第16回 日本放射光学会 若手研究会
放射光サマースクール2024
—放射光科学×キャリアパス—
S1-2「ベイズ計測と放射光科学」

東京大学・大学院新領域創成科学研究科
複雑理工学専攻
岡田真人

本講演のスライドは岡田研HPにて公開

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

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 –)

内容

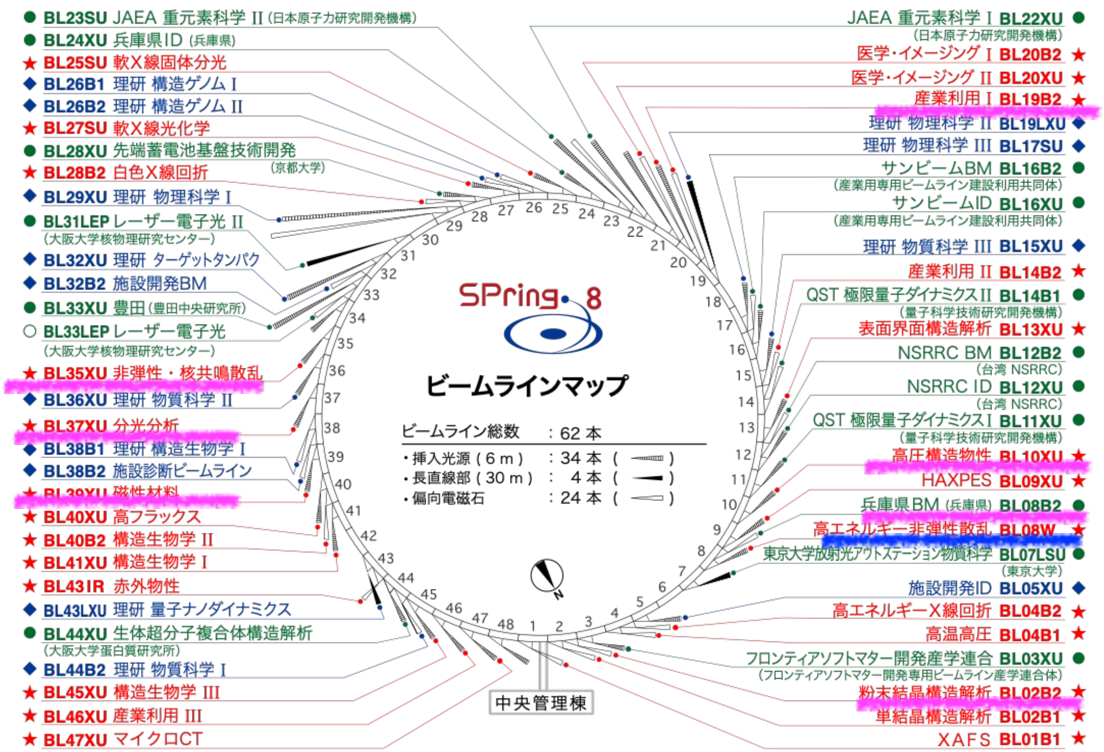
- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測の啓蒙と普及の戦略

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
BL10XU
横山優一+河口彰吾、沙織
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

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

ベイズ計測と放射光科学

- ベイズ計測にとって、放射光科学はテストベッドとして重要である。

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  – 計測科学の必須条件
  – ベイズ計測三種の神器
  – $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  – スペクトル分解
  – メスバウアー分光
  – 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

計測科学の必須条件

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

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

ベイズ計測

- ベイズ推論のうち計測科学に重要な三つの要素からなる情報数理科学的体系で、その三要素はベイズ計測三種の神器と呼ばれる

1. 物理パラメータの確率分布推定
2. 同一データを説明する複数モデルをデータのみから選べるベイズ的モデル選択
3. 同一物質に対する複数の実験データを系統的に統合するベイズ統合

- 従来の最小二乗法によるパラメータフィットでは、1.の物理パラメータの点推定しか行えない
- パラメータフィットを超えて: ベイズ計測では、取り扱えることが質的に異なる

ベイズ計測の習得法

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

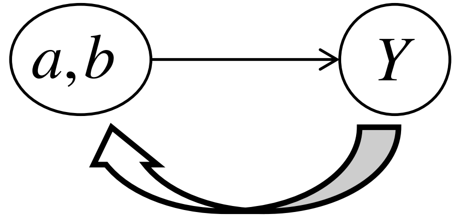
- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

ベイズ計測とは?

ベイズ推論

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(a,b\mid Y)$:事後確率。データが与えられたもとでの物理パラメータの確率.

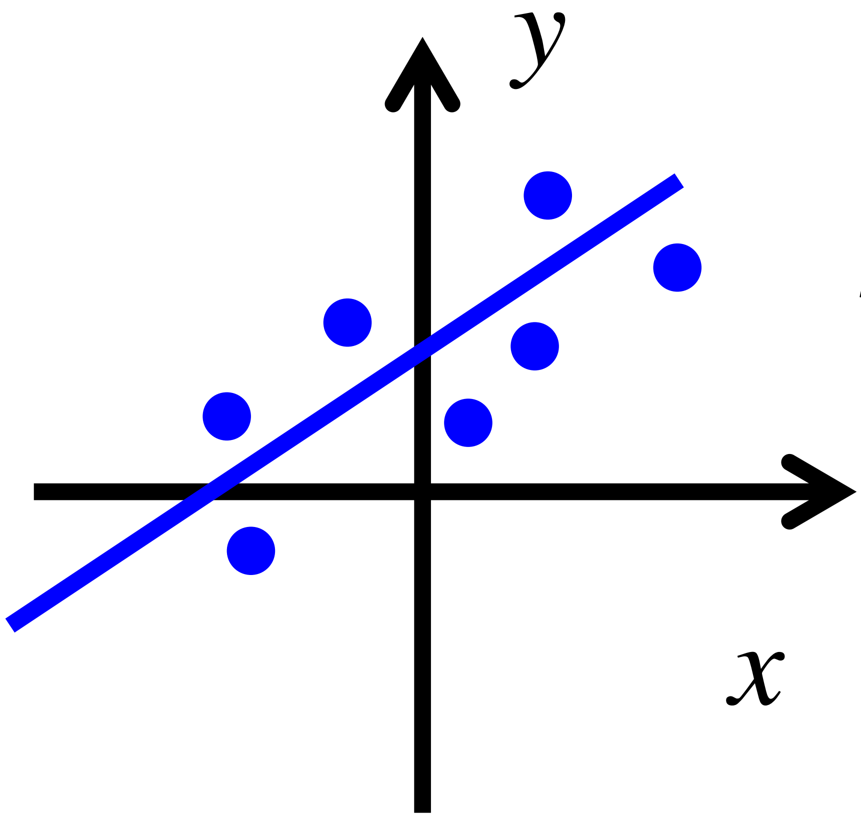
$p(a,b)$:事前確率。あらかじめ設定しておく必要がある。これまで蓄積されてきた科学的知見

