第27回HiSOR研究会
～物性研究とベイズ計測の協奏～
Cooperation between Condensed Matter Research and Bayesian Inference

2025.3.5

The University of Tokyo

ベイズ計測 オープンソースソフトウェアの開発の取り組み

13:30～13:35　はじめに

13:35～14:05　「物性研究とベイズ計測」
岡田 真人（東京大学）

14:05～14:25　「ベイズ計測オープンソースソフトウェアの開発の取り組み」
片上 舜（東京大学）

14:25～14:50　「ベイズ統合とベイズ的階層モデリング」
横山 優一（JASRI）

14:50～15:10　休憩

東京大学　大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻

片上 舜

自己紹介

- 東京大学・大学院理学系研究科 岡田研 (2016～2022)
- 学位論文

  ベイズ推論による物理モデルに対するパラメータ分布推定

- 東京大学・大学院新領域創成科学研究科 助教 （2022/04～ ）
  - 物理計測データに対してのベイズ解析
  - ベイズ計測オープンソースソフトウェア

求められる計測科学の必須条件とは

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
- データだけから数理モデルを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

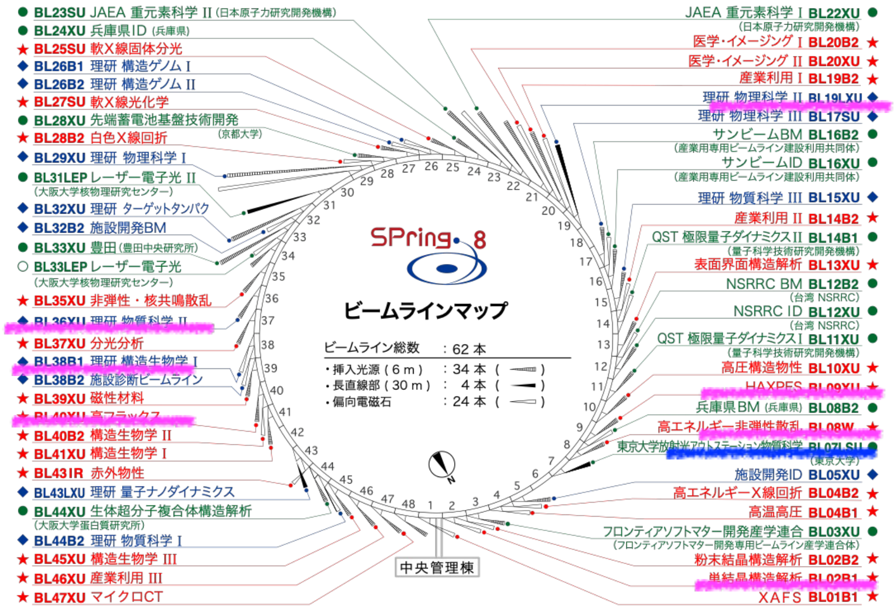
- ベイズ推論のうち計測科学に重要な三つの要素からなる情報数理科学的体系で、その三要素はベイズ計測三種の神器と呼ばれる

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

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

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

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

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

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)

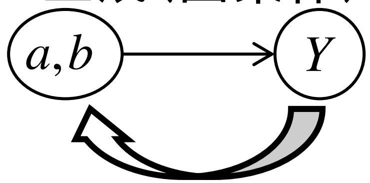
ベイズ計測を自分のデータ解析に使ってみよう！

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＞

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

$p(a,b|Y)$ ：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.

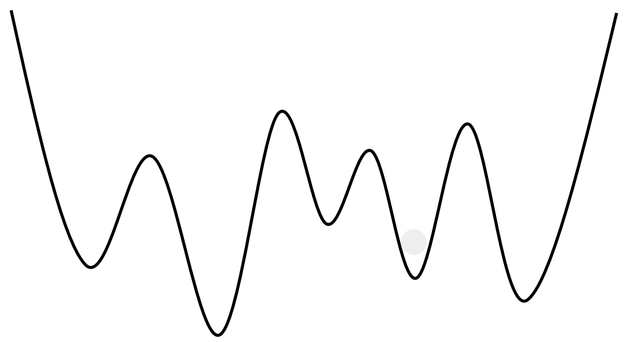
$p(a,b)$ ：事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。
これまで蓄積されてきた科学的知見

