

地球データ駆動科学シンポジウム
JAMSTEC-東大-筑波大-NIMS 合同セミナー
2025年3月25日(火) 13:00-17:10

ベイズ計測の新展開 有限データ理論とライブラリ開発

東京大学・大学院新領域創成科学研究科

複雑理工学専攻

片上 舜

内容

- 自己紹介
- ベイズ計測の有限理論
 - ベイズ計測：本研究の目的と達成イメージ
 - 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - 数値実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ベイズ推論のライブラリの紹介
- まとめ

内容

- 自己紹介
- ベイズ計測の有限理論
 - ベイズ計測：本研究の目的と達成イメージ
 - 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - 数値実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ベイズ推論のライブラリの紹介
- まとめ

自己紹介

- ・東京大学・大学院理学系研究科 岡田研
(2016 ~ 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 ~)
- ・物理計測データに対してのベイズ解析
- ・ベイズ計測オープンソースソフトウェア

内容

- ・自己紹介
- ・ベイズ計測の有限理論
 - ・ベイズ計測：本研究の目的と達成イメージ
 - ・提案理論
 - ・ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - ・数値実験
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ・ベイズ推論のライブラリの紹介
- ・まとめ

Mesoscopic Bayesian Inference by Solvable Models

Shun Katakami, Shuhei Kashiwamura, Kenji Nagata, Masaichiro
Mizumaki, Masato Okada

<https://arxiv.org/abs/2406.02869>

岡田研新着情報

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

共同研究者



柏村 周平
東京大学



永田 賢二
NIMS



水牧 仁一朗
熊本大学



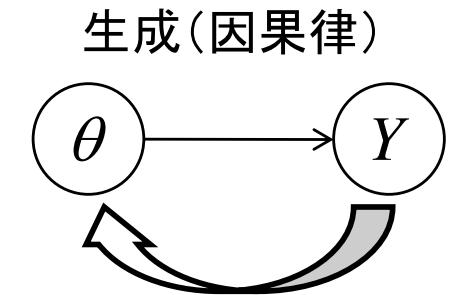
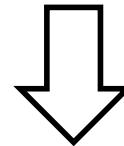
岡田 真人
東京大学

内容

- ・自己紹介
- ・ベイズ計測の有限理論
 - ・ベイズ計測：本研究の目的と達成イメージ
 - ・提案理論
 - ・ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - ・数値実験
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ・ベイズ推論のライブラリの紹介
- ・まとめ

ベイズ推論

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



〈ベイズの定理〉

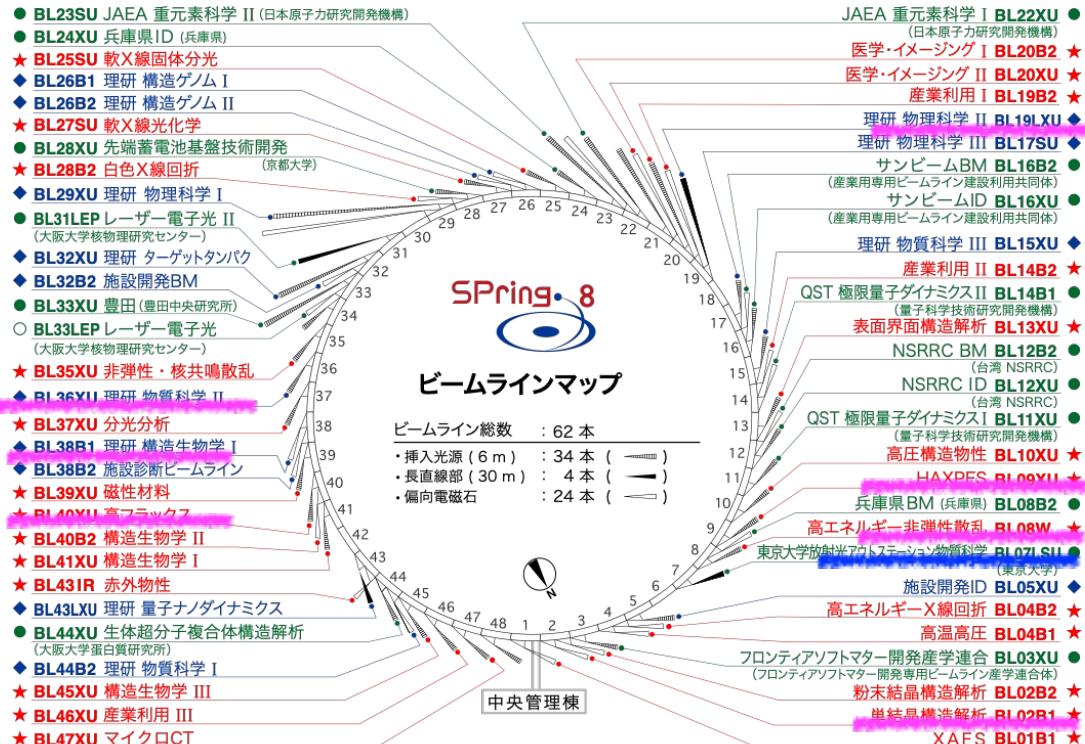
$$p(\theta | Y) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)} \propto \exp(-nE(\theta))p(\theta)$$

$p(\theta | Y)$: 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.

$p(\theta)$: 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

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

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)

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。
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

研究の動機の直感的説明

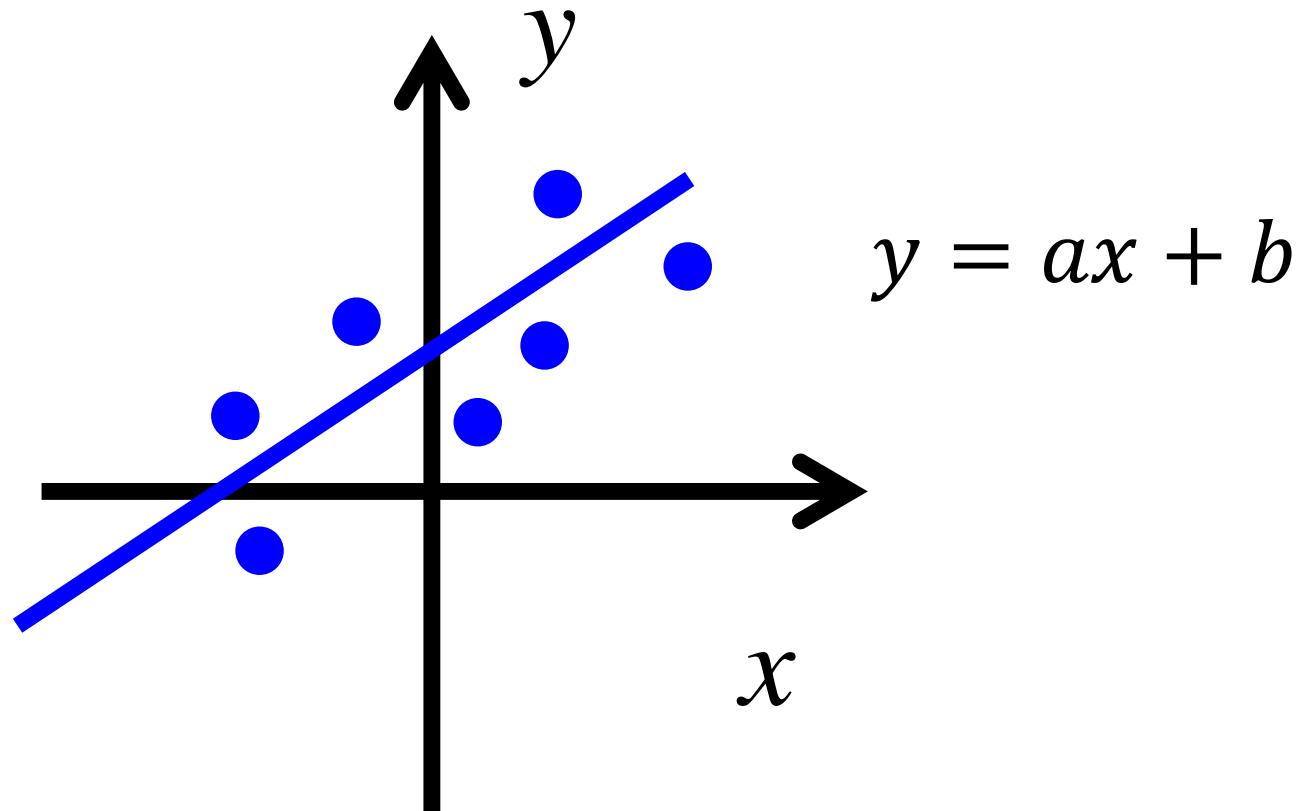
ベイズ計測で自由エネルギーを計算する場面を想像する



観測ノイズの取り扱いの二つの流儀

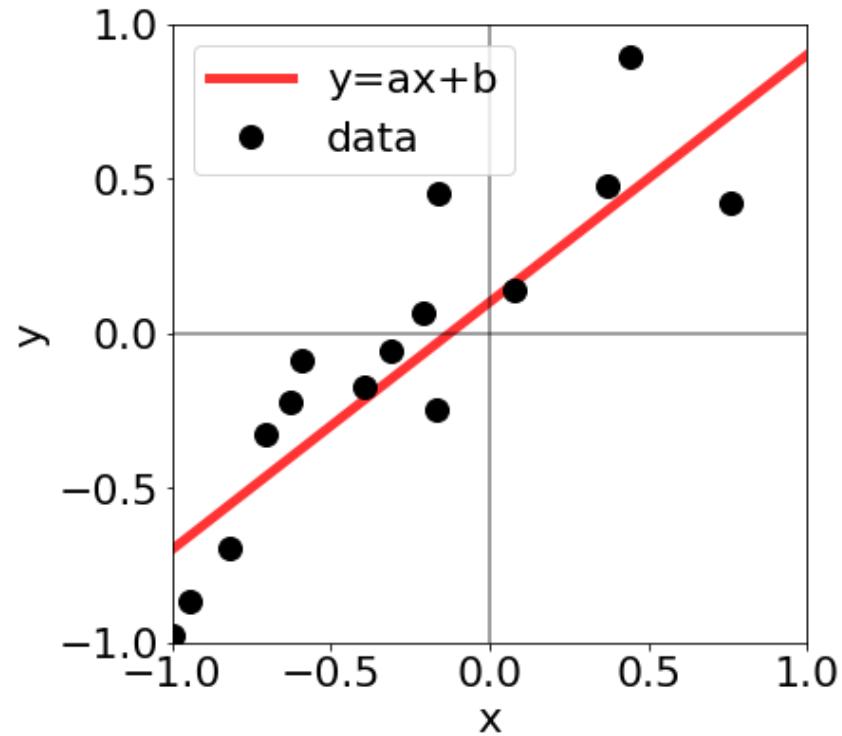
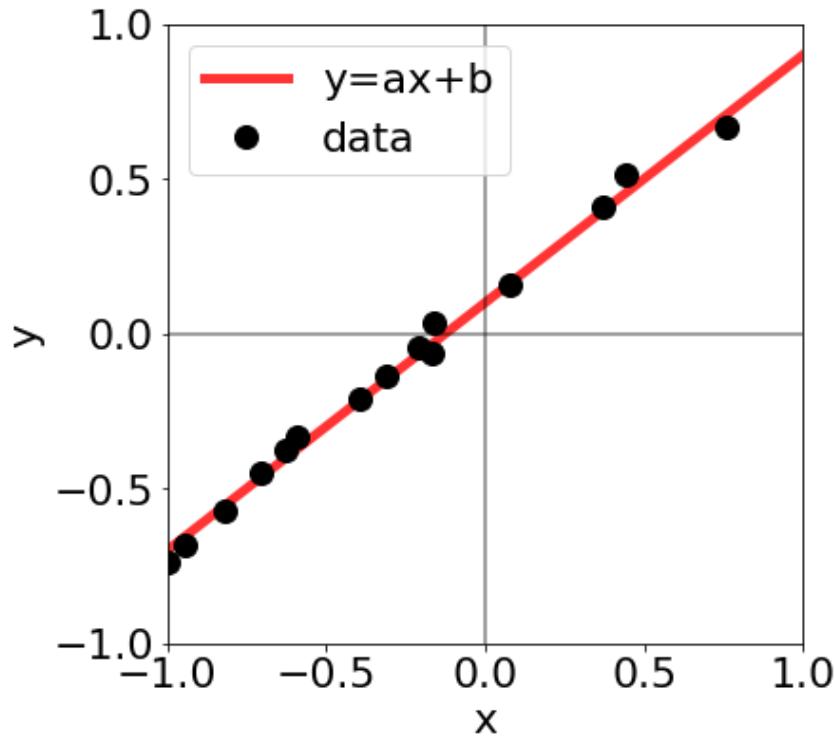
1. 観測ノイズを固定して議論
通常のベイズ計測
2. 観測ノイズを固定せずに議論
観測点 N 無限大の漸近論
観測点 N 有限の理論はない
本研究で提案

