

物性研究とベイズ計測

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3月5日(水) 13:35- 14:05

場所:広島大学学士会館・レセプションホール

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](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、今後の物性研究にとって必要なベイズ計測を紹介する。
- 本セミナーでは以下を説明する
 1. ベイズ推論導入のきっかけとなった、修士時代の強相関電子系の研究
 2. $y=ax+b$ のベイズ計測の解析計算
 3. 磁化率と比熱のベイズ統合

内容

- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 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)
 - ベイズ推論に基づく計算論的神経科学
- 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 -)

物性科学の特徴

- 第一原理として、量子力学と電磁気学で記述できる。
- しかし、強相関電子系からも解るように、**第一原理的に物性を議論することはできない**。
- そのため、現象を説明するモデルは複数存在する可能性があり、**モデル自身とそのパラメータを実験/計測データから決定する必要がある**。
- その情報数理基盤がベイズ計測である。
- これが物性研究とベイズ計測の協奏の必要性である。

内容

- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

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 L₃-XAS are expressed as

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

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

where

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

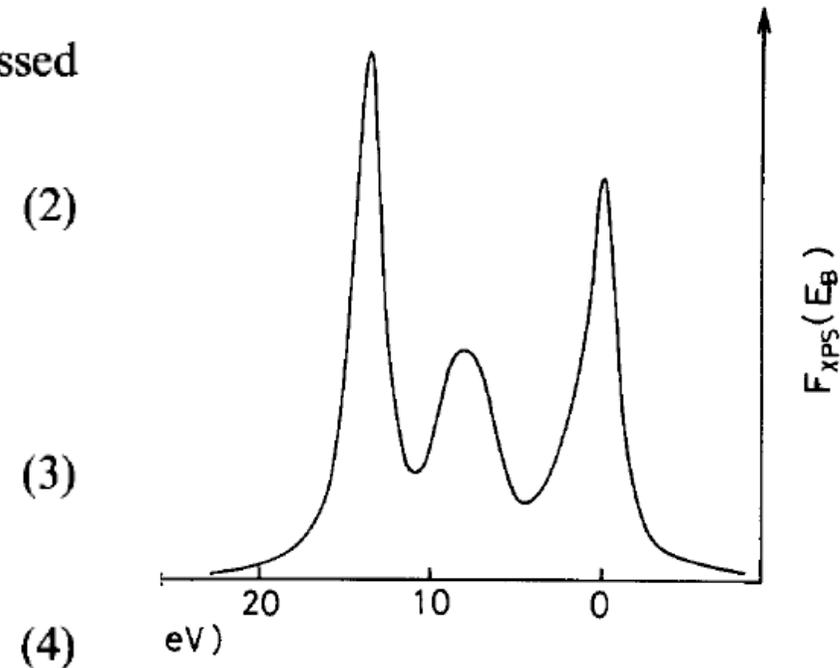


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily.

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

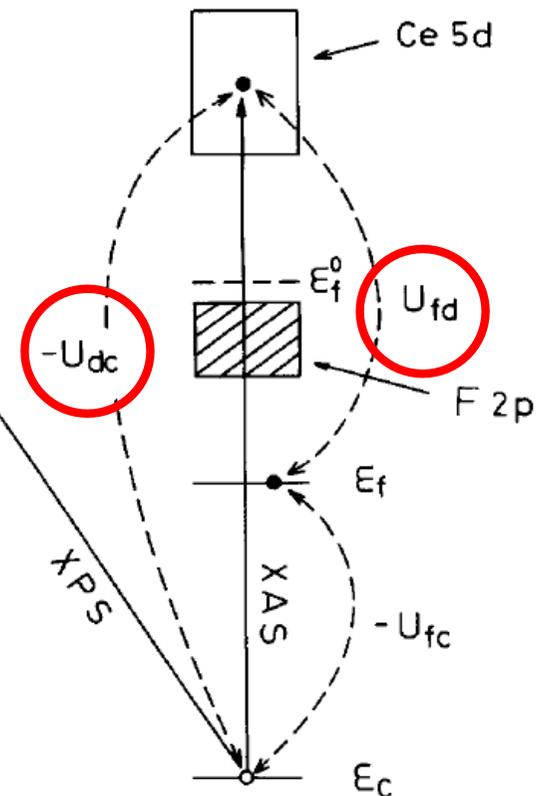
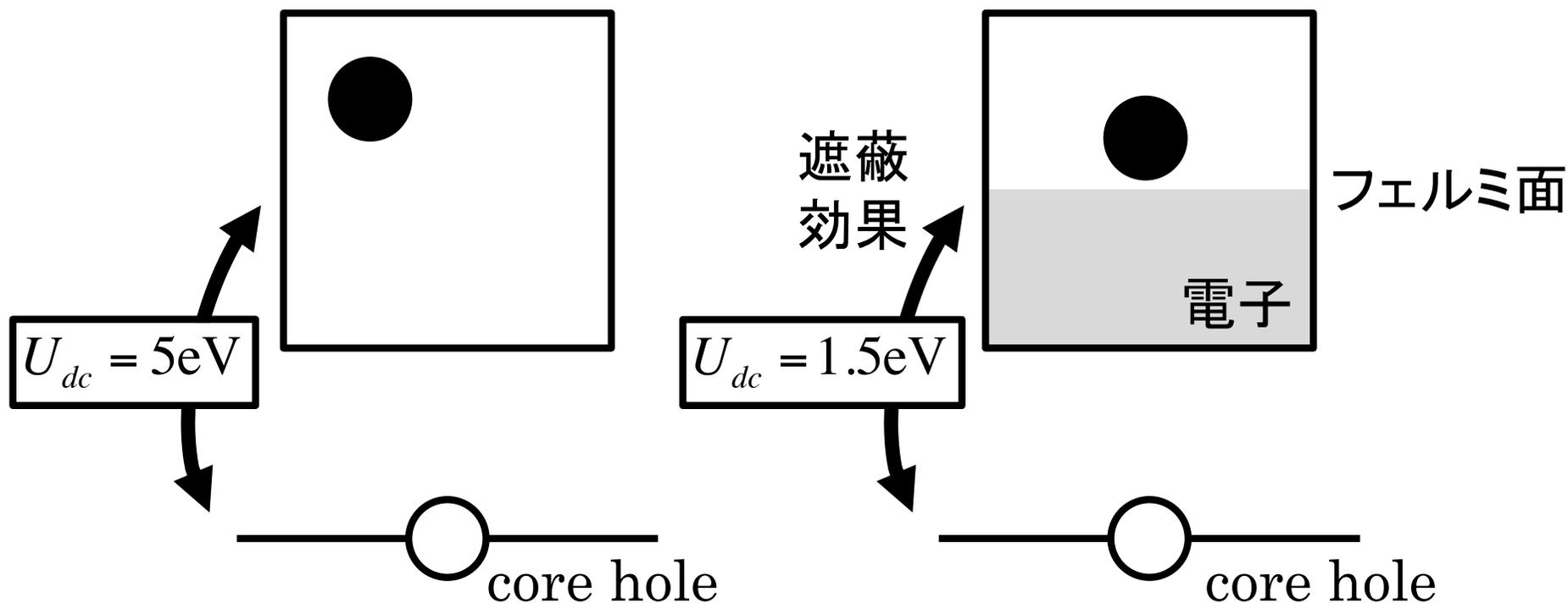


Fig. 1. Model of the present theory describing 3d-XPS and L₃-XAS.

