

# ベイズ計測

岡田真人

東京大学 大学院新領域創成科学研究科

# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - －スペクトル分解の従来法
  - －ベイズ計測
  - －レプリカ交換モンテカルロ法
  - －モデル選択
  - －計測限界
- ・まとめ

# 自己紹介(理論物理)

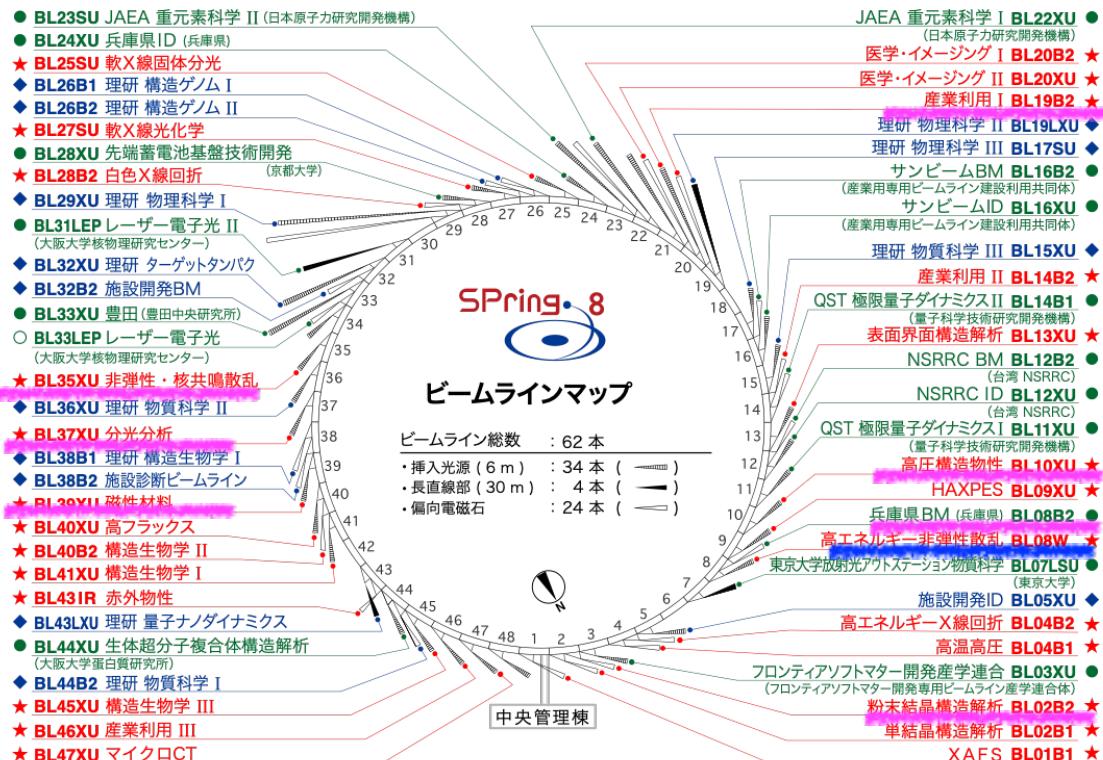
- ・ 大阪市立大学理学部物理学科 (1981 - 1985)
- ・ 大阪大学大学院理学研究科物理専攻 (1985 – 1987)
  - 希土類元素の光励起スペクトルの理論
- ・ 三菱電機 (1987 - 1989)
  - 化合物半導体(半導体レーザー)の結晶成長
- ・ 大阪大学大学院基礎工学研究科生物工学 (1989 - 1996)
- ・ JST ERATO 川人学習動態脳プロジェクト (1996 - 2001)
- ・ 理化学研究所 脳科学総合研究センター (2001 - 04/06)
- ・ 東京大学・大学院新領域創成科学研究所 複雑理工学専攻 (2004/07 – )

# 共同研究者

- 片上 舜 東京大学 大学院新領域創成科学研究所
- 永田 賢二 国立研究開発法人物質・材料研究機構
- 村岡 恵 東京大学 大学院新領域創成科学研究所
- 本武 陽一 一橋大学 大学院ソーシャル・データサイエンス教育研究推進センター
- 杉田 精司 東京大学 大学院理学系研究科
- 佐々木 岳彦 東京大学 大学院新領域創成科学研究所

# SPring-8全ビームラインベイズ化計画

敬称略



全BL本数: 62本

来年度には過半数をこえる予定

## 情報と放射光研究者のマッチング

メスバウアー

岡田研学生+筒井

小角散乱

BL08B2

BL19B2

XAS測定

BL37XU

BL39XU

岡田研学生+桑本

岡田研学生+水牧

## 放射光ユーザーへの展開

時分割XRD

横山優一+河口彰吾、沙織

BL10XU

ユーザー: 公立大、東工大

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

15

# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかした。
- ・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。

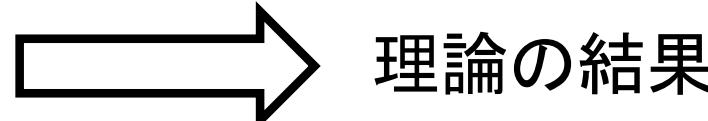
# ベイズ計測

順アプローチ

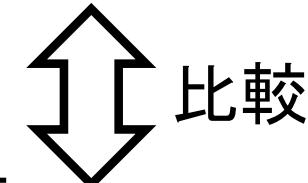
計測データ



モデル



$$p(Y | \theta, K) \text{ 解析計算, 数値計算}$$



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

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

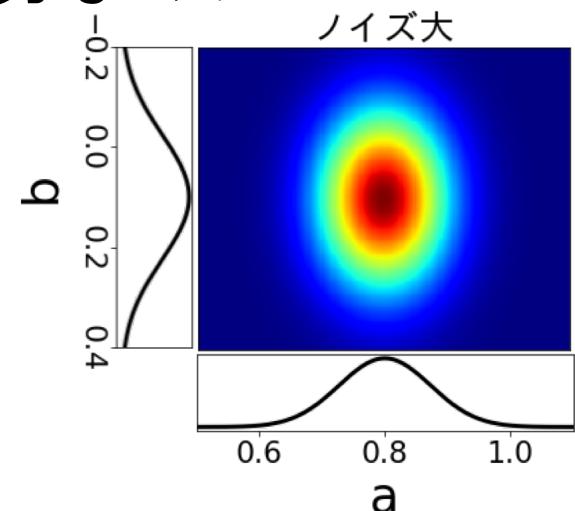
計測データ



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



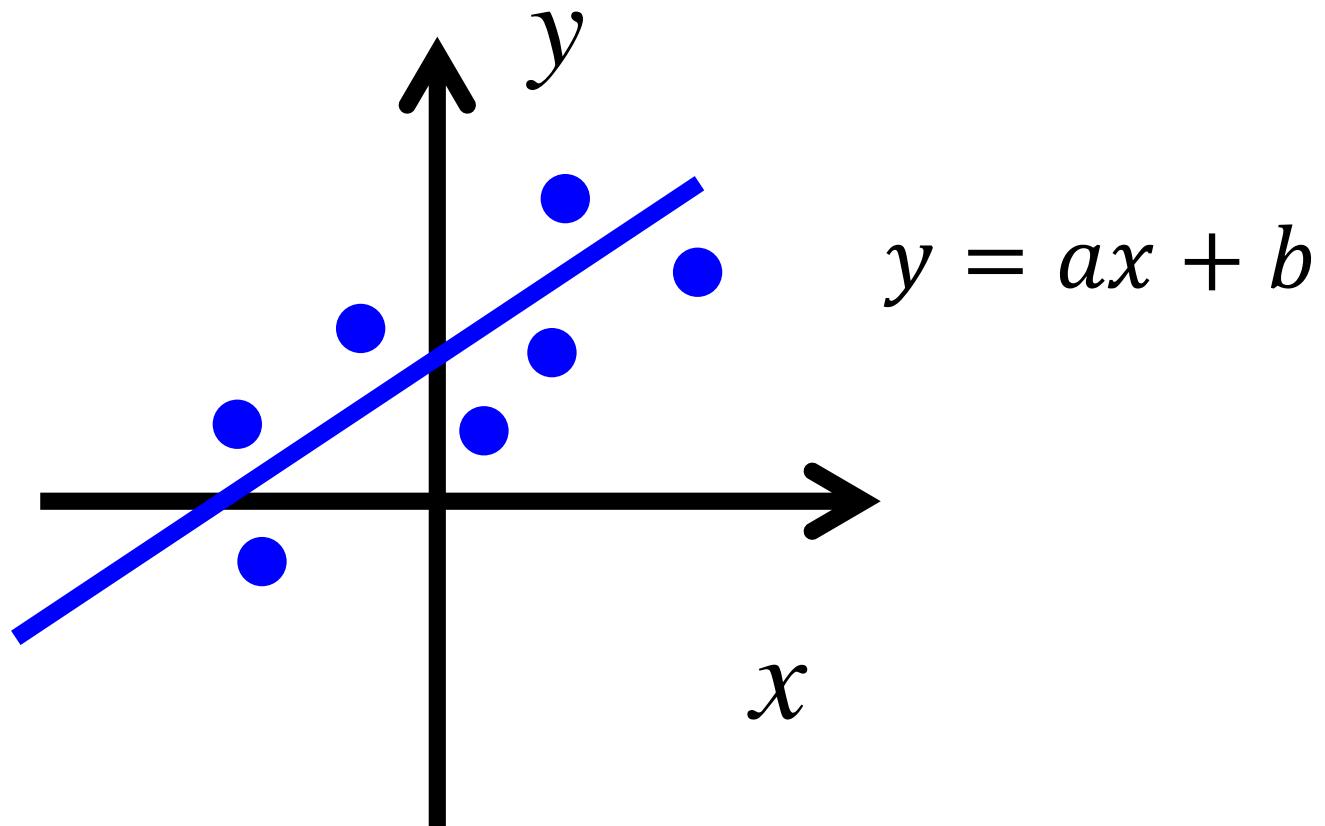
# ベイズ計測の勉強の流れ

1. 線形回帰モデル $y=ax+b$ のベイズ計測の解析計算
2. 線形回帰モデル $y=ax+b$ をレプリカ交換モンテカルロ法で数値解析し、1の解析結果と同じ結果が出ることを確認する  
汎用プログラム: 次の片上さんの講演
3. ベイズ的スペクトル分解をレプリカ交換モンテカルロ法で数値解析する  
汎用プログラム: 次の片上さんの講演
4. 各自のテーマに入る。

# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

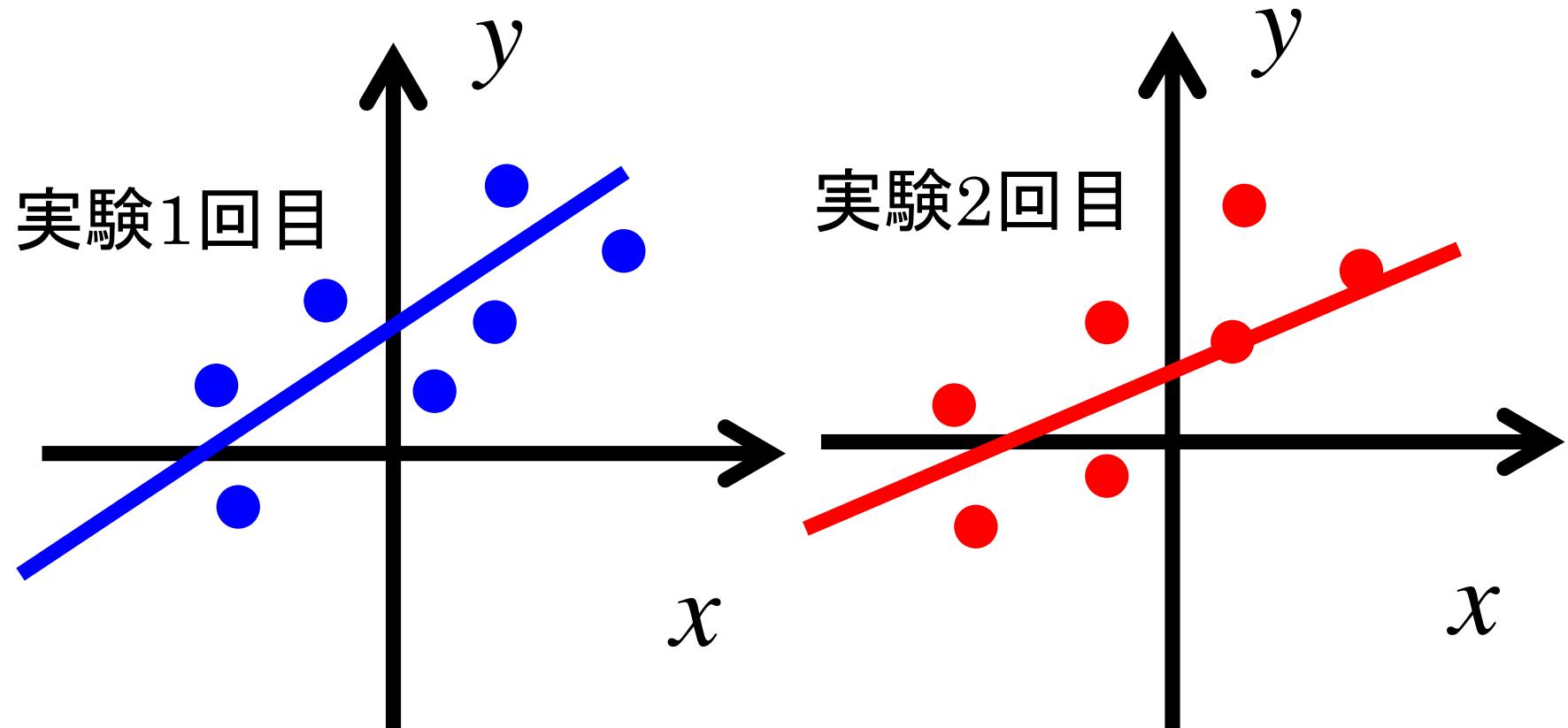
# 線形回帰問題



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

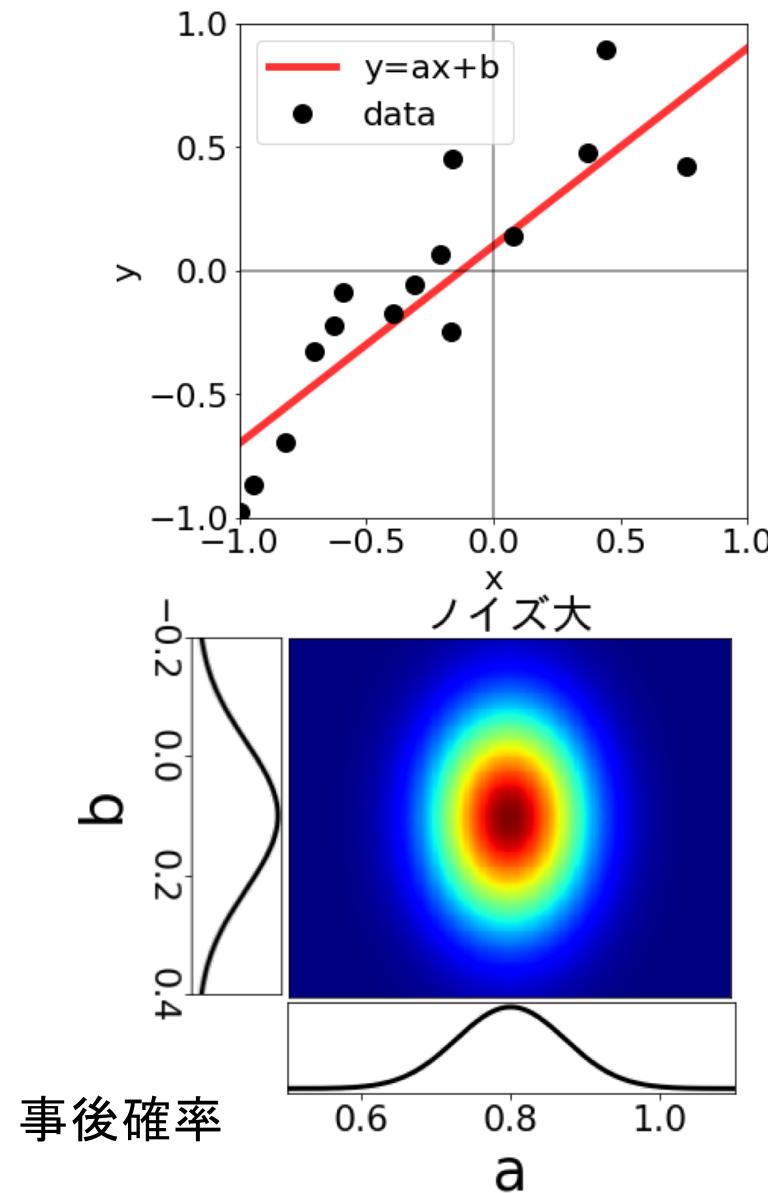
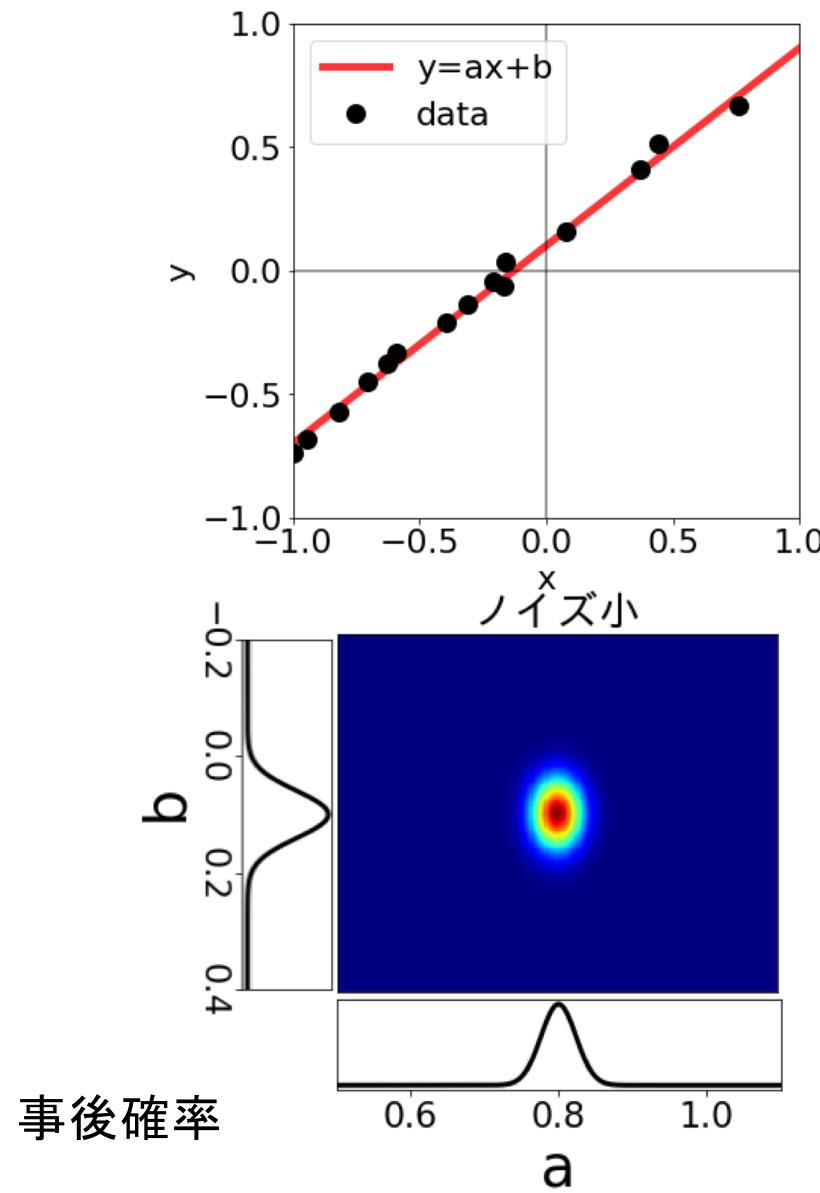
## データの背後にある物理量の評価



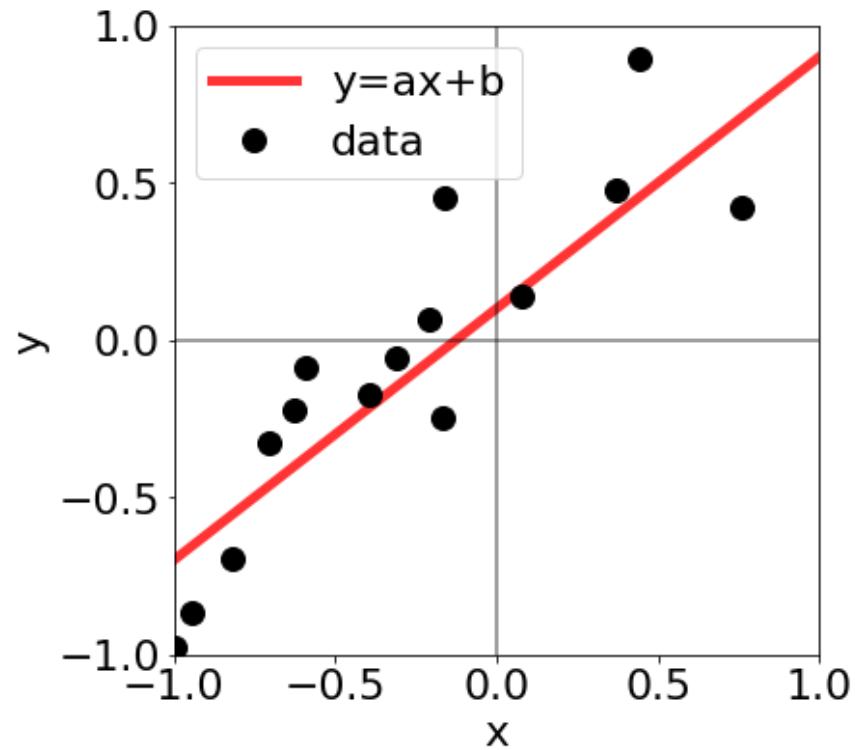
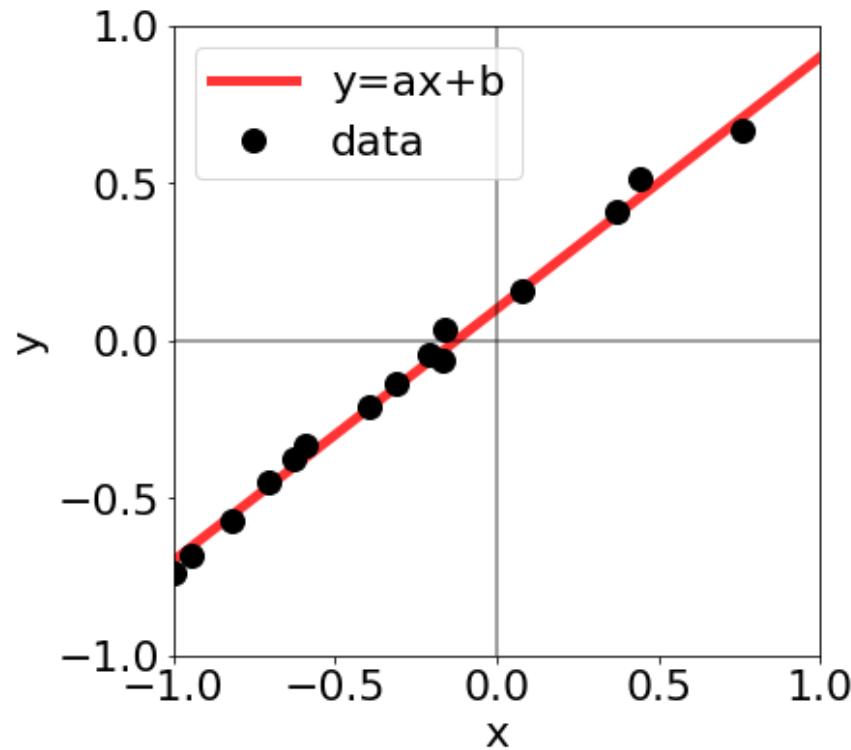
傾き  $a$  : 系の線形応答、バネ定数、電気伝導度、誘電率、  
実験複数回おこなって、 $a$  のばらつきを見る  
これを1回の実験でももとめられないか → ベイズ推論

# $p(a,b|Y)$ の推定 (3/3)

## 1次元線形回帰では手で計算できる



# 1次元線形回帰



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)

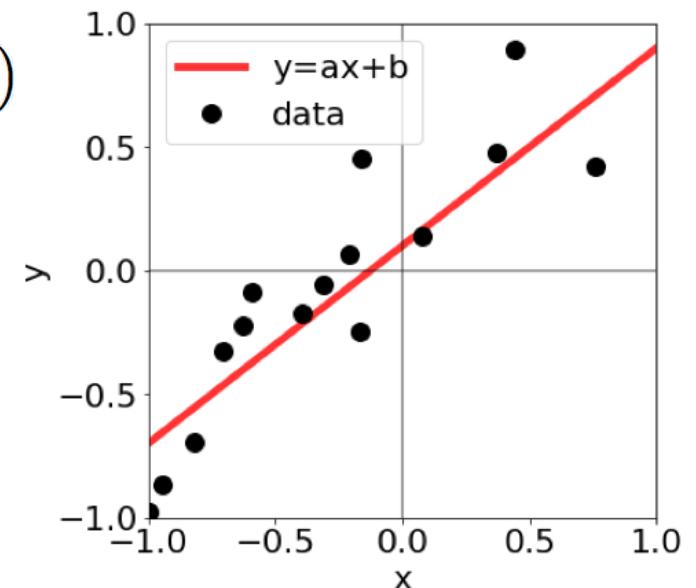
$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \text{ とする場合}$$

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

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

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

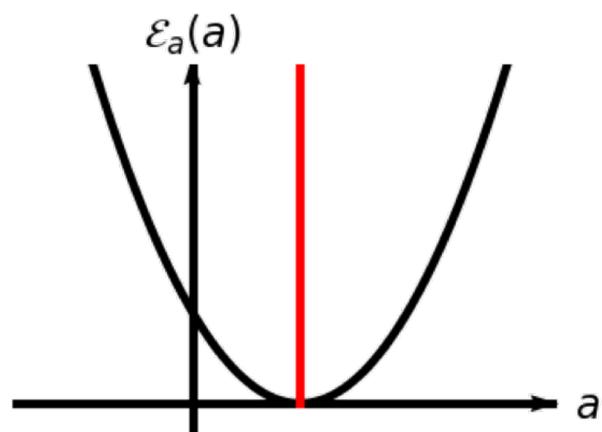
$$\bar{xy} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i y_i$$



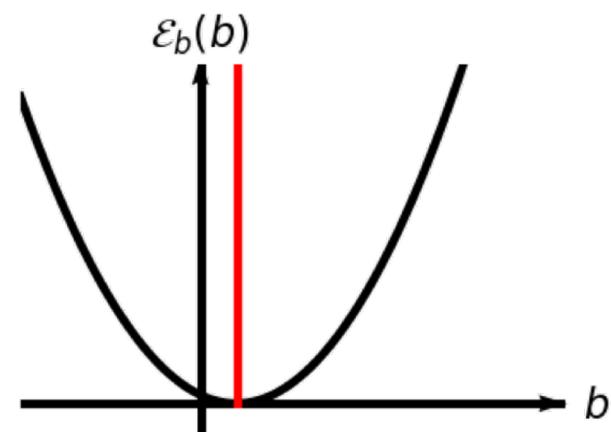
## 4.1 最小二乘法 (2/2)

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

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

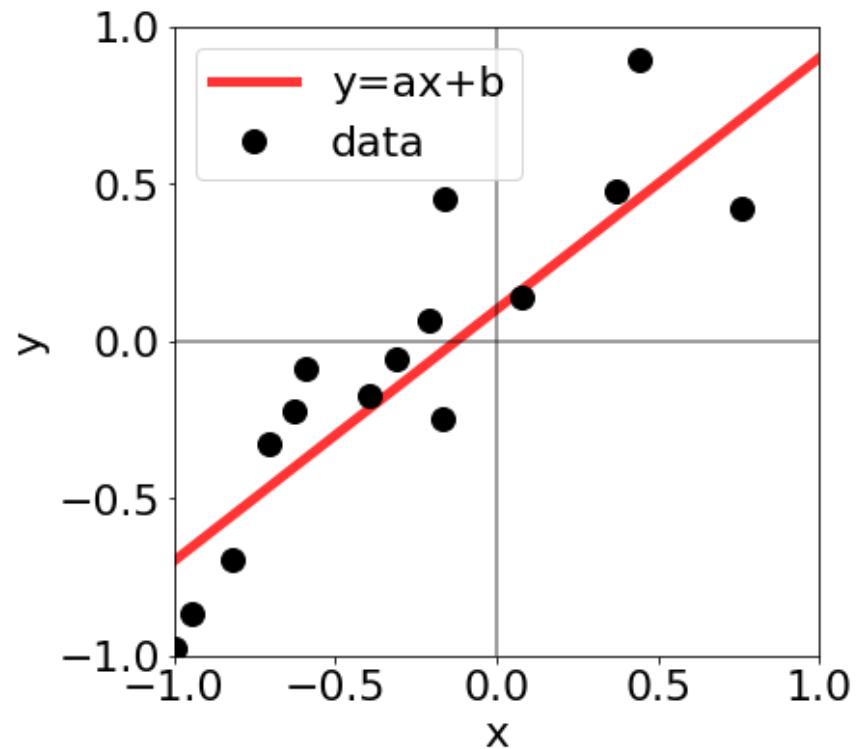
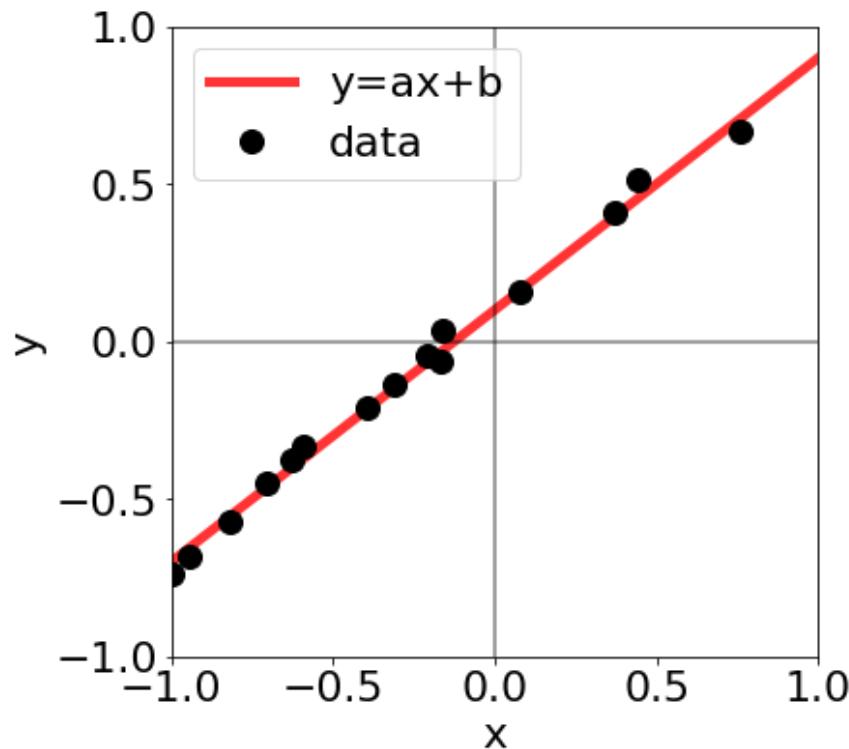


$$a_0 = \frac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}$$



$$b_0 = \bar{y}$$

# 自然科学的視点からの ベイズ計測の解説 (1/2)

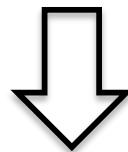


この二つの違いを数学的に表現したい  
傾き  $a$  と切片  $b$  は同じだけど、ばらつきが違う

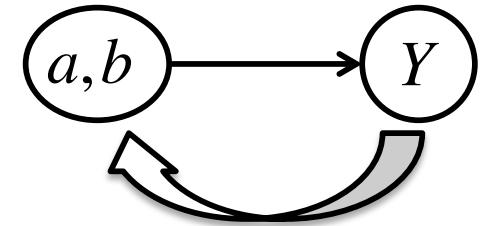
# 自然科学的視点からの ベイズ計測の解説 (2/2)

