櫻井先生来訪セミナー
2025年7月29日(火)

The University of Tokyo

ベイズ計測の応用展開
実計測解析ライブラリの開発

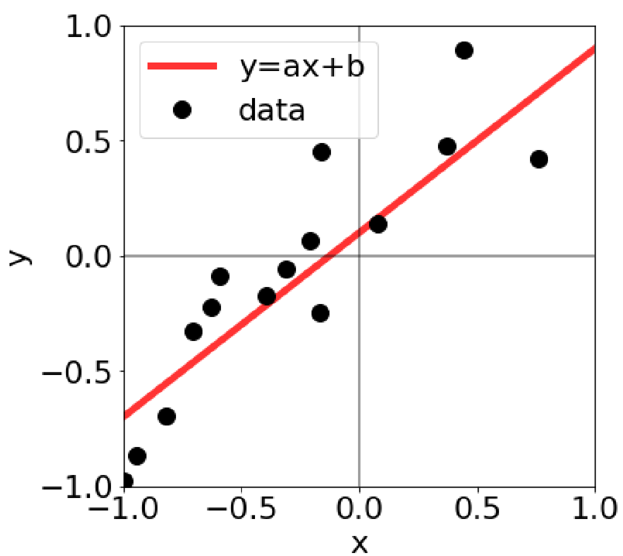
片上 舜

東京大学大学院新領域創成科学研究科

自己紹介

- 東京大学・大学院理学系研究科 岡田研
  $(2016 \sim 2021)$
- 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
  $(2021 \sim)$
- 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

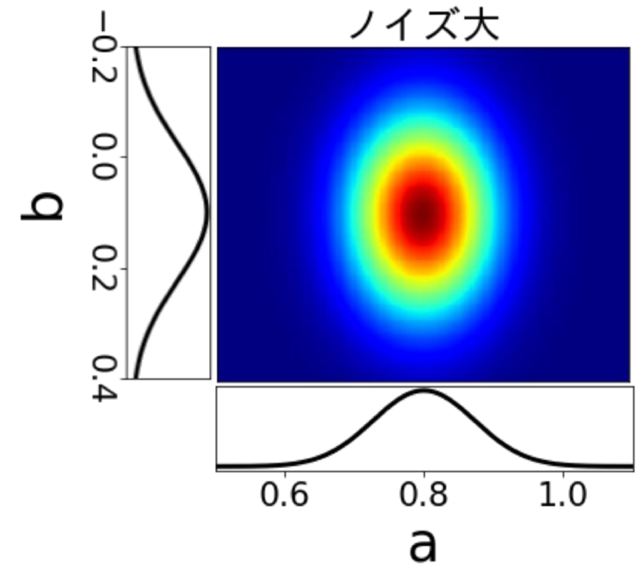
ベイズ推論による物理モデルに対するパラメータ分布推定



対象を観測
(計測データ)

$$y = ax + b$$

物理モデル



パラメータの値は?
このモデルは正しかったのか?
データはちゃんと計測できてたのか?

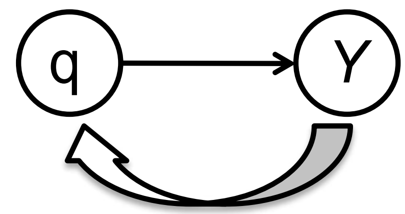
計測データから情報を抽出

ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

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

$$\Downarrow$$

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(\theta\,|\,Y)$ ：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.

$p(q)$ ：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。

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

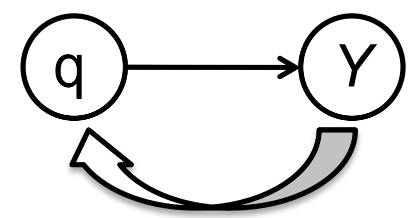
(シミュレーションはノートPCで実行できる場合が多い)

ベイズ計測を自分のデータ解析に使ってみよう！

ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(\theta\,|\,Y)$ ：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.

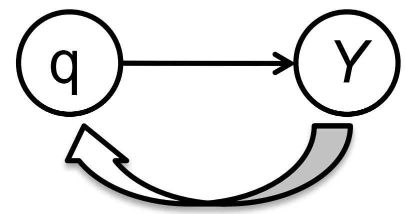
$p(q)$ ：事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。
これまで蓄積されてきた科学的知見

ベイズ計測って、どうやって実装したらいいのか。

ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

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

生成（因果律）



$$\Downarrow$$

＜ベイズの定理＞

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

$p(\theta\,|Y)$ ：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.

