

領域略称名：疎性モデリング  
領域番号：4503

平成30年度科学研究費補助金「新学術領域研究  
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「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」

(領域設定期間)

平成25年度～平成29年度

平成30年6月

領域代表者 (東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授・岡田 真人)

## 目 次

1. 研究領域の目的及び概要	13
2. 研究領域の設定目的の達成度	15
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	18
4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況	19
5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	21
6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	24
7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況	29
8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	31
9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	35
10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	36
11. 総括班評価者による評価	37

**研究組織** (総：総括班, 支：国際活動支援班, 計：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究, 公：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総	25120001 スパースモデリングと高次元データ駆動科学創成への支援と広報	平成 25 年度～ 平成 29 年度	岡田 真人	東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授	16
Y00 支	15K21718 スパースモデリングと高次元データ駆動科学の国際活動支援	平成 27 年度～ 平成 29 年度	岡田 真人	東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授	6
A01-1 計	25120002 スパースモデリングを用いた新しい医用 MRI 画像の創生	平成 25 年度～ 平成 29 年度	富樫 かおり	京都大学・大学院医学研究科・教授	5
A01-2 計	25120003 スパースモデリングによる NMR 計測・解析の高速高精度化	平成 25 年度～ 平成 29 年度	木川 隆則	国立研究開発法人理化学研究所・生命システム研究センター・チームリーダー	3
A01-3 計	25120004 スパースモデリングから脳における視覚物体像の時空間表現に挑む	平成 25 年度～ 平成 29 年度	谷藤 学	国立研究開発法人理化学研究所・脳科学総合研究センター・チームリーダー	4
A02-1 計	25120005 スパースモデリングに基づくデータ駆動解析による地球プロセスモデルの構築	平成 25 年度～ 平成 29 年度	駒井 武	東北大学・環境科学研究科・教授	4
A02-2 計	25120006 スパースモデリングが拓く太陽系博物学：ハヤブサ後の小惑星探査戦略の創出	平成 25 年度～ 平成 29 年度	宮本 英昭	東京大学・大学院工学系研究科・教授	3
A02-3 計	25120007 スパースモデリングを用いた超巨大ブラックホールの直接撮像	平成 25 年度～ 平成 29 年度	本間 希樹	国立天文台・水沢 VLBI 観測所・教授	4
B01-1 計	25120008 圧縮センシングにもとづくスパースモデリングへ	平成 25 年度～ 平成 29 年度	田中 利幸	京都大学・情報学研究科・教授	3

	のアプローチ				
B01-2 計	25120009 スパースモデリングによる潜在構造の抽出	平成 25 年度～ 平成 29 年度	岡田 真人	東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授	5
B01-3 計	25120010 物理モデリングとスパースモデリングの融合による自然法則の抽出	平成 25 年度～ 平成 29 年度	福島 孝治	東京大学・大学院総合文化研究科・教授	4
C01-1 計	25120011 カーネル法による高次元データの非線形スパースモデリング	平成 25 年度～ 平成 29 年度	赤穂 昭太郎	国立研究開発法人産業技術総合研究所・人間情報研究部門・研究グループ長	4
C01-2 計	25120012 セミパラメトリックベイズ推論アプローチによるスパースモデリングの深化と応用	平成 25 年度～ 平成 29 年度	福水 健次	統計数理研究所・数理・推論研究系・教授	3
C01-3 計	25120013 大規模なスパースモデリングへの統計力学的アプローチ	平成 25 年度～ 平成 29 年度	樺島 祥介	東京工業大学・情報理工学院・教授	5
C01-4 計	25120014 スパースモデリングを促進する可視化基盤の強化	平成 25 年度～ 平成 29 年度	藤代 一成	慶應義塾大学・理工学部・教授	3
統括・支援・計画研究 計 15 件					
A01 公	26120501 生体系固体 NMR 解析の高度化とスパースモデル	平成 26 年度～ 平成 27 年度	出村 誠	北海道大学・先端生命科学研究科・教授	1
B01 公	26120502 エネルギーデバイス界面の動的電気測定による疎性モデリングの産業応用	平成 26 年度～ 平成 27 年度	島田 敏宏	北海道大学・工学研究院・教授	3
C01 公	26120503 疎性モデリングに基づく部分グラフ指示子の冗長性及び相関構造の分析	平成 26 年度～ 平成 27 年度	瀧川 一学	北海道大学・大学院情報科学研究科・准教授	1
C01 公	26120504 スパース表現に基づくマーク付き点過程に対する	平成 26 年度～ 平成 27 年度	日野 英逸	筑波大学・システム情報系・助教	1

	距離尺度の学習手法の開発				
A01 公	26120505 スパース性を利用した体幹部呼吸性体動の高速4次元MRイメージング	平成26年度～平成27年度	羽石 秀昭	千葉大学・フロンティア医工学センター・教授	6
A01 公	26120506 スパース性を使った新規多次元NMRスペクトル再構成法の開発とGPCR研究への応用	平成26年度～平成27年度	上田 卓見	東京大学・大学院薬学系研究科・助教	2
A01 公	26120507 疎性を用いた多階層ネットワークの同定	平成26年度～平成27年度	宇田 新介	九州大学・生体防御医学研究所・准教授	1
A02 公	26120508 極低温走査トンネル顕微鏡を用いた物性物理学実験へのスパースモデリングの適用	平成26年度～平成27年度	吉田 靖雄	東京大学・物性研究所・助教	3
B01 公	26120509 化学反応データ計測とベイズ推定によるデータ駆動反応化学の確立	平成26年度～平成27年度	佐々木 岳彦	東京大学・新領域創成科学研究科・准教授	1
B01 公	26120510 疎性モデリングとの融合によるデータ同化研究の新展開	平成26年度～平成27年度	長尾 大道	東京大学・地震研究所・准教授	1
B01 公	26120511 スパースモデリングによるナノデバイスシミュレーション解析	平成26年度～平成27年度	安藤 康伸	東京大学・工学研究科・助教	5
B01 公	26120512 スパースモデリングによる大規模カルシウムイメージングデータの解析手法の確立	平成26年度～平成27年度	青西 亨	東京工業大学・総合理工学研究科・准教授	3
B01 公	26120513 スパース性を利用した大自由度非線形システムのデータ解析とモデリング	平成26年度～平成27年度	中尾 裕也	東京工業大学・工学院・准教授	1

A01 公	26120514 スパースモデリングによるヒト脳内での物体画像表現ダイナミクスの解明	平成 26 年度～ 平成 27 年度	宮脇 陽一	電気通信大学・先端領域教育研究センター・准教授	1
C01 公	26120515 相関スパース表現 Deep Architecture によるテクスチャ解析	平成 26 年度～ 平成 27 年度	庄野 逸	電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授	2
C01 公	26120516 時系列データの再帰的圧縮過程における最適停止性の研究	平成 26 年度～ 平成 27 年度	村山 立人	富山大学・大学院理工学研究部(工学)・講師	1
C01 公	26120517 基本演算としての 3 次元構造類似比較技術とそのスパースモデリングへの応用	平成 26 年度～ 平成 27 年度	大淵 竜太郎	山梨大学・総合研究部・教授	1
B01 公	26120518 低ランク行列分解法による非経験的ナノ物性マッピング法の開発と応用	平成 26 年度～ 平成 27 年度	巽 一徹	名古屋大学・未来材料・システム研究所・准教授	3
A02 公	26120519 金属鉍床品位の 3 次元高精度モデリングと鉍床形成の物理法則の検出	平成 26 年度～ 平成 27 年度	小池 克明	京都大学・工学研究科・教授	2
B01 公	26120521 スパース最適制御理論によるバイオメカニクスのためのスパースモデリング	平成 26 年度～ 平成 27 年度	永原 正章	京都大学・大学院情報学研究科・講師	1
B01 公	26120522 圧縮センシングを用いた超低磁場 MRI の時空間分解能の向上	平成 26 年度～ 平成 27 年度	笈田 武範	京都大学・大学院工学研究科・助教	1
C01 公	26120523 ネットワーク構造のスパースモデリングの探求	平成 26 年度～ 平成 27 年度	下平 英寿	大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授	1
C01 公	26120524 疎性モデリングへの組合せ論的アプローチと最適化	平成 26 年度～ 平成 27 年度	河原 吉伸	大阪大学・産業科学研究所・准教授	2

