

物理学とデータ駆動科学: ベイズ計測を中心に

東京大学・大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻

岡田真人

日時:2024年6月12日(水) 13時30分- 15時分

場所:九州大学伊都キャンパスウェスト2号館
701号室

自己紹介

- 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
 - アモルファスシリコンの成長と構造解析
- 大阪大学大学院理学研究科(金森研) (1985 – 1987)
 - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- 三菱電機 (1987 - 1989)
 - 化合物半導体(半導体レーザー)の結晶成長
- 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学(福島研) (1989 - 1996)
 - 畳み込み深層ニューラルネット
 - 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 –)

本セミナーの目的

- 本セミナーでは、物理学全般を取り扱うことができるデータ駆動科学の枠組みを紹介する。
- データ駆動科学は階層的自然観に基づいており、その数理情報基盤は本セミナーで解説するベイズ推論とスパースモデリング(SpM)である。
- 本セミナーでは以下を説明する
 1. ベイズ推論導入のきっかけとなった、修士時代の強相関電子系の研究
 2. ベイズ計測の基礎から展開の解説

内容

- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論: 修士課程の研究の感想
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 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
- ベイズ計測の導入による計測科学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
- まとめと今後の展開

内容

- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論: 修士課程の研究の感想
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 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計測科学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

要素還元主義と階層的自然観

- 要素還元主義
 - 物理学の法則の獲得をよりミクロな方向に進め、得られた基礎方程式からの演繹で、世界を理解する言う立場
- 階層的自然観
 - 自然を各階層に分離して、階層ごとに研究することで、世界を理解する立場
- 以下の状況から、階層的自然観が正しいと言わざるを得ない
 - 第一原理計算の実情
 - 愛情などの高度な認知機能の解明

自己紹介

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

修士課程の指導教官 小谷章雄先生

Journal of the Physical Society of Japan
Vol. 56, No. 2, February, 1987, pp. 798-809

Many Body Effect in Inner Shell Photoemission and Photoabsorption Spectra of La Compounds

Akio KOTANI, Masato OKADA, Takeo JO,
A. BIANCONI,[†] A. MARCELLI[†] and J. C. PARLEBAS^{††}

*Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University,
Toyonaka 560*

*[†]Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza",
00185 Roma, Italy*

^{††}LMSES, Université Louis Pasteur, 67070 Strasbourg, France

(Received October 14, 1986)

REFERENCES

1. A. Kotani & Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* **37**, 912 (1974).
2. O. Gunnarsson & Schönhammer, *Phys. Rev.* **B27**, 4315 (1983).
3. A. Fujimori, *Phys. Rev.* **B28**, 2281 (1983).

修士課程を終えての感想 (1/4)

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

The spectra of 3d-XPS and L₃-XAS are expressed as

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

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

where

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

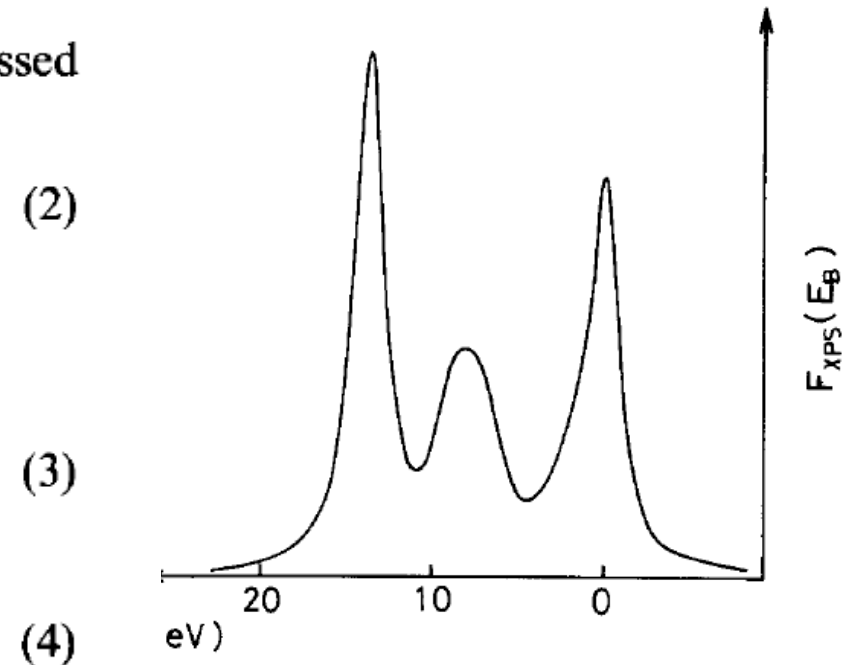


Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily.

ヒトがモデルのパラメータを**ハンドチューン**して議論

今回の集中講義の動機 -> ベイズ計測へ

(Kotani, Okada and Okada, 1987)

修士課程を終えての感想 (2/4)

Kotaniの2p-XASのモデル

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

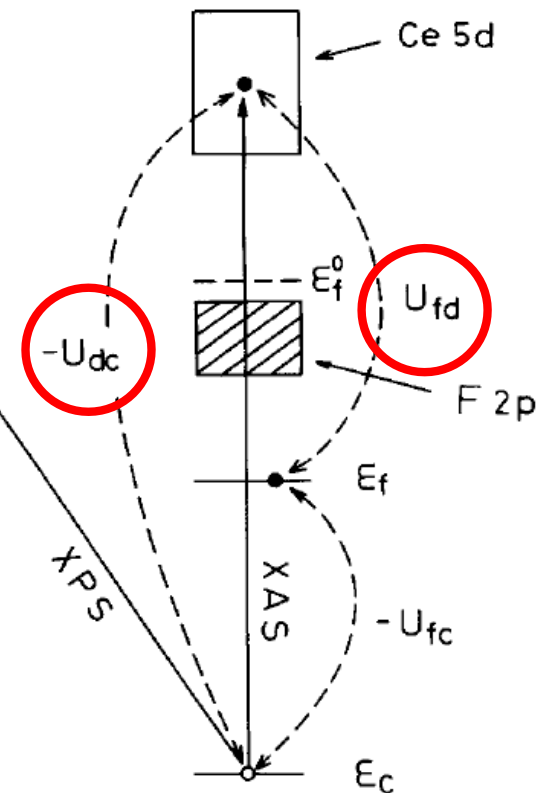
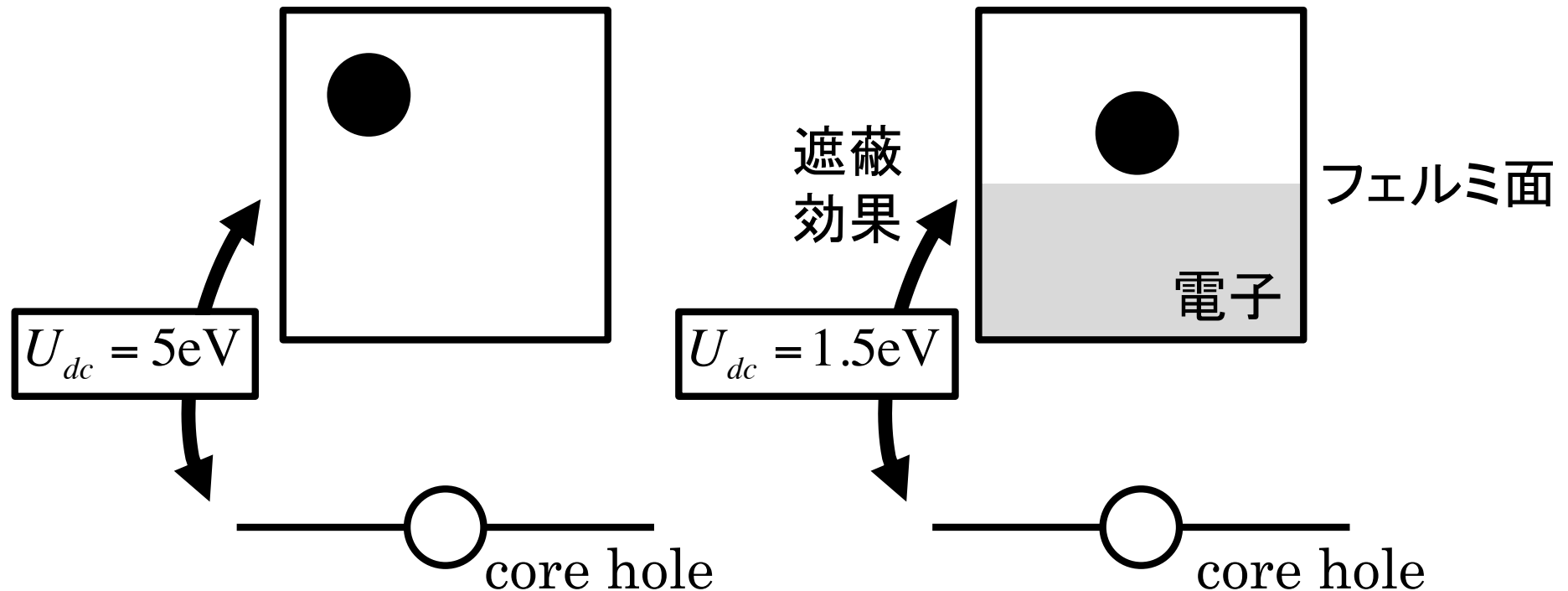


Fig. 1. Model of the present theory describing 3d-XPS and L_3 -XAS.

修士課程を終えての感想 (3/4)

KotaniとGunnarssonの主張



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

修士課程を終えての感想 (4/4)

なにが問題か: モデル選択

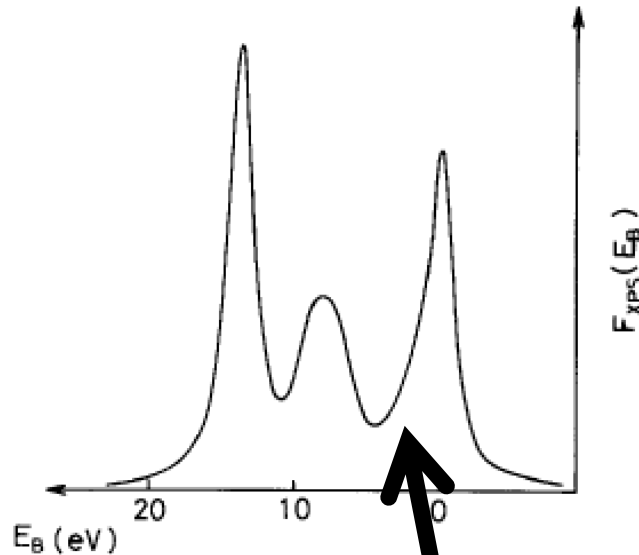


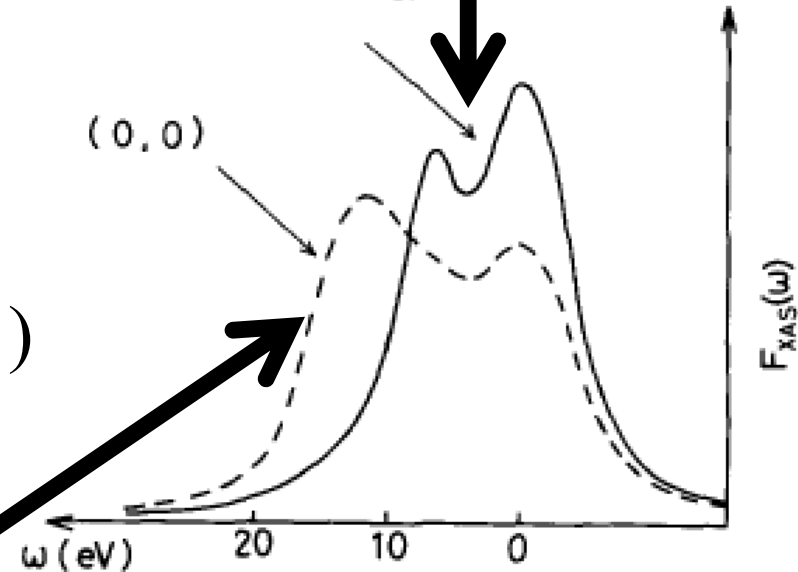
Fig. 2. Calculated result of 3d-XPS. The origin of the binding energy E_B is taken arbitrarily

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

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

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

(0, 0)



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

修士時代の研究の問題点

有効ハミルトニアンによる
X線光スペクトルの記述の階層

—— 演繹による導出不可能! ——

量子力学と電磁気学の階層

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

ベイズ計測の必然性(パラメータ推定、モデル選択)

