

AIMaP 研究集会等実施報告書

(Part 1/4) 名称・重点テーマ・キーワード等

項目	内容
名称	「MI ² 新材料探索のためのデータ科学：計測インフォティクス」チュートリアルセミナー
採択番号	2017A010
重点テーマ	分光計測・画像処理・ノイズ除去等における情報数理に基づくデータ処理
キーワード	全体：機械学習、計測、大量データ、高速解析 導入編：分光、最小二乗法、ベイズ推論、スパースモデリング、データ駆動科学 応用事例 1：ベイズ分光、スペクトル分解、減衰振動波形、光物性物理 応用事例 2：走査型透過電子顕微鏡、分光スペクトル、スペクトラムイメージ解析、クラスタ解析、行列分解、Python
主催機関	国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS） 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）
運営責任者	NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 MI2I 副プロジェクトリーダー 真鍋 明
開催日時(開始)	2017/11/01
開催日時(終了)	2017/11/01
開催場所	JST 東京本部別館（K's 五番町）1 階ホール

(Part 2/4) 最終プログラム・参加者数

項目	内容
最終 プログラム	13:00 -13:30 導入編 「計測インフォマティクスとベイズ推論」 岡田真人 (東京大学 教授／NIMS 招聘研究員・MI アドバイザー) 質疑・応答
	13:30 -14:45 応用事例 「光物性におけるデータ駆動科学」 赤井一郎 (熊本大学 教授) 質疑・応答
	14:45 -15:00 休憩
	15:00 -16:15 応用事例 「スペクトラムイメージ解析における機械学習」 志賀元紀 (岐阜大学 准教授／JST さきがけ) 質疑・応答
	16:15 閉会 (添付、プログラムと要旨をご参照願います。)
	数学・数理科学:10 人, 諸科学: 14 人, 産業界: 73 人, その他: 5 人 以上は回収したアンケート結果(回収数: 102 名)の内訳
参加者数	数学・数理科学:14 人, 諸科学: 20 人, 産業界: 83 人, その他: 15 人 内、 ・受講者: 113 名 (数学・数理科学:11 人, 諸科学: 14 人, 産業界: 83 人, その他: 5 人) ・主催者: 19 名 (数学・数理科学:3 人, 諸科学: 6 人, 産業界: 0 人, その他: 10 人) 以上は名簿からの推定結果(総人数: 132 名)の内訳

(Part 3/4) 論点・現状・今後の展開

項目	内容
当日の論点	物質・材料開発は、研究者の閃き・経験・勘に頼ることが多く、昨今の製品ニーズの多様化、ユースの急変に対応できなくなっている。世界各国が共通の課題を抱える中、国際競争の主導権を得るには、客観的・系統的判断に基づく新たな手法が必須である。昨年度、その新手法として情報統合型物質・材料開発 (MI²) を取り上げ、MI²に必須の情報・数理を解説する公開講座「MI²と数学連携による新展開 チュートリアル」を開催した。平易な統計手法を出発点として手法の理解を一步進める「超基礎からの」シリーズを三回開催し、全回満席の成功を収めた。本年の新チュートリアルセミナーはその基盤に立ち、物質・材料開発で即使える実践的手法を身につける内容へと発展させる。材料をどのように数値化し（記述子の選択）、どのように分析するかを、計算系、合成系、計測系の事例を通して学び取るシリーズを開催し、人材育成を通して MI²による物質・材料開発を網羅的に加速する。本チュートリアルセミナーはその計測系の回にあたり、「計測インフォマティクス」という比較的新しい概念にフォーカスを当て、根本的な考え方と数理科学的な基礎を復習したうえで、実際の適用事例を学んでいく。 <導入編> ○計測インフォマティクスとはなにか? 「計測インフォマティクス」の出自は、NIMS 石井真史氏が提唱し、1/19 に開催されたワークショップに遡る。 http://www.nims.go.jp/MI-I/event/d53p8f00000000kh-att/d53p8f00000000nm.pdf ○計測インフォマティクスをめぐる産官学の状況 H28～CREST/さきがけ「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」の戦略目標「材料研究をはじめとする最先端研究における計測技術と高度情報処理の融合」が大きな流れ。 https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah28-3.html http://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah28-3.html http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/28/03/attach/1368514.htm ○計測インフォマティクスを各企業がとりいれるための方針

