東京大学・大学院新領域創成科学研究科
基盤科学研究系
高次元データ駆動科学教育プログラム
データ駆動科学入門I No2/2

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

自己紹介(理論物理学)

- 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 北伊丹製作所(量産エンジニア)　　　　(1987‐1989)
  - 化合物半導体(半導体レーザー)のエピタキシャル結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学　　　(1989‐1996)
  - ニューラルネットワーク(脳型人工知能)
  - 福島先生は畳み込み深層ニューラルネットワークの提案者
- 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　甘利チーム (2001‐04/06)
  - 情報統計力学
  - ベイズ推論，機械学習，データ駆動科学
- 東京大学・大学院新領域創成科学研究科　複雑理工学専攻
  - データ駆動科学、ベイズ推論、スパースモデリング (2004/07 –)

内容(1/3)

- データ駆動科学入門Iの紹介とゴール
  線形回帰$y=ax+b$の解析計算とスペクトル分解
- 高次元次元データ駆動科学教育プログラムの紹介
  プログラムの目的と設計指針
- 自然科学とデータ駆動科学
  自然記述の二つの戦略:
    要素還元主義と階層的自然観
    階層的自然観とデータ駆動科学
- データ駆動科学の二つの情報数理基盤
  スパースモデリング(SpM)
  ベイズ推論からベイズ計測へ

内容(2/3)

- 計算論的神経科学とデータ駆動科学

  David Marrの三つのレベル

  データ駆動科学の三つのレベル

  連立方程式とデータ駆動科学

- 直線回帰$y=ax+b$の解析手計算
  - 最小二乗法の復習
  - ベイズ推論の導入とベイズ計測の創成
  - パラメータの確率分布、ノイズ分散推定、モデル選択

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

  レプリカ交換法の適用

  モデル選択

  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  – Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

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[††]

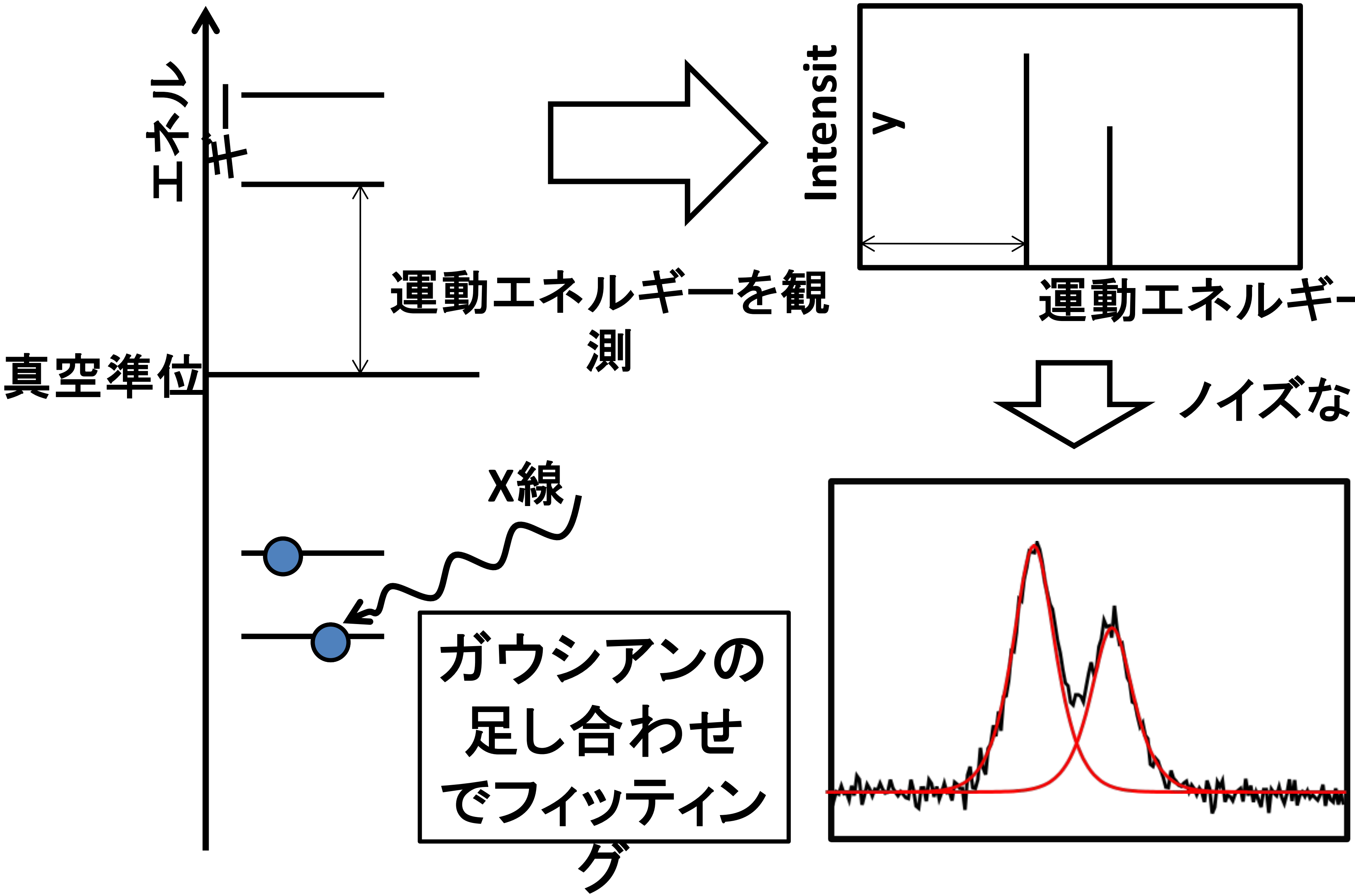
Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University,
Toyonaka 560
[†]*Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza",*
00185 Roma, Italy
[††]*LMSES, Université Louis Pasteur, 67070 Strasbourg, France*

(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).

X-ray Photoelectron Spectroscopy（XPS）
X線光電子分光



希土類化合物のXPSとXAS

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

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

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

where

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

スペクトルで多体効果をみる

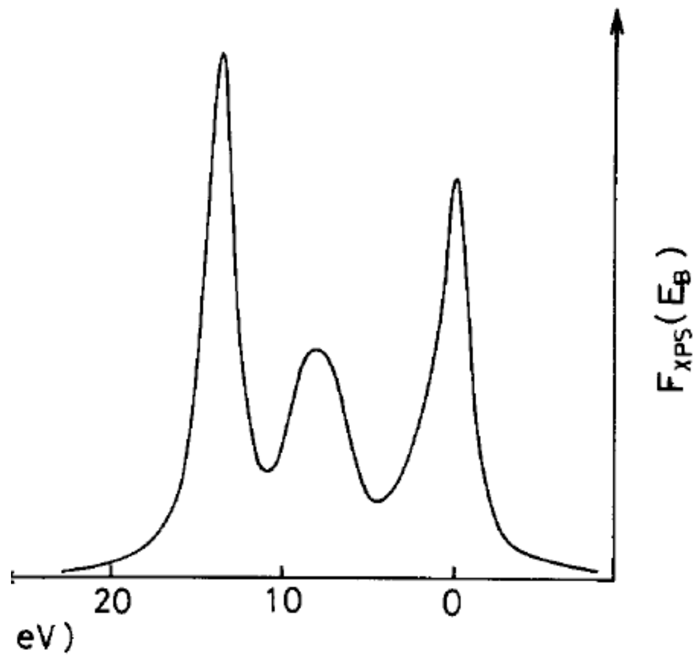


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily.

(A. Kotani, K. Okada and M. Okada, 1987)

ピークの位置と幅から，対象の物理的性質の考察が可能になる

順モデルからパラメータフィットしてスペクトルを再構成

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

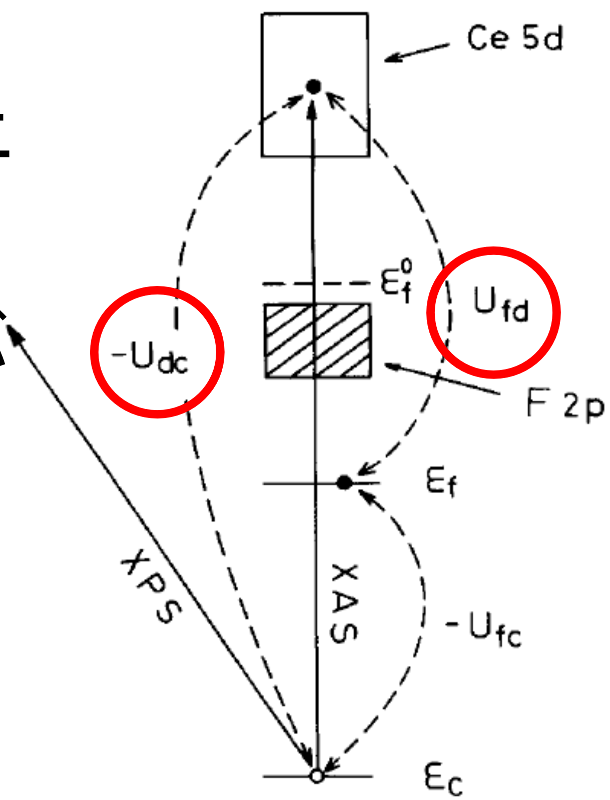
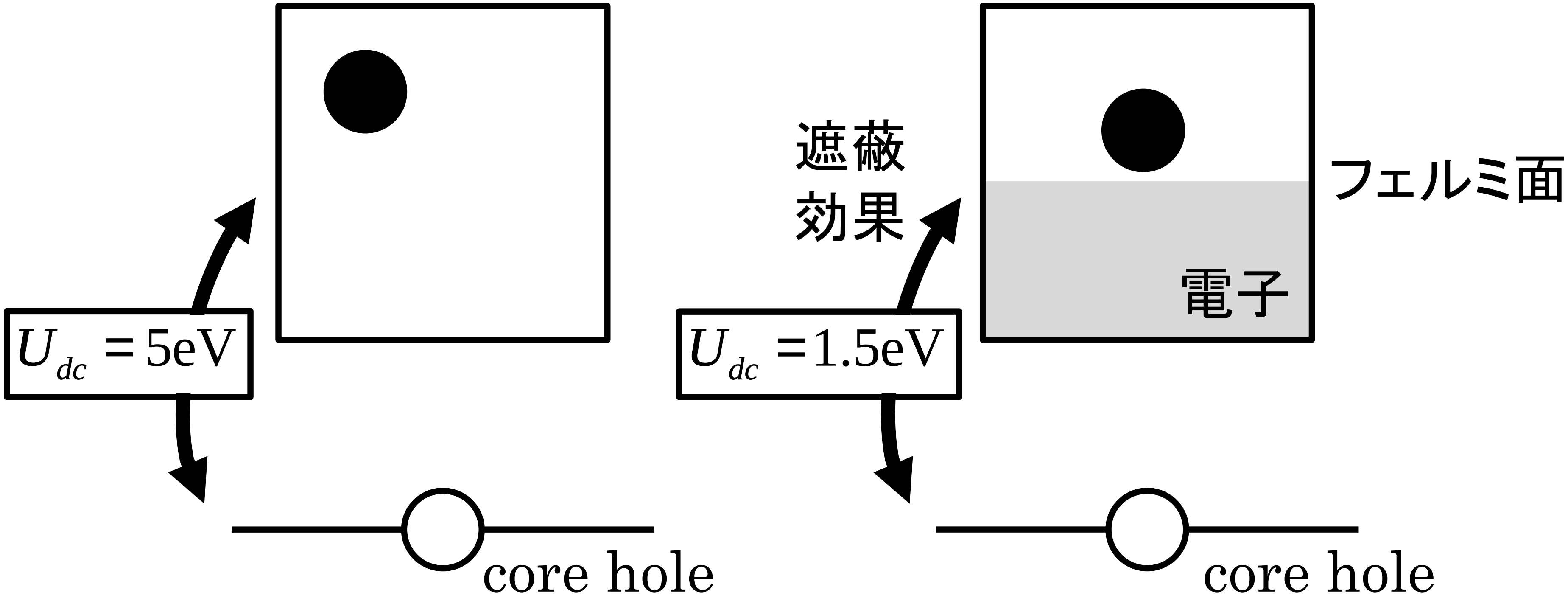


Fig. 1. Model of the present theory describing 3*d*-XPS and L_3-XAS.

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.

なにが問題か: モデル選択

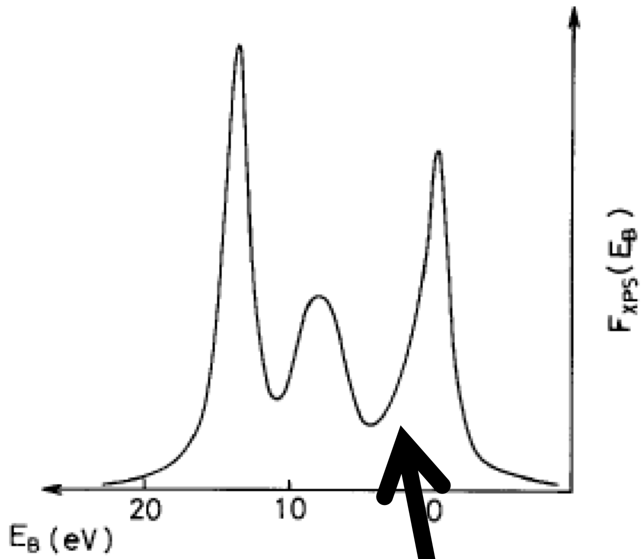
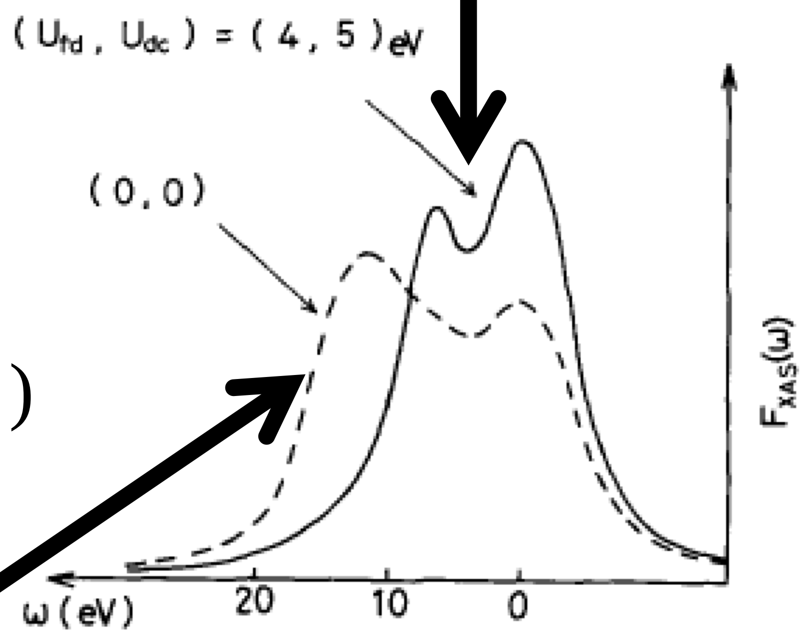


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily.

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



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

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

希土類化合物のL_3-XASを解析して

- Kotaniの主張: U_{dc}が必要
- 結論
  - 絶縁体では5eV程度
  - 金属では1〜2eV程度
- 当時(35年前)感じた問題点
  - 発見法的なパラメータサーチ
  - XPSを決めてからXASを解析
  - 余分なパラメータを導入?
  - オーバーフィット
  - 推定パラメータの誤差評価

→ベイズ的アプローチ，ベイズ統合

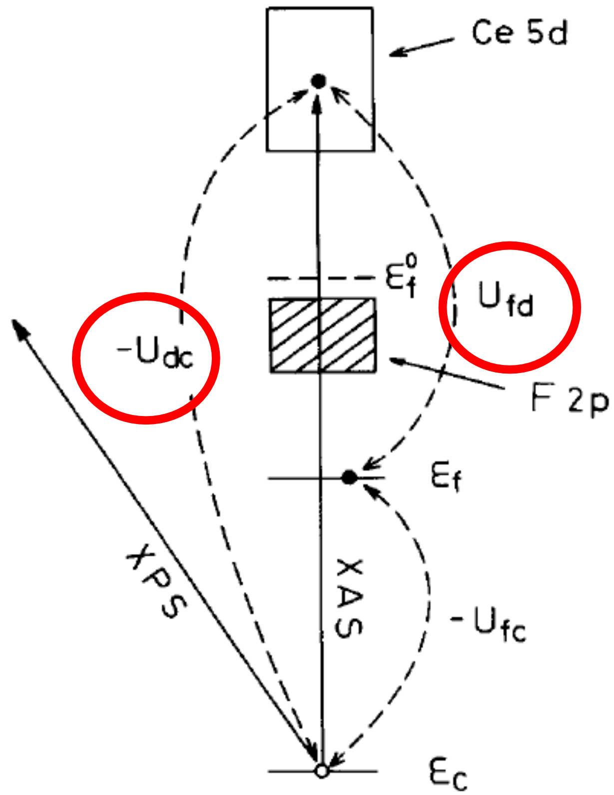


Fig. 1. Model of the present theory describing 3*d*-XPS and L_3-XAS.

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

  レプリカ交換法の適用

  モデル選択

  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

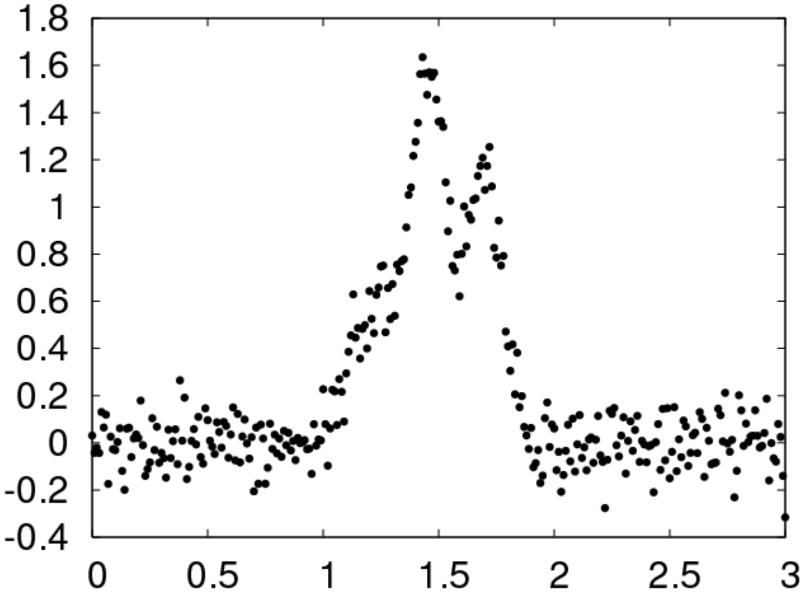
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

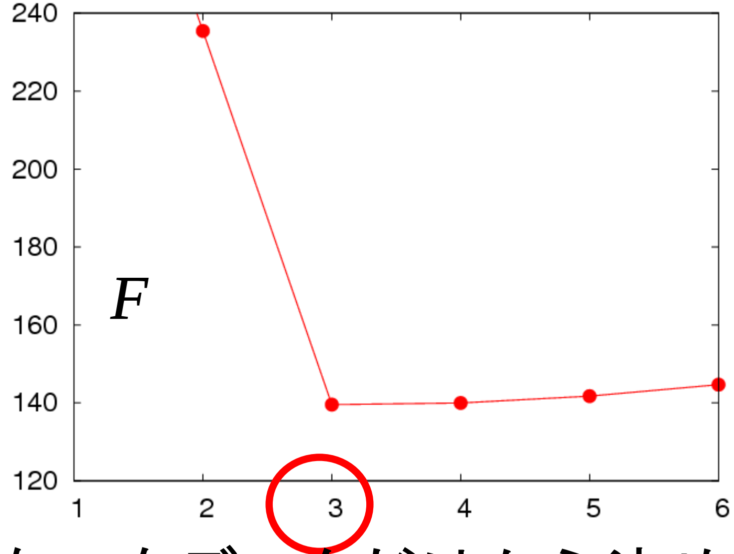
ベイズ的スペクトル分解

永田賢二，杉田誠司，岡田真人
東京大学大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻

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

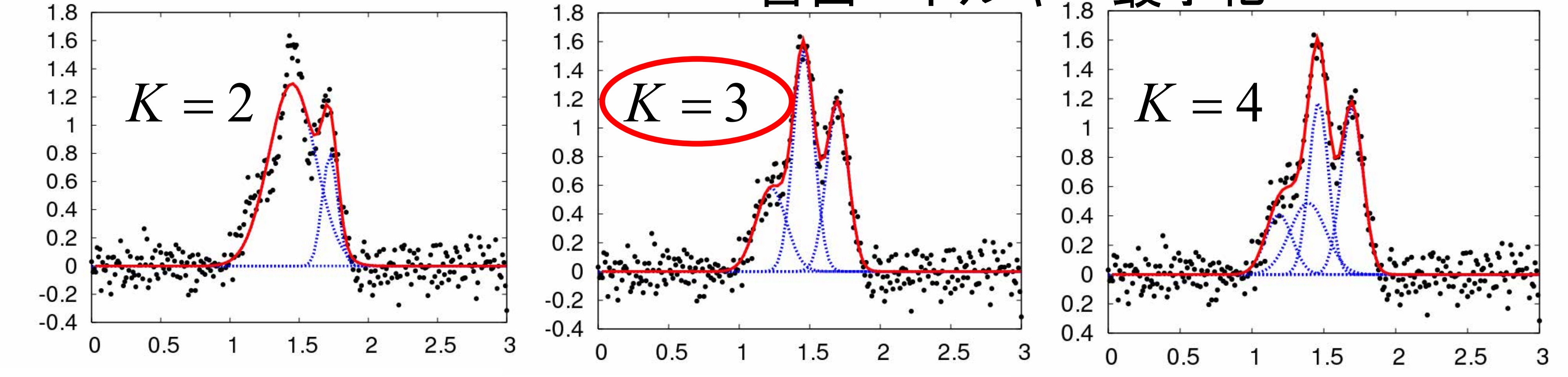
スペクトル分解





最適なKをデータだけから決める

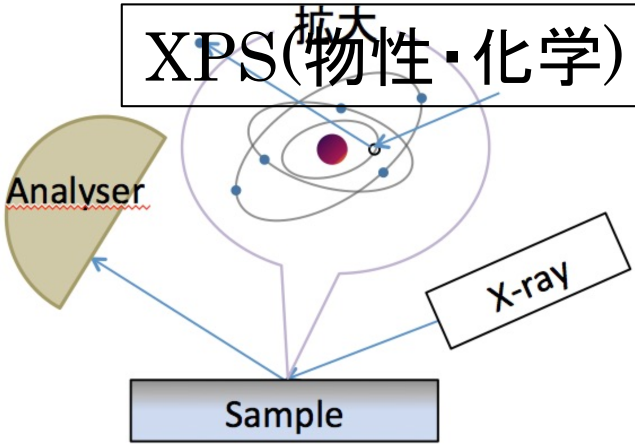
自由エネルギー最小化



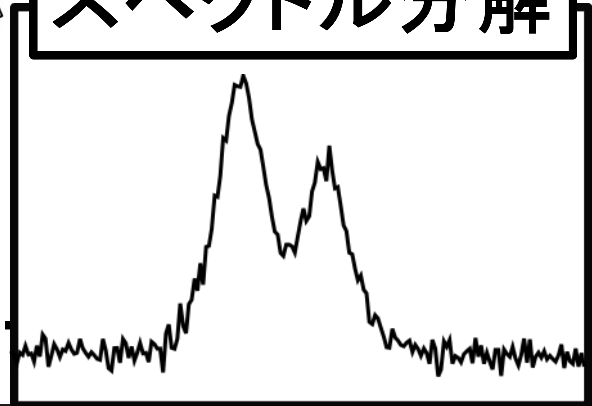
Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

スペクトル分解と物質材料/生命科学
スペクトルの生成機序がわからない場合、
まずはスペクトル分解

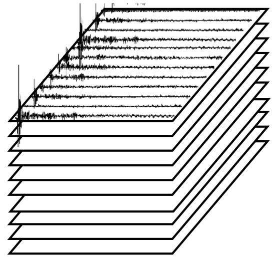
XPS(物性・化学)

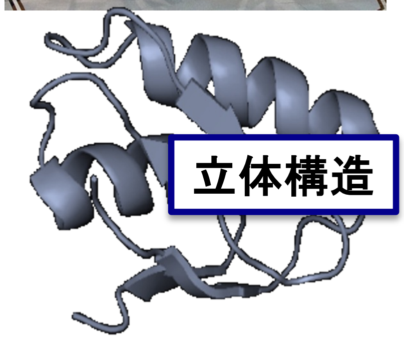


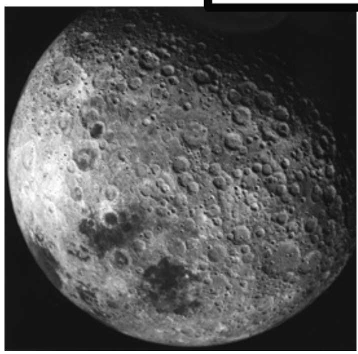
スペクトル分解

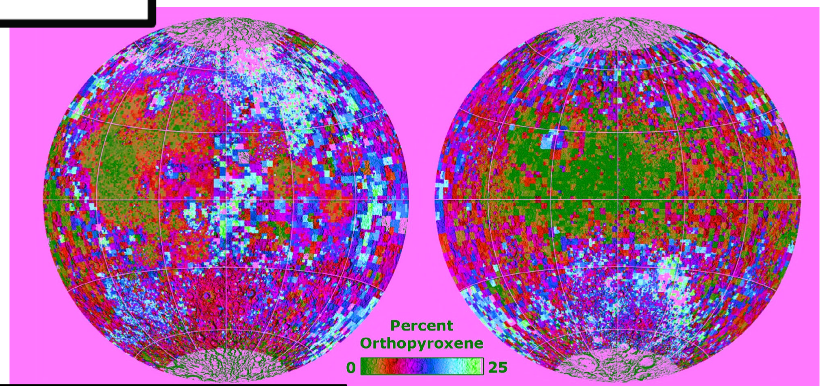


NMR









光の反射スペクトル(惑星科学)

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

  レプリカ交換法の適用

  モデル選択

  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  – Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

スペクトル分解の定式化

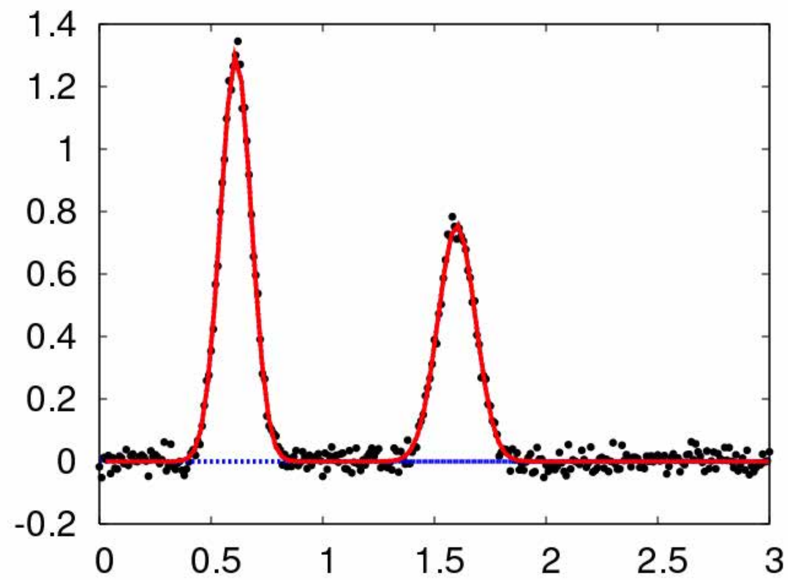
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i : 入力　y_i : 出力

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

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



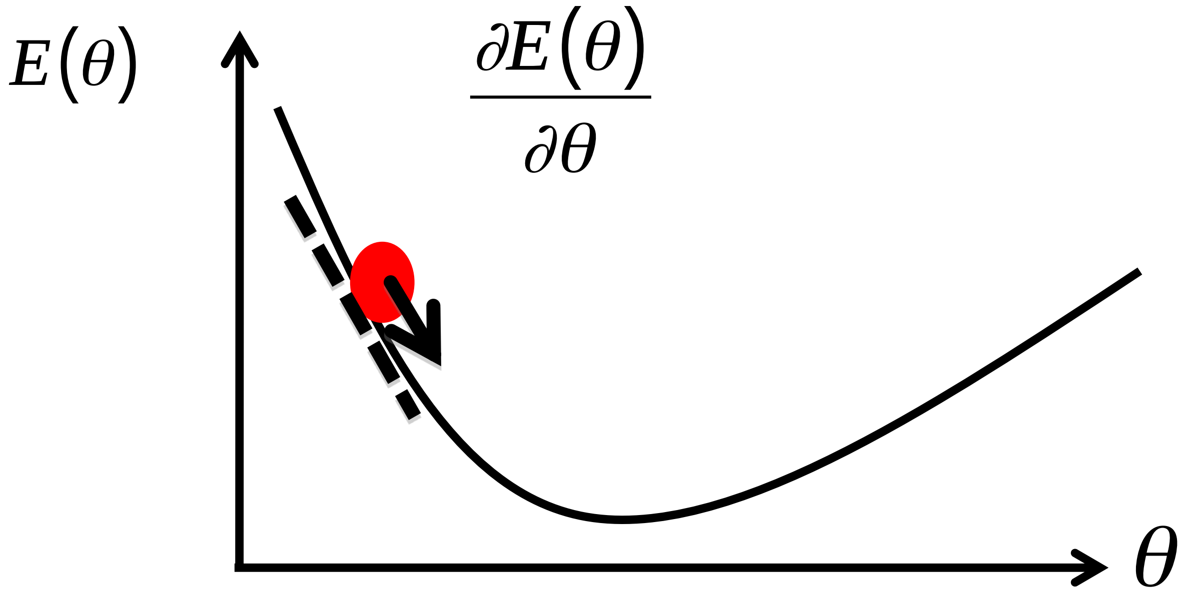
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

内容(3/3)

- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  – Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

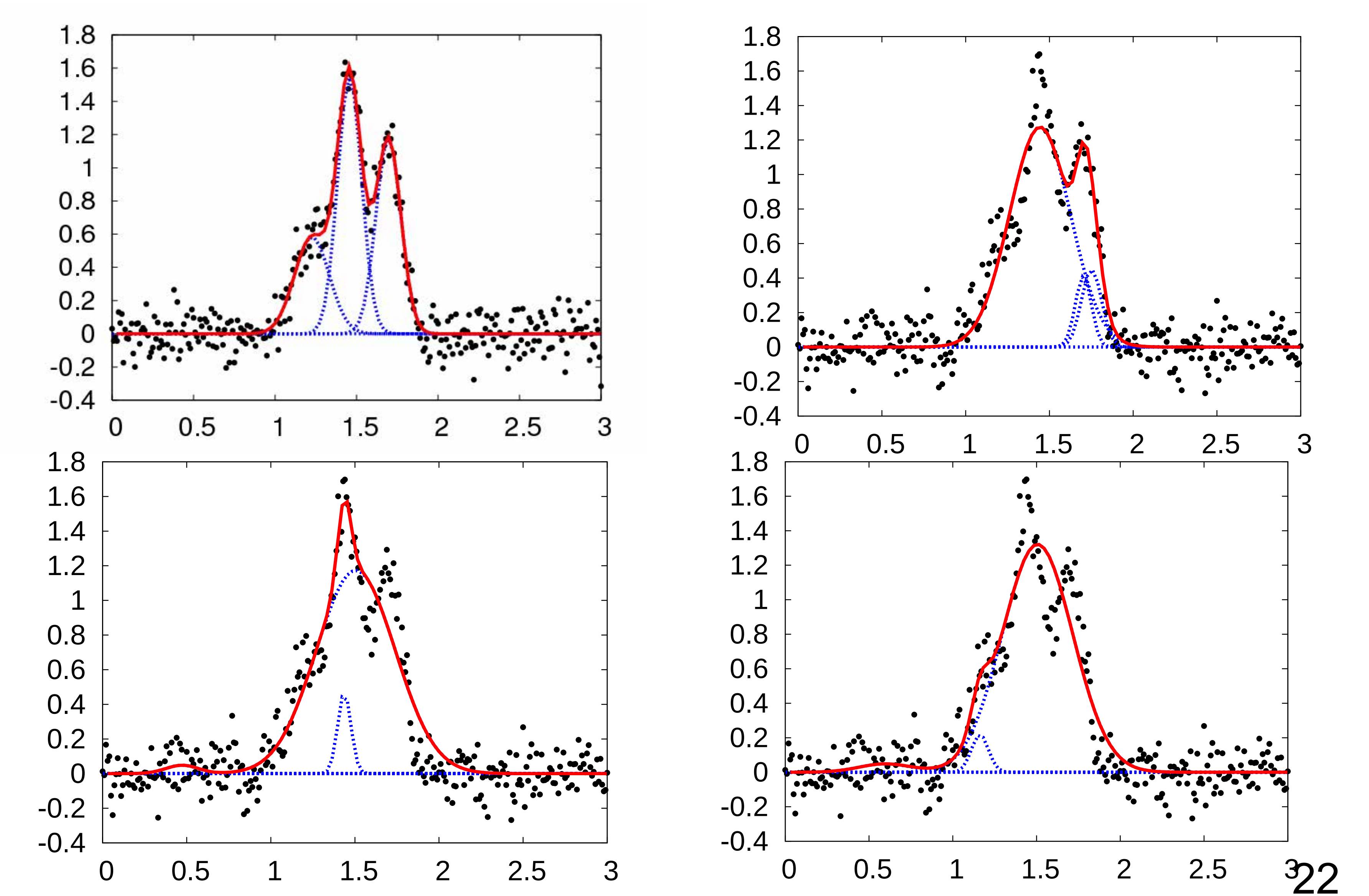
スペクトル分解従来法: 最急降下法 (1/3)



