ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?

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

2024年5月8日(水) データ駆動科学シンポジウム
「ベイズ計測によるSPring-8のデータ解析高度化」
SPring-8/JASRI

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

自己紹介

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

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

本基調講演の目的

- 本当に、ベイズ計測を、SPring-8に導入するメリットはあるのだろうか?
  - ベイズ計測導入に関する疑問点
- ベイズ計測を取り込まなくても、日々のSPring-8でのデータ解析は問題なく回っている
- ことさら新しいことをする必要があるとは思えない。
- 昨今の流れでベイズ計測をSPring-8に導入せよという流れがあるが、その必要性を感じられない
- 最近流行のディープラーニングであれば、これまでのデータ解析でできなかった事ができそうだから、導入しも良い。
- ベイズ計測が何で、日常的に使っているデータ解析と何が違うかを、短時間で理解できる説明が必要。
- 日々の通常業務で多忙を極める我々を、説得不可能

自然科学全般におけるパラメータフィットの必要性

- SPring-8に関連する物質材料科学、生命科学だけでなく、多くの自然科学分野では、実験データを説明する数理モデルの中のフリーパラメータを求める必要がある。
- フリーパラメータサーチは実験のポストプロセスとして取り扱われる
- フリーパラメータサーチ独自の学理は存在しない状況である
- その結果、多くの研究者開発者にとっては、
- フリーパラメータサーチは厄介者扱い
- パラメータフィットの学理をベイズ計測で構築

ベイズ計測理解への最短パス

- ベイズ計測が何で、日常的に使っているデータ解析と何が違うか
- ベイズ計測を勉強すれば、わかるという　抽象思考を期待する態度ではだめ

- どのようなアプローチが必要か

- 抽象的な議論ではなく、具体的対象を説明
  - 最小二乗法$y=ax+b$へのベイズ計測の導入
- この例を多くの計測に対応できること例示
  - スペクトル分解、小角散乱、メスバウアー分光等
  - SPring-8全ビームラインベイズ化計画

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

ベイズ計測と利点の理解のために $y=ax+b$へのベイズ計測の導入

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

ベイズ計測

- 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

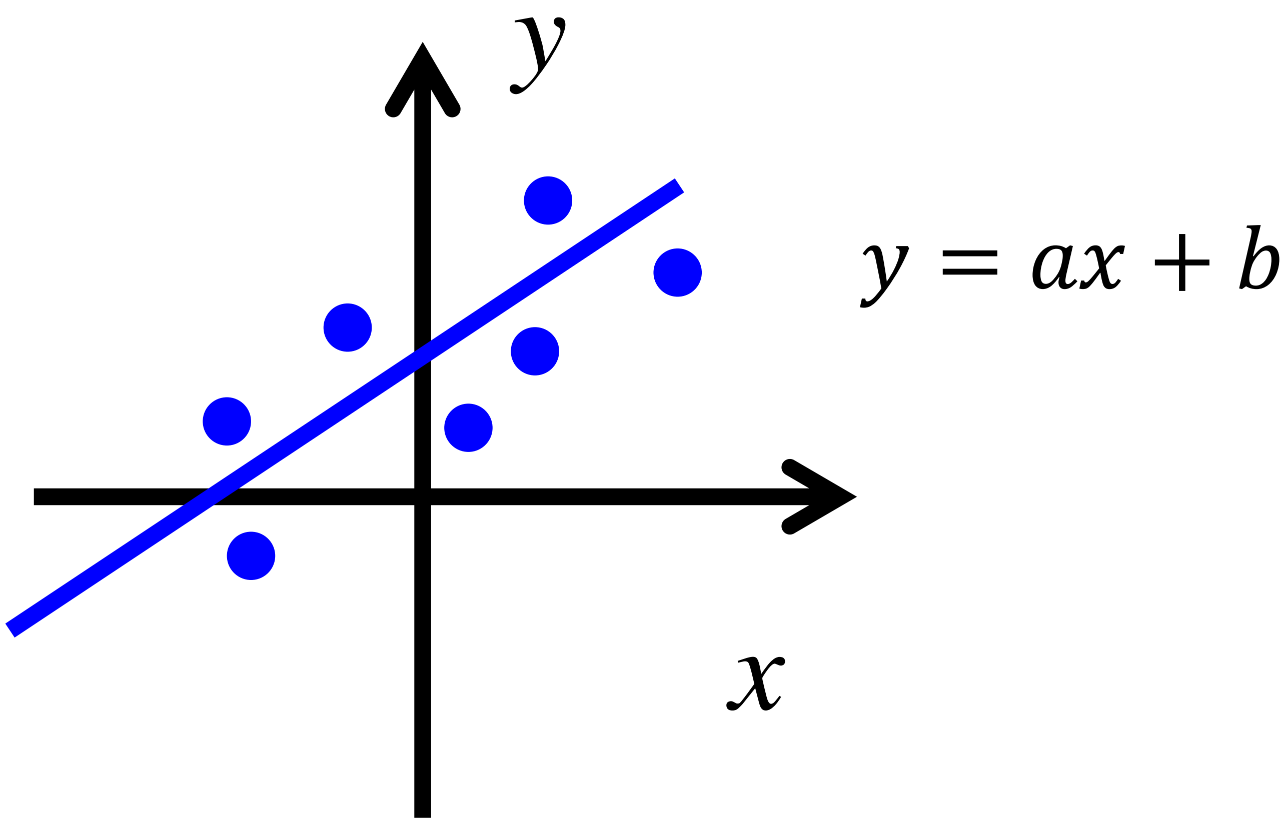
- 従来の最小二乗法によるパラメータフィットでは、1.の物理パラメータの点推定しか行えない
- パラメータフィットを超えて: ベイズ計測では、取り扱えることが質的に異なる

ベイズ計測の利点 $y=ax+b$の取り扱いを通じて

- 従来の最小二乗法
  - 1.物理パラメータの点推定
- ベイズ計測
- 1.物理パラメータの確率分布推定
- 2.データからのベイズ的モデル選択
- 3. ベイズ統合: 今回は説明を省略
  - 水牧先生の基調講演