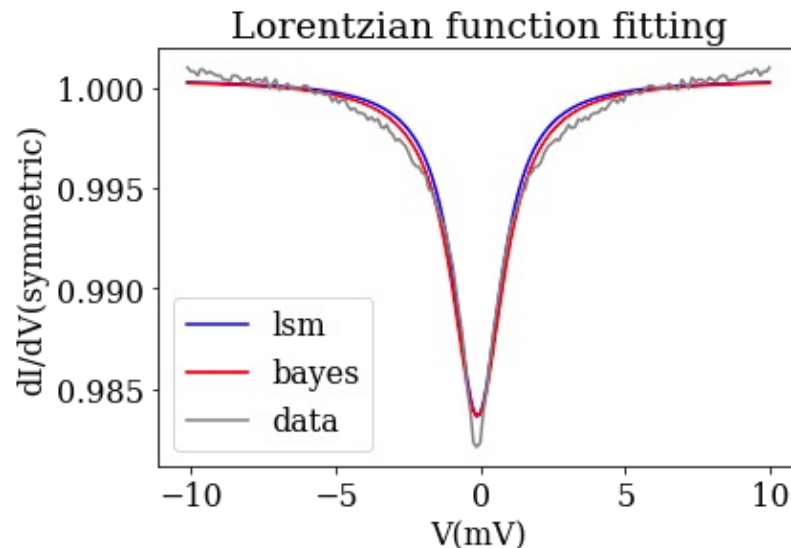
現代的な問題へリニューアル

志賀@河江研 2024年秋の物理学会

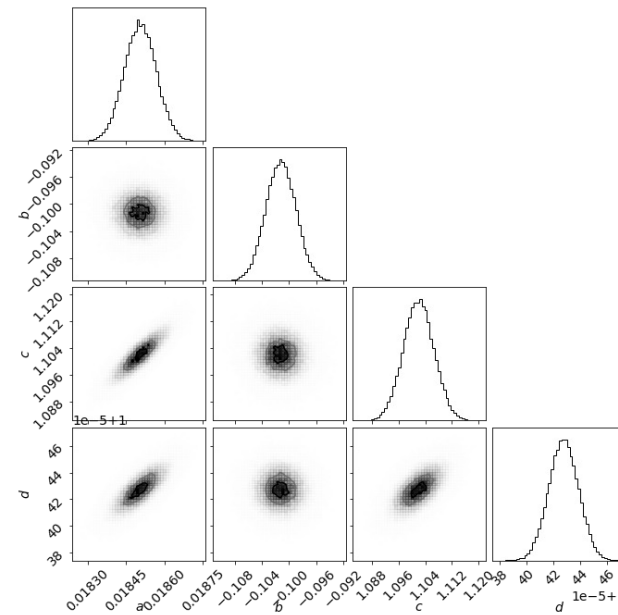
タイトル: ベイズ計測を利用した重い電子系化合物における点接合分光法スペクトルの精密解析

著者: 志賀、片上、高橋、寺本翼、水牧、岡田、河江

$T=0.9\text{K}$



フィッティング結果



事後確率分布

ベイズ的モデル選択で、混成ギャップのあるなしを決定可能

より俯瞰的な考察

階層的自然観と実験データ解析

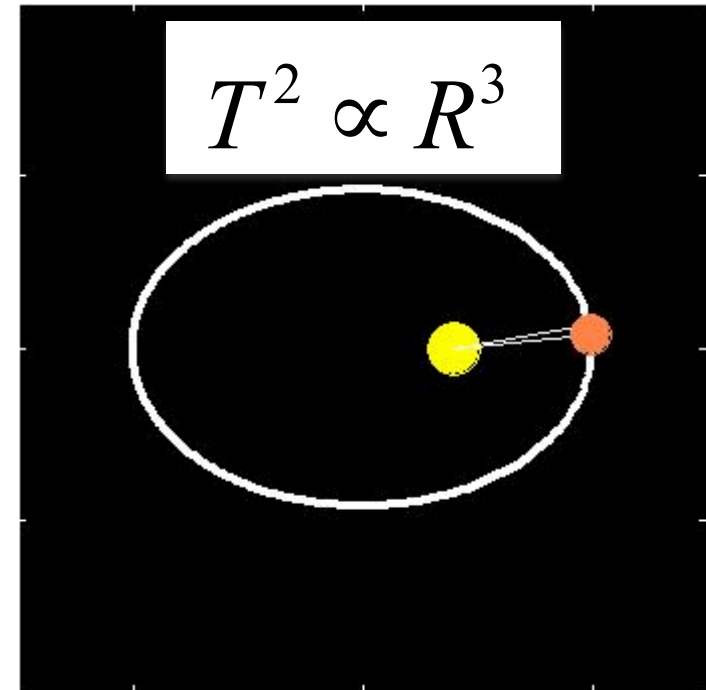
- 階層的自然観の立場では、各階層の数理モデルの構築のためは、ミクロレベルからの演繹を諦めたために、その帰結として、実験データを用いる必要がある。
- 実験データの解析には、その現象を説明するす数理モデルがないかあるかで、二つの戦略が必要である
- 実験データを解析するデータ駆動科学の数理情報学的枠組みは、その二つに対応して、スパースモデリング(SpM)とベイズ推論の二つが用意されている

Keplerの法則

ティコ・ブラーエの
天体観測データ



Keplerの法則



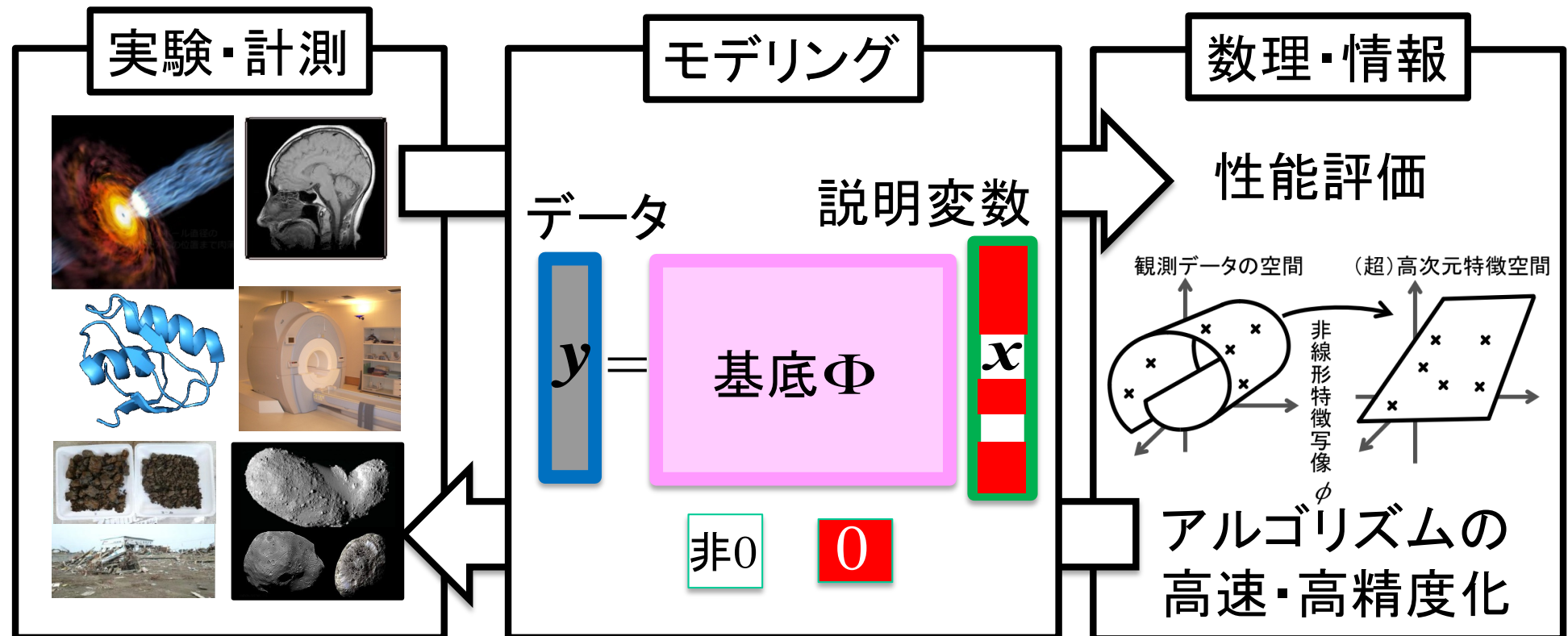
観測データからヒトが直感で特徴量 T と R を抽出し
その定量的現象論を提案

物理学とスパースモデリング(SpM)

- 古典力学や量子力学の前段階で、スパースモデリング(SpM)は活用されている歴史
- ニュートン力学に対するKeplerの法則
 - 公転周期 T と公転半径 R
- 前期量子論
 - プランクの輻射の理論、アインシュタインの光量子仮説
- これらは全て、そのレベルを記述する数理モデルがない段階で、実験データから特徴量をヒトが決め、その特徴量を用いて、現象を定量的に記述する現象論である

新学術領域研究 平成25～29年度 スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成

領域代表岡田の個人的な狙い
世界を系統的に記述したい
その方法論と枠組みを創りたい
ヒトが世界を認識するとは？



階層的自然観での普遍的な構造

現在考察している階層

分断!!

ミクロな階層

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

ベイズ計測の必然性(パラメータ推定、モデル選択)

内容

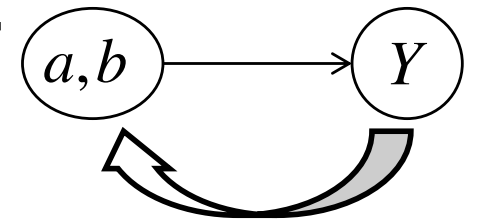
- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論: 修士課程の研究の感想
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 非線形系に対しても $y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか?
 - スペクトル分解
 - メスバウアー分光
 - 小角散乱
- ベイズ計測の導入による計測科学のゲームチェンジング
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- まとめと今後の展開

ベイズ計測とは?

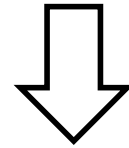
ベイズ推論

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

生成(因果律)



<ベイズの定理>



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

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

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

ベイズ計測三種の神器

1. 物理パラメータの事後確率分布定
2. モデル選択
3. データ統合

ベイズ計測

- ベイズ推論のうち計測科学に重要な三つの要素からなる情報数理科学的体系で、その三要素は**ベイズ計測三種**の神器と呼ばれる
 1. 物理パラメータの確率分布推定
 2. 同一データを説明する複数モデルをデータのみから選べるベイズ的モデル選択
 3. 同一物質に対する複数の実験データを系統的に統合するベイズ統合
- 従来の最小二乗法によるパラメータフィットでは、1.の物理パラメータの点推定しか行えない
- **パラメータフィットを超えて**: ベイズ計測では、取り扱えることが質的に異なる

ベイズ計測と利点の理解のために $y=ax+b$ へのベイズ計測の導入

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

ベイズ計測の利点

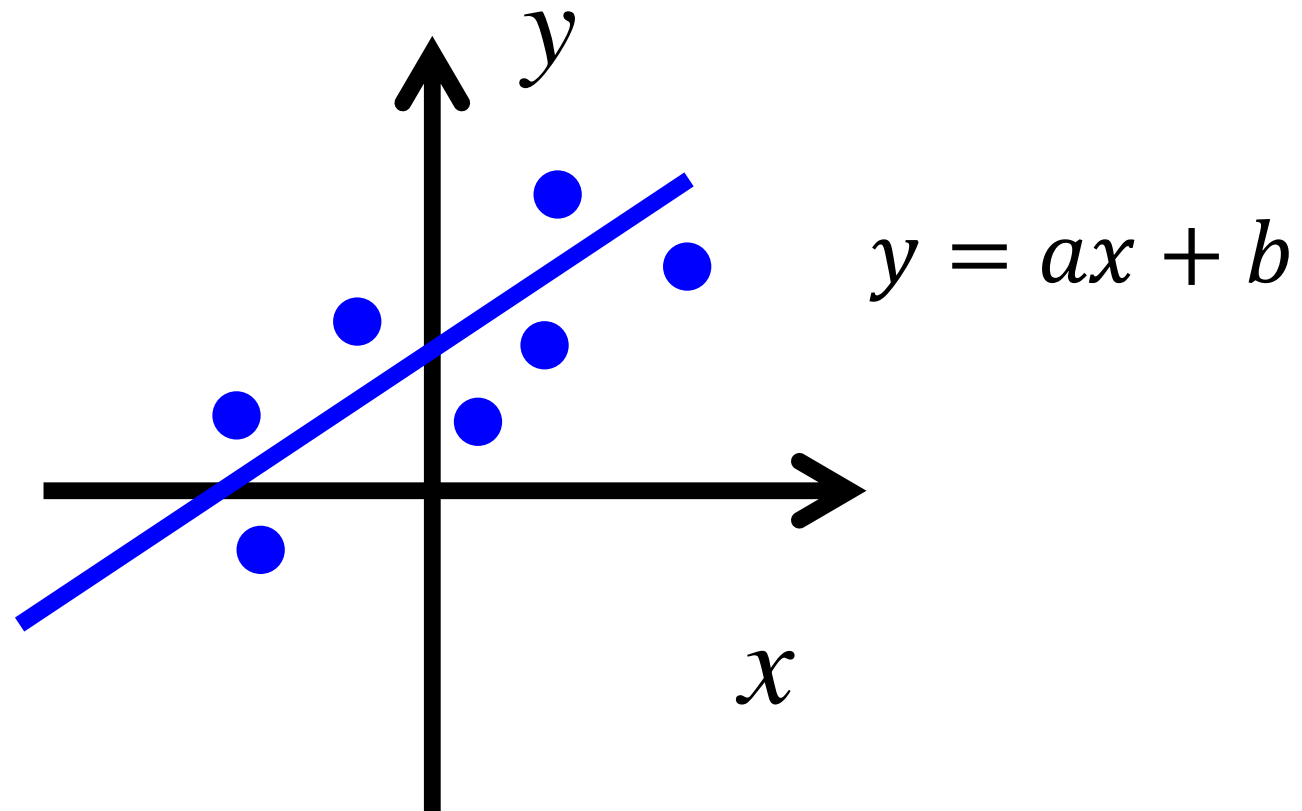
$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

- 従来の最小二乗法
 - 1. 物理パラメータの点推定
- ベイズ計測
 - 1. 物理パラメータの確率分布推定
 - 2. データからのベイズ的モデル選択
 - 3. ベイズ統合: 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