ベイズ計測って、どうやって実装したらいいのか。

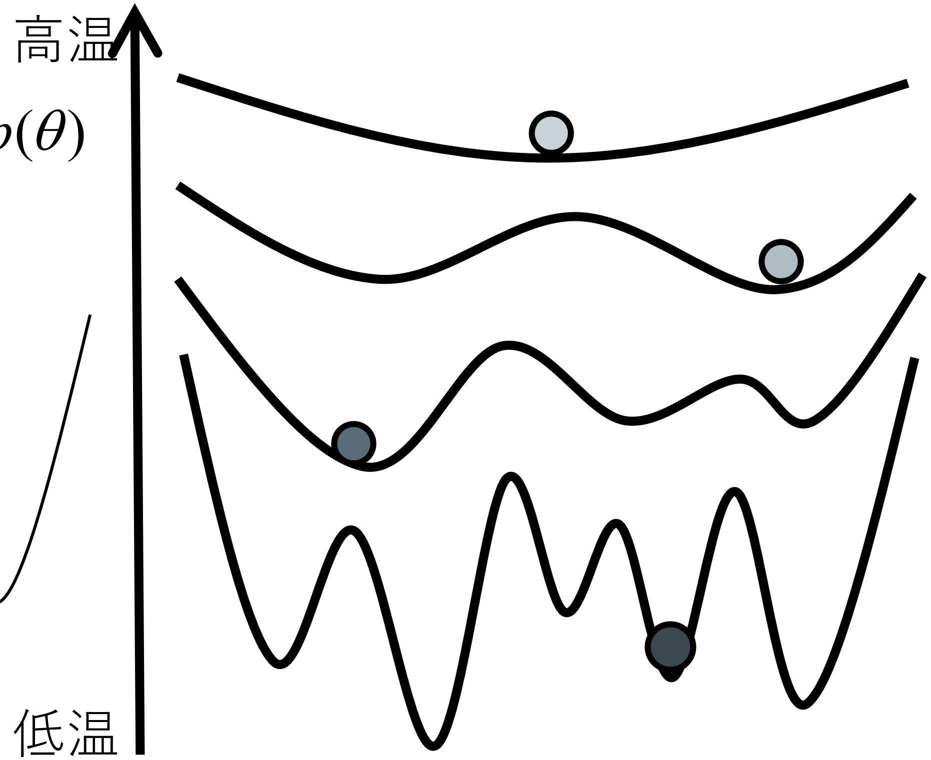
レプリカ交換モンテカルロ法

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).

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)

研究室の組織構成

Okada Lab

HOME | OKADA LAB | PEOPLE | RESEARCH | TEACHING | OUTREACH

Team Okada

Faculty

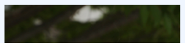
岡田 真人
OKADA, Masato
教授

okada[at]edu.k.u-tokyo.ac.jp
HP

片上 舜
KATAKAMI, Shun
助教

katakami[at]mns.k.u-tokyo.ac.jp
HP

PhD Students



ベイズ計測オープンソースソフトウェアの構築

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)

01　既存の確率分布推定ライブラリ

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) のライブラリ

- Stan
- PyMC3
- JAGS
- emcee
- BUGS

交換モンテカルロ法のライブラリ

- Tensorflow
- emcee
- ptmcmcsampler

ベイズ計測のご利益を簡単には十分に享受できない

[redacted]

