

ベイズ計測と SPring-8全ビームラインベイズ化計画

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻

JASRI客員研究員

岡田真人

2024年9月6日(金)

SPring-8シンポジウム2024
九州大学医学部百年講堂

謝辞: SPring-8/JASRI関係者



水牧 仁一朗 筒井 智嗣 桑本 滋生 横山 優一

こちらの方々との共同研究なしには、私の研究者としての到達点のデータ駆動科学(ベイズ計測)はありませんので、この場を借りて深く感謝させていただきます

自己紹介

- ・ 大阪市立大学理学部物理学科
－ アモルファスシリコンの成長と構造解析 (1981 - 1985)
- ・ 大阪大学大学院理学研究科(金森研)
－ **希土類元素の光励起スペクトルの理論** (1985 – 1987)
- ・ 三菱電機
－ 化合物半導体(半導体レーザー)の結晶成長 (1987 - 1989)
- ・ 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学(**福島研**) (1989 - 1996)
－ 置み込み深層ニューラルネット(DCNN)
－ 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
- ・ 東京大学・大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
－ 脳科学 情報統計力学、**データ駆動科学** (2004/07 –)

本講演の狙い

- ・統計学のベイズ推論を計測科学向けに
コンパクトな形で再構成した情報数理科
学的体系であるベイズ計測を紹介する。
- ・そのベイズ計測SPring-8のJASRI担当
分の26本のビームラインへの適用の現
状報告
- ・最後に、JASRI データ駆動科学グルー
プの今後のあり方についての私見

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・ベイズ計測の導入とベイズ計測三種の神器
- ・ベイズ計測の具体例: 線形回帰 $y=ax+b$ を例にして
- ・非線形系へのベイズ計測の展開
 - ・スペクトル分解
 - ・メスバウア一分光
 - ・小角散乱
 - ・2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介
- ・JASRI データ駆動科学グループの今後のあり方についての私見

SPring-8全ビームラインベイズ化 計画共同実施者

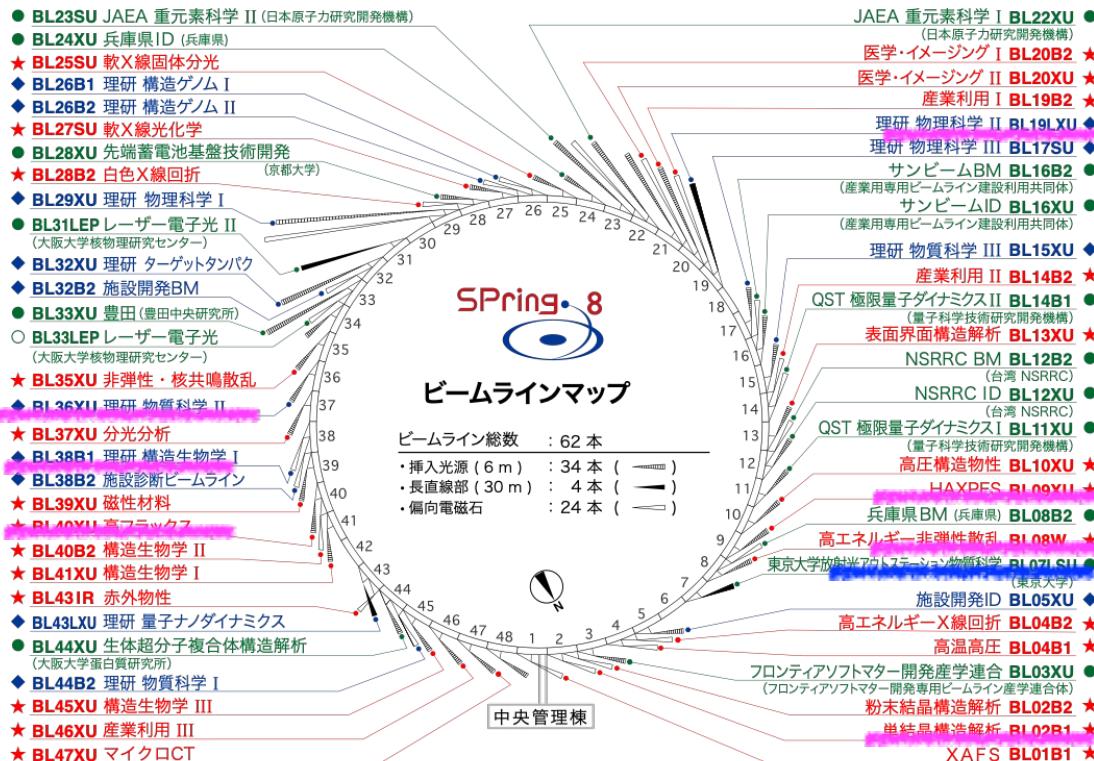


水牧 仁一朗教授

2023年4月より熊本大学理学部物理学科
2016年12月13日(火)より共同研究開始

SPring-8全ビームラインベイズ化計画

敬称略



赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本
今年(2024)年度中に14BL/26の
ベイズ化が完了
理事長賞受賞の波及効果により、
SPring-8全体のミッションとなり、
ベイズ化実績によりBLが評価される体制へ

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
BL19B2

岡田研学生+桑本

XAS測定

BL37XU
BL39XU

岡田研学生+水牧

放射光ユーザーへの展開

時分割XRD

BL02B2
BL10XU

横山優一+河口彰吾、沙織
ユーザー: 公立大、東工大

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

SPring-8全ビームラインベイズ化計画

- ・通常では系統的手法がない、モデル選択とデータ統合をベイズ計測で系統的に取り扱う
- ・**フラッグシップ戦略**: ベイズ計測をSPring-8に導入し、身近(近くにくるな症候群)な計測と他の大型計測施設への**起爆剤**とする。
- ・2023年度JASRI理事長賞JASRIデータ駆動科学グループ**横山優一氏受賞**を契機に、全BLに**ベイズ計測利用の加速**へ
- ・2024年度中に14BL/26のベイズ化完了

SPring-8全ビームライン ベイズ化計画の波及効果

- ・ フラッグシップ戦略もあり、追従施設が続出
- ・ SPring-8/JASRI: 2023年3月7日シンポジウム
- ・ あいちSR: 2023年10月30日シンポジウム
- ・ 日本放射光学会 若手研究会: 2024年9月2日
- ・ 台湾(NSRRC): 2024年9月4日シンポジウム
 - 大盛況: ベイズ計測の国際展開
- ・ **2024年9月6日SPring-8シンポジウム2024**
- ・ 佐賀LS: 2024年10月16日シンポジウム
- ・ 日本放射光学会企画講演提案: 2025年1月

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・ベイズ計測の導入とベイズ計測三種の神器
- ・ベイズ計測の具体例: 線形回帰 $y=ax+b$ を例にして
- ・非線形系へのベイズ計測の展開
 - ・スペクトル分解
 - ・メスバウア一分光
 - ・小角散乱
 - ・2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介
- ・JASRI データ駆動科学グループの今後のあり方についての私見

ベイズ計測とベイズ計測三種の神器

- ・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
 - ・**最小二乗法を超えて**: ベイズ計測では、取り扱えることが質的に異なる

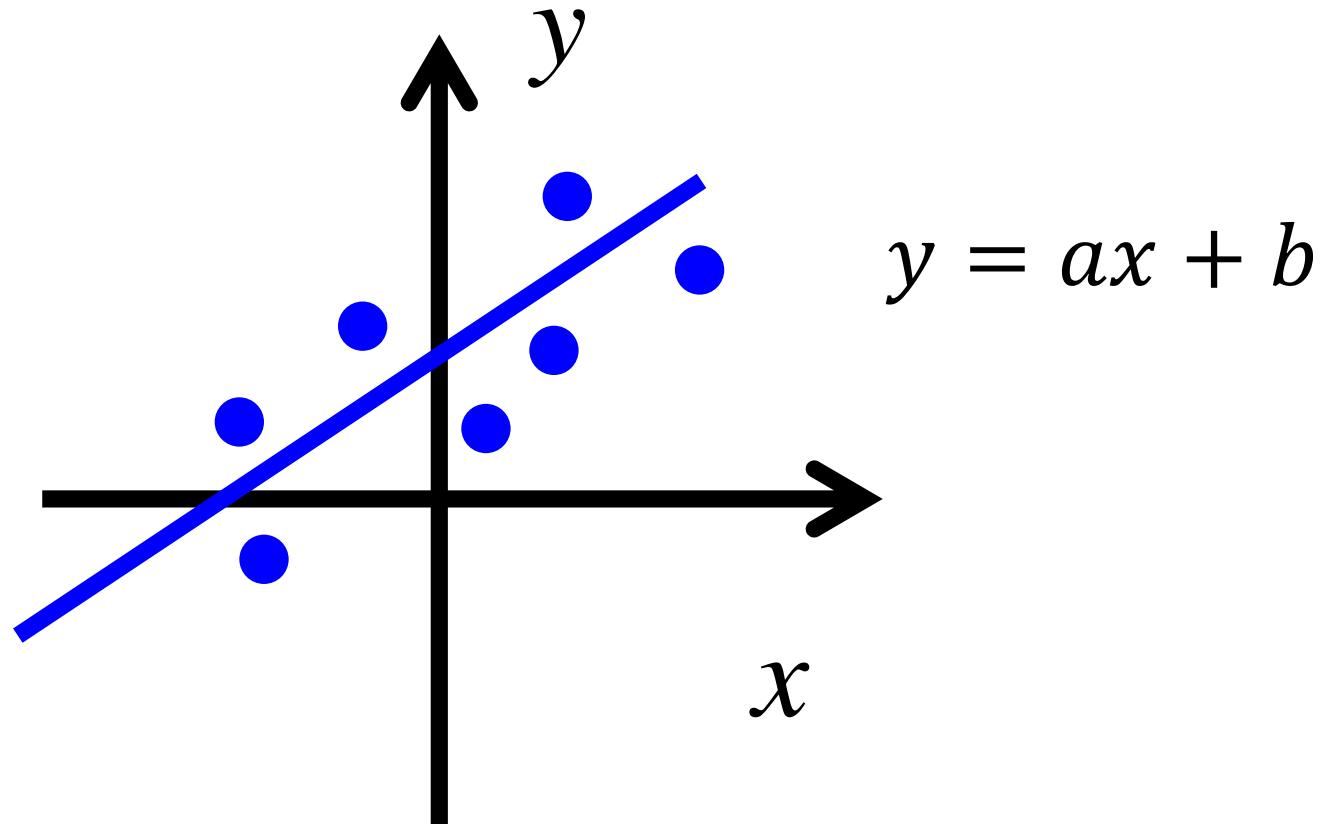
内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・ベイズ計測の導入とベイズ計測三種の神器
- ・ベイズ計測の具体例: 線形回帰 $y=ax+b$ を例にして
- ・非線形系へのベイズ計測の展開
 - ・スペクトル分解
 - ・メスバウア一分光
 - ・小角散乱
 - ・2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介
- ・JASRI データ駆動科学グループの今後のあり方についての私見

ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ の取り扱いを通じて

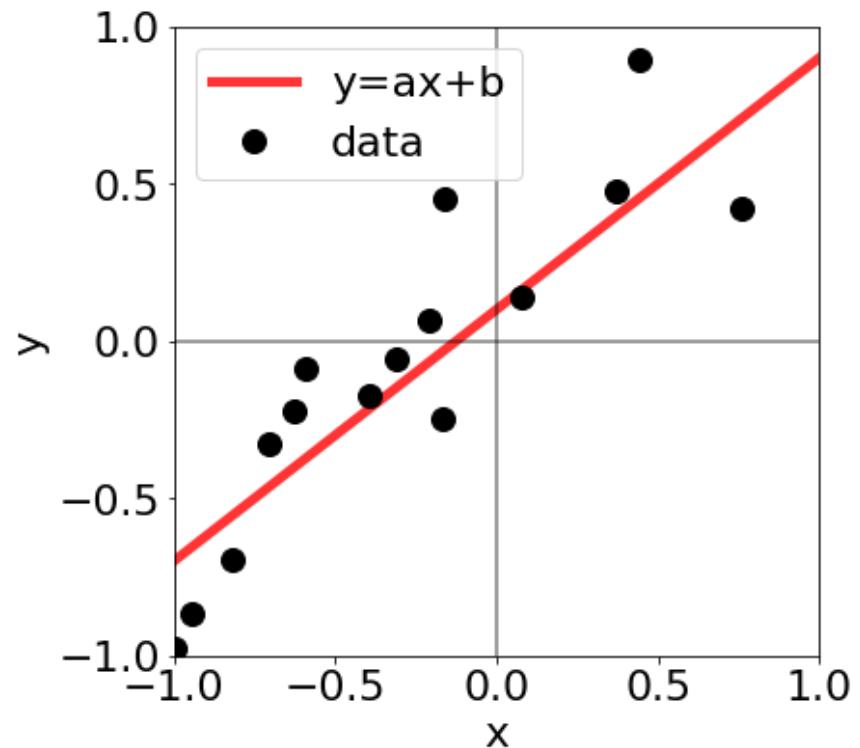
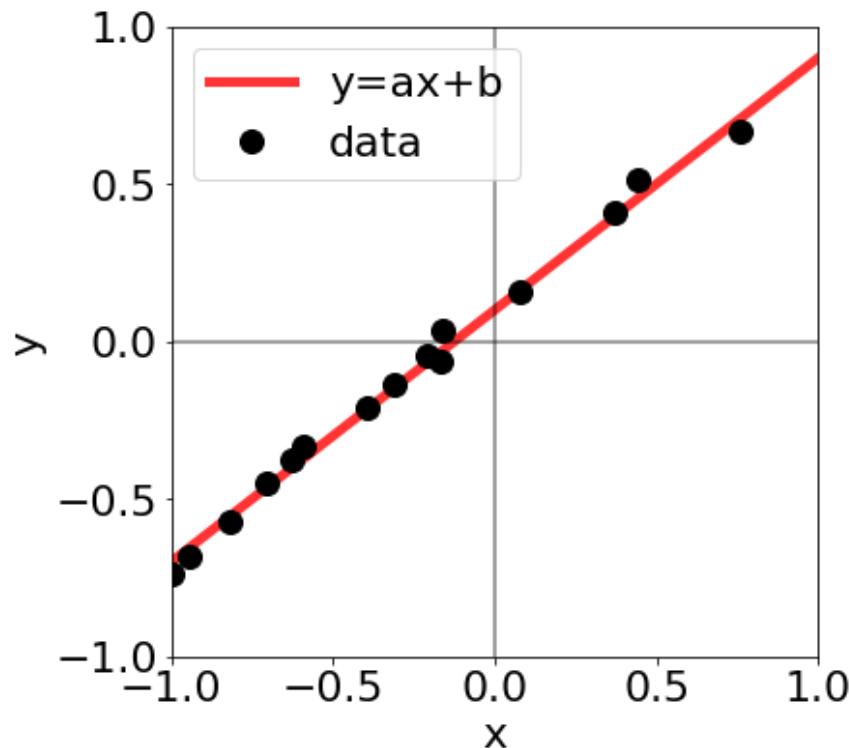
現状でも用いられている最も簡単な例



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

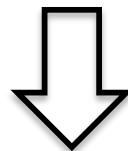


この二つの推定精度の違いを数学的に表現したい
準備として従来手法の最小二乗法

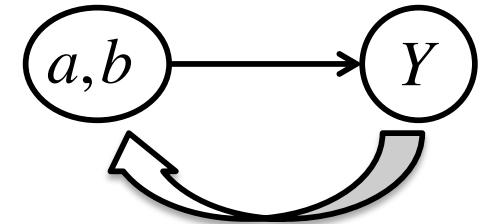
ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定

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

生成(因果律)



<ベイズの定理>



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

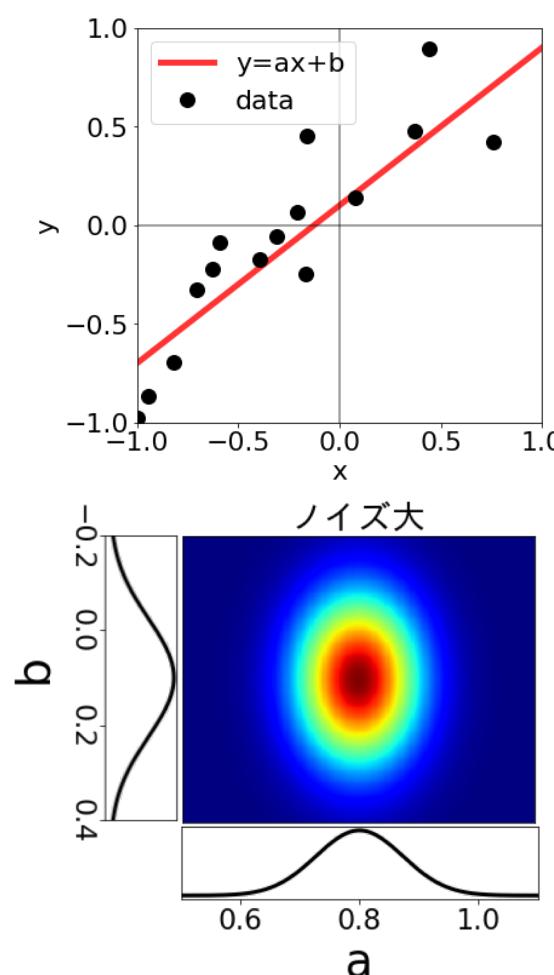
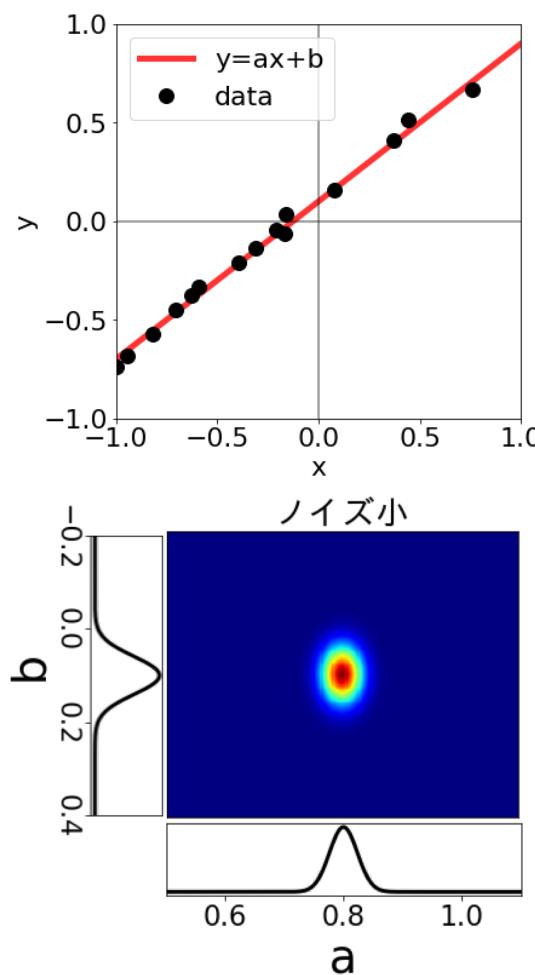
$p(a, b | Y)$: 事後確率。データが与えられたもとでの、パラメータの確率。