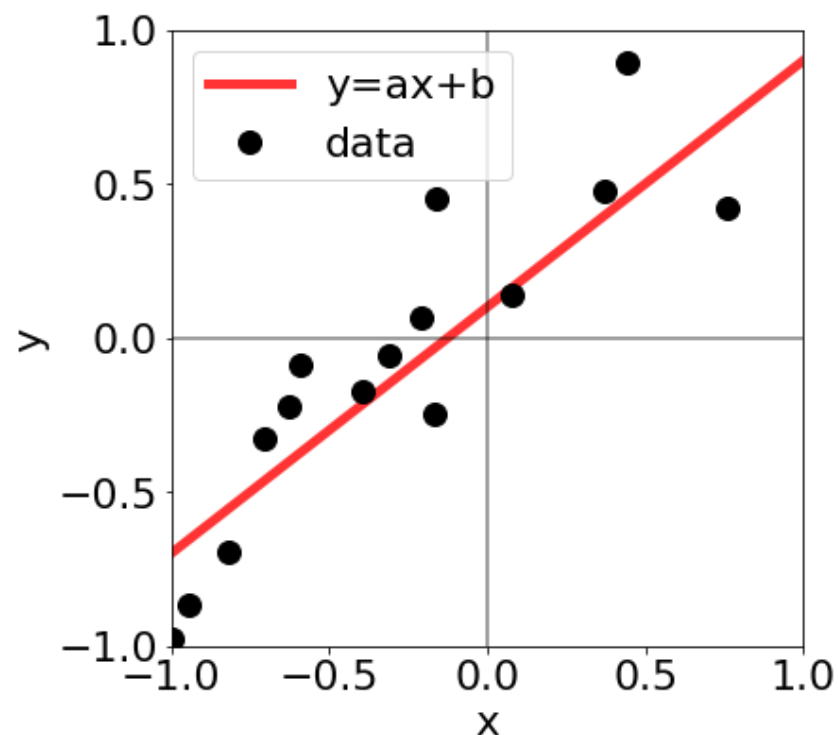
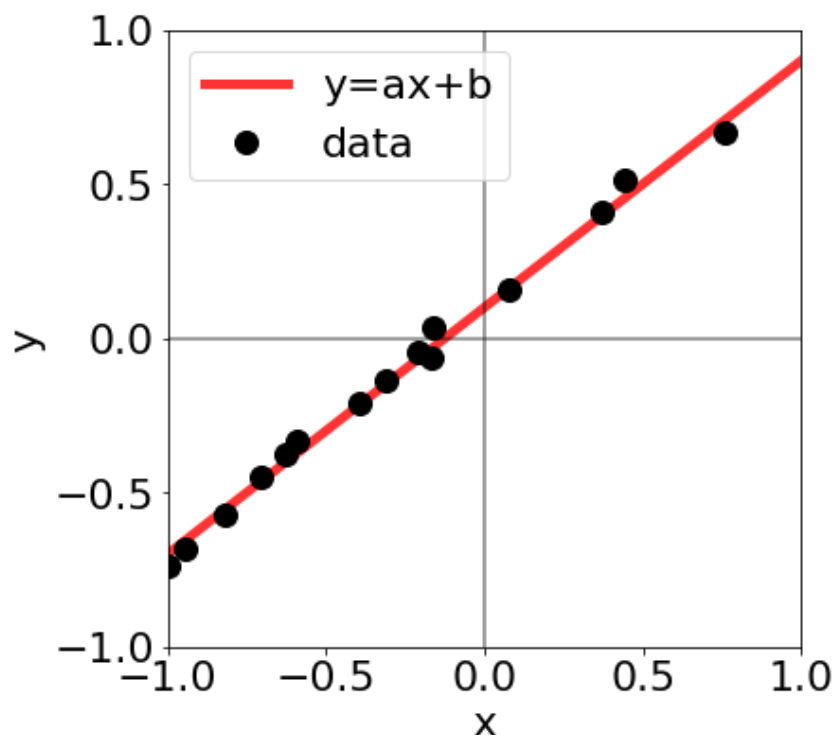
現状でも用いられている最も簡単な例



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)

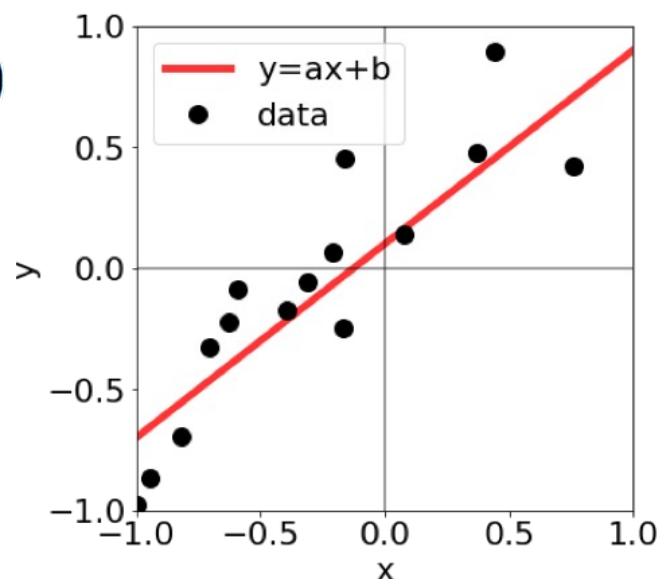
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \quad \text{とする場合}$$

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

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

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

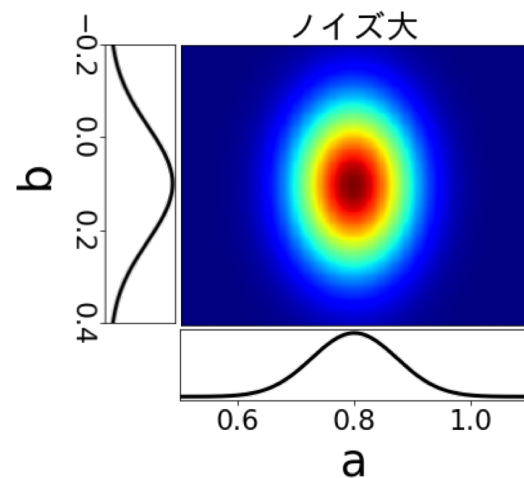
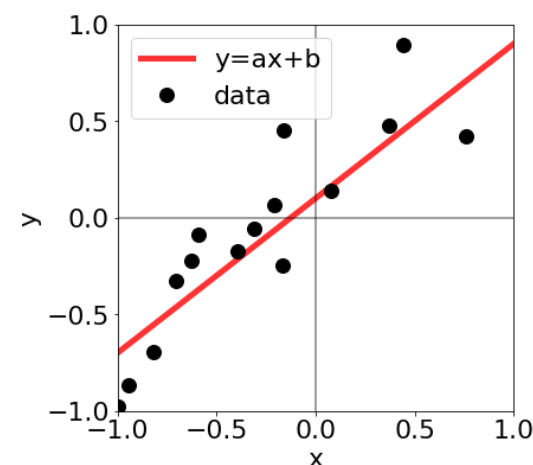
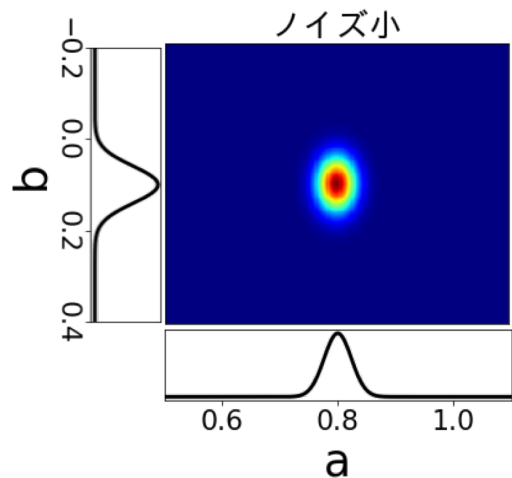
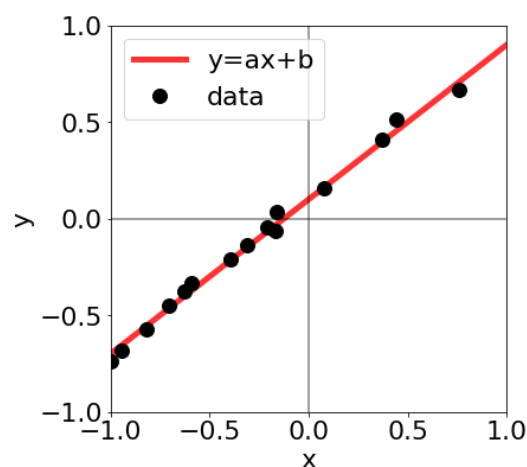
$$\overline{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

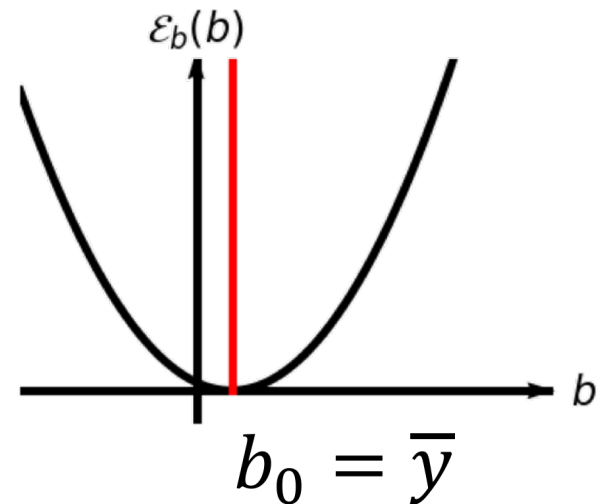
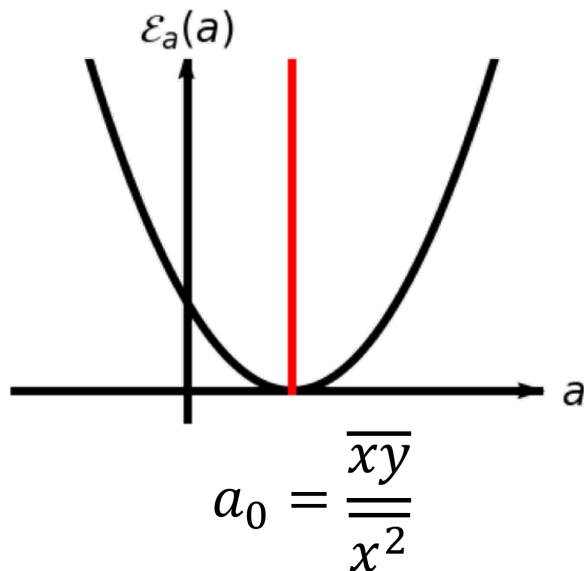
結論: 神器1 パラメータの事後確率推定



$y=ax+b$ の最小二乗法

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

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



$y=ax+b$ の最小二乗法

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

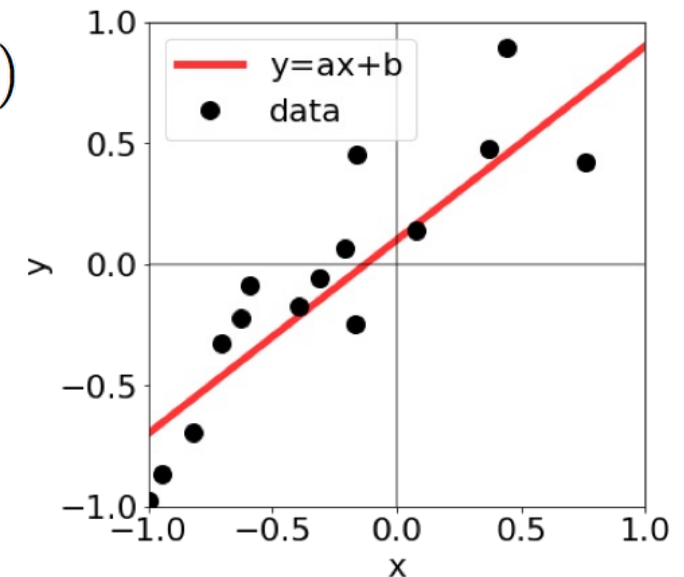
二乗誤差 $E(a, b)$ を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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

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

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

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

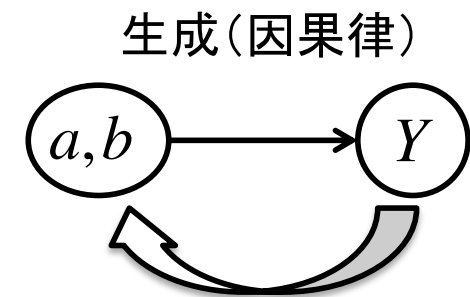


ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定 (1/4)