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

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。  
これまで蓄積してきた科学的知見

# $p(a,b|Y)$ の推定 (1/3)

1次元線形回帰では手で計算できる

$$y_i = ax_i + b + n_i$$

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

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

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

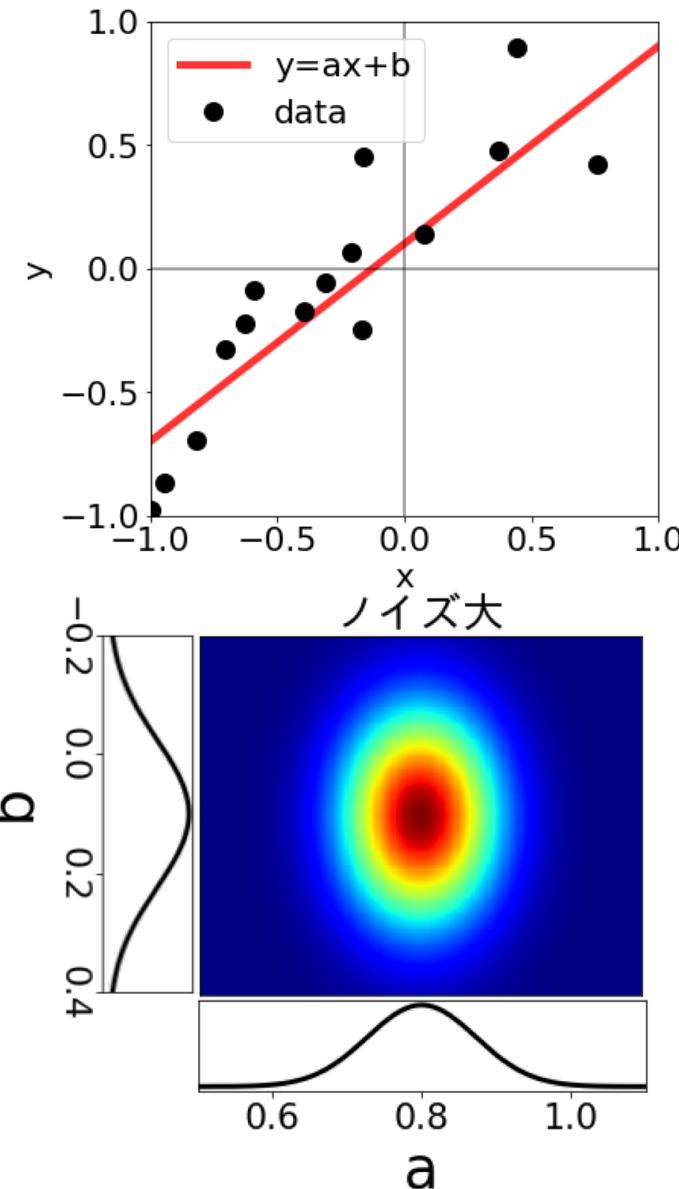
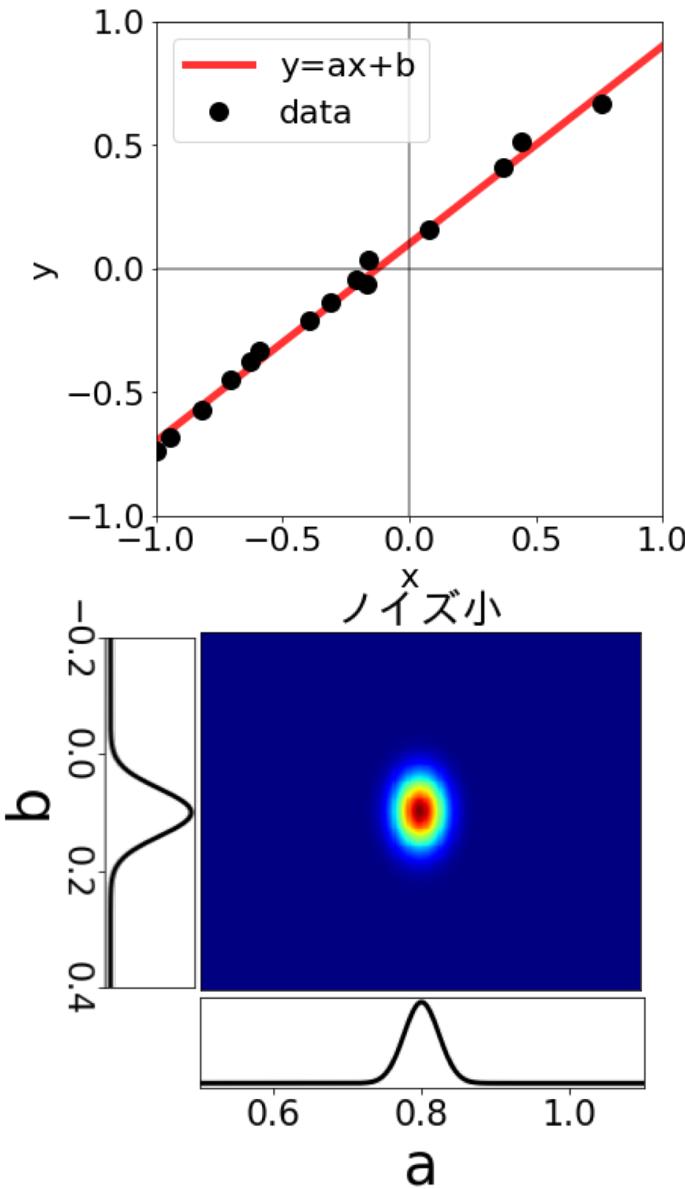
$p(a,b|Y)$ の推定 (2/3)

1次元線形回帰では手で計算できる

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

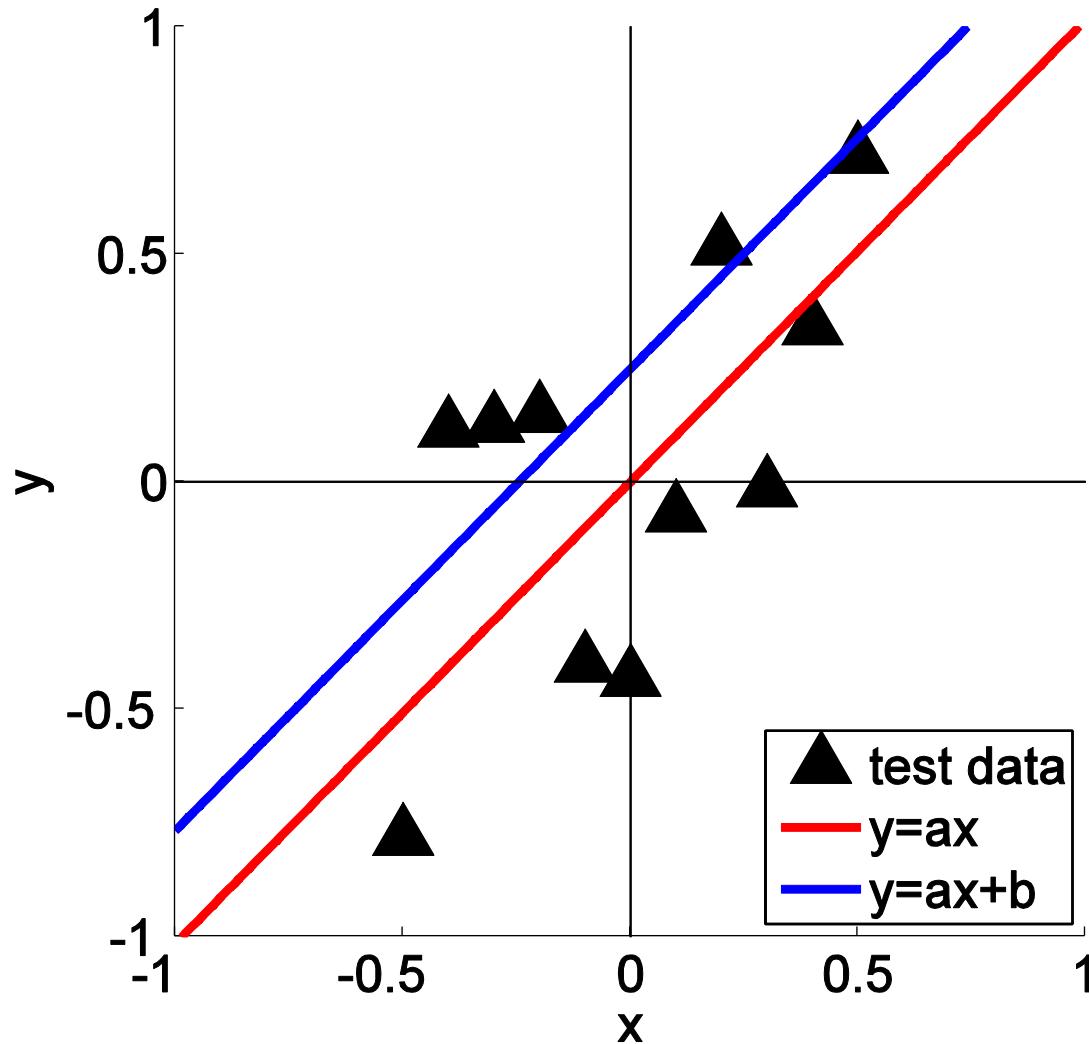
$p(a,b|Y)$ の推定 (3/3)

1次元線形回帰では手で計算できる



# ベイズ的モデル選択

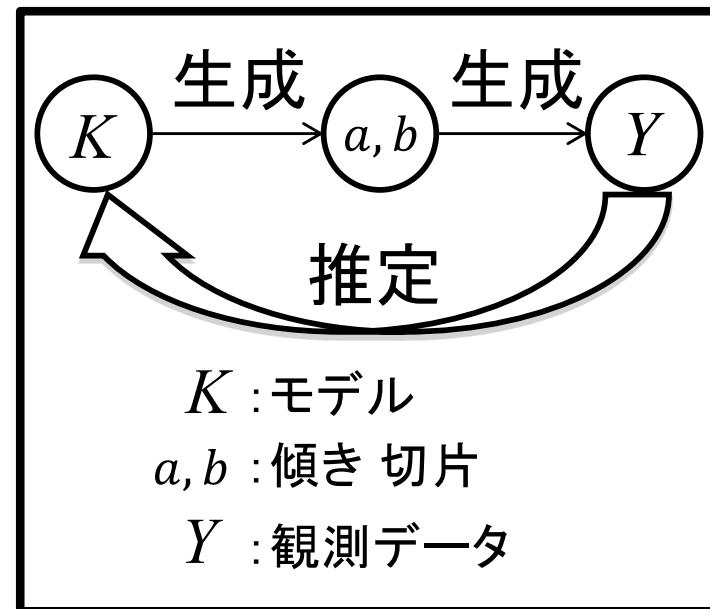
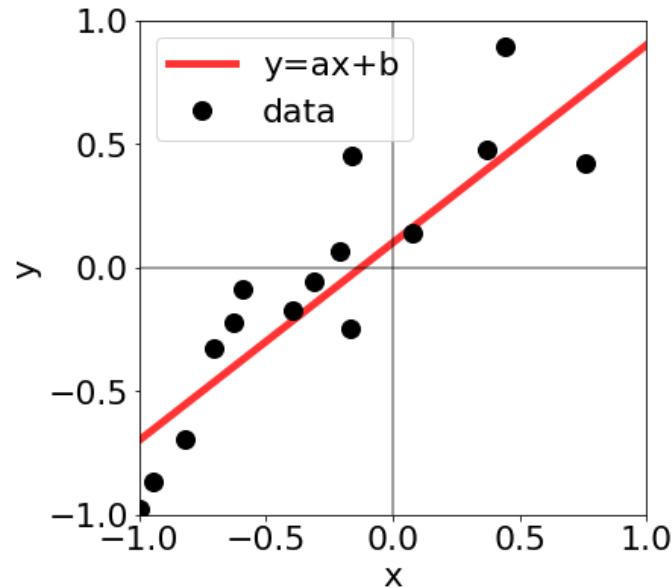
## $y=ax$ か $y=ax+b$ か?



