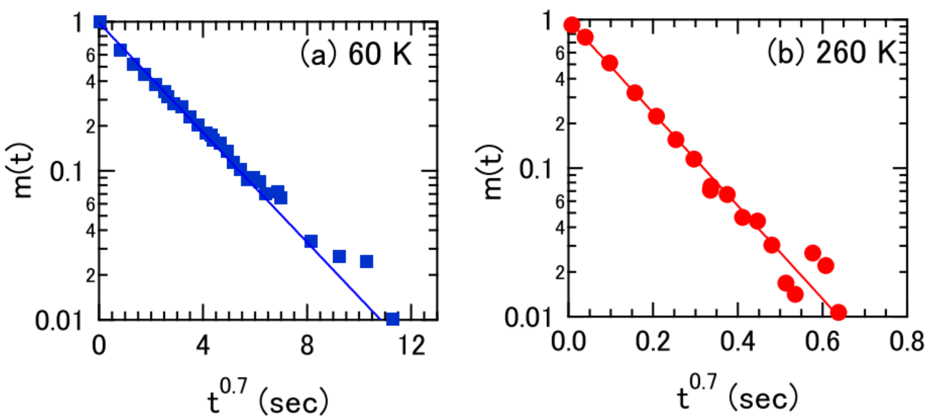
有機モット絶縁体スピン液体を報告したY. Shmizu et al. では，試料が2相に分かれていると解釈している。

0.4 Kより低温側で緩和時間T_1が分裂

Y Shimizu et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 107001 (2003)

核スピン格子緩和 – stretched exponentialの場合

粉末試料を使う場合や試料のdisorderが原因で緩和率T_1^{-1}が一つの値の周りに連続的に分布している場合，現象論的にstretched exponential 関数 $\exp\left(-\left(\frac{t}{T_1}\right)^{\beta}\right)$ でフィッティングする場合もある。



常圧下における半導体SmS（粉末）の核スピン格子緩和曲線．T Koyama et al. は$\beta = 0.7$ のstretched exponential関数を使ってフィッティングし，得られたT_1の温度依存性などを議論した．

T Koyama et al 2015 J. Phys.: Conf. Ser. **592** 012027

核スピン格子緩和のフォワードモデル

単一の指数関数でうまくフィッティングできない緩和曲線が実験で得られた場合，①多成分の緩和を仮定するか②stretched exponentialを仮定するかで解釈が変わってしまう。
そこで，ベイズ推論の枠組みで最も妥当なモデルを選択することを試みる。

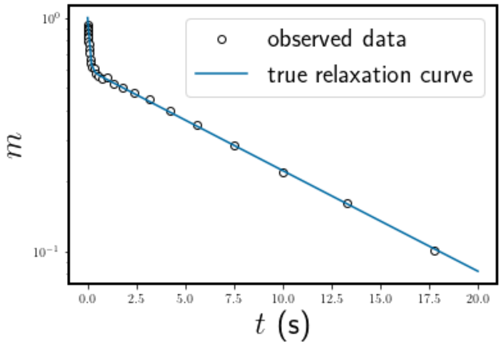
$$m(t) = \sum_{k=1}^{K} A_k \ \exp\left(-(W_k t)^{\beta_k} \right) + \mathrm{C} + \epsilon$$

緩和振幅　緩和率 $\left(=\frac{1}{T}\right)$　Stretching 指数　オフセット　ノイズ（ガウシアン）

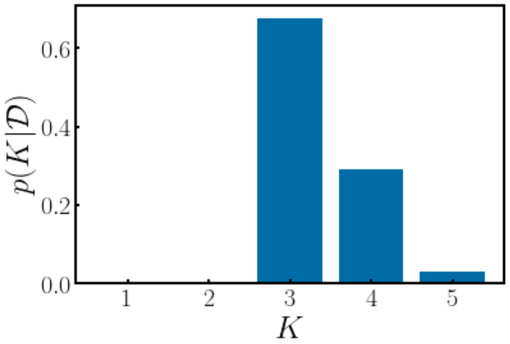
モデル数 K の事前分布は一様とする．観測データ $\mathcal{D} = \{(t_i, m_i)\}_{i=1,2,\ldots,N}$ が与えられたとき，事後確率$p(K\,|\mathcal{D})$ が最大となるモデル数を選択する。

数値実験(多成分: $K = 3$)