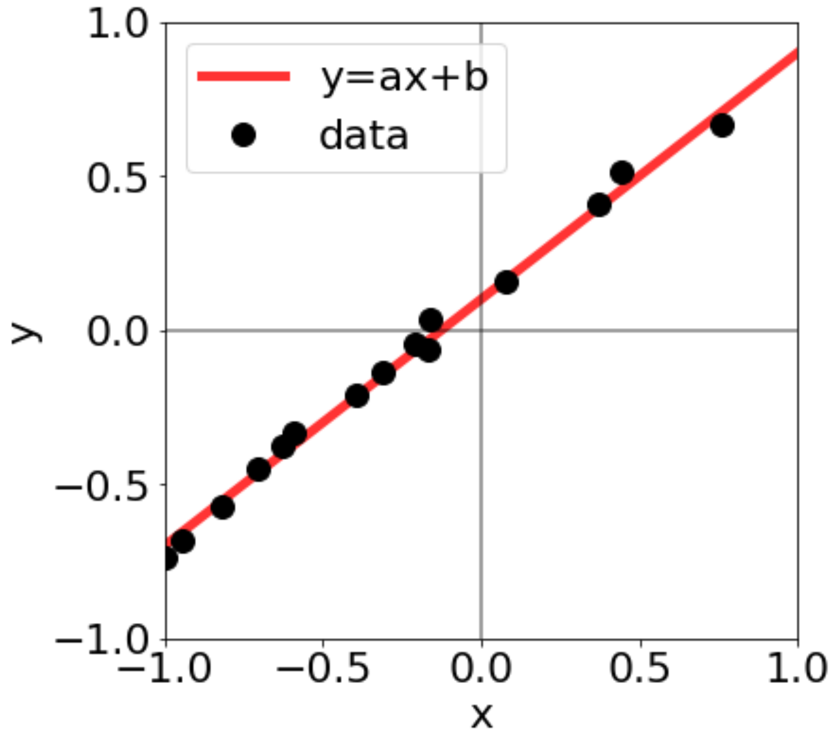
ベイズ計測の利点
$y=ax+b$の取り扱いを通じて

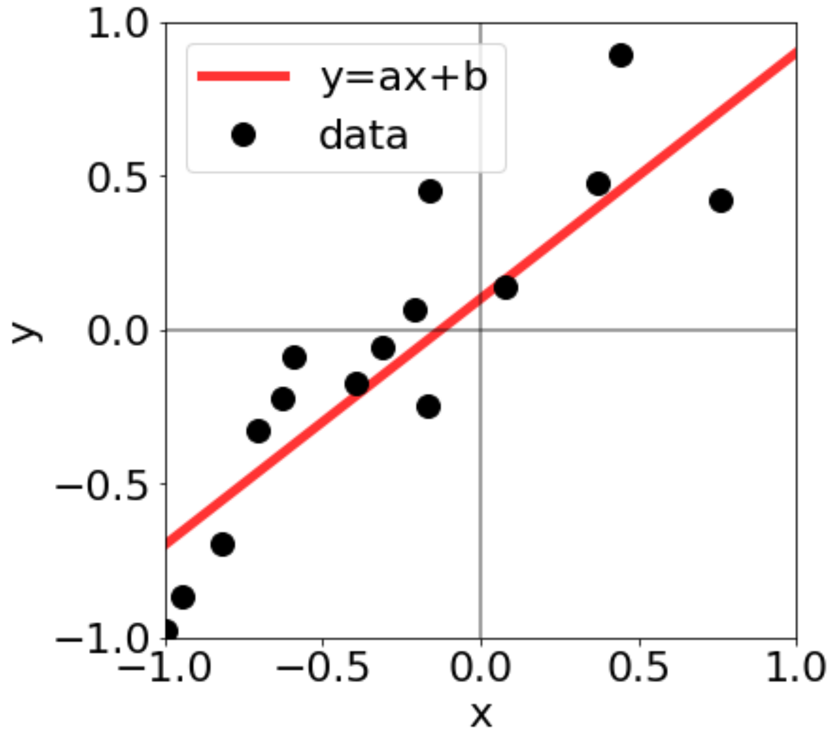
現状でも用いられている最も簡単な例



傾き a： 系の線形応答、バネ定数、電気伝導度、誘電率

ベイズ計測の利点
y=ax+bの取り扱いを通じて





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

$y=ax+b$の最小二乗法

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

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

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

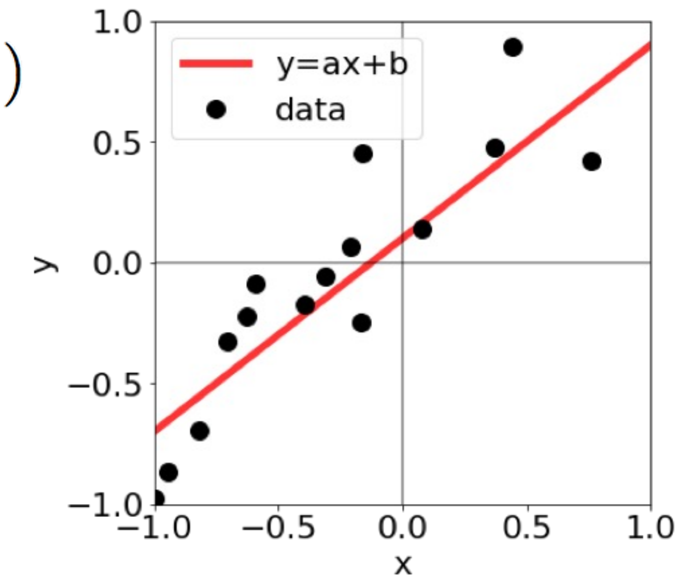
$$E(a,b)=\frac{1}{2}\left(\overline{x^2}\left(a-\frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}\right)^2+(b-\bar{y})^2-\frac{\overline{xy}^2}{\overline{x^2}}-\bar{y}^2+\overline{y^2}\right)$$

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

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

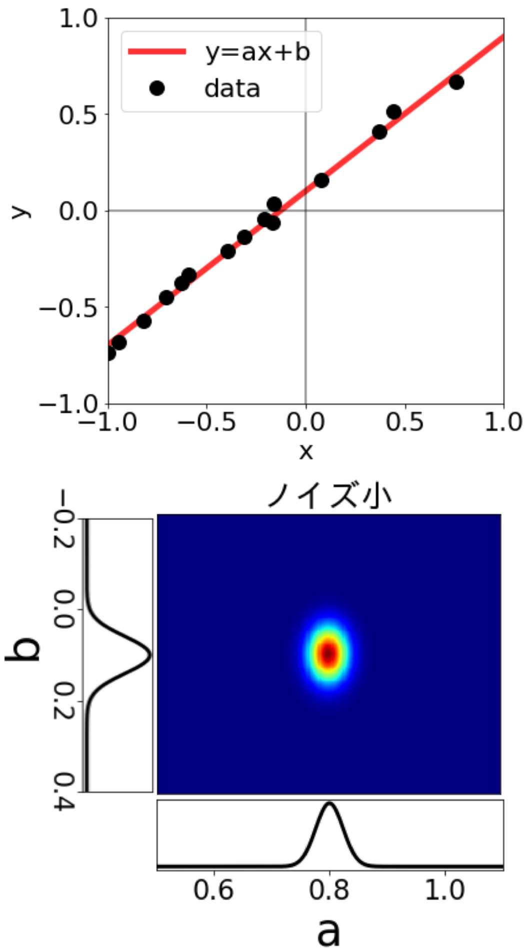
平均：$\bar{y}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i$，分散：$\overline{x^2}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

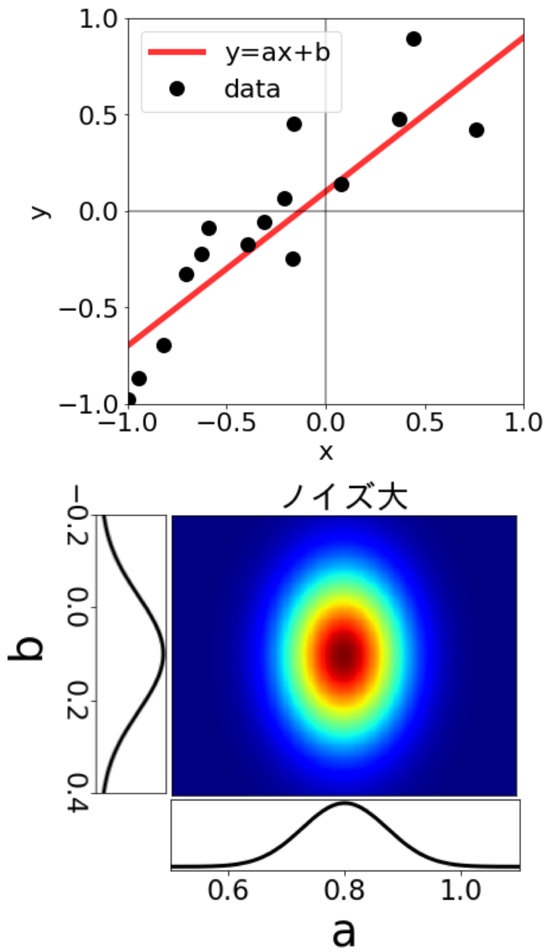
$$\overline{xy}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_iy_i$$



ベイズ計測の利点
$y=ax+b$の取り扱いを通じて

結論: 神器1 パラメータの事後確率推定





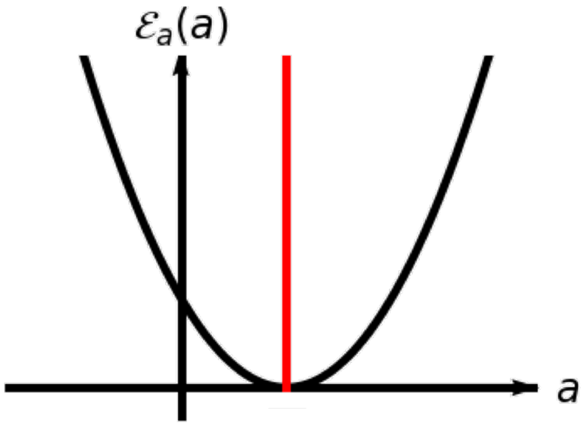
y=ax+bの最小二乗法

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

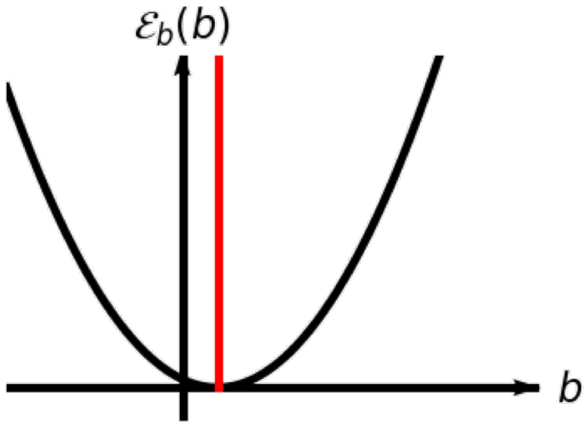
$$a_0 = \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}} \quad b_0 = \overline{y}$$

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

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



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



$$b_0 = \overline{y}$$

$y=ax+b$の最小二乗法

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

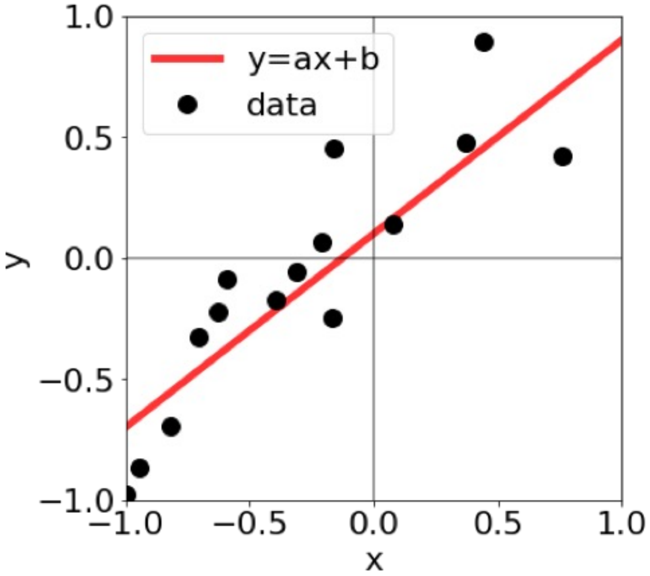
二乗誤差$E(a,b)$を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

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

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



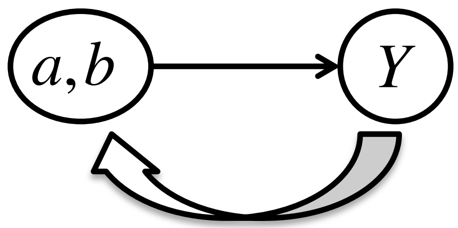
平均：$\bar{y}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i$，分散：$\overline{x^2}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