	訓練誤差
$y = ax$	0.43
$y = ax + b$	0.34

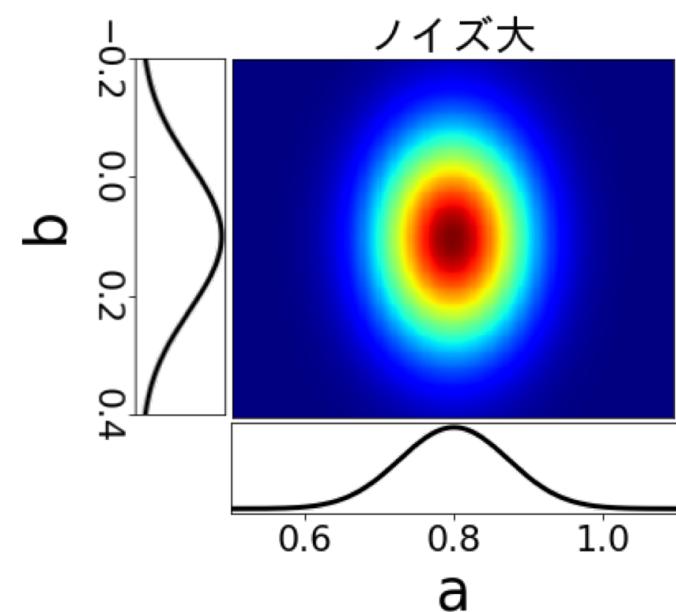
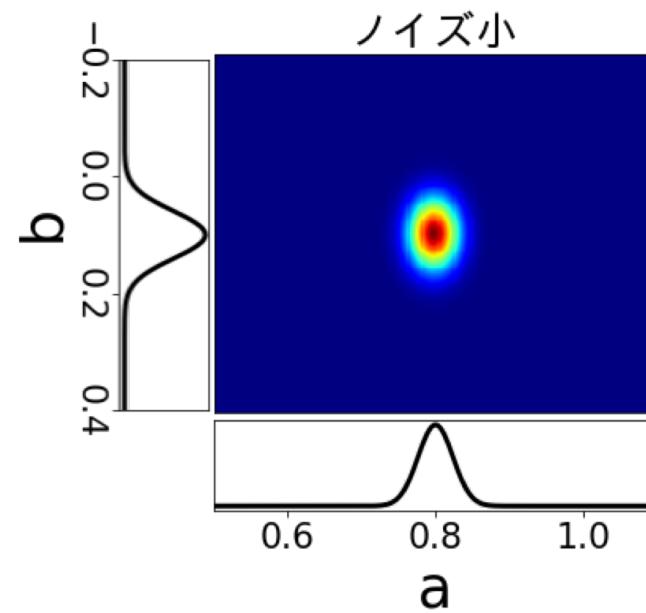
	汎化誤差
$y = ax$	0.33
$y = ax + b$	0.40

# 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.  $\theta$ がないぞ
3.  $p(K, \theta, Y)$  の存在を仮定

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

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

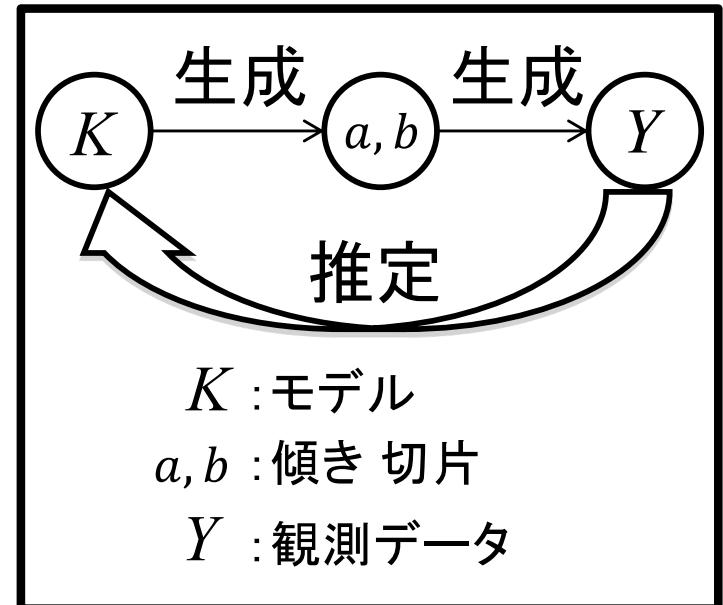
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

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

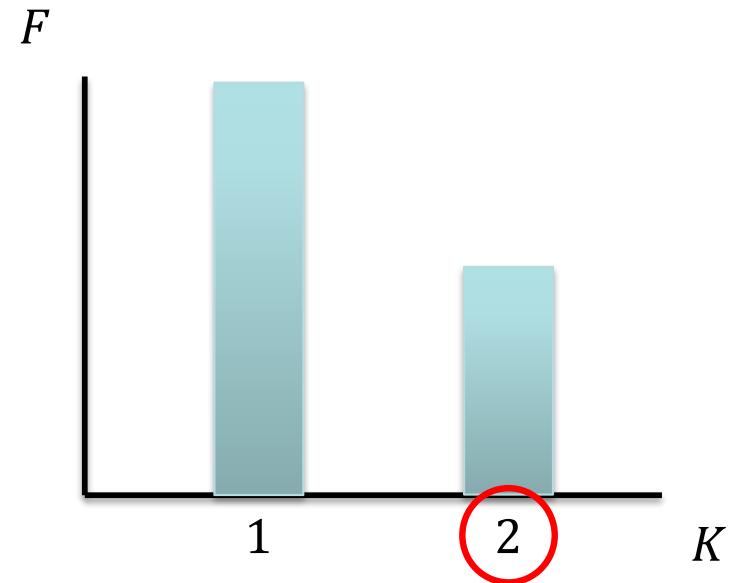
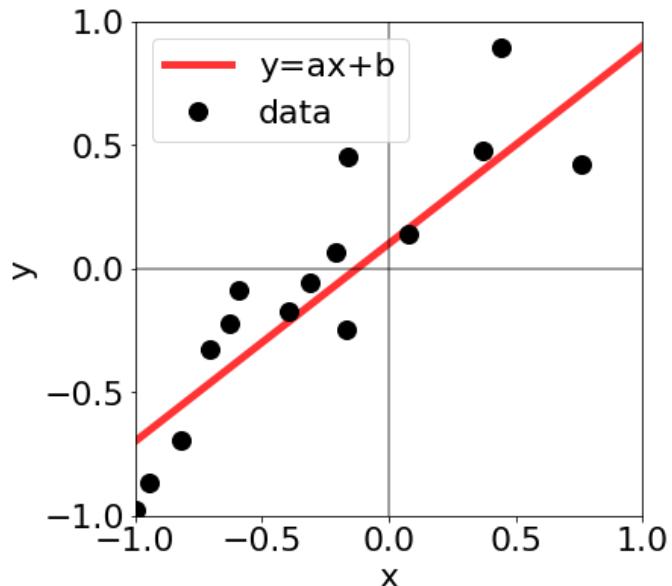
$$F(K) = -\log \int \exp(-nE(\theta)) p(\theta) d\theta$$

自由エネルギーを最小にするモデル  $K$  を求める。



# 自由エネルギー

## $y=ax$ か $y=ax+b$ か?



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

$$K=1 : y = ax$$

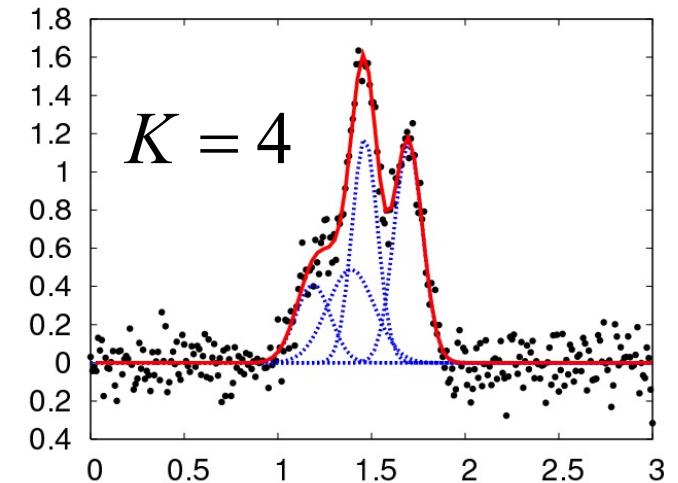
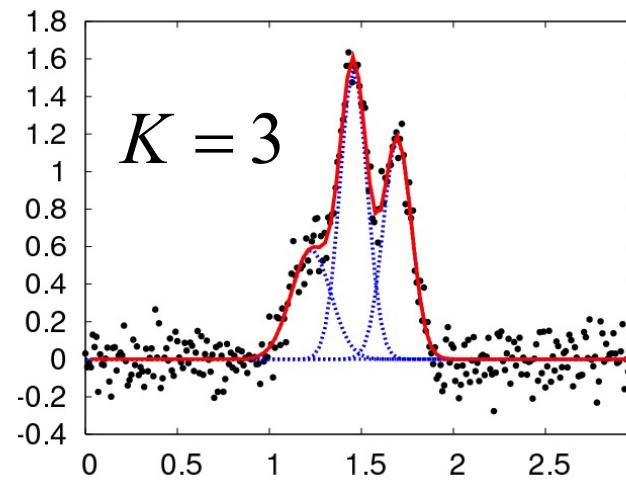
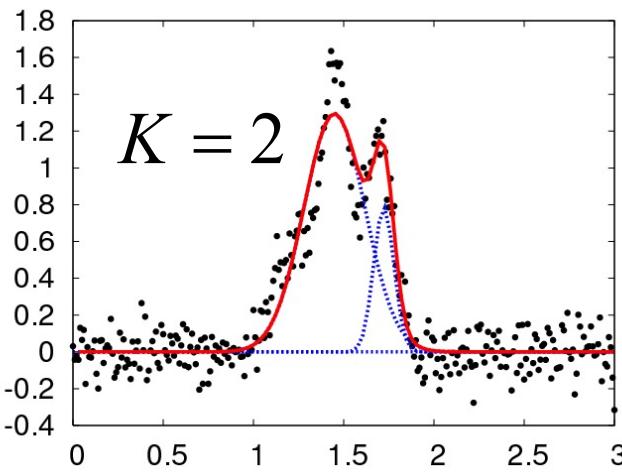
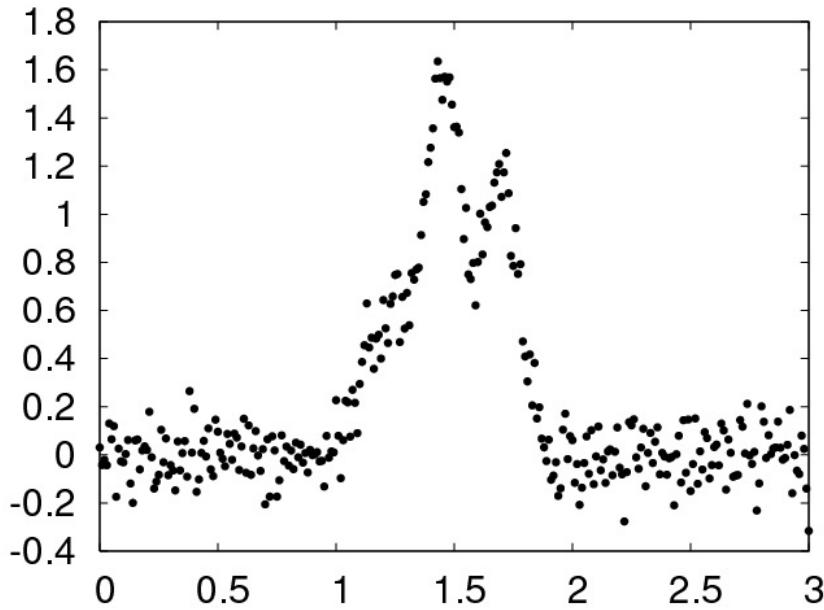
$$K=2 : y = ax + b$$

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

# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

# 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

# スペクトル分解の定式化

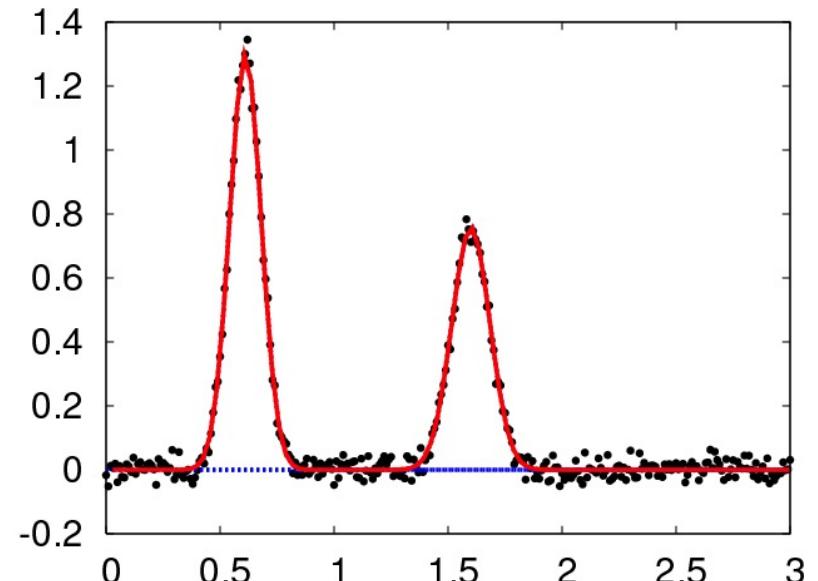
ガウス関数(基底関数)の足し合わせにより、スペクトルデータを近似

観測データ:  $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

$x_i$ : 入力  $y_i$ : 出力

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

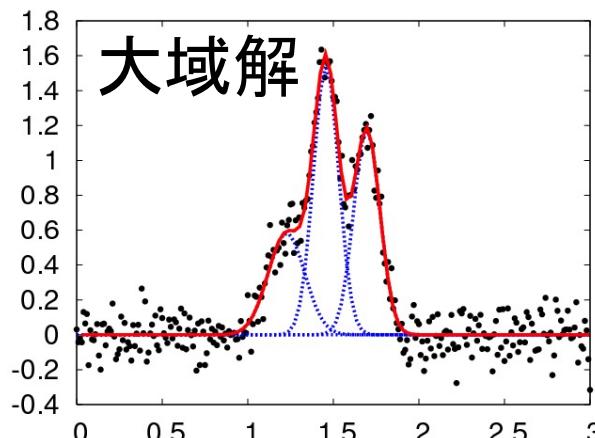
$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \dots, K$$



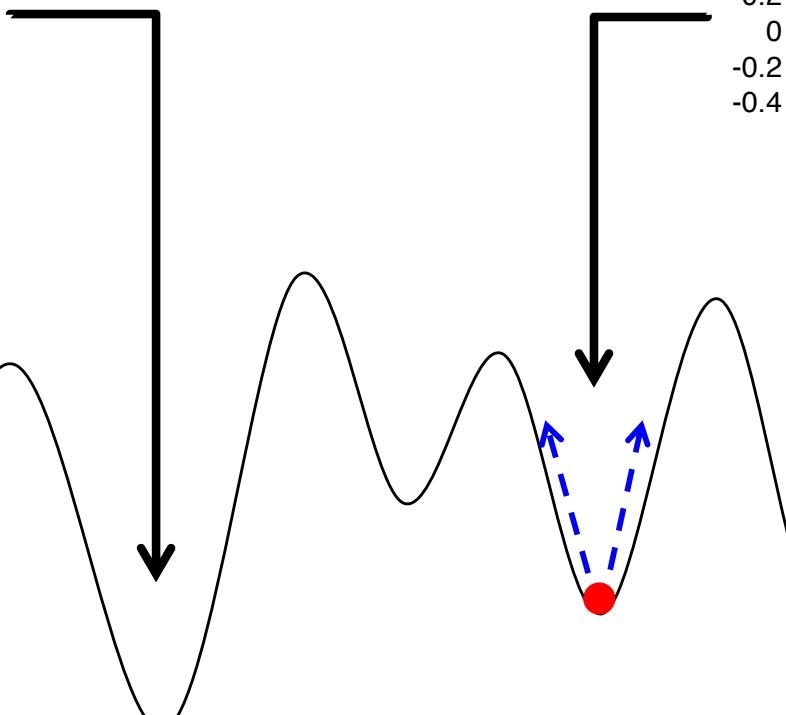
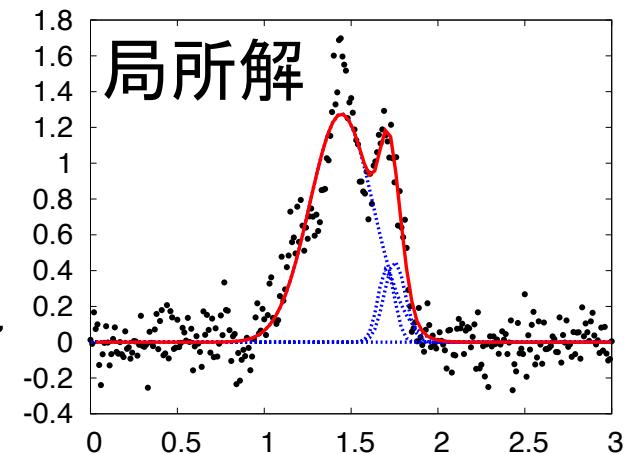
二乗誤差を最小にするようにパラメータをフィット(最小二乗法)

