



分散関係計測データに対する ベイズパラメータ推定

片上 舜

東京大学 大学院新領域創成科学研究所



- Shun Katakami, Hirotaka Sakamoto, Kenji Nagata, Taka-hisa Arima, and Masato Okada

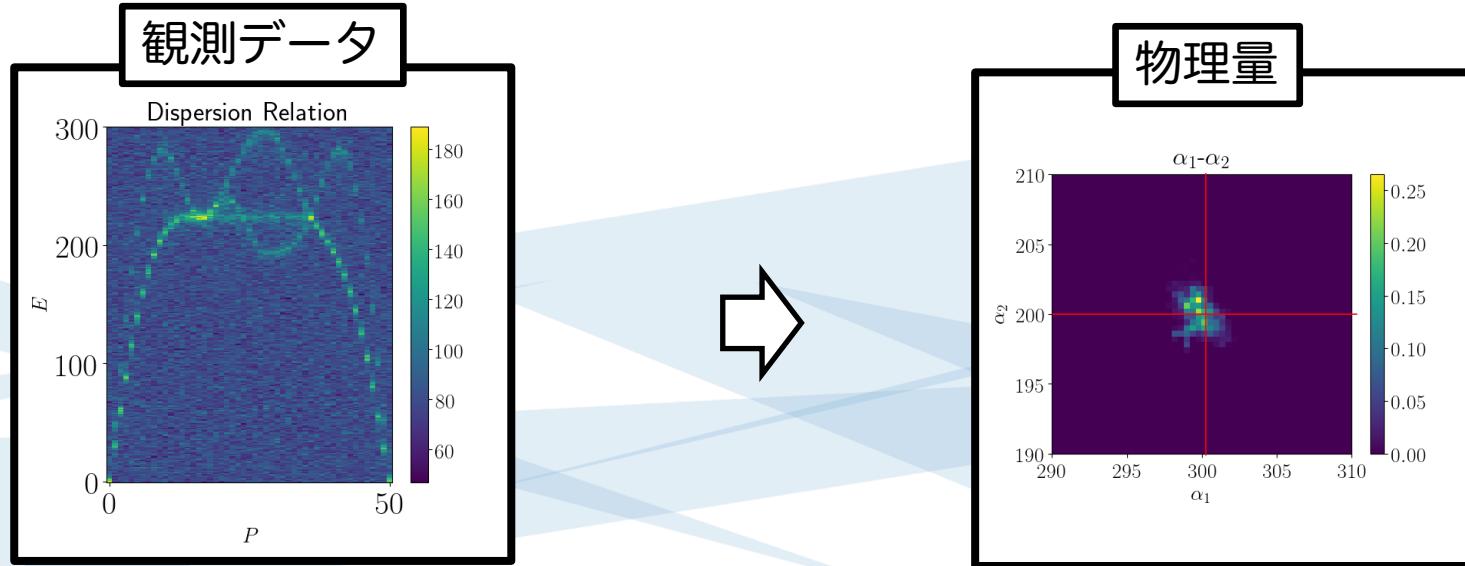
"Bayesian parameter estimation from dispersion relation observation data with Poisson process"

Physical Review E 105, 065301(2022)

- H. Sakamoto, S. Katakami, K. Muto, K. Nagata, T. Arima, and M. Okada

"Bayesian Parameter Estimation Using Dispersion Relation Spectra"

Journal of the Physical Society of Japan, 89, 124002, (2020)





では今日は非弾性散乱実験の解析方法のお話?



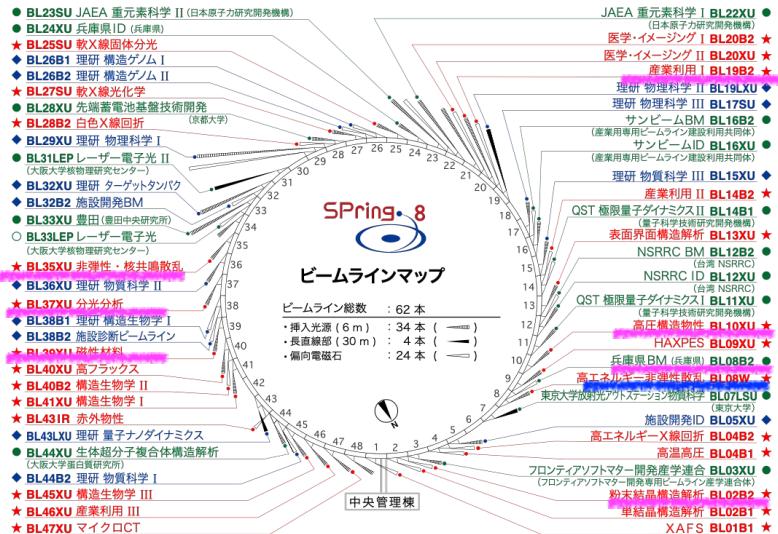
ベイズ計測を是非導入してみて欲しい層

スペクトルや画像データなど観測データからフィッティングやパラメータ推定を行っている方で

- そのフィッティングの際に、パラメータを手打ちで決めている。最急降下法などを使っているが、うまくいかない。
- フィッティング用のモデルが複数あって、どれが正しいモデルなのかがわからない。
- S/Nが悪いデータや欠損データからなんとか知見を得たい。
- 複数計測の統合を行いたい。
- そのような方は、一度ベイズ計測をお試しください。

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
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 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

来年度には過半数をこえる予定

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

共著者



武藤健介
東京大学



坂本浩隆
東京大学



岡田真人
東京大学



永田賢二
産総研



有馬孝尚
東京大学

目次

- ベイズ計測とは
 - 解析的に解けるベイズ推論：線形回帰問題
 - 数値的に解くベイズ推論：スペクトル分解
- 非弾性散乱実験のベイズ推論
 - ガウスノイズモデル
 - ポアソンノイズモデル
- まとめ
 - 物性科学とベイズ推論
 - EMCライブラリー

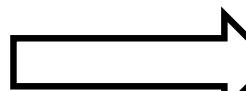
目次

- ベイズ計測とは
 - 解析的に解けるベイズ推論：線形回帰問題
 - 数値的に解くベイズ推論：スペクトル分解
- 非弾性散乱実験のベイズ推論
 - ガウスノイズモデル
 - ポアソンノイズモデル
- まとめ
 - 物性科学とベイズ推論
 - EMCライブラリー

ベイズ計測

順アプローチ

計測データ



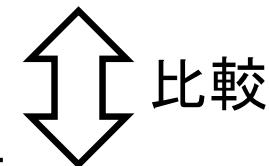
実験の結果

モデル



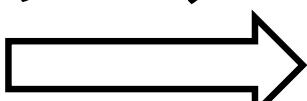
理論の結果

$p(Y | \theta, K)$ 解析計算, 数値計算



逆アプローチ

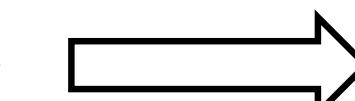
対象とする
物理系



系の物理

モデル

$p(\theta, K)$



観測過程

計測機器の特性

計測データ

$p(\theta, K | Y)$

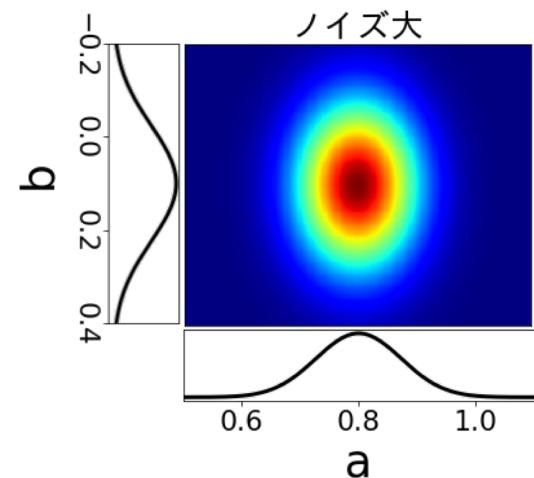


全てをモデル化し

ベイズの定理で因果をさかのぼる

ベイズ推論のご利益

- ・パラメータを確率分布として推定
 - ・推定精度を議論できる。
- ・従来手法の推定性能を改善できる可能性
 - ・適切なモデル化によって推定性能改善
- ・モデル選択
 - ・モデルが候補の中からどれが適切なのか
- ・複数の計測データを同時評価
 - ・推定精度向上の可能性



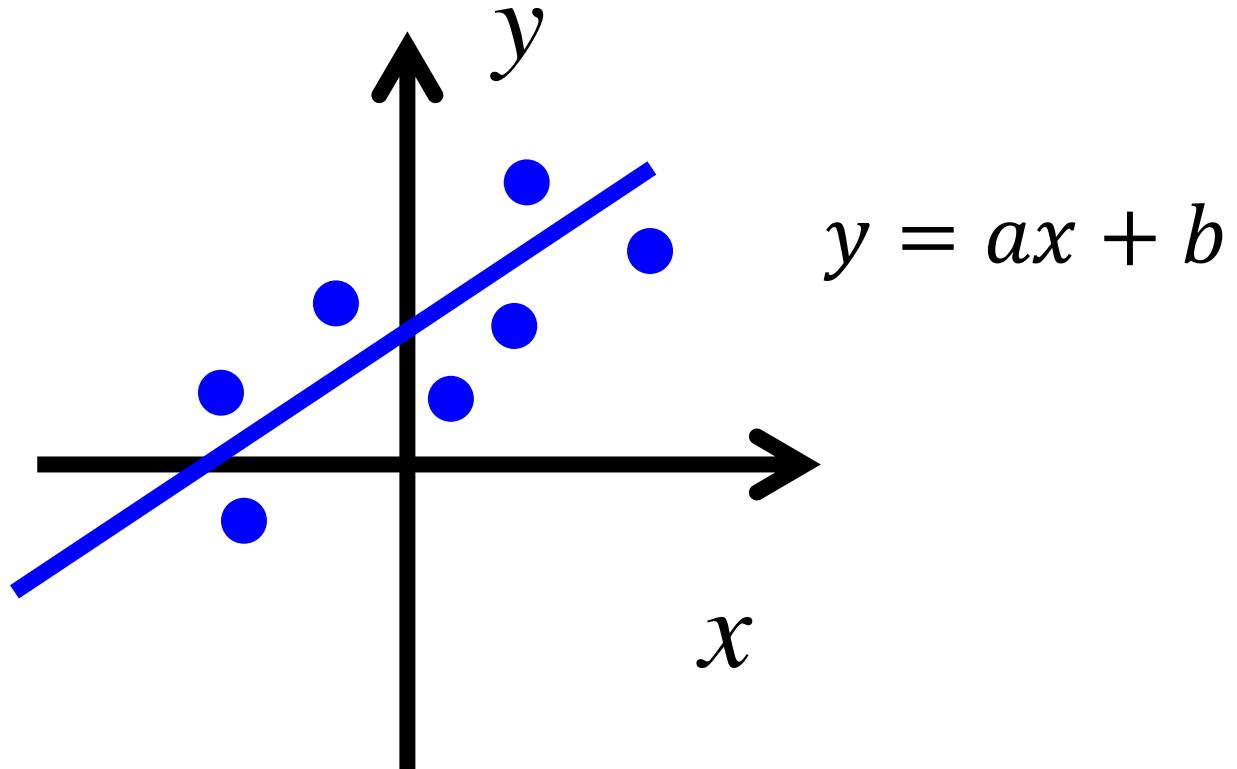
目次

- ベイズ計測とは
 - 解析的に解けるベイズ推論：線形回帰問題
 - 数値的に解くベイズ推論：スペクトル分解
- 非弾性散乱実験のベイズ推論
 - ガウスノイズモデル
 - ポアソンノイズモデル
- まとめ
 - 物性科学とベイズ推論
 - EMCライブラリー



線形回歸問題

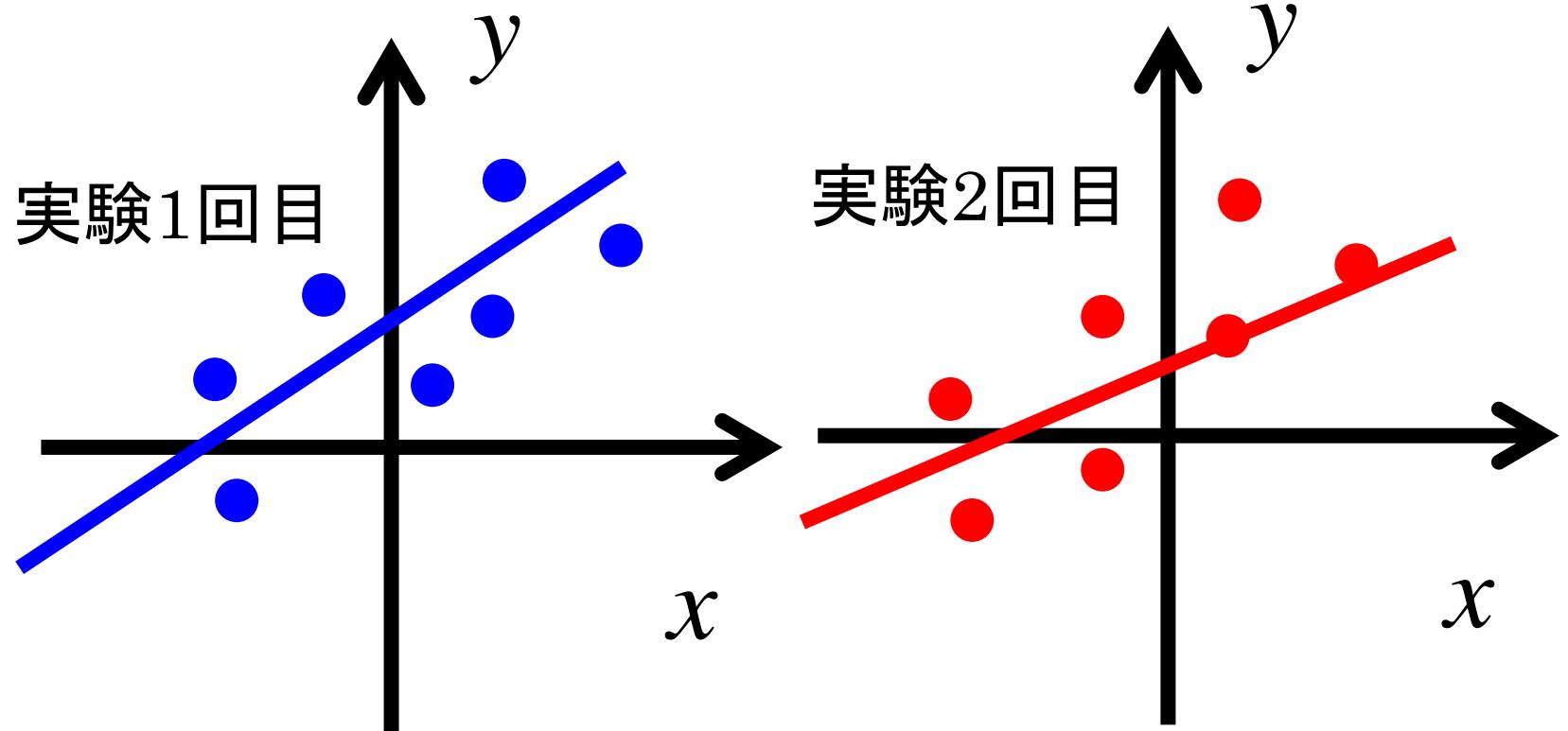
線形回帰問題



傾き a : 系の線形応答、バネ定数、電気伝導度、誘電率、

データのばらつきの評価

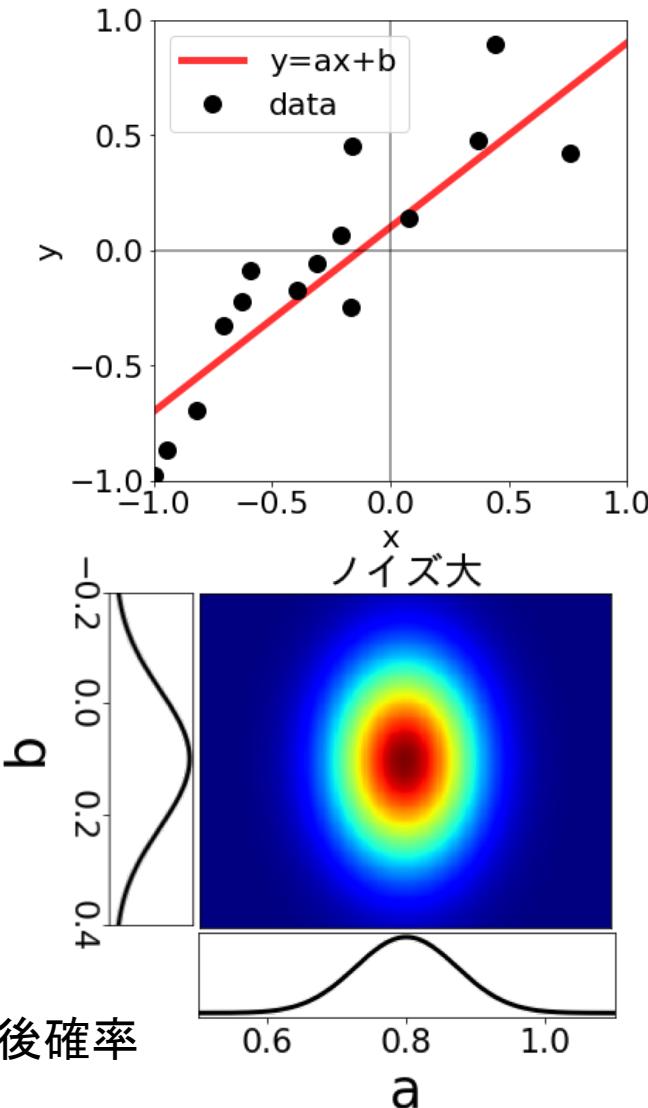
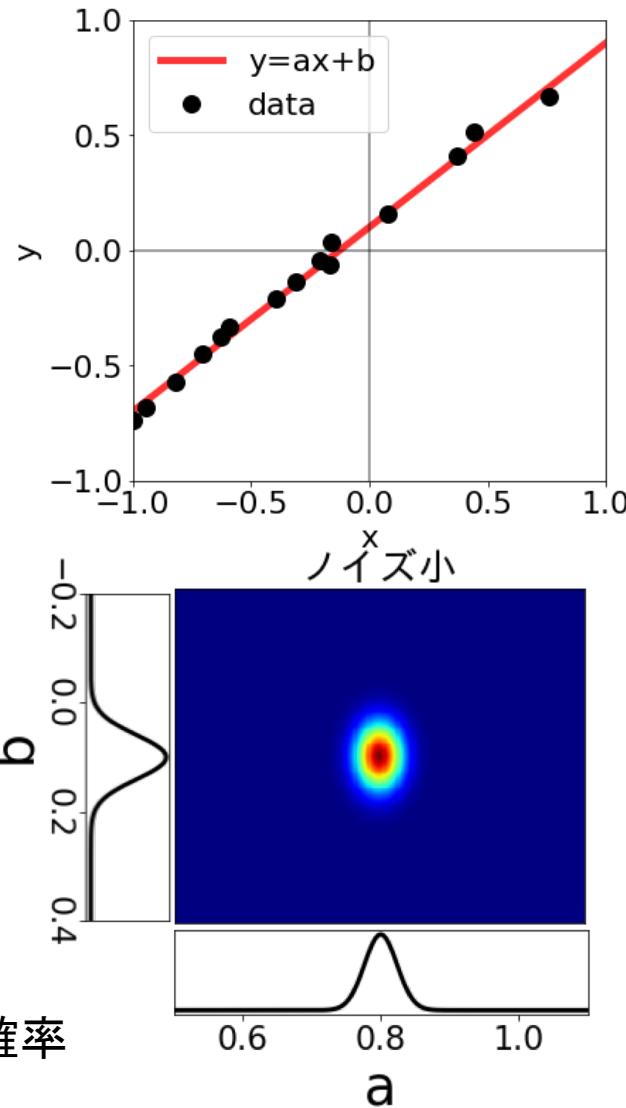
データの背後にある物理量の評価



