ベイズ計測の基礎から展開へ: 研究スキルの獲得からキャリアプランまで

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
okada@edu.k.u-tokyo.ac.jp

本講演のスライドは岡田研HPにて公開予定

https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/lab.html#overview

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 –)

自己紹介のまとめ

- 大学と大学院修士課程で(物性)物理学の教育研究
- (株)三菱電機で半導体レーザーの量産スタッフ
- 大学院博士課程、助手、ERATO研究員でニューラルネット/情報統計力学/計算論的神経科学の研究
- 東大新領域複雑理工で、脳科学、化学、地球科学など多様な自然科学と出会い、それらを普遍的取り扱うデータ駆動科学を創設。

本講演の目的

- 五十嵐研の研究内容であるデータ駆動科学の背景を知る。
- が通常の実験データ解析と何が違っているかを説明。
- その違いがどういう利点を生むかを、データ駆動科学の情報数理基盤の一つであるベイズ計測に関する具体例を使って説明。
- データ駆動科学が卒論/修論/博論などの研究活動に有用であるだけでなく、就活および、より重要な、キャリアプランを提案できることを示す。

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

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

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

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

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?

実験・計測

モデリング

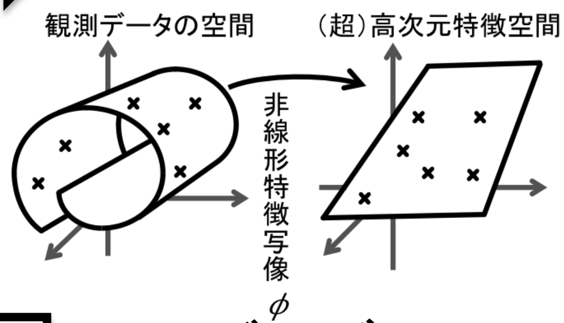
データ　　　説明変数

y = 基底Φ x

非0　0

数理・情報

性能評価



アルゴリズムの
高速・高精度化

階層的自然観での普遍的な構造
ベイズ計測の必然性

現在考察している階層

切断!!

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
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

計測科学の必須条件

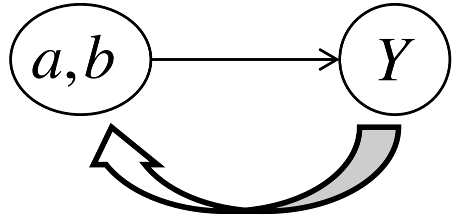
- 数理モデルのフリーパラメータを決める系統的枠組み
- 複数モデルをデータだけから選択する系統的枠組み
- 同一物質に対する複数の計測データを統合する系統的枠組み

ベイズ計測とは?

ベイズ推論

$$p(Y,a,b) = p(Y \mid a,b)\,p(a,b) = p(a,b \mid Y)\,p(Y)$$

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

ベイズ計測三種の神器

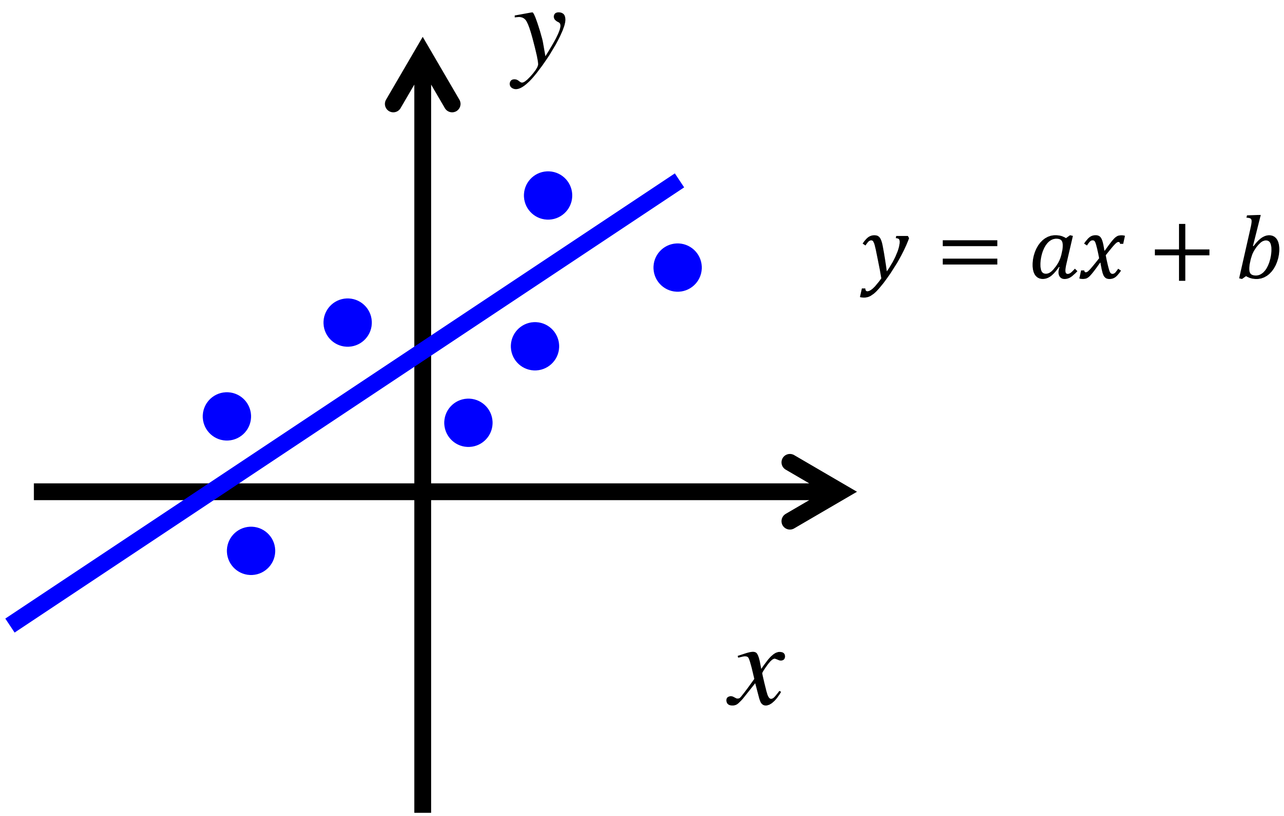
- パラメータの事後確率推定: 数理モデルのフリーパラメータを決める系統的枠組み
- ベイズ的モデル選択: 複数モデルをデータだけから選択する系統的枠組み
- ベイズ統合: 同一物質に対する複数の計測データを統合する系統的枠組み
  - ベイズ統合の説明は水牧先生@熊大の招待講演

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

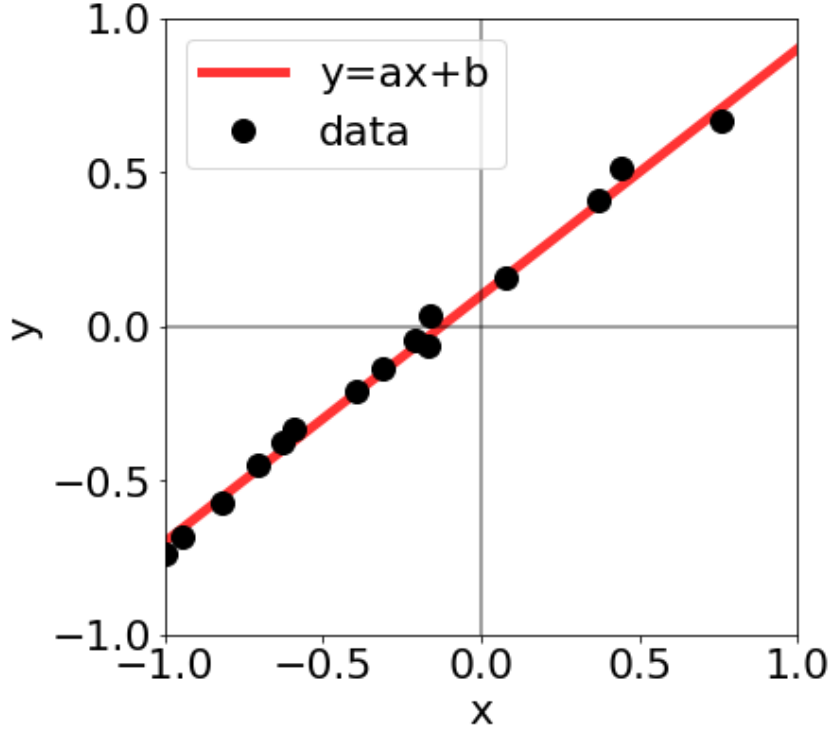
ベイズ計測の利点
y=ax+bの取り扱いを通じて

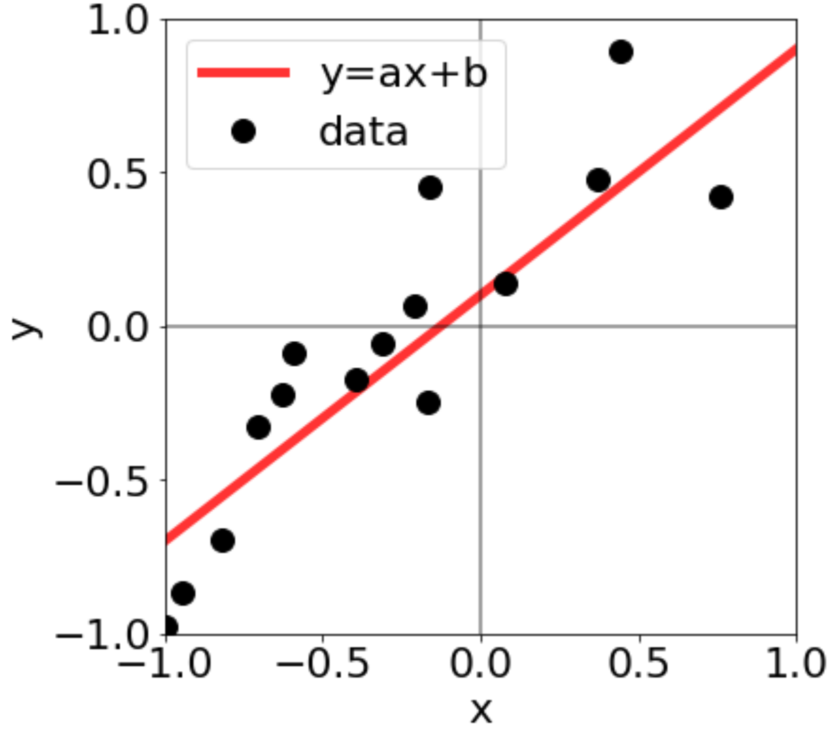
現状でも用いられている最も簡単な例



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

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

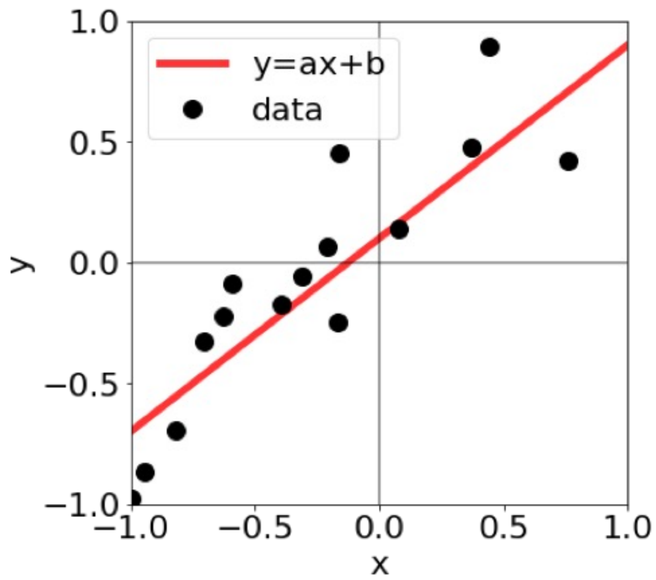
二乗誤差$E(a,b)$を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

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

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

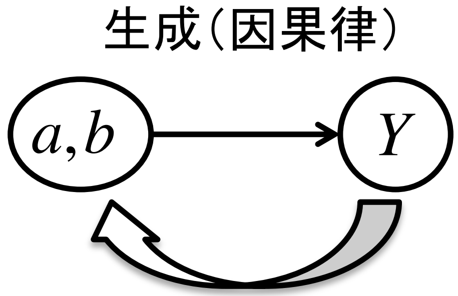


平均：$\bar{y}=\dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N}y_i$，分散：$\overline{x^2}=\dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

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

ベイズの定理による
神器1: パラメータの事後確率推定 (1/4)

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



＜ベイズの定理＞

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

$p(a,b \mid Y)$: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 (2/4)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

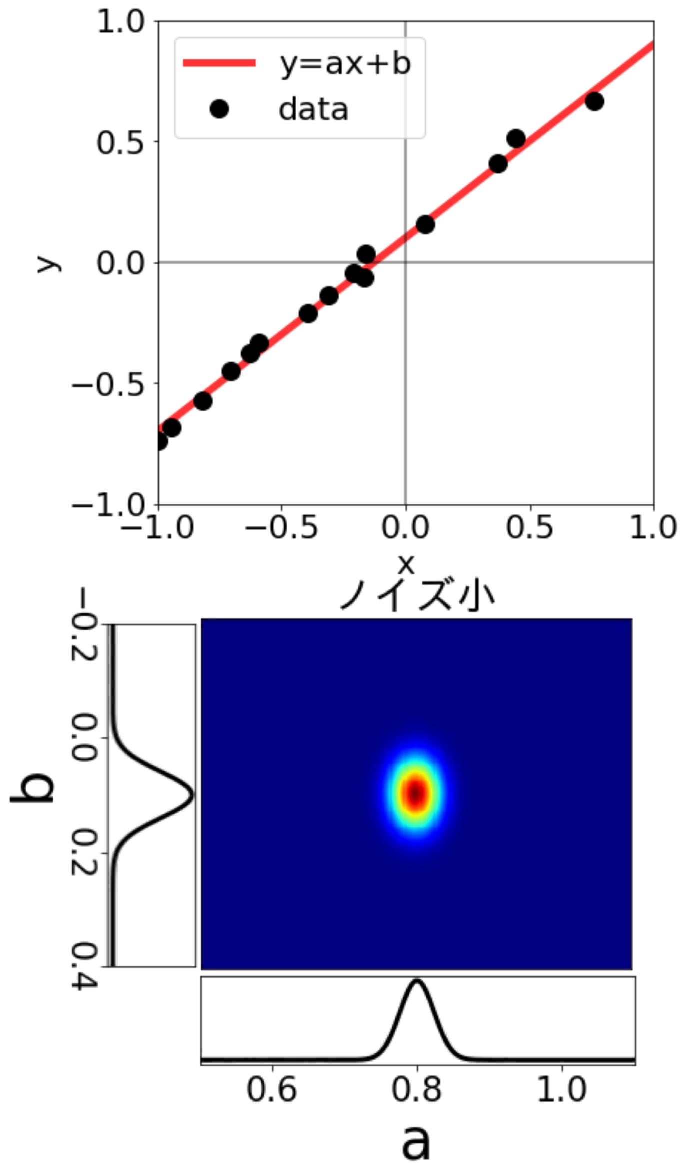
$$p(n_i) = p(y_i|a,b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

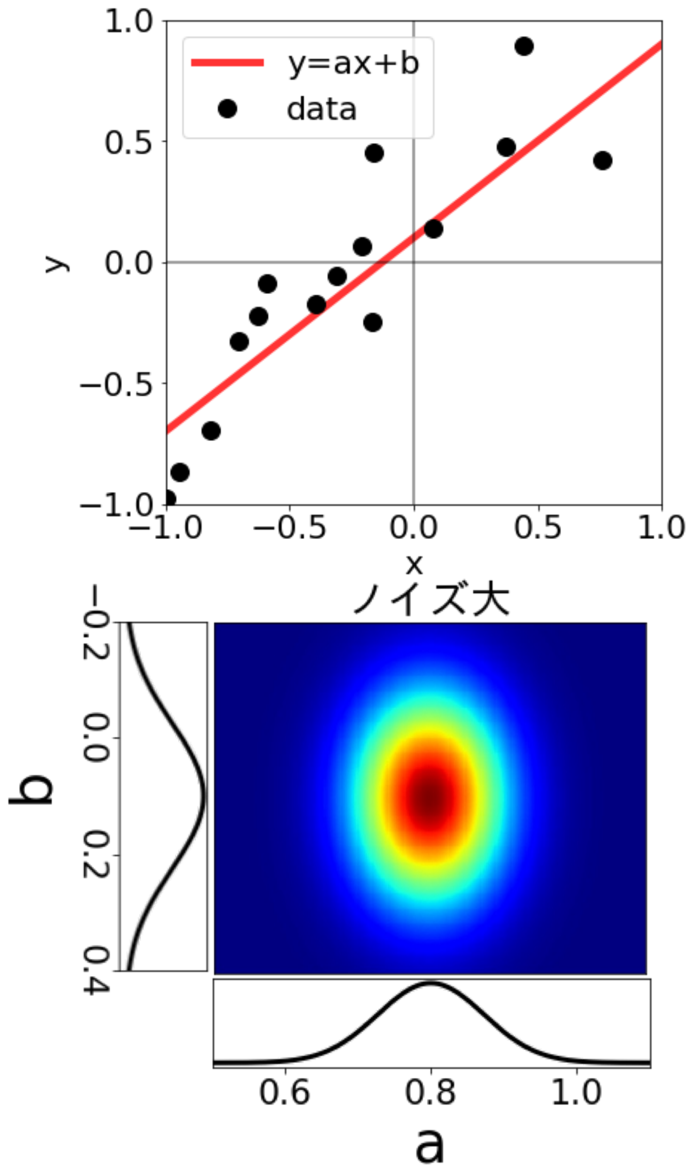
$$\begin{aligned}
p(Y|a,b) &= \prod_{i=1}^{N} p(y_i|a,b) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right)
\end{aligned}$$

神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

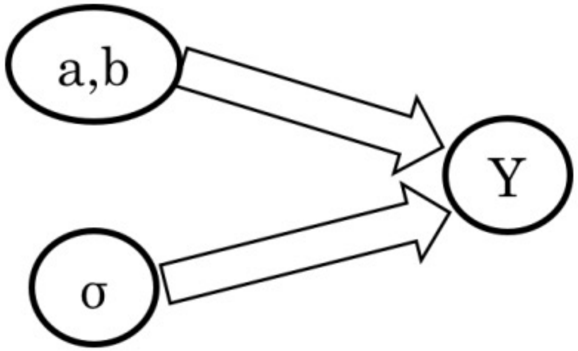
$$
\begin{aligned}
p(a, b|Y) &= \frac{p(Y|a,b)p(a,b)}{p(Y)} \propto p(Y|a,b) \\
&= \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}\Big(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0, b_0)\Big)\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}\Big(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b)\Big)\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a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

神器1: パラメータの事後確率推定 (4/4)





神器1: パラメータの事後確率推定
ノイズ分散推定



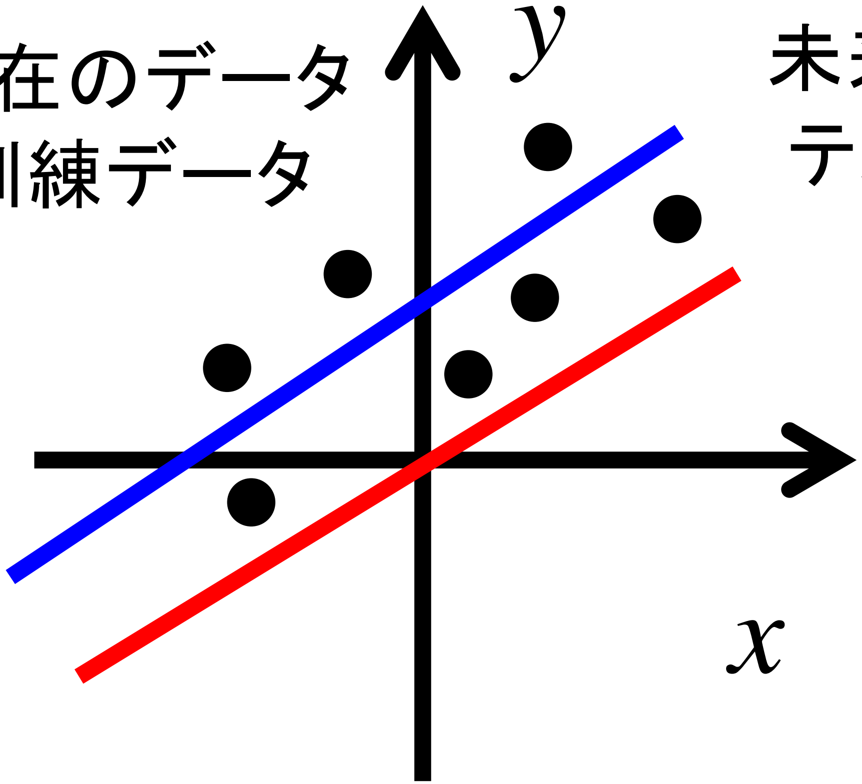
$$
\begin{aligned}
p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb\, p(Y|a,b,\sigma^2) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \int dadb \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \left\{\exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0,b_0)\right) + \int da \exp\left(-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2\right)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