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

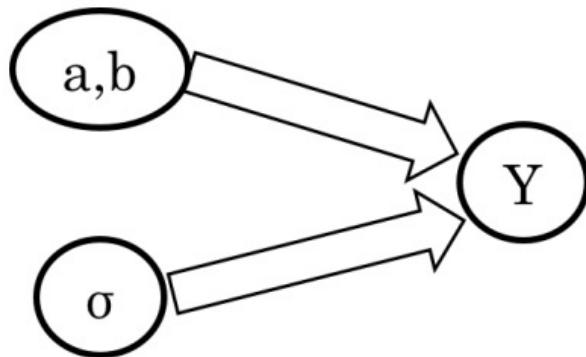
ベイズ計測の利点

$y=ax+b$ 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



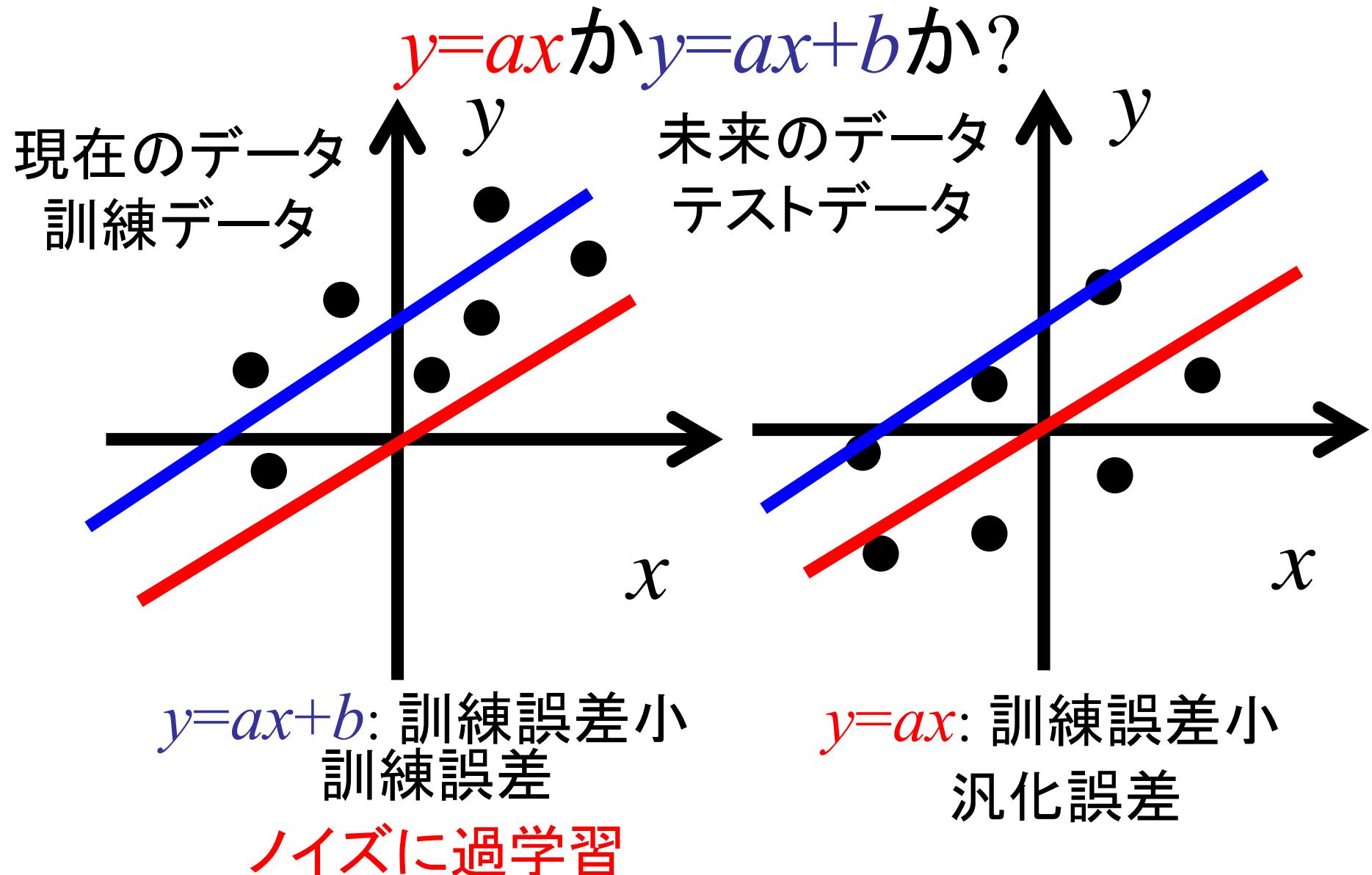
神器1: パラメータの事後確率推定 ノイズ分散推定



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

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

問題意識 神器2: ベイズ的モデル選択



モデル選択できる理由: 汎化誤差は観測ノイズに依存する

神器2: ベイズ的モデル選択

1. 欲しいのは $p(K|Y)$

2. θ がないぞ

3. $p(K, \theta, Y)$ の存在を仮定

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

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

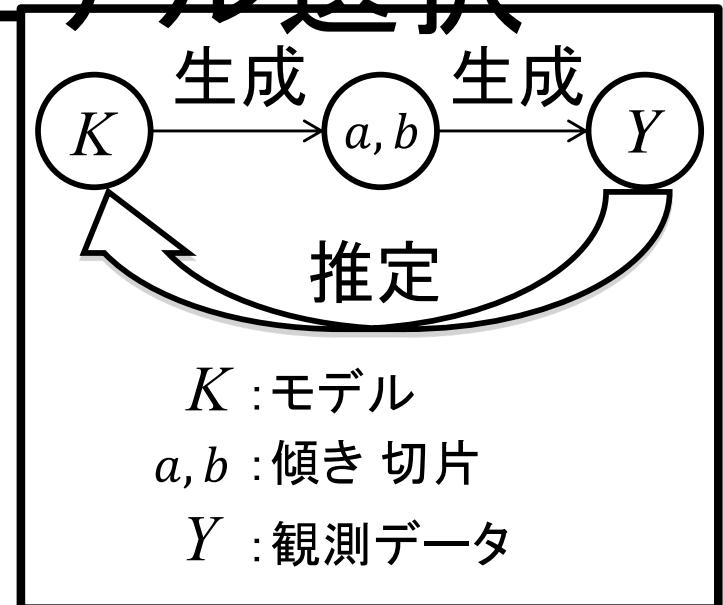
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

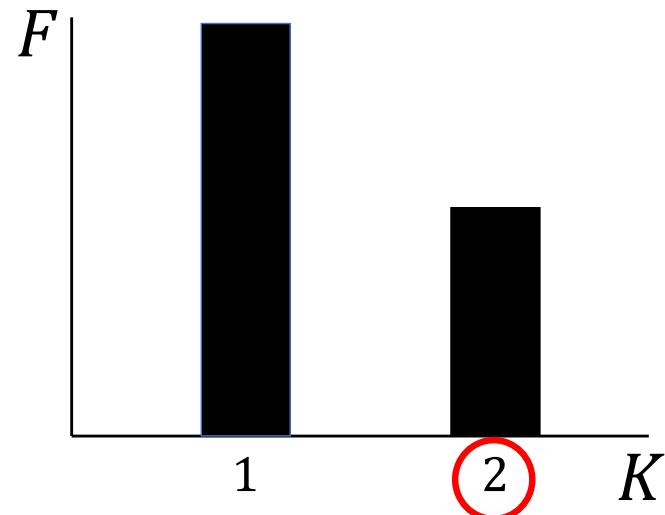
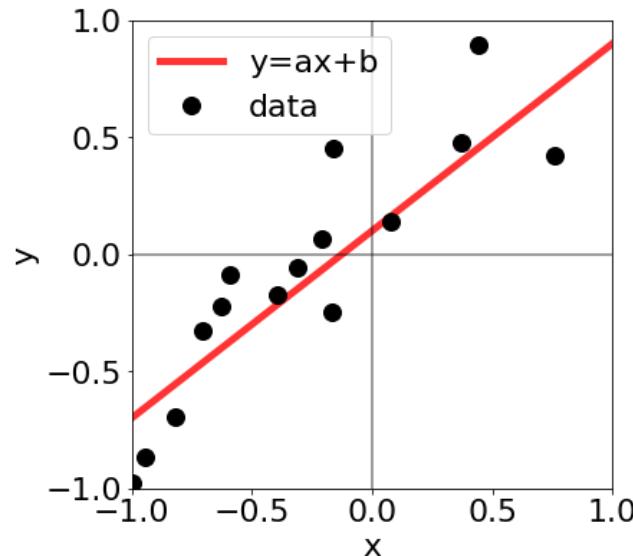
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にするモデル K を求める。



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



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

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

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

データのみからモデルを選択できる

まとめ：ベイズ計測三種の神器 $y=ax+b$ の解析取り扱いを通じて

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

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・ベイズ計測の導入とベイズ計測三種の神器
- ・ベイズ計測の具体例: 線形回帰 $y=ax+b$ を例にして
- ・非線形系へのベイズ計測の展開
 - ・スペクトル分解
 - ・メスバウア一分光
 - ・小角散乱
 - ・2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介
- ・JASRI データ駆動科学グループの今後のあり方についての私見

非線形系へのベイズ計測の展開

- ベイズ計測三種の神器の普遍性の実証
 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
- 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
 - メスバウア一分光
 - 小角散乱
 - 2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介

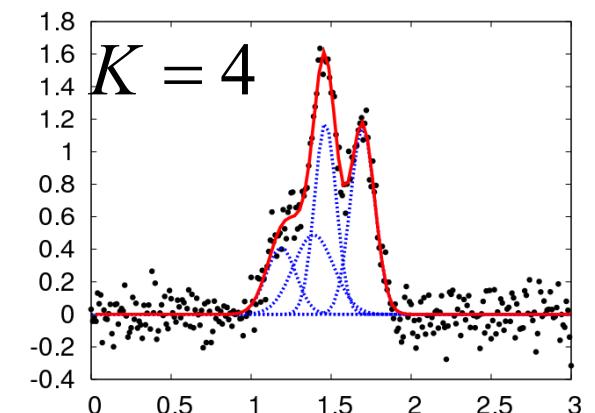
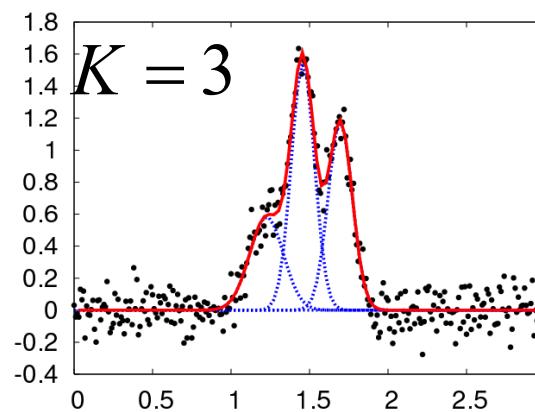
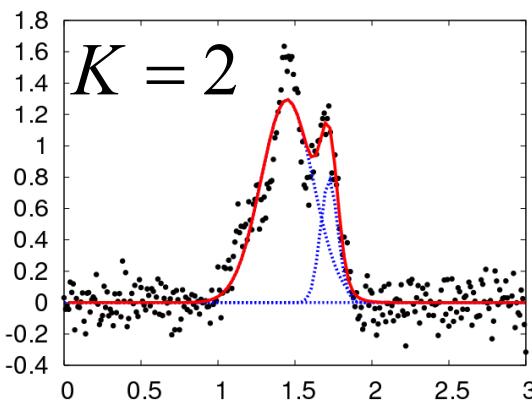
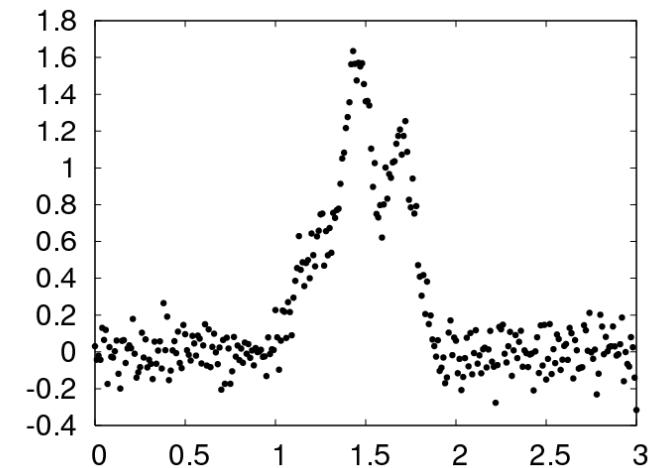
ベイズ計測のロールモデル ベイズ的スペクトル分解のキーパーソン



永田 賢二

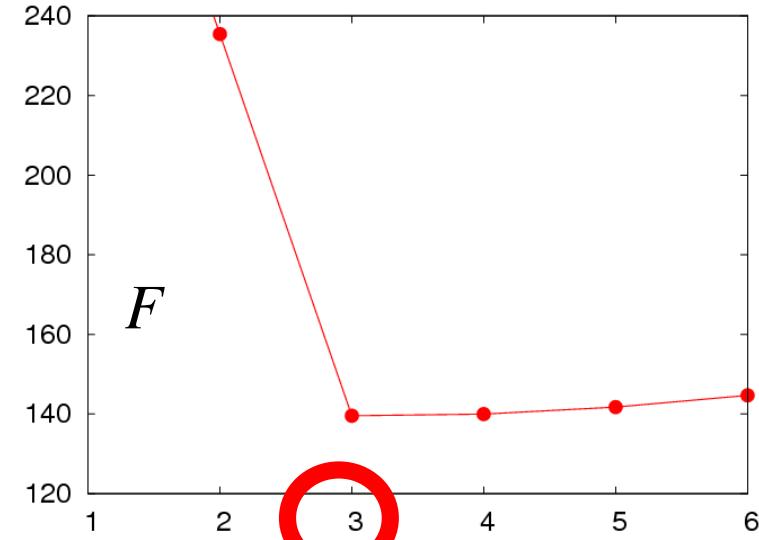
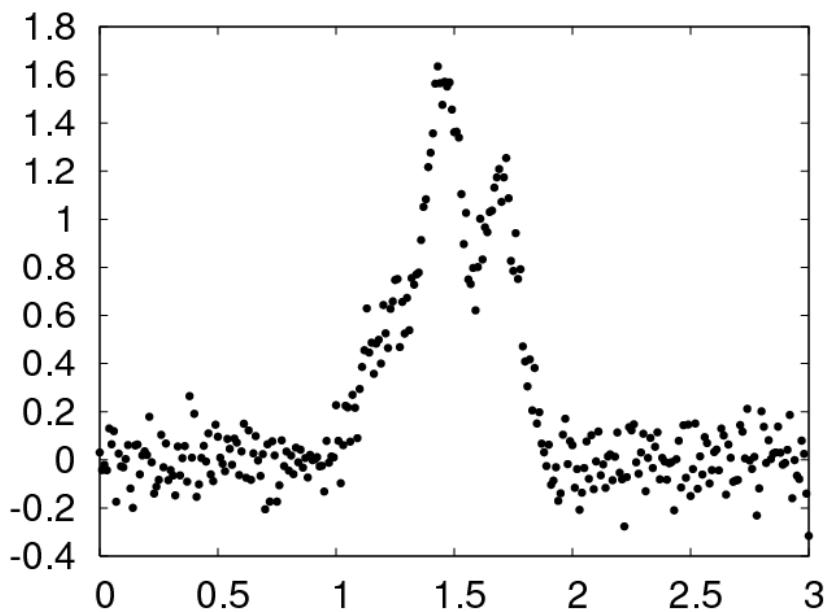
東大新領域岡田研助教 (2011-2016)
現国立研究開発法人物質・材料研究機構

