

放射光科学とデータ駆動科学

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

本講演のスライドは岡田研HPにて公開

[https://mns.k.u-
tokyo.ac.jp/lab.html#overview](https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/lab.html#overview)

大阪大学大学院理学研究科(金森研) 指導教官: 小谷章雄先生(城武男先生)

Journal of the Physical Society of Japan
Vol. 56, No. 2, February, 1987, pp. 798-809

Many Body Effect in Inner Shell Photoemission and Photoabsorption Spectra of La Compounds

Akio KOTANI, Masato OKADA, Takeo JO,
A. BIANCONI,[†] A. MARCELLI[†] and J. C. PARLEBAS^{††}

*Department of Physics, Faculty of Science, Osaka University,
Toyonaka 560*

*[†]Dipartimento di Fisica, Università di Roma “La Sapienza”,
00185 Roma, Italy*

^{††}LMSES, Université Louis Pasteur, 67070 Strasbourg, France

(Received October 14, 1986)

REFERENCES

1. A. Kotani & Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* **37**, 912 (1974).
2. O. Gunnarsson & Schönhammer, *Phys. Rev.* **B27**, 4315 (1983).
3. A. Fujimori, *Phys. Rev.* **B28**, 2281 (1983).

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, データ駆動型科学
- ・ 東京大学・大学院新領域創成科学研究所 複雑理工学専攻
－ 情報統計力学、データ駆動科学 (2004/07 –)

ベイズ計測の 計り知れないインパクト

- 研究者の黒船
 - SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 対：地道に築いたものを破壊するな!!
- 自分の論文が書き換わってしまうかも
 - 若手の千載一遇のチャンス
- 期待先行型のAI（深層ネット）を遥かに超える研究の根幹への破壊力
- ごぼう抜きキャリアアップへ

内容

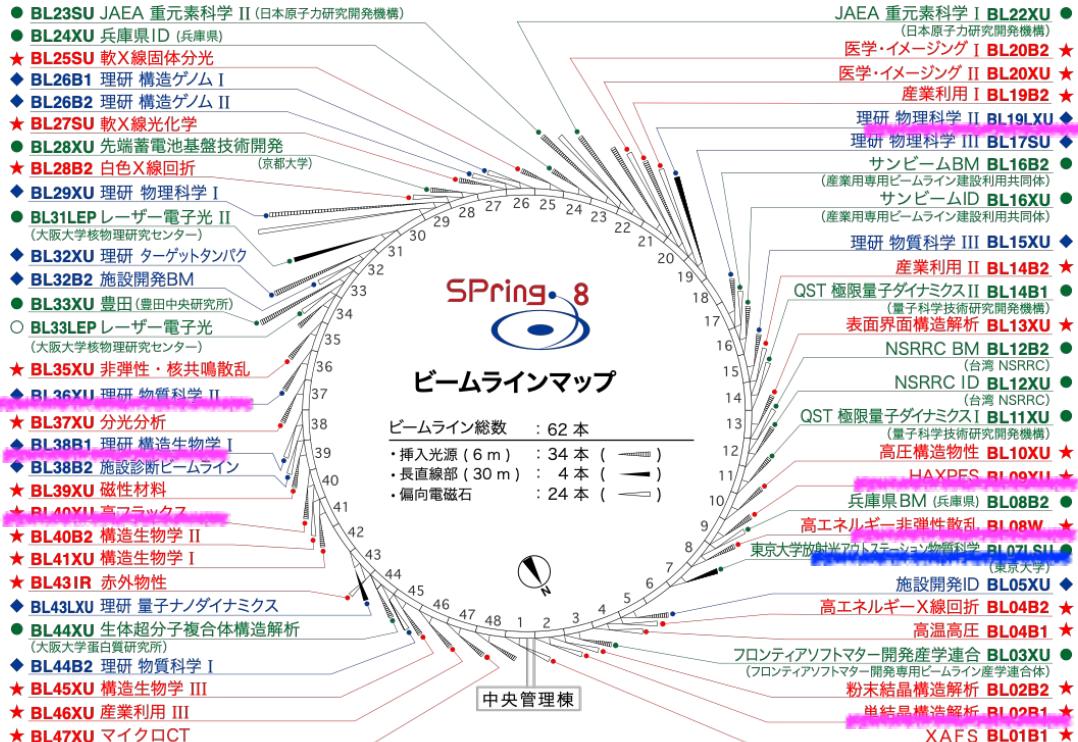
- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ベイズ計測
 - 計測科学の必須条件
 - ベイズ計測三種の神器
 - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
 - スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、中性子非弾性散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

SPring-8

- ・アメリカのAdvanced Photon Source (APS),ヨーロッパのEuropean Synchrotron Radiation Facility(ESRF)と合わせて, **世界3大放射光施設**.
- ・理研はSPring-8を「データ創出基盤」であると言っている. **年間延べ1万人**が利用.
- ・APSやESRFにおいてベイズ計測は導入されていない.
- ・放射光におけるベイズ計測に関しては**日本が最先端**である.

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

岡田研学生+筒井

小角散乱

BL08B2

BL19B2

XAS測定

BL37XU

BL39XU

岡田研学生+桑本

放射光ユーザーへの展開

時分割XRD

横山優一+河口彰吾、沙織

BL10XU

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
- ・ 佐賀LS: 2024年10月16日シンポジウム
- ・ 広大HiSOR: 2024年11月18日

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・データ駆動科学の三つのレベル: データ解析の学理
- ・ベイズ計測
 - 計測科学の必須条件
 - ベイズ計測三種の神器
 - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- ・非線形系にするベイズ計測
 - スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、中性子
非弾性散乱
- ・ベイズ計測とキャリアパス
- ・まとめと今後の展開

David Marrの三つのレベル (1982)

David Marrは脳の視覚を理解する中で、**複雑な情報処理機械を理解**するには以下の三つのレベルが必要であると説いた (Marr, Vision, 1982)

計算理論

計算の目的とその適切性を議論し、実行可能な方法の論理を構築

表現・アルゴリズム

計算理論の実行方法。特にその入力と出力の表現と変換のためのアルゴリズム

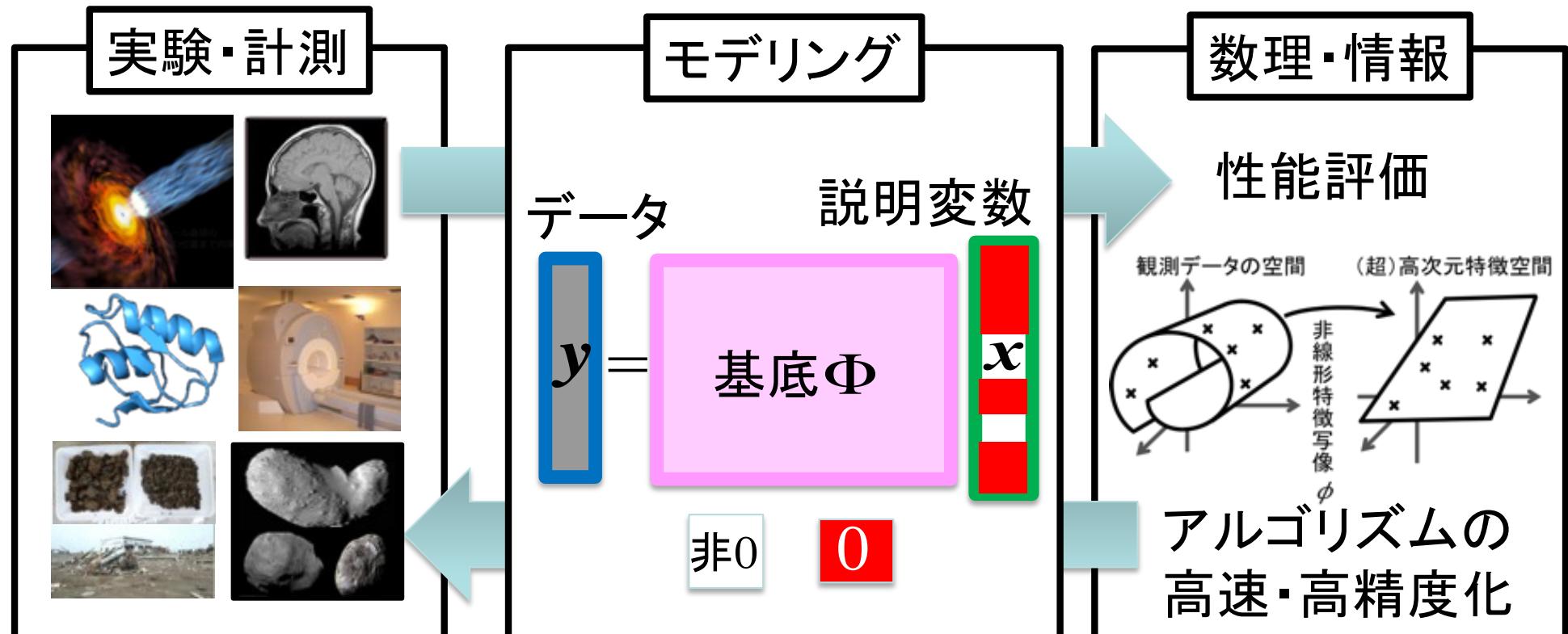
ハードウェア実装

表現とアルゴリズムの物理的な実現
ニューラルネットワーク(ディープラーニング)

新学術領域研究 平成25～29年度 スペースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成

領域代表岡田真人の個人的な狙い

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？



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.

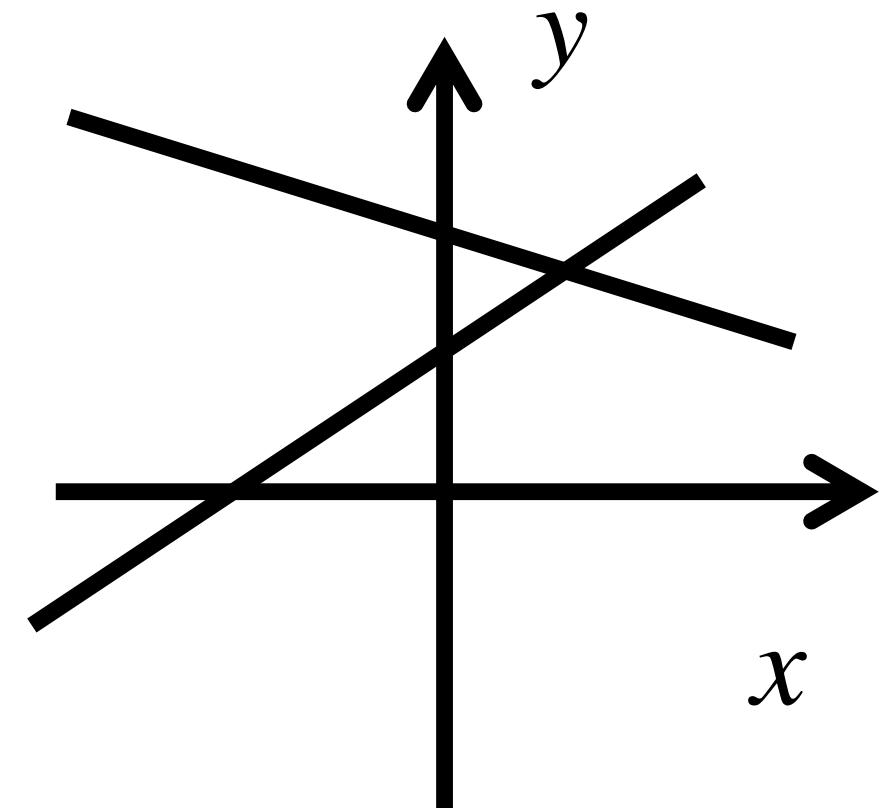
連立方程式とデータ駆動科学

連立方程式とその応用

鶴亀算 食塩水 寝坊
して追いかける問題

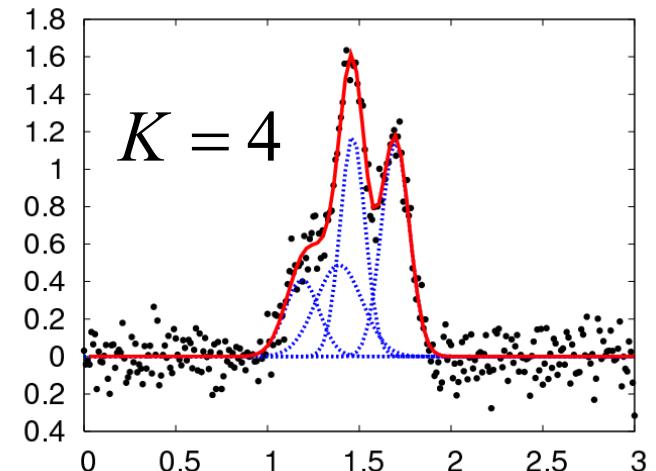
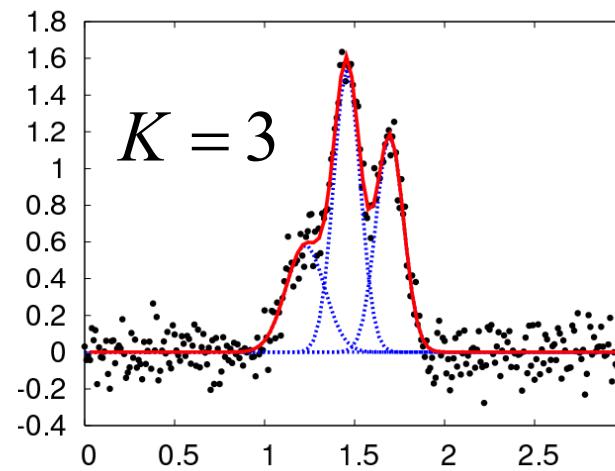
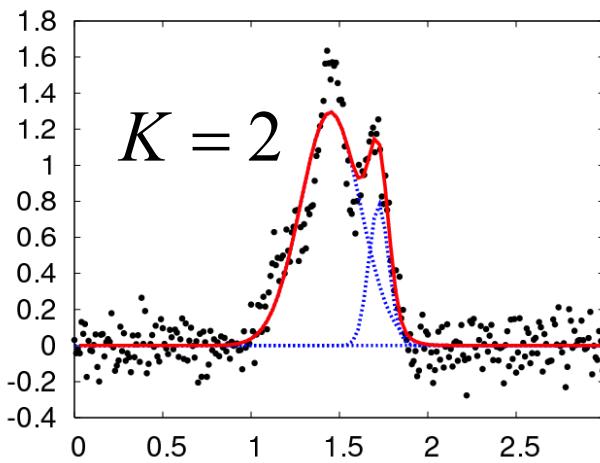
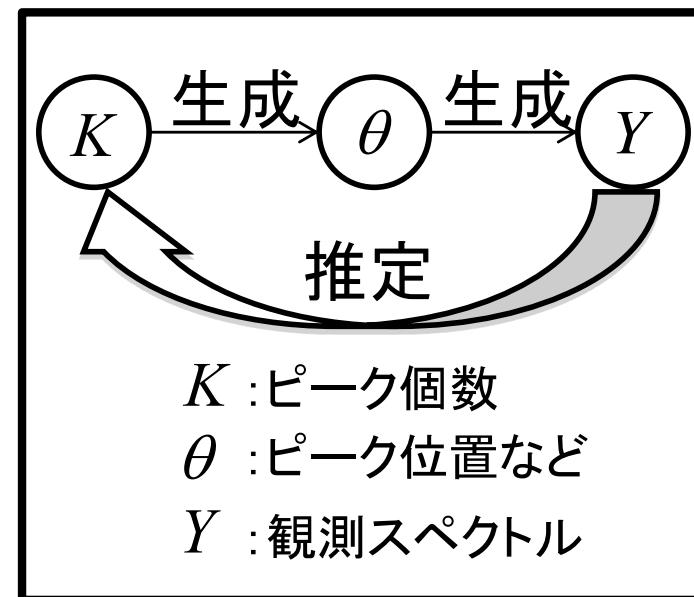
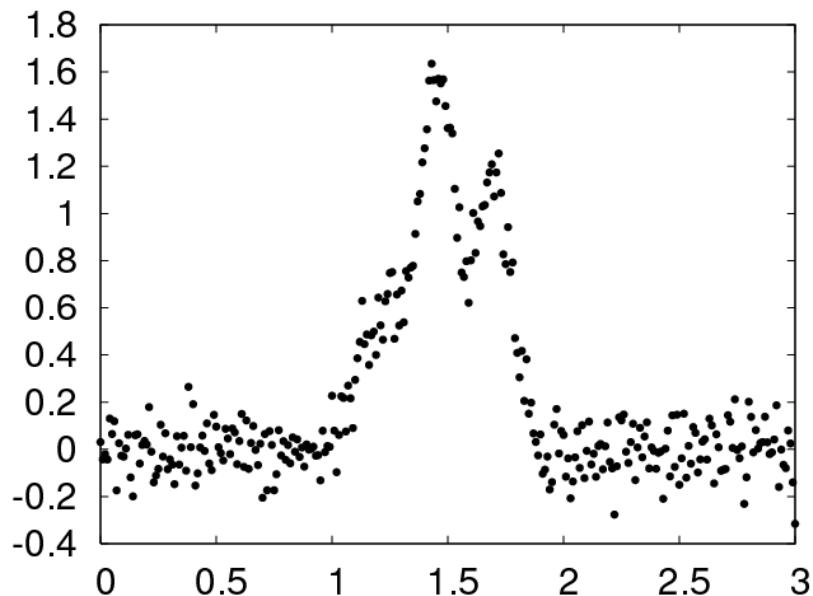
連立方程式への変換

加減法, 代入法



(五十嵐, 竹中, 永田, 岡田, 応用統計学, 2016)

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.
Nagata, Sugita and M. Okada, “Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method”, *Neural Networks*, 28, 82-89 2012.