ベイズ計測三種の神器

1. 物理パラメータの事後確率分布定
2. モデル選択
3. データ統合

ベイズ計測の利点
y=ax+bの取り扱いを通じて

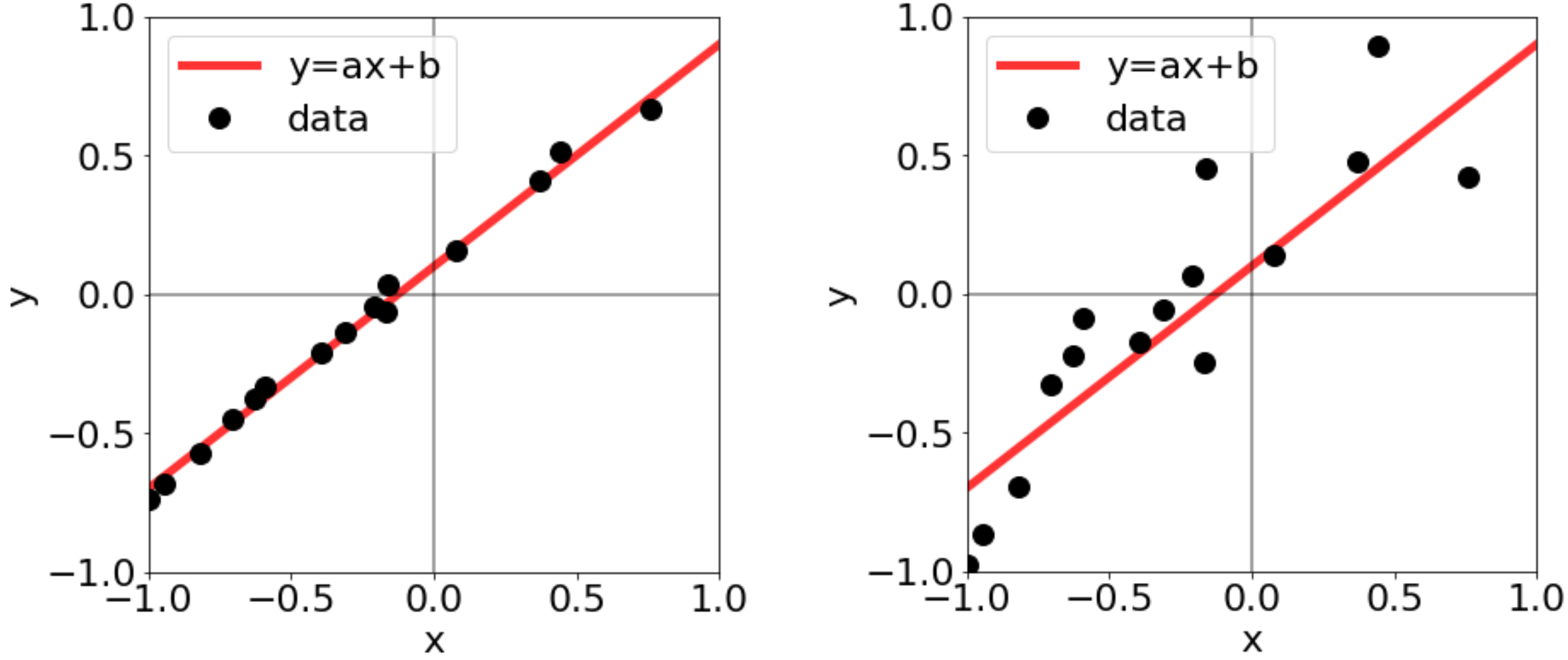
現状でも用いられている最も簡単な例



$y = ax + b$

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

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

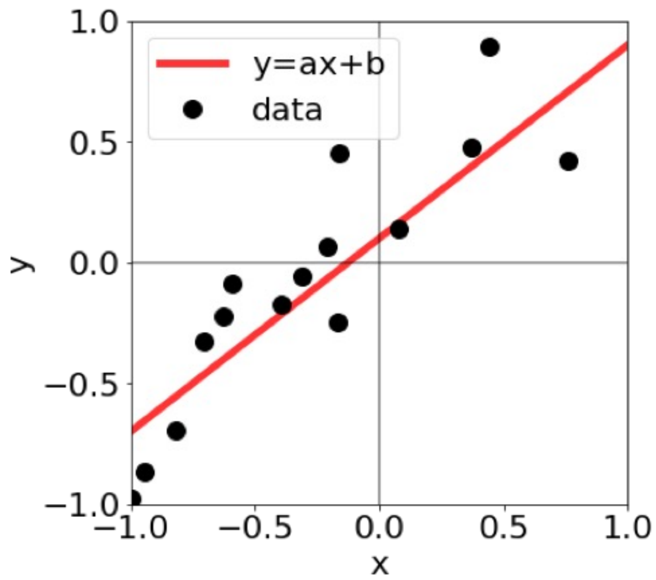
二乗誤差$E(a,b)$を最小にするようにパラメータをフィット（最小二乗法）

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

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

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

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



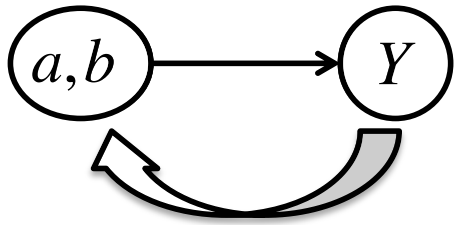
平均：$\bar{y}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i$，分散：$\overline{x^2}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i^2$

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

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)

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

生成（因果律）



＜ベイズの定理＞

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

$p(a,b \mid Y)$: 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)

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

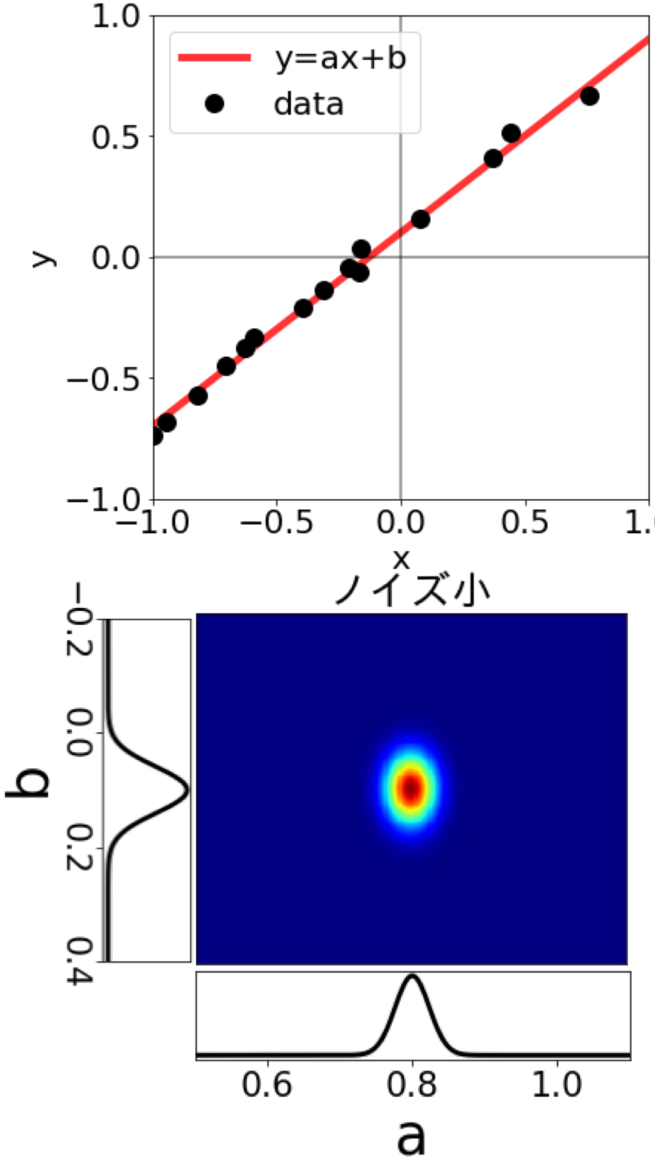
$$p(n_i) = p(y_i|a,b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right)$$

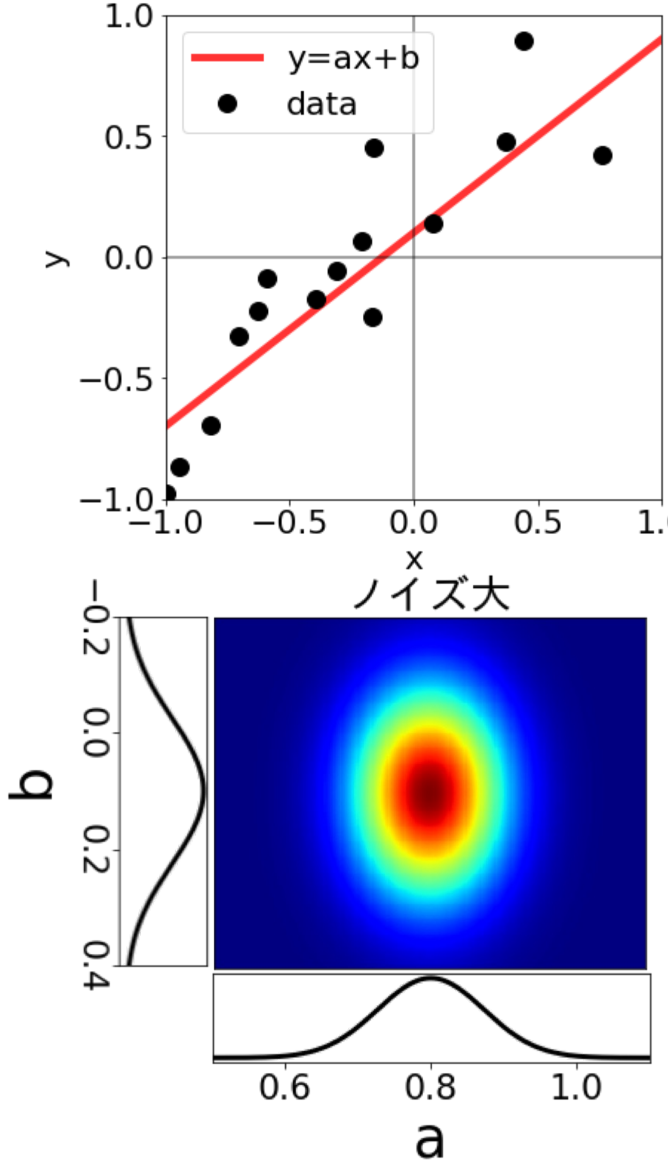
$$\begin{aligned} p(Y|a,b) &= \prod_{i=1}^{N} p(y_i|a,b) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^N \exp\left(-\frac{N}{\sigma^2} E(a,b)\right) \end{aligned}$$

神器1: パラメータの事後確率推定 (3/4)

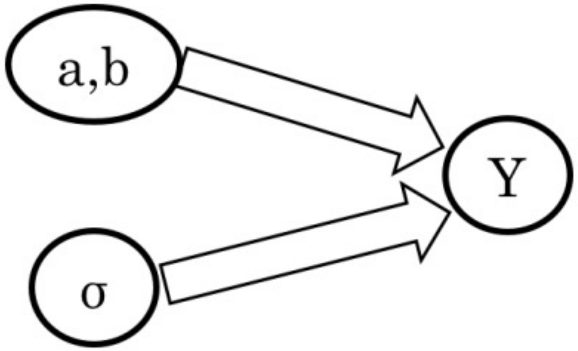
$$
\begin{aligned}
p(a,b|Y) &= \frac{p(Y|a,b)p(a,b)}{p(Y)} \propto p(Y|a,b) \\
&= \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}\Big(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b) + E(a_0,b_0)\Big)\right\} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}\Big(\mathcal{E}_a(a) + \mathcal{E}_b(b)\Big)\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2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