02 計測科学における理想的なベイズ推論ツール

求められる機能性

・ベイズ計測三種の神器
1. パラメータ推定
2. モデル選択
3. ベイズ統合

・実行解析結果の可視化

・ベイズ推論の高速な実行

ベイズ推論

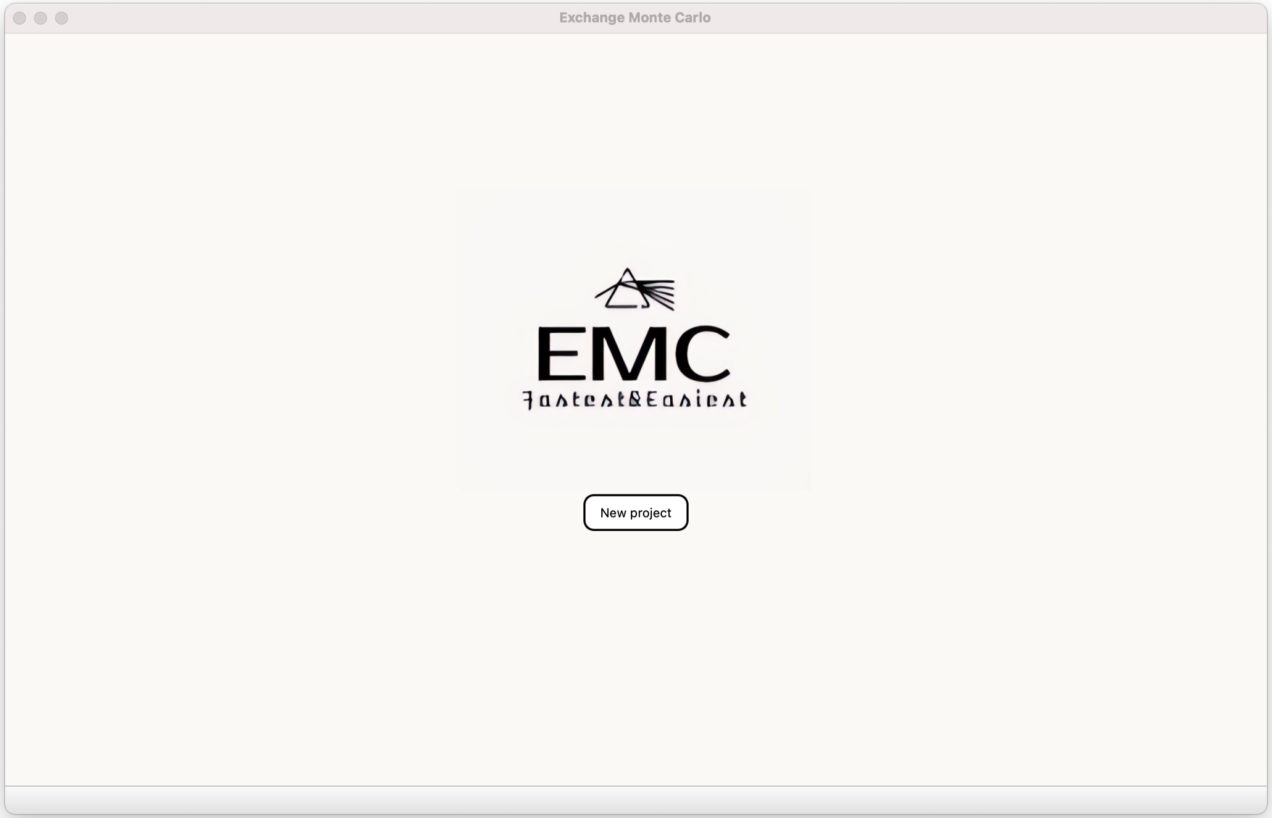
$$\underbrace{P(\theta|D)}_{\text{事後分布}} \propto \underbrace{P(D|\theta)}_{\text{尤度(モデル)}} \times \underbrace{P(\theta)}_{\text{事前分布}}$$

θ : 物理量 (モデルパラメータ)
D : 計測データ

モデルの実装 → データの取り込み → 解析結果の確認

ベイズ計測ワークフロー

01 アプリケーション EMC



[redacted]

スペクトル分解

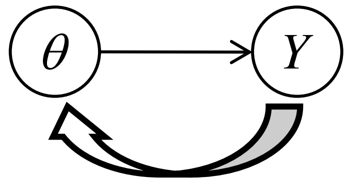
永田賢二，杉田誠司，岡田真人
東大新領域

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

ベイズ計測

$$p(Y,\theta) = p(Y \mid \theta)p(\theta) = p(\theta \mid Y)p(Y)$$

生成（因果律）



$$\Downarrow$$

＜ベイズの定理＞

$$p(\theta|Y) = \frac{p(Y|\theta)p(\theta)}{p(Y)} \propto \exp\bigl(-nE(\theta)\bigr)p(\theta)$$