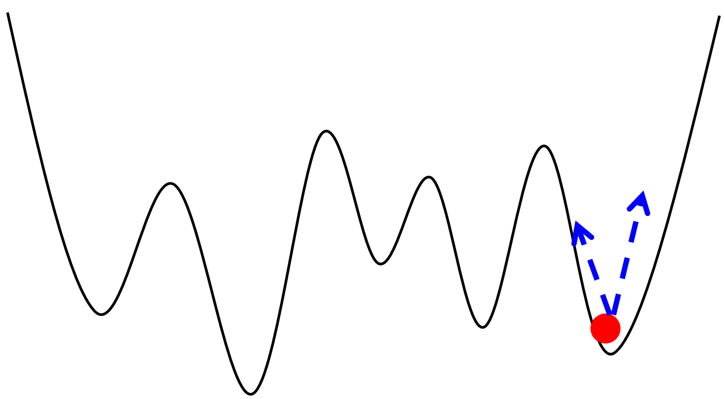
$p(q)$ ：事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。
これまで蓄積されてきた科学的知見

実装困難にしているのは
課題に無関係な確率分布の取り扱い

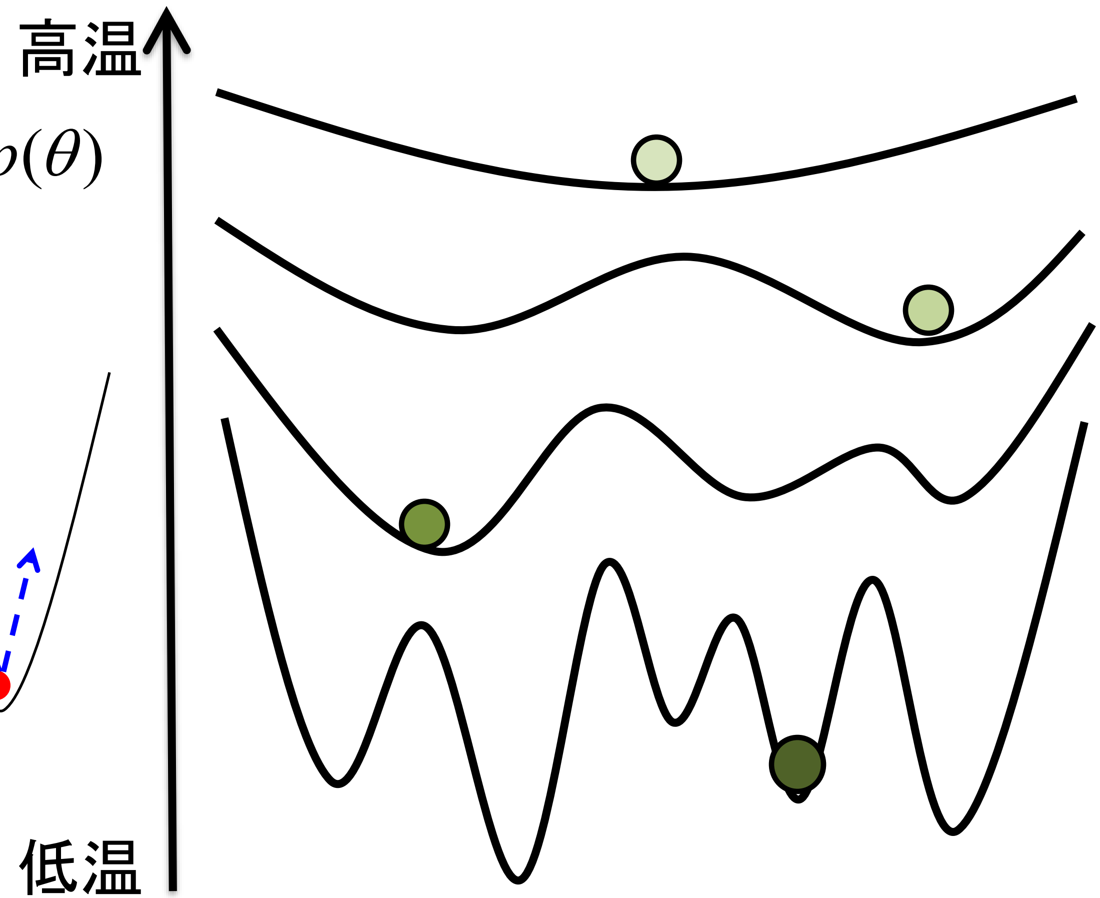
ベイズ推論における確率分布の数値計算方法
レプリカ交換モンテカルロ法

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



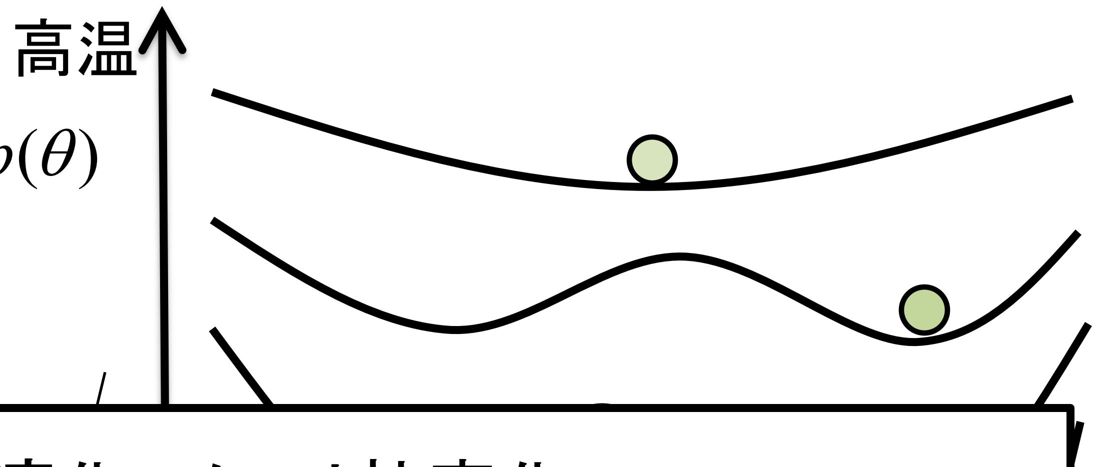
K. Hukushima, K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996).

ベイズ推論における確率分布の数値計算方法
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

$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2}\beta E(\theta)\right)p(\theta)$$



- 空間計算量の最適化 (メモリ効率化)
- 時間計算量の最適化 (並列処理の実装)
- 効率的なEMC実装プロセスの整備

上記は実計測科学者にとって必須ではない技術。

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

ベイズ計測オープンソースソフトウェアの構築

01 計測科学における理想的なベイズ推論ツール

- 確率分布の効率的かつ高速な実行
- ベイズ計測三種の神器
  1. パラメータ推定
  2. モデル選択
  3. ベイズ統合
- 平易なモデルの実装
- データの取り込み
- 実行解析結果の可視化

