ベイズ計測の基礎から展開へ: 研究スキルの獲得からキャリアプランまで

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
okada@edu.k.u-tokyo.ac.jp

本講演のスライドは岡田研HPにて公開予定

https://mns.k.u-tokyo.ac.jp/lab.html#overview

自己紹介

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

自己紹介のまとめ

- 大学と大学院修士課程で(物性)物理学の教育研究
- (株)三菱電機で半導体レーザーの量産スタッフ
- 大学院博士課程、助手、ERATO研究員でニューラルネット/情報統計力学/計算論的神経科学の研究
- 東大新領域複雑理工で、脳科学、化学、地球科学など多様な自然科学と出会い、それらを普遍的取り扱うデータ駆動科学を創設。

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

要素還元主義と階層的自然観

- 要素還元主義
  - 物理学の法則の獲得をよりミクロな方向に進め、得られた基礎方程式からの演繹で、世界を理解する言う立場
- 階層的自然観
  - 自然を各階層に分離して、階層ごとに研究することで、世界を理解する立場
- 以下の状況から、階層的自然観が正しいと言わざるを得ない
  - 第一原理計算の実情
  - 愛情などの高度な認知機能の解明

階層的自然観と実験データ解析

- 階層的自然観の立場では、各階層の数理モデルの構築のためは、ミクロレベルからの演繹を諦めたために、その帰結として、実験データを用いる必要がある。
- 実験データの解析には、その現象を説明する数理モデルがないかあるかで、二つの戦略が必要である
- 実験データを解析するデータ駆動科学の数理情報学的枠組みは、その二つに対応して、スパースモデリング(SpM)とベイズ推論の二つが用意されている

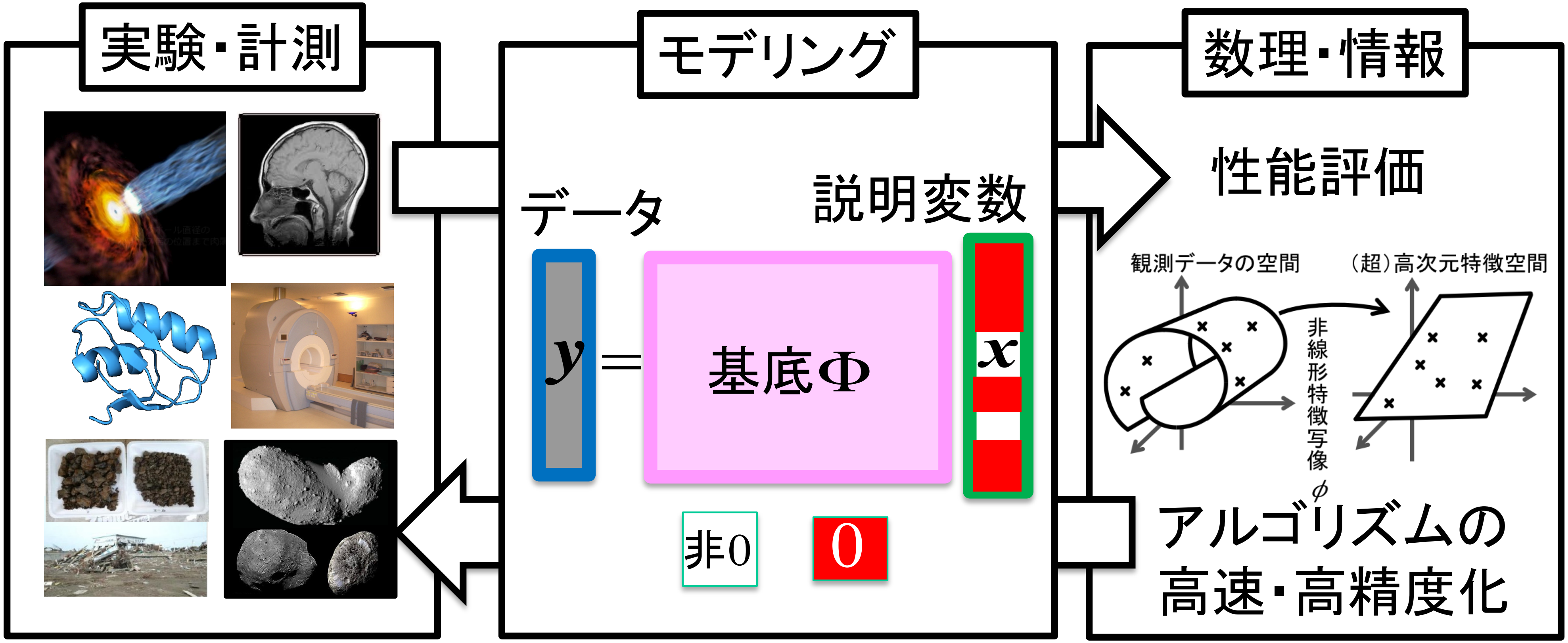
物理学とスパースモデリング(SpM)

- 古典力学や量子力学の前段階で、スパースモデリング(SpM)は活用されている歴史
- ニュートン力学に対するKeplerの法則
  - 公転周期Tと公転半径R
- 前期量子論
  - プランクの輻射の理論、アインシュタインの光量子仮説
- これらは全て、そのレベルを記述する数理モデルがない段階で、実験データから特徴量をヒトが決め、その特徴量を用いて、現象を定量的に記述する現象論である

新学術領域研究　平成25～29年度
スパ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?



階層的自然観での普遍的な構造
ベイズ計測の必然性

現在考察している階層

切断!!

ミクロな階層

- 数理モデルのフリーパラメータの決定精度が、そのモデルの正しさ証明つながる
- ミクロなレベルと分断されているため、一般に複数の数理モデルが存在する

ベイズ計測の必然性(パラメータ推定、モデル選択)

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

計測科学の必須条件

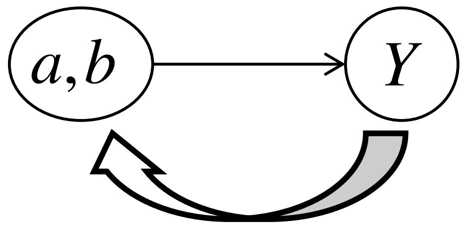
- 数理モデルのフリーパラメータを決める系統的枠組み
- 複数モデルをデータだけから選択する系統的枠組み
- 同一物質に対する複数の計測データを統合する系統的枠組み

ベイズ計測とは?

ベイズ推論

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p\left(a,b\mid Y\right)$: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.

$p\left(a,b\right)$: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

ベイズ計測三種の神器

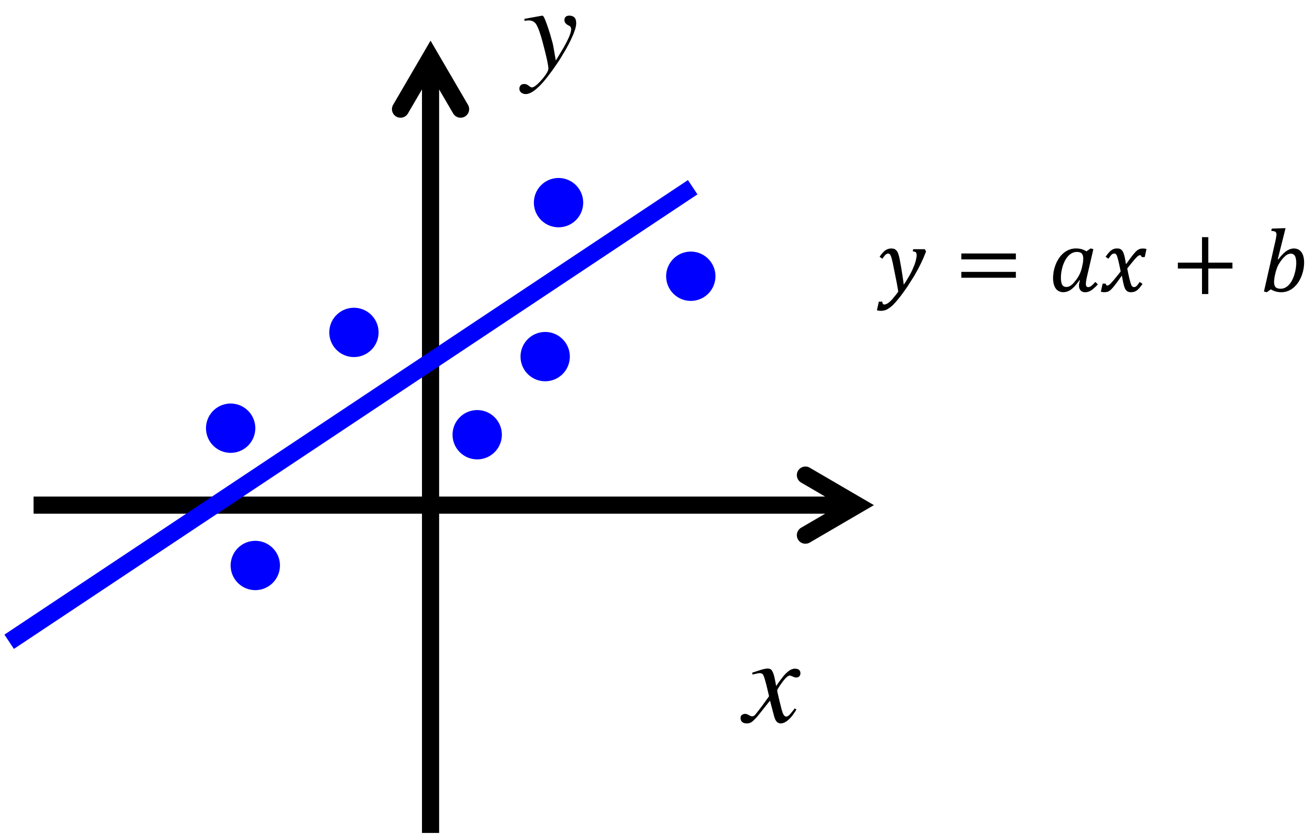
- パラメータの事後確率推定: 数理モデルのフリーパラメータを決める系統的枠組み
- ベイズ的モデル選択: 複数モデルをデータだけから選択する系統的枠組み
- ベイズ統合: 同一物質に対する複数の計測データを統合する系統的枠組み
  - ベイズ統合の説明は水牧先生@熊大の招待講演

