

ベイズ計測と放射光科学

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻

岡田真人

2024年10月16日(水)

九州シンクロトロン光研究センターシンポジウム
「ベイズ計測～現状と展望～」

内容

- 本講演の目的
 - ベイズ計測を放射光科学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
 - ノイズ分散推定
 - 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
- ベイズ計測専用高速ライブラリ
- まとめ: ベイズ計測の導入による佐賀LSのゲームチェンジング
- 佐賀LS全ビームラインベイズ化計画

内容

- 本講演の目的
 - ベイズ計測を放射光科学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
 - ノイズ分散推定
 - 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
- ベイズ計測専用高速ライブラリ
- まとめ: ベイズ計測の導入による佐賀LSのゲームチェンジング
- 佐賀LS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、佐賀LS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、日々の佐賀LS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。
- 佐賀LSのユーザーにとってのメリットがわからない。
- 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な説明が必要。
- そうでなければ、日々の通常業務で多忙を極める我々を、説得不可能

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、メスバウアー分光等
 - その具体例: SPring-8全BLベイズ化計画

自然科学全般におけるパラメータフィットの必要性

- 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性
- 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
- この状況をベイズ計測で打破

内容

- 本講演の目的
 - ベイズ計測を放射光科学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
 - ノイズ分散推定
 - 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
- ベイズ計測専用高速ライブラリ
- まとめ: ベイズ計測の導入による佐賀LSのゲームチェンジング
- 佐賀LS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

- 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

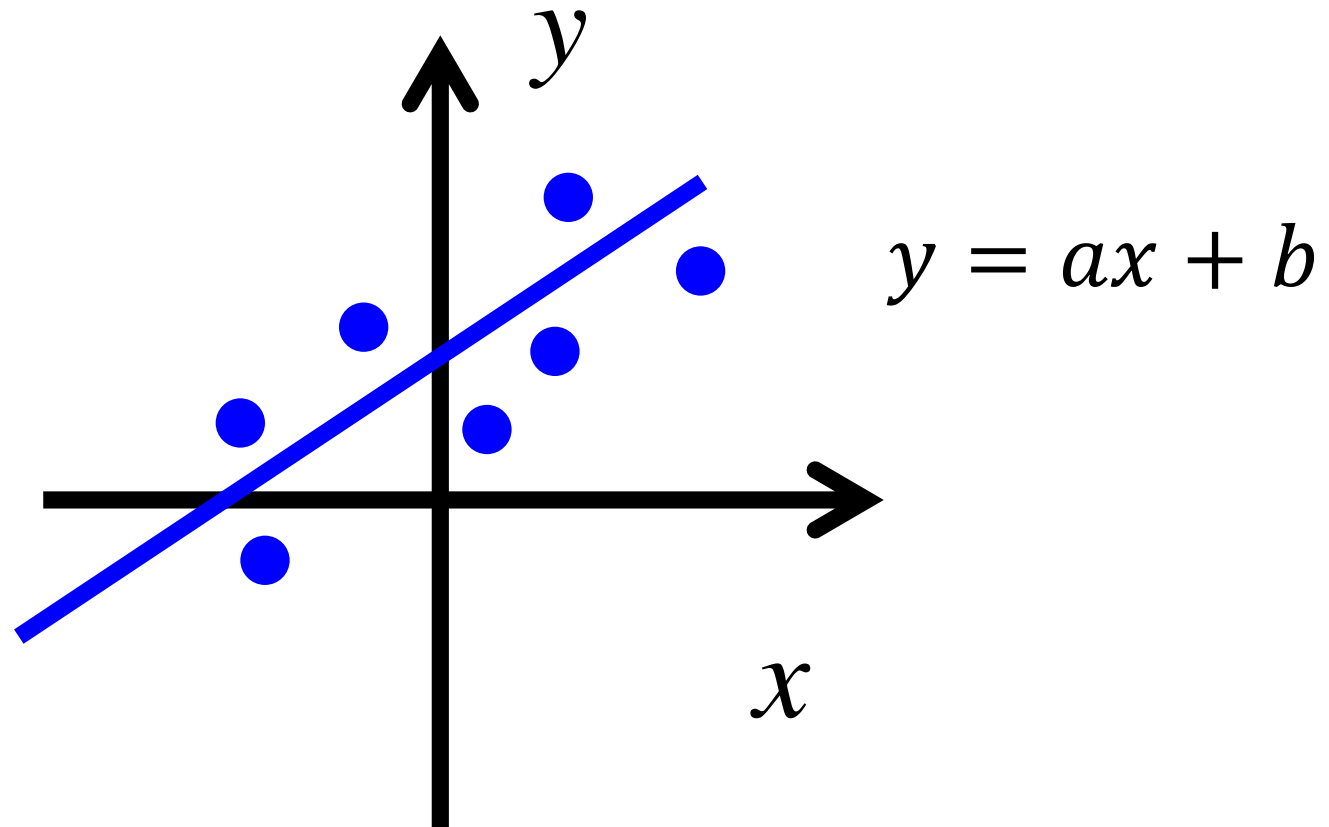
$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