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)

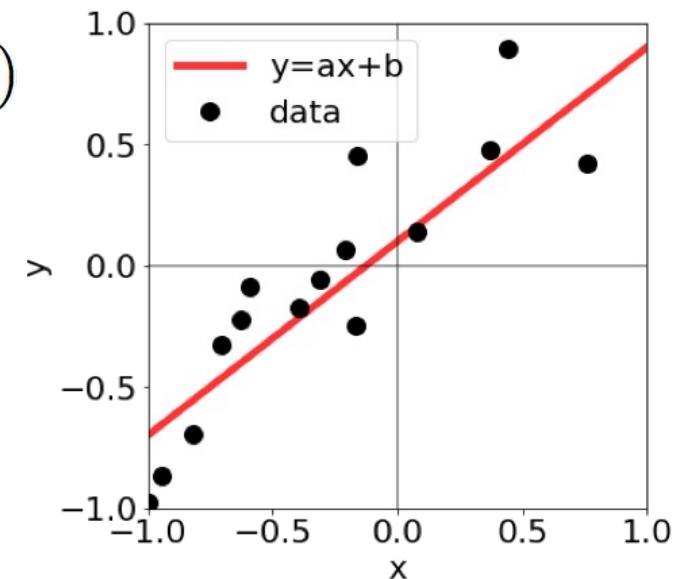
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \text{ とする場合}$$

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

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

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

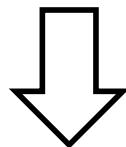
$$\bar{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



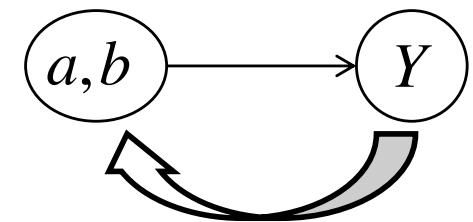
ベイズの定理による 神器1: パラメータの事後確率推定 (1/4)

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

生成(因果律)



<ベイズの定理>



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

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

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

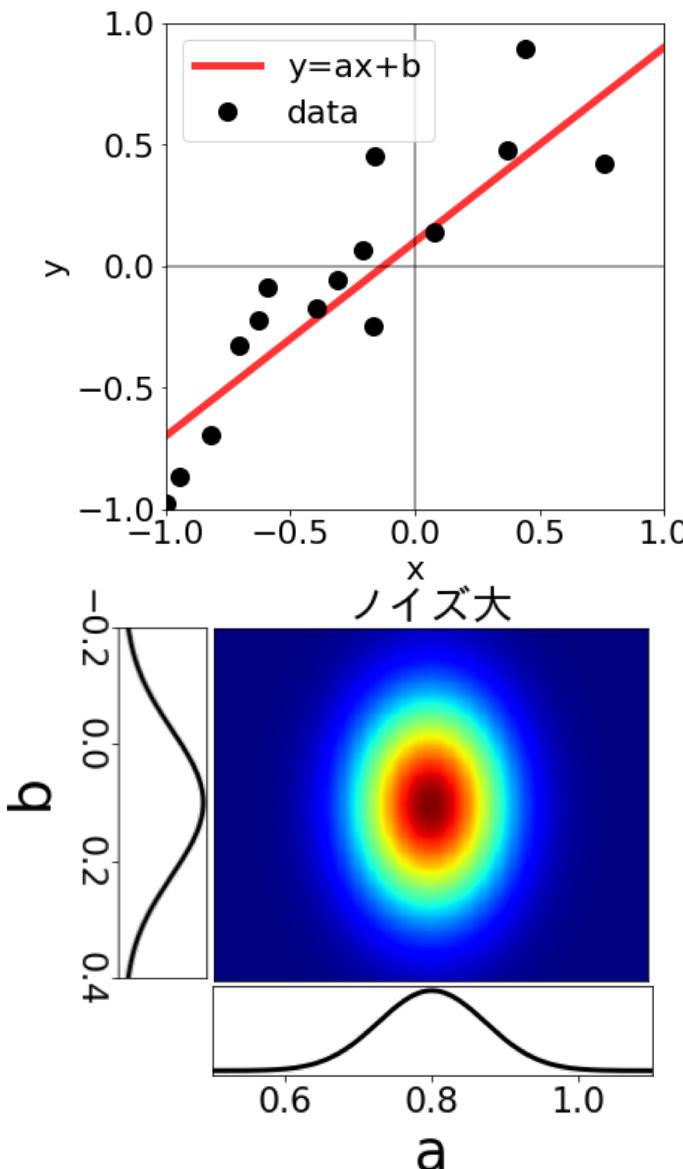
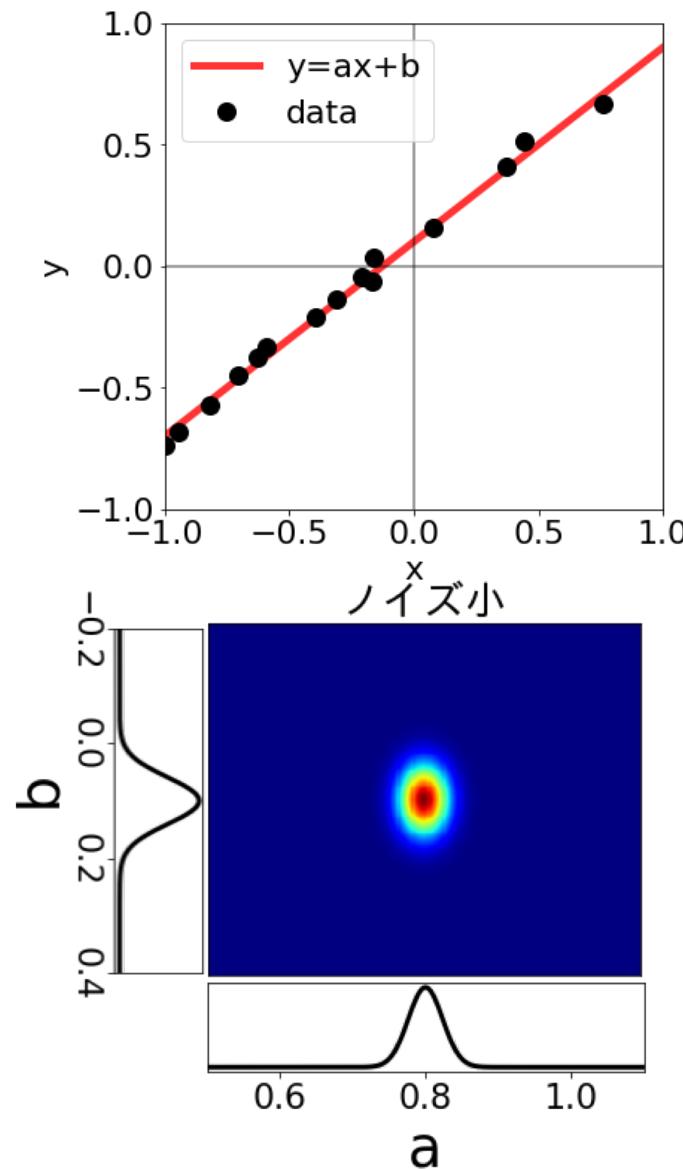
$$p(n_i) = p(y_i|a, b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

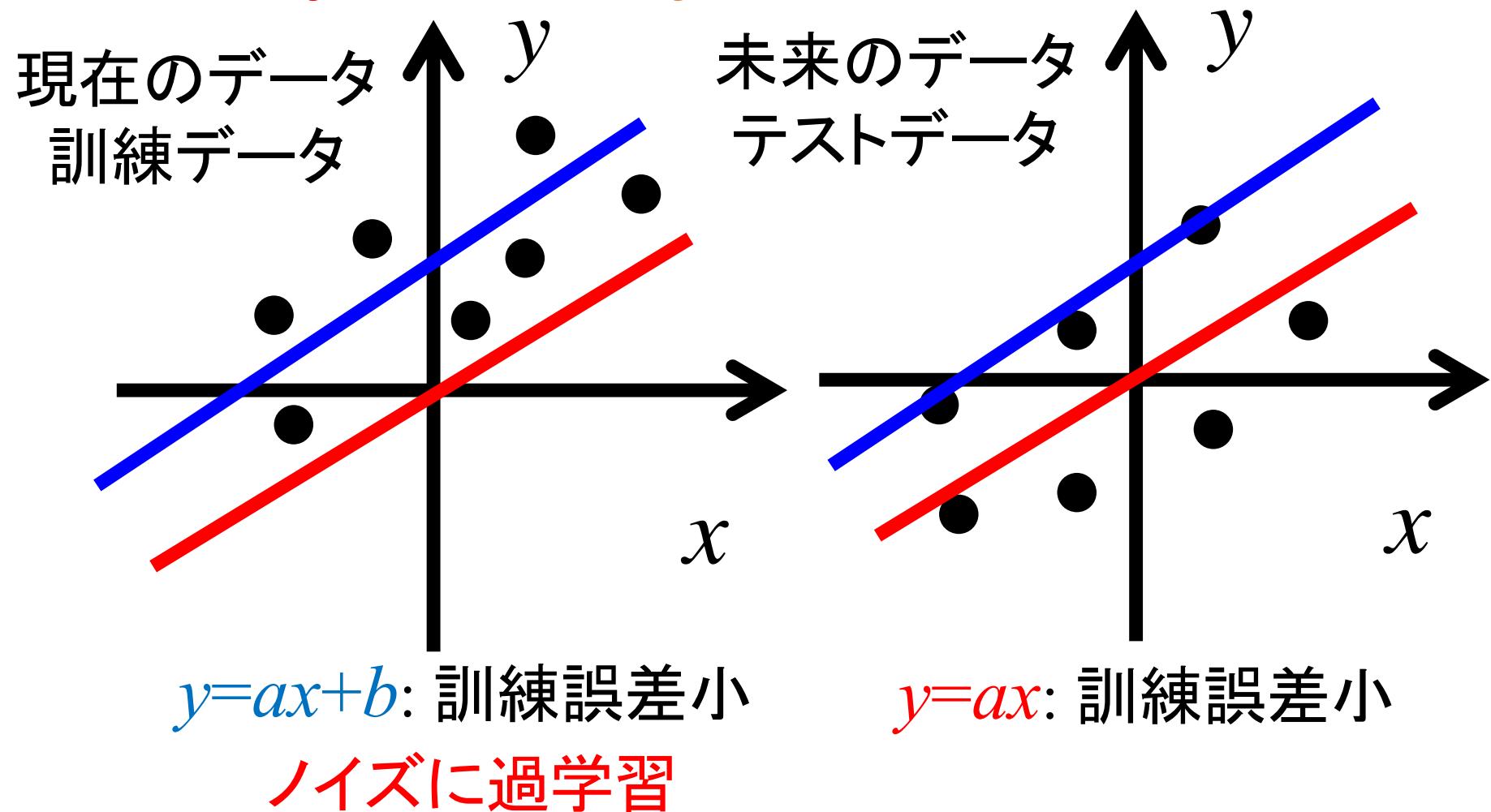
$$\begin{aligned} p(a, b|Y) &= \frac{p(Y|a, b)p(a, b)}{p(Y)} \propto p(Y|a, b) \\ &= \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} \left(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0, b_0) \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} \left(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) \right) \right\} \\ &=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

神器1: パラメータの事後確率推定 (4/4)



問題意識 神器2: ベイズ的モデル選択

$y = ax$ か $y = ax + b$ か?



