ベイズ計測の理論的洞察と展望

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

Mesoscopic Bayesian Inference by Solvable Models Shun Katakami, Shuhei Kashiwamura, Kenji Nagata, Masaichiro Mizumaki, Masato Okada

https://arxiv.org/abs/2406.02869 回口工业主义

岡田研新着情報

https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/home.html

内容

- 共同研究者と自己紹介
- 本研究の目的と達成イメージ
- 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- 数值実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- ・まとめ

内容

- 共同研究者と自己紹介
- 本研究の目的と達成イメージ
- 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- 数值実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- ・まとめ

共同研究者



柏村 周平東京大学



永田賢二 NIMS



水牧 仁一朗 熊本大学



岡田真人 東京大学

自己紹介

- 東京大学·大学院理学系研究科 岡田研 (2016 ~ 2022)
- ・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(2022~)
- ・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

内容

- 共同研究者と自己紹介
- 本研究の目的と達成イメージ
- 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- 数值実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- ・まとめ

研究の動機の直感的説明

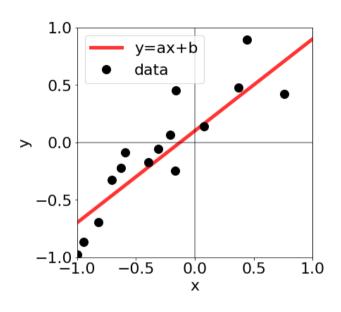
ベイズ計測で自由エネルギーを計算する場面を想像する

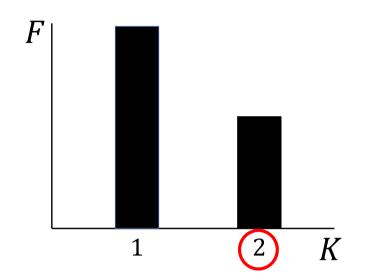


観測ノイズの取り扱いの二つの流儀

- 1. 観測ノイズを固定して議論 岡田の基調講演
- 2. 観測ノイズを固定せずに議論 観測点N無限大の漸近論 観測点N有限の理論はない 本研究で提案

モデル選択: 自由エネルギー差



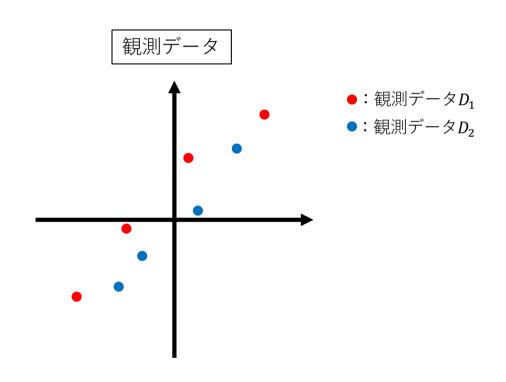


- K = 1 : y = ax
- K = 2 : y = ax + b

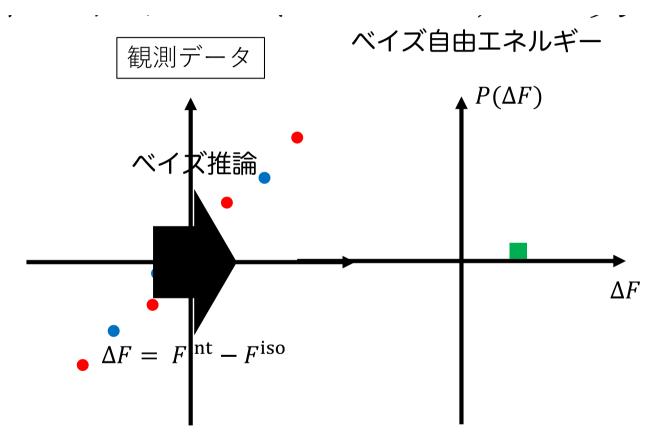
$$F(K=1) = N \left\{ \frac{1}{\sigma^2} E(a_0) + \frac{\log N}{2N} \right\}$$