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

ベイズの定理による
神器1: パラメータの事後確率推定

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

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

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

神器1: パラメータの事後確率推定

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

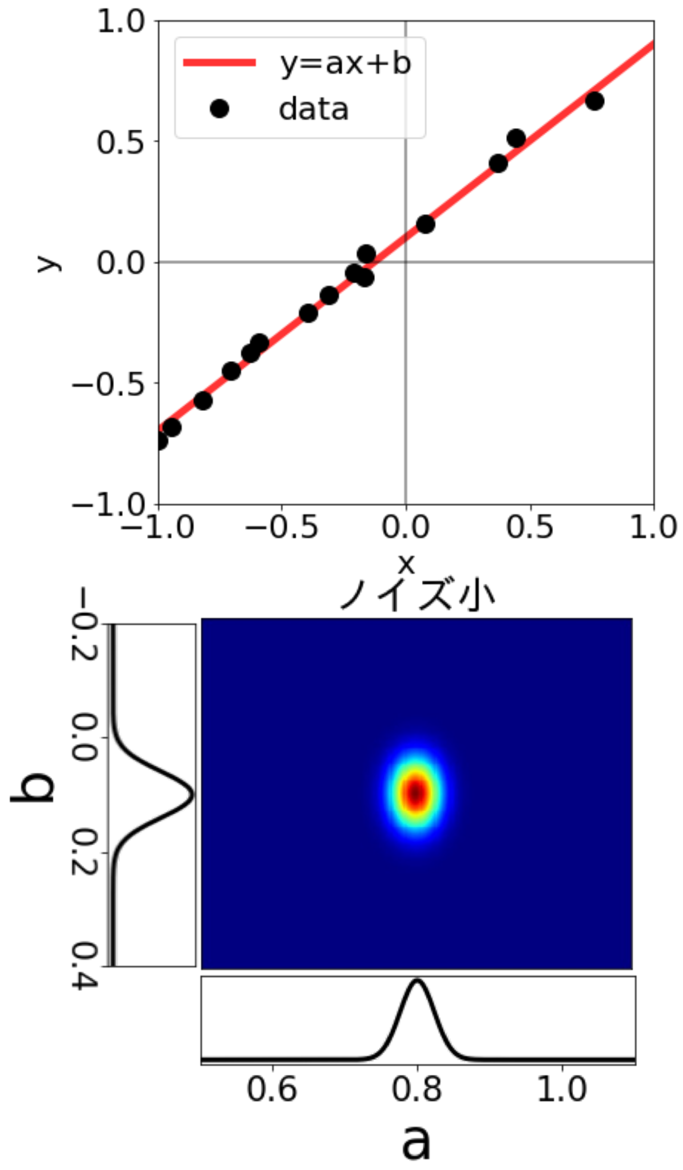
$$p(n_i) = p(y_i|a,b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

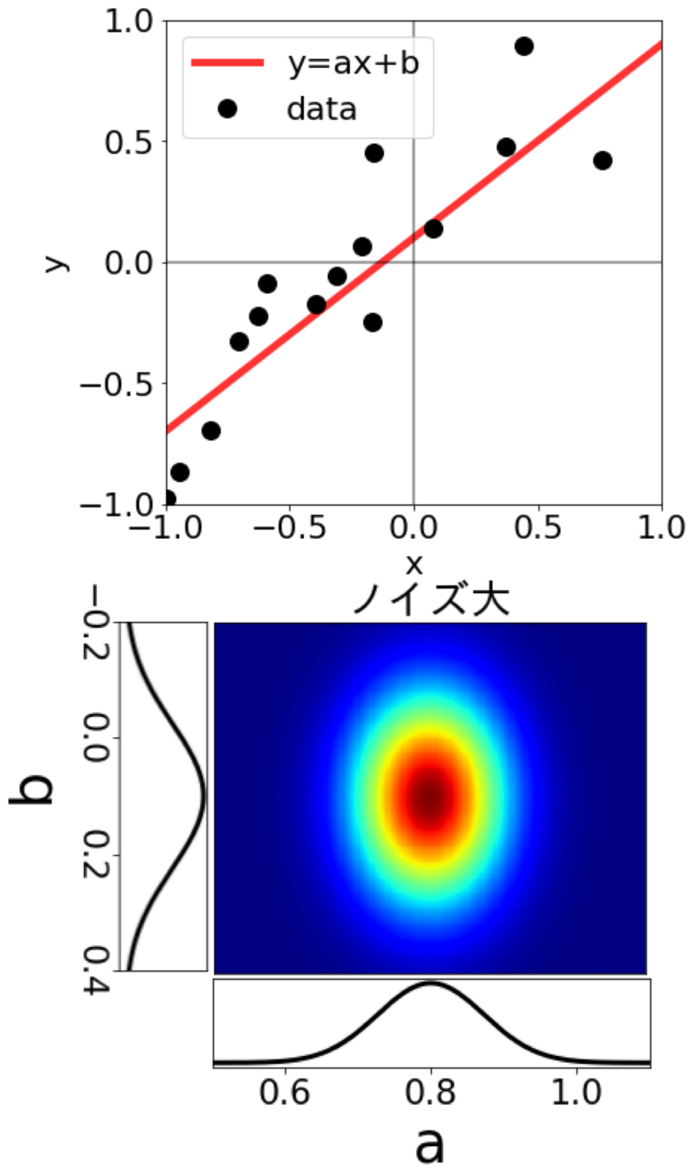
$$\begin{aligned}
p(Y|a,b) &= \prod_{i=1}^{N} p(y_i|a,b) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right)
\end{aligned}$$

神器1: パラメータの事後確率推定

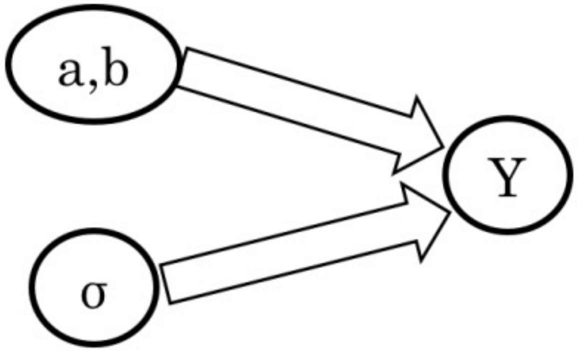
$$
\begin{aligned}
p(a,b|Y) &= \frac{p(Y|a,b)p(a,b)}{p(Y)} \propto p(Y|a,b) \\
&= \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}\Big(\mathcal{E}_a(a)+\mathcal{E}_b(b)+E(a_0,b_0)\Big)\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}\Big(\mathcal{E}_a(a)+\mathcal{E}_b(b)\Big)\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2+\frac{N}{2\sigma^2}(b-b_0)^2\right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

神器1: パラメータの事後確率推定





神器1: パラメータの事後確率推定 ノイズ分散推定



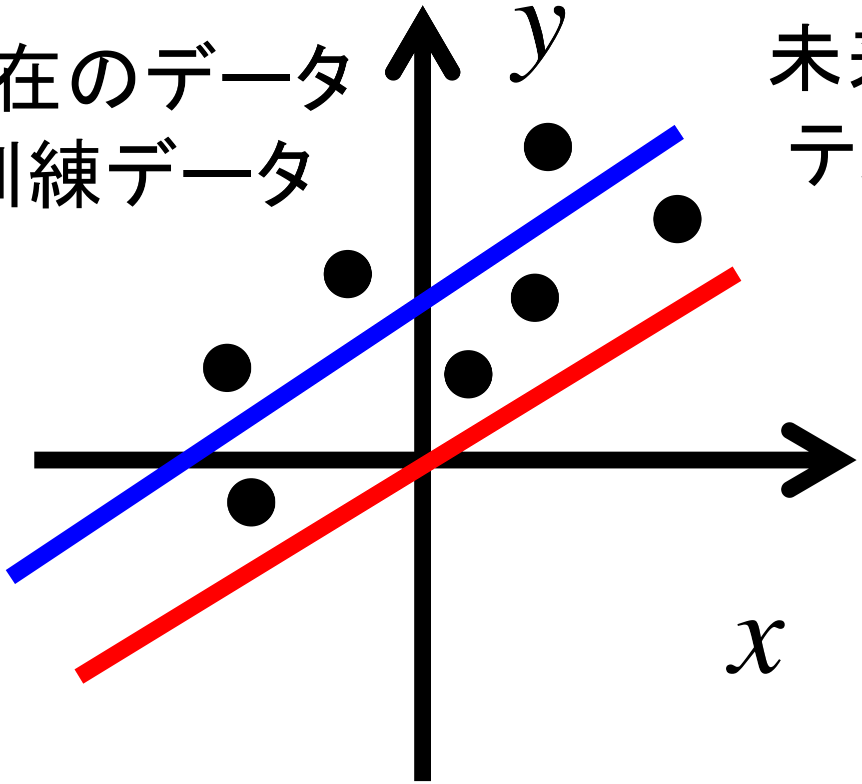
$$
\begin{aligned}
p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb\, p(Y|a,b,\sigma^2) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \int dadb \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \left\{\exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0,b_0)\right) + \int da \exp\left(-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2\right)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

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

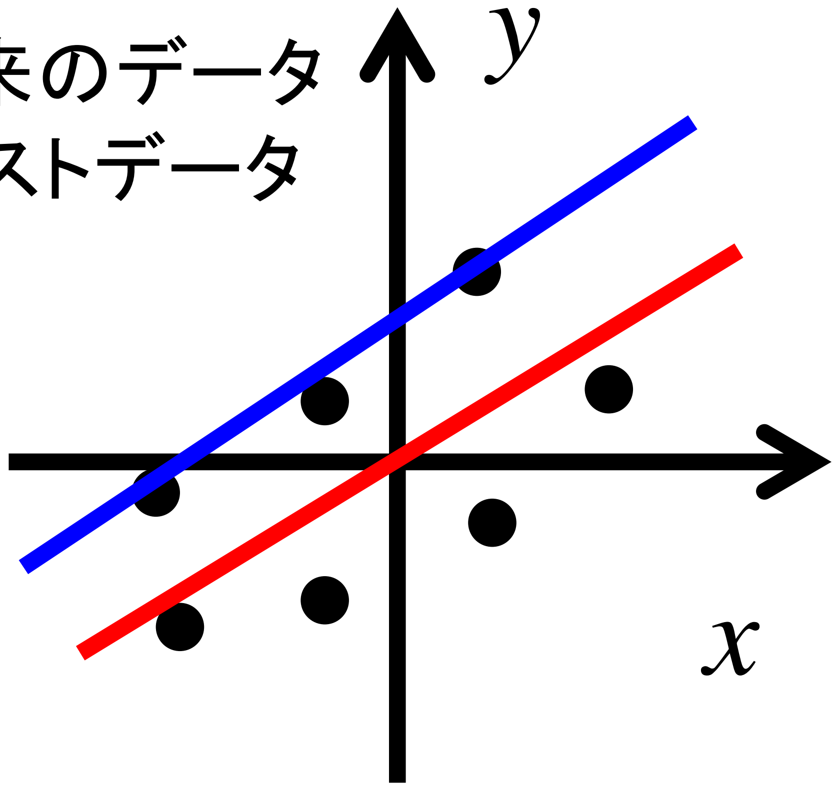
問題意識　神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$か$y=ax+b$か?