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

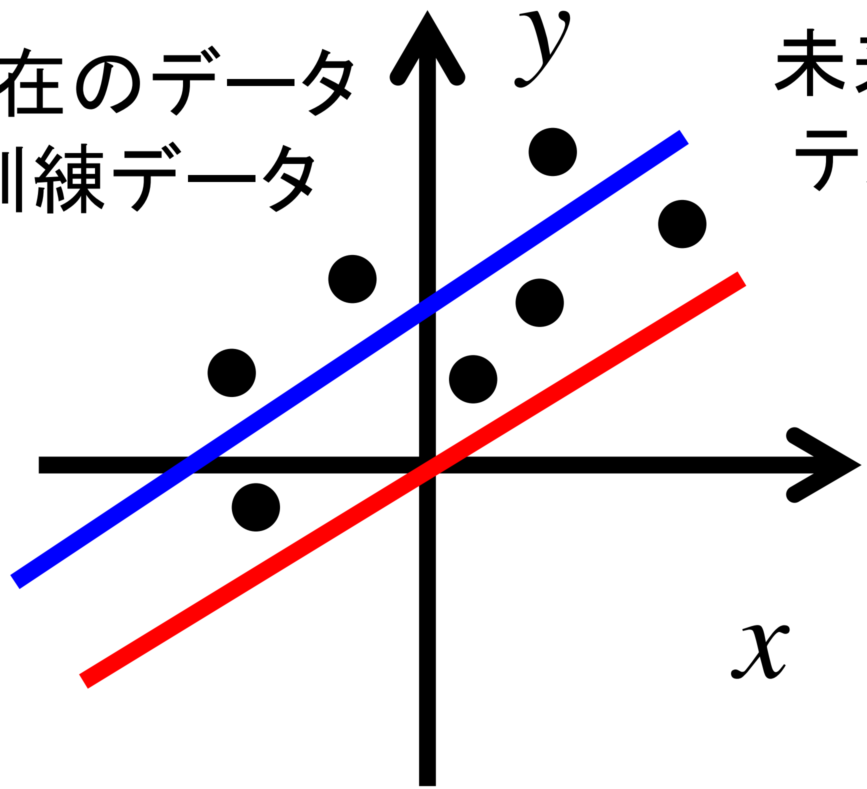


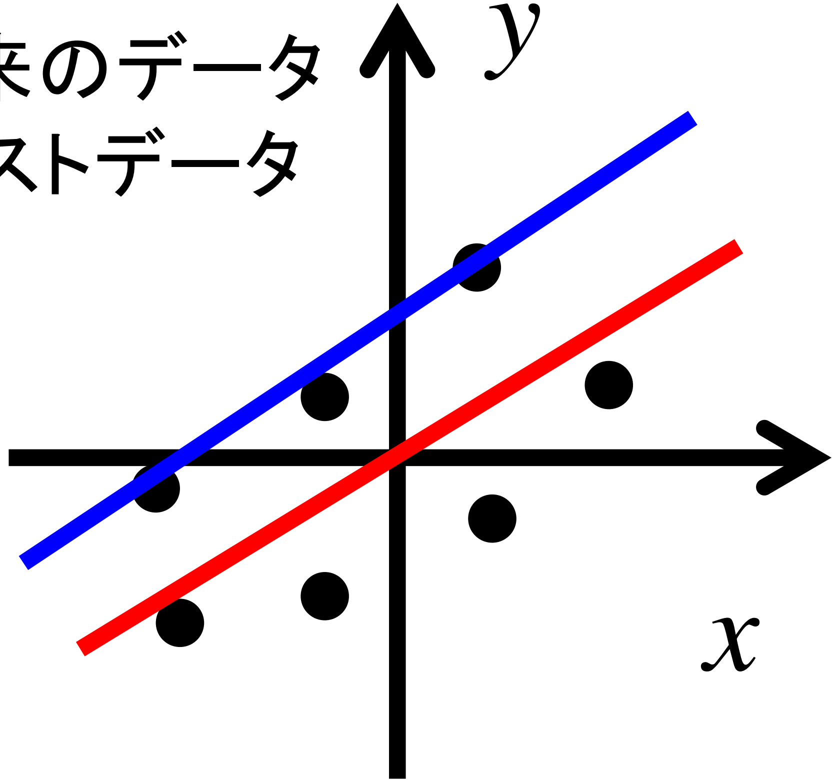
$$
\begin{aligned}
p(\sigma^2|Y) &\propto \int dadb\, p(Y|a,b,\sigma^2) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \int dadb \exp\left\{-\frac{N}{\sigma^2}E(a,b)\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^N \left\{\exp\left(-\frac{N}{\sigma^2}E(a_0,b_0)\right) + \int da \exp\left(-\frac{N\overline{x^2}}{2\sigma^2}(a-a_0)^2\right)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

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

問題意識　神器2: ベイズ的モデル選択

$y=ax$か$y=ax+b$か?



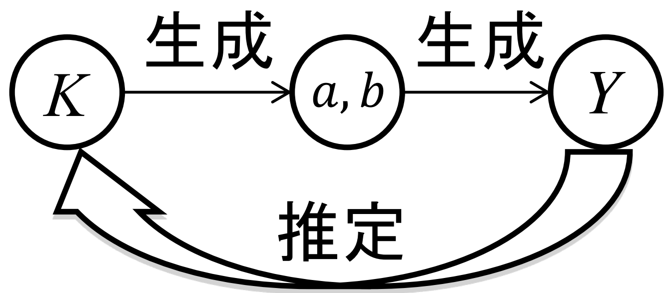


$y=ax+b$: 訓練誤差小
訓練誤差
ノイズに過学習

$y=ax$: 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



K :モデル
a, b :傾き 切片
Y :観測データ

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

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

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

4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化，分配関数

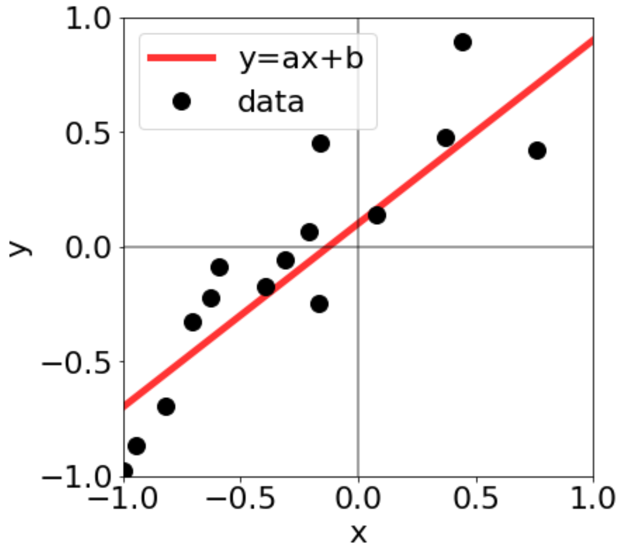
$$p(K, Y) = \int p(K, \theta, Y) d\theta$$

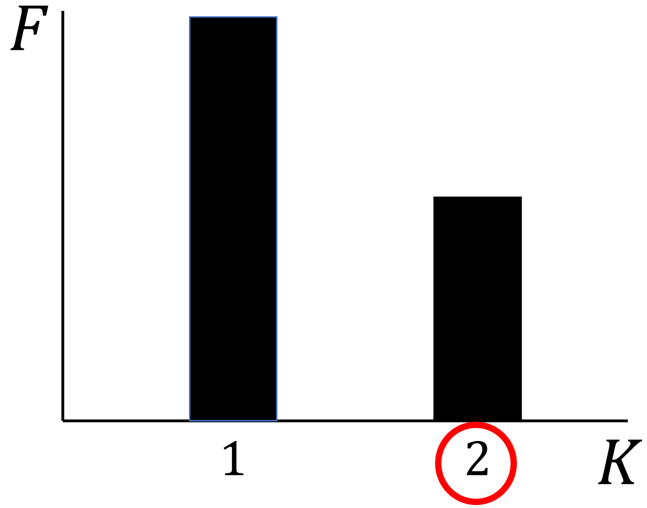
$$p(K \mid Y) = \frac{p(Y \mid K) p(K)}{p(Y)} \propto p(K) \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

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

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





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

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

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

データのみからモデルを選択できる

まとめ: ベイズ計測三種の神器 $y=ax+b$の解析取り扱いを通じて

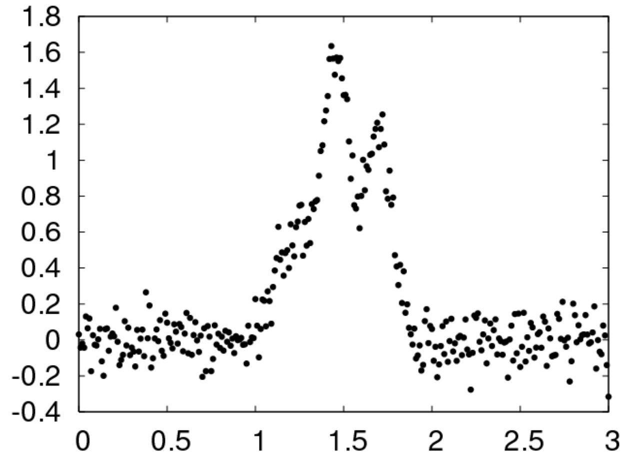
- 従来の最小二乗法
  - 1.物理パラメータの点推定
- ベイズ計測

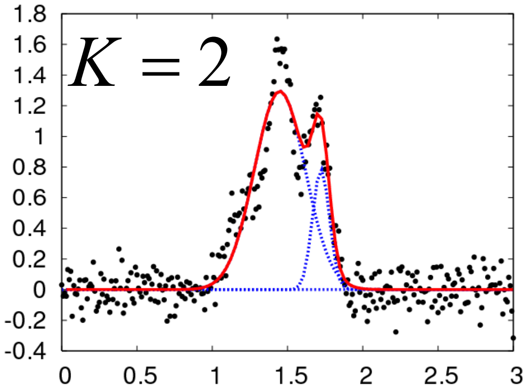
1. 物理パラメータの確率分布推定
2. データからのベイズ的モデル選択
3. ベイズ統合: 今回は説明を省略
   - 水牧先生の基調講演

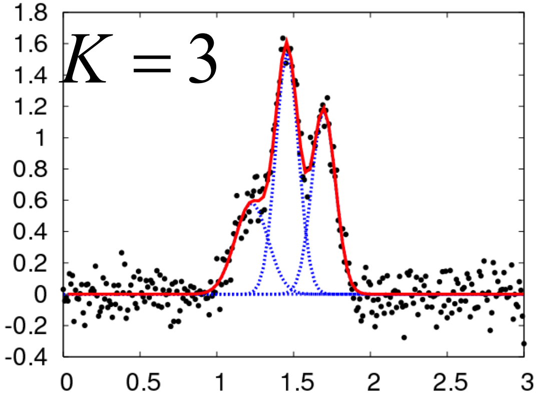
内容

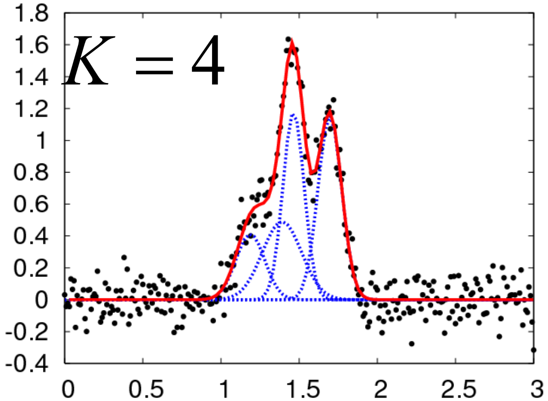
- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

ベイズ的スペクトル分解









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

スペクトル分解の定式化

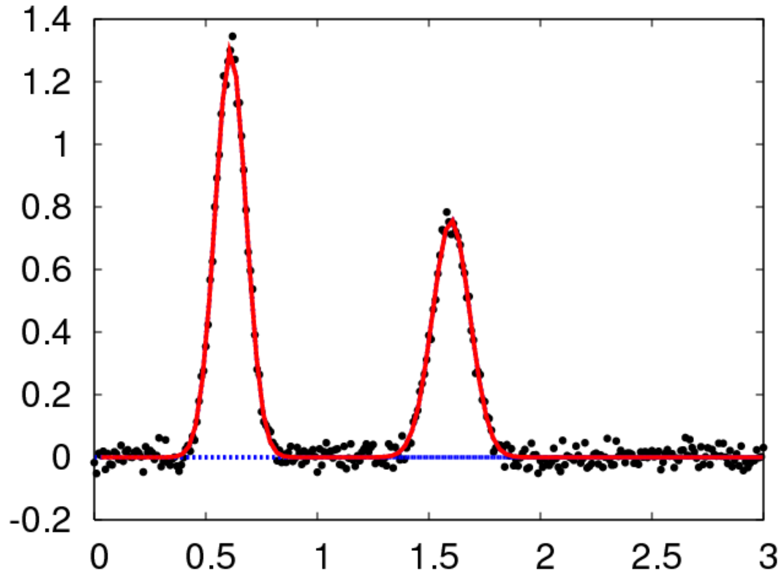
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより，スペクトルデータを近似