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

↓

<ベイズの定理>



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

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

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

神器1: パラメータの事後確率推定 (2/4)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

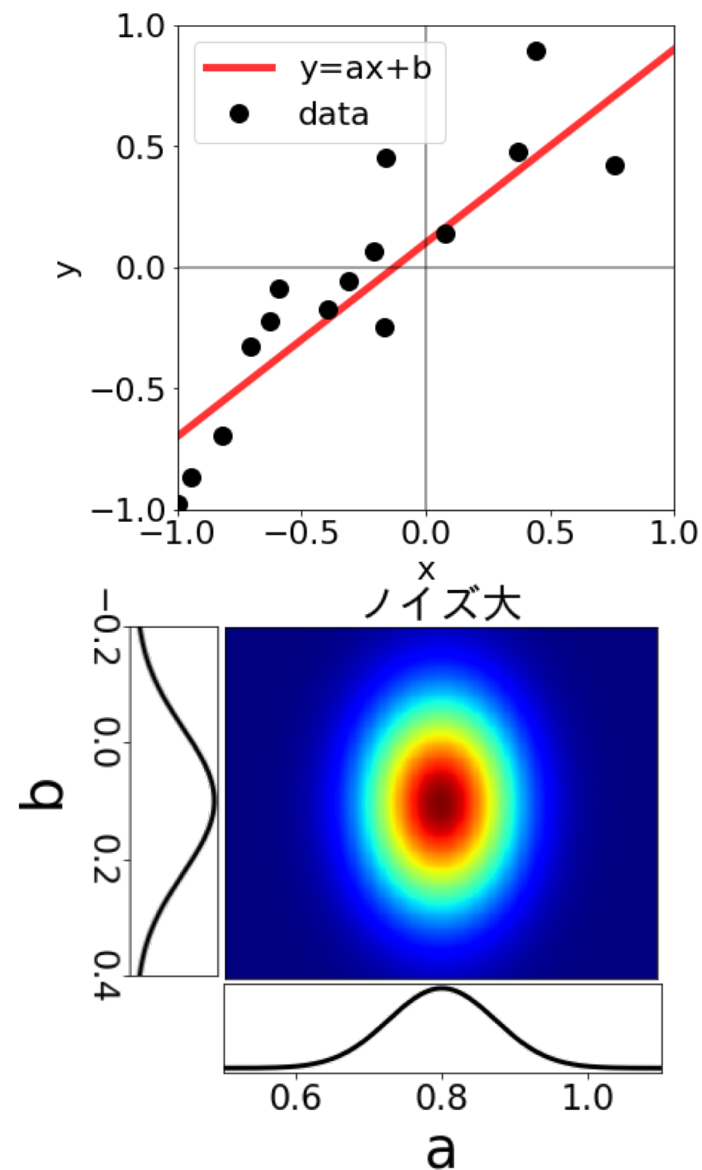
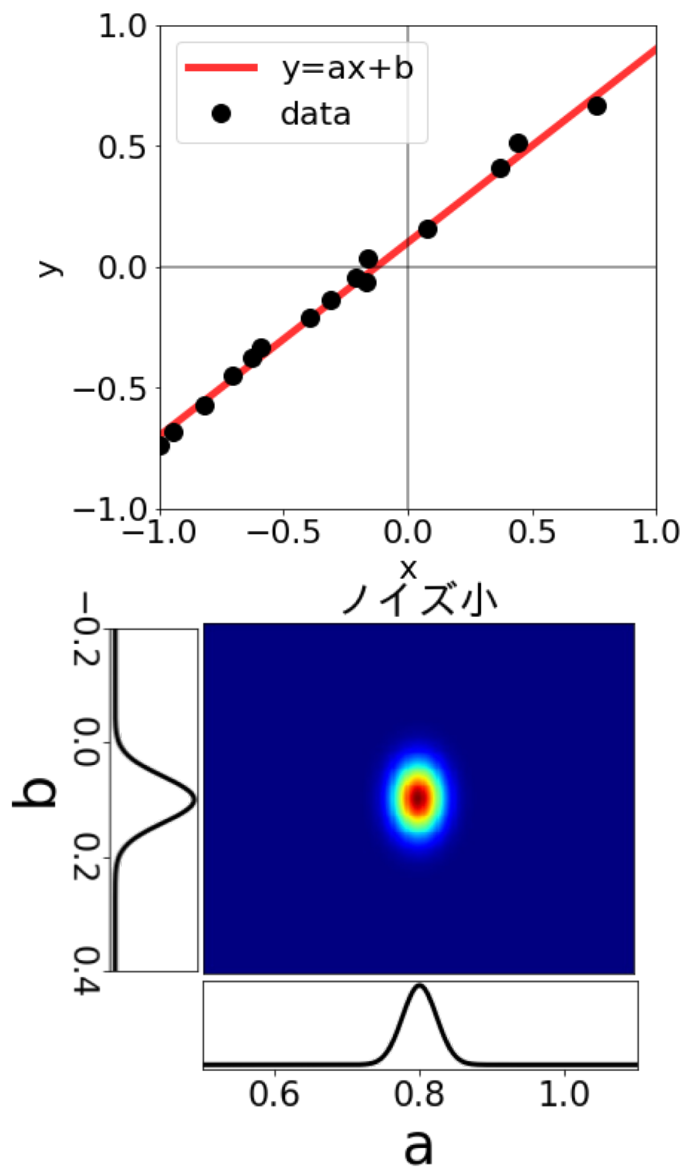
$$p(n_i) = p(y_i|a, b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

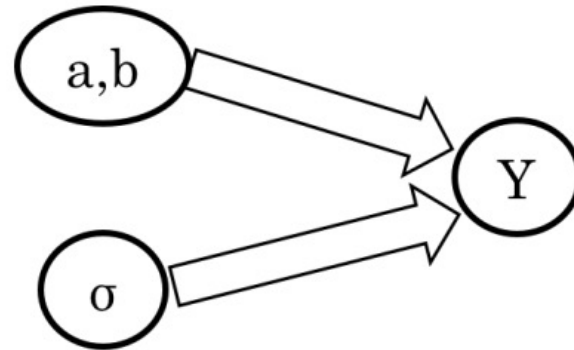
神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

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

神器1: パラメータの事後確率推定 (4/4)



神器1: パラメータの事後確率推定 ノイズ分散推定

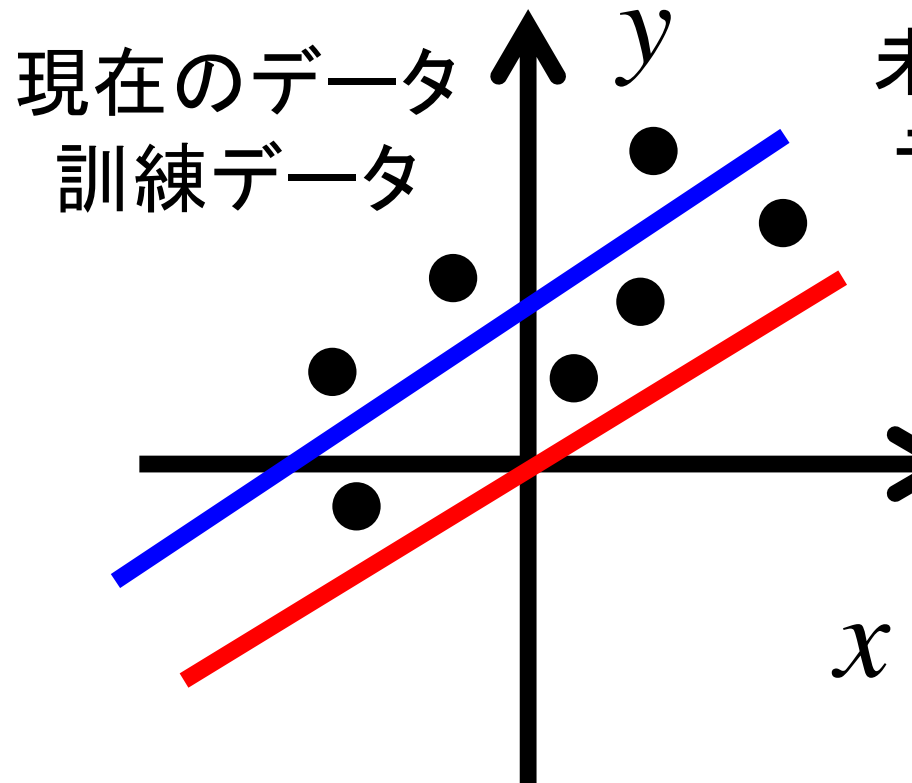


$$\begin{aligned} p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb p(Y|a, b, \sigma^2) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^N \int dadb \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} E(a, b) \right\} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^N \left\{ \exp \left(-\frac{N}{\sigma^2} E(a_0, b_0) \right) + \int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

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

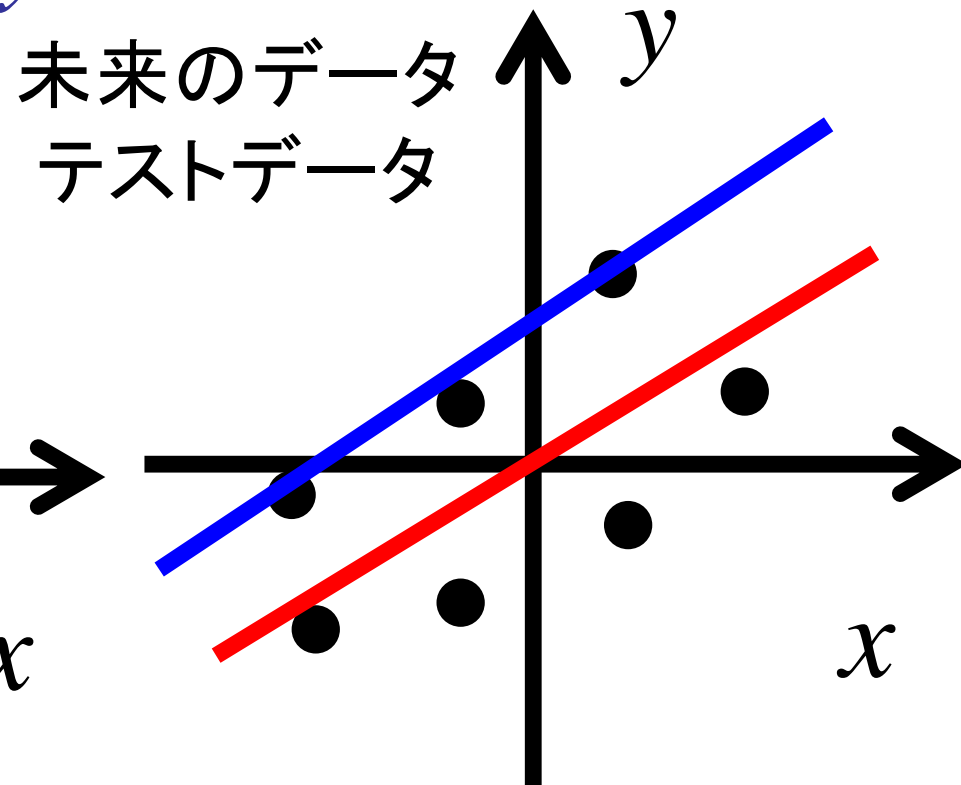
問題意識 神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$ か $y=ax+b$ か?



$y=ax+b$: 訓練誤差小
訓練誤差

ノイズに過学習



$y=ax$: 訓練誤差小
汎化誤差

モデル選択できる理由: 汎化誤差は観測ノイズに依存する

神器2: ベイズ的モデル選択

1. 欲しいのは $p(K|Y)$

2. θ がないぞ

3. $p(K, \theta, Y)$ の存在を仮定

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

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

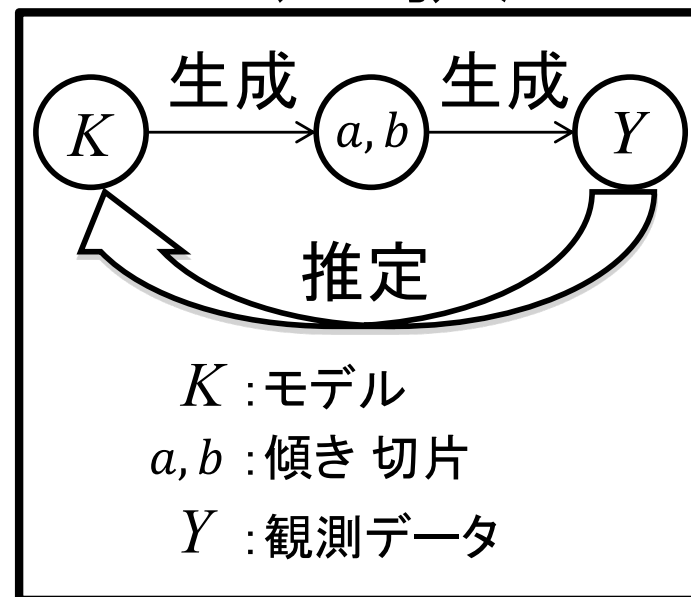
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

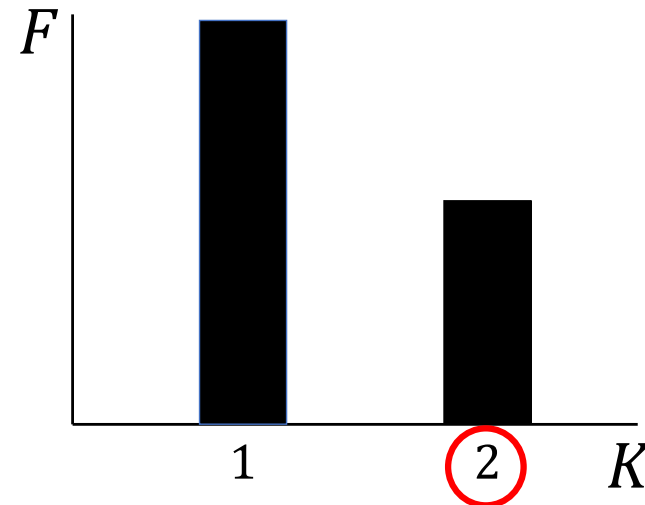
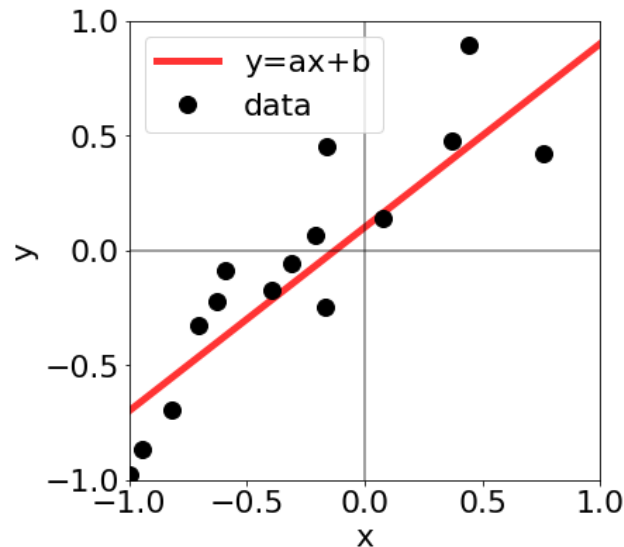
$$p(K | Y) = \frac{p(Y | K) p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にするモデル K を求める.