モデル選択: ベイズ推論によりモデルの良さを定量的に評価

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

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

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

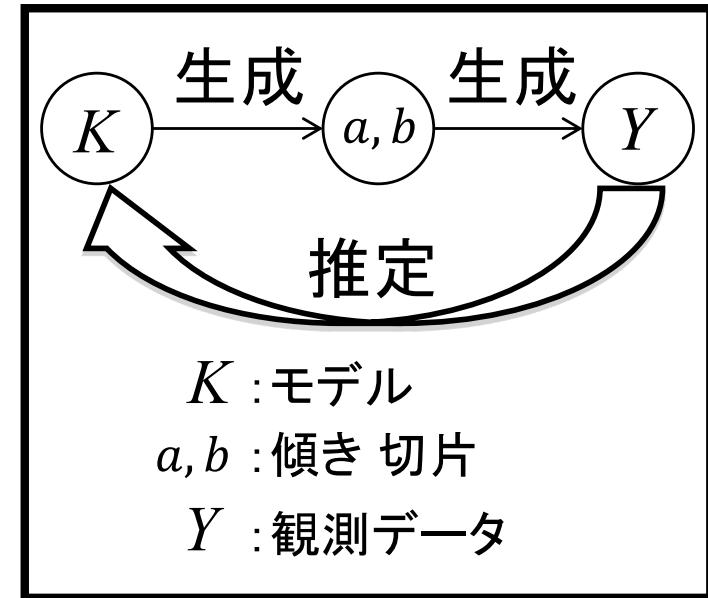
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

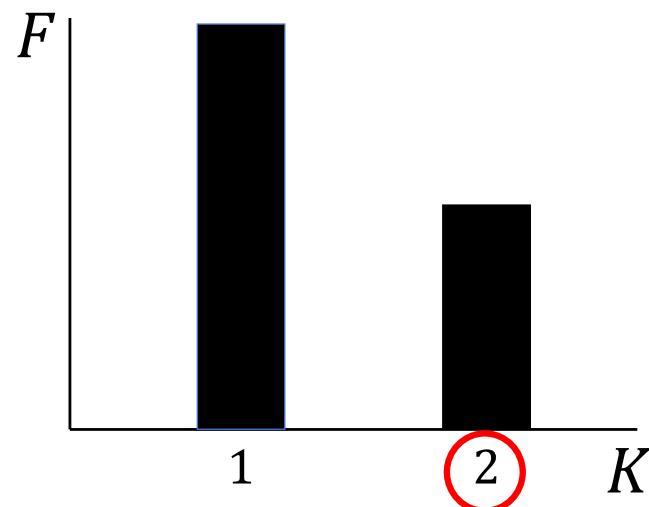
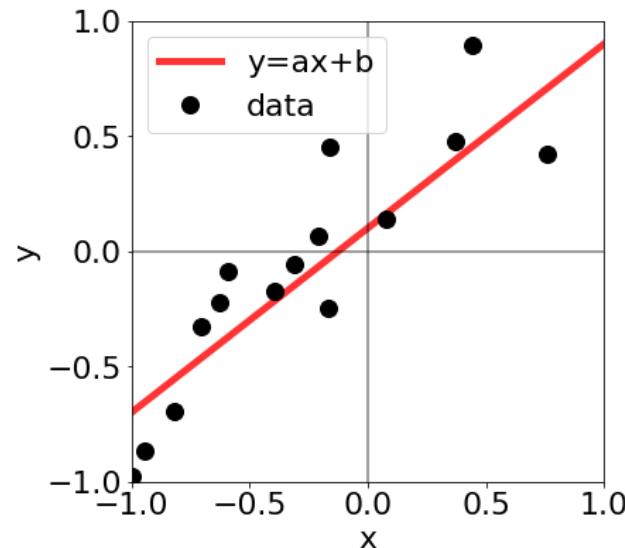
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にするモデル K を求める.