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

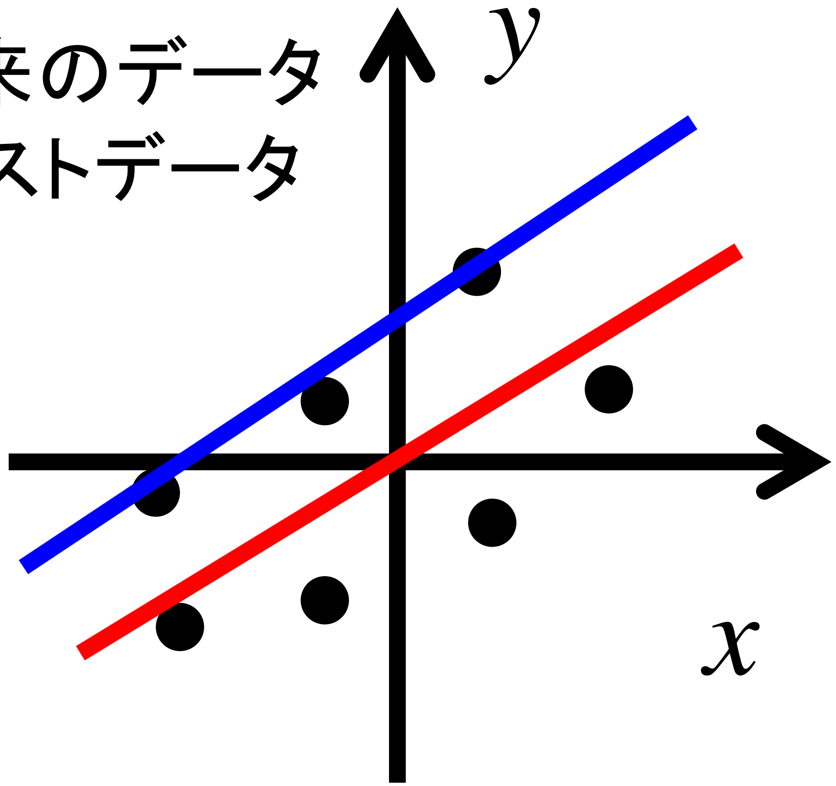
問題意識　神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$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

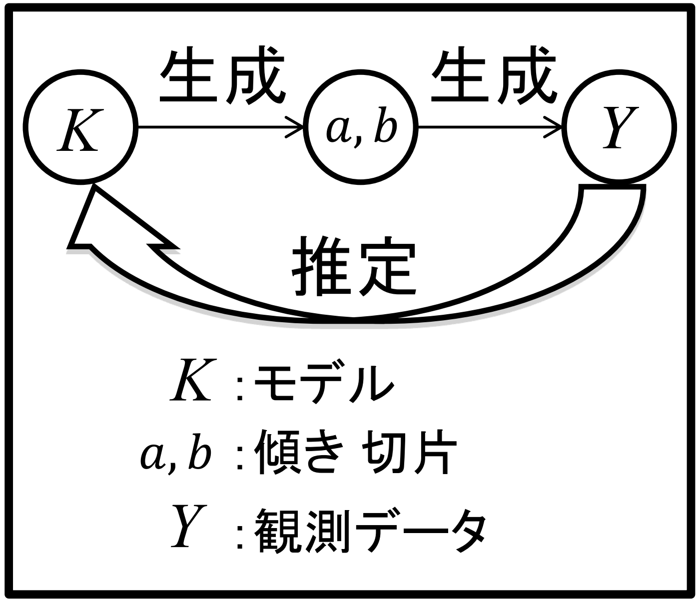
1. 欲しいのは　$p(K|Y)$

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

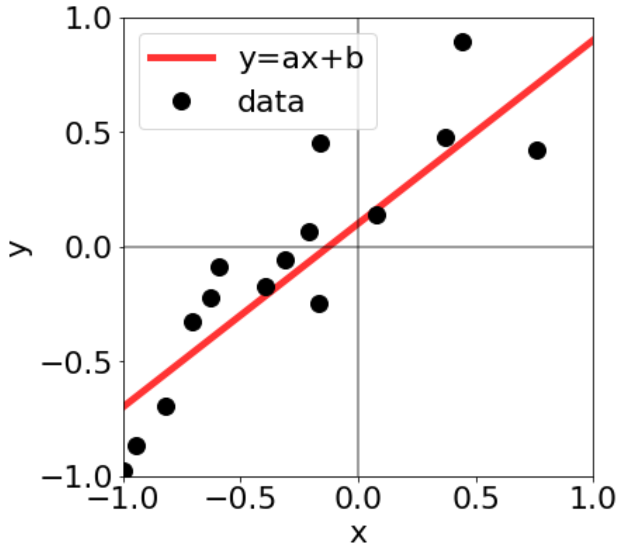
$$p(K,Y) = \int p(K,\theta,Y)\,d\theta$$

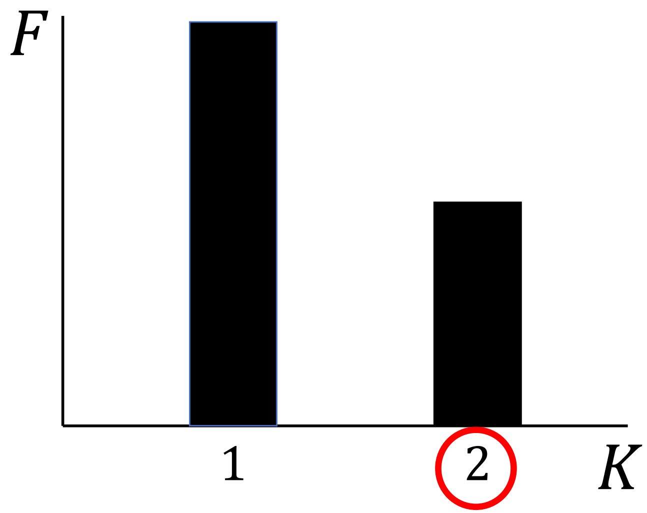
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)\,d\theta$$

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

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: 自由エネルギー差





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

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

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

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

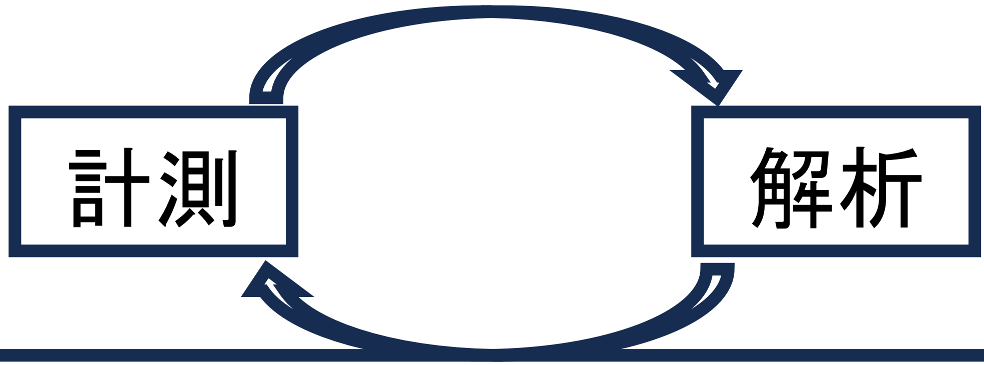
- 従来の最小二乗法
  - 1.物理パラメータの点推定
- ベイズ計測

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

ベイズ計測による
計測と解析の双方向相互作用

従来法: ポストプロセスとしての解析

提案法: 計測と解析の双方向的相互作用



ベイズ計測の習得法

1. $y=ax+b$への解析的計算の適用
2. $y=ax+b$への数値計算の適用
3. 1.と2.の結果が一致するのを確認
4. ベイズ的スペクトル分解
5. 各課題に取り組む

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

ベイズ計測普及の戦略は何か?

- 直線回帰$y=ax+b$の例でベイズ計測の利点は明らかなので、あとは個々の実験家に任せれば良い。
- これは誤った考え方
- 実験家は従来の手法で日々の仕事が回っているので、新しいベイズ計測を学ぶ必然性が感じられない。
- これまでやってきたことを否定されたくない。
- これは大きなビジネスチャンス!!

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

ベイズ計測の多様な計測への展開

- これまでやってきたことを否定されたくない
- 自ら否定せざるをえない環境を作る
- 実験家の重要課題を次々に解決
- ベイズ計測の多様な計測への展開
- これを他人任せ実験家任せではなく、理論家ができるだけビジブルな形で行う
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画

 -> 全日本計測施設ベイズ化計画

SPring-8全ビームライン ベイズ化計画

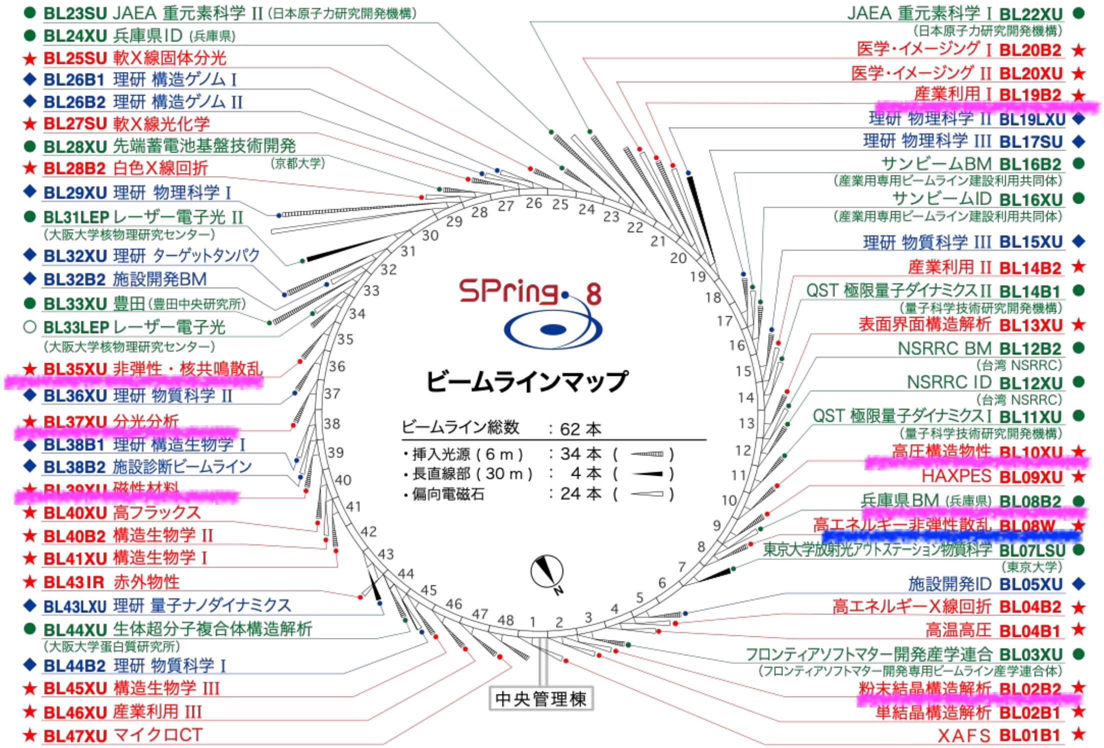
- ベイズ計測を啓蒙普及するのは、数理的ミニマムな研究だけでは不十分である
- 多種多様な複雑な計測に対しても、ベイズ計測三種の神器は通用するかを実証的に調べる
- 力強い実証方法は、SPring-8の全てのビームラインにベイズ計測を導入
- フラッグシップ計測施設のSpring-8を起爆点に、てかベイズ計測を世界展開
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画の意図である

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

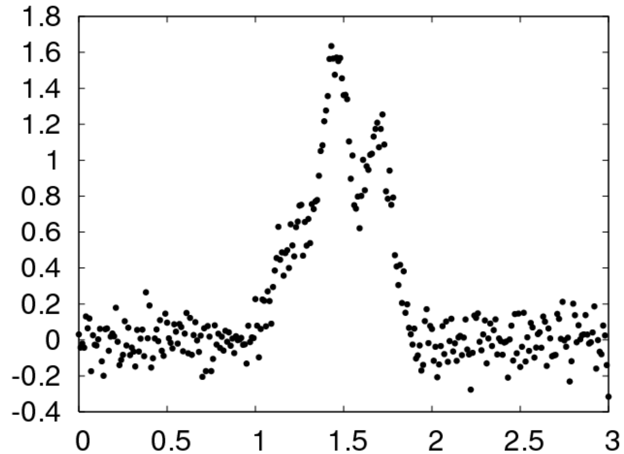
時分割XRD
BL02B2　横山優一+河口彰吾、沙織
BL10XU　ユーザー：公立大、東工大

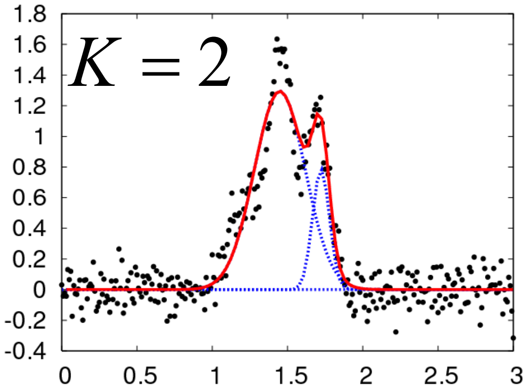
赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本

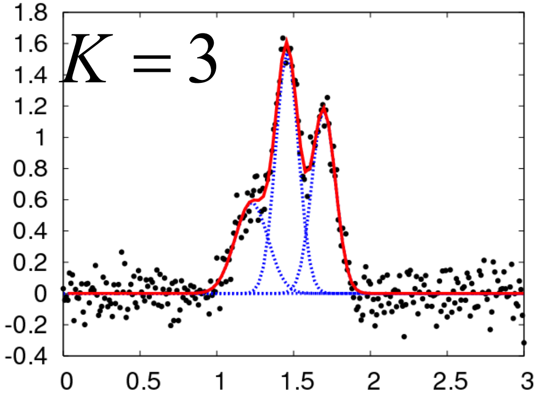
全BL本数：62本

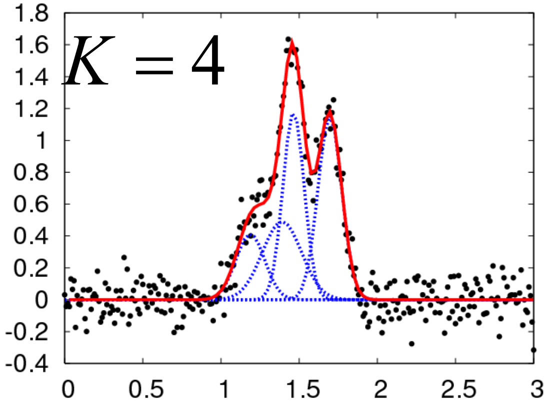
年度	2021	2022	2023
導入	2	8	14
全BL	26	26	26

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 Network*s 2012

スペクトル分解の定式化

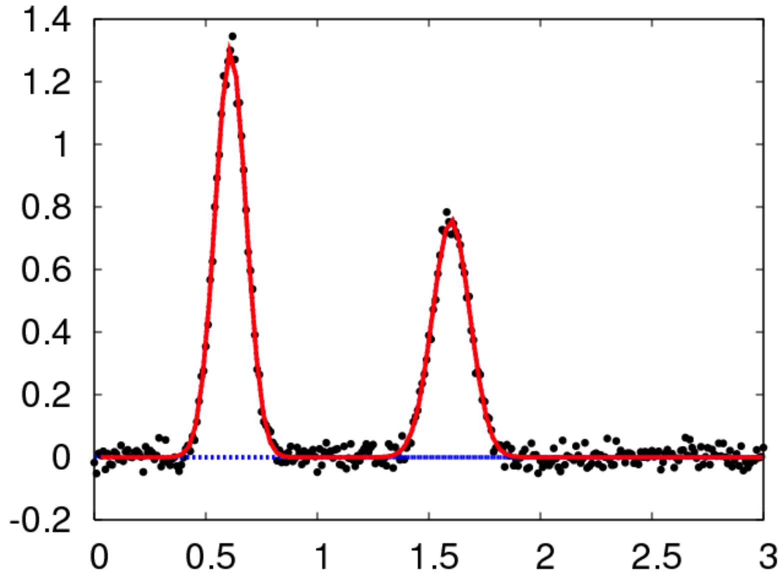
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i : 入力　y_i : 出力

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

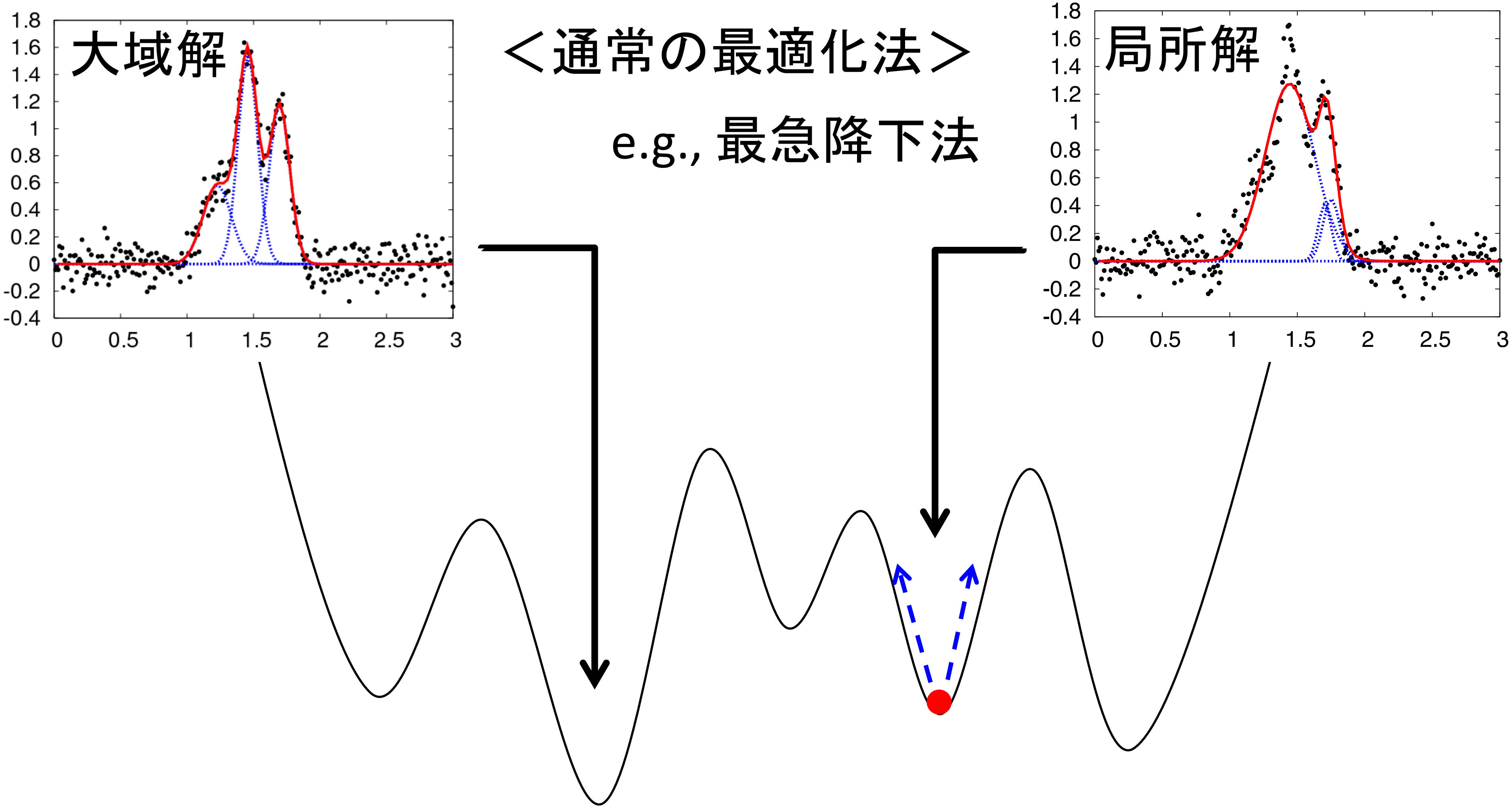
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \cdots, K$$