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

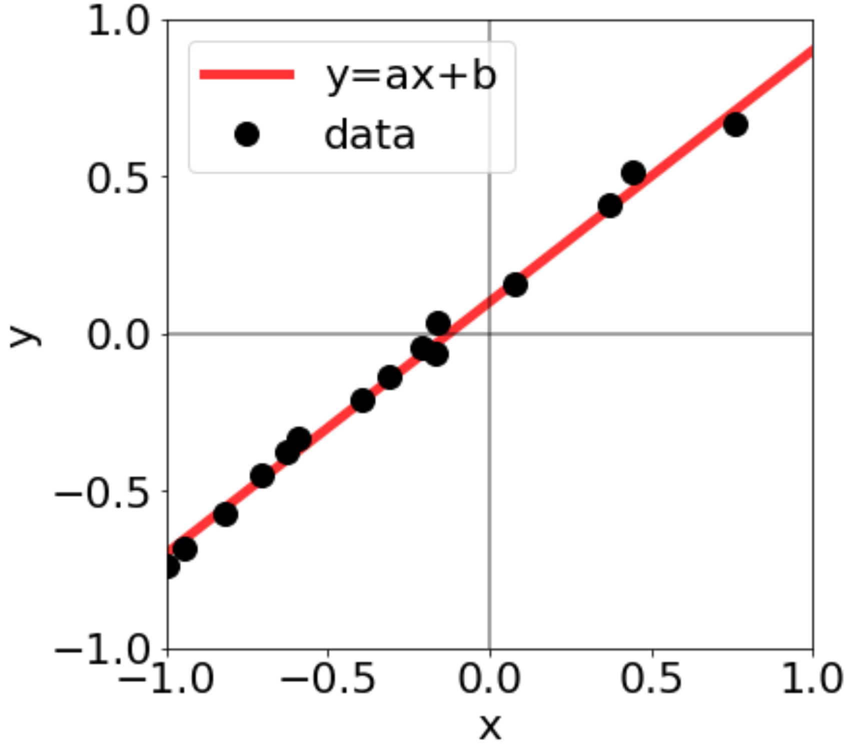
ベイズ計測の利点
$y=ax+b$の取り扱いを通じて

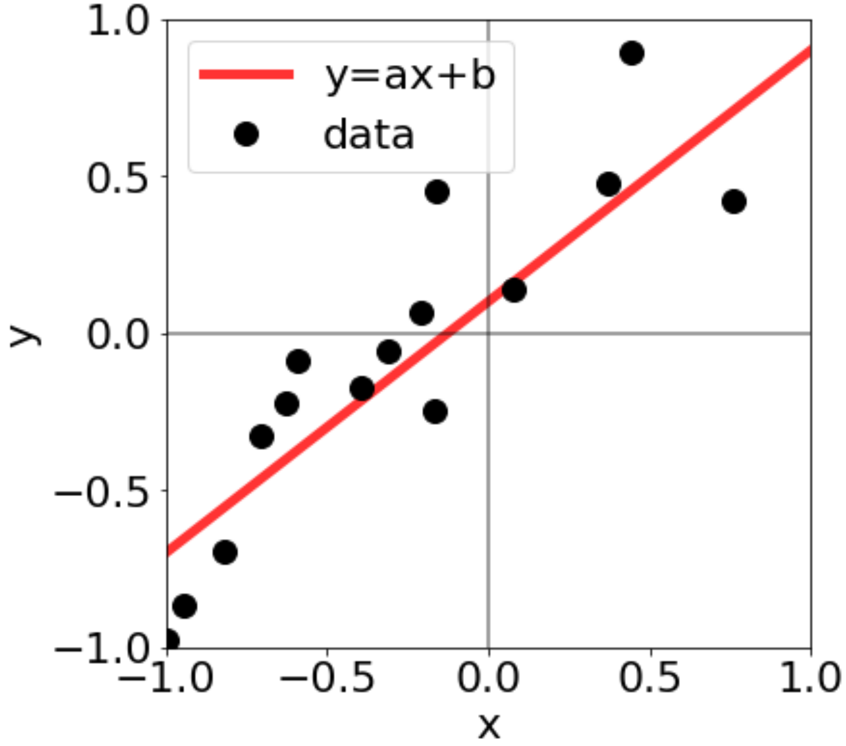
現状でも用いられている最も簡単な例



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

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

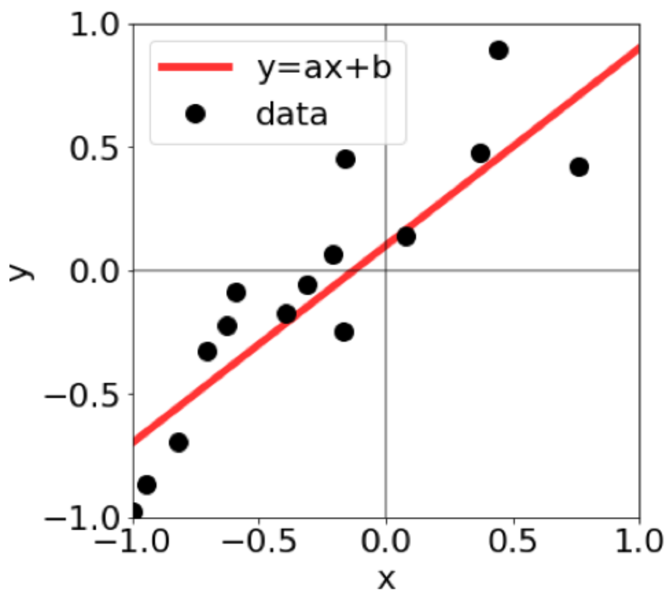
二乗誤差$E(a,b)$を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

$$a_0=\frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}\quad b_0=\overline{y}$$

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



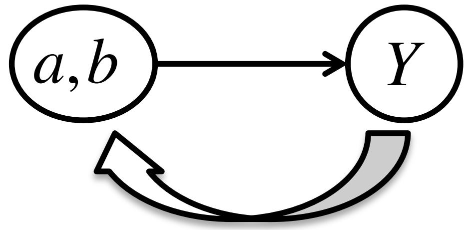
平均: $\bar{y}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i$, 分散: $\overline{x^2}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

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

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)

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(a,b\,|\,Y)$: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 (2/4)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

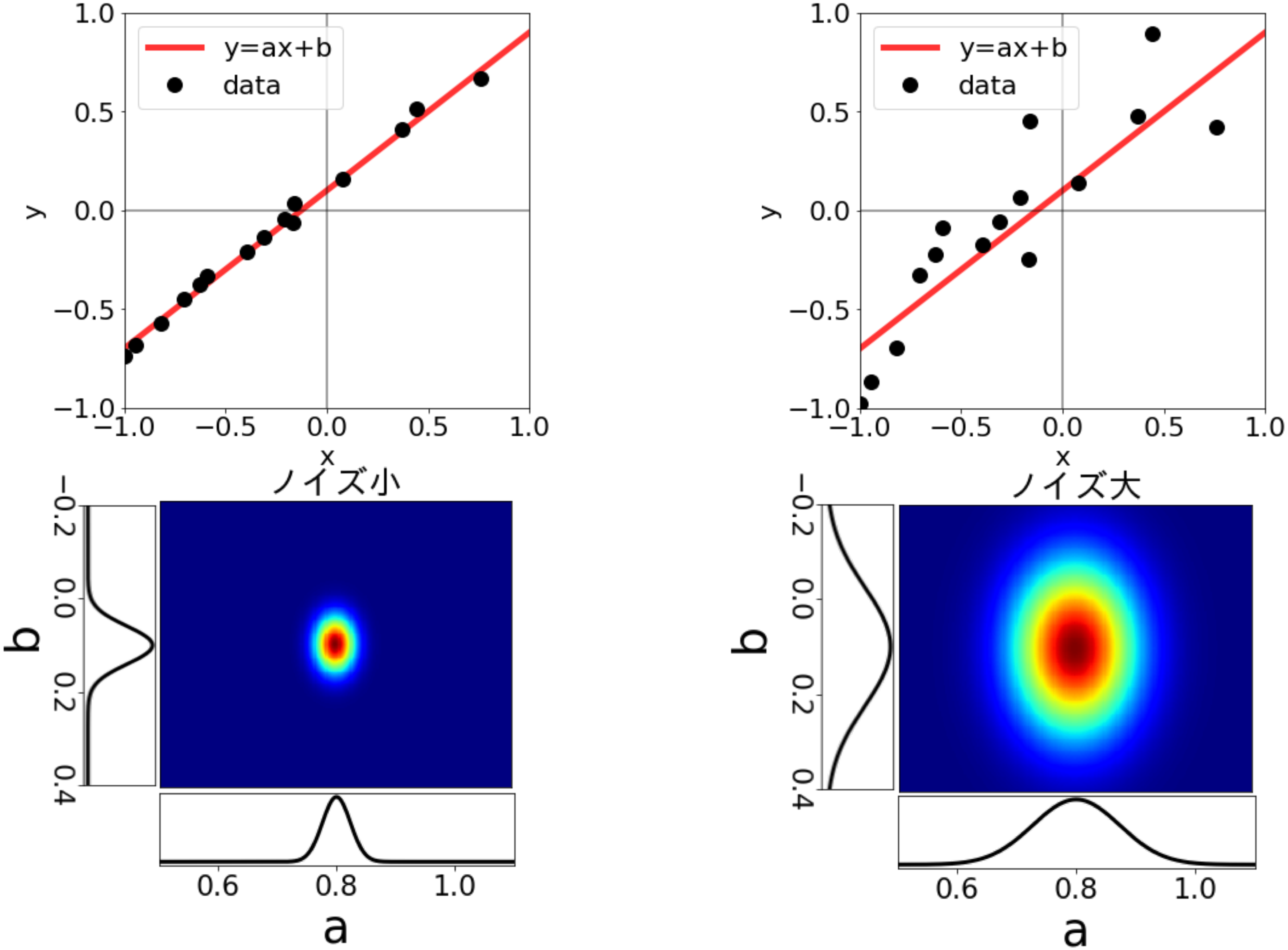
$$p(n_i) = p(y_i|a,b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

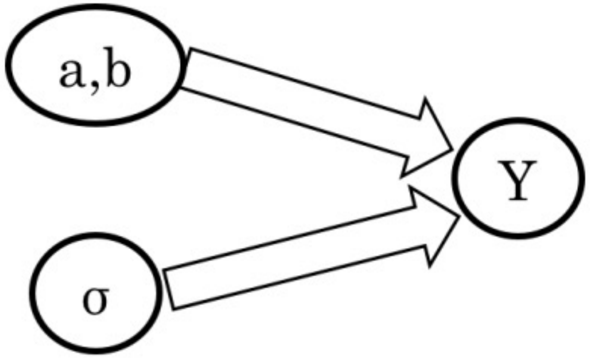
神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

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

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



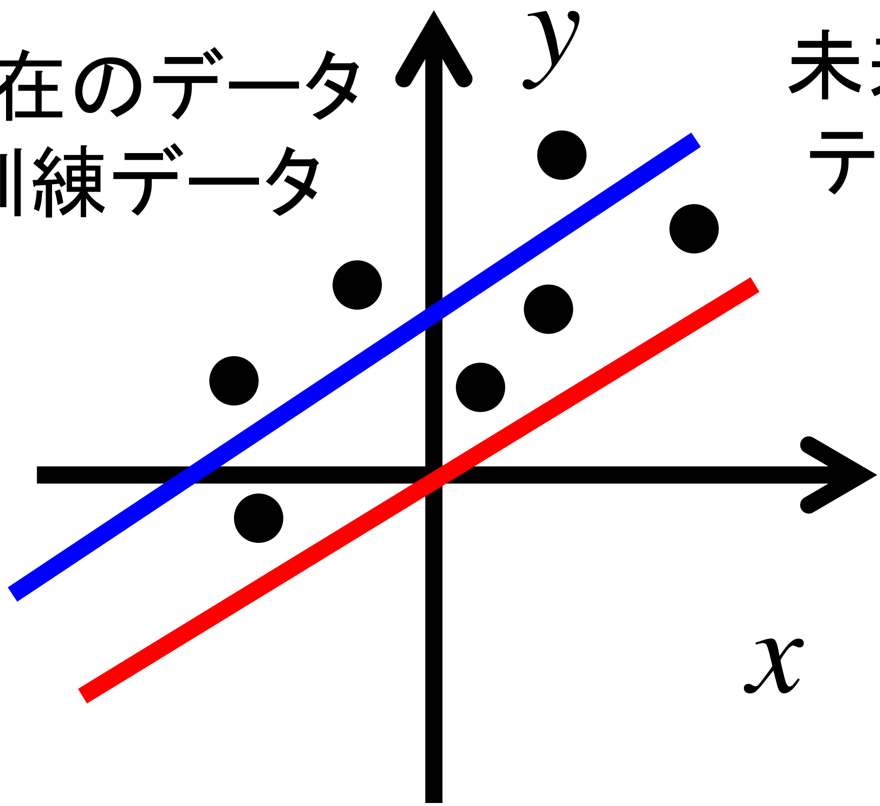
$$
\begin{aligned}
p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb\, p(Y|a,b,\sigma^2) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \int dadb \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \left\{\exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0,b_0)\right) + \int da \exp\left(-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2\right)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

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

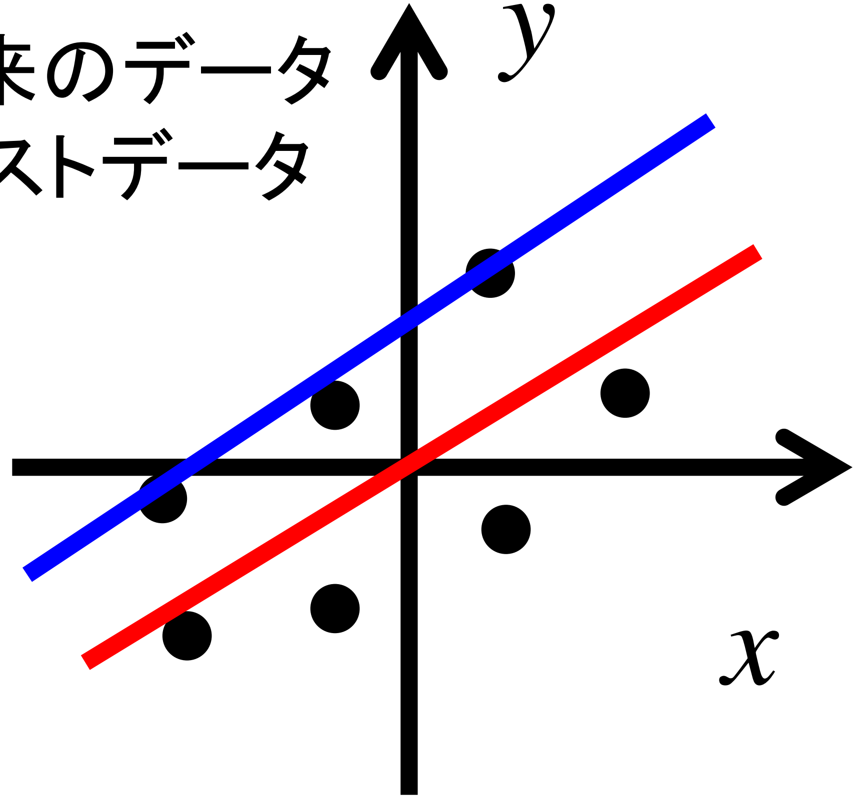
問題意識　神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$か$y=ax+b$か?