スペクトル分解(1/5)

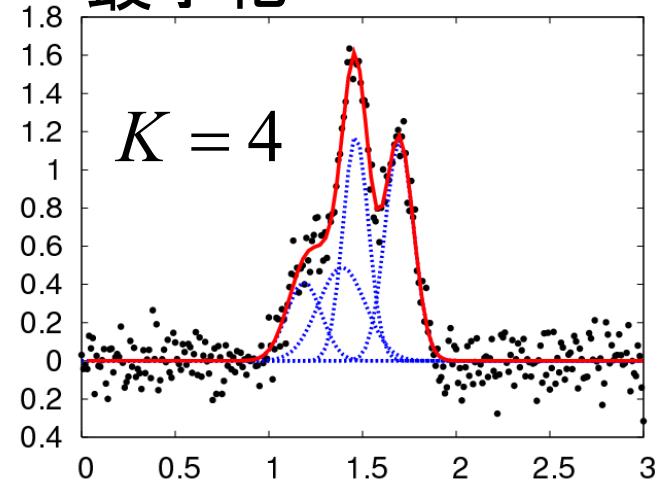
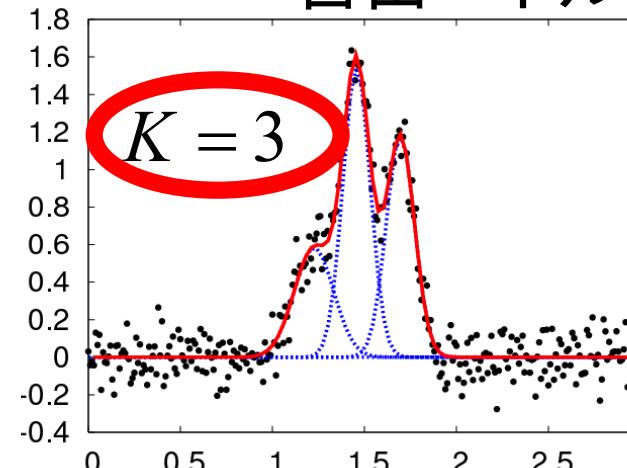
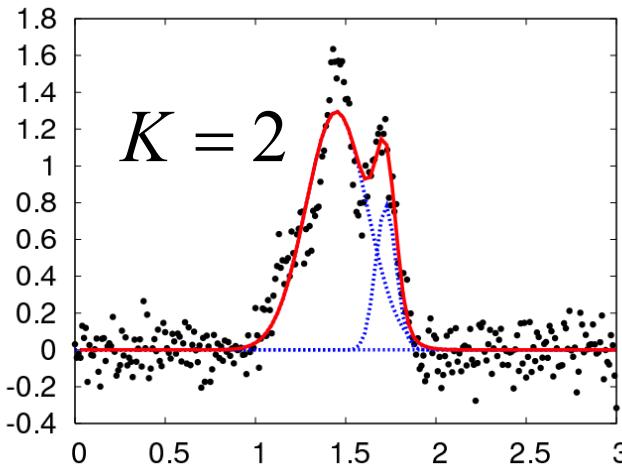


Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution
with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

スペクトル分解 (2/5): モデル選択:



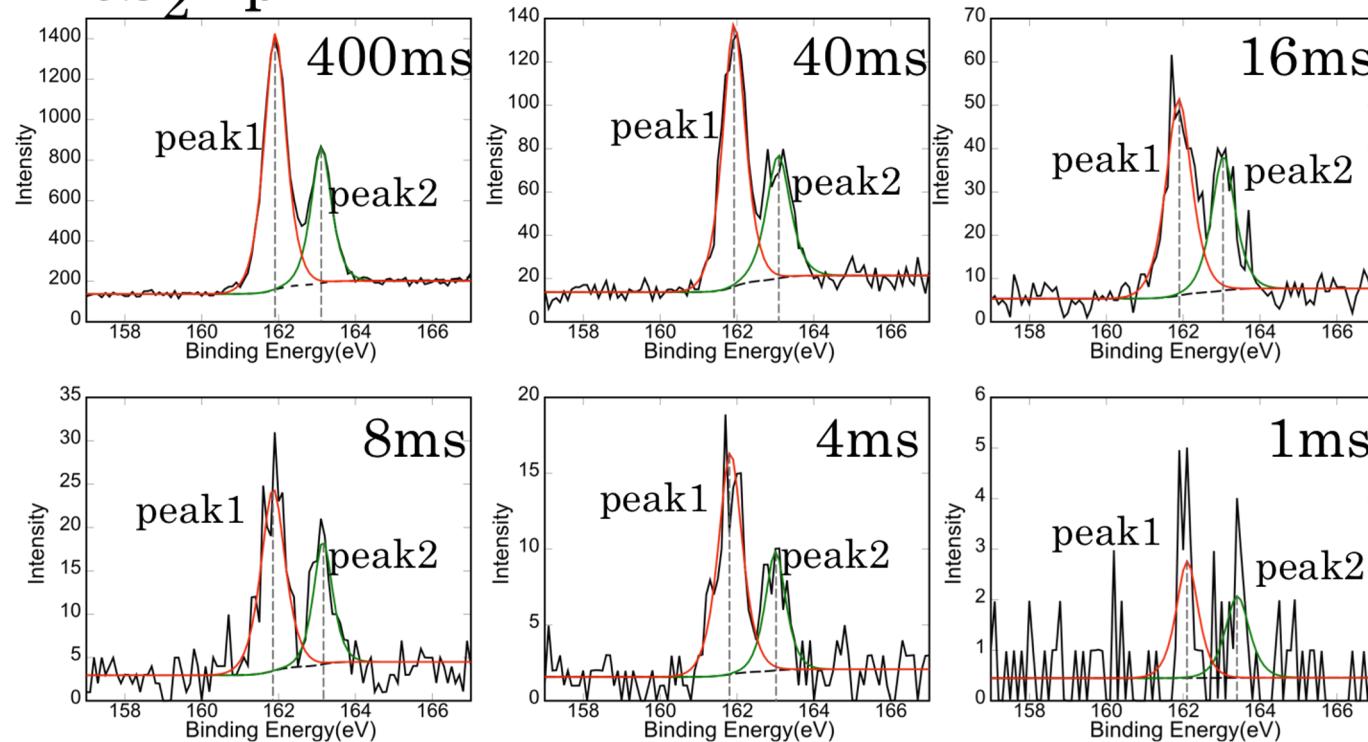
最適な K をデータだけから決める
自由エネルギー最小化



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

スペクトル分解(3/5) 計測限界の理論的評価

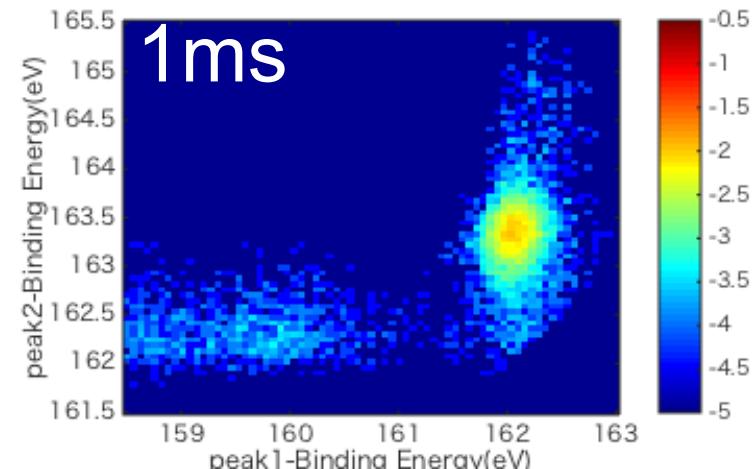
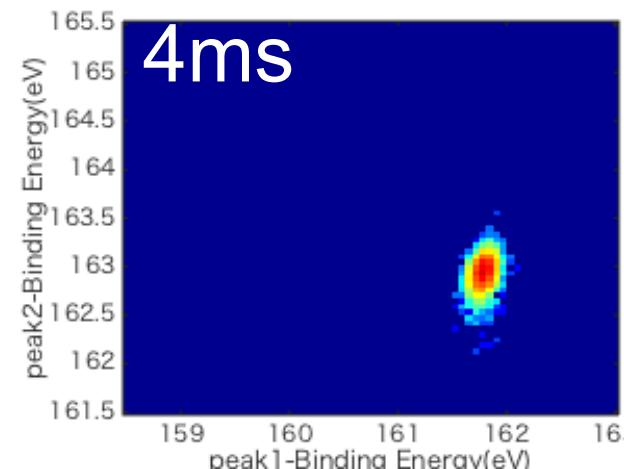
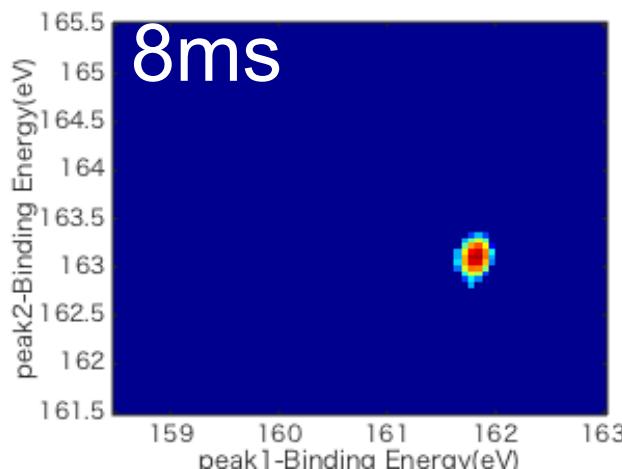
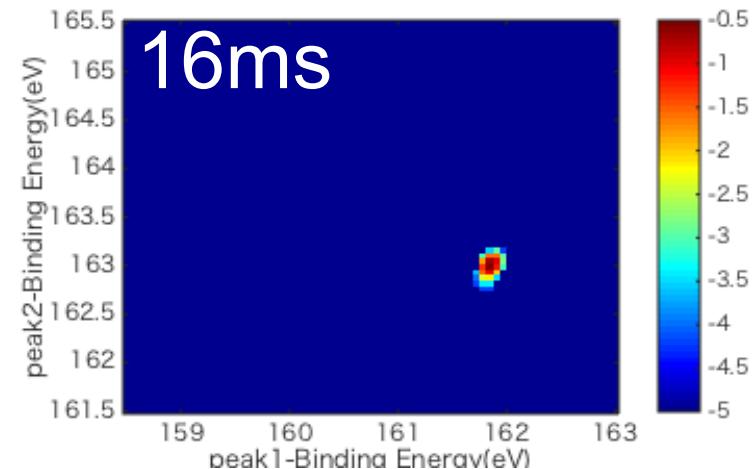
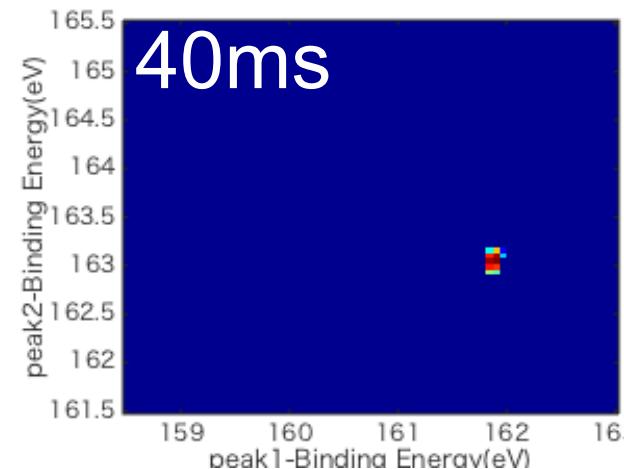
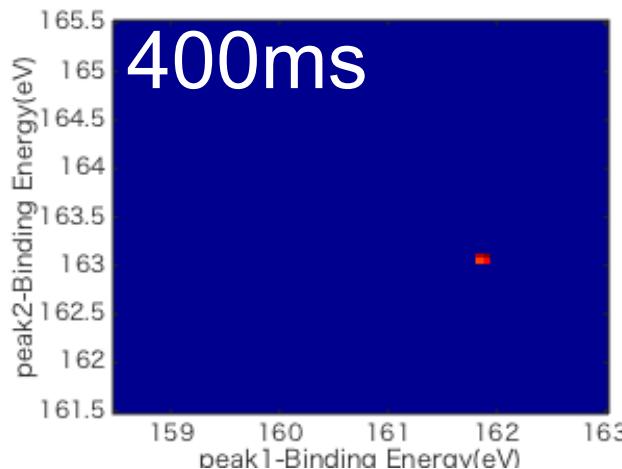
MoS₂ 2p