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）

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

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

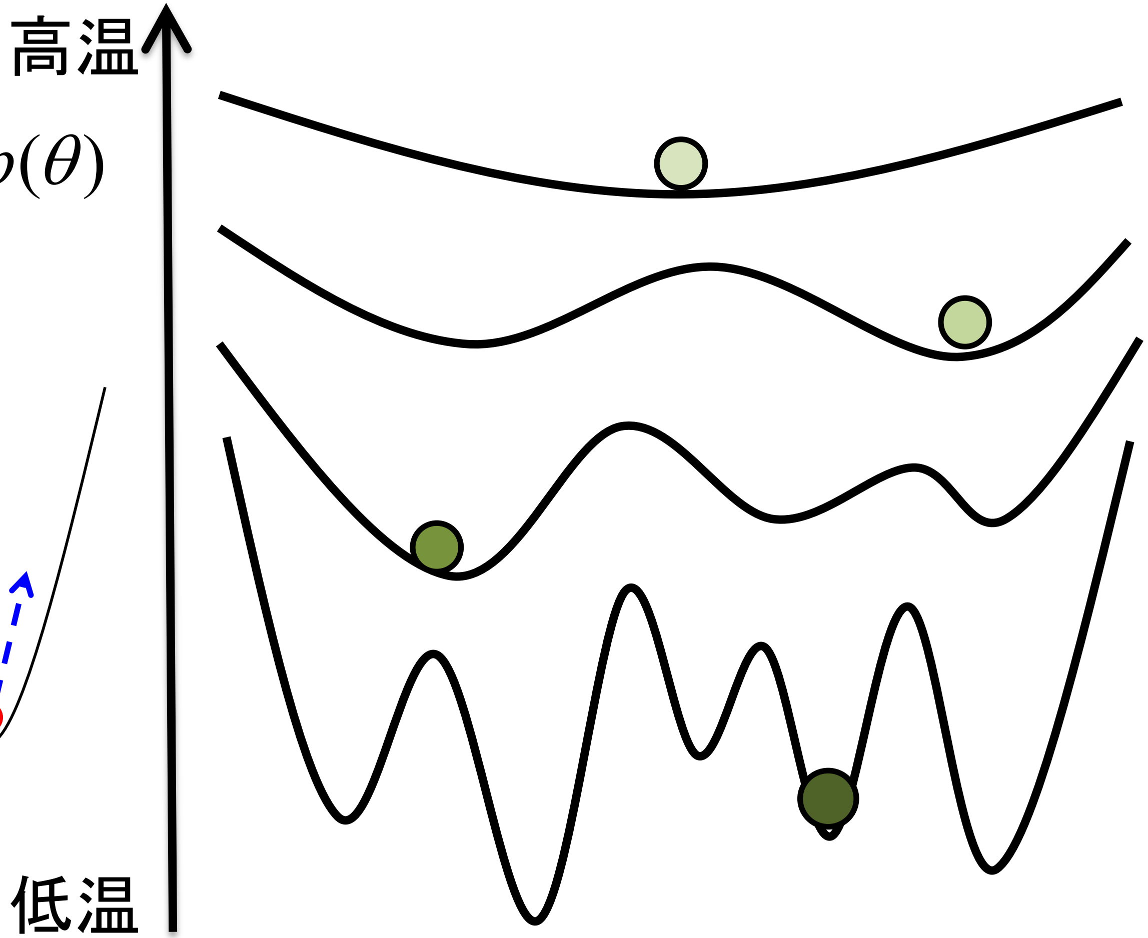


モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

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

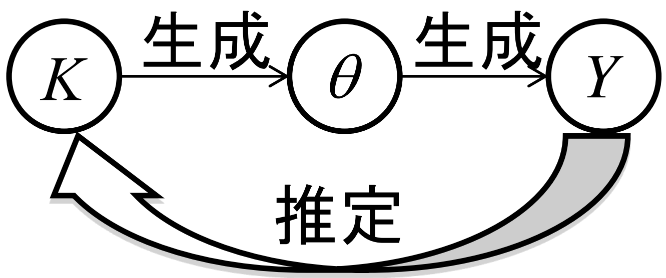
1. 欲しいのは　$p(K|Y)$

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

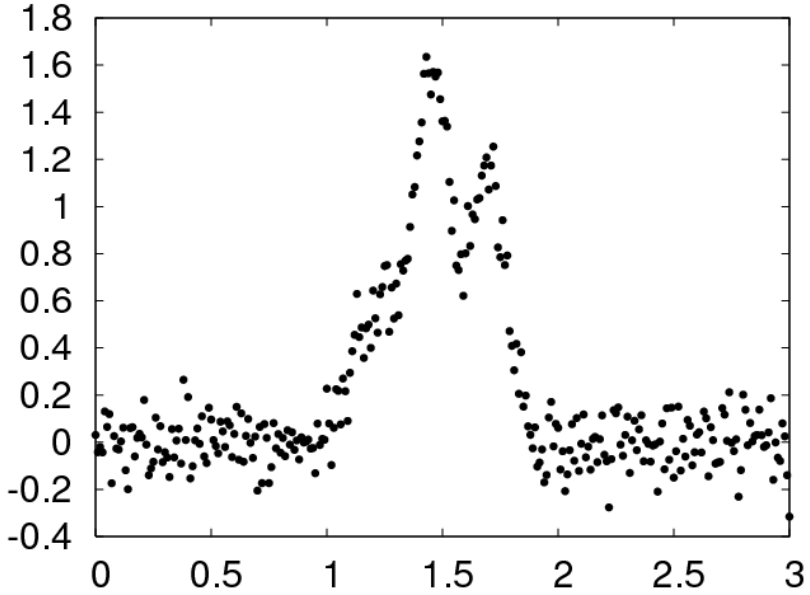
$$p(K,Y) = \int p(K,\theta,Y)\,d\theta$$

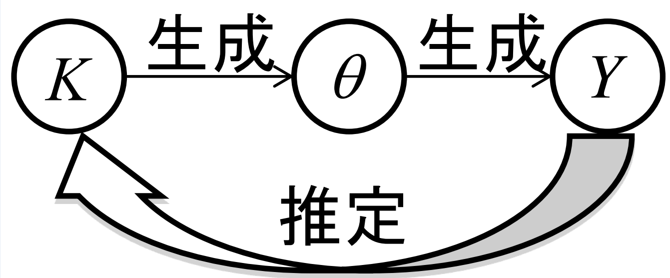
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)\,d\theta$$

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

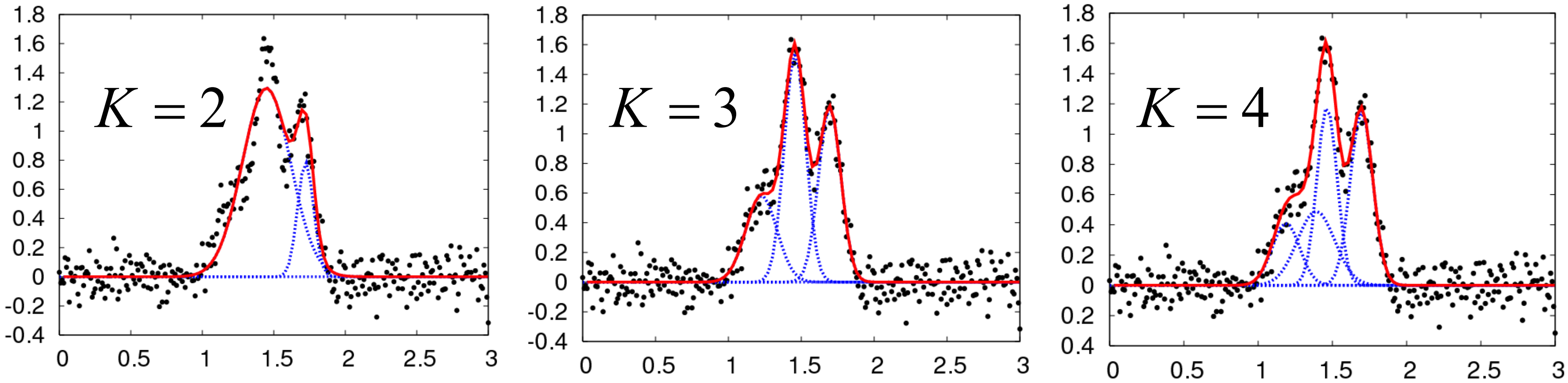
自由エネルギーを最小にする個数　Kを求める.

モデル選択: Kをどう選ぶか



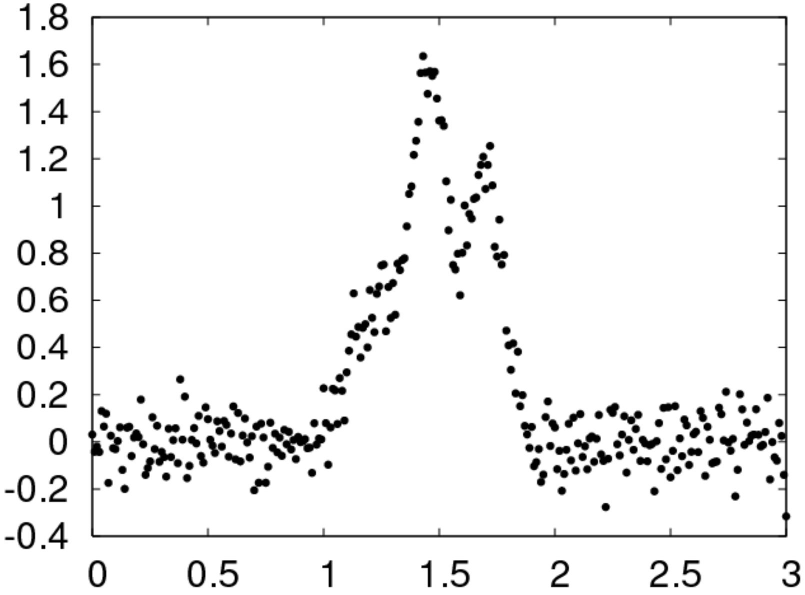


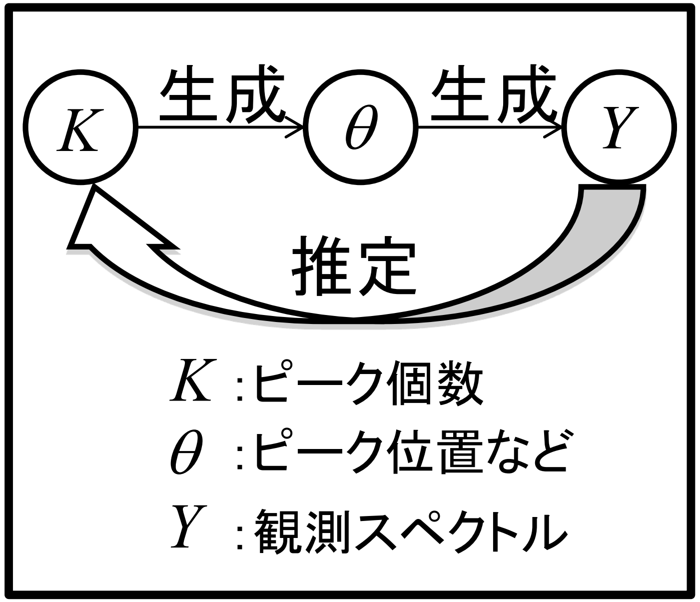
K :ピーク個数
θ :ピーク位置など
Y :観測スペクトル

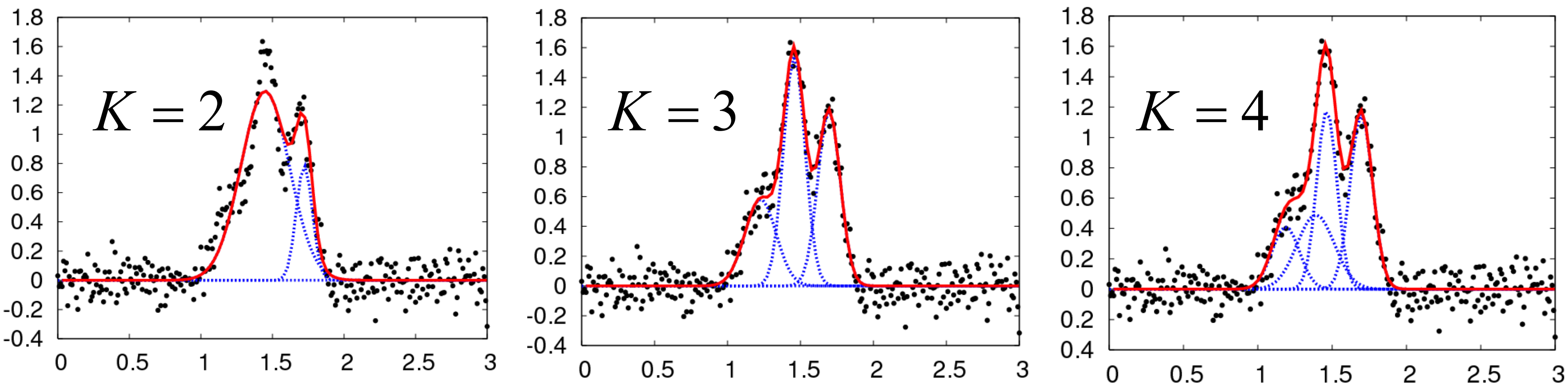


Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

ベイズ的スペクトル分解: Kをどう選ぶか







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

スペクトル分解の三つのレベル (1/2)

スペクトル分解の計算理論

データ解析の目的: 多峰性スペクトルから背後にある離散電子のエネルギー準位を推定する

データ解析の適切さ: 多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和で表し、その単峰性関数の個数を推定する。誤差関数の最小化では、単峰性関数が多い方が誤差関数は小さい。そこで統計学の交差検証誤差やベイズ的モデル選択で単峰性関数の数Kを決める。

スペクトル分解のモデリング

多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和に観測ノイズが付加されれて生成するとモデリングする

スペクトル分解の三つのレベル (2/2)

スペクトル分解の表現・アルゴリズム

多峰性スペクトルを単峰性関数の線形和に観測ノイズが付加されれて生成するとモデリングし、ベイズ推論を適用することで、K個の単峰性関数の大きさ、位置、幅の事後確率を求める。各Kに対して、ベイズ的自由エネルギーを求め、ベイズ的自由エネルギーを最小にするKを求める。そのK個の単峰性関数の位置を、電子のエネルギー準位とする。

Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, "Three Levels of Data-Driven Science", *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.

データ駆動科学の三つのレベル (2016)

計算理論(対象の科学，計測科学)

データ解析の目的とその適切性を議論し，実行可能な方法の論理(方略)を構築

モデリング(統計学，理論物理学，数理科学)

計算理論のレベルの目的，適切さ，方略を元に，系をモデル化し，計算理論を数学的に表現する

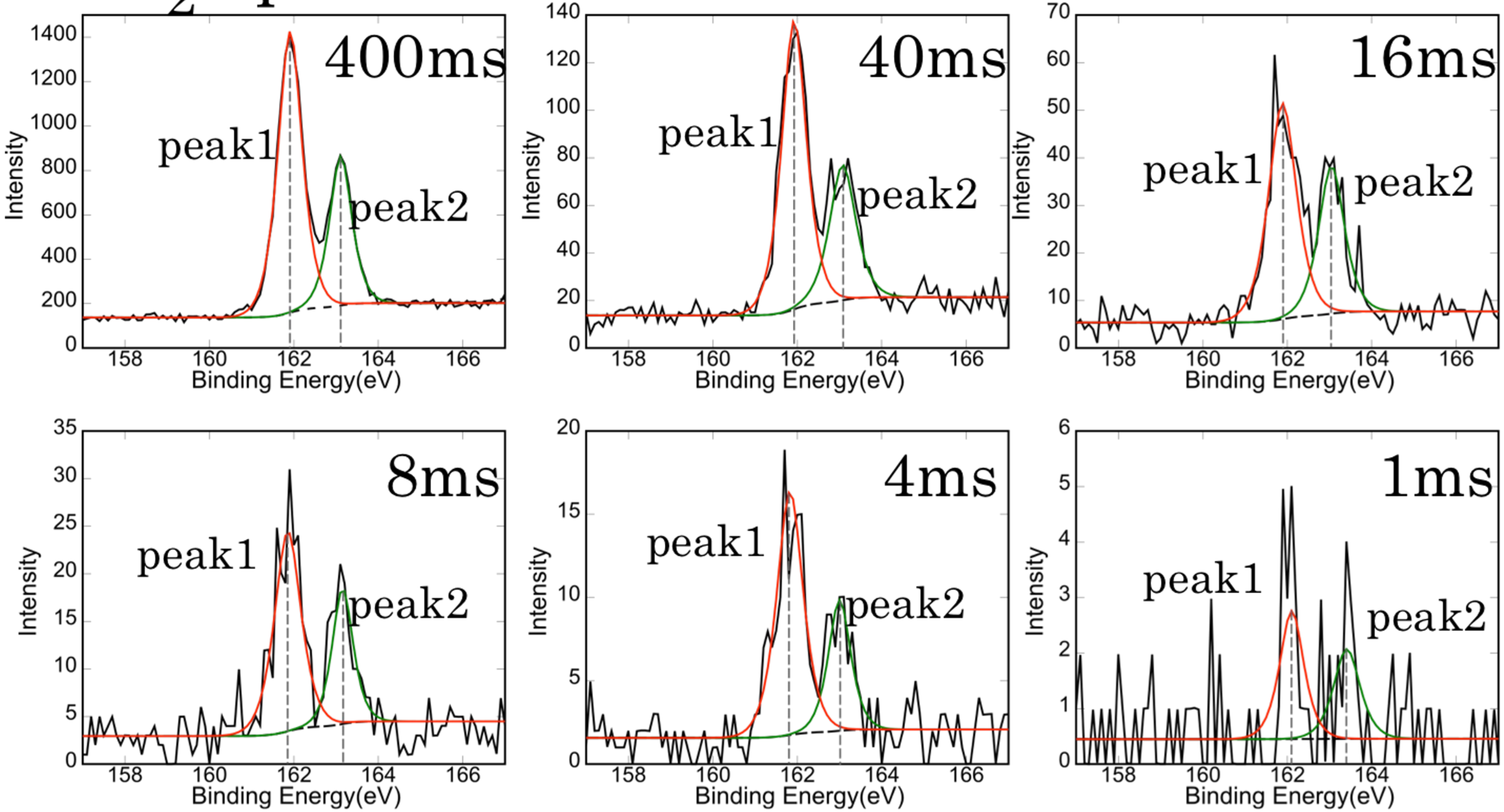
表現・アルゴリズム(統計学，機械学習，計算科学)

モデリングの結果得られた計算問題を，実行するのためのアルゴリズムを議論する.

Igarashi, Nagata, Kuwatani, Omori, Nakanishi-Ohno and M. Okada, “Three Levels of Data-Driven Science”, *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016.

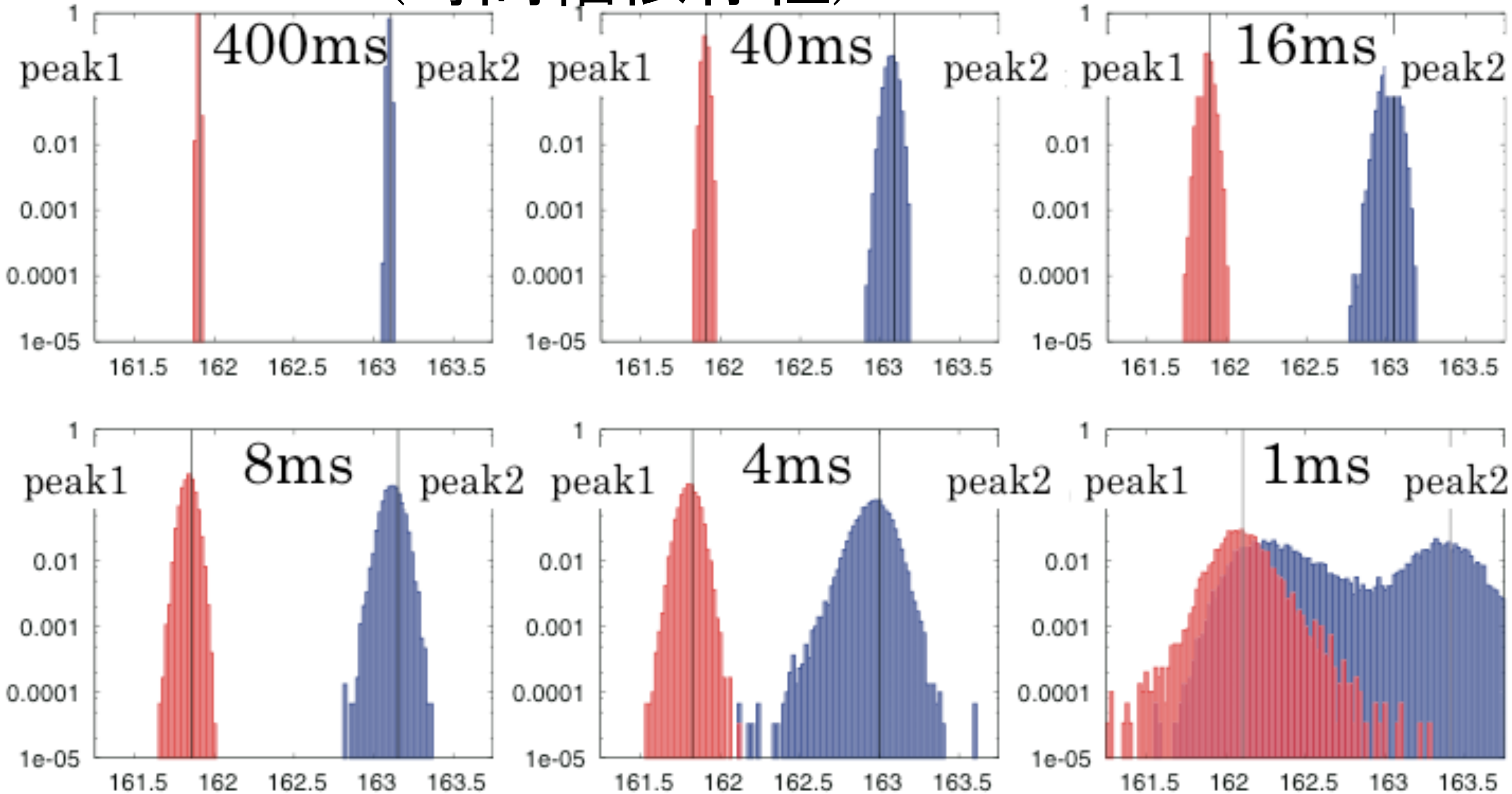
計測限界の理論的取り扱い (4/9)
(Nagata *et al.* 2019)