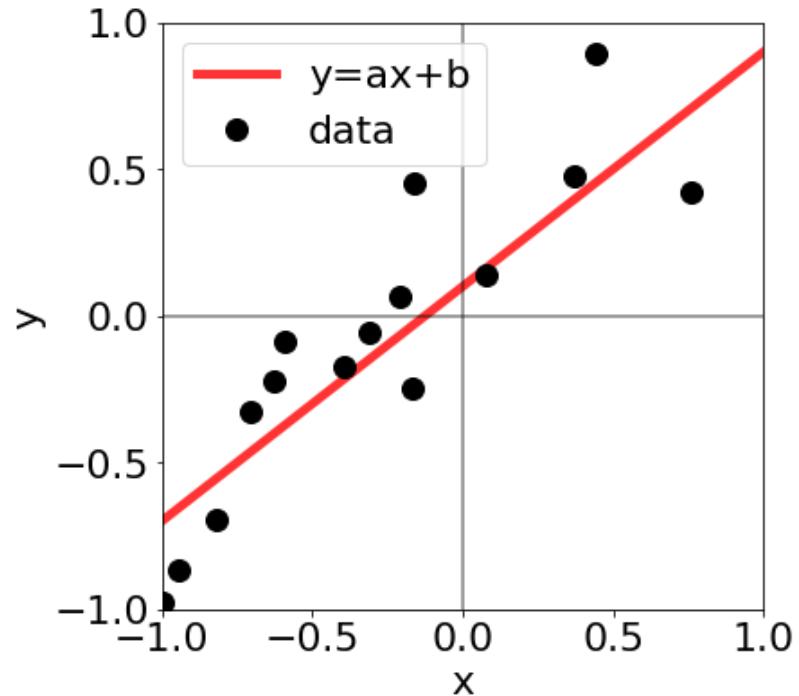
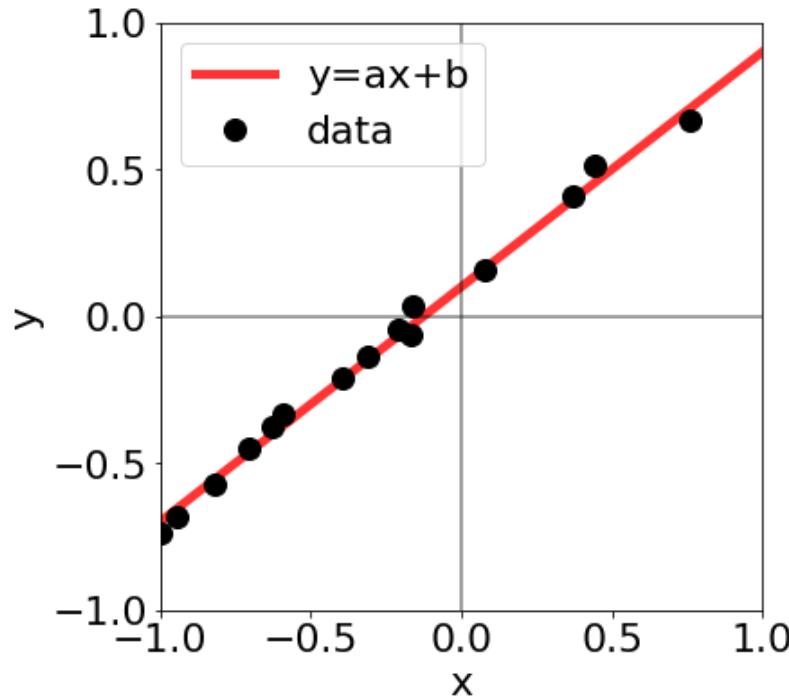
傾き a : 系の線形応答、バネ定数、電気伝導度、誘電率、
実験複数回おこなって、 a のばらつきを見る
これを1回の実験でももとめられないか → ベイズ推論

4.3 $p(a,b|Y)$ の推定 (3/3)

最小二乗法では手で計算できる



最小二乗法



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

4.1 最小二乗法 (1/2)

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

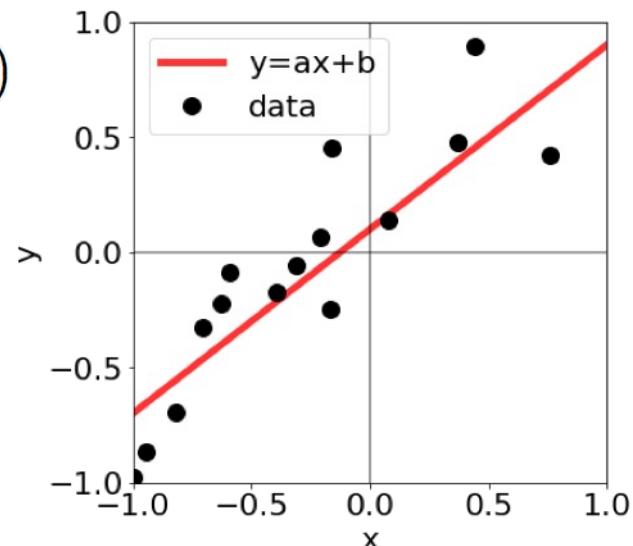
二乗誤差 $E(a, b)$ を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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

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

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

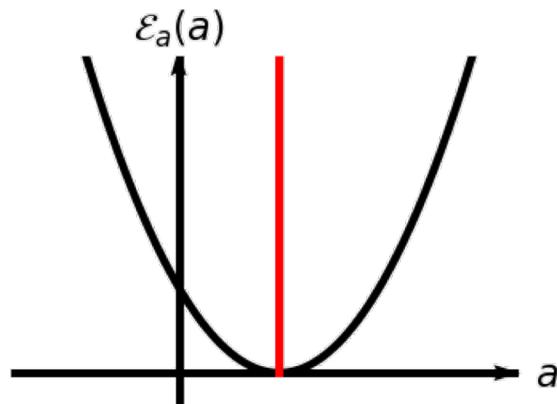
$$\bar{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



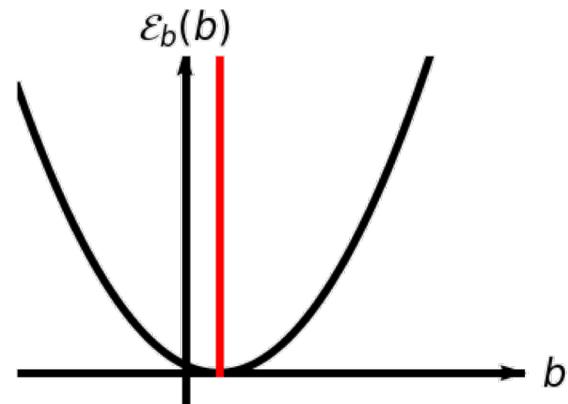
4.1 最小二乘法 (2/2)

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

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

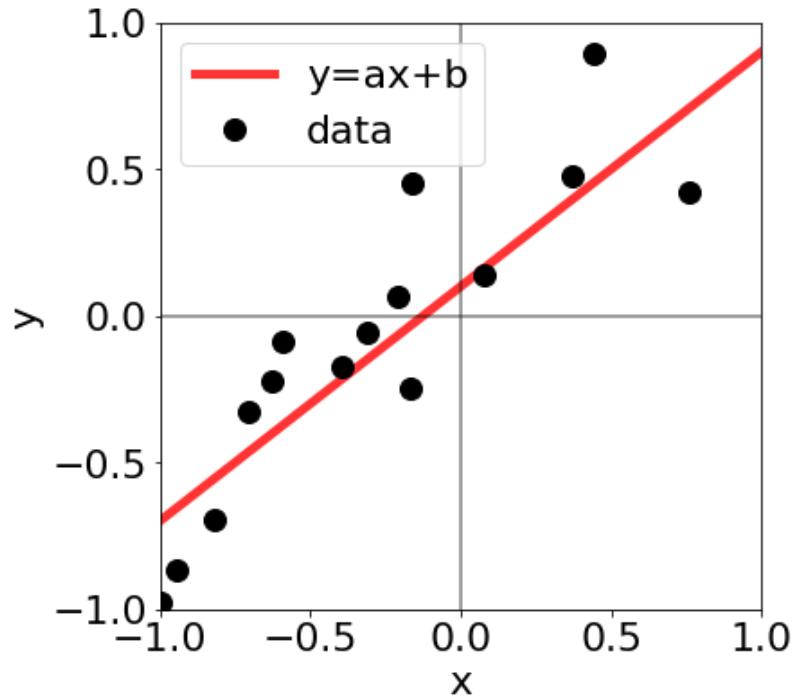
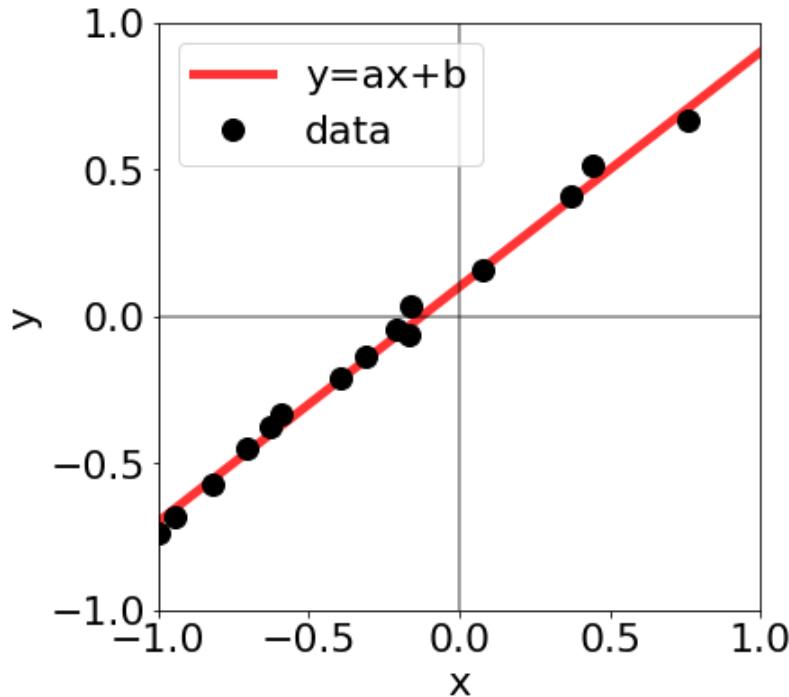


$$a_0 = \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}$$



$$b_0 = \bar{y}$$

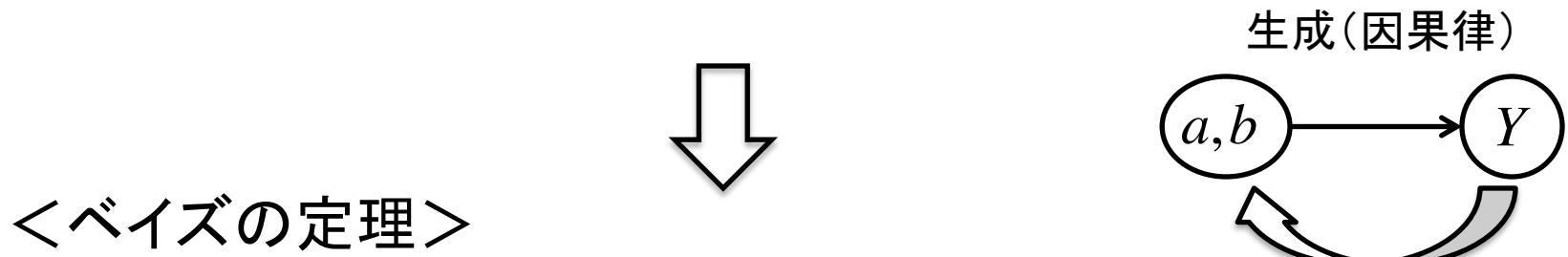
4.2 自然科学的視点からの ベイズ推論の解説 (1/2)



この二つの違いを数学的に表現したい
傾き a と切片 b は同じだけど、ばらつきが違う

4.2 自然科学的視点からの ベイズ推論の解説 (2/2)

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



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

$p(a, b | Y)$: 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

4.3 $p(a,b|Y)$ の推定 (1/3) 最小二乗法では手で計算できる

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

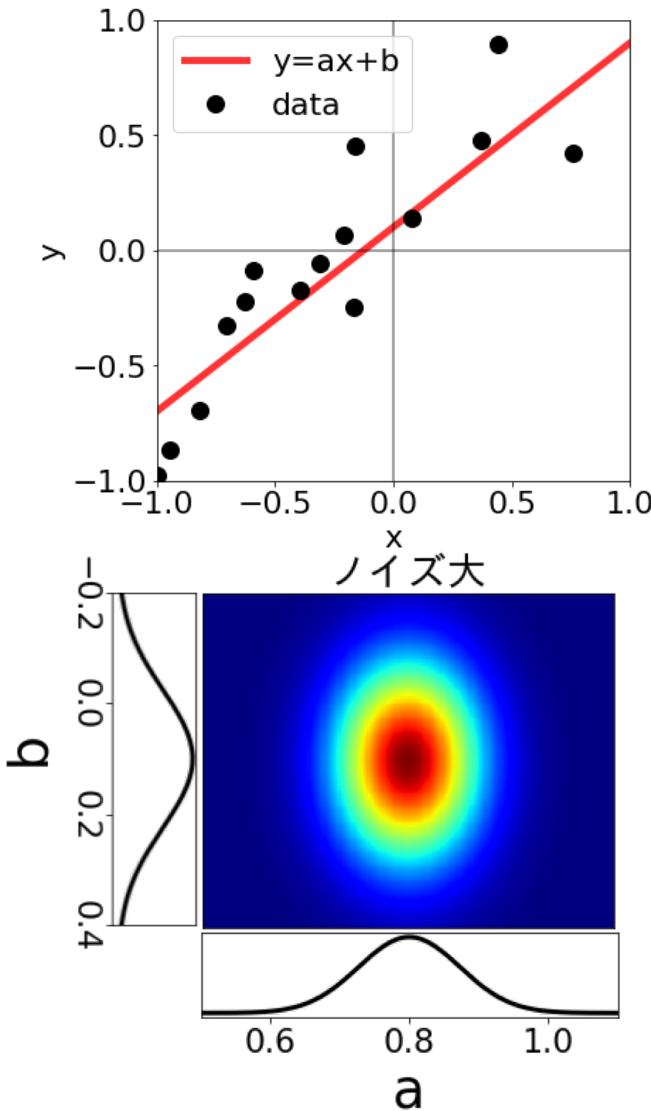
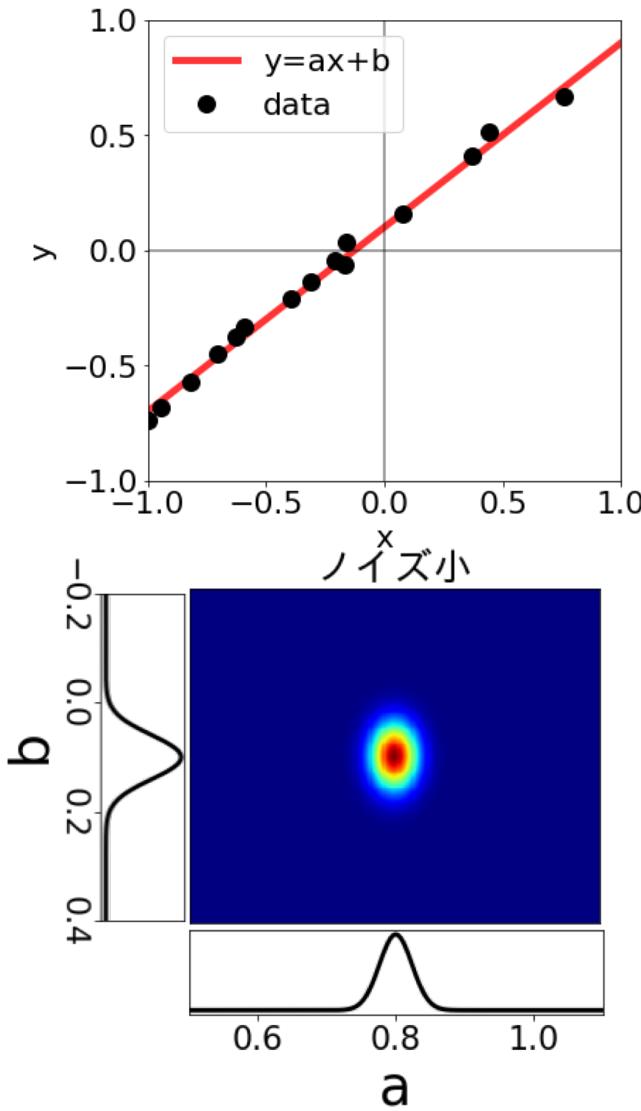
$$p(n_i) = p(y_i|a,b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

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

4.3 $p(a,b|Y)$ の推定 (2/3) 最小二乗法では手で計算できる

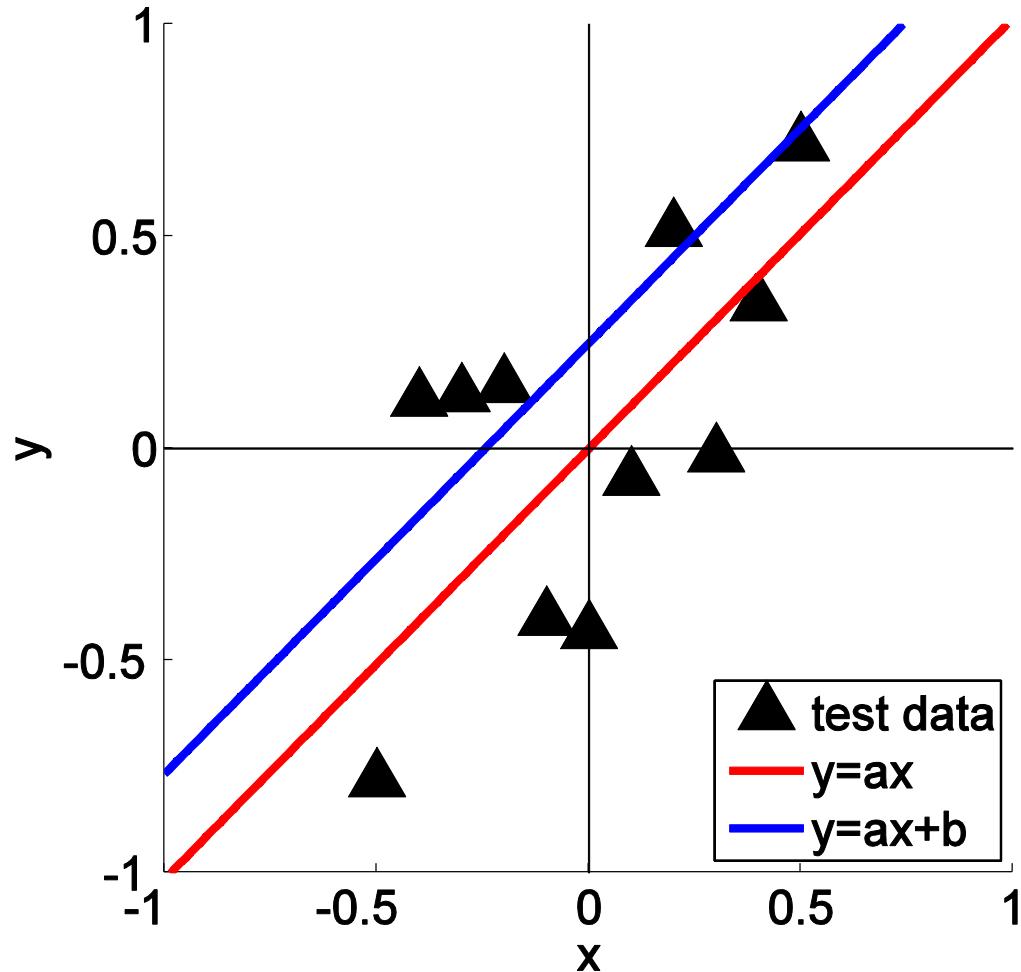
$$\begin{aligned} p(a, b|Y) &= \frac{p(Y|a, b)p(a, b)}{p(Y)} \propto p(Y|a, b) \\ &= \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} \left(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0, b_0) \right) \right\} \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{N}{\sigma^2} \left(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) \right) \right\} \\ &=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

4.3 $p(a,b|Y)$ の推定 (3/3) 最小二乗法では手で計算できる



4.6 ベイズ的モデル選択

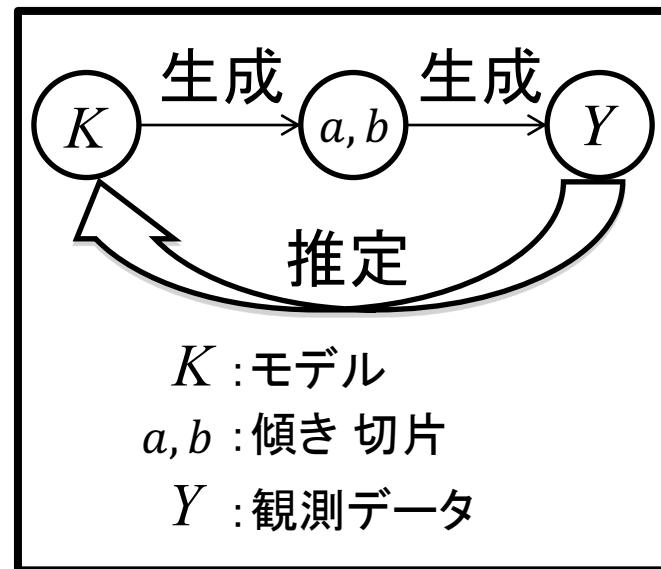
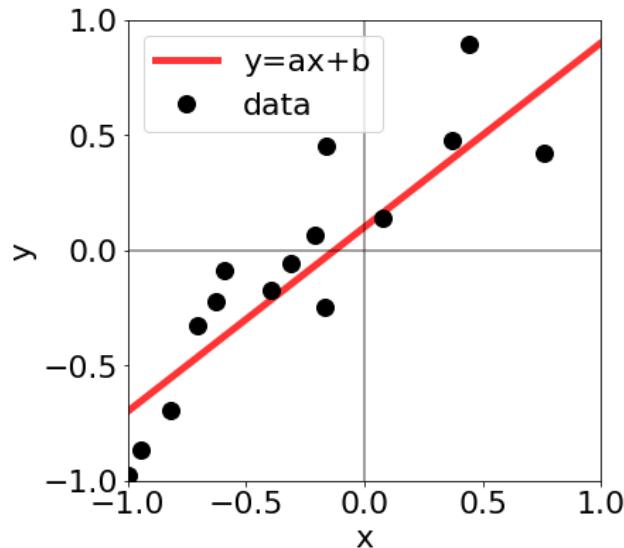
$y=ax$ か $y=ax+b$ か?