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- データ駆動科学の三つのレベル: データ解析の学理
- ベイズ計測
 - 計測科学の必須条件
 - ベイズ計測三種の神器
 - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ
 - スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、中性子非弾性散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

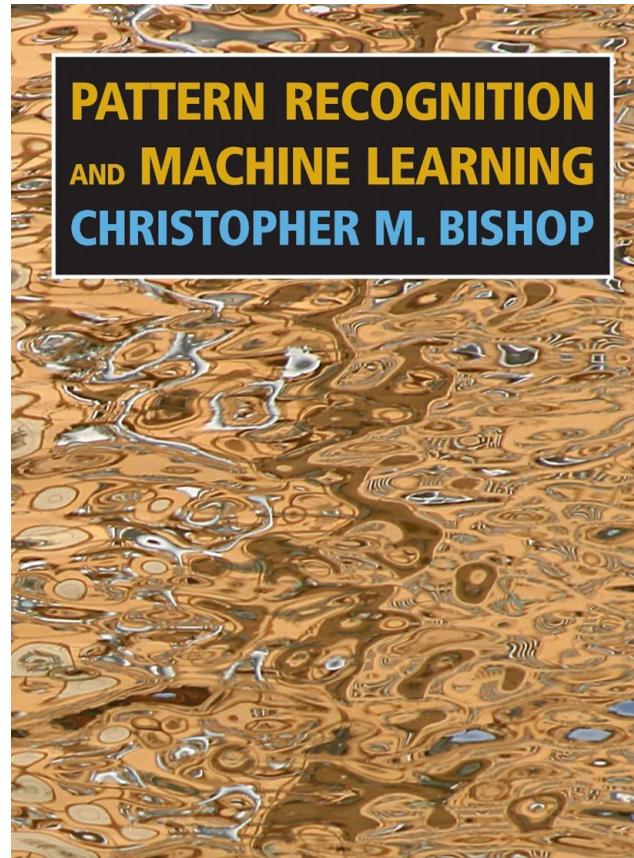
計測科学の必須条件

- 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

- ・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

ベイズ推論とベイズ計測は違う



分厚い本を読む必要はない。分厚い部分のほとんどは近似アルゴリズムの説明

ベイズ計測の習得法 たったこれだけ

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. OJT的に各課題に取り組む

内容

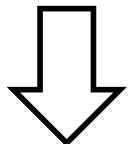
- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ・ベイズ計測
 - ・計測科学の必須条件
 - ・ベイズ計測三種の神器
 - ・ $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- ・非線形系にするベイズ計測
 - ・スペクトル分解、メスバウア一分光、小角散乱、XPS/ XASのベイズ統合
- ・ベイズ計測とキャリアパス
- ・まとめと今後の展開

ベイズ計測とは？

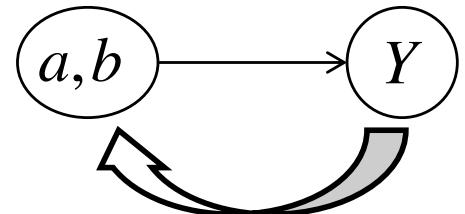
ベイズ推論

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

<ベイズの定理>



生成(因果律)



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

$p(a, b | Y)$: 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

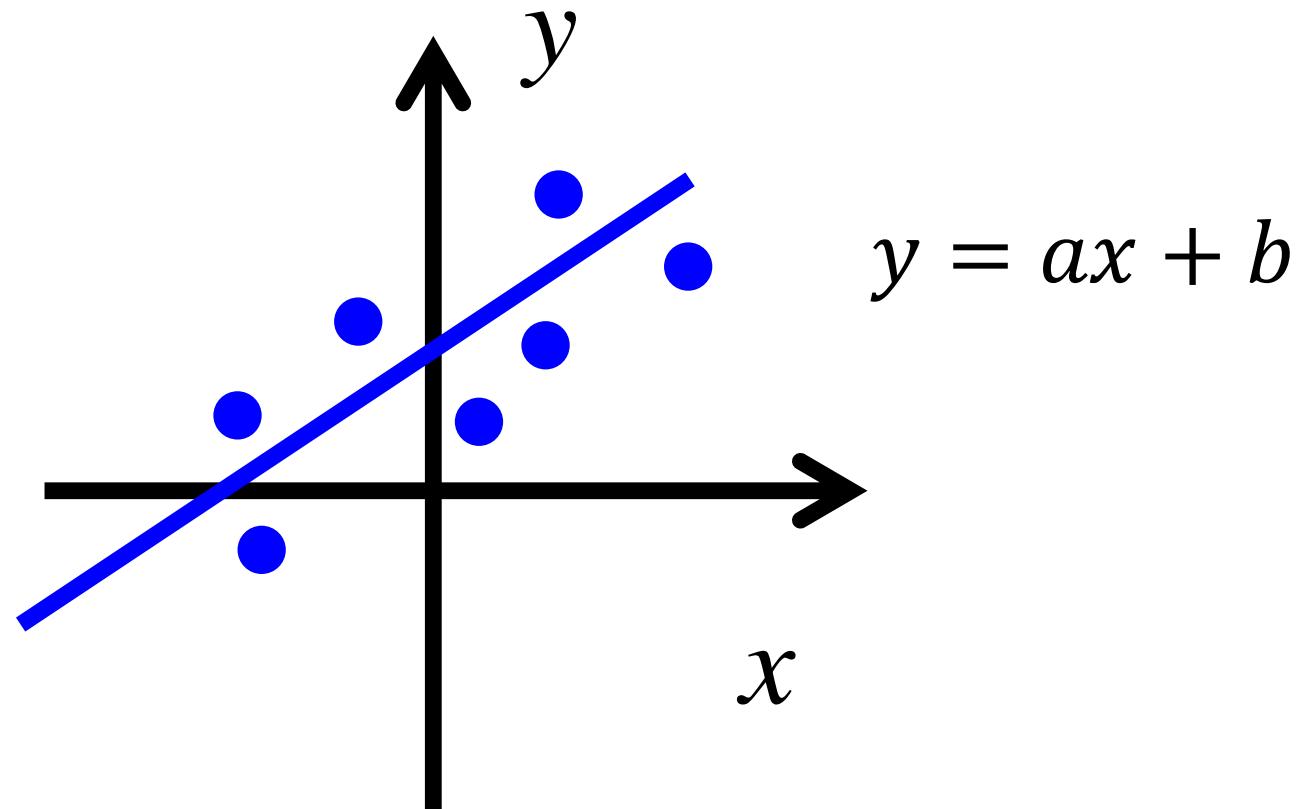
ベイズ計測三種の神器

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

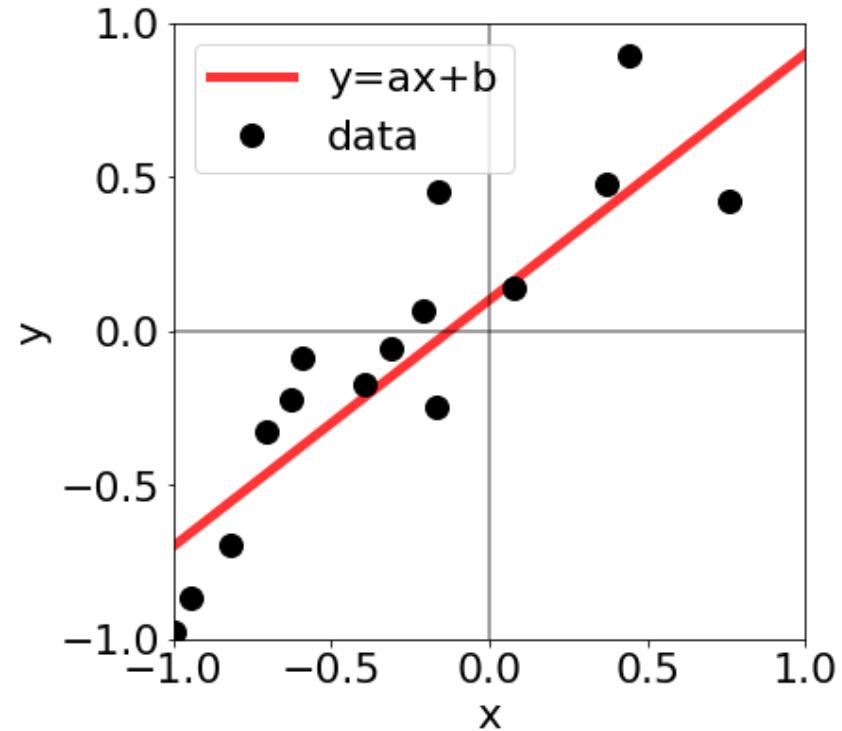
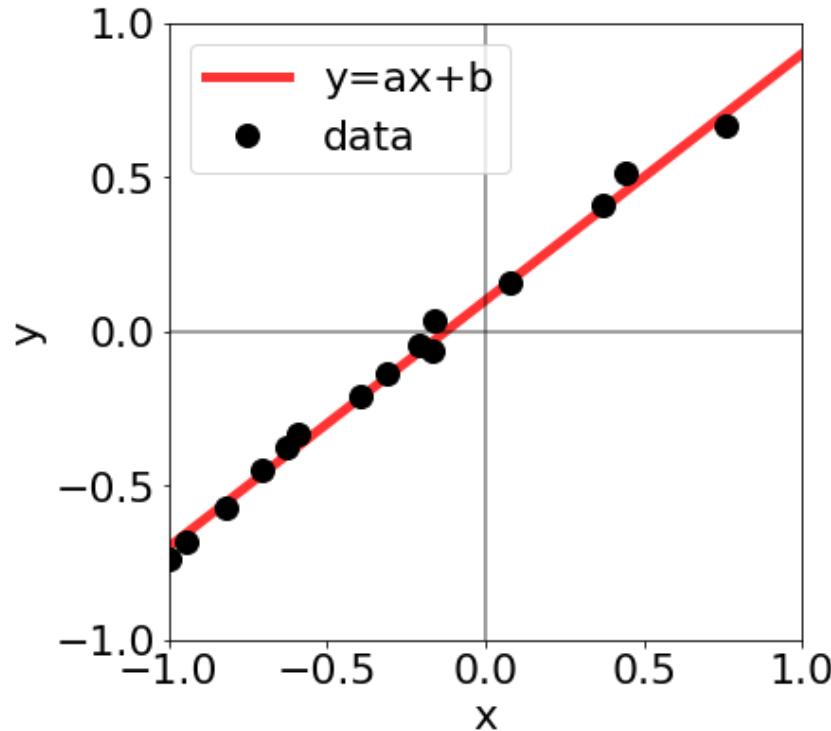
現状でも用いられている最も簡単な例



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)

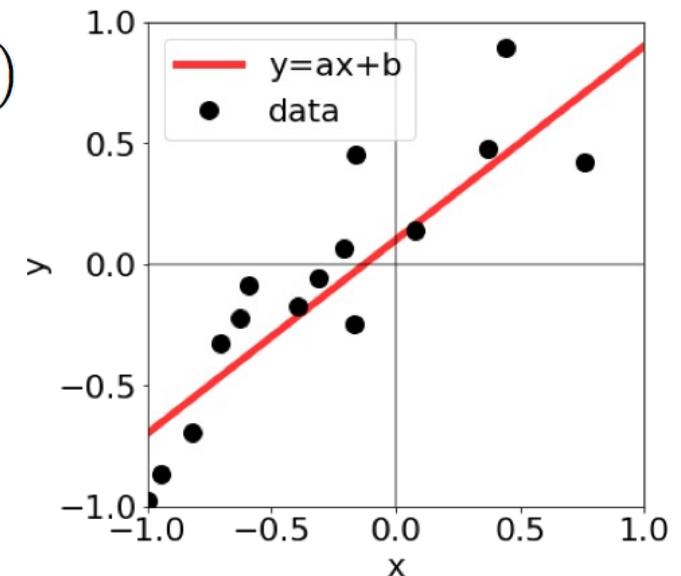
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \text{ とする場合}$$

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

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

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

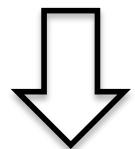
$$\bar{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



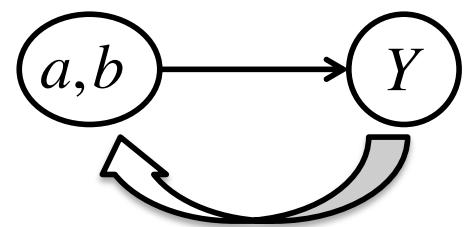
ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定 (1/4)

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

<ベイズの定理>



生成(因果律)



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

$p(a, b | Y)$: 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

神器1: パラメータの事後確率推定 (2/4)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

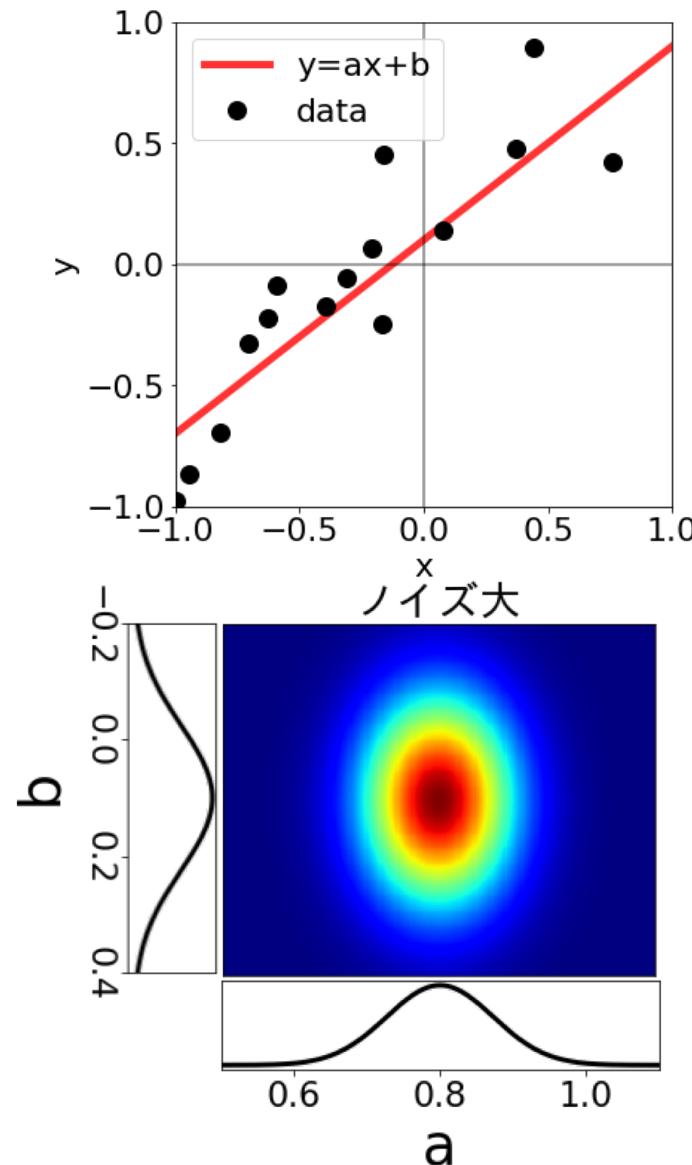
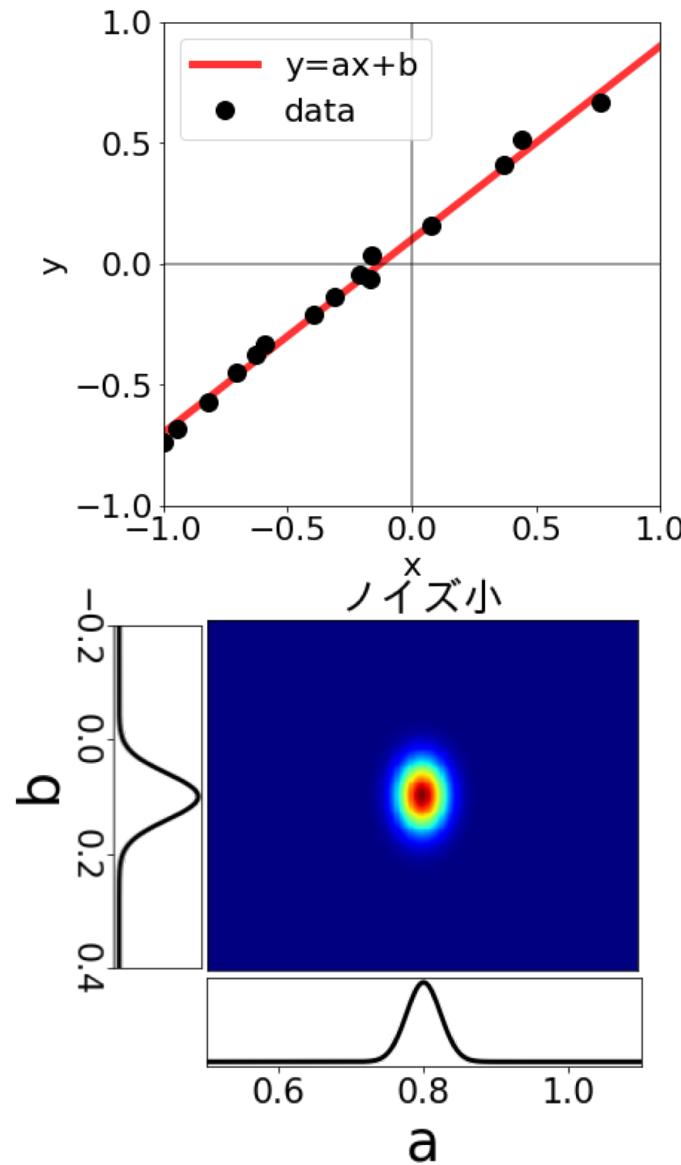
$$p(n_i) = p(y_i|a, b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

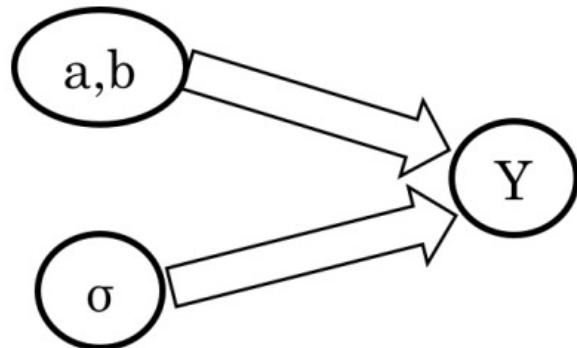
神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

