

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名：ベイズ推論とスペースモデリングによる計測と情報の融合
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

### 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）

### 主たる共同研究者

長尾 大道（東京大学地震研究所 准教授）

日野 英逸（情報・システム研究機構統計数理研究所 教授）

桑谷 立（海洋研究開発機構海域地震火山部門 グループリーダー）

成田 憲保（東京大学大学院総合文化研究科 教授）

3. 事後評価結果

### ○評点：

A 優れている

### ○総合評価コメント：

(以下、2022年度課題事後評価時のコメント)

本研究課題は、ベイズ推論を計測科学に導入したベイズ計測により、a)シグナル対ノイズ比の低いスペクトルや画像等から特徴量を抽出する技術、b)少ないデータからより有用な情報を引き出す情報再構成技術、c)異種情報を統合する解析技術等を構築し、従来の計測科学がどのように変わるかの具体例を示すと共に、ベイズ計測の情報数理科学的な学理の構築を目指したものである。

ベイズ計測については、計測限界の定量的評価、有効ハミルトニアンなどの系の有効モデルの選択、異種計測の情報統合などが行えることを示した。特に分光学に集中し、X線光電子分光(XPS)、X線吸収分光(XAS)、メスバウア一分光、X線吸収微細構造(XAFS)などの研究による成果を活用し、放射光施設SPring-8の全ビームラインにベイズ計測を導入するプロジェクトを立ち上げた。

近似アルゴリズム開発においては、能動学習によるスペクトル計測の高速化とその最適停止基準の理論的導出による高速化を実現した。さらに、4次元変分法に対し、2nd-order アジョイント(SOA)法を導入することにより、不確実性評価が可能な手法へ高度化することに成功し、数値モデルの数値解法に対応する、SOA モデルの超高精度解法を機械的に与える方法論を確立した。また、行列の冪乗法と SOA 法を用いることにより、事後分布の有効自由度の基底を抽出する有効モデル抽出法を確立した。

モデル構築においては、畳み込みニューラルネットワーク(CNN)を用いた3D単一分子局在型超解像顕微鏡法を開発した。

さらに、計測データへの適用として、さきがけ「情報計測」1期生終了者の桑谷立氏が研究参加し、地球物質科学分野に対して先駆的な情報科学と計測科学を融合し、ベイズ計測の浸透に大きく貢献した。また、さきがけ「情報計測」2期生終了者の成田憲保氏が研究参加し、時系列データの解析に対してベイズ計測の方法を用いることで、新たな惑星の発見や発見された惑星の特徴量抽出を行った。

以上のように、計測限界の定量的評価、系の有効モデルの選択、異種計測の情報統合などが行えることを示し、ベイズ計測の情報数理基盤を構築するとともに、情報計測領域への横断的展開を図った。課題内及び領域内の共同研究を通じ多くの成果が出たことで、基礎研究プロジェクトとして大きな意義があった。

放射光施設 SPring-8 の全ビームラインへのベイズ計測導入プロジェクトについては、今後、施設側への具体的な提案を含めて、放射光科学等の他の先端計測分野への実装・普及を目指すもので、戦略目標達成への更なる貢献を大いに期待したい。

(2024年2月追記)

本課題は、期間を1年間延長し、SPring-8全ラインベイズ化計画を目標として、メスバウア一分光と小角散乱法などのベイズ計測手法の開発を行った。さらに、 $y=ax+b$ に関するメソスケールの可解モデルを提案し、ベイズ計測の情報数理科学基盤を構築した。また、これまでに開発した磁化パターンを記述する時間依存Ginzburg-Landauモデルに基づくシミュレーション法に不確実性評価が可能な4次元変分法についての改良を実施し、乱択化アルゴリズム等との組み合わせにより、大規模な実問題への適用が可能となるような計算量軽減法を構築した。地球科学分野では、防災科学分野を含む多様な分野への展開を実施し、火山灰供給源対比システムや津波堆積物層をターゲットとした地層対比システム、漂流軽石のハザード可視化システムなどを構築し、論文発表を行った。