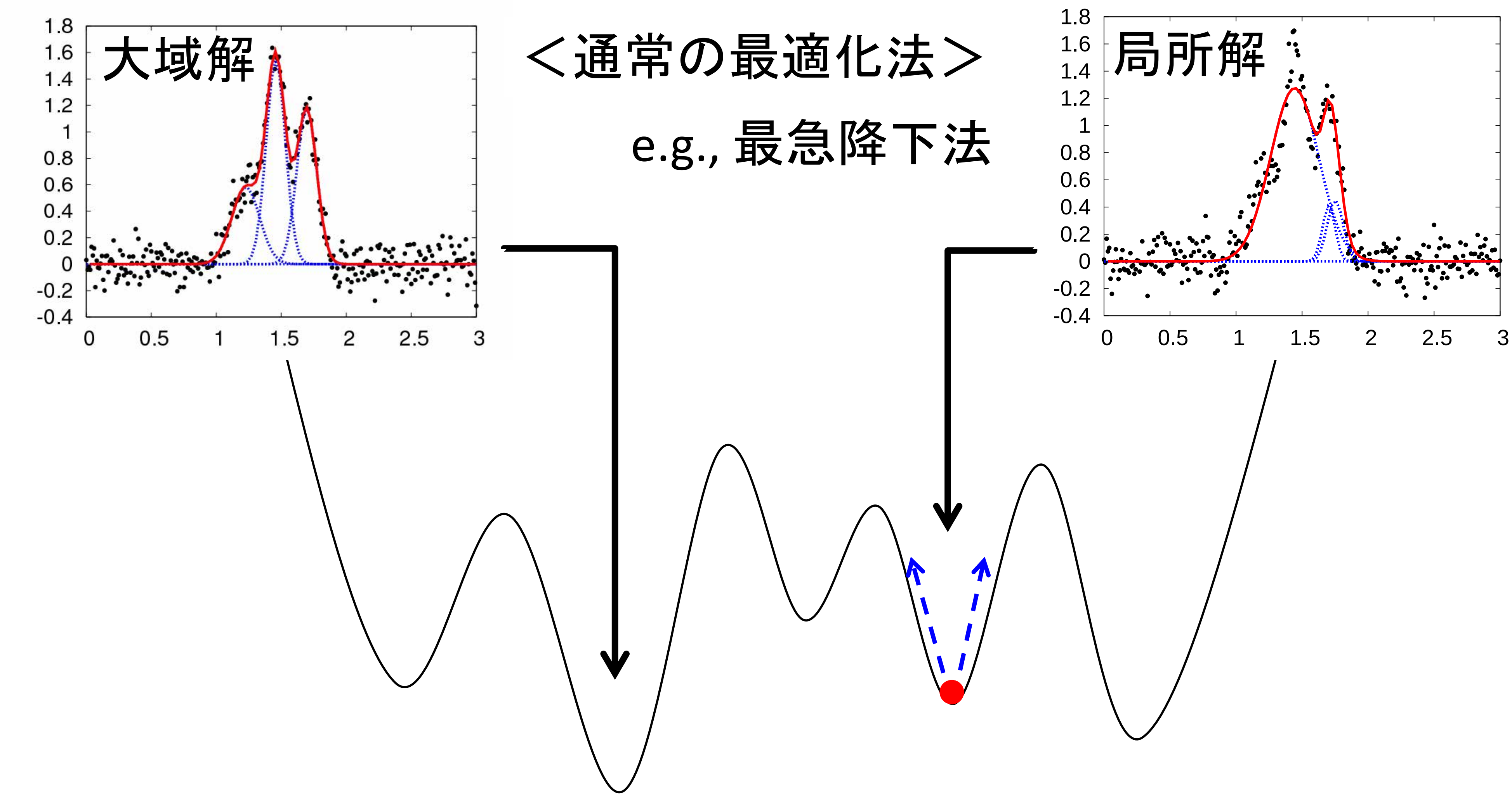
$$\frac{d\theta}{dt} = -\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta}$$

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

スペクトル分解従来法: 最急降下法 (2/3) ローカルミニマム



スペクトル分解従来法: 最急降下法 (3/3)
誤差関数は局所解を持つ



内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

  レプリカ交換法の適用

  モデル選択

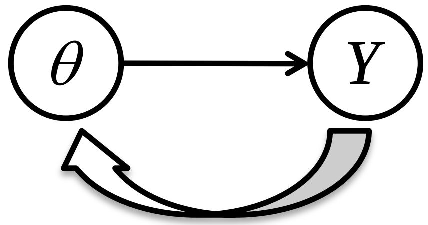
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

ベイズ推論の導入 (1/2)
ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(\theta \mid Y)$: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.

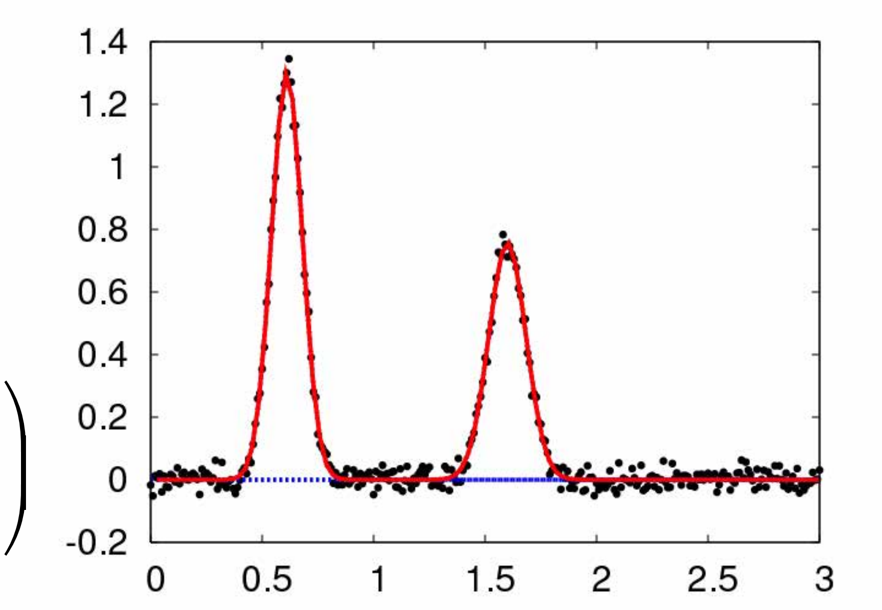
$p(\theta)$:事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。
これまで蓄積されてきた科学的知見

ベイズ推論の導入 (2/2)
確率的定式化

出力は，入力からの応答とノイズの足し合わせにより生成

⇒出力は，確率変数である．

$$y_i = f(x_i;\theta) + \varepsilon$$



ノイズが正規分布であるとすると，

$$p(y_i\,|\,\theta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(y_i - f(x_i;\theta)\right)^2\right)$$

それぞれの出力 y_i が，独立であるとすると，

$$p(Y\,|\,\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(y_i\,|\,\theta) \propto \exp(-nE(\theta)) \qquad Y = \{y_1, \cdots, y_n\}$$

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

ボルツマン分布

内容(3/3)

- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  – Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

モンテカルロ法の適用
メトロポリス法: 計算の簡略化

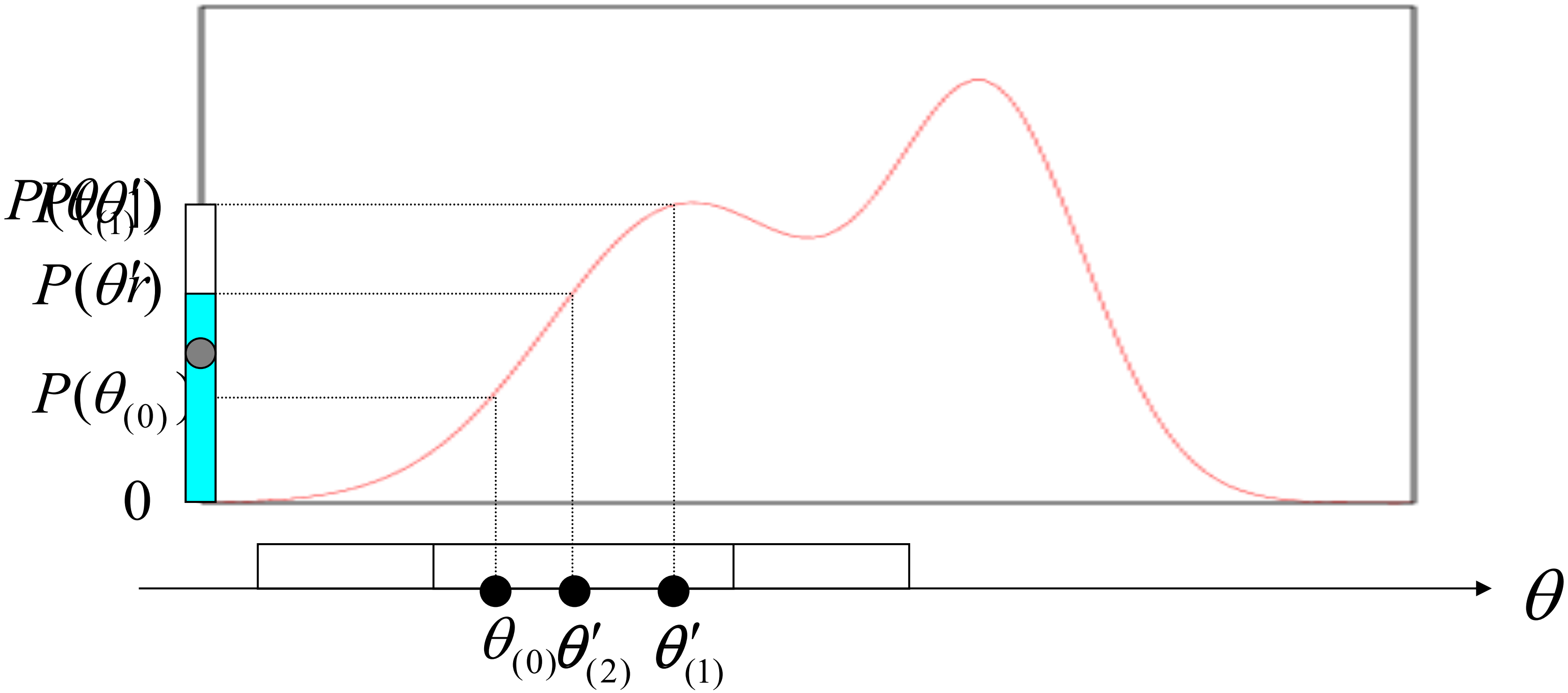
（例）以下の確率分布 $P(\theta)$ に従うサンプル生成

1. 初期値 $\theta_{(0)}$ を設定する。
2. 現在の値 $\theta_{(t)}$ から、次の式で候補 θ' を生成する。
3. 確率の比較により、次の値 $\theta_{(t+1)}$ を決める。

$\theta' = \theta_{(t)} + \varepsilon$　ε : 平均0の一様乱数、正規乱数など

$P(\theta_{(t)}) < P(\theta') \Rightarrow \theta_{(t+1)} = \theta'$

$P(\theta_{(t)}) > P(\theta') \Rightarrow$ 確率 r で $\theta_{(t+1)} = \theta'$、確率 $1-r$ で $\theta_{(t+1)} = \theta_{(t)}$　$r = \dfrac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})}$



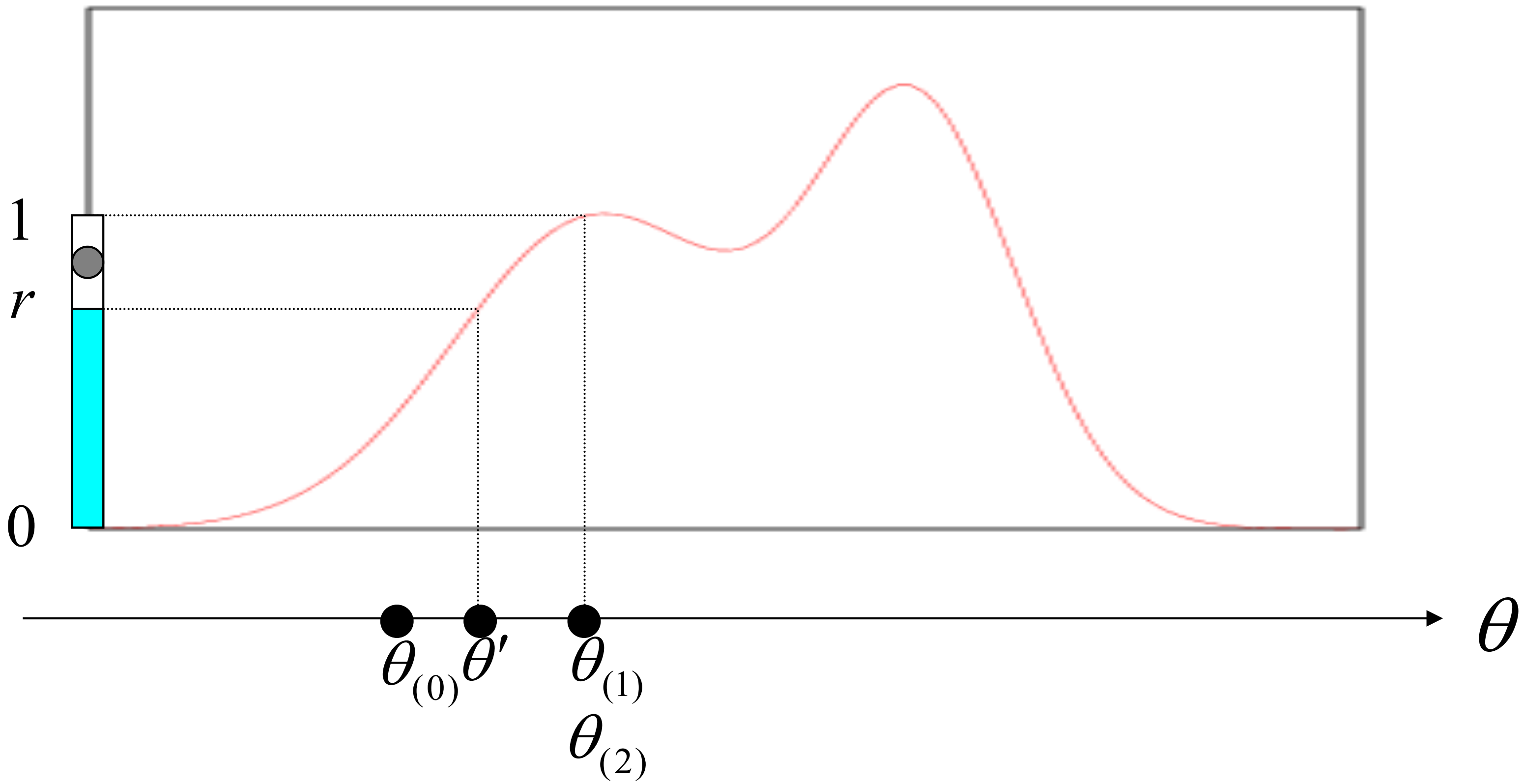
モンテカルロ法の適用: メトロポリス法

（例）以下の確率分布 $P(\theta)$ に従うサンプル生成

３．　密度の比較により、次の点 $\theta_{(t+1)}$ を決める。

$P(\theta_{(t)}) > P(\theta')$ ⇨ 確率 r で $\theta_{(t+1)} = \theta'$
確率 $1-r$ で $\theta_{(t+1)} = \theta_{(t)}$

$$r = \frac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})}$$



モンテカルロ法の適用
メトロポリス法のアルゴリズム

＜確率分布 $P(\theta)$ に従うサンプリング･アルゴリズム＞

１． θ の初期値 $\theta_{(0)}$ を適当に設定する。

２． 現在の点 $\theta_{(t)}$ から、以下の式で候補 θ' を生成する。

$$\theta' = \theta_{(t)} + \varepsilon \qquad \varepsilon：平均0の一様乱数、正規乱数など$$

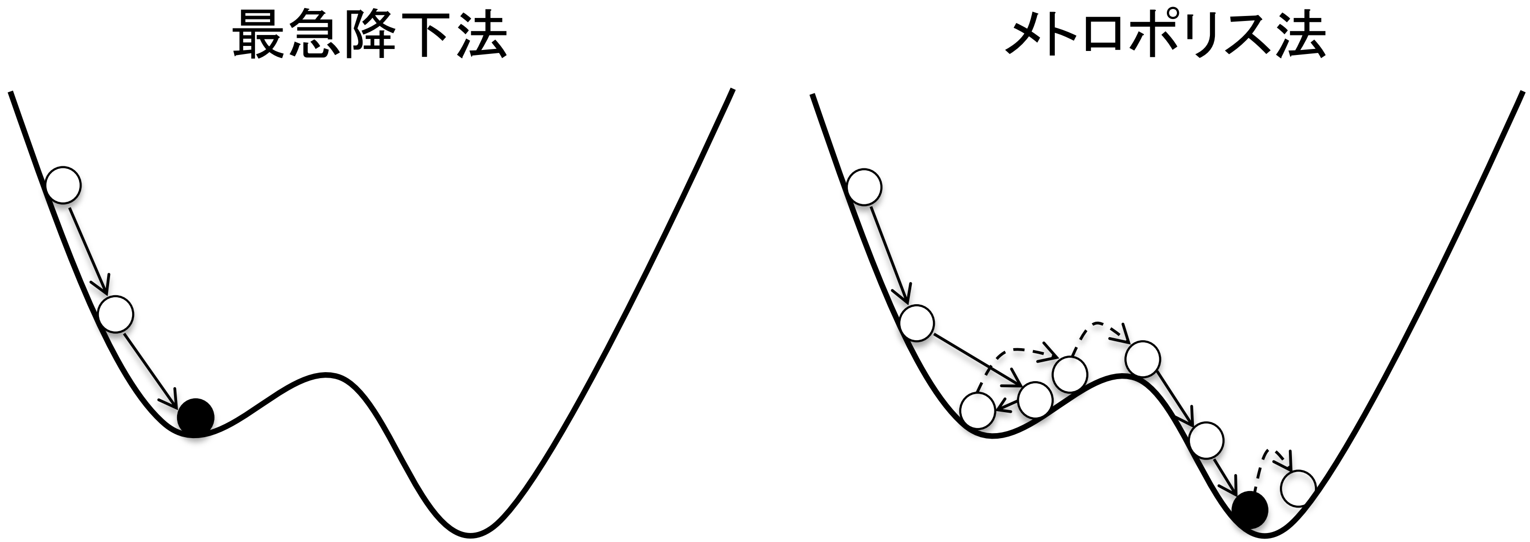
３． 密度の比較により、次の状態 $\theta_{(t+1)}$ を決める。

$$P(\theta_{(t)}) \le P(\theta') \quad \Longrightarrow \quad \theta_{(t+1)} = \theta'$$

$$P(\theta_{(t)}) > P(\theta') \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{ll} 確率\ r\ で & \theta_{(t+1)} = \theta' \\ 確率\ 1-r\ で & \theta_{(t+1)} = \theta_{(t)} \end{array} \qquad r = \frac{P(\theta')}{P(\theta_{(t)})}$$

４． ステップ２に戻り、繰り返す。

モンテカルロ法の適用
最急降下法との比較



・メトロポリス法だと，局所解から脱却する可能性がある.

・十分な更新を行うと，以下のボルツマン分布からのサンプリングと見なせる

$$p(\theta) \propto \exp\left(-\beta E(\theta)\right)$$

モンテカルロ法の適用
マルコフ連鎖

マルコフ連鎖：直前の点 $\theta_{(t-1)}$ のみに依存して、次の点 $\theta_{(t)}$ を決定する。

$$\theta_{(t-1)} \to \theta_{(t)} \to \theta_{(t+1)} \cdots$$

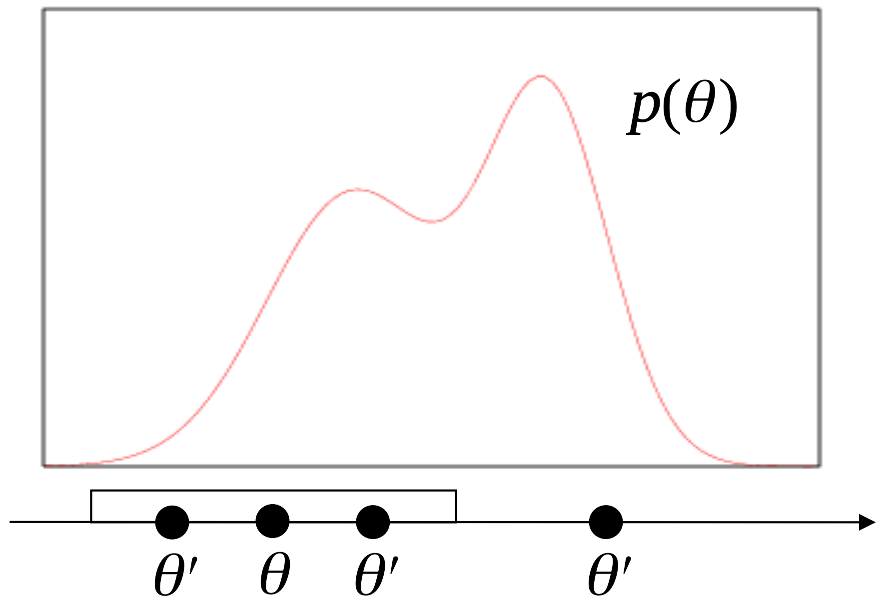
・遷移確率　$\pi(\theta \to \theta')$：点 θ から点 θ' に移る確率

（メトロポリス法の場合）　　ε :[-D,D]の範囲の一様分布からランダムに選ぶ。

Case1: $\pi(\theta \to \theta') = 0$

Case2: $\pi(\theta \to \theta') = \dfrac{1}{2D}$

Case3: $\pi(\theta \to \theta') = \dfrac{1}{2D}\dfrac{p(\theta')}{p(\theta)}$



モンテカルロ法の適用
マルコフ連鎖の原理

＜遷移確率 $\pi(\theta \to \theta')$ が満たすべき条件＞

１. 詳細つりあい条件　　$p(\theta)\pi(\theta \to \theta') = p(\theta')\pi(\theta' \to \theta)$

確率分布 $p(\theta)$ に従う点がたくさんある状況を考える。

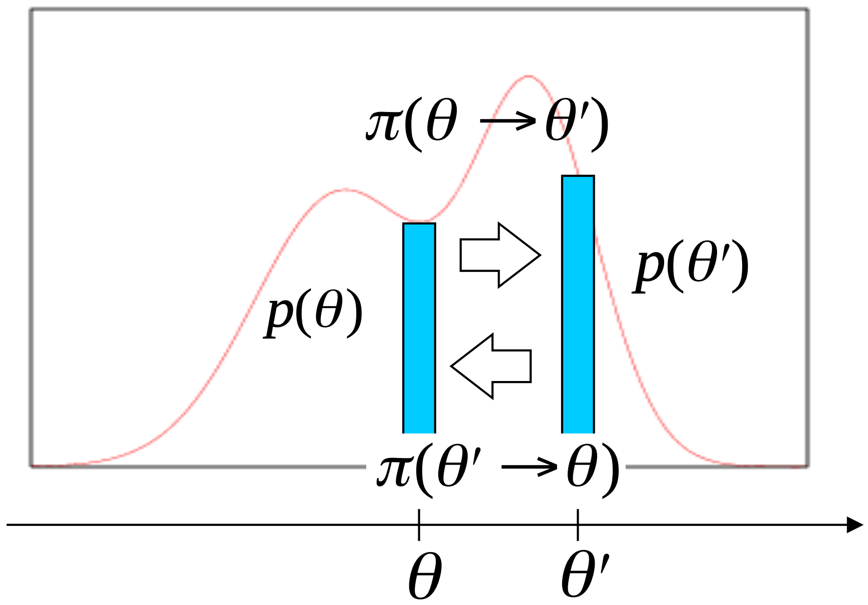
（左辺）: θ から θ' に移る個数

（右辺）: θ' から θ に移る個数

任意の2つの位置での
「流入」と「流出」がつりあっている。

「確率分布 $p(\theta)$ を不変にする」

それぞれの点を更新



モンテカルロ法の適用
マルコフ連鎖の原理

＜遷移確率 $\pi(\theta \to \theta')$ が満たすべき条件＞

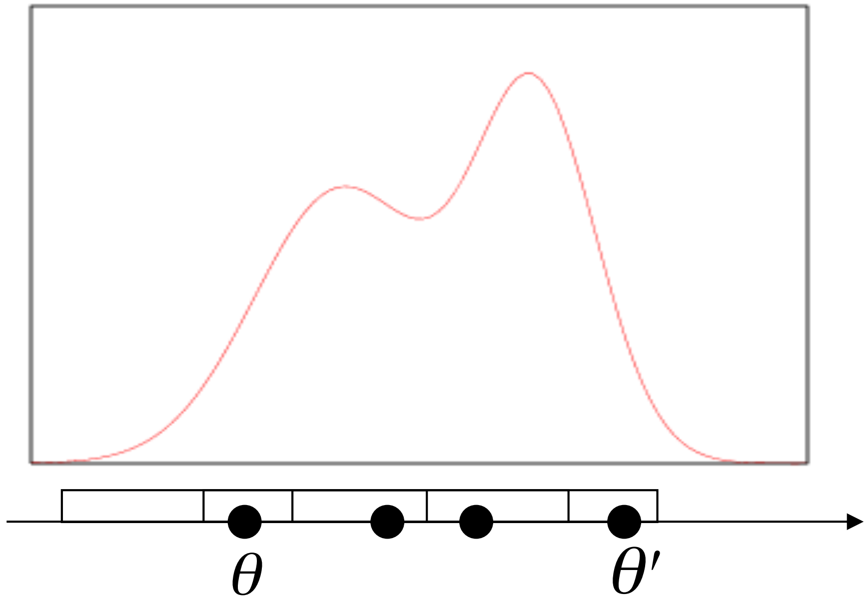
２. エルゴード性

任意の2つの点 θ と θ' の間の遷移確率がゼロでないか、
有限個のゼロでない遷移確率の積で表すことができる。

・何回かの更新で、どこへでも到達することが可能である。

⇩

・どんな初期値から始めても唯一の分布に収束する。



モンテカルロ法の適用
メトロポリス法における詳細つりあい条件

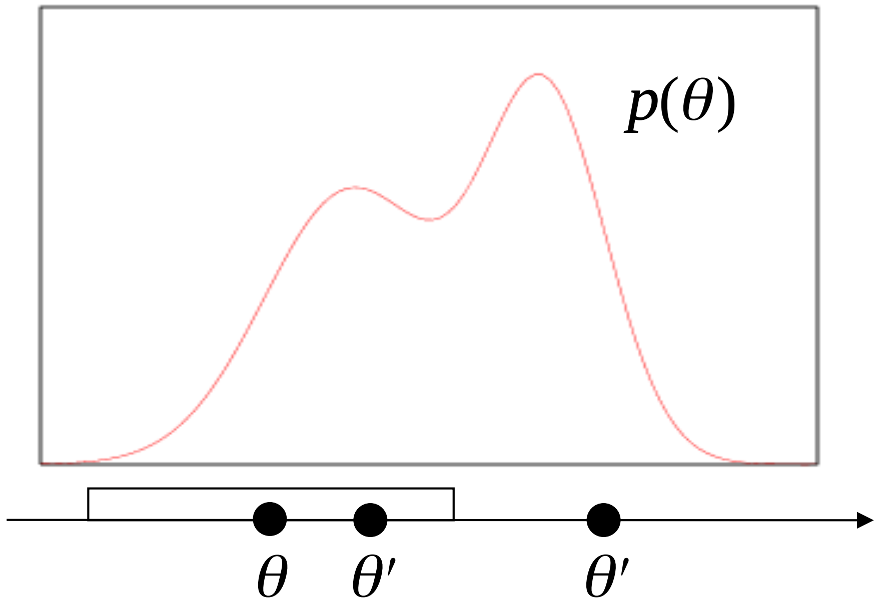
$$p(\theta)\pi(\theta \to \theta') = p(\theta')\pi(\theta' \to \theta)$$

（先のメトロポリス法の場合）

ε :[-D,D]の範囲の一様乱数

1. $|\theta' - \theta| > D$ の場合

$$\pi(\theta \to \theta') = \pi(\theta' \to \theta) = 0$$



2. $p(\theta') \geq p(\theta)$ の場合

$$\pi(\theta \to \theta') = \frac{1}{2D}$$

$$\pi(\theta' \to \theta) = \frac{1}{2D}\frac{p(\theta)}{p(\theta')}$$

$$\frac{\pi(\theta' \to \theta)}{\pi(\theta \to \theta')} = \frac{p(\theta)}{p(\theta')}$$

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  – Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

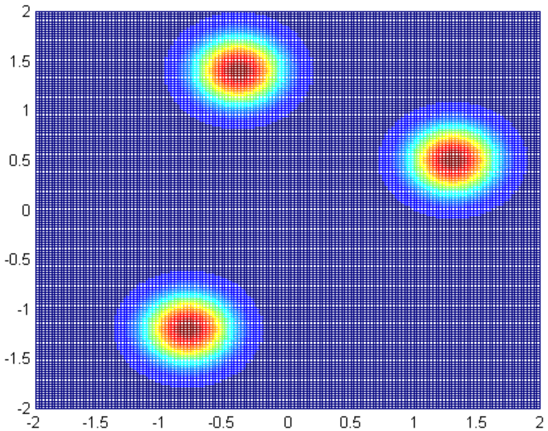
モンテカルロ法の適用
メトロポリス法の問題：遅い緩和

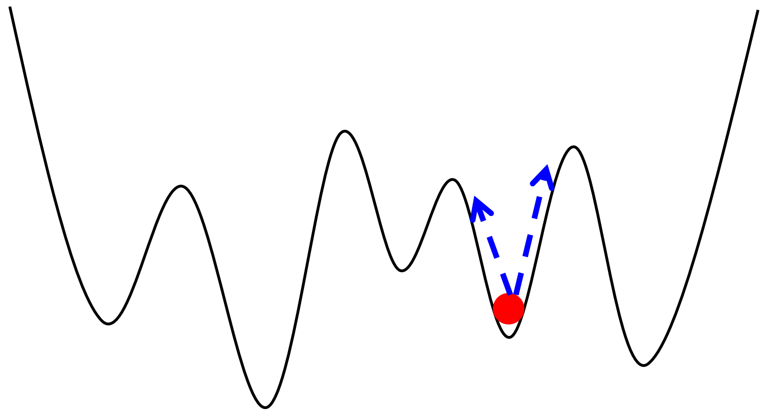
メトロポリス法の基本は、「少し変えて、選ぶかどうかを確率的に決める。」

ある確率分布に対しては、ものすごく効率が悪くなってしまう。

（例）密度の高い領域が、いくつもあり、互いに離れている場合
（多峰性のある確率分布）

$$p(\theta) \propto \exp\left(-\beta E(\theta)\right)$$



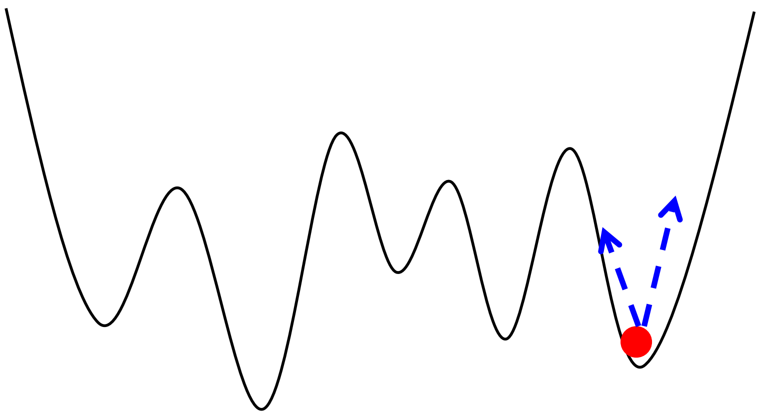


最適化における，ローカルミニマムの問題と同じである．

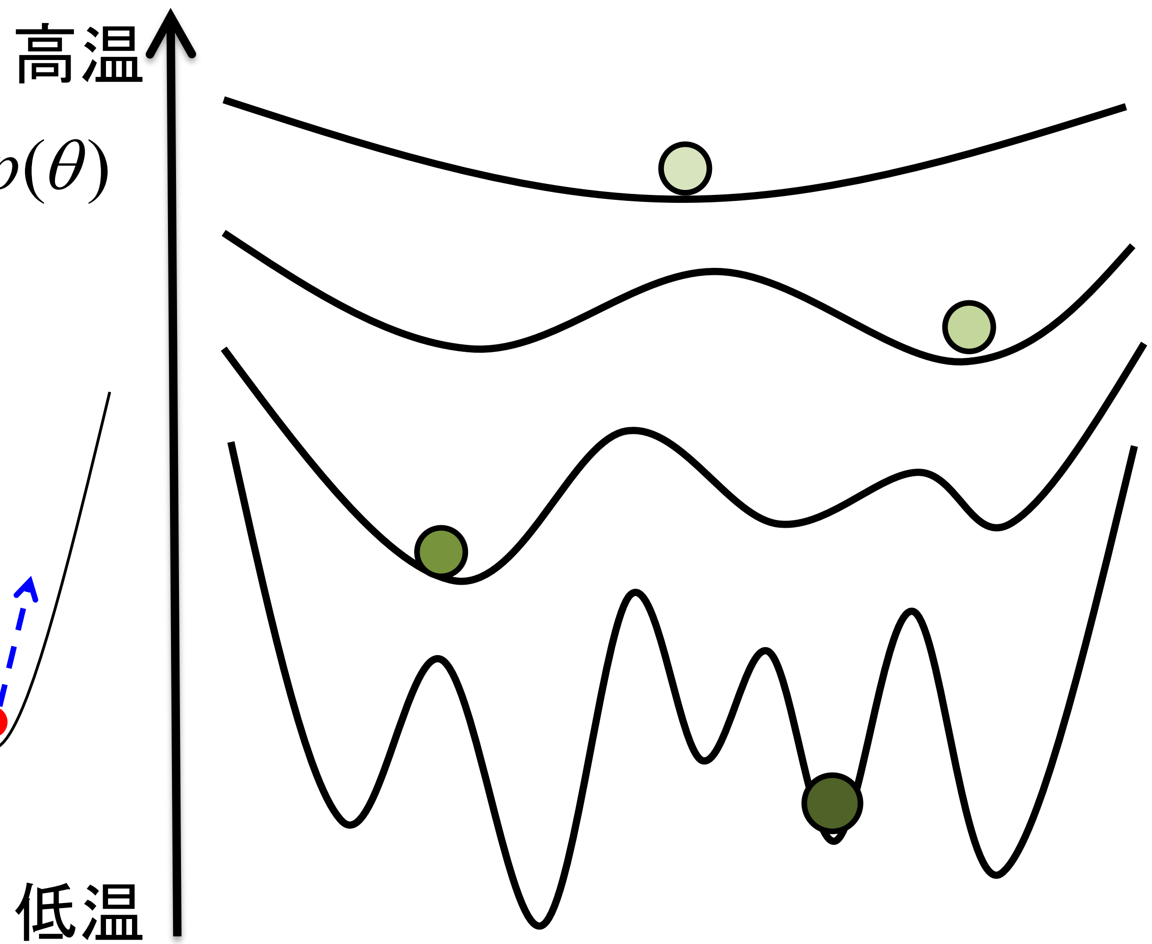
モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

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).

モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

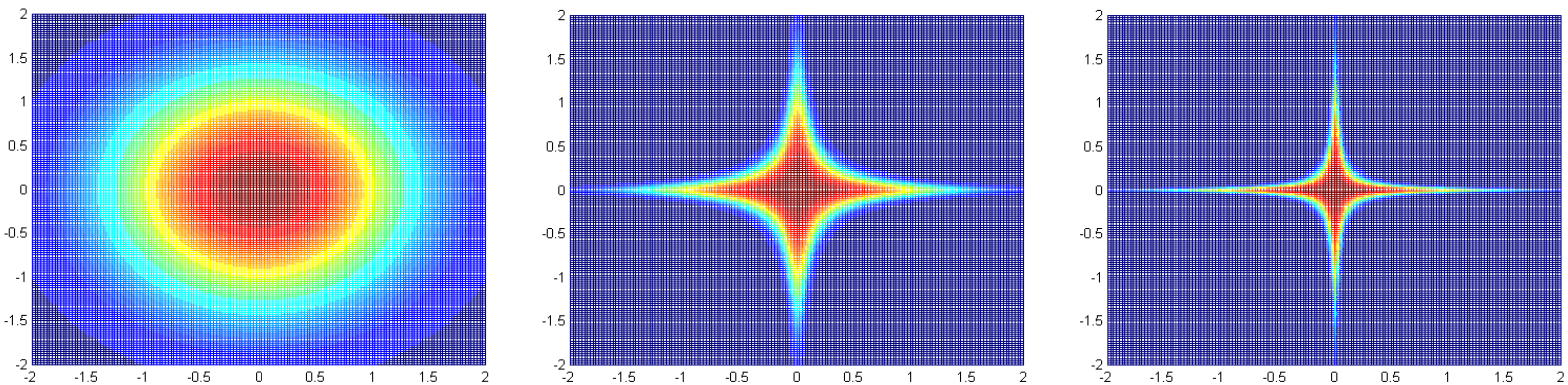
[Hukushima and Nemoto,96]

・複数の確率分布から同時にサンプリング

目標分布 : $p(\{\theta\}) = \prod_{l=1}^{L} p_{\beta_l}(\theta_l) \qquad \{\theta\} = \{\theta_1, \cdots, \theta_L\}$

$$p_\beta(\theta) \propto \exp(-\beta E(\theta))$$

$\beta = 0$ $\qquad\qquad$ $\beta = 1$



β

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

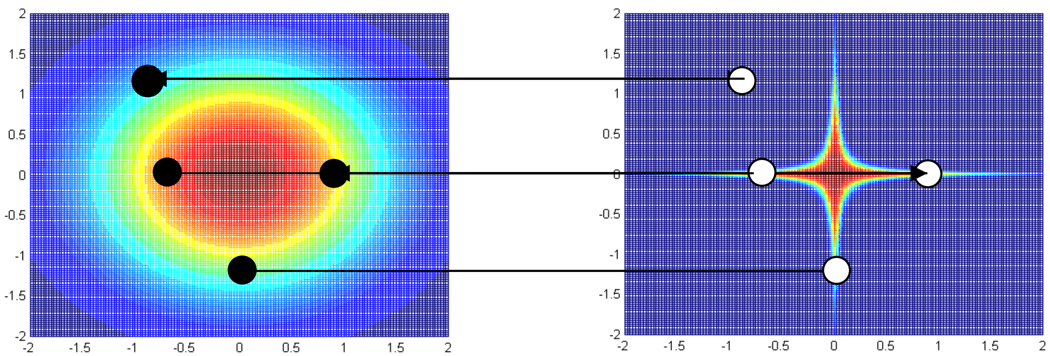
1. それぞれの確率分布について、メトロポリス法で状態の更新

$$\theta_l \Rightarrow \theta_l'$$

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

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

u: 状態の交換を行う確率



<Case1> r :小

<Case2> r :大

<Case3> $r \approx 1$

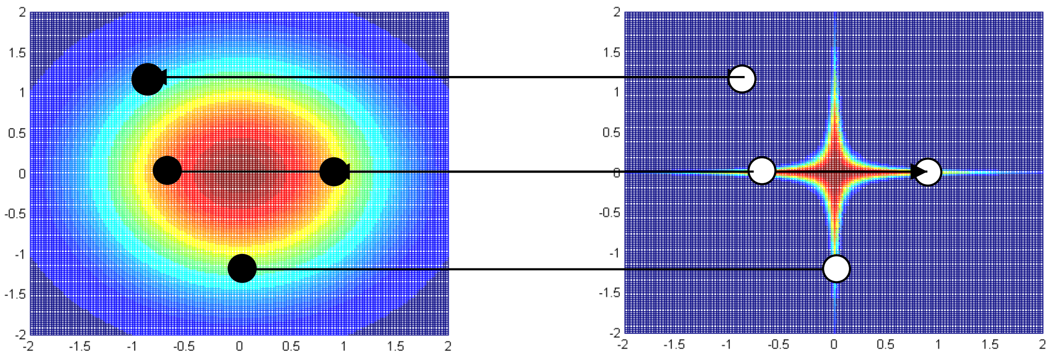
モンテカルロ法の適用

レプリカ交換モンテカルロ法の詳細つりあい条件

＜詳細つりあい条件＞

$$p(\{\cdots,\theta_l,\theta_{l+1},\cdots\})\times\pi(\{\cdots,\theta_l,\theta_{l+1},\cdots\}\rightarrow\{\cdots,\theta_{l+1},\theta_l,\cdots\})$$
$$=p(\{\cdots,\theta_{l+1},\theta_l,\cdots\})\times\pi(\{\cdots,\theta_{l+1},\theta_l,\cdots\}\rightarrow\{\cdots,\theta_l,\theta_{l+1},\cdots\})$$

$$\Rightarrow\quad \frac{\pi(\{\theta_l,\theta_{l+1}\}\rightarrow\{\theta_{l+1},\theta_l\})}{\pi(\{\theta_{l+1},\theta_l\}\rightarrow\{\theta_l,\theta_{l+1}\})}=\frac{p_{\beta_l}(\theta_{l+1})p_{\beta_{l+1}}(\theta_l)}{p_{\beta_l}(\theta_l)p_{\beta_{l+1}}(\theta_{l+1})}$$
$$=\exp(-(\beta_{l+1}-\beta_l)(E(\theta_l)-E(\theta_{l+1})))=r$$



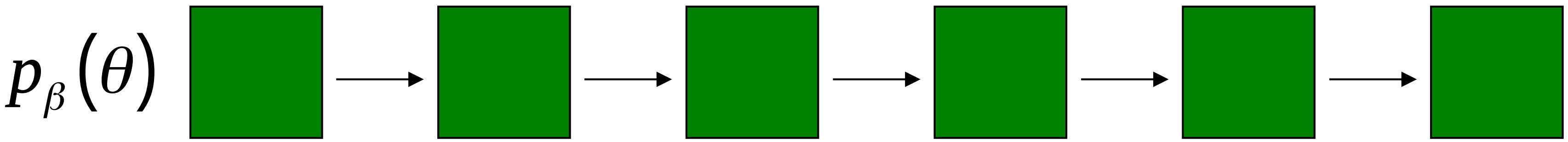
<Case1> r :小

<Case2> r :大

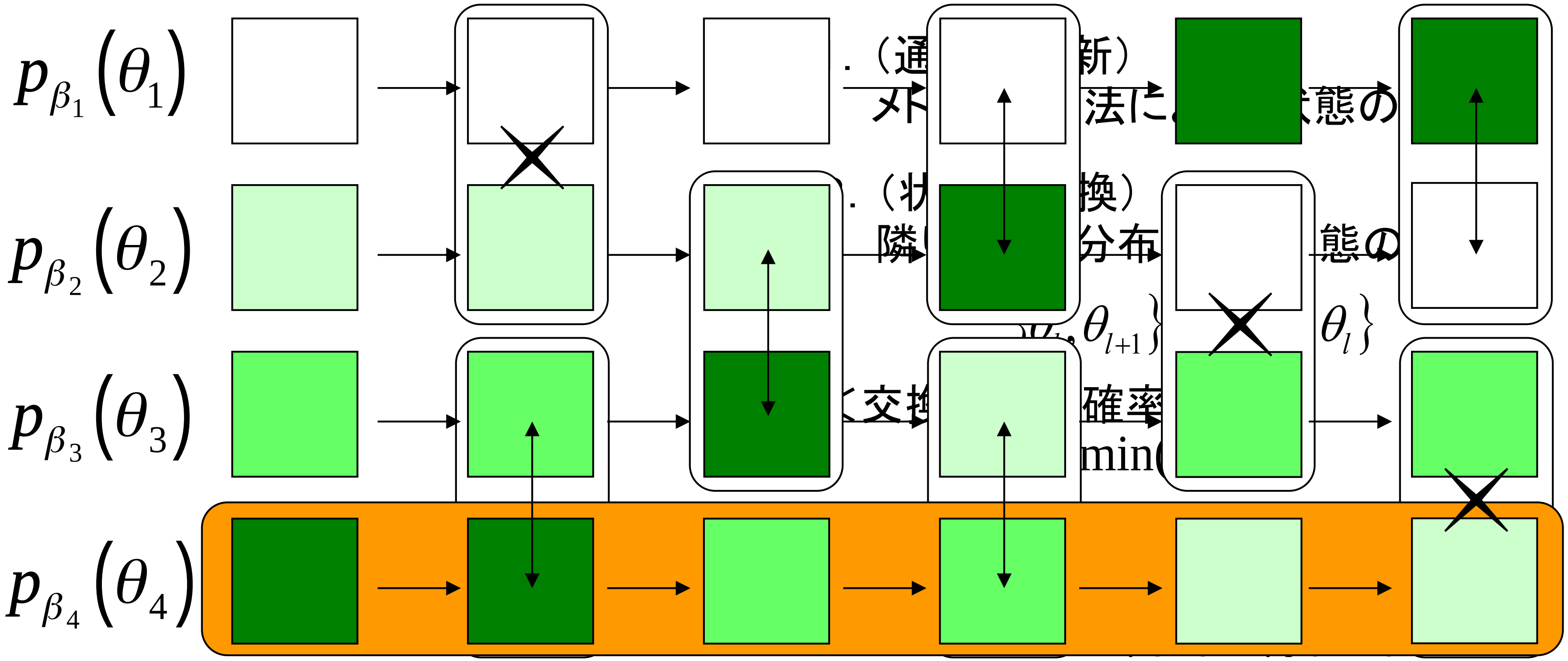
<Case3> $r\approx 1$

モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法のイメージ

<メトロポリス法>

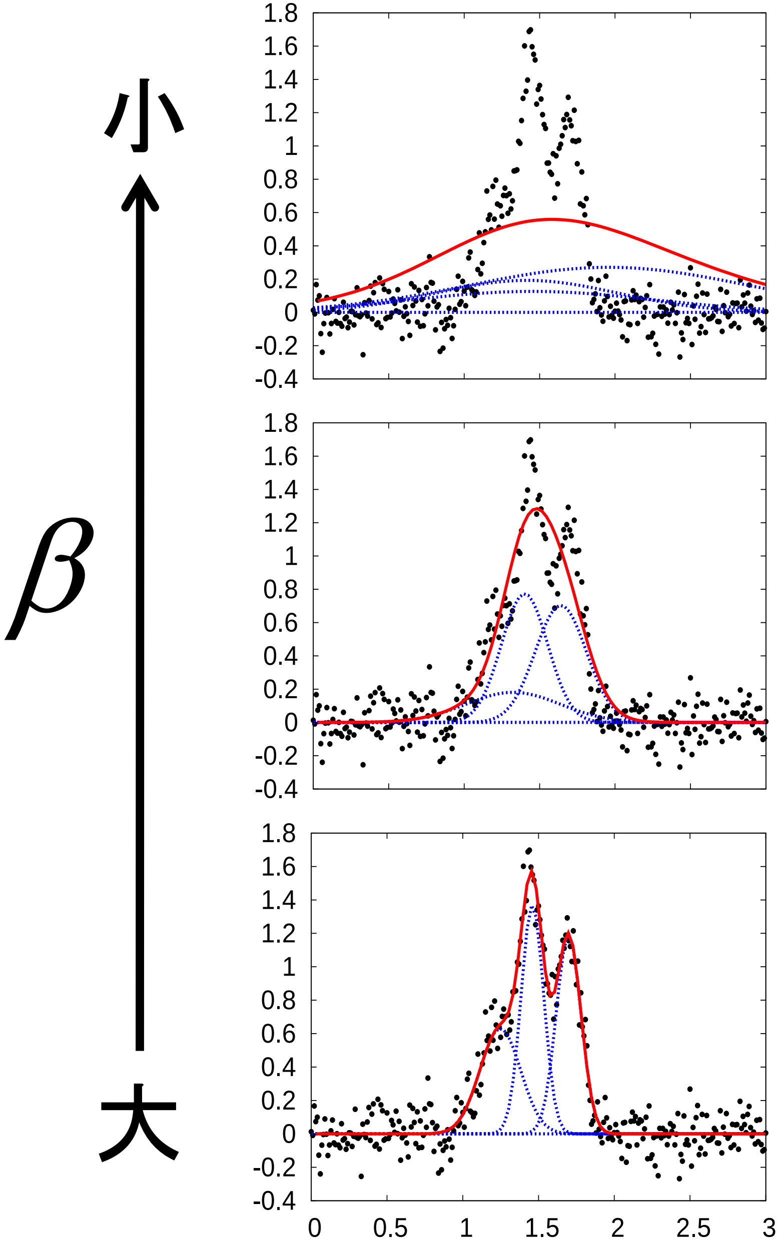


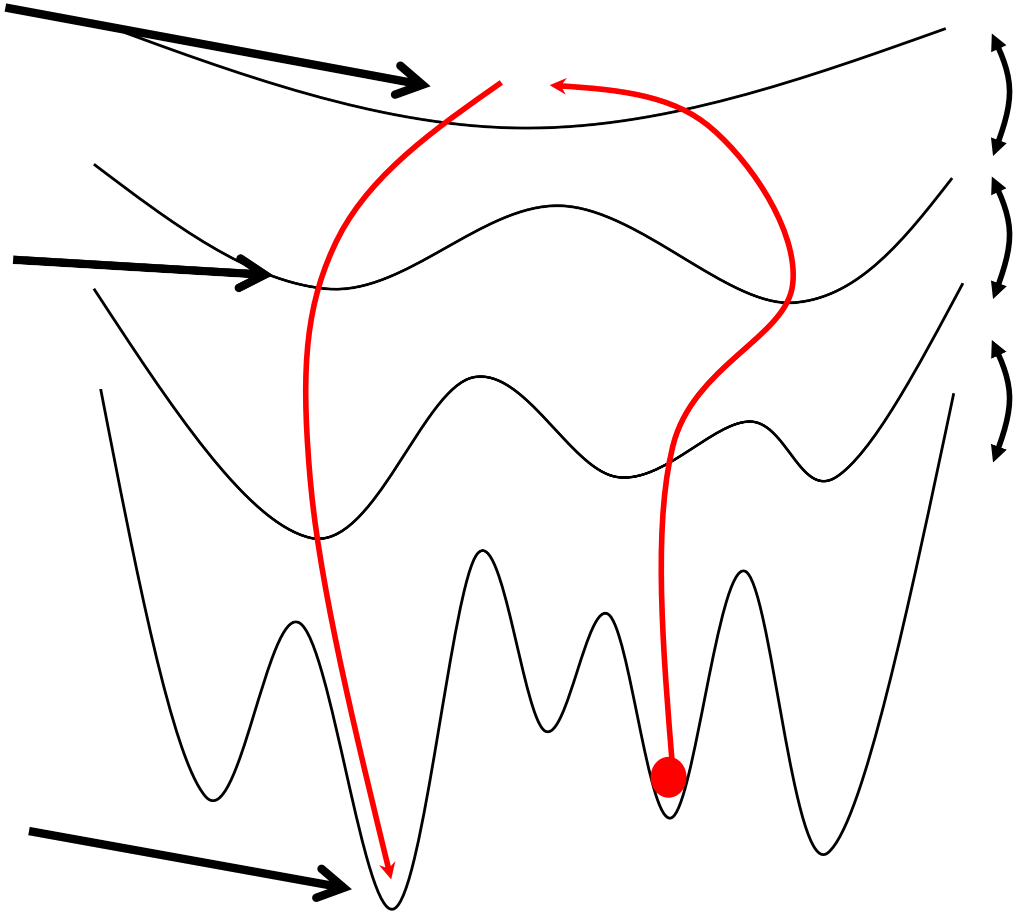
<レプリカ交換モンテカルロ法>



モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

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





[Hukushima and Nemoto, 1996]

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

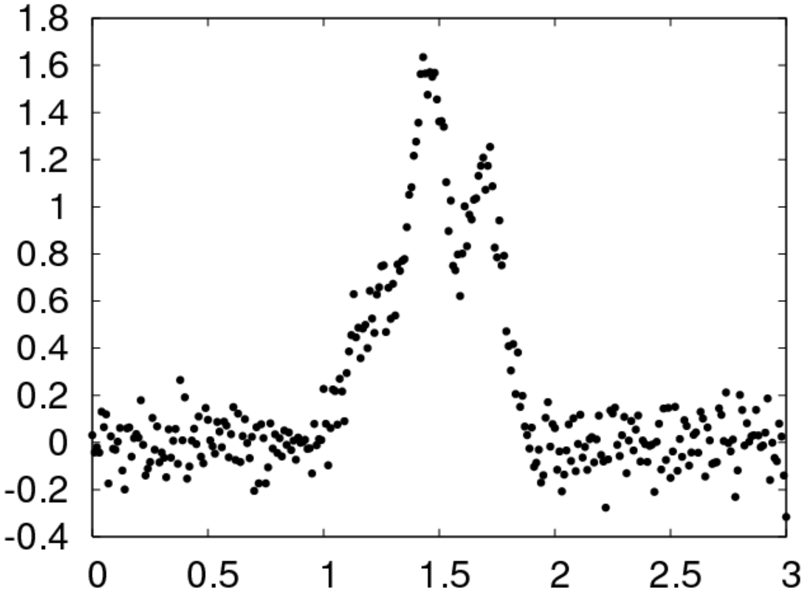
  レプリカ交換法の適用

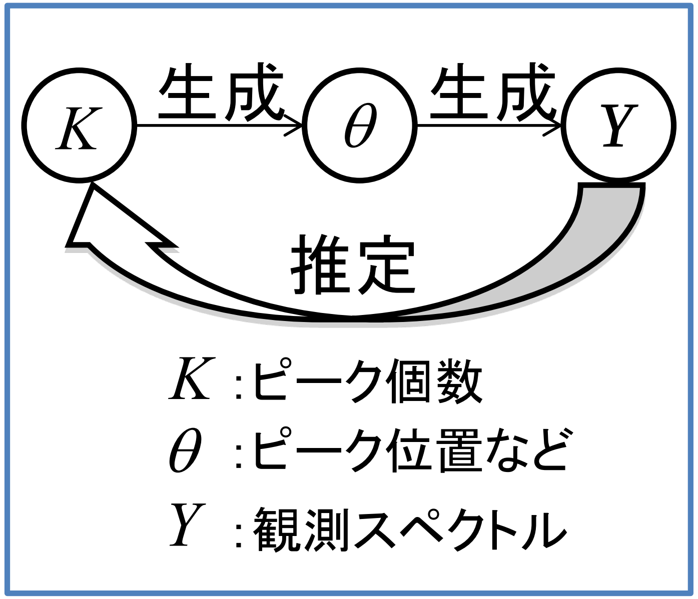
  モデル選択

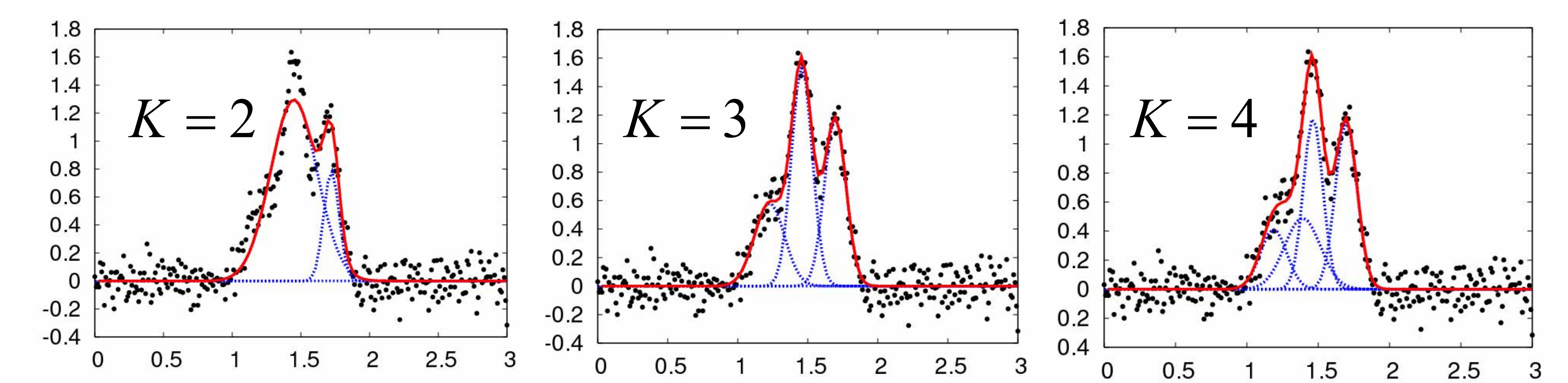
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

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

モデル選択: 自由エネルギーの導入

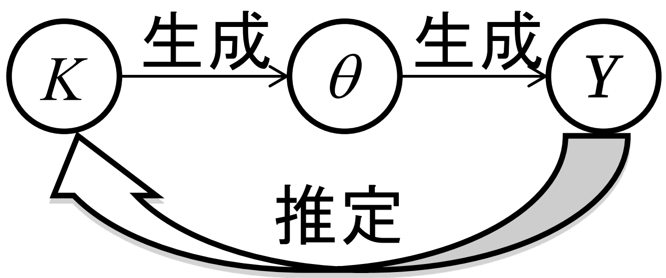
1. 欲しいのは　$p(K|Y)$

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: 自由エネルギーの数値的計算法
レプリカ交換法の性質を巧妙に使う

自由エネルギー: $F = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta) \right) p(\theta) d\theta$

以下のように、補助変数 β を導入する。　　　β : 逆温度

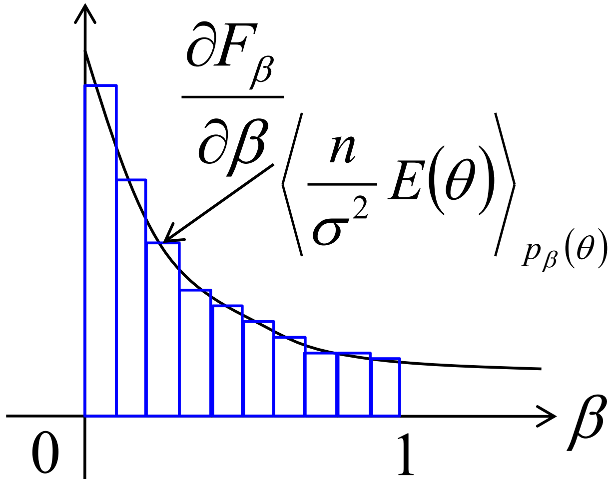
$$F_\beta = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta) \right) p(\theta) d\theta \quad \left(F_{\beta=0} = 0 \right)$$

$$F = F_{\beta=1} = \int_0^1 d\beta \frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$$

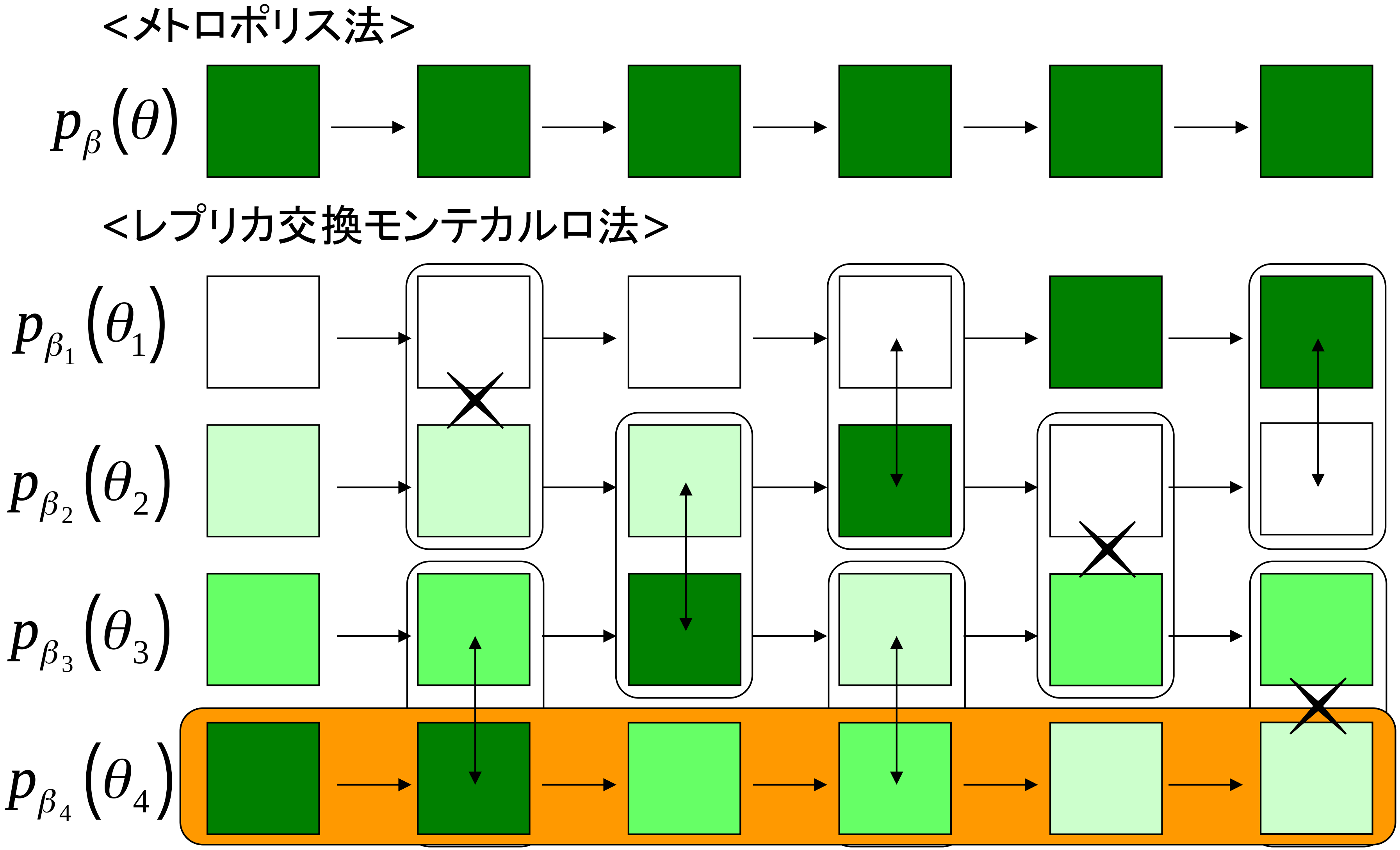
たくさんの温度でのシミュレーションが必要
→ 各温度でのエネルギー平均(すでにやってる)

$\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$ … 確率分布 $p(\theta;\beta)$ に従う二乗誤差 $\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)$ の期待値

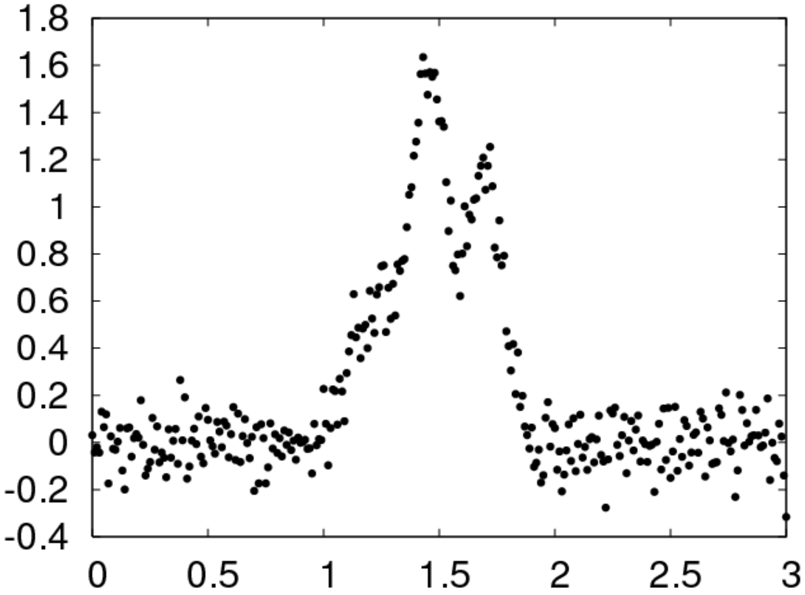
$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta) \right) p(\theta)$$

