

論文審査の結果の要旨

氏名 中西（大野） 義典

本論文は 6 章からなり、第 1 章では論文の背景・目的および目的達成のための方策が示されたのち、第 2 章のマルコフ確率場、第 3・4 章の圧縮センシング、第 5 章の解空間解析の導入がなされている。また、第 6 章で結論として、論文の総括が述べられている。

第 1 章では、はじめに、自然科学の様々な分野で画像データが手に入るようになったが、そこからの情報抽出は容易ではないという背景が述べられている。そこで、近年発展著しい情報科学や計算機を用いて、自然科学の仮説・検証のループを促進する枠組みをデータ駆動科学と呼称し、その創成が論文の目的として掲げられている。次に、データ駆動科学の創成という目的を達成するためには、多様な視点を導入することが重要であることが指摘されている。複数の分野を眺めると、異なる分野で、同じ解析手法が適用される場合がある。本論文では、自然科学のデータ解析に共通する原理を明らかにすることにより、データ駆動科学という普遍的な枠組みとその方法論を構築し、自然科学全体を刷新することが目指されている。その先鞭として、多くの分野に跨る問題である、マルコフ確率場・圧縮センシング・解空間解析が紹介され、以降の章の導入となっている。

第 2 章では、マルコフ確率場のハイパーパラメータ推定が議論されている。画像データに記録されている自然現象は、第 0 近似として拡散方程式により記述される。したがって、画像データから拡散係数を推定することは普遍的な問題である。この問題を解決するために、情報科学で画像処理に用いられるマルコフ確率場と拡散方程式との数理的対応を指摘し、ベイズ推定の枠組みを用いて拡散係数に対応するハイパーパラメータを推定した。本研究の独創的な点は推定値の不確かさを評価する手法を開発したことにある。拡散現象を理解するのに最低限必要なモデルを取り扱うことにより、ハイパーパラメータのベイズ事後分布を解析的に導出し、その分布の広がりにより推定値の不確かさを評価できることを示した。

第 3 章では、圧縮センシングの理論に関する近年の先行研究が概括されている。圧縮センシングとは、自然科学で広く受け入れられる原信号のスパース性を仮定することにより、少ない計測データから原信号の推定を可能にする統計学的な枠組みである。圧縮センシングを実行するためには、データを説明する解候補から最もスパースなものを選ぶ必要があるが、これは NP 困難な問題を伴う。近年の圧縮センシングに対する期待の高まりは、多項式時間で実行可能な凸緩和法により得られる解が、現実的な条件の下で厳密解が一致することが示されたことによるものである。本章では、第 5 章で用いられる解析手法とも関連するが、統計力学を用いた論証について詳述されている。

第 4 章では、圧縮センシングを実験物理学に適用した研究について説明されている。対象とする実験は走査型トンネル顕微・分光法による準粒子干渉観測である。物質表面の準粒子干渉パターンは、電子のバンド構造を反映しており、物性の解明に重要な役割を担う。しかし、走査型トンネル顕微・分光法による観測は実験時間が長大になるという欠点がある。そこで、準粒子干渉のスパース性に着目して、圧縮センシングの適用が議論されている。通常解析される画像データからランダムに画素を取り除いた少量のデータを用いても、凸緩和法を適用することにより、電子状態に関する情報を抽出できることを明らかにした。

第 5 章では、解空間の状態密度を調べることにより、最適化問題を解析する手法について説明されている。具体的に、圧縮センシングにも深く関係するスパース推定の問題に適用し、統計力学の鞍点法とレプリカ法を用いて大自由度極限での状態密度を調べた。また、その結果が、交換モンテカルロ法により有限系での数値実験と整合することを確かめた。さらに、代表的な近似手法の性能を比較し、貪欲法が凸緩和法より優れていることを明らかにした。

第 6 章では、データ駆動科学において、マルコフ確率場・圧縮センシング・解空間解析が担う役割を明確にし、それぞれを自然科学の現象・計測・解析に関する本質として位置付けている。現象と計測を行き来する仮説・検証ループに情報科学による解析が整然と取り込まれデータ駆動科学の基盤として一体となっている。

なお、本論文第 1 章は、五十嵐康彦，永田賢二，桑谷立，大森敏明，岡田真人との共同研究であり，本論文第 2 章は，永田賢二，庄野逸，岡田真人との共同研究であり，本論文第 4 章は，土師将裕，吉田靖雄，福島孝治，長谷川幸雄，岡田真人との共同研究であり，本論文第 5 章は，小淵智之，岡田真人，樺島祥介との共同研究であるが，いずれも論文提出者が主体となって分析及び検証を行ったもので，論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって，博士（科学）の学位を授与できると認める。

以上 2, 000 字