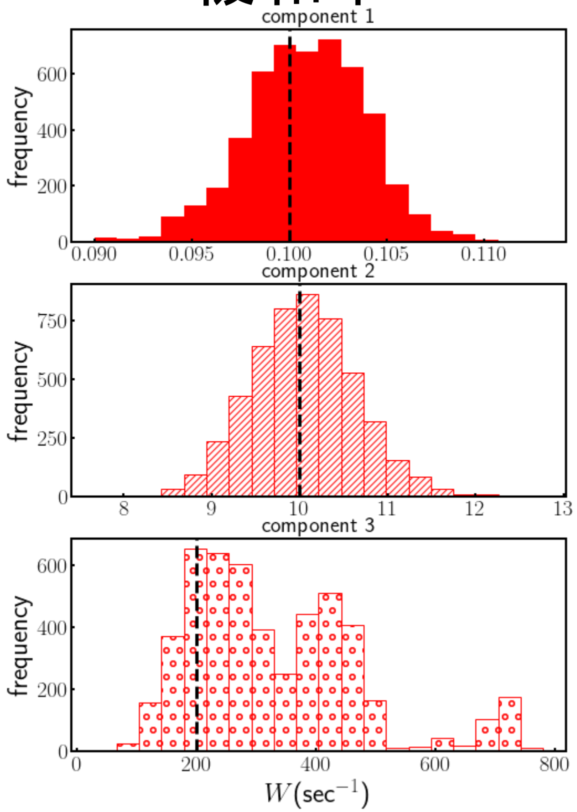
生成データ



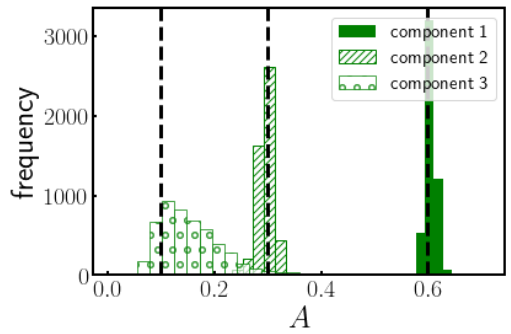
モデル選択



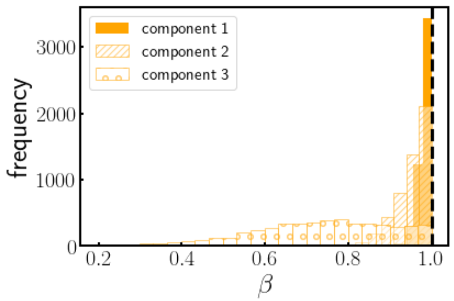
緩和率



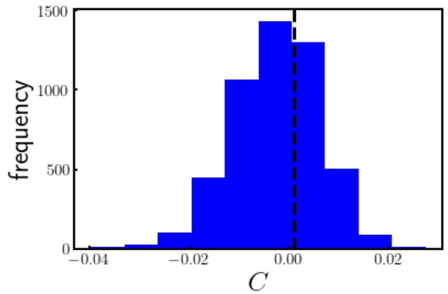
緩和振幅



Stretching指数

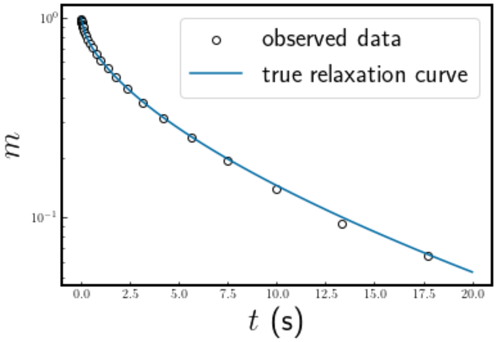


オフセット

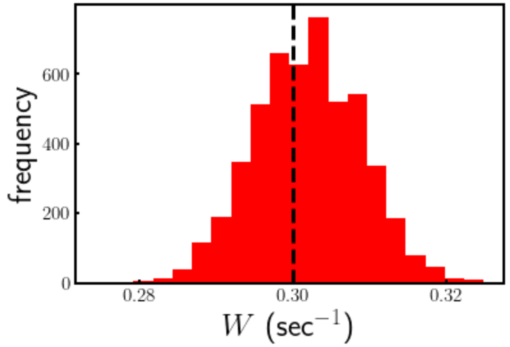


数値実験（単一のstretching exponential）

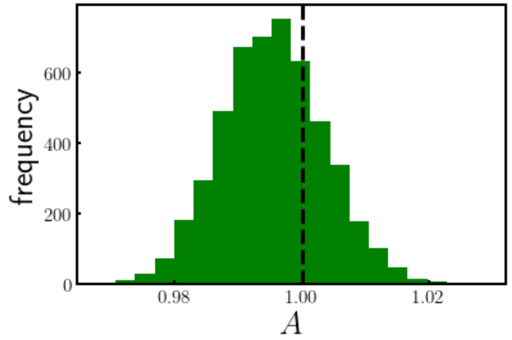
生成データ



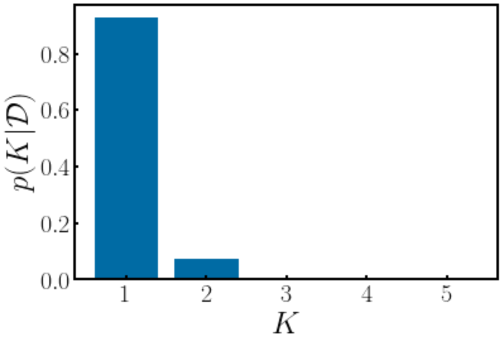
緩和率



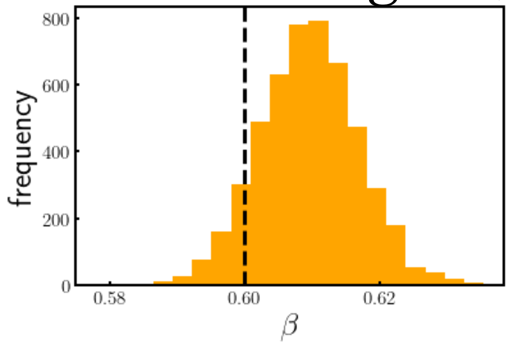
緩和振幅



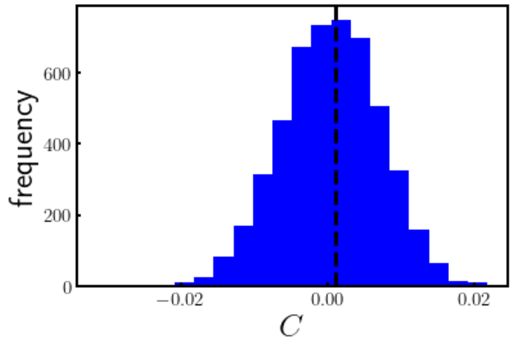
モデル選択



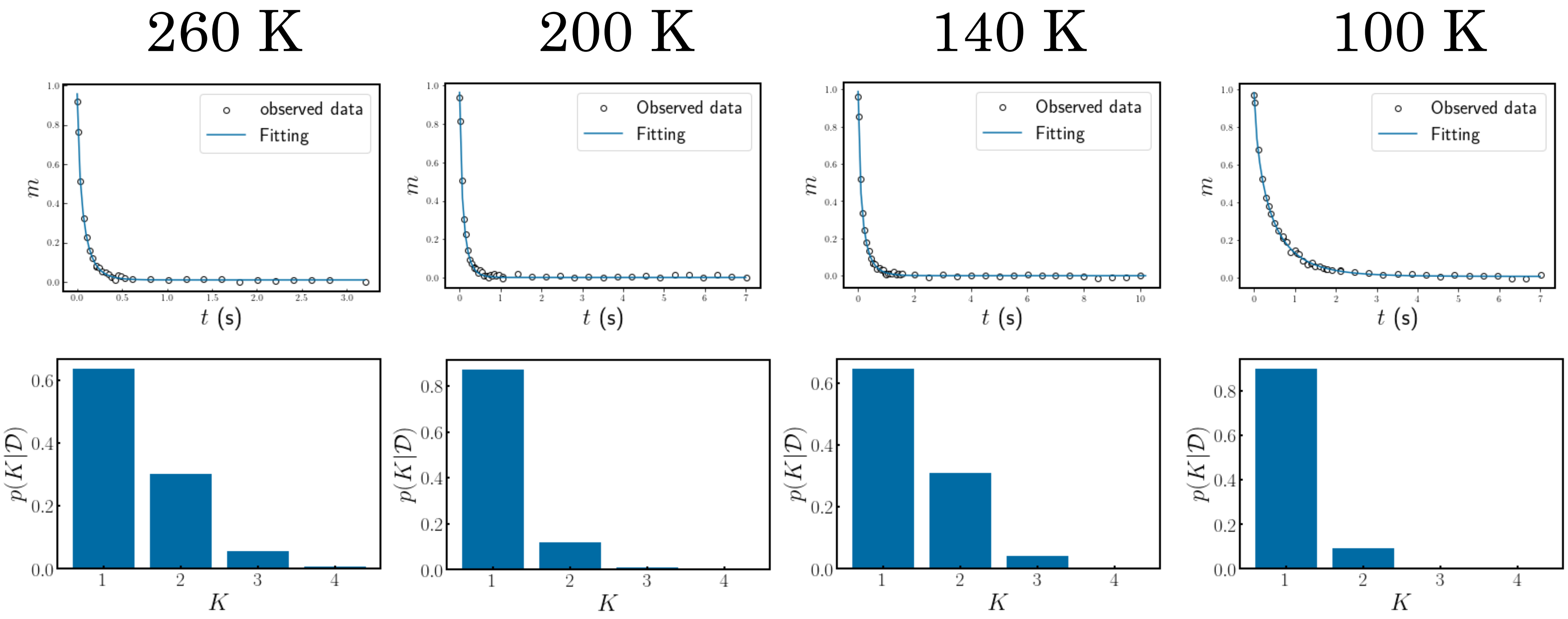
Stretching指数



オフセット

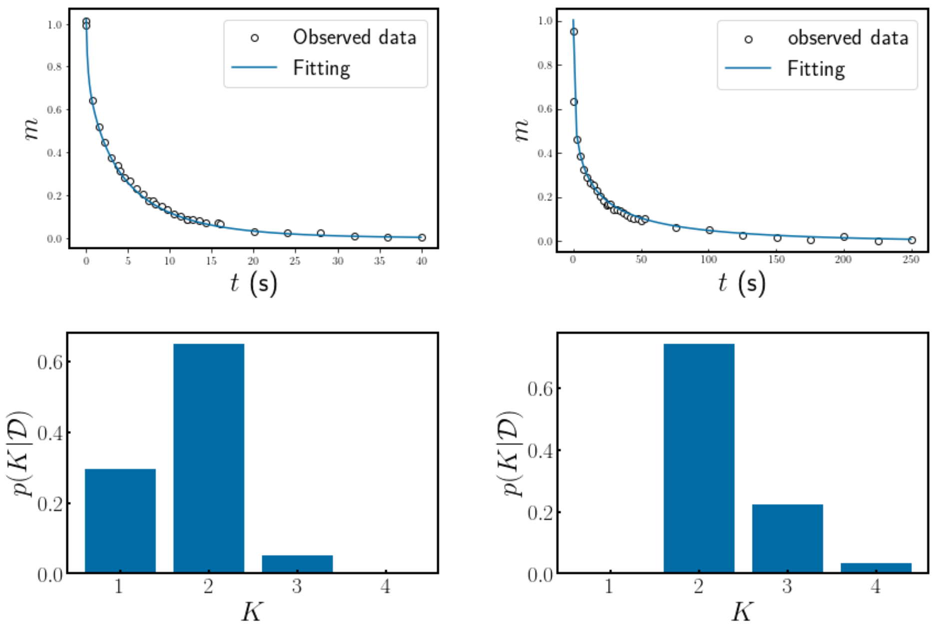


SmS の実験データ（常圧）



SmS の実験データ（常圧）

60 K　　30 K



100 Kより高温側では単一のstretched exponentialが選択される。（データを報告したT Koyama et al. が行った解析を支持）

一方，低温側では2つの緩和成分があるという結果が得られた。（物理的解釈は次回以降）

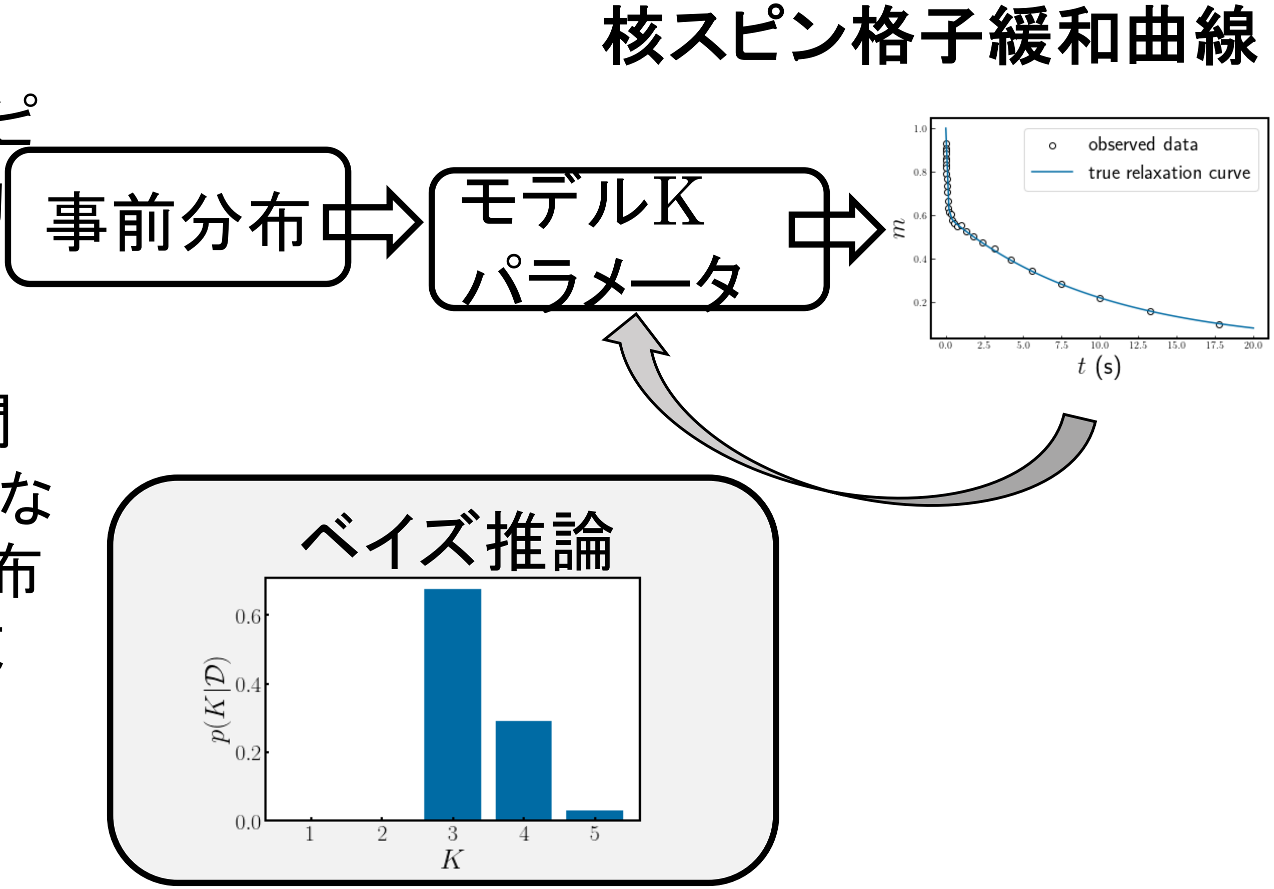
NMRまとめ

・試料の乱れや複数の緩和成分の共存を考慮した核スピン格子緩和のモデルを構築した。

・NMR測定における核スピン格子緩和曲線の物理的解釈をサポートできる。

・βの適切な事前分布に関する物理的な事前知識がないため [0,1] 上の一様分布を使ったが,事前分布の改善が望まれる。

・今後は半導体SmSのNMR測定実験に本手法を適用し，物理的解釈を議論する。



内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

X線光電子および吸収分光スペクトルのベイズ統合

横山優一[1], 魚住孝幸[2], 永田賢二[3], 岡田真人[3,4], 水牧仁一朗[1]
[1]高輝度光科学研究センター, [2]阪府大院工, [3]物材機構, [4]東大新領域

Yokoyama, Uozumi, Nagata, Okada, and Mizumaki. “Bayesian Integration for Hamiltonian Parameters of X-ray Photoemission and Absorption Spectroscopy” *JPSJ*, **90**, 034703, (2021)

XPSとXASの従来型の解析法

実験
(XPS、XAS)