A01 公	26120525 遺伝子発現の力学的・回路的制御機構の実験・シミュレーションデータ駆動型研究	平成 26 年度～ 平成 27 年度	粟津 暁紀	広島大学・理学系研究科・准教授	3
C01 公	26120526 圧縮センシングに基づく超高次元非線形写像の機械学習に関する研究	平成 26 年度～ 平成 27 年度	酒井 智弥	長崎大学・大学院工学研究科・准教授	1
C01 公	26120527 スパースモデリングを実現する一般化主成分分析法の圧縮センシングに基づく数理基盤	平成 26 年度～ 平成 27 年度	小西 克己	工学院大学・情報工学部・准教授	1
A01 公	26120528 変数選択安定性を重視した変数選択を用いたオミックス疾患バイオマーカー探索	平成 26 年度～ 平成 27 年度	田口 善弘	中央大学・理工学部・教授	1
B01 公	26120529 スパースモデリングを用いた自閉症スペクトラムの構造推定	平成 26 年度～ 平成 27 年度	市川 寛子	東京理科大学・理工学部・講師	1
C01 公	26120530 スパースデータの多階層メモリへの配置及び高速かつ省電力計算手法の開発と検証	平成 26 年度～ 平成 27 年度	藤澤 克樹	九州大学・マスフォアインダストリ研究所・教授	3
A01 公	26120531 スパースモデリングの深化による MR スペクトルスコピーへのデータ駆動的アプローチ	平成 26 年度～ 平成 27 年度	梅田 雅宏	明治国際医療大学・医学教育研究センター・教授	2
A01 公	26120532 大規模神経活動イメージングによる皮質コラムの階層型情報変換機構の解明	平成 26 年度～ 平成 27 年度	船水 章大	沖縄科学技術大学院大学・神経計算ユニット・研究員	2
A01 公	26120533 パスサンプリングによる 1 分子 FRET 光子計数デ	平成 26 年度～ 平成 27 年度	松永 康佑	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究機構・研究員	2

	ータのモデリング				
C01 公	26120534 スパースモデリングを用いたビッグデータの In-situ 可視化	平成 26 年度～ 平成 27 年度	Bi Chongke	国立研究開発法人理化学研究所・研究員	1
A02 公	26120535 スパースモデリングを用いた顔の個体認知の神経機構の解明	平成 26 年度～ 平成 27 年度	菅生 康子	国立研究開発法人産業技術総合研究所・研究員	4
A01 公	26120536 スパースモデリングを用いた大脳中次視覚野における自然視覚情報処理機構の解明	平成 26 年度～ 平成 27 年度	西本 伸志	国立研究開発法人情報通信研究機構・脳情報通信融合研究センター・主任研究員	1
A02 公	26120537 ブラックホール直接撮像をおこなう気球サブミリ波 VLBI のキーテクノロジー	平成 26 年度～ 平成 27 年度	土居 明広	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・助教	4
A02 公	26120538 疎性モデリングによる地震発生予測のための地殻活動データからの情報抽出	平成 26 年度～ 平成 27 年度	堀 高峰	国立研究開発法人海洋研究開発機構・地震津波海域観測研究開発センター地震津波予測研究グループ・グループリーダー	2
A01 公	16H01525 多階層システム生物学におけるデータ駆動科学の展開	平成 28 年度～ 平成 29 年度	小松崎 民樹	北海道大学・電子科学研究所・教授	1
A01 公	16H01526 高精度タンパク質固体 NMR の圧縮センシング測定法開発	平成 28 年度～ 平成 29 年度	出村 誠	北海道大学・先端生命科学研究院・教授	1
C01 公	16H01527 スパースモデリングによる確率的神経細胞モデルダイナミクスの縮約	平成 28 年度～ 平成 29 年度	山野辺貴信	北海道大学・医学研究院・助教	1
A01 公	16H01528 スパースモデリングによる大規模ゲノムコホート解析	平成 28 年度～ 平成 29 年度	田宮 元	東北大学・東北メディカル・メガバンク機構・教授	2



A02 公	16H01529 最適な基底選択による高 レイノルズ数流れの高速 予測手法の開発	平成 28 年度～ 平成 29 年度	三坂 孝志	東北大学・学際科学フロンティア研究 所・助教	1
A01 公	16H01530 スパース性の拡張による MRI 圧縮センシングの 新展開	平成 28 年度～ 平成 29 年度	伊藤 聡志	宇都宮大学・工学研究科・教授	1
A01 公	16H01531 高次元 NMR データ解析 法の開発および GPCR の機能解明への応用	平成 28 年度～ 平成 29 年度	上田 卓見	東京大学・大学院薬学系研究科・助教	1
A01 公	16H01532 疎性モデリングを用い た、微分方程式の統計的 推定論の確立	平成 28 年度～ 平成 29 年度	木立 尚孝	東京大学・大学院新領域創成科学研究 科・准教授	1
B01 公	16H01533 ベイズ推定に基づく TEM・速度論データ解析 による触媒開発	平成 28 年度～ 平成 29 年度	佐々木 岳彦	東京大学・大学院新領域創成科学研究 科・准教授	1
B01 公	16H01534 スパースモデリングによ る走査トンネル分光の高 速化・高精度化	平成 28 年度～ 平成 29 年度	吉田 靖雄	東京大学・物性研究所・助教	1
B01 公	16H01535 高次元空間自由度のスパ ース化による反応シミュ レーション解析	平成 28 年度～ 平成 29 年度	安藤 康伸	国立研究開発法人産業技術総合研究 所・機能材料コンピューテーショナルデ ザイン研究センター・研究員	5
B01 公	16H01536 高速データ同化計算に資 する疎性モデリングに基 づく観測行列デザイン	平成 28 年度～ 平成 29 年度	長尾 大道	東京大学・地震研究所・准教授	2
B01 公	16H01538 スパース性に基づく大自 由度非線形システムのデ ータ駆動型縮約モデリン グ手法の構築	平成 28 年度～ 平成 29 年度	中尾 裕也	東京工業大学・工学院・准教授	1
C01 公	16H01539 制限ボルツマン・マシン による多細胞スパース信 号の検出	平成 28 年度～ 平成 29 年度	青西 亨	東京工業大学・情報理工学院・准教授	3

B01 公	16H01540 脳の高次機能による言語 表象の定量的な解釈を実 現するスパースモデリン グ手法の開発	平成 28 年度～ 平成 29 年度	小林 一郎	お茶の水女子大学・基幹研究院・教授	1
A01 公	16H01541 スパースモデリングを用 いたヒト脳活動の高時空 間分解能解析と脳情報源 の同定	平成 28 年度～ 平成 29 年度	宮脇 陽一	電気通信大学・大学院情報理工学研究 科・教授	3
C01 公	16H01542 Deep Learning を用い たスパーステクスチャ画 像解析手法の確立	平成 28 年度～ 平成 29 年度	庄野 逸	電気通信大学・大学院情報理工学研究 科・教授	1
A02 公	16H01543 宇宙初期密度揺らぎの再 構築による精密宇宙論の 展開	平成 28 年度～ 平成 29 年度	市來 淨興	名古屋大学・理学研究科・准教授	1
B01 公	16H01544 低ランク行列多元分解法 による非経験的ナノ物性 マッピング法の拡張と実 装	平成 28 年度～ 平成 29 年度	巽 一徹	名古屋大学・未来材料・システム研究 所・准教授	1
A02 公	16H01545 物理法則—地球統計学の 組み合わせによる金属鋳 床品位の空間モデリング の深化	平成 28 年度～ 平成 29 年度	小池 克明	京都大学・工学研究科・教授	2
B01 公	16H01546 動的スパースモデリング の理論とそのバイオメカ ニクスへの応用	平成 28 年度～ 平成 29 年度	永原 正章	北九州市立大学・環境技術研究所・教授	1
C01 公	16H01547 ネットワーク構造のスパ ースモデリングとリサン プリングによる統計的推 測	平成 28 年度～ 平成 29 年度	下平 英寿	京都大学・情報学研究科・教授	1
C01 公	16H01548 構造的疎性モデリングの ためのメタ学習アルゴリ ズム体系の構築	平成 28 年度～ 平成 29 年度	河原 吉伸	大阪大学・産業科学研究所・准教授	1

A02 公	16H01549 津波防災分野における疎 性モデリングの適用	平成 28 年度～ 平成 29 年度	馬場 俊孝	徳島大学・大学院社会産業理工学研究 部理工学域・教授	1
A01 公	16H01550 スクレオソームスケール の現象を説明するスパー スな情報表現単位の模索	平成 28 年度～ 平成 29 年度	前原 一満	九州大学・生体防御医学研究所・助教	1
B01 公	16H01551 多階層オミクスデータの ためのネットワーク推定 方法の開発	平成 28 年度～ 平成 29 年度	宇田 新介	九州大学・生体防御医学研究所・准教授	1
B01 公	16H01552 コヒーレントフォノン信 号の疎性モデリング解析 による光誘起構造変化へ のアプローチ	平成 28 年度～ 平成 29 年度	赤井 一郎	熊本大学・パルスパワー科学研究所・教 授	3
B01 公	16H01553 ベイズ理論に基づいた 3 次元原子イメージの精密 化	平成 28 年度～ 平成 29 年度	細川 伸也	熊本大学・大学院先端科学研究部・教授	1
C01 公	16H01554 スパースモデリングに基 づくデータ駆動型制御の ための数理基盤	平成 28 年度～ 平成 29 年度	小西 克己	工学院大学・情報学部・准教授	1
B01 公	16H01555 心理学へのデータ駆動型 アプローチとスパースモ デリングを用いた自閉性 症状の構造推定	平成 28 年度～ 平成 29 年度	市川 寛子	東京理科大学・理工学部・講師	1
C01 公	16H01556 準素イデアル分解を用い た疎性へのアプローチ	平成 28 年度～ 平成 29 年度	三浦 佳二	関西学院大学・理工学部・准教授	2
A01 公	16H01557 (廃止) スパースモデリングによ る脳マクロ状態抽出とア ルゴリズム推定	平成 28 年度	伊藤 真	沖縄科学技術大学院大学・神経計算ユ ニット・研究員	1
A01 公	16H01559 1 分子スクリーニング装 置から得られるビッグデ ータのスパース化	平成 28 年度～ 平成 29 年度	安井 真人	理化学研究所・生命機能科学研究セン ター・特別研究員	1