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. $U_{dc} = 0$ (Gunnarsson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

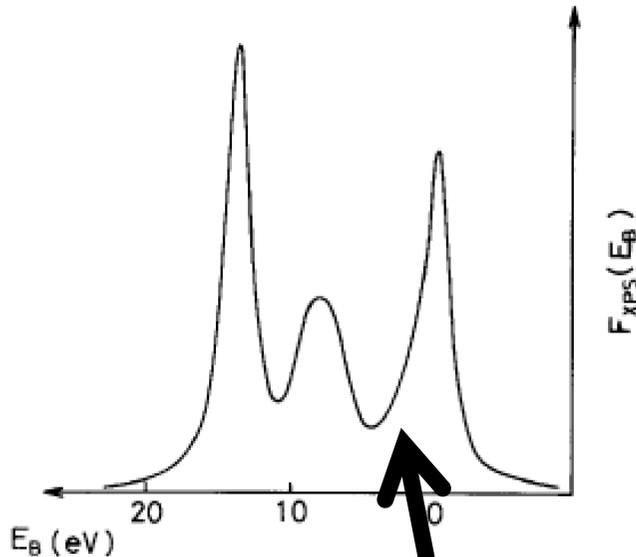
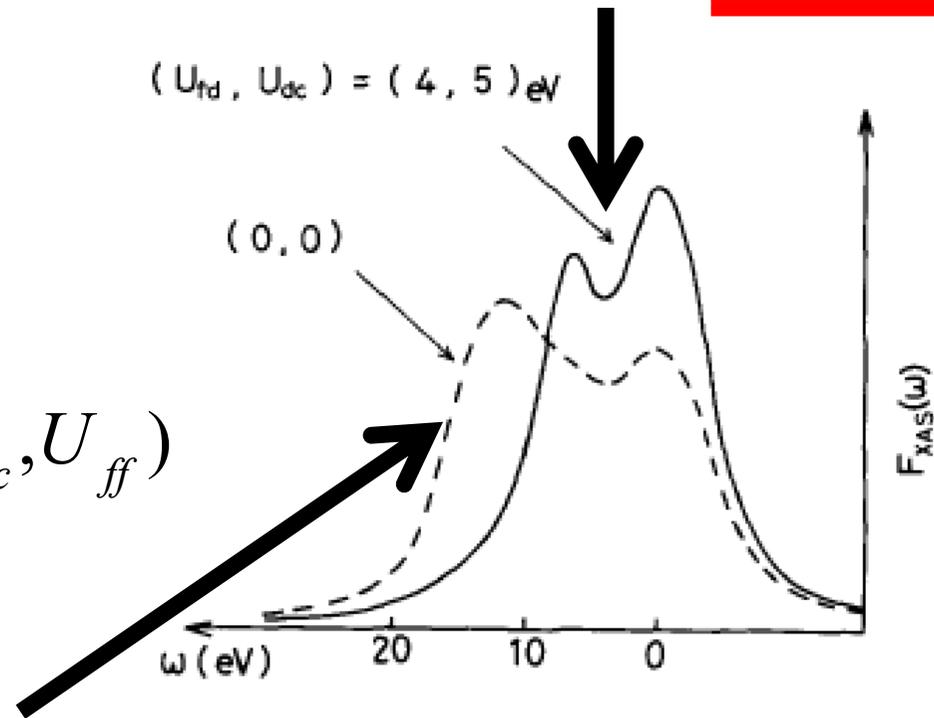


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily

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

$$(U_{fd}, U_{dc}) = (4, 5) \text{ eV}$$

(0, 0)



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

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

修士時代の研究の問題点

有効ハミルトニアンによる
X線光スペクトルの記述の階層

—— 演繹による導出不可能! ——

量子力学と電磁気学の階層

- 数理モデルのフリーパラメータの決定精度が、そのモデルの正しさ証明つながらる
- ミクロなレベルと分断されているため、一般に複数の数理モデルが存在する

ベイズ計測の必然性(パラメータ推定、モデル選択)

内容

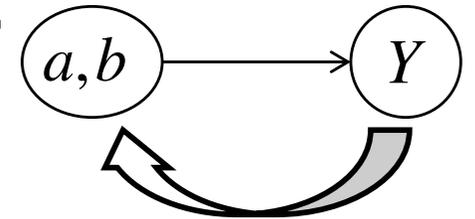
- 自己紹介
- 修士課程の研究の紹介
- **ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて**
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

ベイズ計測とは?

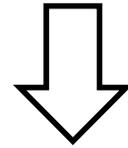
ベイズ推論

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

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

- 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、いまでも用いられている
- $y=ax+b$ 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: 磁化率と比熱のベイズ統合
 - 横山さんのXPSとXASのベイズ統合

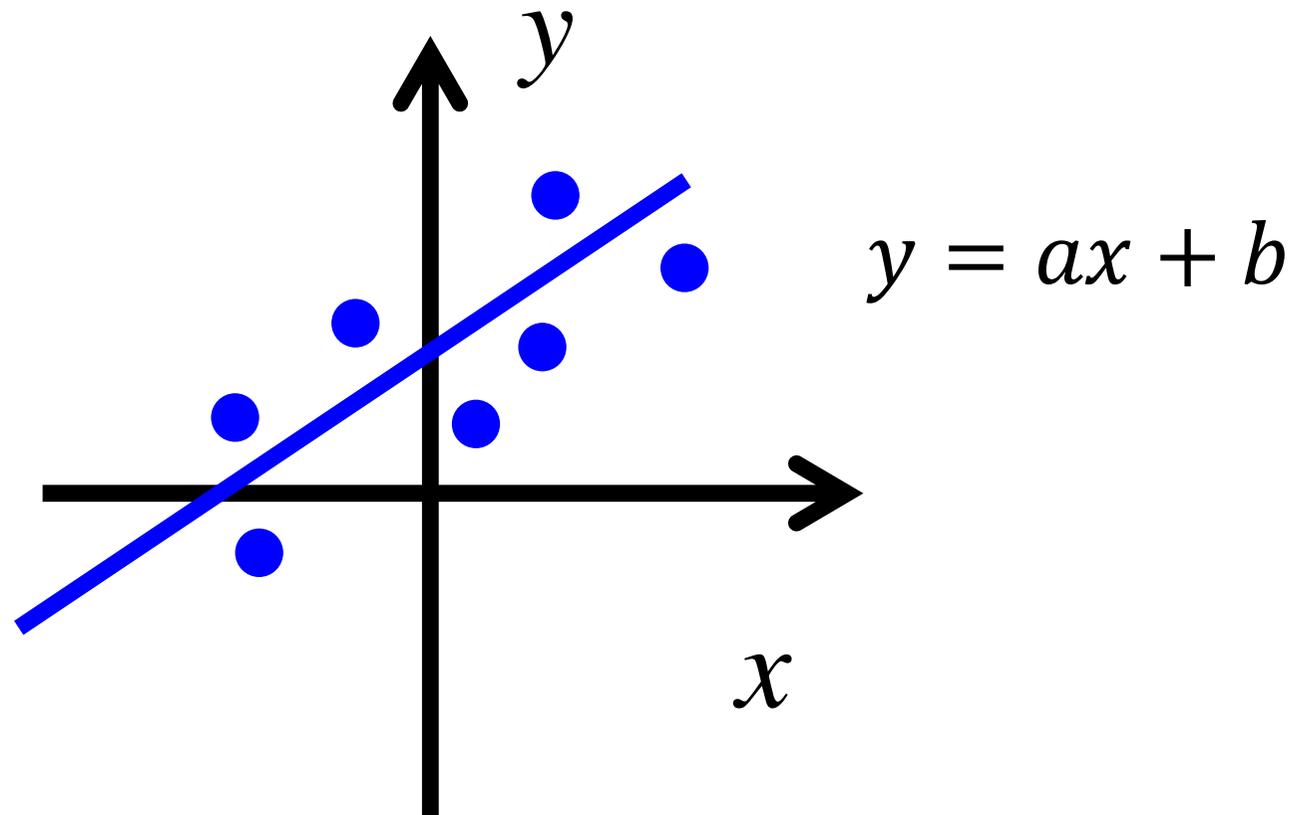
内容

- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - **最小二乗法**
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