	訓練誤差
$y=ax$	0.43
$y=ax+b$	0.34

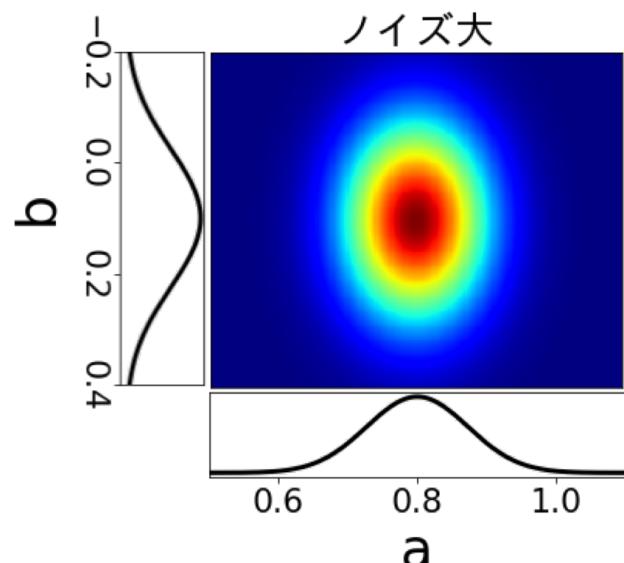
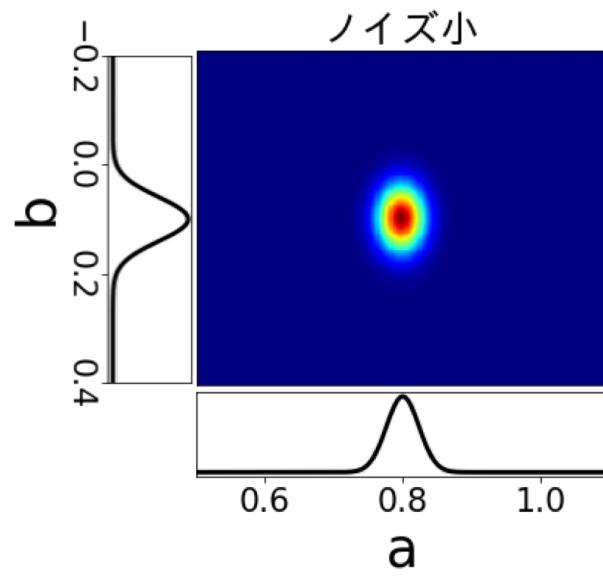
	汎化誤差
$y=ax$	0.33
$y=ax+b$	0.40

より深い構造をさぐる: モデル選択



$$K = 1 : y = ax$$

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



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

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

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

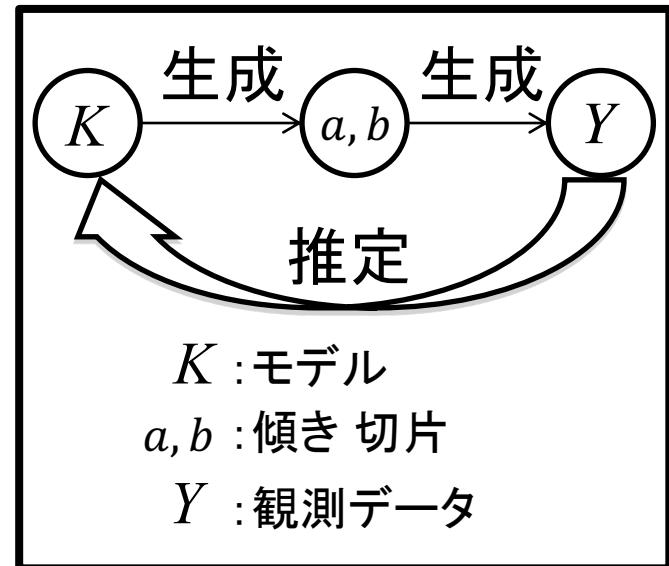
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

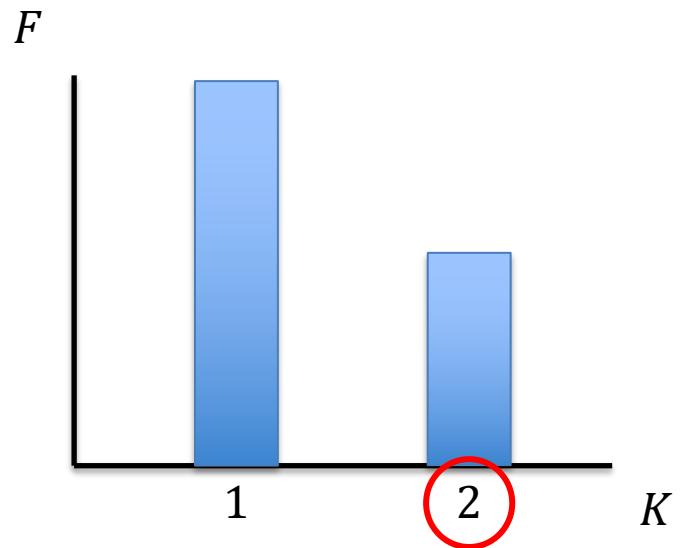
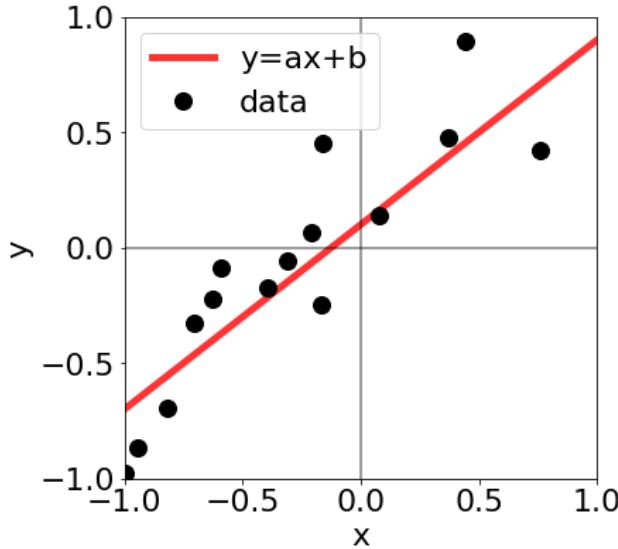
$$p(K|Y) = \frac{p(Y|K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

自由エネルギーを最小にするモデル K を求める.



4.7 自由エネルギー $y=ax$ か $y=ax+b$ か?



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

$$K = 1 : y = ax$$

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

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

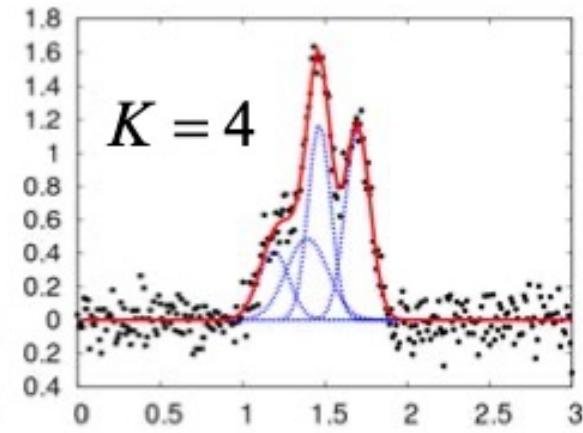
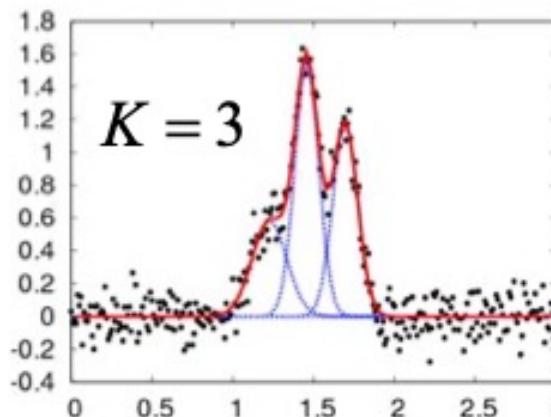
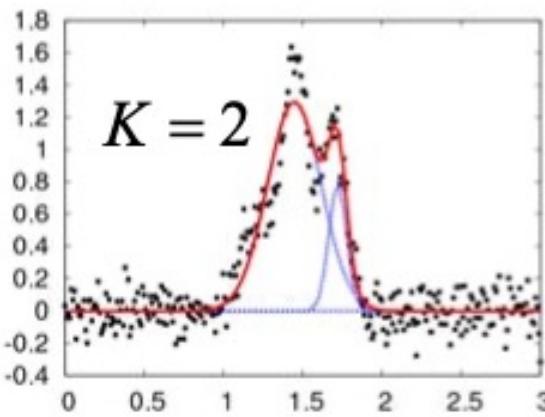
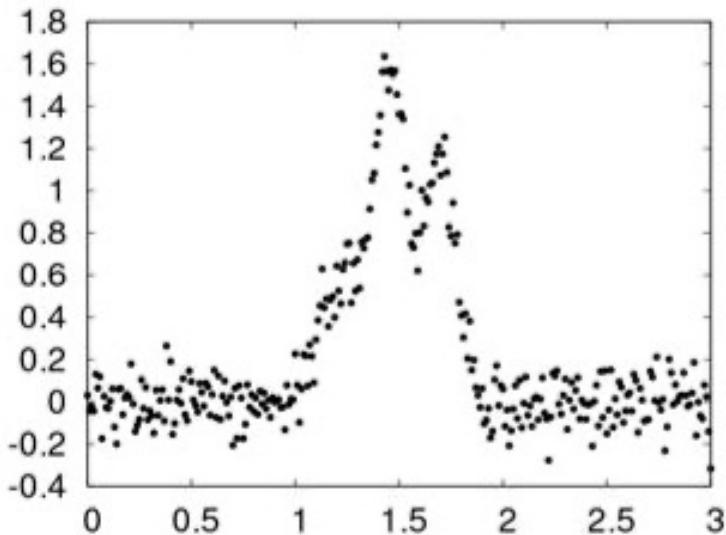
目次

- ベイズ計測とは
 - 解析的に解けるベイズ推論：線形回帰問題
 - 数値的に解くベイズ推論：スペクトル分解
- 非弾性散乱実験のベイズ推論
 - ガウスノイズモデル
 - ポアソンノイズモデル
- まとめ
 - 物性科学とベイズ推論
 - EMCライブラリー



スペクトル分解

分光学とは: 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

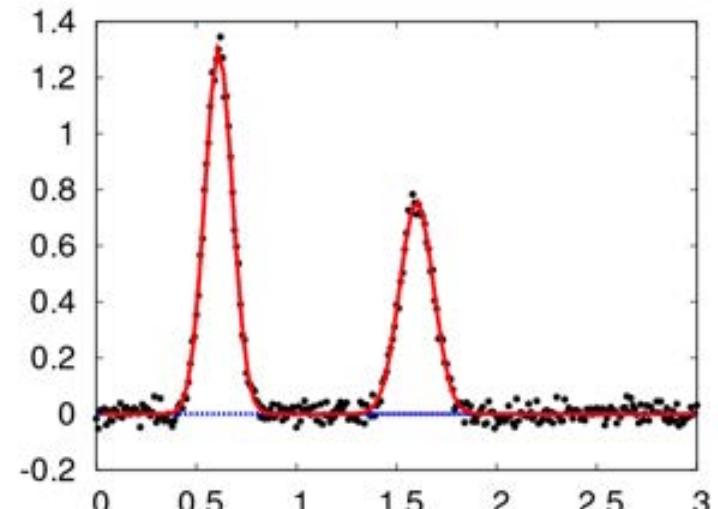
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより、スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

x_i : 入力 y_i : 出力

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

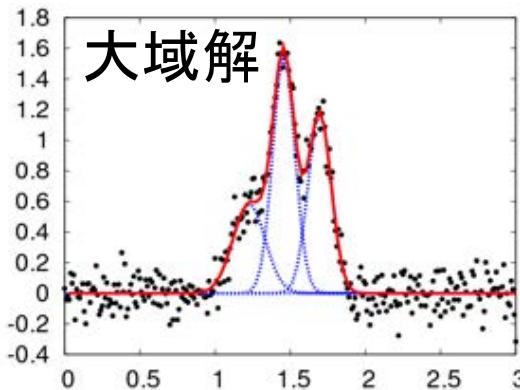
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \dots, K$$



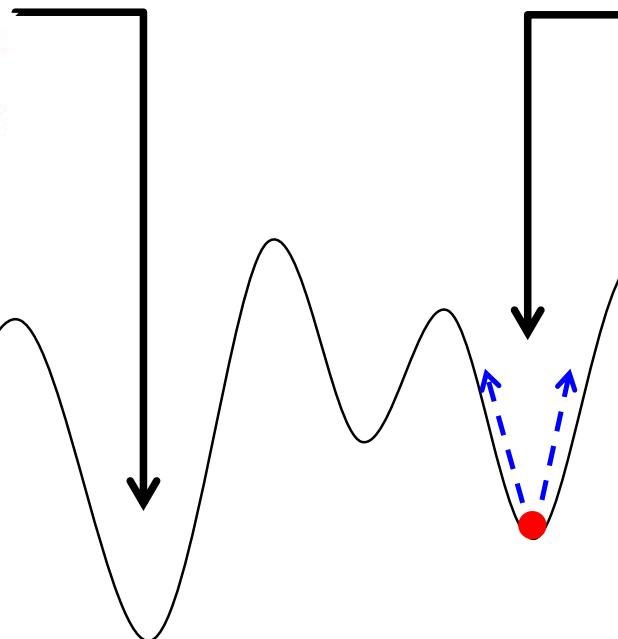
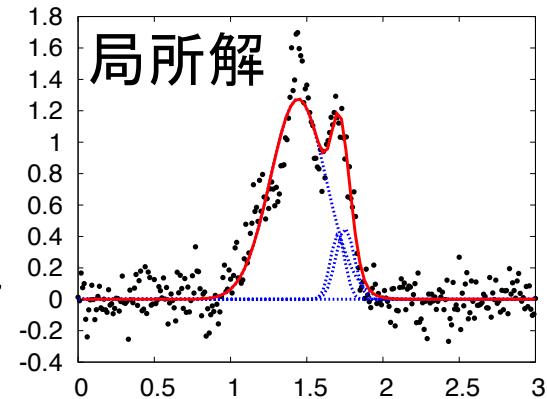
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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

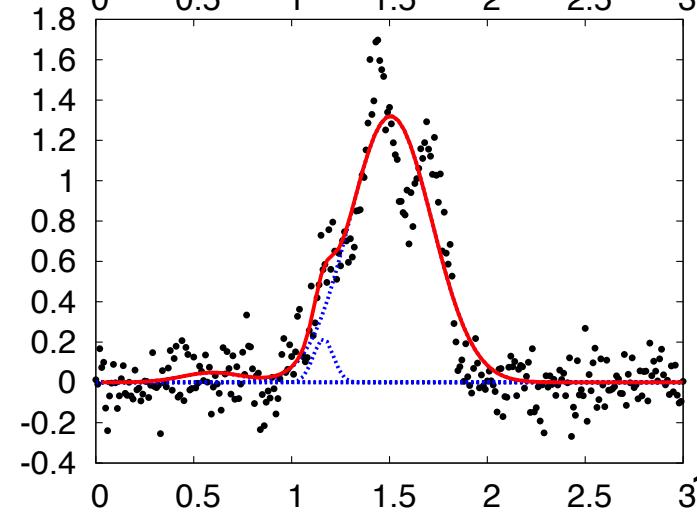
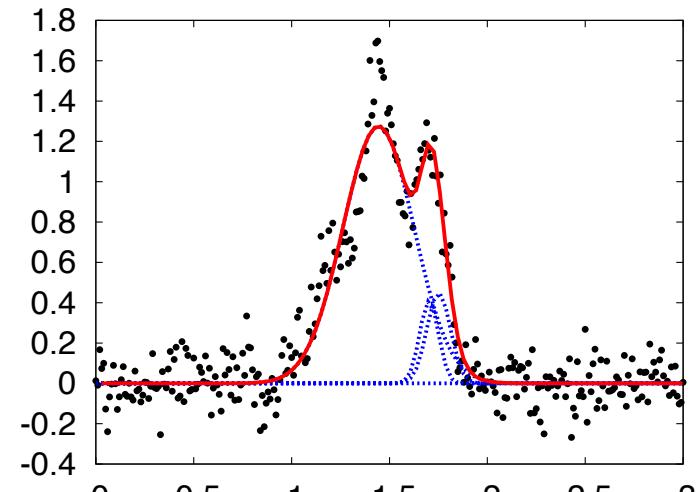
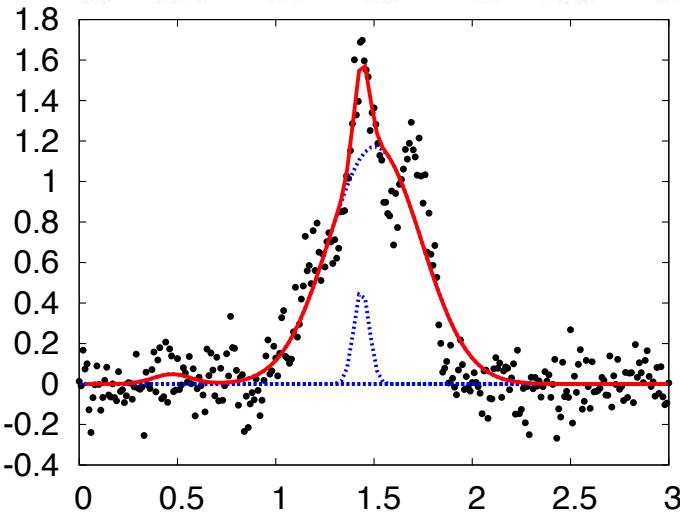
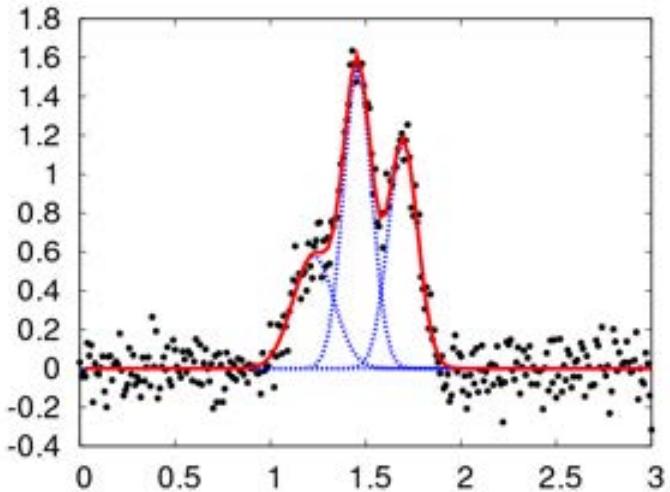
誤差関数は局所解を持つ



<通常の最適化法>
e.g., 最急降下法

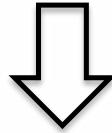


ローカルミニマム



ベイズ推論：因果律を組み込んでデータ解析

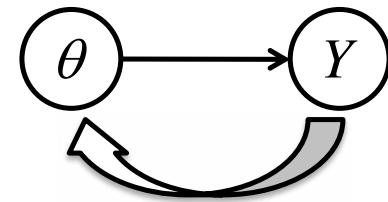
$$p(Y, \theta) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)}$$



<ベイズの定理>

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

生成(因果律)



$p(\theta | Y)$: 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。
これまで蓄積してきた科学的知見