A01 公	16H01561 スパースモデリングを用いた側頭葉における顔の情報コーディングの研究	平成 28 年度～ 平成 29 年度	菅生 康子	国立研究開発法人産業技術総合研究所・人間情報研究部門・主任研究員	1
A01 公	16H01562 スパースモデリングによる電顕単粒子構造解析の迅速・高分解能化	平成 28 年度～ 平成 29 年度	佐藤 主税	国立研究開発法人産業技術総合研究所・バイオメディカル研究部門・研究グループ長	1
B01 公	16H01563 大気圏再突入カプセルに関する大規模流体シミュレーションデータの疎性モデリング解析	平成 28 年度～ 平成 29 年度	大道 勇哉	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・航空技術部門・研究開発員	2
A02 公	16H01564 スパースモデリングによる地震発生予測のための地殻活動データからの情報抽出	平成 28 年度～ 平成 29 年度	中田 令子	国立研究開発法人海洋研究開発機構・地震津波海域観測研究開発センター・特任技術研究員	2
B01 公	16H01565 次元可変空間での疎性モデリングによる地下構造イメージングの高度化	平成 28 年度～ 平成 29 年度	高橋 努	国立研究開発法人海洋研究開発機構・地震津波海域観測研究開発センター・主任研究員	1
公募研究 計 75 件					

# 1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ以内）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

大量の高次元計測データに隠された規則性を抽出するデータ解析の系統的技術の開発は、来たるべき「データ科学時代」における全ての科学分野に共通する喫緊の課題である。本領域では、多くの自然科学分野の高次元計測データに普遍的にスパース性が存在することを基本原理としたスパースモデリングに注目し、生命分子からブラックホールに至る幅広い自然科学分野の実験・計測研究者と情報科学者の連携により、この課題を解決する。これにより、スパースモデリングの数理的基盤を深化させるとともに、高次元データ駆動科学ともいふべき新学術領域を創成し、本格化するデータ科学時代に向けて我が国の学術水準の圧倒的優位を確立する。

## ① どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる新たな研究領域」であるか

より深く自然を知りたいという飽くなき探究心が、とどまることを知らない計測技術の向上をもたらし、大量の高次元観測データを日々生み続けている。

これを好機と捉え、科学技術の水準を革新的に向上・強化させるために、**情報科学と自然科学が緊密に融合した革新的な自然探究の方法論**を構築する。我々は、その方法論構築のための**キーテクノロジー**が、近年、情報科学分野で大きな注目を集めている**スパースモデリング(SpM)**であると考え。SpMは、高次元データに普遍的に内在する**スパース(疎)性**を利用することで、データから最大限の情報を効率よく抽出できる技術の総称である。これまでもSpMは個別分野において萌芽的成果を生み出し、それらの背後にある共通原理を明確化し、より強力なものにすることは自然科学全体に革新的な展開をもたらす。

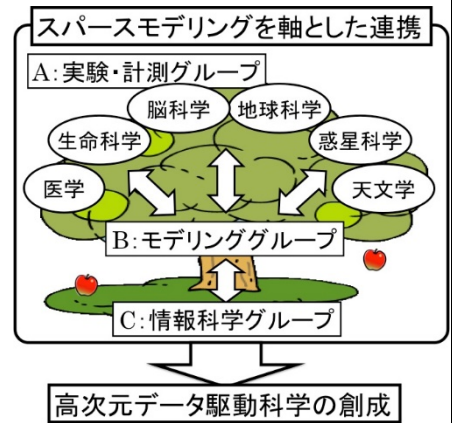


図 1-1: スパースモデリングに基づく高次元データ駆動科学

こうした現状認識を踏まえ、本領域では**図 1-1**のように、SpM や高次元データ解析で顕著な実績をあげている情報科学者と、生命分子からブラックホールに至る、幅広い自然科学の実験・計測研究者が SpM というキーテクノロジーを軸として緊密に連携することで、大量の高次元データを効率的に科学的な知へとつなげる**高次元データ駆動科学**ともいふべき新学術領域を創成する。これにより、これまで、**個々の分野ごとに探求されていた課題に対して、新たな共通原理に基づく革新的な科学的方法論**を確立することによって、あらゆる科学分野の研究に大きな波及効果をもたらす、来たるべきデータ科学の時代に向けて、我が国の学術水準の圧倒的優位性を確立する。

その**具体化**へ向けて、以下の三つの**重点目標**を掲げる。

- A: **データ駆動科学の実践**: 高次元データの効率的な活用により、科学的方法の質的変化を引き起こすことで、自然科学の個別の課題を解決する。
- B: **モデリング原理の確立**: 多様な視点の導入により、分野の個別性を超えた類似性/共通性にもとづいた対象/現象のモデル化法に関する理論整備を行うことで、革新的展開を生み出す。
- C: **数理基盤の形成**: 非線形で不確実性を伴う高次元の自然科学データに関して、具体的事例から数理的課題を絞り込むことで、統計的手法を深化・創成する。

これら A, B, C に対して、本領域では、**図 1-2**のように、実験・計測グループ(実験 G, A01,A02)、モデリンググループ(モデル G, B01)、情報科学グループ(情報 G, C01)の三つの項目をおく。

自然科学と情報科学の緊密な連携・融合を目指す本領域において、モデル G(B01)のインターフェース・触媒としての役割が特に重要である。モデル G(B01)は**構造的類似性**に基づき、できるだけ一般性のある**モデリング原理の確立**を目指す**横断的コーディネーション**を中心的機能として研究を進める。

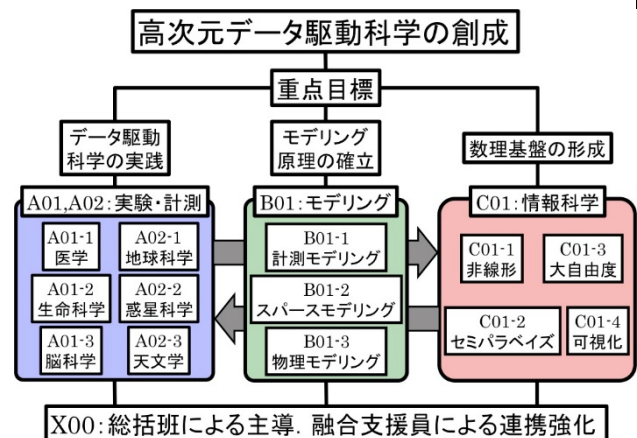


図 1-2: 領域の重点目標と班構成

② 研究の学術的背景：なぜスパースモデリングか？

科学とは、(1)研究者の仮説や意図に基づいた実験・観測によりデータを獲得し、(2)そこから少数の説明変数を選択し、(3)得られた説明変数と仮説を比較し対応させることで法則を発見する行為である。この**仮説の提案・検証ループ**の不断の繰り返しにより今日の科学は発展してきた。天体観測の結果を分析し、ケプラーの法則を経て到達したニュートン力学はこの模範例である。一方で、近年の計測技術の発展による**データの高次元化で計算量が爆発**する状況に、研究者の直感的行為である思索や試行錯誤が追いつかずに、こうした**仮説・検証ループに基づくモデル化が著しく困難**になっている。こうした問題は、物理学や化学と比して、多数の要素が生み出す複雑な現象に目を向ける生物や地学など「理科第2分野」に分類される科学で特に顕著である。

スパースモデリング(SpM)とはこのような困難を解決するために提案されたモデル化/アルゴリズムの総称である(図1-3)。その基本的な考え方は(1)高次元データの説明変数が次元数よりも少ない(スパース)と仮定し、(2)説明変数の個数が小さくなることと、データへの適合とを同時に要請することにより、(3)人手に頼らない自動的な説明変数の選択を可能にする枠組みである。SpMの先駆は1980年代の後半に石川真澄が提案した人工神経回路網モデルの忘却付き構造学習である。2000年代半ばからはDonohoらが提唱している**圧縮センシング(CS)**が計測工学、通信工学、医用工学など幅広い分野で革新的情報抽出技術として大きな注目を集めている。