現在のデータ
訓練データ



未来のデータ
テストデータ

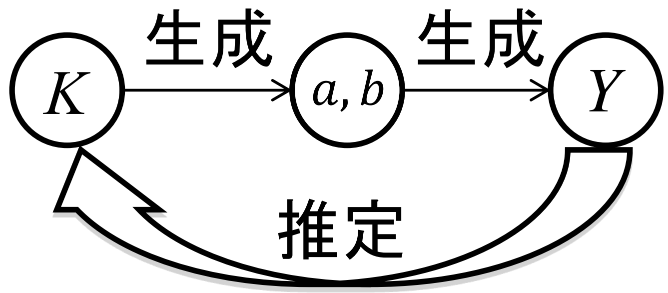


$y=ax+b$: 訓練誤差小
訓練誤差
ノイズに過学習

$y=ax$: 訓練誤差小
汎化誤差

モデル選択できる理由:汎化誤差は観測ノイズに依存する

神器2: ベイズ的モデル選択



K :モデル

a,b :傾き 切片

Y :観測データ

1. 欲しいのは　$p\left(K \mid Y\right)$

2. θがないぞ

3. $p\left(K,\theta,Y\right)$ の存在を仮定

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

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

4. 無駄な自由度の系統的消去:周辺化，分配関数

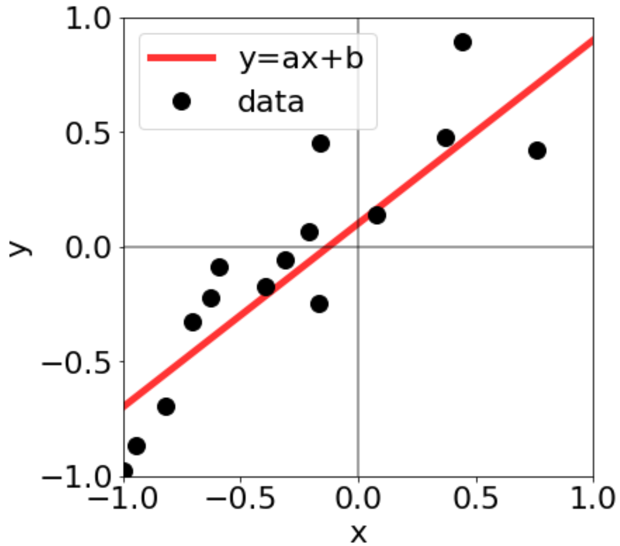
$$p(K,Y)=\int p\left(K,\theta,Y\right)d\theta$$

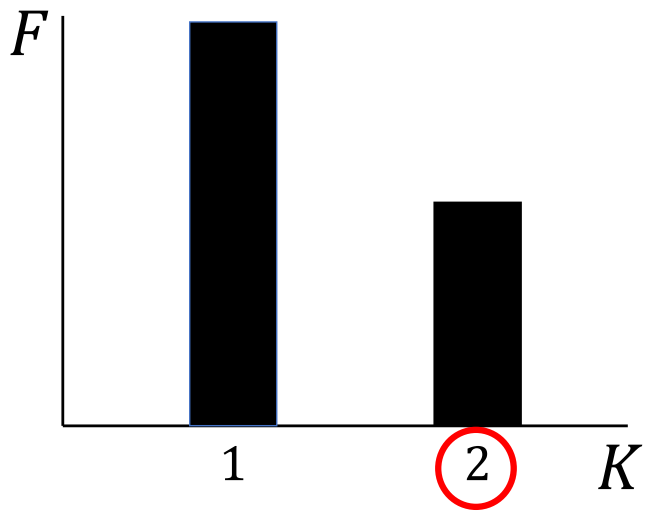
$$p\left(K \mid Y\right)=\frac{p\left(Y \mid K\right)p\left(K\right)}{p\left(Y\right)}\propto p\left(K\right)\int \exp\left(-nE\left(\theta\right)\right)p\left(\theta\right)d\theta$$

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

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: ベイズ計測三種の神器 $y=ax+b$の解析取り扱いを通じて

- 従来の最小二乗法
  - 1.物理パラメータの点推定
- ベイズ計測

1. 物理パラメータの確率分布推定
2. データからのベイズ的モデル選択
3. ベイズ統合: 今回は説明を省略
   - 水牧先生の基調講演

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- ベイズ計測三種の神器

1. 物理パラメータの確率分布推定
2. データからのベイズ的モデル選択
3. ベイズ統合: 今回は説明を省略
   - 水牧先生の基調講演

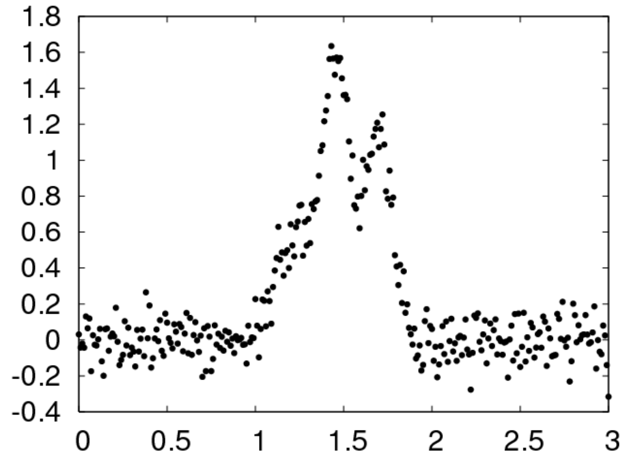
- 以下の具体例でアナロジーの成立を議論
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱

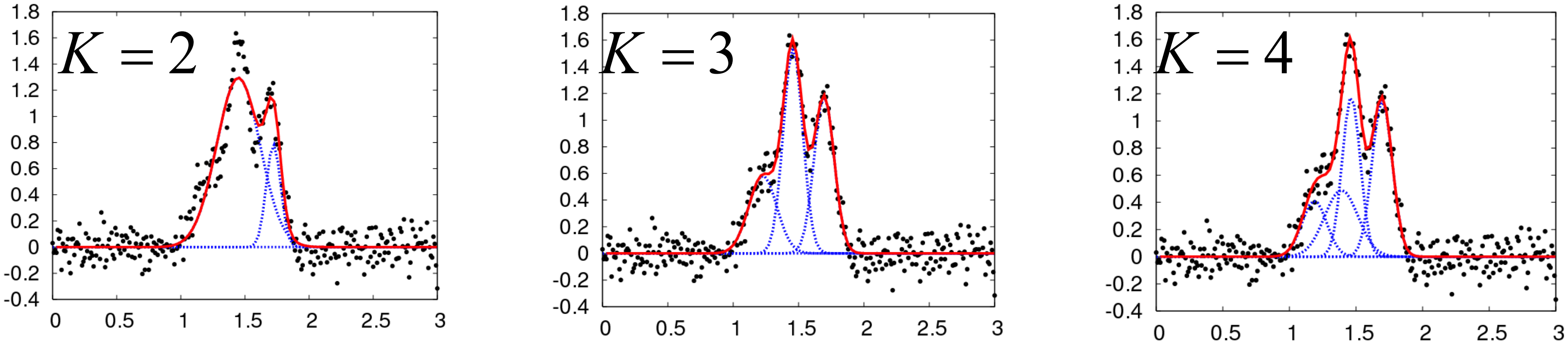
SPring-8全ビームライン ベイズ化計画

- SPring-8で行われているのは$y=ax+b$より遥かに複雑な非線形系に対する計測
- その多種多様な複雑な計測に対しても、$y=ax+b$で述べたベイズ計測三種の神器は通用するかを実証的に調べる必要がある
- 最も愚直であるが、力強い実証方法は、Spring-8の全てのビームラインにベイズ計測を導入し、$y=ax+b$のアナロジーが成り立つかを議論することである
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画の意図である

非線形系に対しても
$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- スペクトル分解
  - 神器1: パラメータの事後分布推定