ベイジアンモデリング

$$P(\theta|D) \propto P(D|\theta) \times P(\theta)$$

事後分布　尤度(モデル)　事前分布

θ : 物理量 (モデルパラメータ)
D : 計測データ

モデルの実装 → データの取り込み → 解析結果の確認

ベイズ計測ワークフロー

02 計測科学における理想的なベイズ推論ツール

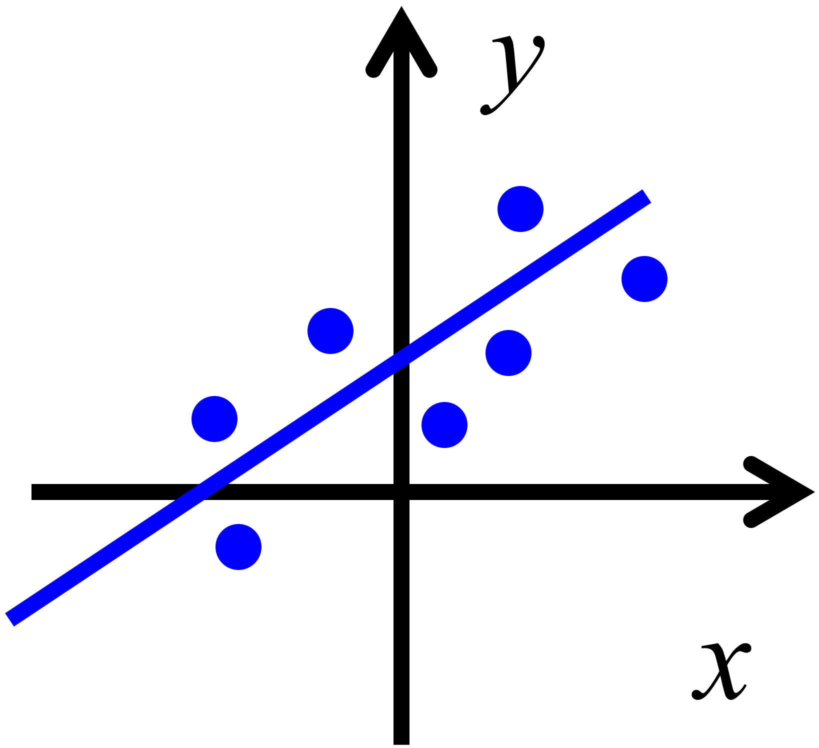
・結局、ユーザーが解析に際して具体的にやらなければならないこと

1. モデルの入力出力関係の記述
2. モデルパラメータに対する事前知識
3. ボタンを押す。（実行）

上記は情報科学の専門家に依存せず

計測現場の人が独立に実行可能な内容に閉じている。

例1）線形モデルに対するベイズ推論

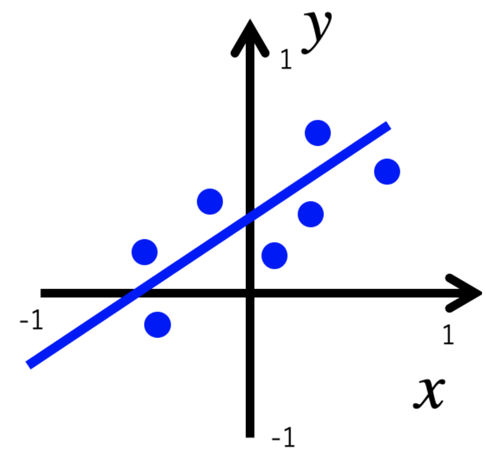


$y = ax + b$

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

例1）線形モデルに対するベイズ推論

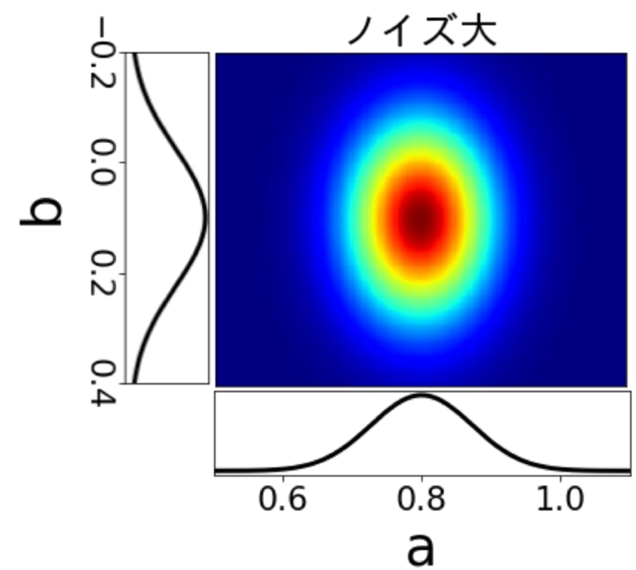


モデルパラメータ(a, b)

1. モデルの入出力関係

$$y = ax + b$$

2.モデルパラメータに対する事前知識



$$a \sim 0.8$$
$$b \sim 0.2$$

3.実行

解析的に実行できるケースなので解析解導出の確認

モデルパラメータ推定 (1/2)