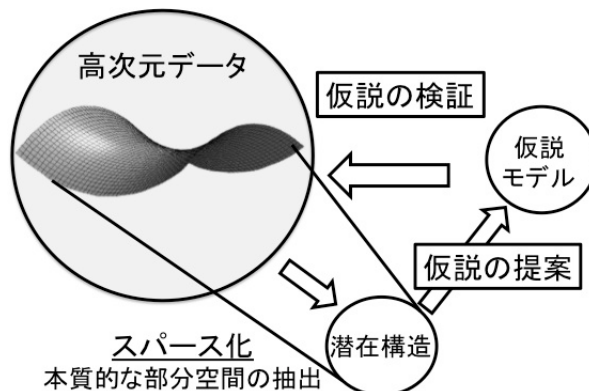


図1-3：SpMによる仮説/検証ループ

③ 関連する国内・国外の研究動向と本領域との関係をどのように位置づけているか

データ科学の時代が今まさに到来しつつあり、その中で、データベースの構築やソフトウェア開発など、ユーザーに対する情報の可用性を高めることを目的とした研究が多くなされている。一方、科学的知識抽出を目指すプロジェクトは、具体的なアルゴリズムや研究アプローチの模索段階である。

本応募領域は、大量の高次元データからの科学的知識抽出の系統的方法論の構築を推進するものである。その具体的方策として、(1)スパースモデリング(SpM)への重点投資、(2)複数の自然科学分野と情報科学分野との協同運営体制、(3)普遍性の探求による各分野間の壁の完全撤廃、の三点を基本戦略に掲げる。本応募領域が生み出す新たなデータ解析手法・科学的研究スタイルは、情報科学分野のみならず、ほぼ全ての自然科学領域に大きな波及効果を及ぼす。

④ 応募領域の着想に至った経緯

領域代表者を含めたモデル G(B01)および情報 G(C01)のメンバーは、図1-4に示すように、過去に二件の特定領域研究「確率的情報処理への統計力学的アプローチ」(平成14~17年度)および「情報統計力学の深化と展開」(以下DEX-SMI)(平成18~21年度)の採択経験がある。DEX-SMIの事後評価はAであり、「質、量ともに十分な研究業績が得られている。力量のある研究集団により、統計力学の分野で活力ある新領域が形成されつつある」とのコメントをいただいた。加えて、ヒアリングの場において、「今後は構築された学問体系の他分野への応用展開を期待する。」「枠組みの普遍性を見出すために、今後の**実験家との共同研究**を期待する。」との建設的で示唆に富むご指導をいただいた。以上コメントに基づき、DEX-SMIからの理論家のみによる運営体制と決別し、理科第2分野に属する生物学・地学の全域を含んだ実験家との協働体制を基礎とする運営体制を編成した。これにより、大量の高次元データから、仮説(モデル)を系統的に導く方法論を、生物学・地学分野に確立し、それを実践するための**研究体制のコア**を我が国に形成する。

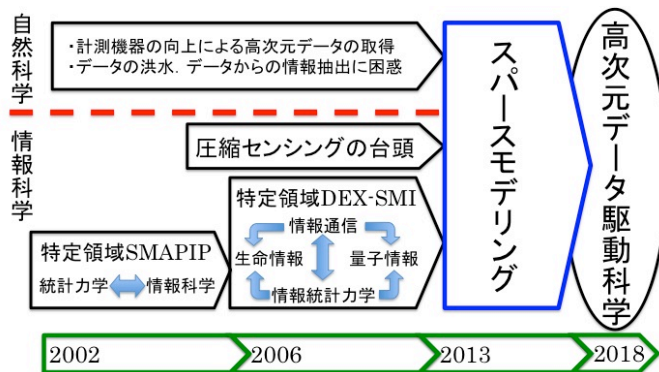


図1-4：応募領域の着想に至った経緯

## 2. 研究領域の設定目的の達成度（3 ページ以内）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記述してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目ごとの状況も記述してください。

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとしたのか

1. 研究領域の目的及び概要で述べた三つの重点目標 A: データ駆動科学の実践, B: モデリング原理の確立, C: 数理基盤の形成を領域の組織構成に反映し、図 2-1 の三層構造からなる、実験 G(A01, A02), モデル G(B01), 情報 G(C01)の研究項目をおき、図 2-2 の形で領域全体の研究推進を主導する総括班(X00)をおいた。この体制に基づき、本領域では以下に述べるデータ駆動科学の基本的考え方を定型化した基本学理、情報科学と自然科学の緊密な融合を推進するための指導原理、および自然科学で領域横断的にデータ解析を行うためのモデリング基盤を創成し、「高次元データ駆動科学」を確立した。

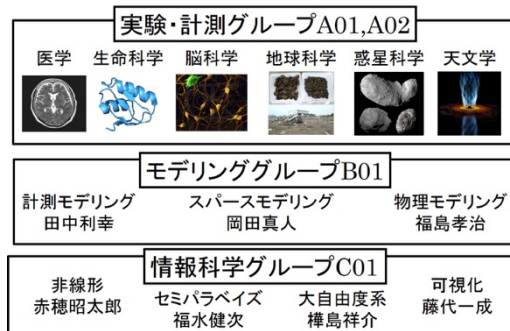


図 2-1：本領域の構成

### 高次元データ駆動科学におけるビジョン／学理の確立・展開

自然科学の発展は、円滑な仮説・検証ループに依拠する。仮説・検証ループを回す上で、計測データにフィットするモデルを探すことに留まらず、得られたモデルの妥当性の評価、および、妥当と判断されたモデルを前提知識とした新たなデータの解釈が重要である。この視点に立脚して、シンプルだが過度に単純化しすぎない普遍的なデータ解析手法の開発を推進し、「仮説・検証ループを回すための統計的手法の深化と創成」を図ることが本領域の基本学理として見出された。

また、情報科学と自然科学が緊密に協同するには、仮説・検証ループの共通認識が重要で、その協同体制に関する暗黙知を形式知に定型化した指導原理として David Marr の三つのレベルを参考にしたデータ駆動科学の三つのレベルが生まれた(図 2-3)。

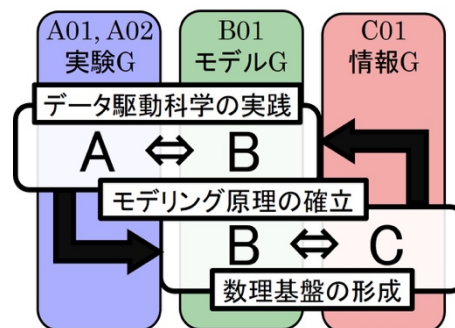


図 2-2：各研究項目の重点目標

三つのレベルは、1)自然言語として記述される自然科学の問題である計算理論のレベルと、2)その問題に最適な数理的定式化を見つけるモデリングのレベルと、3)定式化された問題を解く効率的な表現・アルゴリズムを開発するレベルで構成される。「三つのレベル」では、実験 G(A01,A02)と情報 G(C01)を接続するモデル G(B01)が、VMA(Virtual Measurement Analysis)と呼ばれる問題の本質を抽出したシンプルなトイモデルを作成することで、実験 G(A01,A02)と情報 G(C01)間の共通認識を確認し、議論の基盤を整備する。「三つのレベル」の枠組みを通じて、情報科学と自然科学が緊密に融合した革新的自然探求の方法論が確立し、自然科学の多数の個別分野が数理的手法を通して互いの問題の構造的類似性に気づき、領域の枠を超える幅広い有機的・横断的な共同研究が高速に推進された。

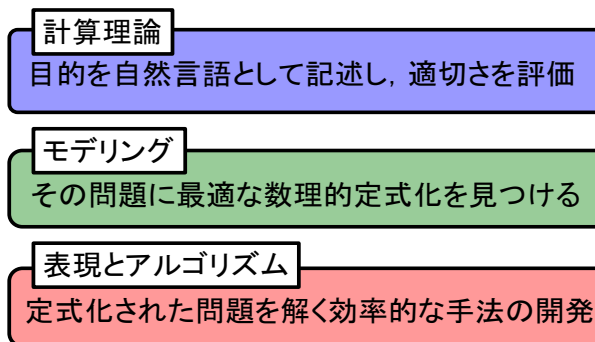


図 2-3：データ駆動科学の三つのレベル

### 高次元データ駆動科学のモデリング基盤

本領域では、上記の基本学理と指導原理に基づいて、SpM やベイズ推論に基づく様々な統計的手法を深化・創成し、領域横断的で爆発的な自然科学の発展を支える下記のモデリング基盤を構築した。

少数基底抽出に用いられる既存の SpM 手法である LASSO では、基底を用意する方法次第で次元削減性能が変化する。スパースモデリング班(B01-2)では、過完備基底を用いて理論的最適性能に近い優れた次元削減を実現した。また、自然科学の立場では人の恣意性を排除すべく、正則化項の重みは統計学的に説明できる形で自動的に定めたい。そこで大自由度班(C01-3)は、統計力学のキャピティ法に基づき、高速に交差検証誤差を推定して最適な重みを求める方法を開発し、統計的に説明可能な最適な基底選択を実現した。これら LASSO の