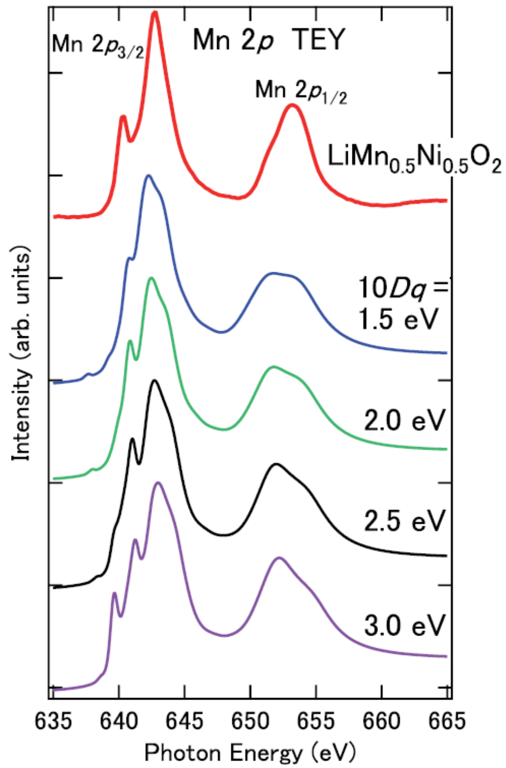
計測スペクトル

$\boldsymbol{\theta}$を手動で調整しながら比較

理論計算
$\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta})$

理論スペクトル

計測スペクトルを
再現可能な$\boldsymbol{\theta}$を採用



Y. Y *et al*., APL **107**, 033903 (2015).

従来法の最大の問題点
・XPSとXASを同時解析する場合、客観的な統合手法が存在しない。

XPSとXASのベイズ推定による解析法

パラメータ$\boldsymbol{\theta}$ ⇒ 実験（XPS、XAS） ⇒ 計測スペクトル$\boldsymbol{D}$

ベイズの定理

$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D})$ ⇐ $p(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$

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

ベイズ計測

1. パラメータの事後確率推定
2. REMCの適用
3. XPSとXASにベイズ統合を適用

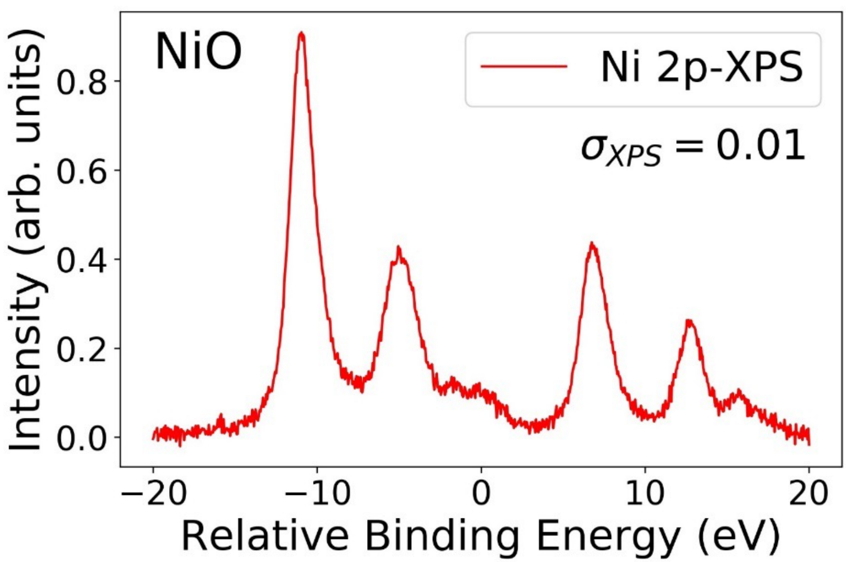
NiOを想定したXPSとXASの人工データ

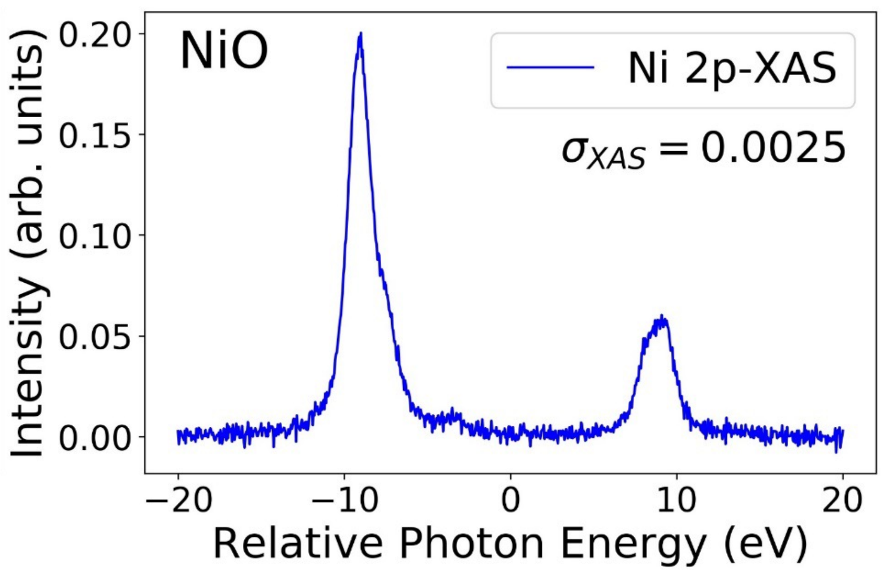
$$H = \sum_{\gamma,\sigma} \varepsilon_{3d}(\gamma) d^{\dagger}_{\gamma\sigma} d_{\gamma\sigma} + \sum_{m,\sigma} \varepsilon_P p^{\dagger}_{m\sigma} p_{m\sigma} + \sum_{\gamma,\sigma} \varepsilon_{p\_L} a^{\dagger}_{\gamma\sigma} a_{\gamma\sigma} + \sum_{\gamma,\sigma} V(\gamma)\left(d^{\dagger}_{\gamma\sigma} a_{\gamma\sigma} + a^{\dagger}_{\gamma\sigma} d_{\gamma\sigma}\right)$$

$$+ U_{dd} \sum_{(\gamma,\sigma)>(\gamma',\sigma')} \left(d^{\dagger}_{\gamma\sigma} d_{\gamma\sigma} d^{\dagger}_{\gamma'\sigma'} d_{\gamma'\sigma'}\right) - U_{dc} \sum_{\gamma,m,\sigma,\sigma'} d^{\dagger}_{\gamma\sigma} d_{\gamma\sigma}\left(1 - p^{\dagger}_{m\sigma'} p_{m\sigma'}\right) + H_{multiplet}$$