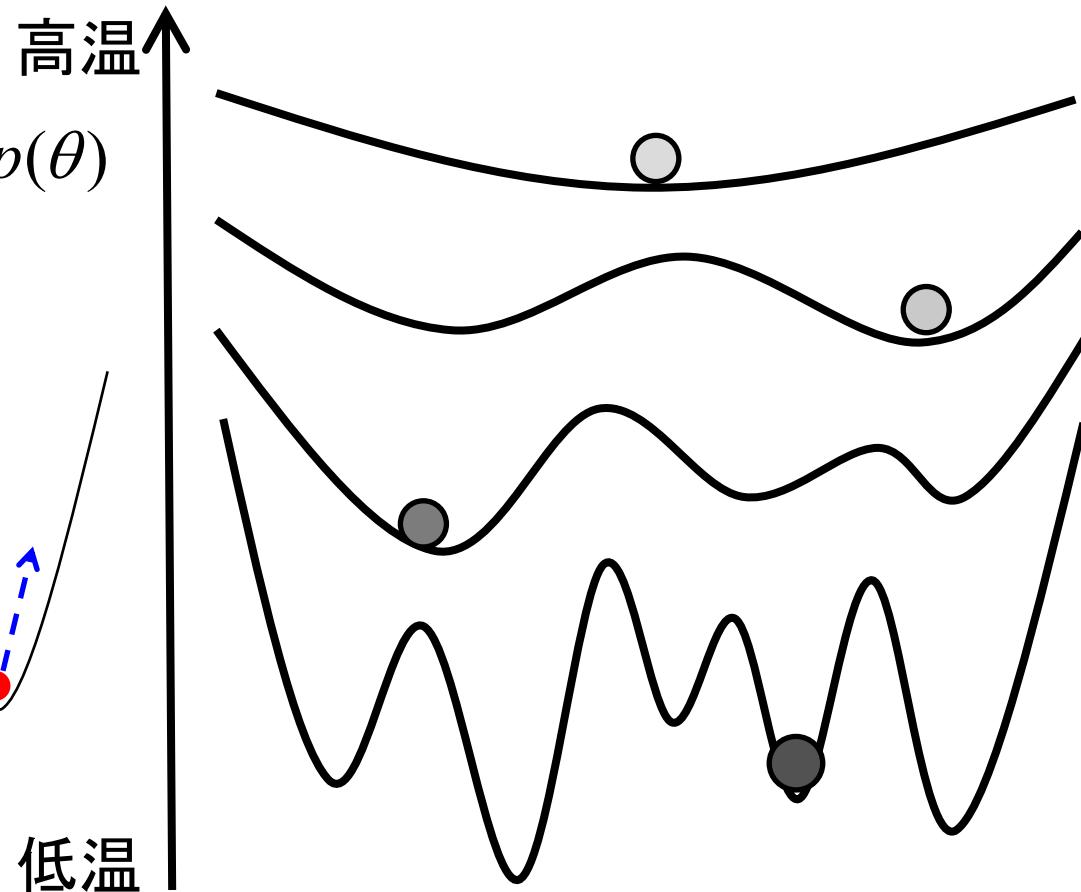
レプリカ交換モンテカルロ法 ランダム спин系の知見から

メトロポリス法

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

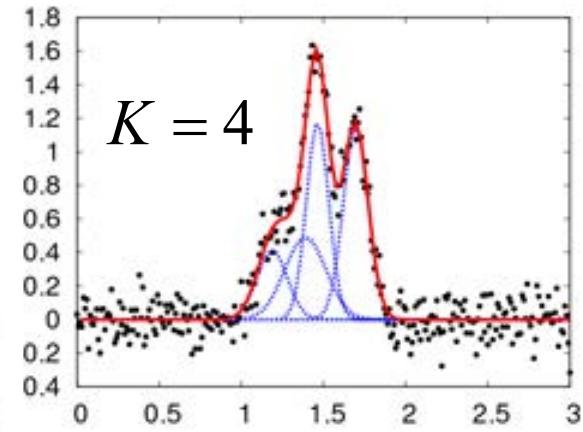
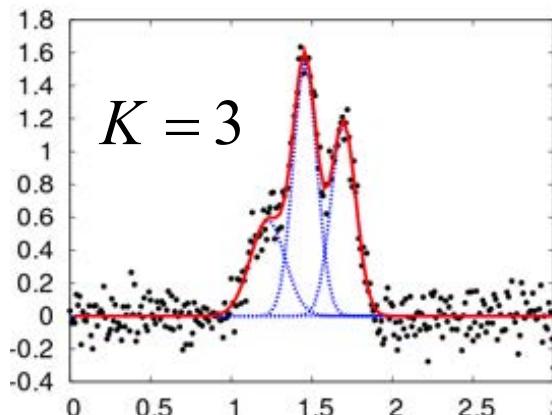
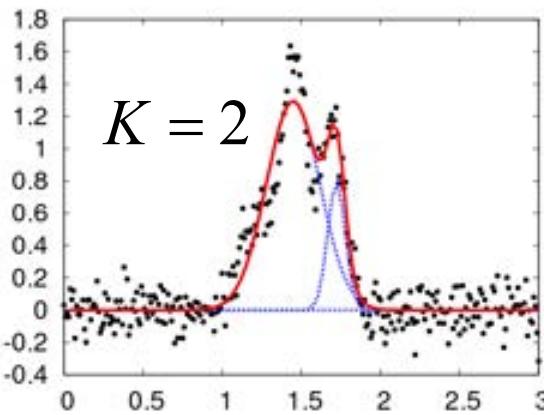
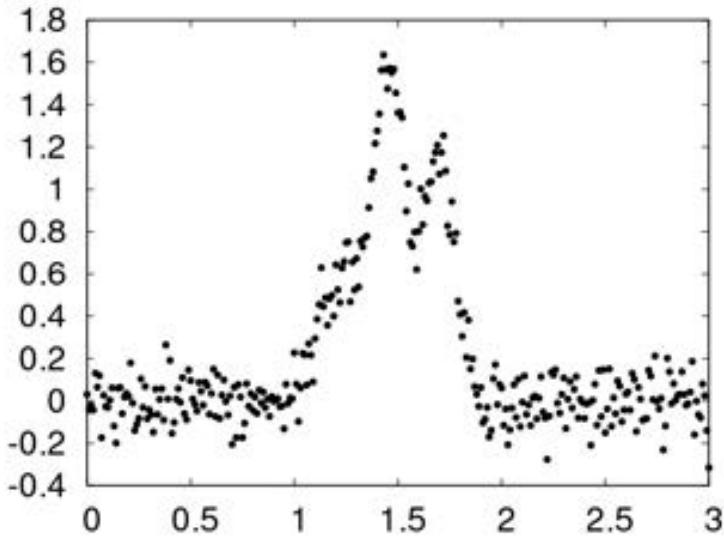


レプリカ交換モンテカルロ法



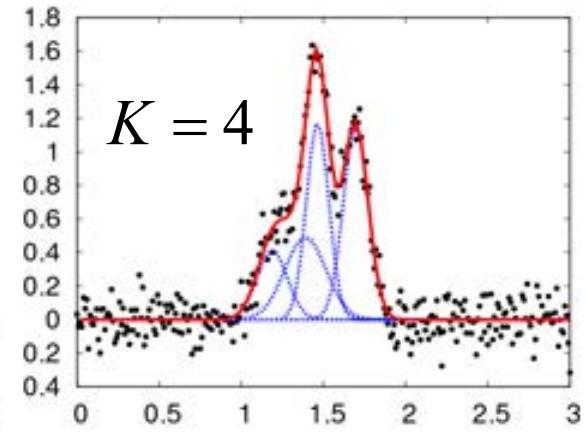
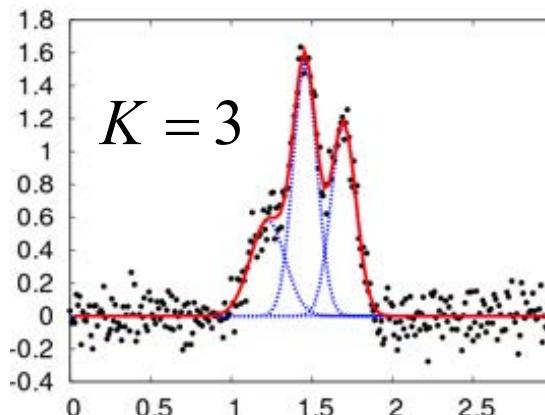
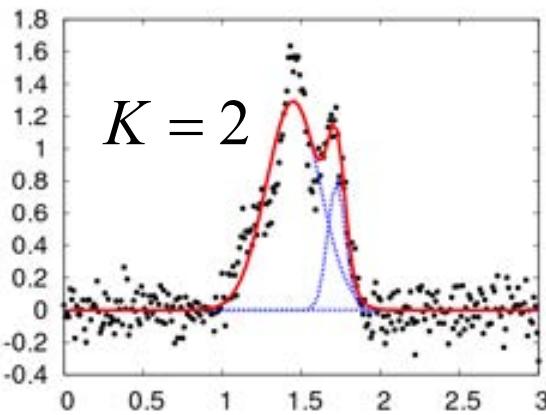
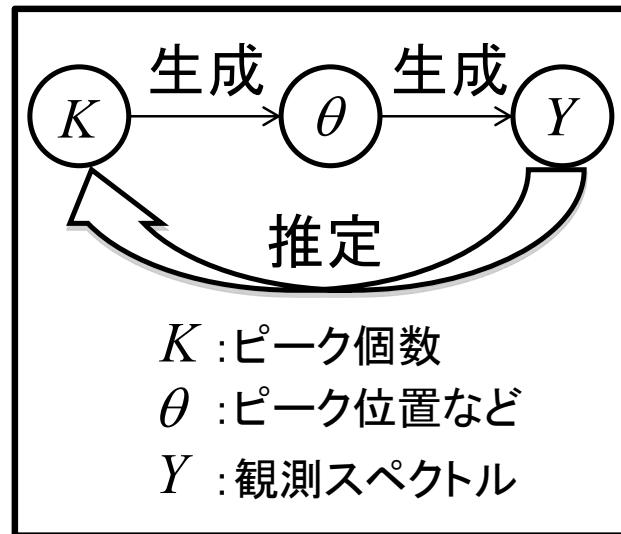
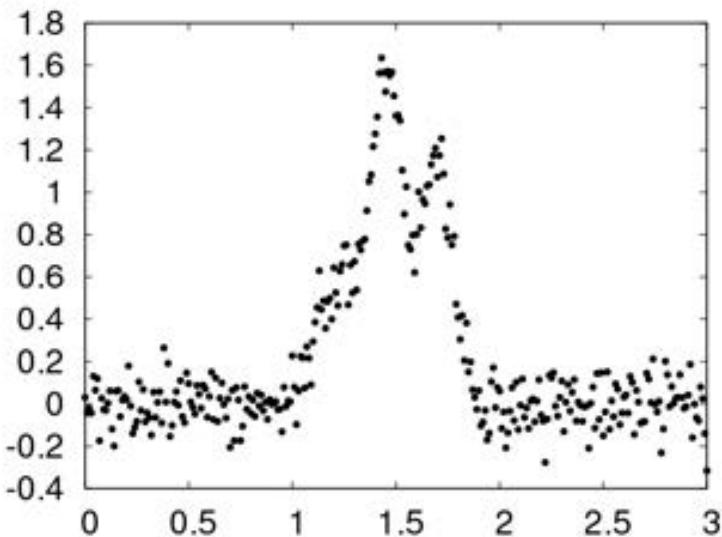
K. Hukushima, K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996).
情報統計力学(Statistical Mechanical Informatics)へ

例題1:スペクトル分解



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

より深い構造をさぐる: モデル選択



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

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

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

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

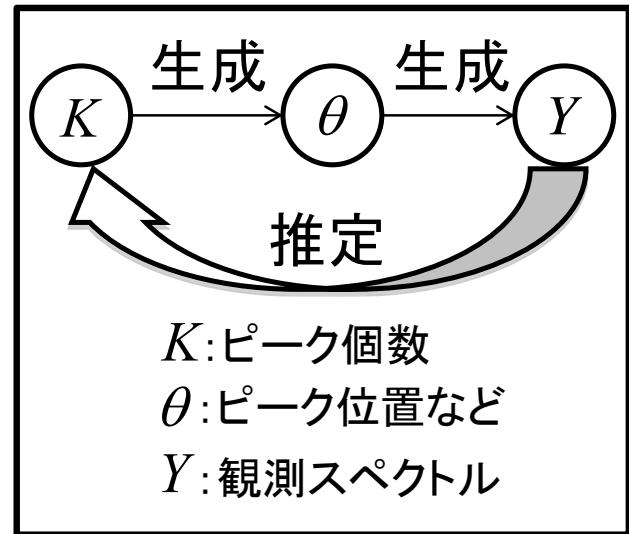
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

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

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

自由エネルギーを最小にする個数 K を求める.



自由エネルギーの数値的計算法 交換モンテカルロ法 の性質を巧妙に使う

$$F = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)\right) p(\theta) d\theta$$

自由エネルギー:

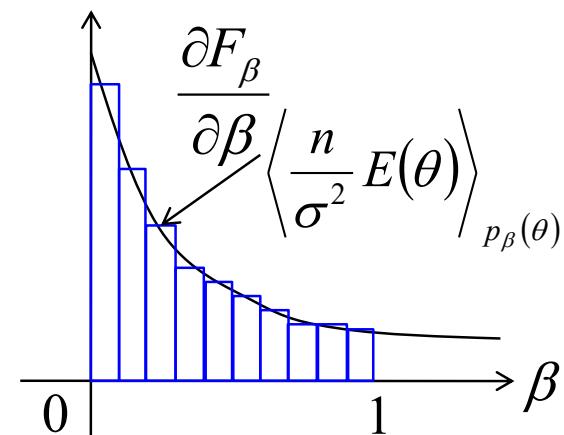
以下のように、補助変数 β を導入する。 β : 逆温度

$$F_\beta = -\log \int \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta) d\theta \quad (F_{\beta=0} = 0)$$

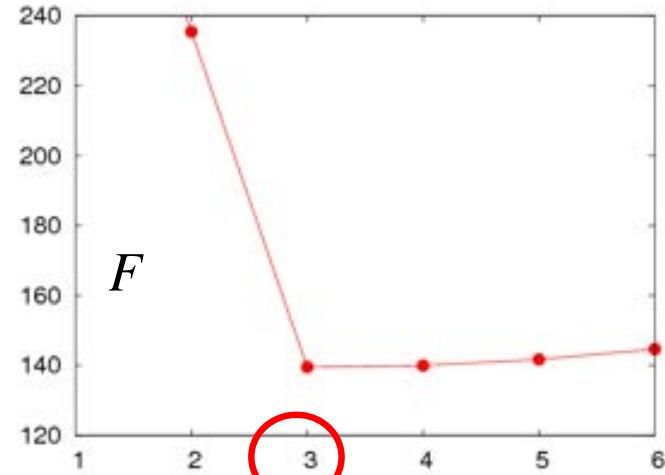
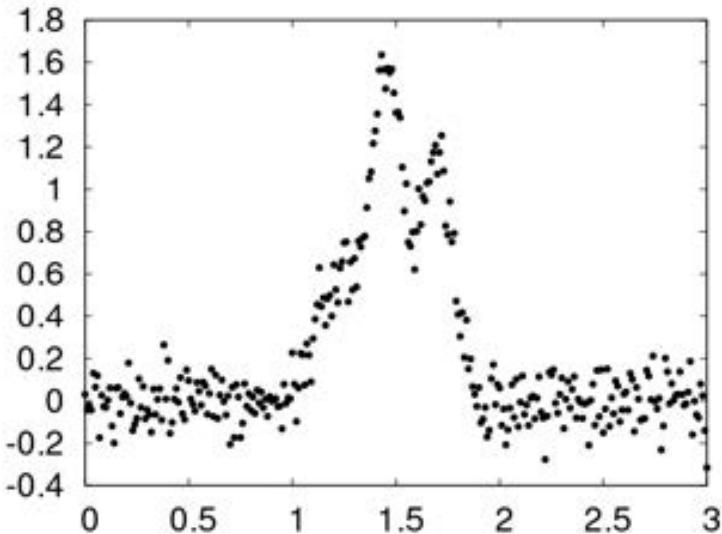
$$F = F_{\beta=1} = \int_0^1 d\beta \frac{\partial F_\beta}{\partial \beta} \quad \begin{array}{l} \text{たくさんの温度でのシミュレーションが必要} \\ \rightarrow \text{各温度でのエネルギー平均(すでにやってる)} \end{array}$$

$\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$... 確率分布 $p(\theta; \beta)$ に従う
 $\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta} \langle \frac{n}{\sigma^2} E(\theta) \rangle$ 二乗誤差 $\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)$ の期待値

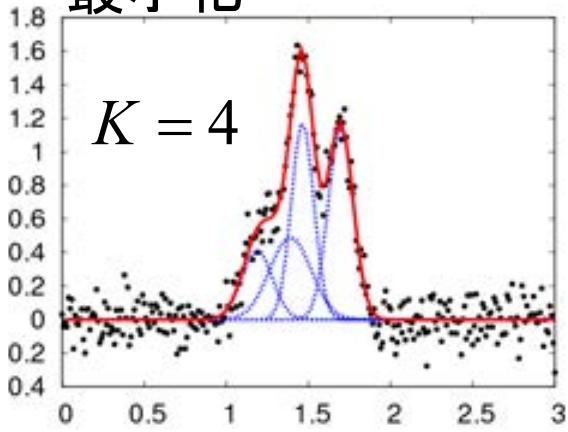
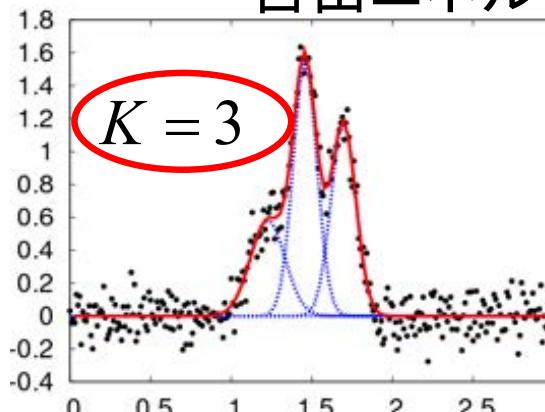
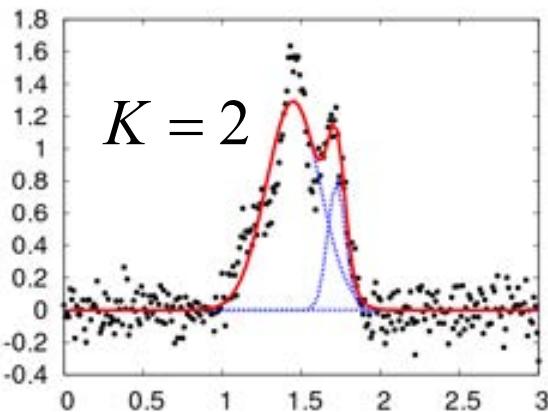
$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta)$$



スペクトル分解



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

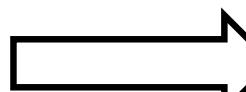


Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

ベイズ計測

順アプローチ

計測データ



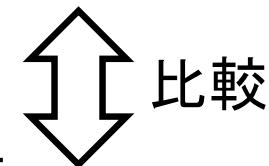
実験の結果

モデル



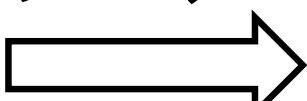
理論の結果

$p(Y | \theta, K)$ 解析計算, 数値計算



逆アプローチ

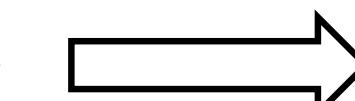
対象とする
物理系



系の物理

モデル

$p(\theta, K)$



観測過程

計測機器の特性

計測データ

$p(\theta, K | Y)$



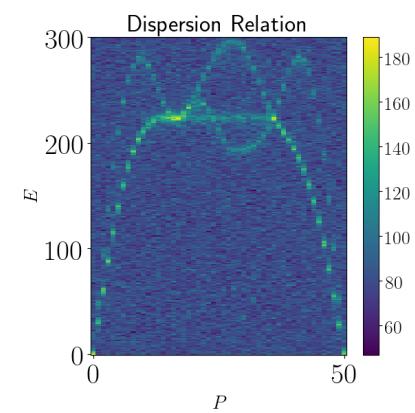
全てをモデル化し
ベイズの定理で因果をさかのぼる

目次

- ベイズ計測とは
 - 解析的に解けるベイズ推論：線形回帰問題
 - 数値的に解くベイズ推論：スペクトル分解
- 非弾性散乱実験のベイズ推論
 - ガウスノイズモデル
 - ポアソンノイズモデル
- まとめ
 - 物性科学とベイズ推論
 - EMCライブラリー

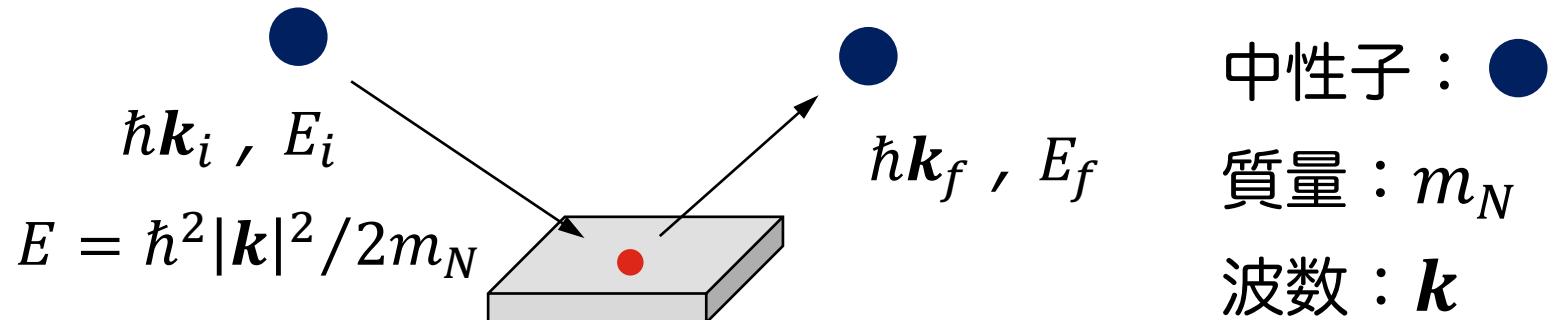


非弹性散乱実験計測データ解析

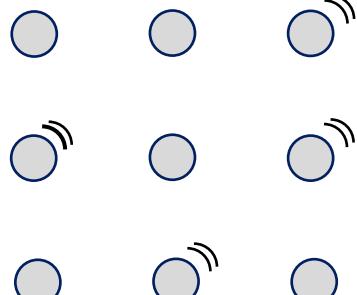


非弾性中性子散乱実験：分散関係

- 試料に入射した中性子の、散乱前後で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！

J-PARCの物質・生命科学実験施設(MLF)