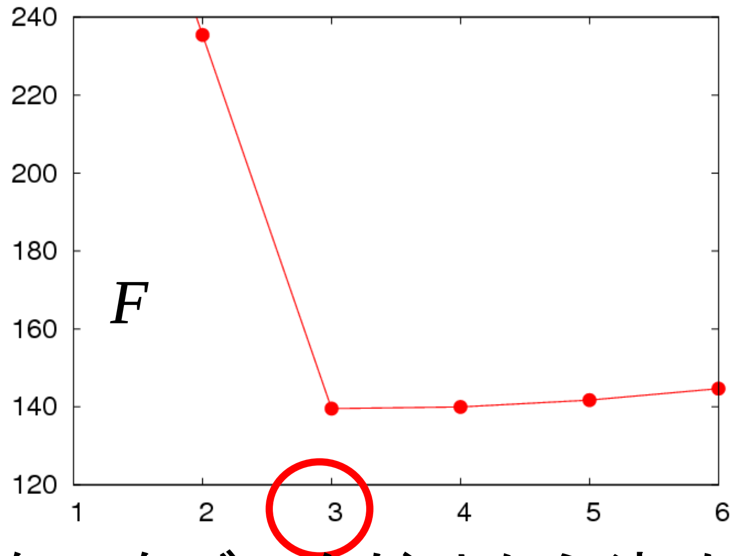


モデル選択: 自由エネルギーの数値的計算法
レプリカ交換モンテカルロ法のイメージ



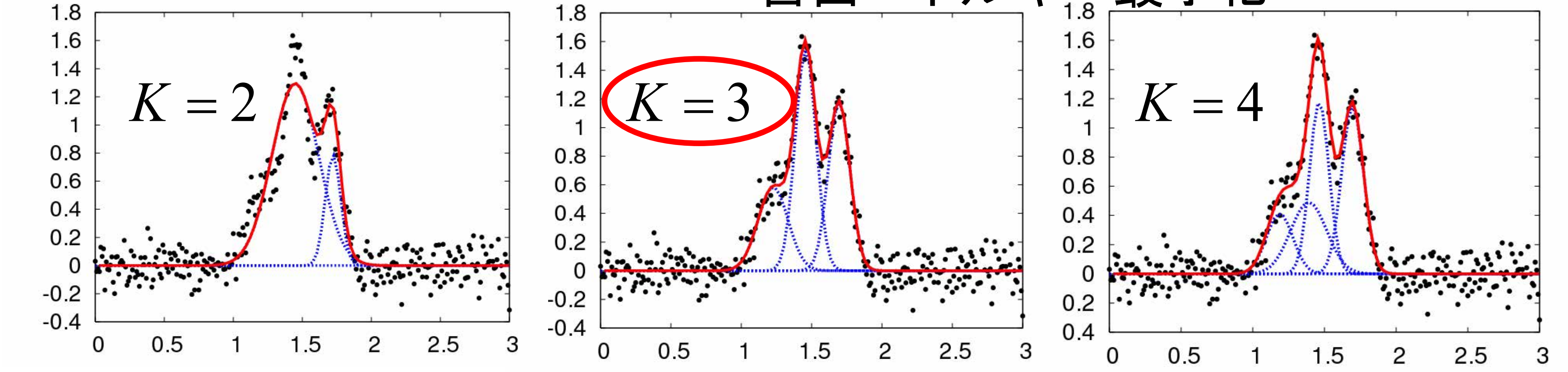
モデル選択: スペクトル分解





最適なKをデータだけから決める

自由エネルギー最小化



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

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

  レプリカ交換法の適用

  モデル選択

  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

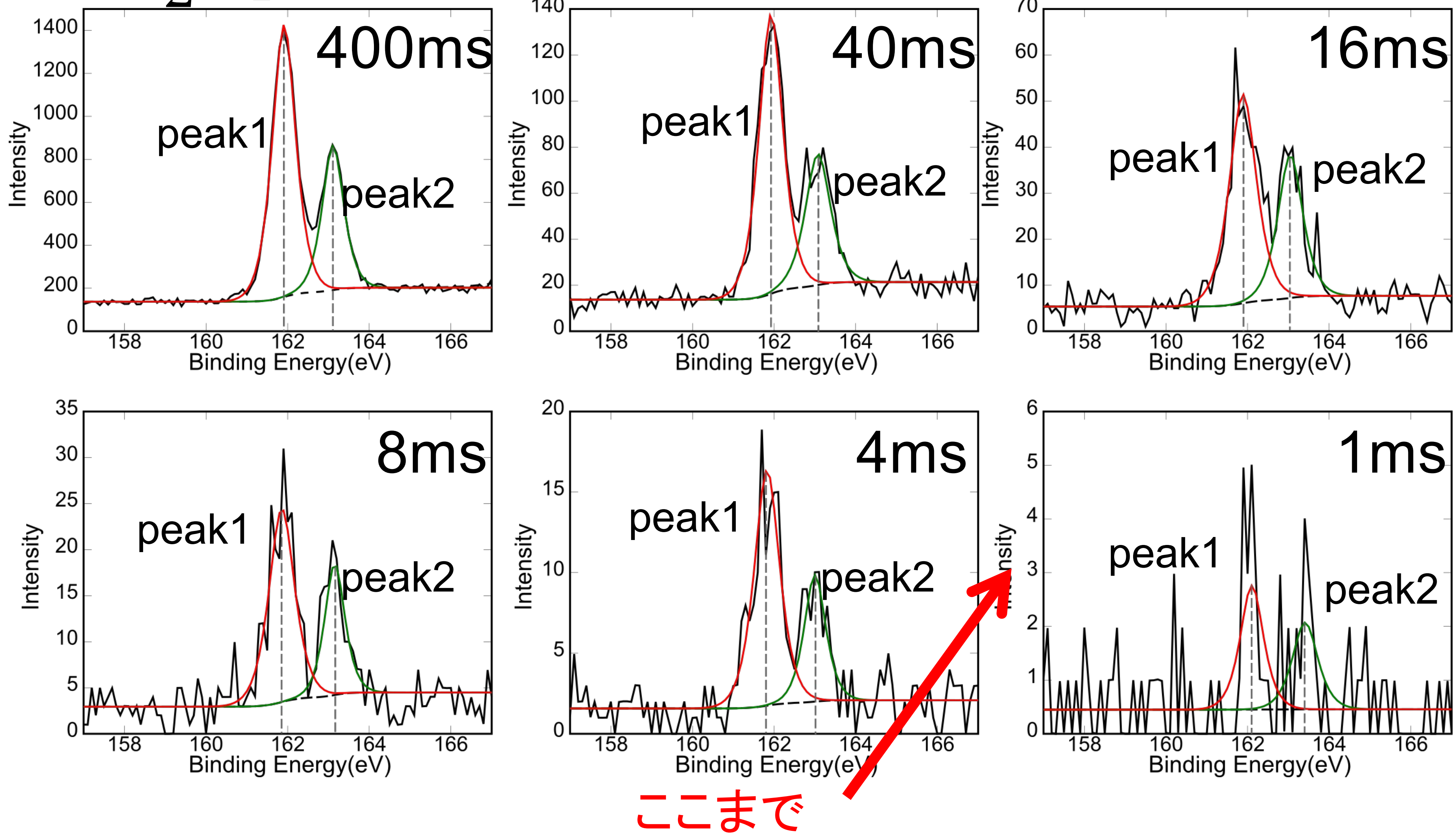
ベイズ計測による計測限界の理論

永田賢二[A], 村岡怜[B], 本武陽一[B], 佐々木武彦[B], 岡田真人[B]
A NIMS, B 東大新領域

Nagata, Muraoka, Mototake, Sasaki, and Okada
"Bayesian Spectral Deconvolution Based on Poisson Distribution: Bayesian Measurement and Virtual Measurement Analytics (VMA)"
Journal of the Physical Society of Japan. 88(4) 044003 - 044003 (2019)

計測限界の理論的取り扱い (1/9)
どこまで時間窓を小さくできるか

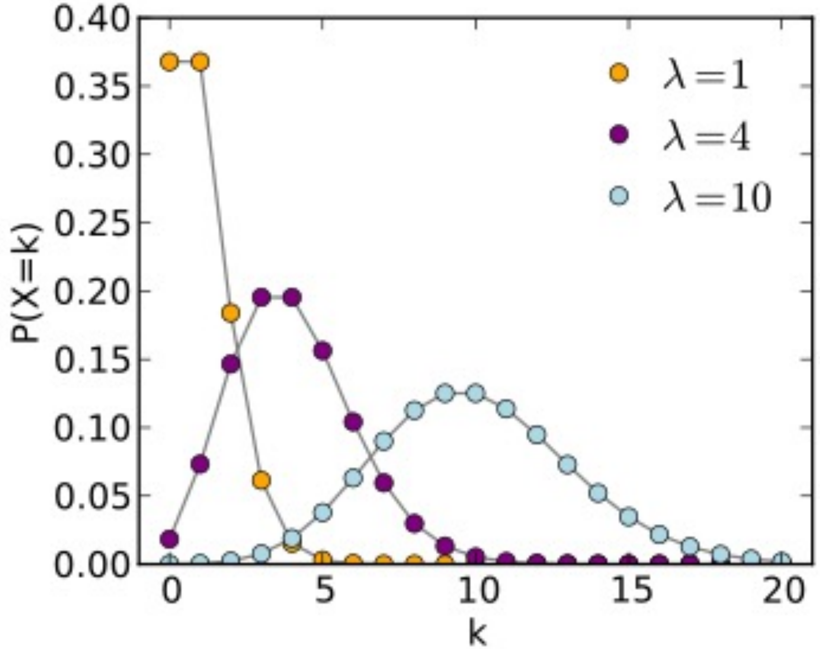
MoS_2 2p



計測限界の理論的取り扱い (2/9) XPS測定におけるノイズ

XPS測定で，データに乗るノイズはポアソン分布に従う

$$P(I=k)=\frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$$



ポアソン分布では，平均＝分散＝λ

$$\Rightarrow \frac{\text{信号強度}}{\text{ノイズ}}=\frac{\mathrm{I(E)}}{\sqrt{\mathrm{I(E)}}}$$

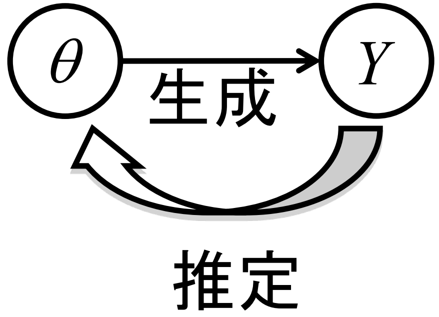
となるので，信号強度が小さくなるほどノイズの大きさが相対的に大きくなる

では，どこまで信号強度が下がっても，真のピークを推定できるのかということが，今回明らかにしたい点である

計測限界の理論的取り扱い (3/9)
ベイズ推論の拡張性

光電子の量子性を考慮する(ポアソン分布)

■ 事後確率: $p(\theta \mid Y) = \dfrac{p(Y \mid \theta)\, p(\theta)}{p(Y)} \quad Y = \{y_i\}_{i=1}^{n}$



$$p(\theta \mid Y) = \frac{1}{p(Y)} \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta) \right) p(\theta)$$

θ : ピーク位置など

Y : 観測スペクトル

これまでの

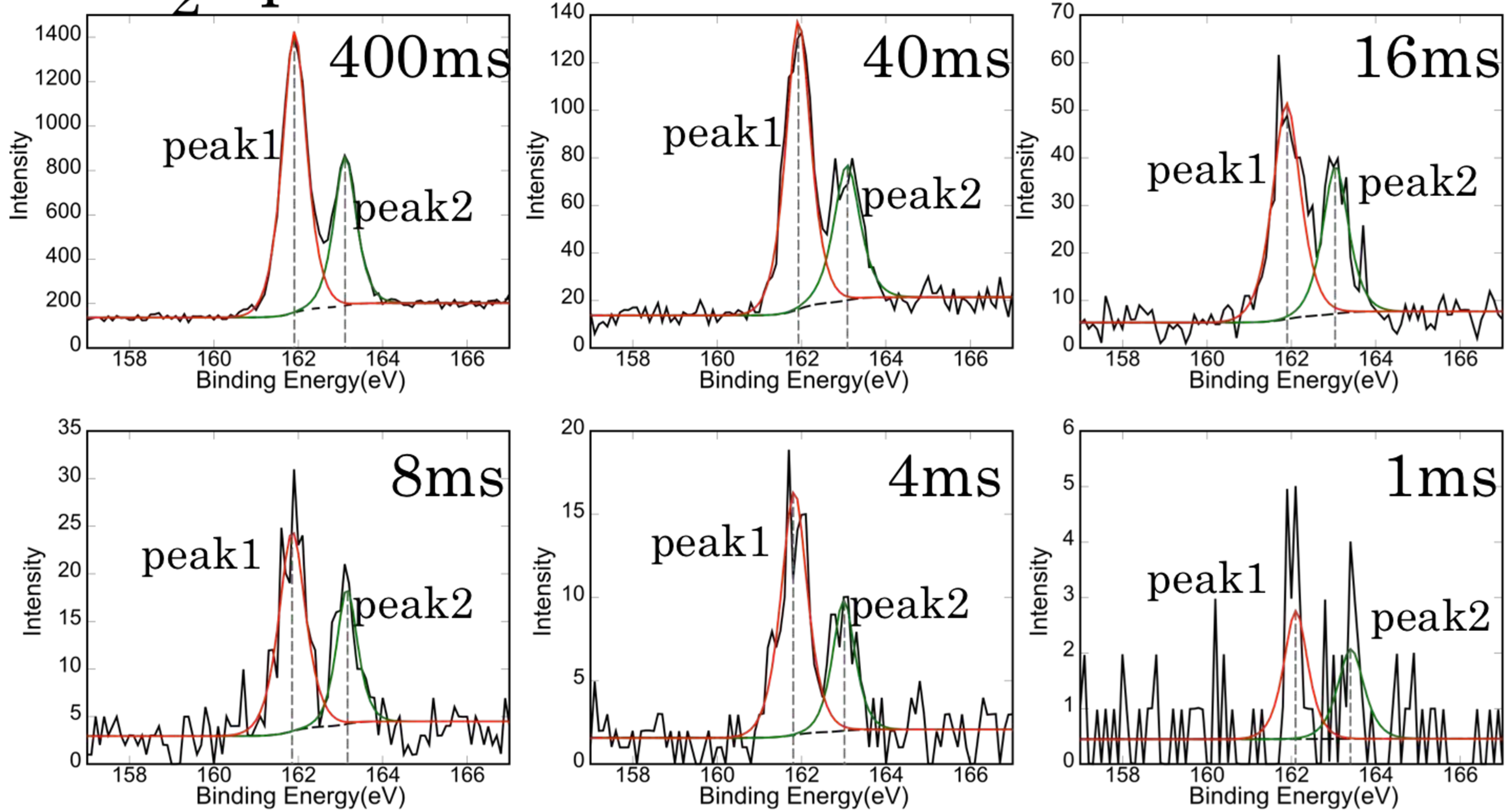
$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f(x_i;\theta) \right)^2$$

$$\boxed{E(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i \log f(x_i;\theta) + f(x_i;\theta) + \sum_{j=1}^{y_i} \log(j) \right)}$$

に変更するだけ

計測限界の理論的取り扱い (4/9)
(Nagata *et al.* 2019)

MoS_2 2p（時間幅依存性）

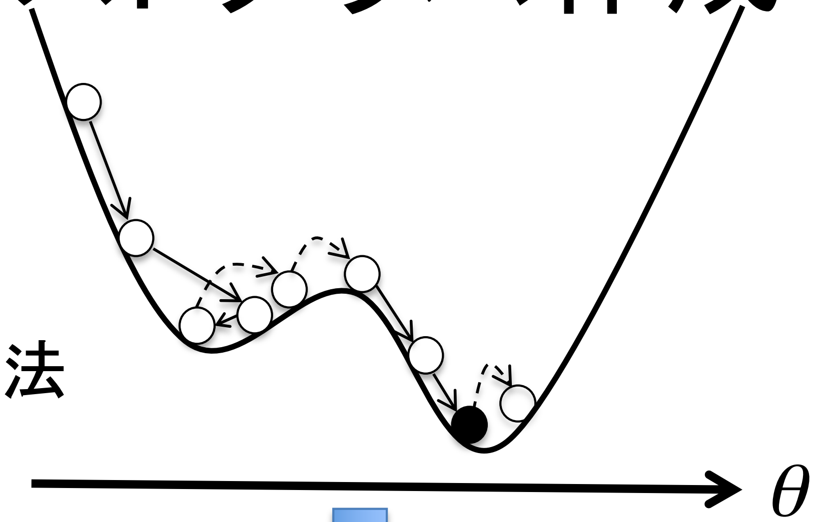


計測限界の理論的取り扱い (5/9)
MCMC法によるヒストグラム作成

誤差関数

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

MCMC法

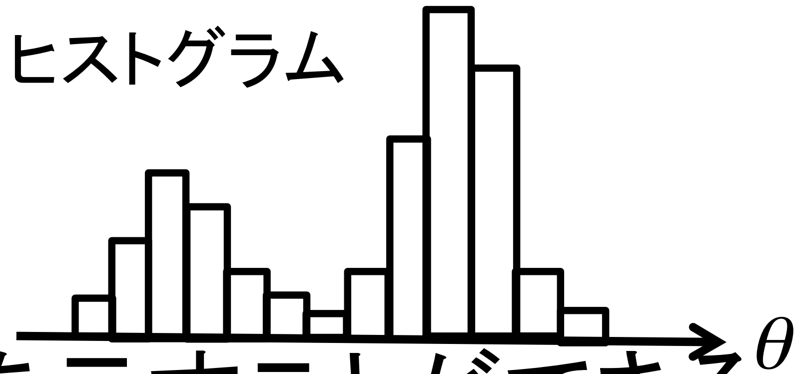


サンプルを保持

事後分布からのサンプリング

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

ヒストグラム

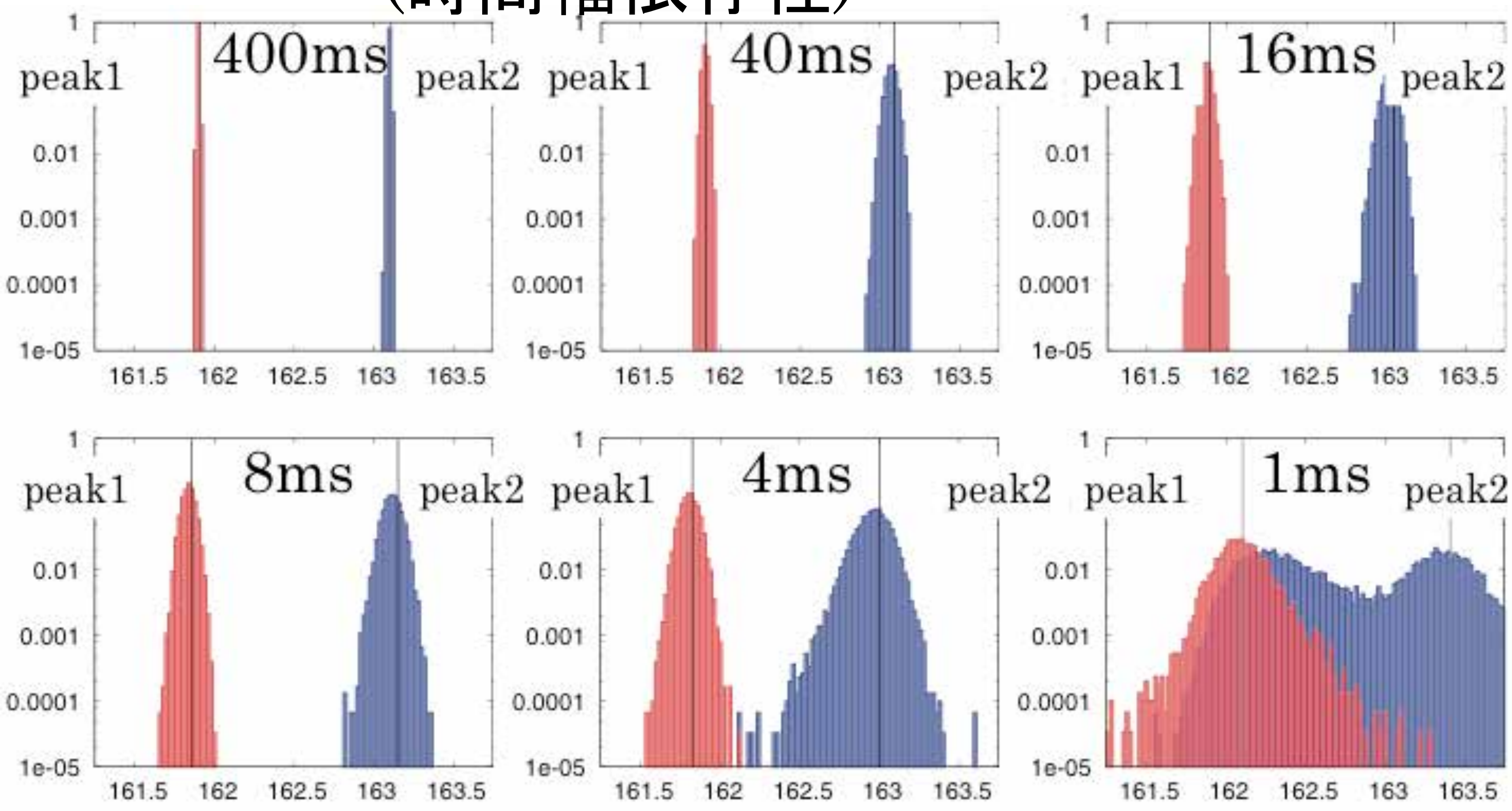


パラメータの推定精度を示すことができる

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

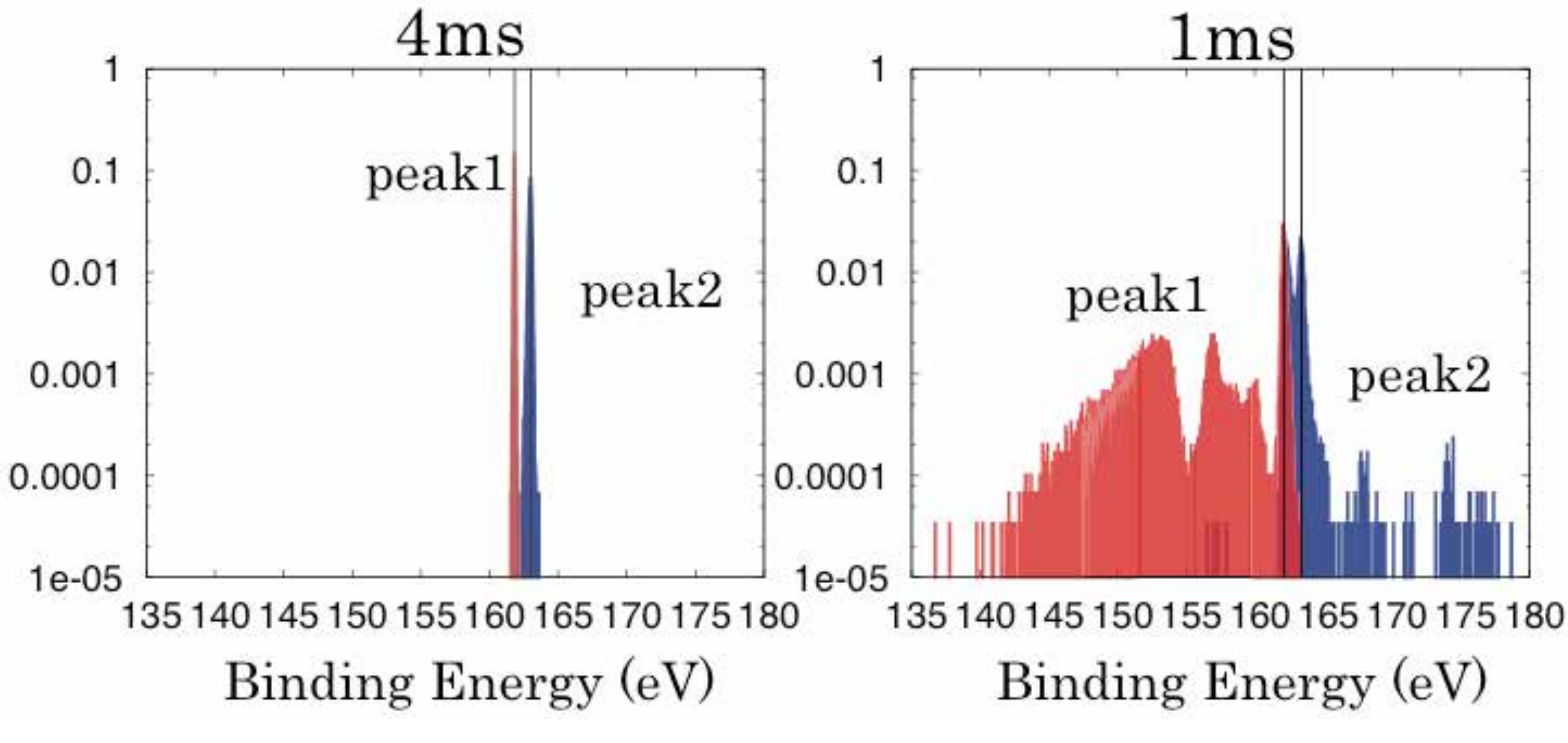
(時間幅依存性)



計測限界の理論的取り扱い (7/9)
(Nagata *et al.* 2019)