$10Dq$

Δ





ベイズ統合(ベイズ計測によるデータ統合)
パラメータの事後確率

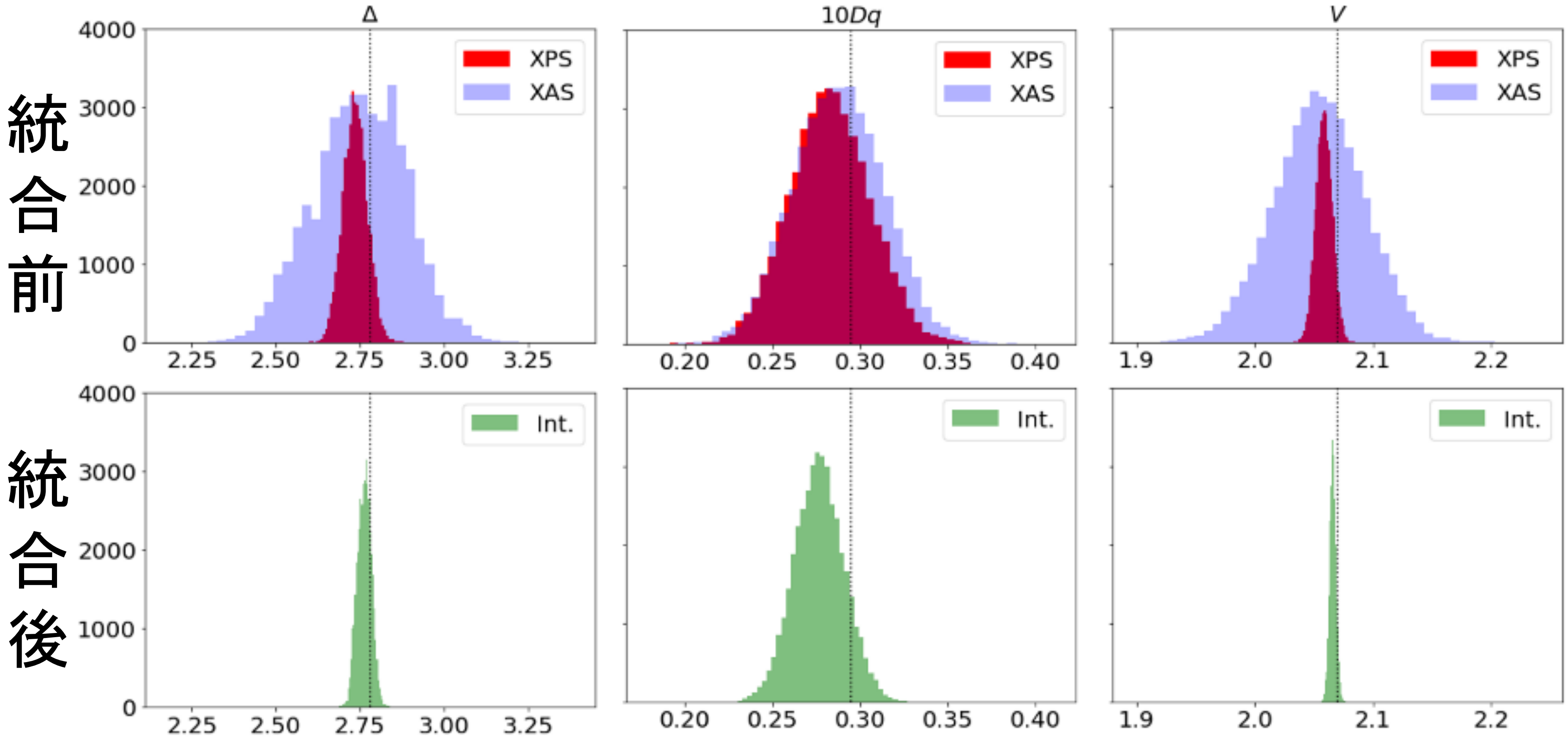
$$p(\boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{D}_{XPS},\hat{b}_{XPS},\boldsymbol{D}_{XAS},\hat{b}_{XAS})$$

$$=\frac{p(\boldsymbol{D}_{XPS},\hat{b}_{XPS},\boldsymbol{D}_{XAS},\hat{b}_{XAS}|\boldsymbol{\Theta})p(\boldsymbol{\Theta})}{p(\boldsymbol{D}_{XPS},\hat{b}_{XPS},\boldsymbol{D}_{XAS},\hat{b}_{XAS})}.$$

$$E_{INT}(\boldsymbol{\Theta})\equiv E_{XPS}(\boldsymbol{\Theta})+\frac{N_{XAS}\hat{b}_{XAS}}{N_{XPS}\hat{b}_{XPS}}E_{XAS}(\boldsymbol{\Theta}).$$

データ統合の誤差関数は
XPSとX ASの誤算関数の和
XPSとXASの重みはデータのみから自動決定
自由エネルギー差からデータ統合の可否も自動決定

ベイズ統合の結果



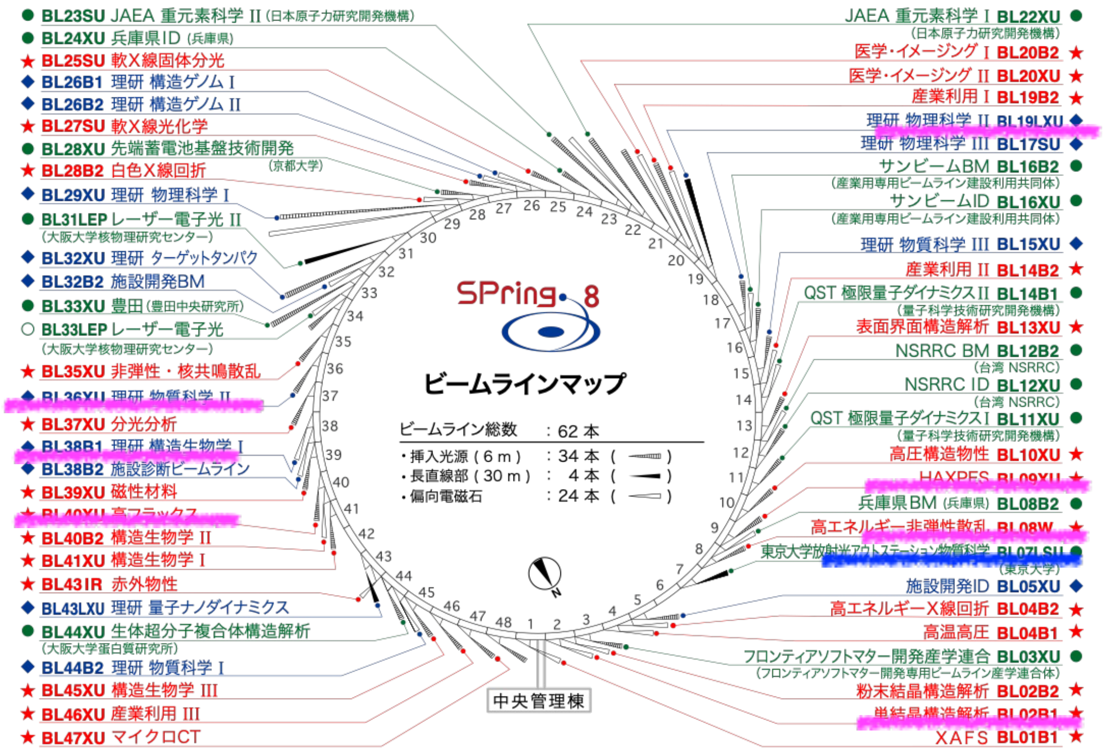
全パラメータで統合後の推定精度が向上
⇒データ統合に成功

内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

SPring-8全ビームラインベイズ化計画

敬称略



赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本

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

2024年中に14BL/26のベイズ化が完了
横山氏優一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

- 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

- 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(近くにくるな症候群)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日シンポ
- あいちSR: 2023年10月30日シンポ
- 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日シンポ
- 佐賀LS: 2024年10月16日シンポ
- 広大HiSOR: 2024年11月18日
- PF 2025年2月6日