MoS_2 2p（時間幅依存性）



計測限界の理論的取り扱い (6/9)
(Nagata *et al.* 2019)

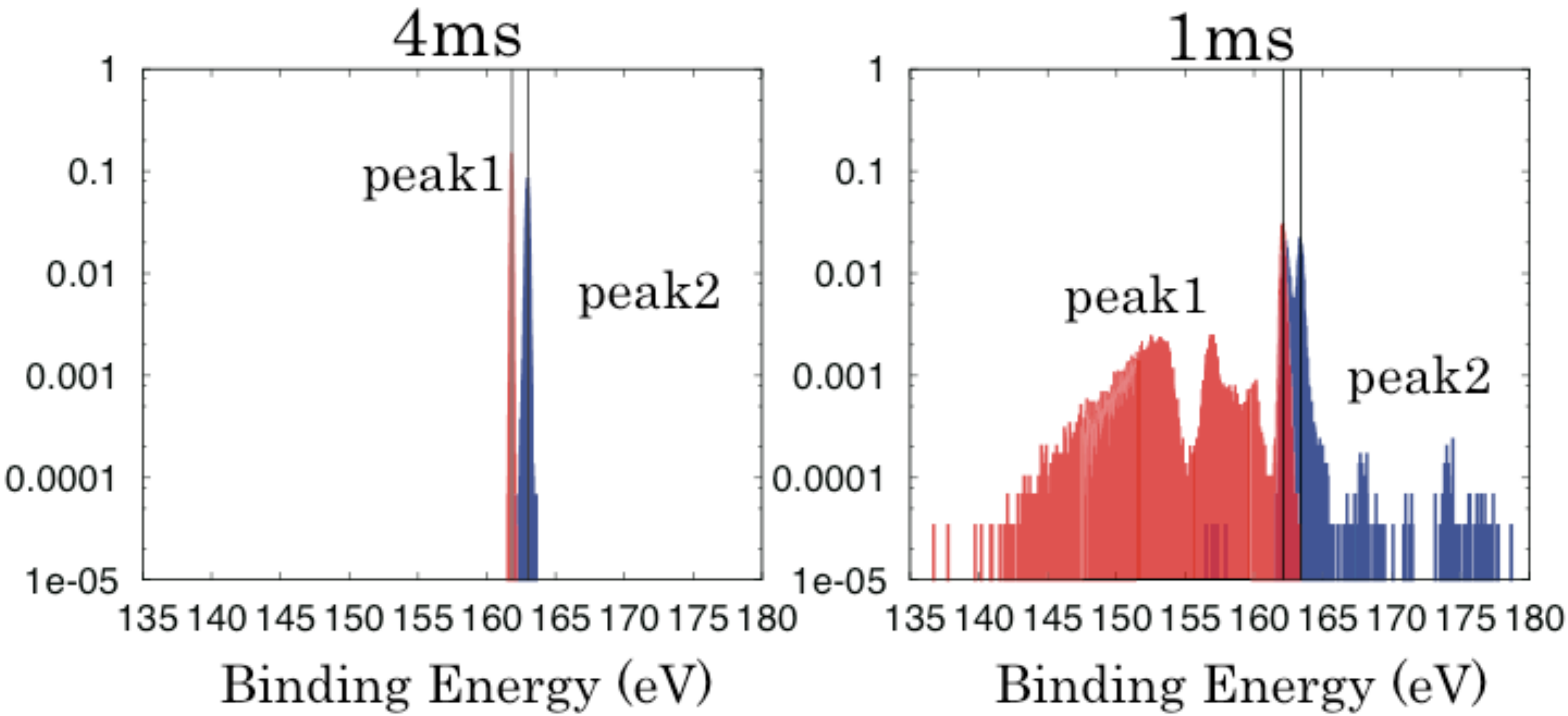
ベイズ計測: ベイズ推論によって,
ピーク位置のベイズ事後確率を計算
(時間幅依存性)



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

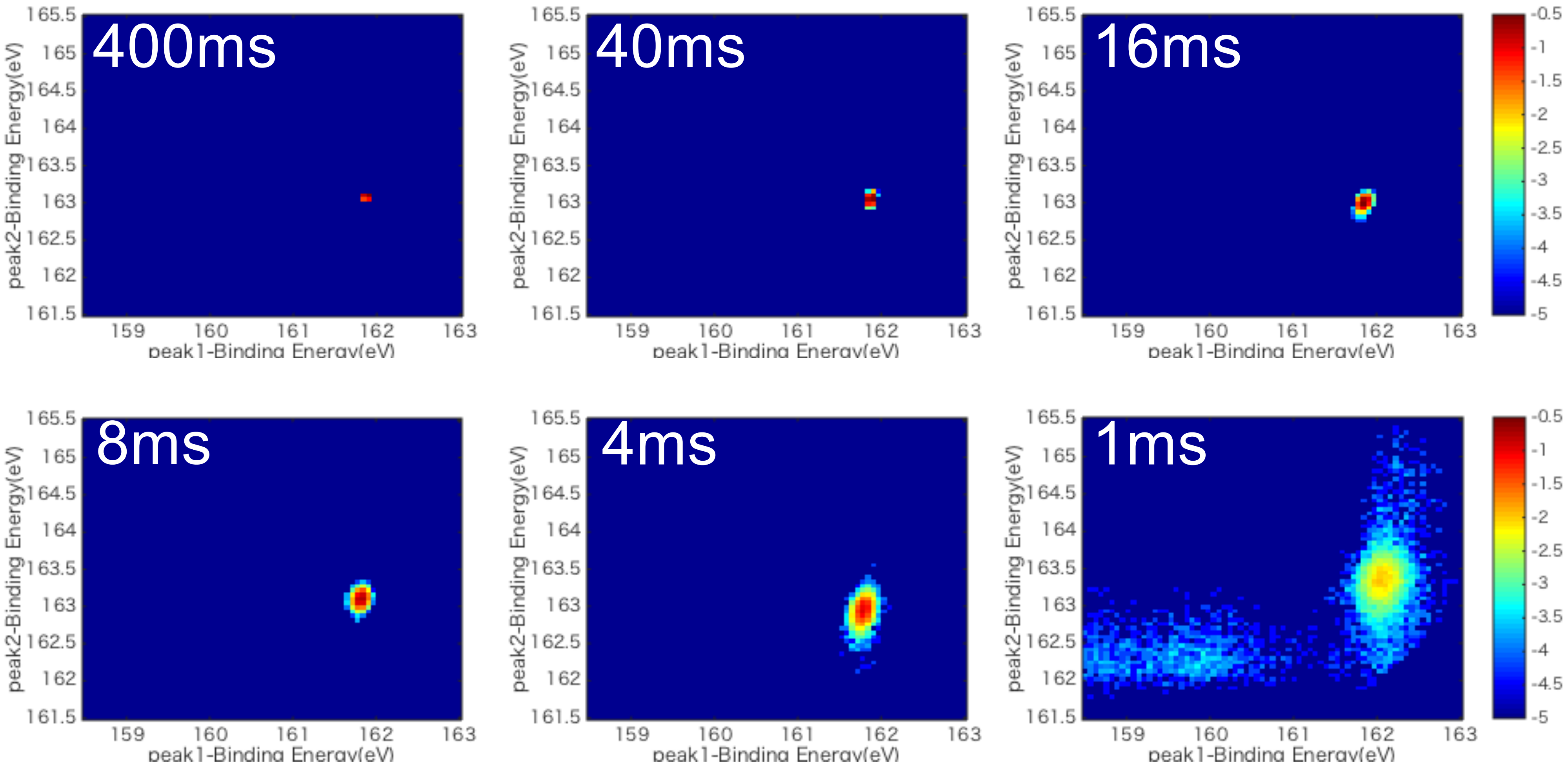
ベイズ計測: ベイズ推論によって,
ピーク位置のベイズ事後確率を計算

(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



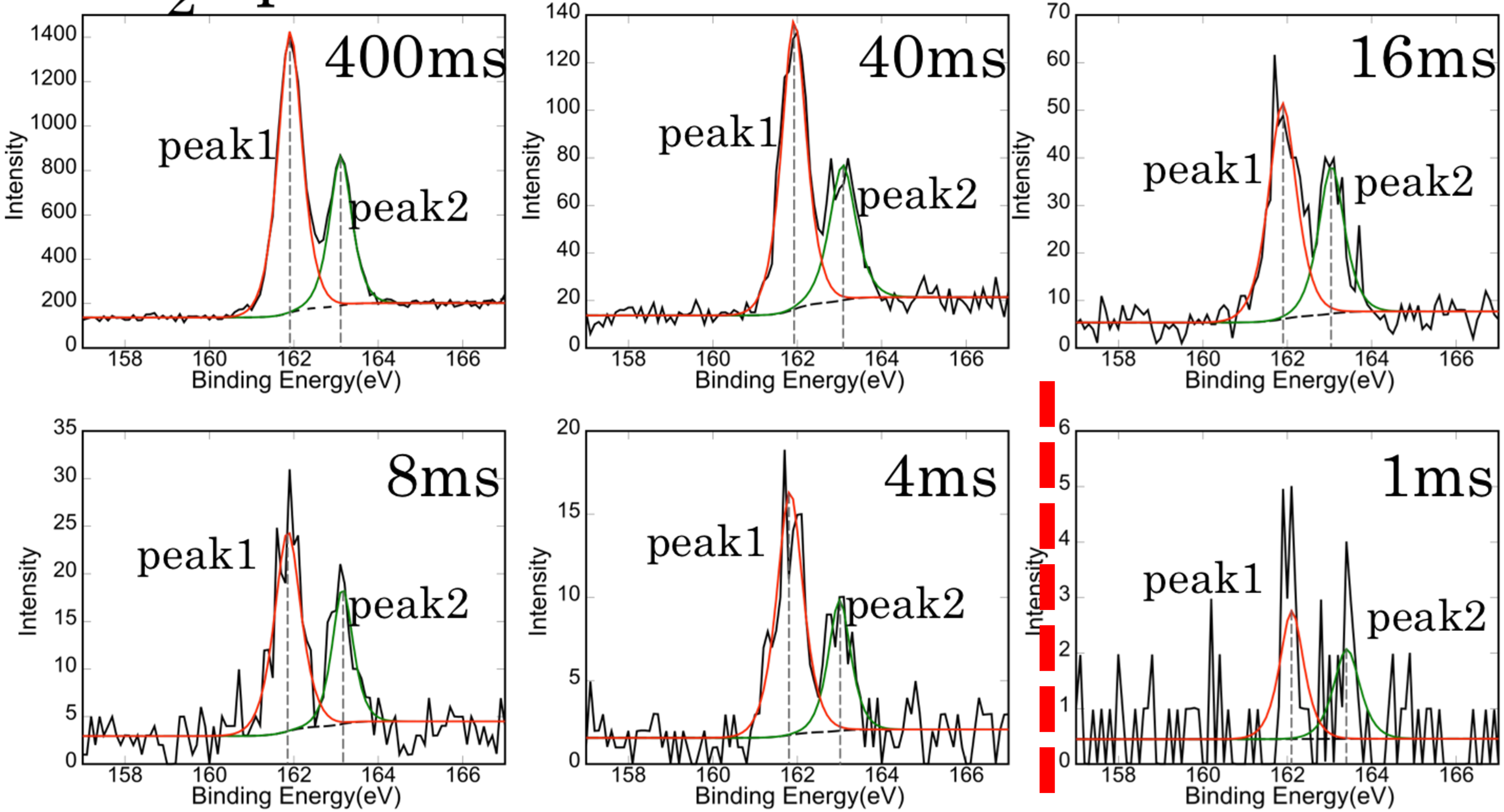
ここまで

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

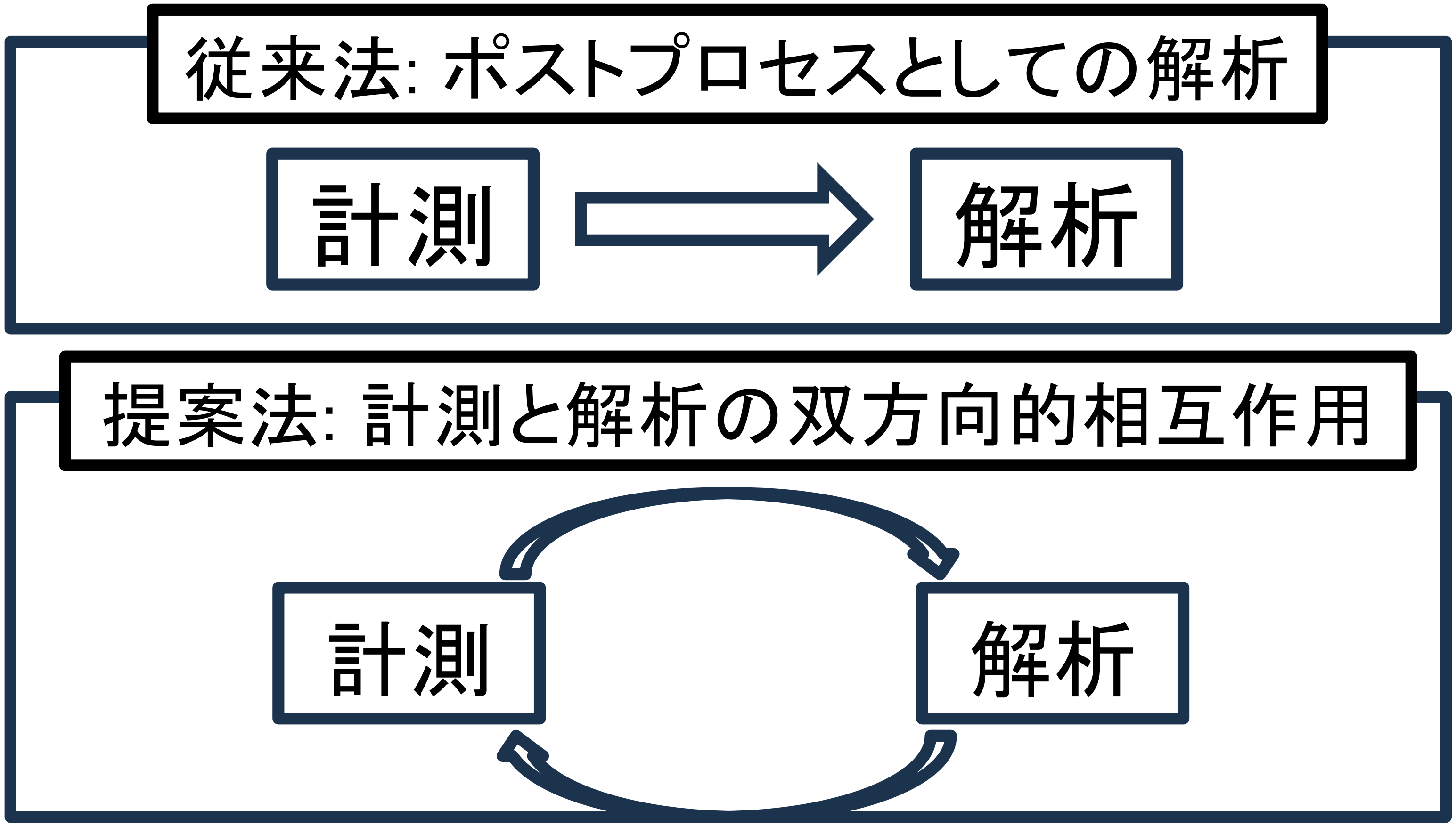
ベイズ計測: ベイズ推論によって, ピーク位置のベイズ事後確率を計算

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

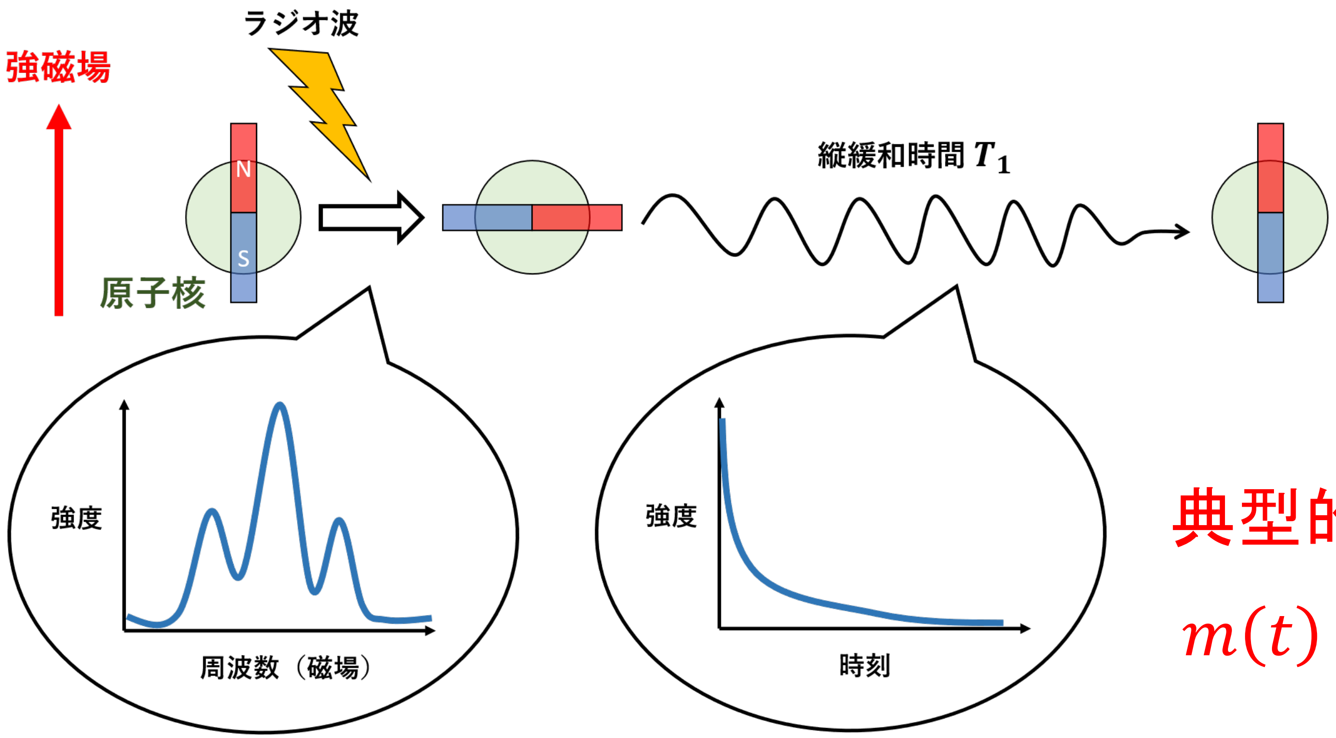


核磁気共鳴法へのデータ駆動科学的手法の開発

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



NMRスペクトル　　$\boxed{\text{核スピン格子緩和曲線}}$

典型的には

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

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)