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

スペクトル分解(4/5) 計測限界の理論的評価

MoS₂ 2p



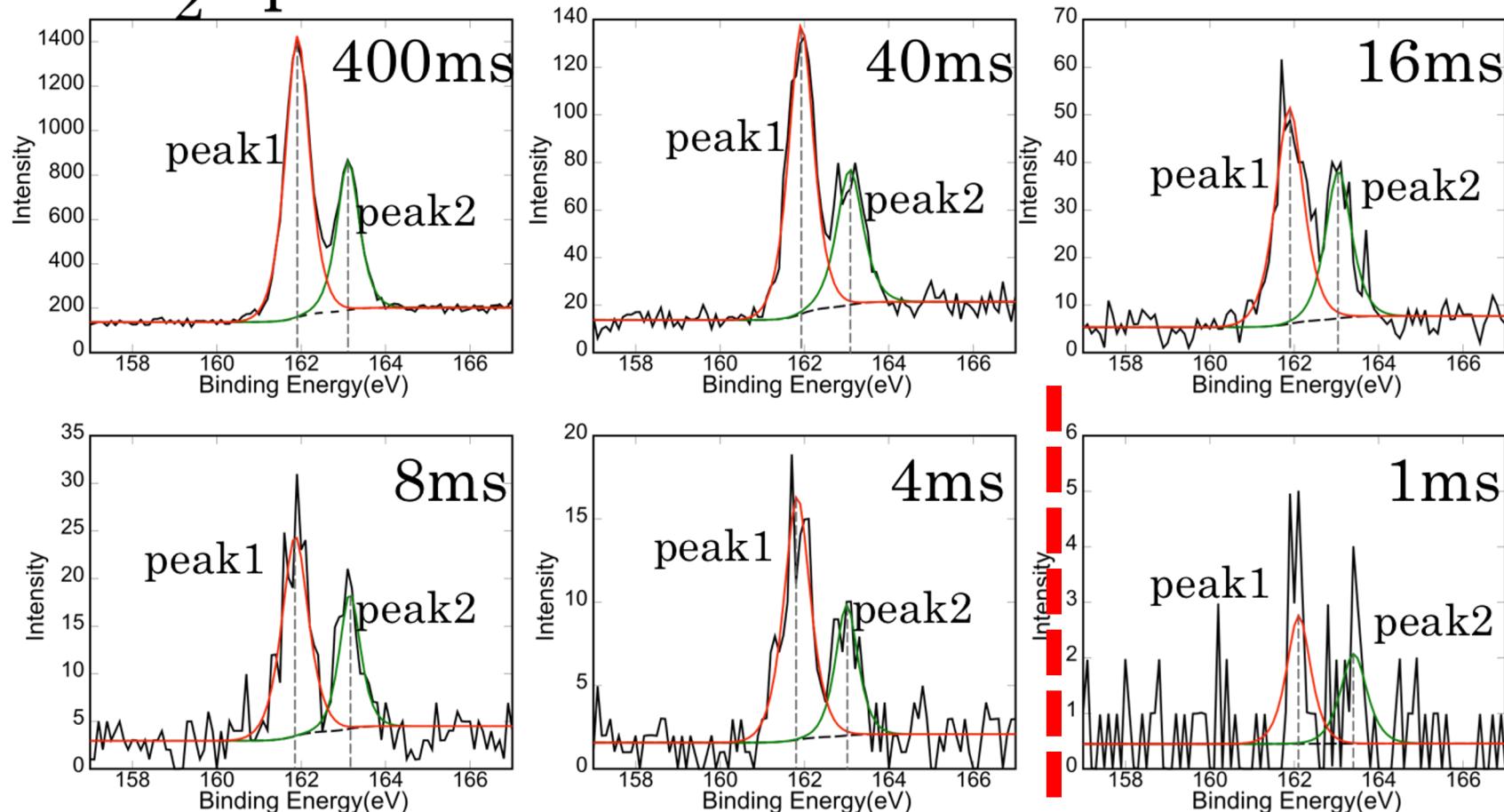
ここまで

スペクトル分解(5/5) 計測限界の理論的評価

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

MoS₂ 2p (時間幅依存性)



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中心 筒井智嗣

東京大学大学院 新領域創成科学研究所 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 先端科学研究所 水牧仁一朗

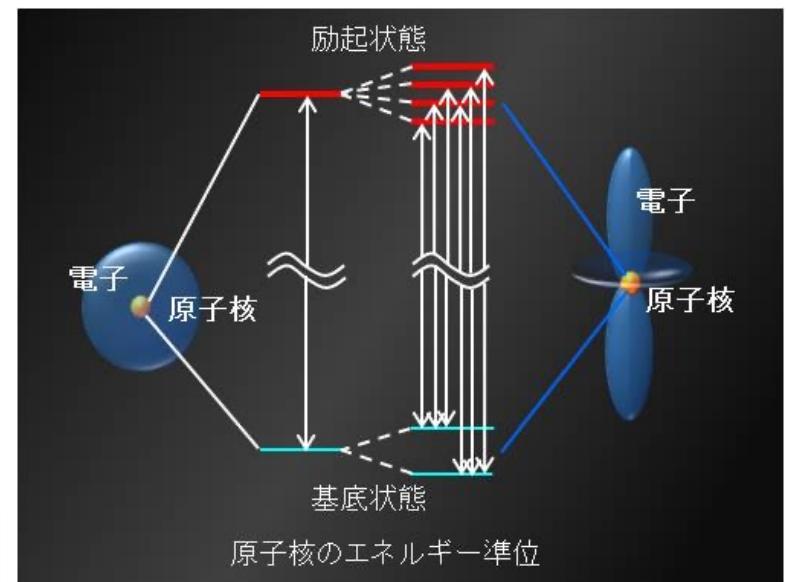
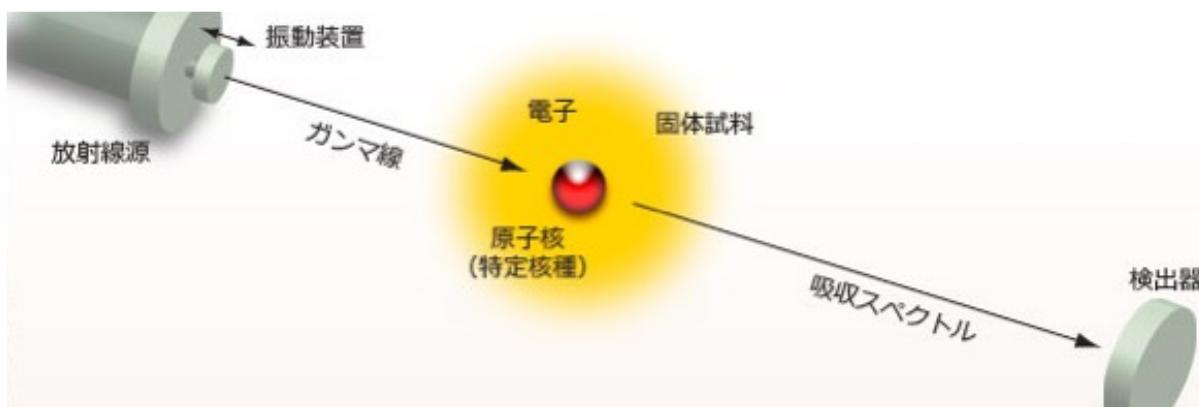
東京大学大学院 新領域創成科学研究所 岡田真人

Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata,
Mizumaki and Okada, *Journal of the Physical
Society of Japan*, 91, 104002 (2022)