観測データ: $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

x_i : 入力　y_i : 出力

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

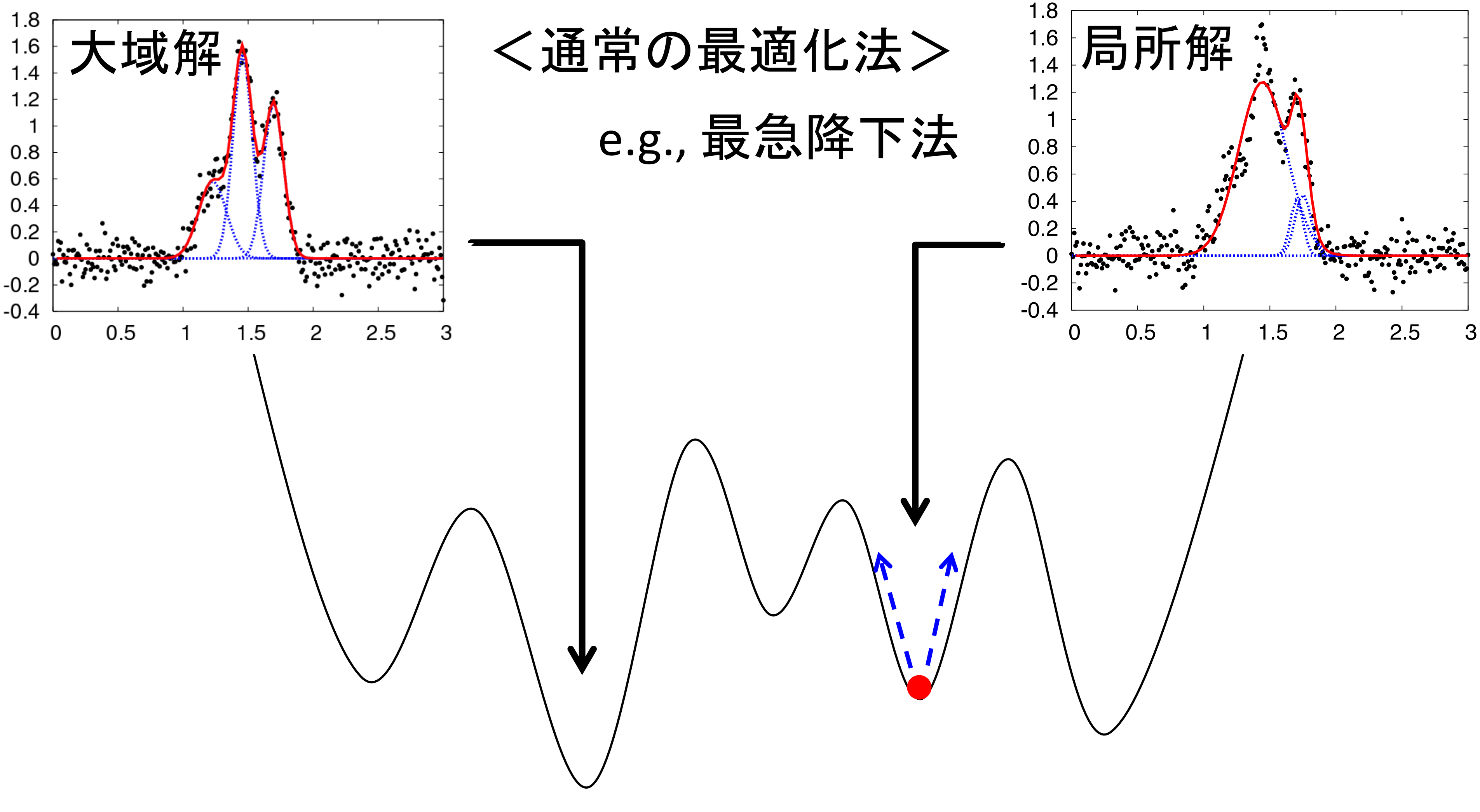
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \cdots, K$$



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）

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

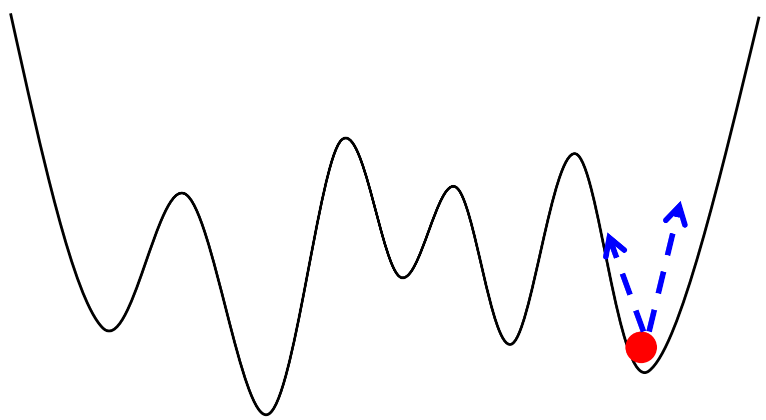
スペクトル分解従来法: 最急降下法 誤差関数は局所解を持つ



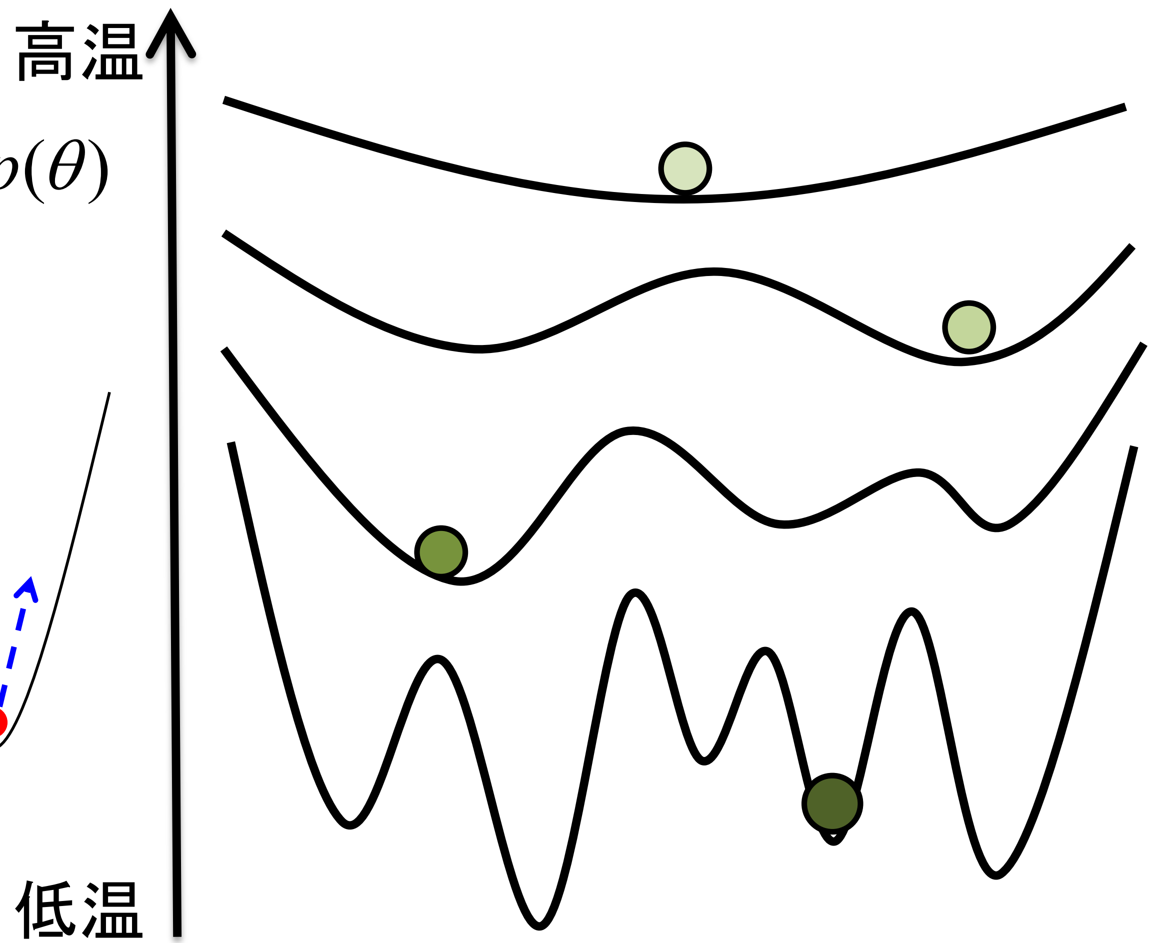
モンテカルロ法の適用
レプリカ交換モンテカルロ法

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

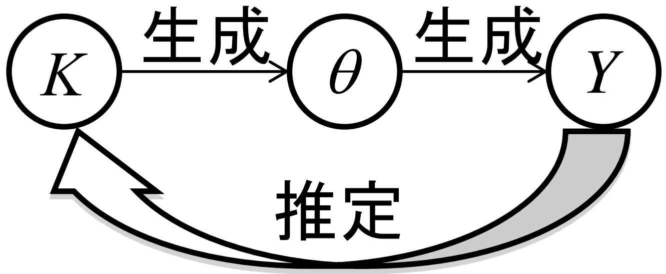
1. 欲しいのは　$p(K \mid Y)$

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:ピーク個数
θ:ピーク位置など
Y:観測スペクトル

4. 無駄な自由度の系統的消去:周辺化，分配関数

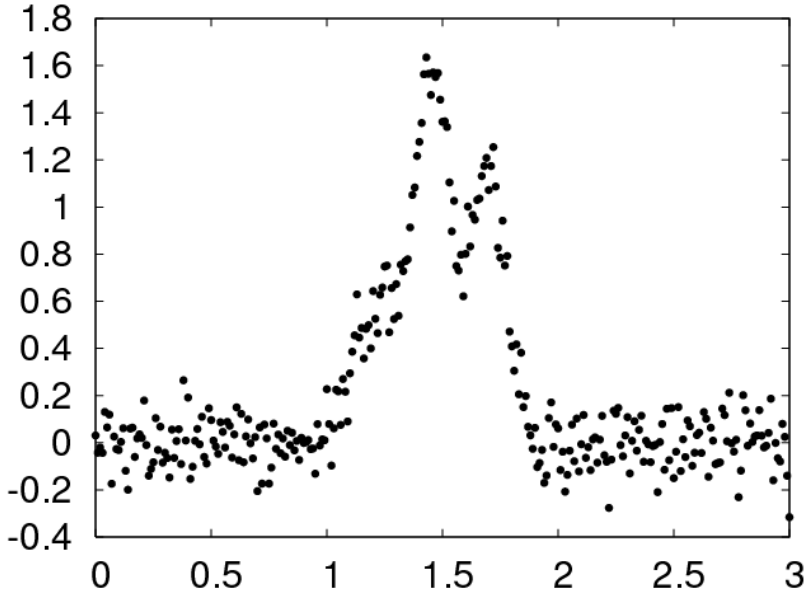
$$p(K,Y) = \int p(K,\theta,Y)\,d\theta$$