内容

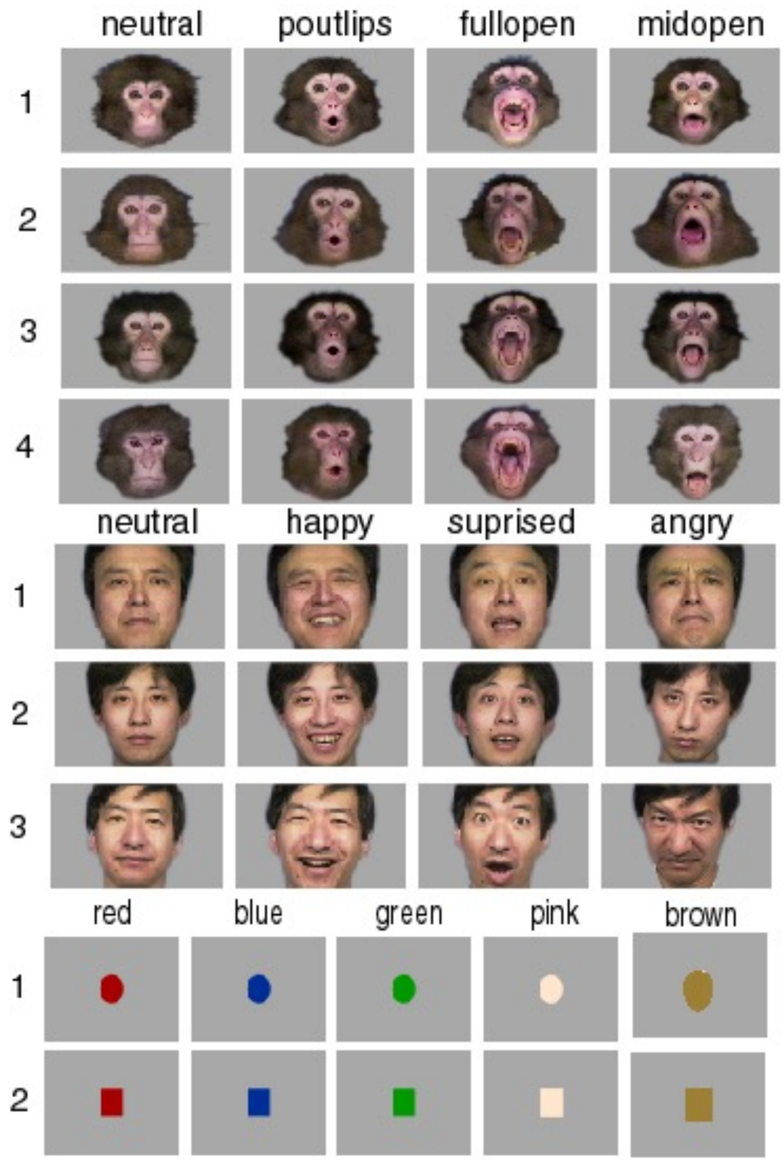
- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

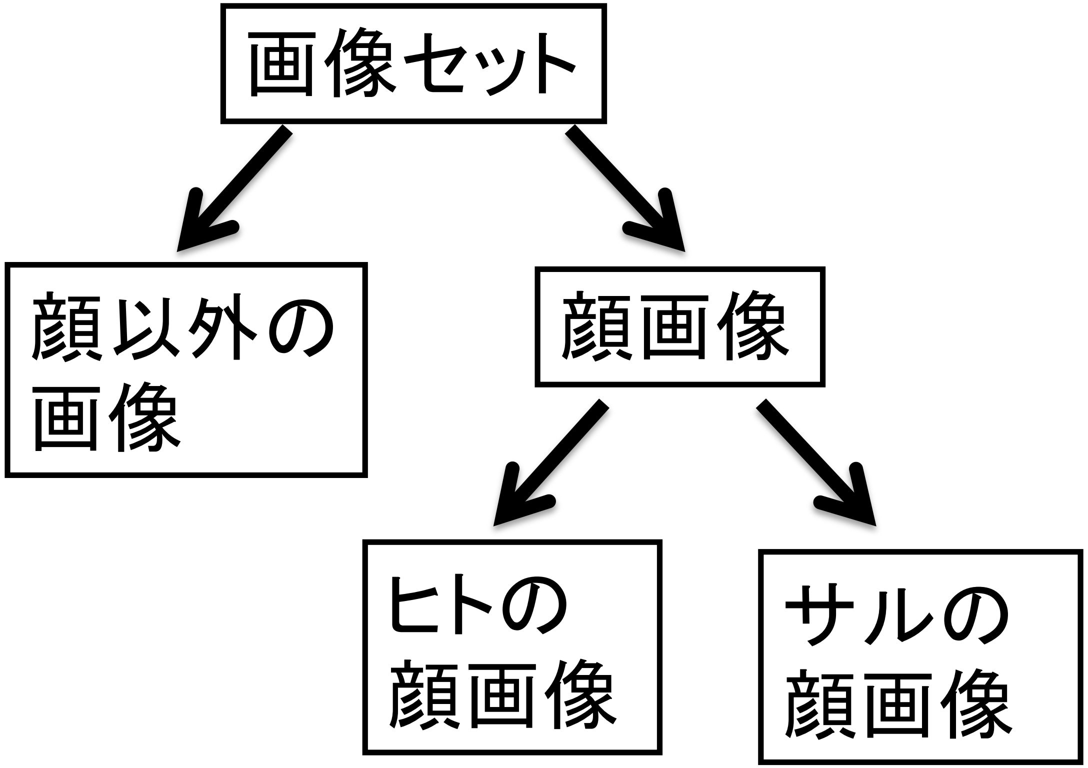
サルの世界観の可視化

松本有中央[1], 岡田真人[2], 菅生宮本靖子[1], 山根茂[3],
河野憲二[4]
[1]産総研, [2]東大新領域, [3]前橋工大, [4]京大

Narihisa Matsumoto, Masato Okada, Yasuko Sugase-Miyamoto, Shigeru Yamane and Kenji Kawanoi. “Population dynamics of face-responsive neurons in the inferior temporal cortex”, *Cerebral Cortex,* **15**, 2005