$p(\theta \mid Y)$ ：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．

$p(\theta)$ ：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

スペクトル分解の定式化

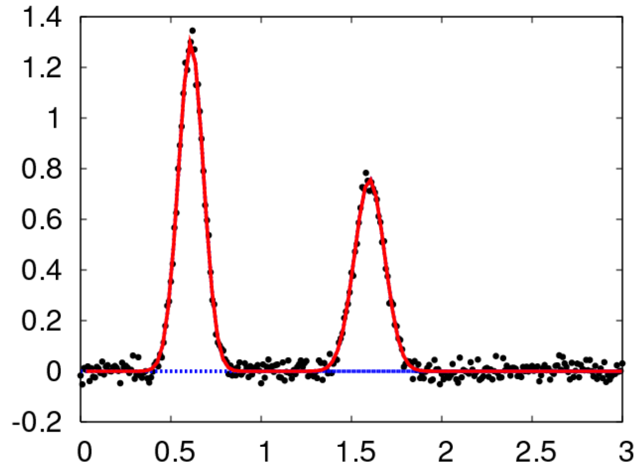
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ:$D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i :入力 y_i :出力

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

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



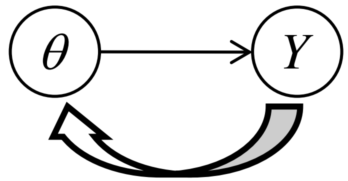
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

ベイズ計測

$$p(Y,\theta) = p(Y \mid \theta)p(\theta) = p(\theta \mid Y)p(Y)$$

生成（因果律）



$$\Downarrow$$

＜ベイズの定理＞

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

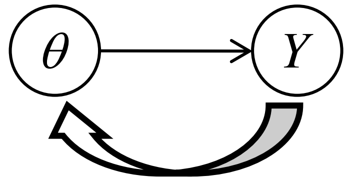
$p(\theta \mid Y)$ ：事後確率．データが与えられたもとでの，パラメータの確率．

$p(\theta)$ ：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

$$p(Y,\theta) = p(Y \mid \theta)p(\theta) = p(\theta \mid Y)p(Y)$$

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

$$p(\theta|Y) = \frac{p(Y|\theta)p(\theta)}{p(Y)} \propto \exp\bigl(-nE(\theta)\bigr)p(\theta)$$

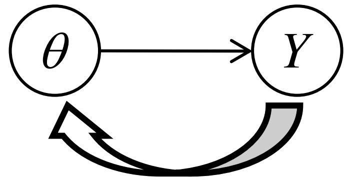
$p(\theta \mid Y)$ ：事後確率．データが与えられたもとでの，パラメータの確率．

$p(\theta)$ ：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

$$p(Y,\theta) = p(Y \mid \theta)p(\theta) = p(\theta \mid Y)p(Y)$$

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

$$\color{red}{p(\theta|Y)} = \frac{p(Y|\theta)p(\theta)}{p(Y)} \propto \exp\bigl(-nE(\theta)\bigr)p(\theta)$$

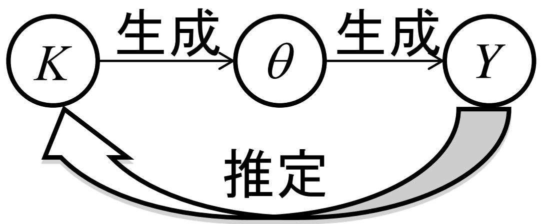
$p(\theta \mid Y)$ ：事後確率．データが与えられたもとでの，パラメータの確率．