$$p(a,b|Y) = \frac{p(Y|a,b)p(a,b)}{p(Y)}$$

ベイズの定理

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

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

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

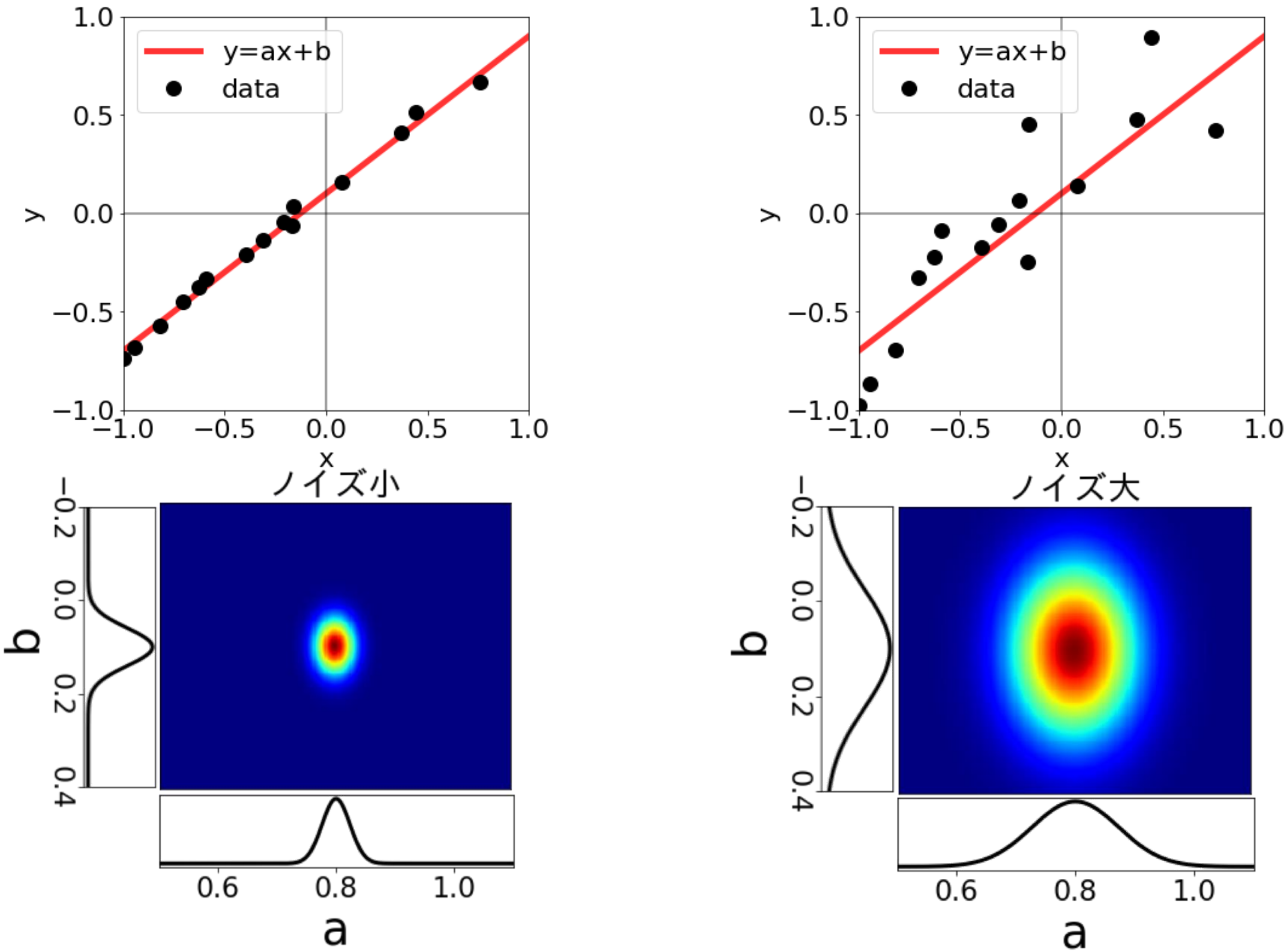
モデルパラメータ推定(2/2)