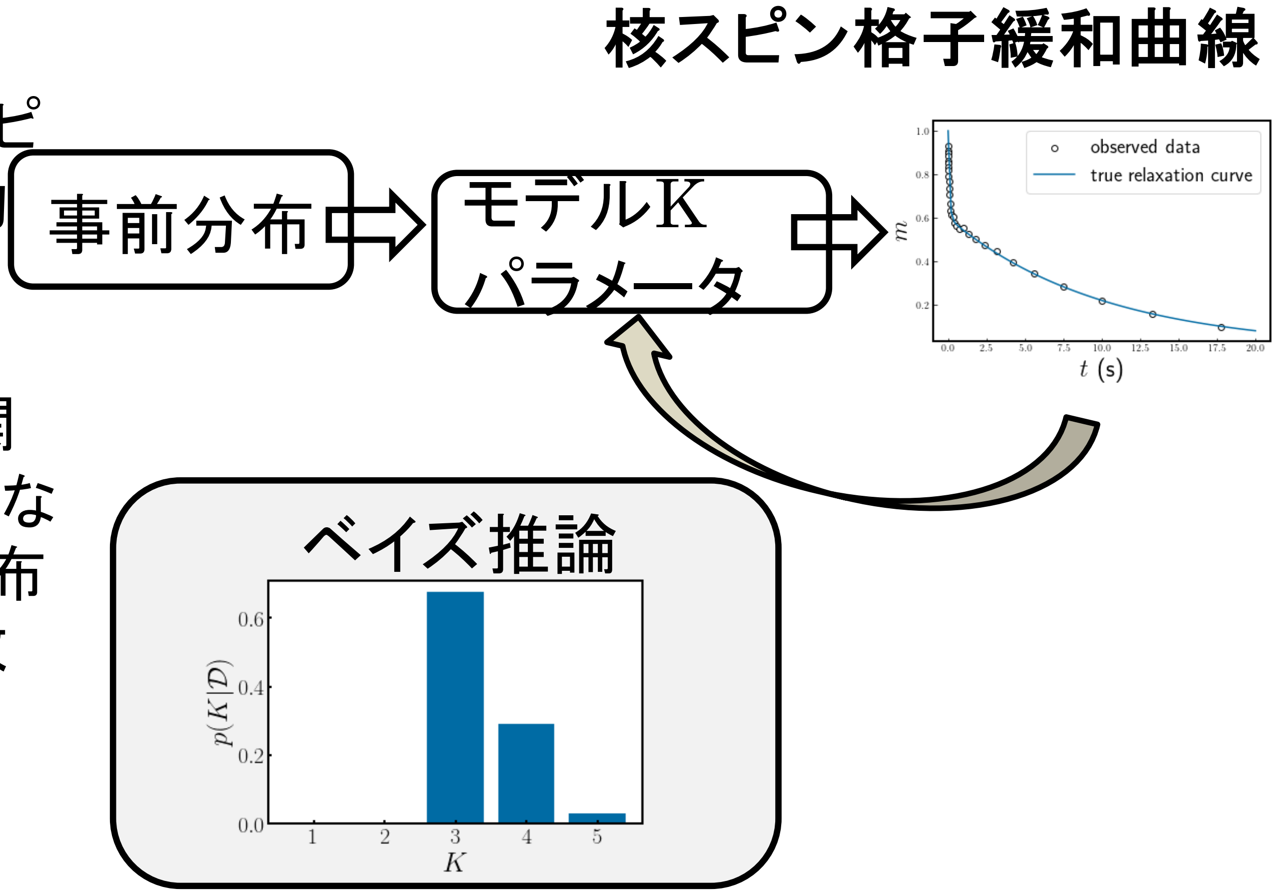
NMRまとめ

・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。



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

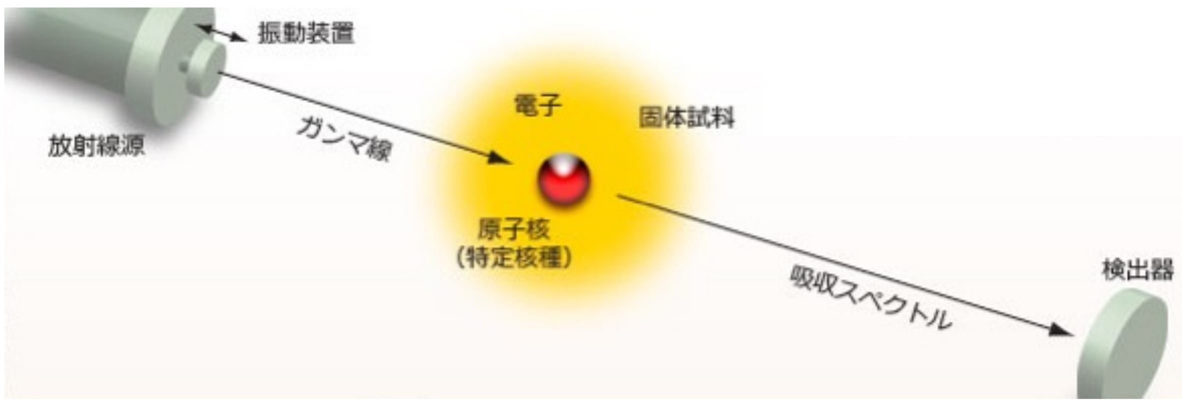
東京大学大学院　理学系研究科　森口椋太
公益財団法人高輝度光科学研究センター　筒井智嗣
東京大学大学院　新領域創成科学研究科　片上舜
国立研究開発法人物質材料研究機構　永田賢二
熊本大学大学院　先端科学研究部　水牧仁一朗
東京大学大学院　新領域創成科学研究科　岡田真人

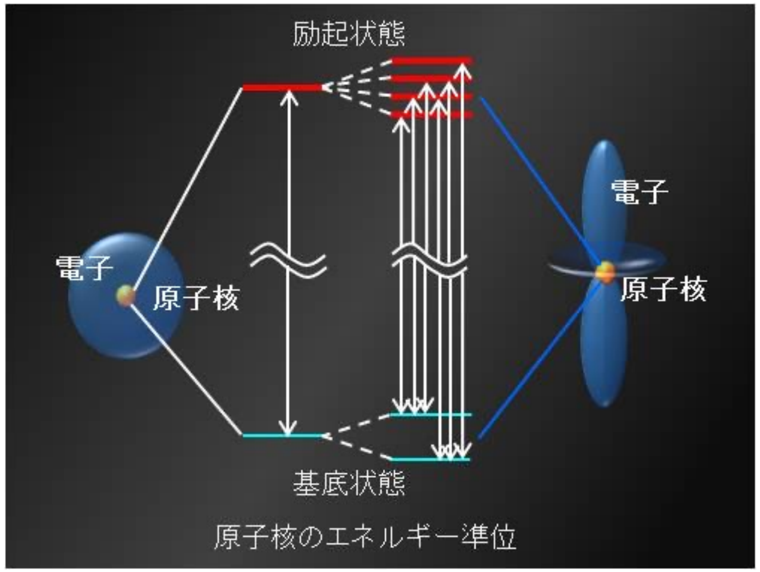
Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada,
Journal of the Physical Society of Japan, 91,W104002 (2022)

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

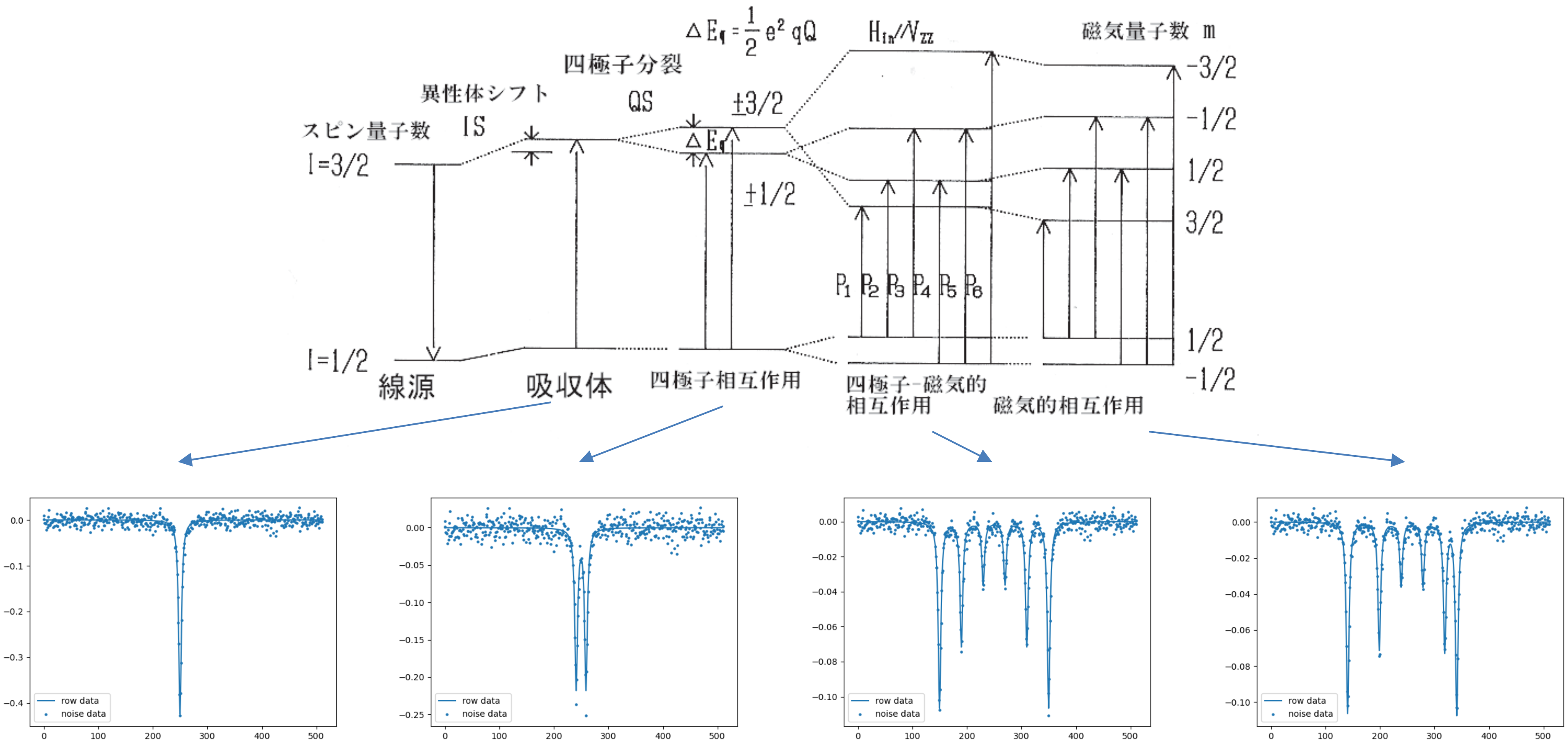
→物質中の原子核周りの内部磁場や電子状態を測定





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

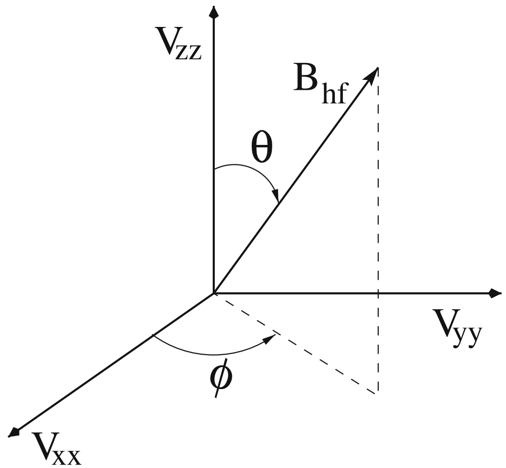


従来はスペクトルの形から相互作用を考えていたため専門家でないと解析が困難

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

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

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

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

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

$$H_c = E_{center}$$

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

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

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

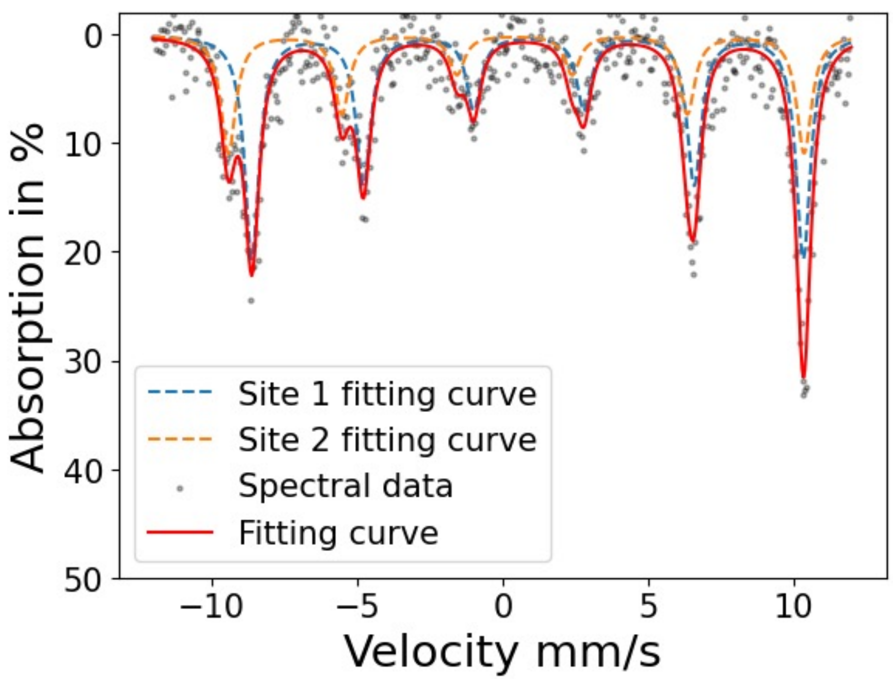
$$\phi:\mathrm{Uniform}(0,2\pi), E_{\mathrm{center}}:\mathrm{Uniform}(-1.0,2.5), r:\mathrm{Uniform}(0.0,1.0), \Gamma:\mathrm{Gamma}(1.5,1.5)$$

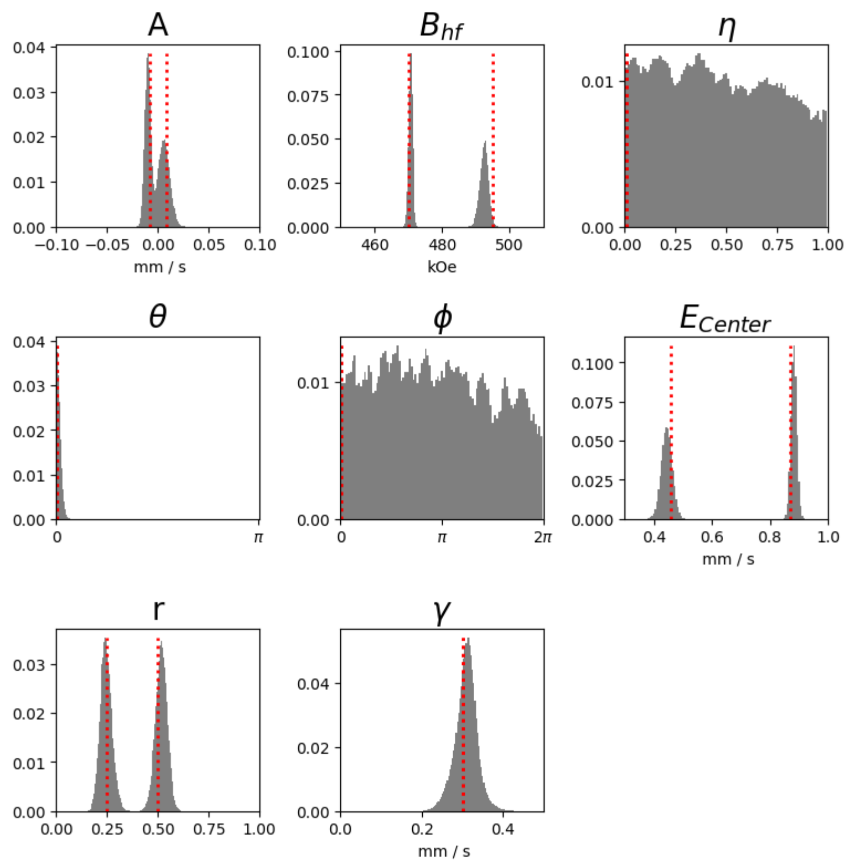
ベイズ推論によるフィッティング

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）

フィッティング結果

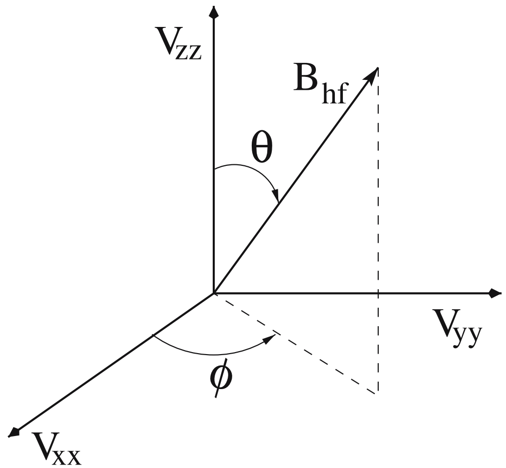




ベイズ推論によるフィッティング

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

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

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

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

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

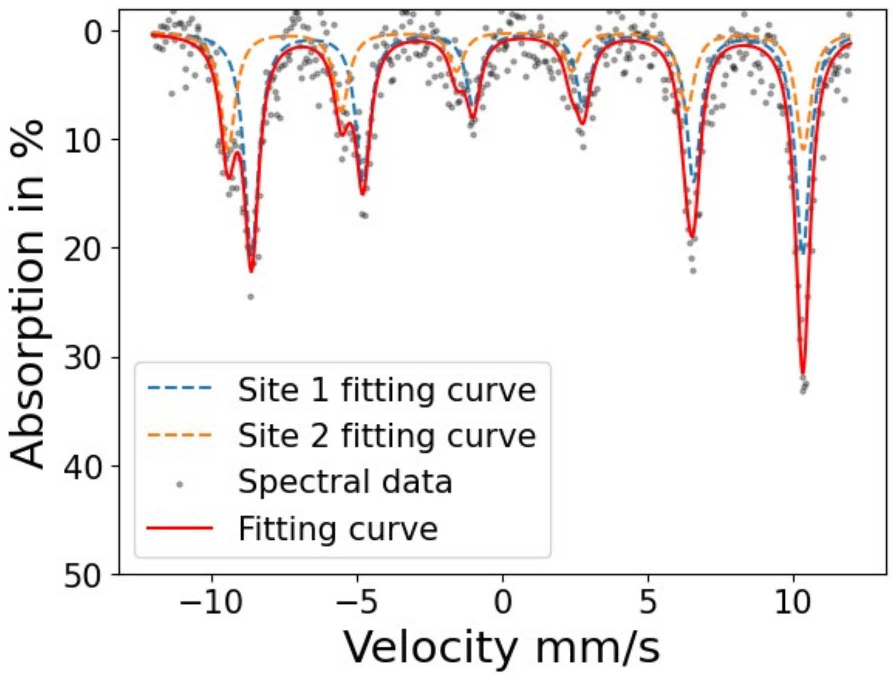
$$H_c = E_{center}$$

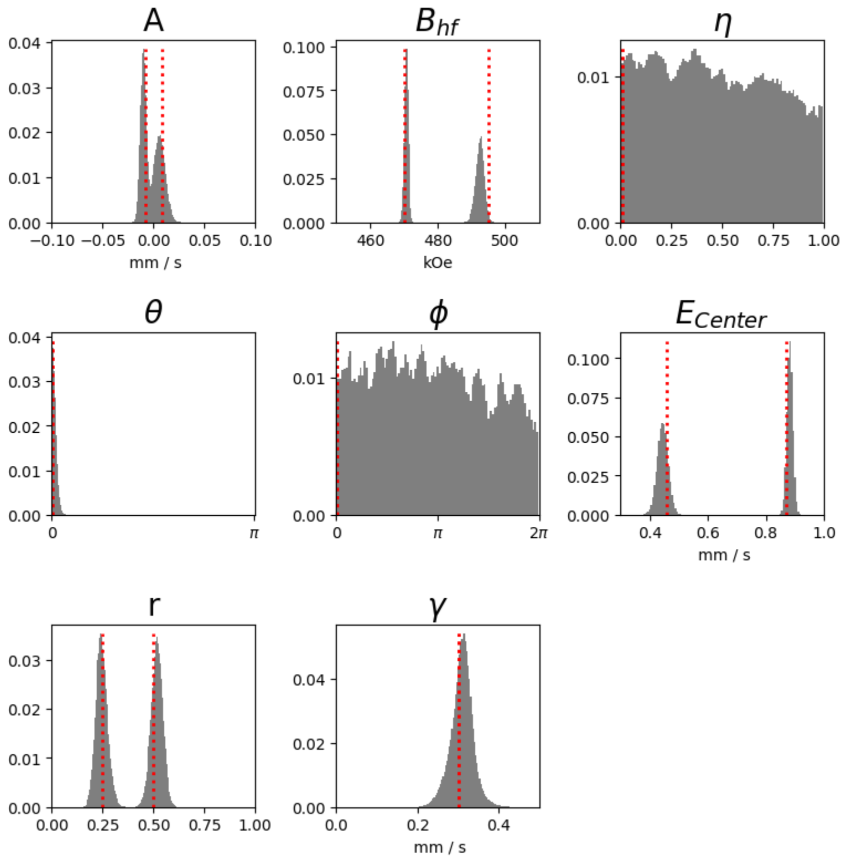
※ $\alpha = g_{\frac{3}{2}}\mu_N B_{hf}$
$\beta = g_{1/2}\mu_N B_{hf}$

Mössbauer Spectroscopy
物理パラメータの事後確率

Posterior probability
(Red line: true values)

Result of fitting



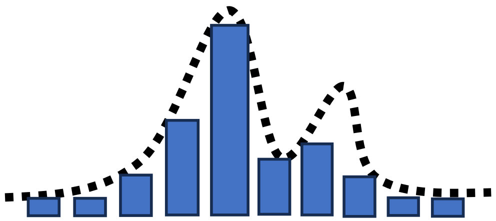


ハミルトニアン選択(1/2)