現在のデータ
訓練データ



未来のデータ
テストデータ



$y=ax+b$: 訓練誤差小
訓練誤差
ノイズに過学習

$y=ax$: 訓練誤差小
汎化誤差

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

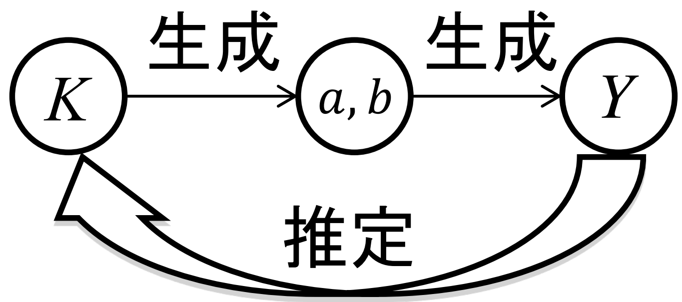
1. 欲しいのは　$p(K \mid Y)$

2. θがないぞ

3. $p(K,\theta,Y)$ の存在を仮定

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

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



K :モデル
a,b :傾き 切片
Y :観測データ

4. 無駄な自由度の系統的消去:周辺化，分配関数

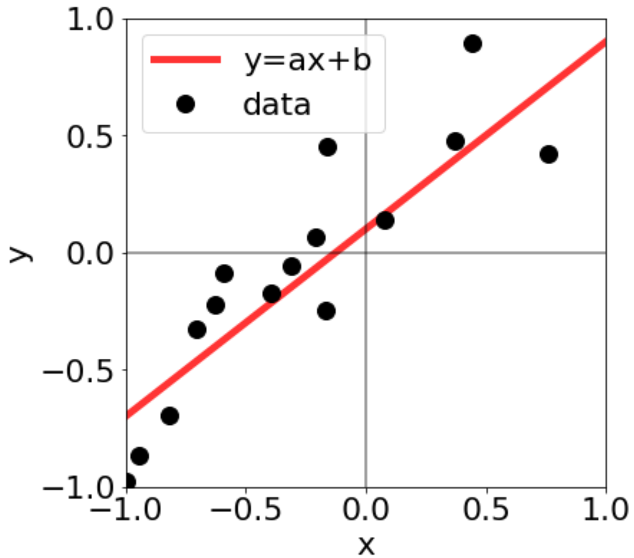
$$p(K,Y) = \int p(K,\theta,Y)\,d\theta$$

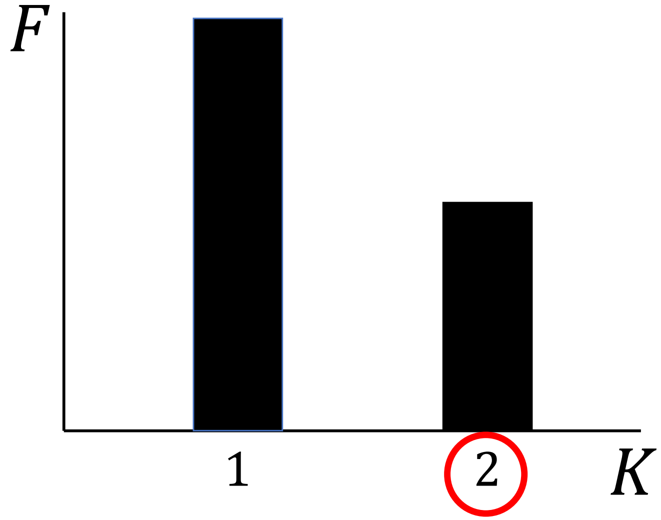
$$p(K \mid Y) = \frac{p(Y \mid K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)\,d\theta$$

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

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





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

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

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

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. 各課題に取り組む

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

ベイズ計測普及の戦略は何か?

- 直線回帰$y=ax+b$の例でベイズ計測の利点は明らかなので、あとは個々の実験家に任せれば良い。
- これは誤った考え方
- 実験家は従来の手法で日々の仕事が回っているので、新しいベイズ計測を学ぶ必然性が感じられない。
- これまでやってきたことを否定されたくない。
- これは大きなビジネスチャンス!!

内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

ベイズ計測の多様な計測への展開

- これまでやってきたことを否定されたくない
- 自ら否定せざるをえない環境を作る
- 実験家の重要課題を次々に解決
- ベイズ計測の多様な計測への展開
- これを他人任せ実験家任せではなく、理論家ができるだけビジブルな形で行う
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
  -> 全日本計測施設ベイズ化計画

SPring-8全ビームライン ベイズ化計画

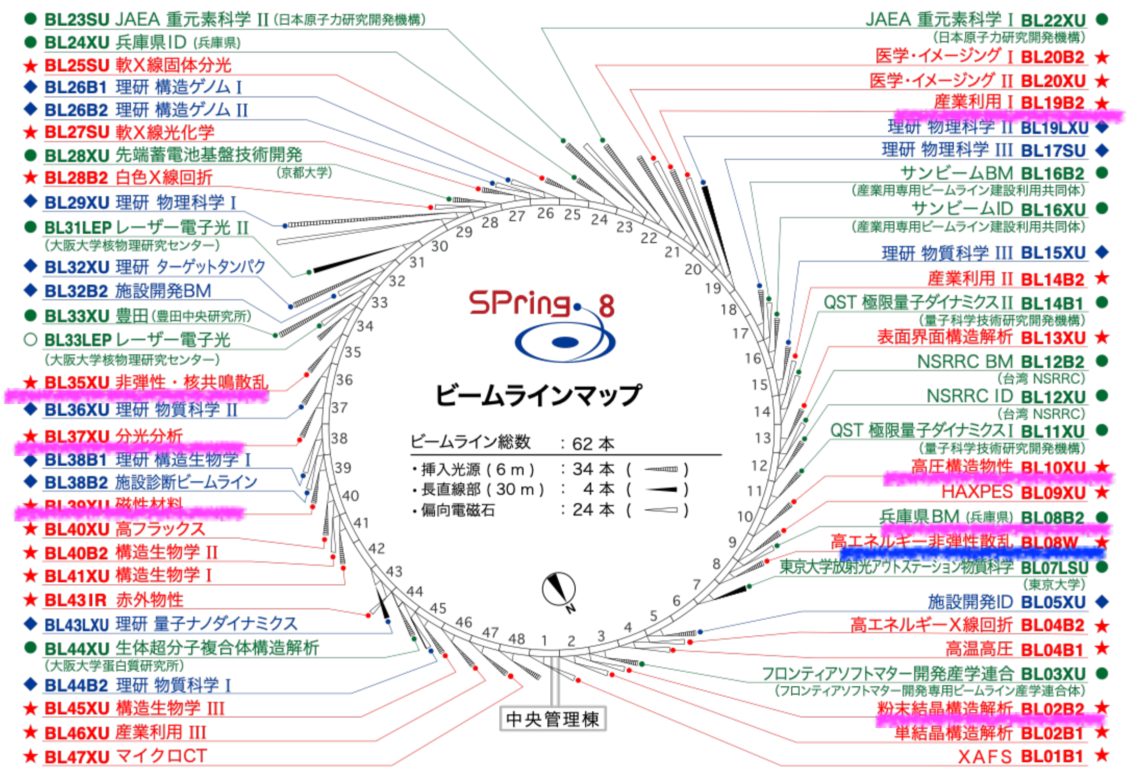
- ベイズ計測を啓蒙普及するのは、数理的ミニマムな研究だけでは不十分である
- 多種多様な複雑な計測に対しても、ベイズ計測三種の神器は通用するかを実証的に調べる
- 力強い実証方法は、SPring-8の全てのビームラインにベイズ計測を導入
- フラッグシップ計測施設のSpring-8を起爆点に、てかベイズ計測を世界展開
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画の意図である

SPring-8全ビームライン ベイズ化計画

- ベイズ計測を、SPring-8に導入するメリットはあるのだろうか?
- ベイズ計測は、日々行われているデータ解析のうち、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
- ベイズ系をSPring-8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全ビームラインベイズ化計画

敬称略



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　岡田研学生+桑本
BL19B2

XAS測定
BL37XU　岡田研学生+水牧
BL39XU

放射光ユーザーへの展開

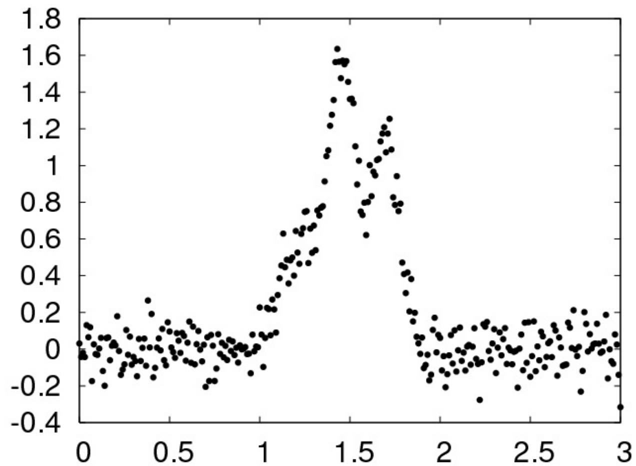
時分割XRD
BL02B2　横山優一+河口彰吾、沙織
BL10XU　ユーザー：公立大、東工大

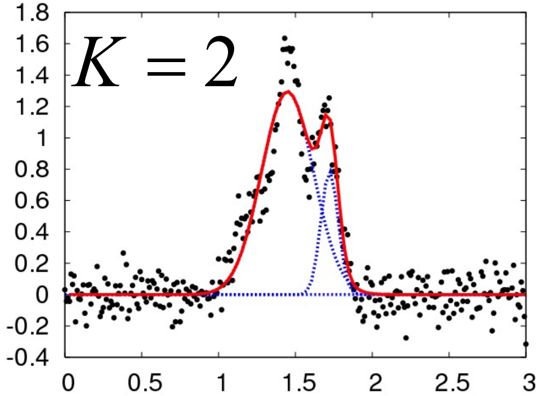
赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本

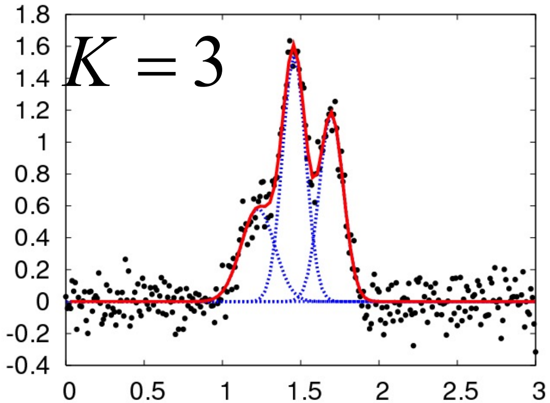
全BL本数：62本

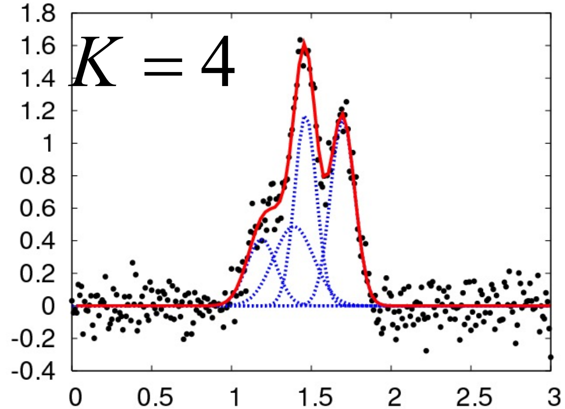
年度	2021	2022	2023
導入	2	8	14
全BL	26	26	26

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

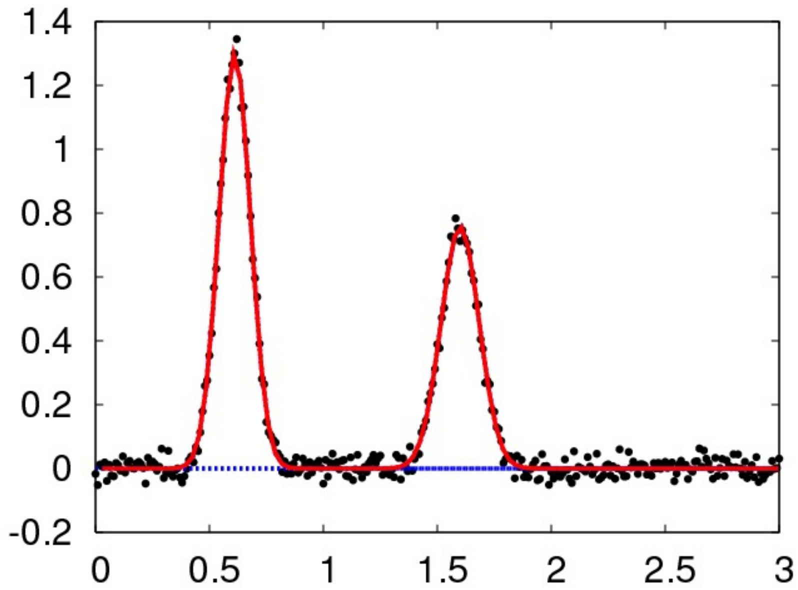
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i : 入力　y_i : 出力