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



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

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

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

データのみからモデルを選択できる

まとめ: ベイズ計測三種の神器 $y=ax+b$ 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

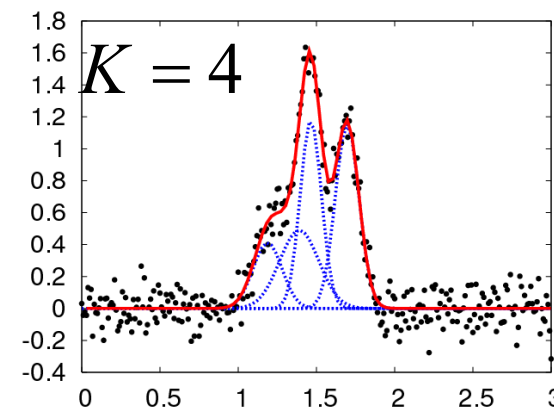
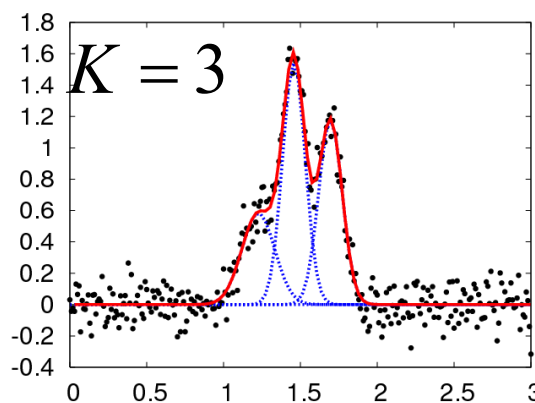
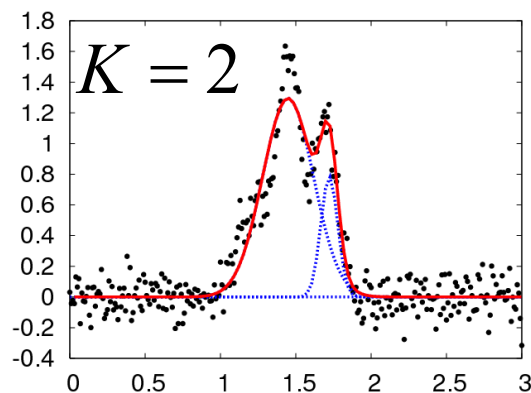
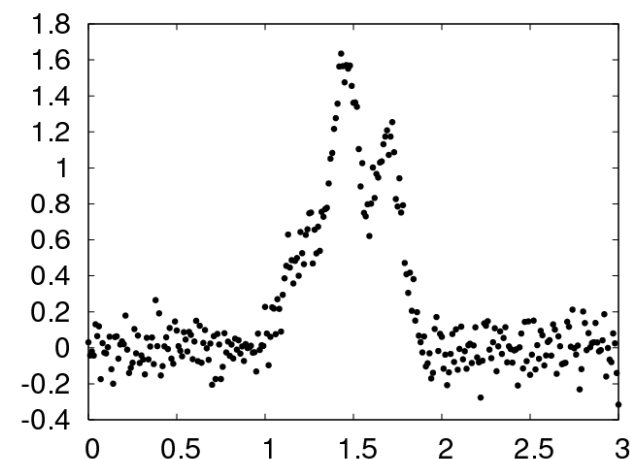
内容

- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論: 修士課程の研究の感想
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 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
- ベイズ計測の導入による計測科学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
- まとめと今後の展開

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

ベイズ的スペクトル分解



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

スペクトル分解の定式化

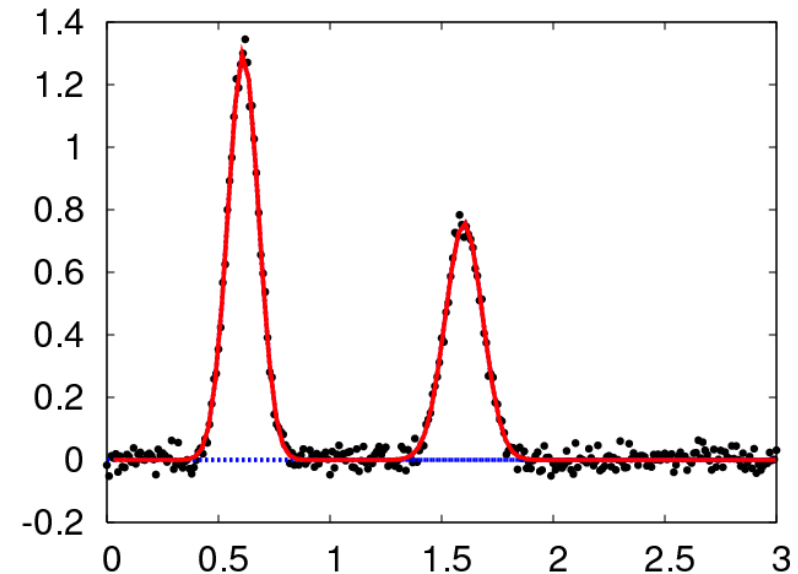
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより, スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

x_i : 入力 y_i : 出力

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

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

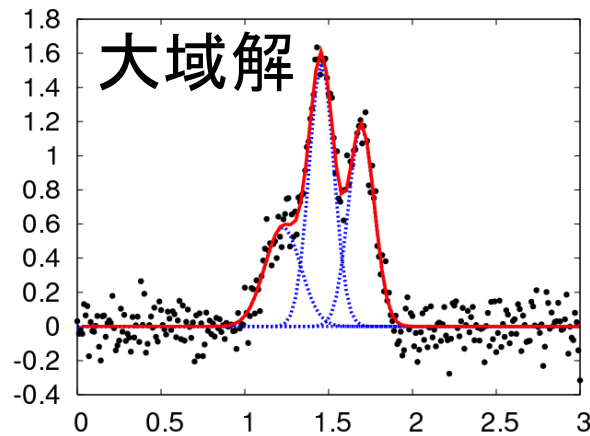


二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

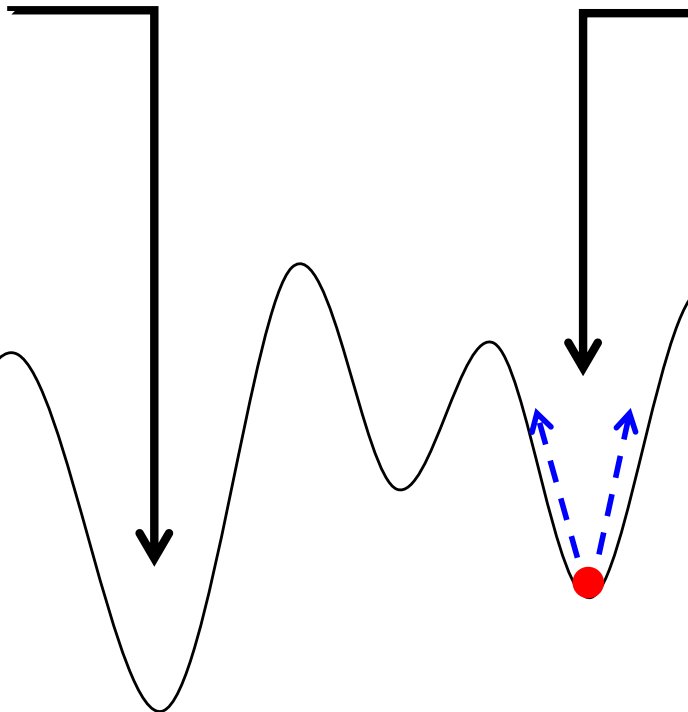
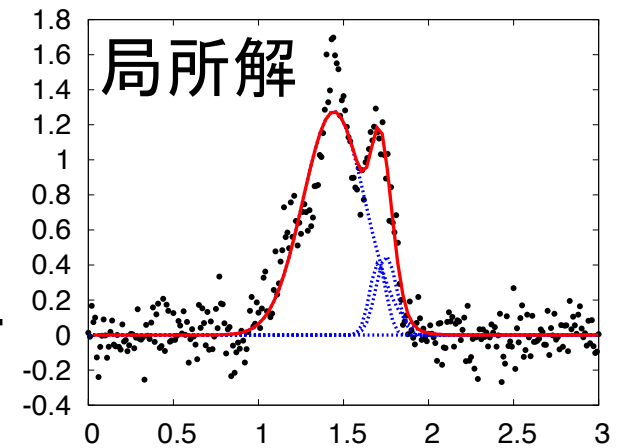
$$E(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(y_i - f(x_i; \theta) \right)^2$$