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

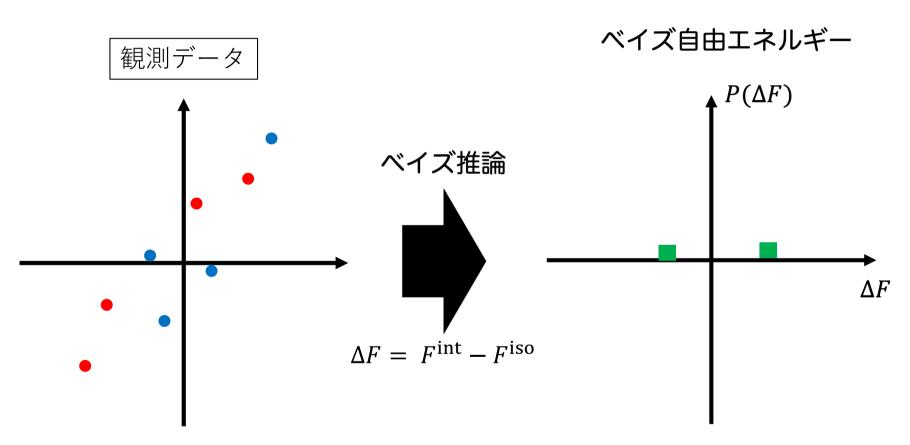
データのみからモデルを選択できる



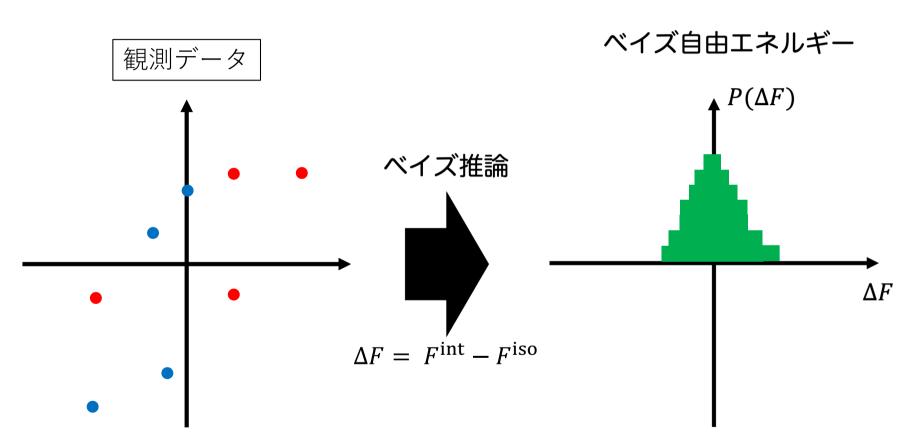
モデル選択やベイズ統合の自由エネルギー差を知りたい。



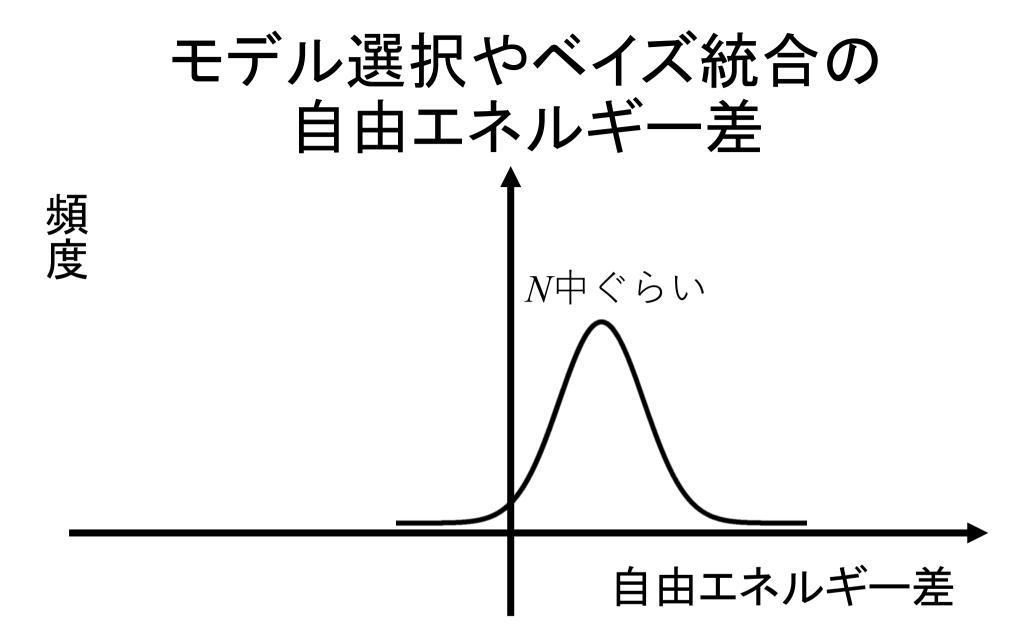