重点投資！

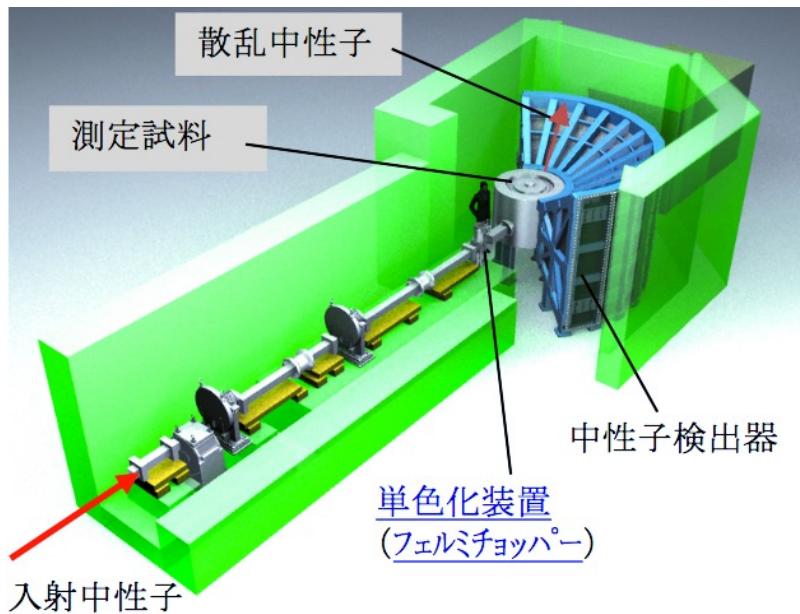
総予算 682億円（10年間）

SNS（米）, ISIS（英）に並ぶ
世界最高水準の実験施設

ブレイクスルー！

4SEASONS（右の装置）では
従来よりも広範囲な
運動量領域の測定を可能に！
→ 大規模(高次元)データ

4SEASONS



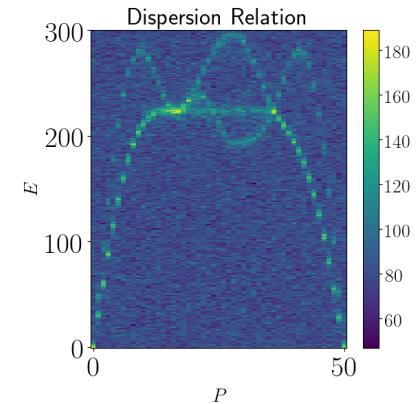
4次元空間中性子探査装置 4SEASONS

[http://www.htc.co.jp/12cyuseishi/
kaisetsu/souchi/bl01_4seasons.pdf](http://www.htc.co.jp/12cyuseishi/kaisetsu/souchi/bl01_4seasons.pdf)

大規模(高次元)データを解析する手法の開発が必要。

本研究：分散関係計測データのベイズ的取り扱い

- ▶ 高次元データ解析を可能に
 - ▶ 分散関係計測データは4次元強度分布
 - ▶ 人目を介した解析は困難
- ▶ 少数イベントデータから推論を可能に
 - ▶ 中性子散乱データはイベント数が小さい



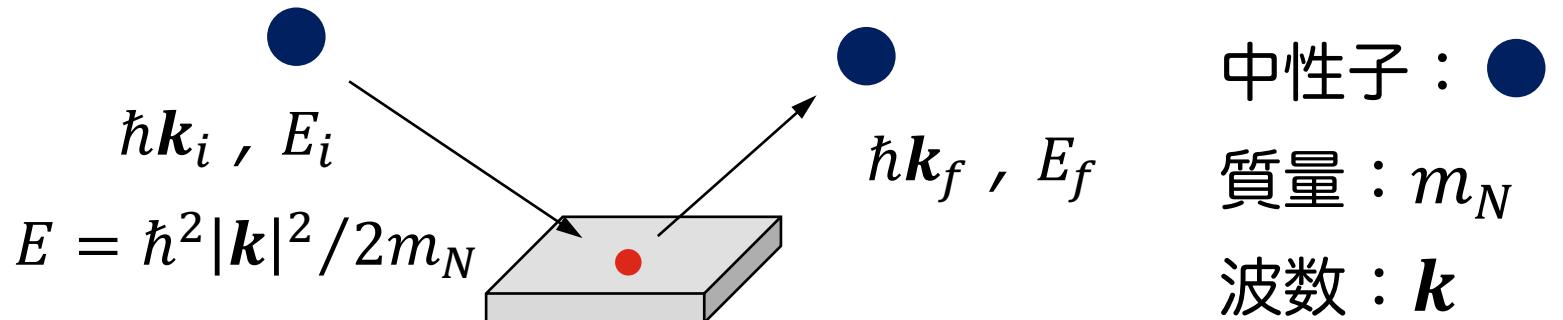
中性子散乱実験の状況

- ▶ イベントデータ数を増やすために、
 - センチメートル級の単結晶を作る努力：
成功確率は大変小さい。
バイオ系では不可能。
 - たくさんの単結晶を並べる努力：
例えば数か月かけて1ミリ程度の単結晶を
数百個向きをそろえて並べている。
バイオ系の結晶は多くの場合100ミクロン以下。

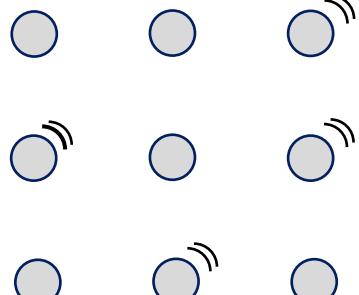
解析可能なイベントデータ数が下がるということは、
実験労力の低減や、不可能だった測定を可能にすることにつながる。

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、散乱前後で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



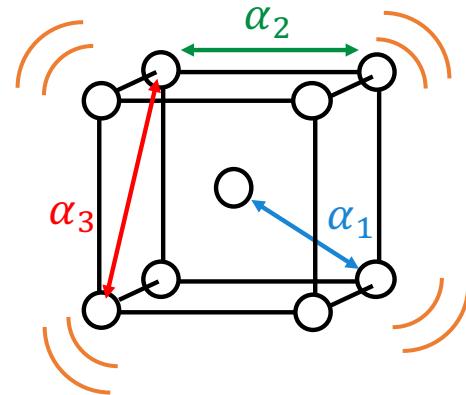
- ・銅酸化物高温超伝導体
- ・磁性体
- ・誘電体
- ・触媒
- ・熱伝材

幅広い対象に活用される
重要な実験手法！

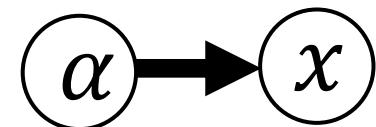
格子構造と分散関係

体心立方格子における運動方程式

$$M\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_0, t) = \alpha_1 \sum_{i=1}^8 \left[\{(\mathbf{u}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{h}_i, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_0, t)) \cdot \hat{\mathbf{h}}_i\} \cdot \hat{\mathbf{h}}_i \right] \\ + \alpha_2 \sum_{j=1}^6 \{(\mathbf{u}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{n}_j, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_0, t)) \cdot \hat{\mathbf{n}}_j\} \cdot \hat{\mathbf{n}}_j \\ + \alpha_3 \sum_{k=1}^{12} \{(\mathbf{u}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_k, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_0, t)) \cdot \hat{\mathbf{p}}_k\} \cdot \hat{\mathbf{p}}_k,$$



相互作用定数 分散関係



波成分で記述

進行波解

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \\ u_z(\mathbf{q}) \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}.$$

固有モード

$$-\omega^2 M_{\text{atom}} \mathbf{u}(\mathbf{r}_0, t) = D \mathbf{u}(\mathbf{r}_0, t)$$

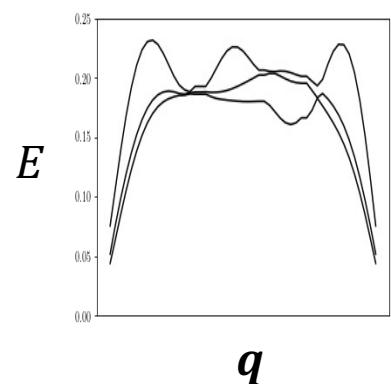
$$\Lambda = U^T D U, \quad \Lambda(\mathbf{q}) = \text{diag}\{\lambda(\mathbf{q})\},$$

分散関係

$$-\omega^2 M_{\text{atom}} = \lambda(\mathbf{q}) \\ \omega = \sqrt{-\frac{\lambda(\mathbf{q})}{M_{\text{atom}}}}$$

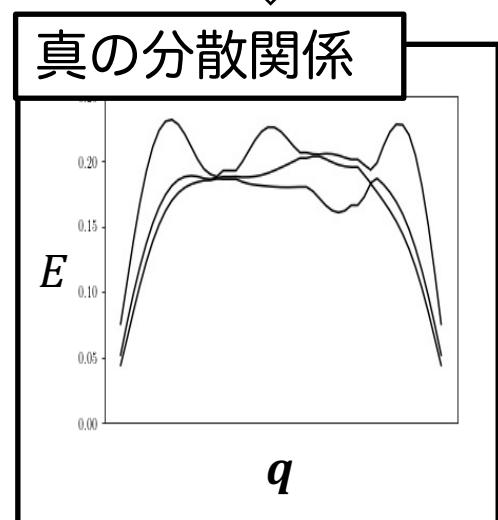
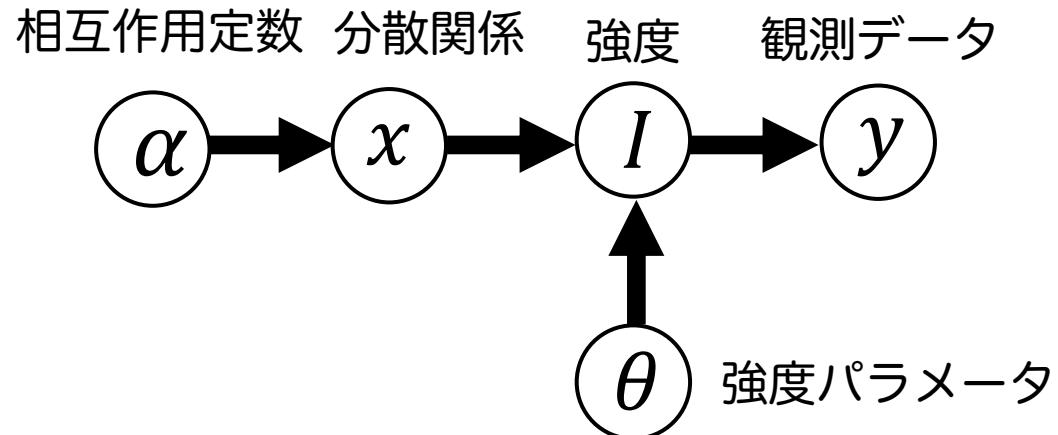
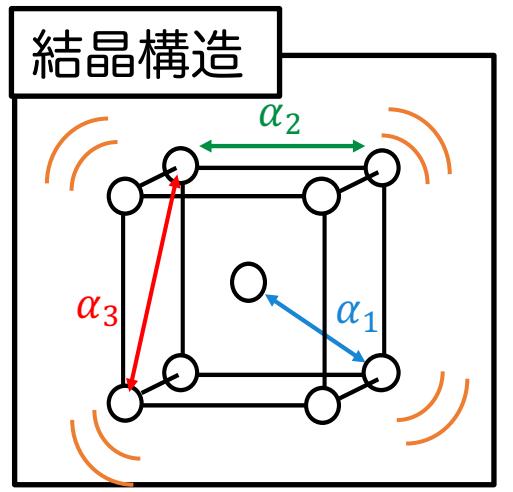
分散関係

$$E = \hbar\omega(\mathbf{q})$$

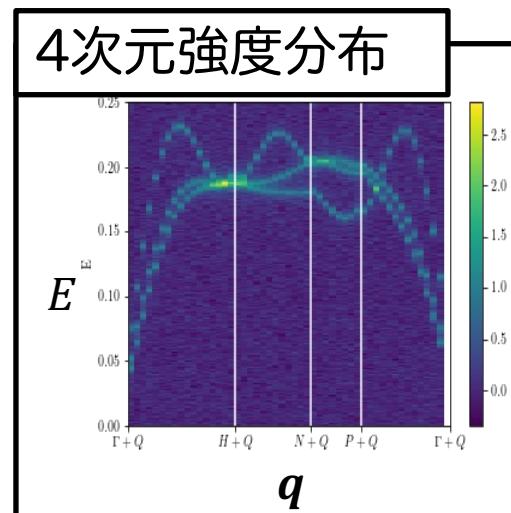


分散関係に格子構造の情報が含まれている。

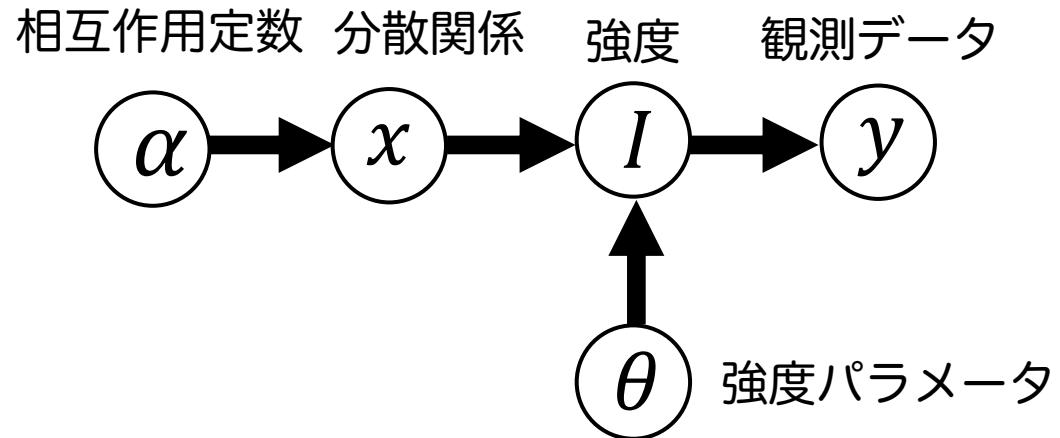
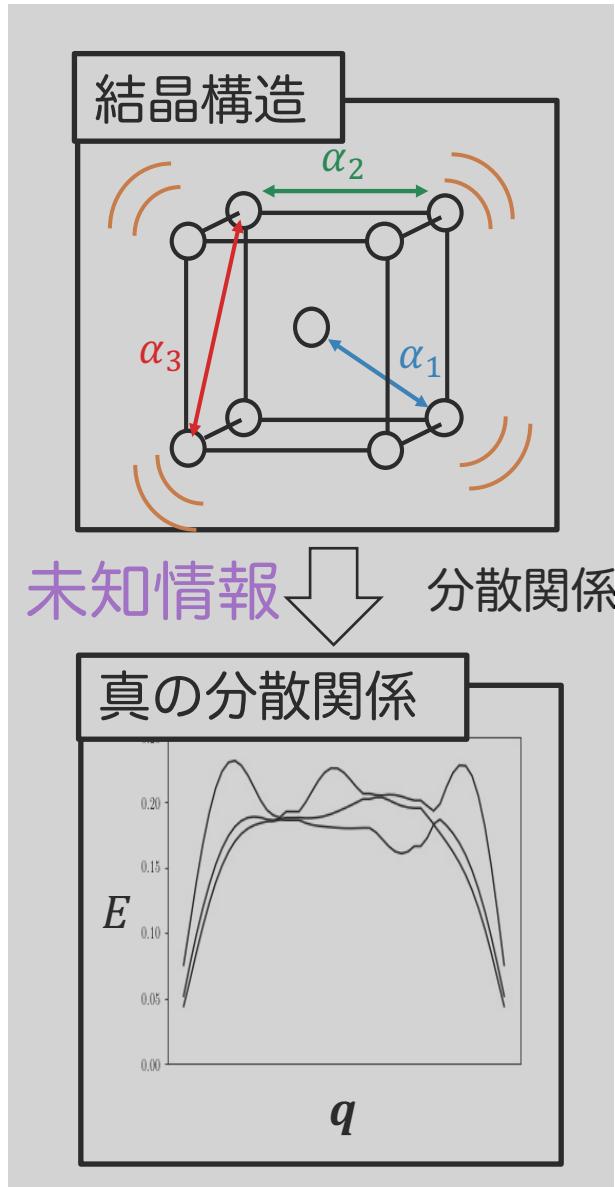
分散関係の観測



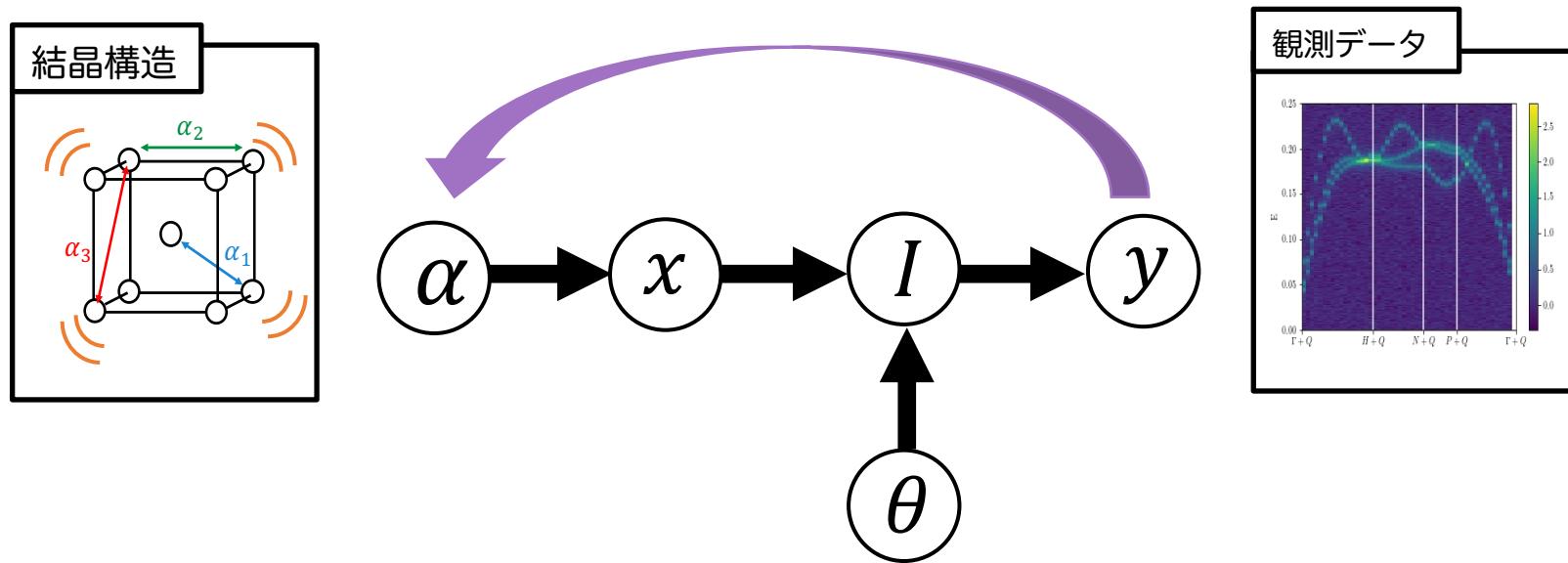
観測



分散関係の観測



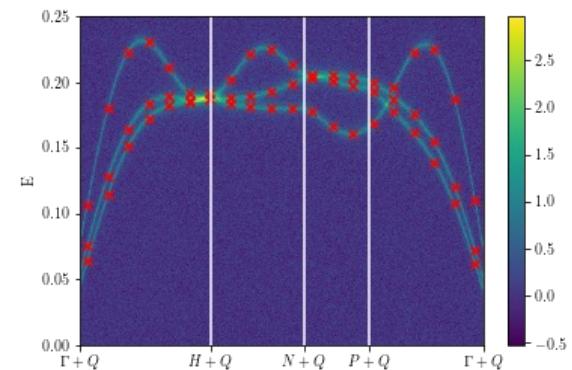
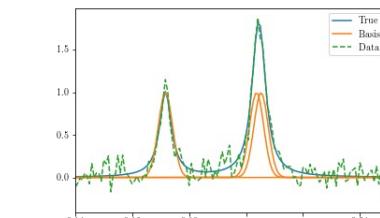
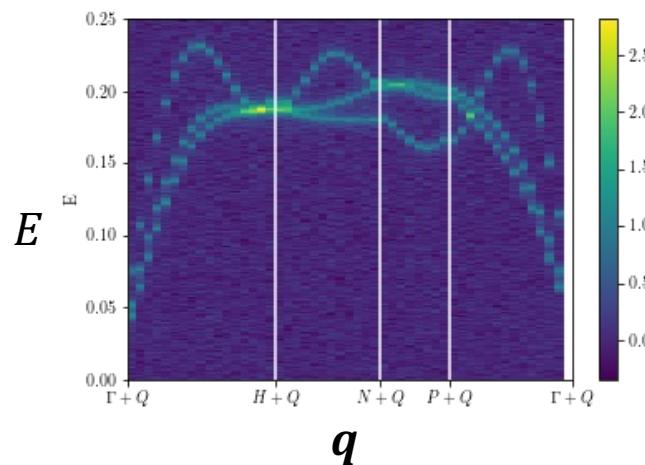
解析の目的