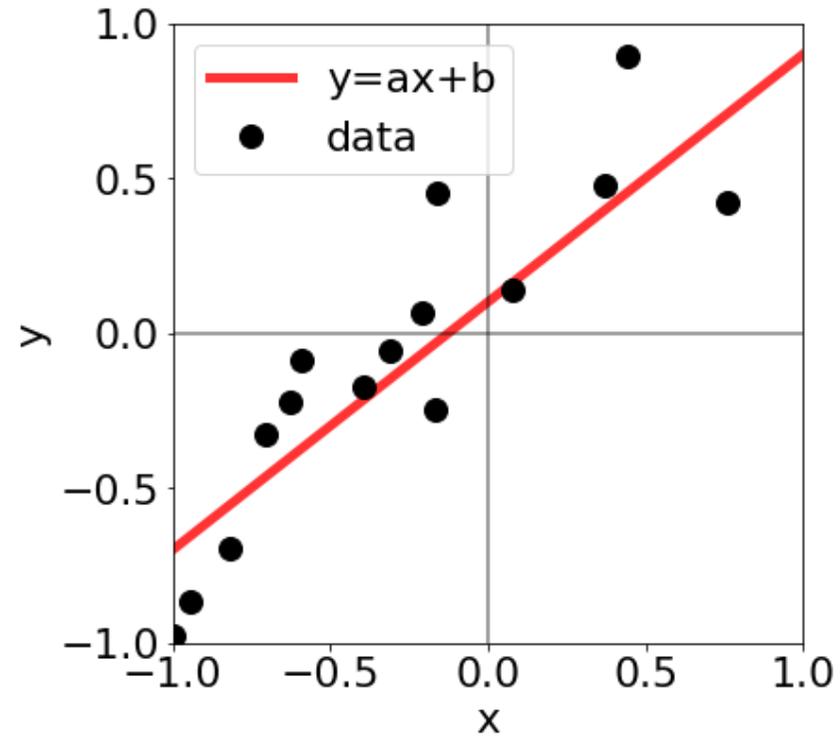
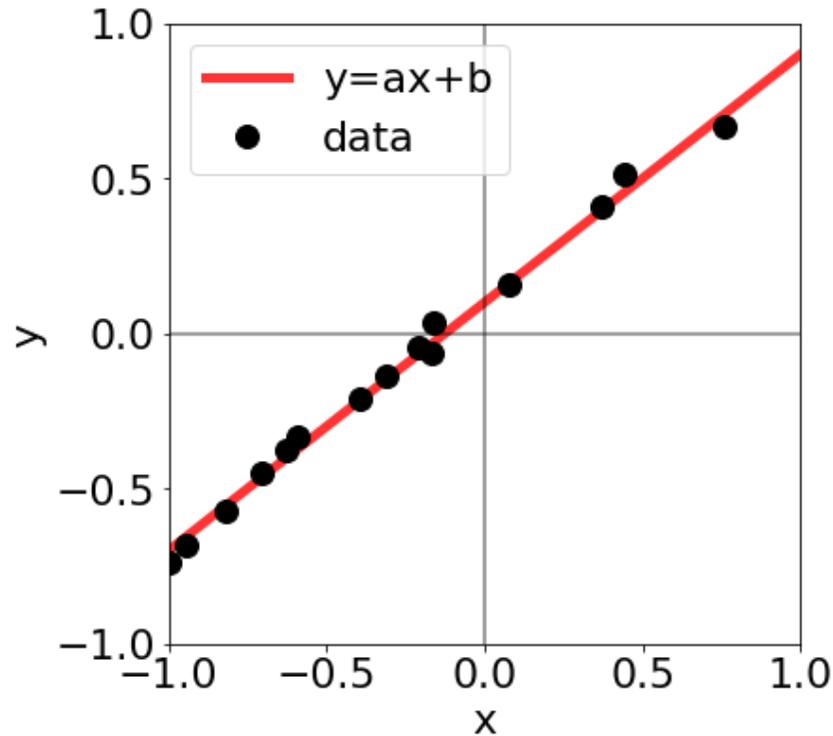
現状でも用いられている最も簡単な例



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)

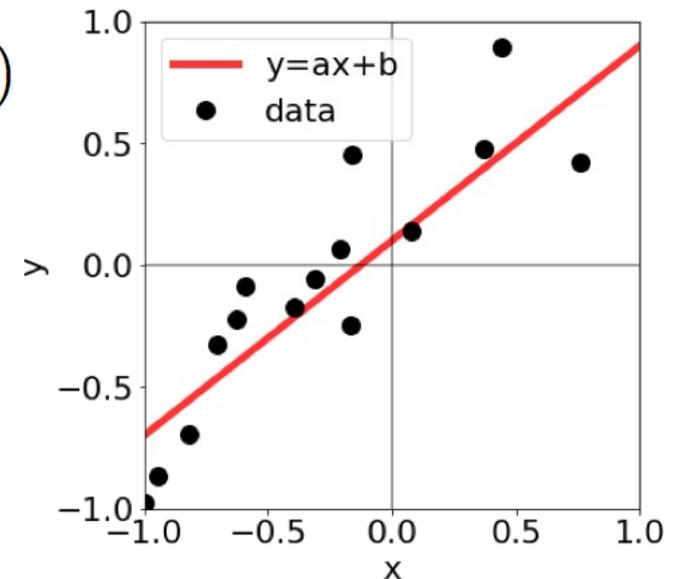
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \text{ とする場合}$$

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

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

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

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



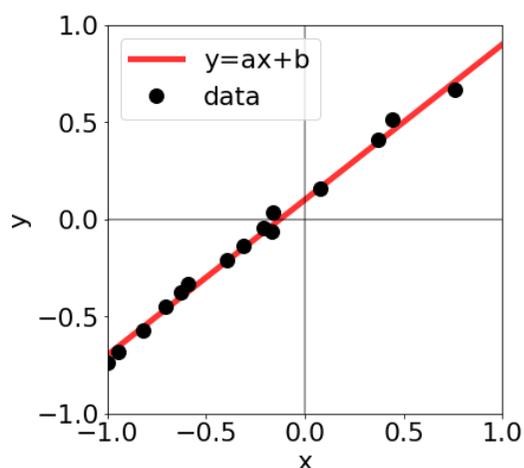
内容

- 自己紹介
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - **ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定**
 - **ノイズ分散推定**
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

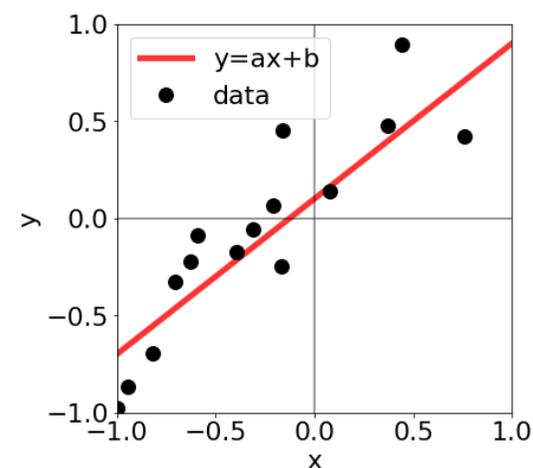
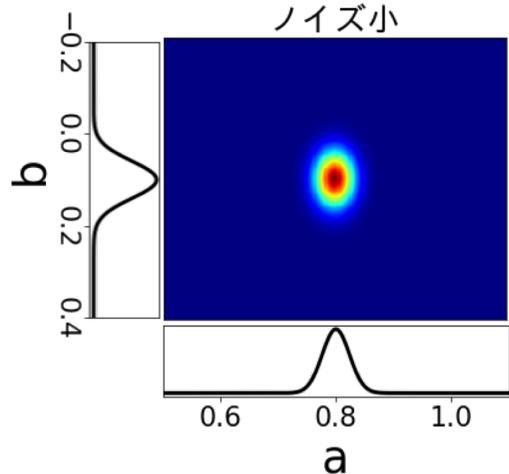
ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