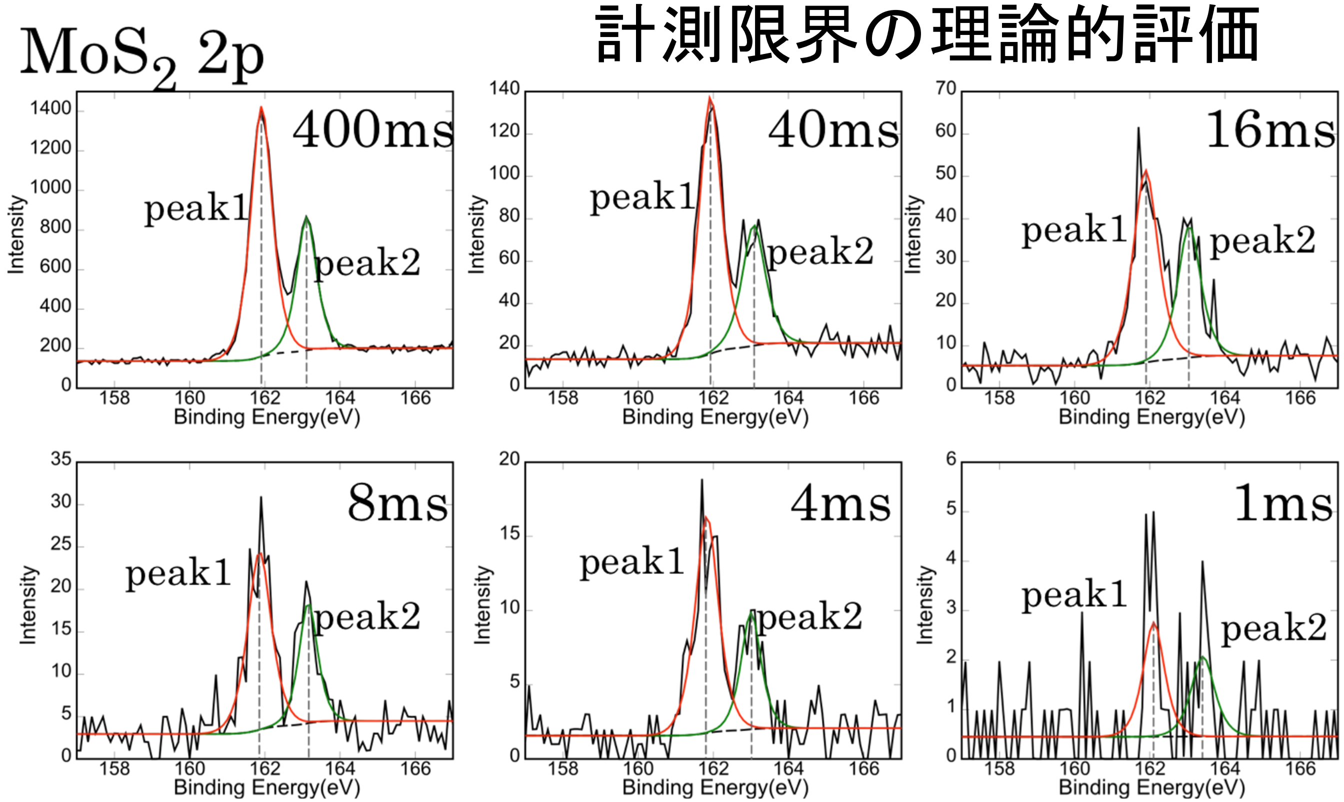




Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- スペクトル分解 神器1: パラメータの事後分布推定
  計測限界の理論的評価

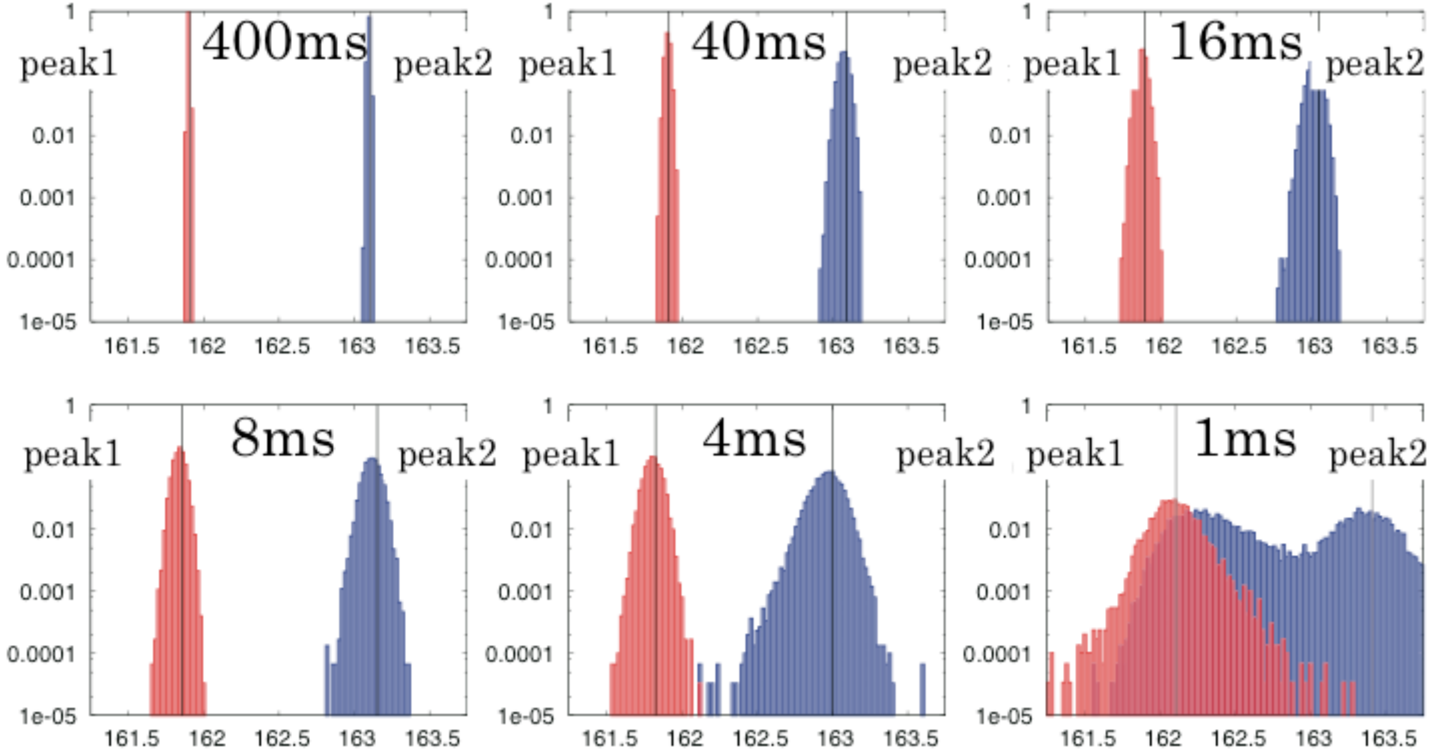


Nagata, Muraoka, Mototake, Sasaki, and Okada " Bayesian Spectral Deconvolution Based on Poisson Distribution: Bayesian Measurement and Virtual Measurement Analytics (VMA)", *JPSJ*. 88(4) (2019)

非線形系に対しても
$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- スペクトル分解 神器1: パラメータの事後分布推定

計測限界の理論的評価

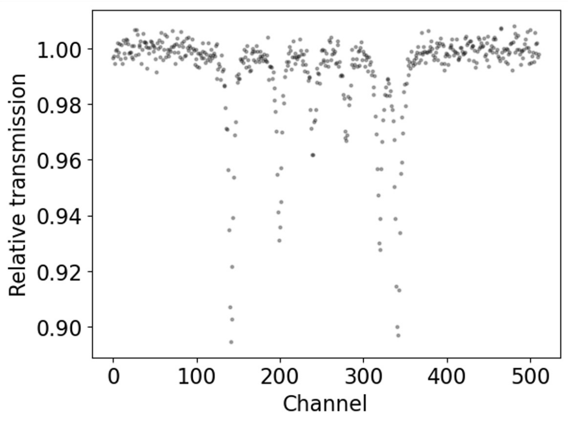


Nagata, Muraoka, Mototake, Sasaki, and Okada " Bayesian Spectral Deconvolution Based on Poisson Distribution: Bayesian Measurement and Virtual Measurement Analytics (VMA)", *JPSJ*. 88(4) (2019)

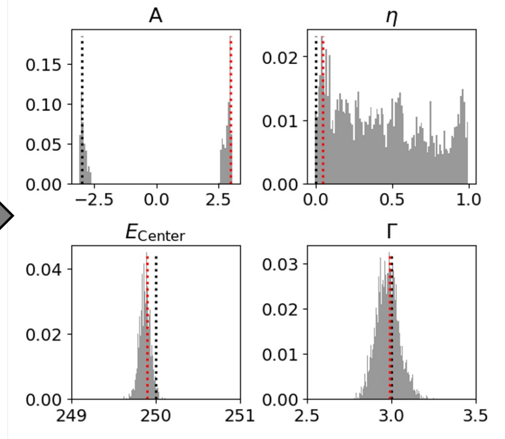
非線形系に対しても y=ax+bのアナロジーは成り立つか?