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

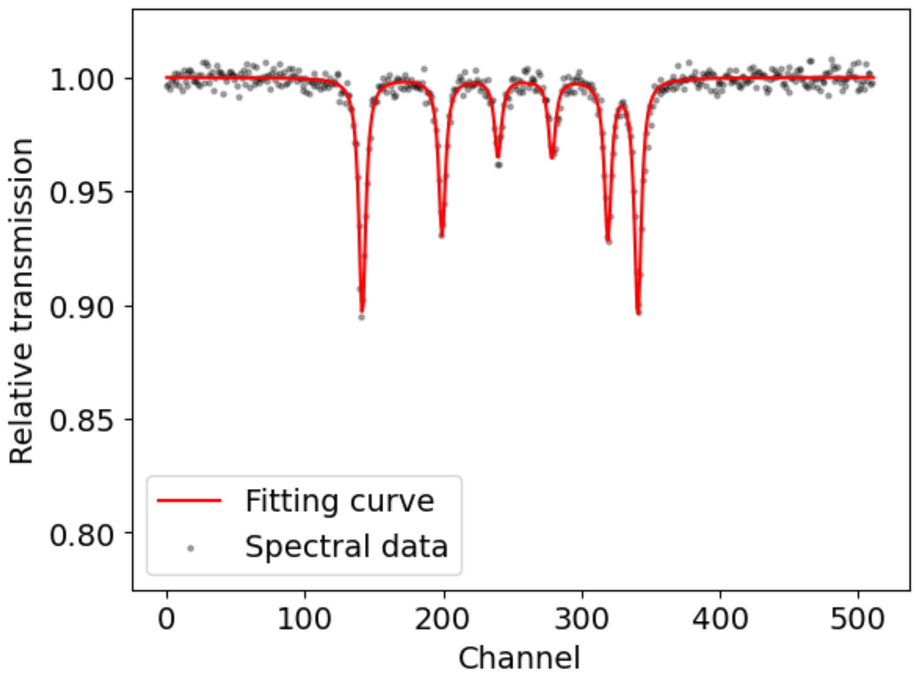
$$F_n(\beta) := -\log Z_n(\beta)$$
$$= \beta \tilde{F}_n(\beta) - \frac{n}{2}(\log \beta - \log 2\pi)$$
$$\tilde{F}_n(\beta) := -\frac{1}{\beta} \log \tilde{Z}_n(\beta)$$

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

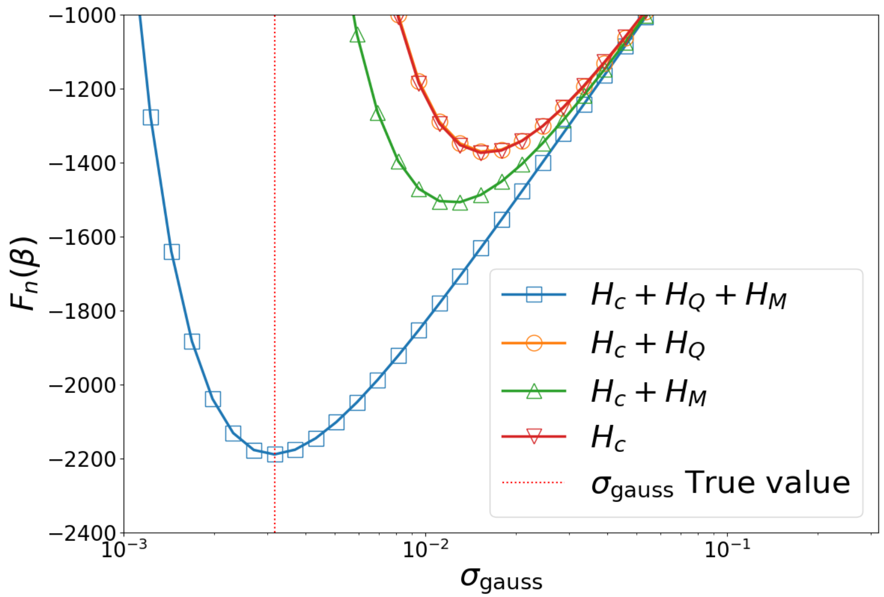
$F\left(x_i; \Theta\right)$: 物理モデル

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



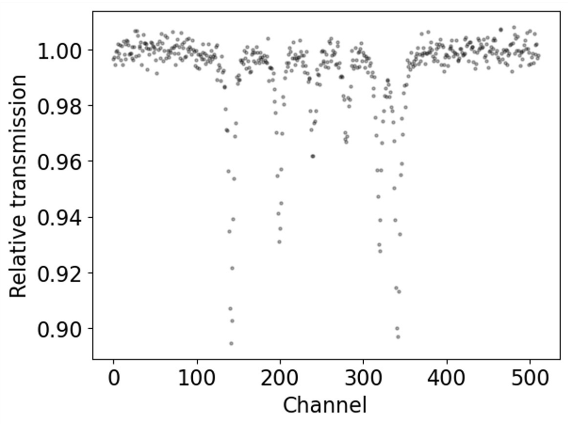
フィッティング



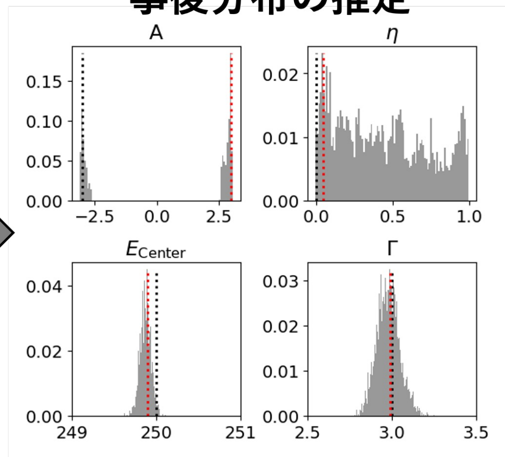
各ハミルトニアンでの自由エネルギー

Mössbauer Spectroscopy まとめ

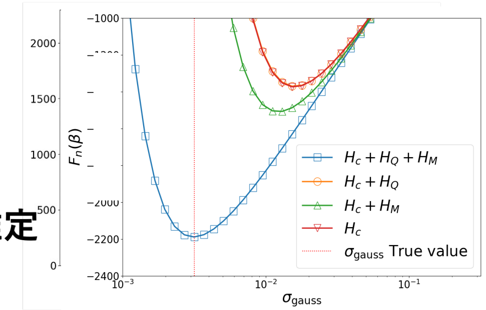
測定データ



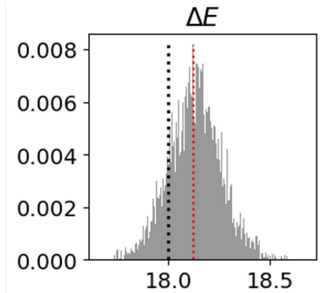
事後分布の推定



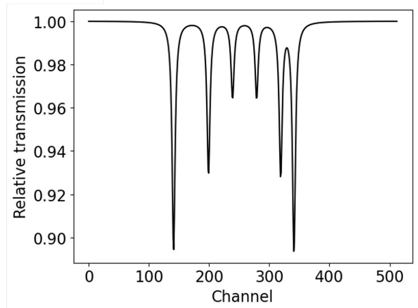
ハミルトニアンの推定



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)

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]

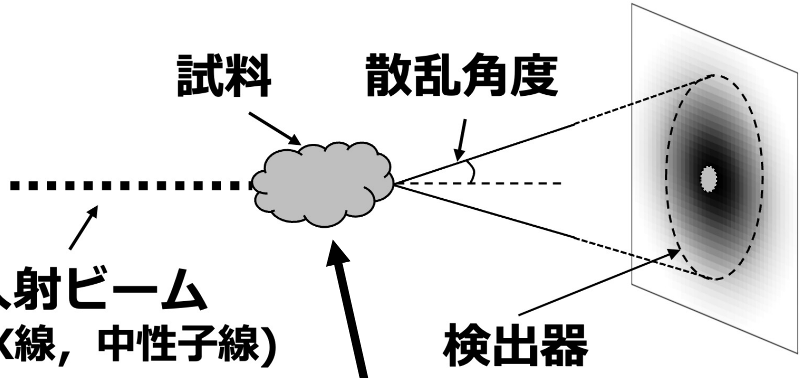
東大新領域[A] 高輝度光科学研究セ[B] 物材機構[C]

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

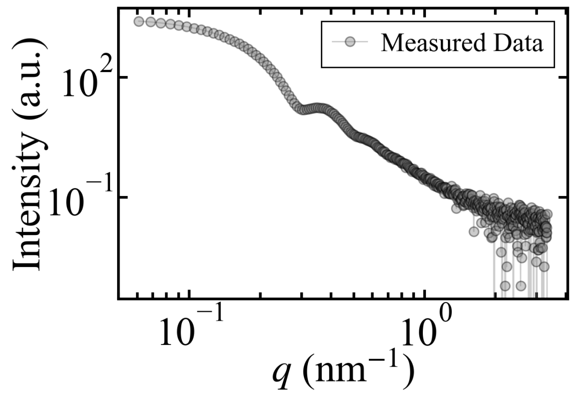
小角散乱法(SAS)

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 …

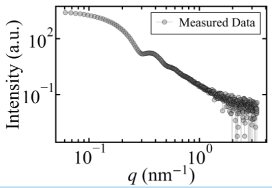
データ解析

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：$p\left(y|q,\Theta,K\right)=\dfrac{I_K(q,\Theta)^y\exp\left(-I_K(q,\Theta)\right)}{y!}$

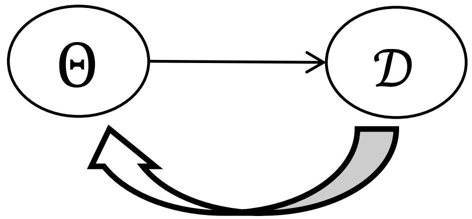
（∵散乱強度は，光子のカウントデータとして計測）

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

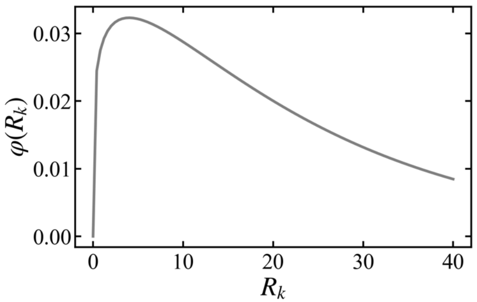
データ$\mathcal{D}$の生成確率：
$$p(\mathcal{D}|\Theta,K)=\prod_{i=1}^{N}p(y_i|q_i,\Theta,K)=\exp(-NE(\Theta,K))$$

→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：
$$p(\Theta|\mathcal{D})=\frac{p(\mathcal{D}|\Theta)\varphi(\Theta)}{\int p(\mathcal{D},\Theta)d\Theta}\propto\exp(-NE(\Theta))\varphi(\Theta)$$



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

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

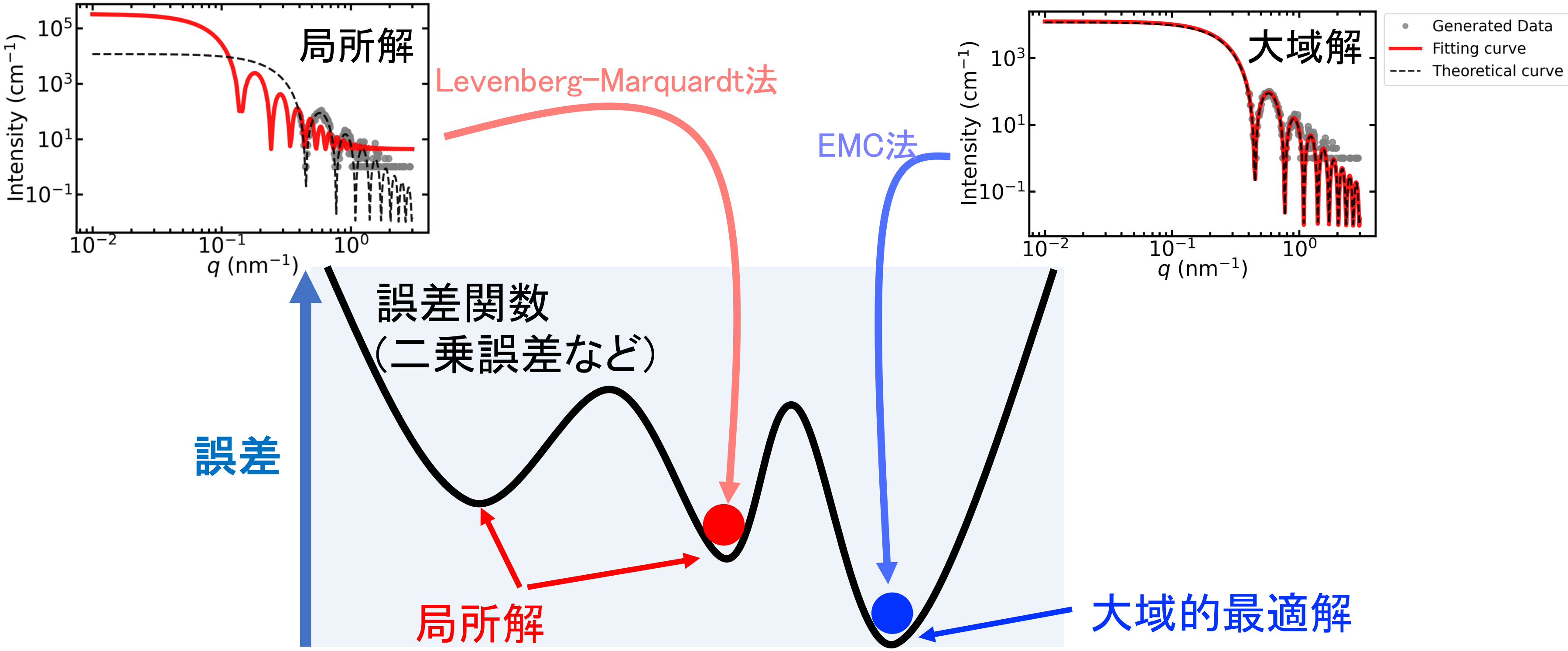
ベイズ計測

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).



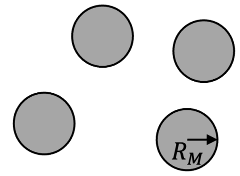
[2] Hukushima, Koji, and Koji Nemoto., J. Phys. Soc. Jpn, 65.6 (1996): 1604-160

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.

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)

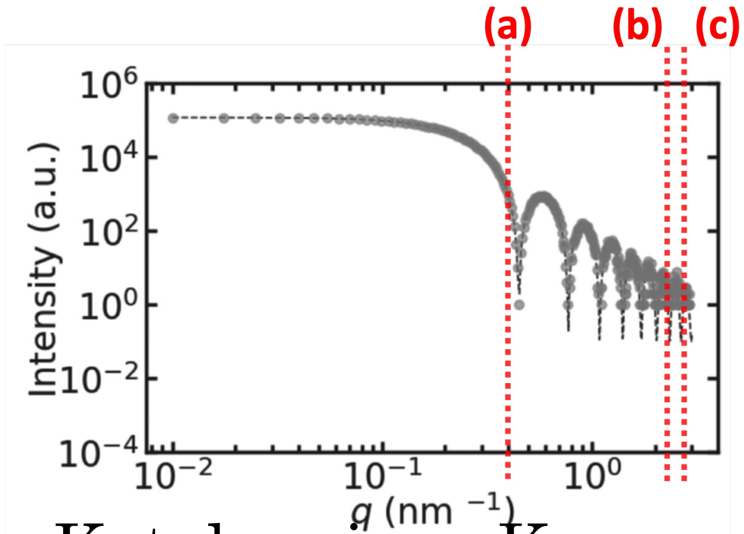


単分散球

SASデータの特徴

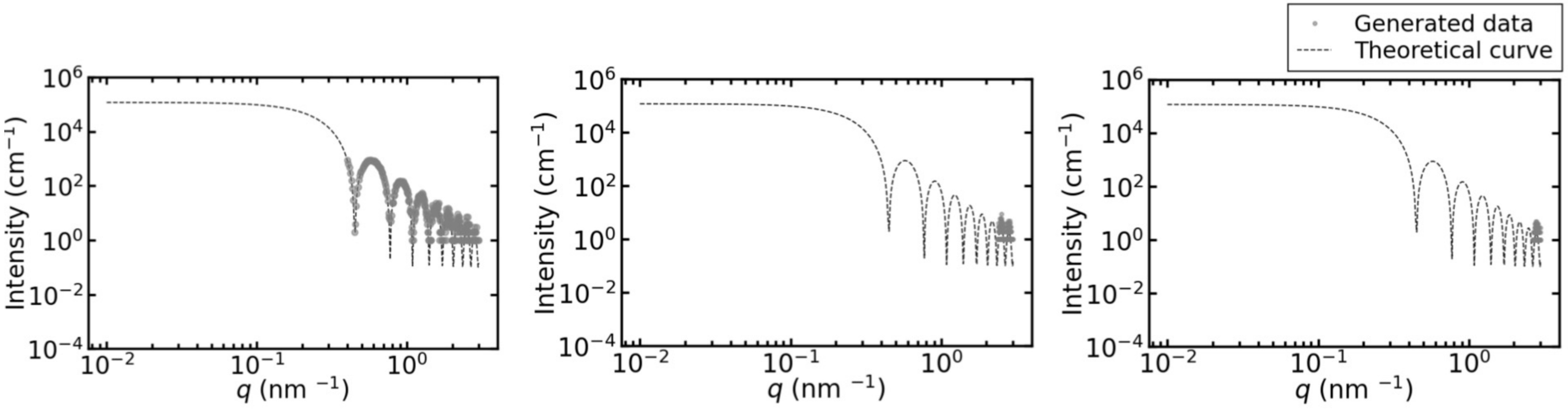
実験機器の構造上，低角領域データ欠損がしばしば起こる.

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

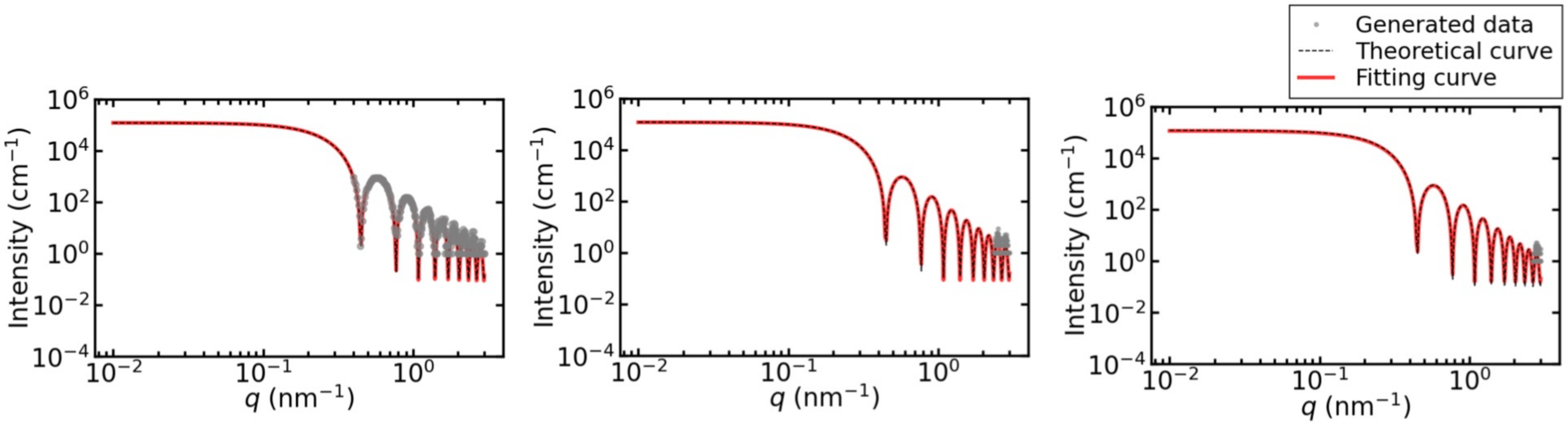


Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ.* 92, 094002 (2023)