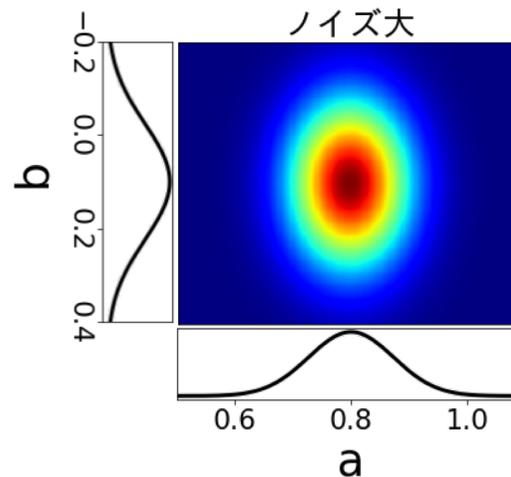
結論: 神器1 パラメータの事後確率推定



ノイズ小



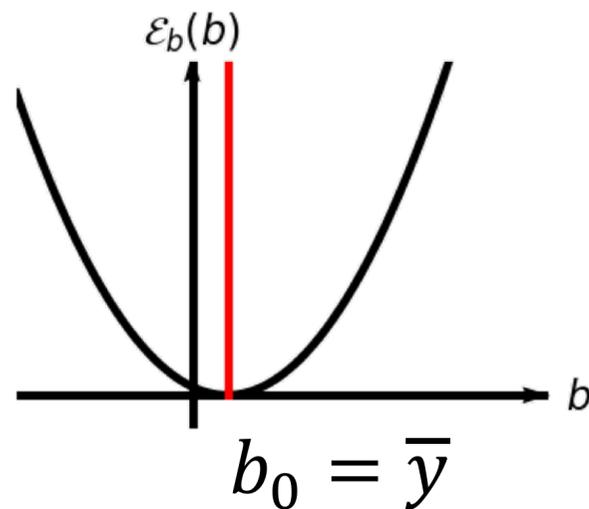
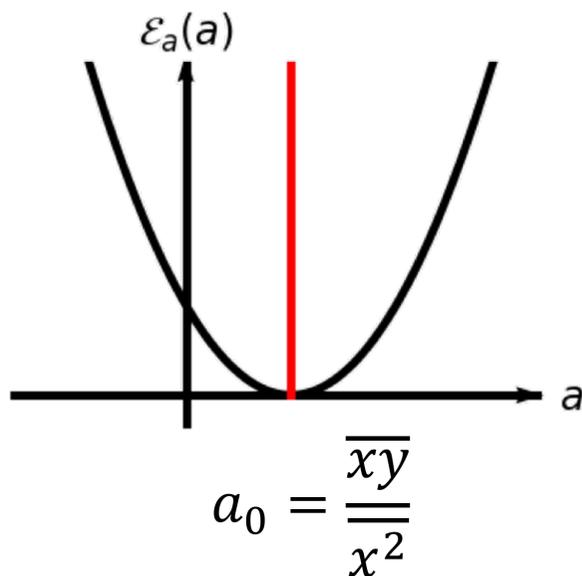
ノイズ大



$y=ax+b$ の最小二乗法

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

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



$y=ax+b$ 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)

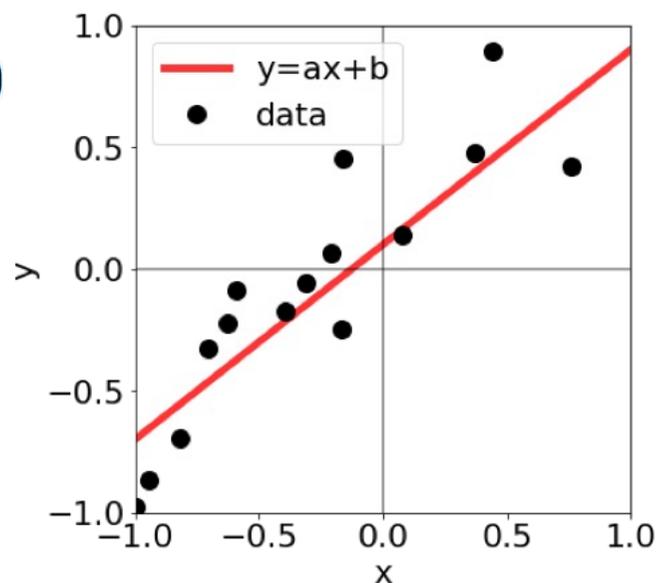
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \quad \text{とする場合}$$

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

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

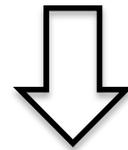
$$\text{平均: } \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i, \quad \text{分散: } \overline{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2$$

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



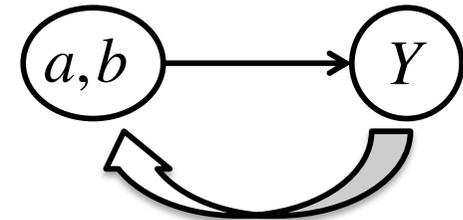
ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定 (1/4)

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



<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)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

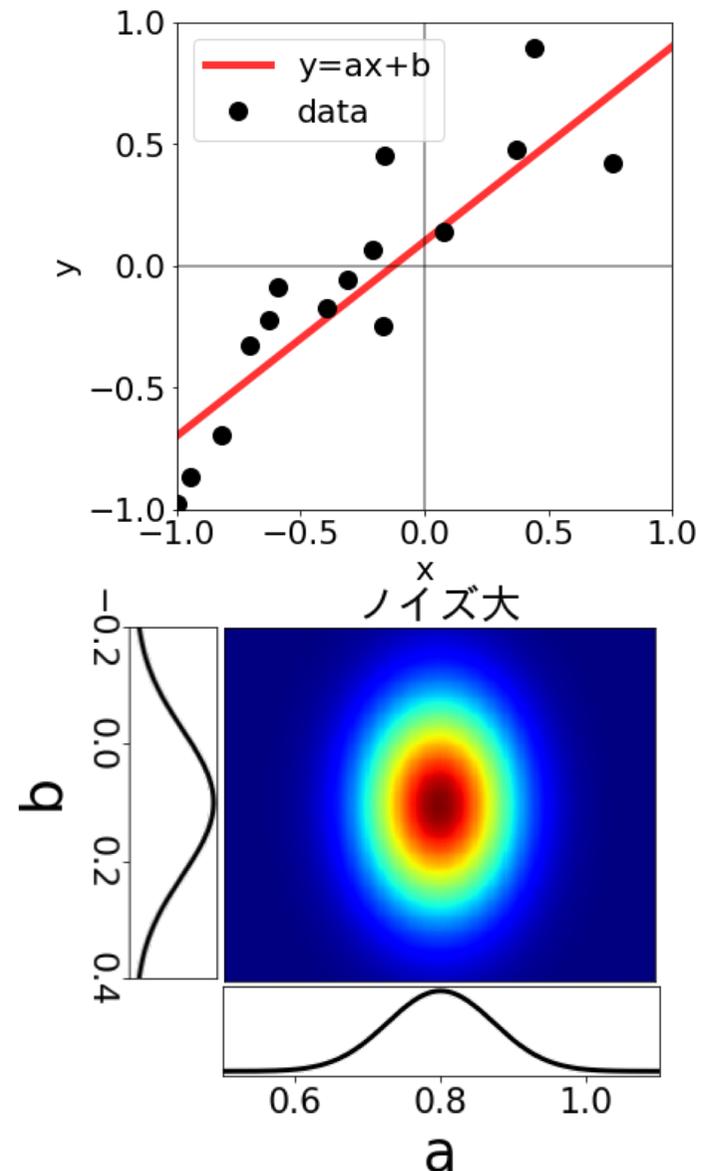
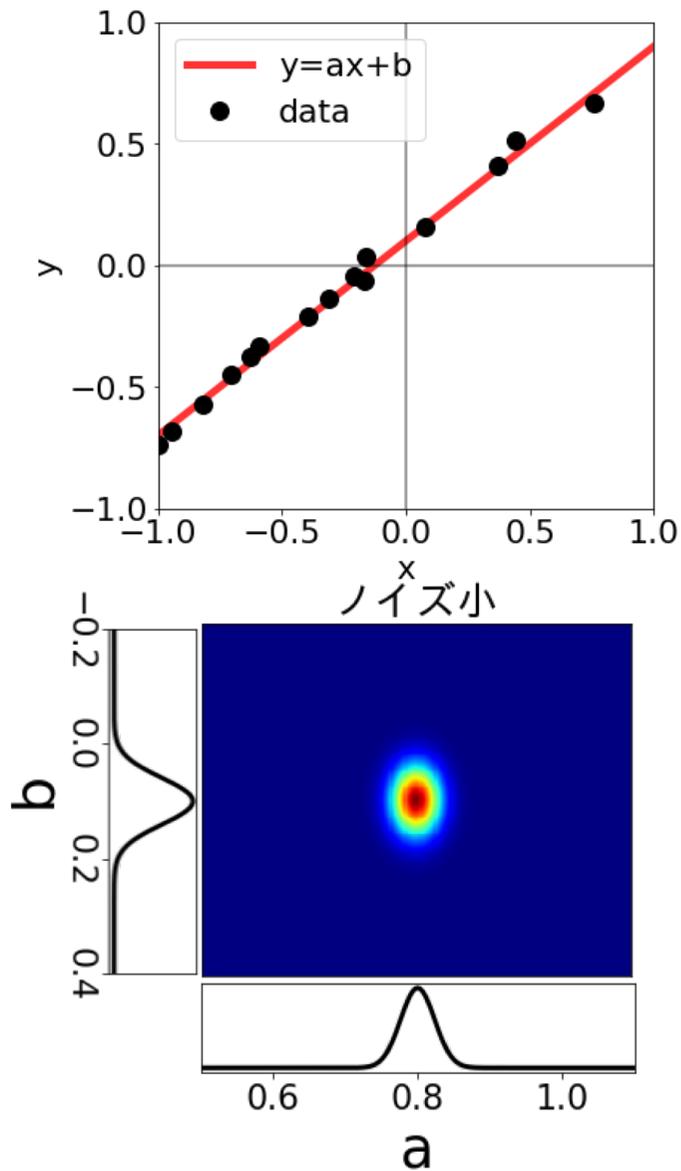
$$p(n_i) = p(y_i|a, b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