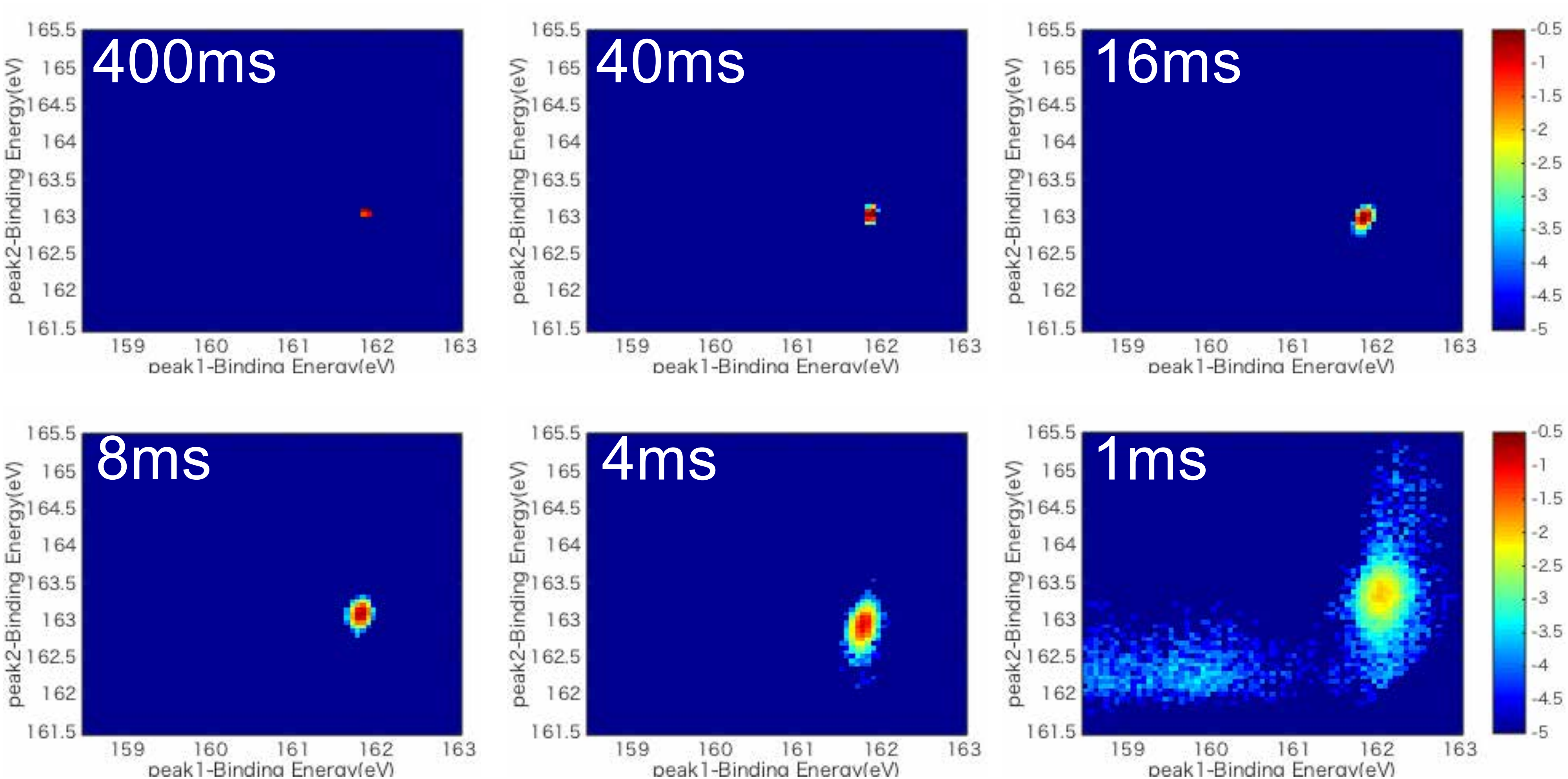
ベイズ計測: ベイズ推論によって,
ピーク位置のベイズ事後確率を計算

(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_2 2p



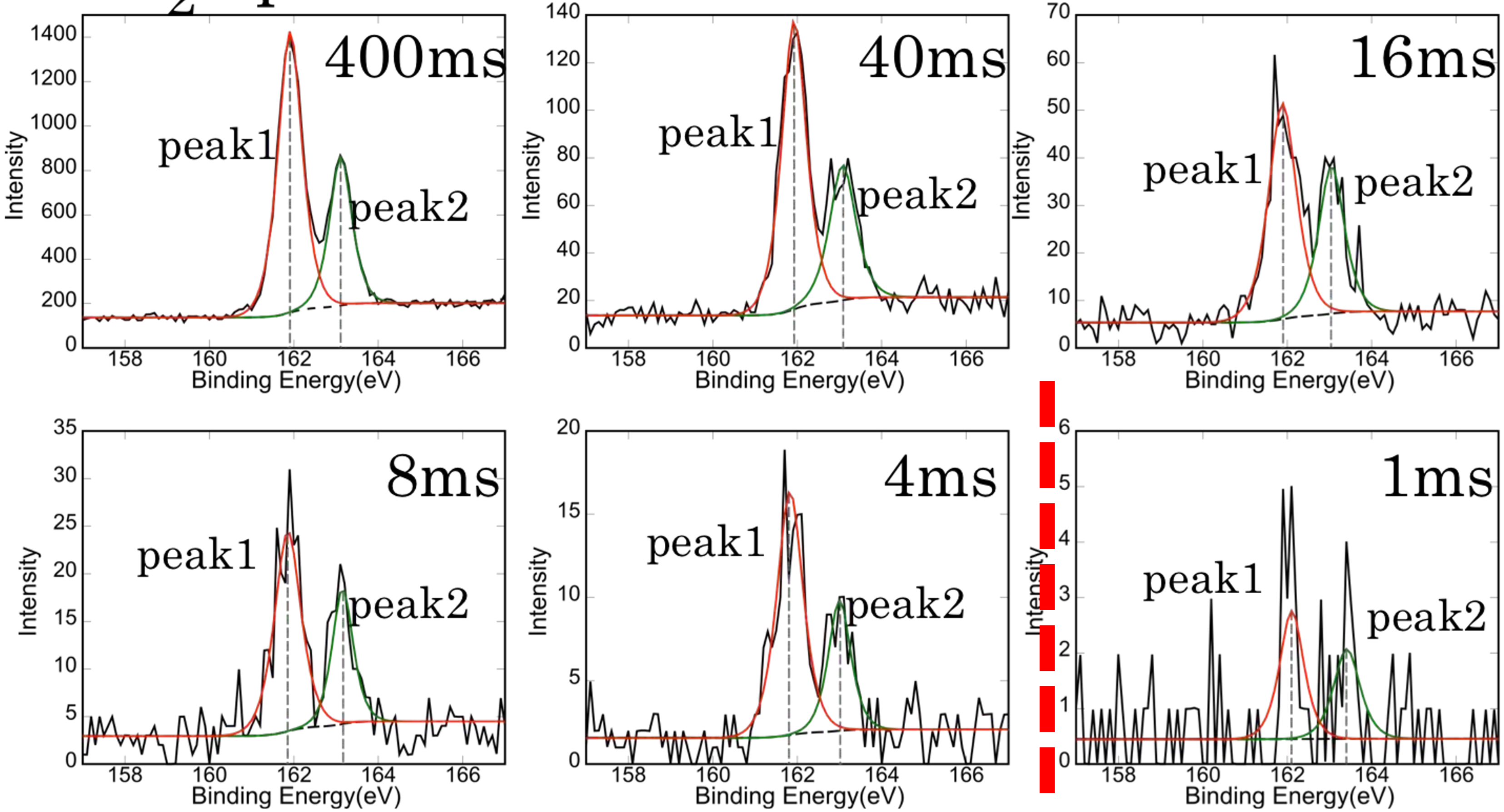
ここまで

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

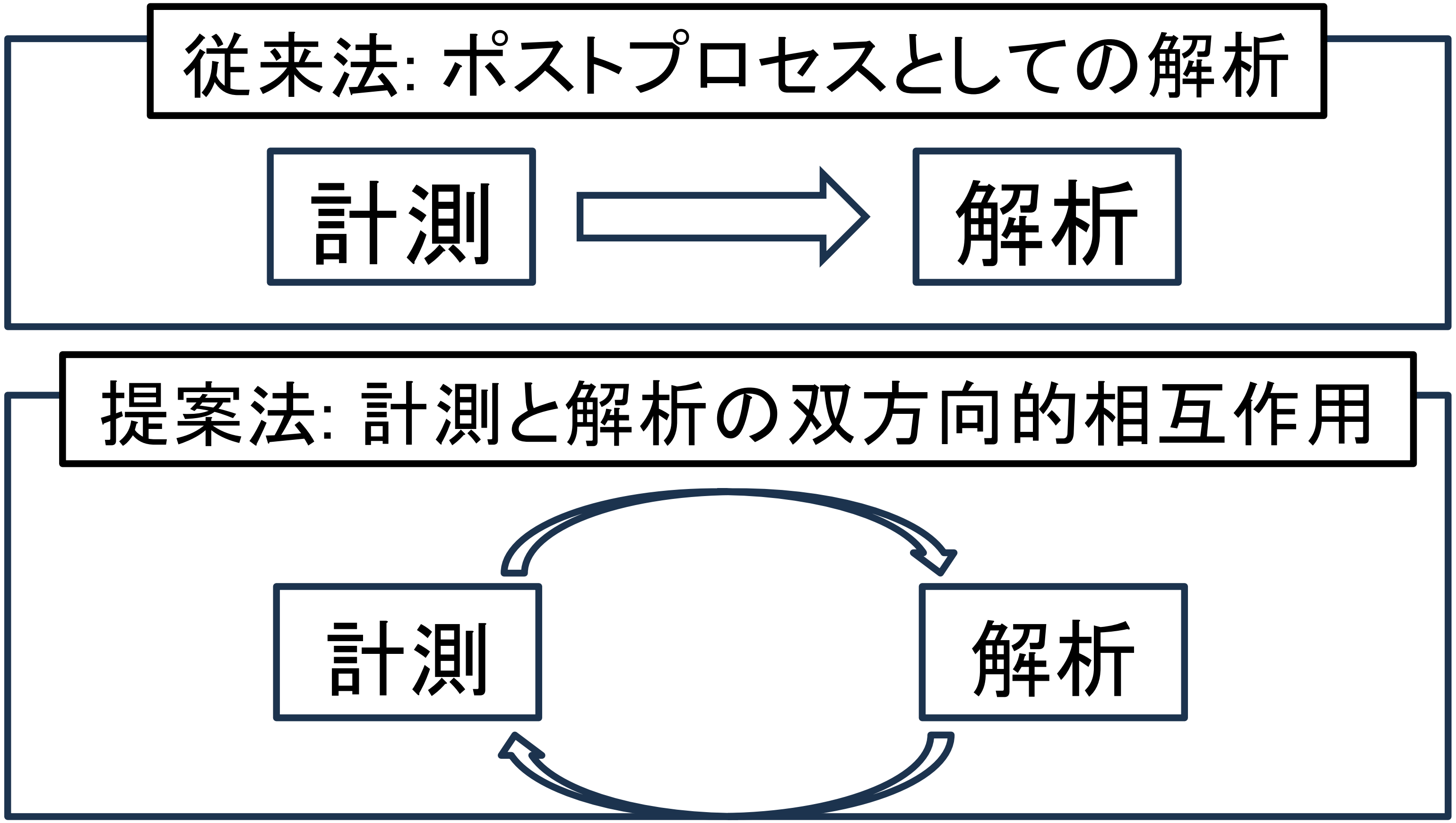
戦略目標: 計測限界を定量的に評価できる枠組みの提案

MoS_2 2p（時間幅依存性）



ベイズ計測による
計測と解析の双方向相互作用

計測限界の理論的推測による，実験計画へのフィードバック



内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解

  従来手法の破綻

  ベイズ計測の導入

  レプリカ交換法の適用

  モデル選択

  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

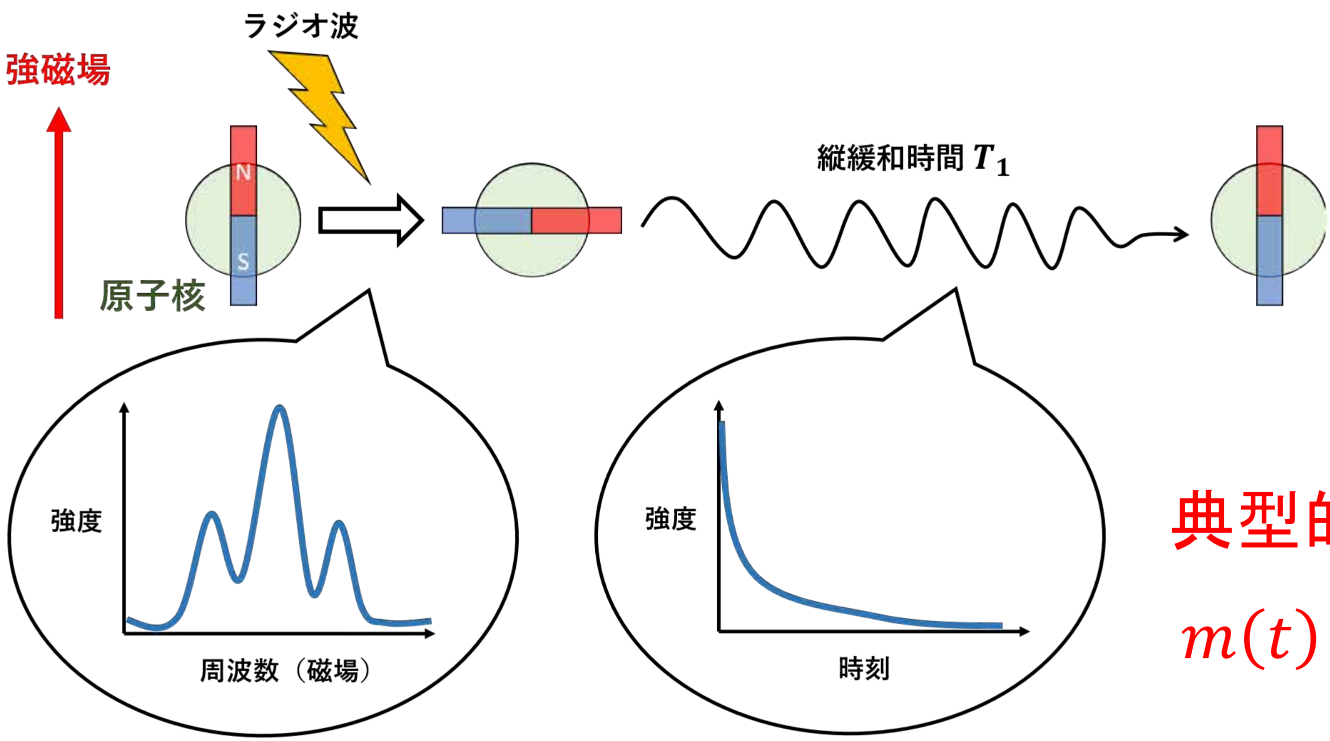
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

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



典型的には

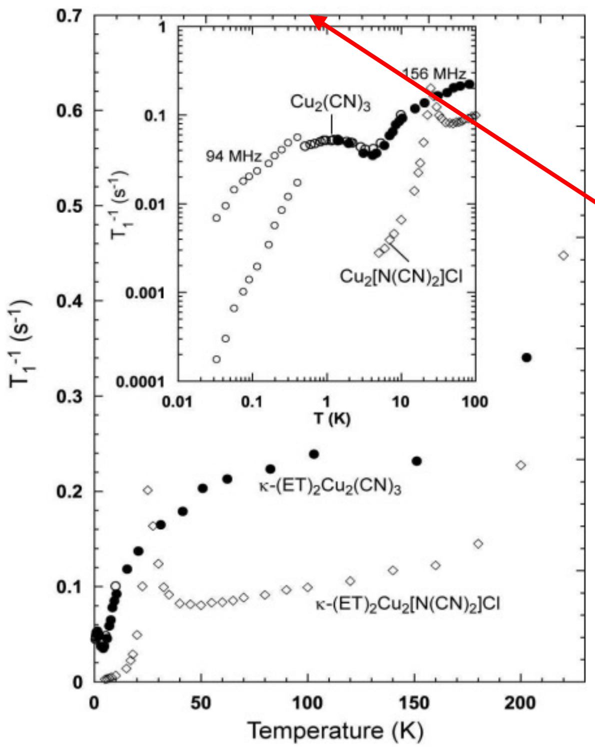
$$m(t) \propto \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)$$

NMRスペクトル

核スピン格子緩和曲線

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。



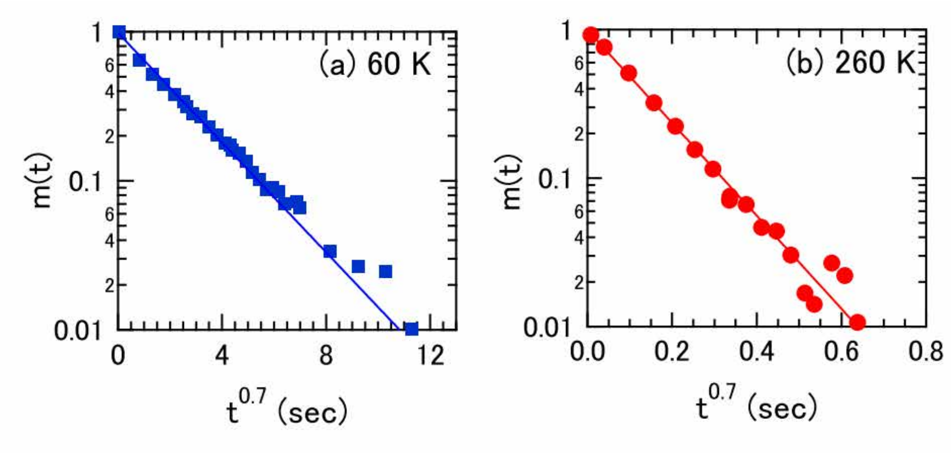
有機モット絶縁体スピン液体を報告したY. Shmizu et al. では，試料が2相に分かれていると解釈している。

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。

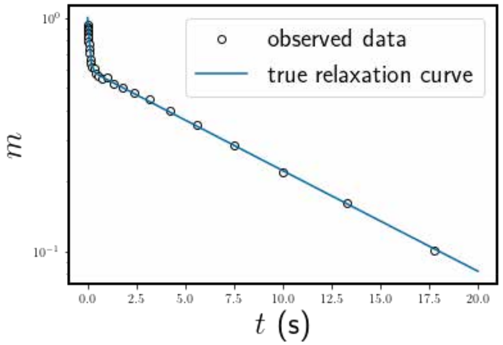
$$m(t) = \sum_{k=1}^{K} A_k \ \exp\left(-(W_k t)^{\beta_k} \right) + \mathrm{C} + \epsilon$$

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

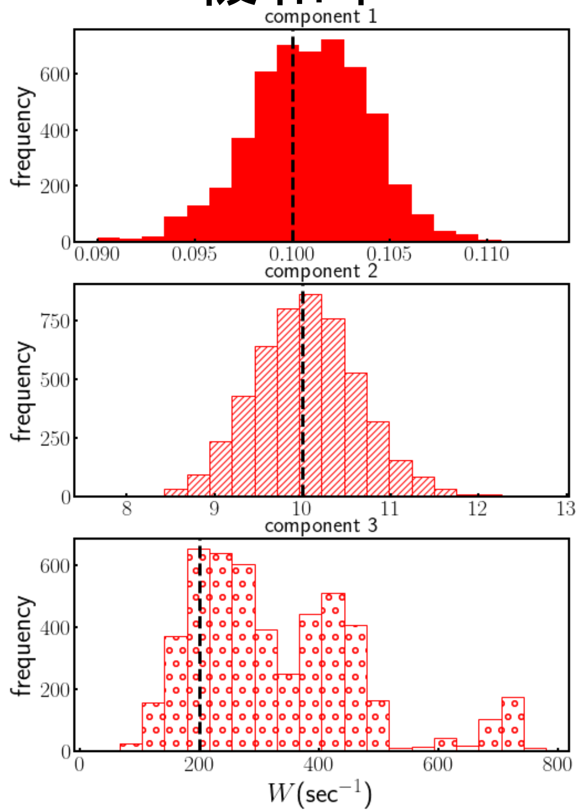
モデル数 K の事前分布は一様とする．観測データ $\mathcal{D} = \{(t_i, m_i)\}_{i=1,2,\dots,N}$ が与えられたとき，事後確率 $p(K \mid \mathcal{D})$ が最大となるモデル数を選択する。

数値実験（多成分: $K = 3$）

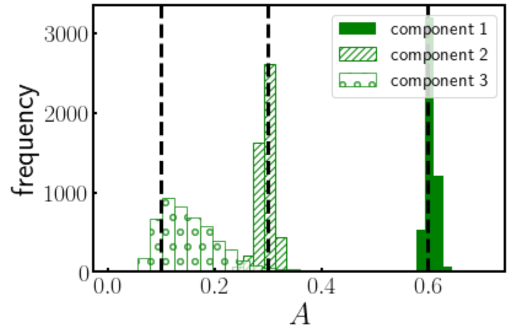
生成データ



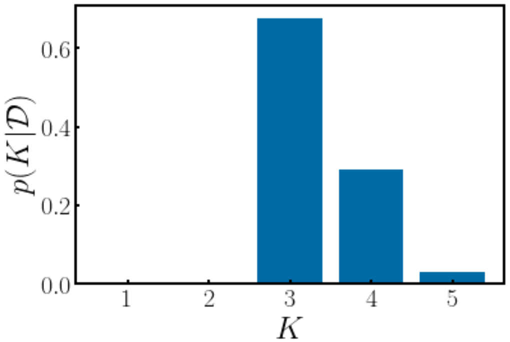
緩和率



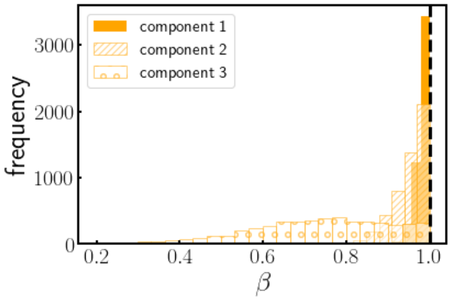
緩和振幅



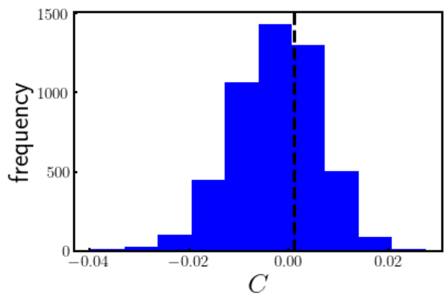
モデル選択



Stretching指数

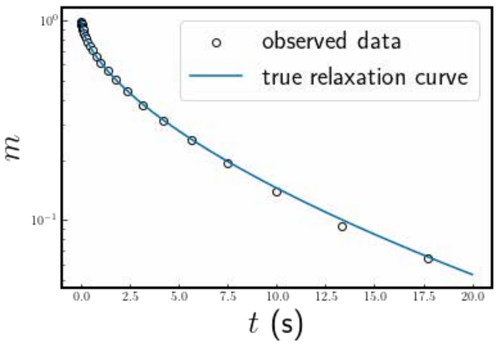


オフセット

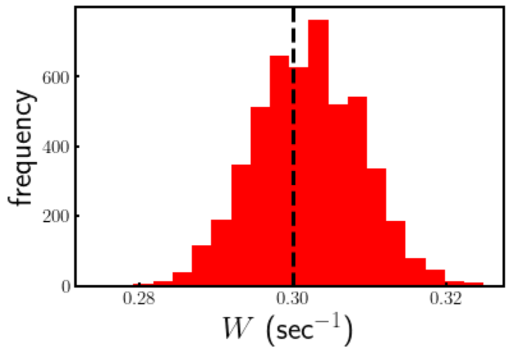


数値実験（単一のstretching exponential）

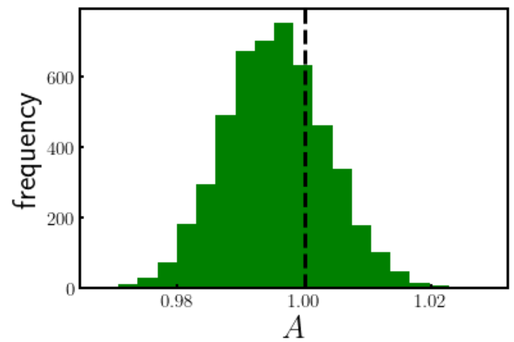
生成データ



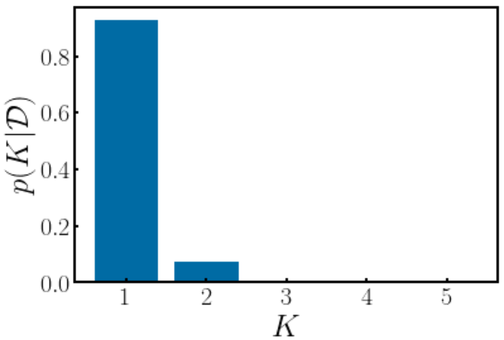
緩和率



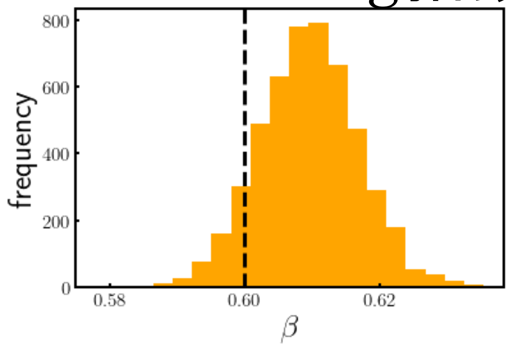
緩和振幅



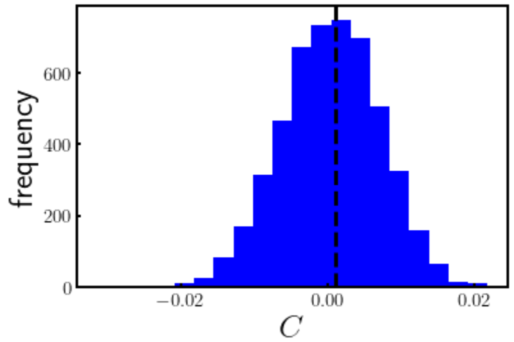
モデル選択



Stretching指数

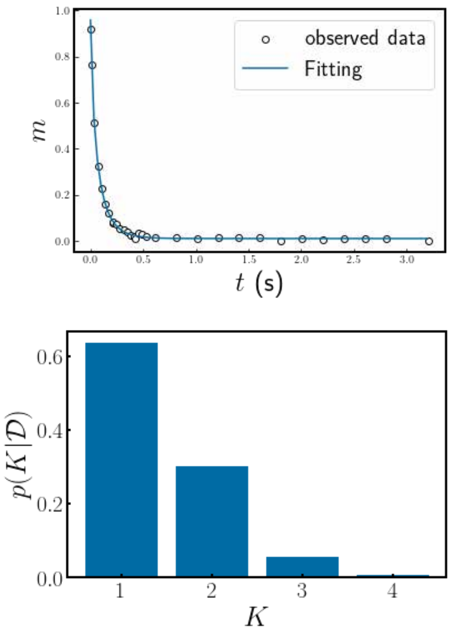


オフセット

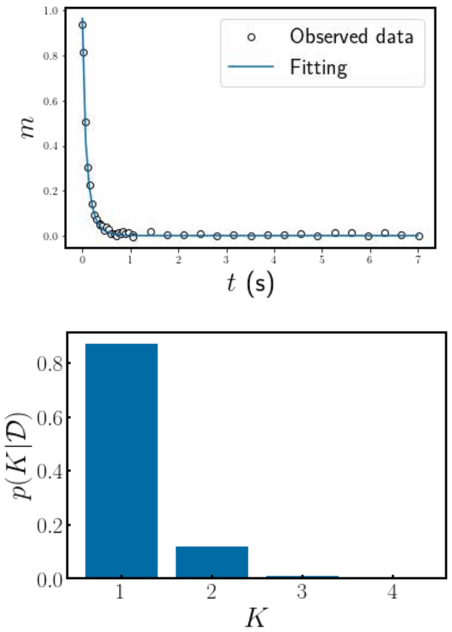


SmS の実験データ（常圧）

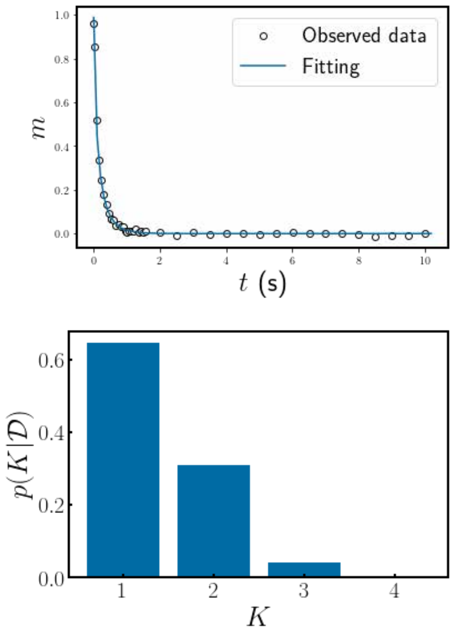
260 K



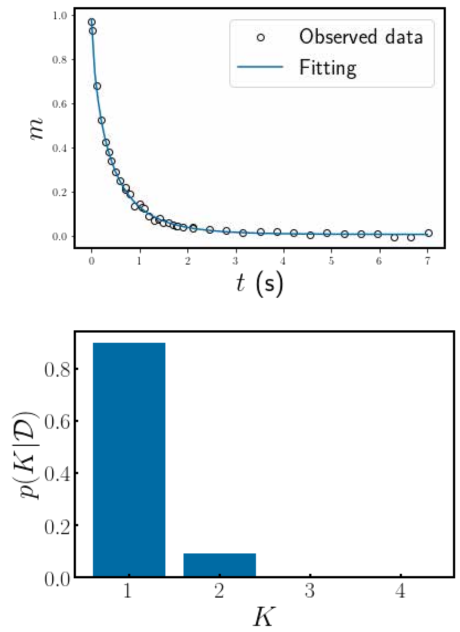
200 K



140 K

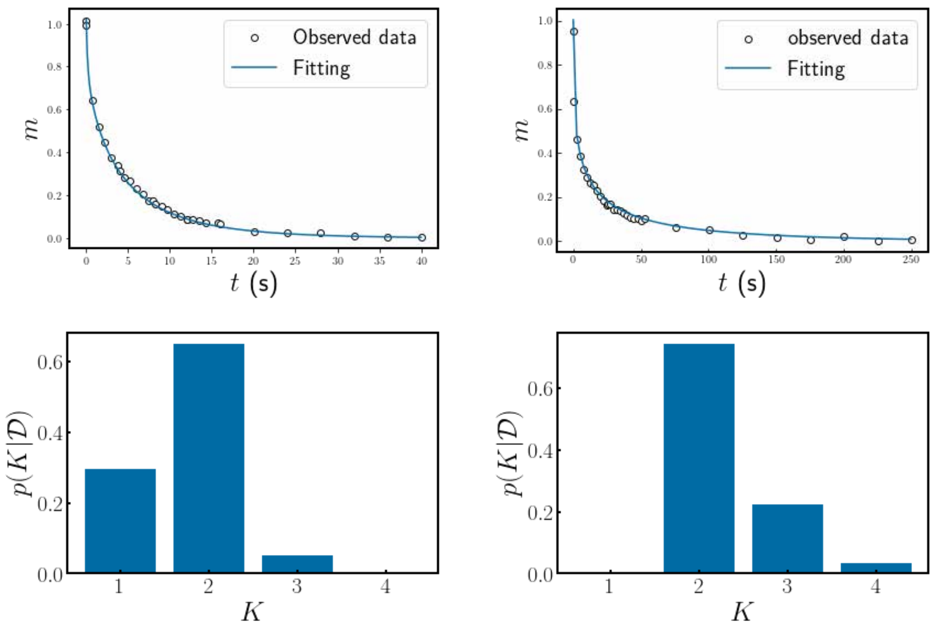


100 K



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）

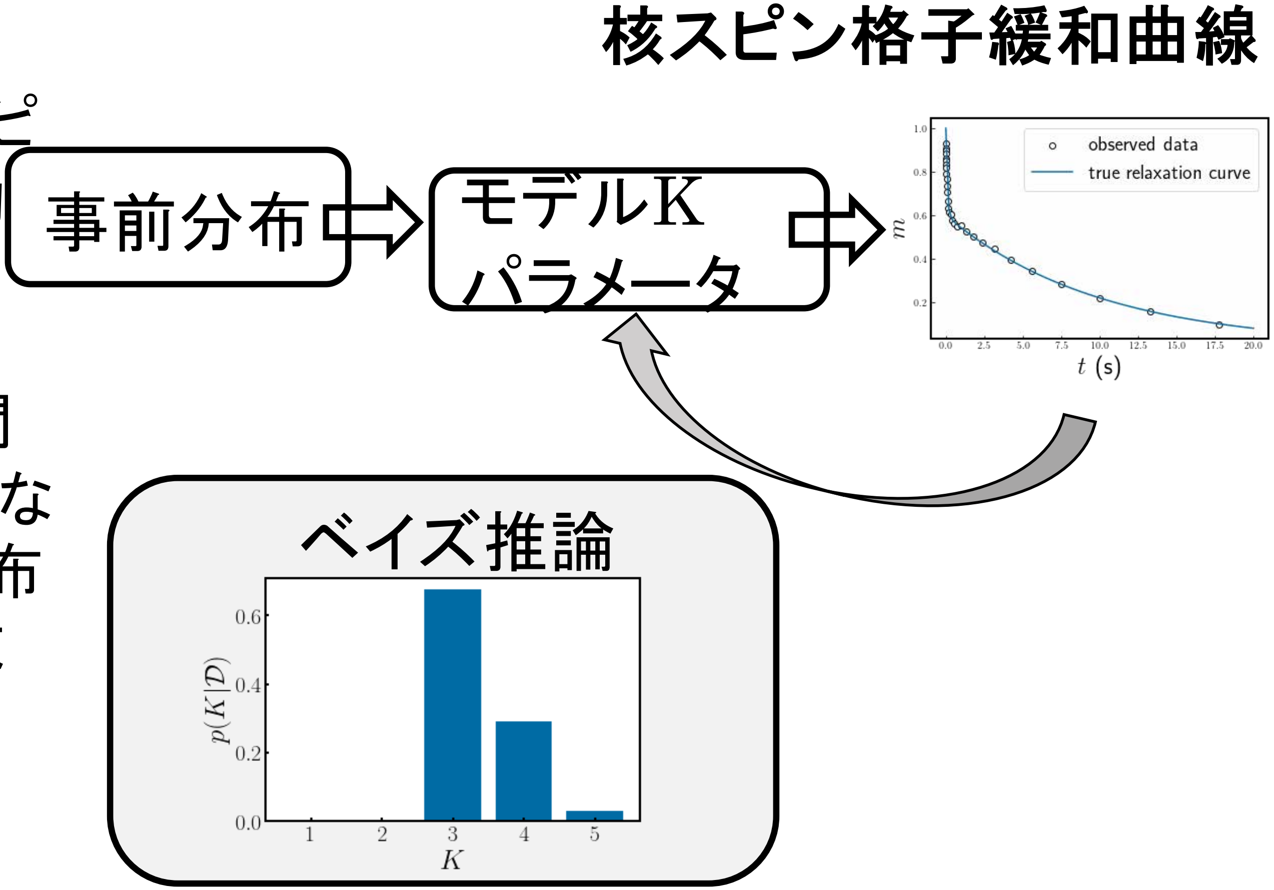
NMRまとめ

・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(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

マグネタイトにおける
メスバウアースペクトルのベ
イズ的解析

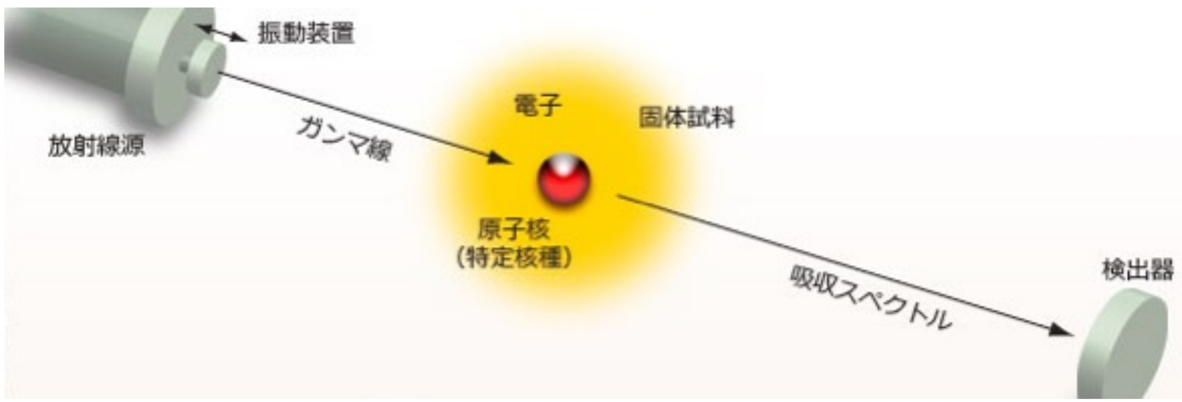
東京大学大学院　理学系研究科　森口椋太
公益財団法人高輝度光科学研究センター　筒井智嗣
東京大学大学院　新領域創成科学研究科　片上舜
国立研究開発法人物質材料研究機構　永田賢二
熊本大学大学院　先端科学研究部　水牧仁一朗
東京大学大学院　新領域創成科学研究科　岡田真人

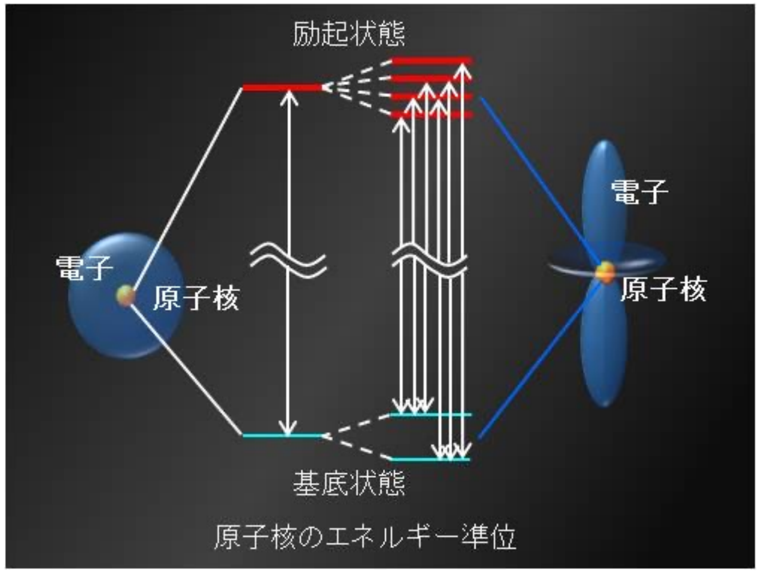
Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 91,W104002 (2022)