神器2: ベイズ的モデル選択 自由エネルギー差



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

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

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

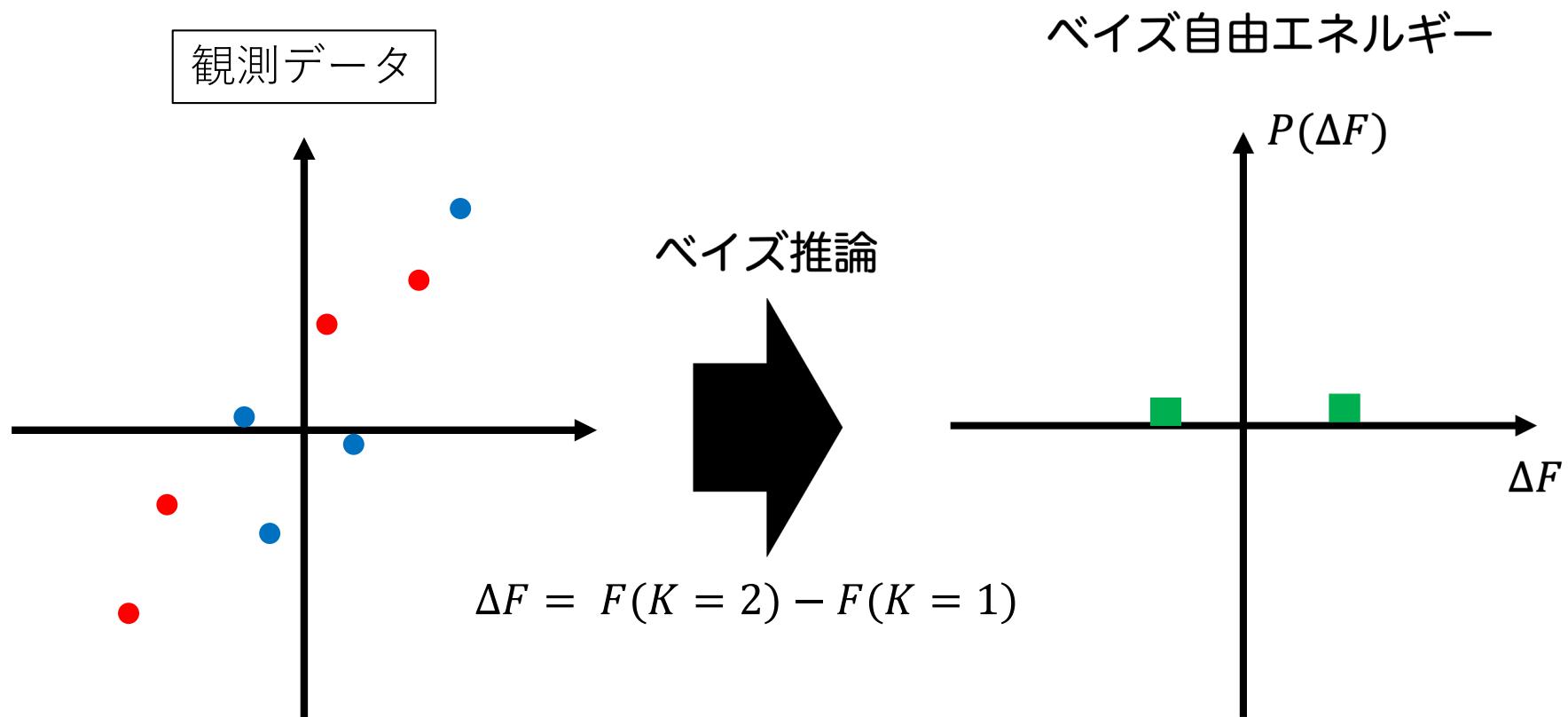
データのみからモデルを選択できる

モデル選択やベイズ統合の 自由エネルギー差

$$\Delta F = F(K=2) - F(K=1)$$

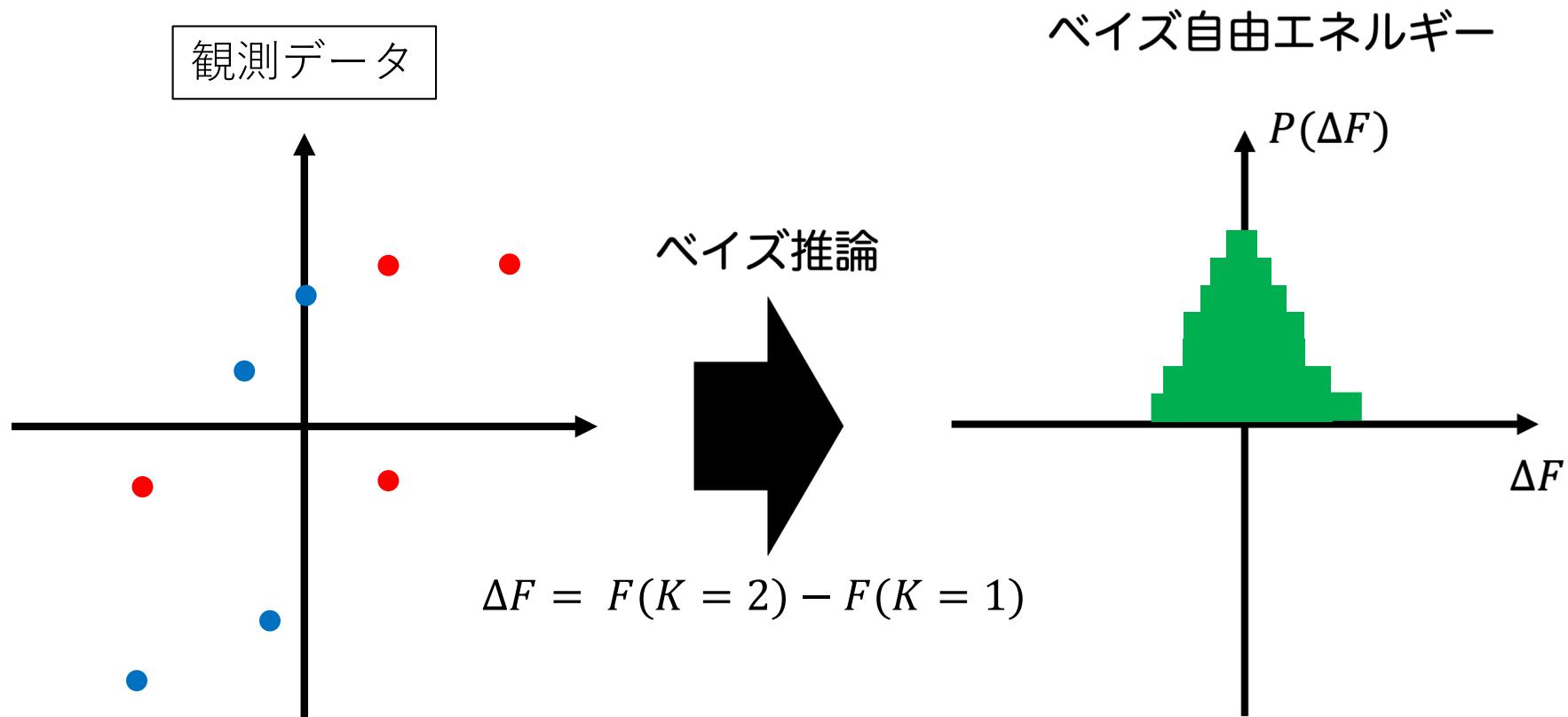
モデル選択やベイズ統合の自由エネルギー大小関係が知りたい。

モデル選択やベイズ統合の 自由エネルギー差



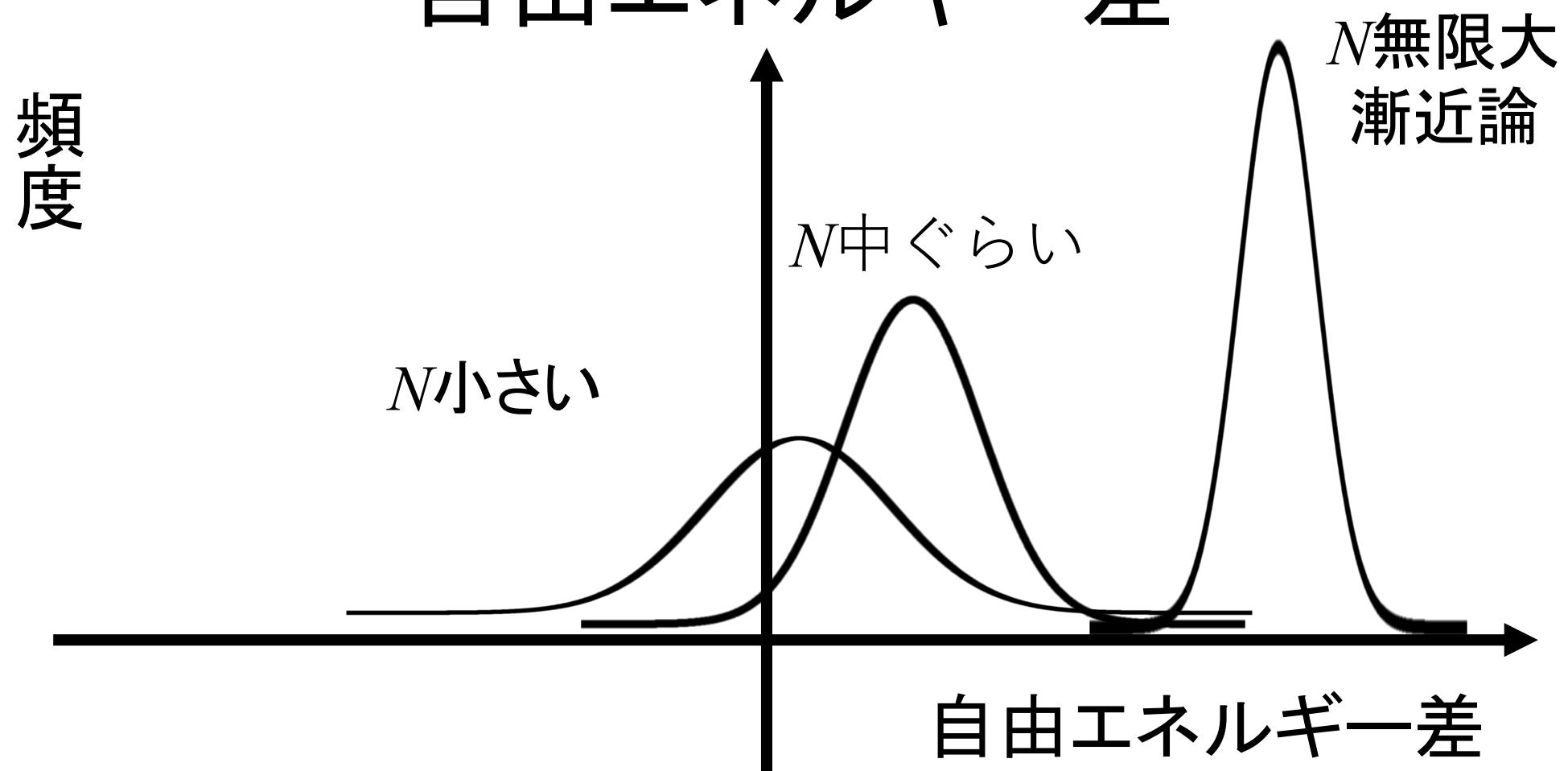
観測データ1つに対してベイズ自由エネルギー差が1つ計算できる。

モデル選択やベイズ統合の 自由エネルギー差



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

モデル選択やベイズ統合の 自由エネルギー差



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

研究の動機のまとめ

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

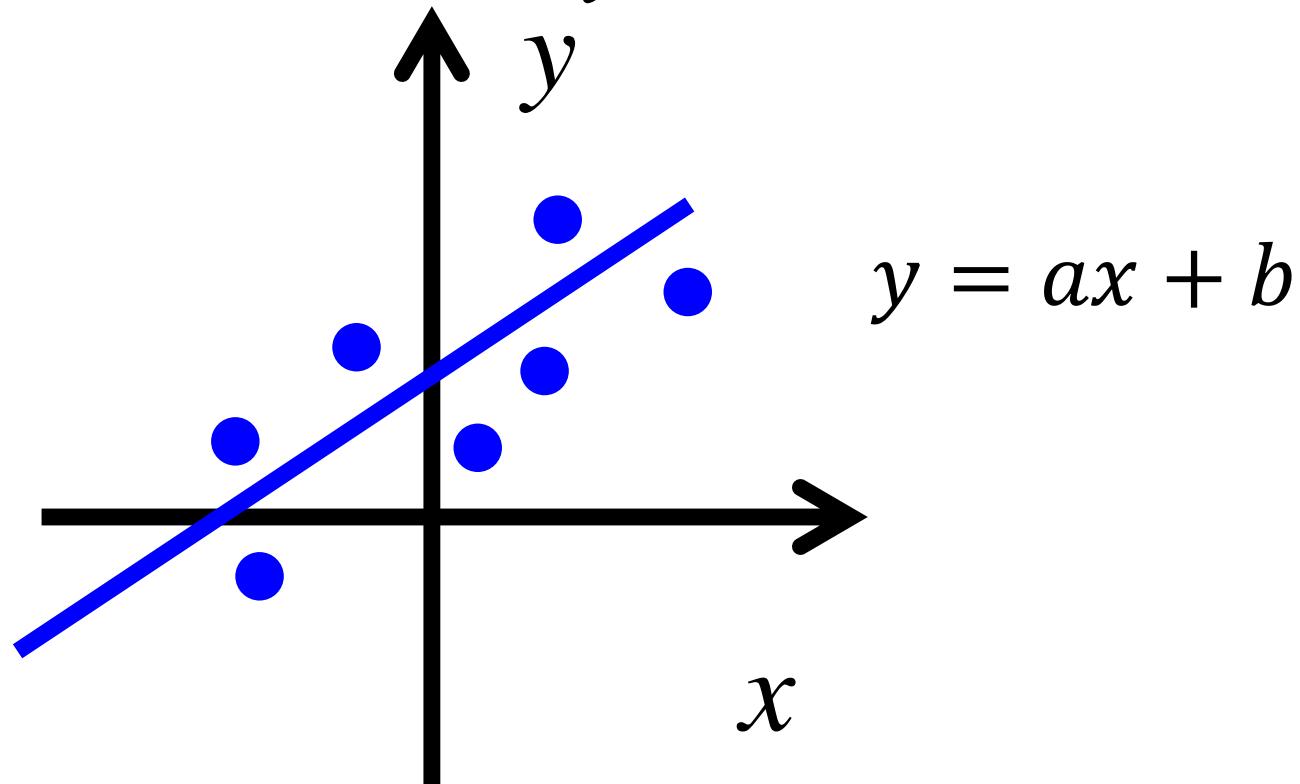
理論的枠組みが満たすべき条件

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

内容

- ・自己紹介
- ・ベイズ計測の有限理論
 - ・本研究の目的と達成イメージ
 - ・**提案理論**
 - ・ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - ・数値実験
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ・ベイズ推論のライブラリの紹介
- ・まとめ

取り扱う系: $y = ax + b$



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

定式化

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

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

$$\begin{aligned} E(a, b) &= \frac{1}{2} \left(\overline{x^2} \left(a - \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}} \right)^2 + (b - \bar{y})^2 - \frac{\overline{xy}^2}{\overline{x^2}} - \bar{y}^2 + \overline{y^2} \right) \\ &= \mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + \underline{E(a_0, b_0)} \geq \underline{E(a_0, b_0)} \end{aligned}$$

残留誤差

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

通常のベイズ計測と本研究の対応

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

通常のベイズ計測: n_i を固定して計算

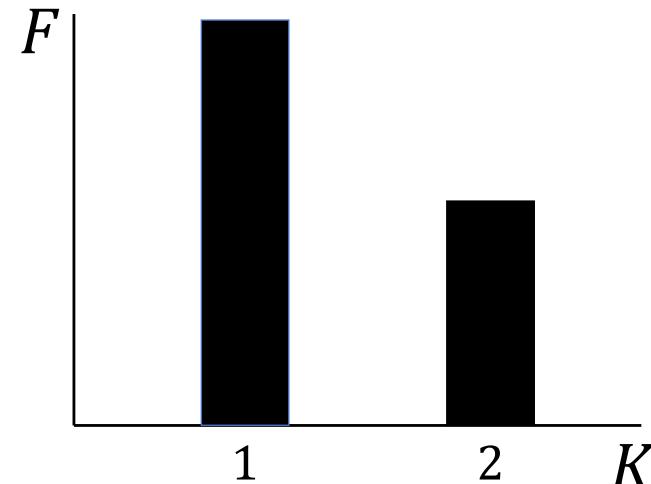
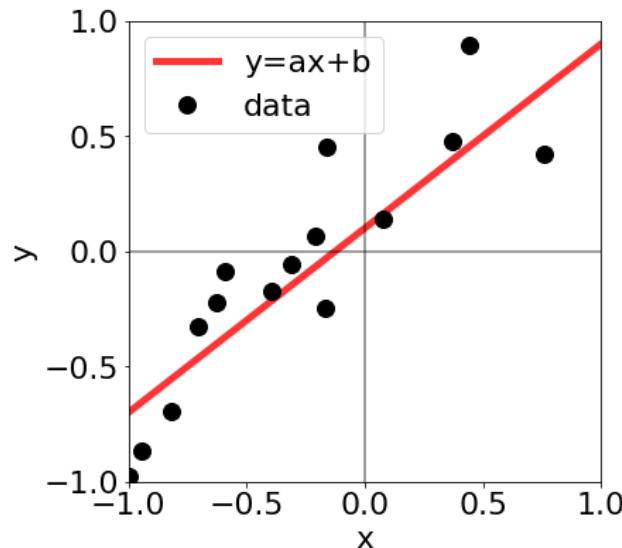
本研究: n_i の揺らぎを考慮して計算

n_i の揺らぎが自由エネルギーの差に影響

ミクロ変数とメゾ変数の導入 (1/2)

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

ベイズ自由エネルギー



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

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

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

データのみからモデルを選択できる

ミクロ変数とメゾ変数の導入 (2/2)

残留誤差は自由度 $N - 2$ の χ^2 分布

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

その内部はガウス分布が存在. a, b の推定値に対応

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

$$\overline{n}^2 = \frac{\sigma_0^2}{N} \tau_2^2 \quad \hat{b}(\tau_2) = b_0 + \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{N}} \tau_2$$

残留誤差と自由エネルギーの ミクロ表現とメゾ表現

ミクロ表現 ミクロ変数は n_i の N 変数

$$\begin{aligned} F(Y) = & \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_0^2) - \ln\left(\frac{\sigma_0^2\pi}{2N}\right) + \frac{1}{2} \ln(\bar{x}^2) + \ln(2\xi_a) + \ln(2\xi_b) + \frac{N}{\sigma_0^2} E(\hat{a}, \hat{b}) \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x}^2}{2\sigma_0^2}} (-\xi_a - \hat{a}) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x}^2}{2\sigma_0^2}} (\xi_a - \hat{a}) \right) \right] \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (-\xi_b - \hat{b}) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (\xi_b - \hat{b}) \right) \right] \end{aligned}$$

メゾ表現 メゾ変数は τ_1, τ_2, v の 3 変数

$$\begin{aligned} F(Y) = & \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_0^2) - \ln\left(\frac{\sigma_0^2\pi}{2N}\right) + \frac{1}{2} \ln(\bar{x}^2) + \ln(2\xi_a) + \ln(2\xi_b) + \frac{v}{2} \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x}^2}{2\sigma_0^2}} (-\xi_a - \hat{a}(\tau_1)) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x}^2}{2\sigma_0^2}} (\xi_a - \hat{a}(\tau_1)) \right) \right] \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (-\xi_b - \hat{b}(\tau_2)) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (\xi_b - \hat{b}(\tau_2)) \right) \right] \end{aligned}$$