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

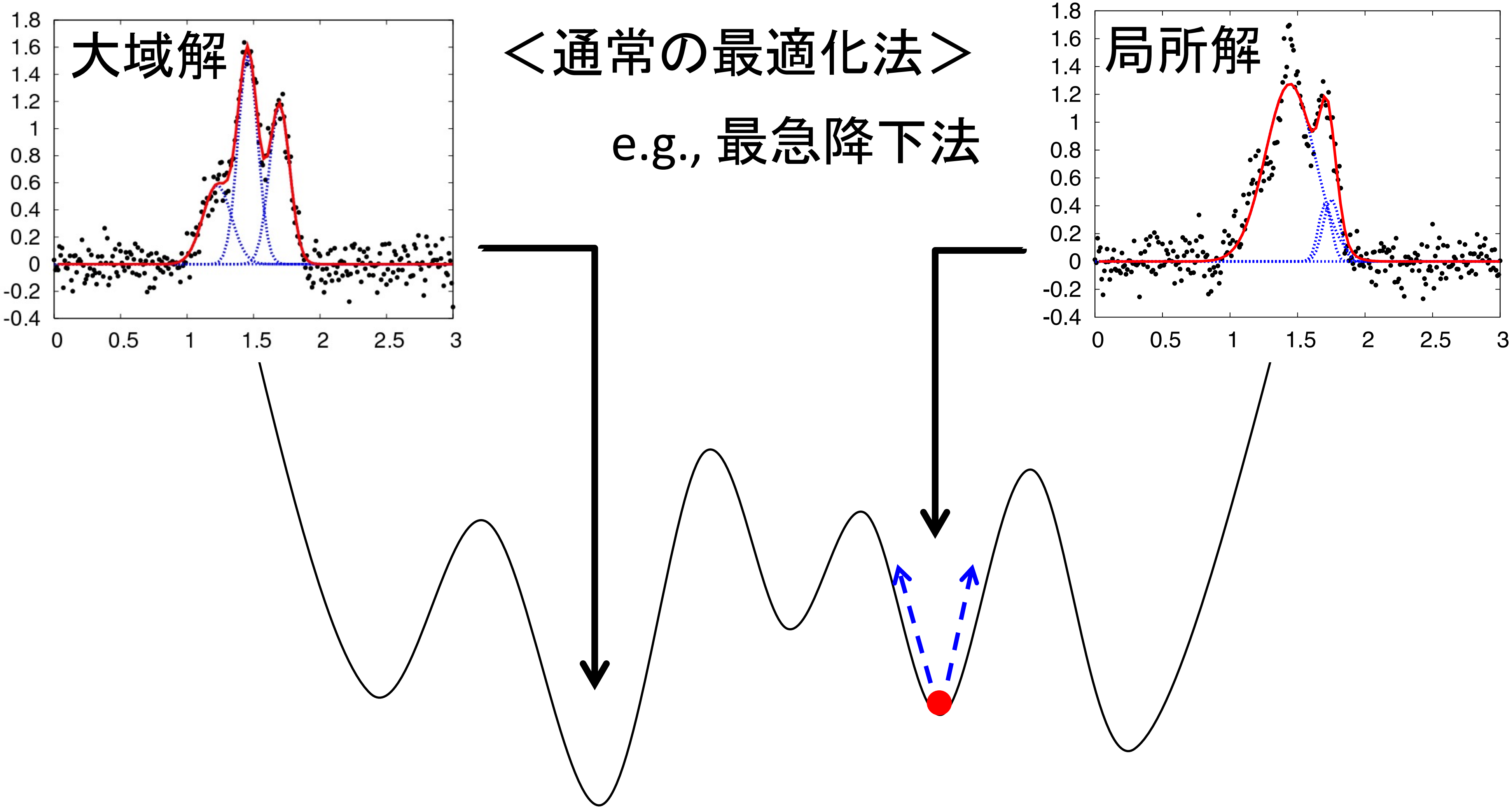
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \cdots, K$$



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）

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

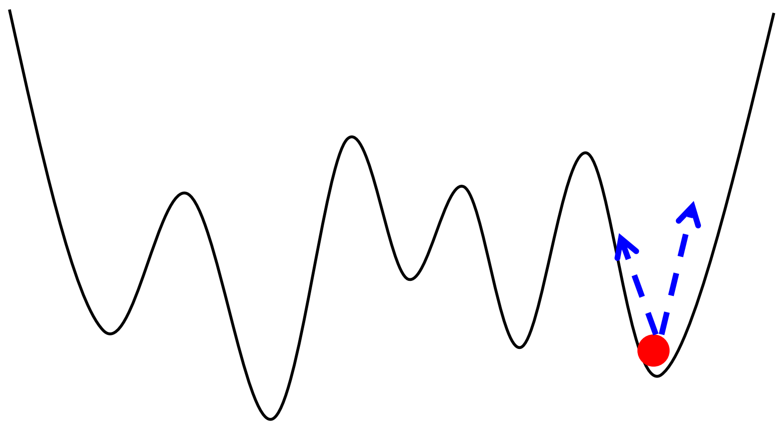
スペクトル分解従来法: 最急降下法
誤差関数は局所解を持つ



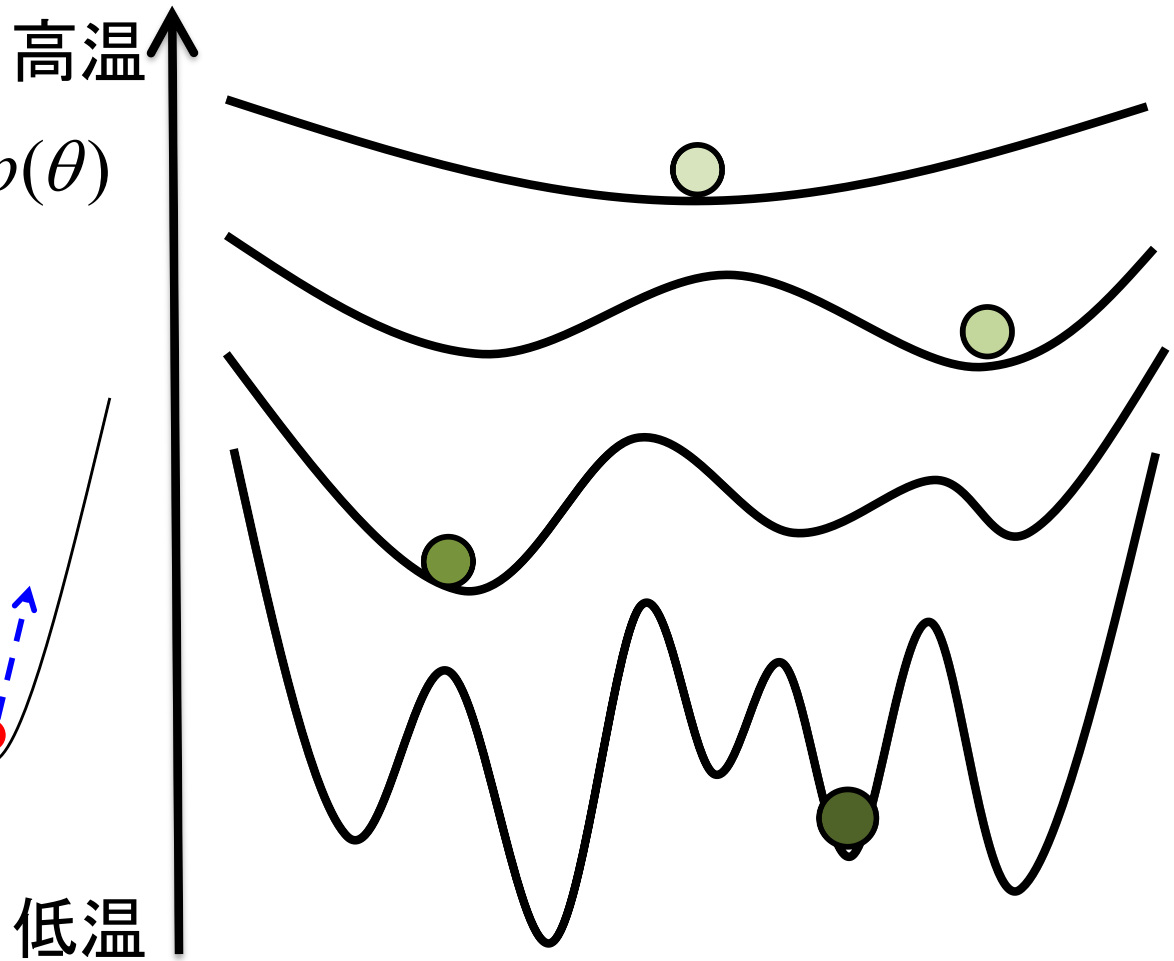
モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

メトロポリス法

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

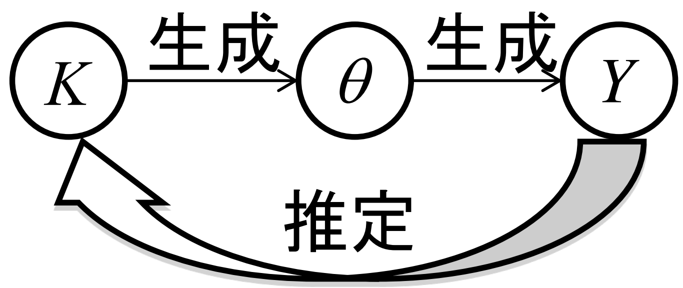


レプリカ交換モンテカルロ法



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

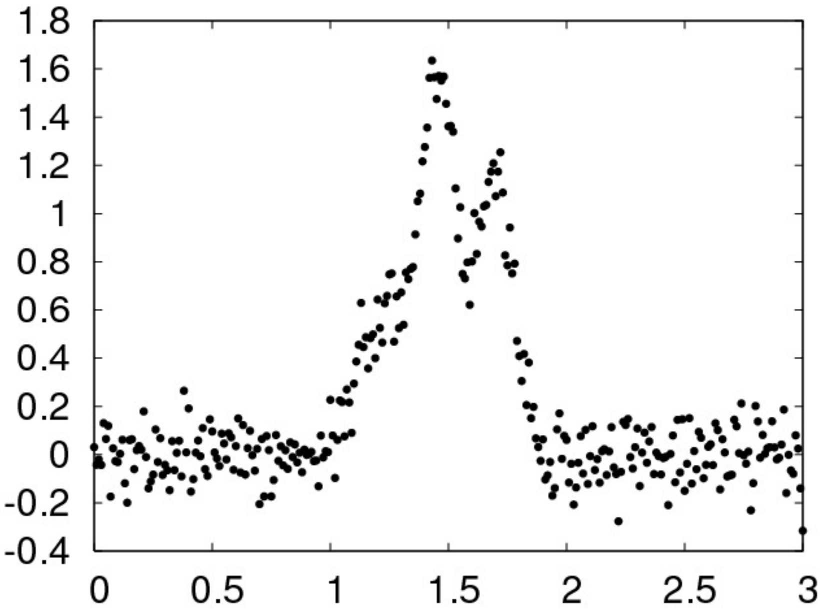
$$p(K,Y) = \int p(K,\theta,Y)d\theta$$

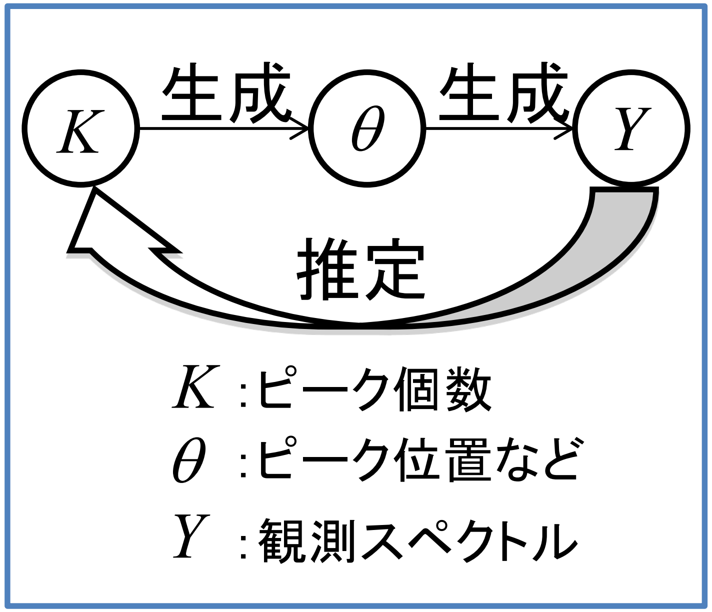
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)d\theta$$