メスバウアー分光とは

メスバウアー分光：物質中の原子核の吸収スペクトルを測定

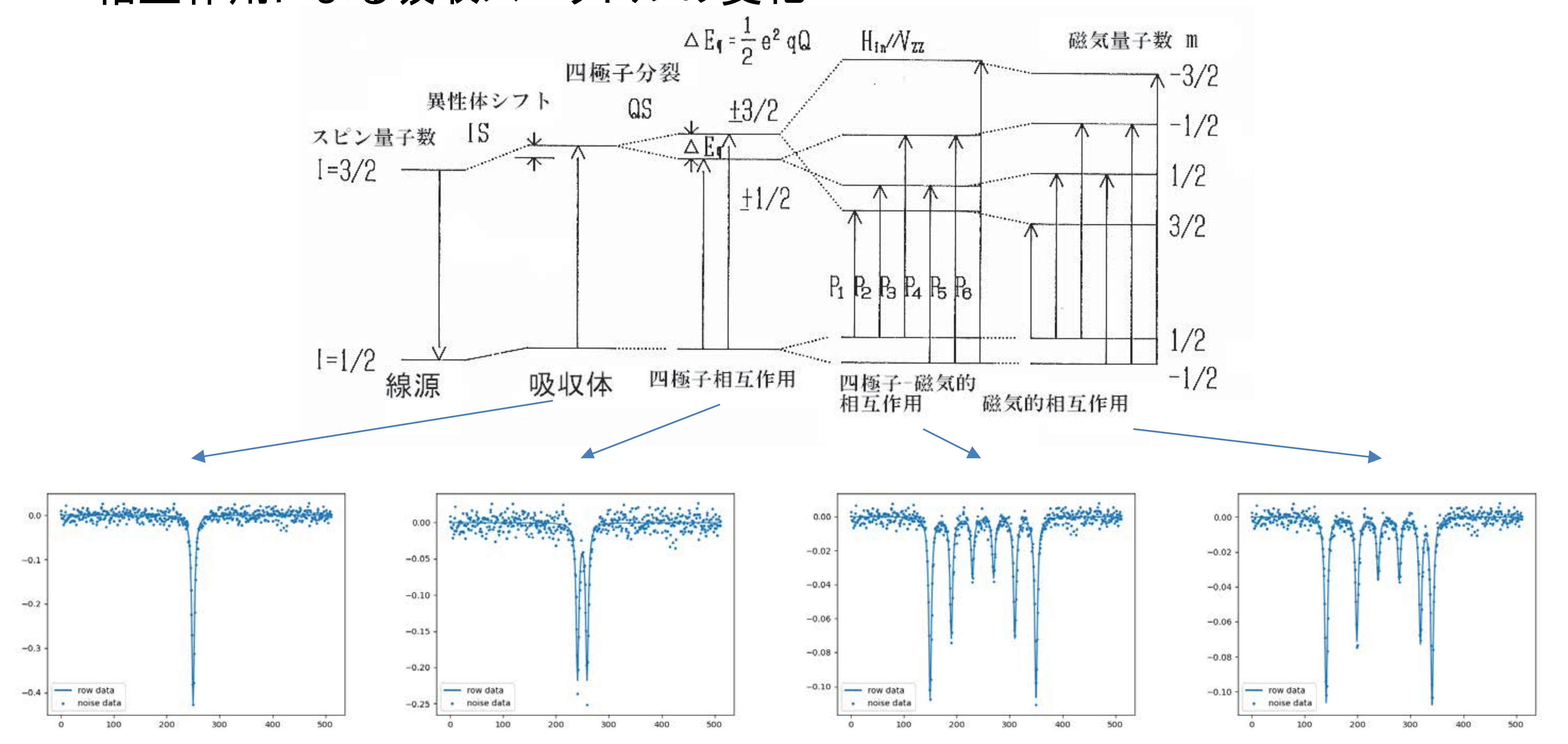
→物質中の原子核周りの内部磁場や電子状態を測定





メスバウアー分光とは

相互作用による吸収スペクトルの変化

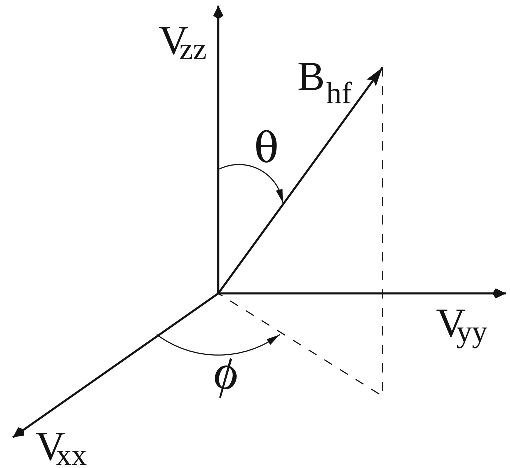


従来はスペクトルの形から相互作用を考えていたため専門家でないと解析が困難

ベイズ推論によるフィッティング

スペクトルに関係する3つのハミルトニアン

- 核ゼーマン相互作用: $H_{M3/2}, H_{M1/2}$
- 四極子相互作用: $H_{Q3/2}, H_{Q1/2}$
- 異性体シフト: H_c



各ハミルトニアン

$$H_{M3/2} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}\alpha\cos\theta & -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{i\phi} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{-i\phi} & \frac{\alpha}{2}\cos\theta & -\alpha\sin\theta e^{i\phi} & 0 \\ 0 & -\alpha\sin\theta e^{-i\phi} & -\frac{\alpha}{2}\cos\theta & -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{i\phi} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{-i\phi} & -\frac{3}{2}\alpha\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$H_{Q3/2} = \begin{pmatrix} 3A & 0 & \sqrt{3}A\eta & 0 \\ 0 & -3A & 0 & \sqrt{3}A\eta \\ \sqrt{3}A\eta & 0 & -3A & 0 \\ 0 & \sqrt{3}A\eta & 0 & 3A \end{pmatrix}$$

$$H_{M1/2} = \begin{pmatrix} -\frac{\beta}{2}\cos\theta & -\frac{\beta}{2}\sin\theta e^{-i\phi} \\ -\frac{\beta}{2}\sin\theta e^{+i\phi} & +\frac{\beta}{2}\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$H_{Q1/2} = 0$$

$$H_c = E_{center}$$

※ $\alpha = g_{\frac{3}{2}}\mu_N B_{hf}$
$\beta = g_{1/2}\mu_N B_{hf}$

ベイズ推論によるフィッティング

尤度と事後分布の設定

物理モデル

$$F(x;\Theta) = \sum_{k}^{K} f\left(x;\Theta_k\right)$$

事後分布

$$p(\Theta|D) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2}\beta E(\Theta)\right)\varphi(\Theta)$$

事前分布

$$\varphi(\Theta)$$

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

$$f\left(x;\Theta_k\right) := \sum_{i,j} r_k \times \frac{1}{\pi}\frac{INT_{i,j,k} \times \gamma_k}{\left(x - E_{i,j,k} - E_{shift,k}\right)^2 + \gamma}$$

事前分布詳細

Γの事前分布はガンマ分布，その他は一様分布

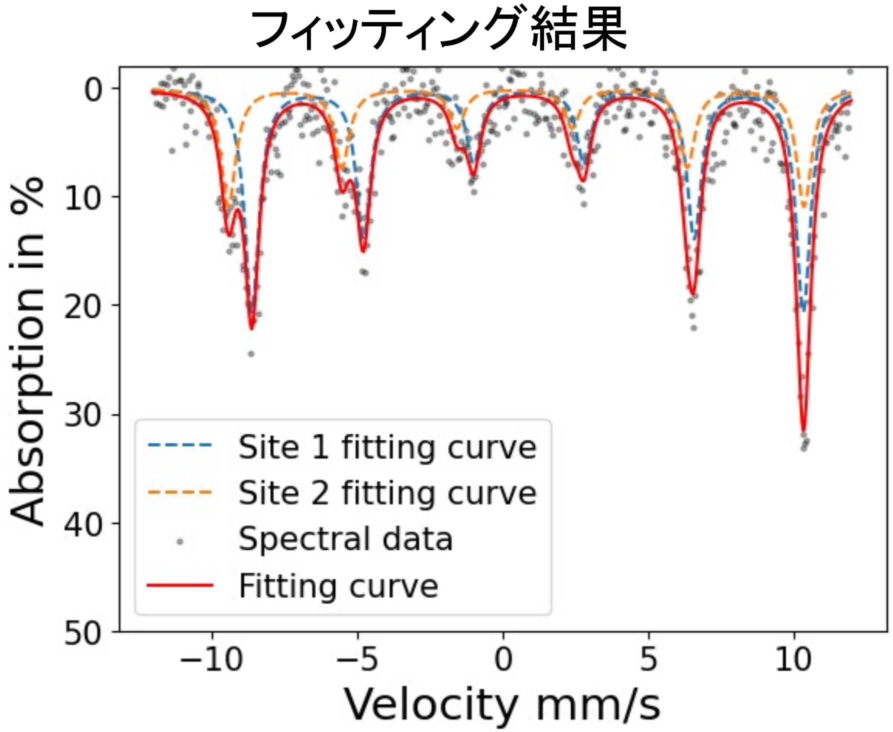
$$A : \mathrm{Uniform}(-1,1), B_{hf} : \mathrm{Uniform}(0,10), \eta : \mathrm{Uniform}(0,1), \theta : \mathrm{Uniform}(0,\pi),$$

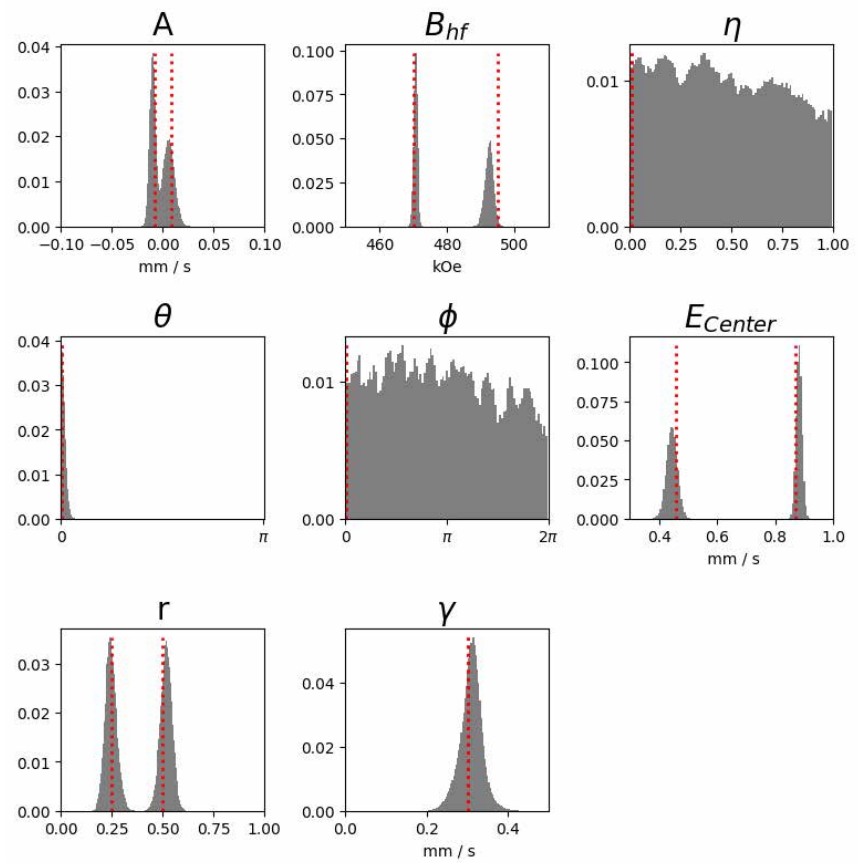
$$\phi : \mathrm{Uniform}(0,2\pi), E_{\mathrm{center}} : \mathrm{Uniform}(-1.0,2.5), r : \mathrm{Uniform}(0.0,1.0), \Gamma : \mathrm{Gamma}(1.5,1.5)$$

ベイズ推論によるフィッティング

生成したデータ(マグネタイト 300Kを想定)

各パラメータの事後分布
(赤い点線が実験値)

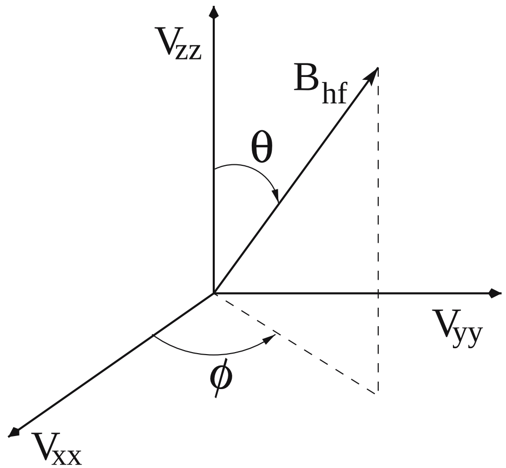




ベイズ推論によるフィッティング

スペクトルに関係する3つのハミルトニアン

- 核ゼーマン相互作用: $H_{M3/2}, H_{M1/2}$
- 四極子相互作用: $H_{Q3/2}, H_{Q1/2}$
- 異性体シフト: H_c



各ハミルトニアン

$$H_{M3/2} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}\alpha\cos\theta & -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{i\phi} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{-i\phi} & \frac{\alpha}{2}\cos\theta & -\alpha\sin\theta e^{i\phi} & 0 \\ 0 & -\alpha\sin\theta e^{-i\phi} & -\frac{\alpha}{2}\cos\theta & -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{i\phi} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\sin\theta e^{-i\phi} & -\frac{3}{2}\alpha\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$H_{Q3/2} = \begin{pmatrix} 3A & 0 & \sqrt{3}A\eta & 0 \\ 0 & -3A & 0 & \sqrt{3}A\eta \\ \sqrt{3}A\eta & 0 & -3A & 0 \\ 0 & \sqrt{3}A\eta & 0 & 3A \end{pmatrix}$$

$$H_{M1/2} = \begin{pmatrix} -\frac{\beta}{2}\cos\theta & -\frac{\beta}{2}\sin\theta e^{-i\phi} \\ -\frac{\beta}{2}\sin\theta e^{+i\phi} & +\frac{\beta}{2}\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$H_{Q1/2} = 0$$

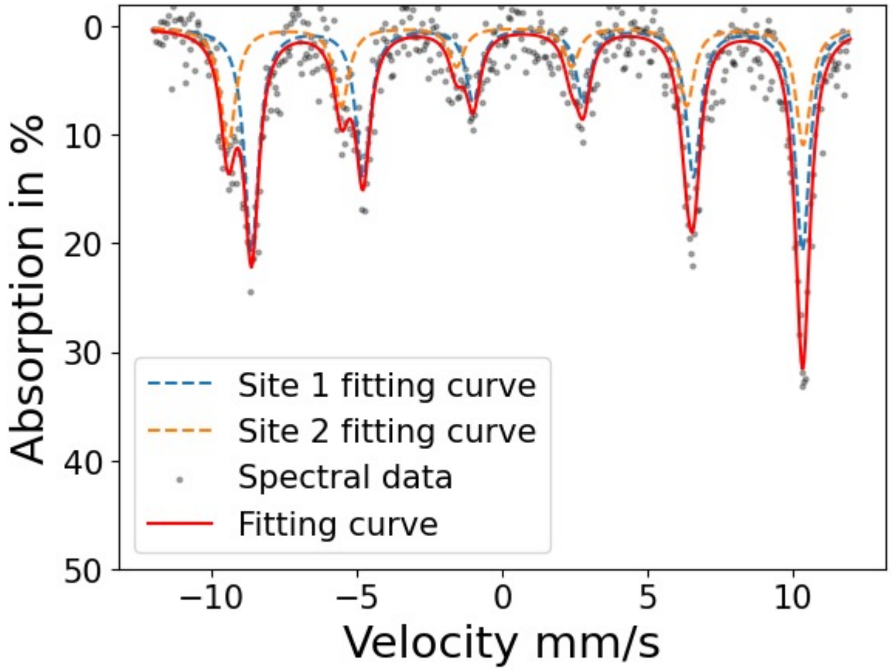
$$H_c = E_{center}$$

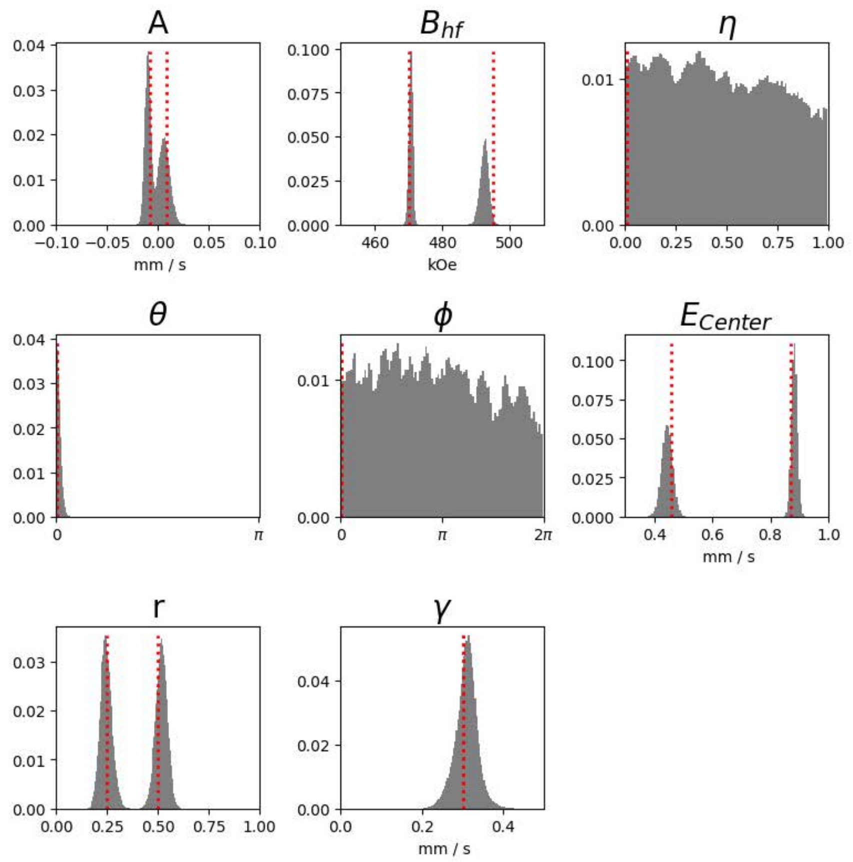
※ $\alpha = g_{\frac{3}{2}}\mu_N B_{hf}$
$\beta = g_{1/2}\mu_N B_{hf}$

Mössbauer Spectroscopy
物理パラメータの事後確率

Posterior probability
(Red line: true values)

Result of fitting

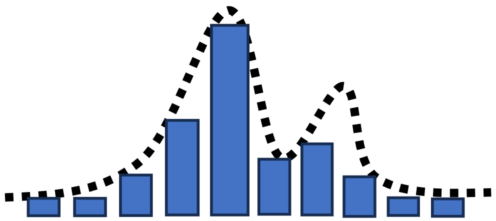




ハミルトニアン選択(1/2)

事後分布からベイズ自由エネルギーを計算

事後分布: $p(\Theta|D) \propto p(D|\Theta)p(\Theta)$



物理モデルの確率

$$F = -\log \boxed{\int p(\Theta|D)d\Theta}$$

ベイズ自由エネルギー
（負の対数周辺尤度）

ベイズ自由エネルギーの計算式

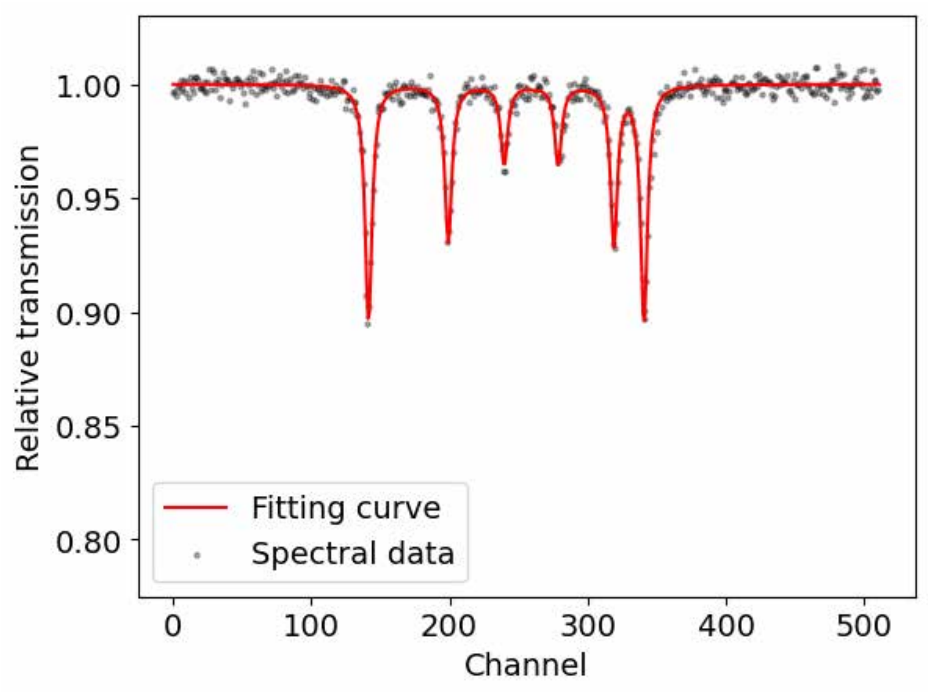
$$F_n(\beta) := -\log Z_n(\beta)$$
$$= \beta\tilde{F}_n(\beta) - \frac{n}{2}(\log\beta - \log 2\pi)$$
$$\tilde{F}_n(\beta) := -\frac{1}{\beta}\log\tilde{Z}_n(\beta)$$

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

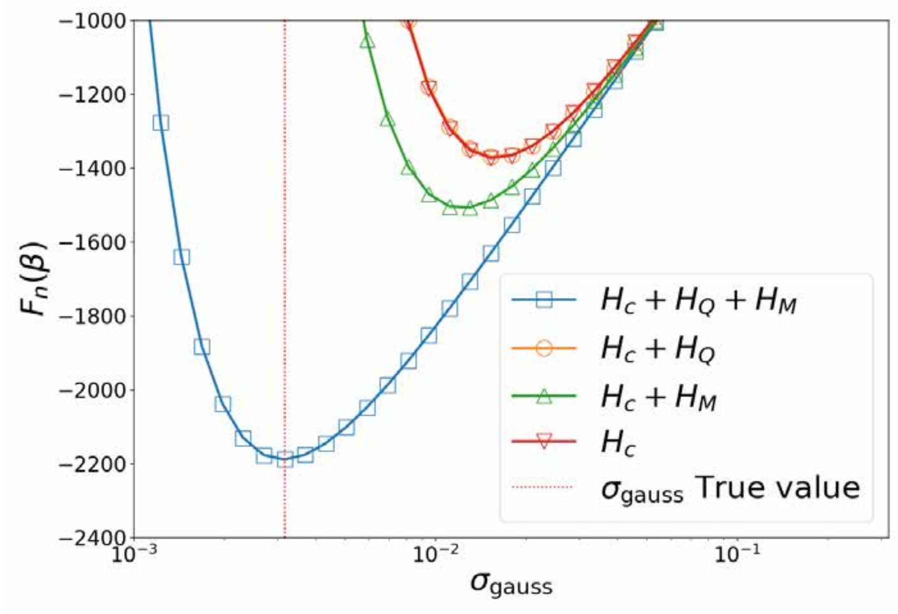
$F\left(x_i;\Theta\right)$: 物理モデル

ハミルトニアン選択(2/2)

核ゼーマン相互作用なし（H_c+H_Q+H_M）の数値実験



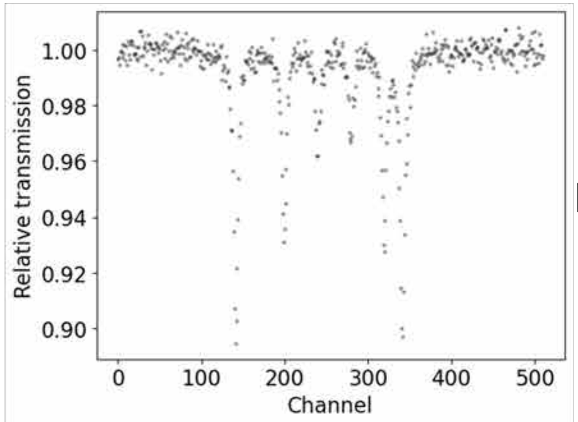
フィッティング



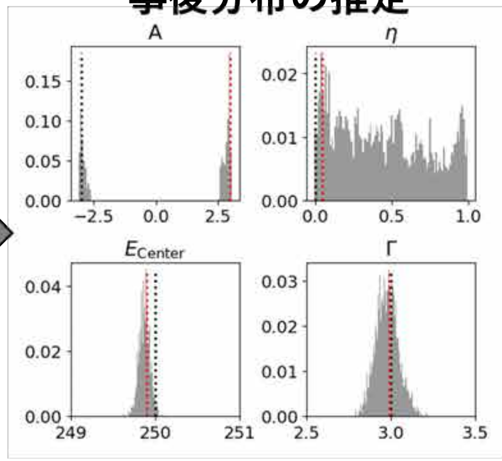
各ハミルトニアンでの自由エネルギー

Mössbauer Spectroscopy
まとめ

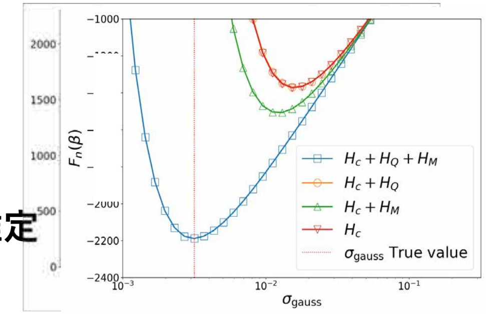
測定データ



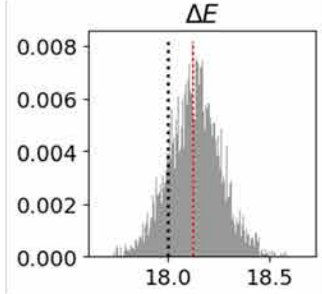
事後分布の推定



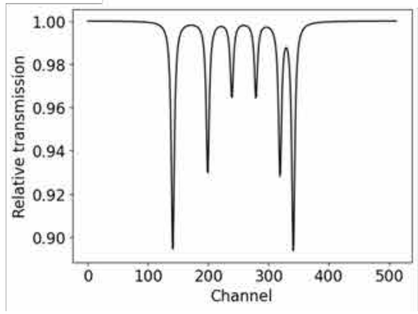
ハミルトニアンの推定



別の物理量の事後分布



フィッティング



Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada,
JPSJ, 91,W104002 (2022)

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSと XASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

小角散乱法データを用いた試料パラメータのベイズ推論

林悠偉[A], 片上舜[A] , 桑本滋生[B], 永田賢二[C], 水牧仁一朗[B], 岡田真人[A]

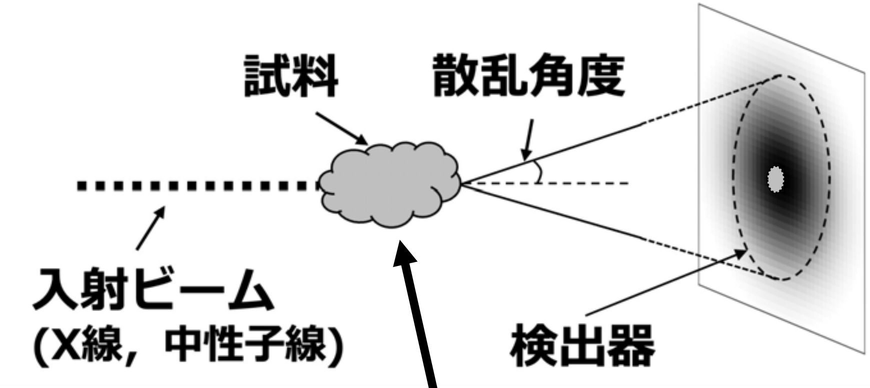
東大新領域[A] 高輝度光科学研究セ[B] 物材機構[C]

Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, "Bayesian Inference for Small-Angle Scattering Data", *Journal of the Physical Society of Japan* 92(9) (2023).

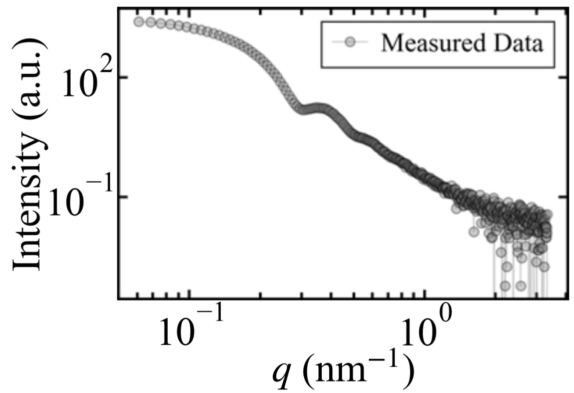
小角散乱法(SAS)

試料にビームを照射し，小さい角度の散乱強度から

ナノ構造解析を行う.



散乱強度–散乱ベクトル



不均一系試料

- 高分子溶液
- タンパク質
- コロイド粒子
- 金属，セラミック
- 繊維 …

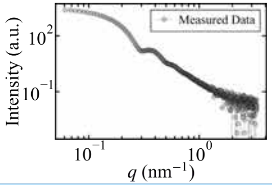
データ解析

1. 散乱強度モデルを設定

2. モデルパラメータ推定

SAS解析の従来法とその課題

SAS解析の流れ



散乱強度モデルを設定

球粒子: $I(q,\Theta) = \left(\frac{\phi}{V}F(q,R_M)^2 + b\right)\times t$

試料パラメータ推定

粒径R_M→10 nm

- 試料パラメータ推定に勾配法などを用いているために，局所解が得られることが多い．
  →何度もパラメータの初期値を変えて対処している．

- 解析に用いる散乱強度モデルが予め分からないと解析できない．
  →フィッティングの二乗誤差や経験則を基にモデル選択している．

本研究の目的

2つの従来法の課題をベイズ計測を応用し解決する．

小角散乱法のベイズ計測 – 定式化

データ点y_iの確率分布：$$p(y|q,\Theta,K)=\frac{I_K(q,\Theta)^y\exp\left(-I_K(q,\Theta)\right)}{y!}$$

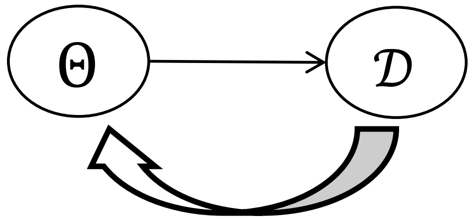
（∵散乱強度は，光子のカウントデータとして計測）

散乱強度の計測値：y_i
散乱ベクトル：q_i
試料モデル：$I(q_i;\Theta)$

データ$\mathcal{D}$の生成確率：$$\begin{aligned}p(\mathcal{D}|\Theta,K)&=\prod_{i=1}^{N}p(y_i|q_i,\Theta,K)\\&=\exp(-NE(\Theta,K))\end{aligned}$$

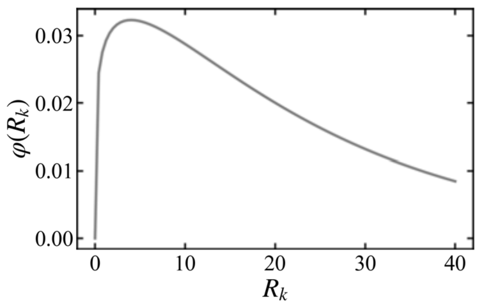
→誤差関数：$$E(\Theta,K)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\{I_K(q_i,\Theta)-y_i\log I_K(q_i,\Theta)+\sum_{j=1}^{y_i}\log j\right\}$$

生成（因果律）



パラメータθの事後確率：$$\begin{aligned}p(\Theta|\mathcal{D})&=\frac{p(\mathcal{D}|\Theta)\varphi(\Theta)}{\int p(\mathcal{D},\Theta)d\Theta}\\&\propto\exp(-NE(\Theta))\varphi(\Theta)\end{aligned}$$

モデルKの事後確率：$$\begin{aligned}p(K|\mathcal{D})&=\frac{\int p(\mathcal{D},\Theta,K)d\Theta}{\sum_K\int p(\mathcal{D},\Theta,K)d\Theta}\\&=\frac{\exp(-F(K))\varphi(K)}{\sum_K\exp(-F(K))\varphi(K)}\end{aligned}$$



事前分布$\varphi(\Theta)$：事前知識を基に設定

試料パラメータ推定

従来法

勾配法や準ニュートン法による
パラメータフィッティング.

課題

- 局所解にトラップされる
- 結果の信頼度が分からない

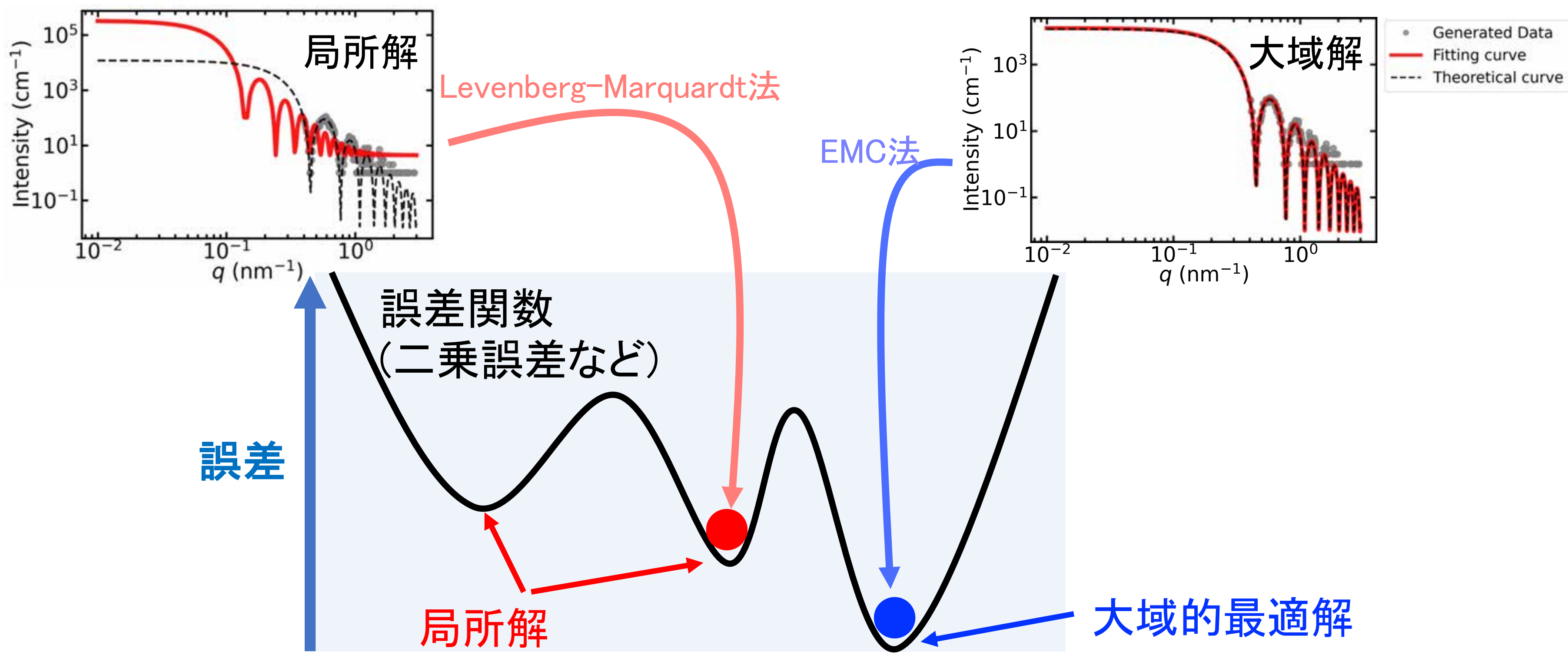
ベイズ計測

交換モンテカルロ(EMC)法[2]により事後分布をサンプリング.