観測データ1つに対してベイズ自由エネルギー差が1つ計算できる。



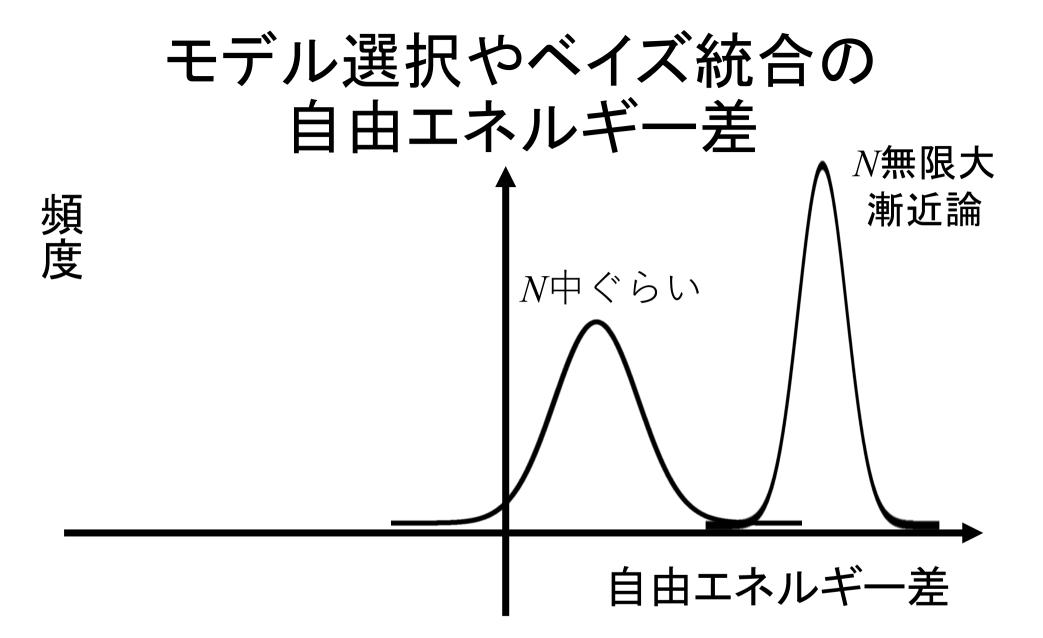
観測データ1つに対してベイズ自由エネルギー差が1つ計算できる。



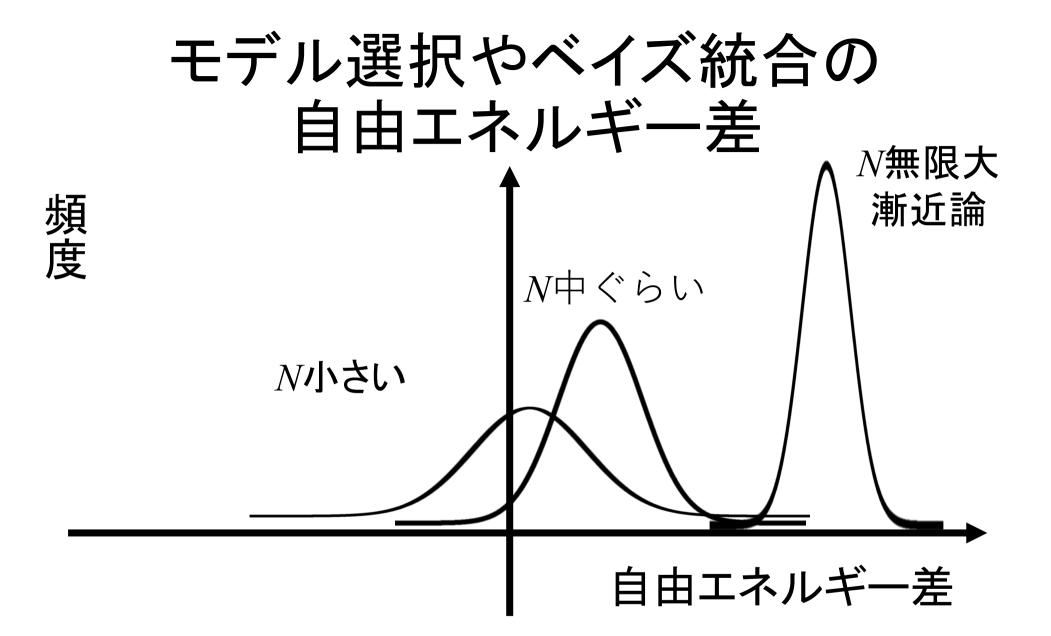
観測データ1つに対してベイズ自由エネルギー差が1つ計算できる。 特定の実験条件下でも観測ごとに自由エネルギー差は毎回異なる。 特定の実験条件下での自由エネルギー差の分布はどうなっているのか?