深化と創成により、LASSO を自然科学の仮説・検証ループに取り込むことに成功した。この成果は下記に述べるブラックホールの撮像に応用されている。

また、ベイズ推論に基づく仮説・検証ループを用いたモデル抽出の研究を推進した。SpMなどで潜在構造が抽出されたとき、これを生成モデルとし、ベイズ推論の前提知識として確率的に組み込むことにより、パラメータや構造の推定精度向上、信頼度推定が可能となる。この成果は下記に述べるNMRに応用されている。さらに、通常のベイズでは生成モデルが用意されているが、観測系の単純なモデル化が不可能な状況でも有効に動作するセミパラメトリックなベイズ推論法も構築した。その構成法として、ノンパラメトリックな手法の代表であるカーネル法とモンテカルロサンプリングを融合したカーネルモンテカルロフィルタ法を開発した。こうしたノンパラメトリック、パラメトリック、セミパラメトリックなベイズ推論に基づく手法も自然科学の仮説・検証ループに取り込むことに成功した。

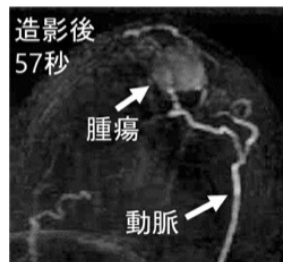
各々の領域や問題で生じる異なる要請に応じて一般に最適な統計的手法が変わるが、手法間の性能の違いを統一的に評価するための方法を確立することが、未知の問題に対処する指針を与えると考えた。そこで、本領域では状態密度つき全状態探索(ES-DoS)法を開発し、基底ごとの予測誤差からなる度数分布(統計物理の状態密度に対応する)に各手法で抽出された基底を写像することで、手法ごとの特性評価を可能にした。ES-DoS法により、乱立する統計的手法間の比較を普遍的に行えるようになり、仮説・検証ループを回すための統計的手法に関する統一的な見方が得られた。また、ES-DoS法により複数の最適組み合わせが存在する問題にもアプローチ可能となり、交換モンテカルロ法による高速近似計算も実現した。

### 高次元データ駆動科学の応用研究成果

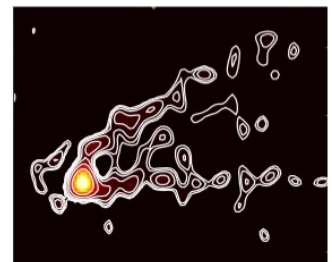
領域代表主導のもと、上記の基本学理と指導原理、モデリング基盤を領域内に浸透させることで、下記に述べるように、分野・階層を超えた共同研究が多数生まれ、1000件以上の学術論文として結実した。これは本領域から生まれた基本学理と指導原理・モデリング基盤の圧倒的な力強さの証左である。

#### ○SpMの深化と創成によるブラックホール撮像・MRI

モデル G(B01)や情報 G(C01)で深化・創成されたLASSOに基づき、天文学班(A02-3)は、電波干渉計の超解像画像復元技法の開発に取り組み、波長7mm帯のM87のVLBI観測画像復元に適用し、これまでで最も根元に近いところで、ブラックホール由来とされる相対論的ジェットの2又構造を分解できた(図2-4右)。2017年4月には、ALMA望遠鏡を含めた初めてのミリ波VLBI観測に成功し、2018年4月現在、データ較正や画像復元に取り組んでいる。本研究の集大成としていよいよブラックホールシャドウの直接撮像が現実のものになろうとしている。



MRI高速撮像



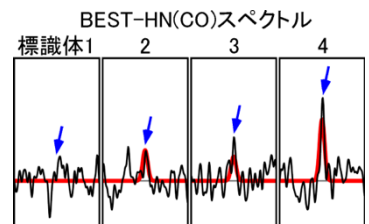
相対論的ジェットの撮像

図2-4: SpMによる高速撮像の実現

医学班(A01-1)は、MRIデータへの適用により従来の精度では診断困難な症状の早期発見を可能とした。脳卒中の原因となる脳血管病変を対象に、SpM撮像・再構成手法を最適化し、1/5の計測時間でも従来法と同画質を実現した。癌検診へ応用したところ、同データ量で時間分解能が30秒から6秒に短縮され、ガンとともにその栄養動脈と流出静脈の分離描出が可能となり、乳癌の新たな診断指標を提唱できた(図2-4左)。さらに1秒以下の時間分解能で撮像・再構成することで自由呼吸下に撮影した肝臓ダイナミックMRIから呼吸による画質劣化の除去法を開発した。これにより患者負担の大幅軽減と予防医療の革新をもたらすことができた。

#### ○ベイズ手法の深化と創成によるNMR

高分子量タンパク質や細胞内タンパク質のNMR解析では、信号重複や低い信号強度が解析の妨げとなる。モデル G(B01)や情報 G(C01)で深化・創成されたベイズ推論に基づく仮説・検証ループを用いたモデル抽出法により、生命科学班(A01-2)は、NMR信号から帰属に有用なアミノ酸情報を得る復号法を開発した。標識率などの事前知識を活用することで、解析困難であった重複信号や、雑音に埋もれた信号も復号可能となった。高濃度で存在する周囲の分子の影響で極めて信号強度が低く解析困難であった細胞内タンパク質も、この方法で復号可能となった(図2-5)。



—観測値 —モデル(アミノ酸L)  
図2-5: 細胞内ユビキチンタンパク質の信号からのアミノ酸情報の復号



### ○ES-DoS 法に基づく基底抽出

地球科学班(A02-1)は、2011年東北沖津波堆積物について、スパースモデリング班(B01-2)や物理モデリング班(B01-3)、セミパラメトリックベイズ班(C01-2)、大自由度班(C01-3)と協働することで、高精度な地球化学判別法を開発し、解の全状態探索(ES-DoS)法により、津波堆積物の起源や浸水プロセスに関する情報を抽出した。判別率の高いトップ50位について、使用する元素の組み合わせと判別率の重みを示した図2-6からは、ヒ素(As)や鉛(Pb)などの重金属類元素が津波堆積物に多く含有されることがわかる。これらの元素組み合わせの情報から、津波堆積物の起源が、鉱山起源の重金属類を多く含んだ沿岸域の海底堆積物であることが新たに明らかになった。

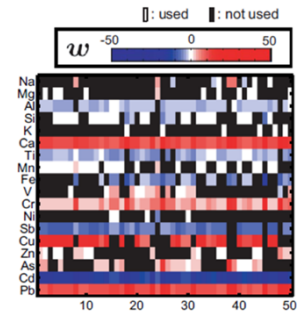


図 2-6 : 津波堆積物を判別する上位 50 位の元素セット

また、A02馬場公募班は、スパースモデリング班(B01-2)と共同で、ベイズ推論に基づいて海底水圧計から沿岸における即時津波高を予測する方法を開発した。本成果は Springer Nature の Change the World, One Article at a Time, Earth and Environmental Sciences 分野の論文として選出され、津波減災のための革新的な手法として評価を受け、本手法は東南海大地震での減災を目的に、徳島県の津波予測システムへの実装を現在進めている。日本の海底水圧計センサーの高密度化に伴い、モンテカルロ法による ES-DoS 法を用い、津波高の予測地点に応じた最適なセンサー群を求める手法を開発した。

さらに、スパースモデリング班(B01-2)と B01 市川公募班の協働で、心理学における NIRS(近赤外分光法)を用いた計測への ES-DoS による SpM を推進し、NIRS から、ASD(自閉症スペクトラム)児と ADHD(注意欠陥・多動性障害)児の判別を行った(図 2-7)。NIRS の多チャンネルデータに SVM 全状態探索法を適用し、二群を最も精度よく判別するチャンネル組合せを明らかにした。

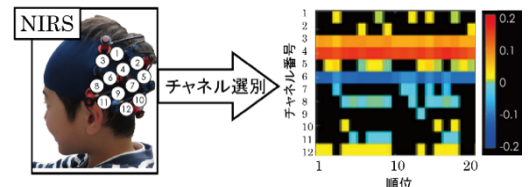


図 2-7 : ASD 児と ADHD 児の識別に寄与するチャンネルの選別

### 高次元データ駆動科学の展開：波及効果、若手人材育成、アウトリーチ

本領域が学界へ与えた最も大きいインパクトは、「高次元データ駆動科学」という既存の学問分野に属さない新しい融合型の学問分野が創成されたことである。「仮説・検証ループを回すための統計的手法の深化と創成」という基本学理と「データ駆動科学の三つのレベル」という指導原理に基づき、自然理解のための普遍的・系統的な数理・情報科学的手法の構築を実現し、学融合研究推進のロールモデルが出来上がった。JST CREST・さきがけの情報計測領域の戦略目標で本領域の活動が引用されたほか、三つのレベルの協同体制は、領域代表が MI(マテリアルズインフォマティクス)アドバイザーに任命されるなど(研)物質材料機構の統合型材料開発・情報基盤部門に影響を与えている。