	モノづくりの現場では歩留まりの向上が大きく収益を左右する。H25～新学術研究領域「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」で目指しているデータ駆動科学は、収益向上に直結できる計測インフォマティクス（計測データから有意な情報を効率的に読み解き、歩留まり向上につなぐ）を各企業が取り入れるための方針にとって有用。新材料開発だけでなく、工程管理にも有用な計測インフォマティクスは、ノイズに埋もれたシグナルの顕在化による高精度解析（汎用機器で高度計測）や、直接計測困難な物理量の抽出、計測時間の短縮等を可能にする。 http://sparse-modeling.jp/about/ ○計測インフォマティクスに必要な機械学習 ⇒ 2つの応用事例への導入 どの教科書にも書かれていないベイズ推論の解釈を示した。 ベイズ推論の適用事例として、因果律をさかのぼり、フィッティング関数の精度検証例を赤井先生に紹介していただく。 フィッティング関数が無い場合のスパースモデリングの事例として、計測スペクトルのカテゴライズ（クラスタ解析）と主成分分析、行列分解を志賀先生に紹介していただく。
研究の現状と課題（既にできていること、できていないことの切り分け）	<応用事例1> 目的：データを骨までしゃぶることにより、直接計測できない物理量の精度を評価、物理モデルの妥当性を評価でき、データ解析の根拠を強固にして、さらには物理法則に従わずに新しい解析手法が確立できるかもしれない。また、実験の効率化が期待できる。 導入で概論のあったベイズの定理を、概論の考え方を踏襲して詳細に解説。ベイズ推定を実装するための各種アルゴリズムを紹介し、以下の事例を概説した。 例1）ノイズを含むスペクトルから、スペクトルに含まれるピーク要素数をベイズ推定で決定。また、ノイズも定量的に推定できる。データ駆動科学的手法により、データを骨までしゃぶりつくした効果を楽しめた。 例2）Cu₂O 薄膜結晶の光吸収スペクトルをベイズ推定で、非常に高精度にピーク分解（ベイズ分光）可能。 例3）減衰振動波形のベイズ分光により、従来のフーリエ変換結果に比べ、2桁高精度のピーク分解、初期移送の定量的な同定が可能になった。 実験系の研究者としてデータ駆動科学的手法を適用することで、計測結果の高精度な解釈やその理論的な実証原理を獲得でき、従来とは比較にならない高度なデータ解析が可能となる。

	このような有用な手法を広範囲に普及させていく必要がある。 <応用事例2> 目的：計測データの解析を自動化・定量化することで、解析コストを大幅に削減し、未知の新物質の予測を可能にする。 例1）STEM-EELSのスペクトル形状から局所構造を予測 例2）観測スペクトルから記述子を抽出するクラスタ解析 例3）シリコンダイオードのSTEM-EELSのスペクトルから主成分分析、行列分解をして、構成物質数と物質の組成を特定 クラスタ解析や行列分解を観測スペクトルに適用、適切な制約条件を加味することで、スペクトルの有意なイメージ解析が可能になる。 機械学習により、純粋にデータから得られる情報をもとに、イメージ解析はできるが、データに含まれない情報（材料科学的な法則や原理など）を同時に取り込み専門家による検証が不可欠である。
新たに明らかになった課題、今後解決すべきこと	* データ駆動科学的な手法の理解と普及をもっと広範囲に。 * 計測インフォマティクスの普及、特に実験・計測系研究者へ。 * 計測インフォマティクスにおいても、数理科学系研究者と材料科学者との密な連携が必須。
今後の展開・フォローアップ	* 第7回チュートリアルセミナーの開催（1/15）：データ科学のワークフローに実例から、データ駆動型手法の材料開発への適用事例を学ぶ * 計測インフォマティクスに特化したワークショップ、セミナーの継続的な企画・開催： - 過去：2017/1/19「先端計測インフォマティクス 大量データ時代の情報活用」ワークショップ、2017/8/9 物質・材料研究機構／九州シンクロトロン光研究センター合同シンポジウム「新しいデータサイエンスが導く材料創生と放射光解析のコラボレーション」、2017/11/1 第6回チュートリアルセミナー開催 ⇒ 将来：他機関等とも連携し、企画開催していく。 * これまでと同様に講義を撮影・DVD化し、MI²を学び取る機会を提供する。

