

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

2020年度 年次報告書

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。各グループの取り組みを以下に述べる。

○ベイズ計測グループ

分散関係スペクトルデータに対して生成過程と観測過程の2つのモデルを導入し、ベイズ推論を用いてデータを再現する物理モデルパラメータを推定可能とした。生成過程には格子ガスモデルを主とした物理モデル、観測過程にはポアソン過程等のノイズモデルを仮定したモデルパラメータ推定手法を提案した。

○データ同化グループ

前年度開発した革新的4次元変分法の数学的基盤を高度化し、有効モデル抽出に向けた準備を完了した。また、これらの基盤技術を応用展開するための実例として、本年度より新たに、時間依存Ginzburg-Landau方程式に従う磁性体モデルの問題に着手し、空間パターンの特徴量を少数パラメータから説明可能な解析的有効モデルを構築した。現在は、これをデータ駆動型の有効モデル抽出のリファレンスとして整備している。

○スパースモデリンググループ

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開発及び展開、最頻値回帰手法の開発を行ない、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。

○ベイズ計測実践グループ

ベイズ計測を物質科学分野、主に地球科学分野に適用するために新設されたグループである。今年度は、地球物理学的観測画像データから、地球物質科学的パラメータを抽出するベイズ推論的手法を開発するとともに、物質科学的画像データから、ベイズ統計的な情報量基準を用いて、不均質化学反応の反応経路を特定する方法などの開発に成功した。

§ 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。

(4) ベイズ計測実践グループ

- ① 主たる共同研究者: 桑谷 立 (海洋研究開発機構 海域地震火山部門副主任研究員)
- ② 研究項目
 - ・ 定常状態画像データからの物理パラメータ・プロセス抽出
 - ・ 非時系列データからのダイナミクス抽出
 - ・ 画像データ・非時系列データからの特徴量抽出を通じた複雑プロセス抽出

【代表的な原著論文情報】

[1] R. Anzaki, S. Ito, H. Nagao, M. Mizumaki, M. Okada, and I. Akai, “Phase prediction method for pattern formation in time-dependent Ginzburg–Landau dynamics for kinetic Ising model without a priori assumptions of domain patterns”, *Physical Review B*, vol. 103, p.094408, (2021).

[2] H. Sakamoto, S. Katakami, K. Muto, K. Nagata, T. Arima, and M. Okada, “Bayesian Parameter Estimation Using Dispersion Relation Spectra”. *J. Phys. Soc. Jpn.* 89, 124002, (2020).

[3] K. Okajima, K. Nagata, and M. Okada, “Fast Bayesian Deconvolution Using Simple Reversible Jump Moves”. *J. Phys. Soc. Jpn.* 90, 034001, (2021).

[4] Hideaki Ishibashi, Hideitsu Hino, “Stopping criterion for active learning based on deterministic generalization bounds”, *The 23rd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS 2020)*, Sicily, Italy, 3–5 June, (2020).