階層的な画像セット



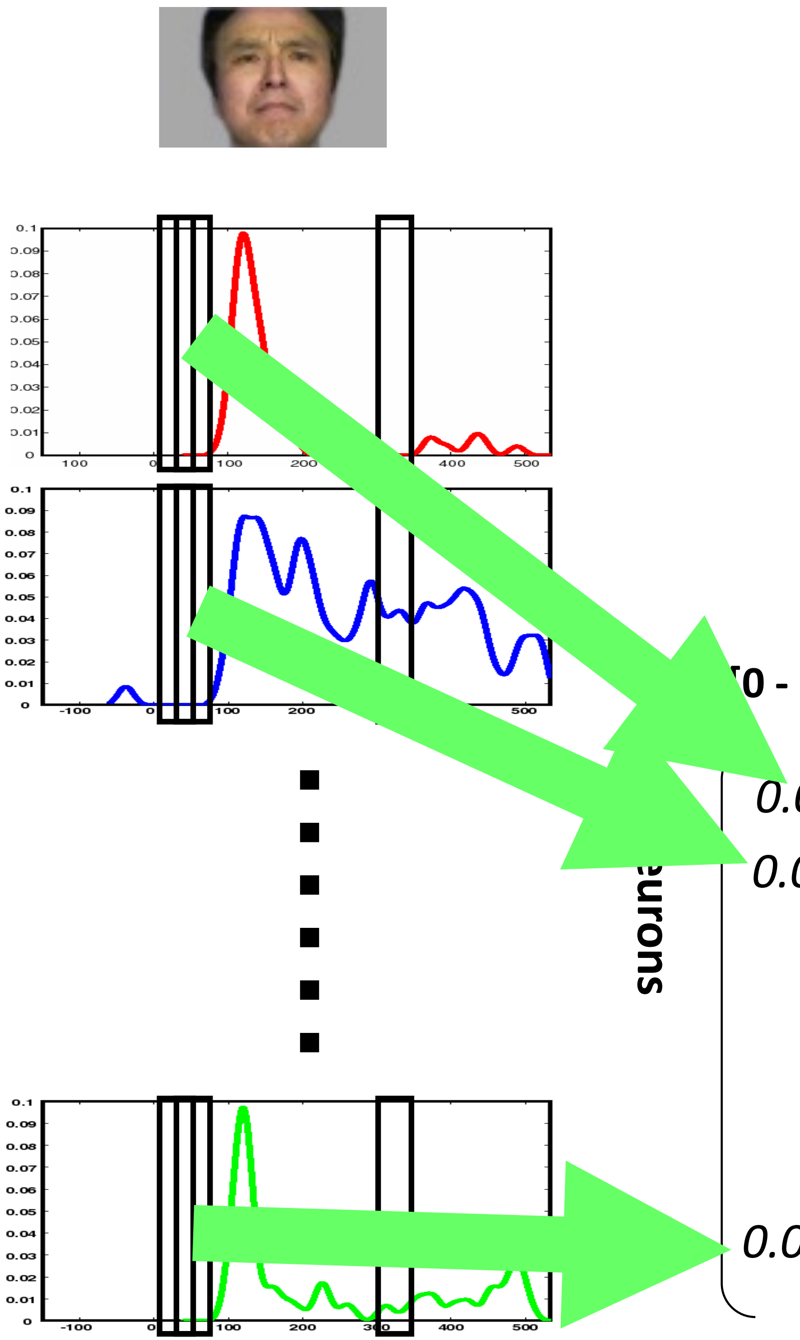


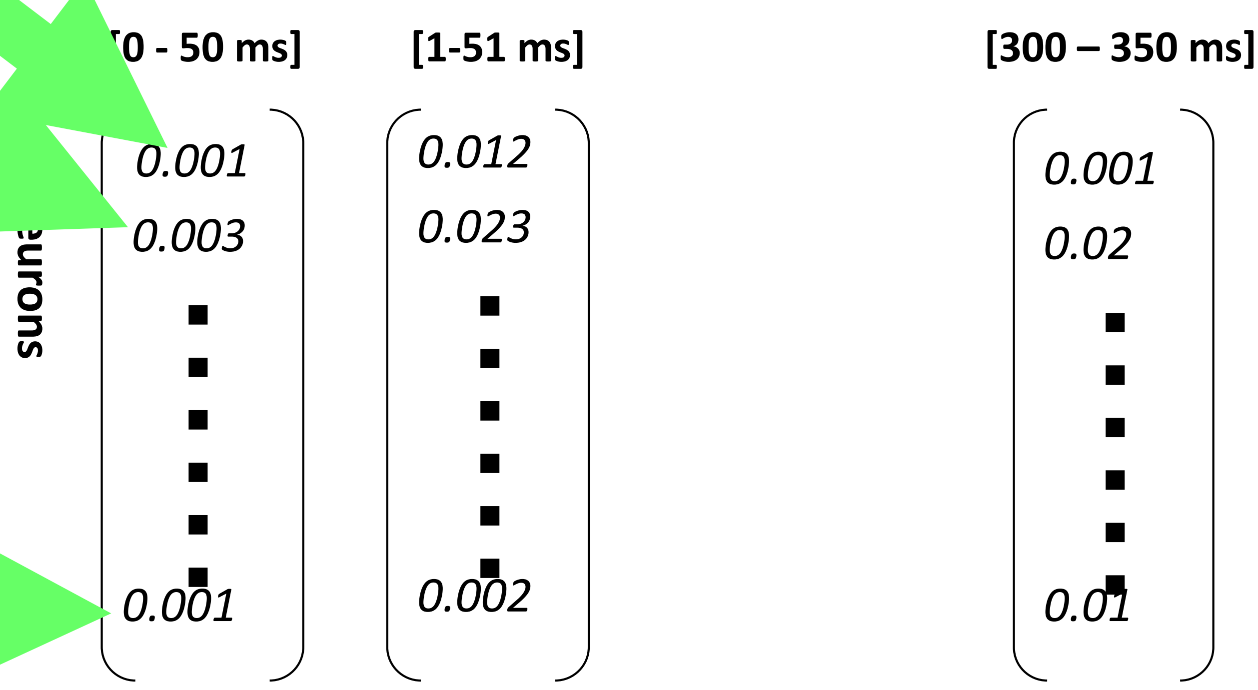
個体別
表情

(Sugase, Yaname, Ueno and Kawano, *Nature*, 1999)

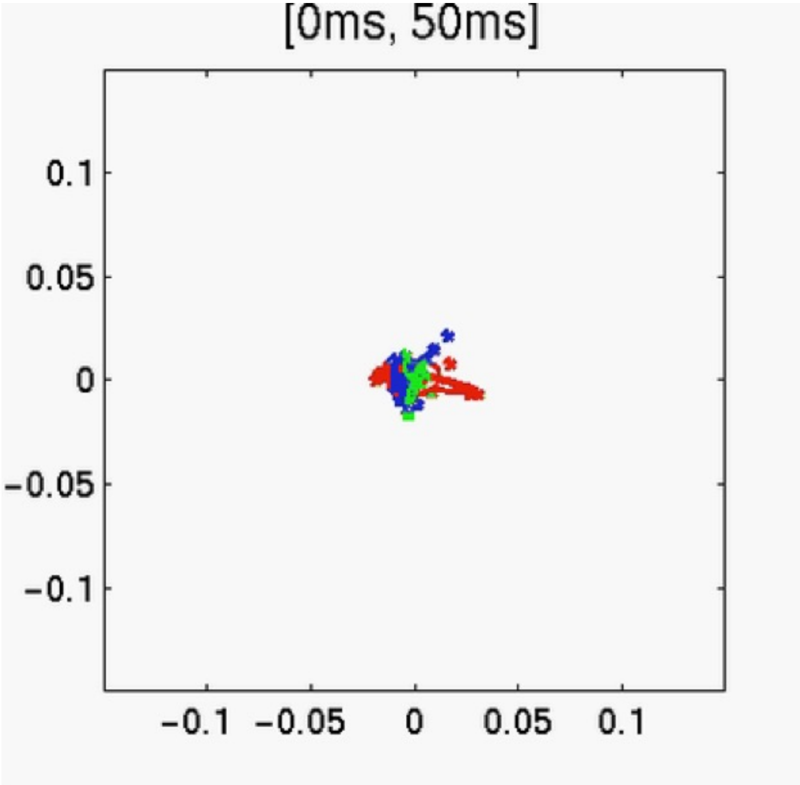
神経集団ベクトル

- 50 msecの時間窓
- 一つの刺激:
  45次元ベクトル
- 38個のベクトル





主成分分析の結果



	点	楕円
赤	ヒト	個体別
青	サル	表情
緑	図形	形

45次元中の動く38個のベクトル

- グローバルな分類
- （サル vs. ヒト vs. 図形）[90 – 140 ms]
- 詳細な分類

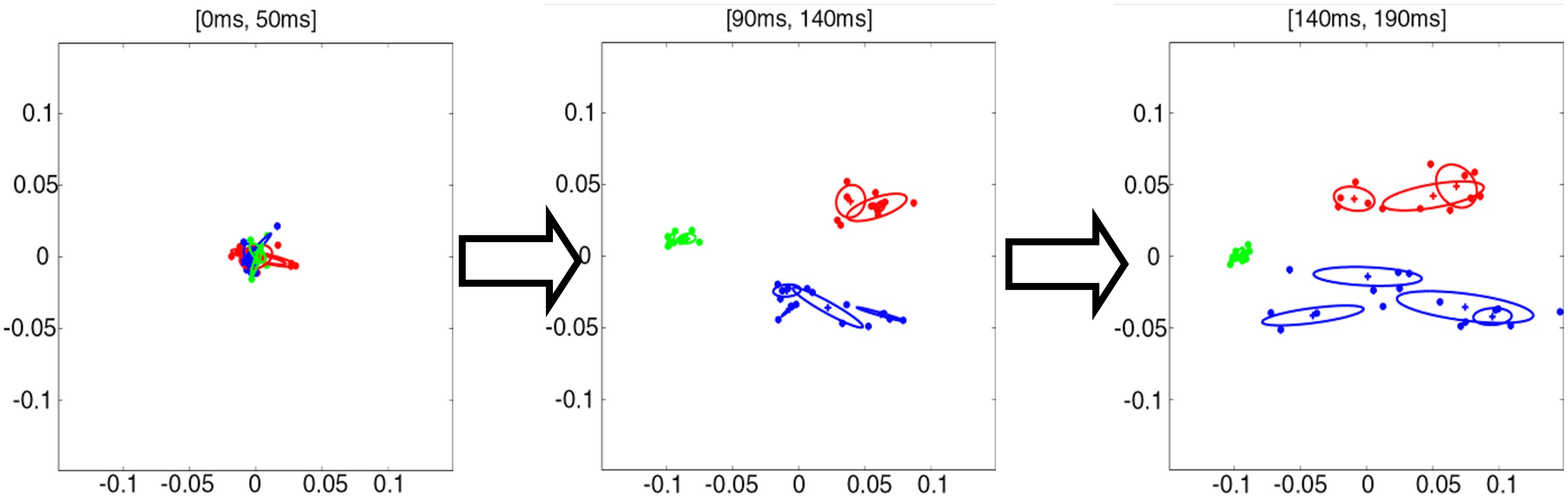
（サルの表情, ヒトの個体別, 図形の形）

[140 – 190 ms]

ニューロン集団による入力画像の階層的なエンコーディング

(Matsumoto *et al.*, 2005)

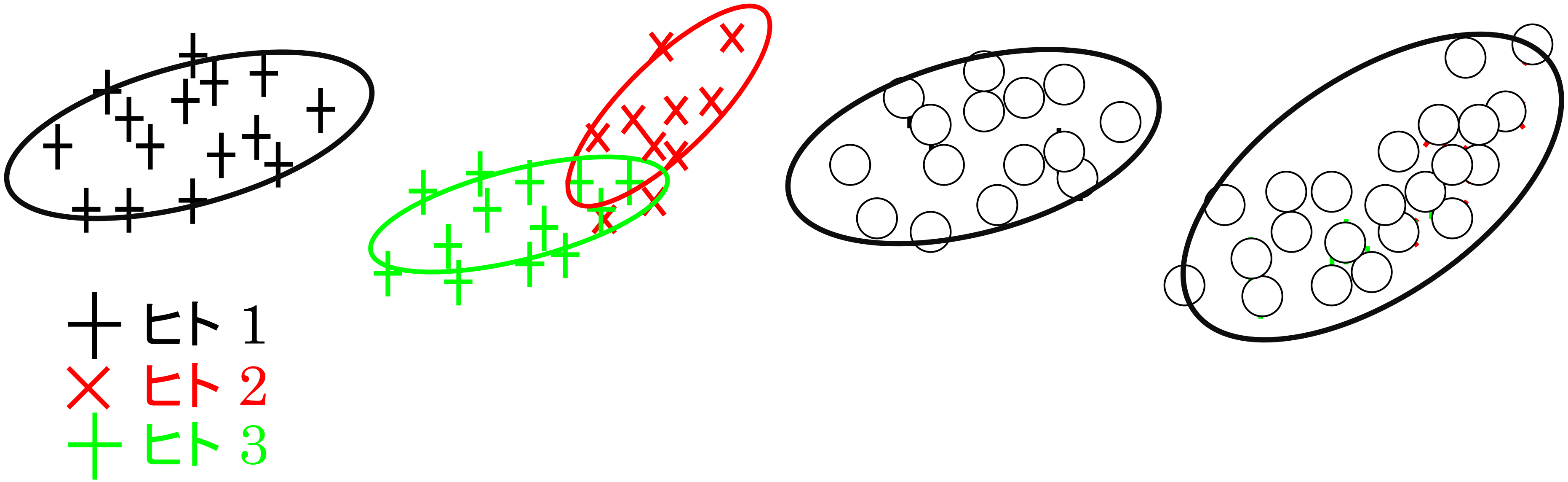
神経集団ダイナミクスのスナップショット



- [90ms, 140ms]でグローバルな分類が起こる.
  （サル vs. ヒト vs. 図形）
- [140ms, 190ms]で詳細な分類が起こる.
  （サルの表情, ヒトの個体別, 図形の形）

刺激セットの階層的な関係性が，神経集団のダイナミクスにエンコードされている.