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

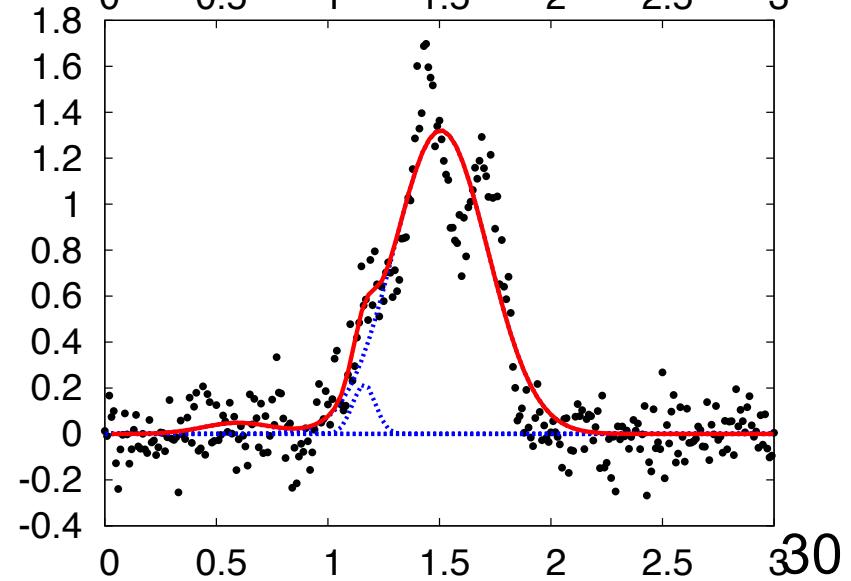
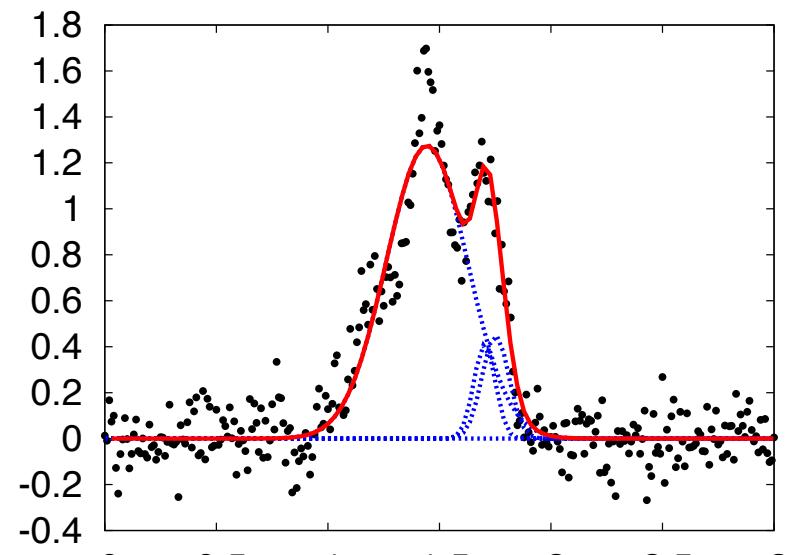
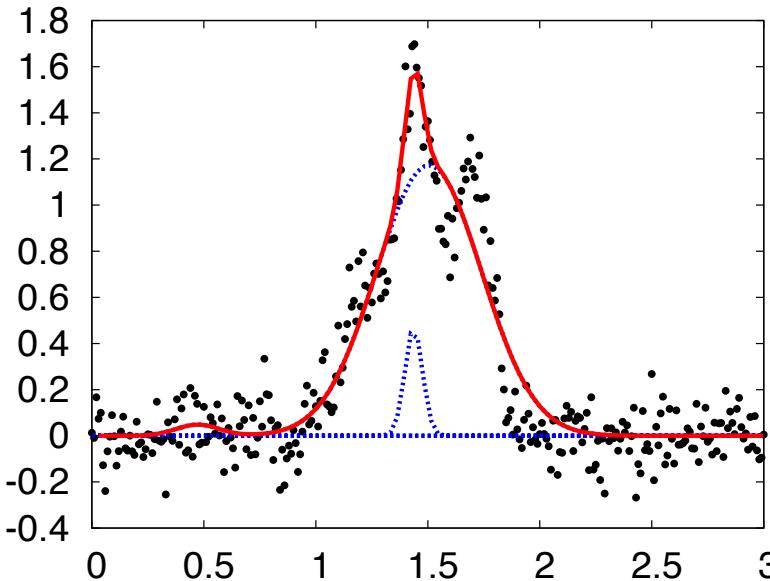
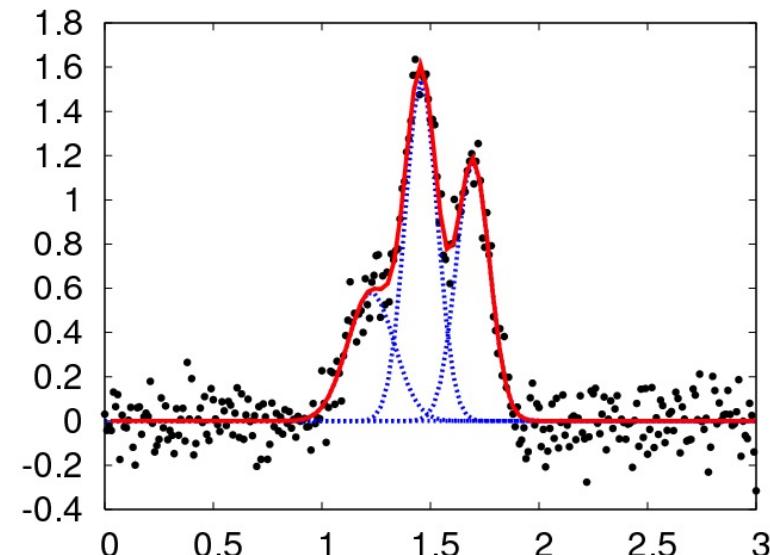
# 誤差関数は局所解を持つ



<通常の最適化法>  
e.g., 最急降下法



# ローカルミニマム



# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかした。
- ・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。

# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

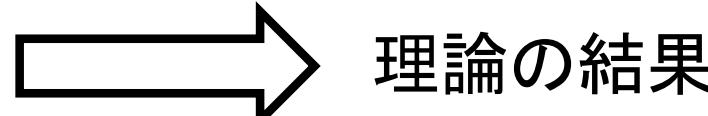
# ベイズ計測

順アプローチ

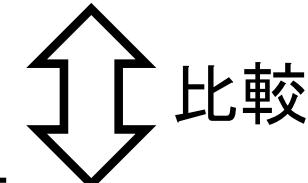
計測データ



モデル



$$p(Y | \theta, K) \text{ 解析計算, 数値計算}$$



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

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

計測データ



全てをモデル化し  
ベイズの定理で因果をさかのぼる

# 確率的定式化

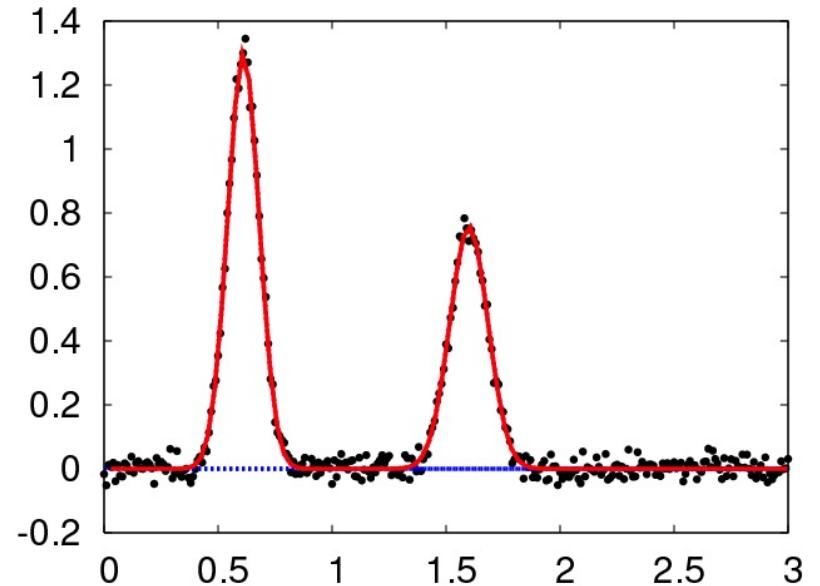
出力は、入力からの応答とノイズの足し合わせにより生成

⇒出力は、確率変数である。

$$y_i = f(x_i; \theta) + \varepsilon$$

ノイズが正規分布であるとすると、

$$p(y_i | \theta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(y_i - f(x_i; \theta))^2\right)$$



それぞれの出力  $y_i$  が、独立であるとすると、

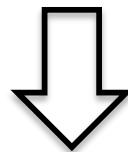
$$p(Y | \theta) = \prod_{i=1}^n p(y_i | \theta) \propto \exp(-nE(\theta)) \quad Y = \{y_1, \dots, y_n\}$$

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

ボルツマン分布

# ベイズ推論: 因果律を組み込んでデータ解析

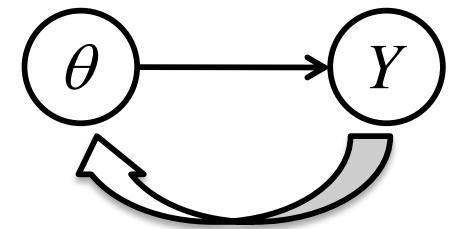
$$p(Y, \theta) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)}$$



<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

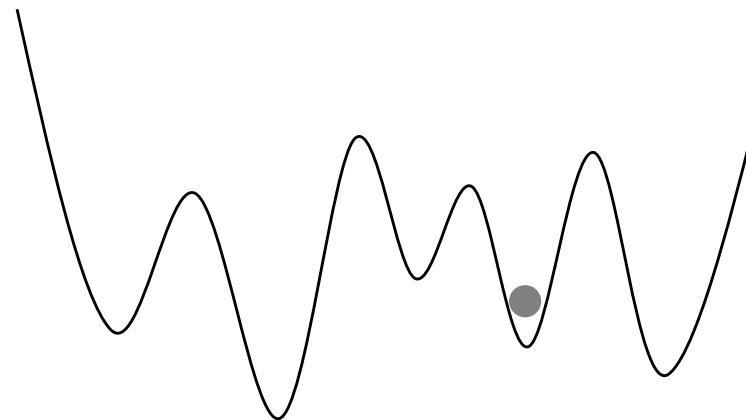
# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

# 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

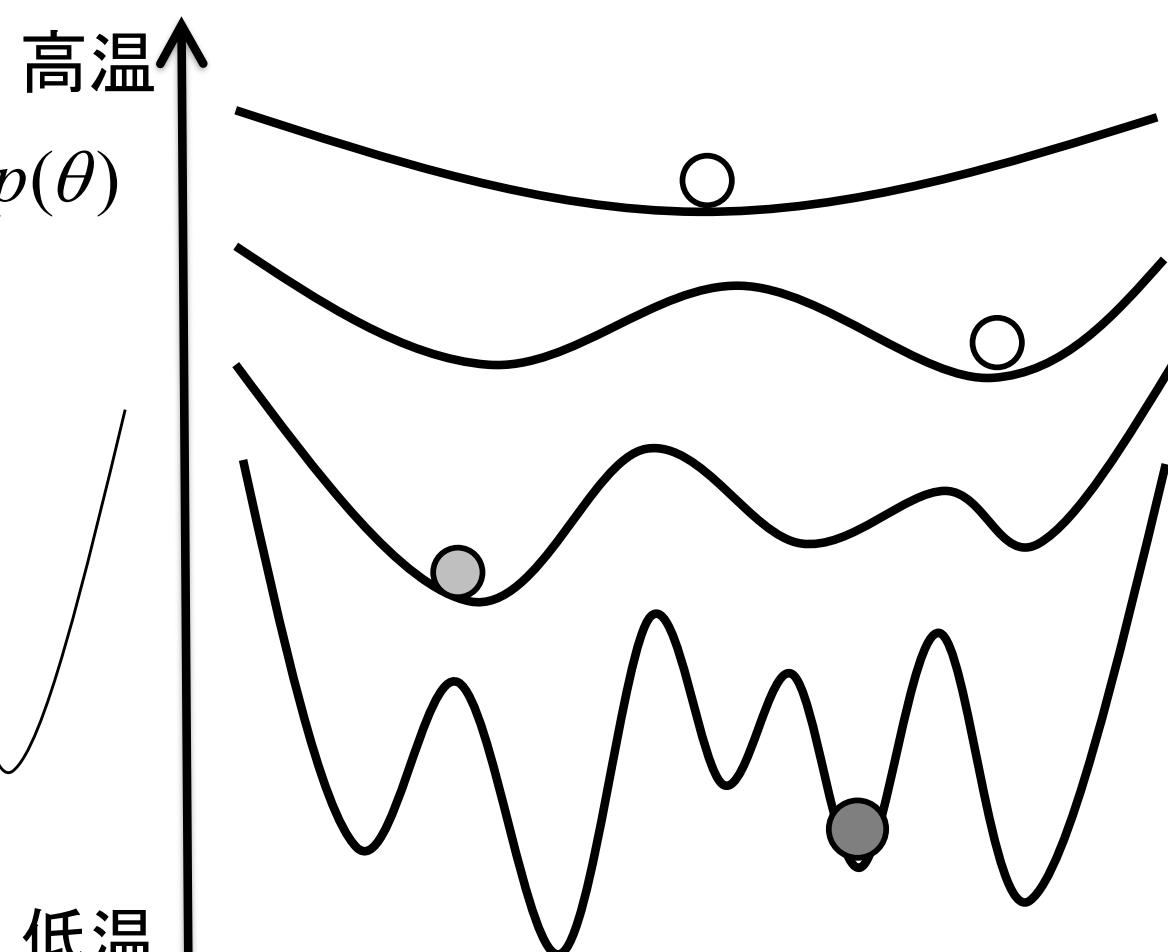
$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta)$$



