

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

2017 年度採択研究代表者

2019 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. 研究成果の概要

本課題の目標は、ベイズ推論による物質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

本年度、ベイズ推論の高速近似アルゴリズムの提案に取り組んだ。ベイズ推論は、計測データ解析に関して筋が良い枠組みであるが、その計算量に関しては問題がある。そこで我々は、スパースモデリングを用いた高速近似アルゴリズム、**Bayesian LARS-OLS** を提案した。計測科学としての、その具体的な対象としてはコヒーレントフォノン(CP) 信号を取り扱った。CP 信号には物質の性質を表す固有振動モードと実験的アーティファクトが混合して含まれている。そのため、時系列データを減衰振動の重ね合わせとして分解する動的モード分解(DMD) によって各成分を分離することができる。本研究では、候補となる振動モードを推定した後、ベイズ的自由エネルギー最小化の枠組みで候補の中の組み合わせを選択する枠組みを提案した(論文(1))。

○データ同化グループ

気象予報などで広く用いられているデータ同化は、限られた計測・観測データから物理現象を予測するための強力な計算技術であるが、時間発展するデータへの適用を想定しており、写真のような時間発展しないデータへ適用可能な「非時系列データ同化」の開発は、様々な科学分野にとって重要となる。データ同化グループでは、合金鋼材料の結晶粒構造の写真データを例として、粒構造成長ダイナミクスを推定する非時系列データ同化の方法論を構築した。これにより、計測種別の異なる構造写真を用いて、モデルパラメータなどのダイナミクスを決定付ける諸物理量の推定が可能となった(論文(2))。

○スパースモデリンググループ

本年度は、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、適応的計測技術における計測の最適停止基準の検討、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および開発を行ない、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、主に材料科学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) Itsushi Sakata, Yoshihiro Nagano, Yasuhiko Igarashi, Shin Murata, Kohji Mizoguchi, Ichiro Akai and Masato Okada, “Normal mode analysis of a relaxation process with Bayesian inference”, *Science and Technology of Advanced Materials*, Volume 21 Issue 1, p67-78, 2020
- (2) Shin-ichi Ito, Hiromichi Nagao, Takashi Kurokawa, Tadashi Kasuya, and Junya Inoue, “Bayesian inference of grain growth prediction via multi-phase-field models”, *Physical Review Materials*, vol. 3, 053404, 2019
- (3) Kotaro Saito, Masao Yano, Hideitsu Hino, Tetsuya Shoji, Akinori Asahara, Hidekazu Morita, Chiharu Mitsumata, Joachim Kohlbrecher, Kanta Ono, "Accelerating small-angle scattering experiments on anisotropic samples using kernel density estimation", *Scientific Reports* 9, 1526, 2019

§ 2. 研究実施体制

(1) ベイズ計測グループ

① 研究代表者:岡田 真人 (東京大学大学院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

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

- ・ 4次元変分法データ同化の飛躍的高度化と実問題への応用展開

- ・ 非時系列データ同化の方法論の確立と実問題への応用展開

- ・ モデル/データ両駆動型データ同化法の確立

- ・ 有効状態空間抽出法の方法論の確立

(3) スパースモデリンググループ

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。