- 観測データから結晶の格子モデルを推定する。
- 結晶格子の(相互作用の有無),
相互作用パラメータの値を推定。

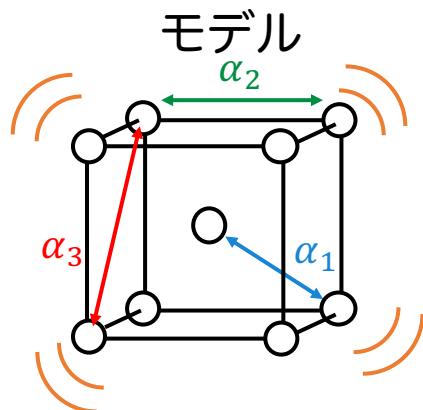
分散関係解析の従来法

データ

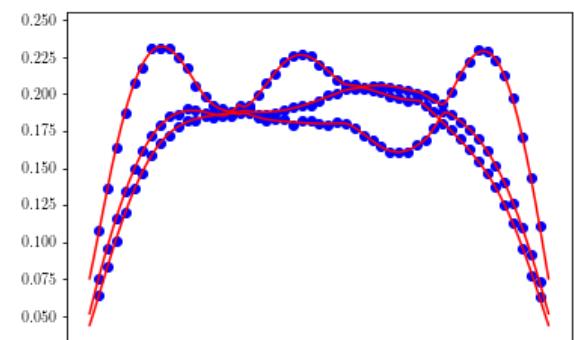


スライス&スペクトル
フィッティング

比較



モデルシミュレーション



従来法の改善可能な点



全ての計測データを用いることができない

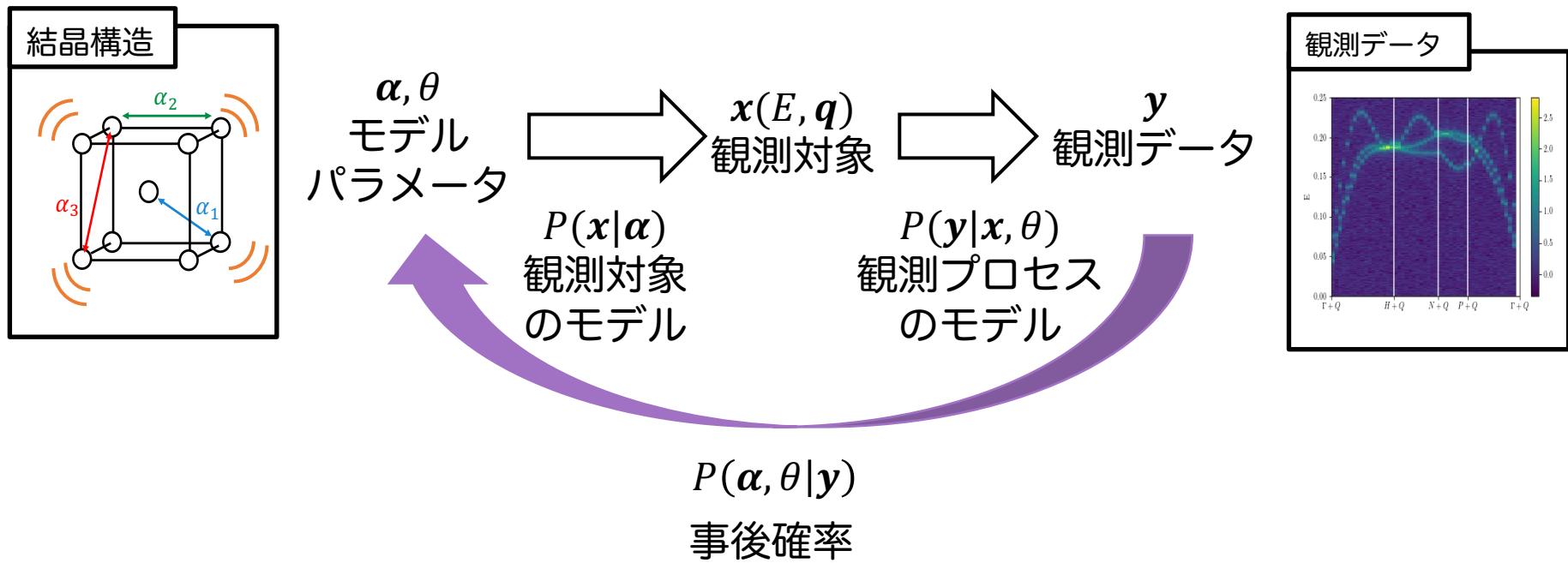


解析における人的コストが大きい
(手動探索を行っている)



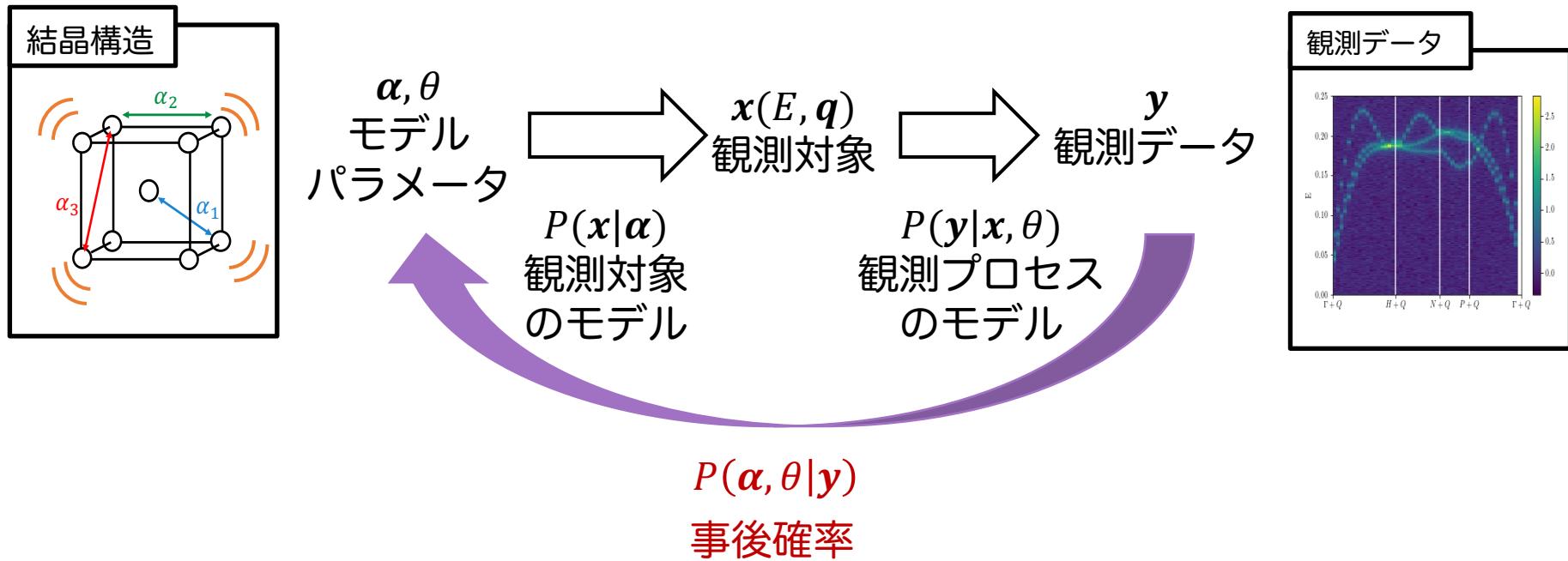
推定値の信頼度評価をする枠組みがない

本研究の目的



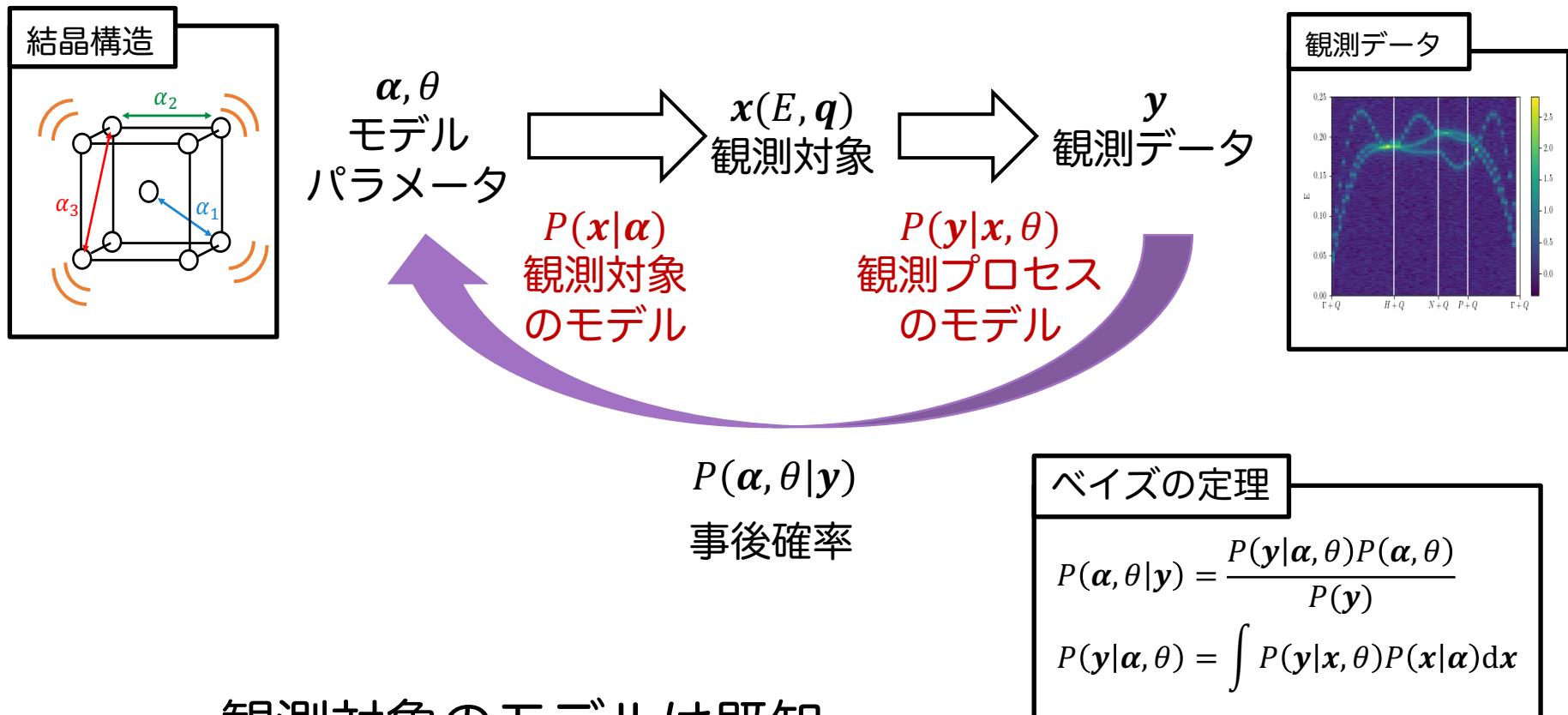
- ベイズ推論による結晶格子の相互作用パラメータ推定法の提案.

ベイズ推論による推定



- 観測データが獲得されたもとでの
モデルパラメータの事後確率を得ることで達成

データ生成過程をモデル化



- 観測対象のモデルは既知。
- 観測過程のモデルを導入する。

手法1：ガウス観測過程

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

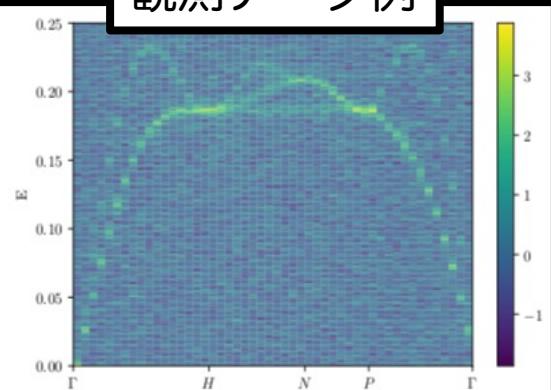
エネルギー (分散関係)

ガウス観測過程によるノイズモデル

$$y_{i,k} = (I_{i,k}(\mathbf{q}_i, E_k; \boldsymbol{\alpha}, \theta) + B) \times T + \epsilon_{i,k} \quad \epsilon_{i,k} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\text{noise}}^2).$$

観測データ例

$$P(y_{i,k} | I(\mathbf{q}, \mathbf{x}; \theta, \gamma, \eta), \sigma_{\text{noise}}) = \mathcal{N}(I(\mathbf{q}_i, x_k; \theta, \gamma, \eta), \sigma_{\text{noise}}^2)$$



ガウスノイズを導入した ベイズ推論は最小二乗法に対応

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

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

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

手法2: ポアソン観測過程

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)

ポアソン過程によるノイズモデル

$$\bar{y}_{i,k} = (I_{i,k}(\mathbf{q}_i, E_k; \boldsymbol{\alpha}, \theta) + B) \times T$$

バックグラウンド : B

$$P(y_{i,k} | I(\mathbf{q}, E; \boldsymbol{\alpha}, \theta), B) = \frac{\bar{y}_{i,k}^{y_{i,k}} \exp(-\bar{y}_{i,k})}{y_{i,k}!}$$

観測時間 : T

数値実験：設定

真のモデルパラメータ

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

基底強度 : $\eta = \{1, 1, 1\}$

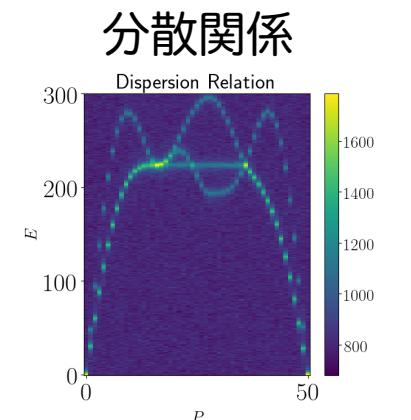
基底幅 : $\gamma = \{0.0025, 0.0025, 0.0025\}$

バックグラウンド : $B = 0.8$

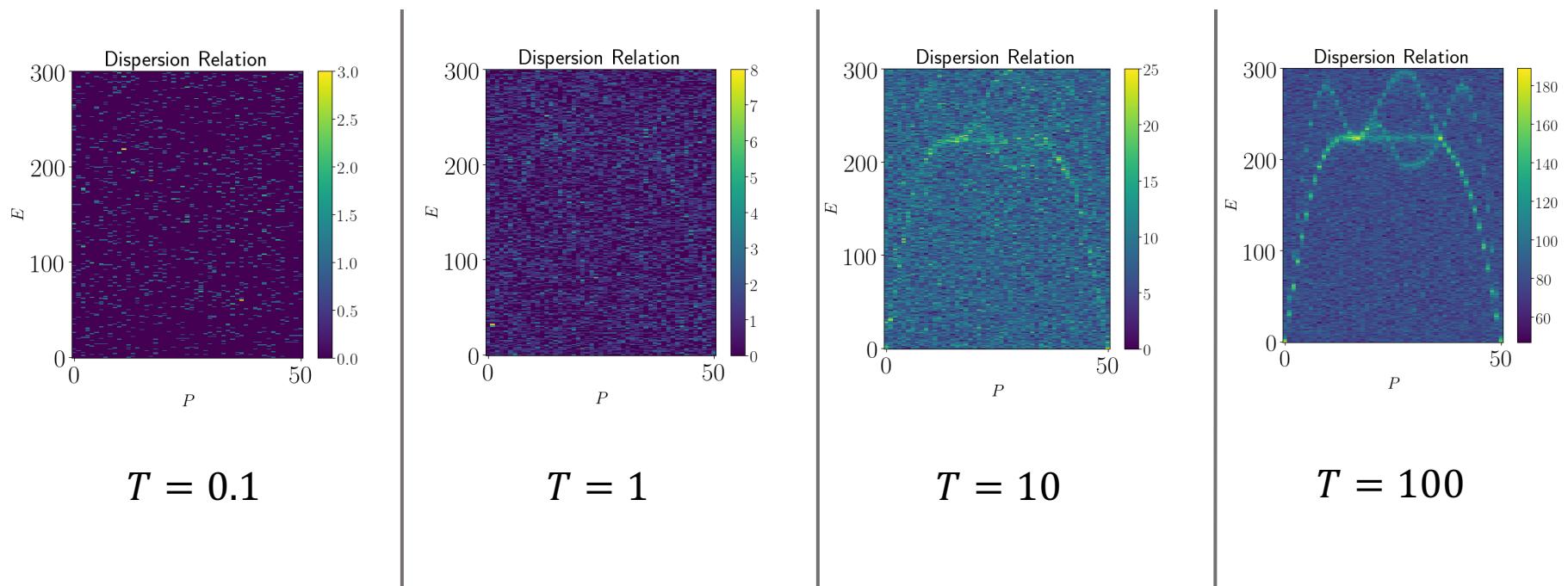
観測データ領域

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

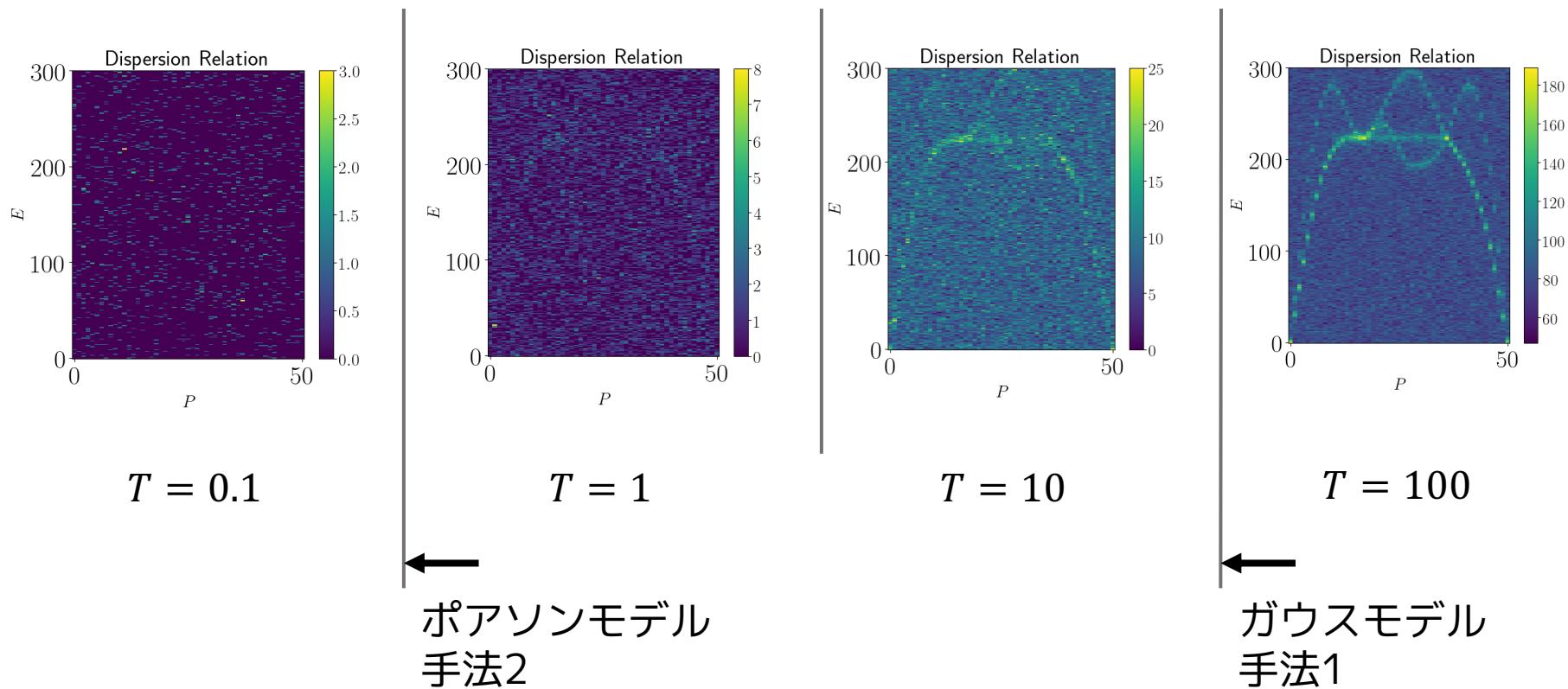
$$\Gamma[0,0,0] \rightarrow H\left[0,0,\frac{2\pi}{a}\right] \rightarrow N\left[0,\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right] \rightarrow P\left[\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right] \rightarrow \Gamma[0,0,0]$$