- 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: 水牧先生の講演1

ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

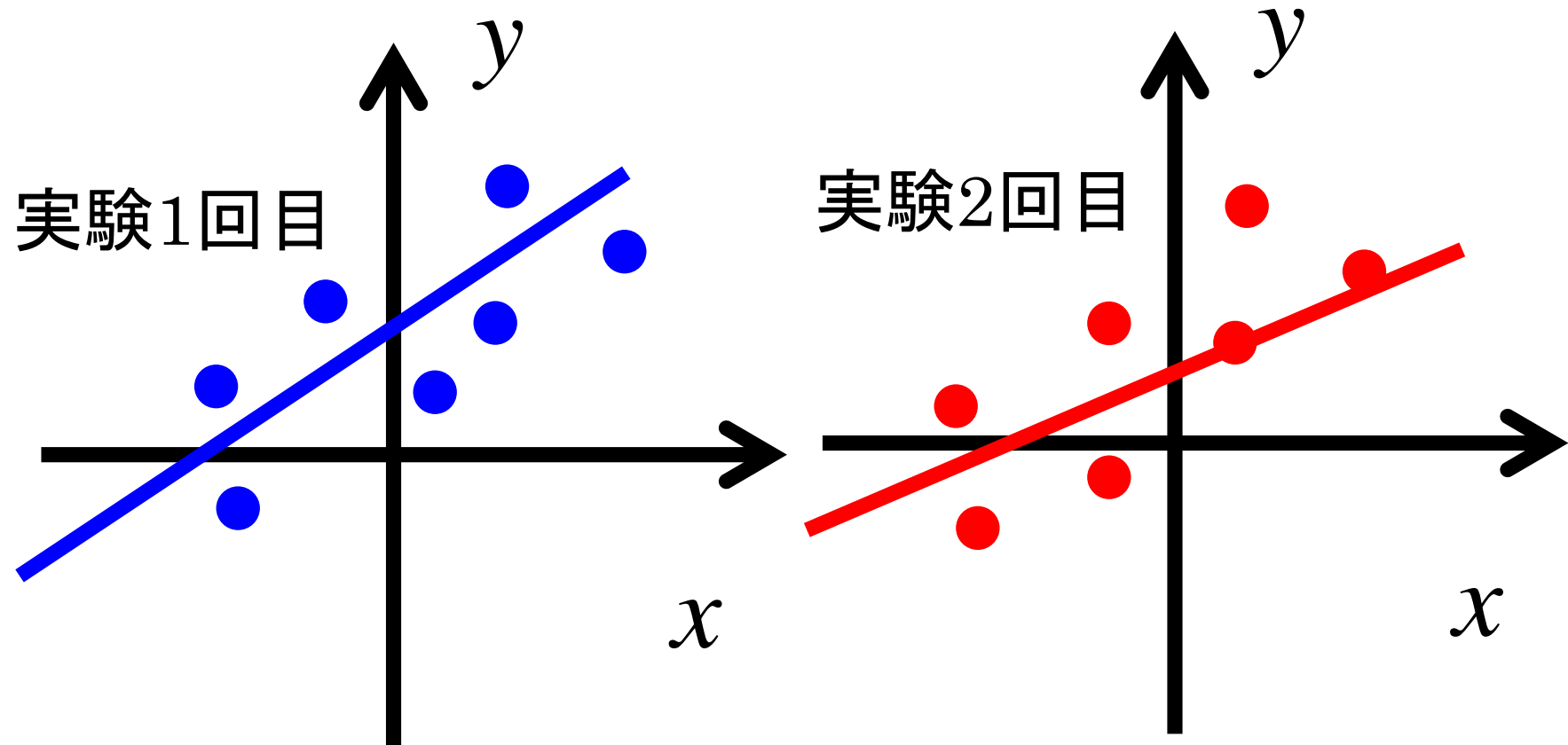
現状でも用いられている最も簡単な例



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



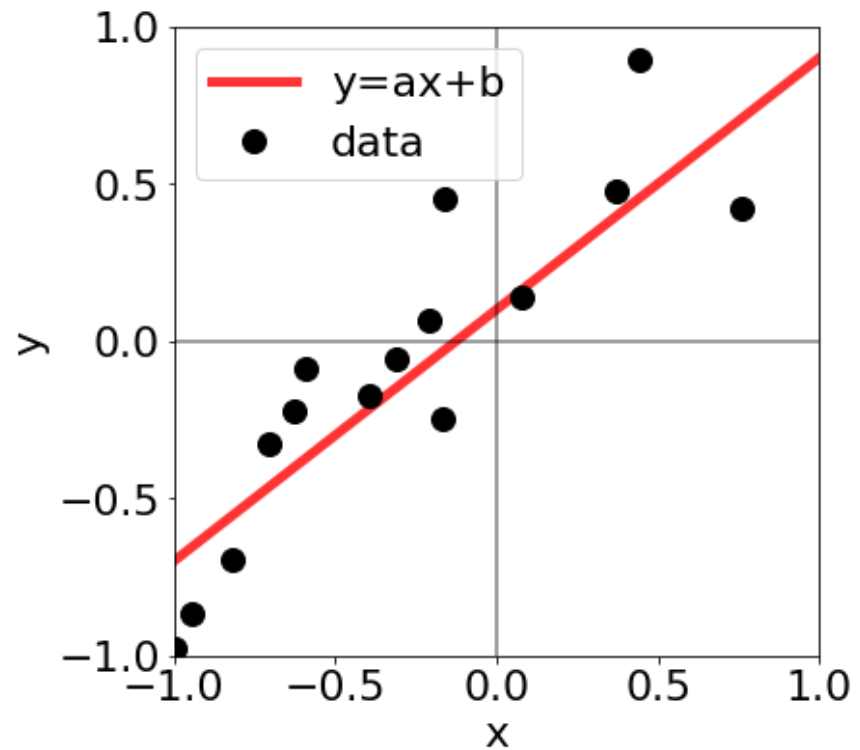
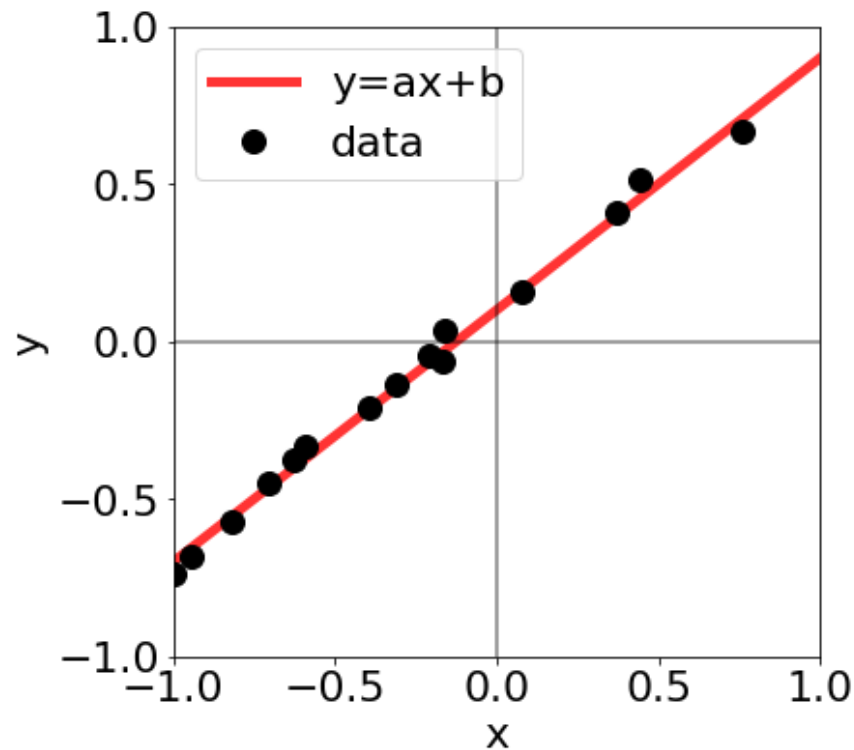
傾き a : 系の線形応答、バネ定数、電気伝導度、誘電率、

実験複数回おこなって、 a のばらつきを見る

これを1回の実験でももとめられないか → ベイズ推論

ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

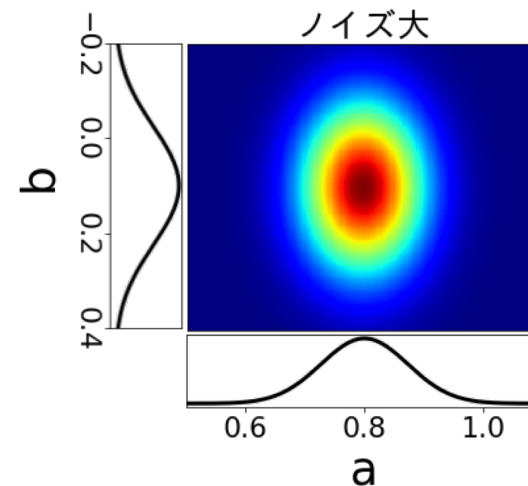
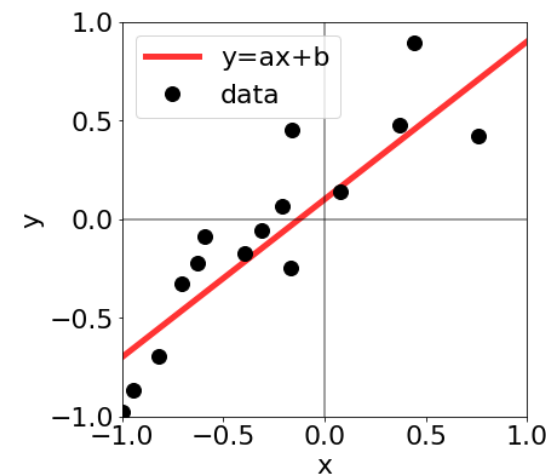
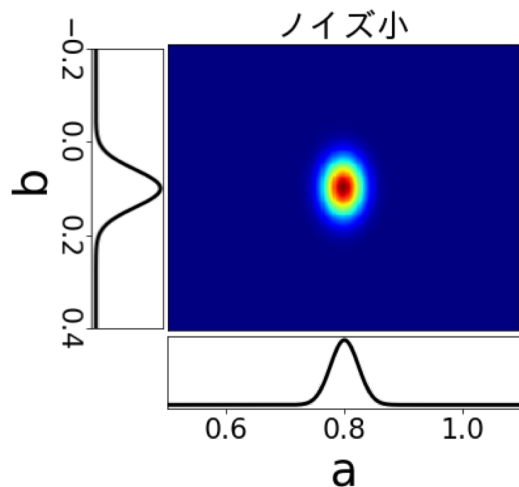
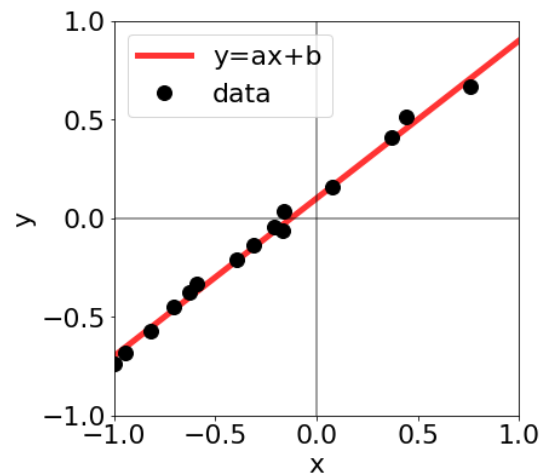


この二つの推定精度の違いを数学的に表現したい
準備として従来手法の最小二乗法

ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

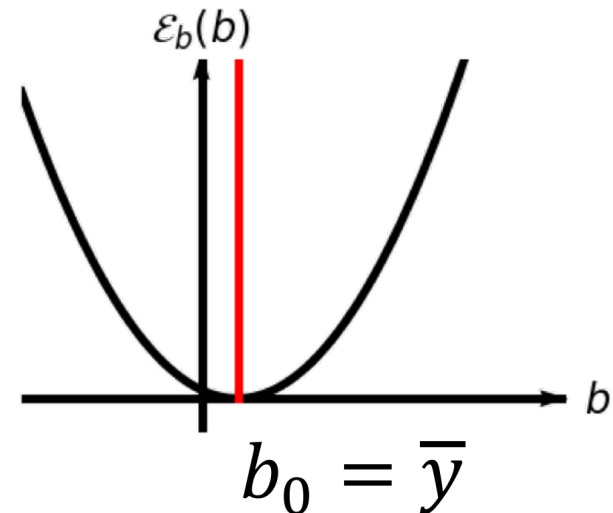
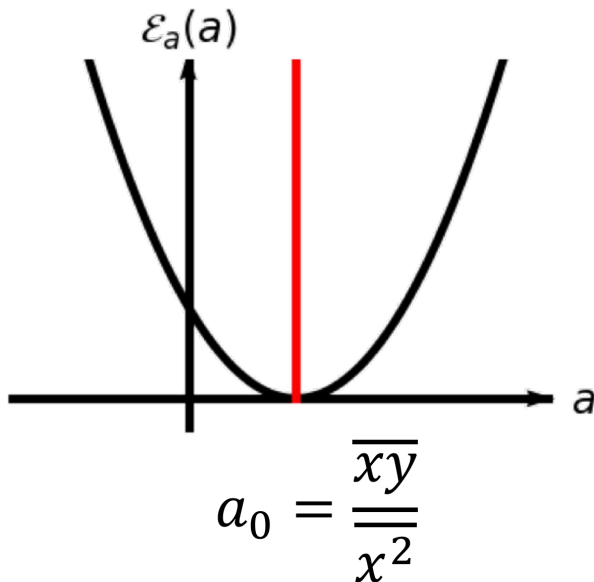
結論: 神器1 パラメータの事後確率推定



$y=ax+b$ の最小二乗法

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

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



$y=ax+b$ 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)

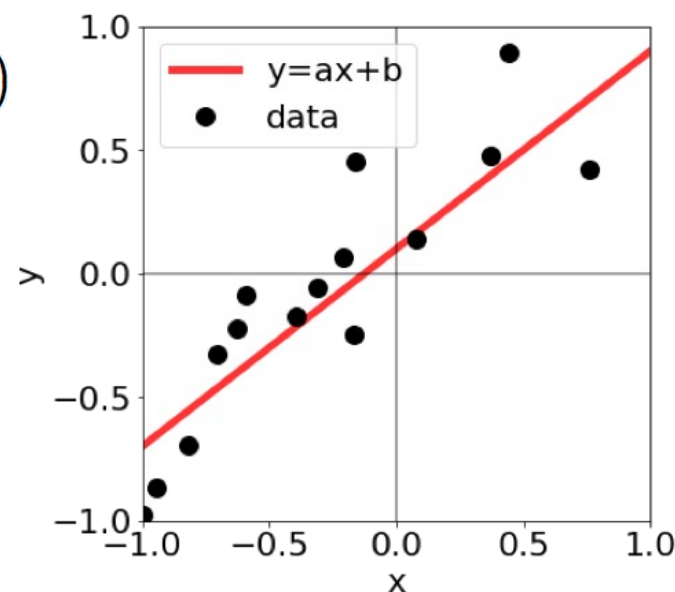
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \quad \text{とする場合}$$

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

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

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

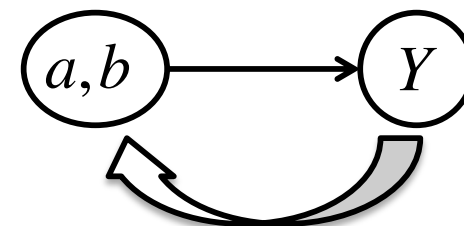
$$\overline{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定