パラメータ推定の数値実験 – 結果



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

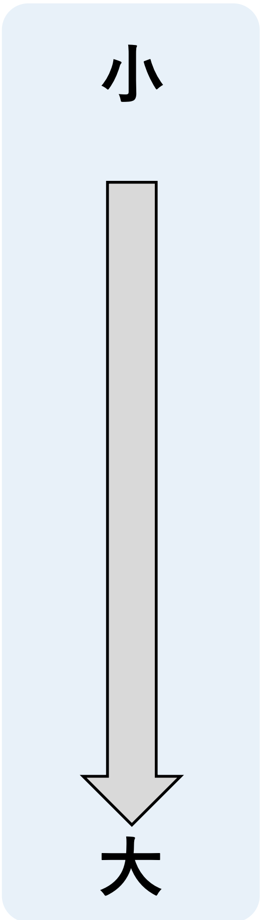


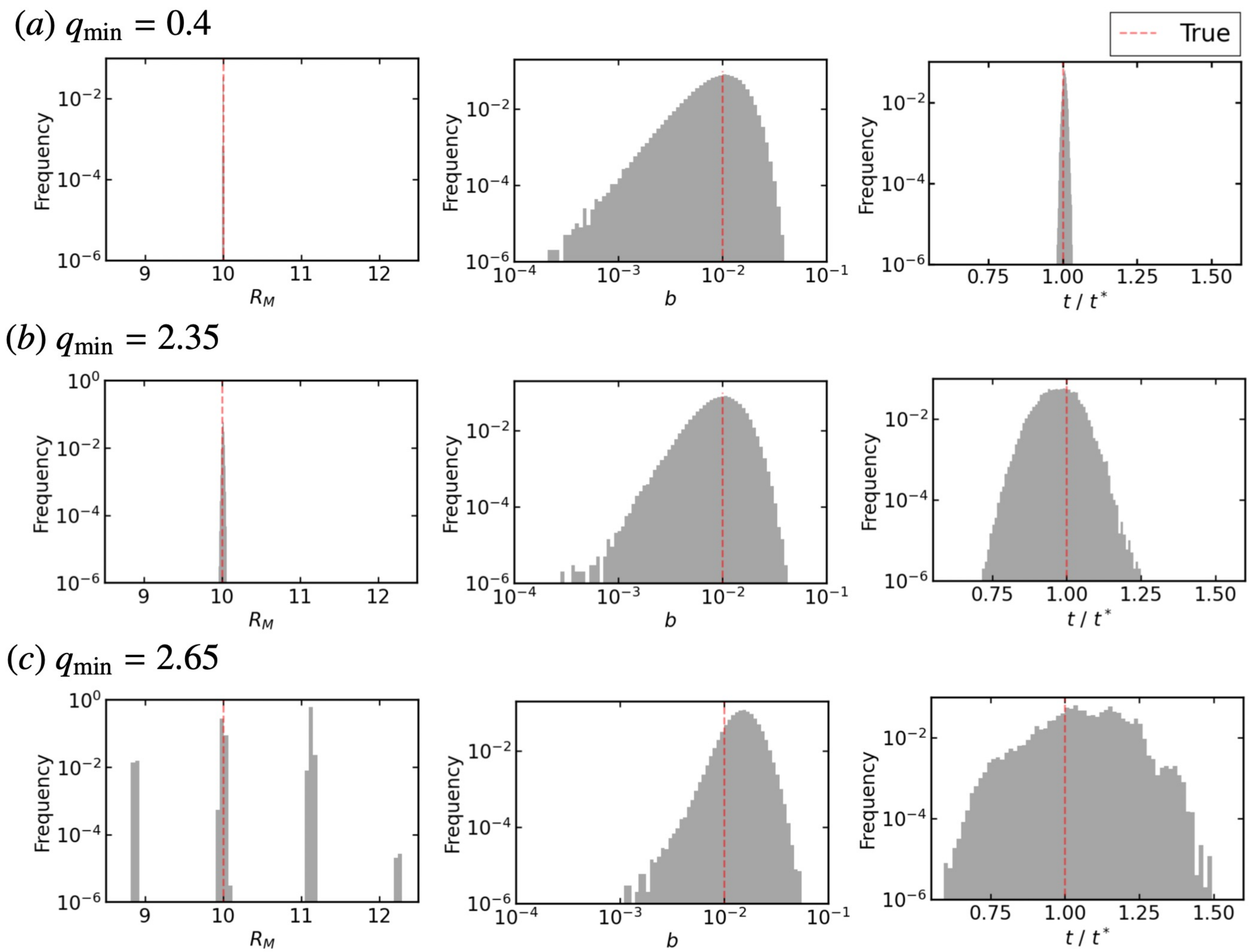
(a) $q_{\mathrm{min}} = 0.4\ \mathrm{nm}^{-1}$　(b) $q_{\mathrm{min}} = 2.35\ \mathrm{nm}^{-1}$　(c) $q_{\mathrm{min}} = 2.65\ \mathrm{nm}^{-1}$

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

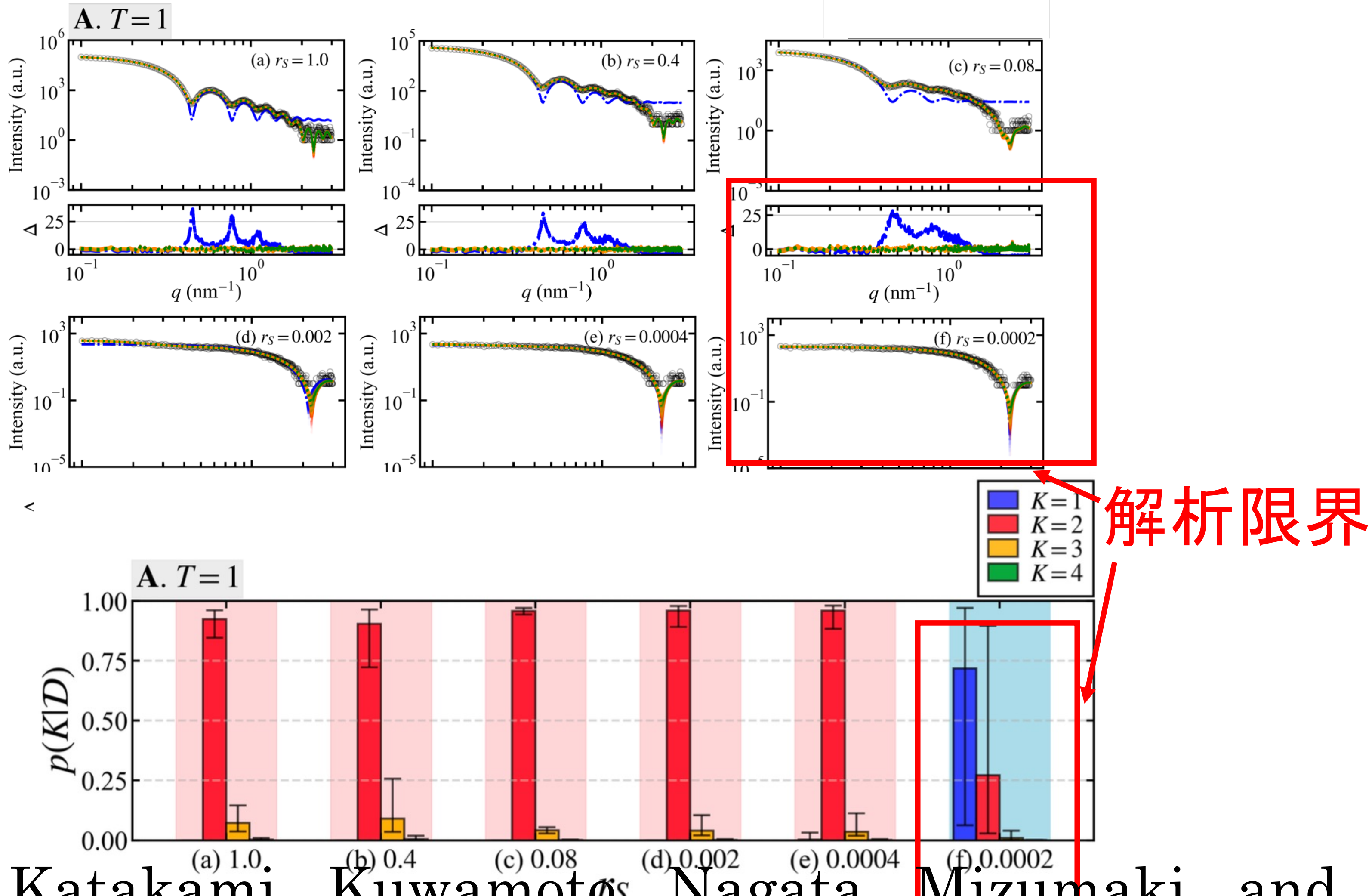




(c) に**複数のピーク**→$q_{\min} = 2.35 - 2.65\ \mathrm{nm}^{-1}$で**推定限界**

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

モデル選択の数値実験 – 結果

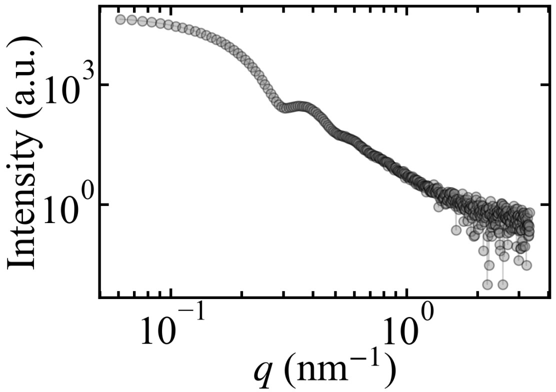


Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *J P S J.* 92, 094002 (2023),

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



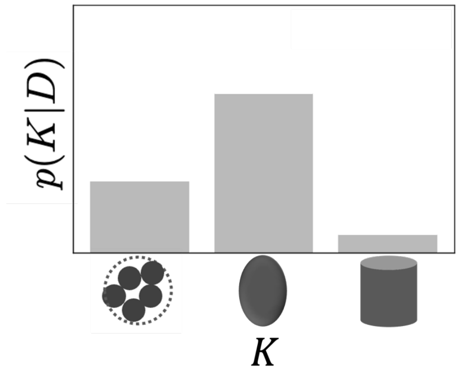
目的

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

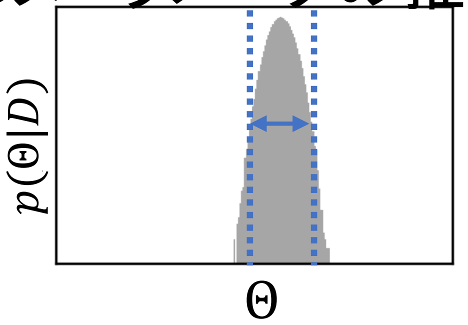


定量的な散乱強度
モデルの選択

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．

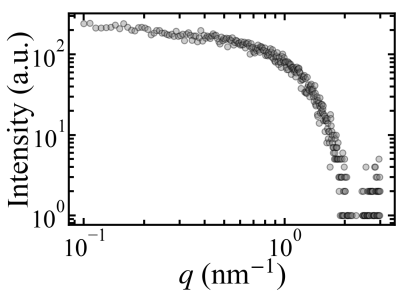
→大域的最適解の推定，推定の信頼度評価ができる．

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．

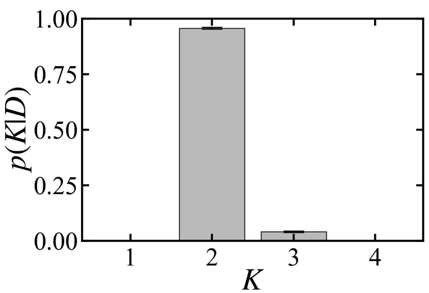
→データ駆動で定量的な散乱強度モデル選択を可能にした．

→データから試料構造を数理的に選択できる．

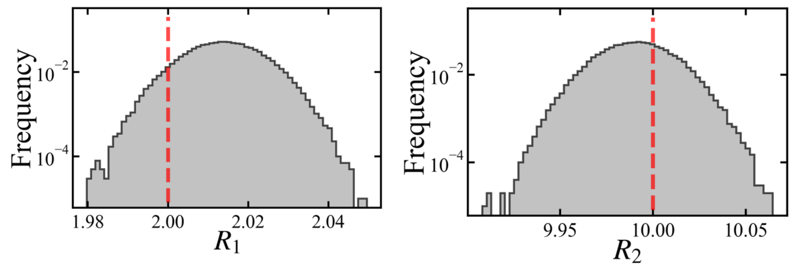
計測データ



試料構造の推定



パラメータ推定



今後，様々な試料のSAS実データへの適用が望まれる

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]）

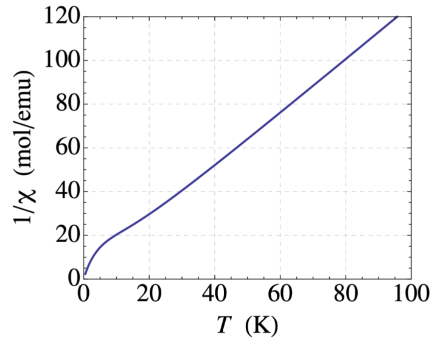
従来のパラメータ推定

対象とする物理系

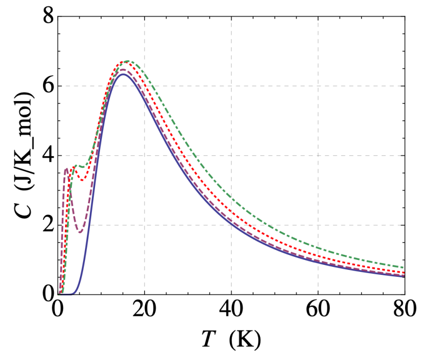
実験

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

<u>従来の解析法の問題点</u>

・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

⇩

<u>ベイズ推論の導入</u>

・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

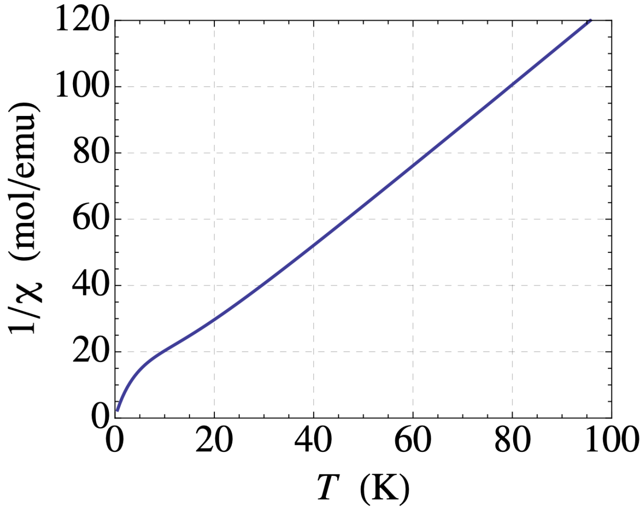
$$\hat{O}_{20} = 3J_z^2 - J(J+1)$$

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

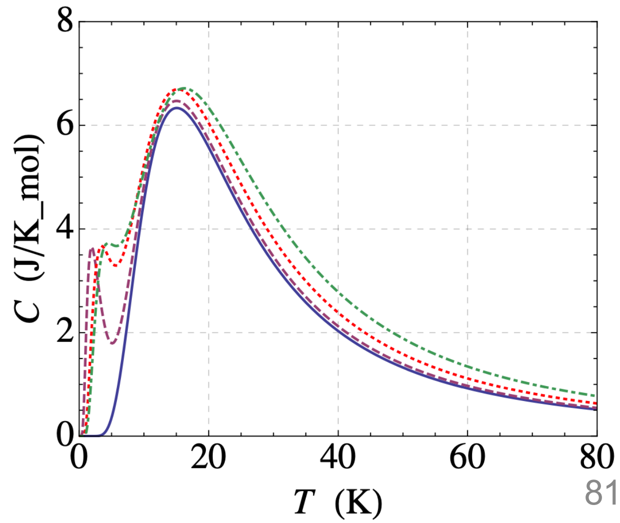
$$\hat{O}_{44} = \frac{1}{2}(J_+^4 - J_-^4)$$

観測データ生成

磁化率



比熱

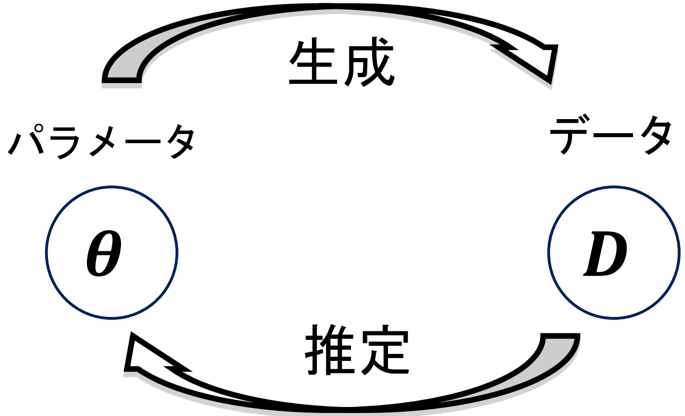


ベイズ推定

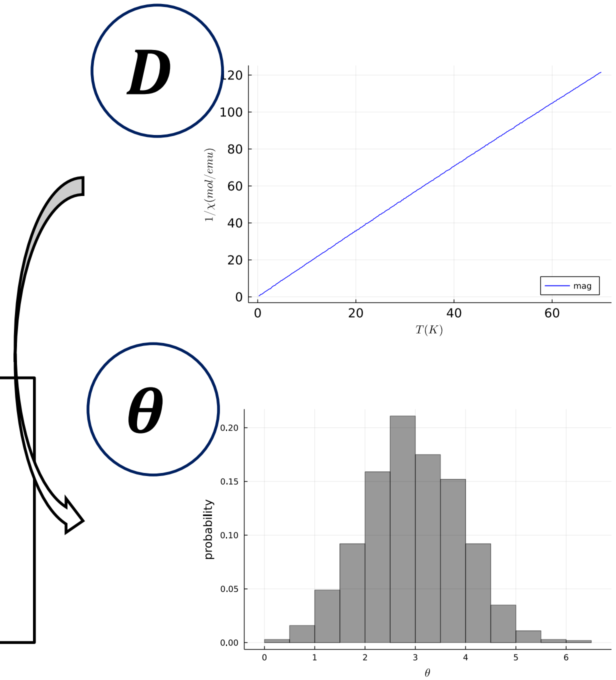
・ベイズ推論：計測データの生成を確率モデルとして定式化
・ベイズの定理により推定パラメータの事後確率を求める

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

$p(\boldsymbol{\theta})$: 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

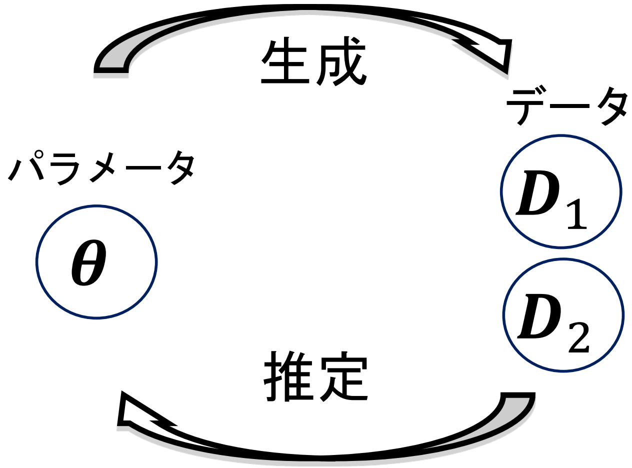


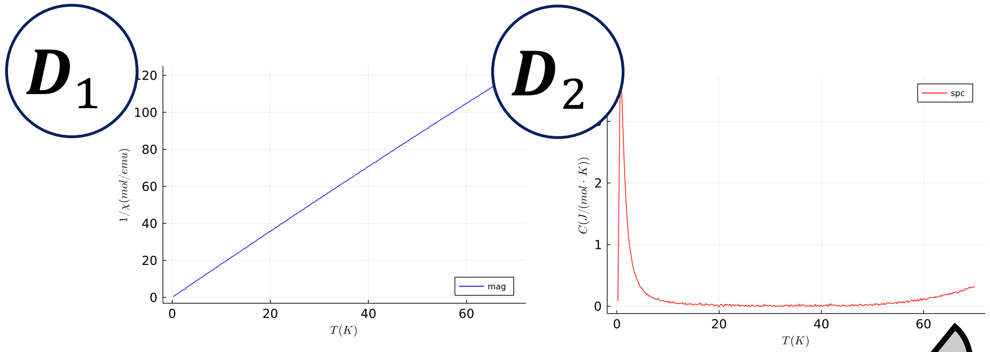
ベイズ統合

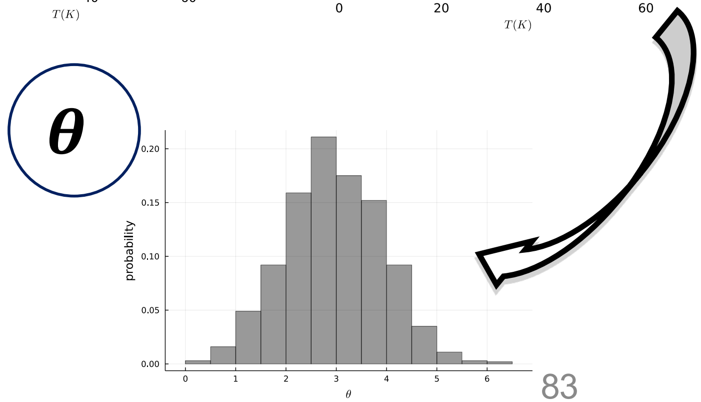
ベイズの定理で推定パラメータの事後分布$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{D_1},\boldsymbol{D_2})$を求める