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

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

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

モデルパラメータ推定



線形モデルのデモ

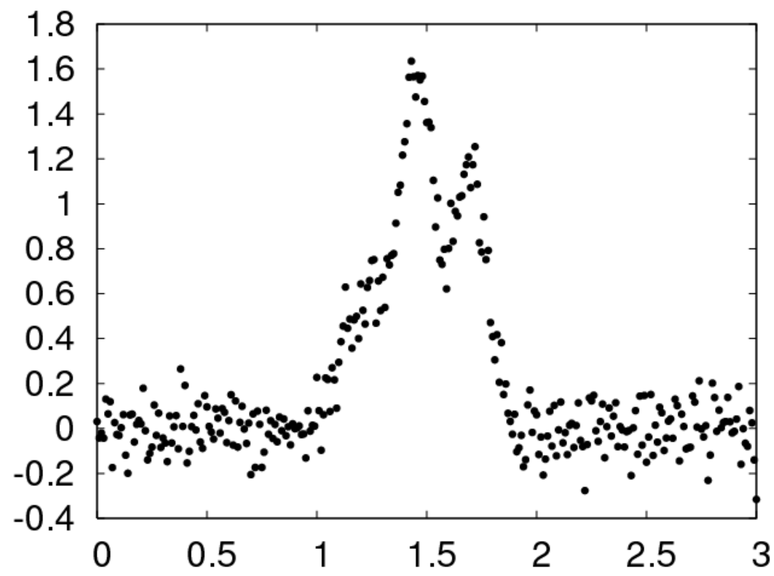
より実践的な例題

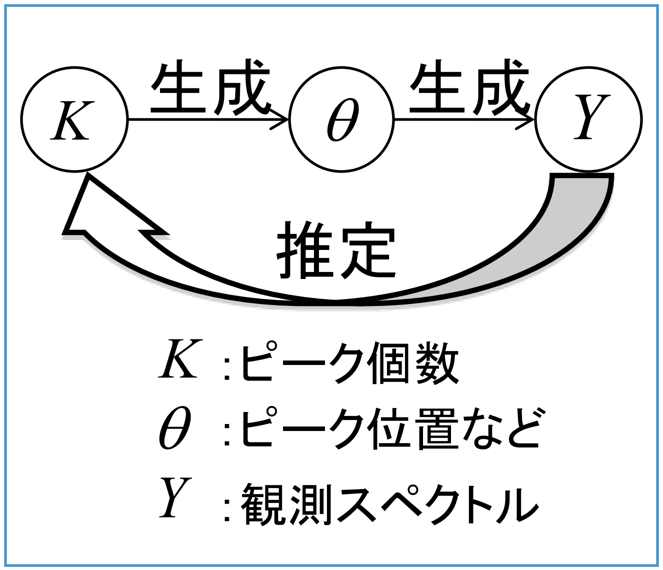
スペクトル分解

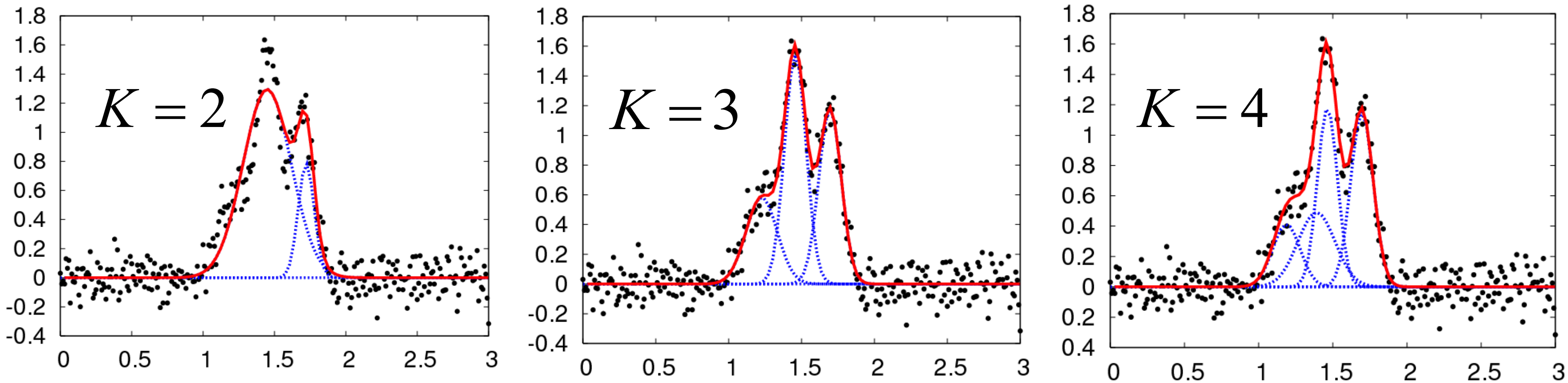
永田賢二，杉田誠司，岡田真人
東大新領域

Kenji Nagata, Seiji Sugita and Masato Okada, "Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method", *Neural Networks*, **28**, 82-89 (2012)

モデル選択: Kをどう選ぶか

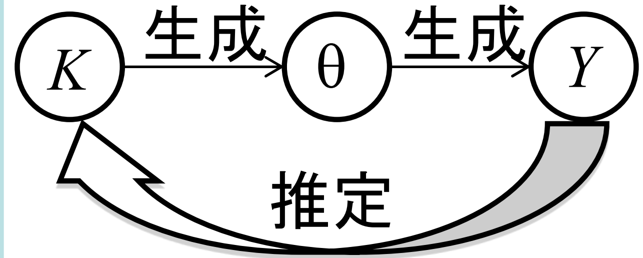






Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

モデル選択: 自由エネルギーの導入



K:ピーク個数

θ :ピーク位置など

Y :観測スペクトル

1. 欲しいのは $p(K \mid Y)$

2. θ がないぞ

3. $p(K,\theta,Y)$ の存在を仮定

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

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

4. 無駄な自由度の系統的消去 : 周辺化, 分配関数

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

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

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

自由エネルギーを最小にする個数 Kを求める.