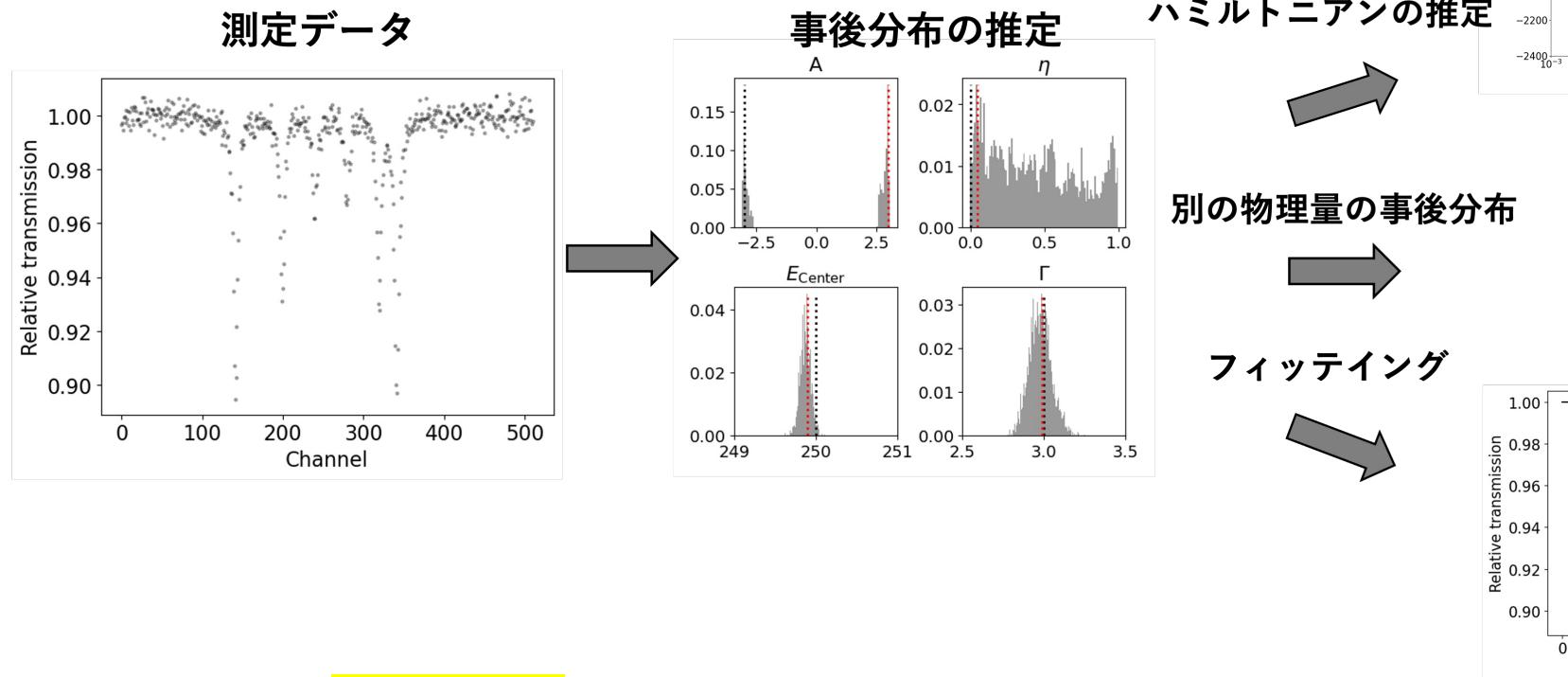
メスバウア一分光 (1/2)

メスバウア一分光: 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



メスバウア一分光(2/2)



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

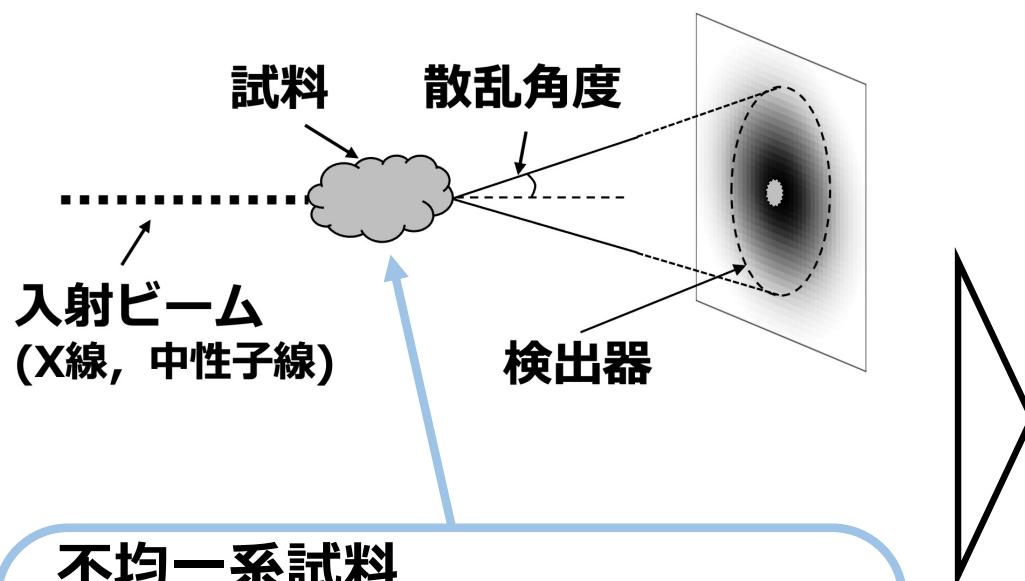
林悠偉^A, 片上舜^A, 桑本滋生^B,
永田賢二^C, 水牧仁一朗^B, 岡田真人^A

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).

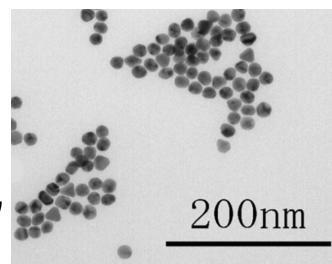
小角散乱 (1/4)

・小角散乱

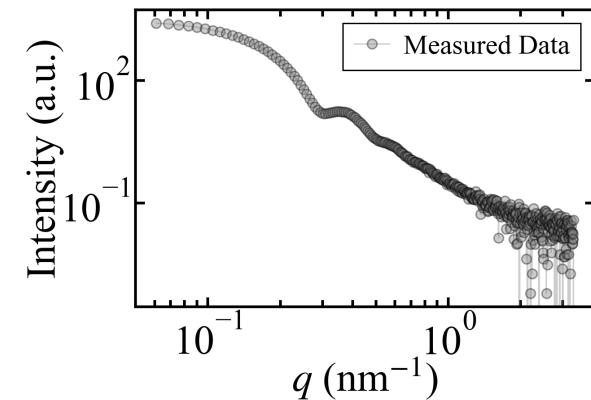


不均一系試料

- ・高分子溶液
- ・タンパク質
- ・コロイド粒子
- ・金属, セラミック
- ・纖維 …



出典: [1]



データ解析

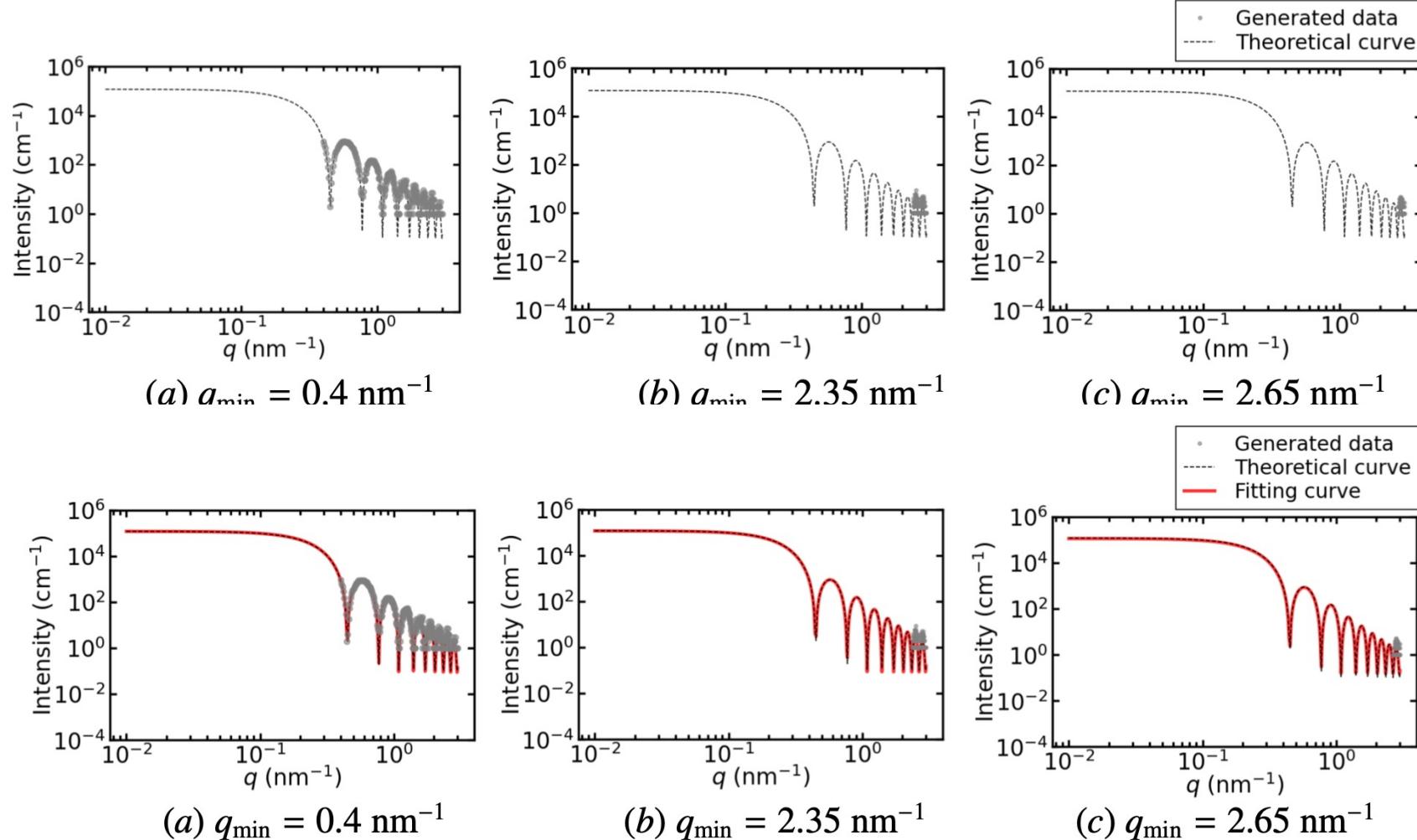
1. 散乱強度モデルを設定

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

2. モデルパラメータ推定

$$\text{粒径 } R_M \rightarrow 10 \text{ nm}$$

小角散乱 (2/4)

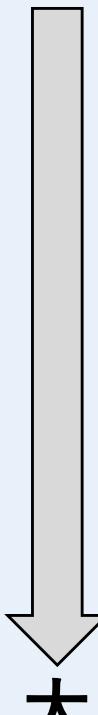


Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ* 92, 094002 (2023),

小角散乱 (3/4)