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

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, 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

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

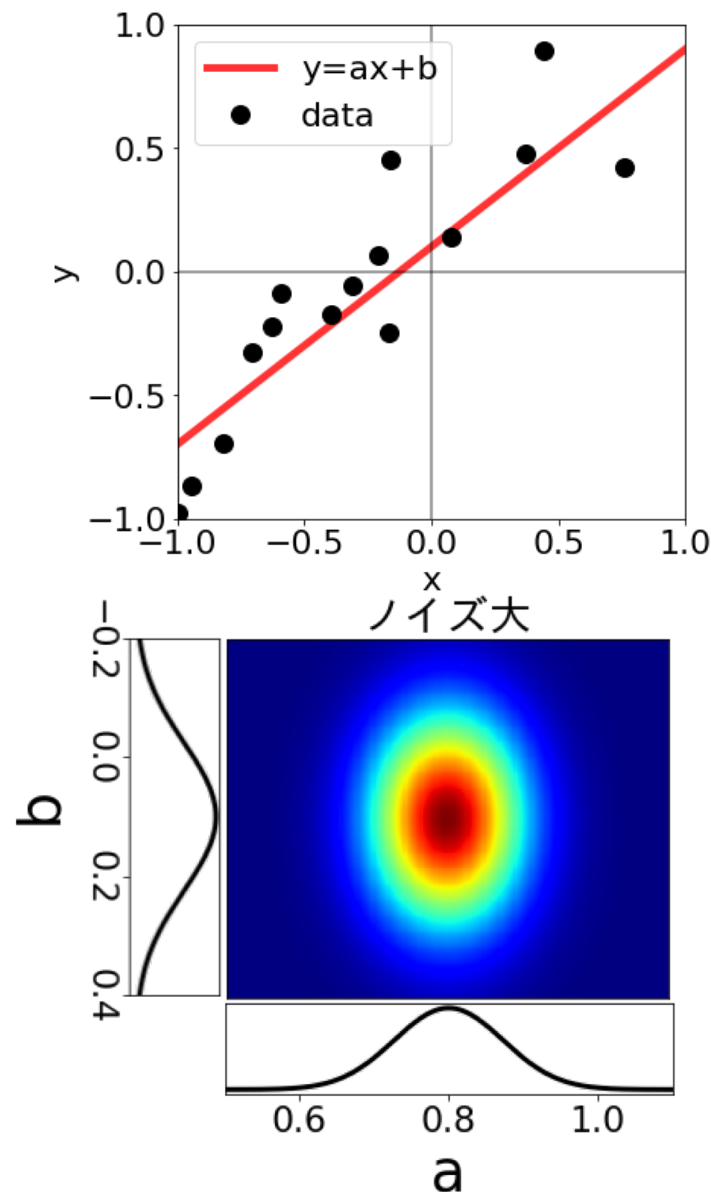
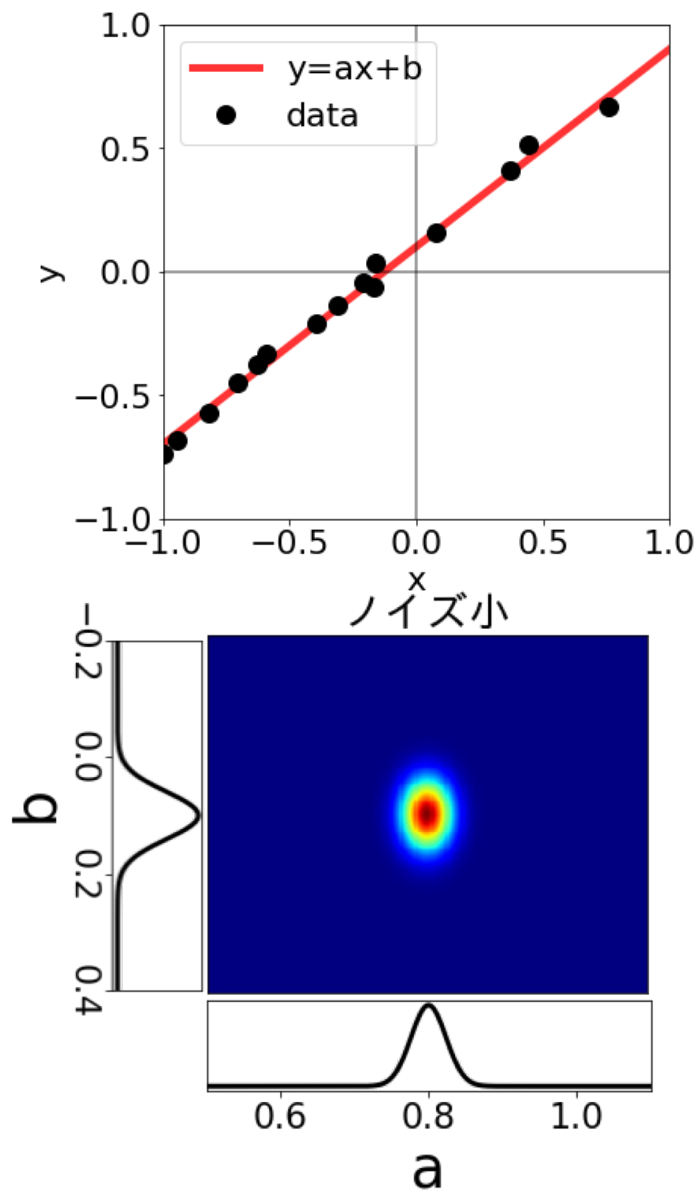
$$p(n_i) = p(y_i|a, b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

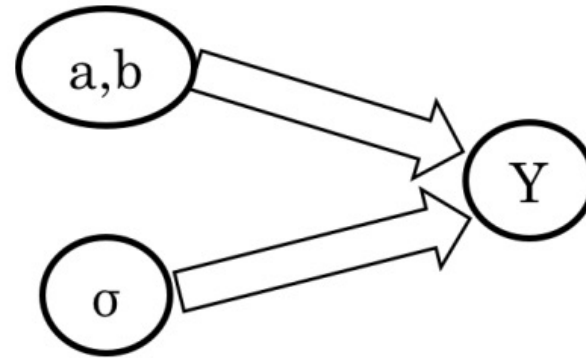
神器1: パラメータの事後確率推定

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

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



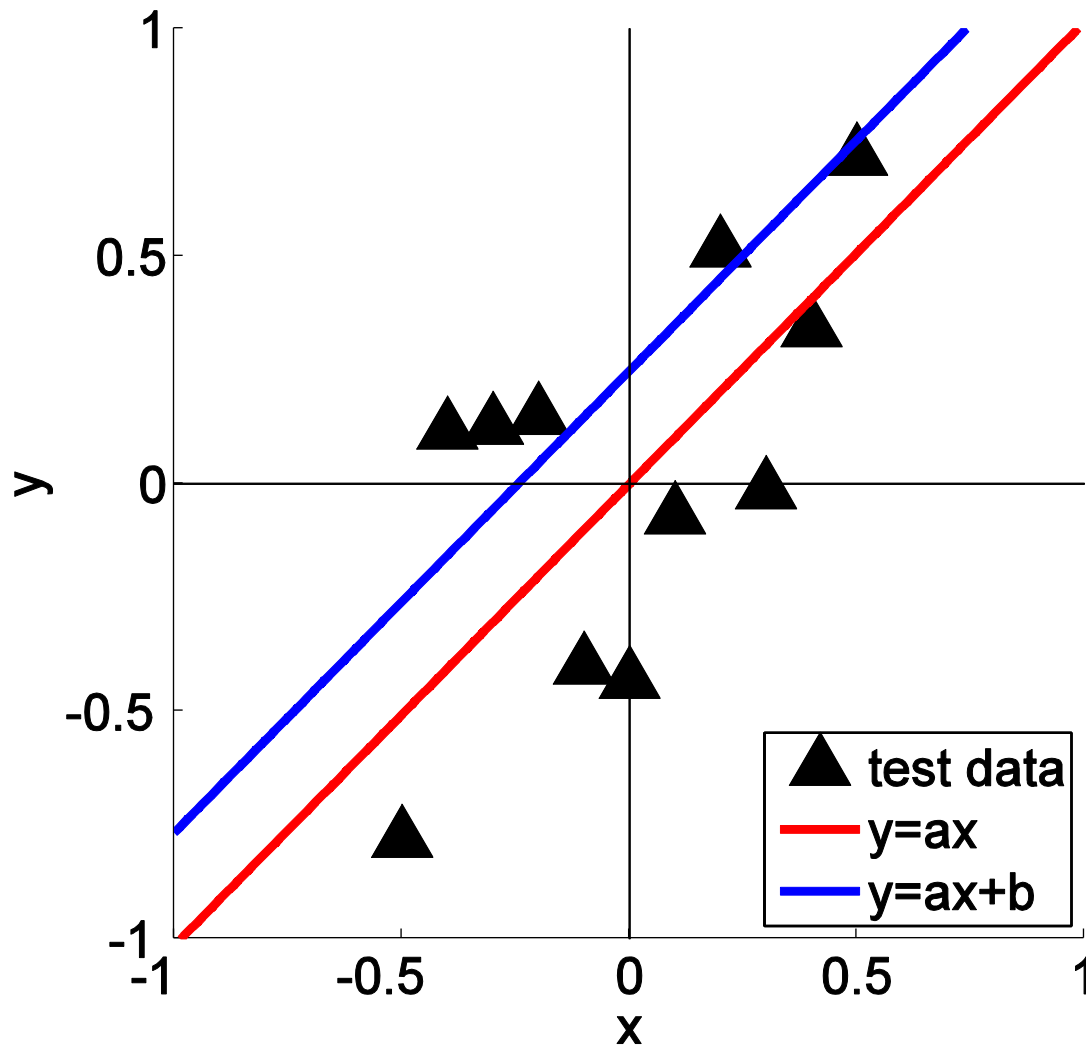
$$\begin{aligned} p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb p(Y|a, b, \sigma^2) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^N \int dadb \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} E(a, b) \right\} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right)^N \left\{ \exp \left(-\frac{N}{\sigma^2} E(a_0, b_0) \right) + \int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

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

問題意識

神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$ か $y=ax+b$ か?