- メスバウアー分光: 生成モデルがハミルトニアンで記述される場合の典型例

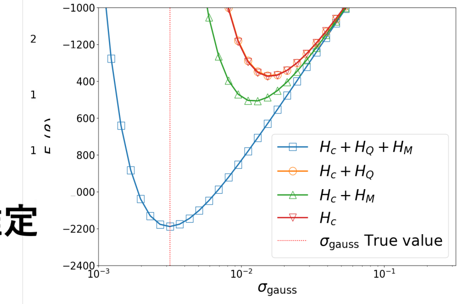
測定データ



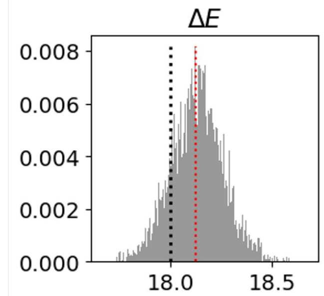
事後分布の推定



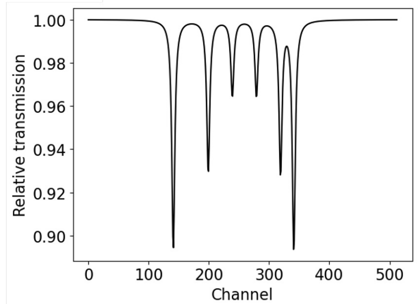
ハミルトニアンの推定



別の物理量の事後分布



フィッティング

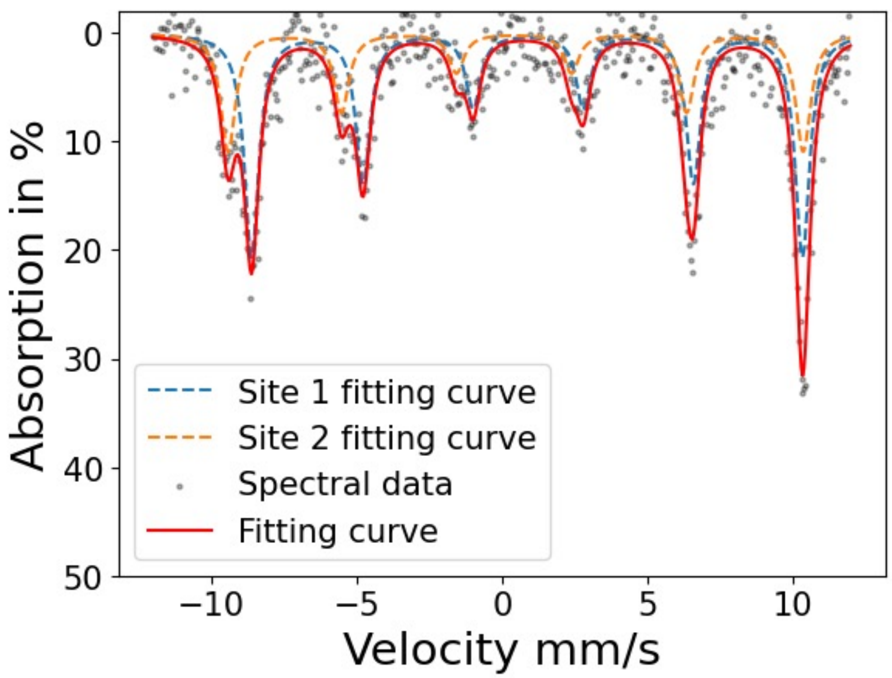


Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada, *JPSJ*, 91,W104002 (2022)

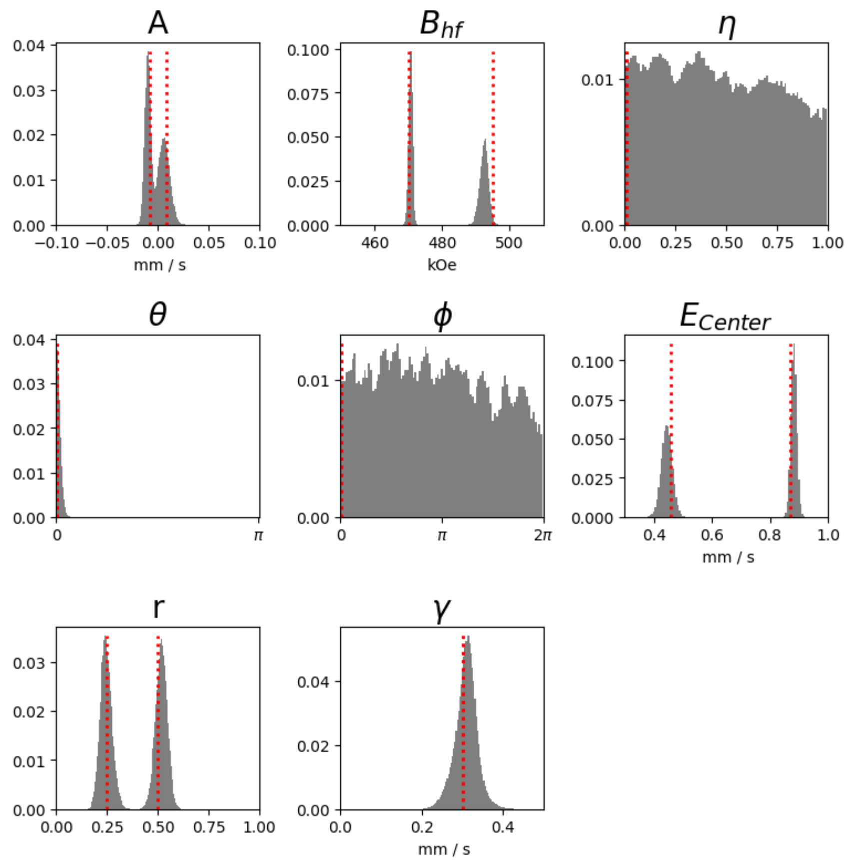
非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- メスバウアー分光
- 神器1: パラメータの事後分布推定

フィッティング結果



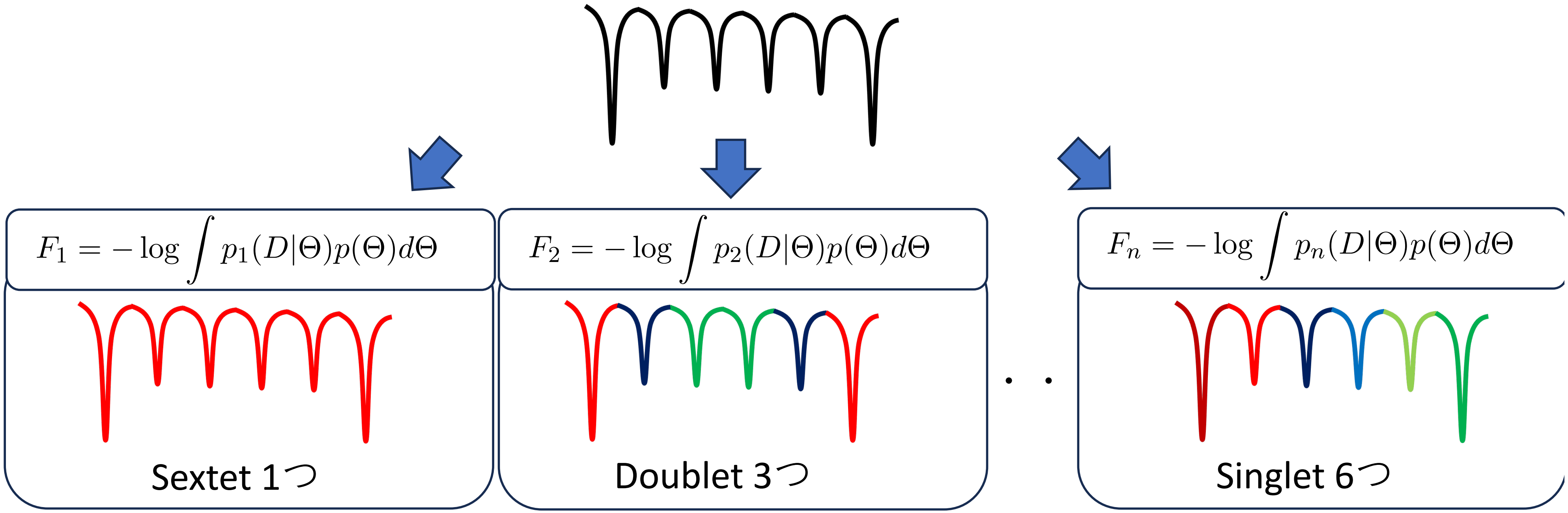
事後分布（赤い点線が実験値）



非線形系に対しても
y=ax+bのアナロジーは成り立つか?

- メスバウアー分光
- 神器2: モデル選択: ハミルトニアン推定

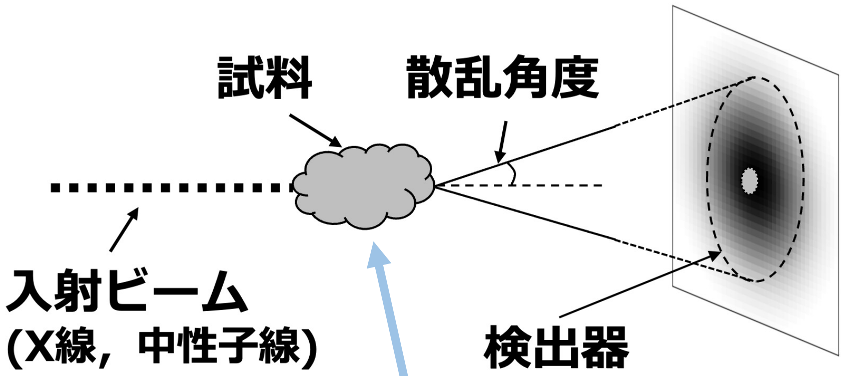
さまざまな物理モデルでのベイズ自由エネルギーを計算

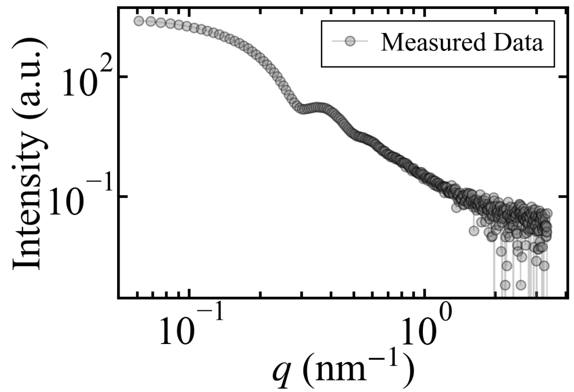


最もベイズ自由エネルギーの小さいモデルを選ぶ

非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

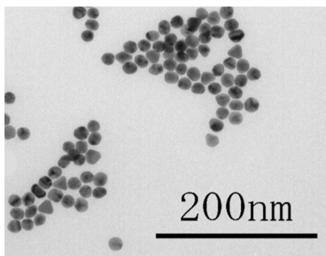
- 小角散乱





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 …



出典: [1]