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

神器1: パラメータの事後確率推定 (4/4)



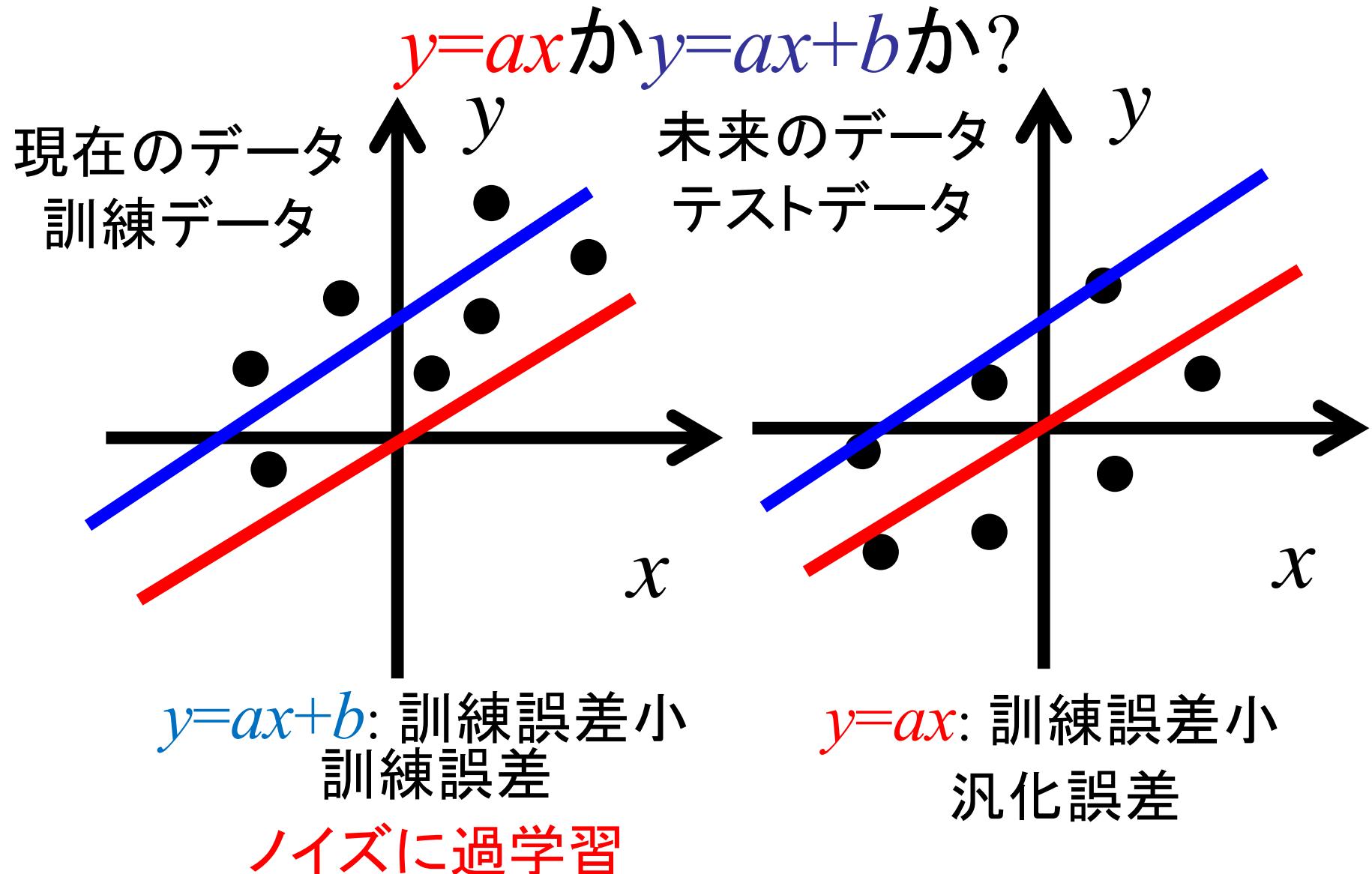
神器1: パラメータの事後確率推定 ノイズ分散推定



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

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

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

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

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

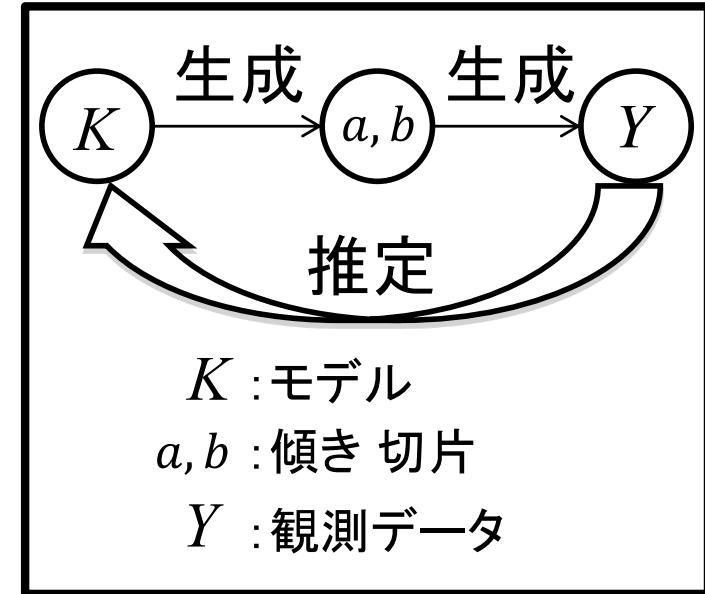
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

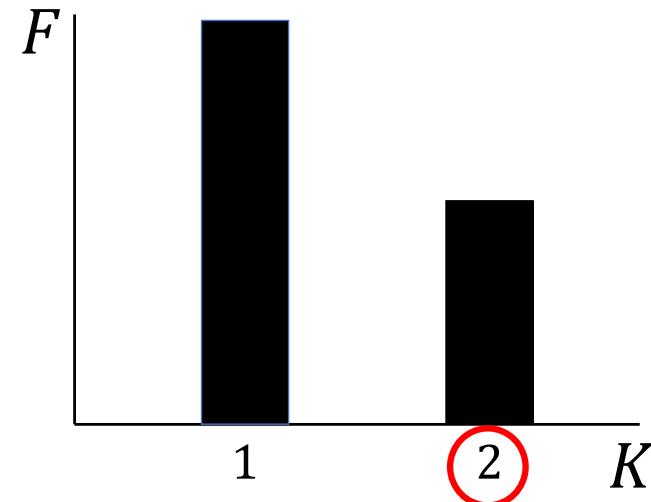
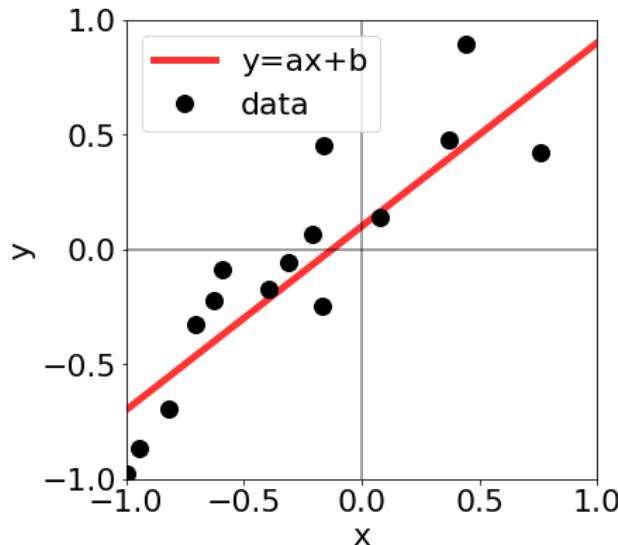
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

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

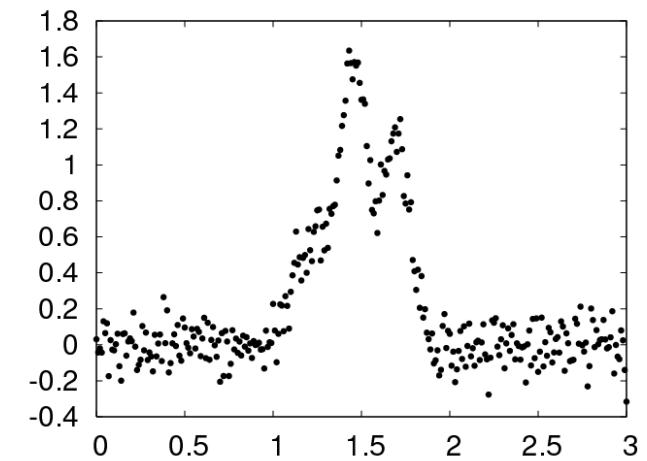
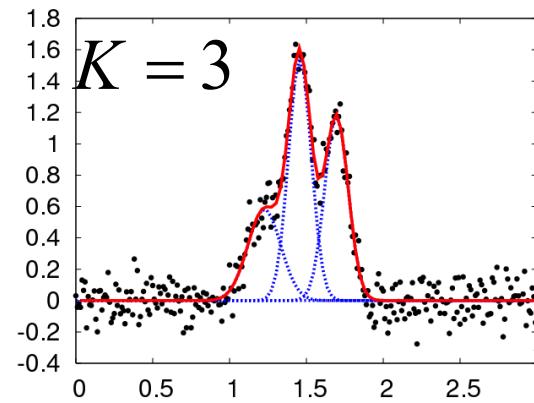
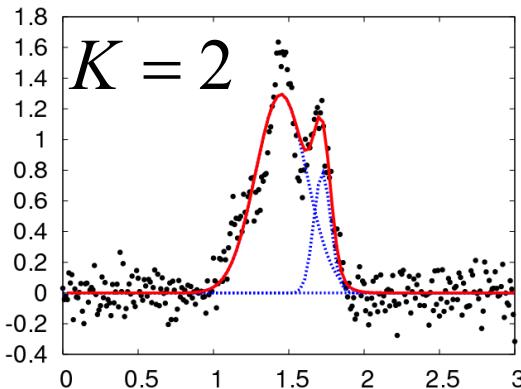
まとめ: ベイズ計測三種の神器 $y=ax+b$ の解析取り扱いを通じて

- 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: 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: 後ほど実例を紹介

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ・ベイズ計測
 - ・計測科学の必須条件
 - ・ベイズ計測三種の神器
 - ・ $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- ・非線形系にするベイズ計測
 - ・スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、中性子非弾性散乱
- ・ベイズ計測とキャリアパス
- ・まとめと今後の展開

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* 2012

スペクトル分解の定式化

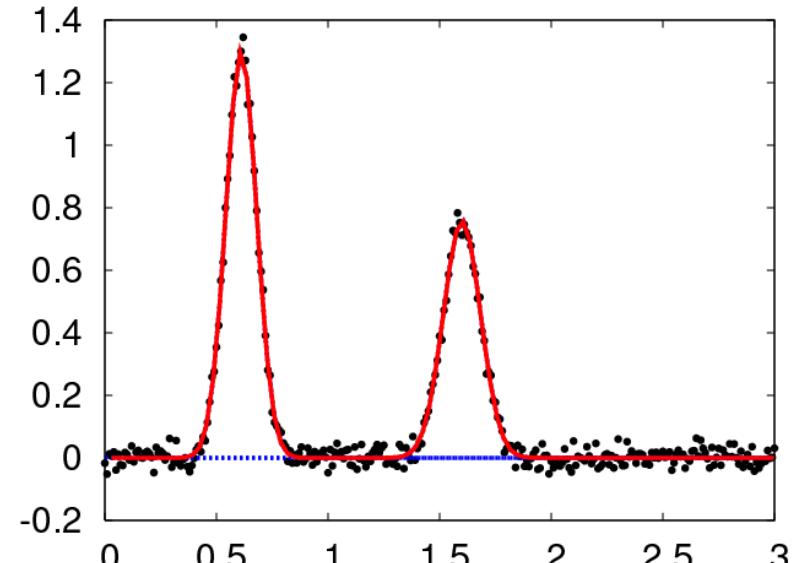
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより、スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

x_i : 入力 y_i : 出力

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

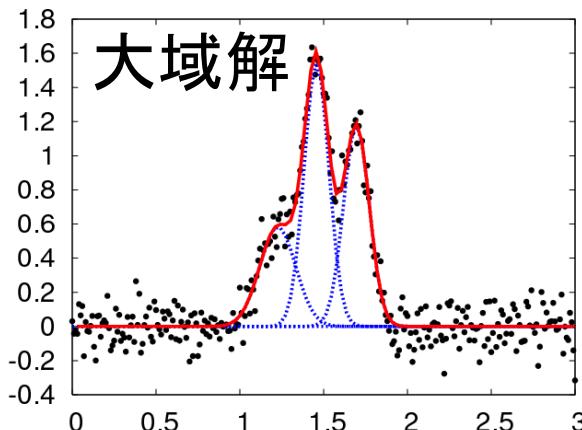
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \dots, K$$



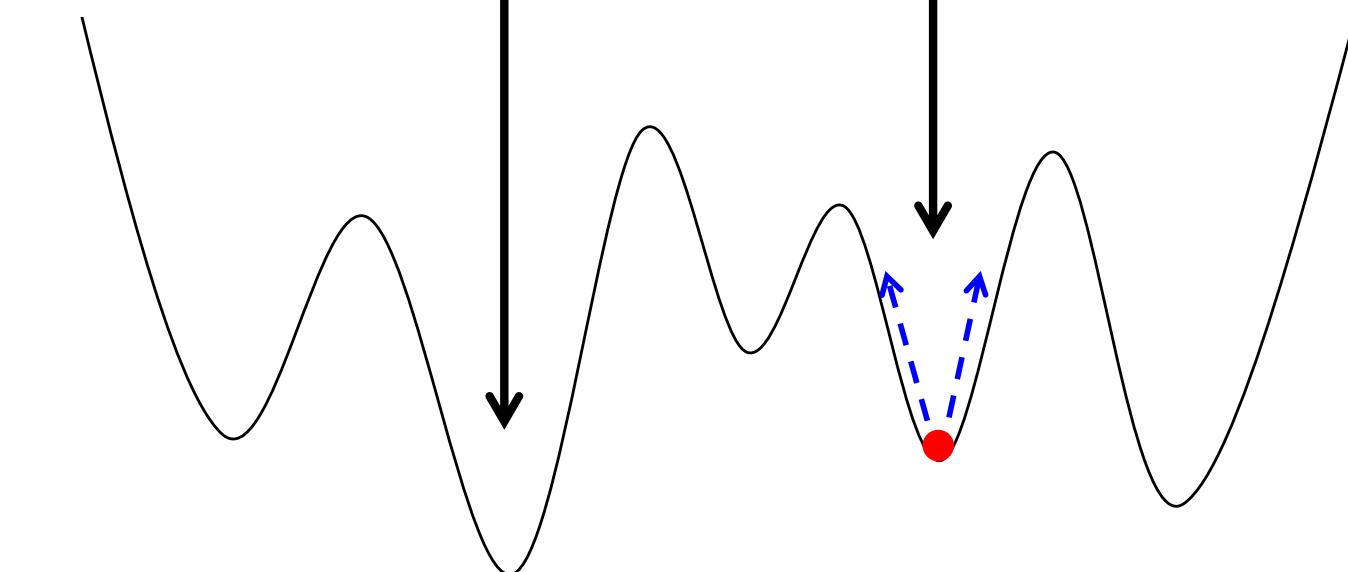
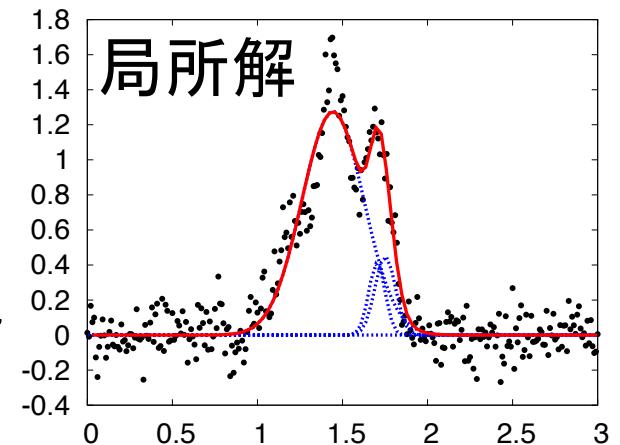
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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

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



<通常の最適化法>
e.g., 最急降下法



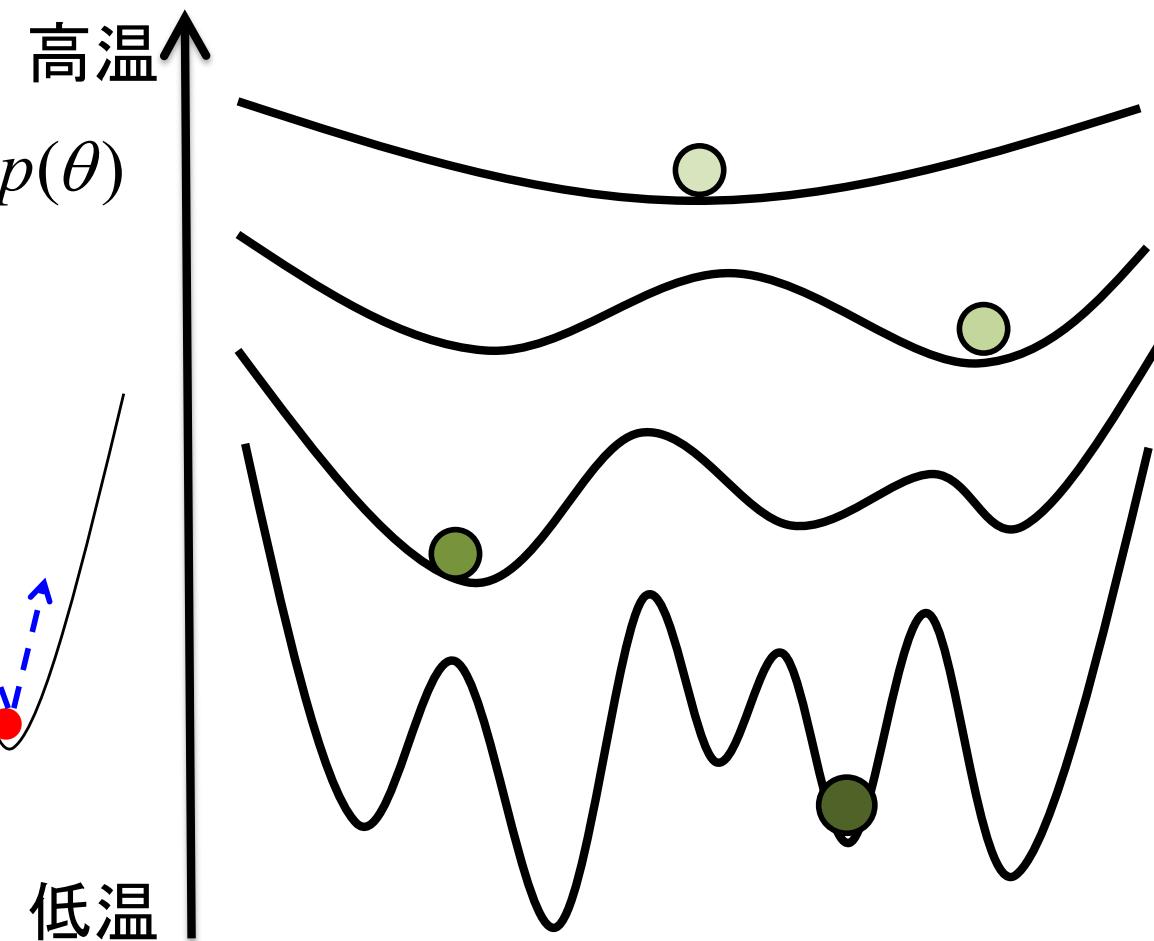
モンテカルロ法の適用 レプリカ交換モンテカルロ法

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).