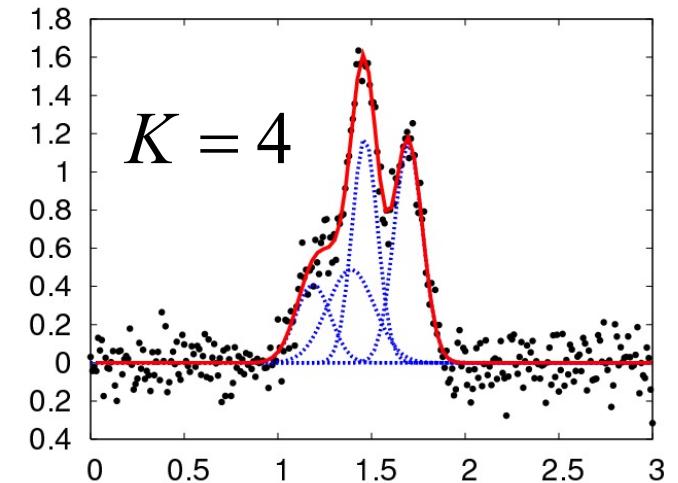
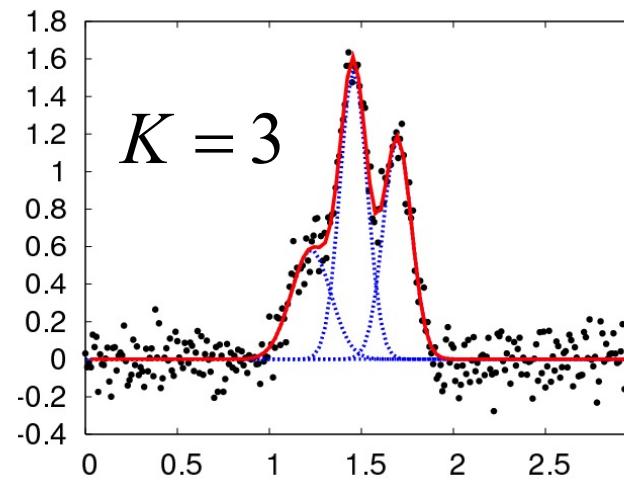
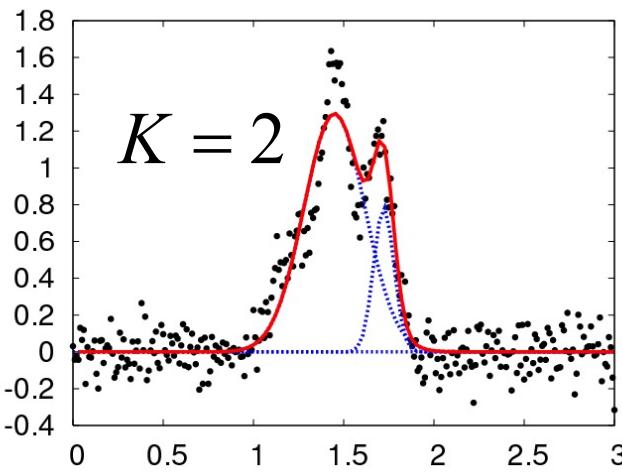
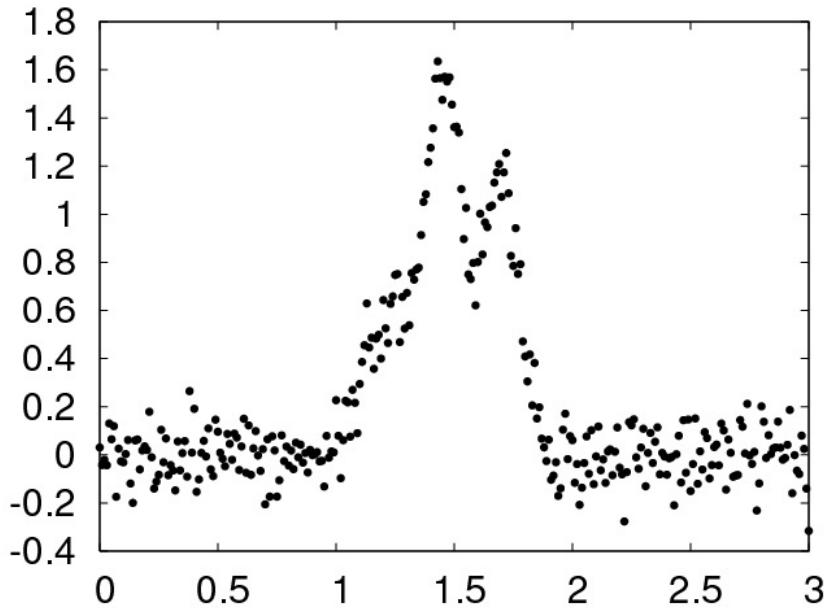
レプリカ交換モンテカルロ法

高温

低温



# 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

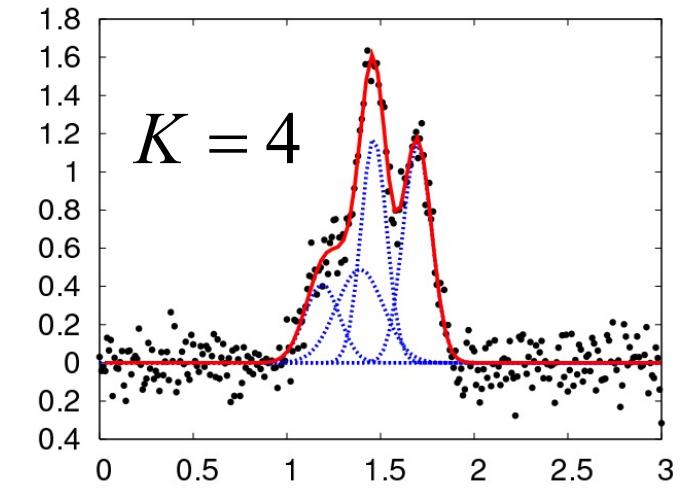
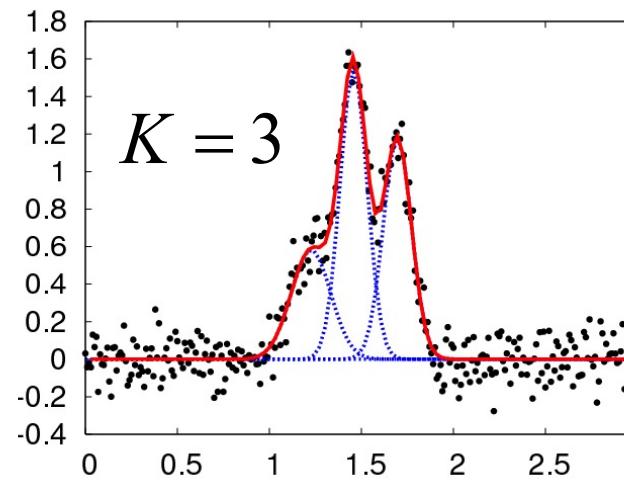
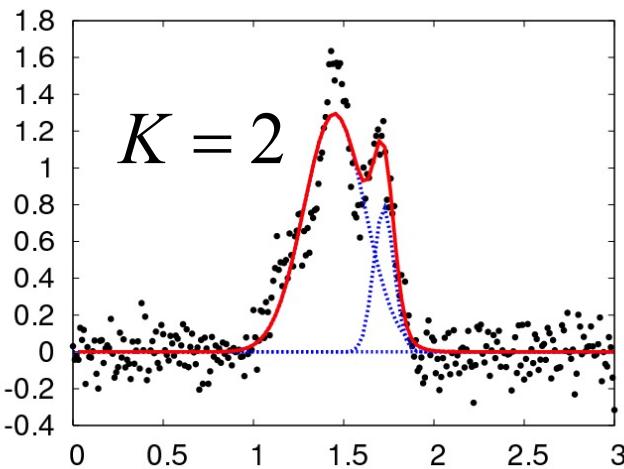
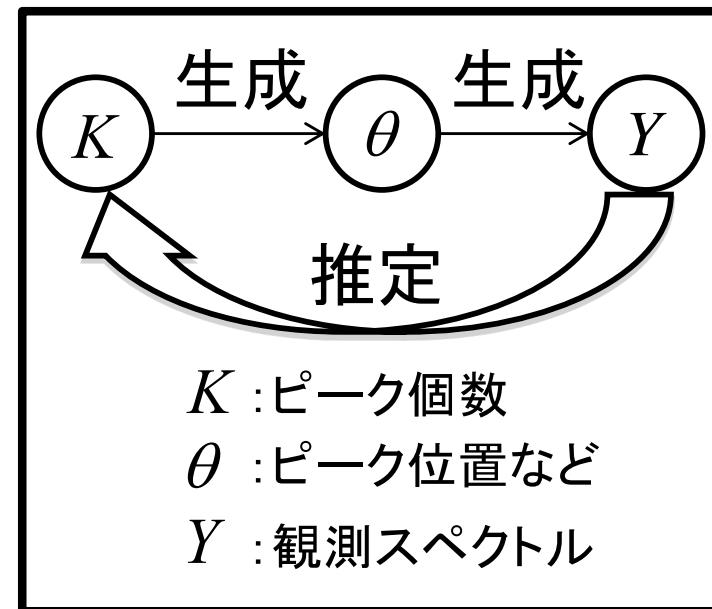
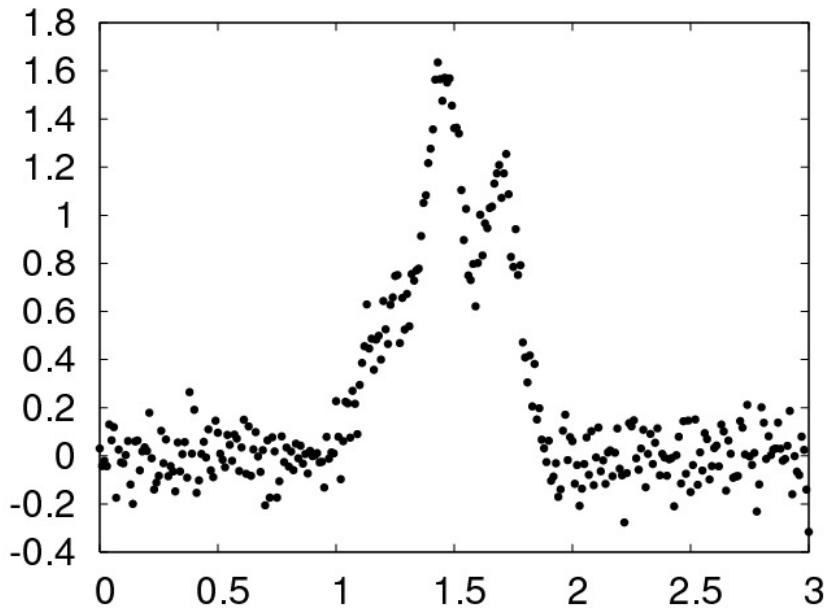
# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかした。
- ・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。

# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

# 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

# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかした。
- ・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。

# モデル選択

1. 欲しいのは  $p(K|Y)$
2.  $\theta$ がないぞ
3.  $p(K, \theta, Y)$  の存在を仮定

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

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

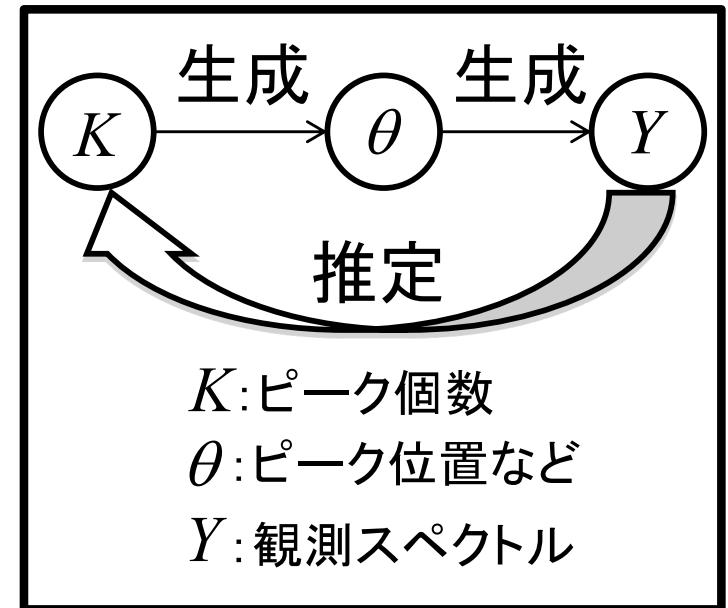
4. 無駄な自由度の系統的消去: 周辺化, 分配関数

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

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

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

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 レプリカ交換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  $\beta$  を導入する。  $\beta$ : 逆温度

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

$$F = F_{\beta=1} = \int_0^1 d\beta \frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$$

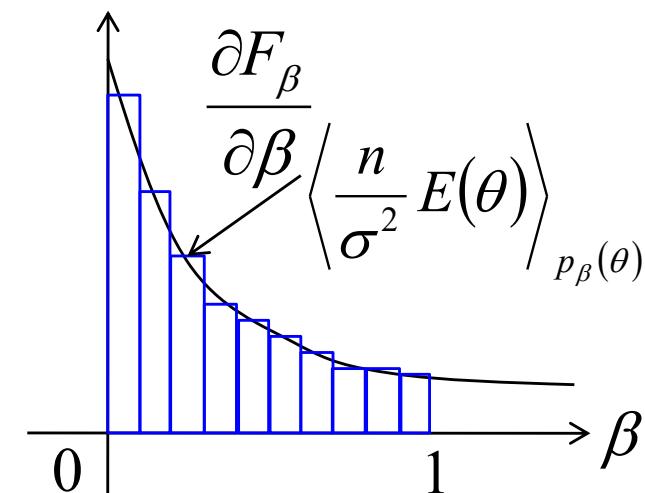
たくさんの温度でのシミュレーションが必要

$\rightarrow$  各温度でのエネルギー平均(すでにやってる)

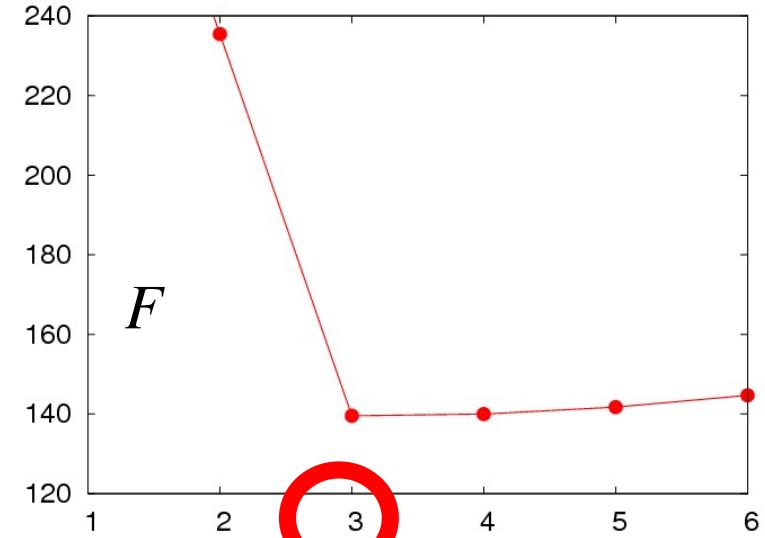
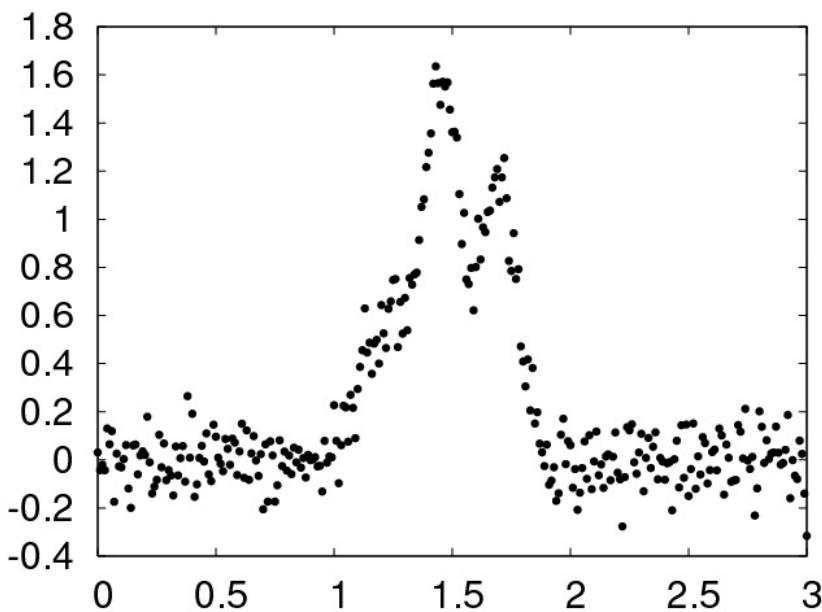
$\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$  ... 確率分布  $p(\theta; \beta)$  に従う