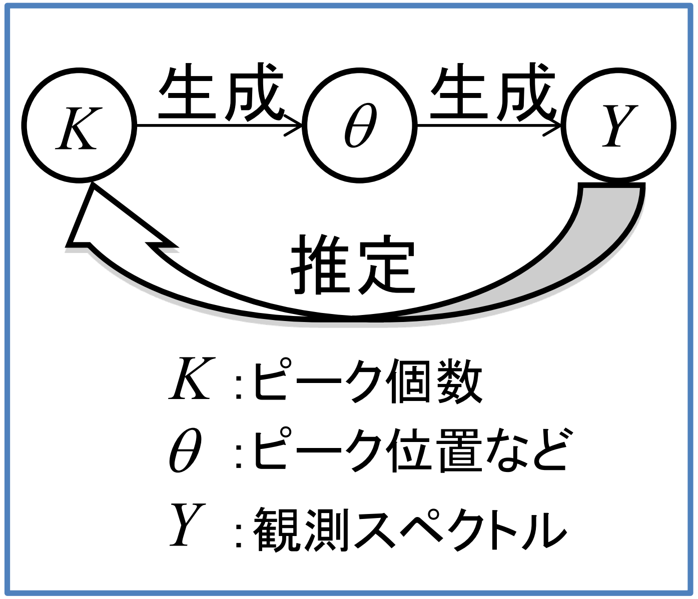
$$p(K \mid Y) = \frac{p(Y \mid K)p(K)}{p(Y)} \propto p(K)\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)\,d\theta$$

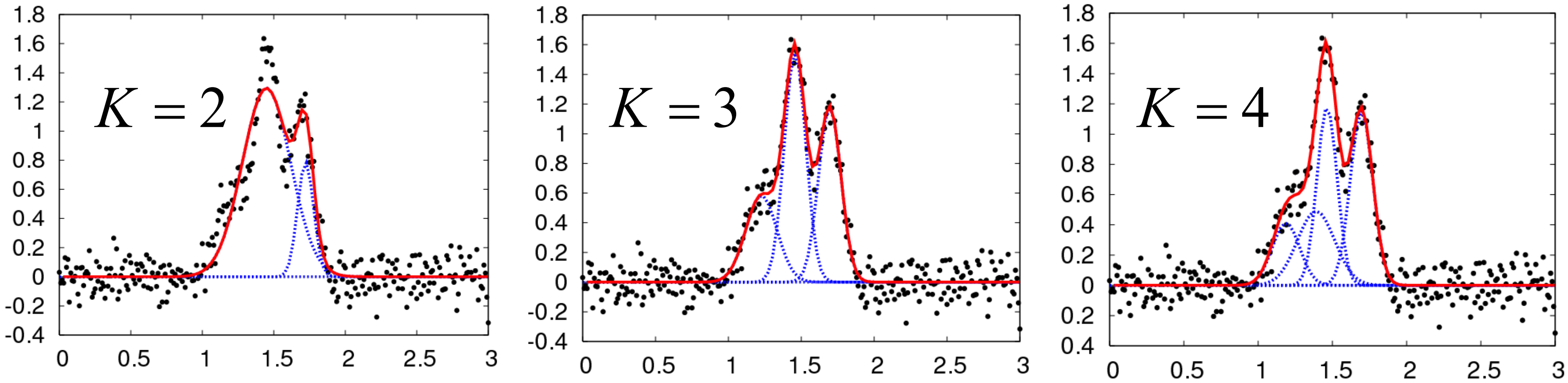
$$F(K) = -\log\int \exp(-nE(\theta))p(\theta)\,d\theta = \boxed{E - TS}$$

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







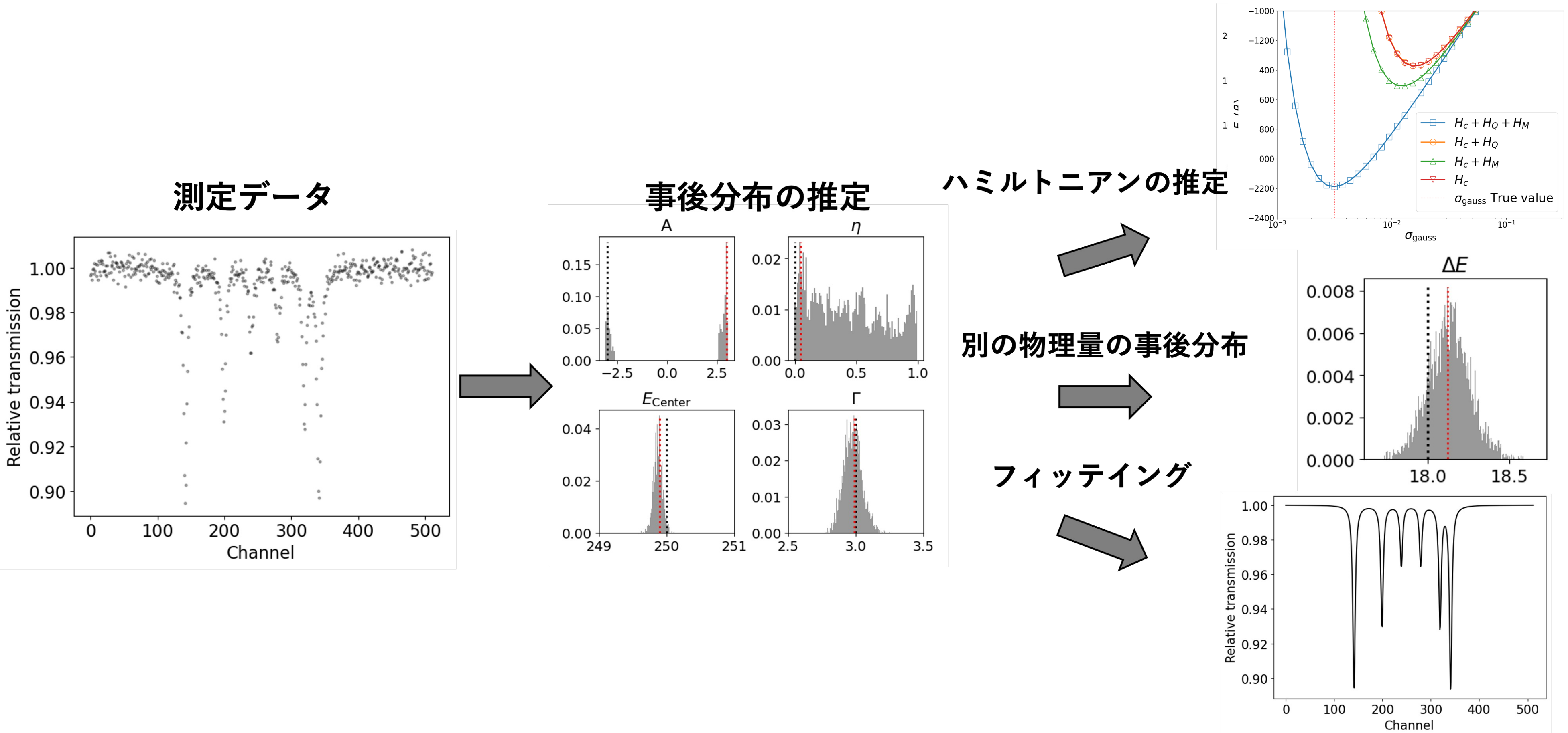
Nagata, Sugita and Okada, Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method, *Neural Networks* 2012

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

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

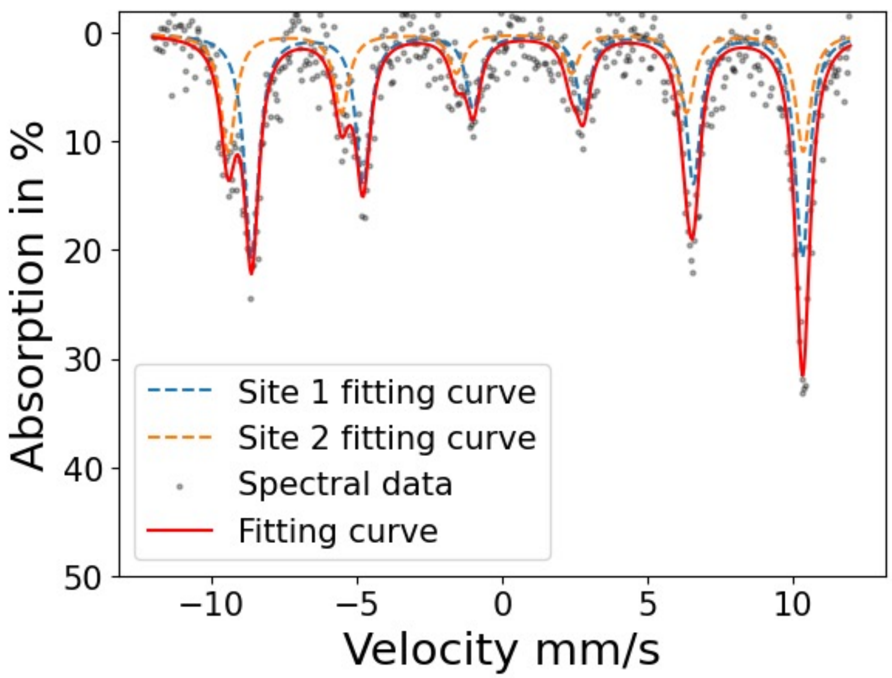


Moriguchi, Tsutsui, Katakami, Nagata, Mizumaki and Okada, *JPSJ*, 91,W104002 (2022)