(Part 4/4) 写真

項目	内容
添付写真 1 後ろから： 受講者 113 名 で満席。キャン セル待ち の受講者も 全員受講で きました。	
添付写真 2 前から： 司会者によ る講師と聴 講者とのつ なぎトーク をきっかけ に、	

添付写真 3

会場内部：
聴講者からの
活発で熱
心な質問や
意見が多数
出ました。



(顔写真は個人情報ですので、AIMaP 関係者・NIMS+JST 関係者の範囲内での配布・共有にとどめてください。)

(2017/08/24b)

MI² チュートリアルセミナー (第6回)

MI² 新材料探索のためのデータ科学 「計測インフォマティクス」

主催：物質・材料研究機構 (NIMS) 科学技術振興機構 (JST)

協賛：文部科学省委託事業 AIMaP (受託拠点：九州大学 IMI) ※

後援：情報・システム研究機構 統計数理研究所

開催日：2017 年 11 月 1 日 (水)

会場：科学技術振興機構 東京本部別館 (K's 五番町) 1F ホール
(〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町)

物質・材料開発は、研究者の閃き・経験・勘に頼ることが多く、昨今の製品ニーズの多様化、ユースの急変に対応できなくなっている。世界各国が共通の課題を抱える中、国際競争の主導権を得るには、客観的・系統的判断に基づく新たな手法が必須である。昨年度、その新手法として情報統合型物質・材料開発 (MI²) を取り上げ、平易な統計数学を出発点として手法の理解を一步進めるチュートリアルセミナー「超基礎からの」シリーズを三回開催した。本年はその基盤に立ち、物質・材料開発で即使える実践的手法を身につける内容へと発展させる。材料をどのように数値化し (記述子の選択)、どのように分析するかを、計算系、合成系、計測系の事例を通して学び取る。今回は計測インフォマティクスにフォーカス。昨年同様 DVD 教材化します。

プログラム

12:30	受付開始
13:00 - 13:30	導入編 「計測インフォマティクスとベイズ推論」 岡田真人 (東京大学 教授 / NIMS 招聘研究員・MI アドバイザー) 質疑・応答
13:30 - 14:45	応用事例 「光物性におけるデータ駆動科学」 赤井一郎 (熊本大学 教授) 質疑・応答
14:45 - 15:00	休憩
15:00 - 16:15	応用事例 「スペクトラムイメージ解析における機械学習」 志賀元紀 (岐阜大学 准教授 / JST さきがけ) 質疑・応答
16:15	閉会

本チュートリアルセミナーは

- ・JST イノベーションハブ構築支援事業

- ・JST さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」

- ・計算物質科学人材育成コンソーシアム、東北大学金属材料研究所

の協力を戴いている。

※：AIMaP：数学アドバンストイノベーションプラットフォーム/Advanced Innovation powered by Mathematics Platform