スペクトル分解の定式化

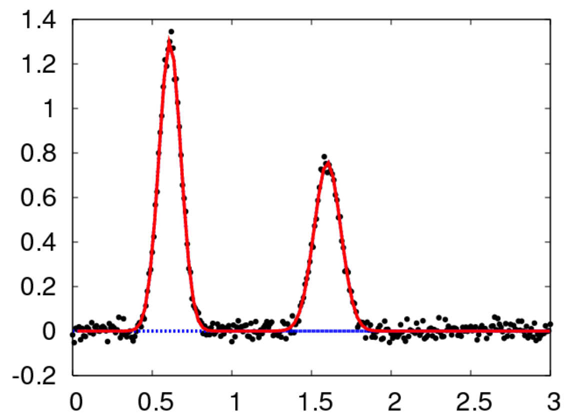
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ:$D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i : 入力 y_i : 出力

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

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



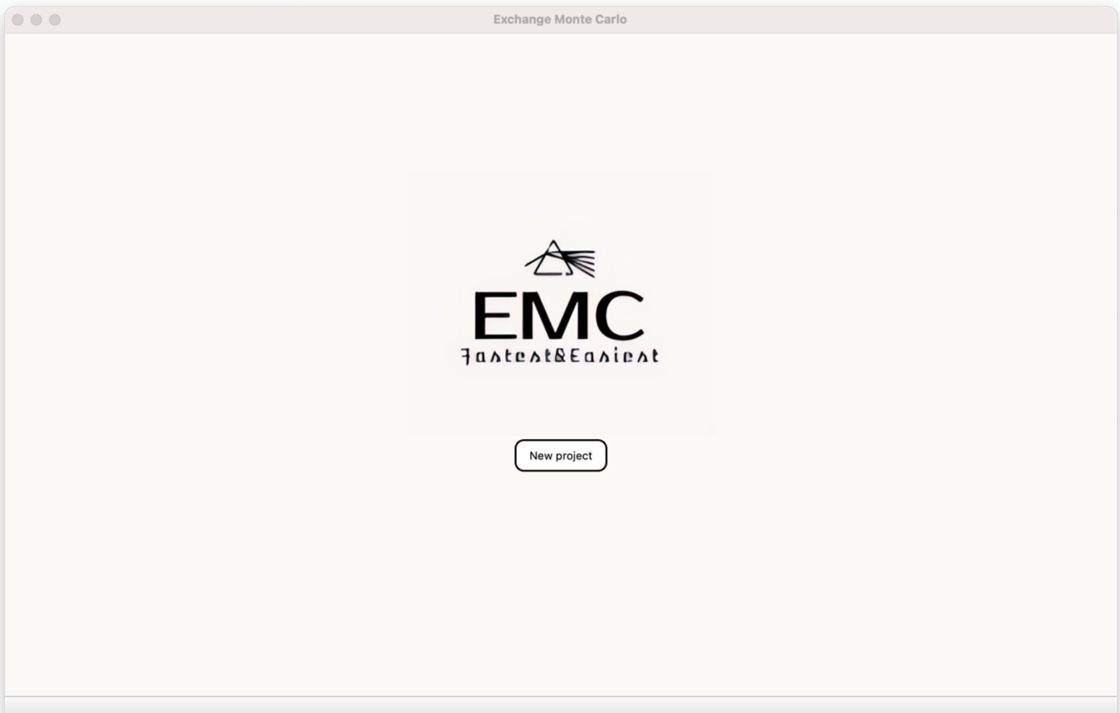
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