課題の解決

- 大域的最適解の推定
- 事後分布から信頼度評価

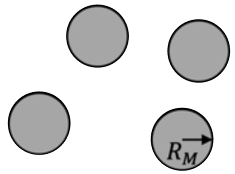
Yui Hayashi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 92, 094002 (2023).



[2] Hukushima, Koji, and Koji Nemoto., J. Phys. Soc. Jpn, 65.6 (1996): 1604-160

パラメータ推定の数値実験 – 設定

単分散球試料のパラメータを推定する.



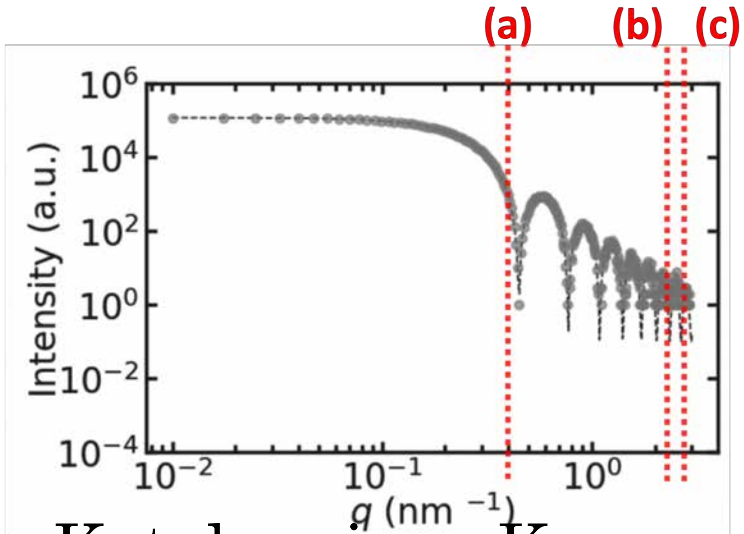
単分散球

散乱強度モデル : $I_M(q;\Theta) = \left[\frac{\phi}{V}\left\{\frac{3\Delta\rho V\,[\sin(qR_M) - qR_M\cos(qR_M)]}{(qR_M)^3}\right\}^2 + b\right]\times t$

パラメータ : $\Theta = \{R_M, b, t\}$ (粒径: R_M, バックグラウンド : b, 計測時間 : t)

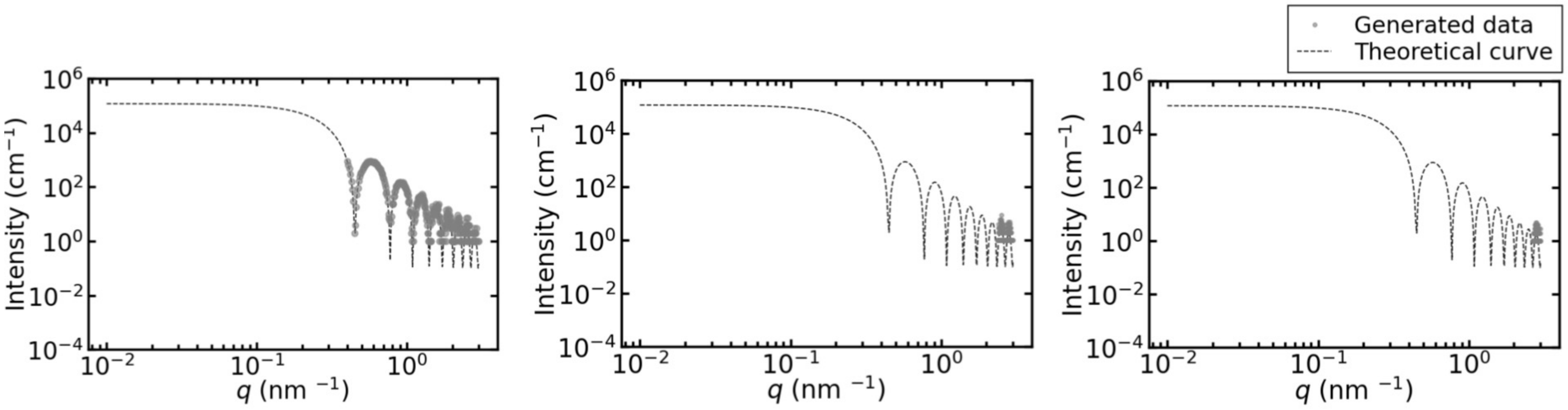
SASデータの特徴
実験機器の構造上, 低角領域データ欠損がしばしば起こる.

欠損度合いの異なる3種類の人工データに対して実験を行う

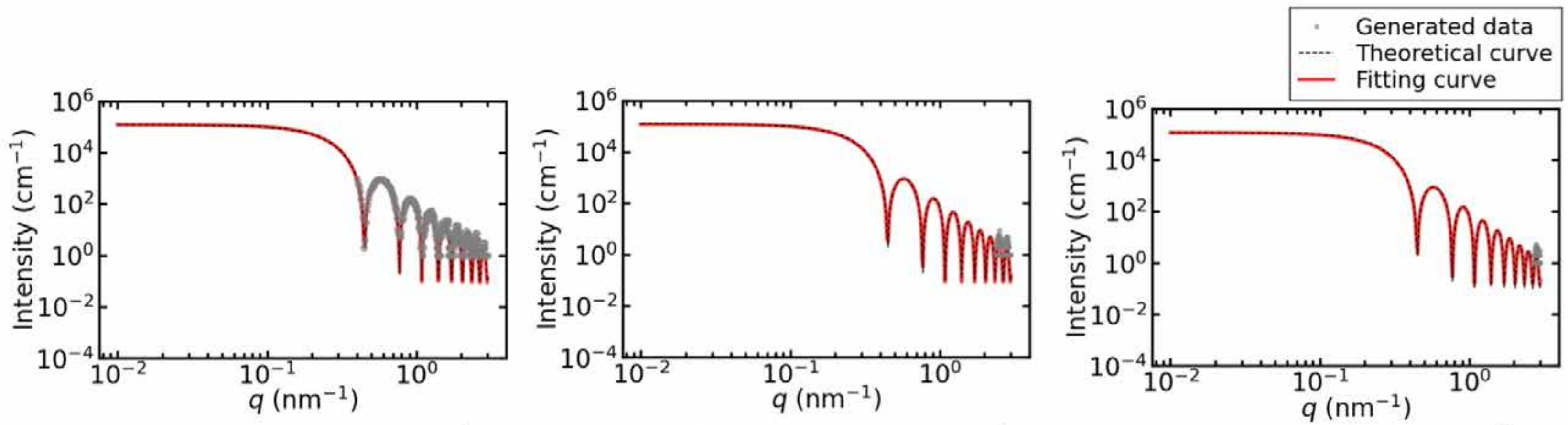


Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ.* 92, 094002 (2023)

パラメータ推定の数値実験 – 結果



(a) $q_{\rm min}$ = 0.4 nm^{-1} (b) $q_{\rm min}$ = 2.35 nm^{-1} (c) $q_{\rm min}$ = 2.65 nm^{-1}

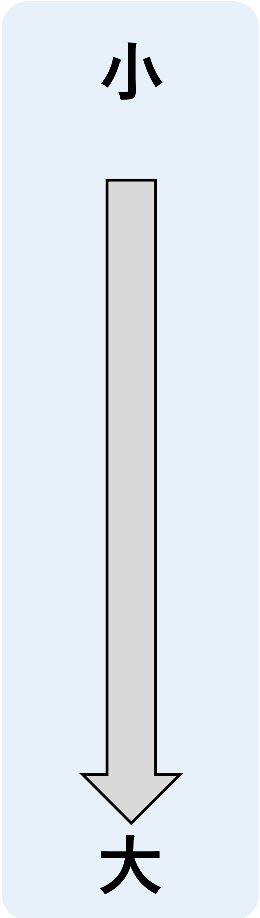


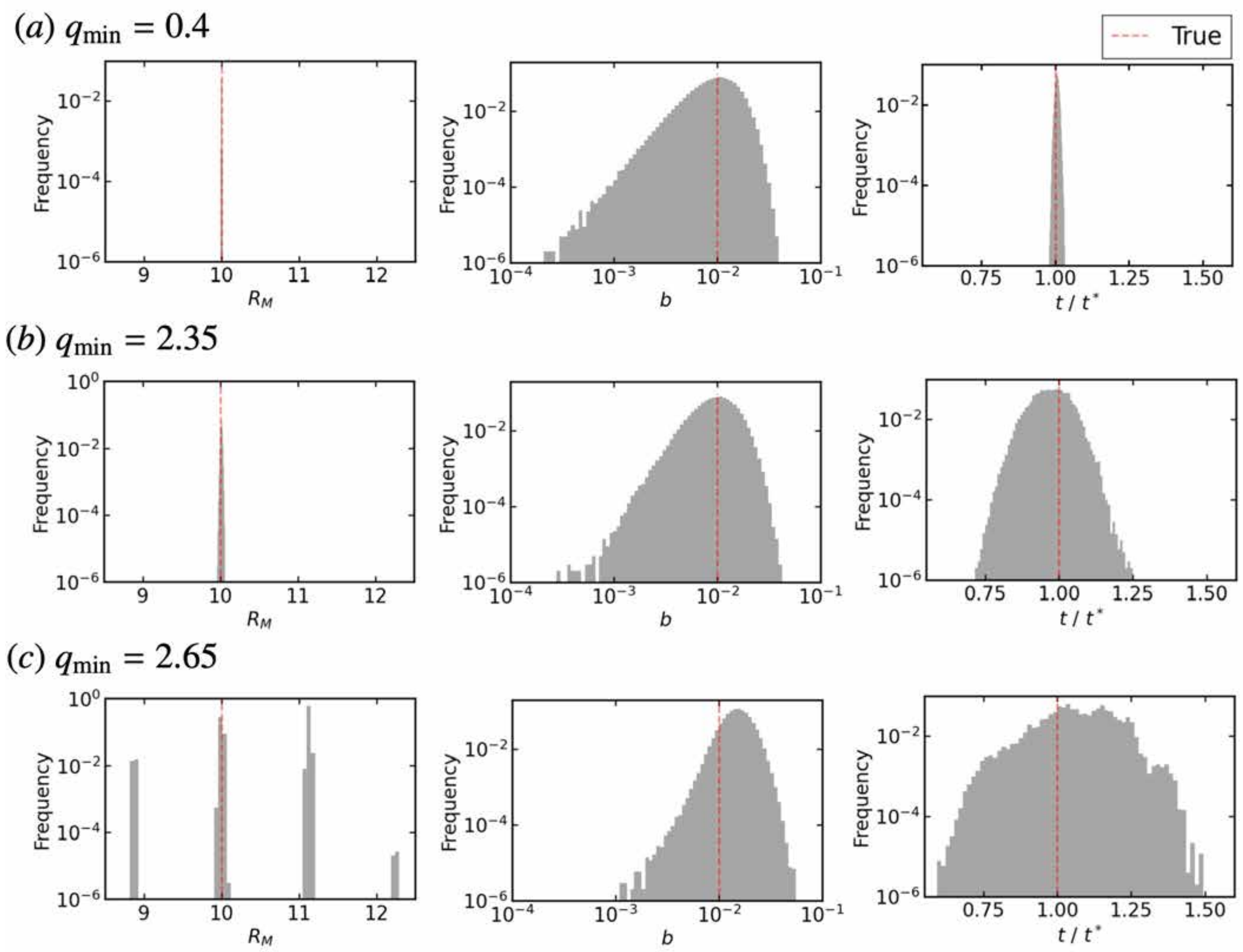
(a) $q_{\rm min}$ = 0.4 nm^{-1} (b) $q_{\rm min}$ = 2.35 nm^{-1} (c) $q_{\rm min}$ = 2.65 nm^{-1}

Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ.* 92, 094002 (2023)

パラメータの事後分布

データ欠損

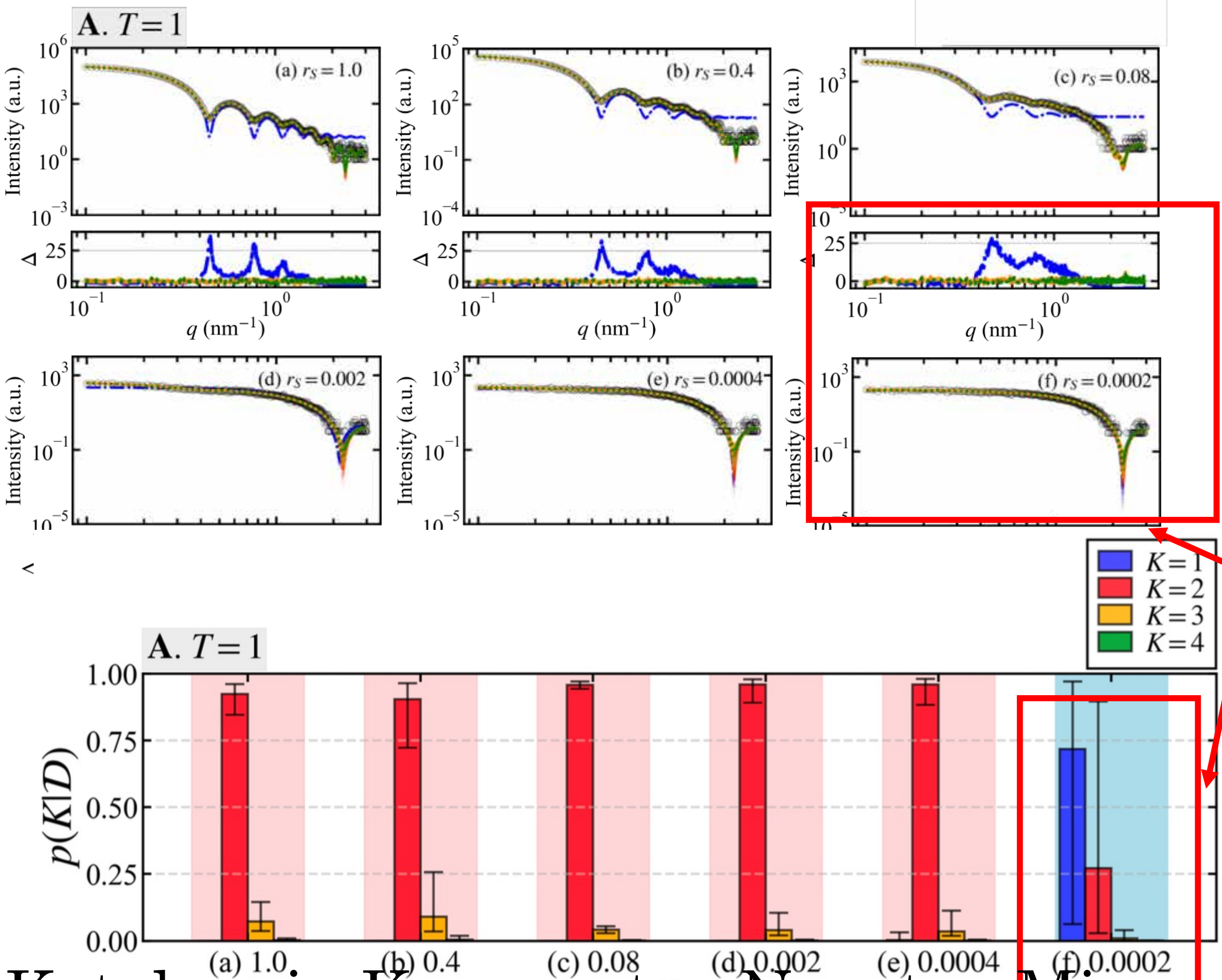




(c) に**複数のピーク**→$q_{\rm min} = 2.35 - 2.65\ {\rm nm}^{-1}$で**推定限界**

Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *J P S J.* 92, 094002 (2023)

モデル選択の数値実験 – 結果



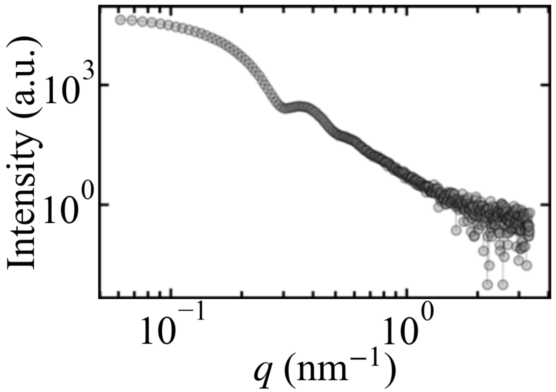
解析限界

Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *J P S J.* 92, 094002 (2023),

小角散乱法におけるベイズ計測
物理パラメータ推定とモデル選択

散乱強度，計測ノイズモデルの選択や試料パラメータ推定

散乱強度−散乱ベクトル：D



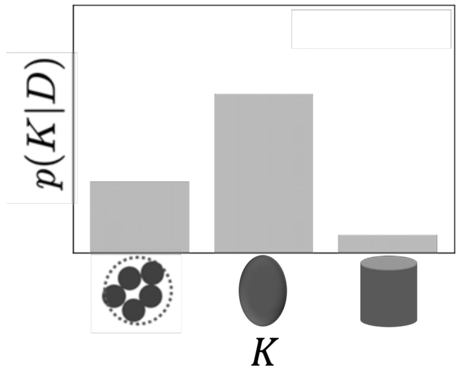
目的

データから試料構造の解析

モデル選択

$$p(K|\mathcal{D}) = \frac{\int p(\mathcal{D},\Theta,K)d\Theta}{\sum_K \int p(\mathcal{D},\Theta,K)d\Theta}$$

試料構造を表す
散乱強度モデルの選択

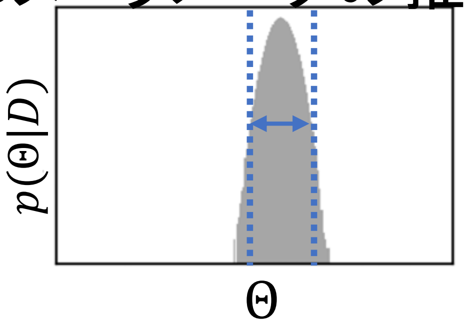


定量的な散乱強度
モデルの選択

パラメータ推定

$$p(\Theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\Theta)p(\Theta)}{\int p(\mathcal{D},\Theta)d\Theta}$$

試料の大きさや密度
のパラメータの推定



信頼度の
定量評価が可能

小角散乱のベイズ計測のまとめ

従来手法の問題点: パラメータ推定に勾配法などを用いているために，局所解が得られることが多い.

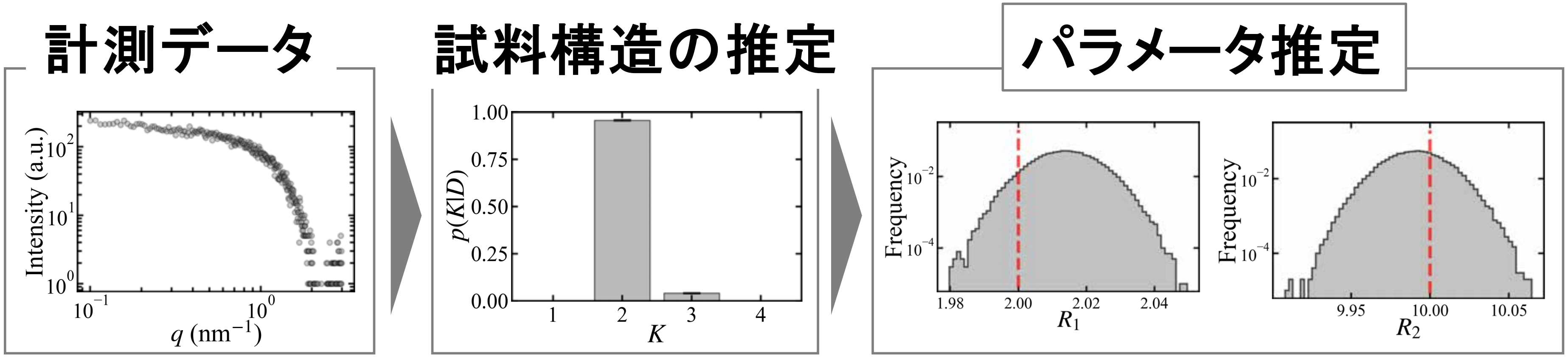
→交換モンテカルロ法を用いて事後確率分布として推定する.

→大域的最適解の推定，推定の信頼度評価ができる.

従来手法の問題点:解析に用いる散乱強度モデルが予め分からないと解析できない.

→データ駆動で定量的な散乱強度モデル選択を可能にした.

→データから試料構造を数理的に選択できる.



今後，様々な試料のSAS実データへの適用が望まれる

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  - 従来手法の破綻
  - ベイズ計測の導入
  - レプリカ交換法の適用
  - モデル選択
  - 計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  - NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSと XASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

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)

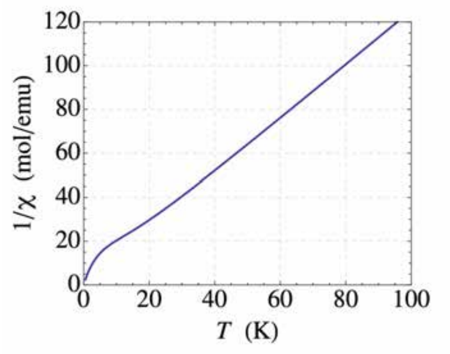
従来のパラメータ推定

対象とする物理系

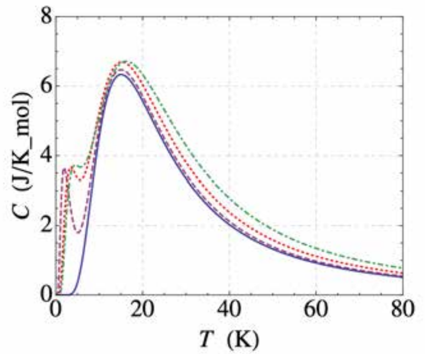
実験

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

ベイズ推論の導入

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

⇩

ベイズ推論の導入

・ベイズ推論を用いることで推定値と推定精度両方を得ることができる
・ベイズ推論を用いた統合法（ベイズ統合）を用いることで客観的な同時解析が可能

4f希土類イオンの結晶モデル

<u>結晶場ハミルトニアン</u>

正方晶：$\hat{H}_{\mathrm{CEF}} = B_{20}\hat{O}_{20} + B_{40}\hat{O}_{40} + B_{44}\hat{O}_{44}$

立方晶：$H_{\mathrm{CEF}} = B_{40}(0_{40} + 5B_{44})$

※等価演算子

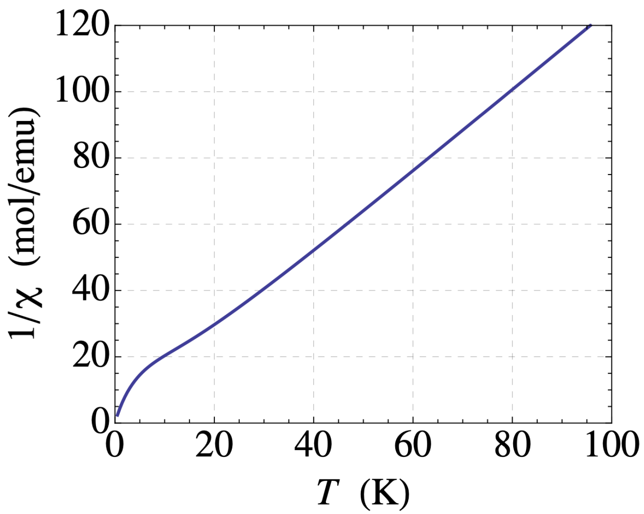
$$\hat{O}_{20} = 3J_z^2 - J(J+1)$$

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

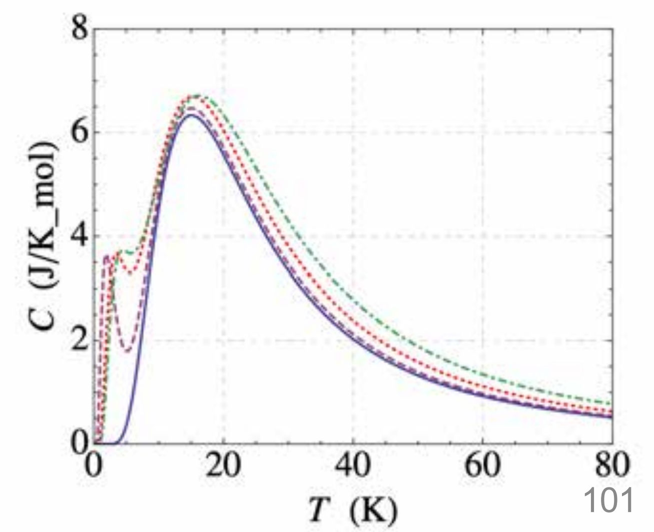
$$\hat{O}_{44} = \frac{1}{2}(J_+^4 - J_-^4)$$

観測データ生成

磁化率

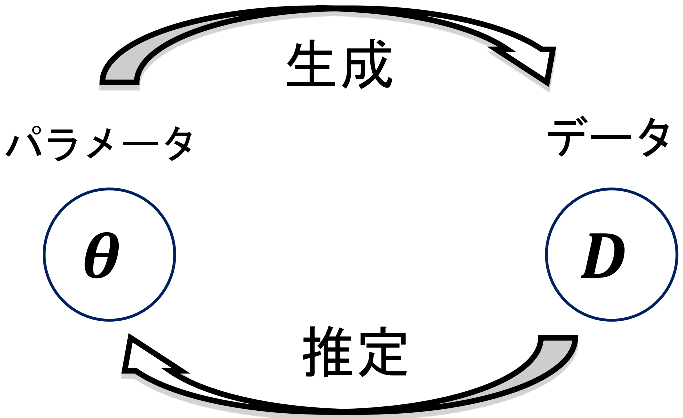


比熱



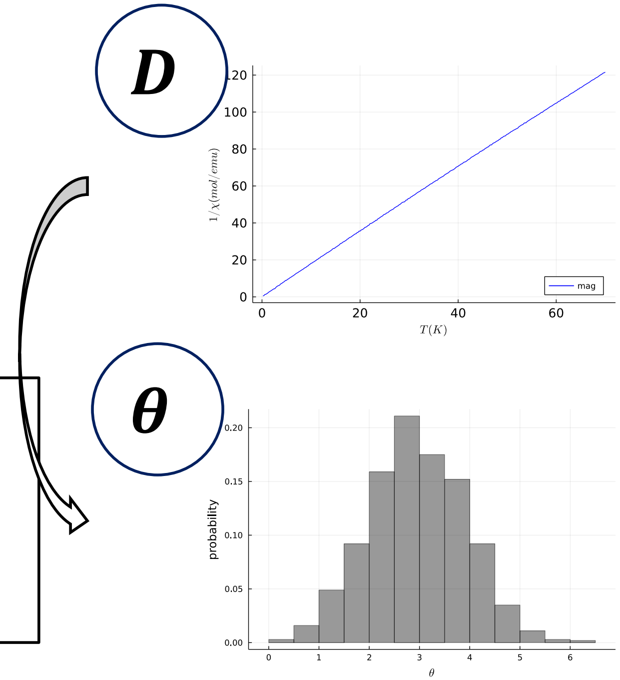
ベイズ推定

・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



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

$p(\boldsymbol{\theta})$：事前確率分布
$p(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$：尤度関数
$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D})$：事後確率分布

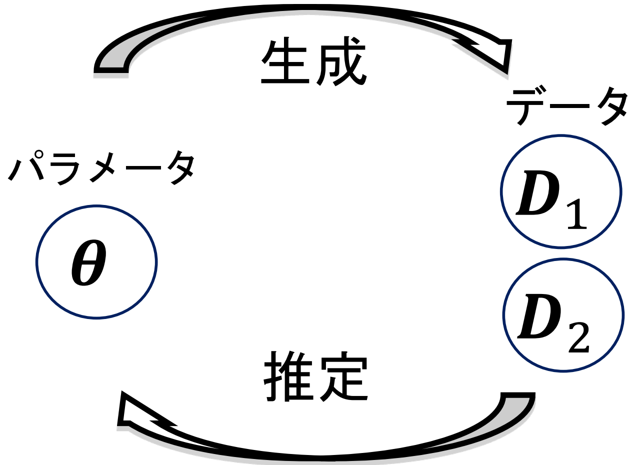


・パラメータの値と精度の両方を推定可能
・全パラメータ空間を自動で探索するため、客観的な解析が可能

ベイズ統合

ベイズの定理で推定パラメータの
事後分布$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2})$を求める

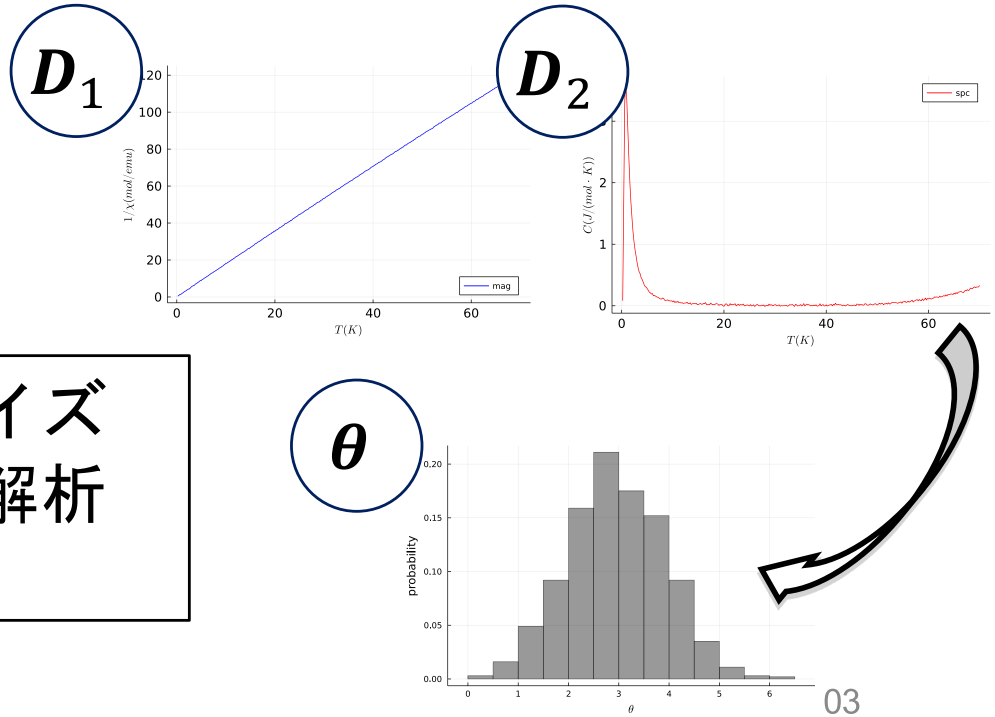
$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2})=\frac{p(\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2}\,|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})}{\int p(\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2}\,|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}}$$
$$=\frac{p(\boldsymbol{D_1}\,|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{D_2}\,|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\th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



$p(\boldsymbol{\theta})$：事前確率分布

$p(\boldsymbol{D}_1|\boldsymbol{\theta}),p(\boldsymbol{D}_2|\boldsymbol{\theta})$：尤度関数

$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D}_1,\boldsymbol{D}_2)$：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

$$p(\boldsymbol{D_1}, b_1|\boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \exp\left(-N_1 b_1 E_1(\boldsymbol{\theta})\right)$$

$$p(\boldsymbol{D_2}, b_2|\boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp\left(-N_2 b_2 E_2(\boldsymbol{\theta})\right)$$

(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

$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_1}, b_1) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \exp\left(-N_1 b_1 E_1(\boldsymbol{\theta})\right) \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\boldsymbol{D_1}, b_1)}$$

$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_2}, b_2) = \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp\left(-N_2 b_2 E_2(\boldsymbol{\theta})\right) \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\boldsymbol{D_2}, b_2)}$$