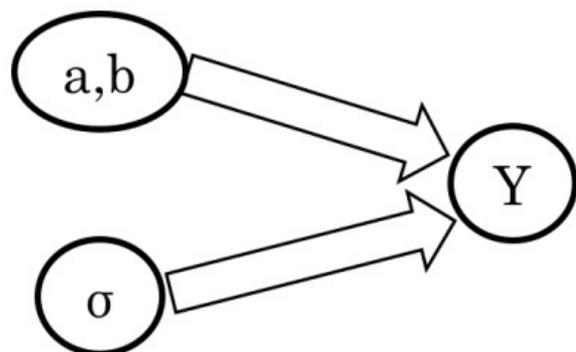
神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

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

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



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

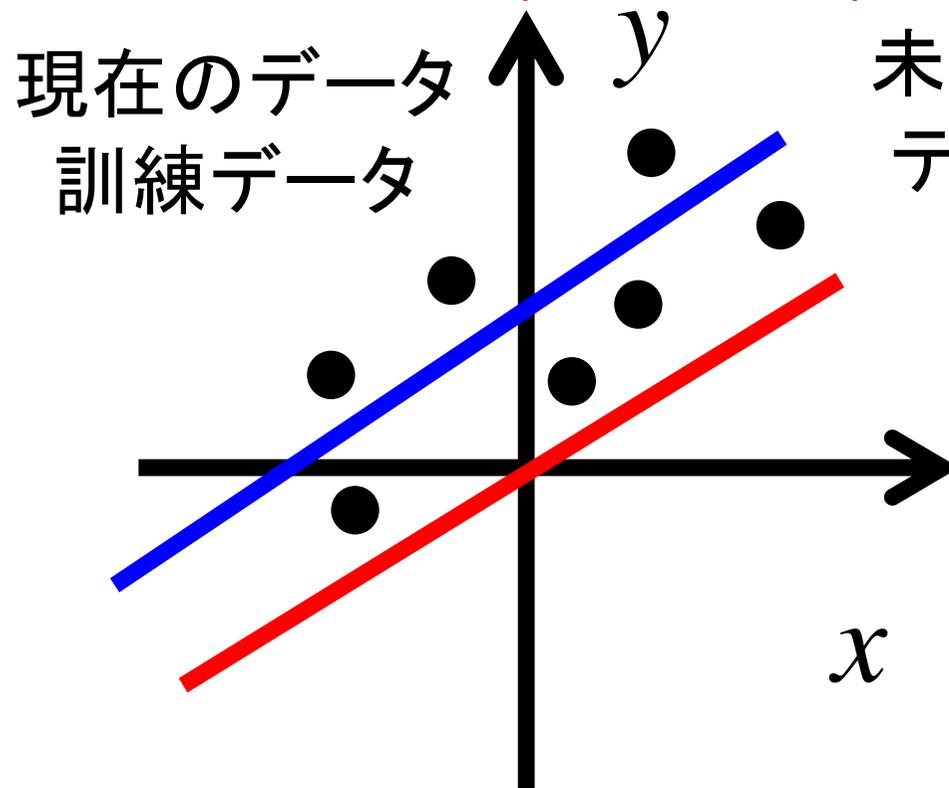
$$\sigma^2 = \frac{NE(a_0, b_0)}{N-2} = \frac{1}{N-2} \sum_{i=1}^N \{y_i - (a_0x_i + b_0)\}^2$$

内容

- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - **神器2: ベイズ的モデル選択**
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

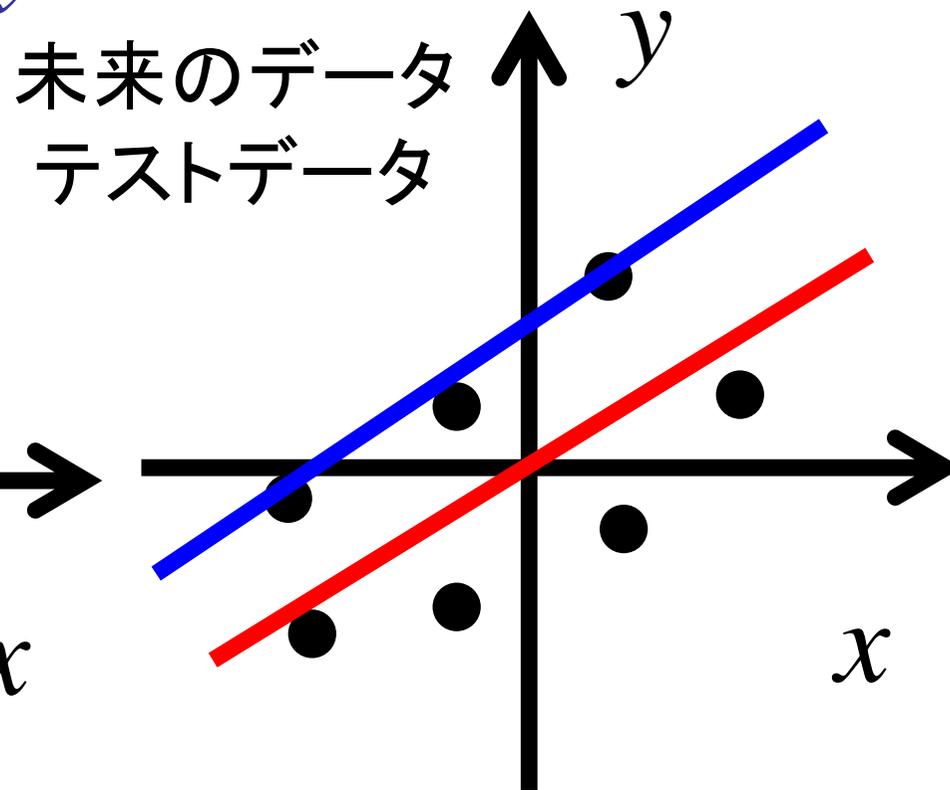
問題意識 神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$ 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. θ がないぞ
3. $p(K, \theta, Y)$ の存在を仮定