モデル選択 (1/4)

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

モデル選択 (2/4)

$y = ax + b$ の自由エネルギーのメゾ変数による表現. メゾ変数は τ_1, τ_2, v_1 の3変数

$$\begin{aligned} F_{y=ax+b}(v_1, \tau_1, \tau_2) = & \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_0^2) - \ln\left(\frac{\sigma_0^2\pi}{2N}\right) + \frac{1}{2} \ln(\bar{x^2}) + \ln(2\xi_a) + \ln(2\xi_b) + \frac{v_1}{2} \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x^2}}{2\sigma_0^2}} (-\xi_a - \hat{a}(\tau_1)) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x^2}}{2\sigma_0^2}} (\xi_a - \hat{a}(\tau_1)) \right) \right] \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (-\xi_b - \hat{b}(\tau_2)) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (\xi_b - \hat{b}(\tau_2)) \right) \right] \end{aligned}$$

$y = ax$ の自由エネルギーのメゾ変数による表現
メゾ変数は τ_1, v_2 の2変数

$$\begin{aligned} F_{y=ax}(v_2, \tau_1) = & \frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma_0^2) - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\sigma_0^2\pi}{2N\bar{x^2}}\right) + \ln(2\xi_a) + \frac{v_2}{2} \\ & - \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x^2}}{2\sigma_0^2}} (-\xi_a - \hat{a}(\tau_1)) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N\bar{x^2}}{2\sigma_0^2}} (\xi_a - \hat{a}(\tau_1)) \right) \right] \end{aligned}$$

モデル選択 (3/4): メゾ変数の関係

2つの残留誤差を見る。

$$\begin{aligned} E(\hat{a}, \hat{b}) &= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \{y_i - (\hat{a}x_i + \hat{b})\}^2 \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \{(y_i - \hat{a}x_i) - \hat{b}\}^2 \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{a}x_i)^2 - 2\hat{b}(y_i - \hat{a}x_i) + \hat{b}^2 \\ &= E(\hat{a}) + \frac{1}{2}\hat{b}^2 - \hat{b}\bar{y} \\ &= E(\hat{a}) - \frac{1}{2}\hat{b}^2 \\ &= E(\hat{a}) - \frac{1}{2}(b_0 + \bar{n})^2 \\ &= E(\hat{a}) - \frac{1}{2} \left(b_0 + \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{N}}\tau_2 \right)^2 \end{aligned}$$

と書くことができる。従って

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

モデル選択 (4/4)

$y = ax + b$ と $y = ax$ の自由エネルギーの差の
メゾ変数による表現: メゾ変数は τ_2 の1変数

$$\begin{aligned}\Delta F(\tau_2) &= F_{y=ax}(v_2, \tau_1) - F_{y=ax+b}(v_1, \tau_1, \tau_2) \\ &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_0^2 \pi}{2N} \right) - \ln(2\xi_b) + \frac{N}{2\sigma_0^2} \hat{b}(\tau_2)^2 \\ &\quad + \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (-\xi_b - \hat{b}(\tau_2)) \right) - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{N}{2\sigma_0^2}} (\xi_b - \hat{b}(\tau_2)) \right) \right].\end{aligned}$$

自由エネルギー差の分布の解析的表式

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

ベイズ統合 (1/3)

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

ベイズ統合 (2/3)

$y = ax + b$ の統合しない場合の自由エネルギーのメゾ変数による表現

$$F^{\text{iso}}(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)}, \tau_2^{(1)}, \tau_2^{(2)}, v^{(1)}, v^{(2)}) \quad (122)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{m=1}^2 \frac{N_m}{2} \ln(2\pi\sigma^{(m)2}) - \ln\left(\frac{\sigma^{(m)2}\pi}{2N_m}\right) + \frac{1}{2} \ln\left(x^{(m)2}\right) + \ln(2\xi_a^{(m)}) + \ln(2\xi_b^{(m)}) + \frac{N_m}{\sigma^{(m)2}} E_m(\hat{a}^{(m)}, \hat{b}^{(m)}) \\ &\quad - \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_m x^{(m)2}}{2\sigma^{(m)2}}}(-\xi_a^{(m)} - \hat{a}^{(m)})\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_m x^{(m)2}}{2\sigma^{(m)2}}}(\xi_a^{(m)} - \hat{a}^{(m)})\right)\right] \\ &\quad - \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_m}{2\sigma^{(m)2}}}(-\xi_b^{(m)} - \hat{b}^{(m)})\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{N_m}{2\sigma^{(m)2}}}(\xi_b^{(m)} - \hat{b}^{(m)})\right)\right] \end{aligned} \quad (123)$$

$y = ax + b$ の統合する場合の自由エネルギーのメゾ変数による表現

$$\begin{aligned} F^{\text{int}}(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)}, \tau_2^{(1)}, \tau_2^{(2)}, v^{(1)}, v^{(2)}) &= \frac{N_1}{2} \ln 2\pi(\sigma^{(1)2}) + \frac{N_2}{2} \ln 2\pi(\sigma^{(2)2}) + \ln 2\xi_a + \ln 2\xi_b + E(\hat{a}, \hat{b}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \ln \frac{2(\beta^{(1)}x^{(1)2} + \beta^{(2)}x^{(2)2})}{\pi} + \frac{1}{2} \ln \frac{2(\beta^{(1)} + \beta^{(2)})}{\pi} \\ &\quad - \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)}x^{(1)2} + \beta^{(2)}x^{(2)2}}{2}}(-\xi_a - \hat{a}(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)}))\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)}x^{(1)2} + \beta^{(2)}x^{(2)2}}{2}}(\xi_a - \hat{a}(\tau_1^{(1)}, \tau_1^{(2)}))\right)\right] \\ &\quad - \ln\left[\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)} + \beta^{(2)}}{2}}(-\xi_b - \hat{b}(\tau_2^{(1)}, \tau_2^{(2)}))\right) - \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\beta^{(1)} + \beta^{(2)}}{2}}(\xi_b - \hat{b}(\tau_2^{(1)}, \tau_2^{(2)}))\right)\right] \end{aligned} \quad (124)$$

ベイズ統合 (3/3)

統合する場合と統合しない場合の
自由エネルギーの差のメゾ変数による表現

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

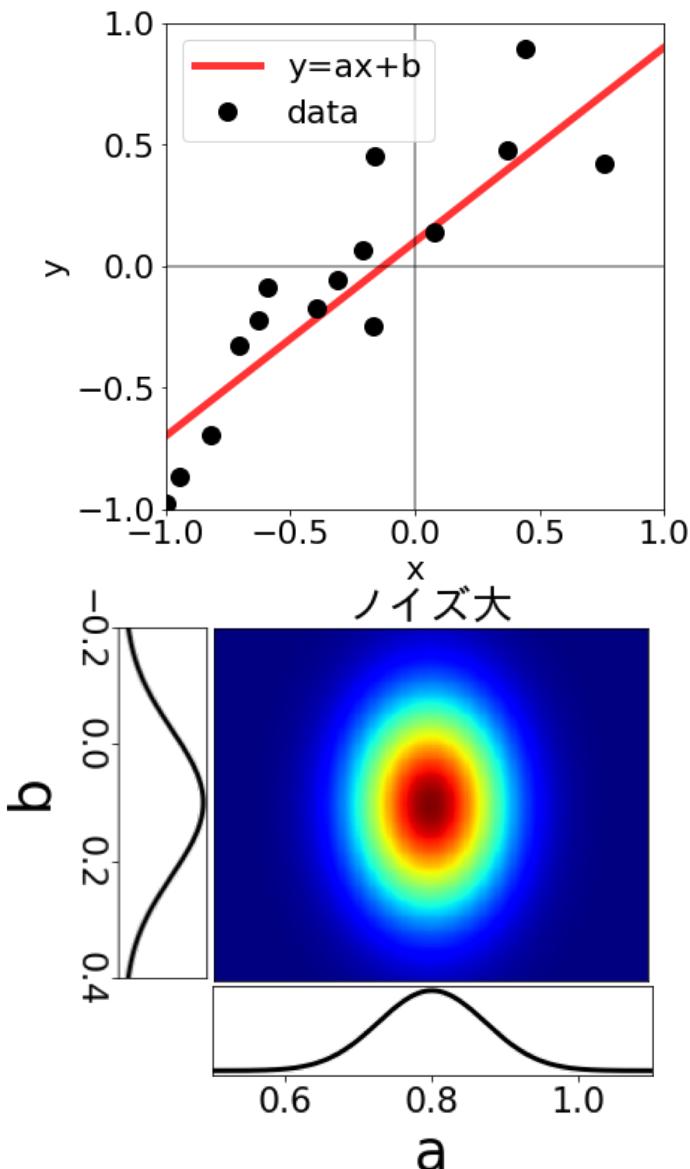
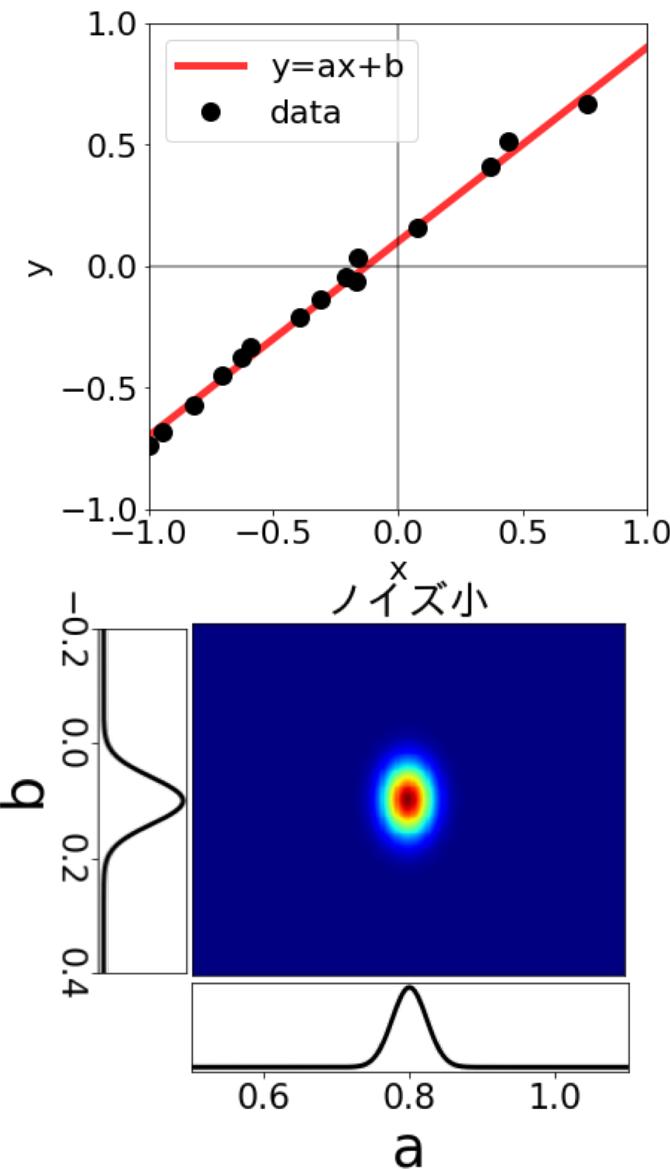
自由エネルギー差の分布の解析的表式