$p(\theta)$ ：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

ベイズ計測オープンソースソフトウェア
デモ

モデル選択: 自由エネルギーの導入

1. 欲しいのは　$p(K \mid Y)$



K: ピーク個数
θ: ピーク位置など
Y: 観測スペクトル

2. θがないぞ

3. $p(K,\theta,Y)$ の存在を仮定

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

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

4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

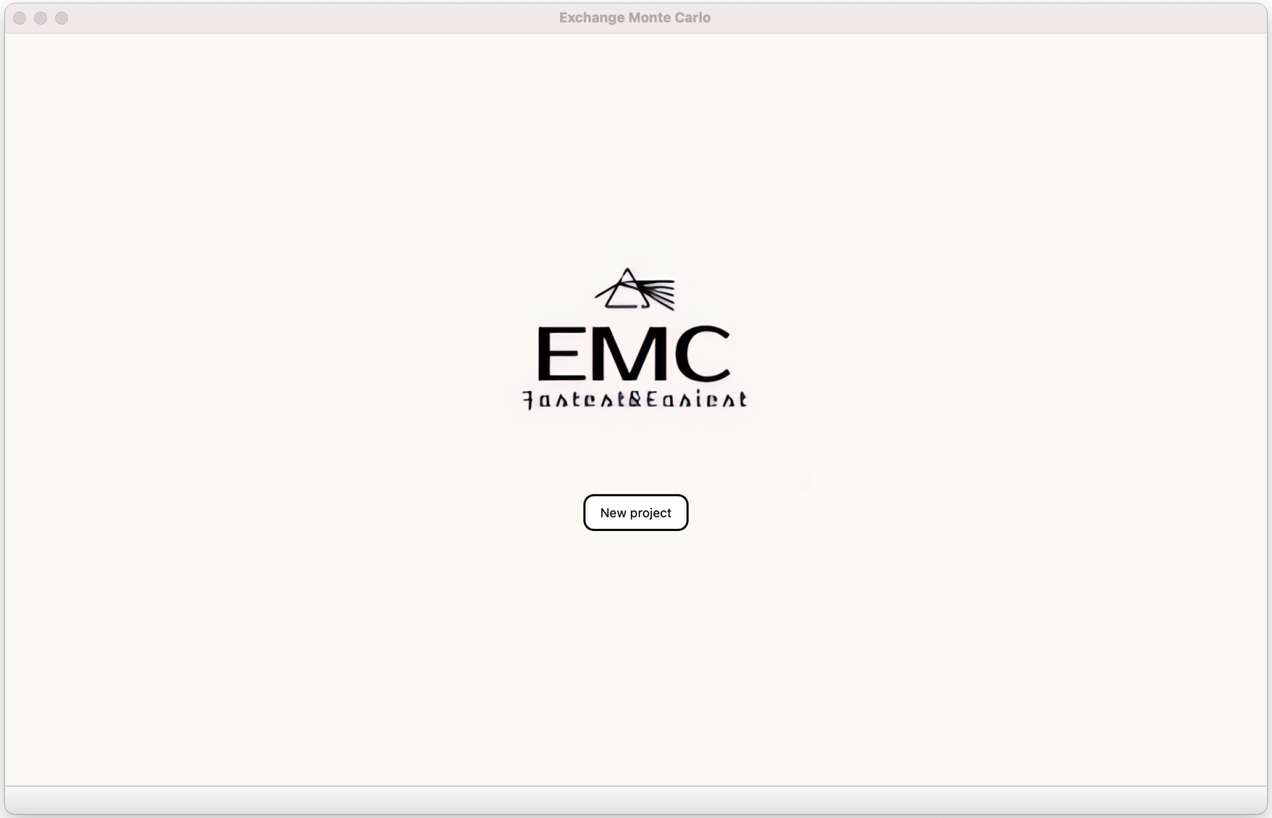
$$p(K \mid Y) = \frac{p(Y \mid K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)\,d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にする個数　Kを求める.