計測点数N無限大の漸近論での取り扱い不可 これが取り扱える理論を構築(難しいけどやる)



計測点数N無限大の漸近論での取り扱い不可 これが取り扱える理論を構築(難しいけどやる)



計測点数N無限大の漸近論での取り扱い不可 これが取り扱える理論を構築(難しいけどやる)

研究の動機のまとめ

- •計測点数Nが有限の場合の、ベイズ計測 を解析的に取り扱う新理論の紹介
 - •動機
 - •計測点数Nが有限の場合、ベイズ的モデル選択やベイズ統合の結果は揺らぐことが数値計算で示されている。
- ・既存の理論のほとんどはNが無限大の極限を取り扱っているので、上記の動機に応える理論は存在しない。
- そこで我々が、新しい枠組みで理論を構築

理論的枠組みが満たすべき条件

- 1. 計測点数Mに従い、ベイズ的モデル選択とベイズ統合の自由エネルギー差が、どう変化していくかが理解できること
- 2. そのため、通常の計測点数Nの無限大の理論ではなく、N有限を理論取り扱えること
- 3. できるだけ数値計算に頼らず、解析的に取り扱える理論であること
- 4. 単なるトイモデルではなく、実際の計測 でも用いられるモデルであること

内容

- 共同研究者と自己紹介
- 本研究の目的と達成イメージ
- 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- 数值実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- ・まとめ

自然科学からみたベイズ推論

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

生成(因果律)



くベイズの定理>

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

p(a,b|Y):事後確率。データが与えられたもとでの、

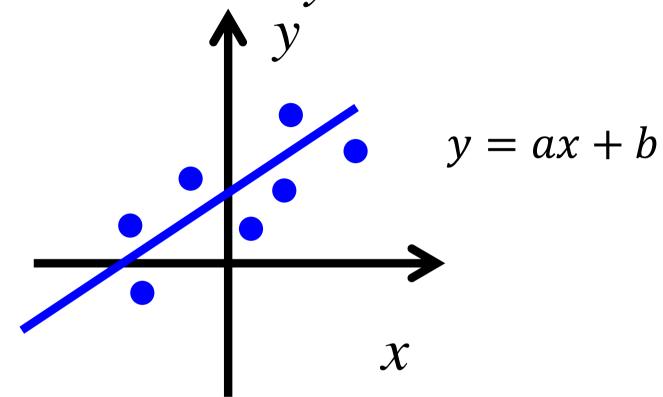
パラメータの確率分布

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

ベイズ計測の三つの要素

- ・ベイズ計測: ベイズ推論から計測科学に 必要十分な要素を取り出したコンパクトな 理論体系
- 1. 物理パラメータの事後分布推定 事後分布推定により推定精度を得る
- 2. モデル選択 複数モデルからデータを用いて、一つ のモデルを決める
- 3. ベイズ統合 複数の計測データの統合





- 1. 解析的にベイズ計測が導入できる系
- 2. 実際の計測でも用いられている系 傾き *a*: 系の線形応答、バネ定数、電気 伝導度、誘電率

定式化

$$y_i = ax_i + b + n_i$$
 $p(n_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{n_i^2}{2\sigma^2}\right)$ $\overline{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0$ とする場合 $E(a,b) = \frac{1}{2} \left(\overline{x^2} \left(a - \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}\right)^2 + (b - \overline{y})^2 - \frac{\overline{xy}^2}{\overline{x^2}} - \overline{y}^2 + \overline{y^2}\right)$ $= \mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0,b_0) \geqq E(a_0,b_0)$

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y_i \quad \overline{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \quad \overline{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i^2$$

岡田による基調講演との対応

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

岡田 (基調講演): n_i を固定して計算

片上(本講演): n_i の揺らぎを考慮して計算

 n_i の揺らぎが自由エネルギーの差に影響

ミクロ変数とメゾ変数の導入(1/2)

- ・ミクロ変数 n_i は計測点数に対応するN個
- ・ミクロ変数 n_i の揺らぎを取り入れる際の計算量は $\exp(N)$ ・このため通常の理論はN無限大の漸近論で展開するが、これでは本研究の目的にそぐわない。
- ・ > クロ変数 n_i から決まるメゾ変数を導入
- ・メゾ変数を用いれば所望の3個程度の変数で計算できるので、本研究の目的を達成できる。

ミクロ変数とメゾ変数の導入(2/2)

残留誤差自体自由度N-2の χ^2 分布

$$E(\hat{a},\hat{b}) = \frac{1}{2} \left(-\frac{\overline{x}\overline{n}^2}{\overline{x}^2} - \overline{n}^2 + \overline{n}^2 \right) = \frac{\sigma_0^2}{2N} v$$

その内部はガウス分布が存在. a, bの推定値に対応

$$\frac{\overline{xn}^2}{\overline{x^2}} = \frac{\sigma_0^2}{N} \tau_1^2 \qquad \hat{a}(\tau_1) = a_0 + \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{N\overline{x^2}}} \tau_1$$

$$\overline{n}^2 = \frac{\sigma_0^2}{N} au_2^2$$
 $\hat{b}(au_2) = b_0 + \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{N}} au_2$