モンテカルロ法の適用 レプリカ交換モンテカルロ法のアルゴリズム

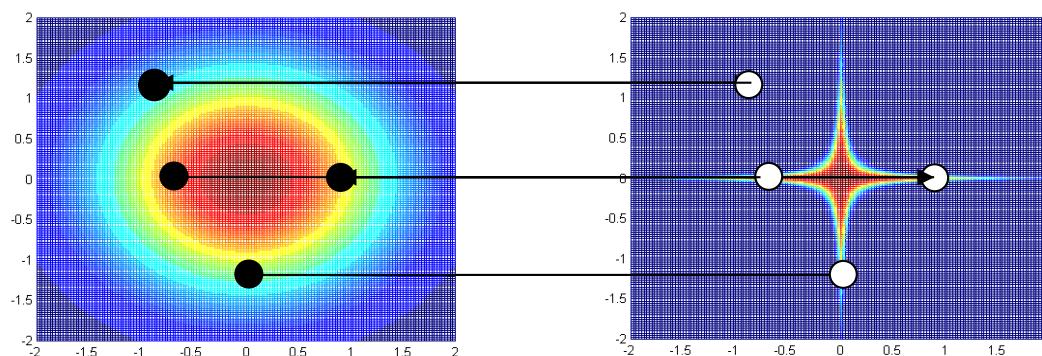
1. それぞれの確率分布について、メトロポリス法で状態の更新

$$\theta_l \Rightarrow \theta'_l$$

2. 隣り合った分布で状態の交換を行う。 $\{\theta_l, \theta_{l+1}\} \Rightarrow \{\theta_{l+1}, \theta_l\}$

$$u = \min(1, r) \quad r = \frac{p_{\beta_l}(\theta_{l+1}) p_{\beta_{l+1}}(\theta_l)}{p_{\beta_l}(\theta_l) p_{\beta_{l+1}}(\theta_{l+1})}$$

u : 状態の交換を行う確率



<Case1> r : 小

<Case2> r : 大

<Case3> $r \approx 1$

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

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

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

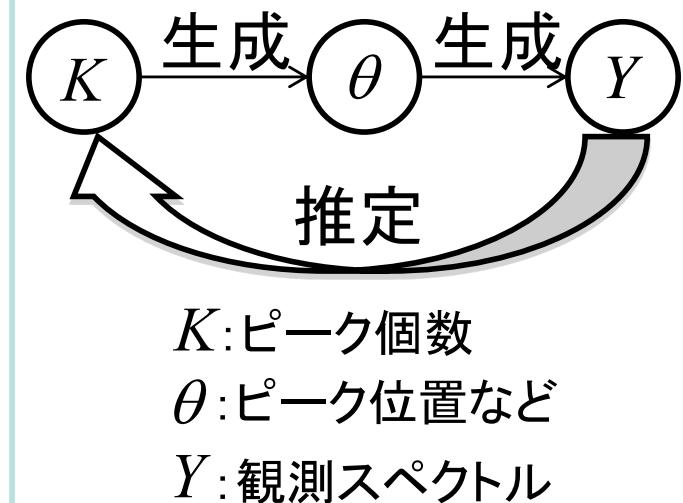
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

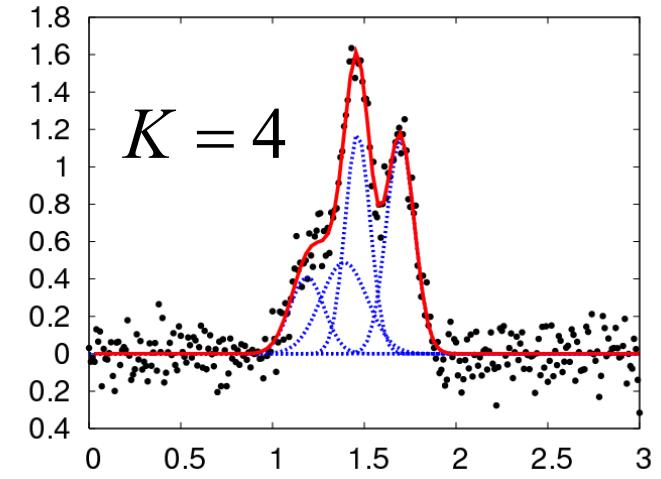
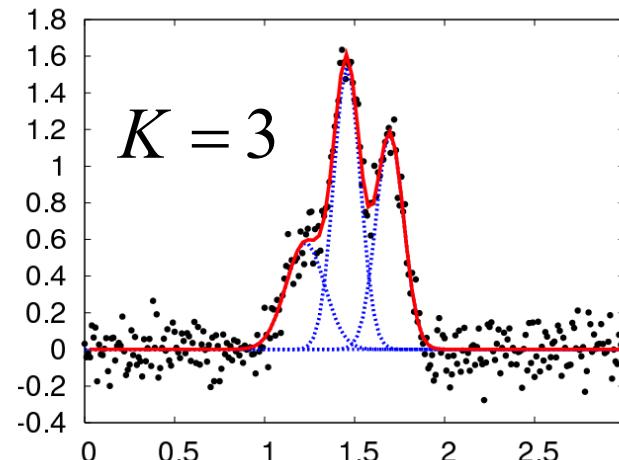
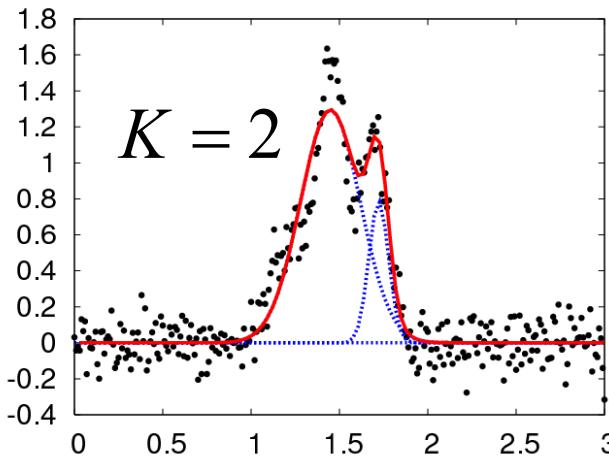
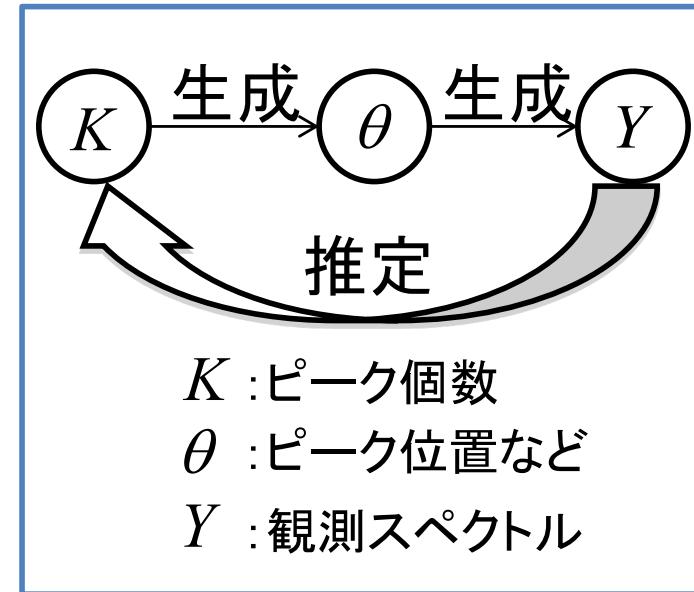
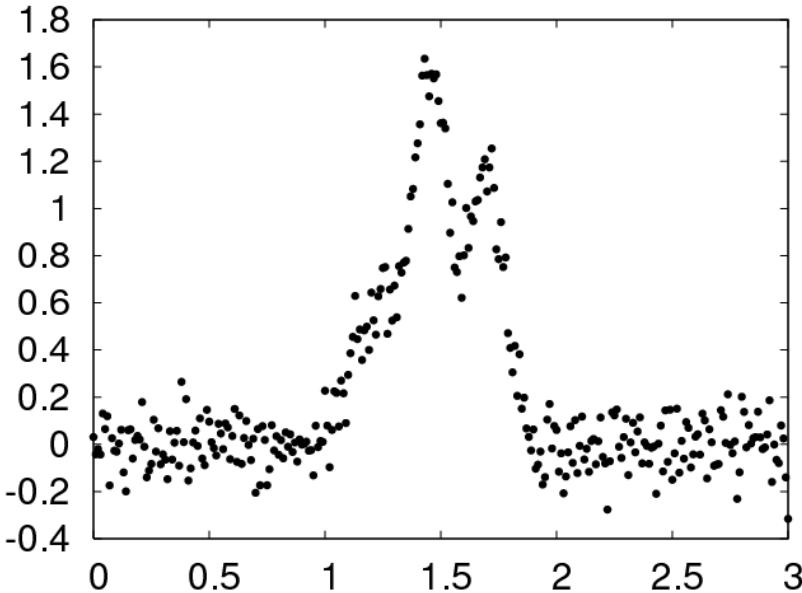
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

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

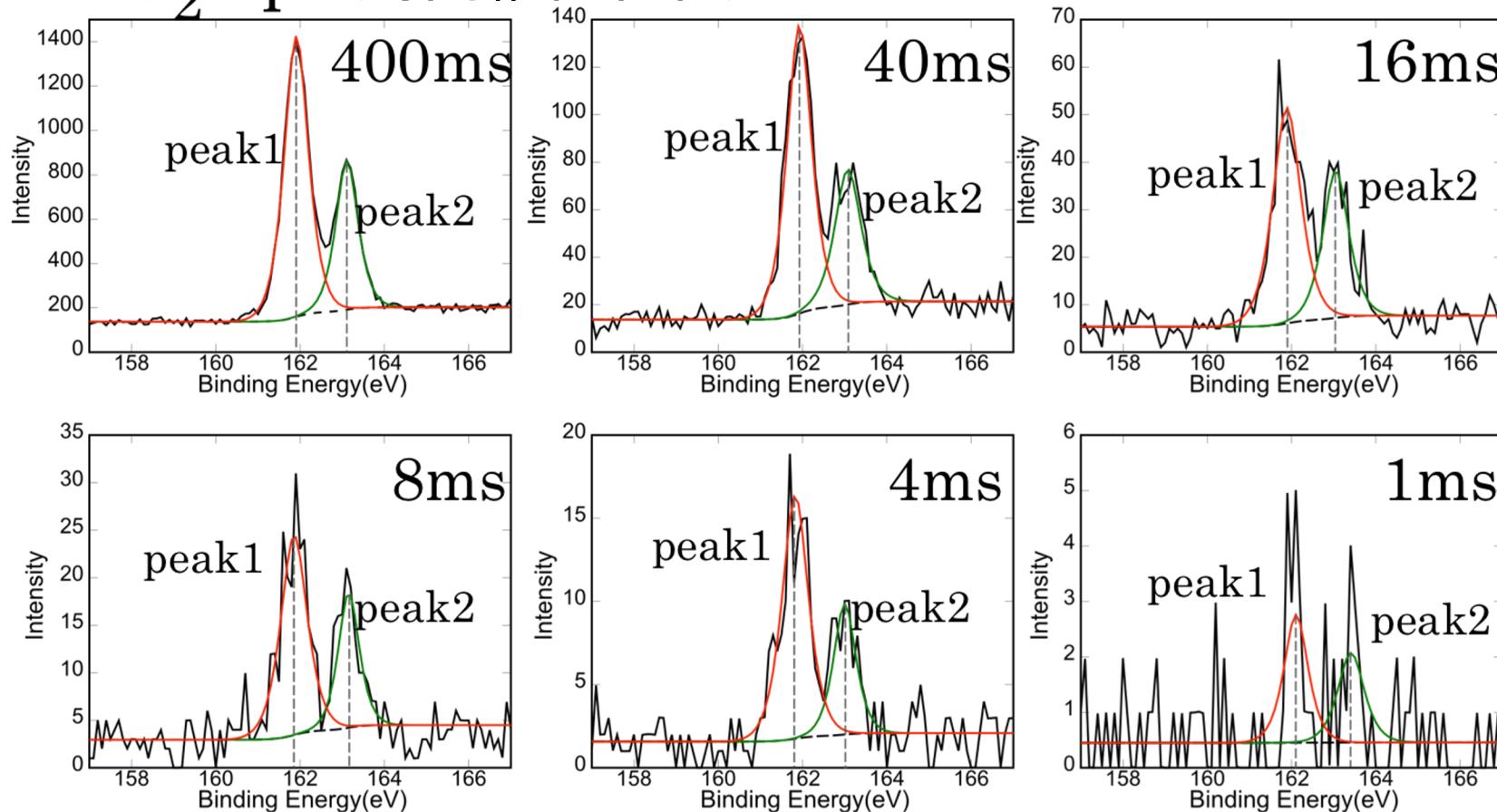


Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

計測限界の理論的取り扱い (4/9)

(Nagata *et al.* 2019)

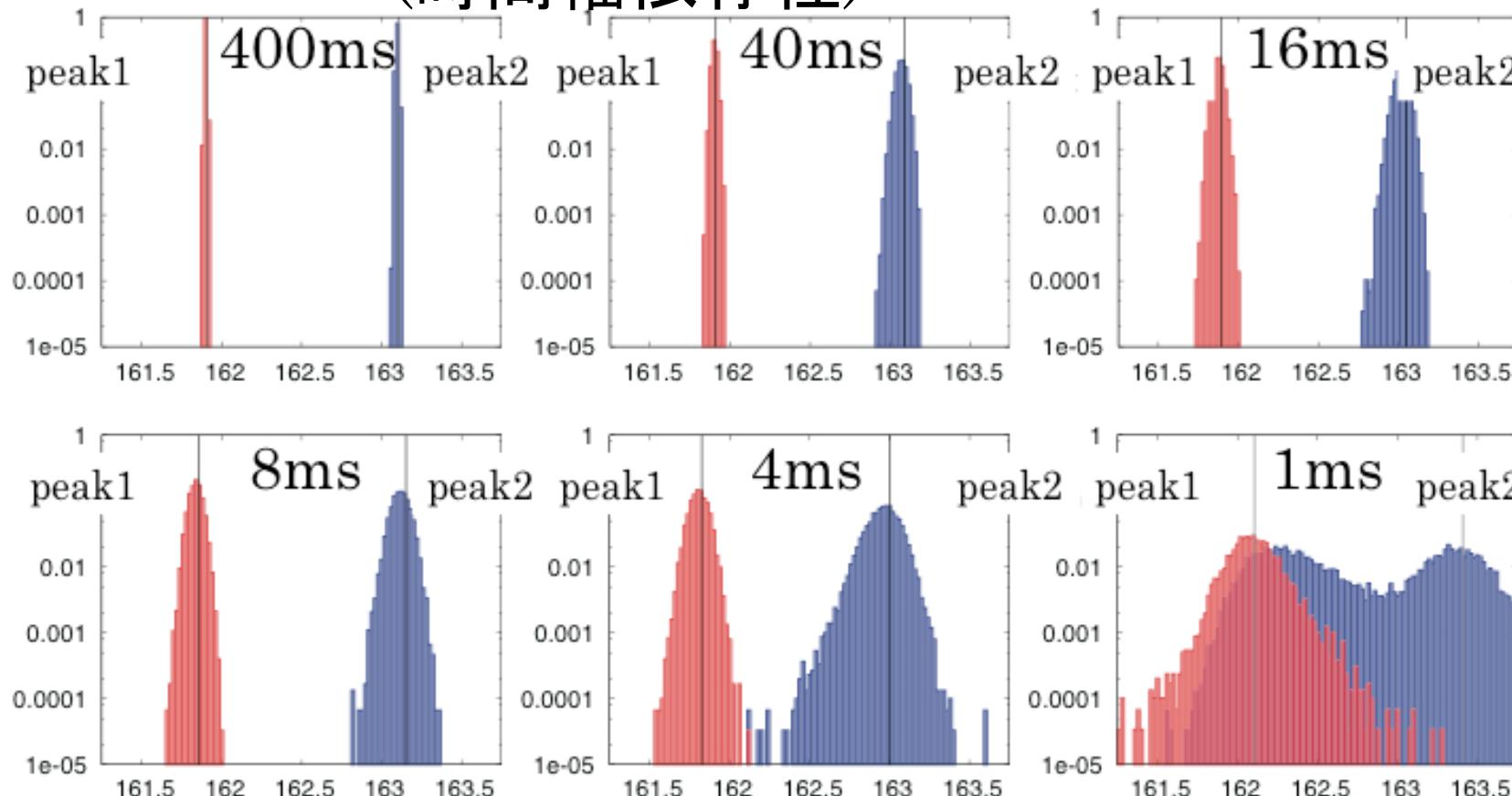
MoS₂ 2p (時間幅依存性)