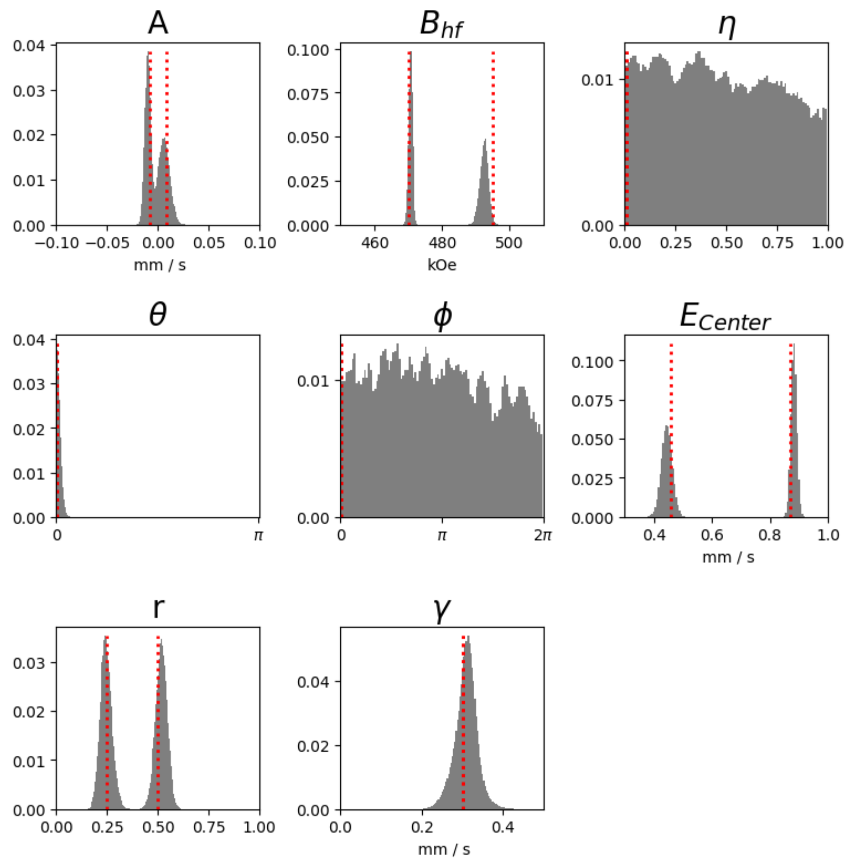
メスバウアー分光 (2/3)

- 神器1: パラメータの事後分布推定

フィッティング結果

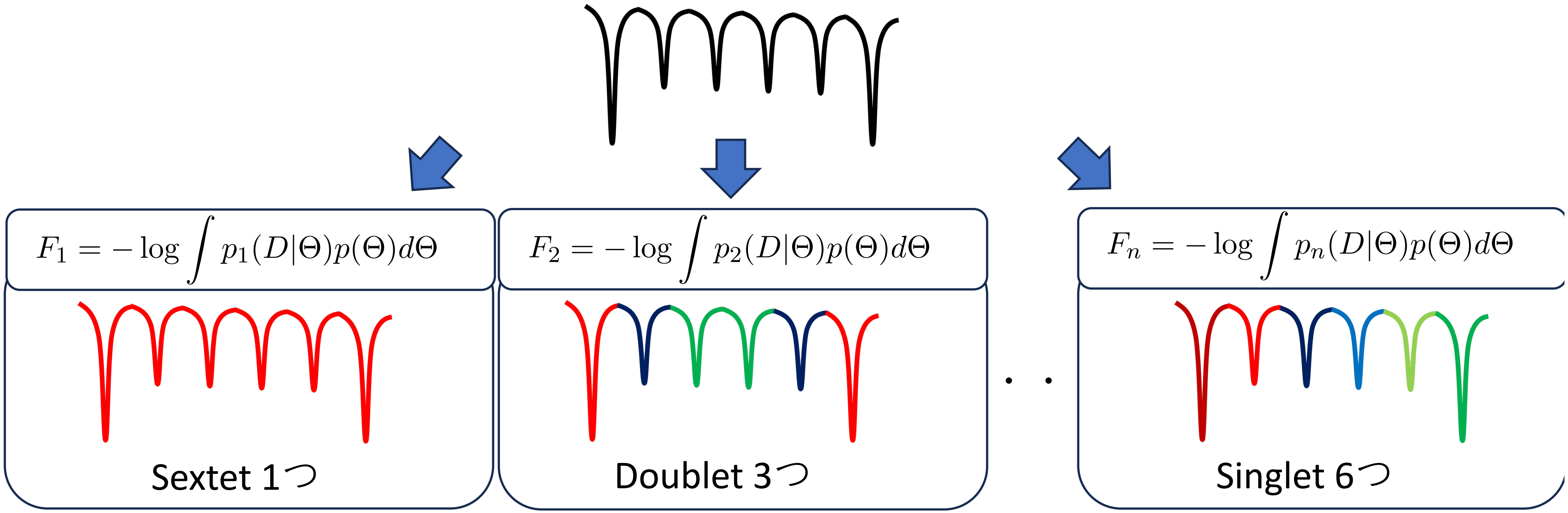


事後分布（赤い点線が実験値）



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

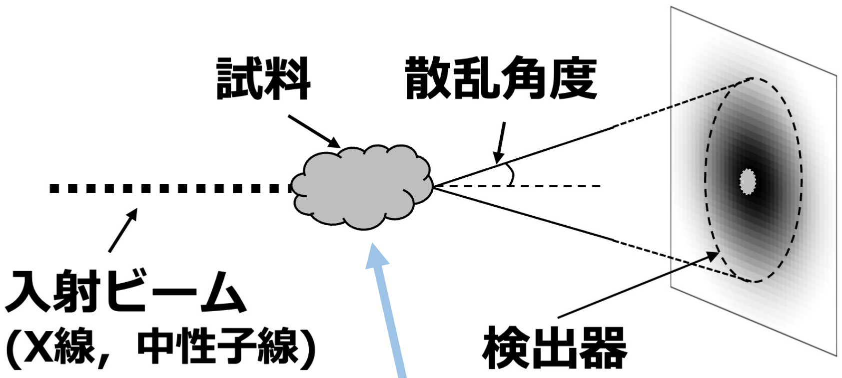


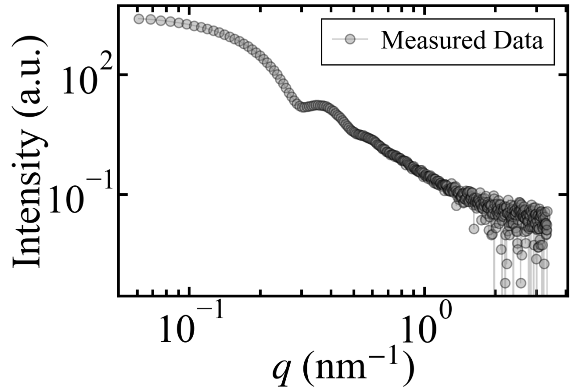
最もベイズ自由エネルギーの小さいモデルを選ぶ

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

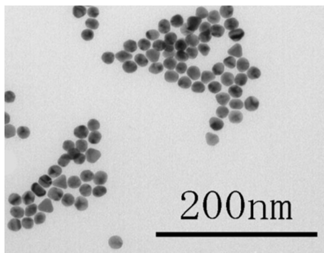
小角散乱 (1/5)





不均一系試料

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



出典: [1]

データ解析

1. 散乱強度モデルを設定

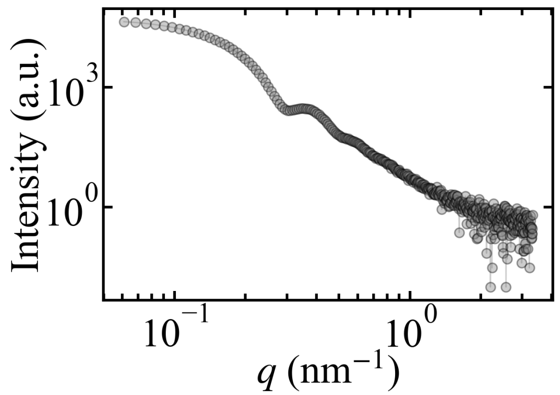
球粒子: $I(q,\Theta) = \left(\frac{\phi}{V}F(q,R_M)^2 + b\right) \times t$

2. モデルパラメータ推定

粒径R_M→10 nm

小角散乱 (2/5)