	訓練誤差
$y=ax$	0.43
$y=ax+b$	0.34

	汎化誤差
$y=ax$	0.33
$y=ax+b$	0.40

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

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

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

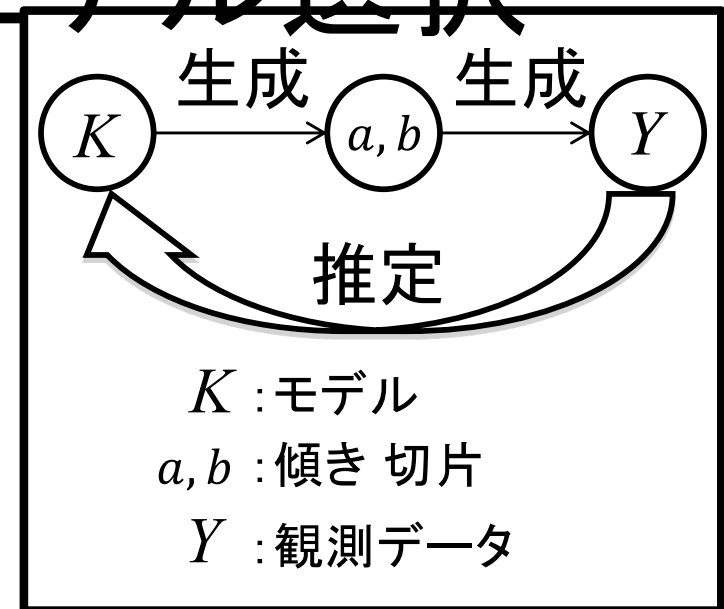
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

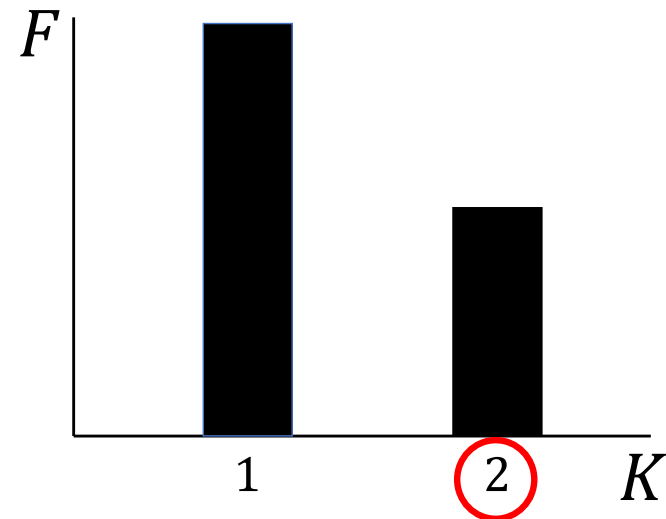
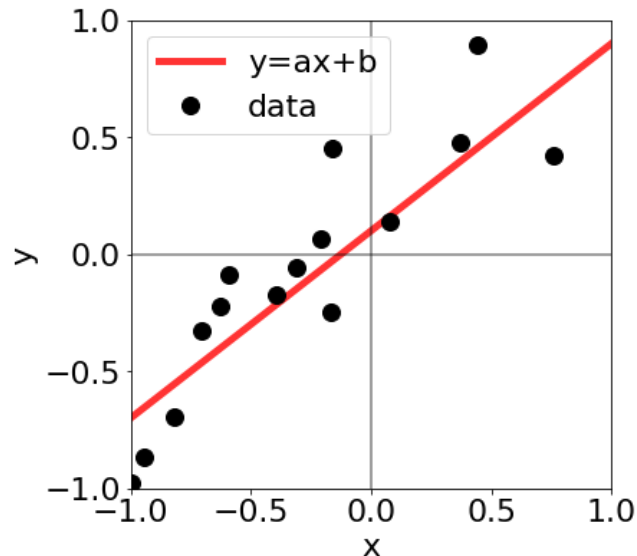
$$p(K | Y) = \frac{p(Y | K) p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

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

- 本講演の目的
 - ベイズ計測を放射光科学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
 - ノイズ分散推定
 - 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
- ベイズ計測専用高速ライブラリ
- まとめ: ベイズ計測の導入による佐賀LSのゲームチェンジング
- 佐賀LS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

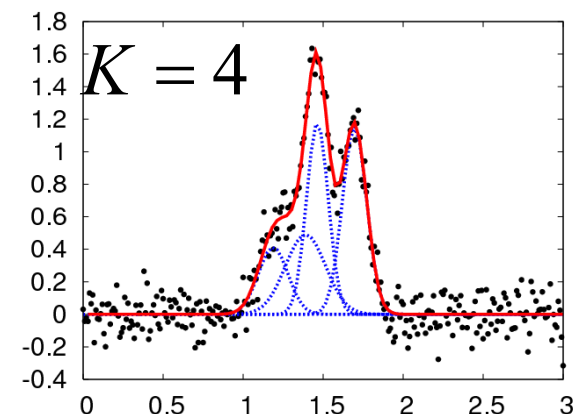
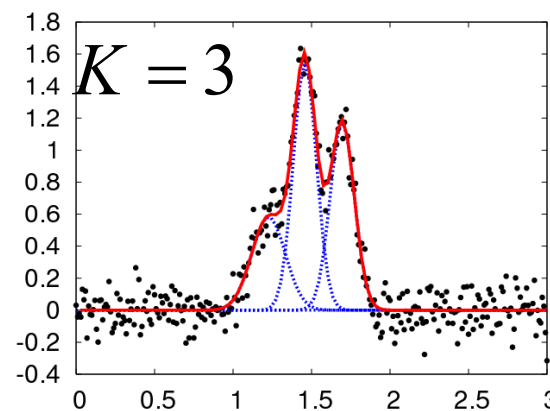
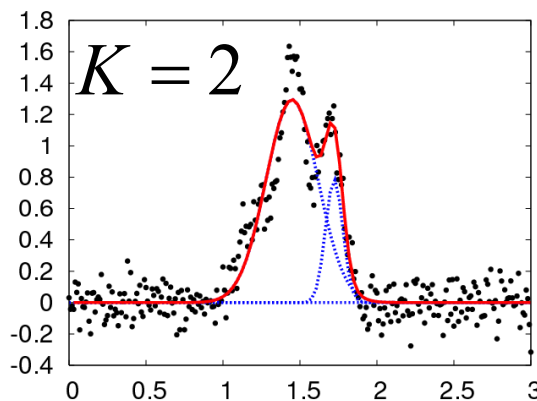
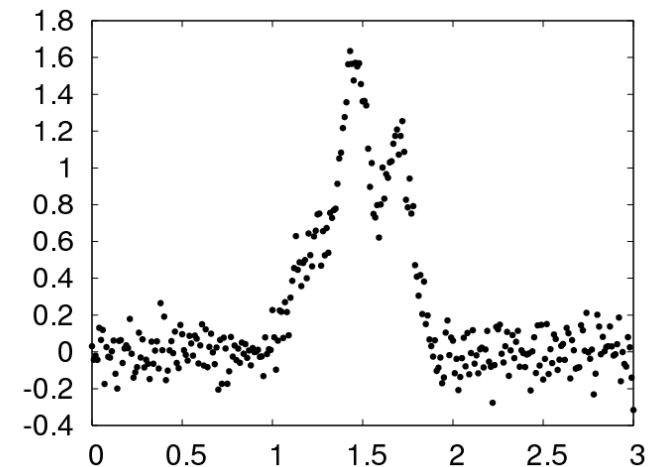
- スペクトル分解
 - メスバウアー分光

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*, 28, 82-89 (2012)

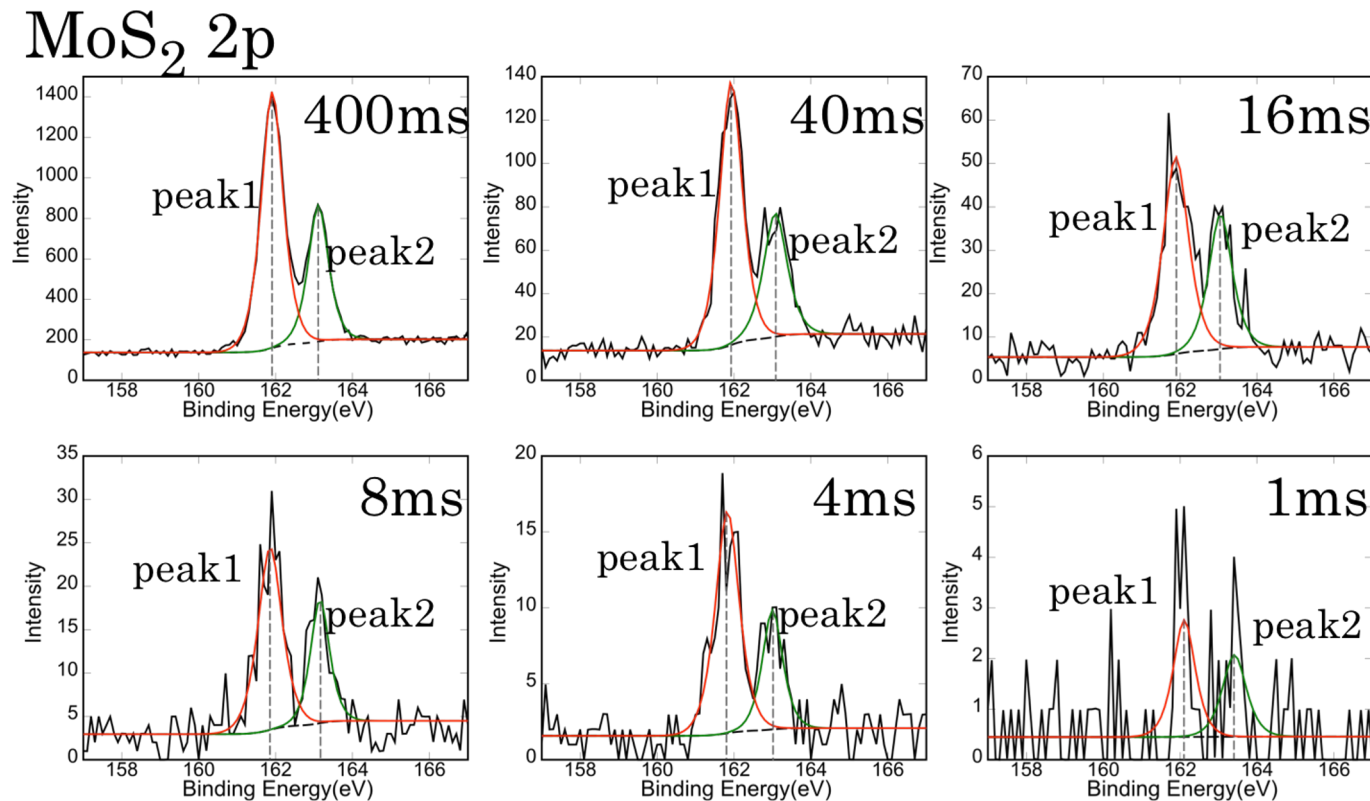
Nagata, Muraoka, Mototake, Sasaki and Masato Okada, “Bayesian Spectral Deconvolution Based on Poisson Distribution: Bayesian Measurement and Virtual Measurement Analytics (VMA)” *Journal of the Physical Society of Japan*, 88(4) 044003 - 044003 (2019)