データ解析

1. 散乱強度モデルを設定

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

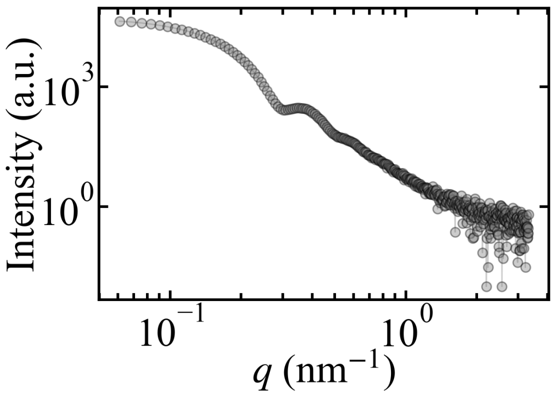
2. モデルパラメータ推定

   粒径R_M→10 nm

非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- 小角散乱

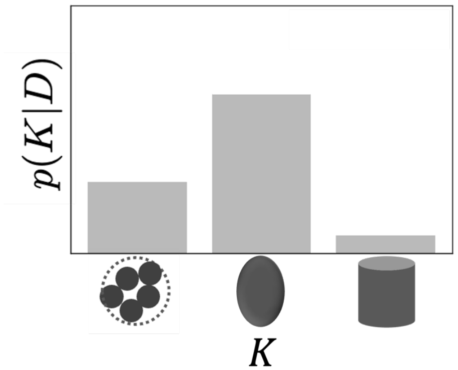
散乱強度−散乱ベクトル：D



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

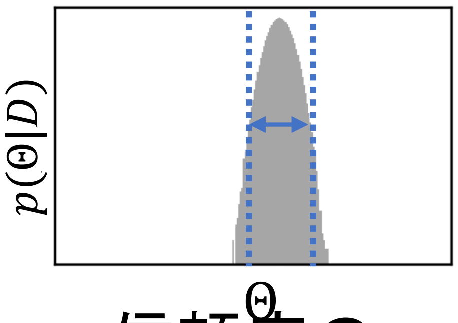


モデルの選択

パラメータ推定

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

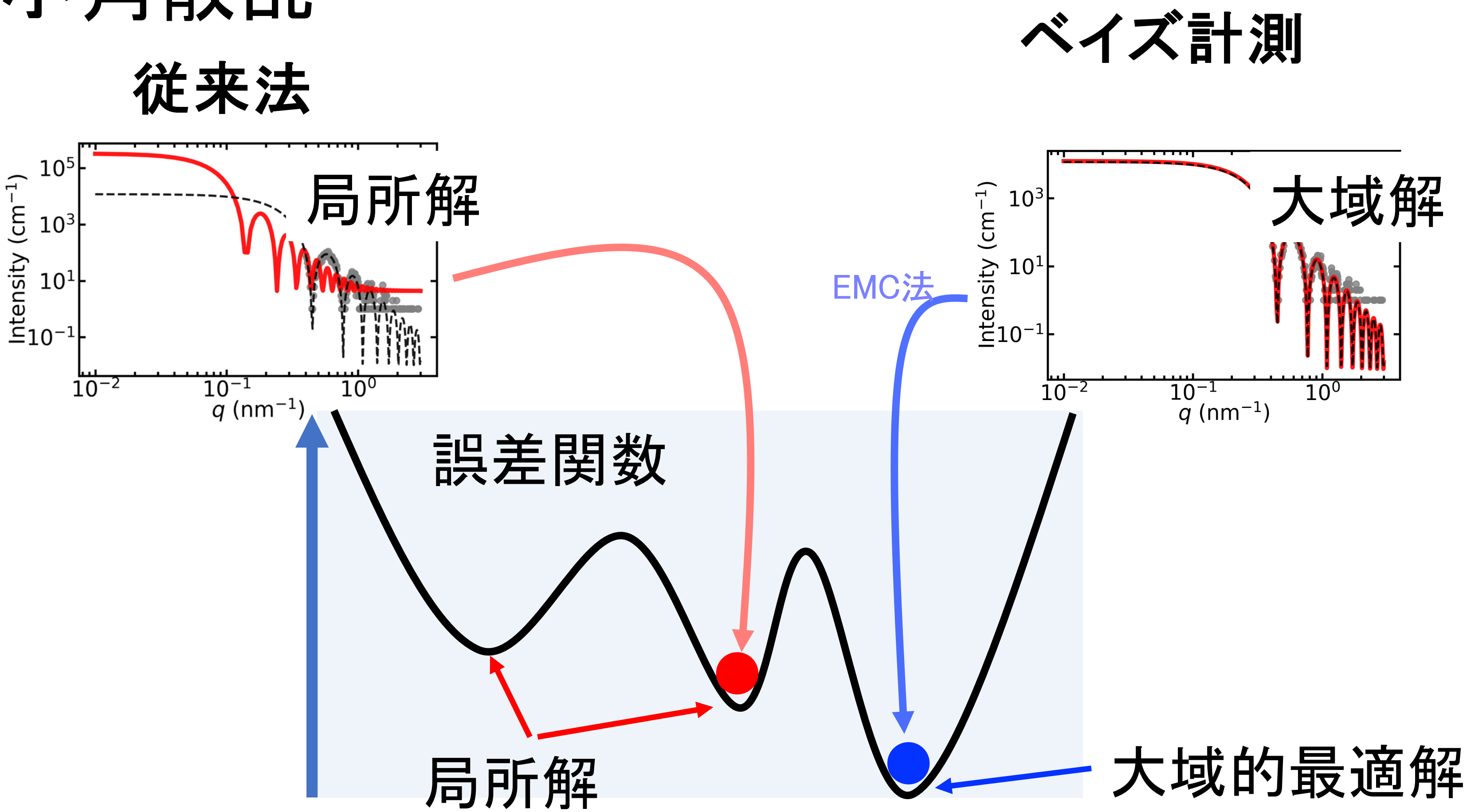
試料の大きさや密度のパラメータを推定



信頼度の定量評価が可能

非線形系に対しても y=ax+bのアナロジーは成り立つか?

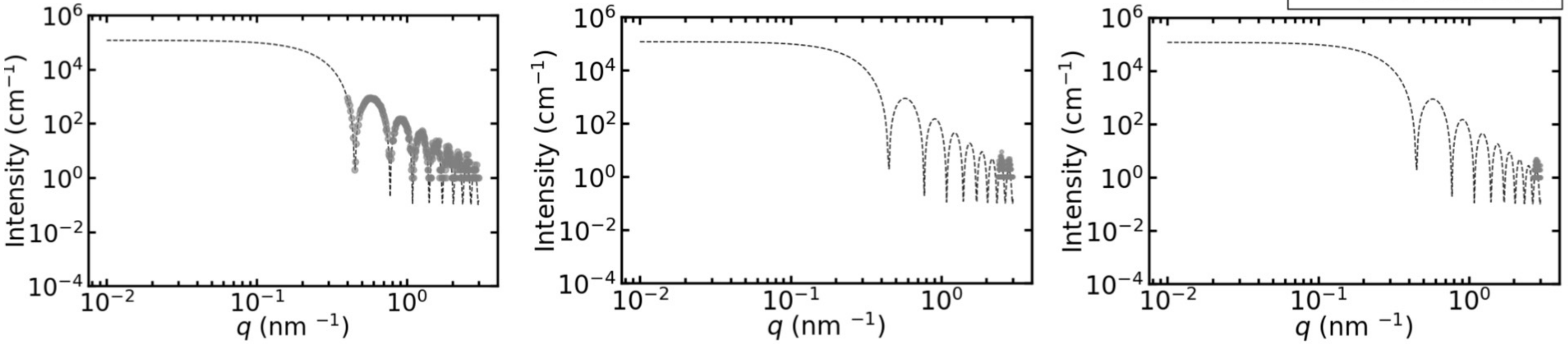
- 小角散乱



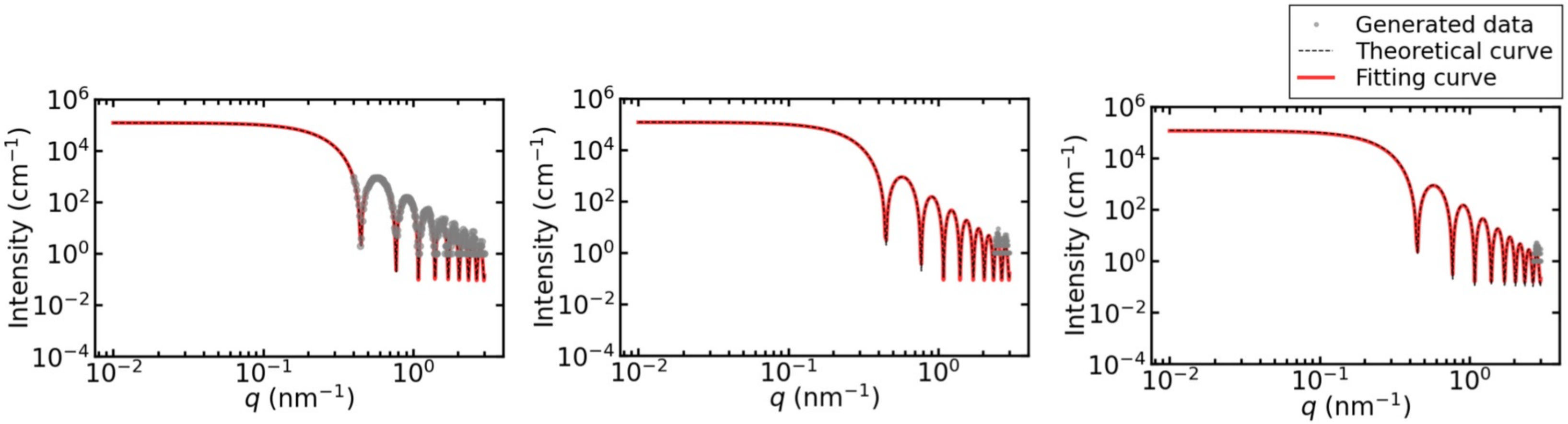
Hukushima　and Nemoto., *JPSJ*, 65.6 (1996): 1604