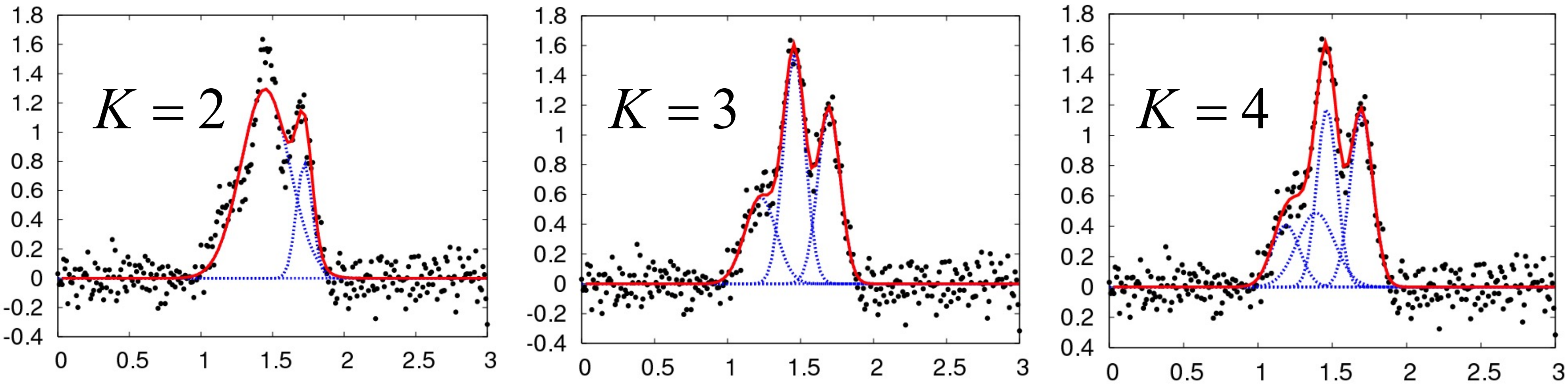
$$F(K) = -\log\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)d\theta = \boxed{E-TS}$$

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

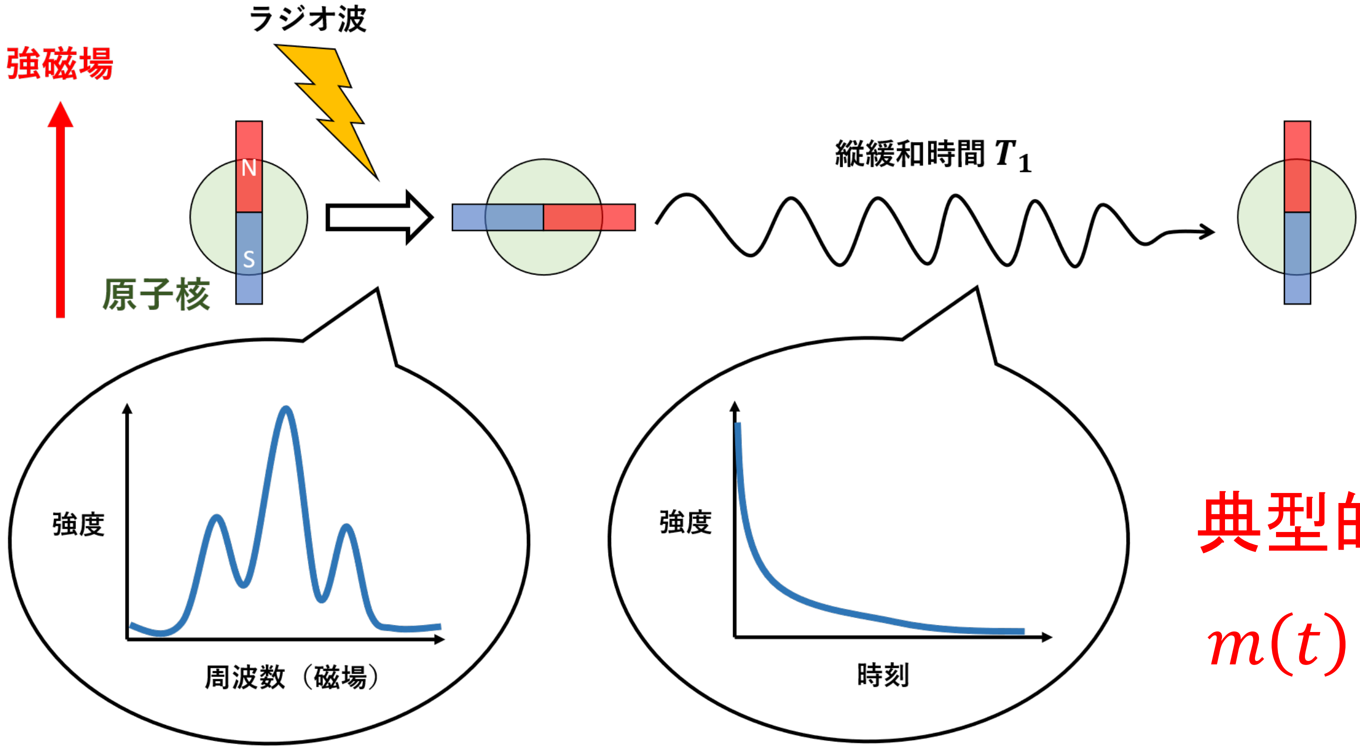






Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

NMR測定



典型的には

$$m(t) \propto \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)$$

NMRスペクトル　　核スピン格子緩和曲線

Ueda, Katakami, Yoshida, Koyama, Nakai, Mito, Mizumaki and Masato Okada, "Bayesian approach to T_1 analysis in NMR spectroscopy with applications to solid state physics", *Journal of the Physical Society of Japan*.92, 054002 (2023)

NMRまとめ

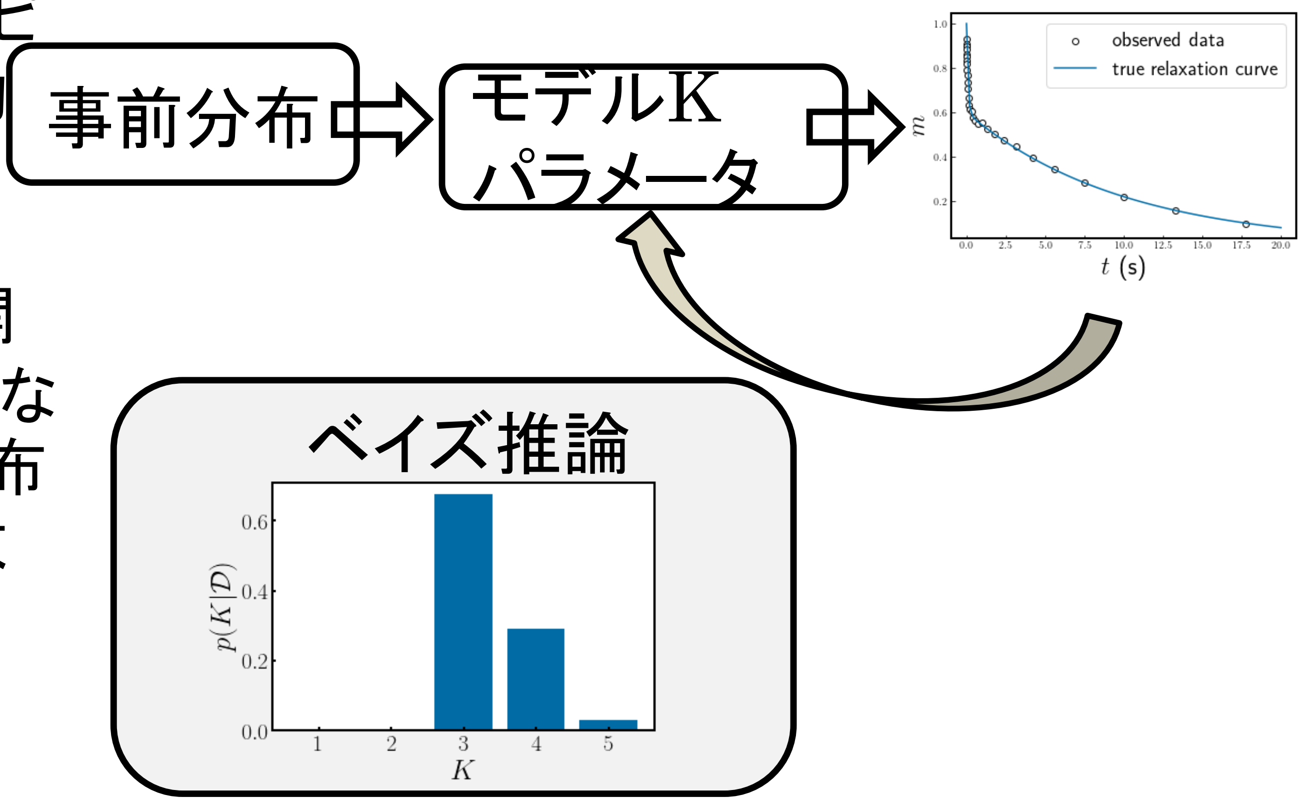
・試料の乱れや複数の緩和成分の共存を考慮した核スピン格子緩和のモデルを構築した。

・NMR測定における核スピン格子緩和曲線の物理的解釈をサポートできる。

・βの適切な事前分布に関する物理的な事前知識がないため $[0,1]$ 上の一様分布を使ったが,事前分布の改善が望まれる。

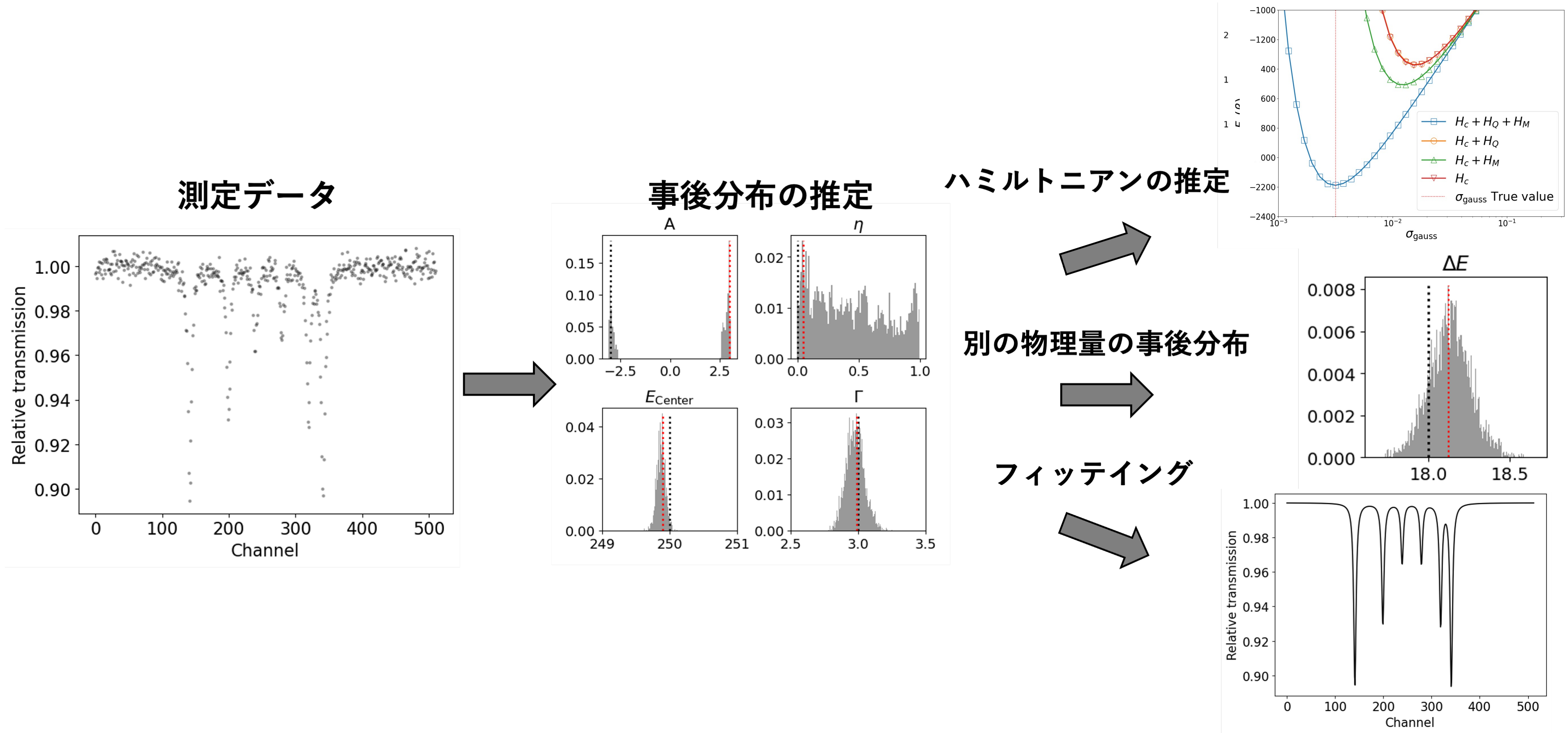
・今後は半導体SmSのNMR測定実験に本手法を適用し，物理的解釈を議論する。

核スピン格子緩和曲線



メスバウアー分光 (1/3)