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

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

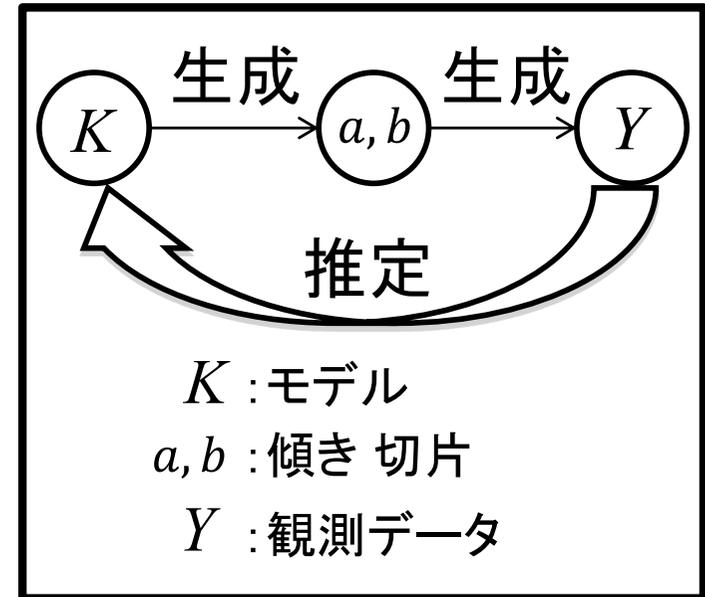
4. **無駄な自由度の系統的消去**: 周辺化, 分配関数

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

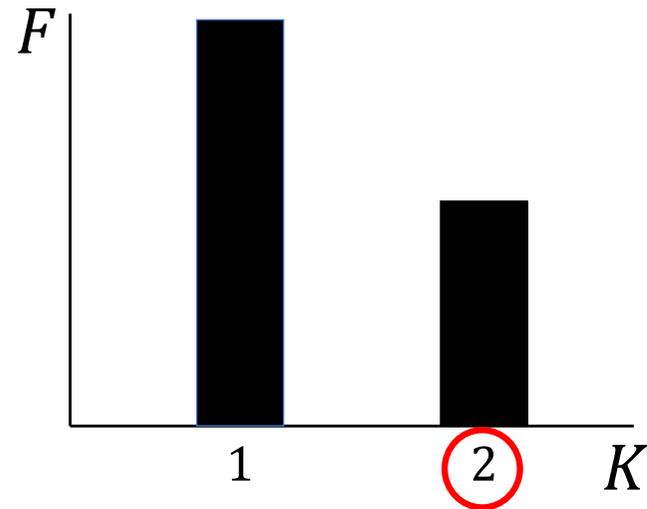
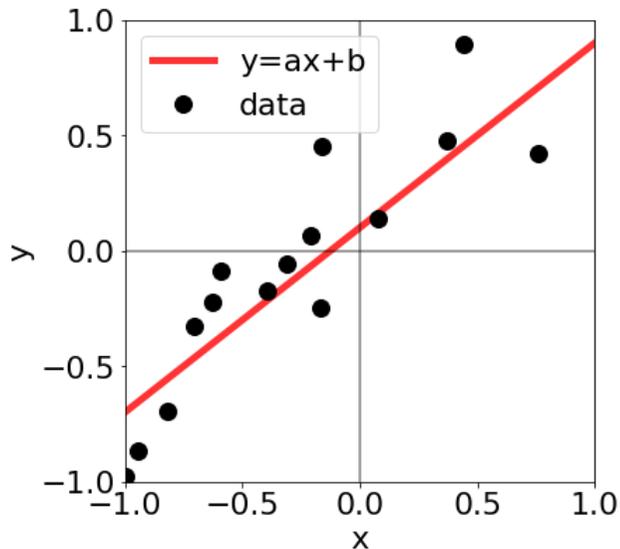
$$p(K | Y) = \frac{p(Y | K) p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にするモデル K を求める.



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: 磁化率と比熱のベイズ統合
 - 横山さんのXPSとXASのベイズ統合

内容

- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

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

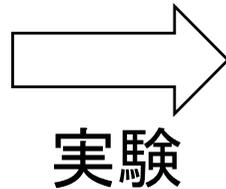
西村怜^A, 片上舜^A, 永田賢二^B, 水牧仁一朗^C,
岡田真人^A

(東大新領域^A、NIMS^B、JASRI^C)

Nishimura, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada
"Bayesian Integration for Hamiltonian Parameters of
Crystal Field" *Journal of the Physical Society of Japan*
Vol.93, No.3(2024)

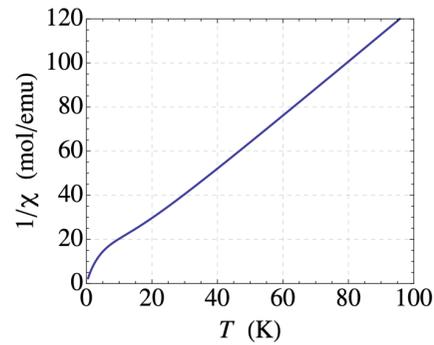
従来のパラメータ推定

対象とする
物理系

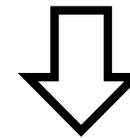
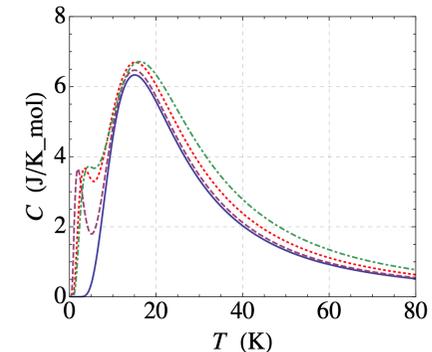


複数の観測データ

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

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

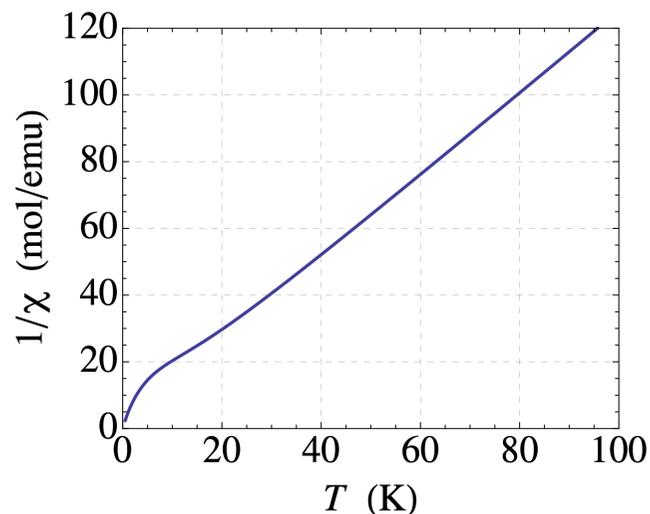
$$\hat{O}_{20} = 3J_z^2 - J(J+1)$$

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

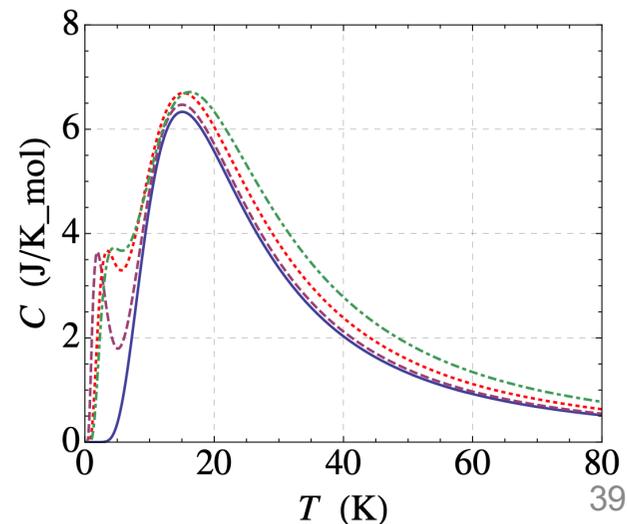
$$\hat{O}_{44} = \frac{1}{2}(J_+^4 - J_-^4)$$

観測データ生成

磁化率



比熱



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

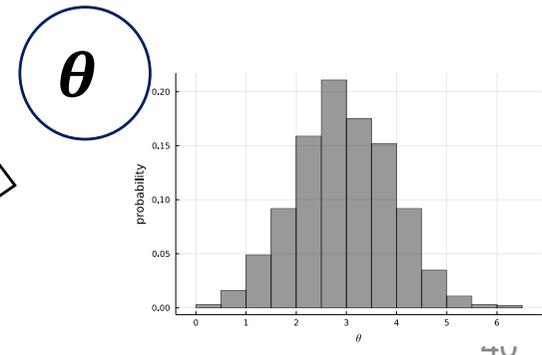
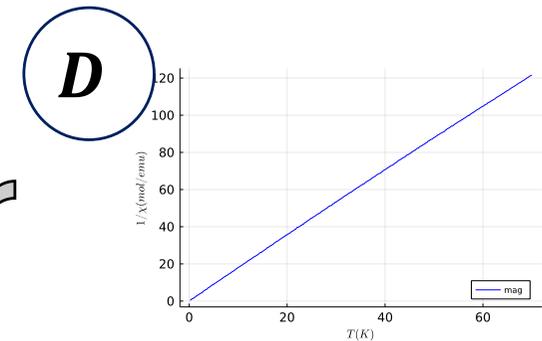
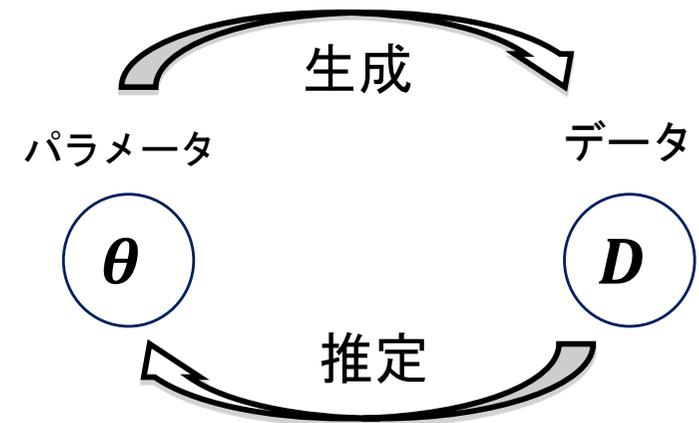
$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{\int p(D|\theta)p(\theta)d\theta}$$