残留誤差と自由エネルギーの ミクロ表現とメゾ表現

ミクロ表現 ミクロ変数は n_i のN変数

$$F(Y) = \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_0^2) - \ln\left(\frac{\sigma_0^2\pi}{2N}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(\overline{x^2}\right) + \ln(2\xi_a) + \ln(2\xi_b) + \frac{N}{\sigma_0^2} E(\hat{a}, \hat{b})$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma_0^2}} \left(-\xi_a - \hat{a}\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma_0^2}} \left(\xi_a - \hat{a}\right)\right)\right]$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} \left(-\xi_b - \hat{b}\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} \left(\xi_b - \hat{b}\right)\right)\right]$$

メゾ表現 メゾ変数は τ_1 , τ_2 , υ の3変数

$$F(Y) = \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_0^2) - \ln\left(\frac{\sigma_0^2\pi}{2N}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(\overline{x^2}\right) + \ln(2\xi_a) + \ln(2\xi_b) + \frac{\upsilon}{2}$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma_0^2}}\left(-\xi_a - \hat{a}(\tau_1)\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma_0^2}}\left(\xi_a - \hat{a}(\tau_1)\right)\right)\right]$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}}\left(-\xi_b - \hat{b}(\tau_2)\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}}\left(\xi_b - \hat{b}(\tau_2)\right)\right)\right]$$

モデル選択 (1/4)

- ここではy=ax+bとy=axのモデル選択を 定式化する。
- ここで重要なのはメゾ変数の取り扱いである。
- 3+2=5メゾ変数のうち、同じデータを使 うことによりメゾ変数が4個になる。
- 特にモデル選択においては1つのメゾ 変数のみで実行できる。

モデル選択 (2/4)

y = ax + b の自由エネルギーのメゾ変数による表現. メゾ変数は τ_1, τ_2, ν_1 の3変数

$$F_{y=ax+b}(v_{1}, \tau_{1}, \tau_{2}) = \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_{0}^{2}) - \ln\left(\frac{\sigma_{0}^{2}\pi}{2N}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(\overline{x^{2}}\right) + \ln(2\xi_{a}) + \ln(2\xi_{b}) + \frac{v_{1}}{2}$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^{2}}}{2\sigma_{0}^{2}}}\left(-\xi_{a} - \hat{a}(\tau_{1})\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^{2}}}{2\sigma_{0}^{2}}}\left(\xi_{a} - \hat{a}(\tau_{1})\right)\right)\right]$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}}\left(-\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2})\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}}\left(\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2})\right)\right)\right]$$

y = ax の自由エネルギーのメゾ変数による表現メゾ変数は τ_1, ν_2 の2変数

$$F_{y=ax}(v_{2}, \tau_{1}) = \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_{0}^{2}) - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\sigma_{0}^{2}\pi}{2N\overline{x^{2}}}\right) + \ln(2\xi_{a}) + \frac{v_{2}}{2}$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^{2}}}{2\sigma_{0}^{2}}}\left(-\xi_{a} - \hat{a}(\tau_{1})\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N\overline{x^{2}}}{2\sigma_{0}^{2}}}\left(\xi_{a} - \hat{a}(\tau_{1})\right)\right)\right]$$

モデル選択 (3/4): メゾ変数の関係

2つの残留誤差を見る。

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} \{y_i - (\hat{a}x_i + \hat{b})\}^2$$
 (172)

$$= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} \{ (y_i - \hat{a}x_i) - \hat{b} \}^2$$
 (173)

$$= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} (y_i - \hat{a}x_i)^2 - 2\hat{b}(y_i - \hat{a}x_i) + \hat{b}^2$$
 (174)

$$= E(\hat{a}) + \frac{1}{2}\hat{b}^2 - \hat{b}\overline{y} \tag{175}$$

$$= E(\hat{a}) - \frac{1}{2}\hat{b}^2 \tag{176}$$

$$= E(\hat{a}) - \frac{1}{2}(b_0 + \overline{n})^2 \tag{177}$$

$$= E(\hat{a}) - \frac{1}{2} \left(b_0 + \sqrt{\frac{{\sigma_0}^2}{N}} \tau_2 \right)^2 \tag{178}$$

と書くことができる。従って

$$v_1 = v_2 - \frac{N}{\sigma_0^2} \left(b_0 + \sqrt{\frac{{\sigma_0}^2}{N}} \tau_2 \right)^2 \tag{179}$$

モデル選択 (4/4)

$$\Delta F(\tau_{2}) = F_{y=ax+b}(\upsilon_{1}, \tau_{1}, \tau_{2}) - F_{y=ax}(\upsilon_{2}, \tau_{1})$$

$$= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_{0}^{2}\pi}{2N} \right) + \ln(2\xi_{b}) + \frac{\upsilon_{1}}{2} - \frac{\upsilon_{2}}{2}$$

$$- \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}} \left(-\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2}) \right) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}} \left(\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2}) \right) \right) \right]$$

$$= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_{0}^{2}\pi}{2N} \right) + \ln(2\xi_{b}) - \frac{N}{2\sigma_{0}^{2}} \left(b_{0} + \sqrt{\frac{\sigma_{0}^{2}}{N}} \tau_{2} \right)^{2}$$

$$- \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}} \left(-\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2}) \right) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}} \left(\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2}) \right) \right) \right]$$

$$= \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}} \left(-\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2}) \right) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_{0}^{2}}} \left(\xi_{b} - \hat{b}(\tau_{2}) \right) \right) \right]$$