計測限界の理論的取り扱い (6/9)

(Nagata *et al.* 2019)

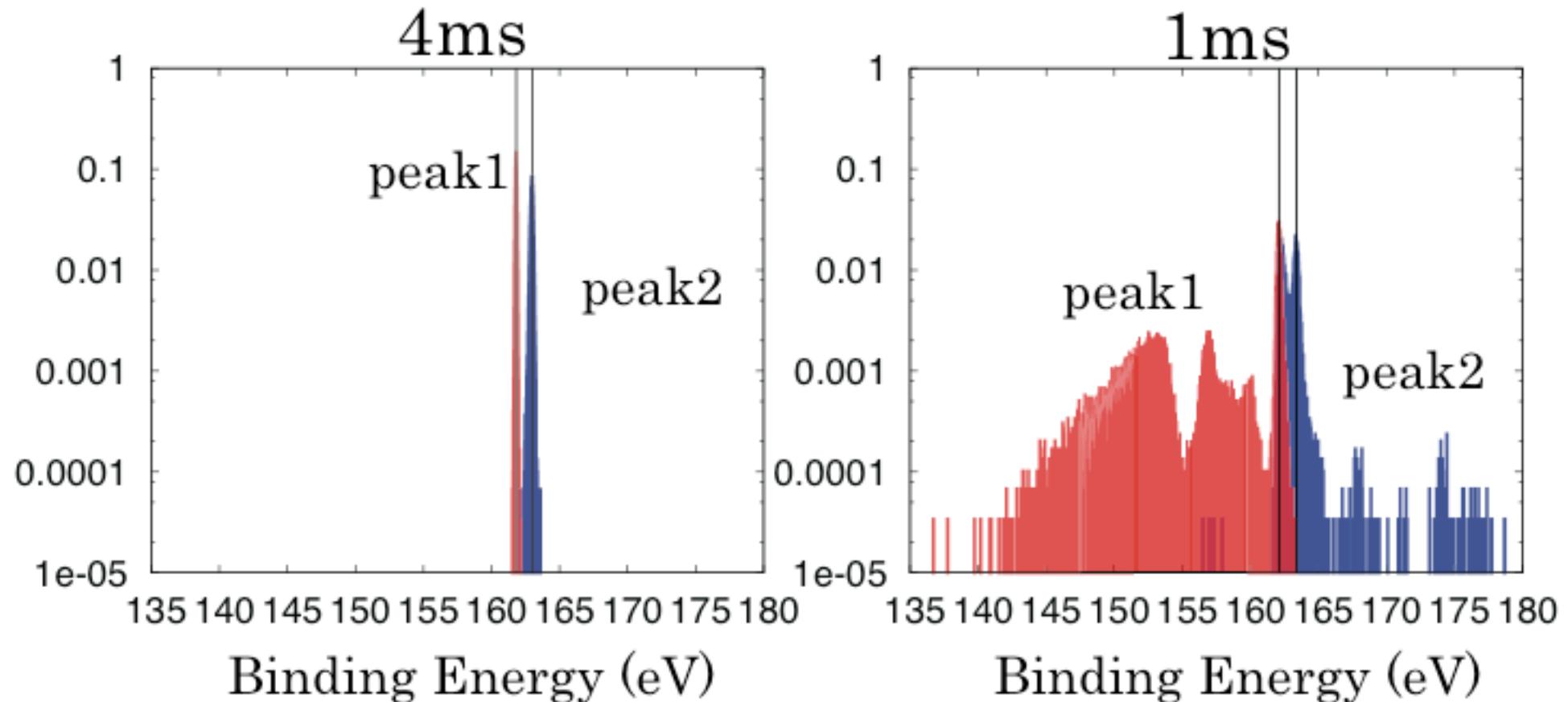
ベイズ計測: ベイズ推論によって,
ピーク位置のベイズ事後確率を計算
(時間幅依存性)



計測限界の理論的取り扱い (7/9)

(Nagata *et al.* 2019)

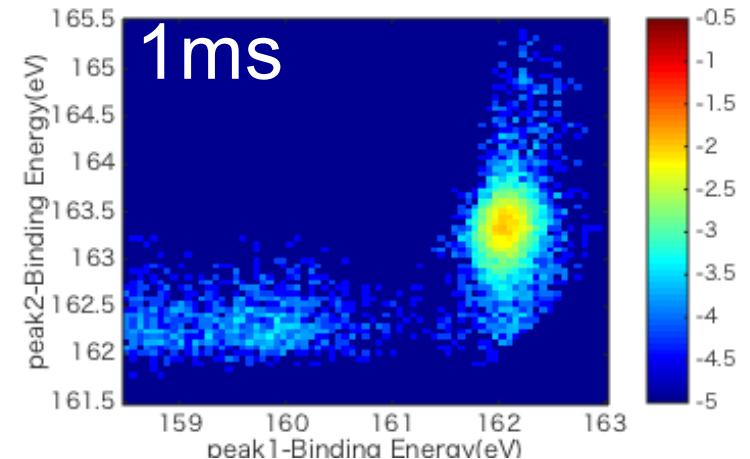
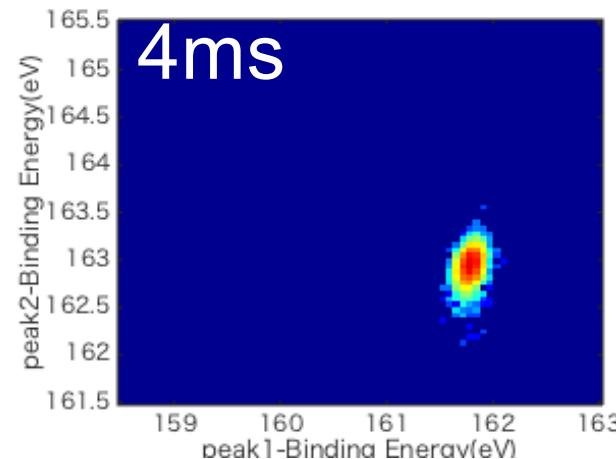
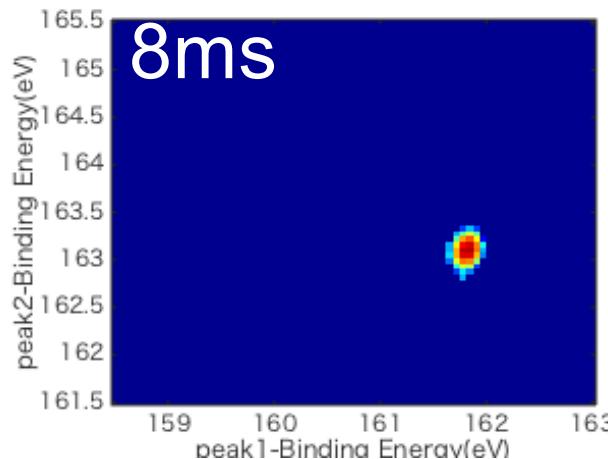
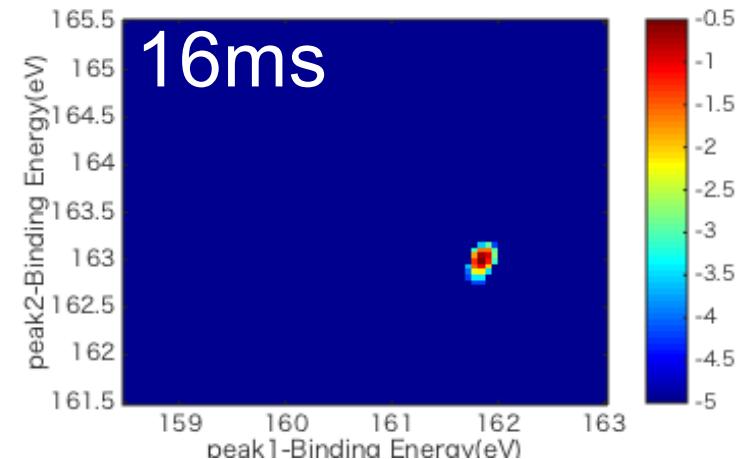
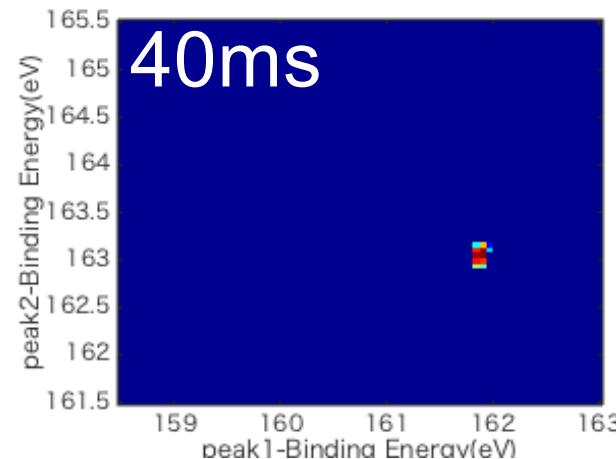
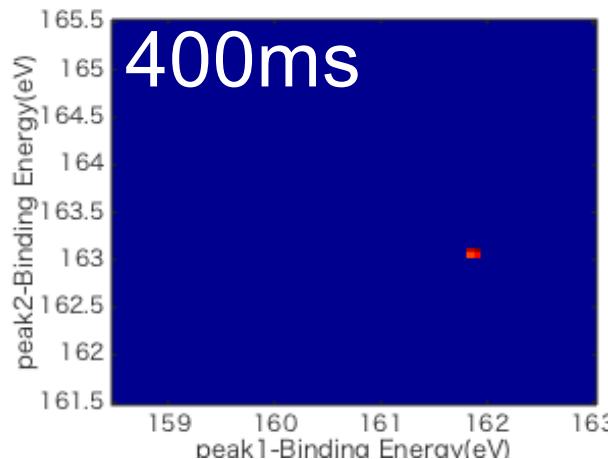
ベイズ計測: ベイズ推論によって,
ピーク位置のベイズ事後確率を計算
(時間幅依存性)



計測限界の理論的取り扱い (8/9)

(Nagata *et al.* 2019)

MoS₂ 2p



ここまで

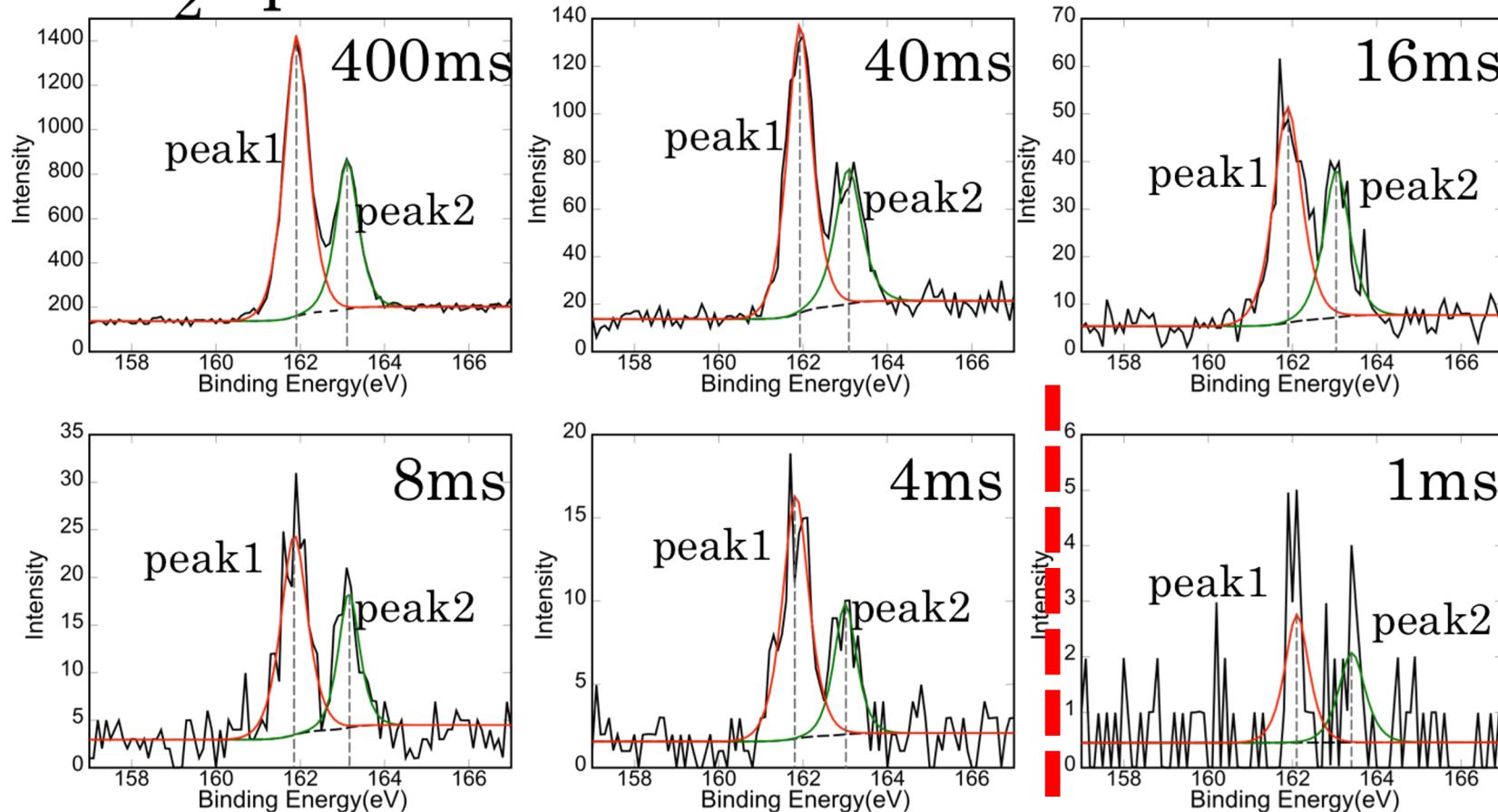
計測限界の理論的取り扱い (9/9)

(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

MoS₂ 2p (時間幅依存性)



Take Home Message

ベイズ計測のインパクト

従来法: ポストプロセスとしての解析

計測

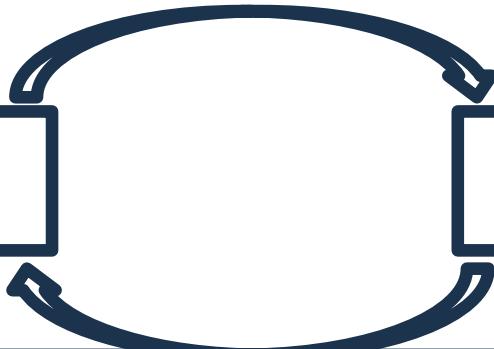


解析

提案法: 計測と解析の双方向的相互作用

計測

解析



放射光科学のパラダイムシフト
キャリアアップの千載一遇のチャンス

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ・ベイズ計測
 - ・計測科学の必須条件
 - ・ベイズ計測三種の神器
 - ・ $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- ・非線形系にするベイズ計測
 - ・スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、中性子非弾性散乱
- ・ベイズ計測とキャリアパス
- ・まとめと今後の展開

X線光電子および吸収分光スペクトル のベイズ統合

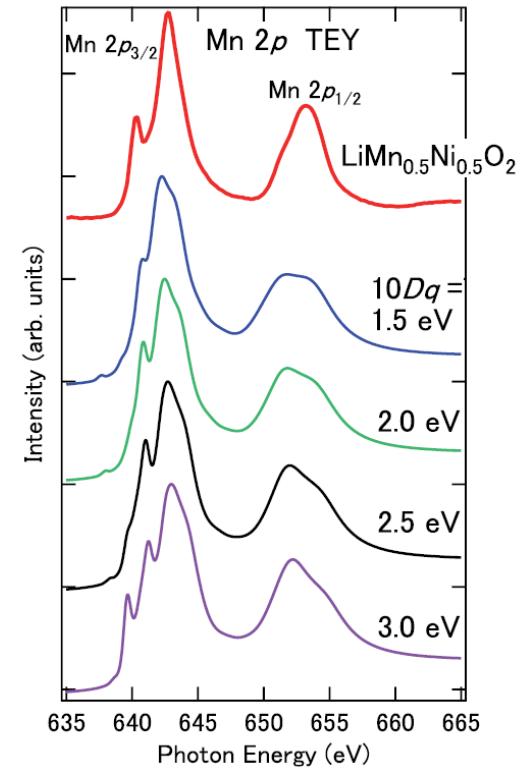
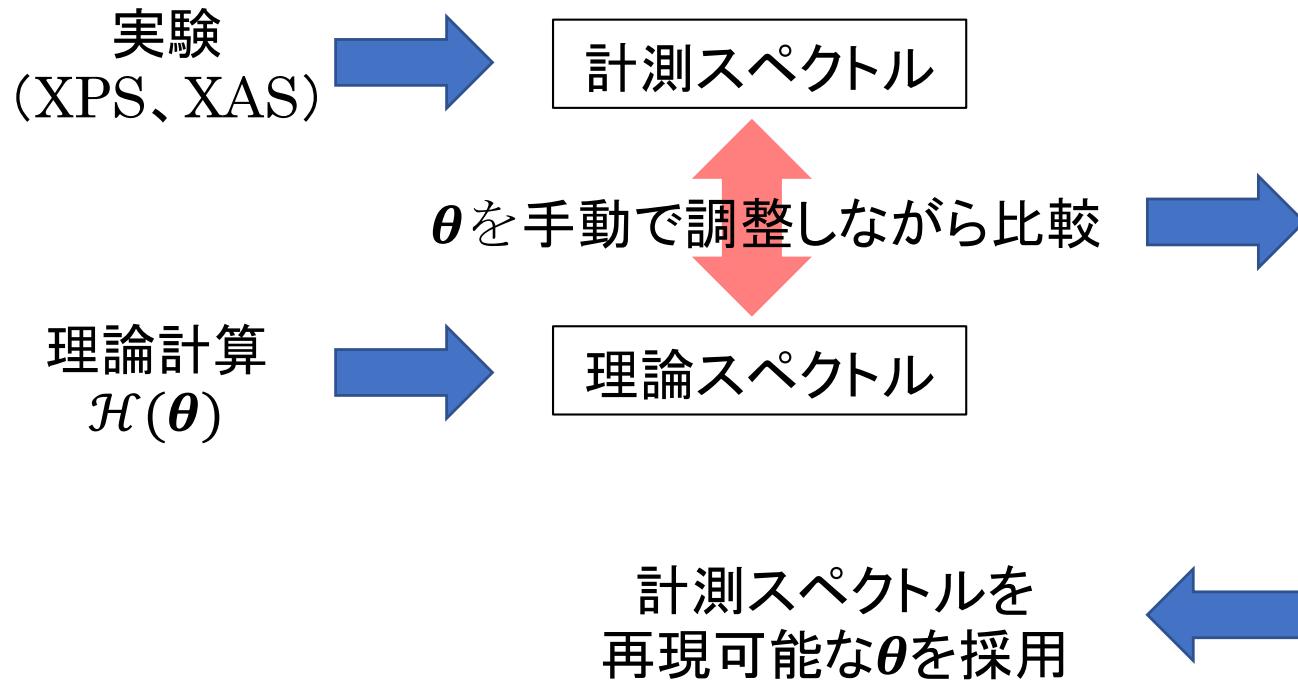
横山優一¹, 魚住孝幸², 永田賢二³, 岡田真人^{3,4},
水牧仁一朗¹