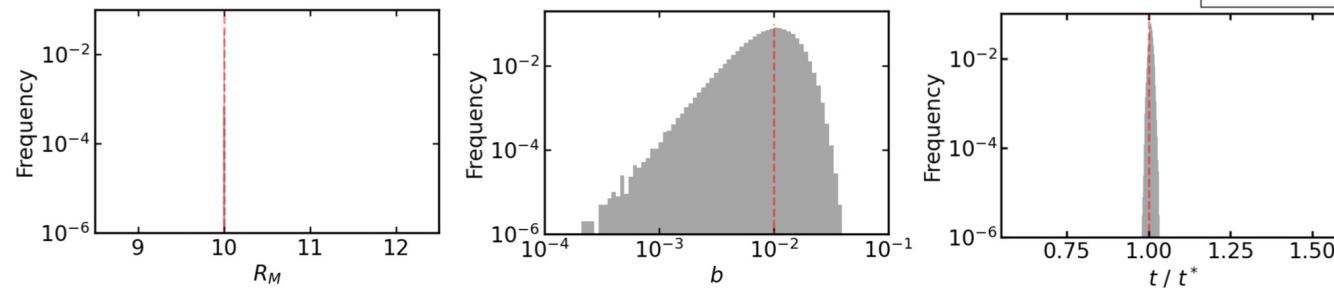
データ欠損

小

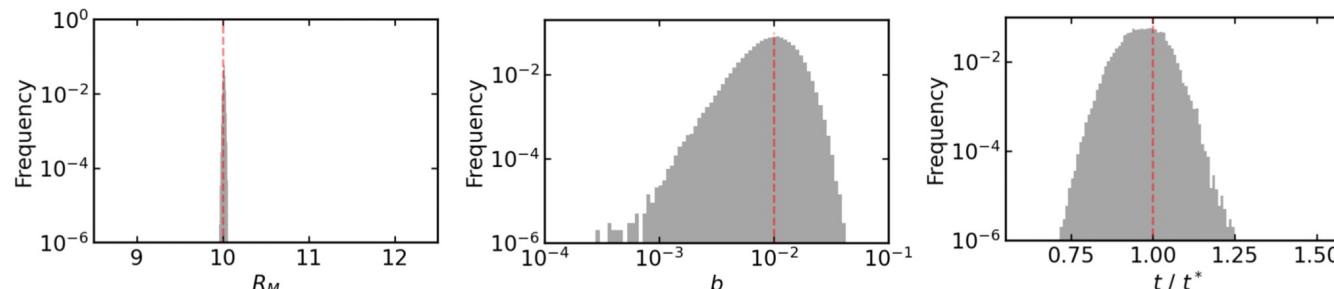


大

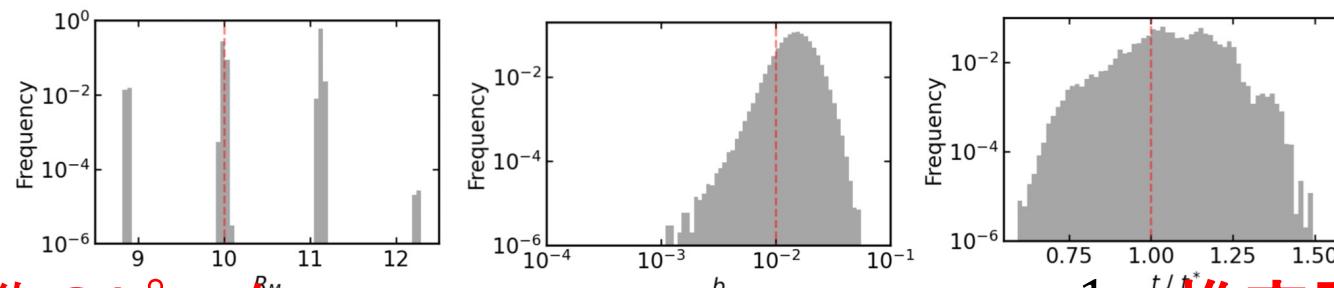
(a) $q_{\min} = 0.4$



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

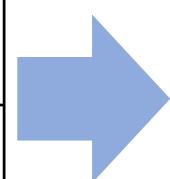
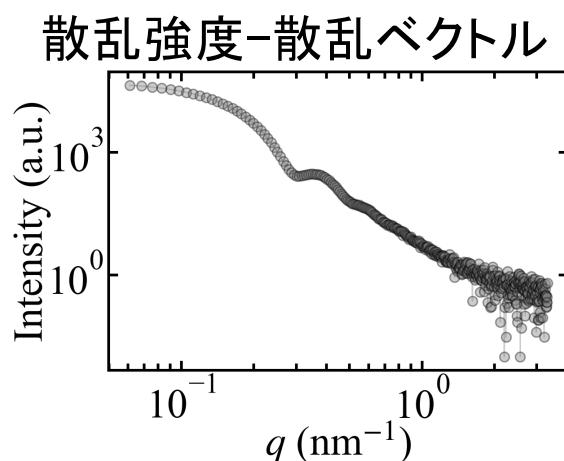


(c) $q_{\min} = 2.65$



(c) に複数のピーク $\rightarrow q_{\min} = 2.35 - 2.65 \text{ nm}^{-1}$ で推定限界

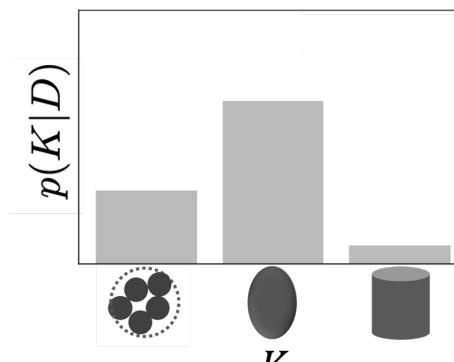
小角散乱 (4/4)



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

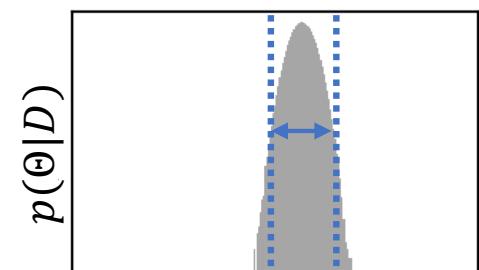


モデルの選択

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
のパラメータを推定

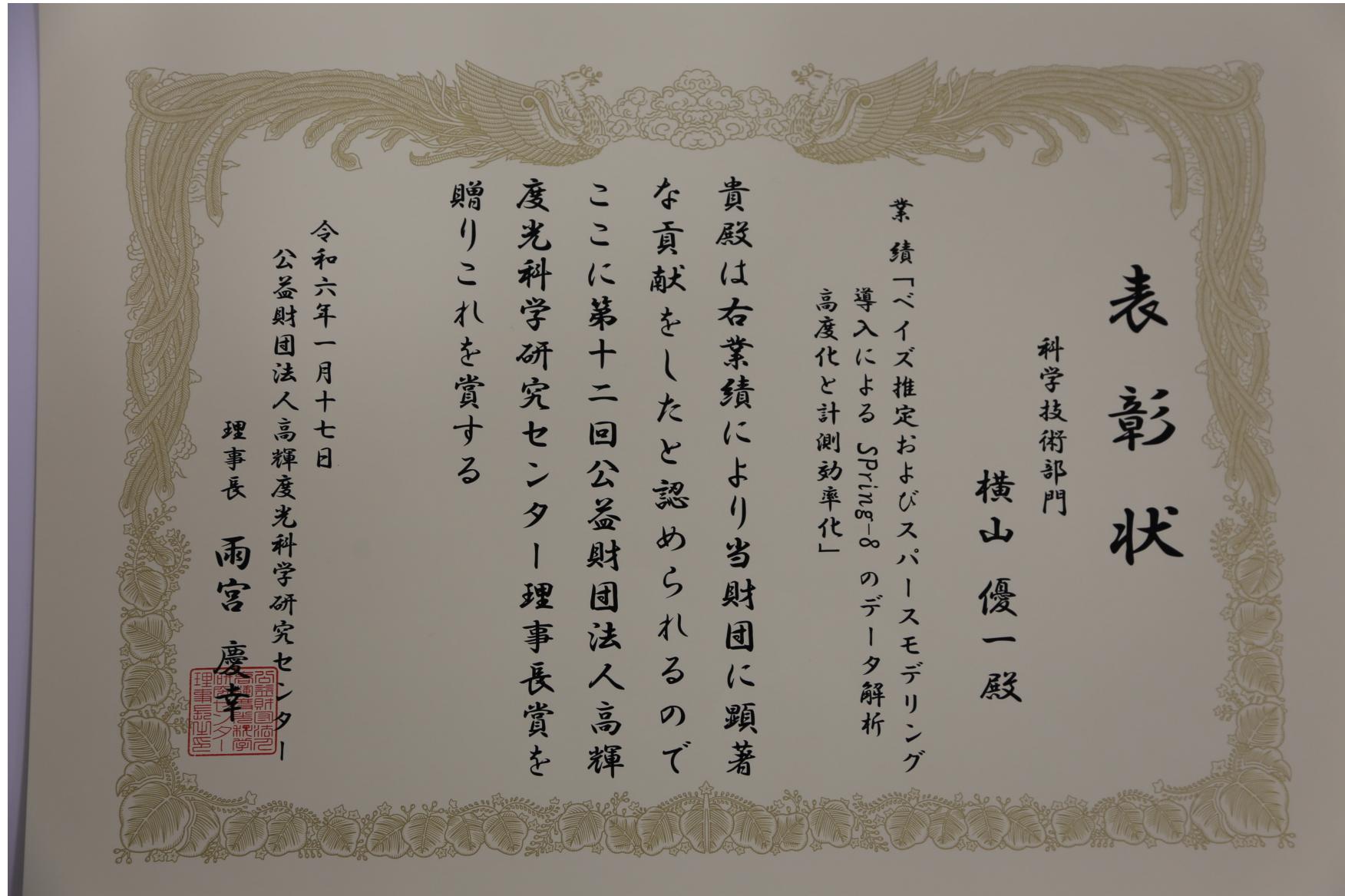


信頼度の
定量評価が可能

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・ベイズ計測の導入とベイズ計測三種の神器
- ・ベイズ計測の具体例: 線形回帰 $y=ax+b$ を例にして
- ・非線形系へのベイズ計測の展開
 - ・スペクトル分解
 - ・メスバウア一分光
 - ・小角散乱
 - ・2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介
- ・JASRI データ駆動科学グループの今後のあり方についての私見

