

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. 研究成果の概要

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、「ベイズ計測の定式化」を目指して、ベイズ推論による計測限界の定量的評価に取り組んだ。ベイズ推論を計測に適用することで、あるスペクトルデータから、どのような微細なピーク構造まで抽出可能であるかを、定量的に見積もることを実現するためのアルゴリズム開発を行った(図1、論文(1))。

#### ○データ同化グループ

データ同化は、計測データとシミュレーションモデルを融合し、現象のダイナミクスを推定・予測を行う。従来のデータ同化では、計測データが時系列データであることが前提とされ、計測データとモデルの直接的な比較が可能な場合に限られていた。本研究では、モデル/データ両駆動型データ同化手法を新たに構築することで、非時系列データを含む多様なデータへの適用を可能とする数学的枠組みを創出した。本研究では、現象のダイナミクスを、知りたい物理・化学パラメータの変化と同時にシミュレーションすることで、まばらな離散的な空間データから時系列データに変換し、データ同化の枠組みで非時系列データを解析する方法を開発した。この成果は、これまで限定されていたデータ同化の応用先を飛躍的に広げる基盤技

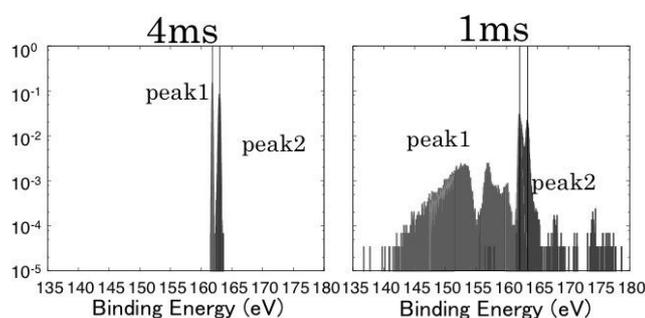


図1.スペクトル分解における耐ノイズ性の評価

術となる(論文(2))。

○スパースモデリンググループ

平成 30 年度は、スパースモデリングに代表される情報の局所性に着目したデータ解析基盤の構築に向け、最頻値回帰手法の解析と開発、及び構造化辞書学習手法の検討を行ない、情報技術による計測高度化を支える方法論を検討した。また、基礎検討と並行して現場におけるニーズに答え実問題に対応する手法の開発を目指し、材料科学、地球科学、生命科学といった種々の分野における計測データの解析に取り組んだ(論文(3))。

**【代表的な原著論文】**

- (1) Kenji Nagata, Rei Muraoka, Yoh-ichi Mototake, Takehiko Sasaki, Masato Okada, “Bayesian Spectral Deconvolution Based on Poisson Distribution: Bayesian Measurement and Virtual Measurement Analytics (VMA)”, J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 88, 044003, 2019.
- (2) Tatsu Kuwatani, Hiromichi Nagao, Shin-ichi Ito, Atsushi Okamoto, Kenta Yoshida, and Takamoto Okudaira, "Recovering the past history of natural recording media by Bayesian inversion", Phys. Rev. E, Vol. 98, 043311, 2018.
- (3) Tetsuro Ueno, Hideitsu Hino, Kanta Ono, “Optimal Design of Experiment for X-Ray Spectromicroscopy by Machine Learning”, Microscopy and Microanalysis, pp.134-135, 2018.

## § 2. 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 次元変分法の具現化  
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確立ならびにその応用展開の検討  
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(統計数理研究所 モデリング研究系)

① 主たる共同研究者:日野 英逸 (統計数理研究所 モデリング研究系 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。