- 生成モデルがハミルトニアンで記述される例



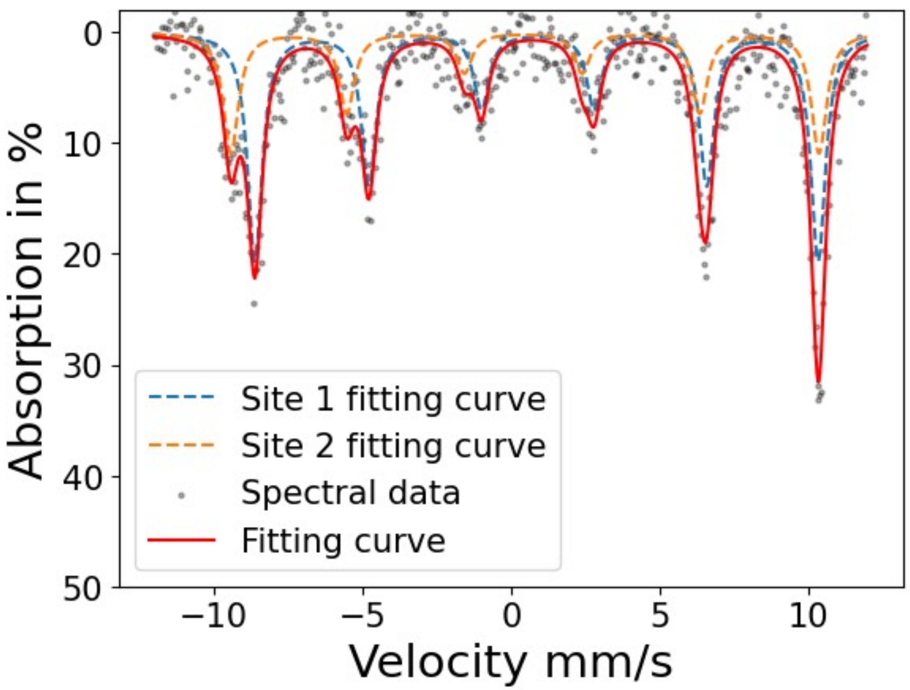
Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada,
JPSJ, 91,W104002 (2022)

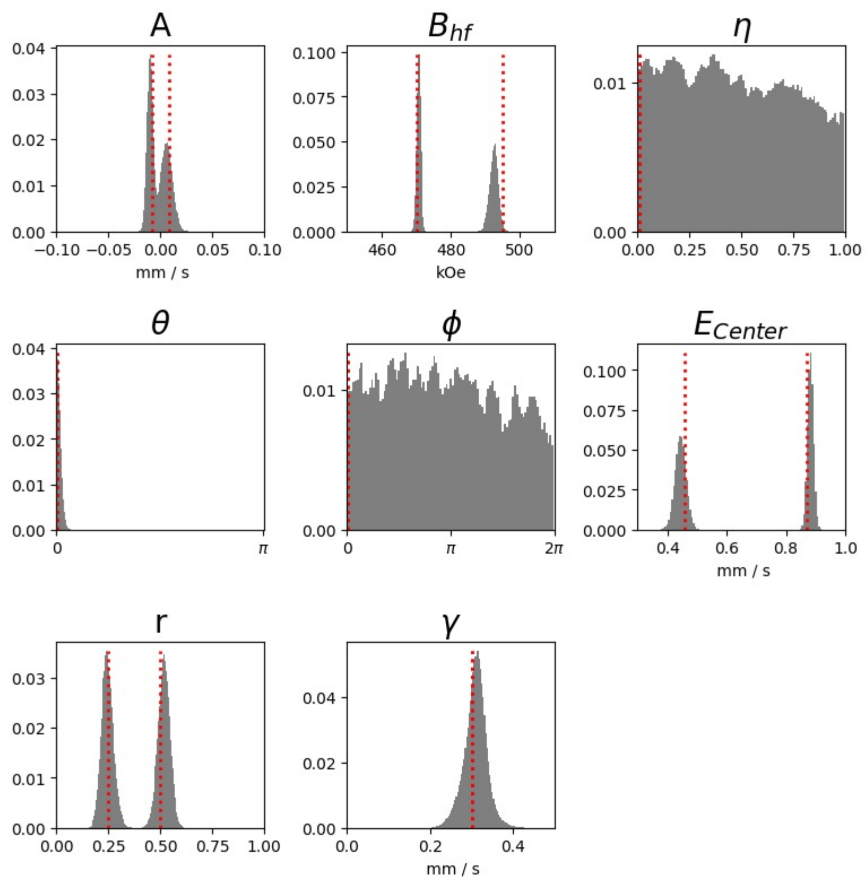
メスバウアー分光 (2/3)

- 神器1: パラメータの事後分布推定

事後分布（赤い点線が実験値）

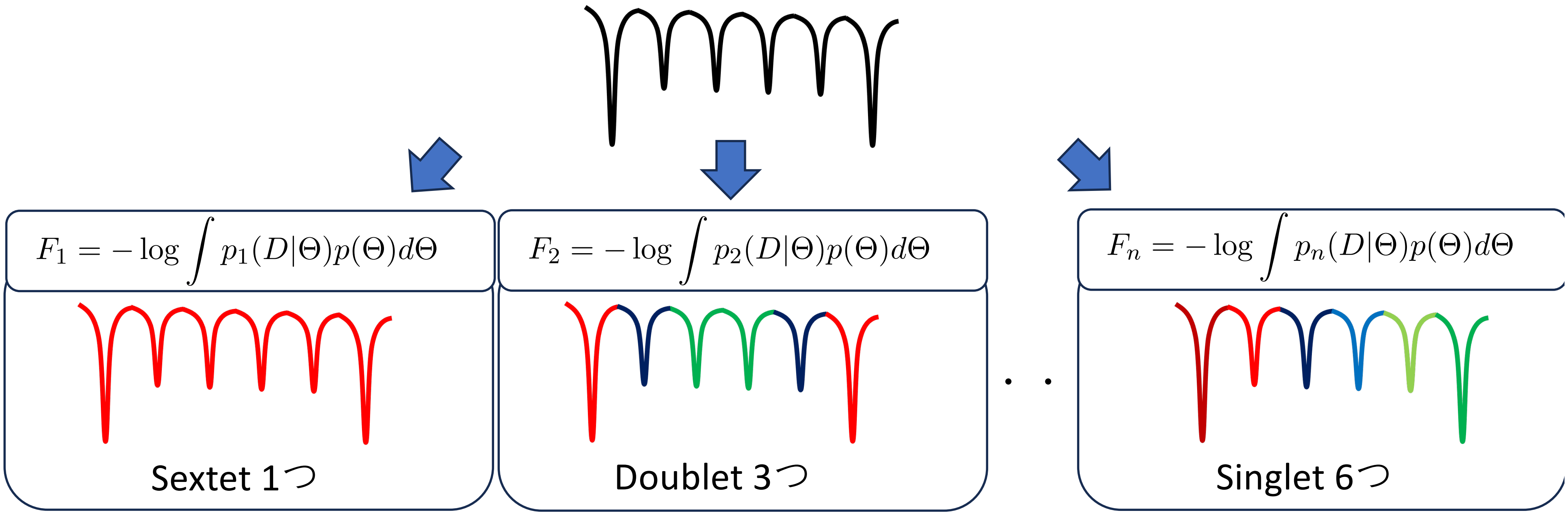
フィッティング結果





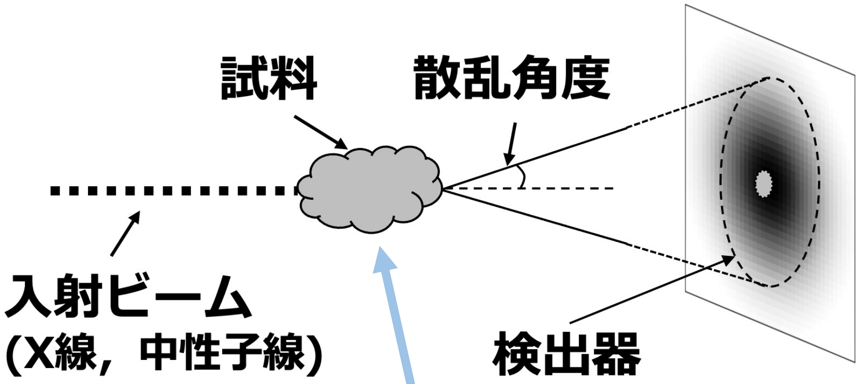
メスバウアー分光 (3/3)

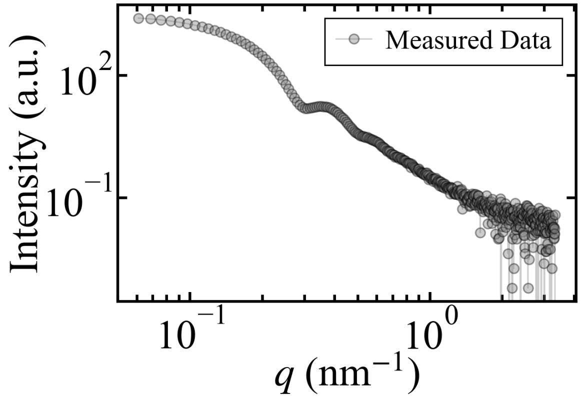
- 神器2: モデル選択: ハミルトニアン推定



最もベイズ自由エネルギーの小さいモデルを選ぶ

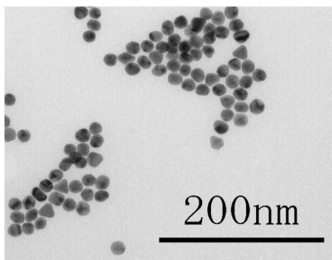
小角散乱 (1/5)





<u>不均一系試料</u>

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



出典: [1]

<u>データ解析</u>

1. 散乱強度モデルを設定

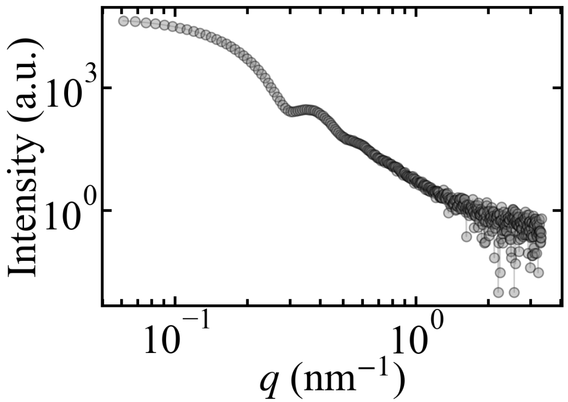
   球粒子：$I(q,\Theta) = \left(\frac{\phi}{V}F(q,R_M)^2 + b\right) \times t$

2. モデルパラメータ推定

   粒径R_M→10 nm

小角散乱 (2/5)

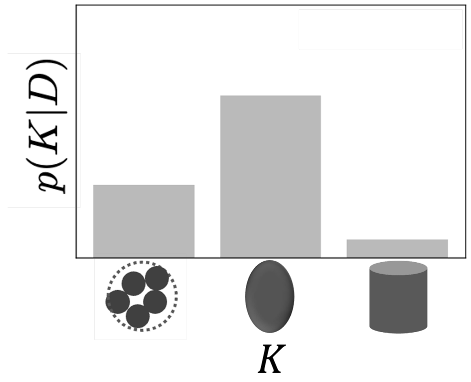
散乱強度−散乱ベクトル：D



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

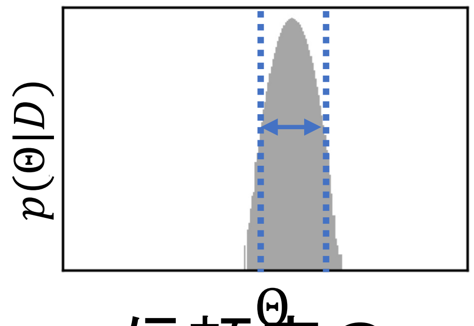


モデルの選択

パラメータ推定

$$p(\Theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\Theta)p(\Theta)}{\int p(\mathcal{D},\Theta)d\Theta}$$