自由エネルギー差の分布の解析的表式

$$p(\Delta F) = \int d\tau_2 \delta(\Delta F - \Delta F(\tau_2)) p(\tau_2)$$

ベイズ統合 (1/3)

- ここでは $y = a_1x + b_1$ と $y = a_2x + b_2$ のベイズ統合を定式化する。
- ここでも重要なのはメゾ変数の取り扱いである。
- 3+3=6メゾ変数を取り扱う。

ベイズ統合 (2/3)

y = ax + b の統合しない場合の自由エネルギーのメゾ変数による表現

$$F^{\text{iso}} = \sum_{m=1}^{2} \frac{N_{m}}{2} \ln(2\pi\sigma^{(m)^{2}}) - \ln\left(\frac{\sigma^{(m)^{2}\pi}}{2N_{m}}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(\overline{x^{(m)^{2}}}\right) + \ln(2\xi_{a}^{(m)}) + \ln(2\xi_{b}^{(m)}) + \frac{N_{m}}{\sigma^{(m)^{2}}} E_{m}(\hat{a}^{(m)}, \hat{b}^{(m)})$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_{m}\overline{x^{(m)^{2}}}}{2\sigma^{(m)^{2}}}} \left(-\xi_{a}^{(m)} - \hat{a}^{(m)}\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_{m}\overline{x^{(m)^{2}}}}{2\sigma^{(m)^{2}}}} \left(\xi_{a}^{(m)} - \hat{a}^{(m)}\right)\right)\right]$$

$$- \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_{m}}{2\sigma^{(m)^{2}}}} \left(-\xi_{b}^{(m)} - \hat{b}^{(m)}\right)\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_{m}}{2\sigma^{(m)^{2}}}} \left(\xi_{b}^{(m)} - \hat{b}^{(m)}\right)\right)\right]$$
(273)

y = ax + b の統合する場合の自由エネルギーのメゾ変数による表現

$$F^{\text{int}}(Y) = \frac{N_1}{2} \ln 2\pi (\sigma^{(1)})^2 + \frac{N_2}{2} \ln 2\pi (\sigma^{(2)})^2 + \ln 2\xi_a + \ln 2\xi_b + E(\hat{a}, \hat{b})$$

$$+ \frac{1}{2} \ln \frac{2(\beta^{(1)} \overline{x^{(1)^2}} + \beta^{(2)} \overline{x^{(2)^2}})}{\pi} + \frac{1}{2} \ln \frac{2(\beta^{(1)} + \beta^{(2)})}{\pi}$$

$$- \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)} \overline{x^{(1)^2}} + \beta^{(2)} \overline{x^{(2)^2}}}{2}} (-\xi_a - \hat{a}(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)})) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)} \overline{x^{(1)^2}} + \beta^{(2)} \overline{x^{(2)^2}}}{2}} (\xi_a - \hat{a}(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)}) \right) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)} + \beta^{(2)}}{2}} (\xi_b - \hat{b}(\tau_2^{(1)}, \tau_2^{(2)})) \right) \right]$$

ベイズ統合 (3/3)