2023年度JASRI理事長賞 JASRIデータ駆動科学グループ横山優一氏

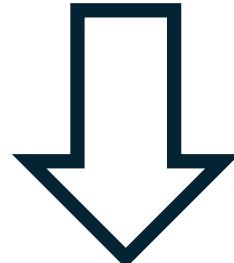


2023年度JASRI理事長賞 JASRIデータ駆動科学グループ横山優一氏

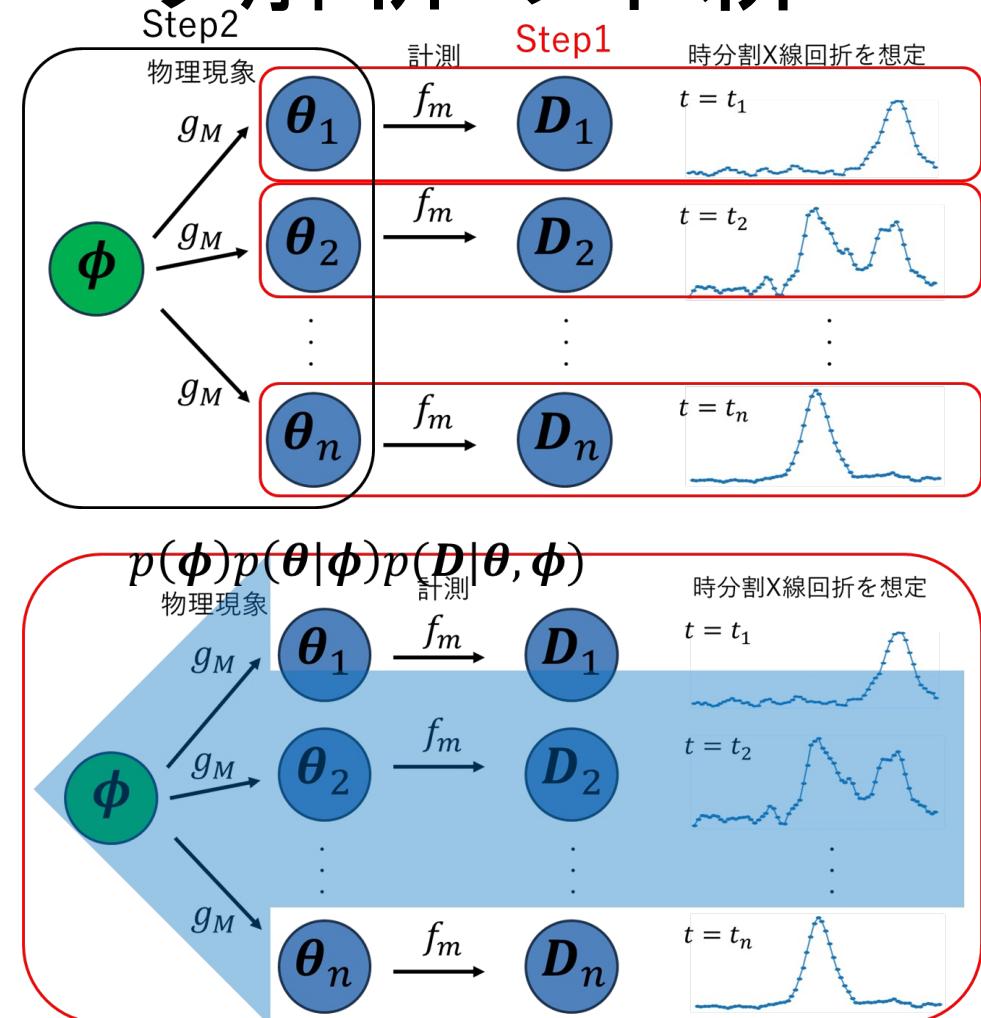


ベイズ的階層モデリング(通常法では無理)によるデータ解析の革新

多段階における
従来型の解析



階層モデリングによる
シームレス解析

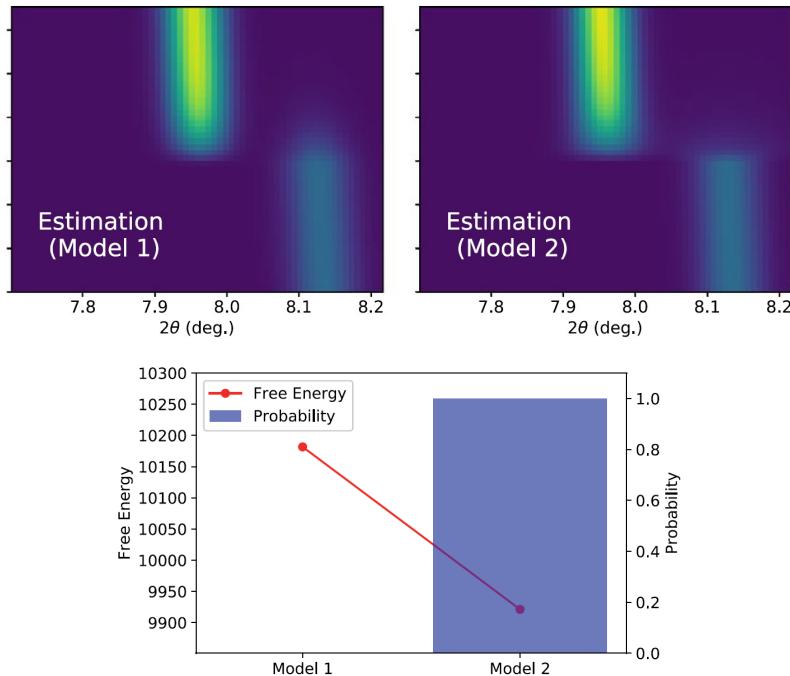


計測限界の向上と計測時間の短縮 \Rightarrow 実験計画へのフィードバック

Y. Yokoyama et al., *Sci. Rep.* 13, 14349 (2023).

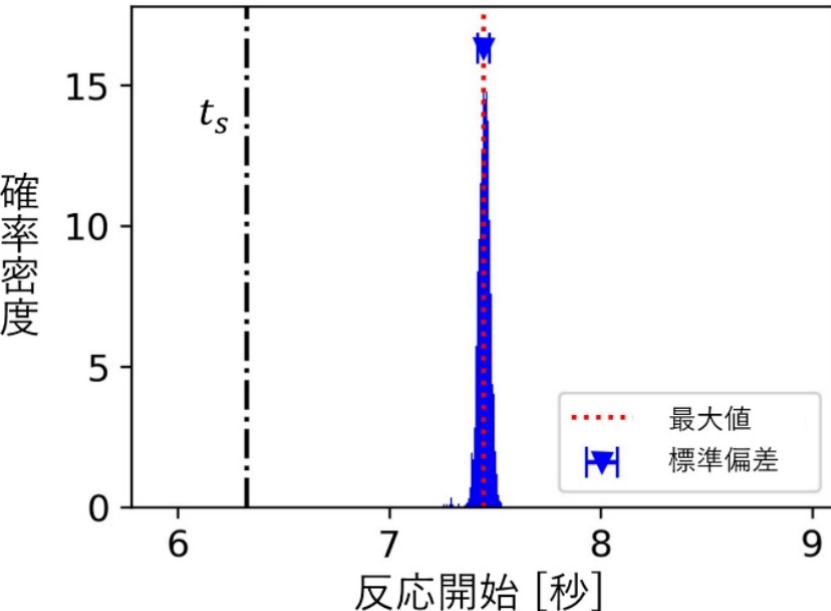
SPring-8 BL02B2の時分割X線回折で 階層モデリングを実演

反応モデル選択の自動化



反応開始の事後分布推定

従来指標 ベイズ推定



データ駆動型のモデル選択と事後分布推定によって
従来よりも客観的かつ定量的な解析が実現
Y. Yokoyama et al., *Sci. Rep.* 13, 14349 (2023).

内容

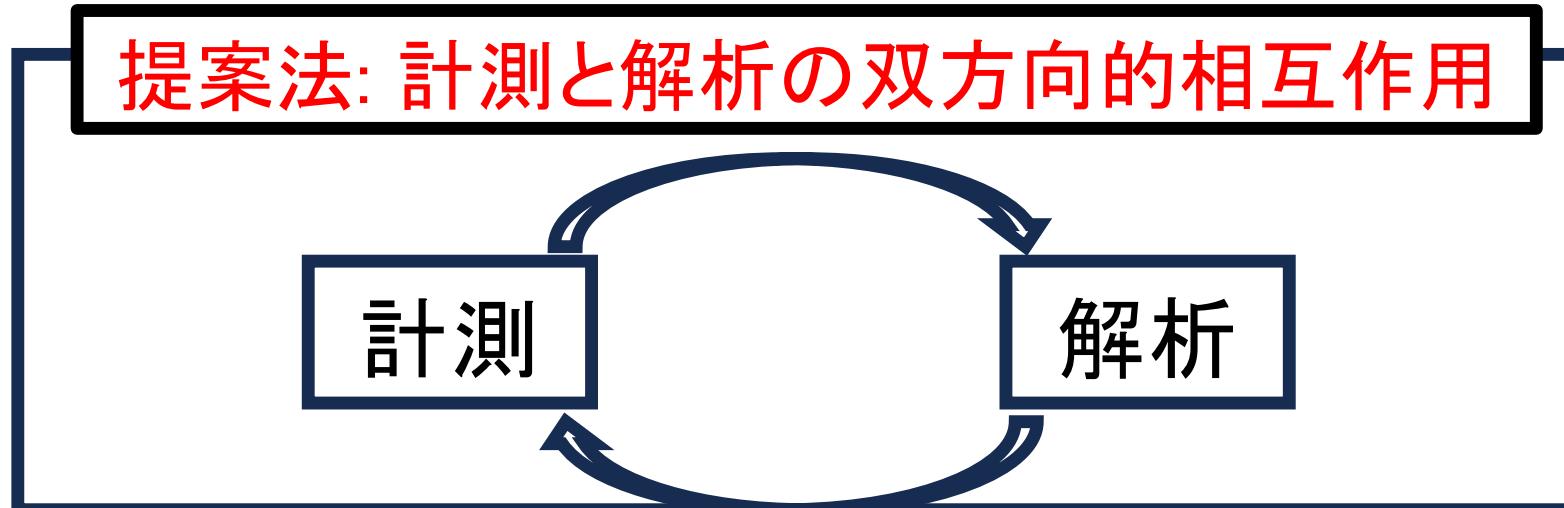
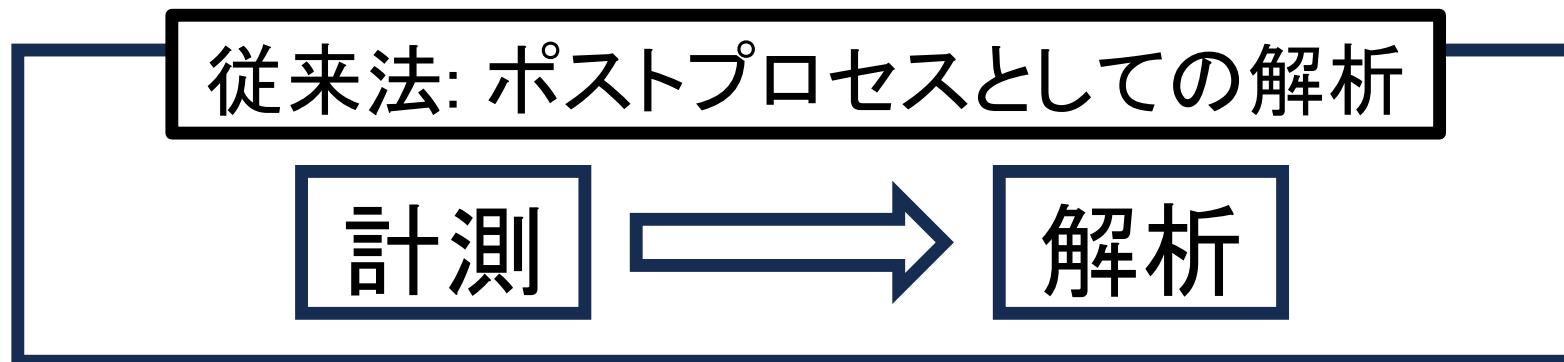
- ・自己紹介と本講演の狙い
- ・ベイズ計測の導入とベイズ計測三種の神器
- ・ベイズ計測の具体例: 線形回帰 $y=ax+b$ を例にして
 - ・最小二乗法
 - ・ベイズの定理
 - ・神器1: パラメータの事後確率推定とノイズ分散推定
 - ・神器2: ベイズ的モデル選択
- ・非線形系へのベイズ計測の展開
 - ・スペクトル分解
 - ・メスバウア一分光
 - ・小角散乱
 - ・2023年度JASRI理事長賞を受賞した横山優一氏の研究紹介
- ・JASRI データ駆動科学グループの今後のあり方についての私見

JASRIデータ駆動科学グループの役割 計測と解析の双方向相互作用

計測限界の向上と計測時間の短縮 →

実験計画へのフィードバック

Y. Yokoyama et al., *Sci. Rep.* 13, 14349 (2023).



JASRI データ駆動科学グループの 今後のある方についての私見

- ・計測と解析の双方向相互作用をSPring-8/JASRIに普及促進し、ユーザーに対する普及活動
- ・そのための組織は、SPring-8/JASRI内にあるべきであり、SPring-8/JASRI以外の大学等からの支援だけでは不十分であるのは明らかである。
- ・SPring-8/JASRIの既存の組織を考慮すると、その組織として一番的確なのは、JASRI データ駆動科学グループである。
- ・すぐにJASRI データ駆動科学グループに投資しないと、台湾(NSRRC)などの例から明らかなように、現在のSPring-8の国際的なアドバンテージが消失