¹高輝度光科学研究センター, ²阪府大院工,

³物材機構, ⁴東大新領域

Yokoyama, Uozumi, Nagata, Okada, and Mizumaki. “Bayesian Integration for Hamiltonian Parameters of X-ray Photoemission and Absorption Spectroscopy”
JPSJ, 90, 034703, (2021)

XPSとXASの従来型の解析法

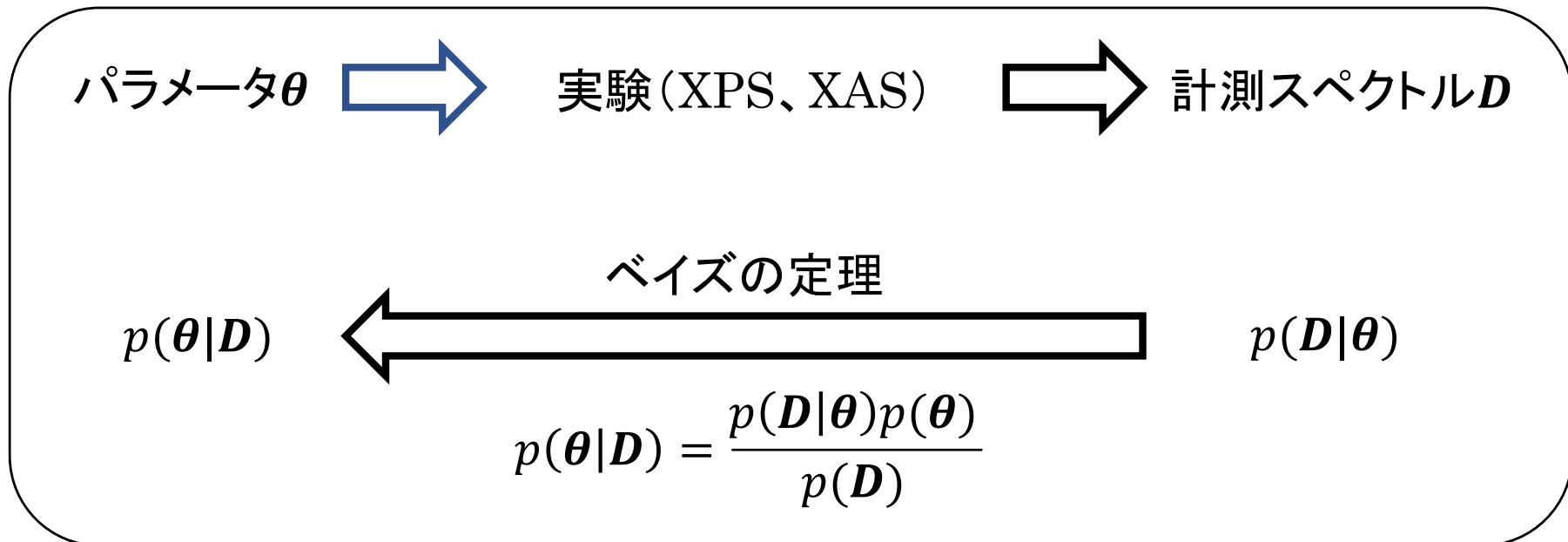


従来法の最大の問題点

- ・XPSとXASを同時解析する場合、客観的な統合手法が存在しない。

Y. Y et al., APL 107, 033903 (2015).

XPSとXASのベイズ推定による解析法



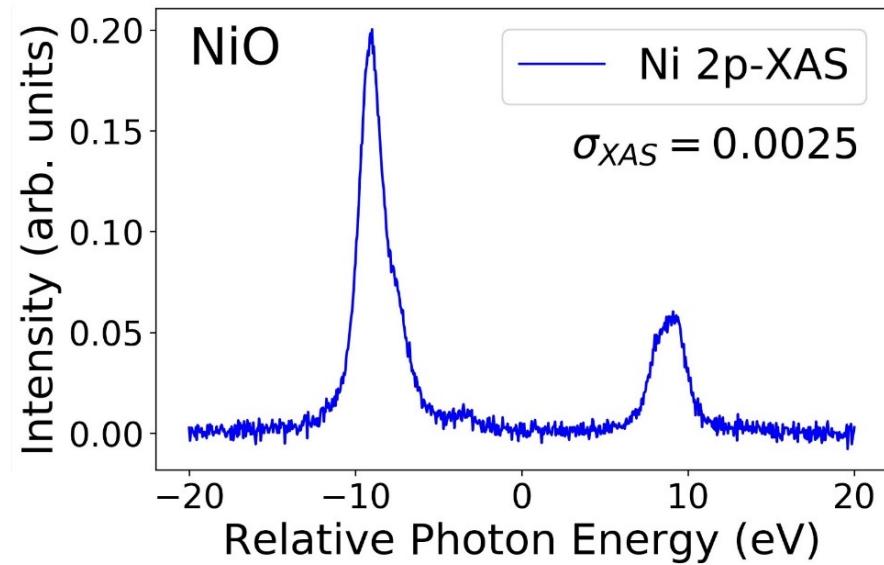
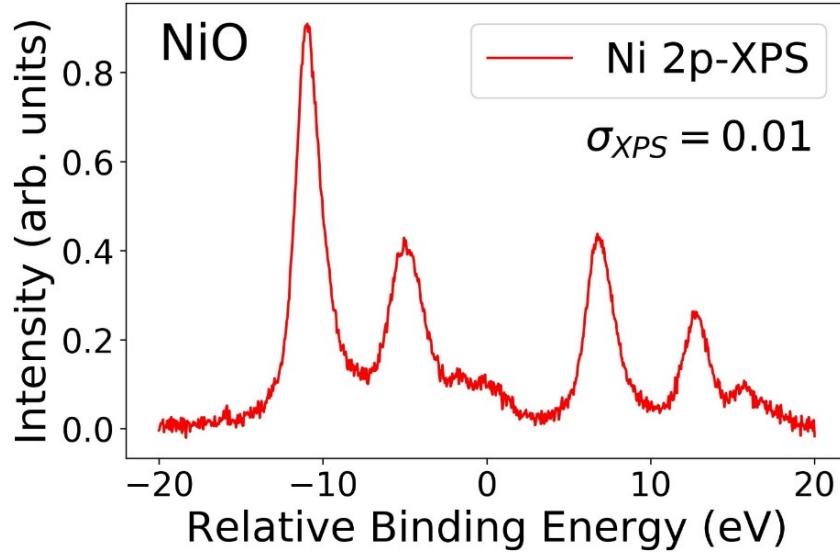
ベイズ計測

1. パラメータの事後確率推定
2. REMCの適用
3. XPSとXASにベイズ統合を適用

NiOを想定したXPSとXASの 人工データ

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\gamma,\sigma} \varepsilon_{3d}(\gamma) d_{\gamma\sigma}^\dagger d_{\gamma\sigma} + \sum_{m,\sigma} \varepsilon_P p_{m\sigma}^\dagger p_{m\sigma} + \sum_{\gamma,\sigma} \varepsilon_{p_L} a_{\gamma\sigma}^\dagger a_{\gamma\sigma} + \sum_{\gamma,\sigma} V(\gamma) (d_{\gamma\sigma}^\dagger a_{\gamma\sigma} + a_{\gamma\sigma}^\dagger d_{\gamma\sigma}) \\
 & + U_{dd} \sum_{(\gamma,\sigma) > (\gamma',\sigma')} (d_{\gamma\sigma}^\dagger d_{\gamma\sigma} d_{\gamma'\sigma'}^\dagger d_{\gamma'\sigma'}) - U_{dc} \sum_{\gamma,m,\sigma,\sigma'} d_{\gamma\sigma}^\dagger d_{\gamma\sigma} (1 - p_{m\sigma'}^\dagger p_{m\sigma'}) + H_{multiplet}
 \end{aligned}$$

Δ



ベイズ統合(ベイズ計測によるデータ統合) パラメータの事後確率

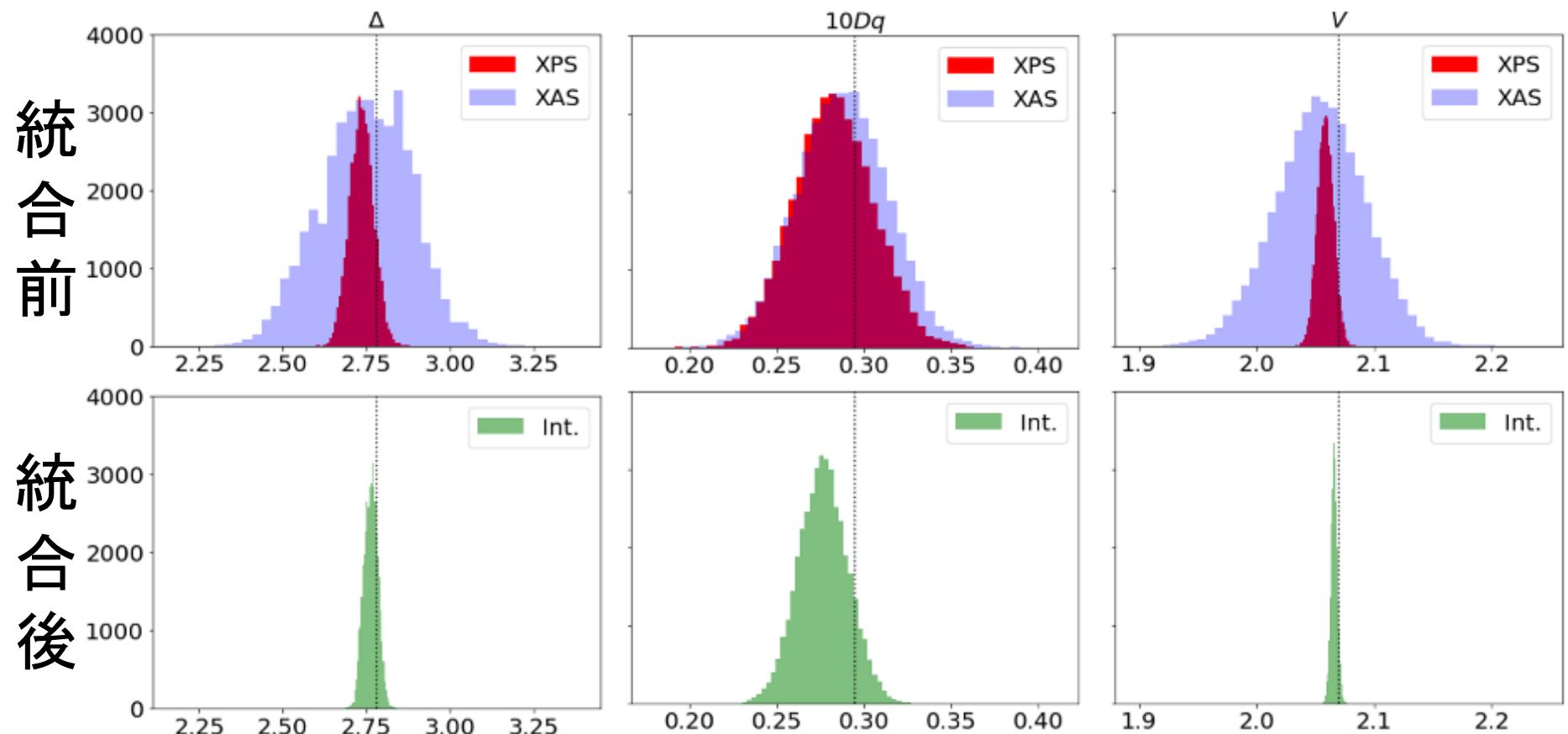
$$p(\Theta | \mathbf{D}_{XPS}, \hat{b}_{XPS}, \mathbf{D}_{XAS}, \hat{b}_{XAS}) \\ = \frac{p(\mathbf{D}_{XPS}, \hat{b}_{XPS}, \mathbf{D}_{XAS}, \hat{b}_{XAS} | \Theta) p(\Theta)}{p(\mathbf{D}_{XPS}, \hat{b}_{XPS}, \mathbf{D}_{XAS}, \hat{b}_{XAS})}.$$

$$E_{INT}(\Theta) \equiv E_{XPS}(\Theta) + \frac{N_{XAS}\bar{b}_{XAS}}{N_{XPS}\hat{b}_{XPS}} E_{XAS}(\Theta).$$

データ統合の誤差関数は
XPSとX ASの誤算関数の和

XPSとXASの重みはデータのみから自動決定
自由エネルギー差からデータ統合の可否も自動決定

ベイズ統合の結果



全パラメータで統合後の推定精度が向上
⇒データ統合に成功

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. メスバウア一分光
 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)

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ベイズ計測
 - 計測科学の必須条件
 - ベイズ計測三種の神器
 - $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
 - スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、**中性子
非弾性散乱**
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

中性子非弾性散乱のベイズ計測

片上舜¹, 坂本浩隆¹, 武藤健介¹, 永田賢二²,
岡田真人¹,

¹東大新領域、²物材機構

Sakamoto, Katakami, Muto, Nagata, Arima and Okada, "Bayesian Parameter Estimation Using Dispersion Relation Spectra", JPSJ, 89, 124002, (2020)

Katakami, Sakamoto, Nagata, Arima and Okada,
"Bayesian parameter estimation from dispersion
relation observation data with Poisson process"
PRE, 105, 065301(2022)

片上 舜

- 2021年 博士(理学)
東京大学・理学系研究科・
物理学専攻 岡田研究室
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」
- 2021年～東京大学・新領域
創成科学研究科 助教
 - ベイズ計測の数理解析
 - 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

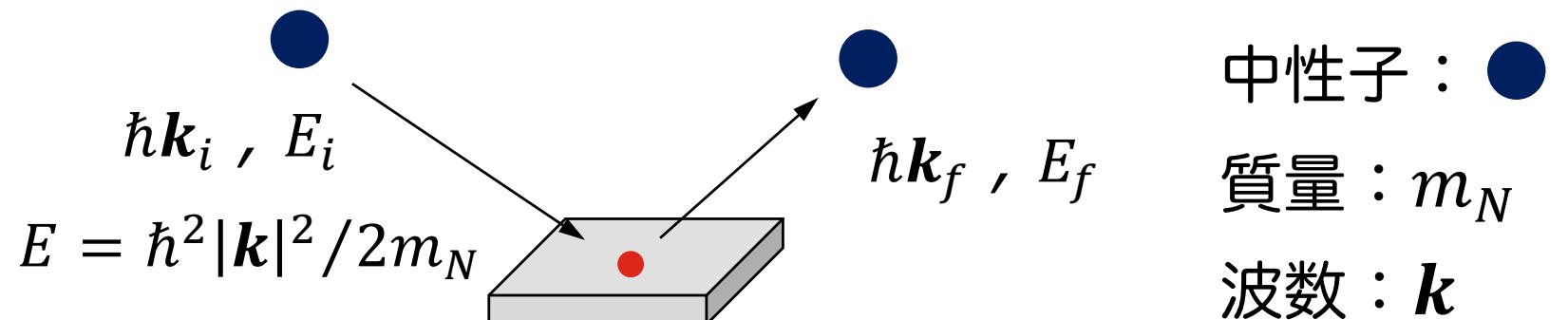


中性子非弾性散乱

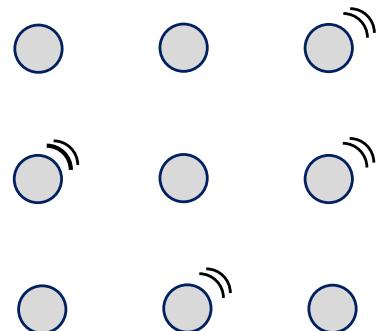
- ・ベイズ計測で取り扱う
- ・計測ノイズを通常のガウスノイズからポアソンノイズに変更
- ・通常のエネルギー一方向に1次元にカットして、スペクトル分解を行い、その結果からバネ定数を推定する二段推定のベイズ計測の提案
- ・中性子非弾性散乱から一気にバネ定数を推定するベイズ的階層モデリングによるベイズ計測の提案
- ・上記の二つの手法はARPESのベイズ計測と深く関係している。