$p(\theta)$: 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



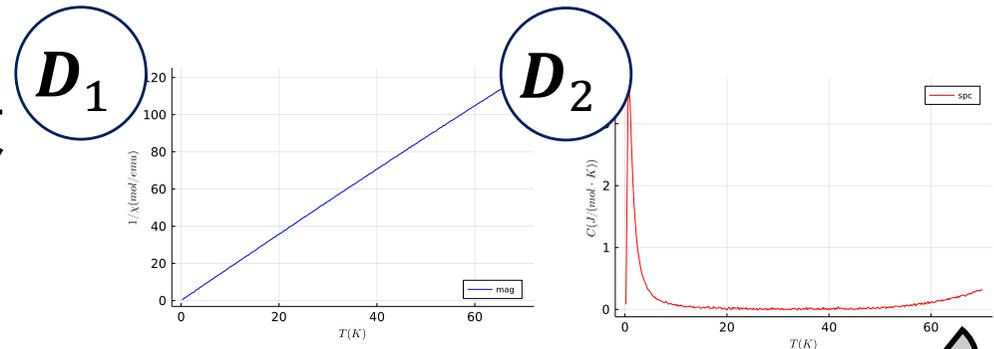
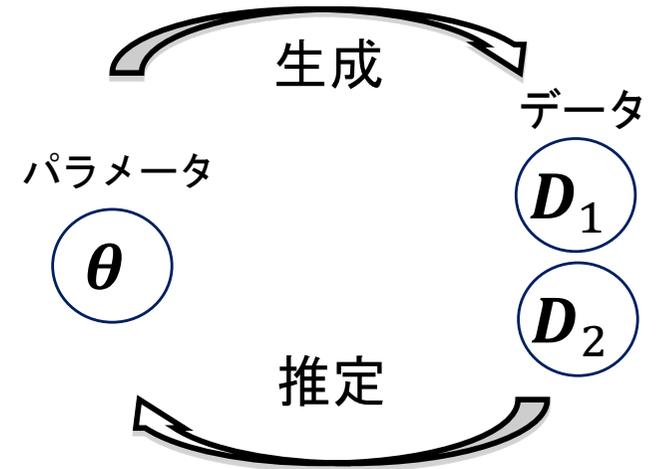
ベイズ統合

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

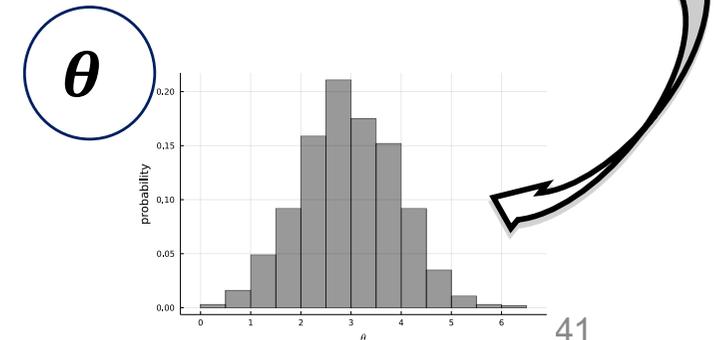
$$p(\theta | D_1, D_2) = \frac{p(D_1, D_2 | \theta)p(\theta)}{\int p(D_1, D_2 | \theta)p(\theta)d\theta}$$

$$= \frac{p(D_1 | \theta)p(D_2 | \theta)p(\theta)}{\int p(D_1 | \theta)p(D_2 | \theta)p(\theta)d\theta}$$

$p(\theta)$: 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

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

$$N \equiv N_1 + N_2$$

$$b \equiv b_1 + b_2$$

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

ベイズ推論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

尤度関数

ベイズの定理

$$p(\theta | \mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) = \frac{p(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 | \theta)p(\theta)}{\int p(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 | \theta)p(\theta)d\theta}$$

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

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

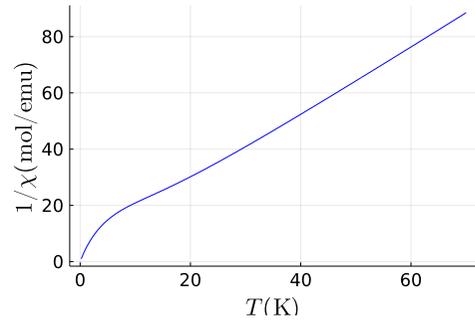
$$F(b_2) = -\ln Z(\mathbf{D}_2, b_2) = -\ln \int p(\mathbf{D}_2, b_2 | \theta)p(\theta)d\theta$$