非線形系に対しても $y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか？



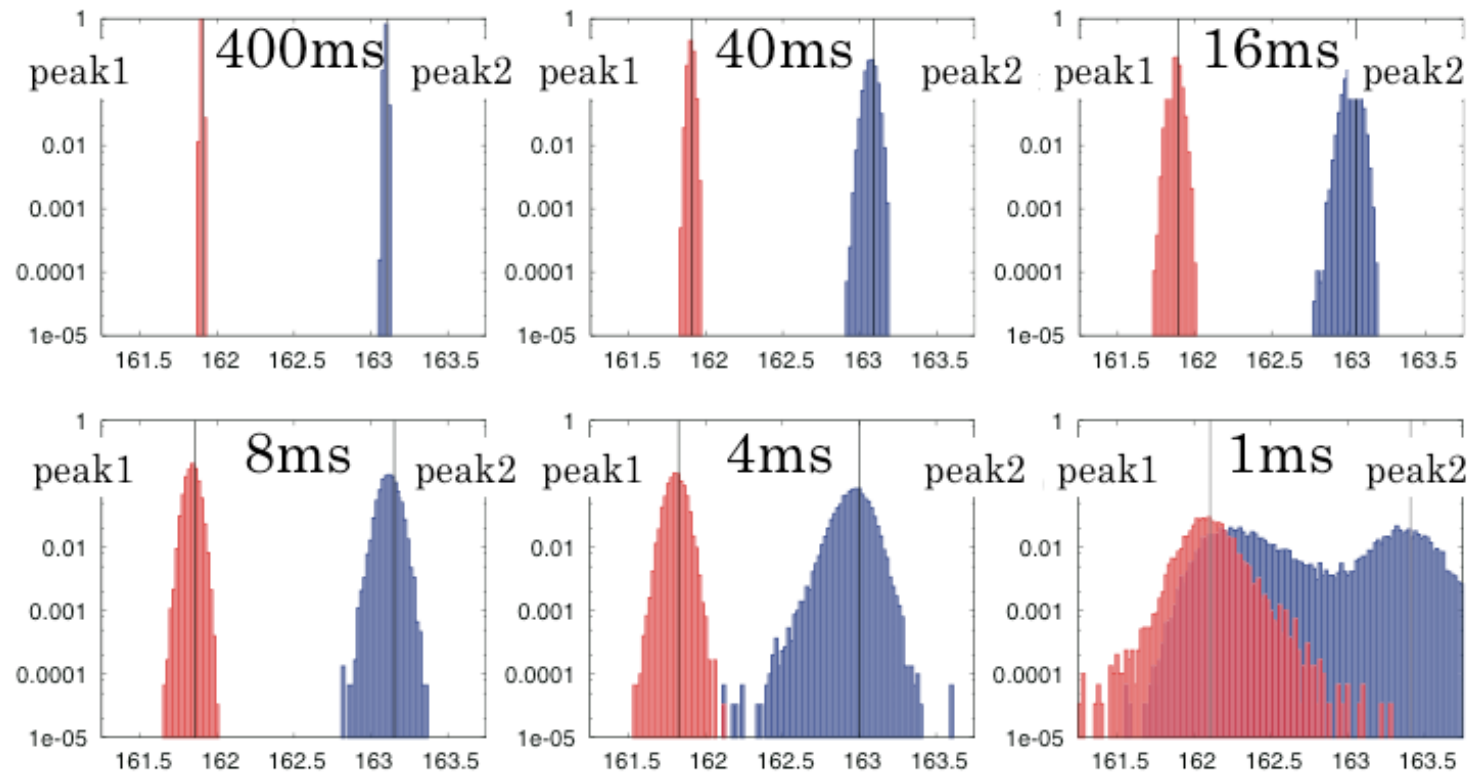
Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

非線形系に対しても $y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか？



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？



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

ベイズ計測による 計測と解析の双方向相互作用 計測限界から実験計画へ

従来法: ポストプロセスとしての解析

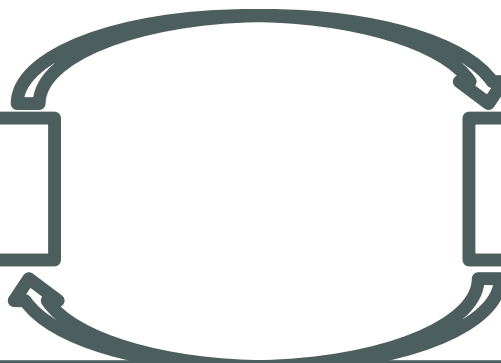
計測



解析

提案法: 計測と解析の双方向的相互作用

計測



解析

実験家もベイズ計測を使いこなす時代へ

メスバウアースペクトルの ベイズ計測

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

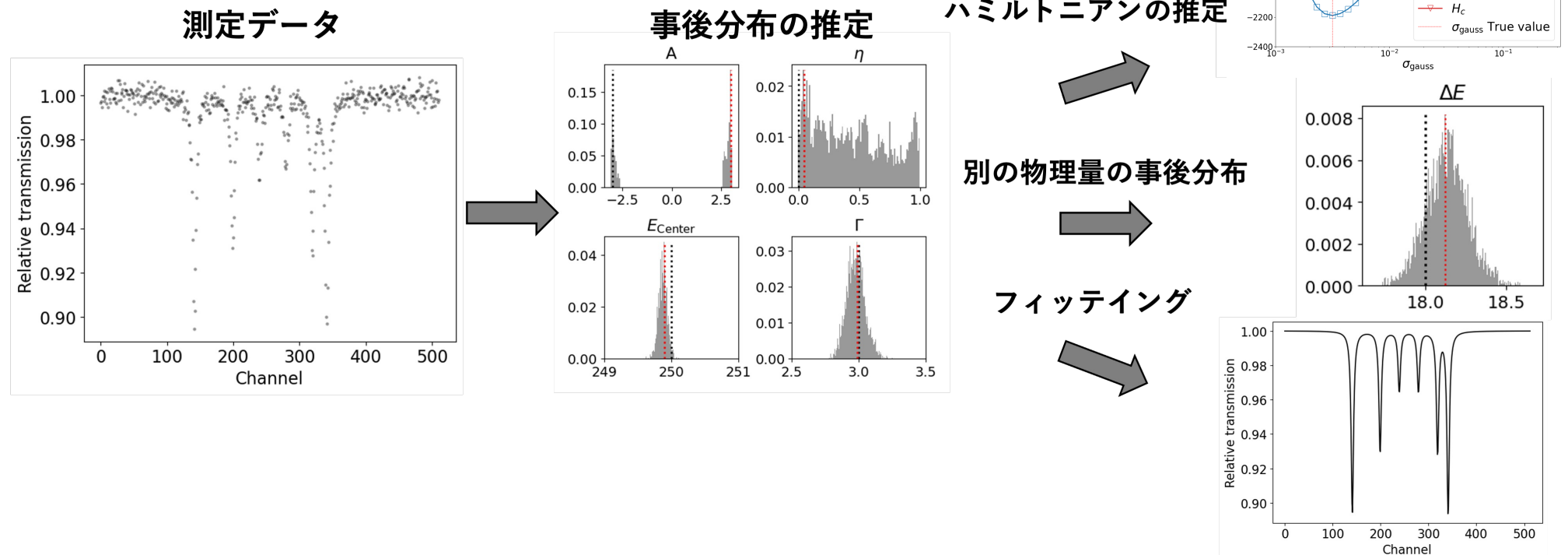
東京大学大学院 新領域創成科学研究科 岡田 真人

Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata,
Mizumaki and Okada, *Journal of the Physical
Society of Japan*, 91, 104002 (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bauer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