非弾性中性子散乱実験：分散関係

- 試料に入射した中性子の、散乱前後の運動量とエネルギーの変化を観測し、分散関係を得る。



原子間の
ダイナミクス

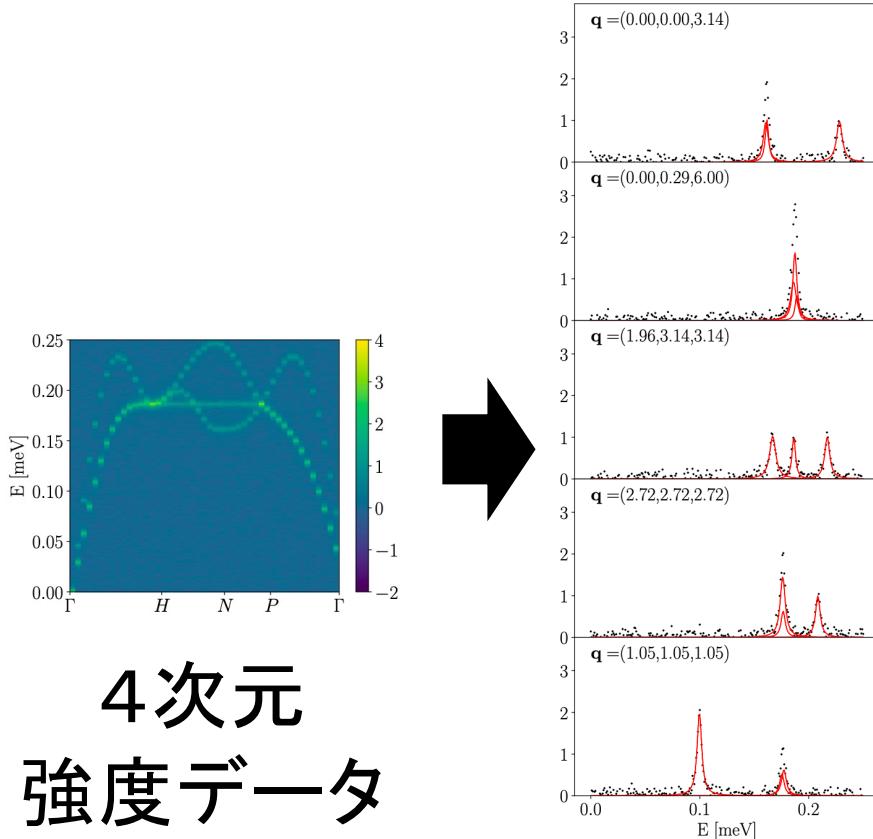


- ・銅酸化物高温超伝導体
- ・磁性体
- ・誘電体
- ・触媒
- ・熱伝材

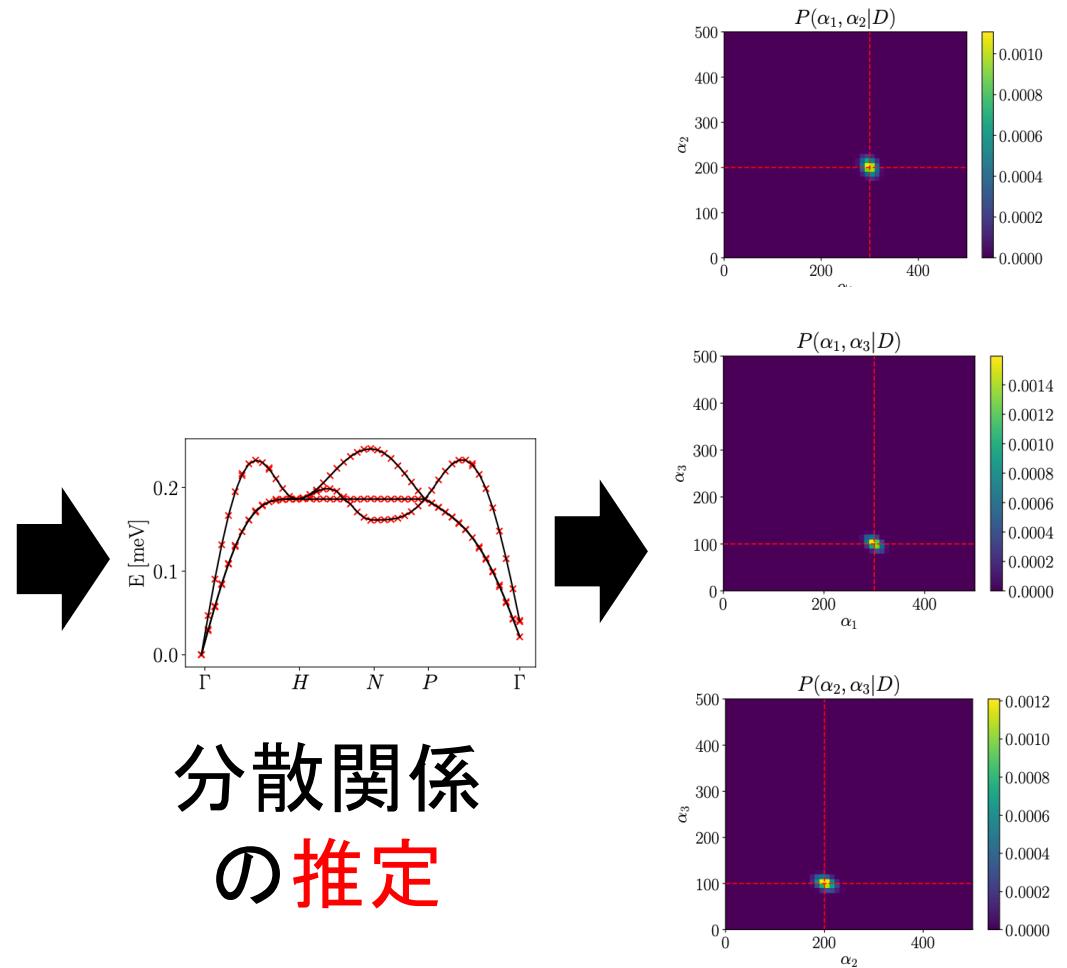
幅広い対象に活用される
重要な実験手法！

従来手法をベイズ的に解析（間接法）

従来の多段の解析手続きをそのままベイズ定式化



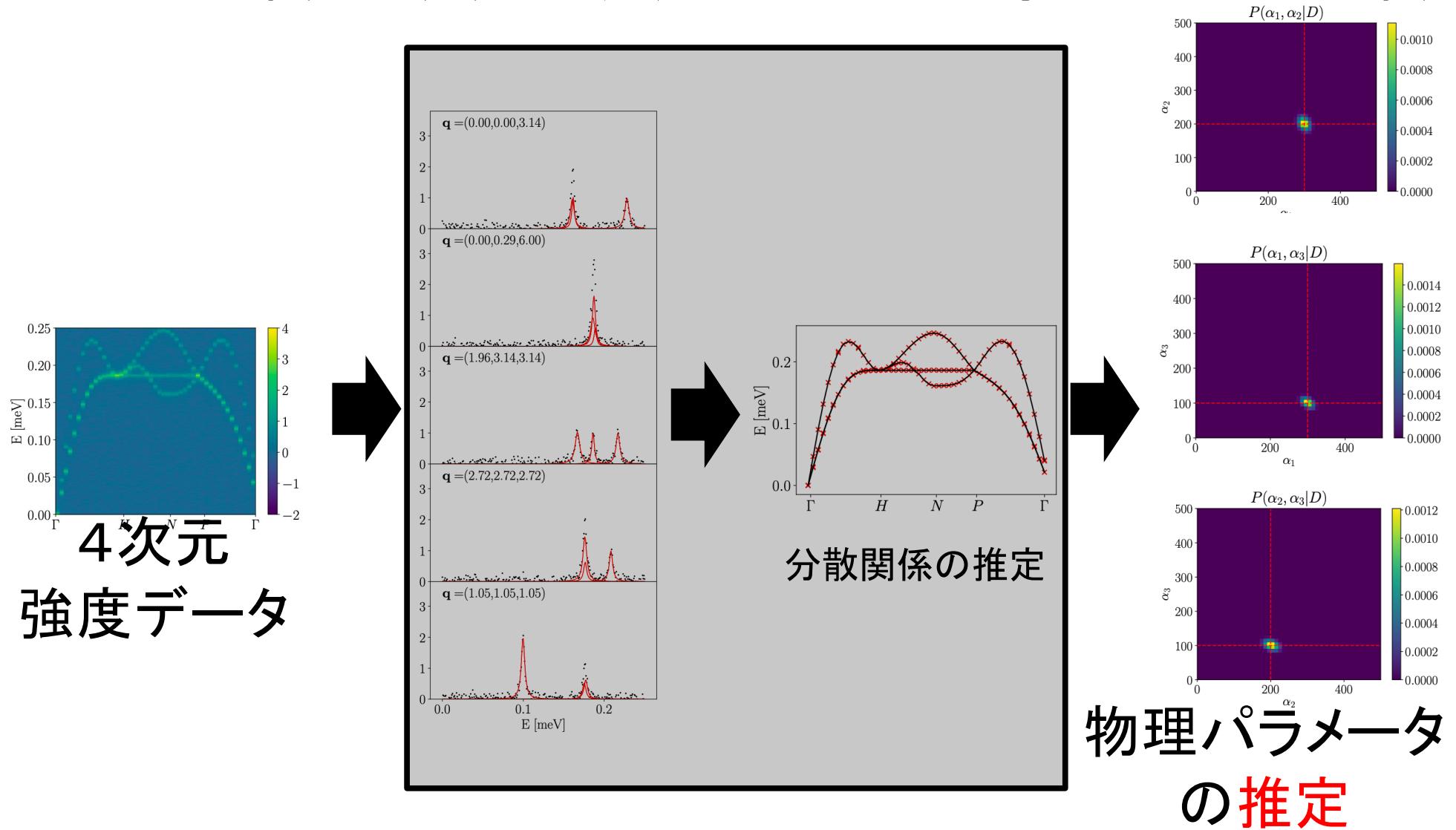
各運動量でスペクトル分解
(ピーク位置の推定)



物理パラメータ
の推定

ベイズ的階層モデリング(直接法)

中間での推定を決定せず、データから一撃でパラメータ推定



観測過程のモデル

ローレンチアンの重ね合わせによる強度モデル

$$I(\mathbf{q}_i, E_k; \boldsymbol{\alpha}, \gamma, \eta) = \sum_j \eta_{i,j} \phi_j(E_k, f_j(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{q}_i), \gamma_j)$$

基底の強度 $\eta_{i,j}$

幅 γ_j [meV]

$$\phi_j(E_k; \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{q}_j, \gamma_j) \propto \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_j^2}{(E_k - f_j(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{q}_i))^2 + \gamma_j^2}$$

中心: $f_j(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{q}) = \hbar\omega_j(\mathbf{q})$

エネルギー(分散関係)

ガウスノイズモデル

$$P(\mathbf{y} | \{I(E_i; \Theta)\}_i) = \prod_{i=1}^{N_E} \mathcal{N}(I(E_i; \Theta) | \sigma_{noise}^2)$$

σ_{noise} : 観測ノイズ

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{noise}^2}} \right)^{N_E} \exp \left[-\frac{N_E}{\sigma_{noise}^2} E_{\text{spd}}(\Theta) \right], \quad E_{\text{spd}}(\Theta) = \frac{1}{2N_E} \sum_{i=1}^{N_E} (y_i - I(E_i; \Theta))^2.$$

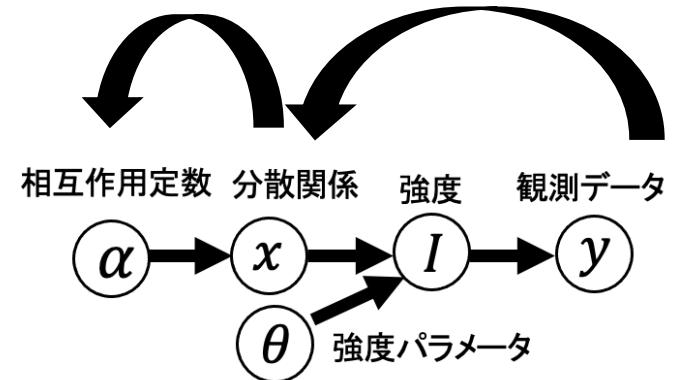
間接法の定式化

ガウスノイズを想定した
スペクトル分解

$$P(y|\{I(E_i; \Theta)\}_i) = \prod_{i=1}^{N_E} \mathcal{N}(I(E_i; \Theta), \sigma_{\text{REMC}}^2)$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\text{REMC}}^2}} \right)^{N_E} \exp \left[-\frac{N_E}{\sigma_{\text{REMC}}^2} E_{\text{spd}}(\Theta) \right],$$

$$E_{\text{spd}}(\Theta) = \frac{1}{2N_E} \sum_{i=1}^{N_E} (y_i - I(E_i; \Theta))^2.$$



ピーク位置(分散関係)を事後分布から推定

$$P(\Theta|D) = \frac{P(y|\{I(E_i; \Theta)\}_i)\psi(\Theta)}{P(D)}$$

推定ピークを用いてモデルパラメータの事後分布を推定

$$P(\{\hbar\hat{\omega}_{j,k}\}|\{\hbar\omega_{j,k}(\alpha)\})$$

$$= \prod_{j,k} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\text{peak}}^2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma_{\text{peak}}^2} (\hbar\hat{\omega}_{j,k} - \hbar\omega_{j,k}(\alpha))^2 \right]$$

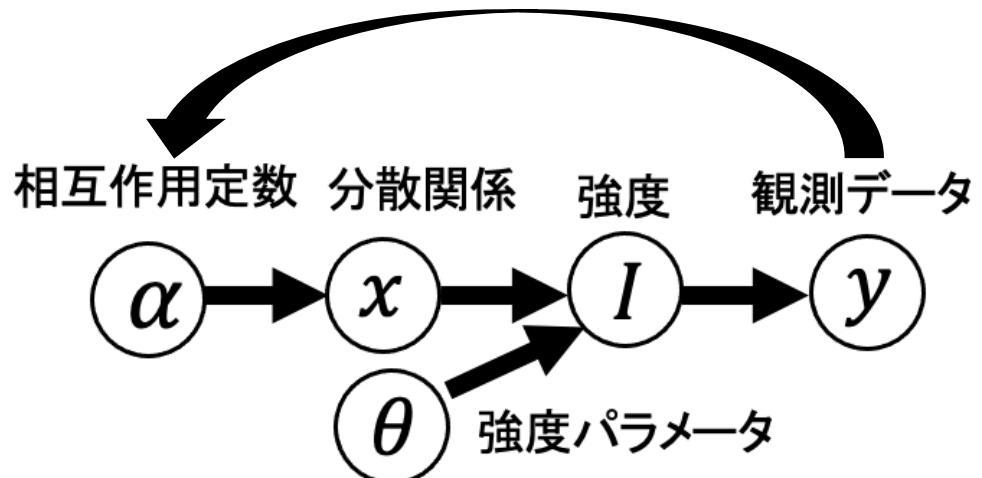
$$P(\alpha|\{\hbar\hat{\omega}_{j,k}\}) = \frac{P(\{\hbar\hat{\omega}_{j,k}\}|\{\hbar\omega_{j,k}(\alpha)\})\phi(\alpha)}{P(\{\hbar\hat{\omega}_{j,k}\})}$$

直接法の定式化

ガウスノイズを想定し

$$\begin{aligned} P(y|I(E_i, \mathbf{q}_i; \Theta), \sigma_{\text{REMC}}^2) \\ = \prod_i \mathcal{N}(I(E_i, \mathbf{q}_i; \Theta), \sigma_{\text{REMC}}^2) \\ = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\text{REMC}}^2}} \right]^N \exp \left[-\frac{N}{\sigma_{\text{REMC}}^2} E_{\text{direct}}(\Theta) \right], \end{aligned}$$

$$E_{\text{direct}}(\Theta) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (y_i - I(E_i, \mathbf{q}_i; \Theta))^2.$$



直接モデルパラメータを全て事後分布から推定

$$P(\Theta|D) = \frac{P(y|I(E_i, \mathbf{q}_i; \Theta))\varphi(\Theta)}{P(D)}$$

数値実験：設定

真のモデルパラメータ

相互作用定数: $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (300, 200, 100) [\text{N/m}]$

基底強度: $\eta = \{1, 1, 1\}$

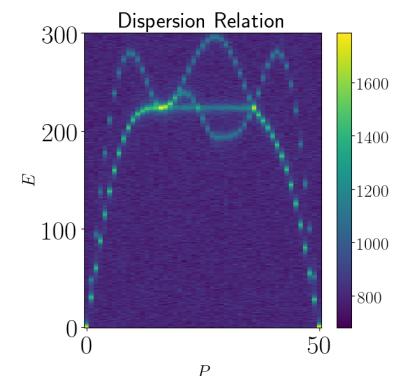
基底幅: $\gamma = \{0.0025, 0.0025, 0.0025\}$

観測データ領域

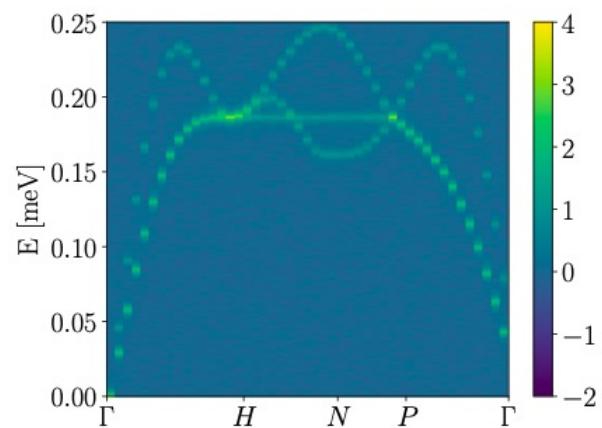
エネルギー空間 $[0, 0.25]$ を300分割,
運動量空間を50分割

$$\Gamma[0,0,0] \rightarrow H\left[0,0,\frac{2\pi}{a}\right] \rightarrow N\left[0,\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right] \rightarrow P\left[\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right] \rightarrow \Gamma[0,0,0]$$