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

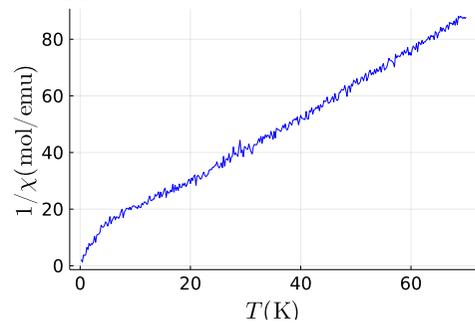
人工データ

磁化率

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

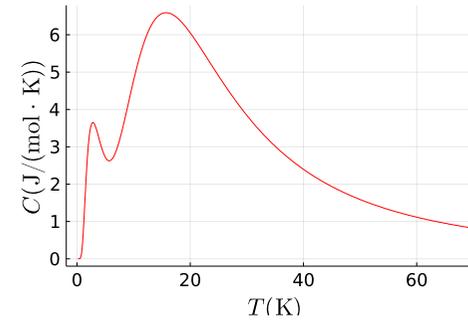


(2) $\sigma_{\text{mag}} = 10^0$

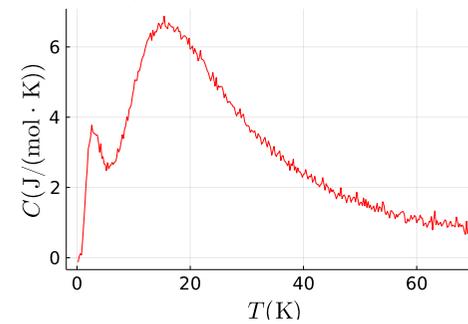


比熱

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



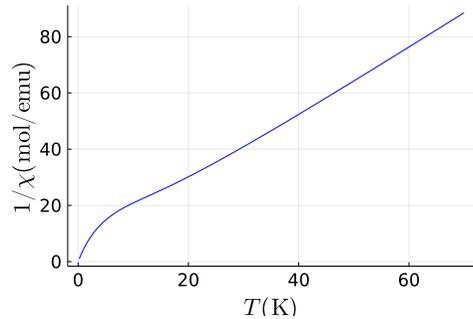
(2) $\sigma_{\text{spc}} = 10^{-1}$



ノイズ推定

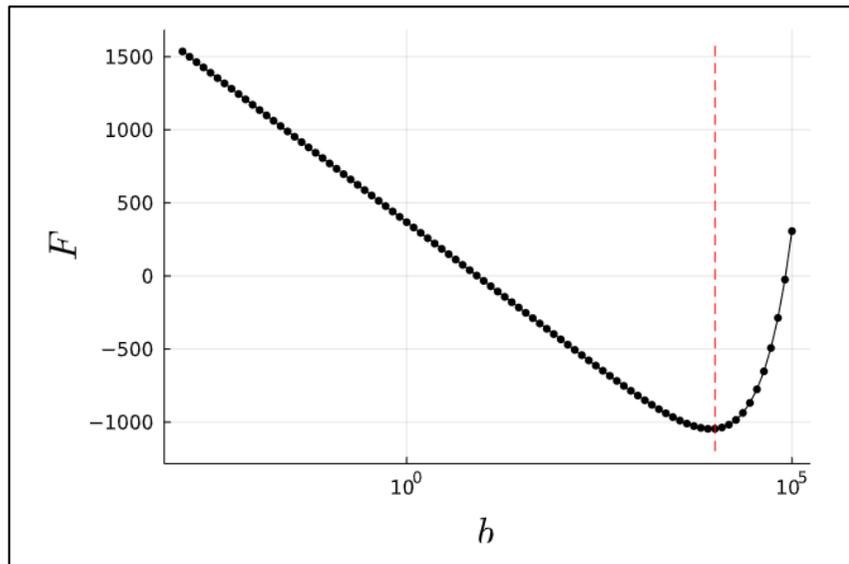
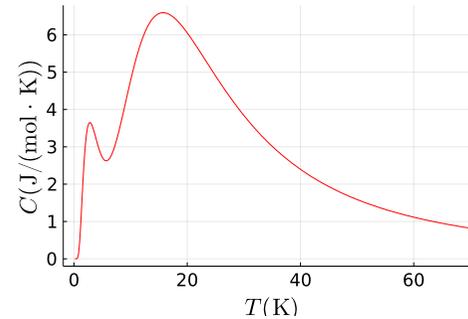
磁化率

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

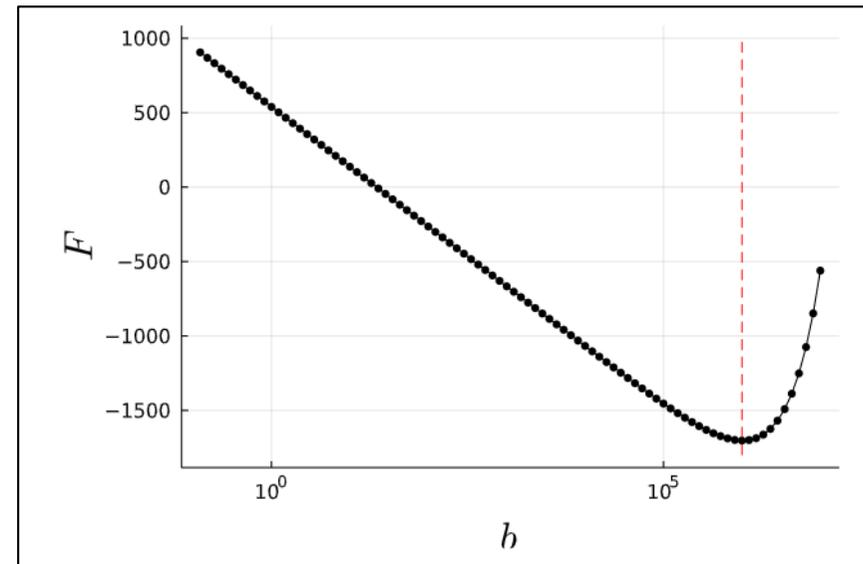


比熱

(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

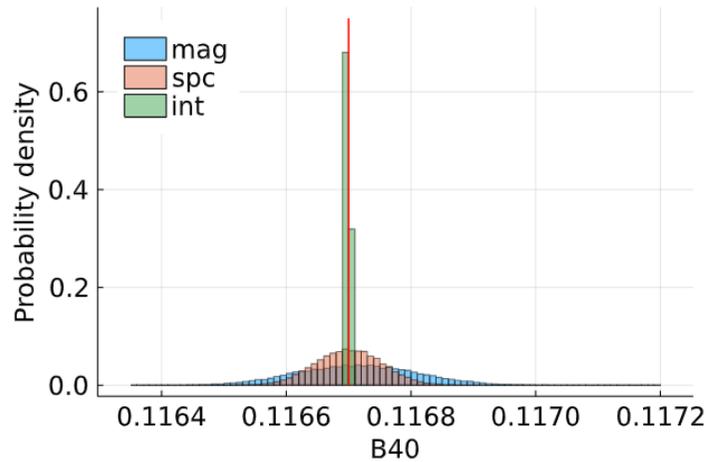
結晶場ハミルトニアン

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

(1)

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

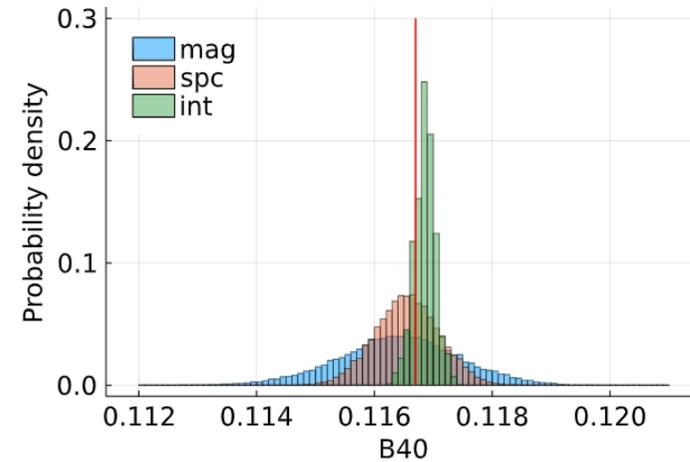
$$\sigma_{\text{spc}} = 10^{-3}$$



(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

磁化率と比熱のベイズ統合結論 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

内容

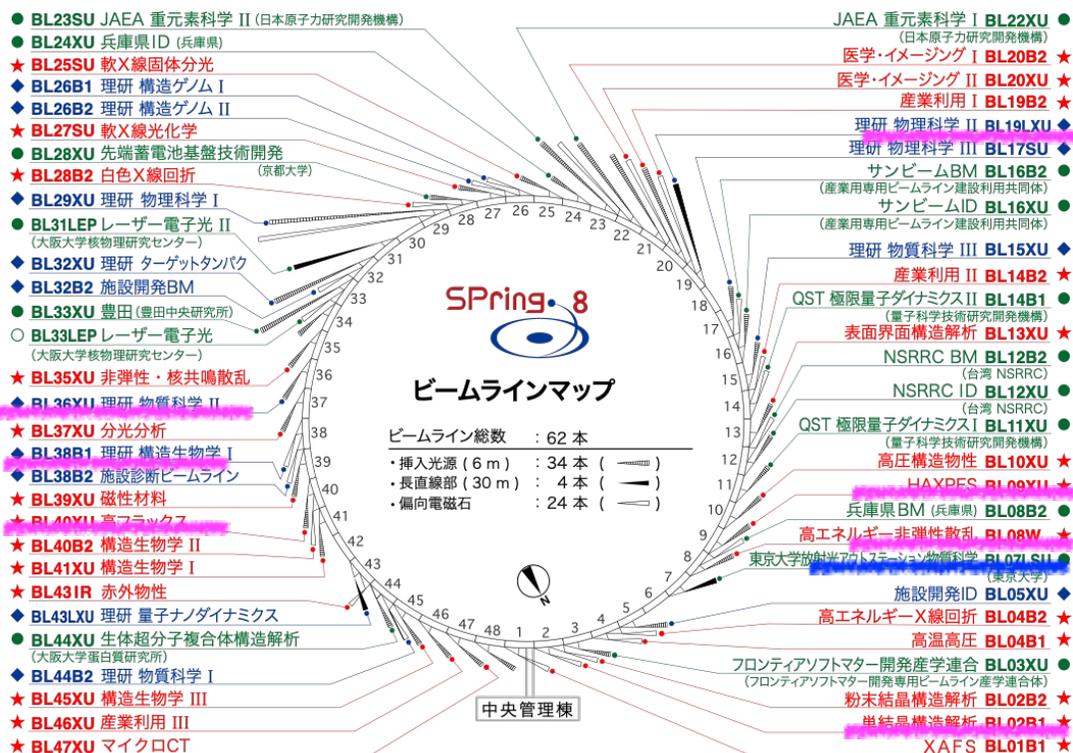
- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

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bauer
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
- **広大HiSOR: 2025年3月5日**

内容

- 自己紹介と導入
- 修士課程の研究の紹介
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 神器3: ベイズ統合
 - 磁化率と比熱のベイズ統合
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

まとめと今後の展開:
物性科学を含む物理学の刷新へ
データ駆動科学—講座導入

理論物理

実験物理

素粒子論

物性理論

光物性

磁性物理

データ駆動科学講座