本領域に参画した研究者は 985 人年であり、そのうち 39 歳以下の若手研究者は半数近い 437 人年である。領域参画したポスドク・RA・若手研究者から、主任研究員やさきがけ研究員など常勤研究職に計 52 名も就職し、次世代の高次元データ駆動科学を担う人材を着実に輩出した。自然科学の若手研究者は単に各分野に閉じることなく、最先端の情報科学手法の素養に触れることにより他の分野で有用な手法を逸早く取り入れられる柔軟性を身に着けた。一方、情報科学の若手研究者は、複数の自然科学分野に同時に取り組むことにより、異なって見える問題に潜む共通の構造を見出し頑健な数理手法を提案した。いずれの立場であろうと、データ駆動科学という観点で俯瞰的に学問全体を見渡すことのできる視野の広さを備え、そのような若手研究者が領域内で共同研究を行うことの相乗効果は絶大である。

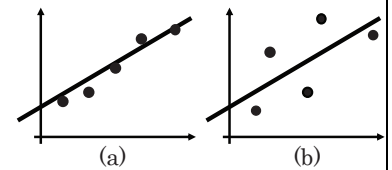
自然科学の仮説・検証ループの爆発的な加速を実現した高次元データ駆動科学であるが、この強力な方法論を領域外の研究者にも伝承すべく、キックオフシンポジウムや公募説明会(全国 25 箇所)、公開シンポジウム(参加のべ人数約 2 千人)に力を入れ、領域代表による招待講演を分野の内外を問わず幅広く行なった(合計 62 件)。また、領域内外との共同研究提案を続け、現場の問題背景に則ったうえでシンプルな解決法を提案してその効果を示した「その場」解析を行うことで、研究参入の敷居を下げる努力をした。こうした努力の結果、第一期公募時には当初募集予定の 4 倍以上となる 132 件もの応募があり、第二期公募時には 93 件の応募があった他、全国の幅広い自然科学・情報科学分野で高次元データ駆動科学・SpM が認知され、多数の研究組織・プロジェクト・学会セッションなどに導入されるまでに至っている。融合研究論文の数は、生物学や地球惑星科学において、平成 28 年度から 3~8 倍に数が増えている。また、企業等との共同研究は、平成 26 年度から 27 年度にかけて伸びており、全期間を通じてのべ 70 社以上と行われ、さらに、平成 30 年 3 月 31 日に開催された本領域主催の最終シンポジウムでは企業関係者の参加人数は半数を超え、産業界からの高い注目を浴びている。

### 3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1 ページ以内）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

本領域研究で創成された高次元データ駆動科学の肝は、情報統計で醸成された SpM を中心に、大量の高次元データを入力として、自然科学の仮説・検証ループを回すための**基本学理の確立**にあった。またその学理に基づく情報科学と自然科学の**融合のための指導原理の確立**も重要課題であった。基本学理と指導原理が確立し、その普遍的有効性が明らかになってからは、当初想定していなかった分野へのデータ駆動科学の**波及促進の方策**が課題となった。以下ではそれぞれの対応を説明する。

**データ駆動科学の基本学理**：仮説・検証ループを回す上で、計測データにフィットするモデルを探すことに留まらず、得られたモデルの妥当性の評価、および、妥当と判断されたモデルを前提知識とした新たなデータの解釈が重要である。この視点に立脚して、**シンプルだが過度に単純化しすぎない普遍的なデータ解析手法**の開発を推進し、「仮説・検証ループを回すための統計的手法の深化と創成」を図ることが本領域の基本学理であり、通常のデータマイニングとの相違である。



線形回帰の手法を例に本領域の学理を説明する。線形回帰では、与えられた観測データに対して最小二乗法を利用し右図(a)の回帰を得る。通常のデータマイニングではこの直線が得られた時点で満足である。しかし、データ分散が大きい場合(b)でも同じ直線となり、モデルパラメータ（直線の傾き・切片）からは(a)と(b)の違いを説明できず、仮説・検証ループに必要な仮説の棄却や比較ができない。データ駆動科学では、(b)の状況を信頼度が低いと判断し、モデルや計測精度と関連付けて**妥当性の議論**に還元して初めて仮説・検証ループが回る。また、**事前知識**（比例関係では切片 0）として得られた知見を新たな仮説提起に組み込む必要もある。単純な線形回帰でも生じるこの問題は、データ駆動科学において普遍的に存在する。

本領域では、SpM やベイズ推論、ES-DoS を、前提知識の取り込みとモデルの選択・評価・検証に用いる。ベイズ推論や SpM は統計学で既に確立された方法だが、自然科学の仮説・検証ループへ組み込むには、自然科学の制約に合わせた問題の再定式化による**既存手法の深化**と、自然科学での評価に必要な**新しい手法の創成**が必要であり、本領域では双方を対象とした。また、本過程で獲得した手法による情報科学の刷新も目指した。

**三つのレベルという指導原理に基づく情報科学と自然科学の融合**：情報科学と自然科学が協同する場合、仮説・検証ループの共通認識が重要だが、研究開始当初はこの点が不明瞭だった。惑星科学では、小惑星におけるスペクトルデータと元素組成データから惑星の分類を行う課題があった。当時、情報科学者は手法の新規性を追求し最新手法の改良を模索した結果、少数の基底抽出という問題の本質を見ずに、無限基底によるフィッティング法を検討した。一方、自然科学者は手法の妥当性には踏み込まずに問題のインパクトを語り、両者の議論は平行線を辿った。自然科学者は独自の目的だけを語り、情報科学者は得意な手法に固執することで連携研究が進展しない問題は、生命や医学、天文学分野でも見られ、本領域の連携に共通する本質の問題だとわかった。

そこで、打開策として考案されたのが**データ駆動科学の三つのレベル**である。項目 7 で詳述するが、本領域では三つのレベルに対応する組織構造を、領域開始時の我々の暗黙知に基づき編成していた。その情報科学者と自然科学者の**協同体制に関する暗黙知を形式知に定型化した指導原理**が三つのレベルである。この枠組みを通じて、自然科学の多数の個別分野が数理的手法を通して互いの問題の構造的類似性に気づき、自然科学者・情報科学者間の共同研究が高速に推進された。三つのレベルはデータ駆動科学のロールモデルとなり、物理学や化学・心理学などの新たな研究対象にもスムーズに適用できることがわかり、当初予想を遥かに超えた研究の広がり貢献した。

**他分野への波及促進**：上記学理と指導原理の確立により、高次元データ駆動科学が創成され、仮説・検証ループの爆発的な加速を実現した。この強力な方法論を広く伝承するため、領域内外との積極的な共同研究提案を続け、現場の問題背景に則った上でシンプルな解決法を提案してその効果を示した「その場」解析により、研究参入の敷居を下げる努力をした。さらには、領域代表による招待講演を分野の内外を問わず計 62 件行なった他、開催した公開シンポジウムではのべ約 2 千人の参加者を集めた。また、全国 25 箇所で開催したシンポジウムや公募説明会を開催し、第一期公募時は募集予定の 4 倍以上となる 132 件もの応募があり、第二期公募時には 93 件の応募があった。これら活動を通じて全国の幅広い自然科学・情報科学分野で高次元データ駆動科学・スパースモデリングが認知され、多数の研究組織・プロジェクト・学会セッション等に導入された。

#### 4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況（2ページ以内）

審査結果の所見及び中間評価において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

##### <審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況>

###### 審査結果の所見

(前略) 一方で、<sup>1</sup>この分野は国際的にも進展が早いため、情報処理・解析の一手法に終わってしまうのではないかとの意見もあった。<sup>2</sup>ビッグデータを取り扱うプログラム手法の中での本領域の位置付けや領域としての5年後の到達点を明確にした上で、研究を推進していくことが望まれる。

###### 所見への対応

下線部1 自然科学の発展は円滑な仮説・検証ループに依拠している。本領域では実験データから自然現象の背後にある潜在構造を読み解く方法を、データが対象とする学問分野によらない普遍的な形で体系化することに成功した。本領域は一貫して、仮説・検証ループを回すという自然科学の指導原理に根差して活動し、通常のデータマイニングのようなデータに適合するモデル獲得に満足することなく、モデルの妥当性評価や前提知識の活用といった仮説・検証ループを回す上で不可欠な解析手法の深化と創成を図り、シンプルだが過度に単純化しすぎない一連の普遍的なデータ解析の枠組みを構築する骨太な成果を残した。この貢献により、当初より計画された医学班(A01-1)のMRI高速診断や天文学班(A02-3)のブラックホール撮像のみならず、物性材料科学(B01 吉田公募班)や触媒化学(B01 佐々木公募班)をはじめとした領域横断的な成果が得られた。さらに、領域代表の所属研究科では高次元データ駆動科学教育プログラムが始まり、JST CREST・さきがけの情報計測領域の戦略目標で本領域の活動が引用されたほか、(研)物質材料機構の統合型材料開発・情報基盤部門のMI(マテリアルズインフォマティクス)全体に本領域で得られた学理や組織体制が影響を与えている。国立大学法人や国立研究開発法人を巻き込みデータ駆動科学の研究体制コアを我が国に形成したことは本領域の特筆すべき成果であり、間違いなく今後の自然科学の発展を支える強靱な屋台骨となるだろう。