IMI：マス・フォアインダトリ研究所/ Institute of Mathematics for Industry

MI²I チュートリアルセミナー（第 6 回）

MI² 新材料探索のためのデータ科学 「計測インフォマティクス」要旨

「計測インフォマティクスとベイズ推論」

岡田 真人（国立大学法人 東京大学／NIMS MaDIS）

〒277-8561 千葉県柏市柏の葉 5-1-5 東大基盤棟 701

E-mail: okada@edu.k.u-tokyo.ac.jp

キーワード：分光、最小二乗法、ベイズ推論、スパースモデリング、データ駆動科学

ベイズ推論は、計測インフォマティクスの重要な情報数理基盤の一つである。本講演では、その理由を説明し、本講演に続く二つの講演の導入とする。

まず、モンテールホール問題を用いてベイズ推論を紹介する。ベイズ推論は、結果から原因を推論する逆問題を系統的に取り扱う数理手法である。ベイズ推論では、(1) 原因の事前確率と、結果の生成モデルを用いて因果律を表現し、(2) 事前確率と生成モデルを用いて、原因と結果の同時確率分布を求める。(3) その同時確率分布から、ベイズ事後確率を求め、これにより逆問題を取り扱う。ベイズ推論の最も簡単な例として、一次関数の最小二乗法をとりあげ、二乗誤差の最小化が、ベイズ事後確率の最大化に対応することを示す。つぎに、ベイズ事後確率を解析的に導出し、計測ノイズの大きさが、一次関数の係数や傾きの推定誤差にどのように影響するかを解析的に示す。



「光物性におけるデータ駆動科学」

赤井 一郎（国立大学法人 熊本大学）

〒860-8555 熊本市中央区黒髪 2-39-1

E-mail: iakai@kumamoto-u.ac.jp

キーワード：ベイズ分光、スペクトル分解、減衰振動波形、光物性物理

マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いて各パラメータの事後確率分布を評価するベイズ推定を、各種スペクトルのスペクトル分解に適用した「ベイズ分光」は、現象を説明する物理モデルに適切な物理法則を組み込むことにより、従来法では得られなかった高精度で物性量を推定することが可能となる。



講演では、複雑な光学スペクトルのスペクトル分解解析[1]や、フェムト秒レーザーを用いて計測されるコヒーレントフォノン(CP)の振動モード解析[2]にベイズ分光を適用した例を紹介する。スペクトル分解では、複数の励起子遷移を含むものを対象とし、励起子遷移で確立された物理法則を組み込むことで、従来解析法では困難であった僅かな応力効果を、統計的定量性を持って評価できることを紹介する。一方、CP 信号のモード解析では、減衰振動の物理モデルを用いることで、振動周波数と振動位相が、従来のフーリエ変換と比較して推定精度が飛躍的に向上することを紹介する。

参考文献

[1] K. Iwamitsu et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 094716 (2016).

[2] S. Aihara et al., *AIP Adv.* **7**, 045107 (2017).

「スペクトラムイメージ解析における機械学習」

志賀 元紀 (国立大学法人 岐阜大学 / JST さきがけ)

〒501-1193 岐阜市柳戸 1 番 1

E-mail: shiga_m@gifu-u.ac.jp

キーワード：走査型透過電子顕微鏡、分光スペクトル、スペクトラムイメージ解析、クラスタ解析、行列分解、機械学習、Python

物質構造や電子状態を調べるために、STEM-EELS/EDX 等の走査型透過電子顕微鏡の分光スペクトルが計測される。この計測で得られるデータは、物質の局所構造を反映するスペクトルが評価試料の 2 次元空間座標の各点において得られ、スペクトラムイメージと呼ばれる。この計測の利点は注目領域のスペクトルを網羅的に得ることであるが、データ規模が大きいためにマニュアルによる網羅解析が難しく、機械学習を用いたデータ解析の自動化が必須となる。本チュートリアルでは、スペクトラムイメージ解析に関する機械学習の手法、特に、クラスタ解析や行列分解を解説する。初学者でも理解しやすいように基本的な手法の考え方から、最近開発された手法の詳細まで幅広く解説する。時間が許す限り、プログラミング言語 Python を用いたデモンストレーションを交えながら解説する予定である。