$\frac{\partial F_\beta}{\partial \beta}$  ... 二乗誤差  $\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)$  の期待値

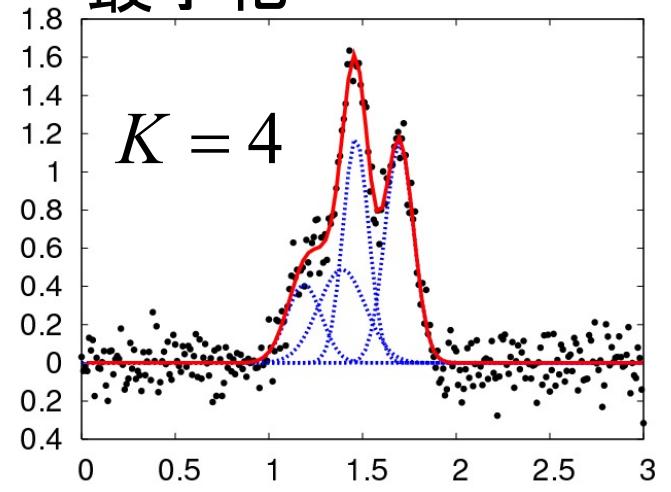
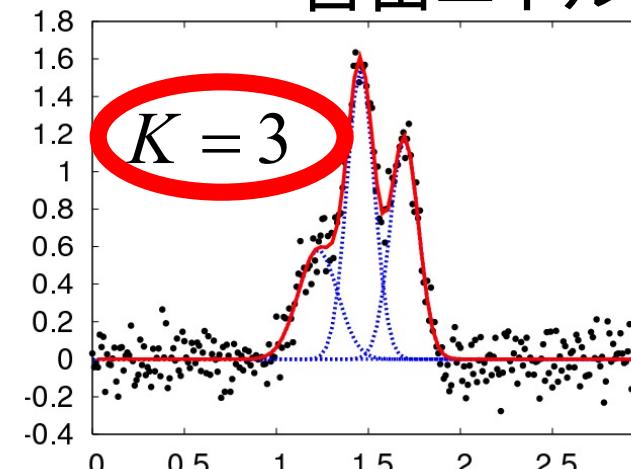
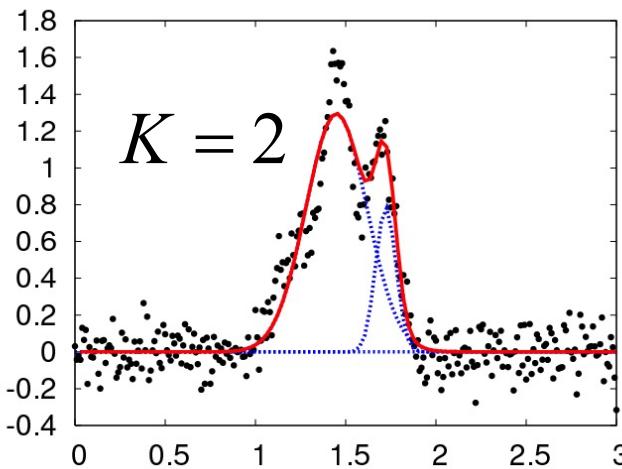
$$p_\beta(\theta) \propto \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} \beta E(\theta)\right) p(\theta)$$



# 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

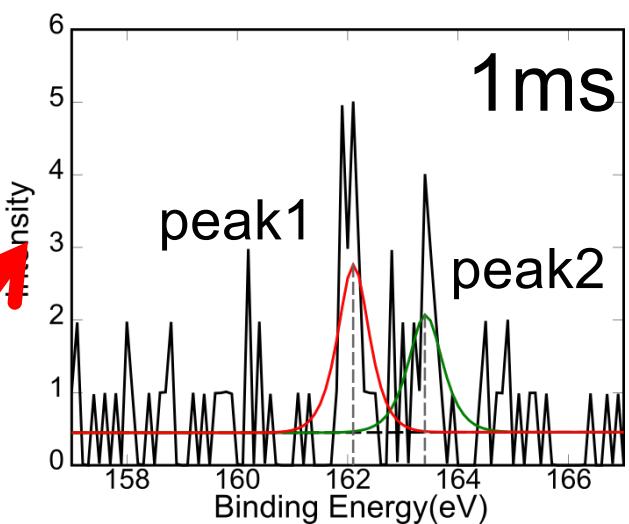
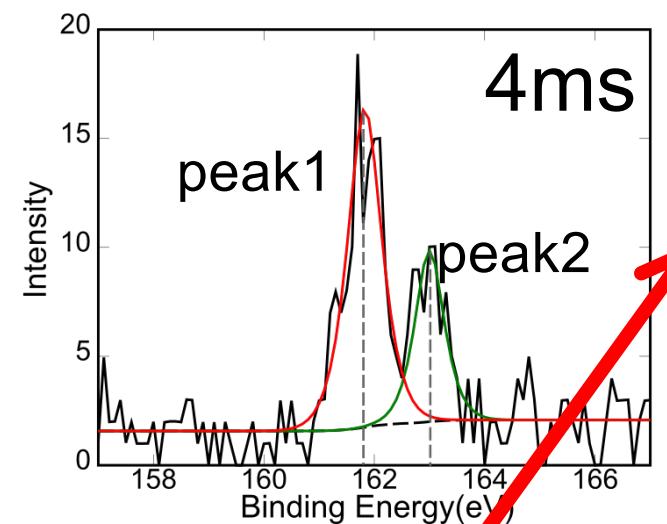
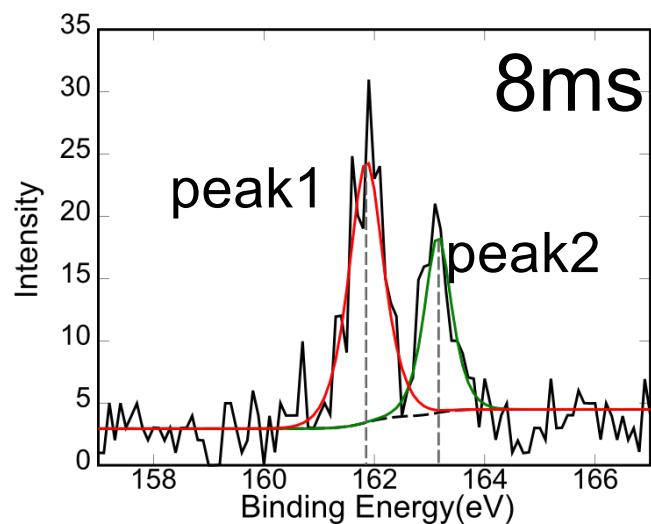
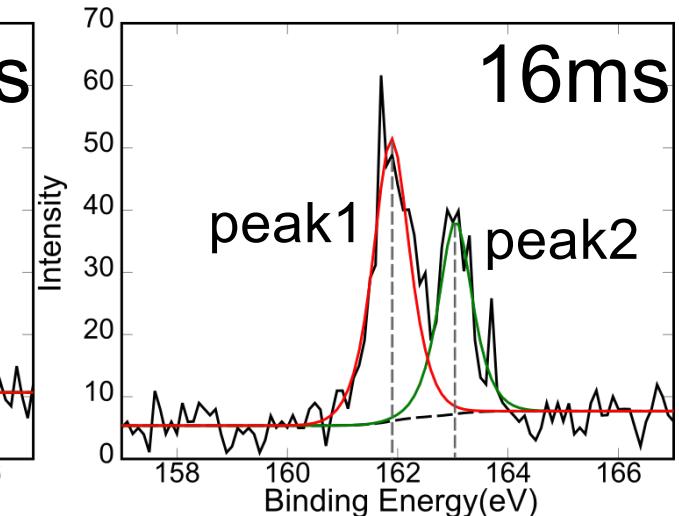
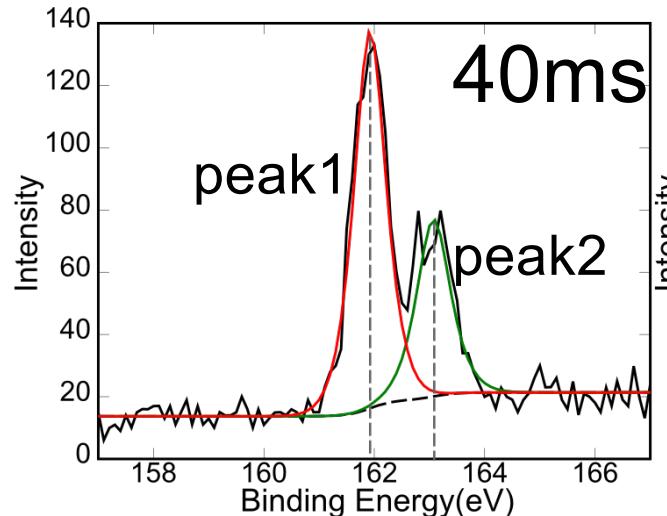
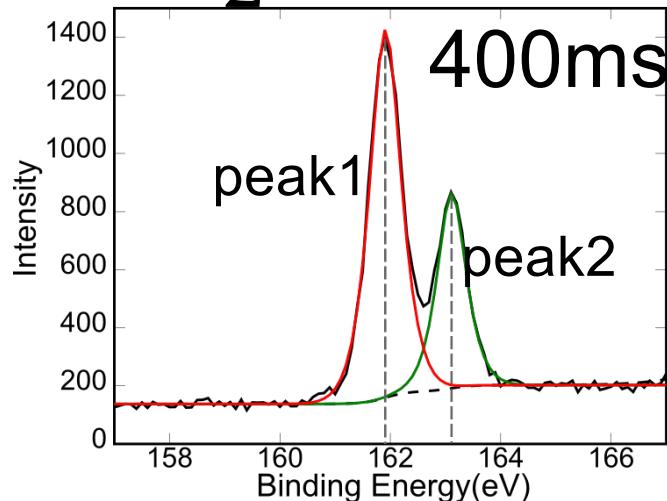
# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

# 例題2: XPS

どこまで時間窓を小さくできるか

MoS<sub>2</sub> 2p



# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかした。
- ・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。

# ベイズ推論の拡張性

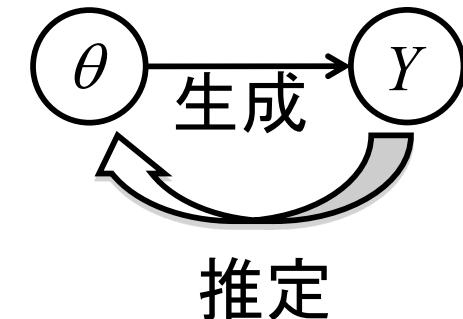
光電子の量子性を考慮する(ポアソン分布)

■ 事後確率:  $p(\theta | Y) = \frac{p(Y | \theta)p(\theta)}{p(Y)}$   $Y = \{y_i\}_{i=1}^n$

$$p(\theta | Y) = \frac{1}{p(Y)} \exp\left(-\frac{n}{\sigma^2} E(\theta)\right) p(\theta)$$

これまでの

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



$\theta$ : ピーク位置など

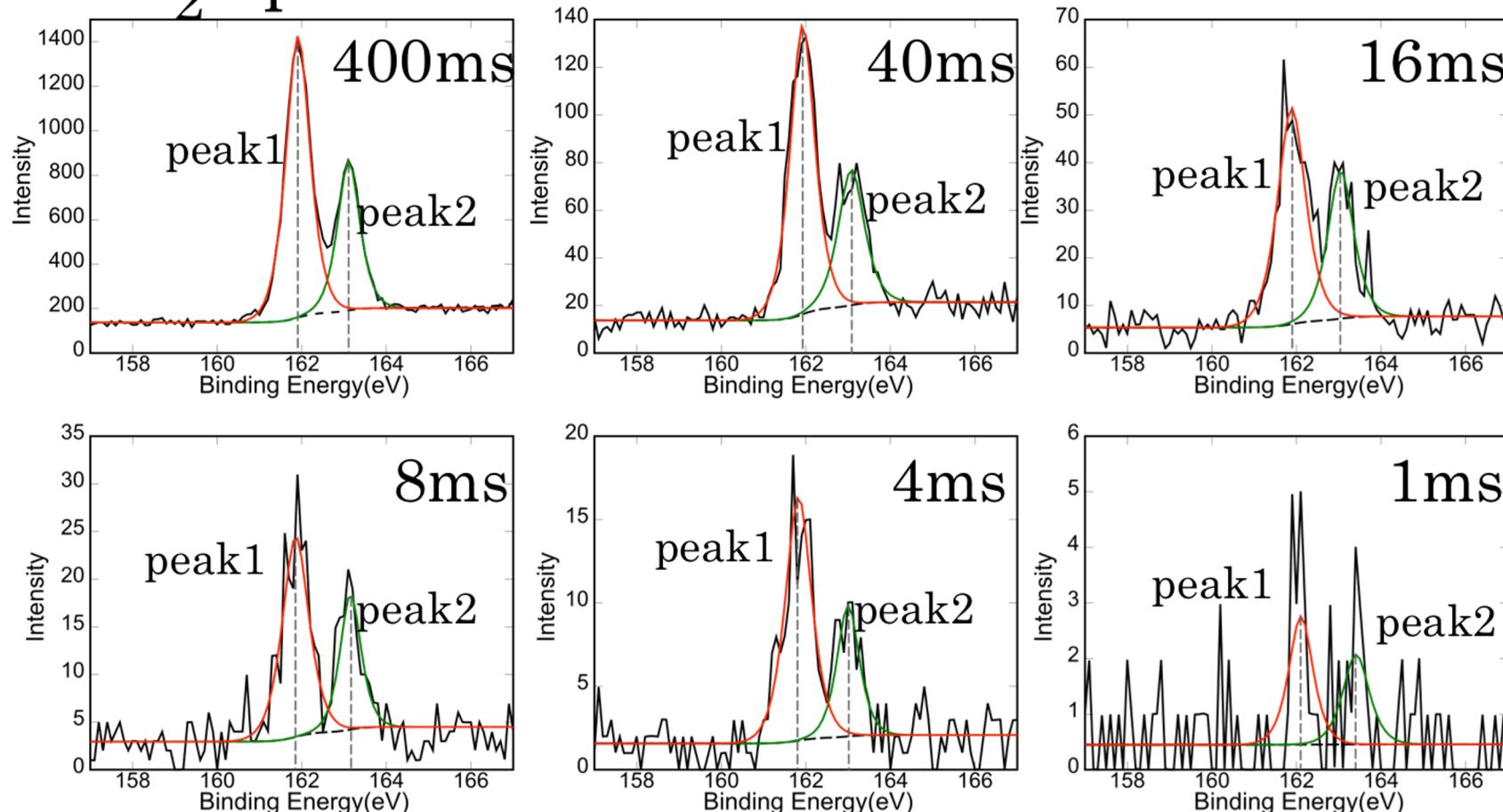
$Y$ : 観測スペクトル

$$E(\theta) = \sum_{i=1}^n \left( y_i \log f(x_i; \theta) + f(x_i; \theta) + \sum_{j=1}^{y_i} \log(j) \right)$$

