

「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の  
開発と応用」

平成 29 年度採択研究代表者

H29 年度  
実績報告書

岡田真人

東京大学大学院新領域創成科学研究科

教授

ベイズ推論とスパースモデリングによる計測と情報の融合

## § 1. 研究実施体制

### (1) ベイズ計測グループ(東京大学大学院)

① 研究代表者:岡田 真人 (東京大学新領域創成科学研究科、教授)

#### ② 研究項目

- ・ ベイズ推論の計測科学への導入  
計測科学にベイズ推論を導入する「ベイズ計測」を実現すると共に、それによって、計測限界の定量的評価や、異種計測の情報統合などが行えることを示す。
- ・ スパースモデリングによるベイズ推論の高速近似アルゴリズムの開発  
スパースモデリングを用いたベイズ推論の高速近似アルゴリズムを開発する。
- ・ スパースモデリングによる計測対象のモデル構築  
スパースモデリングを活用し、複雑な計測対象をモデル化し、そのベイズ推論を実現する。

### (2) データ同化グループ(東京大学地震研究所)

① 主たる共同研究者:長尾 大道 (東京大学地震研究所、准教授)

#### ② 研究項目

- ・ 革新的4次元変分法の創出  
大規模モデルに基づくデータ同化手法である4次元変分法にスパースモデリング技術やレプリカ交換モンテカルロ法等をプラグインすることで高度化し、より高速で高効率な事後分布評価を実現する「革新的4次元変分法」を創出するために必要な基盤技術を開発する。
- ・ モデル/データ両駆動型データ同化の創出  
スパースモデリングなどに代表されるデータ駆動型モデリング手法をモデル駆動型データ同化にプラグインした「モデル/データ両駆動型データ同化」の創出に向けて、様々な計測データに対応できるようデータ同化法の再定式化を行うことで手法の高度化・汎用化を行なう。

### (3) スパースモデリンググループ(筑波大学システム情報系)

① 主たる共同研究者:日野 英逸 (筑波大学システム情報系、准教授)

#### ② 研究項目

- ・ 局所性に基づく計測対象のモデル化  
スパースモデリングに代表される情報の局所性を利用した統計的データ解析手法を開発する。
- ・ 局所性に基づく高効率な計測の実現  
計測における実データ解析の高効率化の実現をする。

## § 2. 研究実施の概要

本課題の目標は、ベイズ推論による物質・生命科学における計測のモデル化のための情報数理基盤構築である。本年度は、各グループそれぞれで要素技術開発に向けた取り組みを行った。以下に各グループの研究実施概要を述べる。

○ベイズ計測グループは本年度、次の2課題に取り組んだ。1つは、スパースモデリング (SpM) の適用による、これまで困難であった大規模な系でのベイズ計測手法の開発である。本年度は計測モデル構築でしばしば必要となる変数・基底選択の高速・高性能化に向けて、基底探索を効率的に行う  $\lambda$ -scan

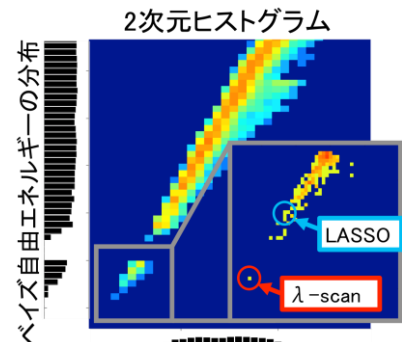
法を開発した<sup>1)</sup>。さらに、近似的基底選択法を統一的に評価できる近似的全状態探索 (AES) 法を開発し、図のように提案手法の有用性を検証した<sup>1)</sup>。AES法はベイズ計測の基盤技術となる。今後は  $\lambda$ -scan 法を用いた高速ベイズ計測法の開発に着手する。もう1つの課題は、ベイズ推論によって計測データから物理特性値の推定限界を推定する手法開発である。本年度は、分光・イメージングデータ解析における平均化処理を対象とし、平均化と推定精度の関係を調べた。この結果、平均化を行わずにベイズ推定を行った方が、推定精度が高いことが確認された<sup>2)</sup>。来年度はこの枠組みを応用し、物理特性値の測定限界をベイズ推定によって調べる手法開発に取り組む。

○データ同化グループは本年度、次の2課題に取り組んだ。1つは革新的4次元変分法の創出へ向けた大自由度モデルのデータ同化手法の高度化である。データ同化は限られた計測データと物理モデルを統融合し、観測不能な内部状態の推定を通して、高精度な予測と予測不確実性評価を行う手法である。我々はこれまでに、既存のデータ同化手法では困難であった、大自由度系での予測不可実性の評価を、高速・高効率に実現する手法を4次元変分法に基づき開発した。本年度は、この手法の妥当性を結晶粒成長モデルで評価し、その論文が採録された。今後は、SpM やレプリカ交換法をプラグインし、革新的4次元変分法の方法論構築に取り組む。もう1つの課題は、モデル/データ両駆動型データ同化創出のためのデータ同化法の再定式化である。本年度は例題として、非時系列計測データに対するデータ同化手法開発に取り組んだ。通常、データ同化は時系列データを対象とする。我々は粒子フィルタを非時系列データにも適用可能に拡張し、岩石の化学組成分布から圧力・温度履歴を推定した。その論文は投稿中である。

○スパースモデリンググループでは、SpM を始めとする局所性に基づく計測対象のモデル化・高速化へ向けて、次の2課題に取り組んだ。1つは、探索的データ解析を念頭にした、観測データの局在性特徴付けのための、情報論的エントロピーのノンパラメトリック推定法の開発である。本年度は、潜在的次元推定問題において、本課題の準備段階から検討していた次元推定法を開発した。来年度は手法の理論解析と高速化、及び実データ検証を検討し、計測現場で使える技術を目指す。もう1つの課題は、データに内在する構造を反映する辞書学習と、SpM による潜在構造抽出を通して、予測に寄与する高・低次特徴量を同定する方法論の検討である。来年度は手法開発と実データ適用を進める。

1) Y. Igarashi et al., J. Phys. Soc. Jpn., **87**[4], 044802, 2018.

2) H. Sakamoto et al., J. Phys. Soc. Jpn., **87**[2], 024802, 2018.



交差検証による予測誤差分布  
図.AES法による近似手法評価.