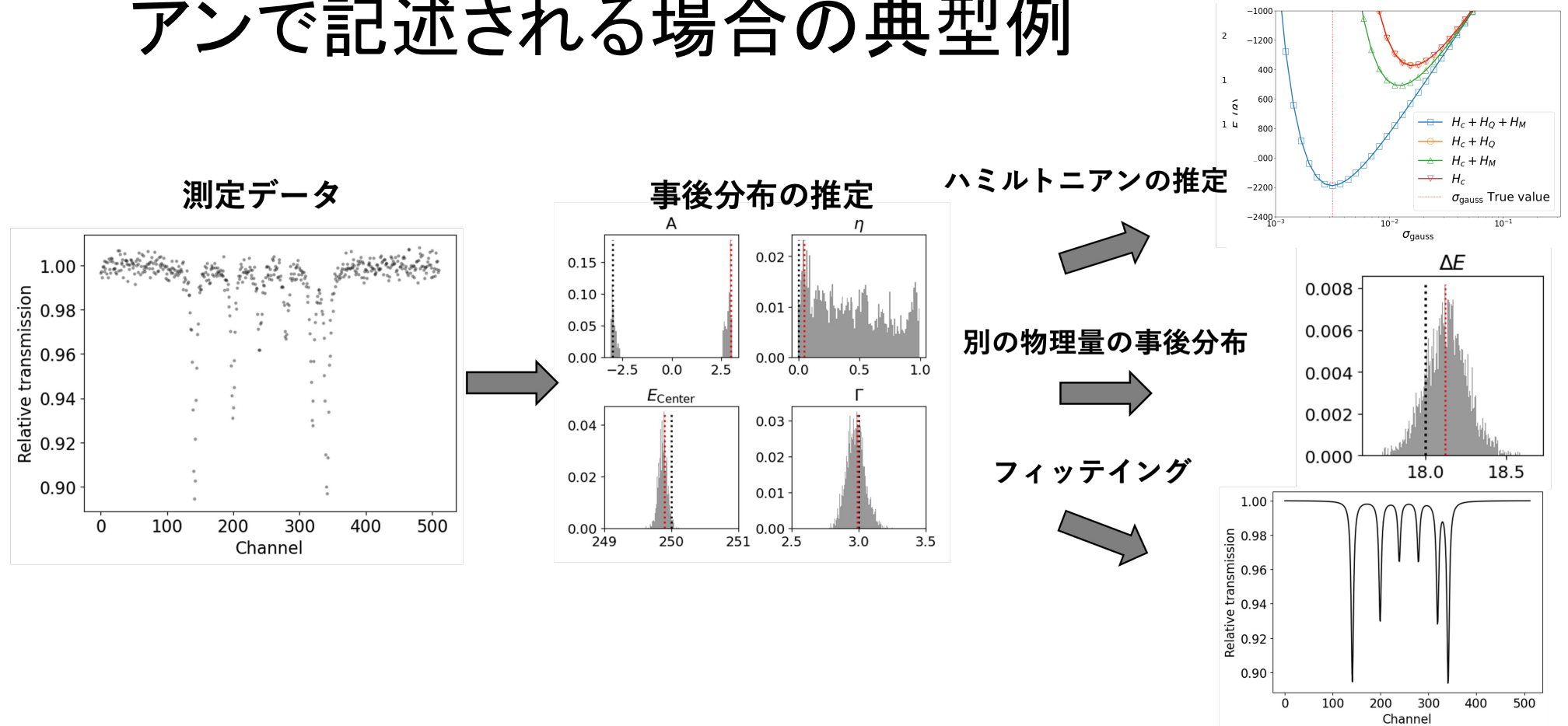


Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada,
JPSJ, 91,W104002 (2022)

非線形系に対しても

$y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか？

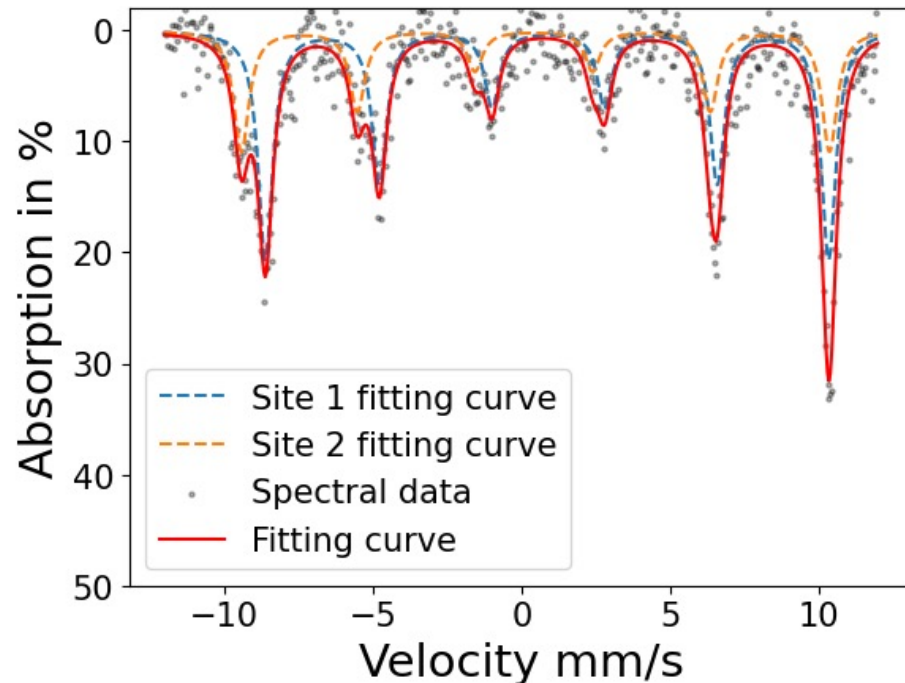
- メスbauer分光：生成モデルがハミルトニアンで記述される場合の典型例



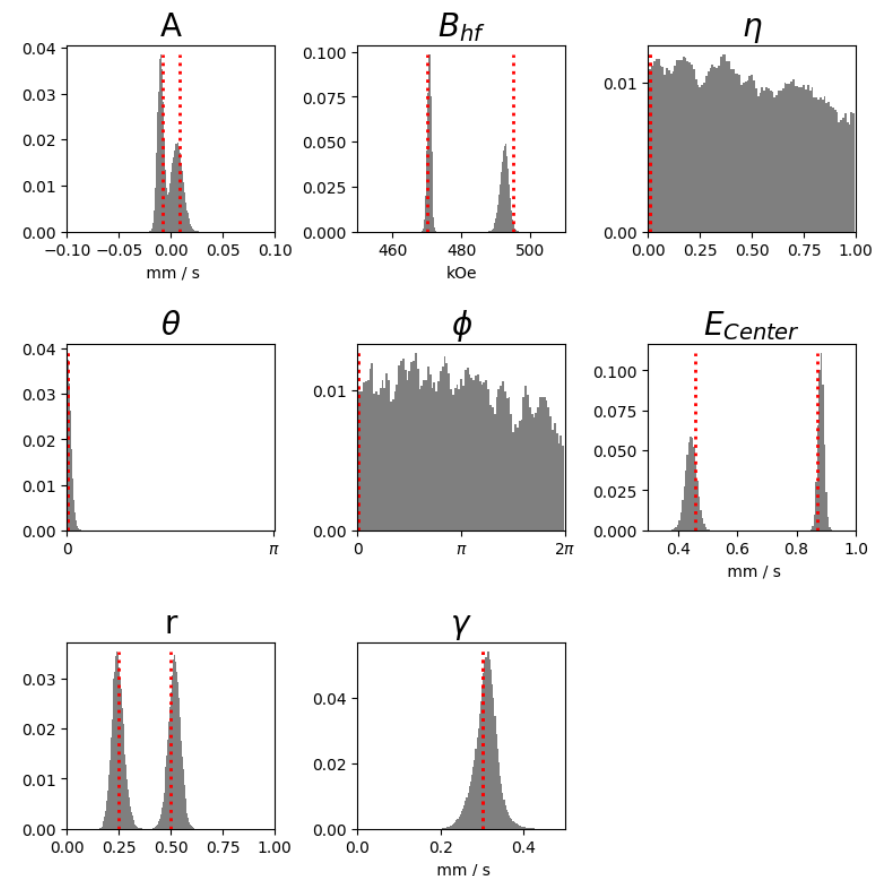
Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada,
JPSJ, 91,W104002 (2022)

非線形系に対しても $y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか？

フィッティング結果

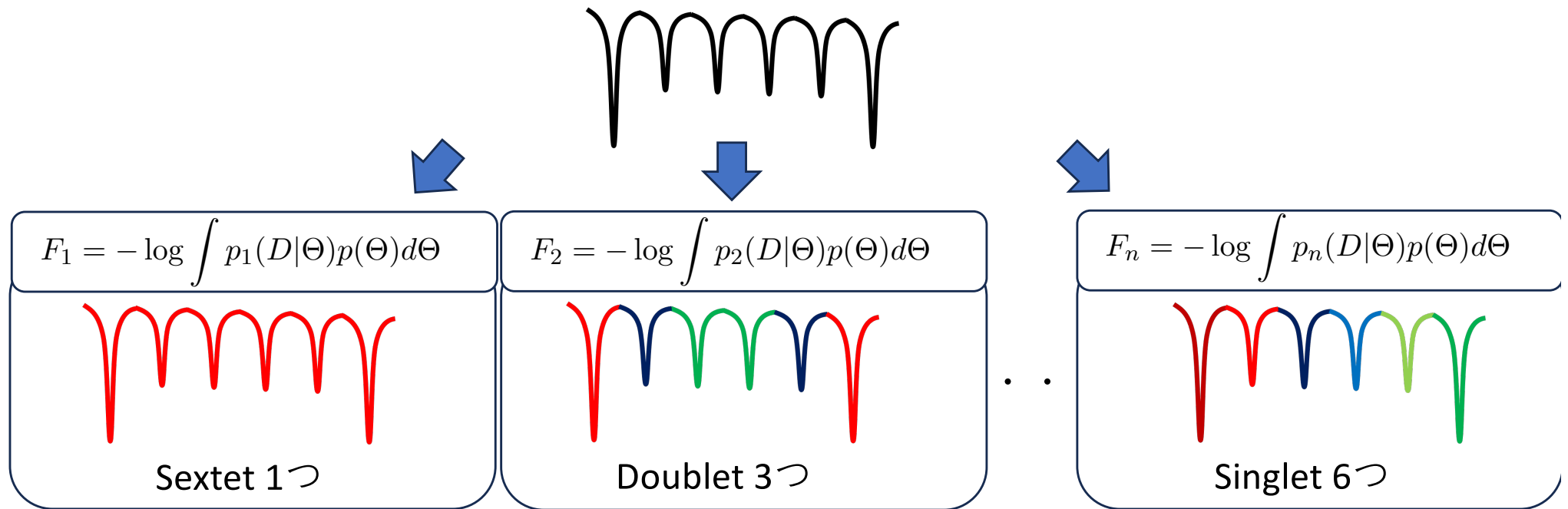


事後分布 (赤い点線が実験値)



非線形系に対しても $y=ax+b$ のアナロジーは成り立つか?