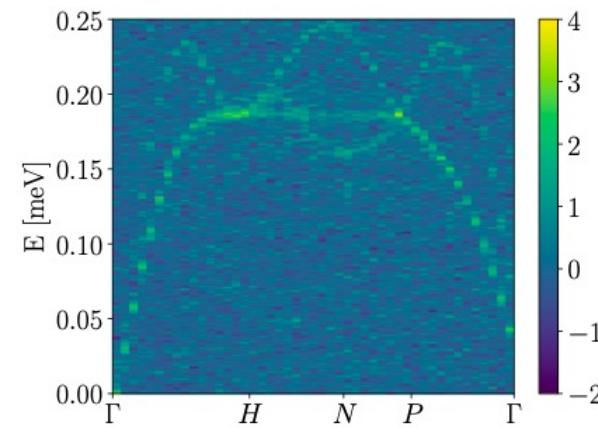
分散関係



数値実験：人工データ



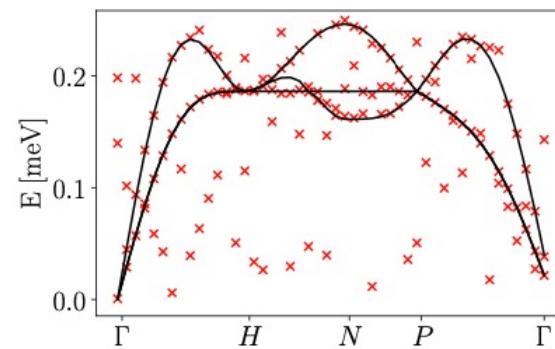
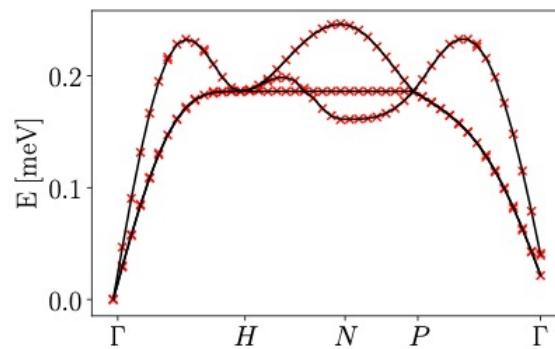
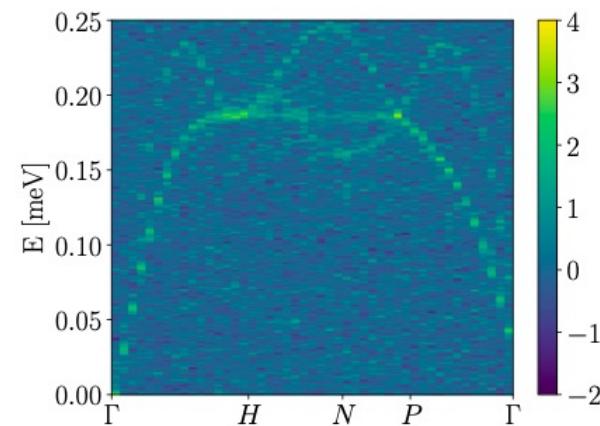
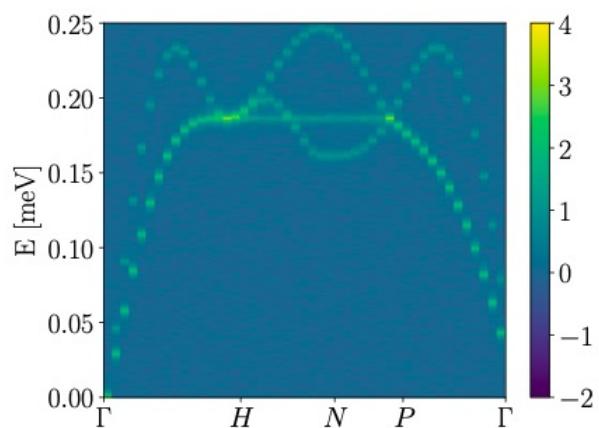
観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.1$



観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.5$

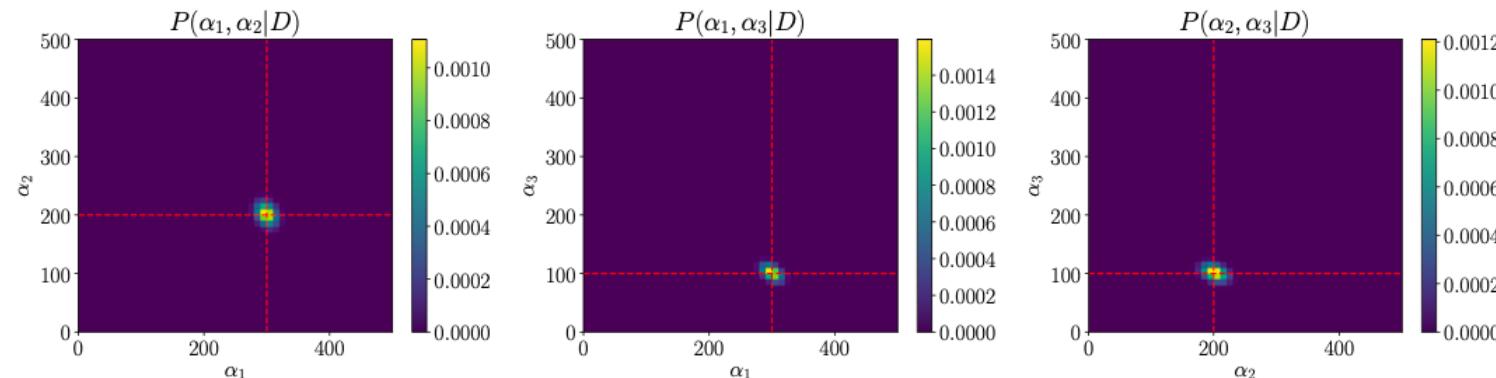
数値実験：分散関係推定(間接法)

観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.1$ 観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.5$

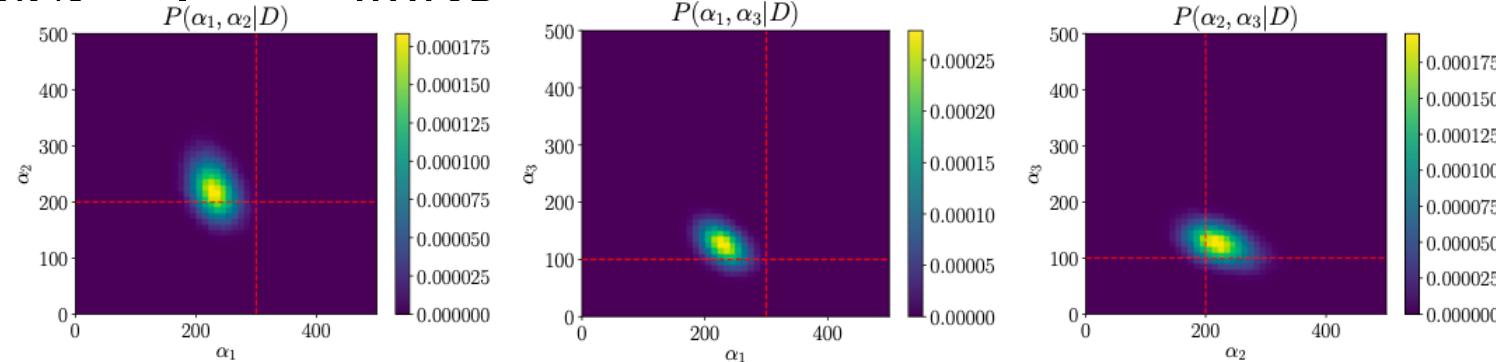


数値実験：パラメータ推定(間接法)

観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.1$



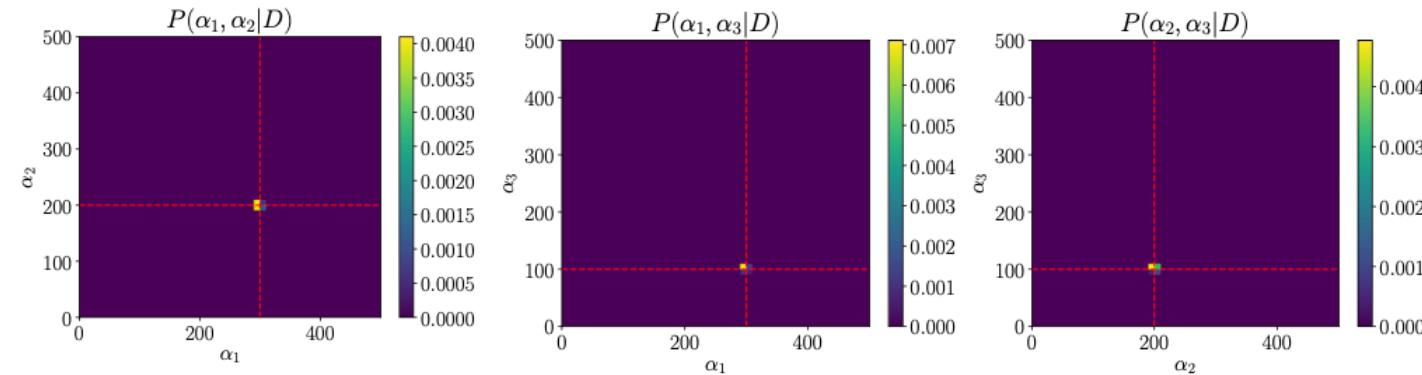
観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.5$



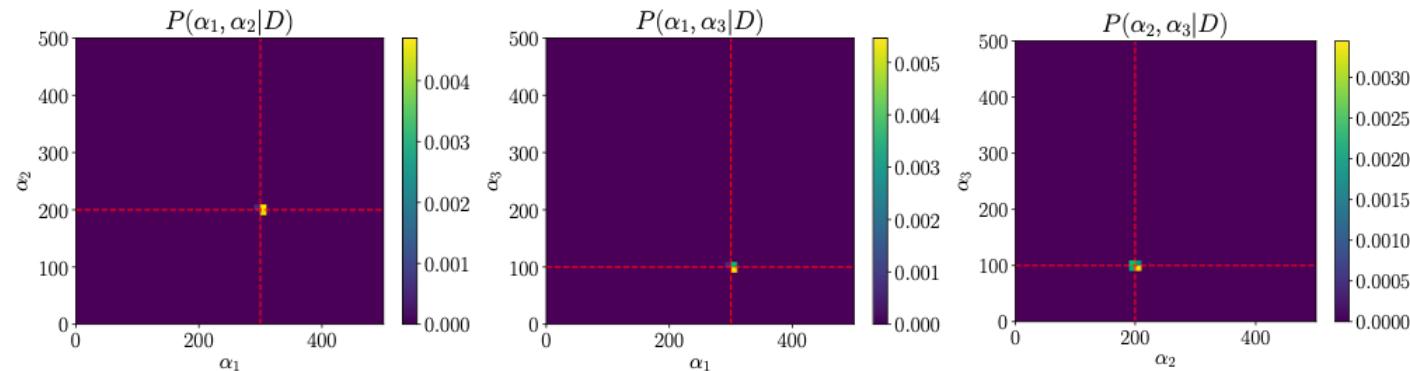
分散関係推定の影響が物理パラメータ推定に影響

数値実験：パラメータ推定(直接法)

観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.1$



観測ノイズ $\sigma_{noise} = 0.5$



中間推定量を固定した間接法に比べて推定性能が改善

数値実験: 計算時間の比較

	データ数	推定 パラメータ数	推定回数	実行時間	累計
直接法	15000	9	1	約570秒	約570秒
間接法 (ピーク推定)	300	9	50	約70秒	約3500秒
間接法 (相互作用 定数推定)	50	3	1		約7秒

間接法：複数回のベイズ推定が必要なため計算コスト大

直接法：全てのデータを用いて一撃で推定するため
1/10以下の時間で高速に実行可能

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ・ベイズ計測
 - ・計測科学の必須条件
 - ・ベイズ計測三種の神器
 - ・ $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- ・非線形系にするベイズ計測
 - ・スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合、中性子非弾性散乱
- ・ベイズ計測とキャリアパス
- ・まとめと今後の展開

ベイズ計測とキャリアパス (1/3)

アカデミア編

物理学科/各学科に
データ駆動科学一講座導入

理論物理

実験物理

素粒子論

物性理論

光物性

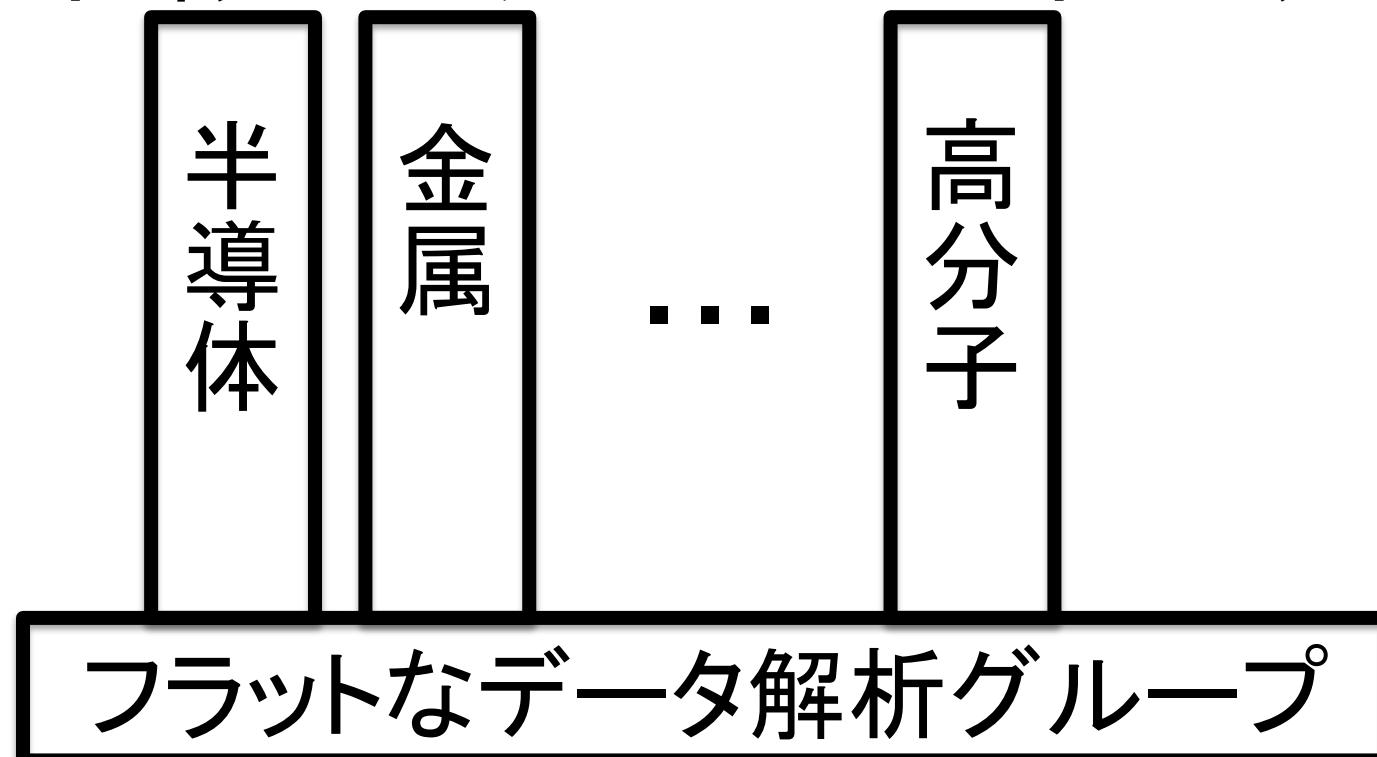
磁性物理

データ駆動科学講座

ベイズ計測とキャリアパス (2/3)

民間企業編

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。

ベイズ計測とキャリアパス（3/3）

放射光科学関連

- SPring-8全ンビームラインベイズ化計画により、アカデミアだけでなく民間企業でもベイズ計測を取り入れる動きが急速に進んでいる。
- SPring-8/JASRIのような従来の計測サービス部門シーザーと民間企業のニーズの乖離
- そこを埋めるために、新たな市場が形成
 - a.s.ist (東大岡田研の学生が起業)
<https://www.a-s-ist.com/>
- ベイズ計測で、**自分のポジションは、自ら創る。**

内容

- ・自己紹介
- ・SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ・データ駆動科学の三つのレベル：データ解析の学理
- ・ベイズ計測
 - ・計測科学の必須条件
 - ・ベイズ計測三種の神器
 - ・ $y=ax+b$ のベイズ計測の解析的取り扱い
- ・非線形系にするベイズ計測
 - ・スペクトル分解、XPS/ XASのベイズ統合中性子非弾性散乱
- ・ベイズ計測とキャリアパス
- ・まとめと今後の展開

まとめと今後の展望

- $y=ax+b$ を例にベイズ計測とベイズ計測三種の神器を解説。一般的な非線形の計測の紹介
- ベイズ計測の放射光科学への導入が大きなビジネスチャンス。
- ベイズ計測の普及戦略としてのSPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 自然科学全般を取り扱うことができるデータ駆動科学の枠組み(三つのレベル)の紹介
- 物理学科/各学科にデータ駆動科学ー講座導入
- 民間企業のR&D組織の新陳代謝を加速
- 自らのポジションは、自ら創る。

Take Home Message

ベイズ計測のインパクト

従来法: ポストプロセスとしての解析

計測

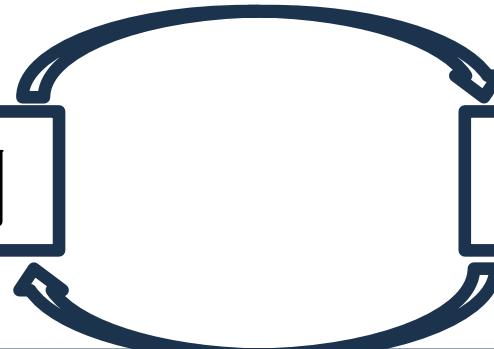


解析

提案法: 計測と解析の双方向的相互作用

計測

解析



放射光科学のパラダイムシフト
キャリアアップの千載一遇のチャンス

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. OJT的に各課題に取り組む

初段に教えを乞うても初段になれず
五段の教えを乞えば初段になれる