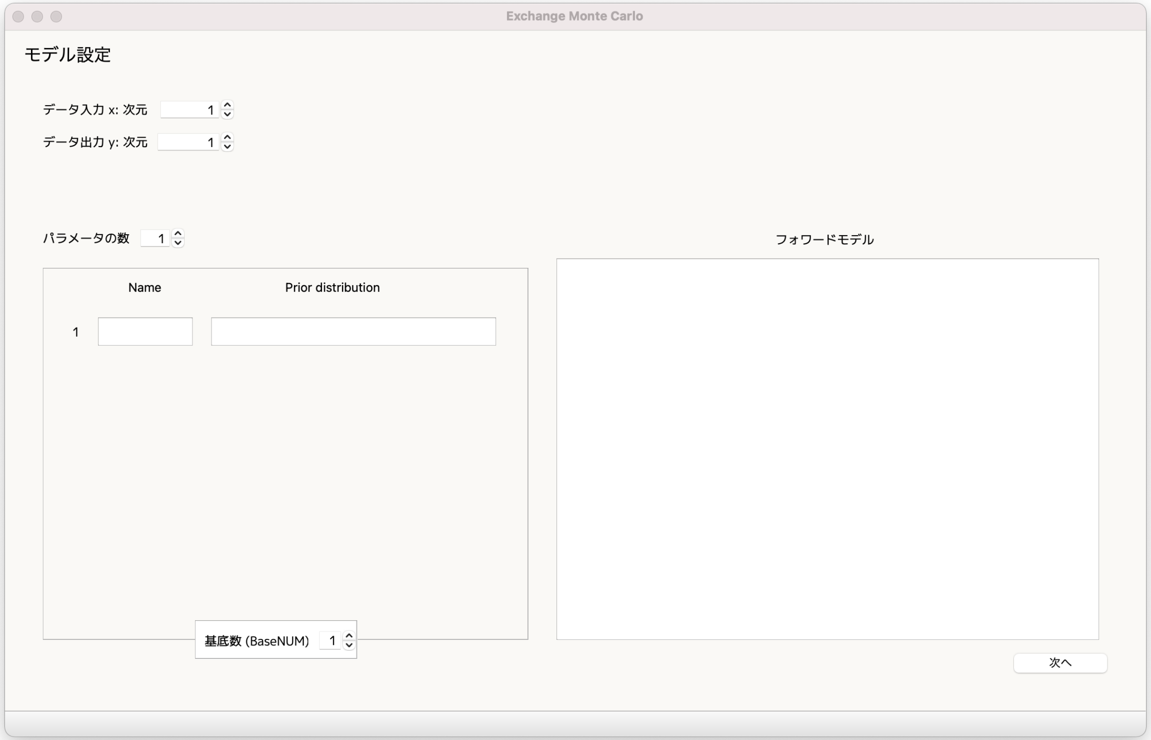
今後の展望

01 アプリケーション EMC



[redacted]