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

内容

- 本講演の目的
 - ベイズ計測を放射光科学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
 - ノイズ分散推定
 - 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
- **ベイズ計測専用高速ライブラリ**
- まとめ: ベイズ計測の導入による佐賀LSのゲームチェンジング
- 佐賀LS全ビームラインベイズ化計画

JASRIデータ駆動科学グループ ベイズ計測プログラム

高輝度光科学研究センター(JASRI)
データ駆動科学グループ

横山優一

JASRI



これまでの経歴と研究活動

2018年：博士(理学)、東京大学・理学系研究科・物理学専攻

・遷移金属化合物の電子状態研究 @ SPring-8 BL07LSU

ランタンコバルト酸化物のspin状態 PRL 120, 206402 (2018)

ユウロピウム化合物の光誘起価数転移 PRB 100, 115123 (2019)

2018年～2019年：NIMS(ポスドク研究員)

・スパースモデリングによるCDIの実像回復法

L1正則化 JPSJ 88, 024009 (2019)、L2+TV正則化 JPSJ 91, 034701 (2022)

2019年～：JASRI(CREST[情報計測]の博士研究員)

・**ベイズ推定**による解析高度化

階層モデリング Sci. Rep. 13, 14349 (2023)、ベイズ統合 JPSJ 90, 034703 (2021)

・**ベイズ推定**による計測効率化

磁気コンプトン散乱 JPSJ 90, 094802 (2021)

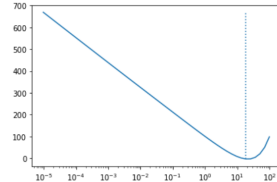
2023年1月～：JASRI(研究員、データ駆動科学グループ)

・SPring-8のBLに**ベイズ推定**を水平展開【SPring-8全BLベイズ化計画】

ベイズ計測のPythonプログラム

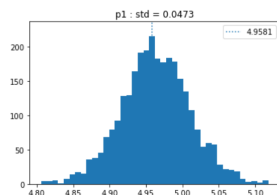
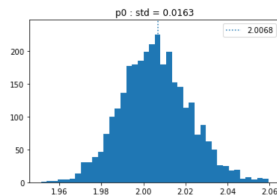
```
In [21]: # ノイズ推定
F = []
for i in range(1, num_temp):
    A = 0
    for j in range(i):
        A += (temp[j+1] - temp[j]) * mean_E[j+1] / (cycle_burn_in_length * n)
    F = np.append(F, A * n ** 2 * (np.log(temp[j]) - np.log(2 * np.pi)))
plt.plot(temp[1:num_temp], F)
plt.xscale("log")
plt.vlines(temp[np.argmin(F)+1], np.min(F), np.max(F), linestyle="dotted")
# plt.yscale("log")
# plt.ylim(200, 500)
print("自由エネルギーの最小値", np.min(F))
print("推定されたノイズの標準偏差", 1 / (temp[np.argmin(F)+1]) ** 0.5)
print("最適な逆温度のインデックス", np.argmin(F)+1)
plt.show()

自由エネルギーの最小値 -3.0050021529226356
推定されたノイズの標準偏差 0.23191032749750493
最適な逆温度のインデックス 44
```



ノイズ推定と
自由エネルギー計算

```
In [22]: # 事後確率分布をプロット
i = np.argmin(F)+1 # ノイズ推定で得られた最適な逆温度のインデックスが入る
pp_MPM = np.zeros(num_para)
for j in range(num_para):
    pp = np.load(dir + "/rslt_p{}.npz".format(j), allow_pickle=True)
    plt.title("p{} : std = {:.4f}".format(j, np.std(pp[i][burn_in_length::])))
    plt.hist(pp[i][burn_in_length::], bins=40)
    pp_hist = np.histogram(pp[i][burn_in_length::], bins=40)
    pp_MPM[j] = ((pp_hist[1])[np.argmax(pp_hist[0])+1] + (pp_hist[1])[np.argmax(pp_hist[0])]) / 2
    plt.vlines(pp_MPM[j], 0, 1, label="p{} : {:.4f}".format(j, pp_MPM[j]))
    plt.ylim(0, 1)
    plt.legend()
    plt.show()
```



パラメータ毎の事後分布
の可視化

初学者へのベイズ計測導入実習

実習1: ハイパーパラメータの調整

実習2: $y=ax+b \Rightarrow$ スペクトル分解

$$y=ax+b$$

ベイズ推定における採択率をハイパーパラメータ(Step size)により調整する方法

Step size S の関数

$$S = \begin{cases} C & (\alpha\beta \leq 1) \\ \frac{C}{(\alpha\beta)^d} & (\alpha\beta > 1) \end{cases} \quad (1)$$

Step size を一定値 C に設定すると、高温領域($\beta \ll 1$)では採択率がほぼ一定になるが、低温領域では採択率が大幅に低下してしまう。低温領域の採択率を高温領域と同等に保つため、ある逆温度 $\beta = 1/\alpha$ から指数関数的な補正を行う。

Step size 調整の手順

※以下の例では初期値を真値に近い値に設定し、繰り返し回数 500 回、焼きなまし回数 200 回で調整を行った。(真値に近い値を初期値とするとサンプリングの収束が速まるため、少ない繰り返し回数で調整が可能となる。)

※ノイズ分散 σ^2 の推定を行う場合、 $b \equiv \beta/\sigma^2$ が逆温度となるが、(1)式の β を b に置き換えて同様に Step size の調整を行う。

1. 高温領域の採択率から C を調整する。

$d=0$ とすると(1)式は $S=C$ (一定値) となる。この場合の採択率を見ながら C の値を変化させ、高温領域の採択率が 50% 付近になるように調整する。図 1 のように、 C の値を増加させると採択率は下がり、減少させると採択率は上がる。

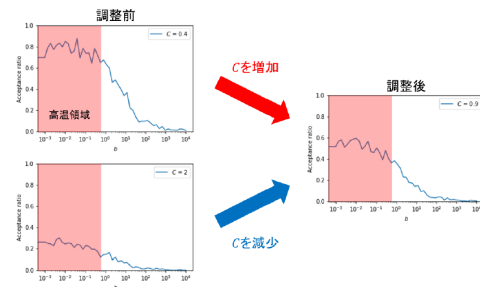
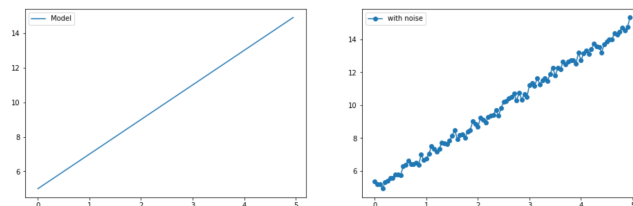


図 1. 調整前後の C の値と採択率の一例。

```
In [5]: def axb(x, a, b):  
        y = a*x + b  
        return y  
  
In [6]: def axbfit(x, p):  
        a, b = p[:, 0], reshape(num_tempo, 1)  
        y = axb(x, a, b)  
        return y  
  
In [7]: # シミュレーション用のデータを作成  
        sigma_R_sim = 0.2 # ノイズの標準偏差  
        n = 100 # データ点数  
        np.random.seed(seed=3) # 乱数のシードを設定  
  
        x = np.arange(n)/20 # x軸を作成  
        a = 2  
        b = 5  
        plt.figure(figsize=(16, 5))  
        plt.subplot(1, 2, 1)  
        plt.plot(x, axb(x, a, b), label="Model")  
        plt.legend()  
        plt.subplot(1, 2, 2)  
        y = axb(x, a, b) + np.random.normal(loc=0, scale=sigma_R_sim, size=n)  
        plt.plot(x, y, marker="o", label="with noise")  
        plt.legend()
```

Out[7]: <matplotlib.legend.Legend at 0x11245412940>



スペクトル分解用の関数に
プログラムを書き換え、
各自のデータへ適用

片上ライブラリとの連携

- Pythonプログラムは導入用としては最適だが、実用面では計算速度等に課題がある
- 片上先生のライブラリ(C++)と連携して、導入はPython、実用はC++という役割分担



The University of Tokyo

EMC ベイズ推定を 全てのユーザーへ

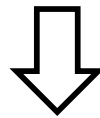
東京大学 大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻
片上 舜

自己紹介

- 東京大学・大学院理学系研究科 岡田研
(2016 ~ 2021)
- 学位論文
「ベイズ推論による物理モデルに対するパラメータ分布推定」
- 東京大学・大学院新領域創成科学研究科 助教
(2021 ~)
- 物理計測データに対してのベイズ解析
- ベイズ計測オープンソースソフトウェア

ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

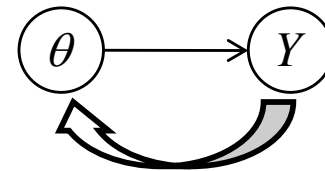
$$p(Y, \theta) = \underline{p(Y|\theta)p(\theta)} = p(\theta|Y)p(Y)$$



<ベイズの定理>

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

生成(因果律)



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

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

事前分布はEMCのソースコードを参考

データからモデルに対する事前知識を考察する。

(何もないければ何もないで良い)

上図を以下の式でフィッティングする。

$$y = \sum_i a_i \exp(-b_i(x - \mu_i)^2/2)$$

データから恐らく

ピーク強度は正の値で 1 程度

ピーク位置は 1.5 程度

逆分散は正の値で 1 程度

```
#define gsl_ran_normal_pdf gsl_ran_gaussian_pdf
inline double SpectralDecompositionGausEMC::SamplingFromPrior(const MBHP_j & MBHP_j, const
static std::gamma_distribution<> prior_0(2,0.5); // ~ aに関する事前分布
if (MBHP_j.P == 0) return prior_0(engine);
static std::normal_distribution<> prior_1(1.5,0.5); // ~ muに関する事前分布
if (MBHP_j.P == 1) return prior_1(engine);
static std::gamma_distribution<> prior_2(14,10); // ~ bに関する事前分布
if (MBHP_j.P == 2) return prior_2(engine);
return 0;
};
inline double SpectralDecompositionGausEMC::ProbCalculationDnPrior(const MBHP_j & MBHP_j, const
if (MBHP_j.P == 0) return gsl_ran_gamma_pdf(value,2,0.5); // ~ aに関する事前分布
if (MBHP_j.P == 1) return gsl_ran_gaussian_pdf(value - 1.5,0.5); // ~ muに関する事前分布
if (MBHP_j.P == 2) return gsl_ran_gamma_pdf(value,14,10); // ~ bに関する事前分布
return 0;
};
```

prior.hpp

フォワードモデルは EMCのソースコードを参考

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

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

targetfunction.hpp

```
inline double SpectralDecompositionGaussEMC::TargetFunction(const vector<double> & x, const vectorMBHP
    double y = 0; int BaseNum = op_.base_nums_[0];
    const auto a = [&](int B) -> const double& {return MBHPparams[0][(int)B][0][0][0];};
    const auto mu = [&](int B) -> const double& {return MBHPparams[0][(int)B][0][1][0];};
    const auto b = [&](int B) -> const double& {return MBHPparams[0][(int)B][0][2][0];};
    rep(i, BaseNum){
        y += a(i) * exp(- 0.5 * b(i)*pow(x[0]-mu(i),2));
    }
    return y;
};
```