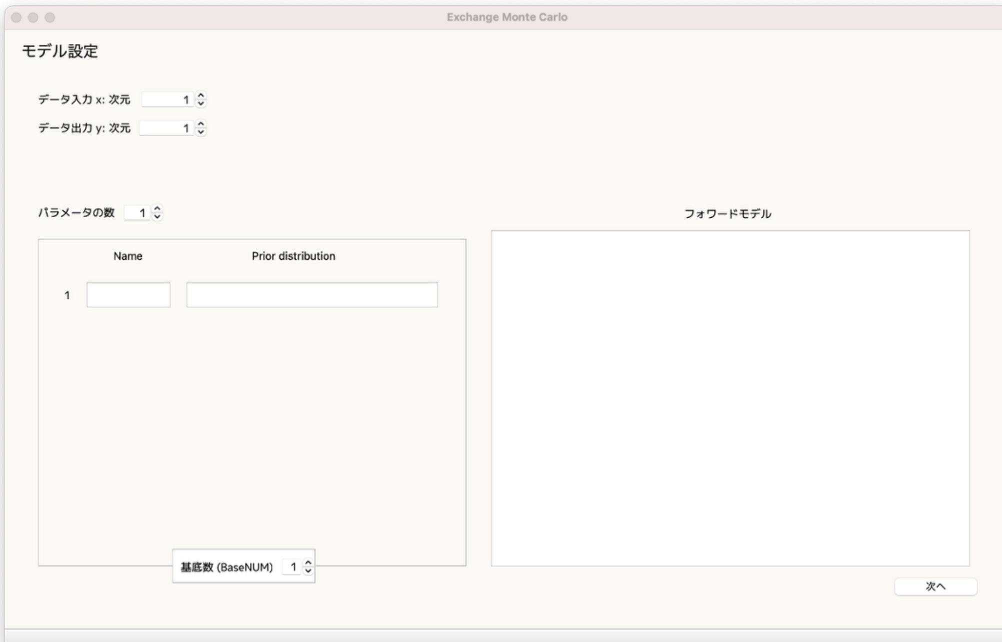
スペクトル分解のデモ

開発中のGUI付きアプリケーション

00 アプリケーション EMC



01　EMCによるスペクトル分解実装



フォワードモデル

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

02　EMCによるスペクトル分解実装

パラメータの名前と事前分布

パラメータの数　3

	Name	Prior distribution
1	a	gamma(2,2)
2	mu	normal(160,2)
3	b	normal(10,2.5)

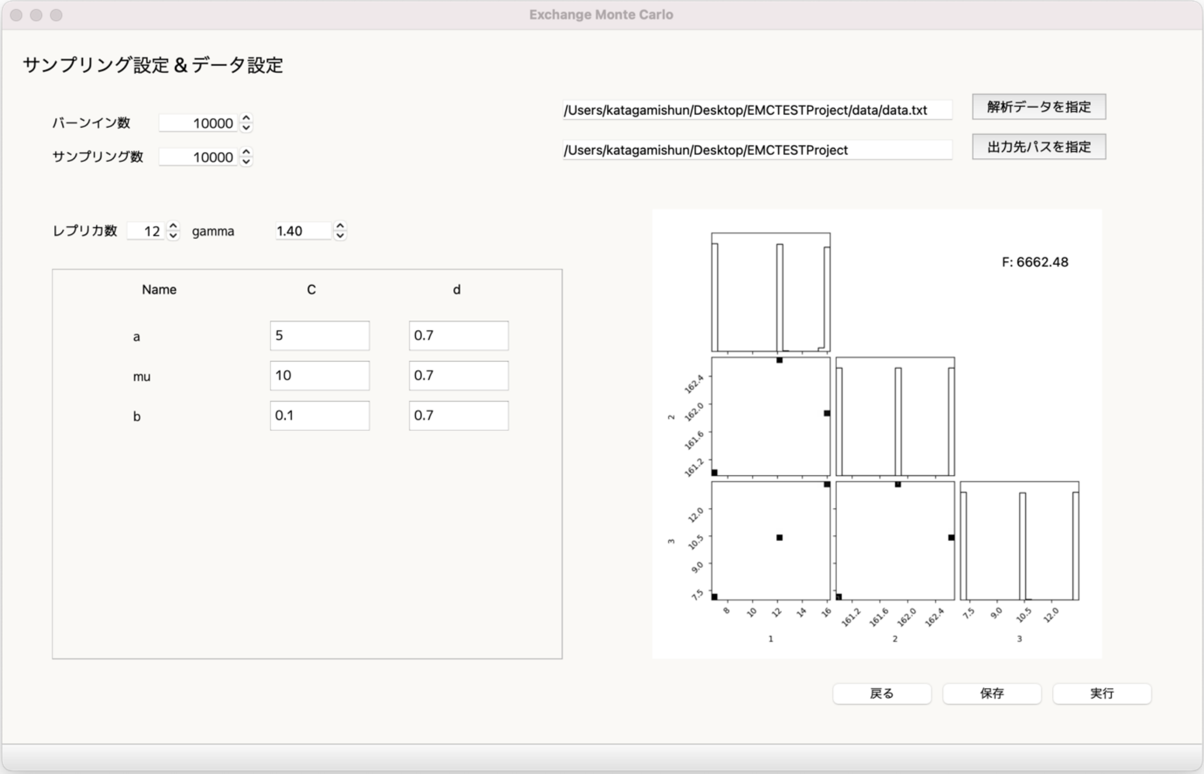
基底数 (BaseNUM)　3

フォワードモデル

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

```
for(int i=0; i<BaseNum;i++){
   y += a(i)*exp(-b(i)*pow(x[0]-mu(i),2)/2)
}
```

03 EMCによるスペクトル分解実装



まとめ

- ベイズ計測は計測科学の解析に非常に親和性がある。
- パラメータ推定、モデル選択、ベイズ統合といった主要課題はベイズ計測3種の神器として解決可能な枠組みであり応用性が高い。
- 線形回帰やスペクトル分解への応用を通じて、理論の**実用性と拡張性**を紹介した。
- 今後は、さらに非線形系・高次元系への適用、ならびに**現場での実装・活用を支援するツールの開発**を通じて、計測・解析の一体化をより強固に推進する。