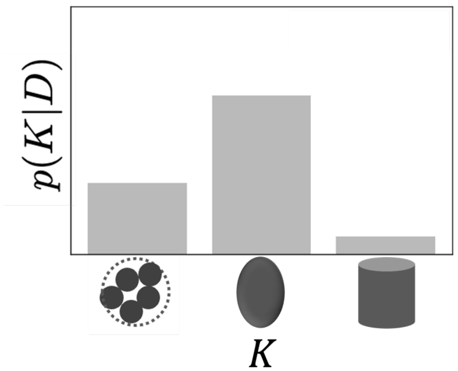
散乱強度−散乱ベクトル：D



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

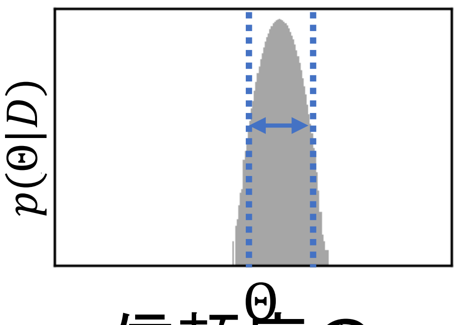


モデルの選択

パラメータ推定

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

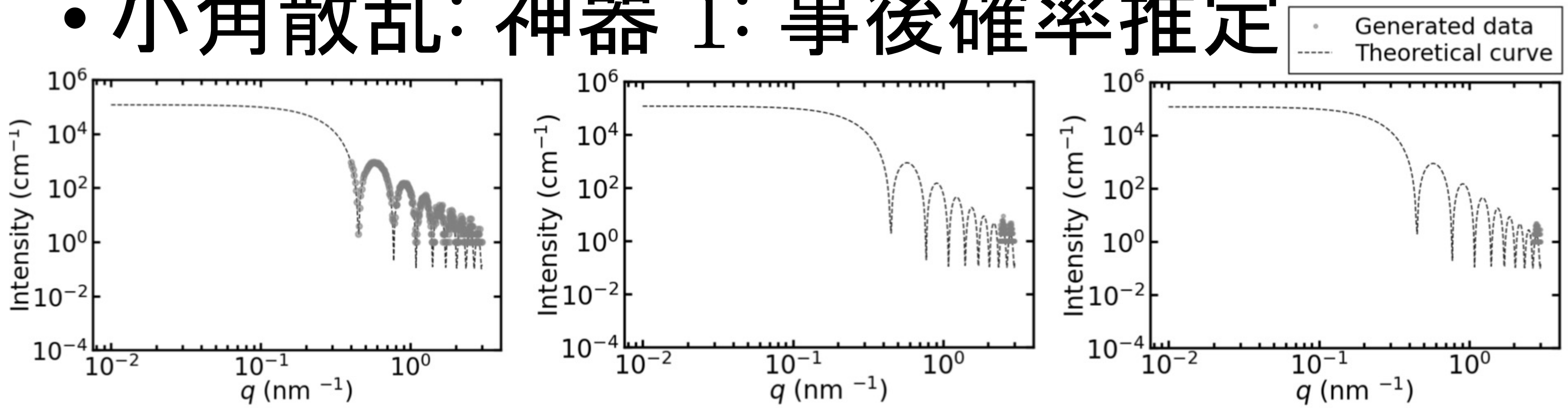
試料の大きさや密度のパラメータを推定



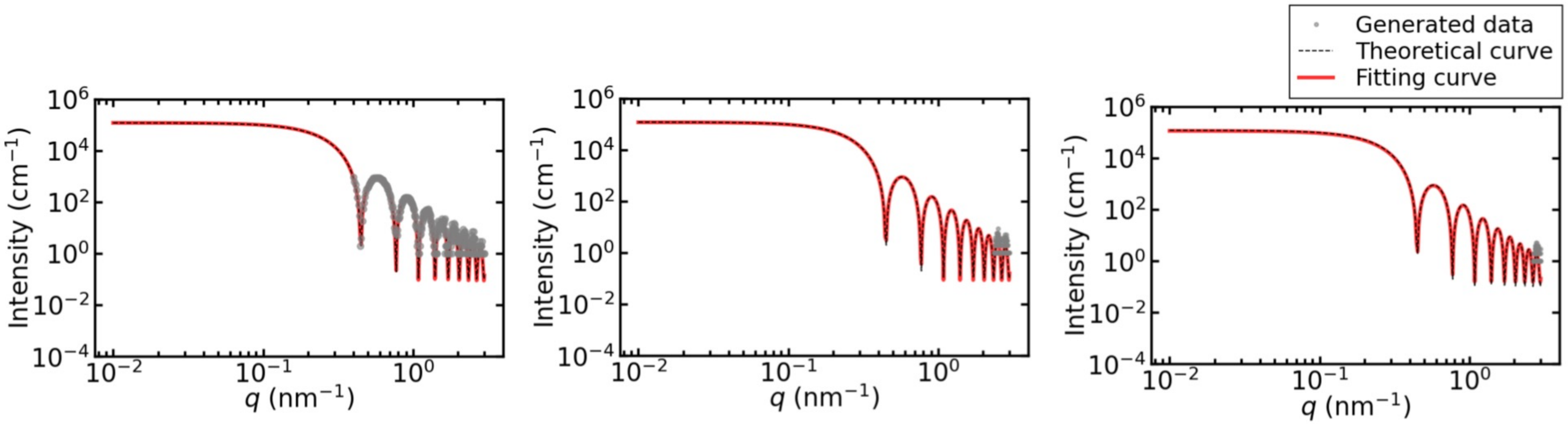
信頼度の定量評価が可能

小角散乱 (3/5)

- 小角散乱: 神器 1: 事後確率推定



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

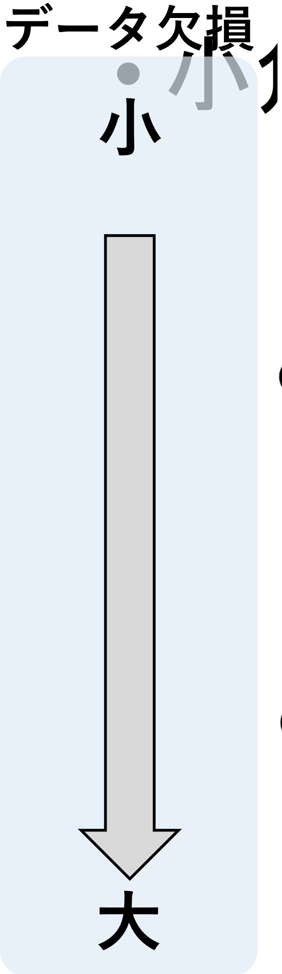


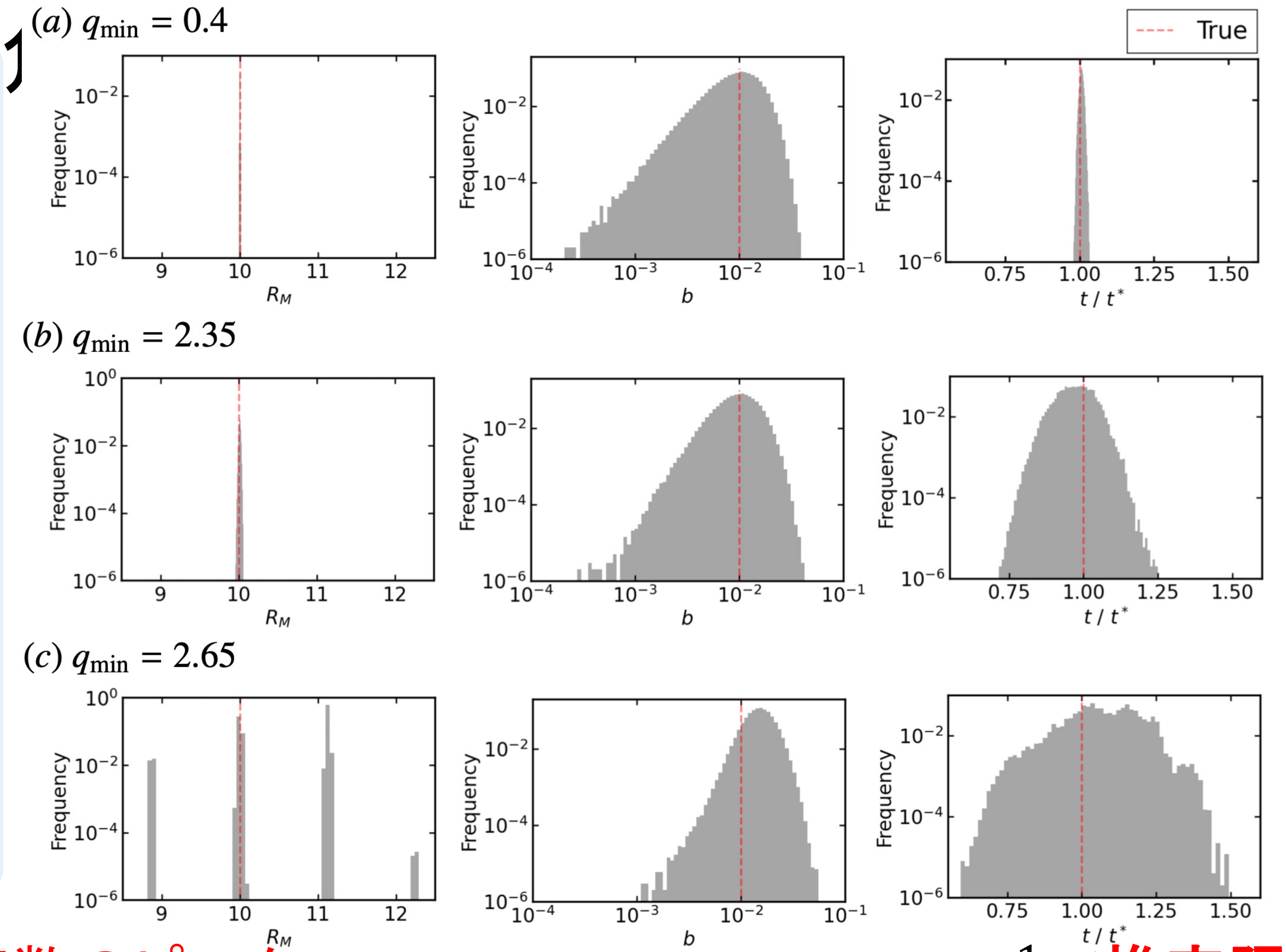
(a) $q_{\mathrm{min}} = 0.4\ \mathrm{nm}^{-1}$ (b) $q_{\mathrm{min}} = 2.35\ \mathrm{nm}^{-1}$ (c) $q_{\mathrm{min}} = 2.65\ \mathrm{nm}^{-1}$

Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *J P S J.* 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