スペクトル分解従来法: 最急降下法

誤差関数は局所解を持つ



<通常の最適化法>
e.g., 最急降下法

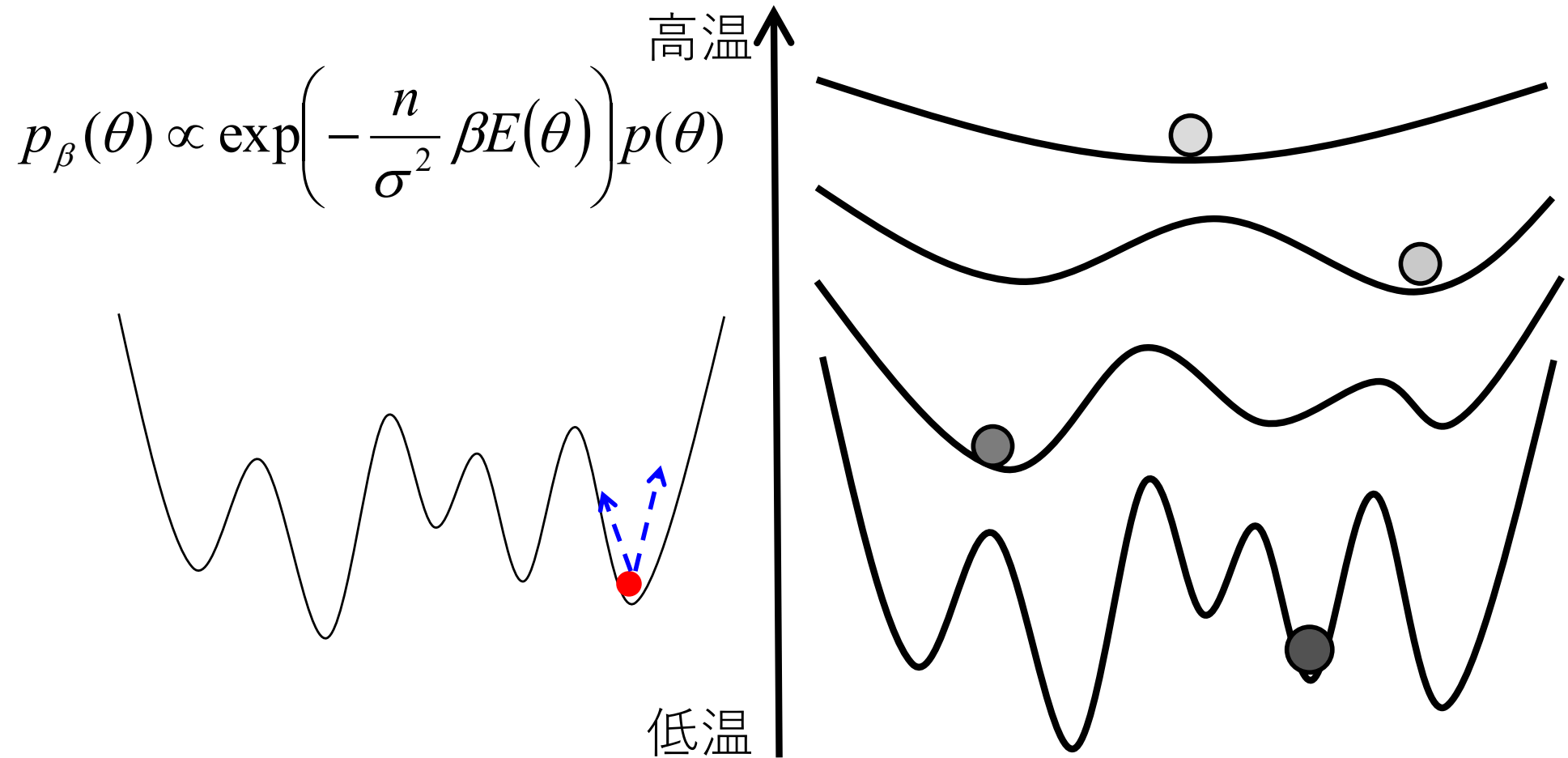


モンテカルロ法の適用

レプリカ交換モンテカルロ法

メトロポリス法

レプリカ交換モンテカルロ法



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

モデル選択：自由エネルギーの導入

1. 欲しいのは $p(K|Y)$

2. θ がないぞ

3. $p(K, \theta, Y)$ の存在を仮定

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

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

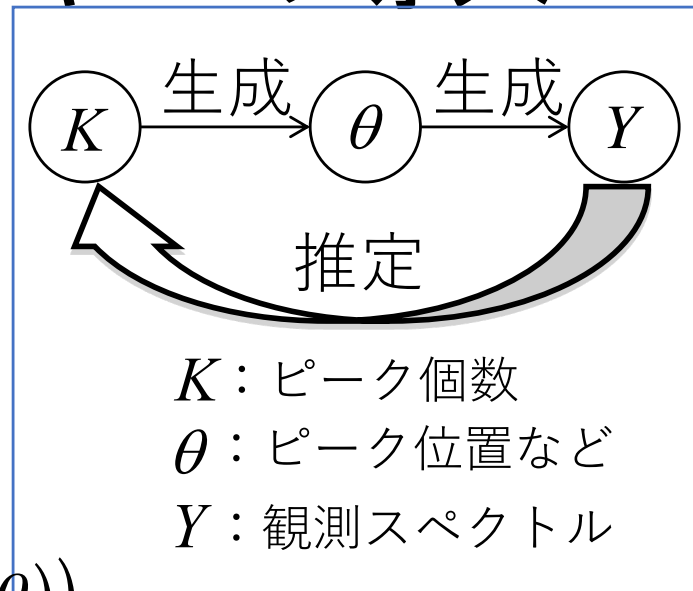
4. 無駄な自由度の系統的消去：周辺化，分配関数

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

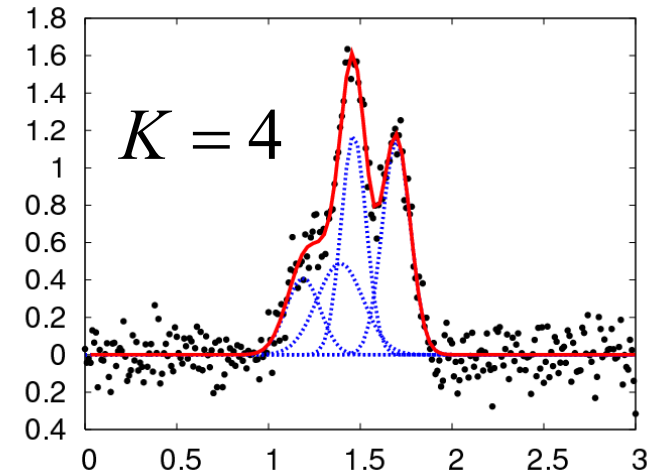
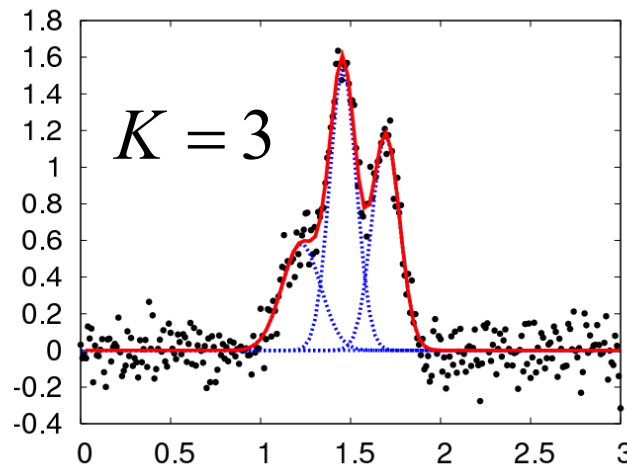
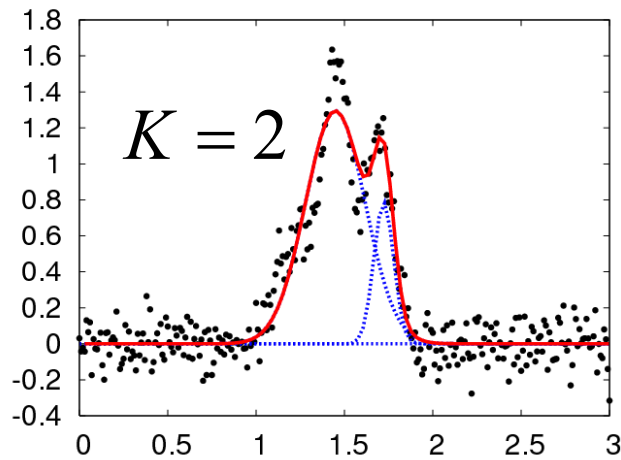
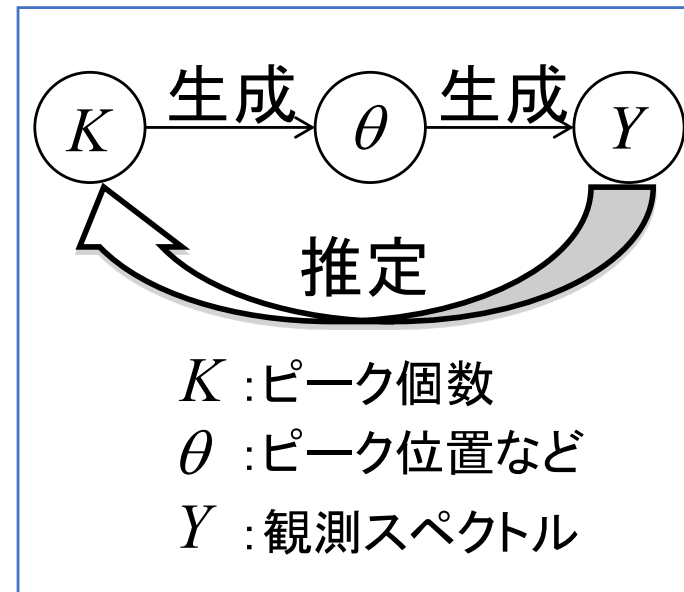
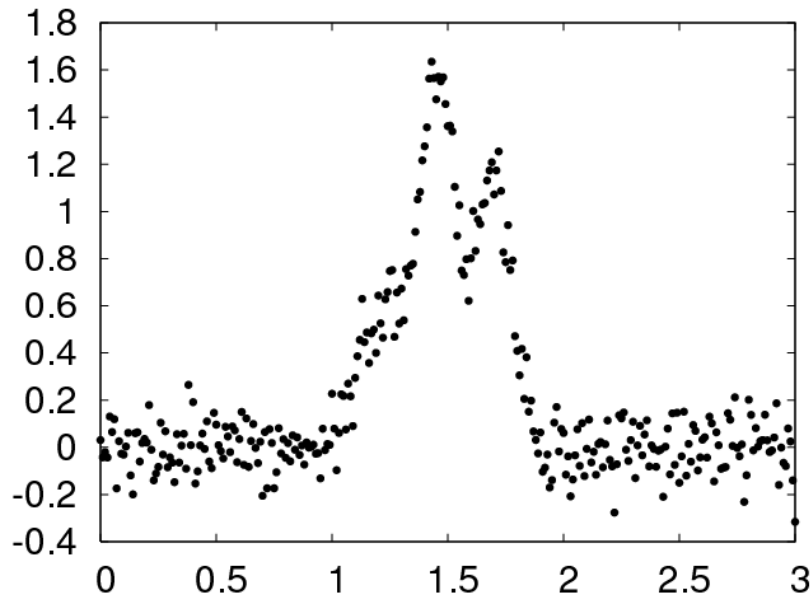
$$p(K | Y) = \frac{p(Y | K) p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にする個数 K を求める.



モデル選択: K をどう選ぶか



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

志賀@河江研 2024年秋の物理学会の さらなる展開

タイトル: ベイズ計測を利用した重い電子系化合物における点接合分光法スペクトルの精密解析

著者: 志賀、片上、高橋、寺本翼、水牧、岡田、河江

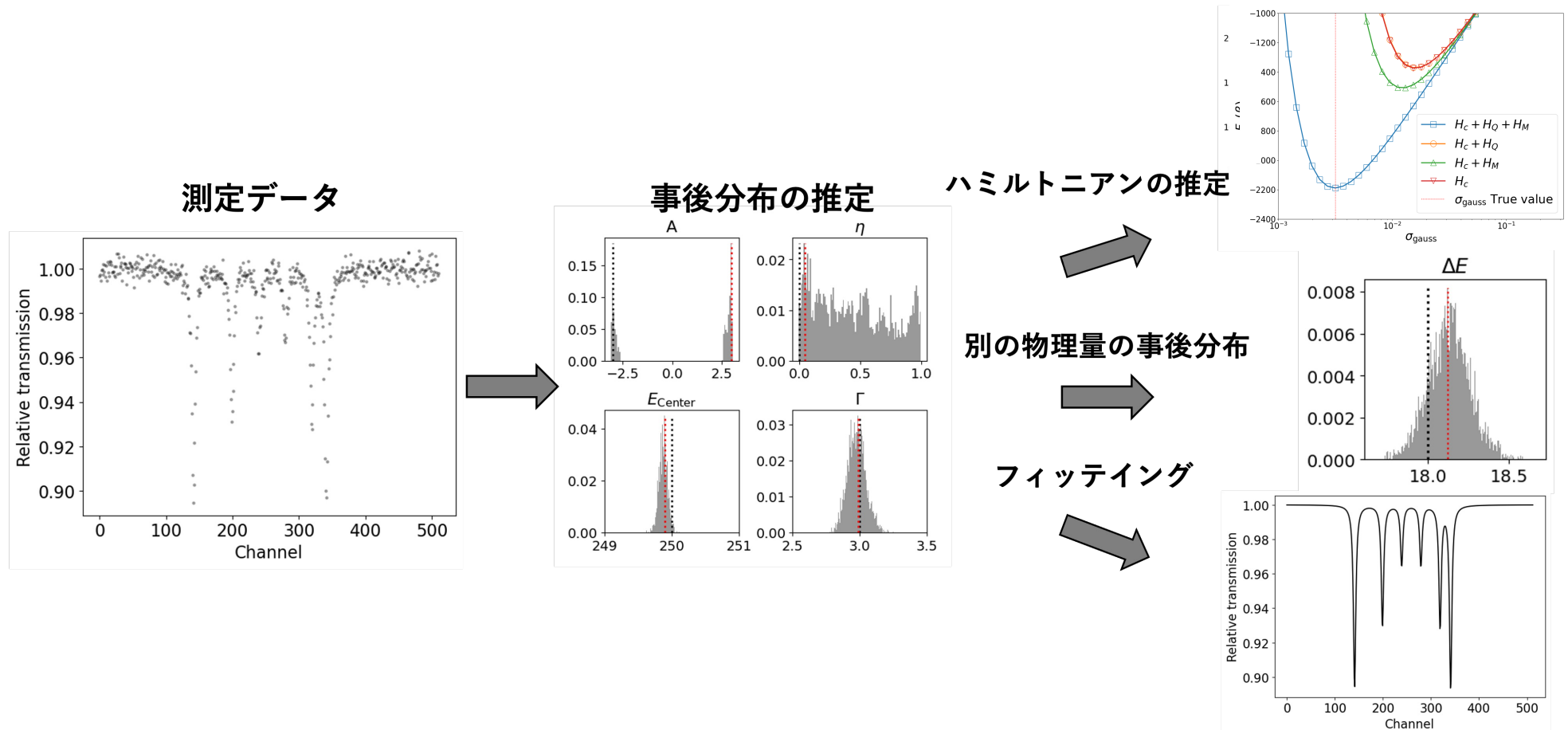
ベイズ的モデル選択で、混成ギャップのあるなしを
決定可能

さらなる発展

- 点接合分光法スペクトルとX線光励起スペクトルの二種類のデータを、**ベイズ統合**で取り扱う。
- ミクロと現状の階層の数理モデルの対応をとることで、**難問の階層連関**への突破口を提案

メスバウアー分光 (1/3)

- 生成モデルがハミルトニアンで記述される例

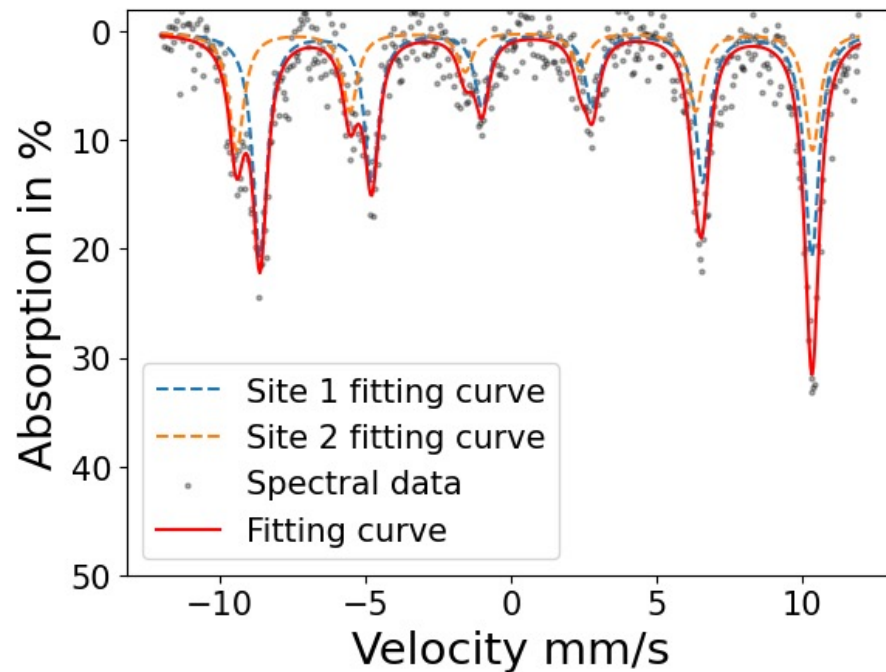


Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada,
JPSJ, 91,W104002 (2022)