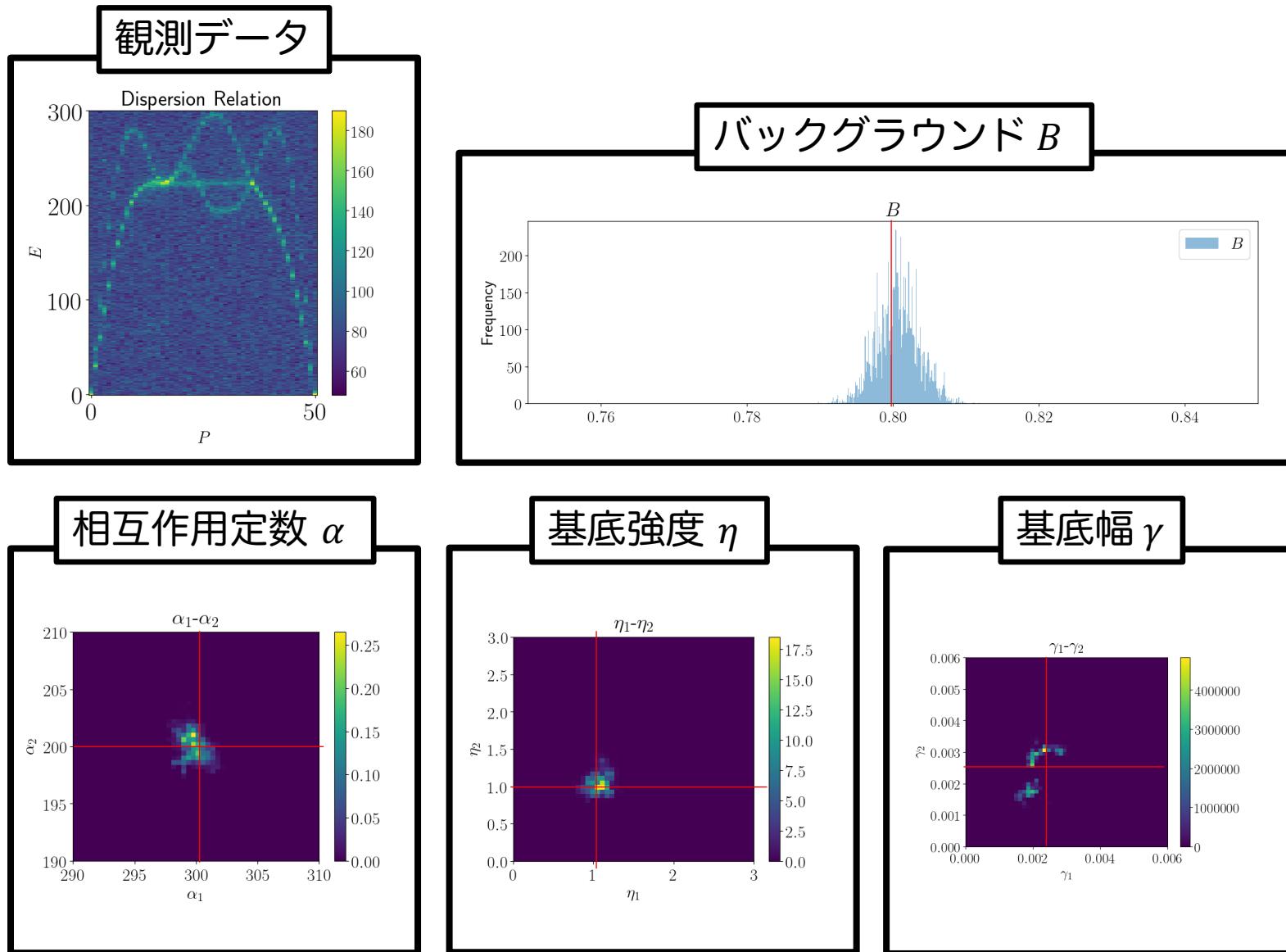
数値実験：パラメータ推定



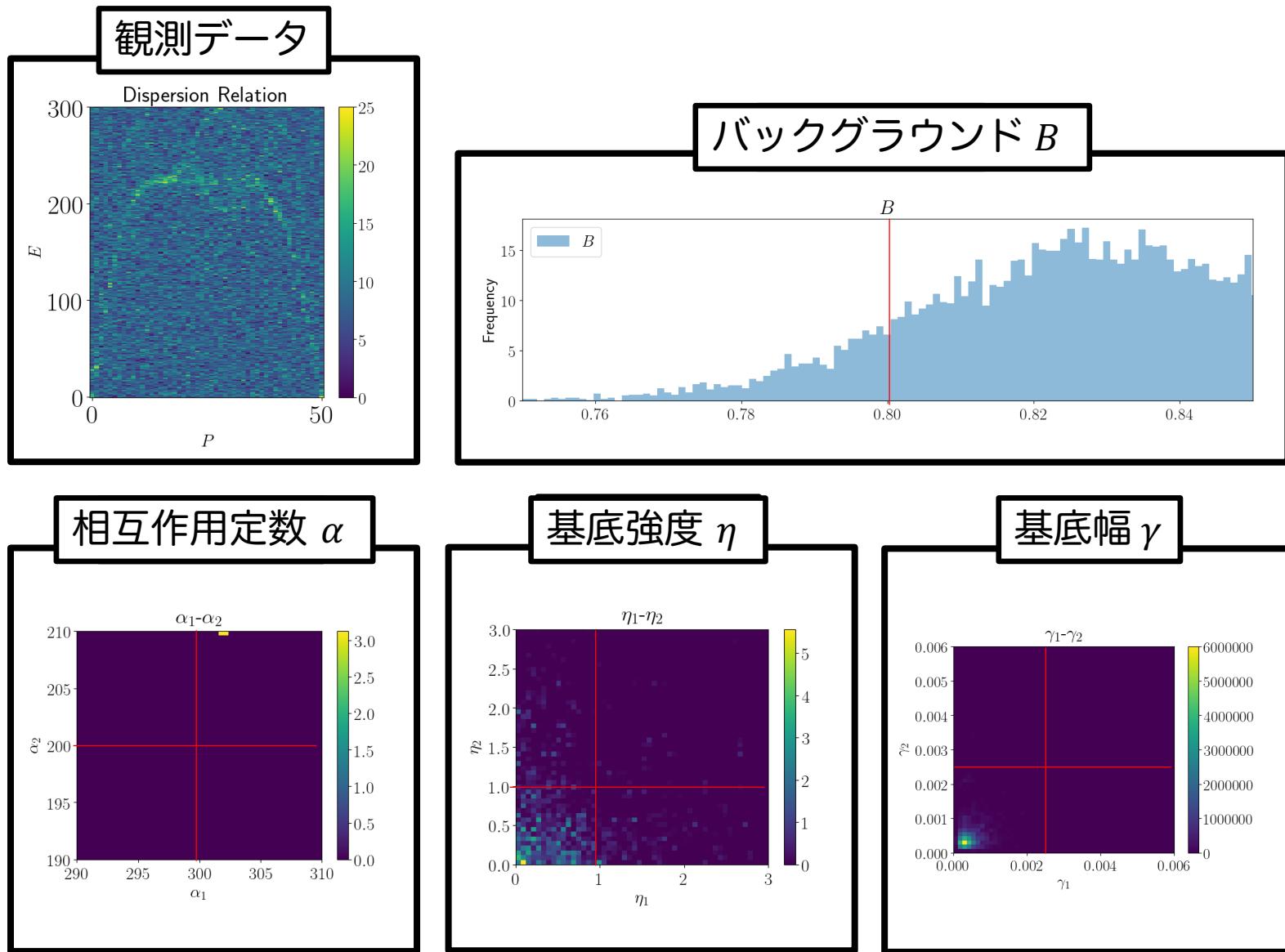
数値実験：パラメータ推定



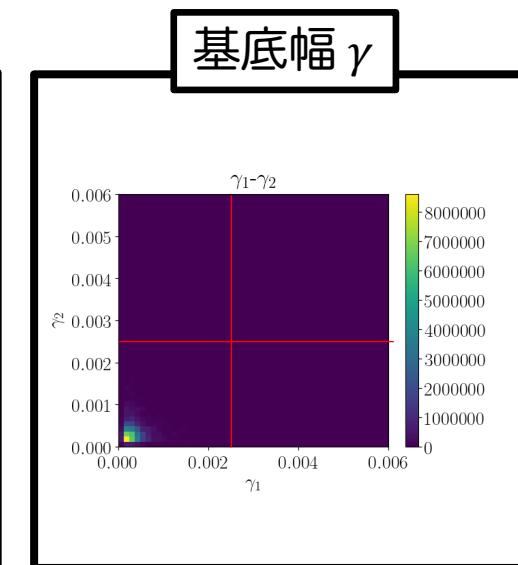
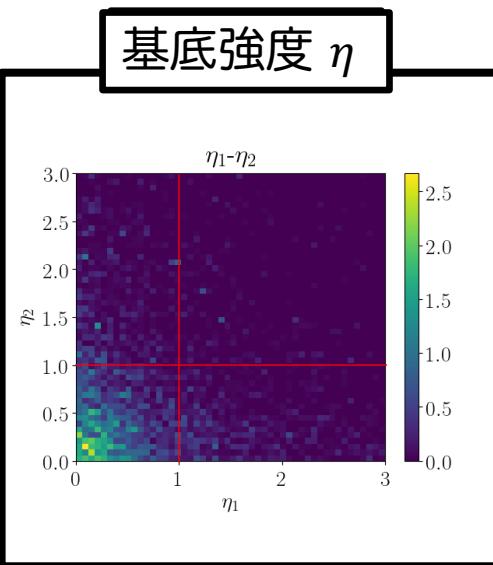
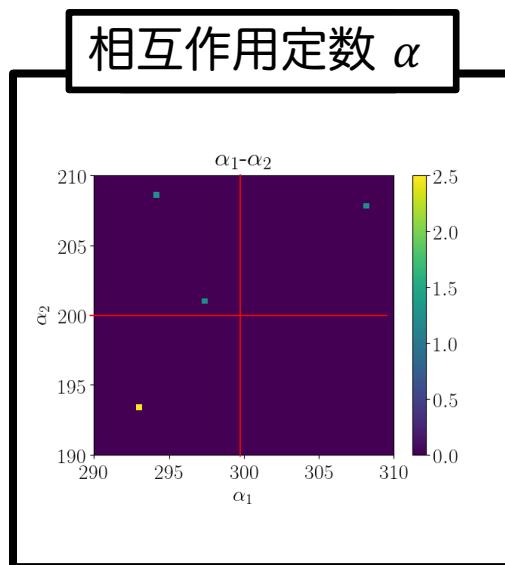
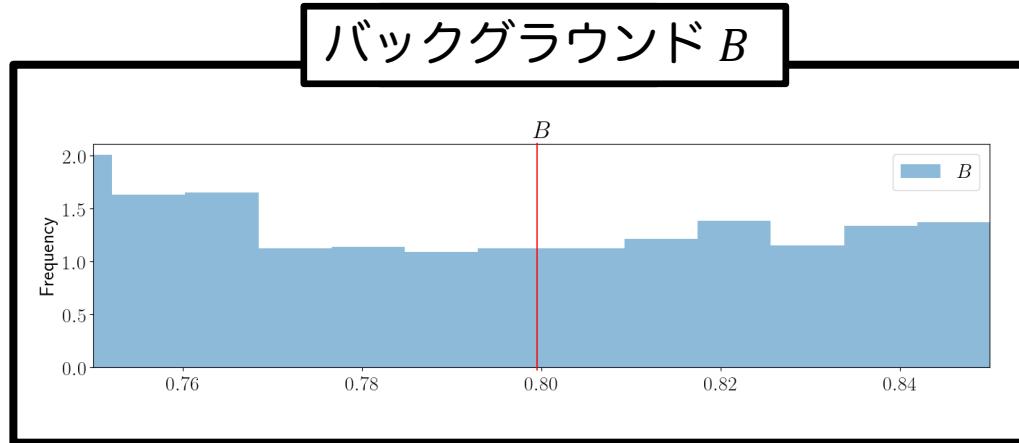
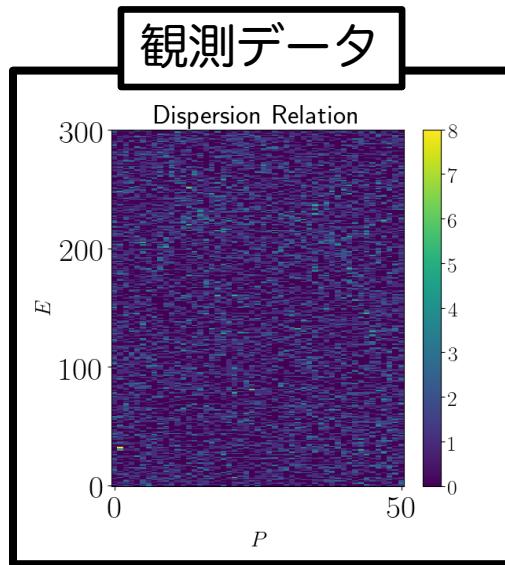
$T = 100$ の事後確率 (Gauss)



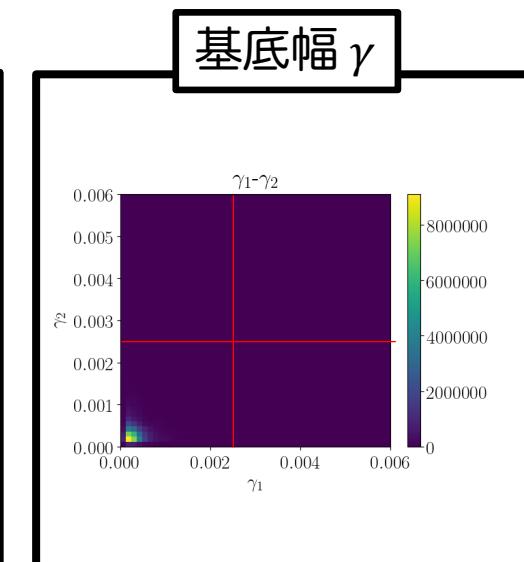
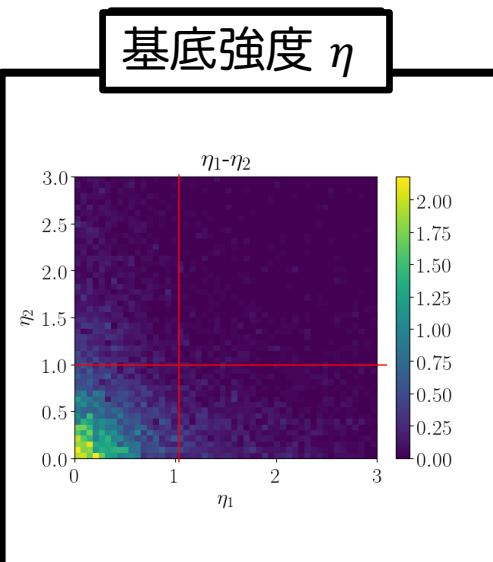
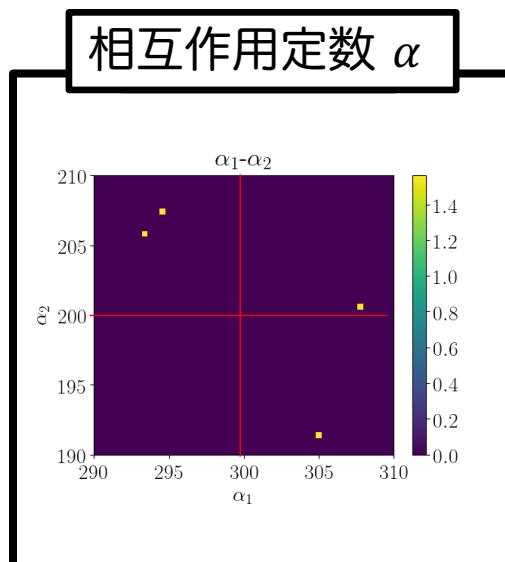
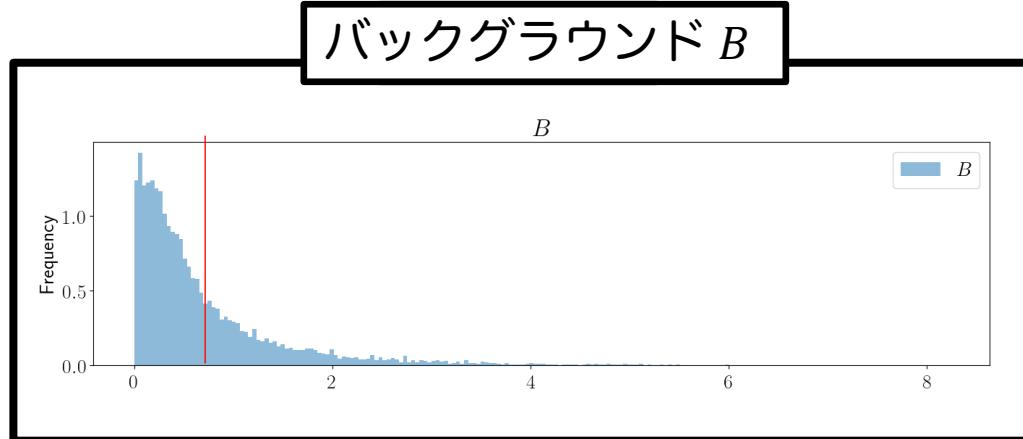
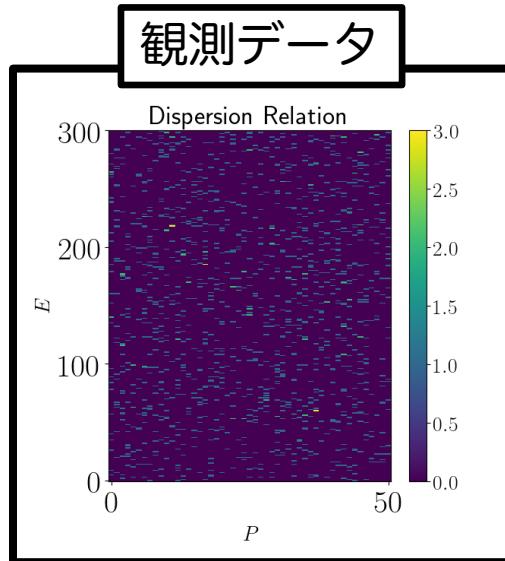
$T = 10$ の事後確率 (Gauss)



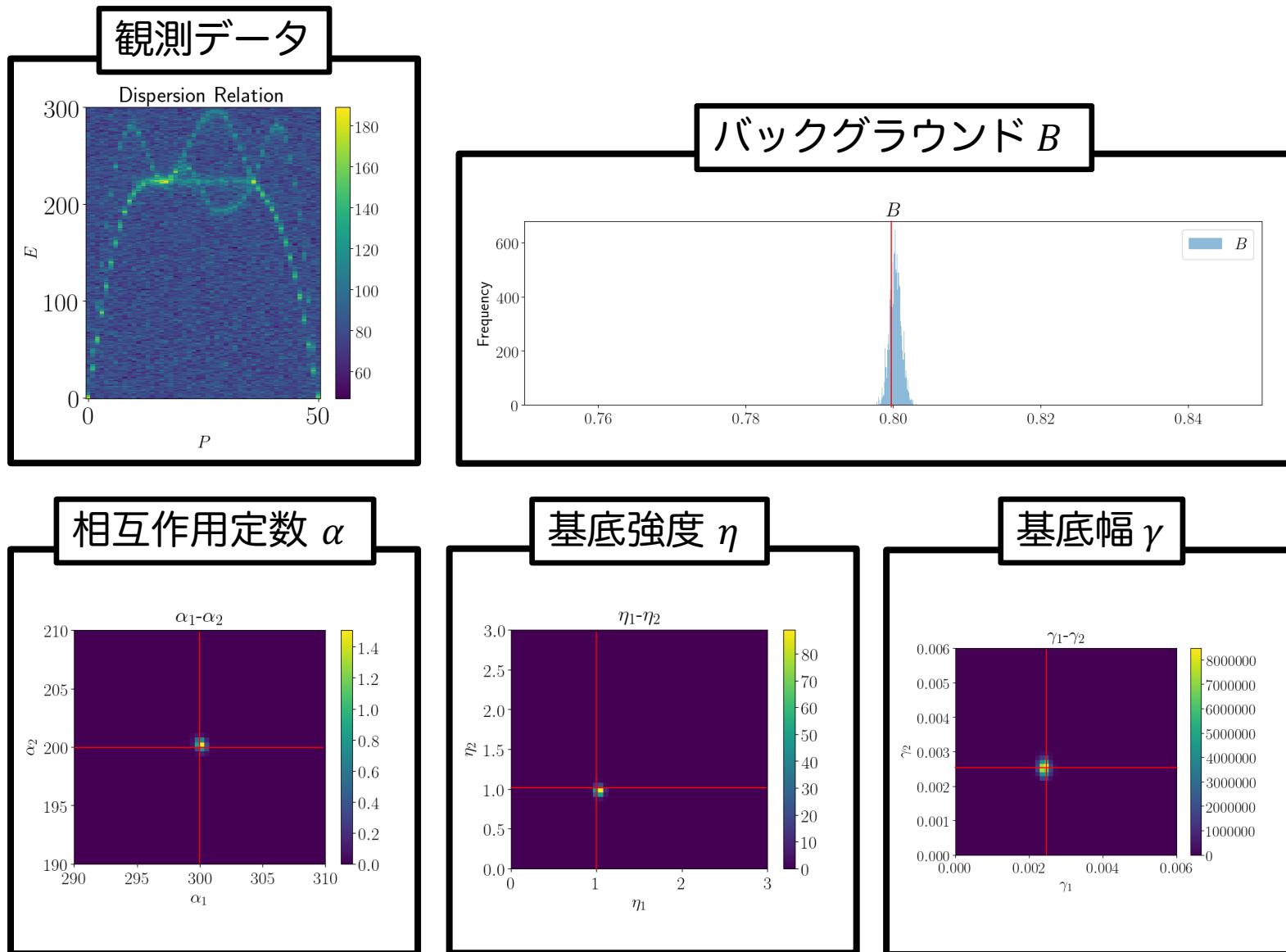
$T = 1$ の事後確率(Gauss)