下線部2 『The Fourth Paradigm』を著したJim Grayに代表されるように、「ビッグデータ」という概念は情報科学の研究者が作ったものであり、必ずしも自然科学の実情に即したものではなかった。本領域立ち上げ時は、各論的な例外事例を除いて自然科学とデータ科学は疎遠であった。自然科学では、大型の実験施設や計算機による大規模計測・計算により取得される高次元データを前にしてもなお、仮説検証ループを回すのに人間の直感で十分ではないかという考えが自然科学に蔓延していた。また、情報科学では、信号処理の分野で発展した圧縮センシングの手法がそのまま自然科学にも適用できるのではないかというような淡い期待があるのみであった。しかし、本領域はその活動を通じて様々な問題を詳らかにし解決してきた。例えば圧縮センシングの近似手法であるLASSOは効率的にビッグデータを処理できるように見えて、その結果はデータのノイズに対して敏感である。実験結果の解釈に人間の主観が入るのを防ぎたいという自然科学からの要請に応える方法論が情報科学には欠如していた。統計手法の深化と創成により、双方を接続するための問題に切り込むこと、これこそが本領域で目指す高次元データ駆動科学である。本領域の活動により高次元データ駆動科学が確立された今、本領域の自然科学者は統計的手法に基づいた仮説・検証ループへとシフトし、また情報科学者は自然科学の背景を考慮した手法開発を進めるようになっていく。このパラダイムシフトをもたらしたことは本領域の大きな貢献である。

##### <中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況>

中間評価の所見： A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)

###### 1. 総合所見

本研究領域は、大量の高次元データから科学的知識を抽出するための系統的方法論の構築を目指した、意欲的な提案である。様々な分野において実験・計測に関わる研究者と、数理的な分析技術に関わる研究者の密な連携を図るため、組織構成に工夫した点には独自性があり、領域代表者のリーダーシップにより活発な活動がなされている。発展の著しい分野であるが、当初の目標に沿った一定の成果が出ており、研究は順調に進んでいる。特に、若手研究者の育成に関しては、優れた実績が得られている。<sup>3</sup>今後の研究では、本研究領域の大きな目標である、スパースモデリングの一般的な指導原理の確立を期待したい。

2. 評価の着目点ごとの所見 (特に問題がない、もしくは十分な成果が出ているというコメントがあった点(2)研究成果, (3)研究組織, (4)研究費の使用, (6)各計画研究の継続に係る経費の適切性についての記述は省く)

(1) 研究の進展状況：当初の計画に基づき順調に進展している。モデリンググループにより、実験・データ収集と情報解析をつなぐアイデアはうまく機能している。個々の研究分野において、3つの研究項目を縦につなぐ成果が出ており、本研究領域の基本的な目標は十分に達成されつつある。また、審査意見に対する対応も、誠意をもってなされている。4 今後は、大きな目標であるデータ駆動科学の創成のための、領域全体を俯瞰する考え方を提示・共有することが期待される。

(5) 今後の研究領域の推進方策：これまで研究は概ね順調に推移しているため、今後も基本的には現在の方針で遂行することが望まれる。5 ただし、国内外において競合するプロジェクトもあるため、連携や組織の強化には、なお一層の取組みが必要である。

## 所見への対応

下線部 3 計算や計測を通じて得られる大量の高次元データから自然現象を記述するのに有効なモデルを獲得するために SpM は重要である。SpM を実践するには、データを説明する適切な少数変数を選ぶという工程が不可欠である。しかし、既存の変数選択アルゴリズムは、LASSO を筆頭に乱立し、自然科学の研究者を中心とするユーザにとってはどのアルゴリズムを使うべきかは悩ましい問題である。そこで、SpM の一般的なモデリング原理を確立するために ES-DoS 法の研究を領域一丸となって推進した。ES-DoS 法はスパースモデリング班(B01-2)で発明した枠組みであり、あらゆる変数の組合せについて説明性能を評価することにより、さまざまな SpM 手法の妥当性を一律かつ客観的に判断する指標を提供した。全状態探索法はスペクトル分解や動的モード分解、セミパラメトリックベイズなど事前知識を活用したりベイズ推論のような確率的取り扱いを要したりする課題にも広く応用可能であり、それによりデータ駆動科学の学理である様々な統計的手法を自然科学の仮説検証ループに取り込むための普遍的知見が得られた。また、こうした知見と方法論が情報科学に閉じることなく、自然科学の研究者とも共有されることにより、実際、医学班(A01-1)の MRI の撮像、生命科学班(A01-2)の NMR、脳科学班(A01-3)の高次視覚中枢の特徴探索、地球科学班(A02-1)の地球化学判別、惑星科学班(A02-2)の隕石分類、天文学班(A02-3)のブラックホール撮像をはじめとして幅広い自然科学分野の進展に寄与した。

下線部 4 データ駆動科学では、実験結果の解釈に人間の主観性が入るのを防ぎたいという自然科学側の問題と、その自然科学の要請に応える方法論の欠如という情報科学側の問題の双方に対して、統計手法の深化と創成により切り込むことは上記で説明した通りである。情報科学者と自然科学者が実際に協同するに当たっては「三つのレベル」という指導原理を持ち込み、「モデリング層」を通じて両者の意識を仮説検証ループへと共通化させることが、分野や問題を問わず円滑にプロジェクトを推進する上で重要であることを発見した。項目7で詳述するように暗黙知から形式知へと定型化された協同体制が計画研究だけでなく公募研究にも浸透した結果、公募研究から領域への積極的な貢献も数多く、当初想定されていた生物学・地学分野だけでなく物理学・化学や社会・人文科学にも及ぶ幅広い分野に跨る共同研究が成立した。三つのレベルの協同体制は、(研)物質材料機構の統合型材料開発・情報基盤部門の MI(マテリアルズインフォマティクス)全体にも受け継がれた。

下線部 5 本領域は情報科学の研究者と自然科学の研究者を内包し、かつ複数の分野の自然科学を並置するという国内外に類を見ない研究形態を創出したことを改めて強調したい。これにより、他の競合プロジェクトに先んじて自然科学データ解析の分野によらない普遍的方法論を追究できた。深く自然を知りたいという飽くなき探求心を抱く研究者のボトムアップにより自然科学を対象とした点は、社会問題の解決を目指したトップダウン組織である理研 AIP や産総研 AIRC とはその目的を異にする。また広範な自然科学分野を同時に議論することにより、特定の分野で得られたデータ解析技術が他の分野にも即座に転用され手法の普遍性を検証する機会を得て、「組合せ爆発」的に多数の研究成果を挙げられる研究者組織を構築した。これは bioinformatics の流れを汲む米国 Materials Genome Initiative (MGI) に代表される、単一の自然科学分野と情報科学分野の連携である「X-informatics」型のプロジェクトには不可能である。しかし本領域が国際会議を主催し国際活動支援活動を精力的に行う中で、欧州 Horizon2020 の eXtreme DataCloud (XDC) が平成 29 年 11 月に始まったことは注目に値する。XDC は生命科学・宇宙物理学・高エネルギー物理学・フォトンサイエンス・臨床医学研究を包括し、Cherenkov Telescope Array や欧州原子核研究機構 (CERN)、生物多様性や生態系を取り扱う LifeWatch Consortium のデータをクラウドプラットフォームで一元管理する体制を構築しデータハンドリングの標準化を目指している。こうした世界的潮流の中での本領域の優位性を維持するため、国際会議 HD<sup>3</sup>-2017 や国内シンポジウム等を通じた国内外の関連研究者との連携強化に不断の努力を重ねている。この好機を逸しないよう適切な投資がなされれば、将来のデータ駆動科学は持続的に発展するだろう。

## 5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

（3 ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限る こととします。

本領域では全体で 1038 件の学術論文が成果として得られた。以下研究項目ごとの代表的な成果を抜粋する。

A01-1 医学班：3 大成人病を対象に研究を行った。脳卒中の原因となる脳血管病変を対象に、計測モデリング班(B01-1)、スパースモデリング班(B01-2)と協働のもと、SpM により撮像・再構成手法を最適化し、1/5 のデータ収集でも従来法と同等の画質が得られることを示し、患者負担の大幅な軽減が期待されている。また、心臓における周期性を活用した画像再構成や、非線形班(C01-1)と共同で SpM 法を活用した超解像技術を冠動脈に応用した。癌診療では急速注入された造影剤のダイナミックな信号変化から悪性度診断が行われているが、SpM 法で時間分解能を 30 秒から 6 秒に短縮することで、ガンとともにその栄養動脈と流出静脈を分離描出し(図 5-1)、乳癌の新たな診断指標を提唱した。さらに 1 秒以下の時間分解能で撮像・再構成することで自由呼吸下に撮影した肝臓ダイナミック MRI から呼吸による画質劣化の除去法を開発した。