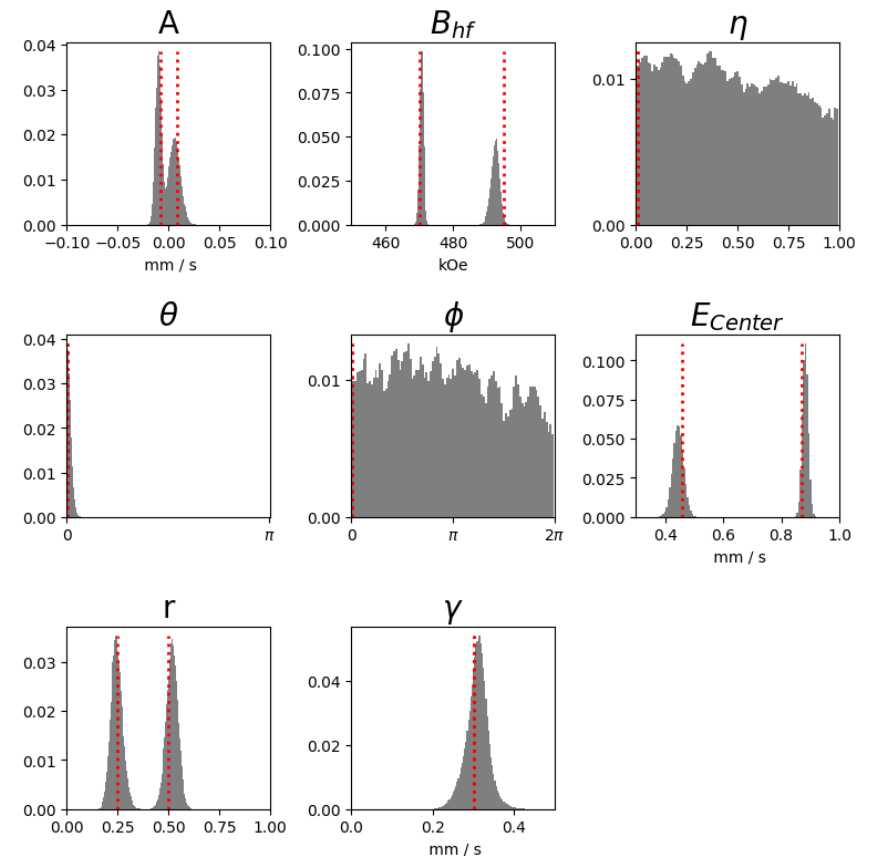
メスバウアー分光 (2/3)

- 神器1: パラメータの事後分布推定

フィッティング結果

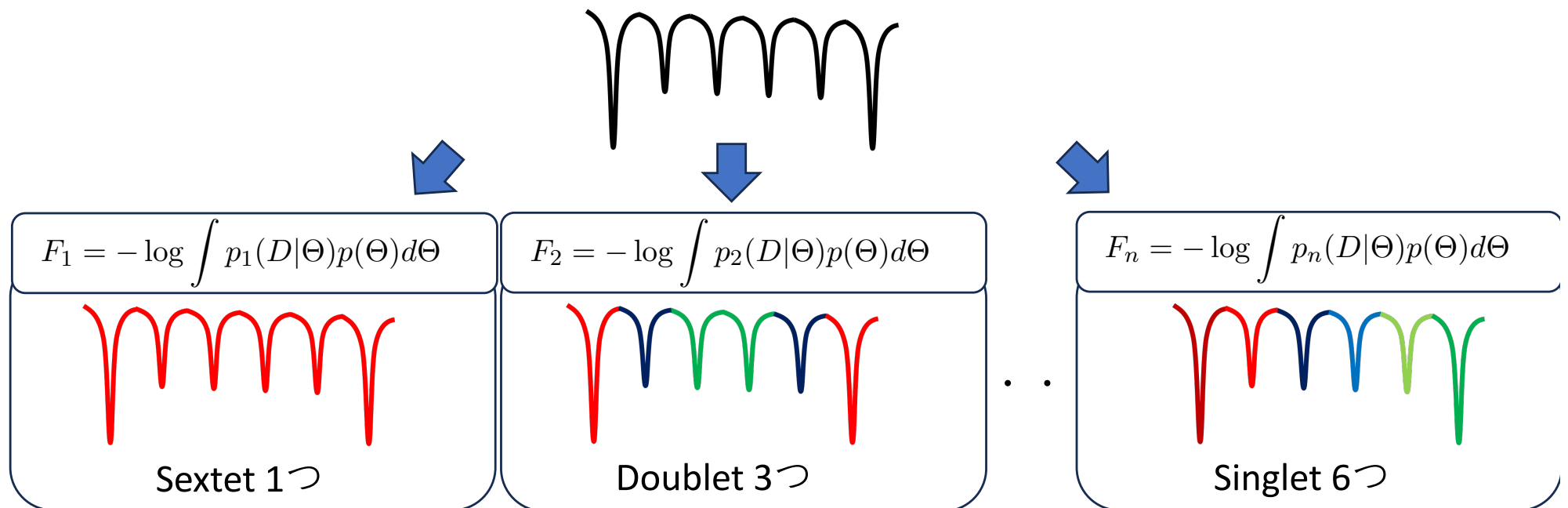


事後分布 (赤い点線が実験値)



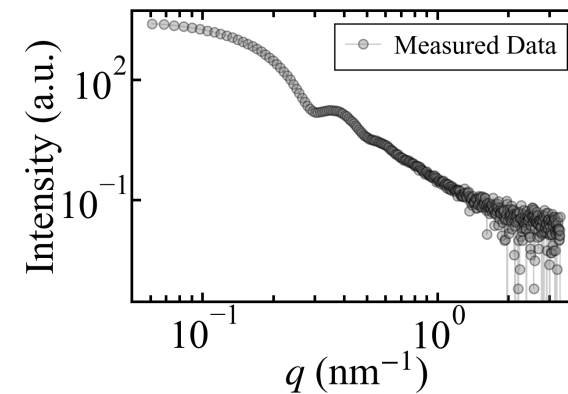
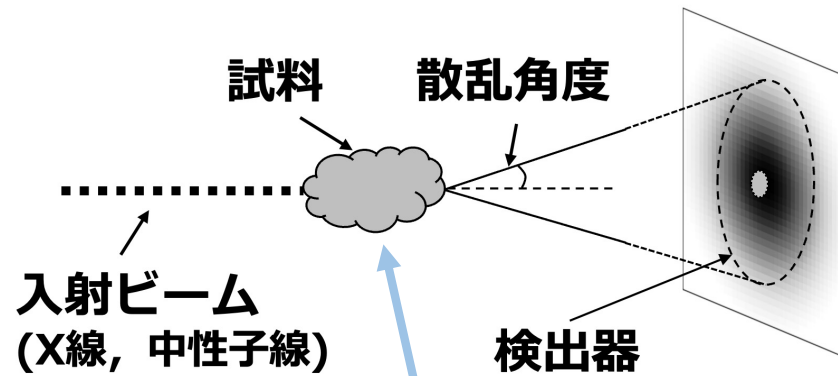
メスバウアー分光 (3/3)

- 神器2: モデル選択: ハミルトニアン推定



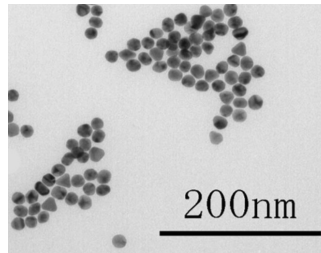
最もベイズ自由エネルギーの小さいモデルを選ぶ

小角散乱 (1/5)



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

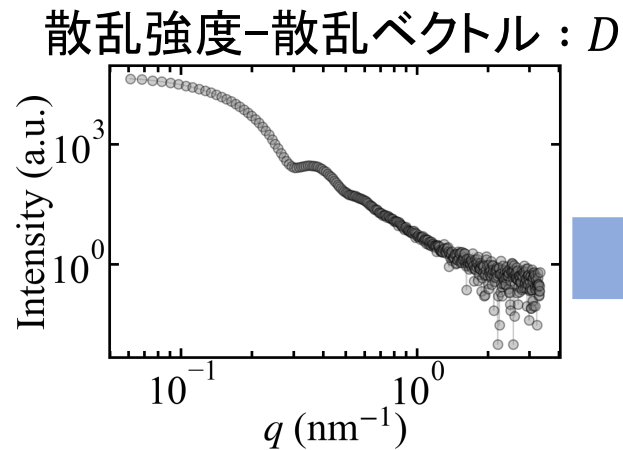
1. 散乱強度モデルを設定

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

2. モデルパラメータ推定

粒径 $R_M \rightarrow 10 \text{ nm}$

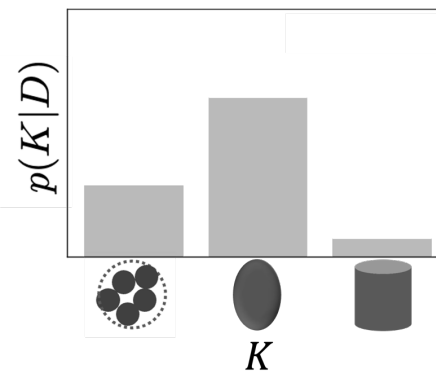
小角散乱 (2/5)



モデル選択

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

試料構造を表す散乱
強度モデルの選択

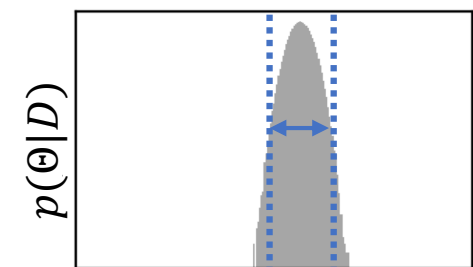


モデルの選択

パラメータ推定

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

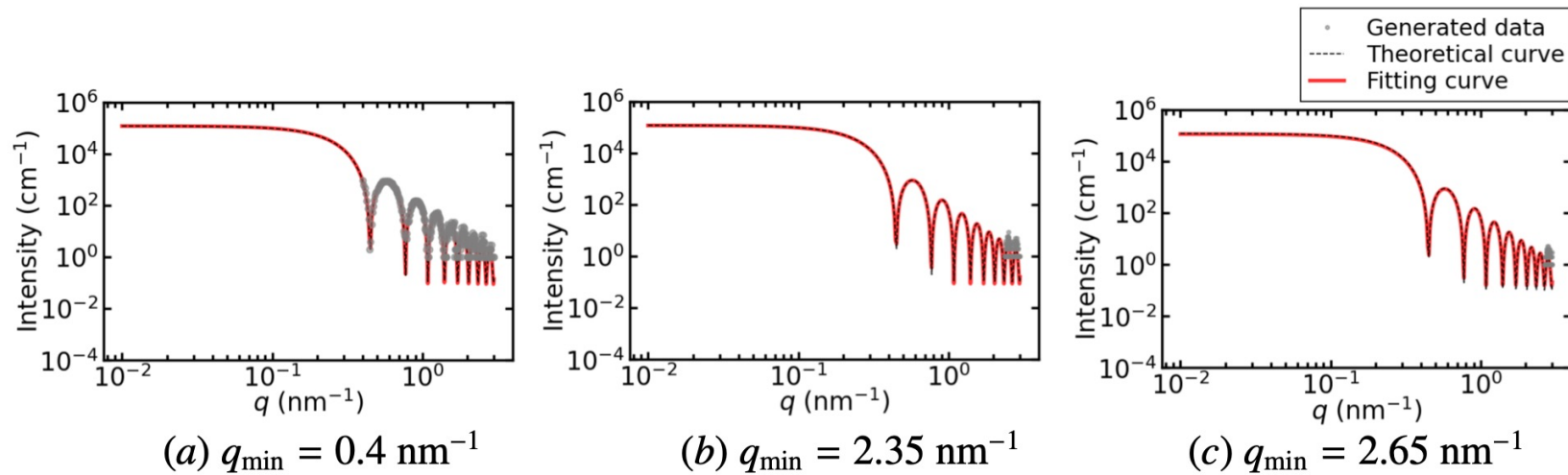
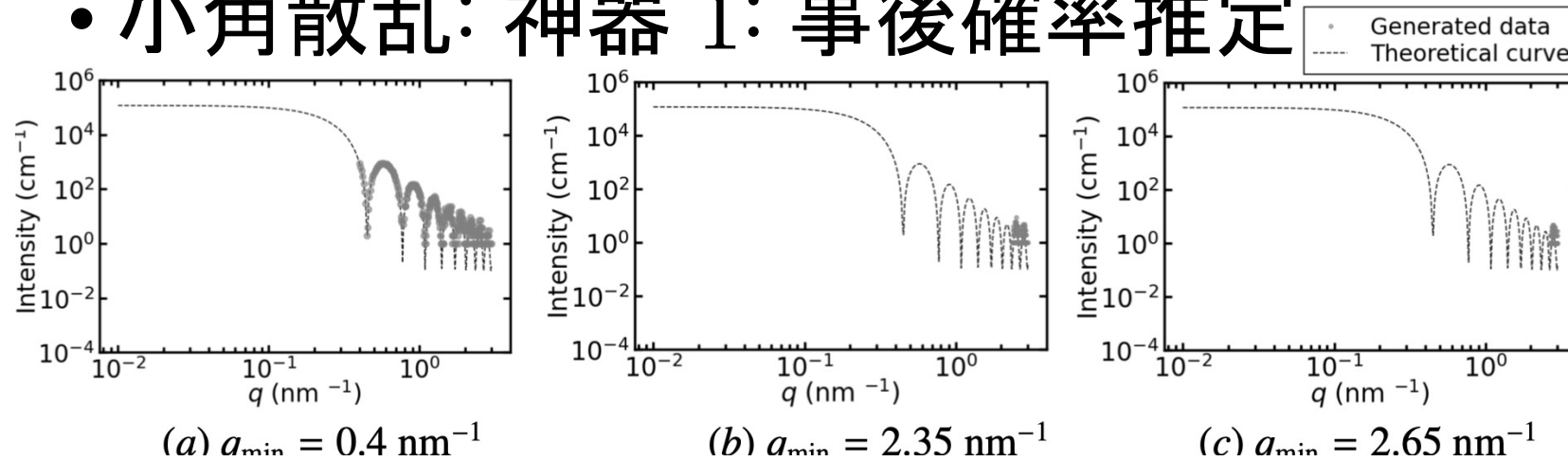
試料の大きさや密度
のパラメータを推定



信頼度の
定量評価が可能

小角散乱 (3/5)