統合する場合と統合しない場合の 自由エネルギーの差のメゾ変数による表現

$$\Delta F = F^{\rm int}(Y) - F^{\rm iso}(Y)$$

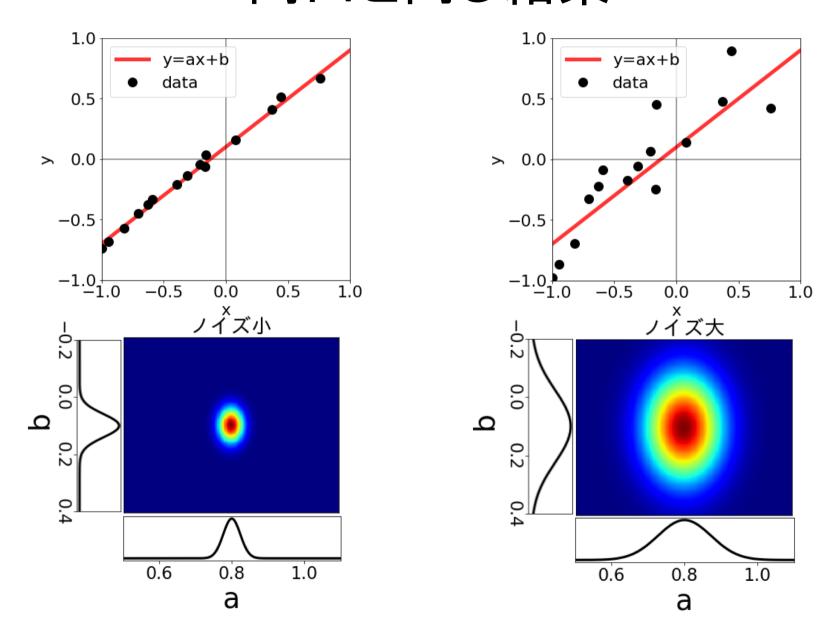
自由エネルギー差の分布の解析的表式

$$p(\Delta F) = \int d\tau_1^{(1)} d\tau_1^{(2)} d\tau_2^{(1)} d\tau_2^{(2)} \delta(\Delta F - \Delta F(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)}, \tau_2^{(1)}, \tau_2^{(2)})) p(\tau_1^{(1)}) p(\tau_1^{(2)}) p(\tau_2^{(2)}) p(\tau_2^{($$

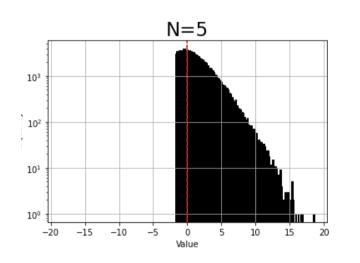
内容

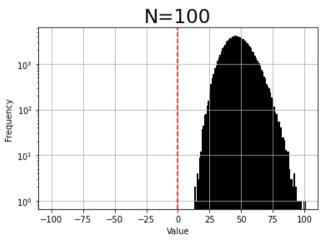
- 共同研究者と自己紹介
- 本研究の目的と達成イメージ
- 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- 数值実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- ・まとめ

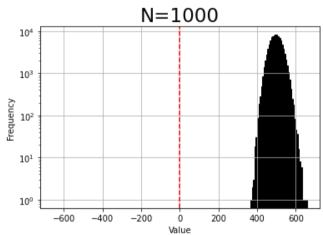
パラメータの事後確率推定 岡田と同じ結果



モデル選択における 自由エネルギー差の確率分布 真のモデルは y = ax + b $a_0 = 1.0, b_0 = 1.0, \sigma_0^2 = 1.0$

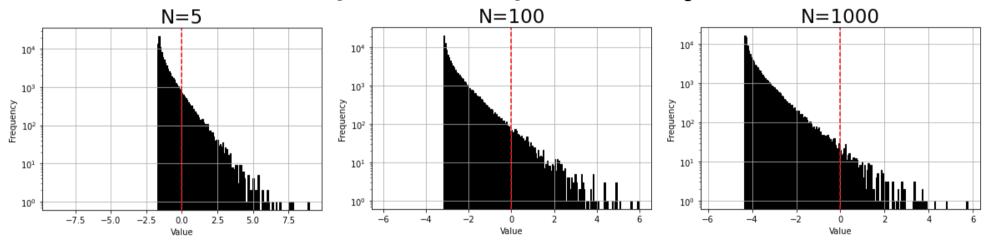






モデル選択における 自由エネルギー差の確率分布 真のモデルは y = ax

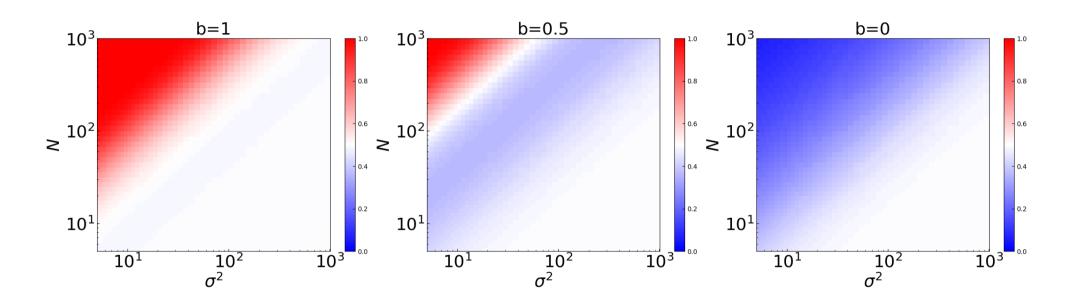
 $a_0 = 1.0, b_0 = 0.0, \sigma_0^2 = 0.0$



大きいモデルが選択される場合と、小さいモデルが選択される場合で自由エネルギー差の分布の形状は定量的に異なる。log Nの効果で自由エネルギーが決まるのでNが大きくないと小さなモデルが確実に選択されることはない。