に変更するだけ

# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* 2019)

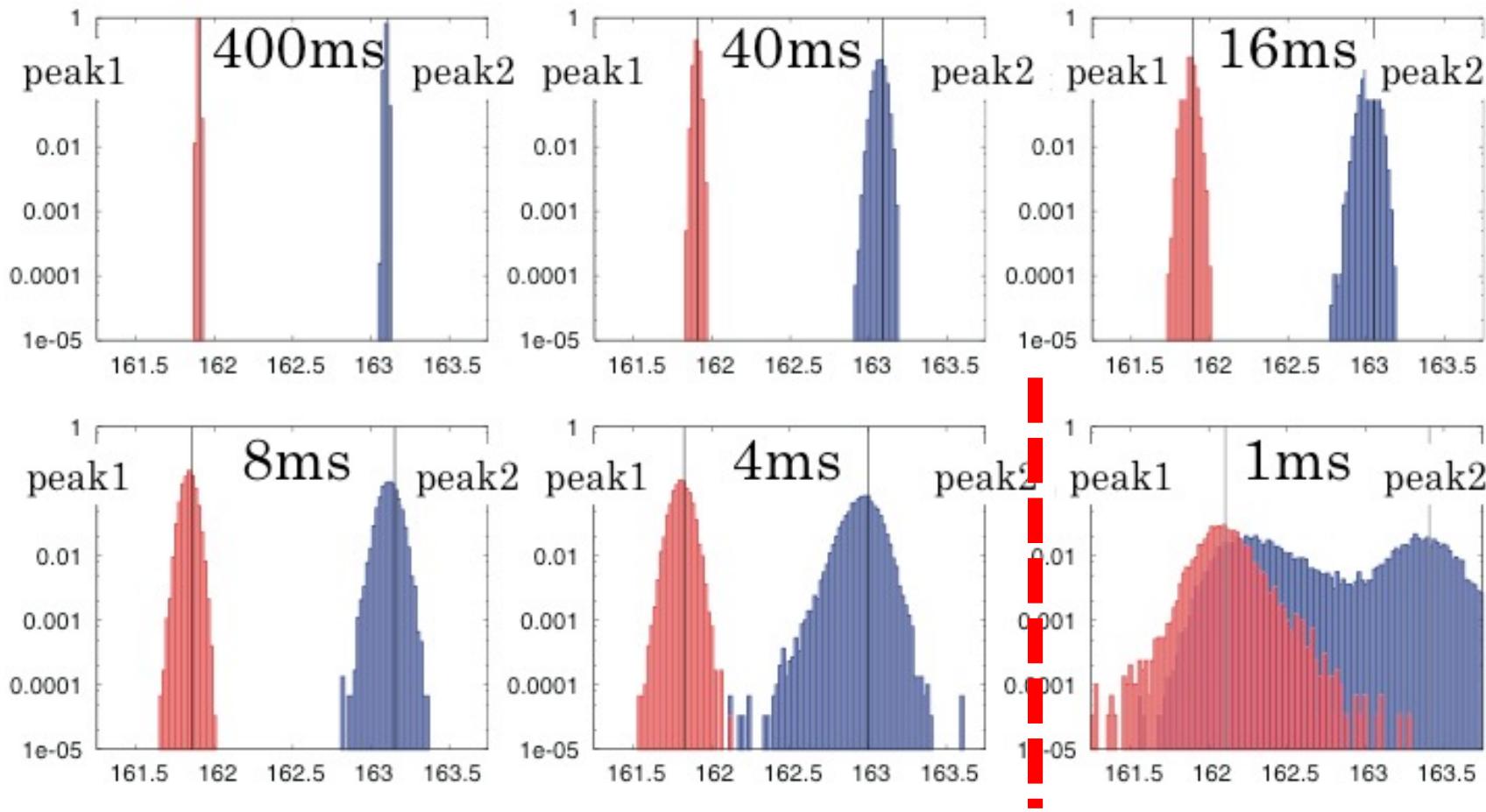
MoS<sub>2</sub> 2p (時間幅依存性)



# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* 2019)

ベイズ計測: ベイズ推論によって、ピーク位置のベイズ事後確率を計算

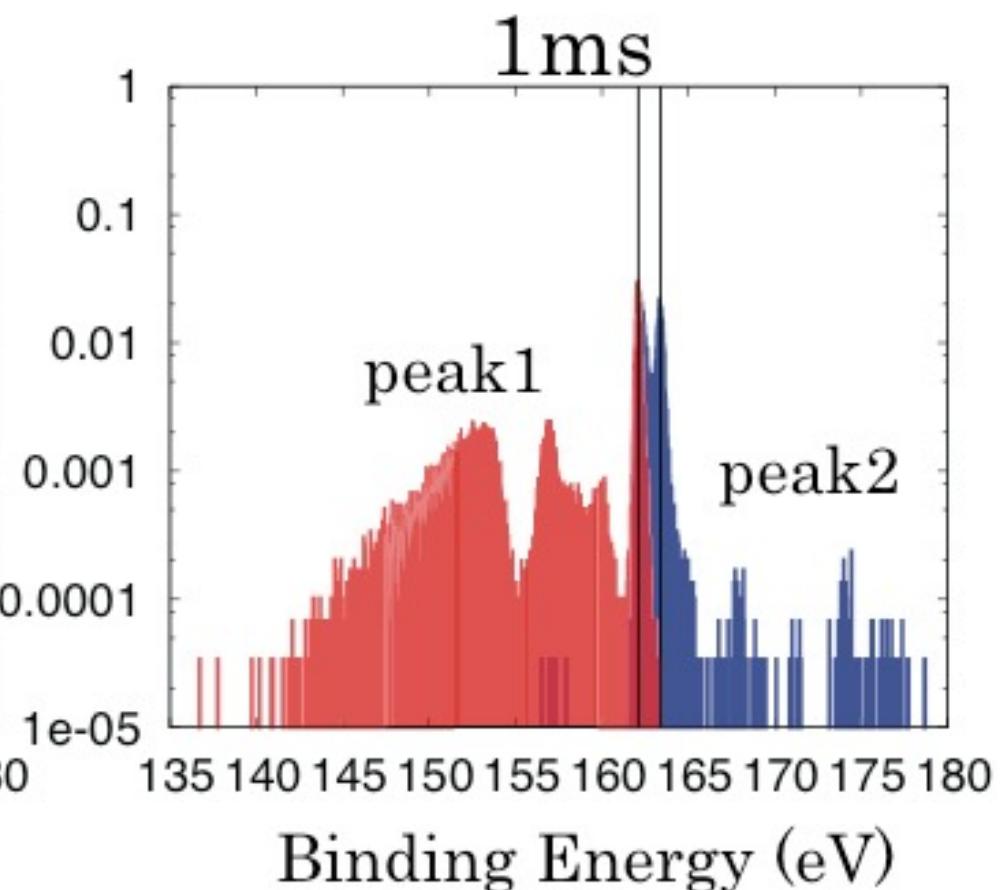
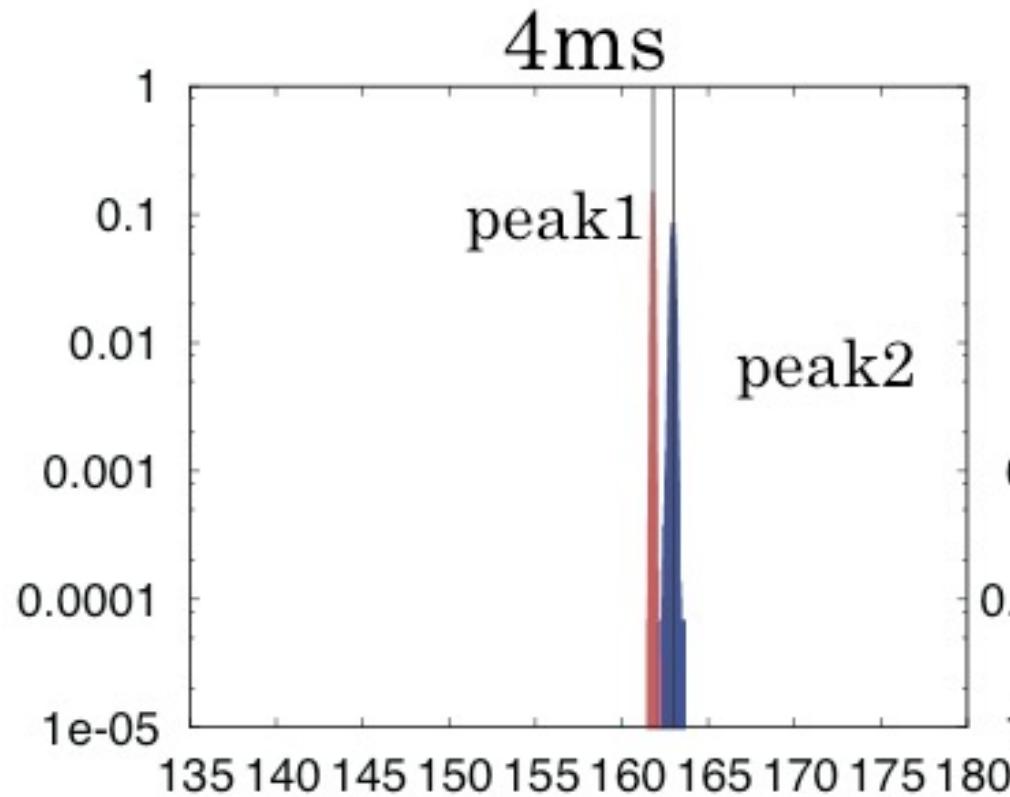
(時間幅依存性)



# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* 2019)

ベイズ計測: ベイズ推論によって、ピーク位置のベイズ事後確率を計算

(時間幅依存性)

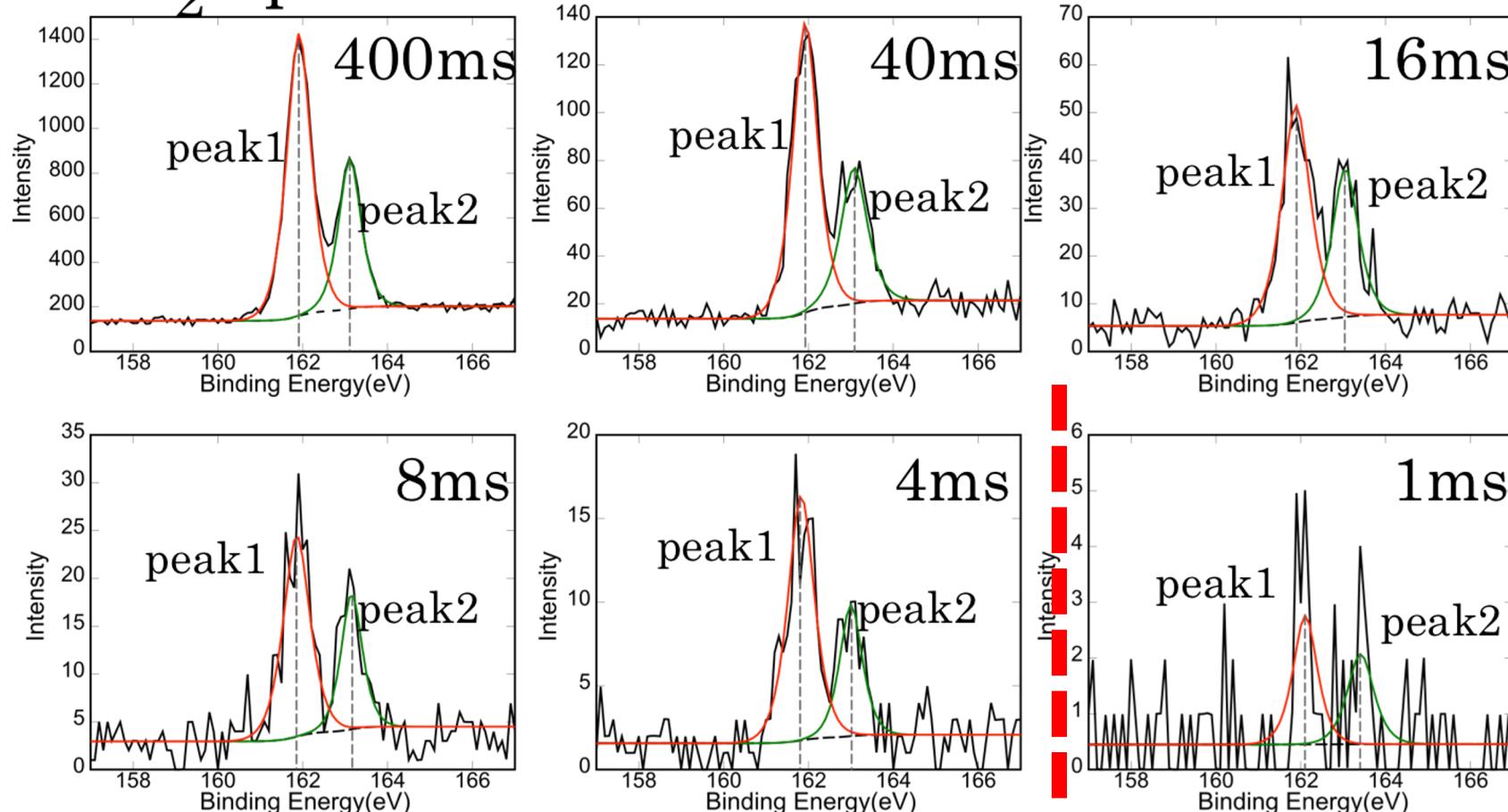


# ベイズ計測 スペクトル分解のベイズ理論(Nagata *et al.* 2019)

ベイズ計測: ベイズ推論によって、ピーク位置のベイズ事後確率を計算

戦略目標: 計測限界を定量的に評価できる枠組みの提案

MoS<sub>2</sub> 2p (時間幅依存性)



# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかした。
- ・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。

# 内容

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

# アンケート

- ・スペクトルや画像データからフィッティングを行なっている
- ・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をなんとかしたい。
- ・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。

# まとめ

- ・自己紹介と導入
- ・1次元線形回帰 $y=ax+b$ のベイズ計測
- ・スペクトル分解
  - スペクトル分解の従来法
  - ベイズ計測
  - レプリカ交換モンテカルロ法
  - モデル選択
  - 計測限界
- ・まとめ

# ベイズ計測の勉強の流れ

1. 線形回帰モデル $y=ax+b$ のベイズ計測の解析計算
2. 線形回帰モデル $y=ax+b$ をレプリカ交換モンテカルロ法で数値解析し、1の解析結果と同じ結果が出ることを確認する  
汎用プログラム: 次の片上さんの講演
3. ベイズ的スペクトル分解をレプリカ交換モンテカルロ法で数値解析する  
汎用プログラム: 次の片上さんの講演
4. 各自のテーマに入る。