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

$p(\boldsymbol{\theta})$：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

<u>分割モデルの尤度の積</u>

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

$$N \equiv N_1 + N_2$$

$$b \equiv b_1 + b_2$$

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

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

<u>統合モデルの事後確率分布</u>

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

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

尤度関数

ベイズの定理

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

周辺尤度関数

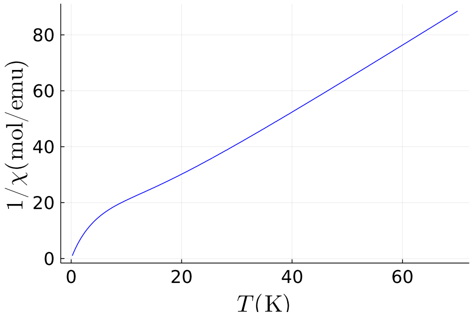
<u>ベイズ自由エネルギー</u>
周辺尤度関数を用いて定義

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

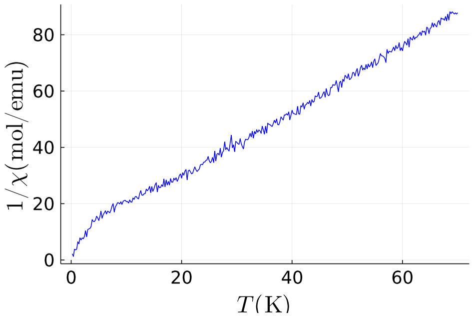
人工データ

磁化率

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

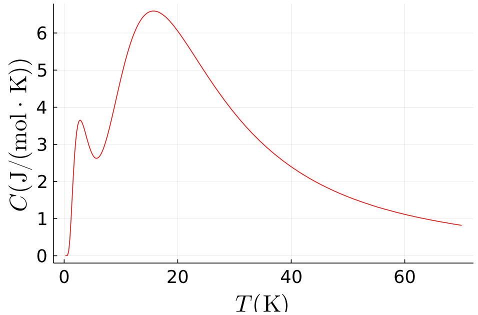


(2)$\sigma_{\text{mag}} = 10^{0}$

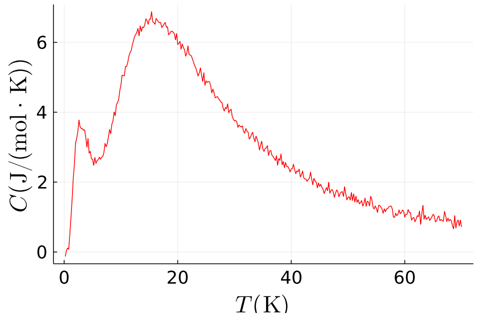


比熱

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



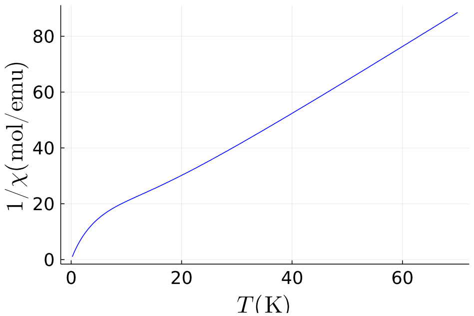
(2)$\sigma_{\text{spc}} = 10^{-1}$

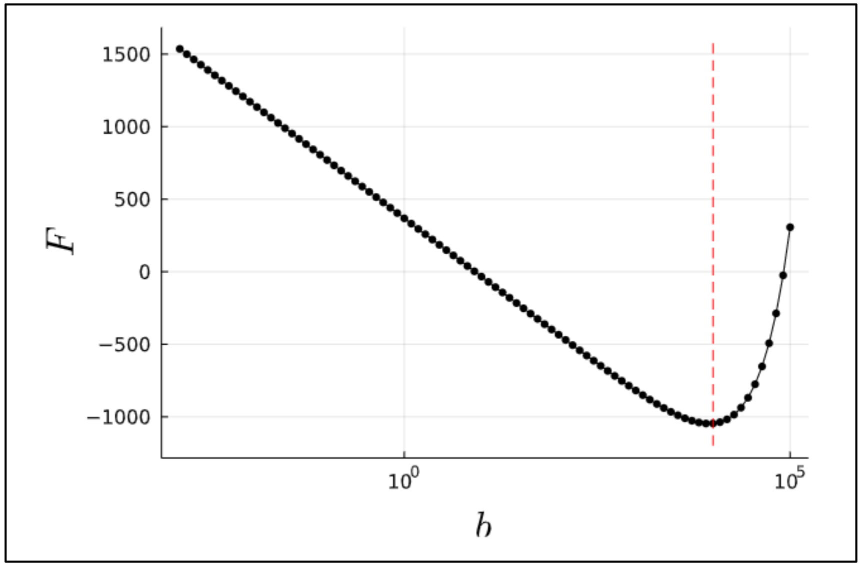


ノイズ推定

磁化率

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



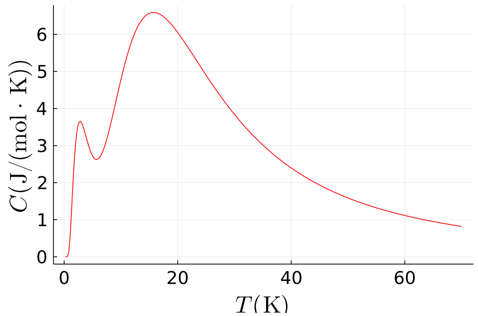


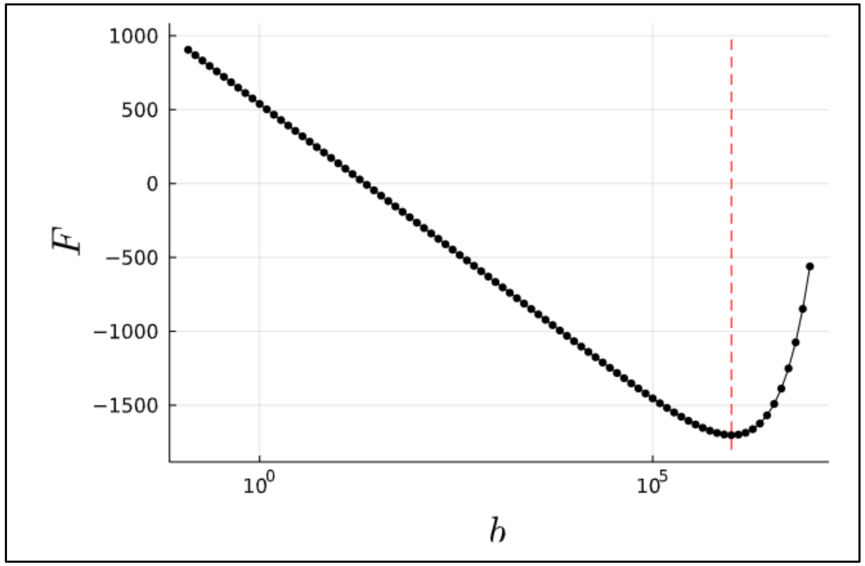
推定値 $b = 8.1113\times10^3$

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

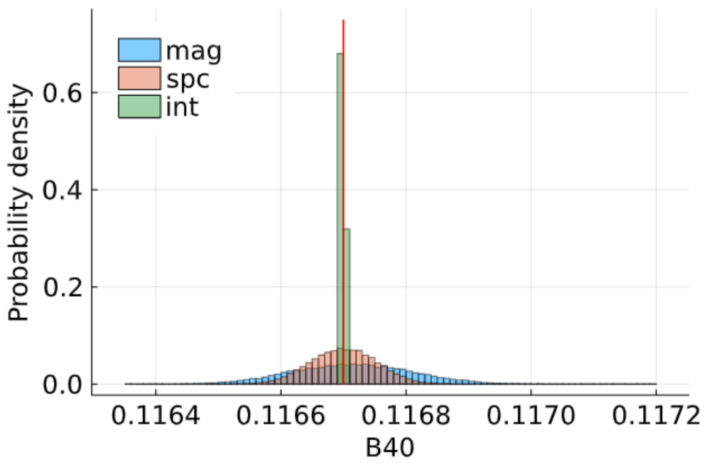
$$H_{\mathrm{CEF}} = B_{40}(O_{40} + 5B_{44})$$

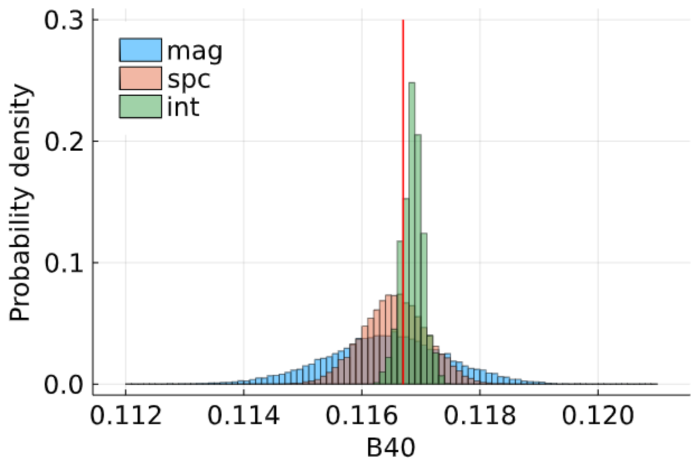
(1)

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

(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

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

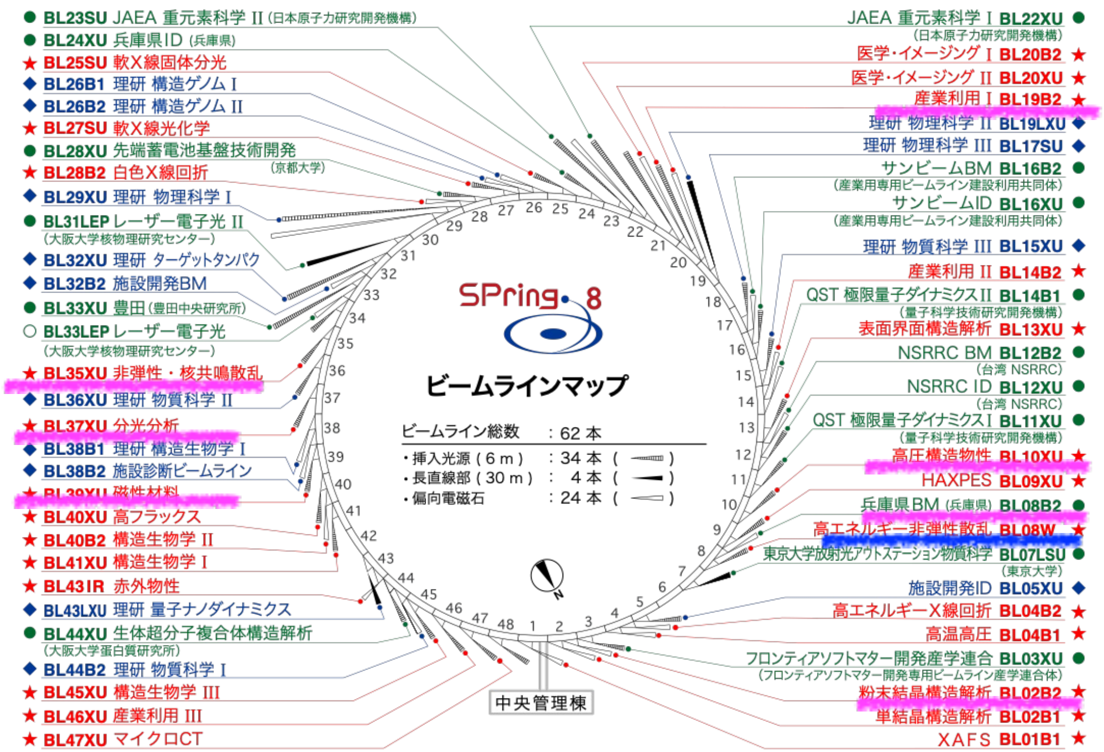
- 事後分布推定 and/or モデル選択
  1. XRD

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)

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

ベイズ計測の社会実装
基礎研究から民間企業の開発まで

- 大学/国研研究部門: ベイズ計測の基礎研究
- 公的計測施設: ベイズ計測の実例の紹介
- 基礎科学実験家/民間企業: ベイズ計測の実践
- 上記の上から下への流れに死の谷が存在
- 公的計測施設のサービス部門のシーズ(計測技術)と民間企業のニーズ(ベイズ計測の実践)の間の乖離
- 新たなビジネスチャンスの到来
  - ベイズ計測のIT企業
  - 株式会社 a.s.ist
  - https://www.a-s-ist.com/

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

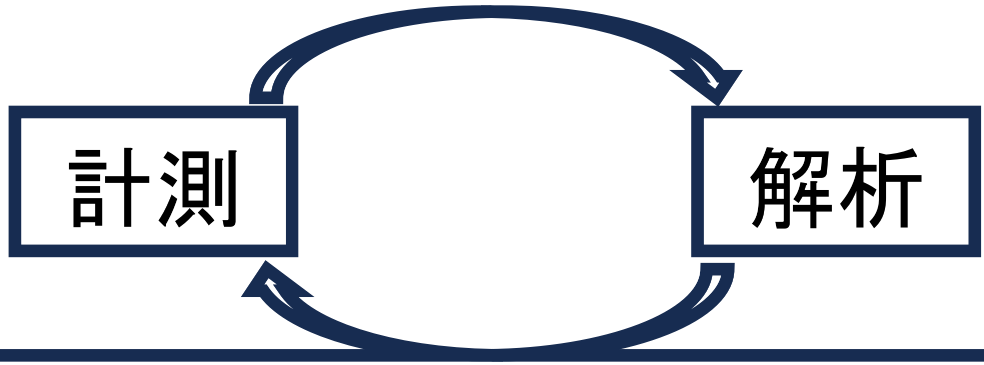
キャリアプランとしてのベイズ計測

- ベイズ計測を習得することのメリット
- ベイズ計測をOJTで習得することによる研究のスキルの向上
- 共同研究の立案とイニシアチブをもった共同研究のハンドリング能力
- 上司のコントロール力、部下の教育など仕事に必要なスキルが全て習得可能
- ベイズ計測習得により、アカデミアから民間企業、はたまた起業まで、広範なキャリアプランの構築が可能

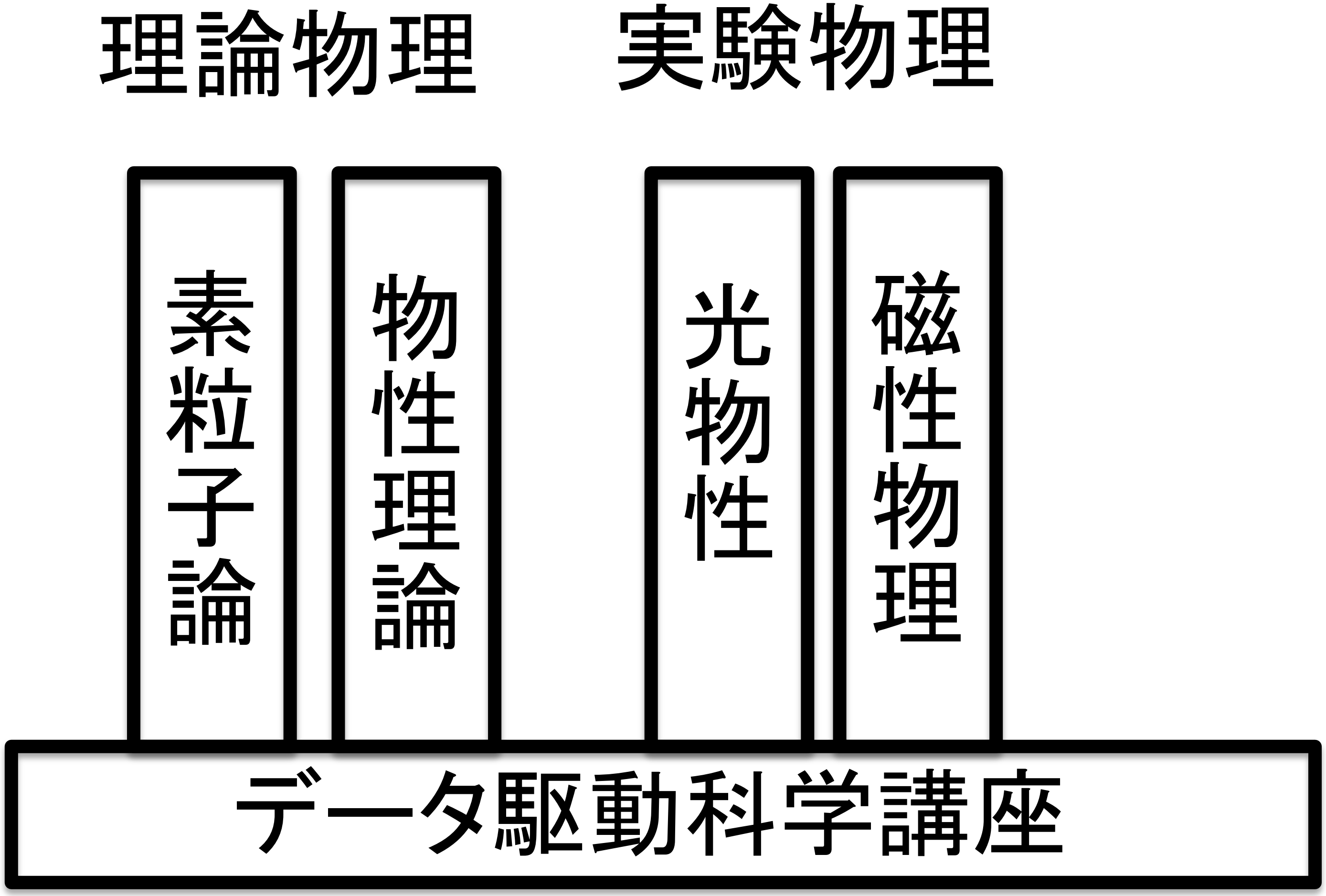
ベイズ計測による
計測と解析の双方向相互作用

従来法: ポストプロセスとしての解析

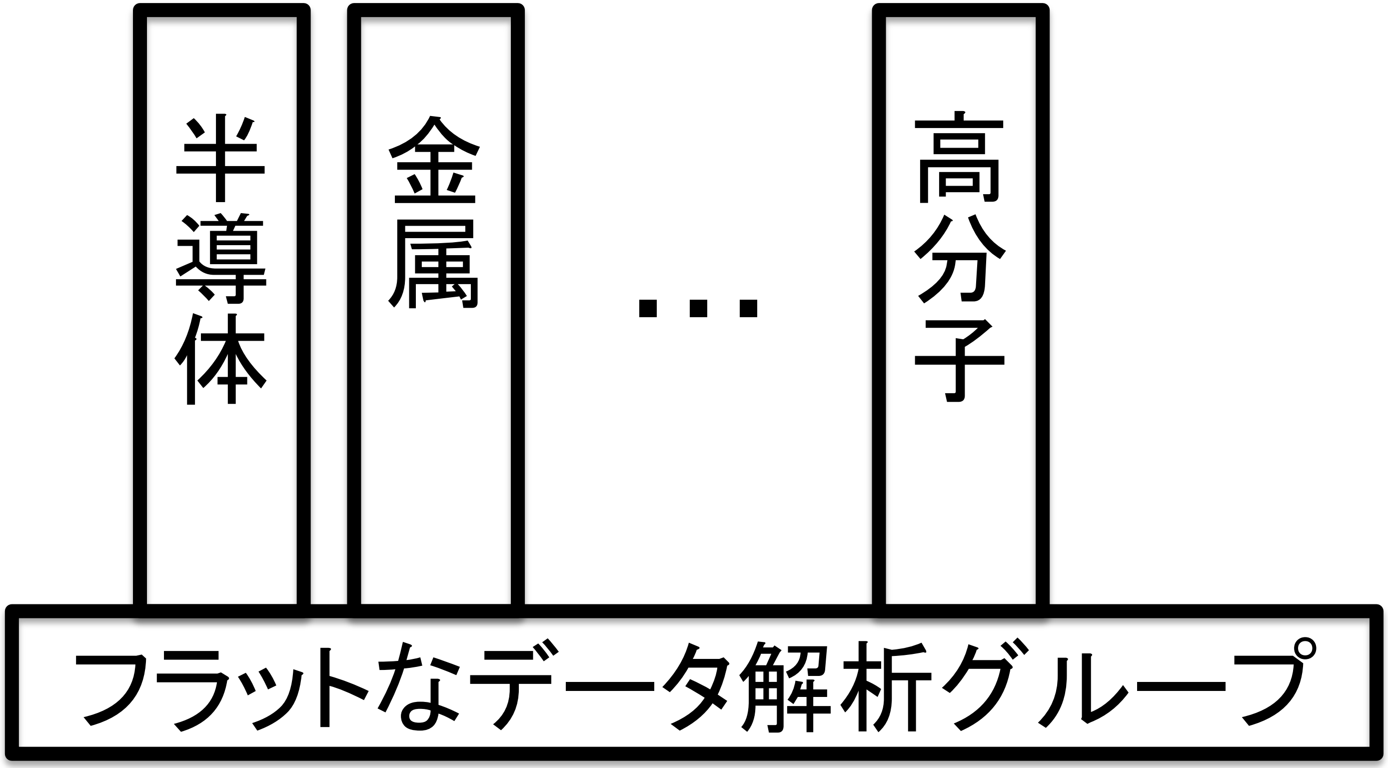
提案法: 計測と解析の双方向的相互作用



アカデミア
物理学科/各学科に
データ駆動科学一講座導入



民間企業
Ｒ＆Ｄ組織のフラット化と人材の流動化



ある縦組織がリストラされても、フラットなデータ解析グループに沿って、他の縦組織にソフトランディングでき、人材の流動化が加速される。

まとめ

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

本講演の目的は達成されたか?

- 五十嵐研の研究内容であるデータ駆動科学の背景を知る。
- が通常の実験データ解析と何が違っているかを説明。
- その違いがどういう利点を生むかを、データ駆動科学の情報数理基盤の一つであるベイズ計測に関する具体例を使って説明。
- データ駆動科学が卒論/修論/博論などの研究活動に有用であるだけでなく、就活および、より重要な、キャリアプランを提案できることを示す。