確率モデル

分割モデルの尤度の積

$$p(\boldsymbol{D_1}, b_1|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{D_2}, b_2|\boldsymbol{\theta}) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp\left(-NbE(\boldsymbol{\theta})\right)$$

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

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

$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_1}, \boldsymbol{D_2}, b_1, b_2) = \left(\frac{b_1}{2\pi}\right)^{\frac{N_1}{2}} \left(\frac{b_2}{2\pi}\right)^{\frac{N_2}{2}} \exp\left(-NbE(\boldsymbol{\theta})\right) \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\boldsymbol{D_1}, \boldsymbol{D_2}, b_1, b_2)}$$

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

ベイズの定理

$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2}) = \frac{\overbrace{p(\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2}|\boldsymbol{\theta})}^{\text{尤度関数}}p(\boldsymbol{\theta})}{\underbrace{\int p(\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}}_{\text{周辺尤度関数}}}$$

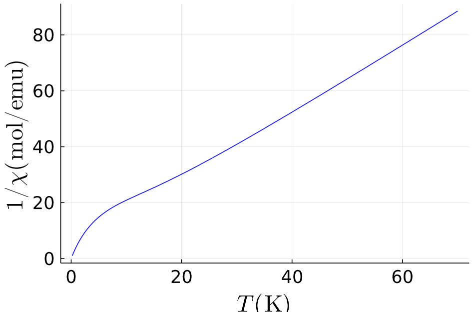
ベイズ自由エネルギー
周辺尤度関数を用いて定義

$$F(b_1) = -\ln Z(\boldsymbol{D_1}, b_1) = -\ln\int p(\boldsymbol{D_1}, b_1|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}$$
$$F(b_2) = -\ln Z(\boldsymbol{D_2}, b_2) = -\ln\int p(\boldsymbol{D_2}, b_2|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}$$
$$F_{\mathrm{int}}(b_1, b_2) = -\ln Z(\boldsymbol{D_1}, \boldsymbol{D_2}, b_1, b_2) = -\ln\int p(\boldsymbol{D_1}, \boldsymbol{D_2}, b_1, b_2|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}$$

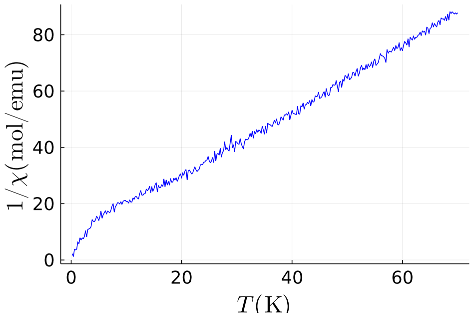
人工データ

磁化率

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

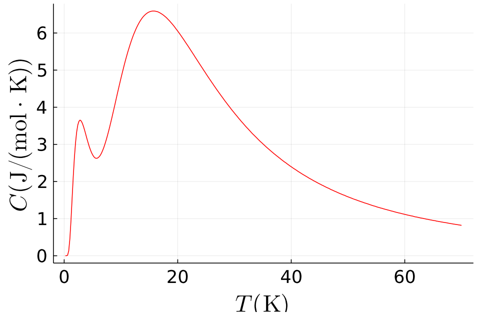


(2)$\sigma_{\mathrm{mag}} = 10^{0}$

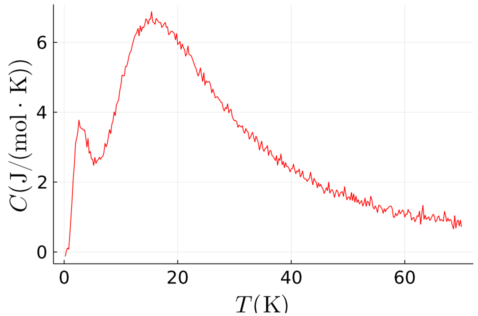


比熱

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



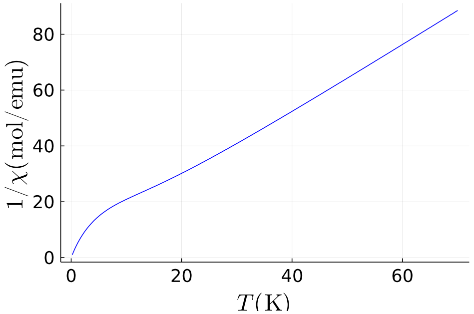
(2)$\sigma_{\mathrm{spc}} = 10^{-1}$

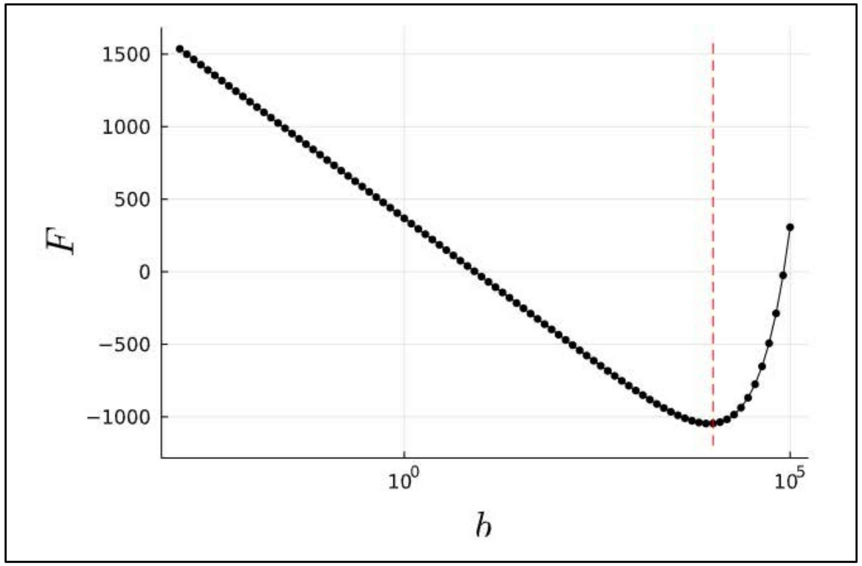


ノイズ推定

磁化率

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



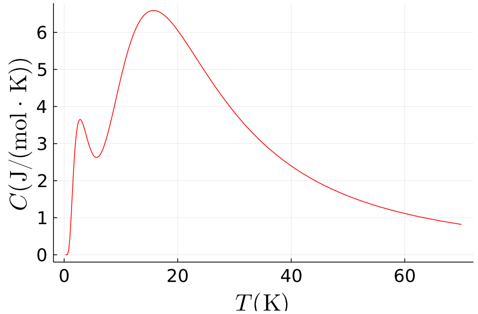


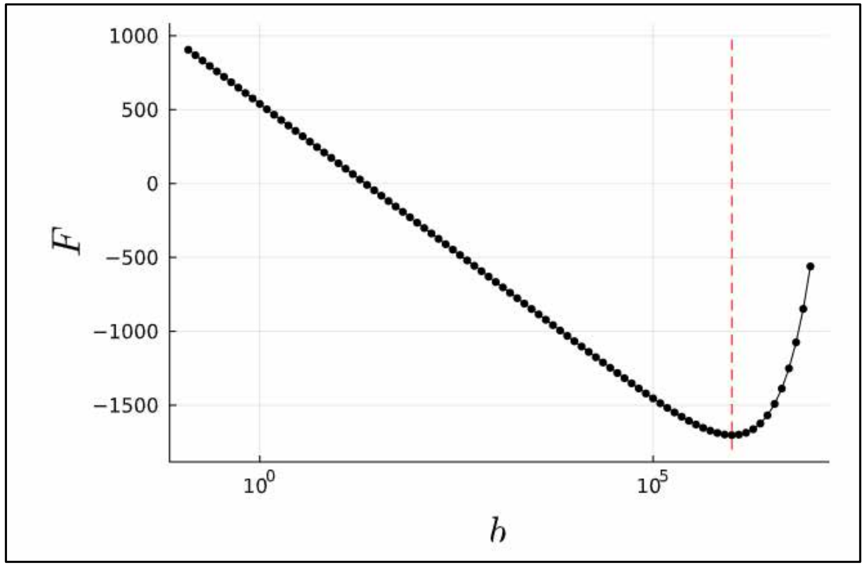
推定値 $b = 8.1113\times 10^3$

真値 $b = 10^4$

比熱

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





推定値 $b = 10^6$

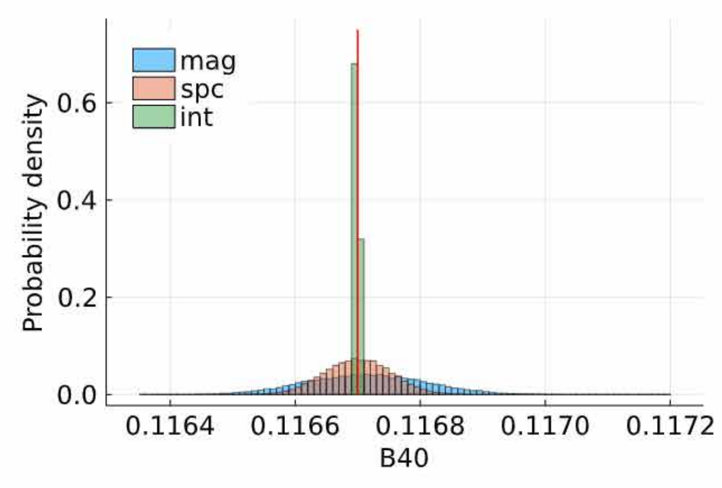
真値 $b = 10^6$

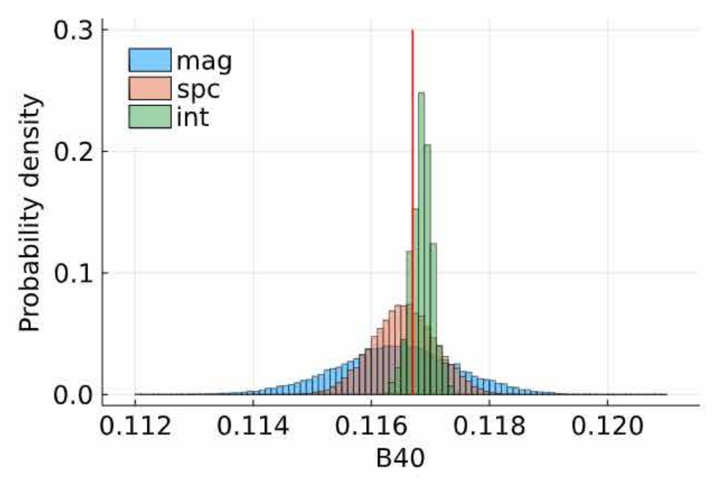
事後分布

結晶場ハミルトニアン
$H_{\mathrm{CEF}} = B_{40}(0_{40} + 5B_{44})$

(1)
$\sigma_{\mathrm{mag}} = 10^{-2}$
$\sigma_{\mathrm{spc}} = 10^{-3}$

(2)
$\sigma_{\mathrm{mag}} = 10^{0}$
$\sigma_{\mathrm{spc}} = 10^{-1}$





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(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  - 従来手法の破綻
  - ベイズ計測の導入
  - レプリカ交換法の適用
  - モデル選択
  - 計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

X線光電子および吸収分光スペクトルのベイズ統合によるハミルトニアンパラメータ推定

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
”*Journal of the Physical Society of Japan*,90, 034703, (2021)

XPSとXASの従来型の解析法

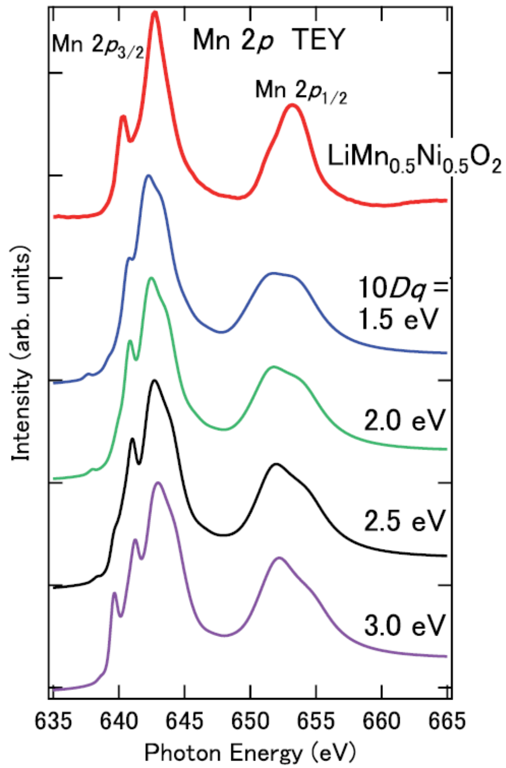
実験
(XPS、XAS)

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



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

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

従来法の課題点
・点推定であるため、推定精度を評価することが困難である。
・パラメータは手動で調整されるため、解析者の主観が介在する余地がある。
・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

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

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

ベイズ推定に基づく解析では、
・パラメータの値と精度の両方を推定することが可能になる。
・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になる。
・XPSとXAS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になる。

⇒本研究では、ハミルトニアンのパラメータをベイズ推定の枠組みで統合させ
XPSとXASの統合的解析法（ベイズ統合）を実現させた。

NiOを想定したXPSとXASの理論スペクトル

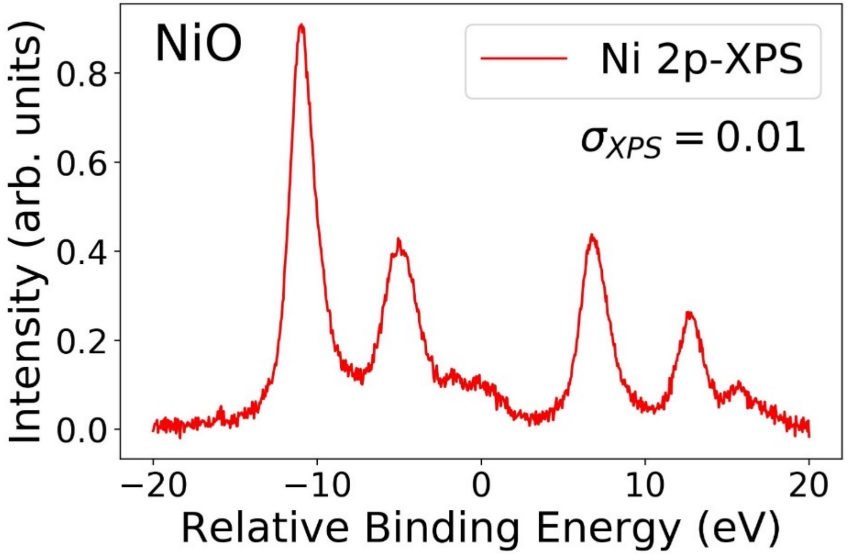
以下のハミルトニアンに基づくクラスターモデル計算

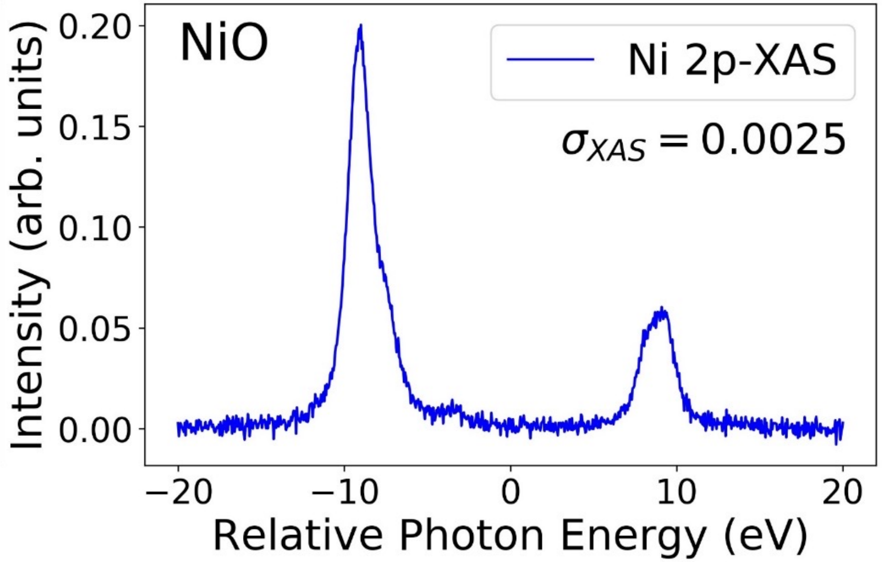
$$H=\sum_{\gamma,\sigma}\varepsilon_{3d}(\gamma)d^{\dagger}_{\gamma\sigma}d_{\gamma\sigma}+\sum_{m,\sigma}\varepsilon_{P}p^{\dagger}_{m\sigma}p_{m\sigma}+\sum_{\gamma,\sigma}\varepsilon_{p\_L}a^{\dagger}_{\gamma\sigma}a_{\gamma\sigma}+\sum_{\gamma,\sigma}V(\gamma)(d^{\dagger}_{\gamma\sigma}a_{\gamma\sigma}+a^{\dagger}_{\gamma\sigma}d_{\gamma\sigma})$$

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

$10Dq$

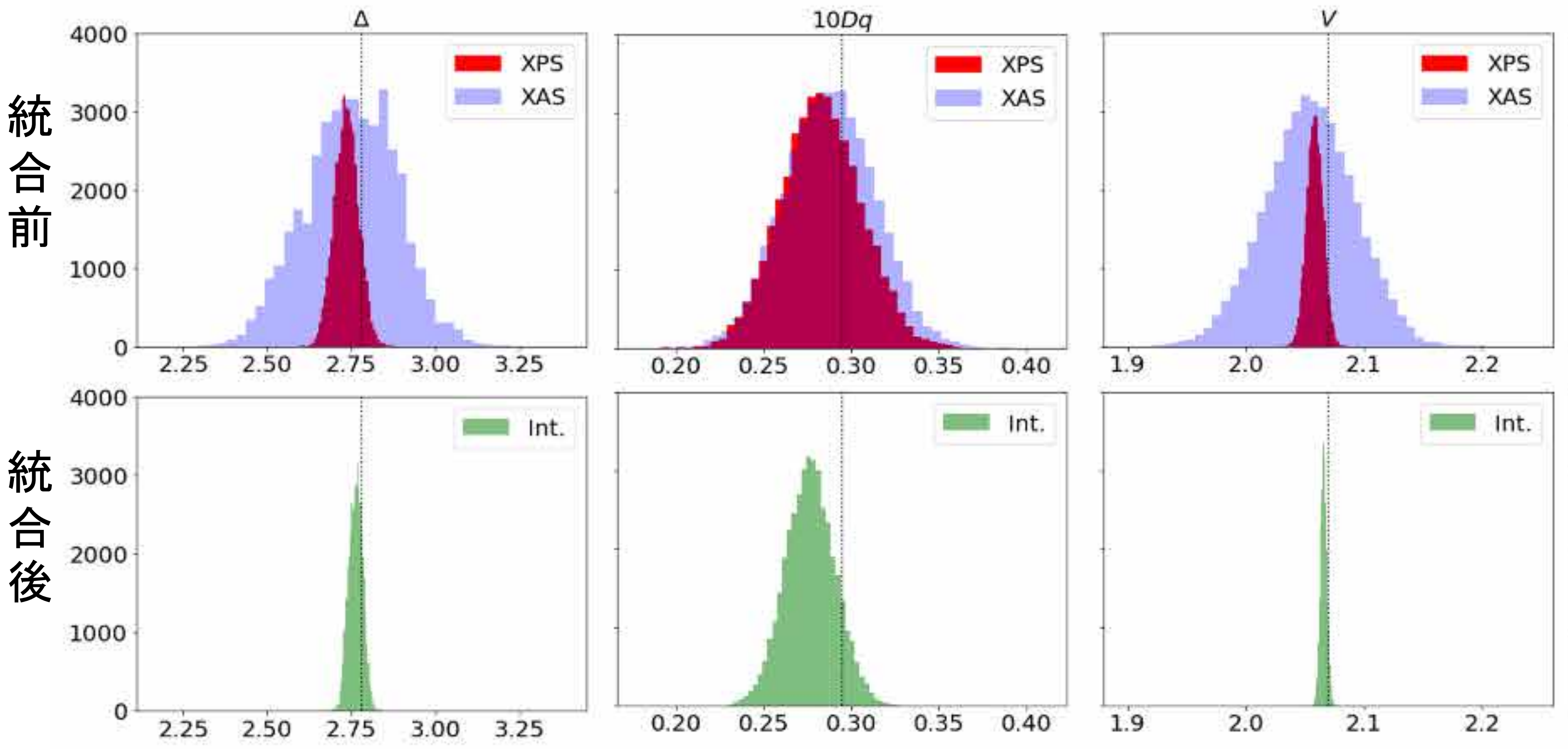
Δ





※ S/Nが同程度（約1%）になるようにガウシアンノイズの大きさを設定した。

ベイズ推定とベイズ統合の比較



ベイズ統合前後を比較すると、

・ 全てのパラメータで統合後の推定精度が向上した。⇒情報の統合に成功。

まとめ

- これまで主観的に統合するしかなかったXPSとXASスペクトルの同時解析において、客観的な統合法（ベイズ統合）を開発した。

- 標準物質NiOを想定したシミュレーションから、
ベイズ統合によってXPSとXASの相補的な情報を活用可能になり
パラメータの推定精度が向上することを明らかにした。

- ベイズの自由エネルギーを比較することにより、
ベイズ統合した解析モデルの方がXPSとXAS単体の解析モデル
よりも妥当であることを判明させた。

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  - 従来手法の破綻
  - ベイズ計測の導入
  - レプリカ交換法の適用
  - モデル選択
  - 計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開

  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSと XASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

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

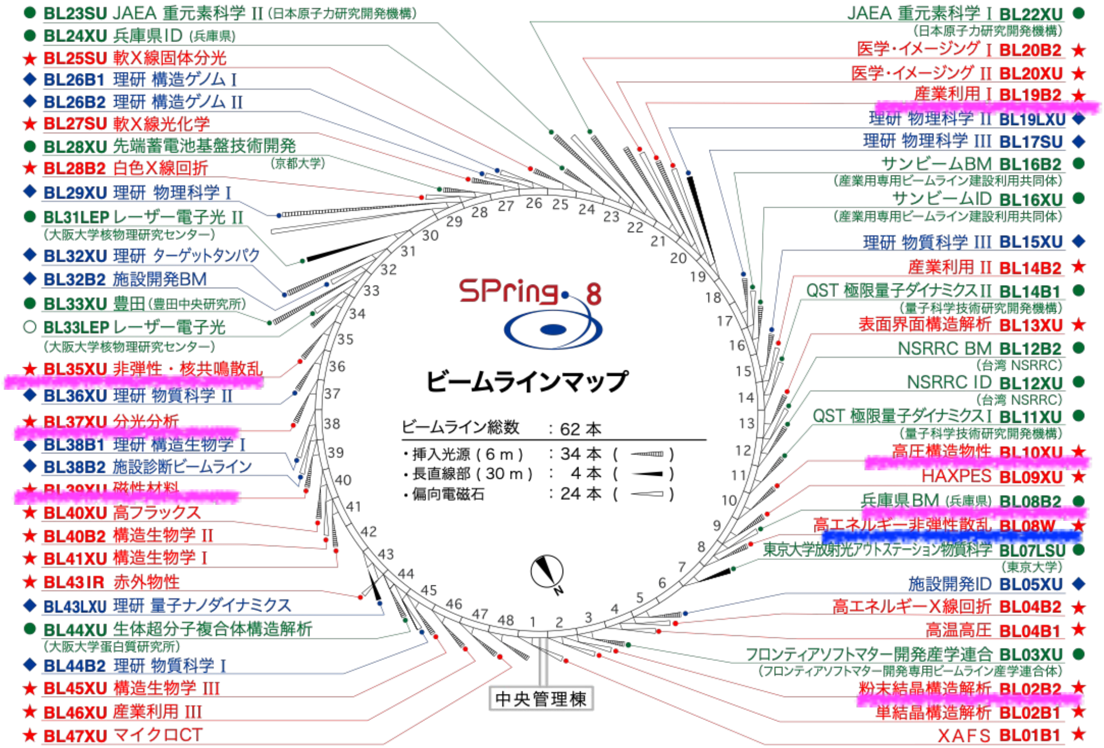
（シミュレーションはノートPCで実行できる場合が多い）

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  - 従来手法の破綻
  - ベイズ計測の導入
  - レプリカ交換法の適用
  - モデル選択
  - 計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  - NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSとXASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

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 26本が共用BL(JASRI)
現在14本がベイズ化完了

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

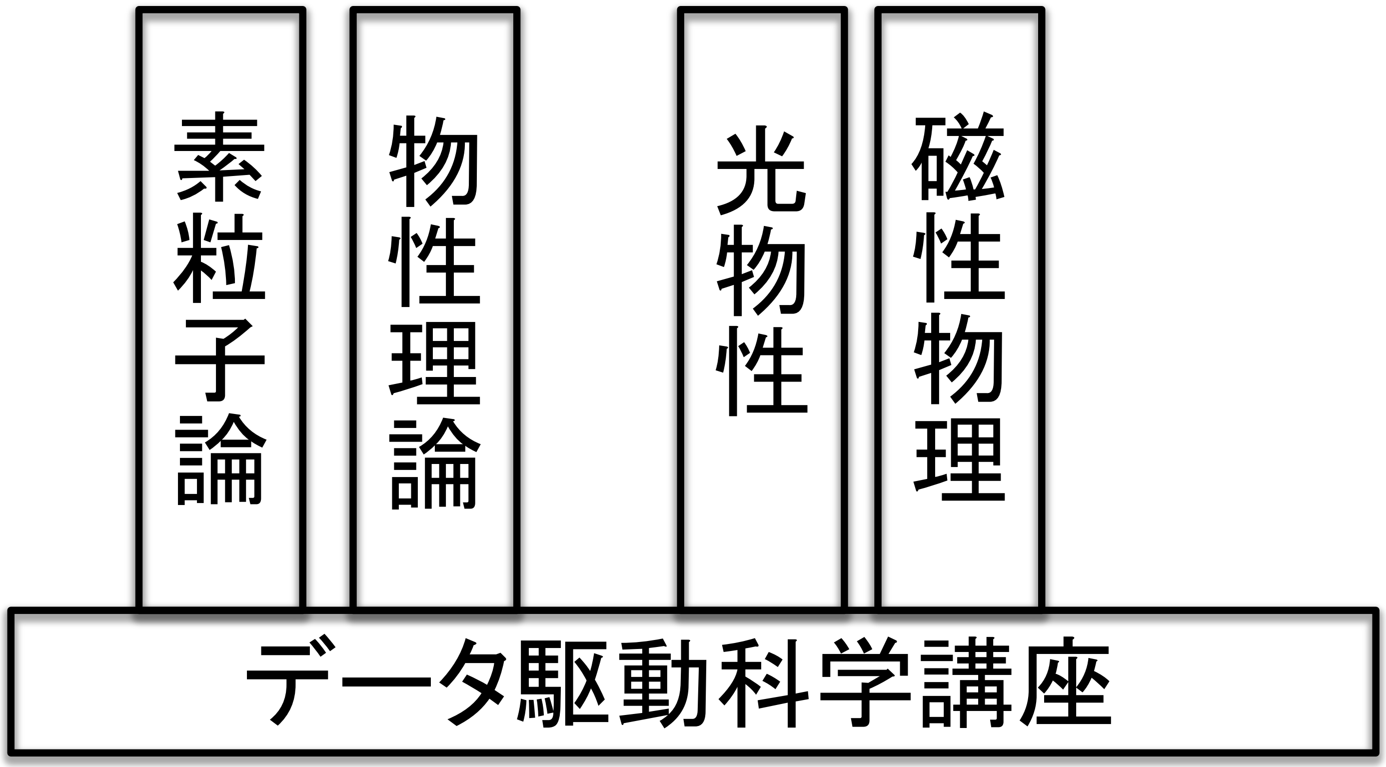
まとめ: ベイズ計測の導入による SPring-8のゲームチェンジング

- データ解析を以下の二つに完全に分離

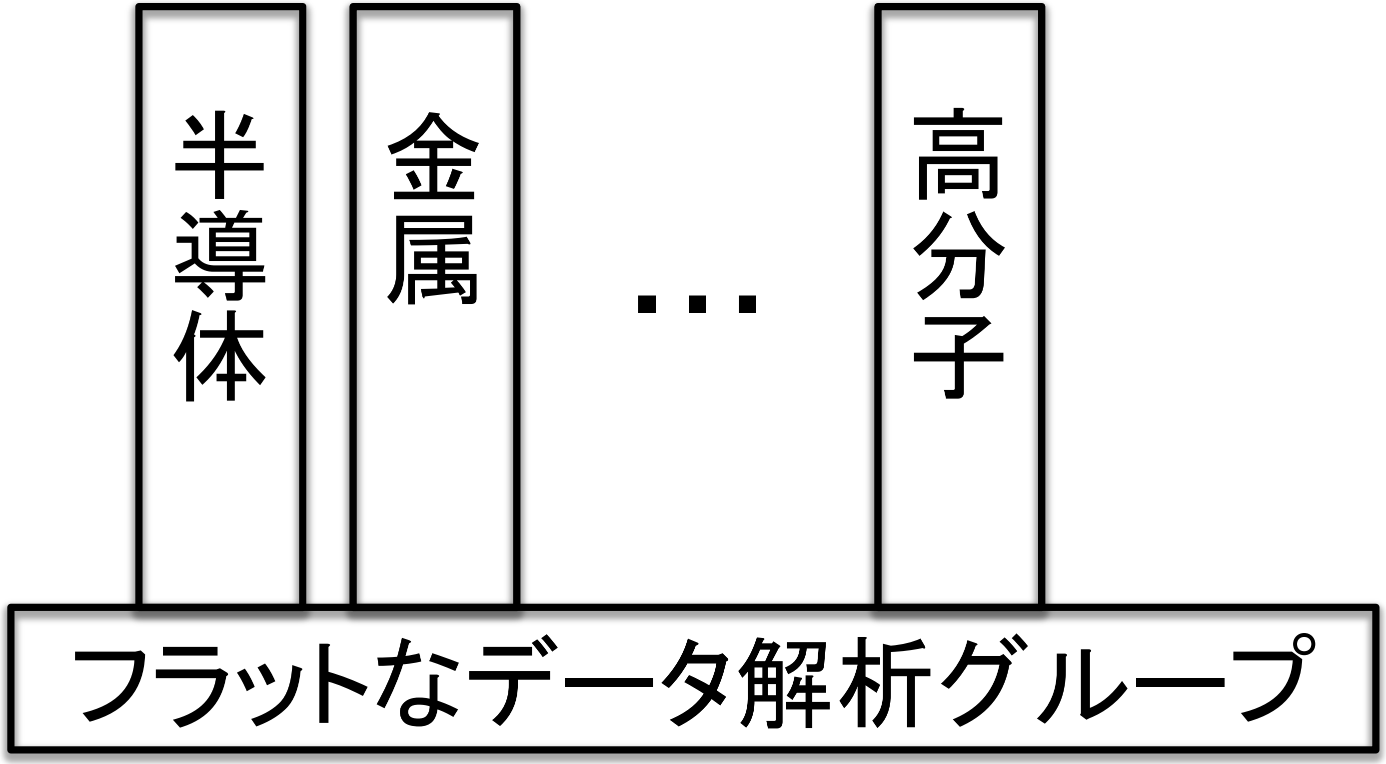
1. 系の物理モデルの複数提案
   – 研究者が自身の物理学的知見から提案
2. 提案された複数の系の物理モデルの候補から、ベイズ計測で、データだけから適切なモデルを選択
   – 研究者の恣意性なしにモデルを決定出来る

物理学科/各学科に
データ駆動科学一講座導入

理論物理　　実験物理



データ駆動科学による
R＆Dのフラット化と人材流動



ある縦組織に属していても、フラットなデータ解析グループのメンバーと共同作業することで、データ駆動科学の普遍性に接することができ、同じアルゴリズムが他の縦組織でも使用可能なことを感じることができ、その縦組織がリストラでなくなっても、他の縦組織で働くことができ、人材の流動化が加速される。

内容(3/3)

- 阪大理物修士課程での研究からベイズ計測へ
- スペクトル分解
  従来手法の破綻
  ベイズ計測の導入
  レプリカ交換法の適用
  モデル選択
  計測限界の理論的取り扱い
- ベイズ計測の展開: 多様な計測への系統的展開
  NMR、メスバウアー分光、小角散乱、比熱と磁化率のベイズ統合、XPSと XASのベイズ統合、ベイズ計測の適用例
- ベイズ計測の展開
  - Spring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめ今後の展望

まとめ

- 事実、データ駆動科学の情報数理基盤のベイズ推論とスパースモデリングは、民間企業での研究開発にも用いることができるだけでなく、これまで系統的に取り扱ってこられなかった民間企業の研究開発を、システマティックにする新しい枠組みである。
- データ駆動科学を習得した人材は、アカデミアだけでなく、民間企業においても、イニシアチブを取れる人材たる。
- これが、このデータ駆動科学教育プログラム(HD3)を開講した理由である。
- 受講生は、このような背景を理解して、授業に挑むことを期待する。