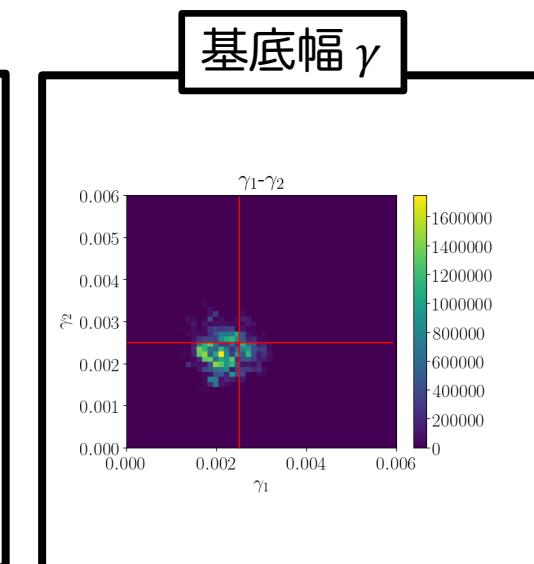
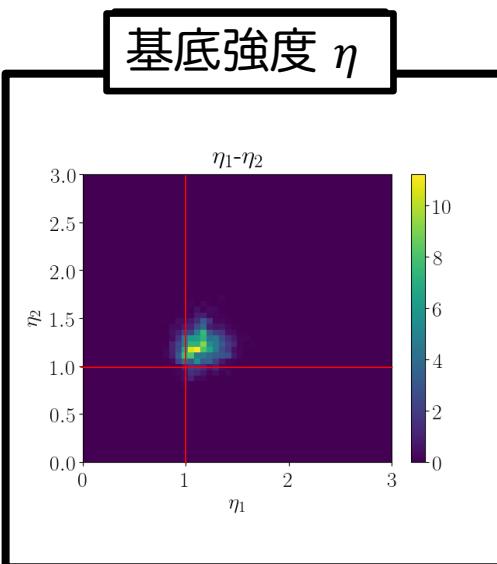
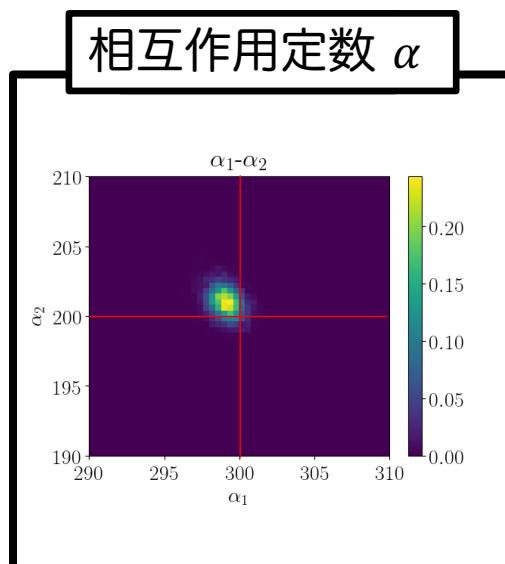
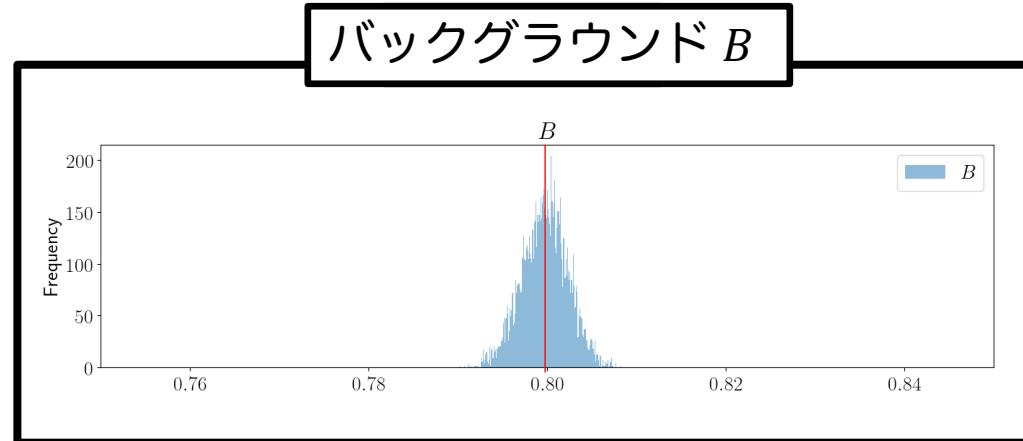
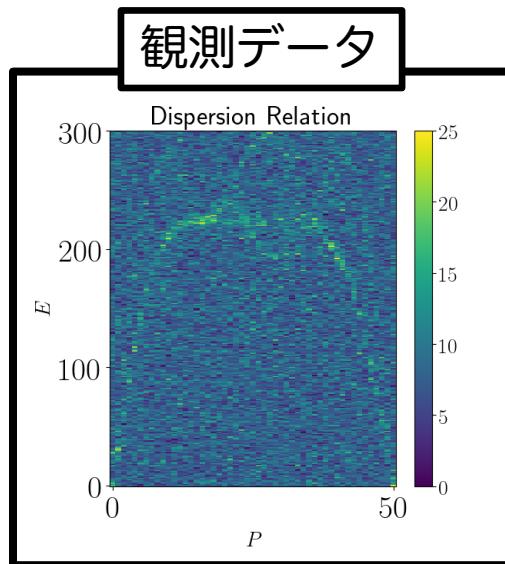
$T = 0.1$ の事後確率(Gauss)



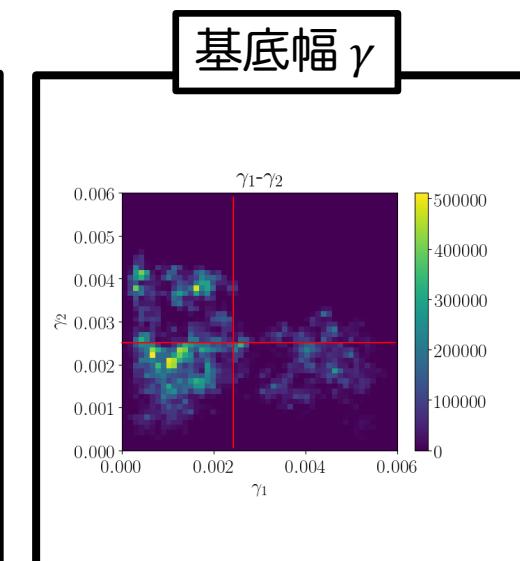
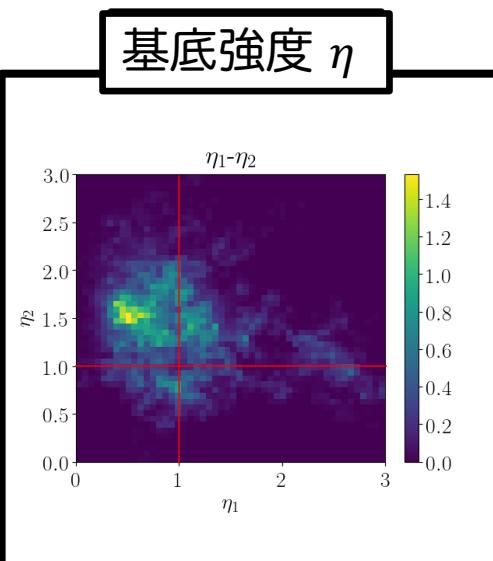
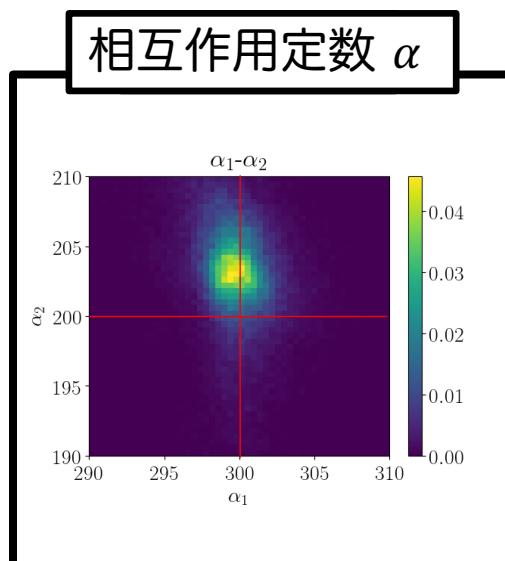
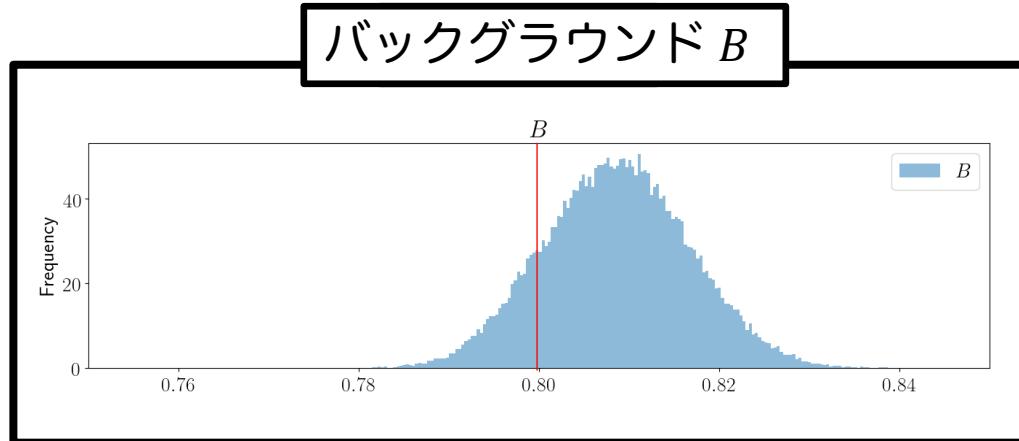
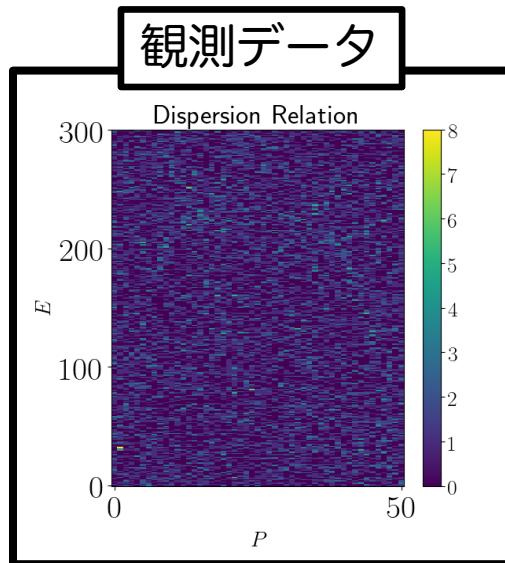
$T = 100$ の事後確率 (Poisson)



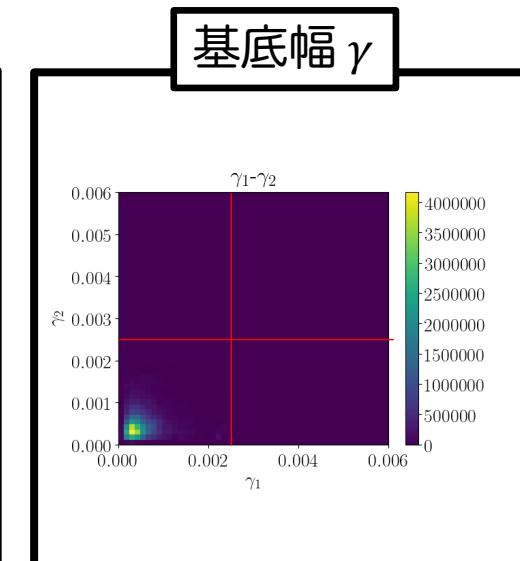
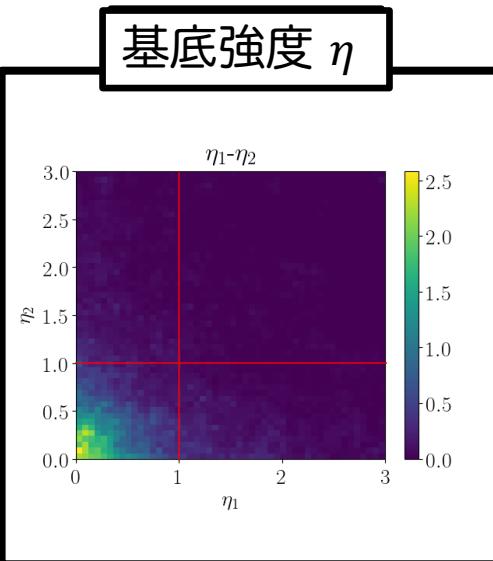
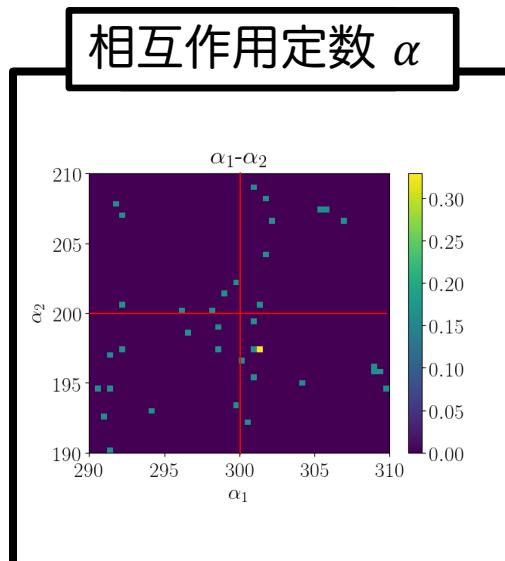
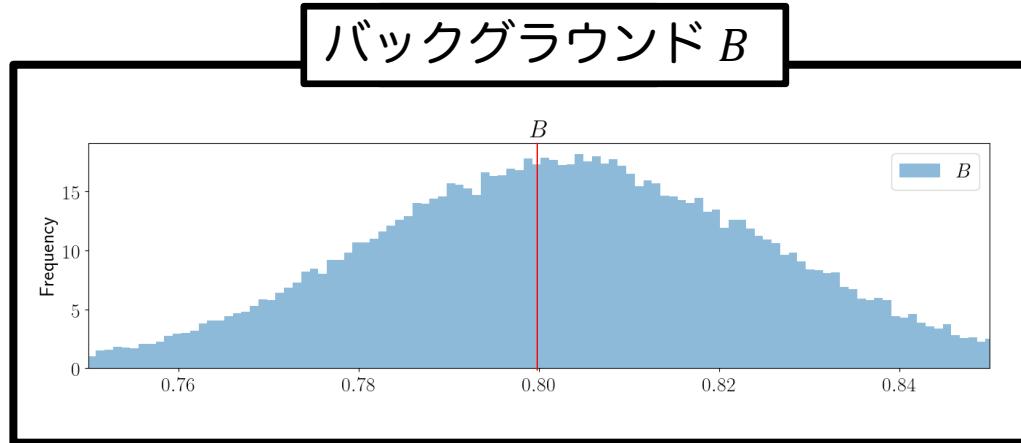
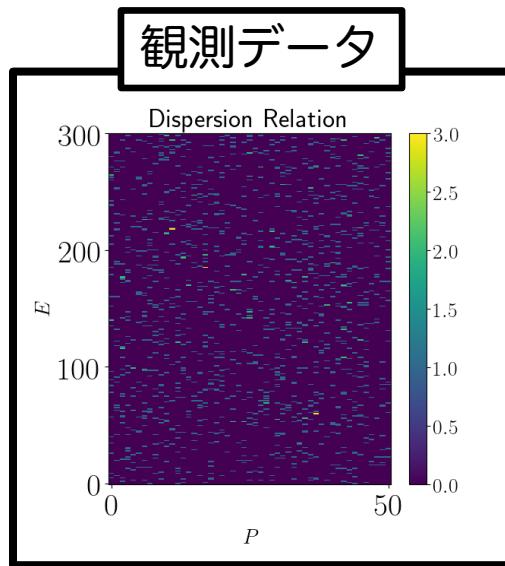
$T = 10$ の事後確率 (Poisson)



$T = 1$ の事後確率(Poisson)



$T = 0.1$ の事後確率(Poisson)



統計解析結果

Table IV. Descriptive statistics values of posteriors by Gaussian EMC.

Time	Posterior Mean			Posterior Std.		
	α_1 [N/m]	α_2 [N/m]	α_3 [N/m]	α_1 [N/m]	α_2 [N/m]	α_3 [N/m]
1000	300.00 ± 0.06	199.99 ± 0.06	100.01 ± 0.03	0.08 ± 0.00	0.10 ± 0.00	0.07 ± 0.00
100	299.88 ± 0.39	199.98 ± 0.63	100.09 ± 0.35	0.89 ± 0.42	1.24 ± 0.40	0.95 ± 0.32
10	2869.40 ± 4335.94	1288.29 ± 685.08	1037.25 ± 327.82	75030.23 ± 182473.8	18510.97 ± 19274.41	10078.06 ± 8481.60
1	1092.83 ± 793.79	1469.85 ± 1518.43	973.71 ± 344.36	28949.34 ± 54884.65	41824.27 ± 78722.12	18154.27 ± 26247.32
0.1	4154.65 ± 9067.73	1409.29 ± 1107.07	1061.90 ± 235.39	325395.19 ± 898216.3	45478.45 ± 74316.54	24386.52 ± 17130.80

Table III. Descriptive statistics values of posteriors by Poisson EMC.

Time	Posterior Mean			Posterior Std.		
	α_1 [N/m]	α_2 [N/m]	α_3 [N/m]	α_1 [N/m]	α_2 [N/m]	α_3 [N/m]
1000	300.00 ± 0.11	200.01 ± 0.09	100.03 ± 0.07	0.09 ± 0.00	0.11 ± 0.01	0.08 ± 0.01
100	299.93 ± 0.26	199.92 ± 0.40	100.07 ± 0.26	0.26 ± 0.01	0.33 ± 0.01	0.24 ± 0.02
10	300.33 ± 1.02	199.88 ± 1.05	99.69 ± 0.46	0.85 ± 0.09	1.10 ± 0.11	0.81 ± 0.08
1	301.72 ± 3.04	200.41 ± 4.46	98.65 ± 2.70	3.30 ± 1.39	3.67 ± 0.99	2.69 ± 0.96
0.1	1101.65 ± 924.92	1219.80 ± 2014.31	1056.90 ± 814.90	12382.66 ± 15656.31	9369.42 ± 19538.85	9769.06 ± 12901.07

各計測時間の計測データに対してベイズ推論を各々10回実行した結果。

ガウスモデルでは $T=100$ まで、ポアソンモデルでは $T=1$ まで推論可能

2桁の精度改善

目次

- ベイズ計測とは
 - 解析的に解けるベイズ推論：線形回帰問題
 - 数値的に解くベイズ推論：スペクトル分解
- 非弾性散乱実験のベイズ推論
 - ガウスノイズモデル
 - ポアソンノイズモデル
- まとめ
 - 物性科学とベイズ推論
 - EMCライブラリー

まとめ

- データの生成モデルがあればベイズ推論
 - ベイズ事後確率: パラメータの精度まで議論
 - モデル選択: どのフィッティング関数が良いかもデータから決定
 - 従来手法の推定性能を改善できる可能性

物性科学とベイズ推論

- $y=ax+b$ の線形回帰のベイズ推論はいたところで使える。
- スペクトルなどの分光データだけでなく、マクロ測定の比熱や帯磁率などにもベイズ推論は使える。
- 強相関電子系などの第一原理計算で取り扱えない電子間相互作用を実験データからきめることができる。
- このように、ベイズ推論は物性科学における必須の普遍的な情報処理技術である。

ベイズ計測を是非導入してみて欲しい層

スペクトルや画像データからフィッティングを行っている方で

- そのフィッティングの際に、パラメータを手打ちで決めている。最急降下法などを使っているが、うまくいかない。
 - フィッティング用のモデルが複数あって、事前にどれを使うかを決めておかないといけない。
 - S/Nが悪いデータや欠損データからなんとか知見を得たい。
 - 複数計測の統合を行いたい。
-
- そのような方は、一度ベイズ計測をお試しください。



ベイズ推定って、どうやって実装したらいいの