サンプリング設定は EMCのソースコードを参考

execution.ipynb

```
data = {  
    # ピーク数  
    "base_num": 3,  
    "replica_num": 36,  
    "gamma": 1.4,  
    "sample_num": 1000,  
    "burnin_num": 1000,  
    "C d": [  
        [0.5, 0.6],  
        [0.5, 0.6],  
        [20, 0.9]  
    ]  
}  
updateConfig(data)
```

サンプリング設定は EMCのソースコードを参考

execution.ipynb

ステップサイズ
調整パラメータ



```
data = {  
    # ピーク数  
    "base_num": 3,  
    "replica_num": 36,  
    "gamma": 1.4,  
    "sample_num": 1000,  
    "burnin_num": 1000,  
    "C d": [  
        [0.5, 0.6],  
        [0.5, 0.6],  
        [20, 0.9]  
    ]  
}  
updateConfig(data)
```

サンプリング設定は EMCのソースコードを参考

execution.ipynb

```
data = {  
    # ピーク数  
    "base_num": 3,  
    "replica_num": 36,  
    "gamma": 1.4,  
    "sample_num": 1000,  
    "burnin_num": 1000,  
    "C d": [  
        [0.5, 0.6],  
        [0.5, 0.6],  
        [20, 0.9]  
    ]  
}  
updateConfig(data)
```

ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

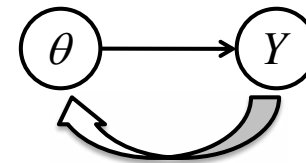
$$p(Y, \theta) = \underline{p(Y | \theta)p(\theta)} = p(\theta | Y)p(Y)$$



<ベイズの定理>

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

生成(因果律)

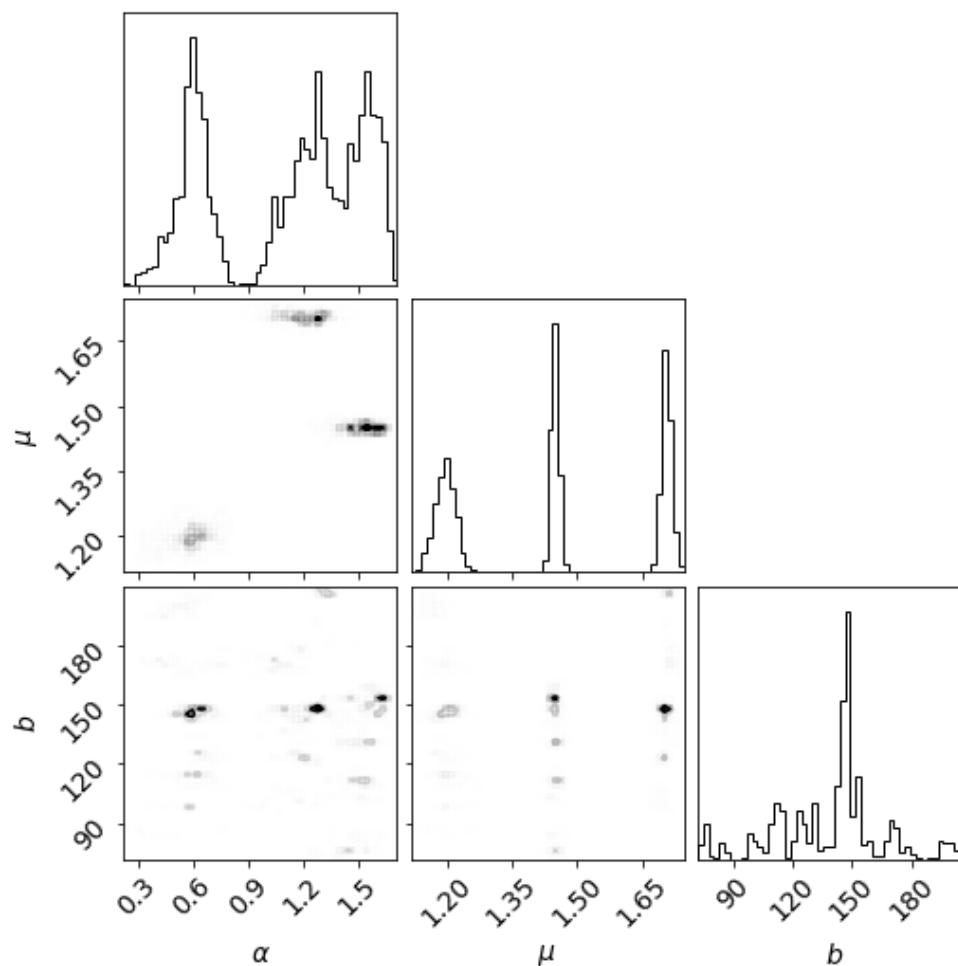


$p(\theta | Y)$: 事後確率。データが与えられたもとでの、パラメータの確率。

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

事後分布は EMCのソースコードを参考

execution.ipynb



内容

- 本講演の目的
 - ベイズ計測を放射光科学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
 - ノイズ分散推定
 - 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
- ベイズ計測専用高速ライブラリ
- まとめ: ベイズ計測の導入による佐賀LSのゲームチェンジング
- 佐賀LS全ビームラインベイズ化計画

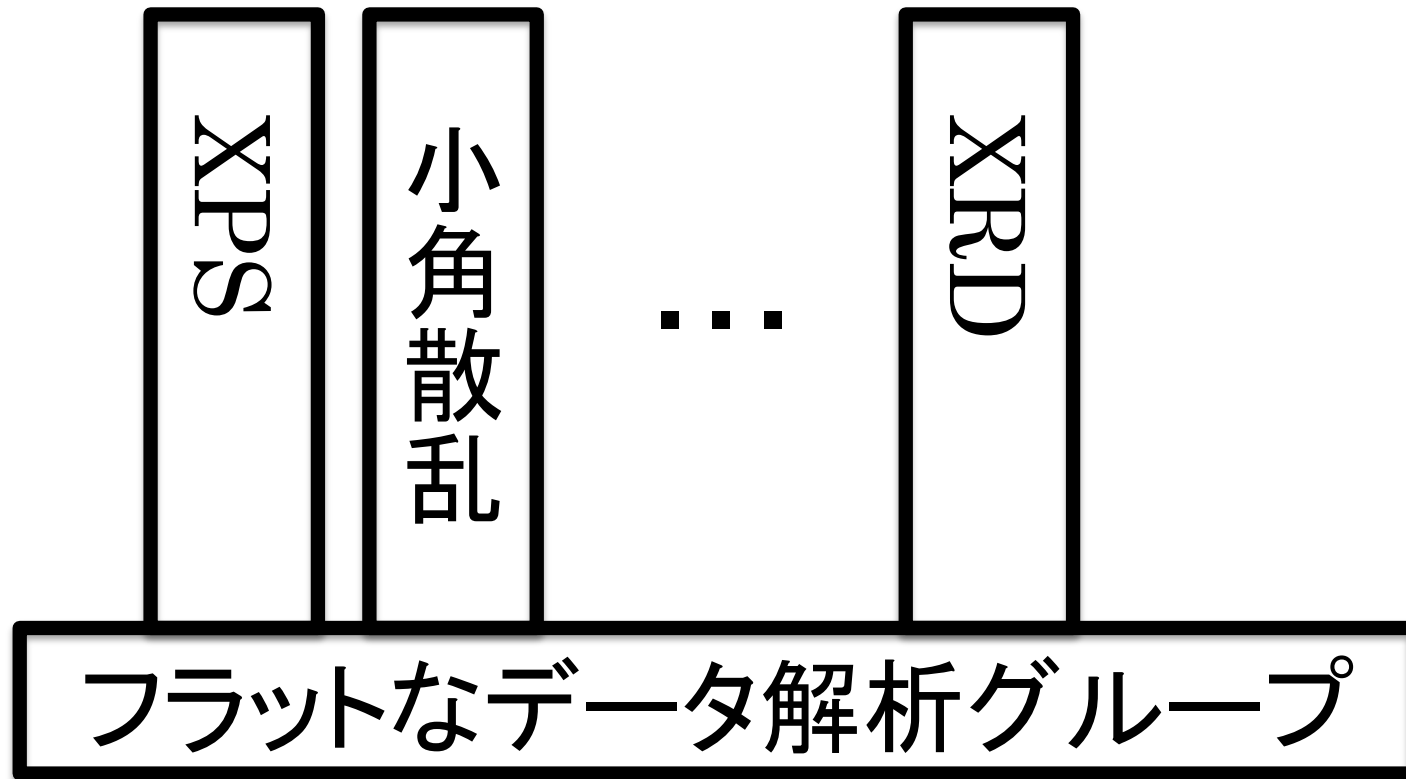
まとめ: ベイズ計測の導入による 佐賀LSのゲームチェンジング

- 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

佐賀LS全ビームライン ベイズ化計画

- ベイズ計測を、佐賀LSに導入する**メリットは絶大**
ベイズ計測は、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。
- ベイズ計測を佐賀LS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/JASRI横山と東大片上によるライブラリ
- データ解析部門一元化と外注による**コストダウン**
 - 他の**放射光施設のノウハウ**の導入
 - **ユーザー**のデータ解析の**ニーズ**に対応
 - 株式会社 a.s.ist (岡田研D1 林の講演)

ベイズ計測による データ解析部門のフラット化と人材育成



個別の計測に従順していても、同じアルゴリズムが他の計測でも使用可能なことを感じることがでる。データ解析技術者のスキルアップが見込める。

ベイズ計測による 計測と解析の双方向相互作用 計測限界から実験計画へ

従来法: ポストプロセスとしての解析

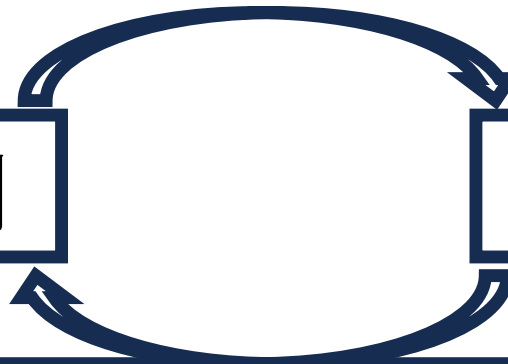
計測



解析

提案法: 計測と解析の双方向的相互作用

計測



解析

実験家もベイズ計測を使いこなす時代へ