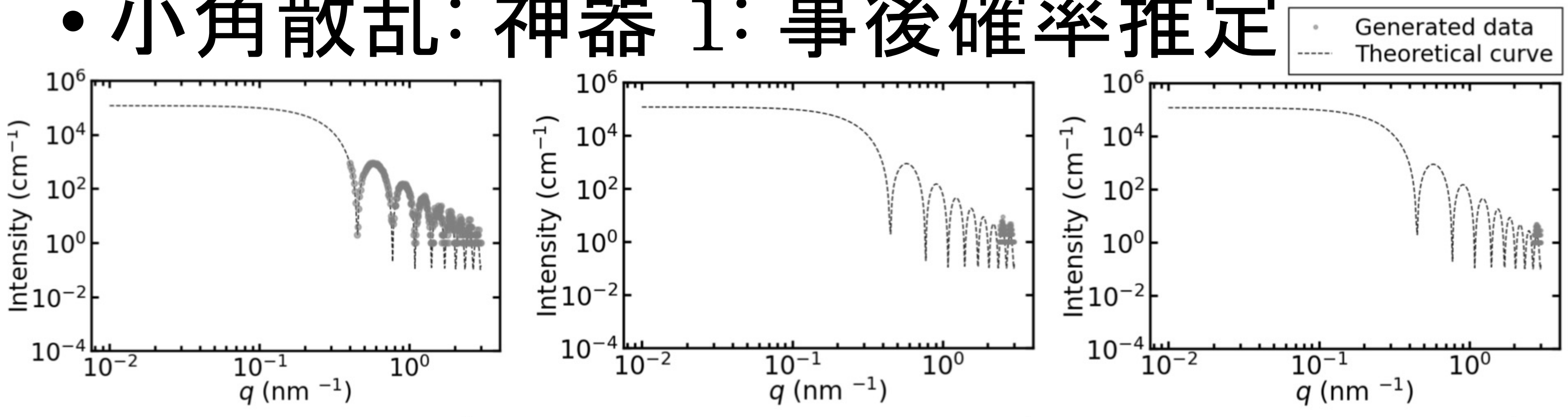
試料の大きさや密度
のパラメータを推定



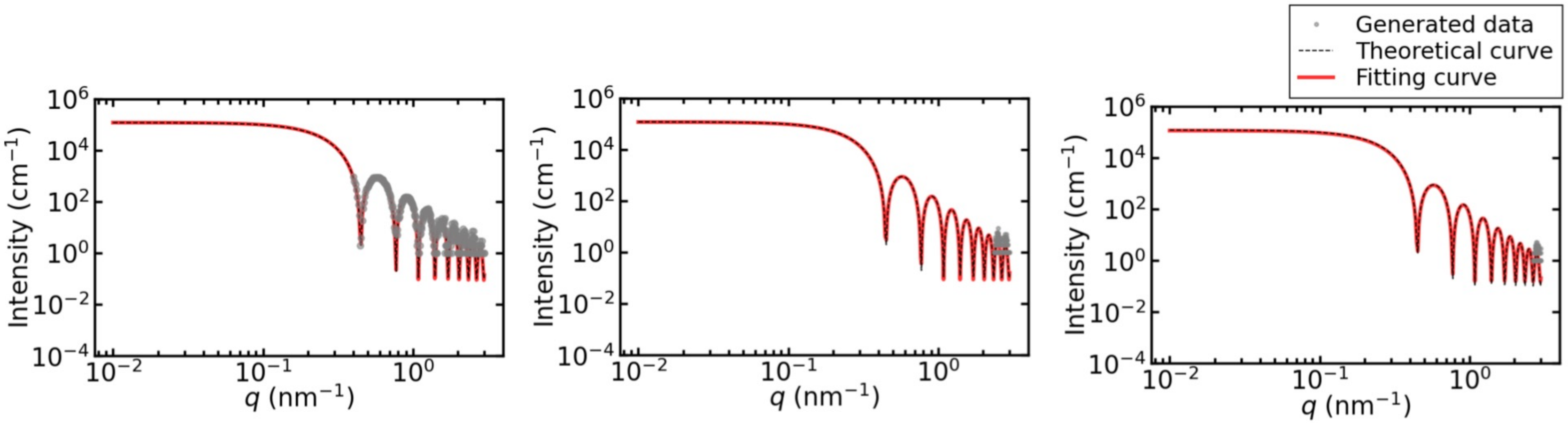
信頼度の
定量評価が可能

小角散乱 (3/5)

- 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定



(a) $q_{\mathrm{min}} = 0.4$ nm^{-1} (b) $q_{\mathrm{min}} = 2.35$ nm^{-1} (c) $q_{\mathrm{min}} = 2.65$ nm^{-1}



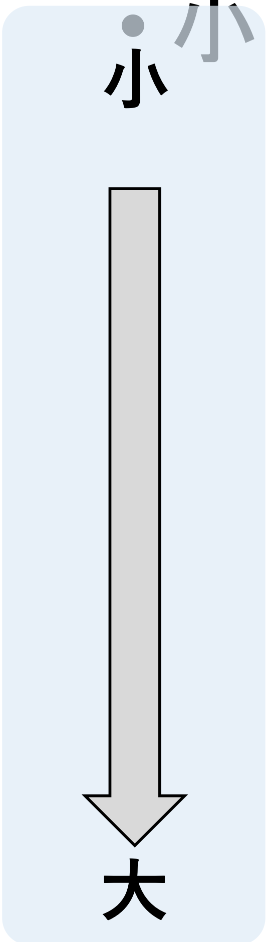
(a) $q_{\mathrm{min}} = 0.4$ nm^{-1} (b) $q_{\mathrm{min}} = 2.35$ nm^{-1} (c) $q_{\mathrm{min}} = 2.65$ nm^{-1}

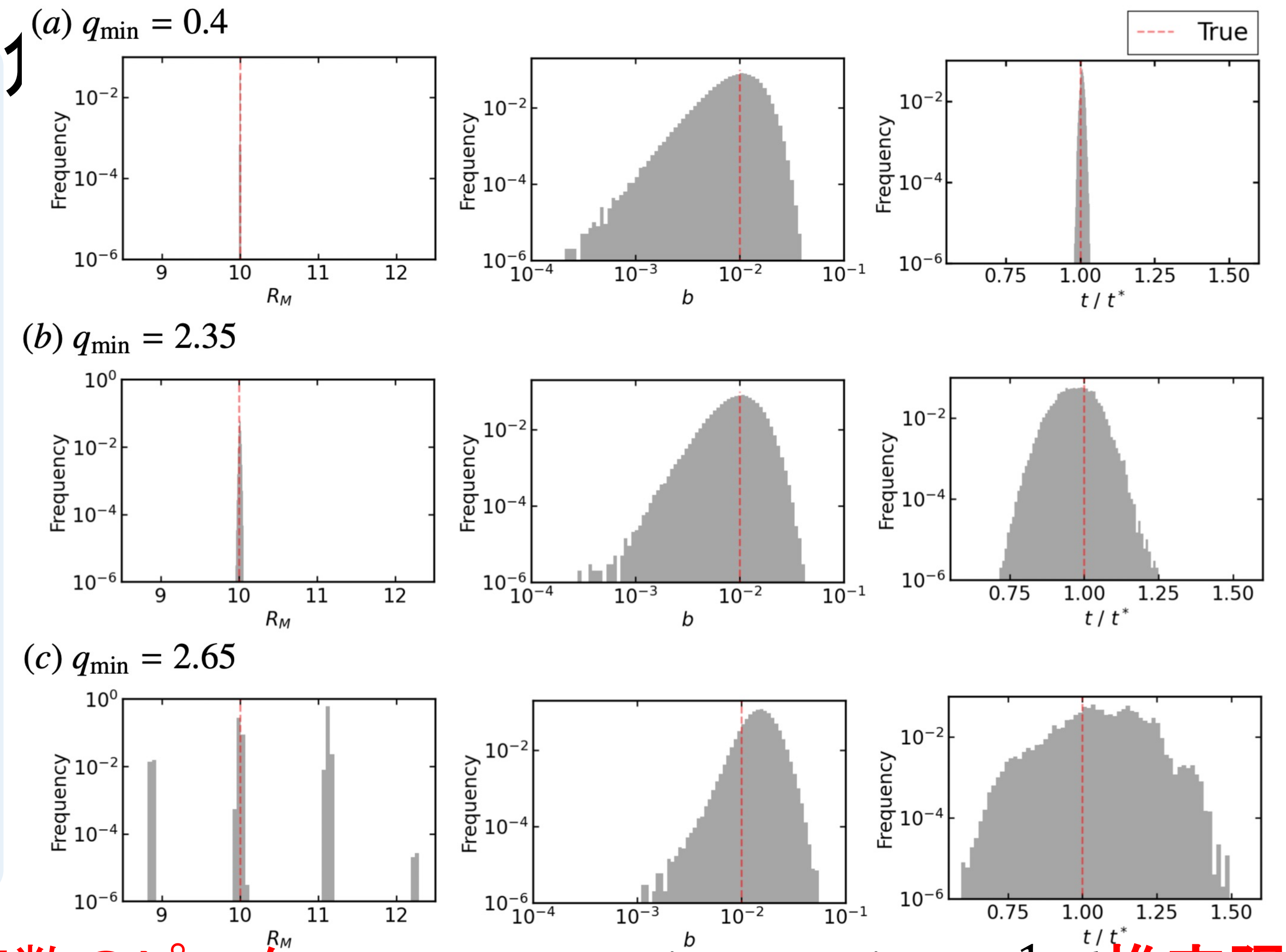
Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ.* 92, 094002 (2023),

小角散乱 (4/5)

- 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定　計測限界の導出

データ欠損

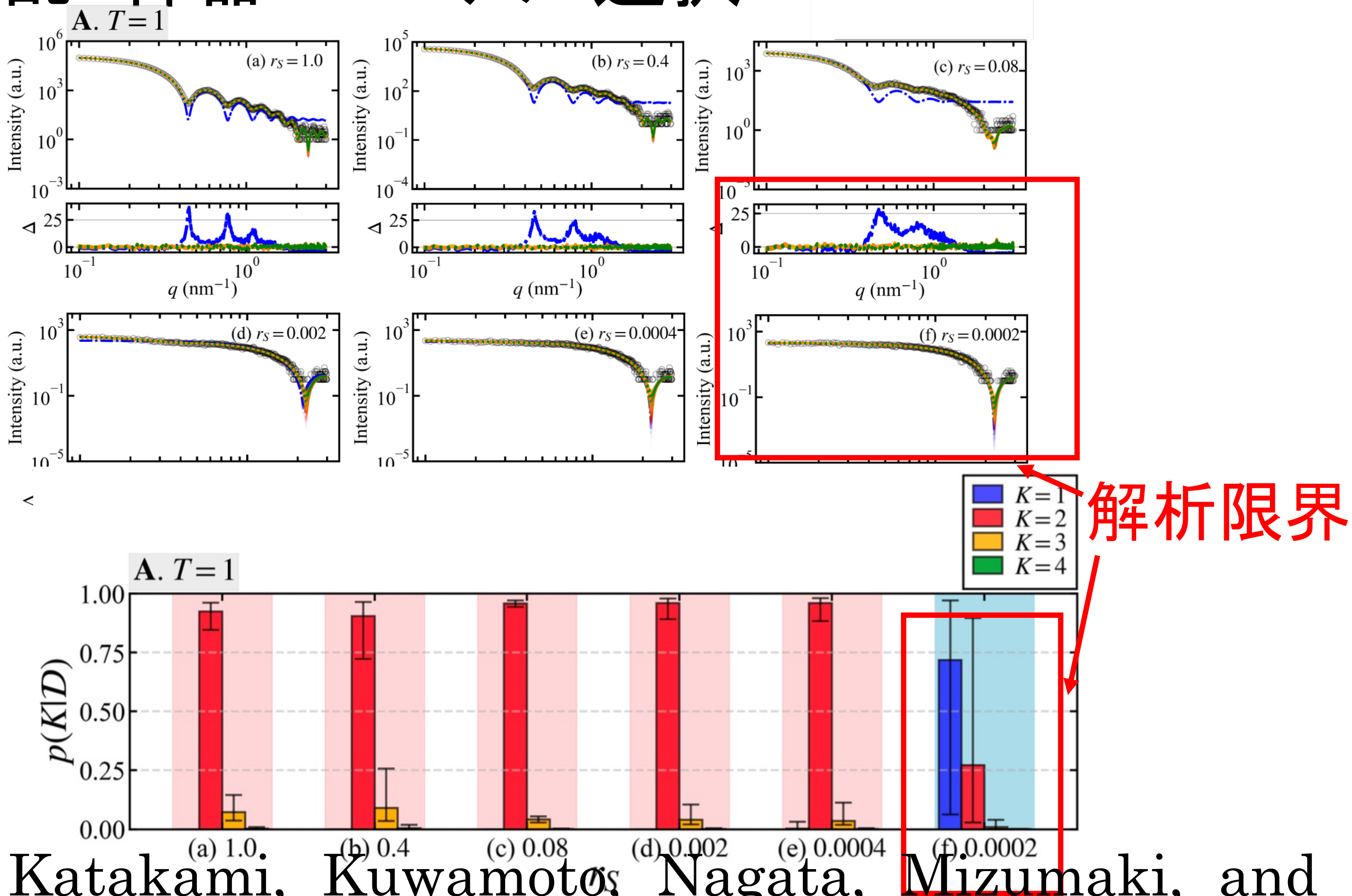




(c) に複数のピーク→$q_{\min} = 2.35 - 2.65\ \mathrm{nm}^{-1}$で推定限界

小角散乱 (5/5)