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

内容

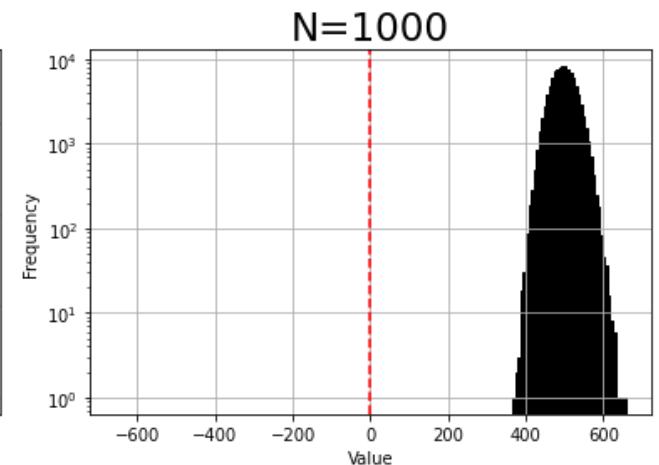
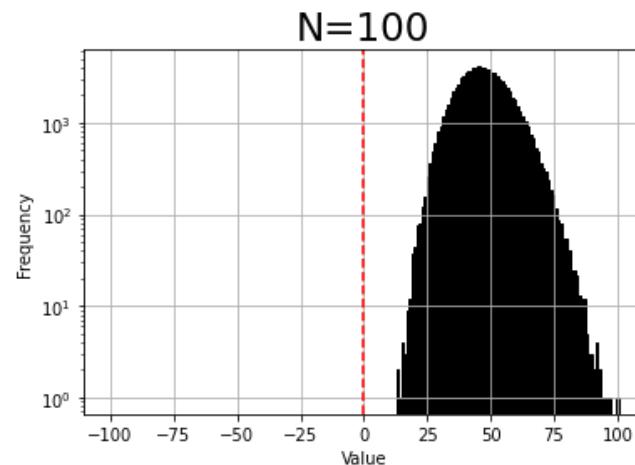
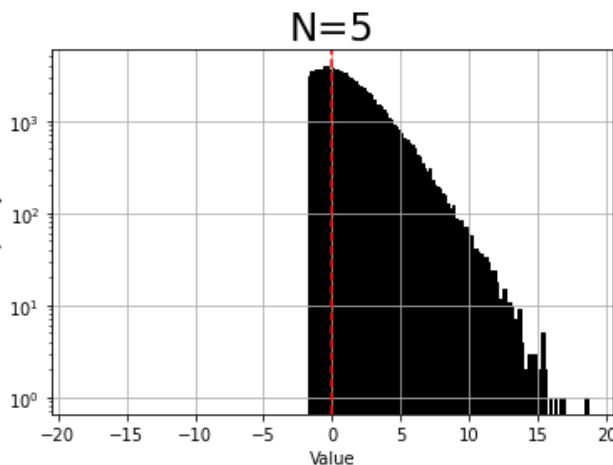
- ・自己紹介
- ・ベイズ計測の有限理論
 - ・ベイズ計測：本研究の目的と達成イメージ
 - ・提案理論
 - ・ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ・**数値実験**
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
- ・ベイズ推論のライブラリの紹介
- ・まとめ

パラメータの事後確率推定



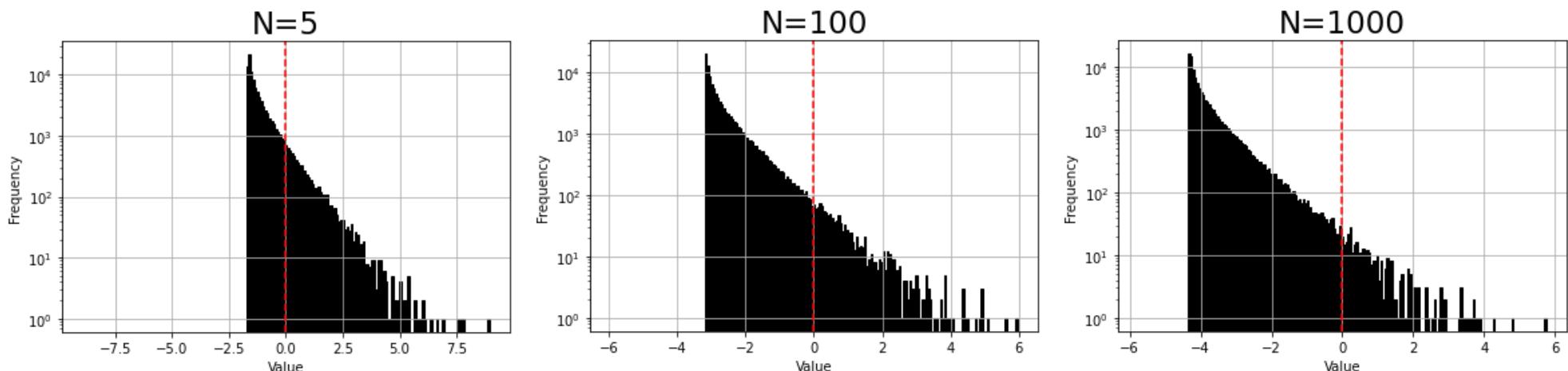
モデル選択における 自由エネルギー差の確率分布 真のモデルは $y = ax + b$