提案理論のみから得られる新規な知見

ベイズ自由エネルギーの差の確率分布



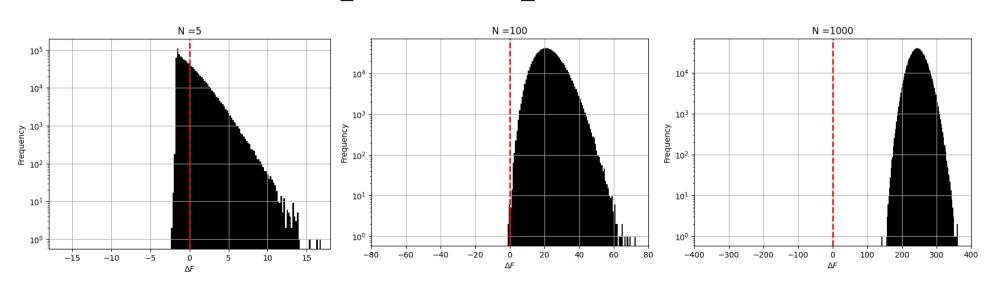
Nとσ²が大きくなると途中でどちらのモデルかが わからなくなる

提案理論のみから得られる新規な知見

ベイズ統合における 自由エネルギー差の確率分布

 $y = a_1 x$, $y = a_2 x$ でのベイズ統合 $a_1^0 \ge a_2^0$ が異なる場合

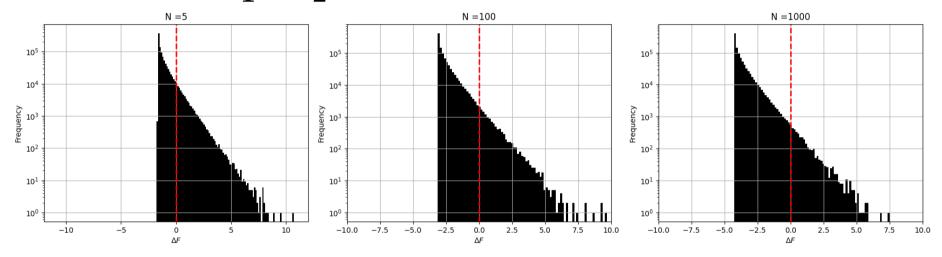
$$a_1^0 = 2.0, a_2^0 = 4.0$$



ベイズ統合における 自由エネルギー差の確率分布

 $y = a_1 x, y = a_2 x$ での ベイズ統合 $a_1^0 \ge a_2^0$ が等しい場合

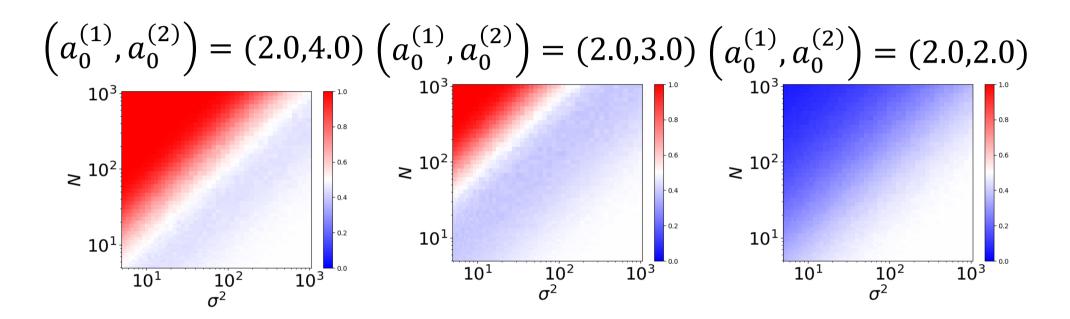
$$a_1^0 = 2.0, a_2^0 = 2.0$$



統合される場合と、統合されない場合で自由エネルギー差の分布の形状は定量的に異なる。log Nの効果で自由エネルギーが決まるのでNが大きくないと統合モデルが確実に選択されることはない。

提案理論のみから得られる新規な知見

ベイズ自由エネルギーの差の確率分布



Nとσ²が大きくなると途中で統合すべきかどうかが わからなくなる

提案理論のみから得られる新規な知見

内容

- 共同研究者と自己紹介
- 本研究の目的と達成イメージ
- 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- 数值実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、 ベイズ統合
- まとめ

まとめ

- 計測点数N有限のメゾ理論を構築した。
- 有限サイズ効果は著しく存在する。これは我々の構築 した理論のみから得られる知見である。
- モデル選択結果や統合の可否は有限サイズ効果に大きく影響される。
- ベイズ推論において、有限サイズ効果を取り扱った定量的理論はこれまで存在せず、この理論はベイズ計測の数理情報基盤足り得る。
- y=ax+bはトイモデルではなく、実際のデータ解析に用いられる実践的なモデルである。
- 非線形な系に対する定性的な知見を得ることができる。 計測点数Nが300程度であれば、計測点数Nの有限性 を考慮しなくて良い。