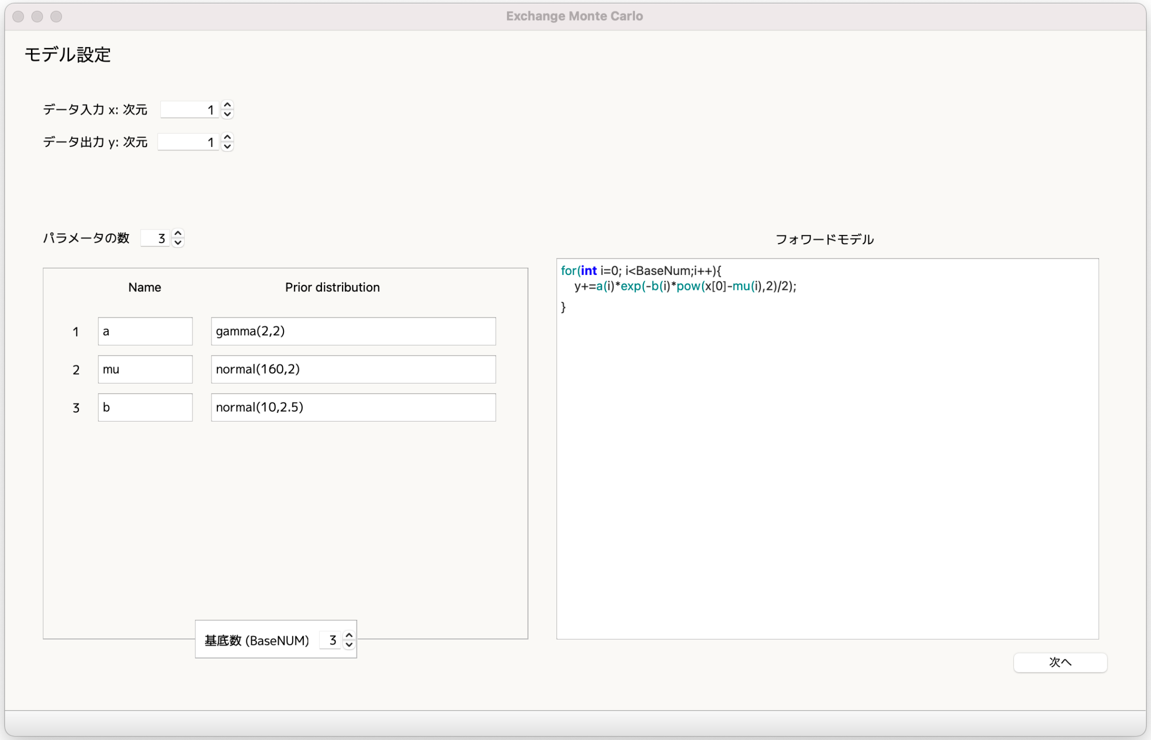
01　EMCによるスペクトル分解実装



フォワードモデル

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

02　EMCによるスペクトル分解実装



フォワードモデル

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

02　EMCによるスペクトル分解実装

パラメータの名前と事前分布

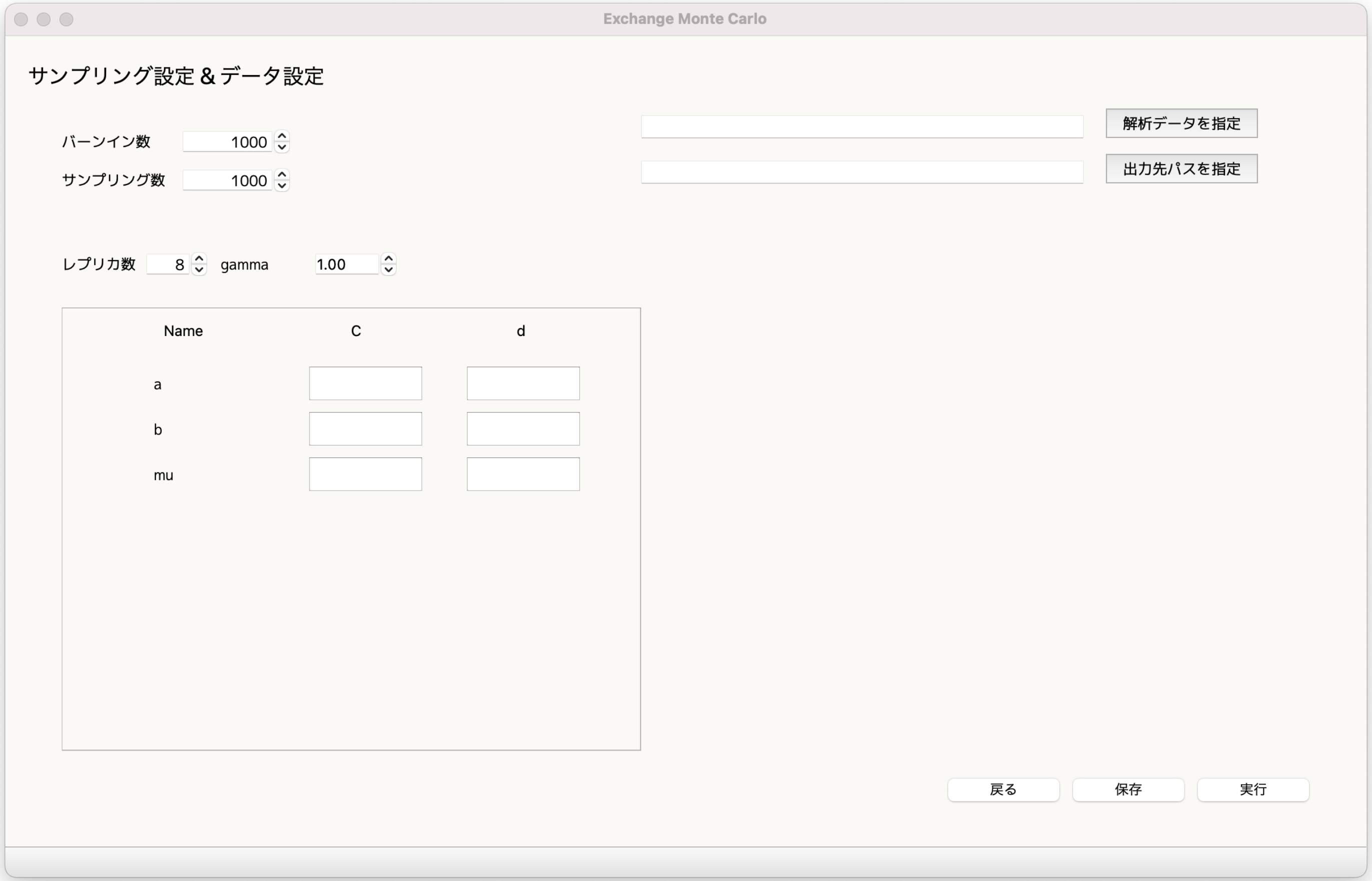
フォワードモデル

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