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



モデル選択における 自由エネルギー差の確率分布

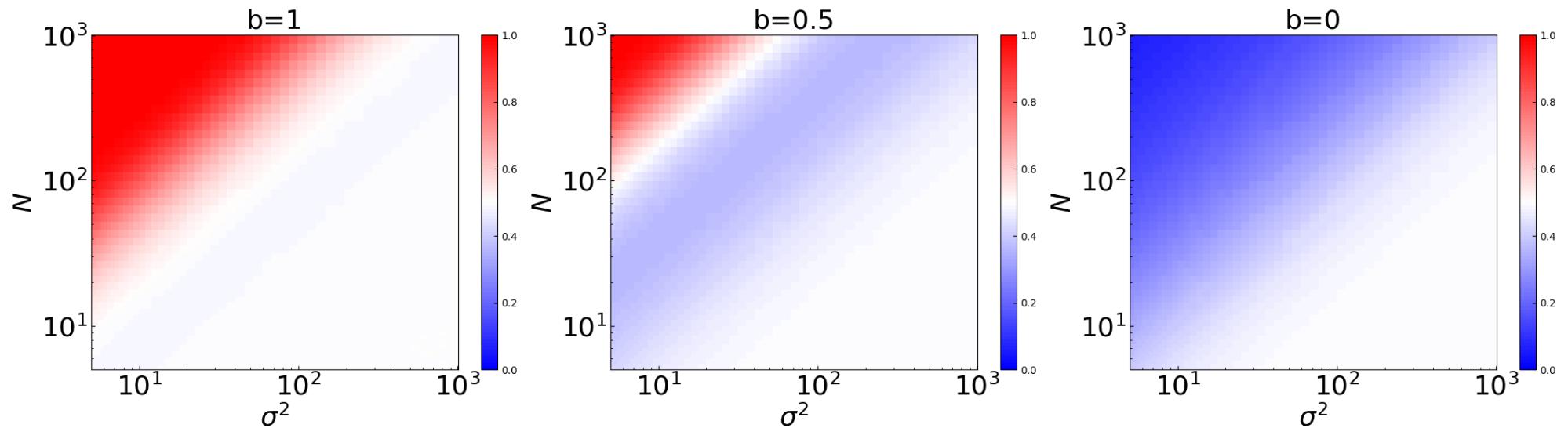
真のモデルは $y = ax$

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


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

提案理論のみから得られる新規な知見

ベイズ自由エネルギーの差の確率分布



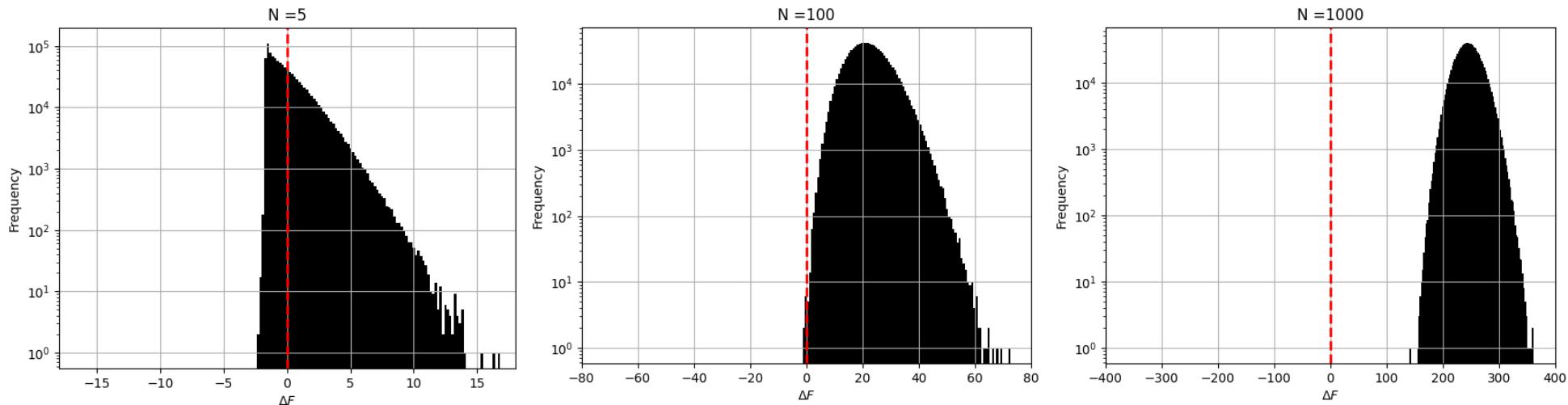
N と σ^2 が大きくなると途中でどちらのモデルかがわからなくなる

提案理論のみから得られる新規な知見

ベイズ統合における 自由エネルギー差の確率分布

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

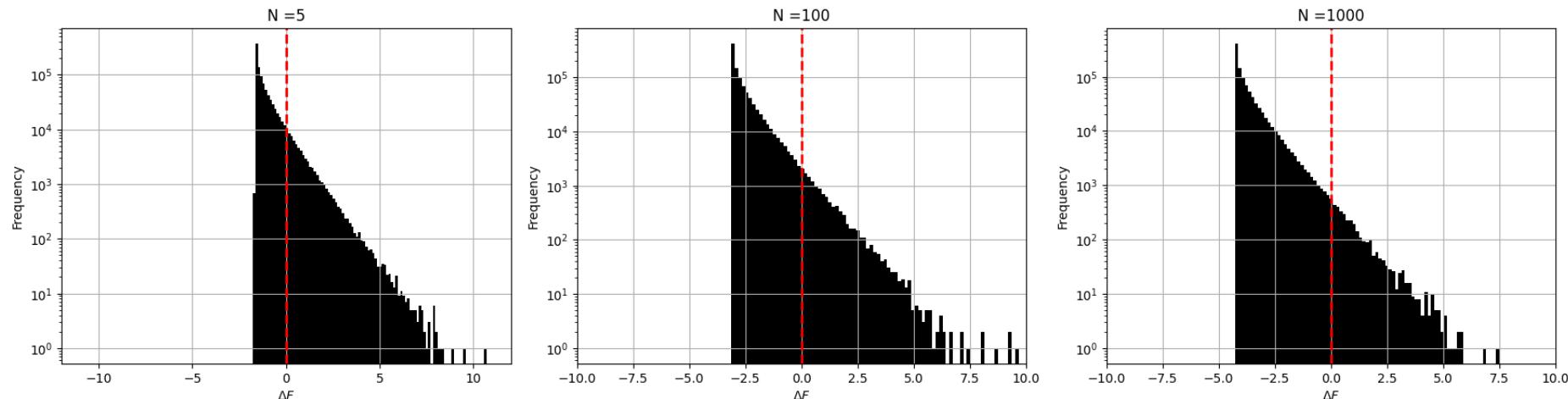
$$a_1^0 = 2.0, a_2^0 = 4.0$$



ベイズ統合における 自由エネルギー差の確率分布

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

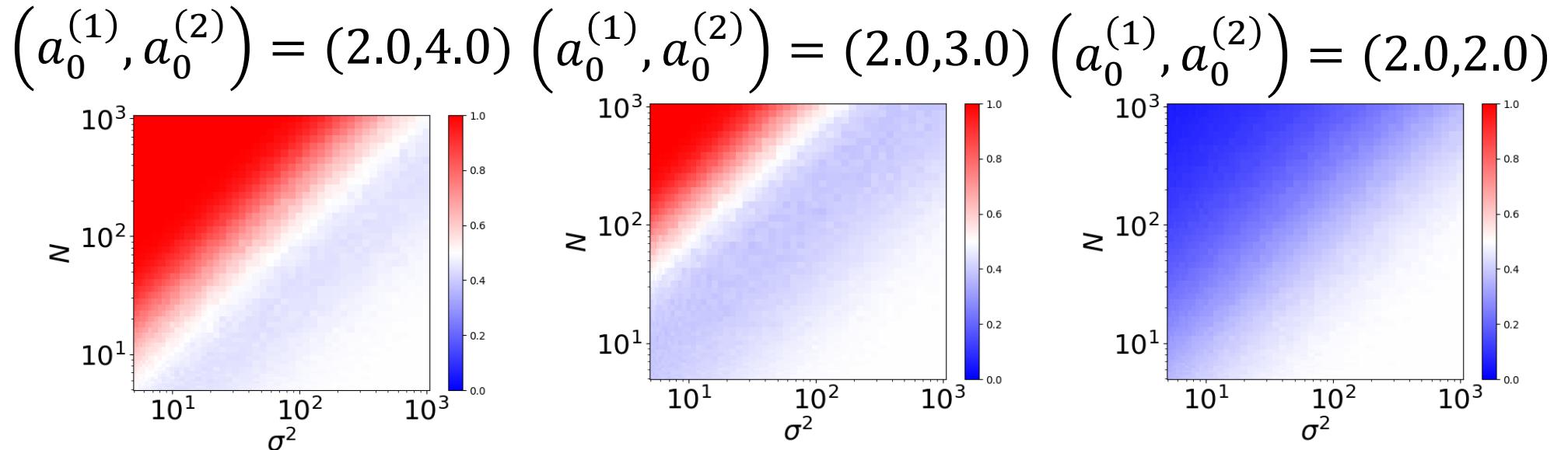
$$a_1^0 = 2.0, a_2^0 = 2.0$$



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

提案理論のみから得られる新規な知見

ベイズ自由エネルギーの差の確率分布



N と σ^2 が大きくなると途中で統合すべきかどうかがわからなくなる

提案理論のみから得られる新規な知見

内容

- 自己紹介
- ベイズ計測の有限理論
 - 本研究の目的と達成イメージ
 - 提案理論
 - ベイズ計測と取り扱う系
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - 数値実験
 - パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - まとめ
- ベイズ推論のライブラリの紹介
- まとめ

まとめ

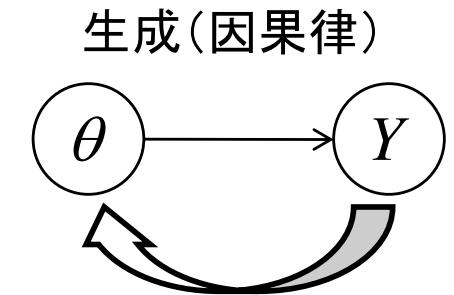
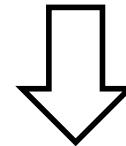
- ・計測点数 N 有限のメゾ理論を構築した。
- ・有限サイズ効果は著しく存在する。これは我々の構築した理論のみから得られる知見である。
- ・モデル選択結果や統合の可否は有限サイズ効果に大きく影響される。
- ・ベイズ推論において、**有限サイズ効果を取り扱った定量的理論はこれまで存在せず**、この理論はベイズ計測の**数理情報基盤**足り得る。
- ・ $y=ax+b$ はトイモデルではなく、実際のデータ解析に用いられる実践的なモデルである。
- ・非線形な系に対する定性的な知見を得ることができる。計測点数 N が300程度であれば、計測点数 N の有限性を考慮しなくて良い。

内容

- ・自己紹介
- ・ベイズ計測の有限理論
 - ・本研究の目的と達成イメージ
 - ・提案理論
 - ・ベイズ計測と取り扱う系
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - ・数値実験
 - ・パラメータ事後分布推定、モデル選択、ベイズ統合
 - ・まとめ
- ・ベイズ推論のライブラリの紹介
- ・まとめ

ベイズ推論

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



〈ベイズの定理〉

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

$p(\theta | Y)$: 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.

$p(\theta)$: 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

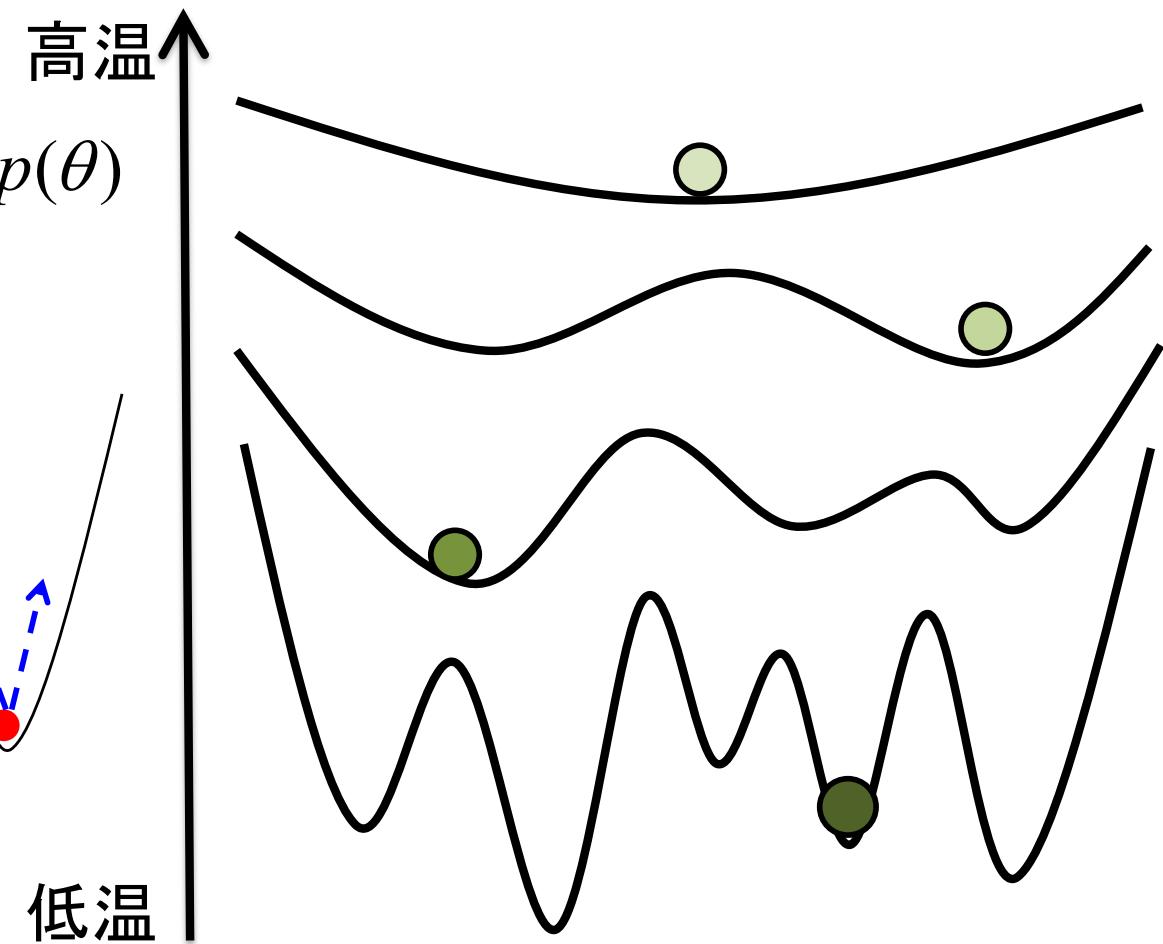
モンテカルロ法の適用 レプリカ交換モンテカルロ法

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

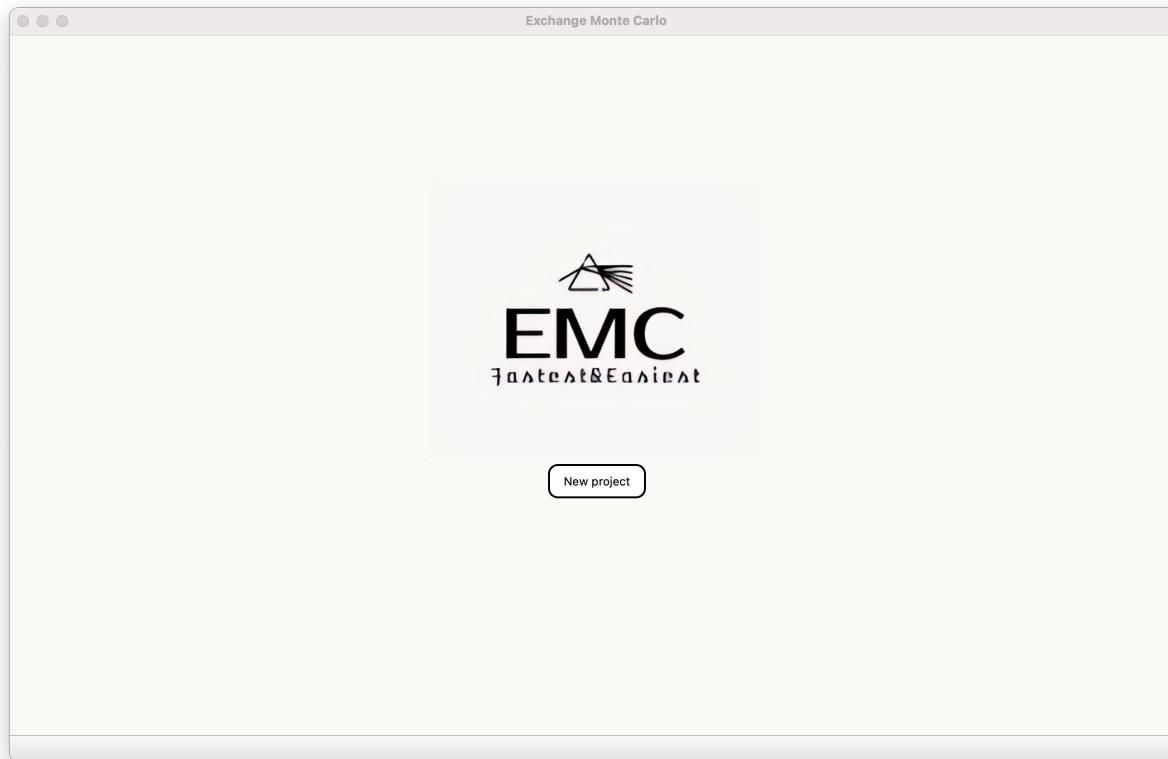


K. Hukushima, K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996).

01



アプリケーション EMC



スペクトル分解の定式化

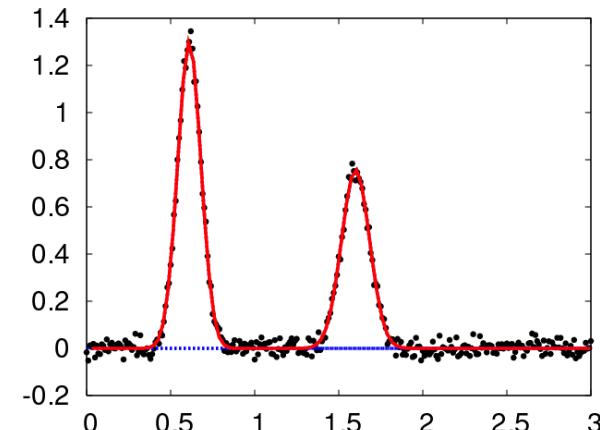
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより、スペクトルデータを近似