非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

- 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定



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

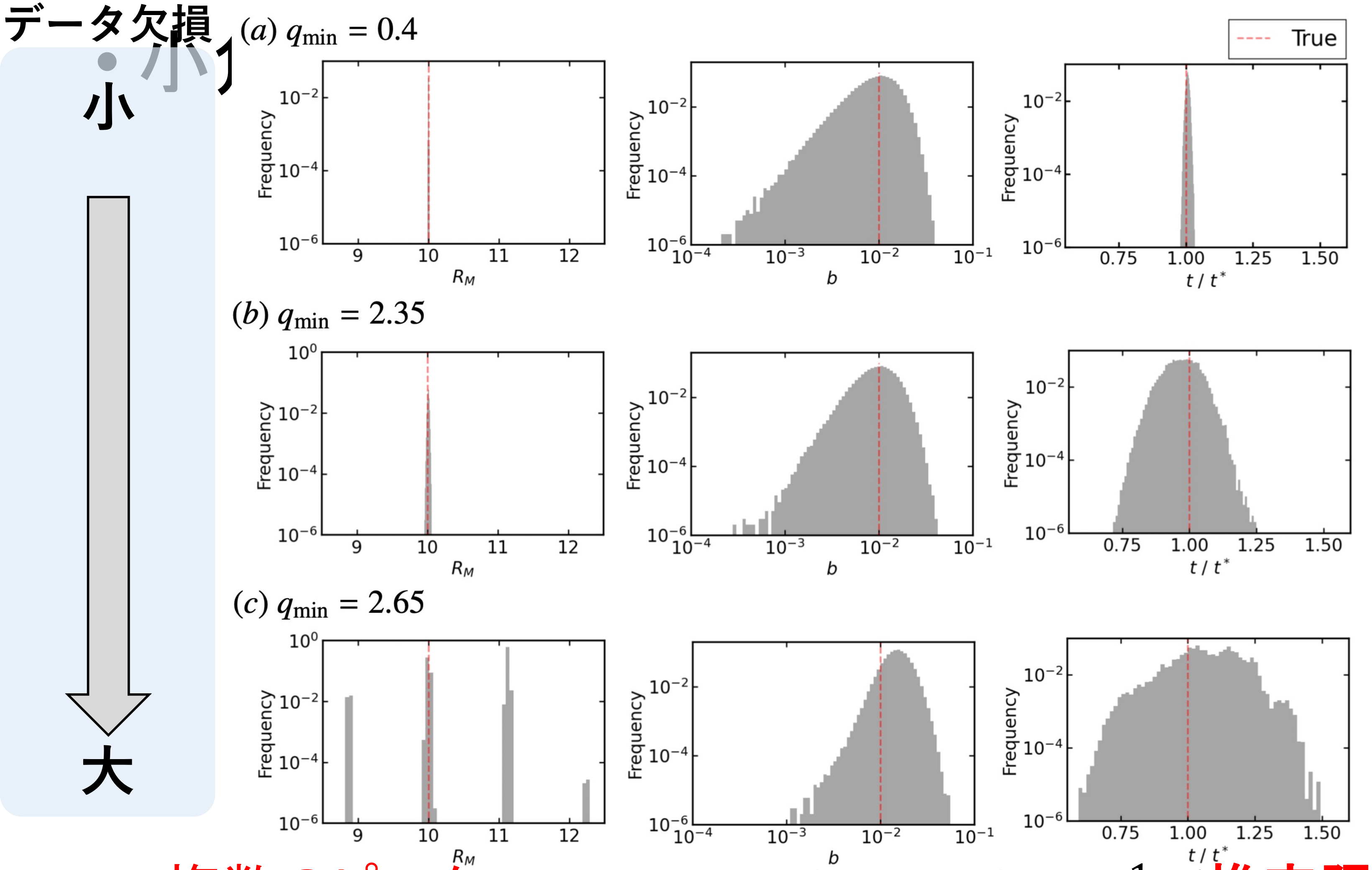


(a) $q_{\min} = 0.4$ nm^{-1} (b) $q_{\min} = 2.35$ nm^{-1} (c) $q_{\min} = 2.65$ nm^{-1}

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

非線形系に対しても $y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?

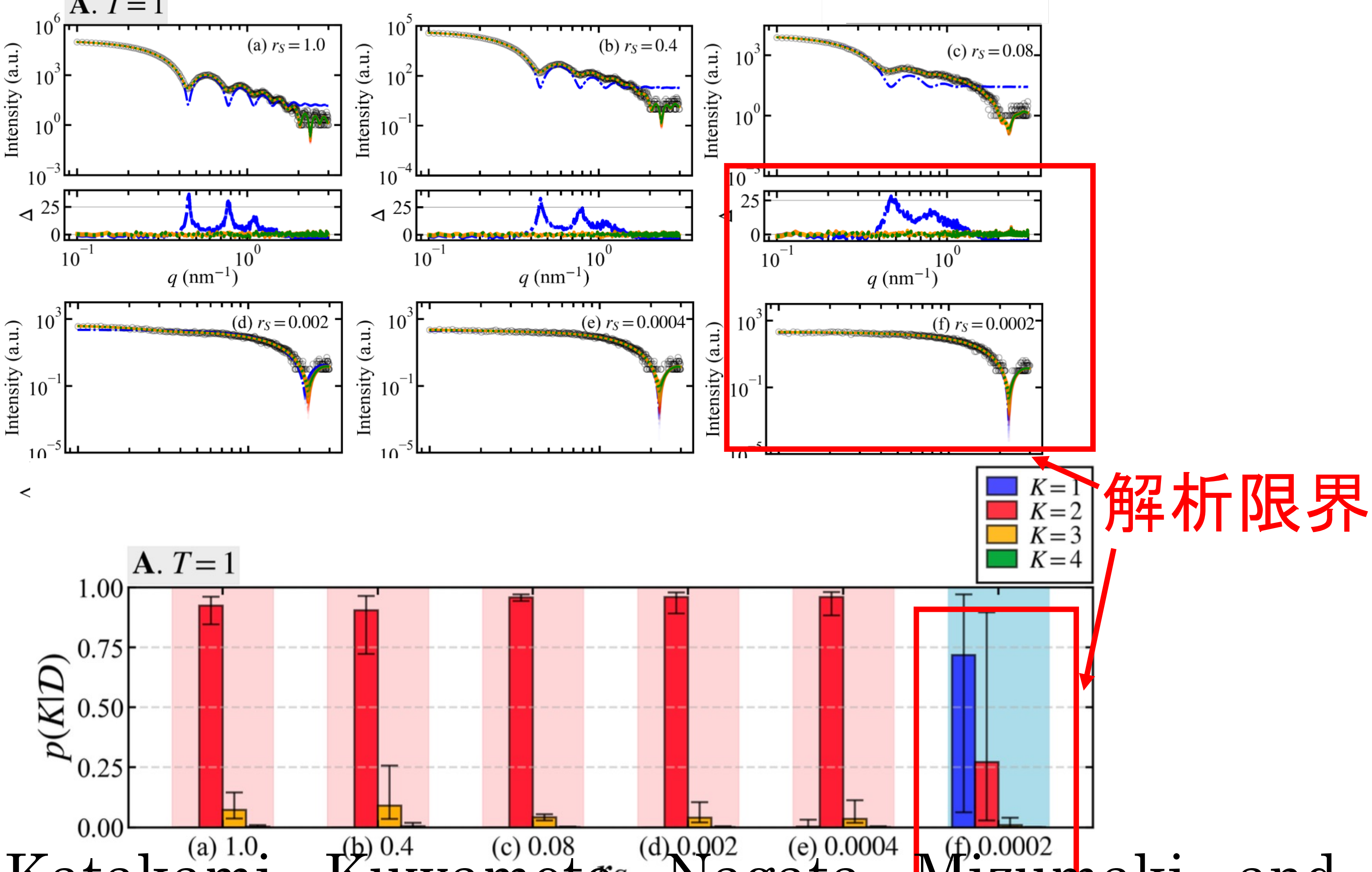
- 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定　計測限界の導出



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

非線形系に対しても $y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか?

- 小角散乱: 神器 2: モデル選択



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

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

内容

- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

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

内容

- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

内容

- 自己紹介
- 本講演の目的
  - ベイズ計測をSPring-8に導入するメリットはあるのか?
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$の取り扱いを通じて
  - 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
- 非線形系に対しても$y=ax+b$のアナロジーは成り立つか?
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- 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
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

SPring-8全ビームライン ベイズ化計画

- ベイズ計測を、SPring-8に導入するメリットはあるのだろうか?
- ベイズ計測は、日々行われているデータ解析のうち、ヒトにより恣意的に行われてきた、モデル選択とデータ統合を、パラメーターフィットと同じ枠組みで取り扱える
- ベイズ系をSPring-8に導入することで、これまでのデータ解析とは質的に異なるメリットを得られる