• 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定

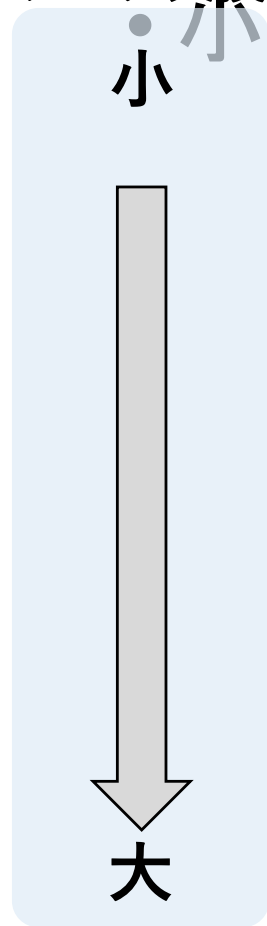


Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ*. 92, 094002 (2023),

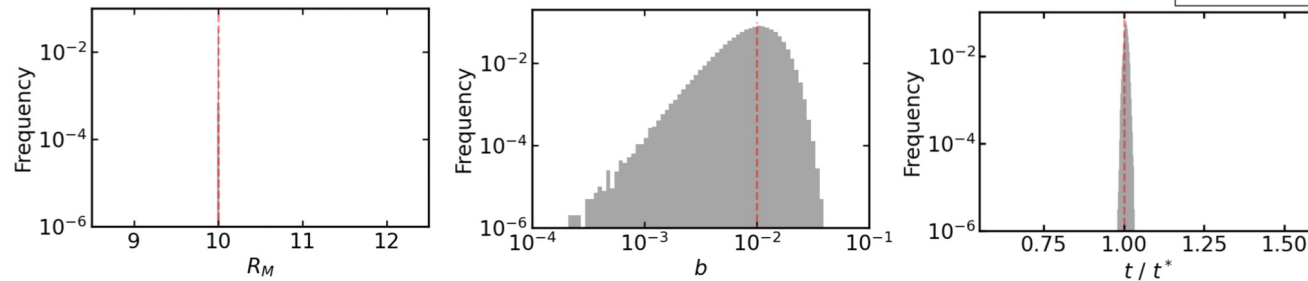
小角散乱 (4/5)

• 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定 計測限界の導出

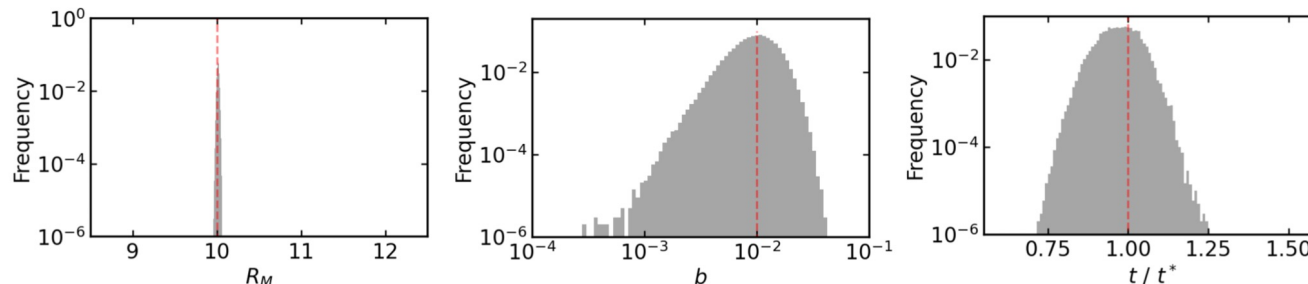
データ欠損



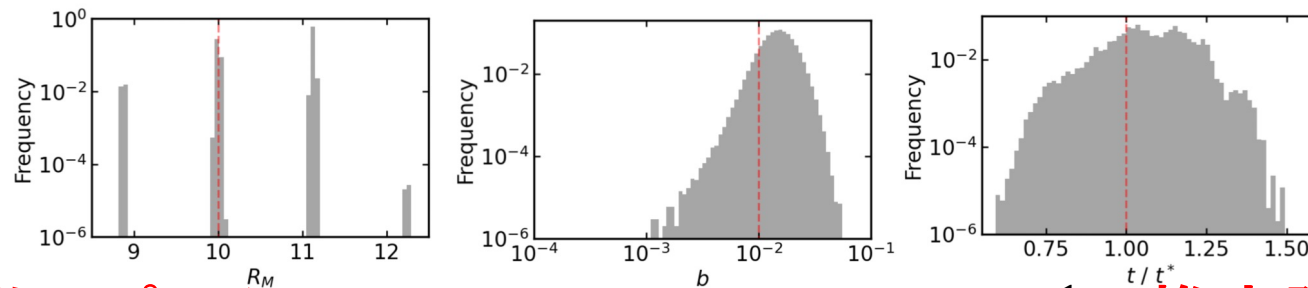
(a) $q_{\min} = 0.4$



(b) $q_{\min} = 2.35$



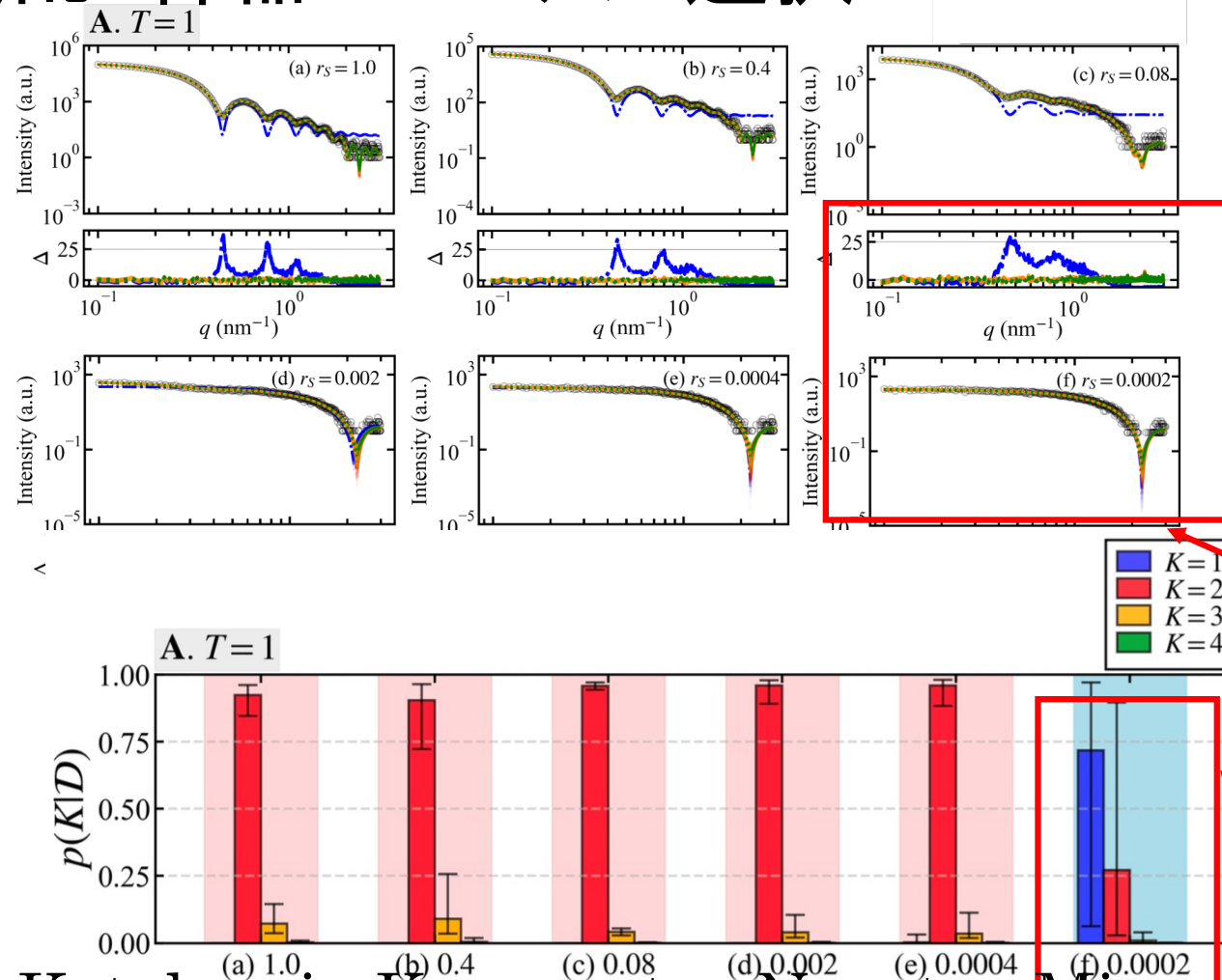
(c) $q_{\min} = 2.65$



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

小角散乱 (5/5)

• 小角散乱: 神器 2: モデル選択



解析限界

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

内容

- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論: 修士課程の研究の感想
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 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
- ベイズ計測の導入による計測科学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
- まとめと今後の展開

ベイズ計測の導入による 計測科学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

- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 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
- ベイズ計測の導入による計測科学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
- まとめと今後の展開

SPring-8全ビームライン ベイズ化計画

- ベイズ計測を啓蒙普及するのは、数理的ミニマムな研究だけでは不十分である
- 多種多様な複雑な計測に対しても、ベイズ計測三種の神器は通用するかを実証的に調べる
- 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
- フラッグシップ計測施設のSpring-8を起爆点に、てかベイズ計測を世界展開
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画の意図である

ベイズ推論と物性科学

2012年12月17日 物性研6階 大講義室

- ベイズ的スペクトル分解招待講演は12年前にすでに物性研行っていた
- 講演の具体的内容
 - ベイズ推論の紹介とベイズ推論の分光学(スペクトル分解)への導入
 - 物理パラメータの事後確立分布推定とモデル選択
- 講演の今後の展望
 - スペクトル分解をロールモデルとし、ベイズ推論は物性科学を根本的に変革する普遍的情報数理的枠組み
- 講演のインパクトはなく、物性科学は何も変わらなかった

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

SPring-8全ビームラインベイズ化計画

敬称略

情報と放射光研究者のマッチング

メスbauer

BL35XU 岡田研学生+筒井

小角散乱

BL08B2 岡田研学生+桑本

BL19B2

XAS測定

BL37XU 岡田研学生+水牧

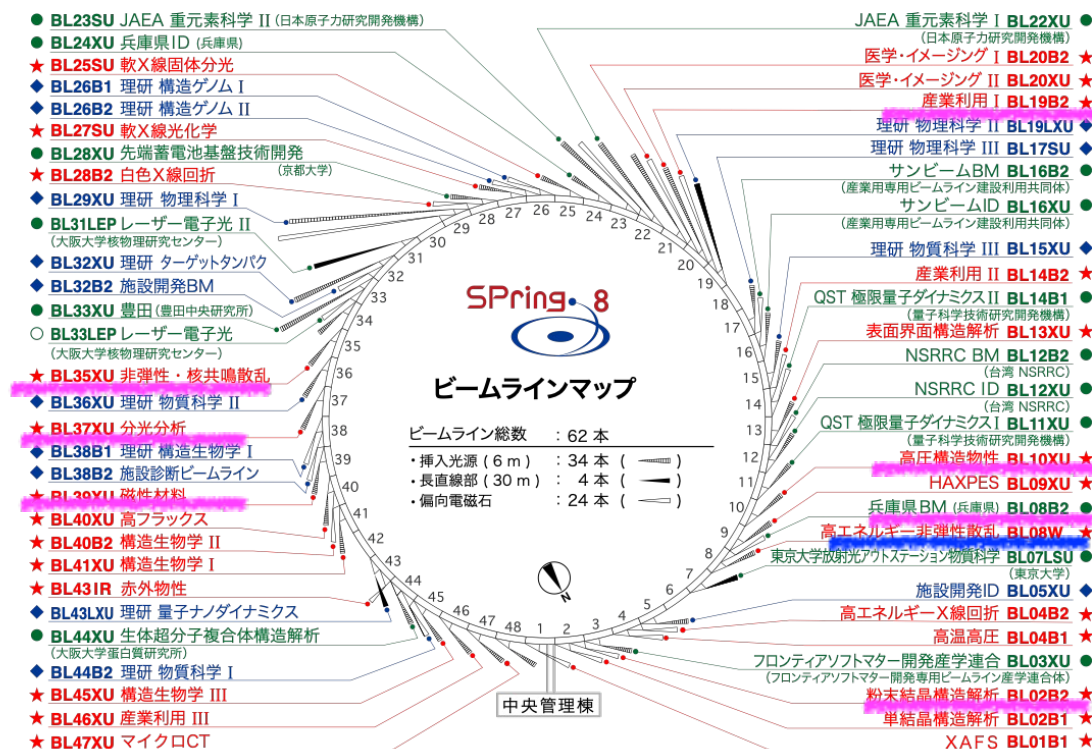
BL39XU

放射光ユーザーへの展開

時分割XRD

BL02B2 横山優一+河口彰吾、沙織

BL10XU ユーザー：公立大、東工大



赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本

全BL本数 : 62本

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

内容

- 自己紹介
- 階層的自然観とベイズ推論: 修士課程の研究の感想
- ベイズ計測の導入: $y=ax+b$ の取り扱いを通じて
 - ベイズ計測とは?
 - 最小二乗法
 - ベイズの定理 神器1: パラメータの事後確率推定
 - ノイズ分散推定
 - 神器2: ベイズ的モデル選択
- 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
- ベイズ計測の導入による計測科学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
- まとめと今後の展開

まとめと今後の展望

- $y=ax+b$ を例にベイズ計測とベイズ計測三種の神器を解説。一般的な非線形の計測に導入可能
- ベイズ計測の物性物理学への導入が大きなビジネスチャンス。ベイズ計測の導入による計測科学のゲームチェンジング
- ベイズ計測の普及戦略としてのSPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 物理学全般を取り扱うことができるデータ駆動科学の枠組みの紹介
- 物理学科/各学科にデータ駆動科学一講座導入

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

素粒子論

物性理論

光物性

磁性物理

データ駆動科学講座