$$\text{観測データ}: D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$$

x_i : 入力 y_i : 出力

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

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

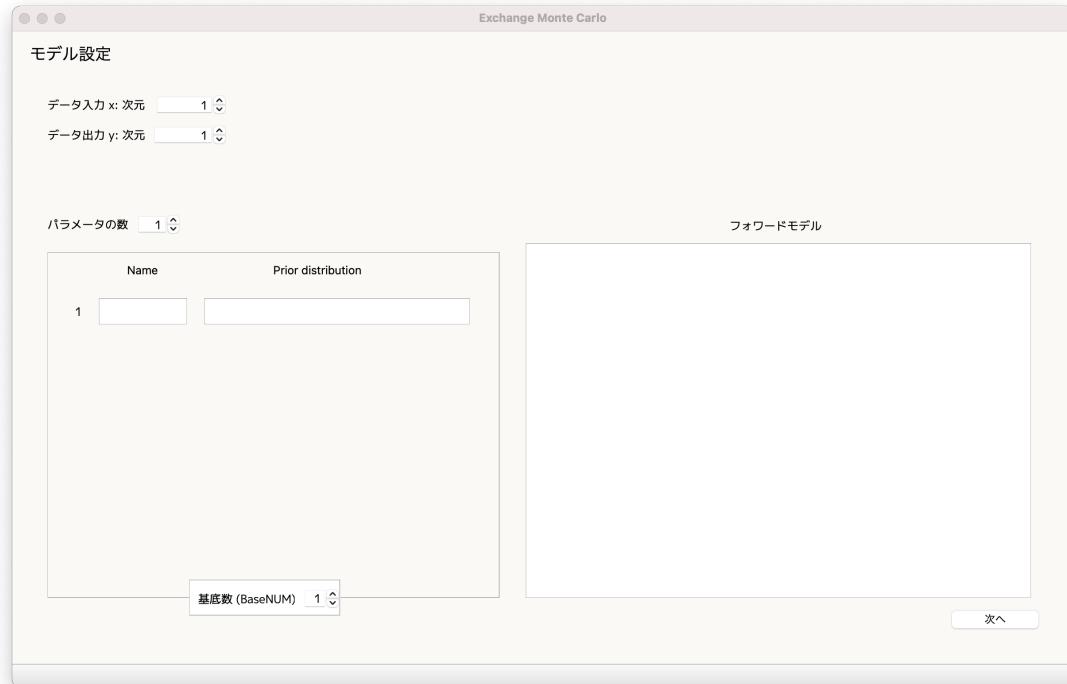


二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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



01 EMCによるスペクトル分解実装

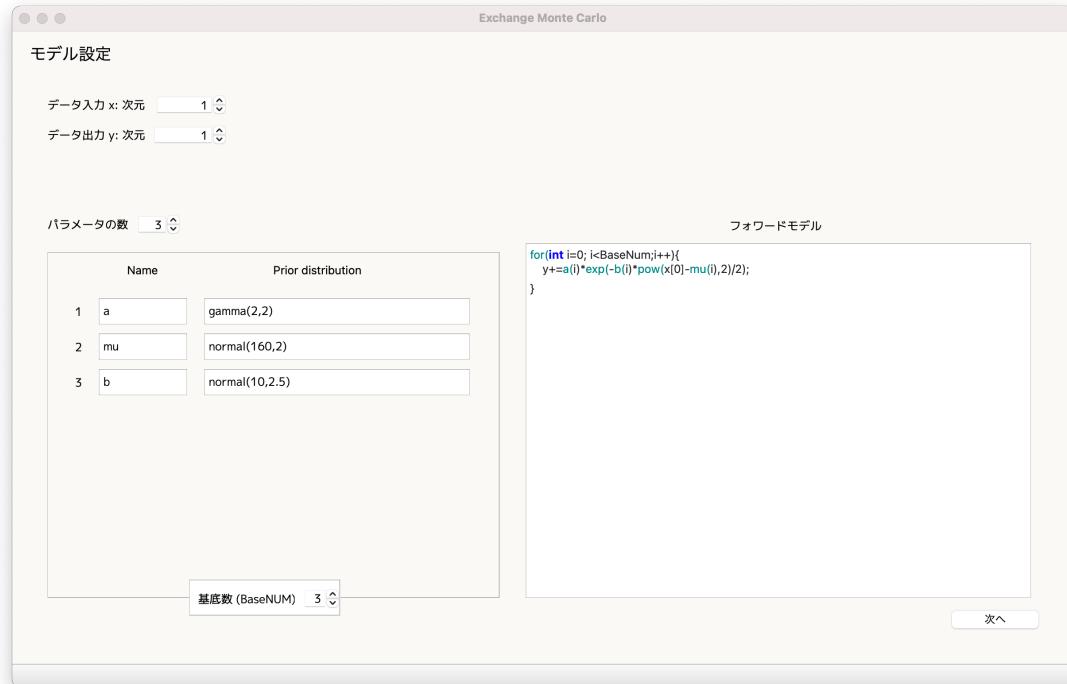


フォワードモデル

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



02 EMCによるスペクトル分解実装



フォワードモデル

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



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 ^

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

基底数 (BaseNUM) ^

フォワードモデル

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

```
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

サンプリング設定とデータの設定

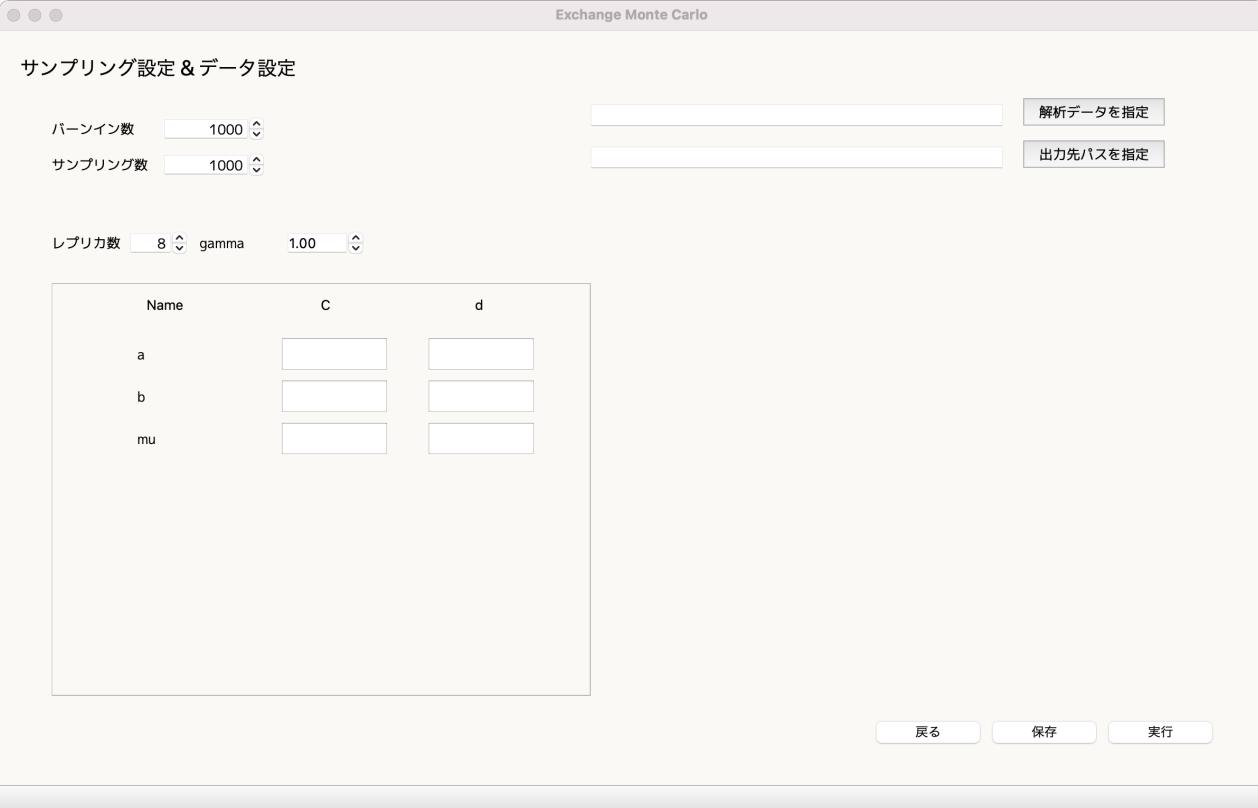
Exchange Monte Carlo

サンプリング設定 & データ設定

バーンイン数	1000	▼		解析データを指定	
サンプリング数	1000	▼		出力先/パスを指定	
レプリカ数	8	▼	gamma	1.00	▼

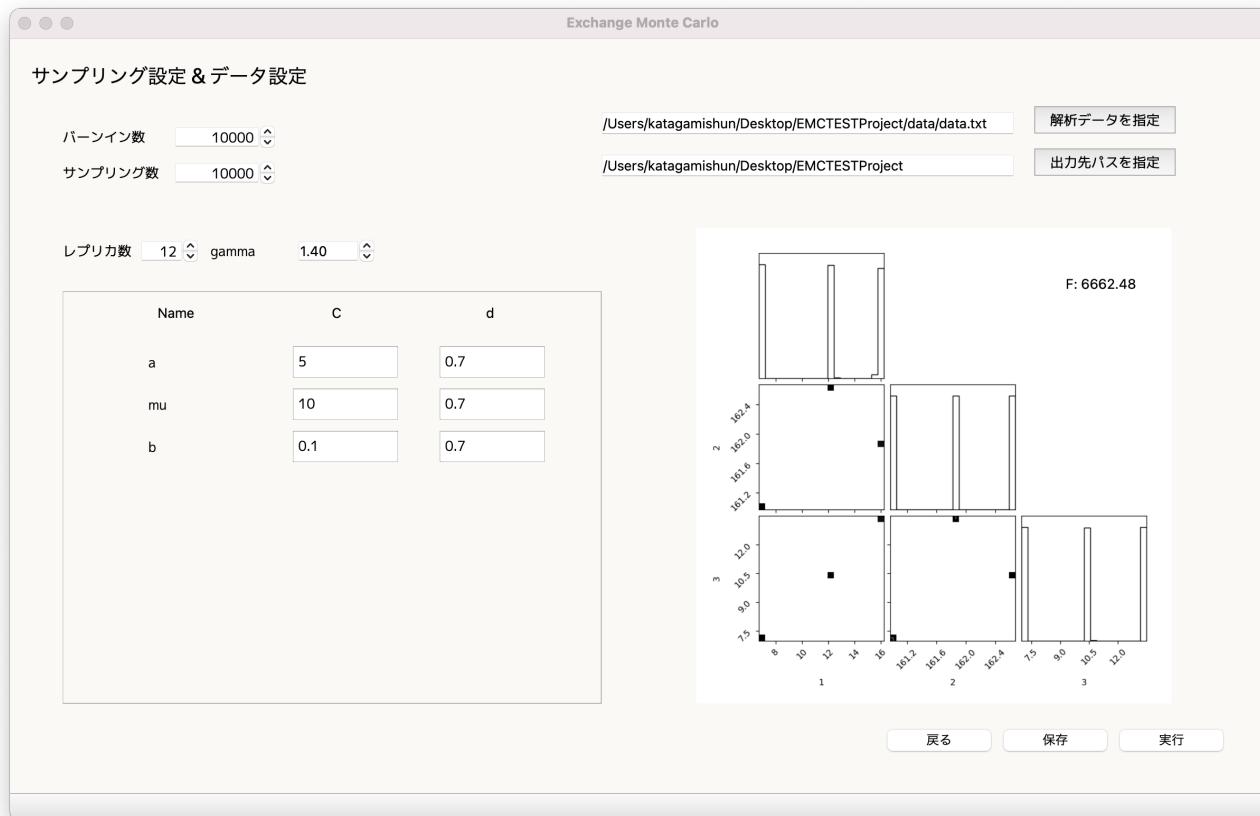
Name	C	d
a	<input type="text"/>	<input type="text"/>
b	<input type="text"/>	<input type="text"/>
mu	<input type="text"/>	<input type="text"/>

戻る 保存 実行





04 EMCによるスペクトル分解実装





01 まとめ :ベイズ推論のライブラリの紹介

- ・ 基本的なベイズ推論ワークフローを完備
- ・ 迅速に実装可能かつ柔軟なモデル構築が可能なUI
- ・ 実行解析結果の可視化
- ・ ベイズ推論の高速な実行
- ・ プロト版であれば共有可能