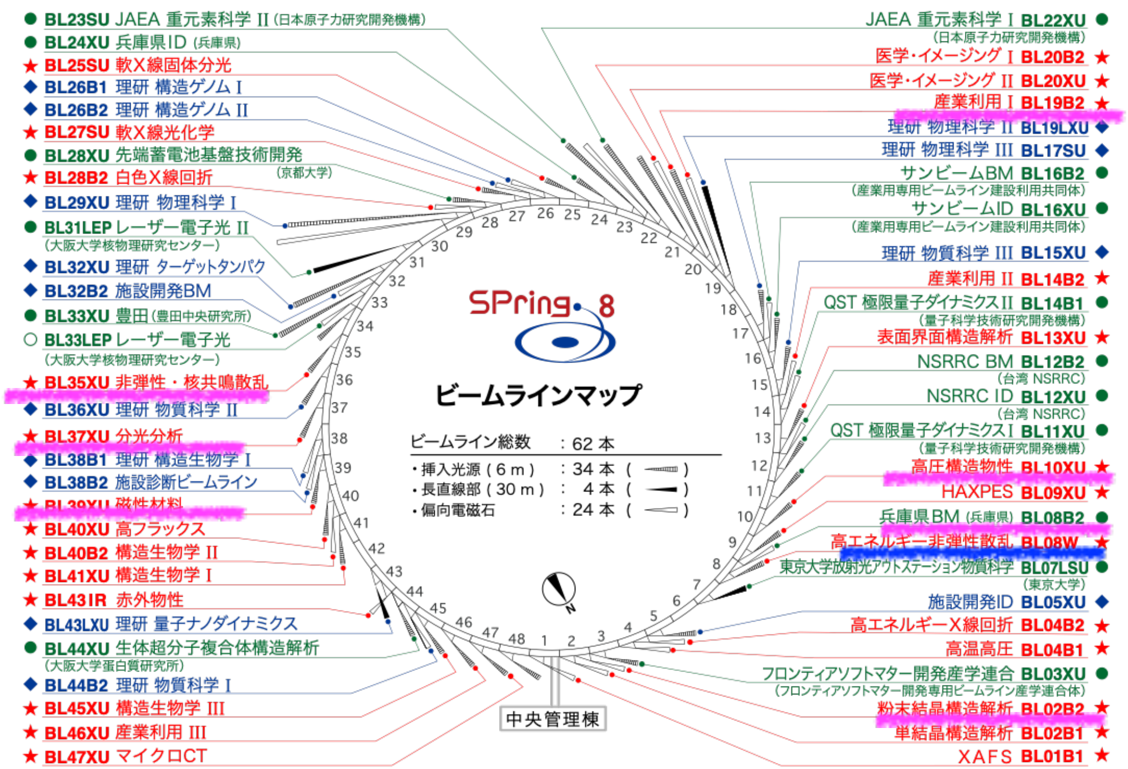
- 小角散乱: 神器 2: モデル選択



Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *J. P. S. J.* 92, 094002 (2023),

SPring-8全ビームラインベイズ化計画

敬称略



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　岡田研学生+桑本
BL19B2

XAS測定
BL37XU　岡田研学生+水牧
BL39XU

放射光ユーザーへの展開

時分割XRD
BL02B2　横山優一+河口彰吾、沙織
BL10XU　ユーザー：公立大、東工大

赤色BLが共用BL(JASRI担当): 計26本

全BL本数：62本

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

ベイズ計測の社会実装
基礎研究から民間企業の開発まで

- 大学/国研研究部門: ベイズ計測の基礎研究
- 公的計測施設: ベイズ計測の実例の紹介
- 基礎科学実験家/民間企業: ベイズ計測の実践
- 上記の上から下への流れに死の谷が存在
- 公的計測施設のサービス部門のシーズ(計測技術)と民間企業のニーズ(ベイズ計測の実践)の間の乖離
- 新たばビジネスチャンスの到来
  - ベイズ計測のIT企業
  - 株式会社 a.s.ist
  - https://www.a-s-ist.com/

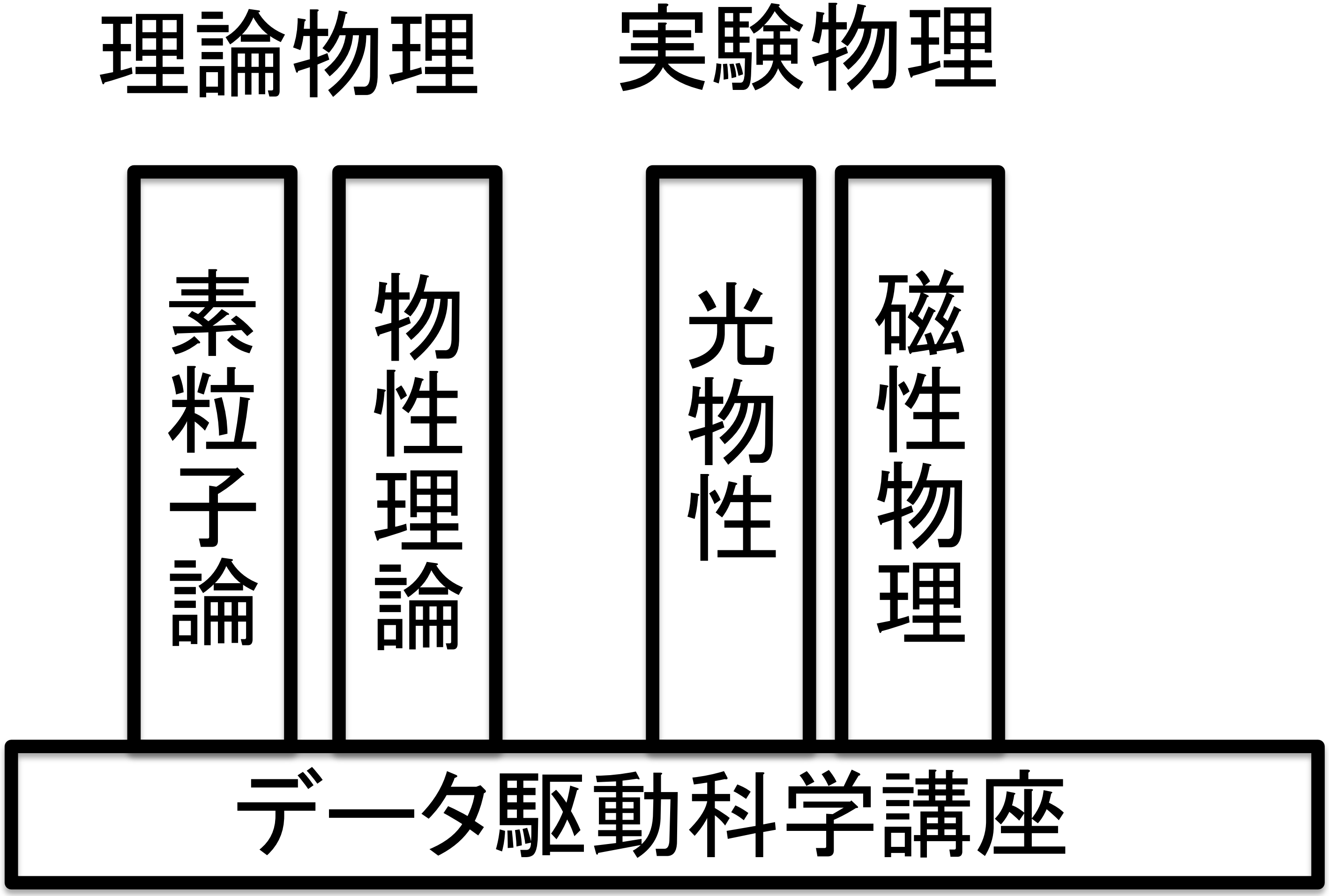
内容

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測

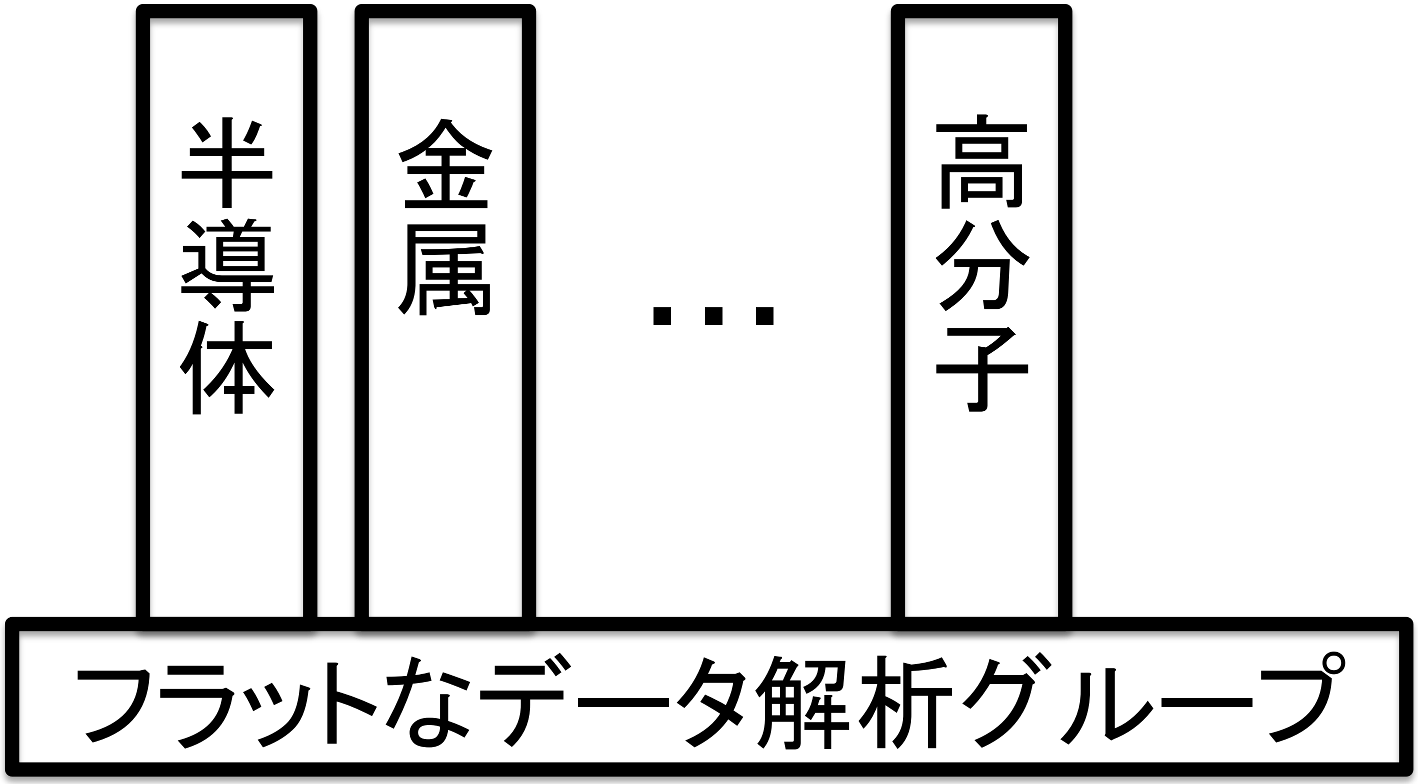
キャリアプランとしてのベイズ計測

- ベイズ計測を習得することのメリット
- ベイズ計測をOJTで習得することによる研究のスキルの向上
- 共同研究の立案とイニシアチブをもった共同研究のハンドリング能力
- 上司のコントロール力、部下の教育など仕事に必要なスキルが全て習得可能
- ベイズ計測習得により、アカデミアから民間企業、はたまた起業まで、広範なキャリアプランの構築が可能

アカデミア
物理学科/各学科に
データ駆動科学一講座導入



民間企業
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。

まとめ

- 自己紹介
- ベイズ推論が用いられる状況
- ベイズ計測: 計測科学のミニマム
  - ベイズ計測三種の神器
- ベイズ計測の基礎の紹介
  - 直線回帰$y=ax+b$のベイズ計測
  - ベイズ計測の習得方法
- ベイズ計測の展開へ
  - ベイズ計測の普及の戦略は何か?
  - ベイズ計測の多様な計測への展開
  - キャリアプランとしてのベイズ計測