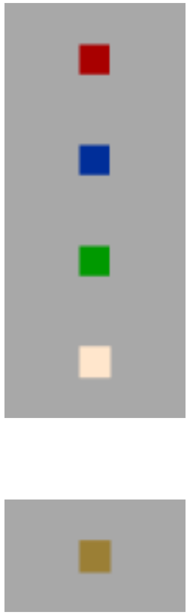
ベイズ的クラスタリング

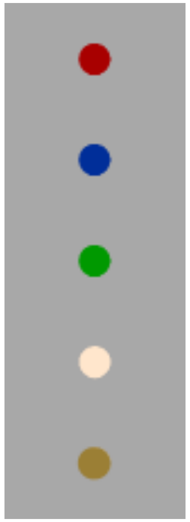


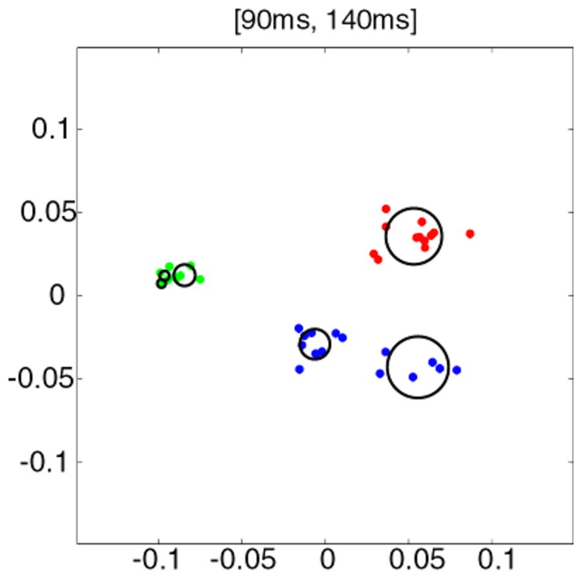
教師ありクラスタリング

教師なしクラスタリング
混合正規分布解析
クラスターの数の自動決定

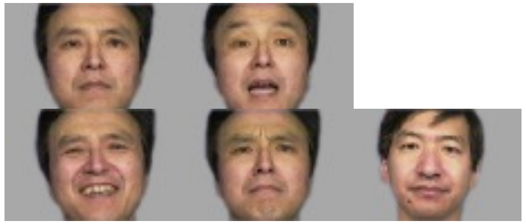
[90, 140ms]

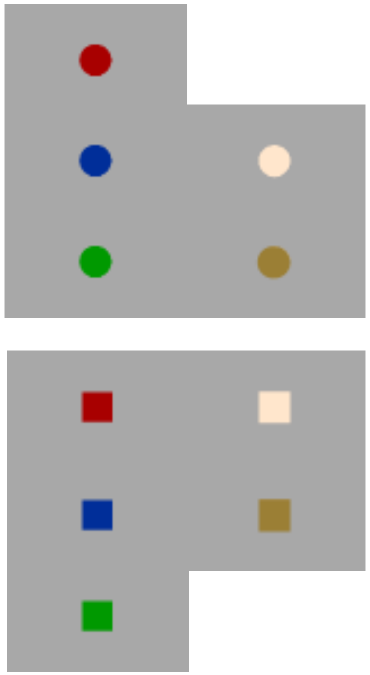


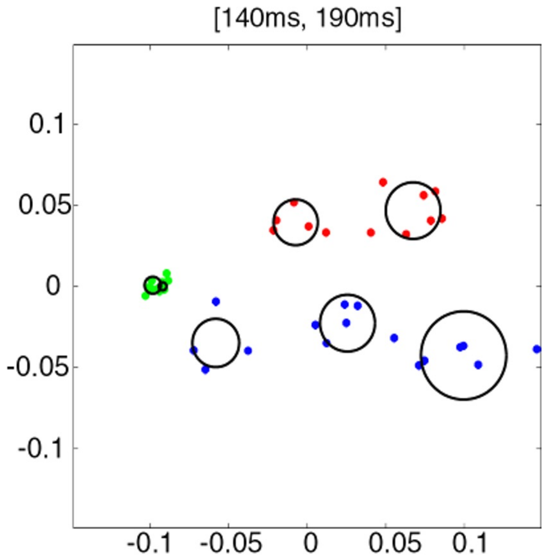


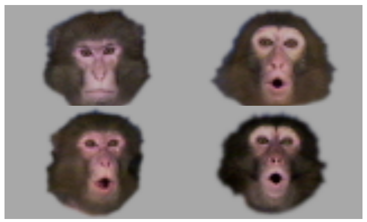


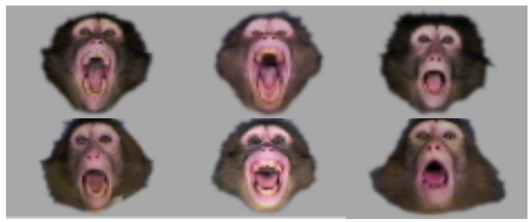
[140, 190ms]