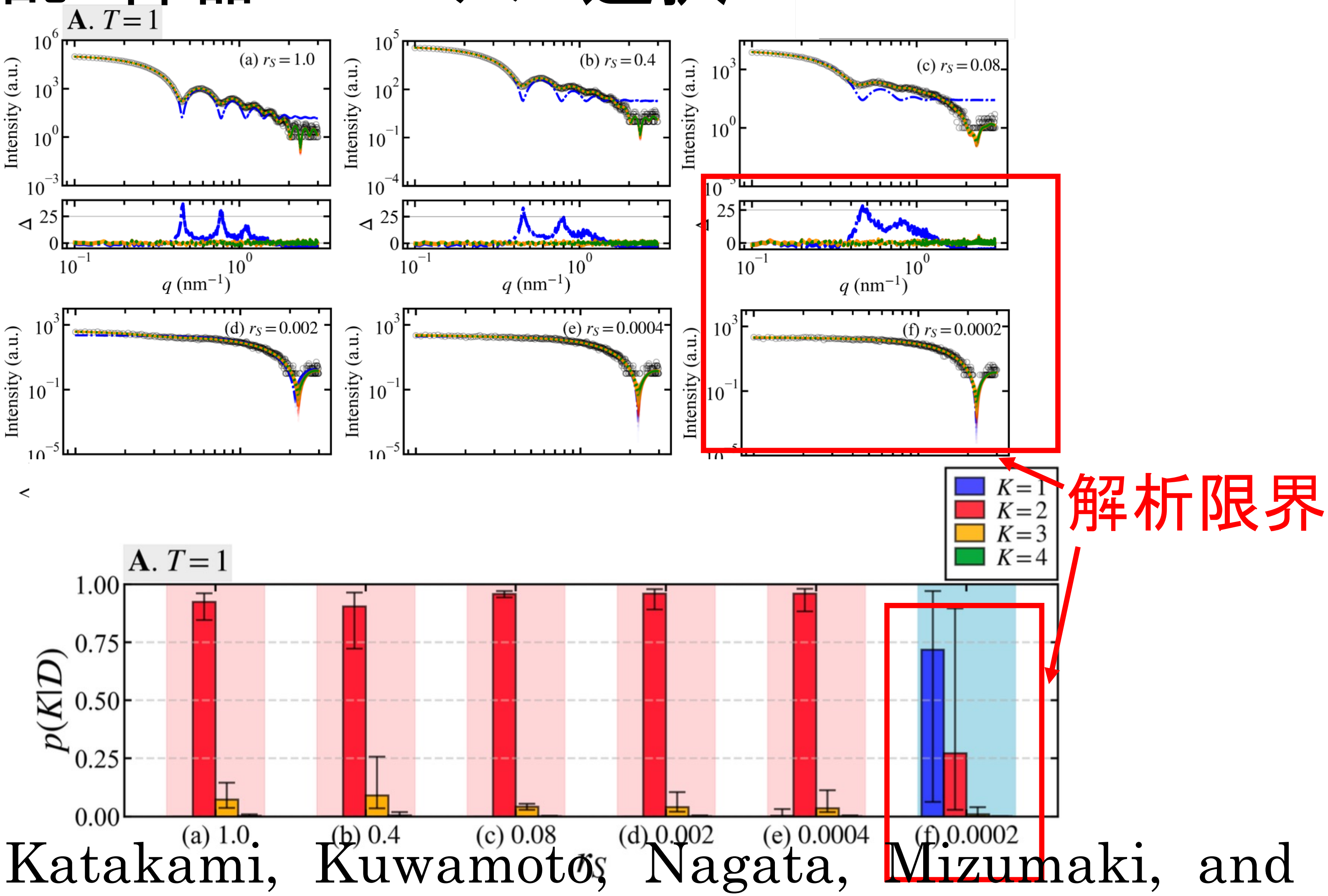




(c) に**複数のピーク**→$q_{\min} = 2.35 - 2.65\ \mathrm{nm}^{-1}$で**推定限界**

小角散乱 (5/5)

- 小角散乱: 神器 2: モデル選択

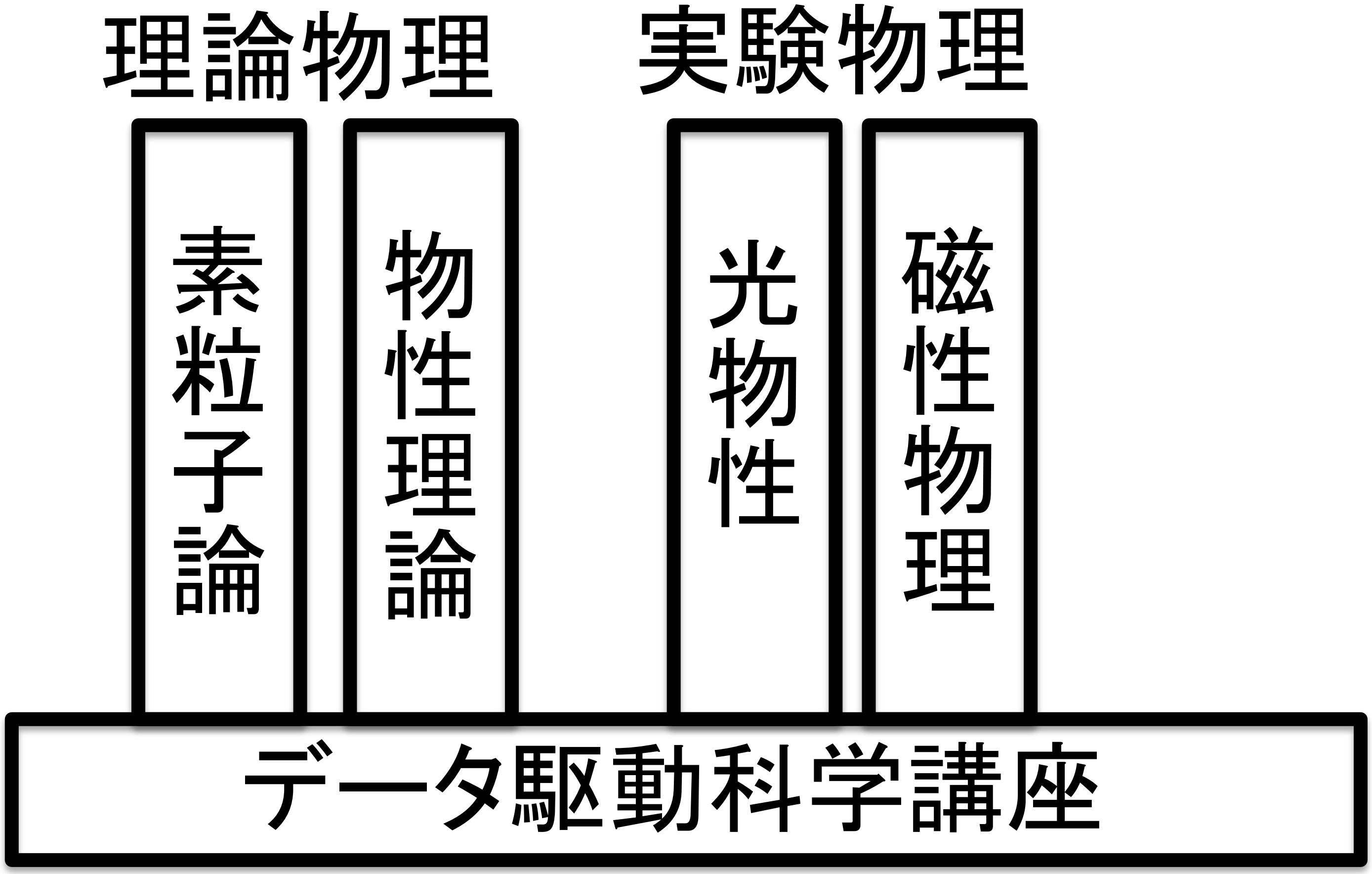


Hayashi, Katakami, Kuwamoto, Nagata, Mizumaki, and Okada, *JPSJ.* 92, 094002 (2023),

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

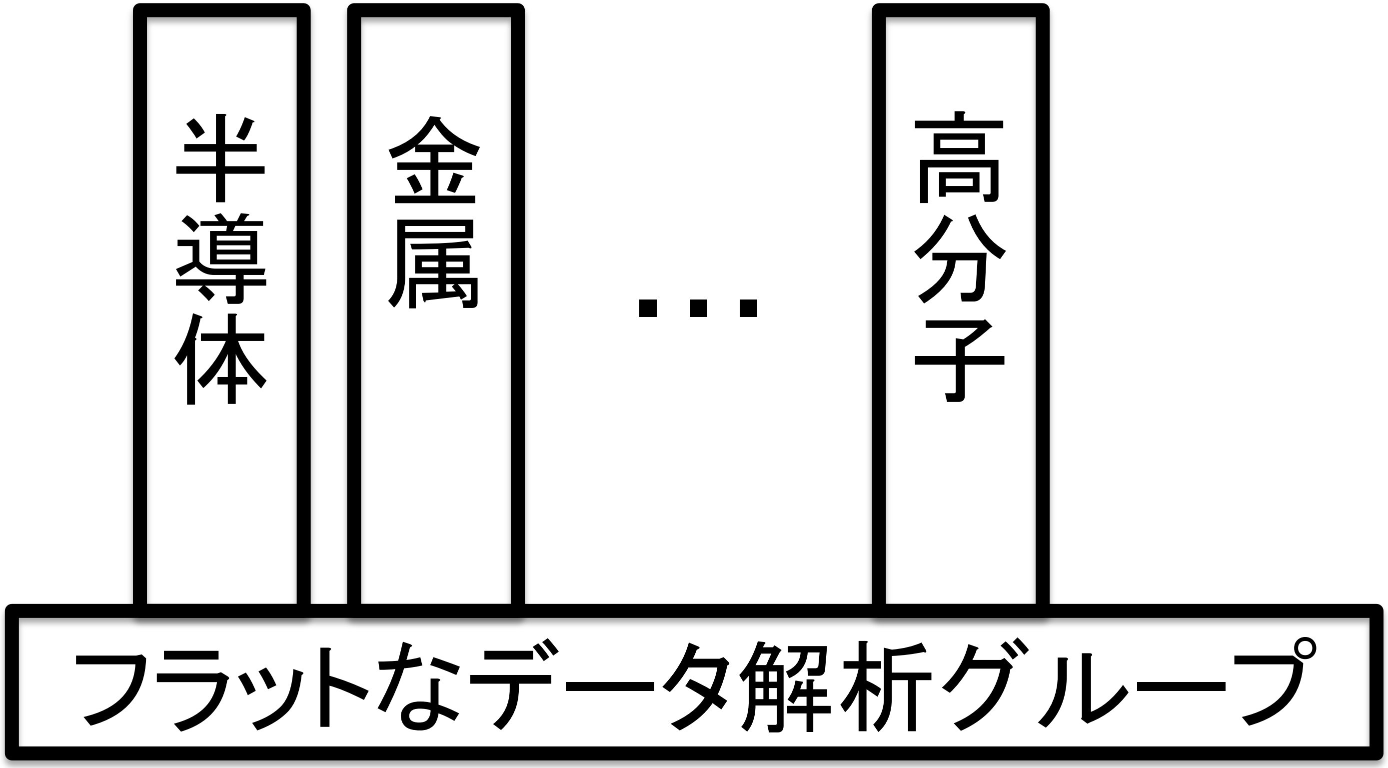
ベイズ計測とキャリアパス (1/3)
アカデミア編
物理学科/各学科に
データ駆動科学一講座導入



ベイズ計測とキャリアパス (2/3)

民間企業編

Ｒ＆Ｄ組織のフラット化と人材の流動化



ある縦組織がリストラされても、フラットなデータ解析グループに沿って、他の縦組織にソフトランディングでき、人材の流動化が加速される。

ベイズ計測とキャリアパス (3/3)
放射光科学関連

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

内容

- 自己紹介
- SPring-8全ビームラインベイズ化計画
- ベイズ計測
  - 計測科学の必須条件
  - ベイズ計測三種の神器
  - $y=ax+b$のベイズ計測の解析的取り扱い
- 非線形系にするベイズ計測
  - スペクトル分解
  - メスバウアー分光
  - 小角散乱
- ベイズ計測とキャリアパス
- まとめと今後の展開

まとめと今後の展望

- $y=ax+b$を例にベイズ計測とベイズ計測三種の神器を解説。一般的な非線形の計測に導入可能
- ベイズ計測の物性物理学への導入が大きなビジネスチャンス。ベイズ計測の導入による計測科学のゲームチェンジング
- ベイズ計測の普及戦略としてのSPring-8全ビームラインベイズ化計画
- 物理学全般を取り扱うことができるデータ駆動科学の枠組みの紹介
- 物理学科/各学科にデータ駆動科学一講座導入
- 民間企業のR&D組織の新陳代謝を加速