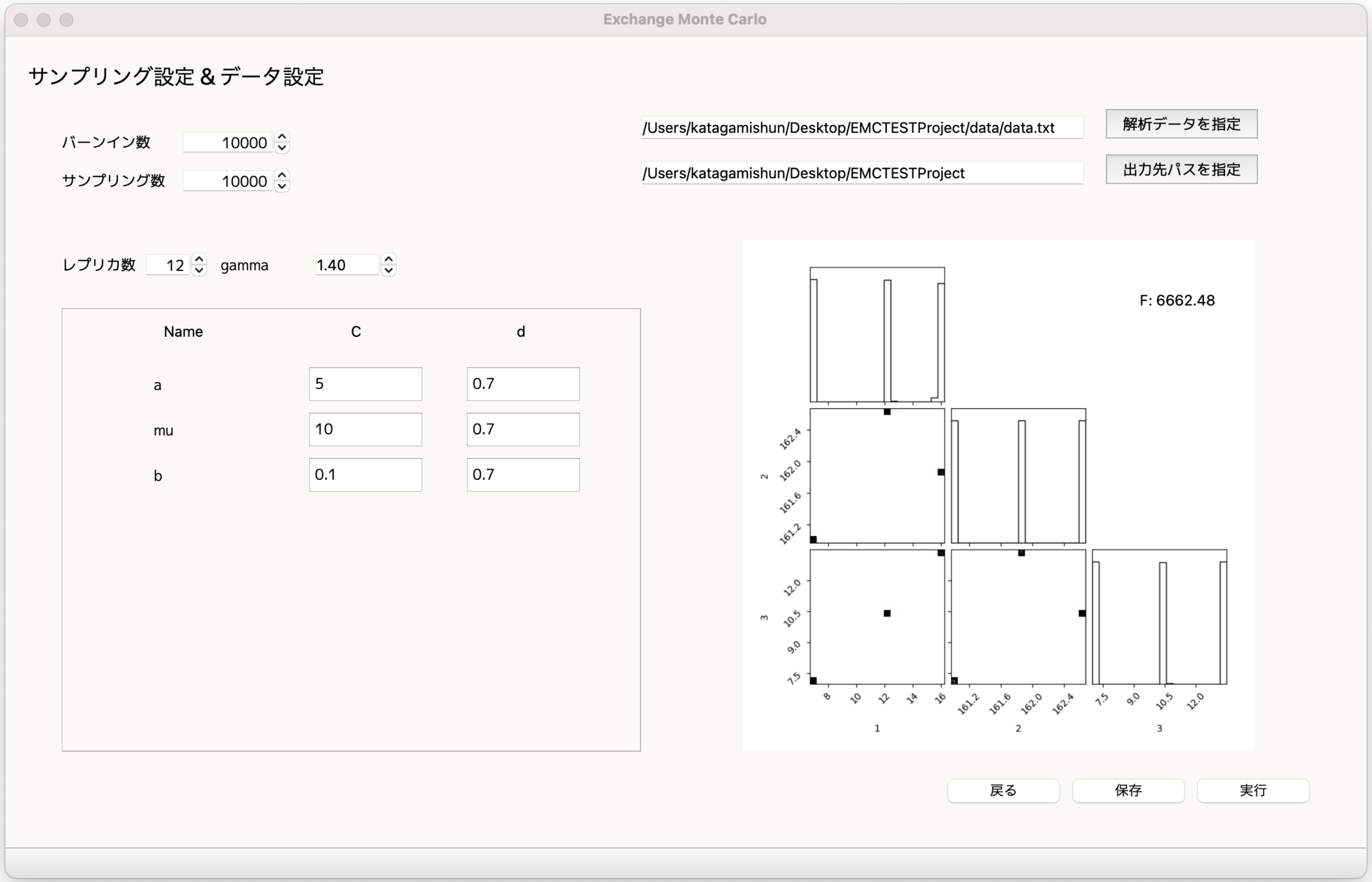
```
for(int i=0; i<BaseNum;i++){
    y += a(i)*exp(-b(i)*pow(x[0]-mu(i),2)/2)
}
```

03　EMCによるスペクトル分解実装

サンプリング設定とデータの設定



04　EMCによるスペクトル分解実装



01　おわりに :ベイズ計測オープンソースソフトウェアの開発の取り組み

- 基本的なベイズ推論ワークフローを完備
- 迅速に実装可能かつ柔軟なモデル構築が可能なUI
- 実行解析結果の可視化
- ベイズ推論の高速な実行
- プロト版であれば共有可能