共同研究者

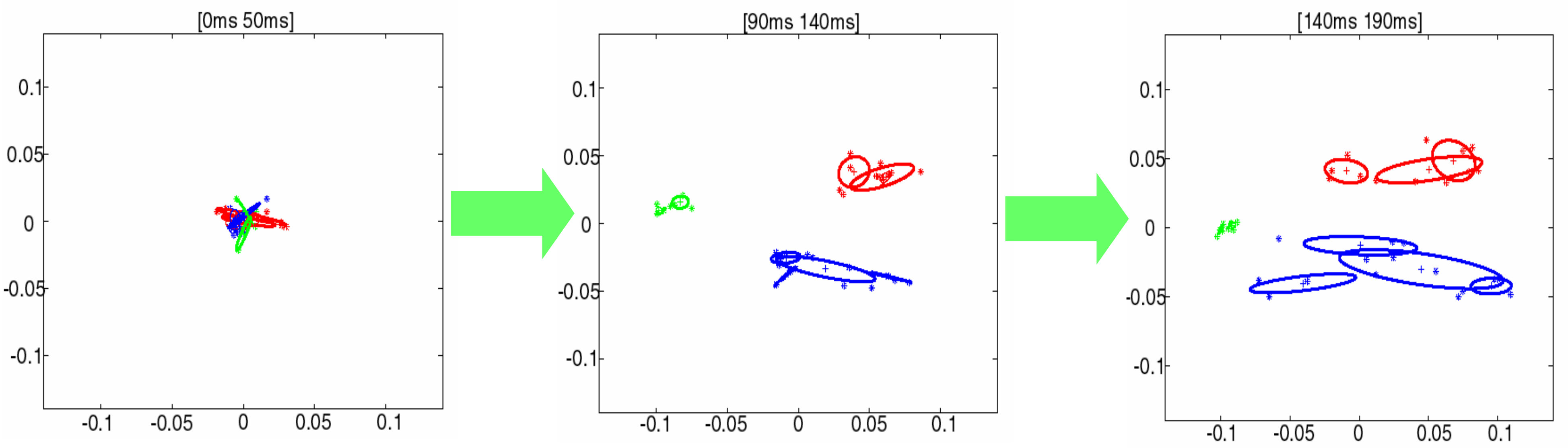
松本有央（産業総合研究所）

菅生康子（産業総合研究所）

山根茂（前橋工科大学）

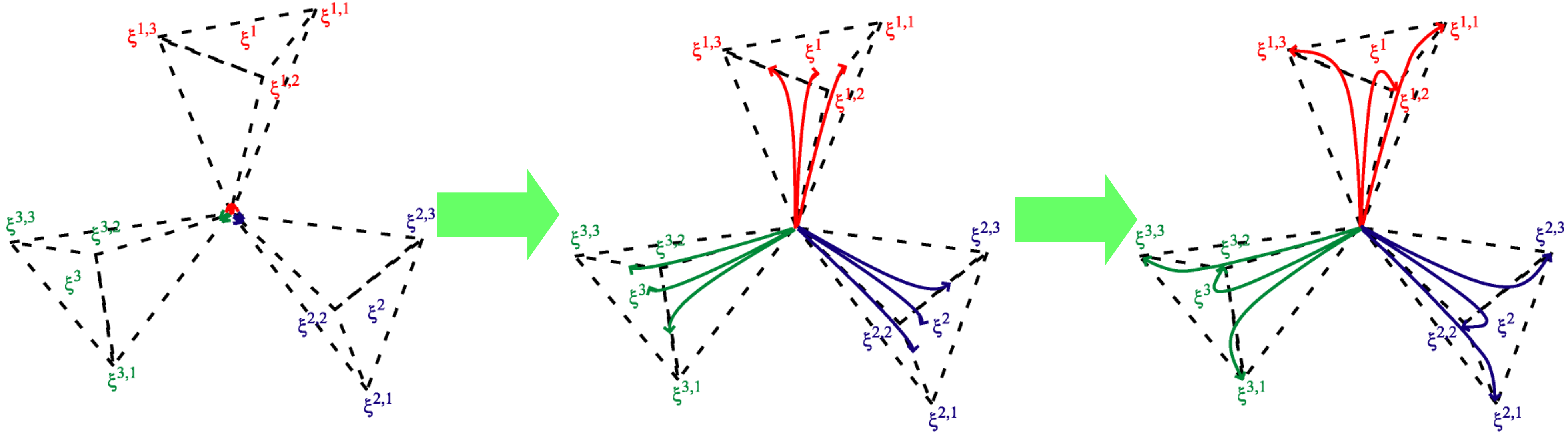
河野 憲二（京都大学）

実験の結果とモデルの結果

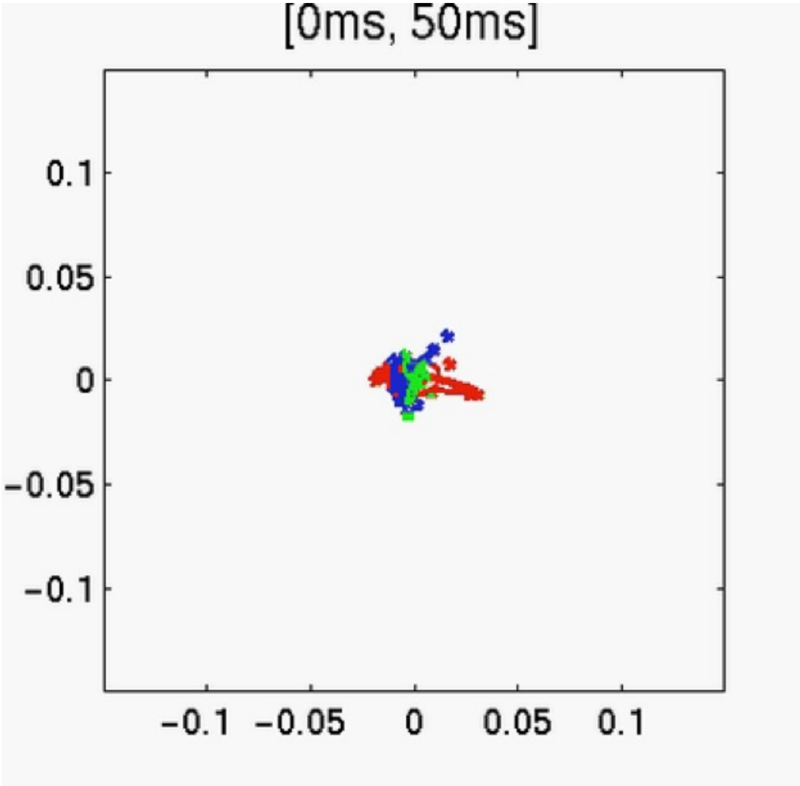


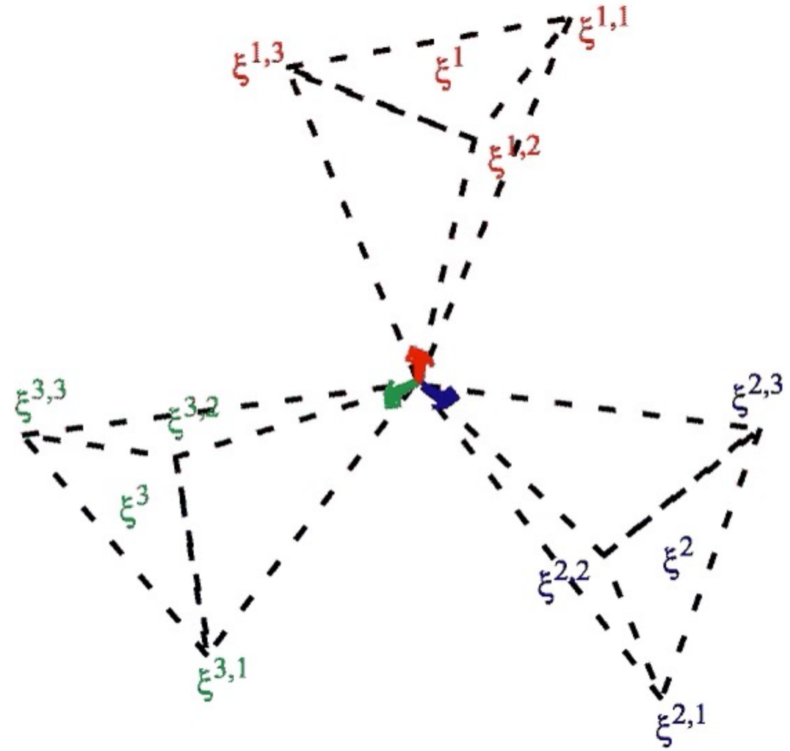
[90 – 140 ms]

[140 - 190ms]



実験の結果とモデルの結果

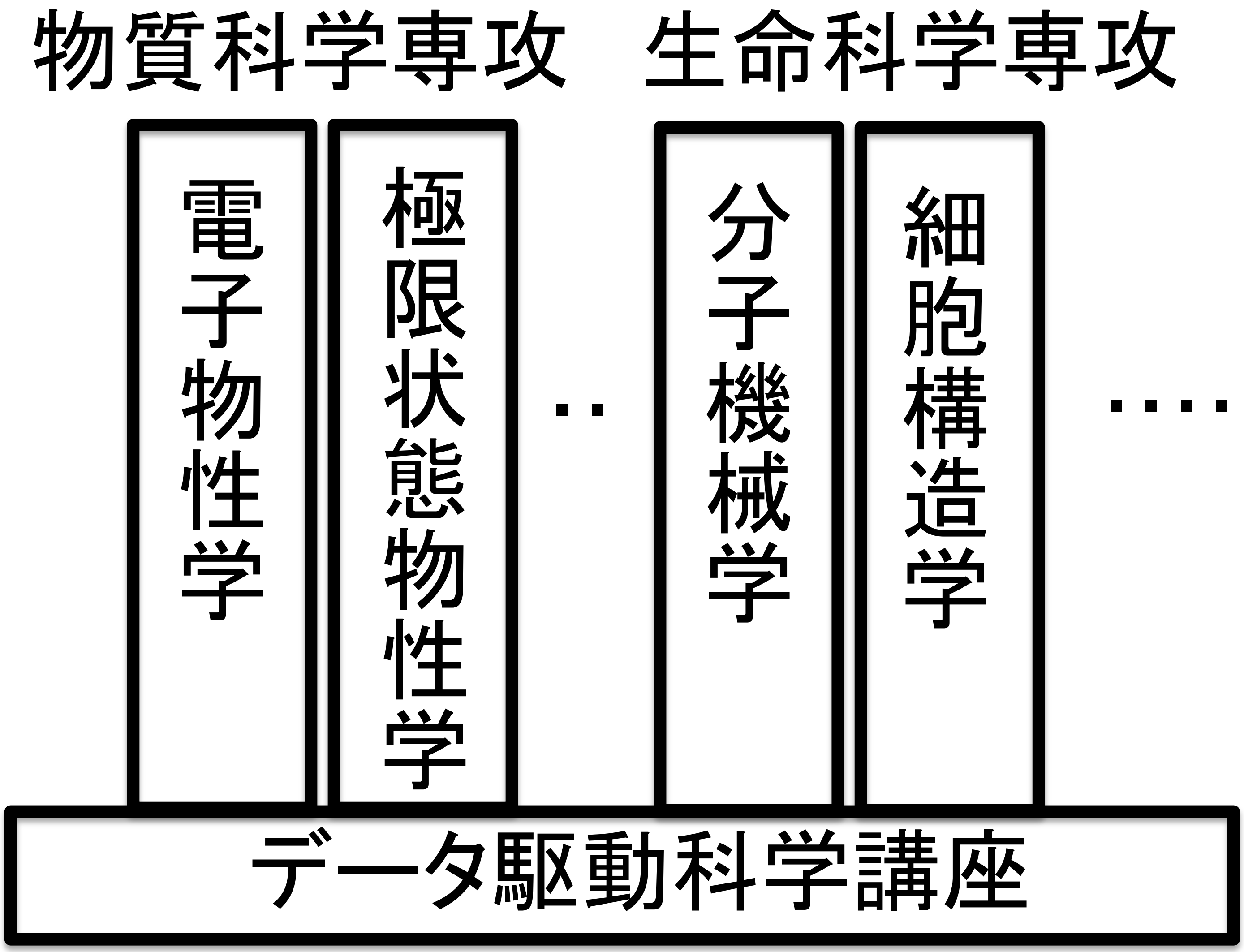




内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

兵庫県立大　理学研究科



内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開

まとめ

- 自己紹介
- 修士課程の研究(XPSとXAS)の感想
- ベイズ計測の導入: 直線回帰$y=ax+b$への適用
- スペクトル分解
- NMRの緩和モード分解
- XASのXPSのベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 脳科学への適用
- 兵庫県立大へのベイズ計測の展開の展望
- まとめと今後の展開