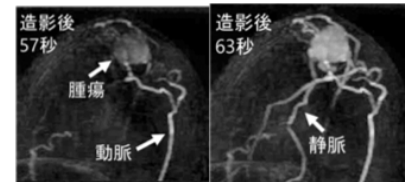
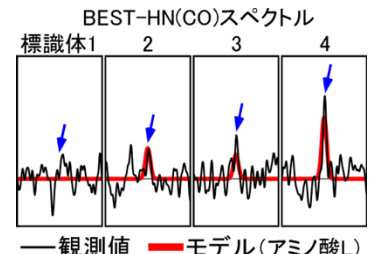


図 5-1：SPM 法によって時間分解能を向上した MRI 画像

A01-2 生命科学班：高分子量タンパク質や細胞内タンパク質の NMR 解析では、信号重複や低い信号強度が解析の妨げとなる。NMR 信号から帰属に有用なアミノ酸情報を得る符号化標識法について、計測モデリング班(B01-1)やスパースモデリング班(B01-2)、大自由度班(C01-3)と共同で、圧縮センシングやスペクトル分解を応用する復号法を開発した。標識率などの事前知識を活用することで、解析困難であった重複信号や、雑音に埋もれた信号も復号可能となった。高濃度で存在する周囲の分子の影響で極めて信号強度が低く解析困難であった細胞内タンパク質も、この方法で解析可能となった(図 5-2)。



— 観測値 — モデル(アミノ酸)  
図 5-2：細胞内ユビキチンタンパク質の信号からのアミノ酸情報の復号

A01-3 脳科学班：視覚中枢が捉えている物体像の特徴を明らかにするために、スパースモデリング班(B01-2)や非線形班(C01-1)と共同で、膨大な数の自然画像断片の中から高次視覚中枢が捉えている特徴を探索する計算論的アルゴリズムを開発した。これにより、1000 を超える物体像に対する神経応答をよく説明する特徴を同定することに成功した。図 5-3 は、「顔」によく反応する細胞が実は顔ではない特徴(図の赤枠部分)を捉えていることが明らかになった例である。この特徴から、私たちはこの細胞が「顔の向き」にどのように反応するかをも予測することができる(左図赤線)。実際、予測された反応性と実際の神経応答(左図、青線)はよく一致する。この成果は不変的な物体認識機構の解明につながると期待されている。

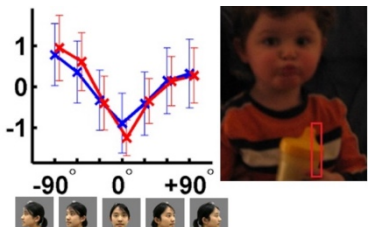


図 5-3：神経細胞の応答と神経細胞が応答する画像特徴量

A02-1 地球科学班：2011 年東北沖津波堆積物について、スパースモデリング班(B01-2)や物理モデリング班(B01-3)、セミパラメトリックベイズ班(C01-2)、大自由度班(C01-3)と協働することで、高精度な地球化学判別法を開発した。また、解の全状態探索法(ES-DoS)により、津波堆積物の起源や浸水プロセスに関する情報を抽出した。図 5-4 は、判別率の高いトップ 50 位について、使用する元素の組み合わせと判別率の傾きを示した図である。ヒ素(As)や鉛(Pb)などの重金属類元素が津波堆積物に多く含有することが見てとれる。これらの元素組み合わせの情報から、津波堆積物の起源が、鉱山起源の重金属類を多く含んだ沿岸域の海底堆積物であることが新たに明らかになった。

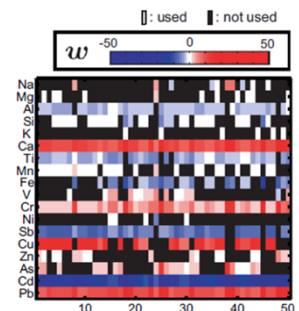


図 5-4：津波堆積物を判別する上位 50 位の元素セット

A02-2 惑星科学班：これまで隕石の分類は鉱物学的に組織や岩片の観察を行うことでなされてきたが、無人探査機でそのような綿密な観察を行うことは極めて困難である。そこで、スパースモデリング班(B01-2)と大自由度班

(C01-3)と共同で、無人探査機でも比較的観測が容易な、岩石の全岩組成データのみを用いて分類を試みた。隕石の全岩組成データをウォード法によってクラスター解析することにより、従来の岩石学・鉱物学による分類と調和的な分類が得られることがわかった(図 5-5)。さらに、主成分分析の負荷行列から本質的な元素の抽出を行い、Si, Na, Ca, Mg, Fe の 5 つの元素が最も代表的な元素であることがわかった。これらの元素を用いて k-means 法によって、全隕石を 8 個のクラスターへ分類したところ、PC1 が分化の度合い、PC2 が熱的変性の度合いを示すことがわかり、隕石学的な裏付けがとれた。

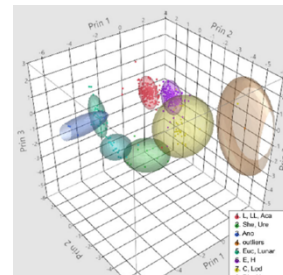


図 5-5 : 主要 5 元素による隕石クラスタ解析結果

A02-3 天文学班 : 計測モデリング班(B01-1)と大自由度班(C01-3)との協力のもと、電波干渉計の超解像画像復元技法の開発に取り組み、ブラックホールシャドウ撮像が可能な技法の開発に成功した。波長 7mm 帯の VLBI 観測データに新手法を適用して M87 の画像を復元したところ、従来比で 3 倍程度分解能が向上し、これまでで最も根元に近いところで相対論的ジェット の 2 叉構造を分解することができた(図 5-6)。さらに 2017 年 4 月には、ALMA 望遠鏡を含めた初めてのミリ波 VLBI 観測に成功し、2018 年 4 月現在データ較正や画像復元に取り組んでいる。本研究の集大成としていよいよブラックホールシャドウ撮像が現実のものになるとうしている。

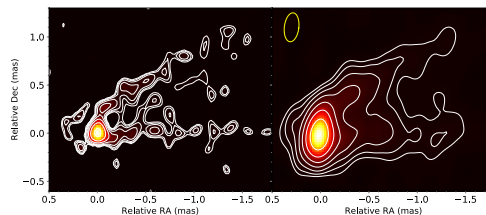


図 5-6 : M87 の 7mm 観測データから SpM(左)と従来法(右)で復元した画像

B01-1 計測モデリング班 : 医学班(A01-1)や天文班(A02-3)などと協力して、圧縮センシングを活用して、MRI や超長基線電波干渉計において少数の観測データから画像を再構成する方法を開発した。図 5-7 は、MR 分光画像法(MRSI)によってマウスに注入されたブドウ糖の代謝の時空間ダイナミクスを非侵襲的に可視化した結果の例である。注入されたブドウ糖が体内に広がり、腫瘍組織で嫌氣的に代謝され乳酸が産生されていく様子を見ることができる。圧縮センシングを使わない撮像法では一枚の画像の観測にも数時間を要し、ダイナミクスの計測は不可能であるが、提案手法では間引き観測により体内の生化学反応の時空間ダイナミクスを非侵襲的に可視化できることを示した。

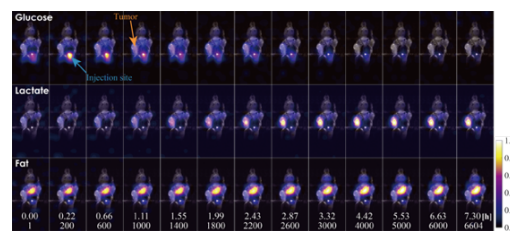


図 5-7: 圧縮センシングを用いた MR 分光画像法によって可視化されたマウス体内の代謝の時空間ダイナミクス。

B01-2 スパースモデリング班 : 分光分析で本計画研究が開発したスペクトル分解について幅広く展開するとともに、手法の深化を手がけた。図 5-8 左のように、時間分割にて計測されたスペクトルデータから、各スペクトルのピーク分離とピーク構造の時間変化を同時に抽出する手法を天文学班(A02-3)との協同で開発した。さらに、最適な説明変数の組合せについて網羅的に探索し、得られた状態密度(DoS)に対して、変数選択で得られた解をマッピングすることですべてのアルゴリズムを評価できる ES-DoS 法の枠組みを構築した。これにより、手法の種別を越えた客観的な妥当性判断指標の提供に成功した。提案手法を、天文班(A02-3)の Ia 型超新星の極大等級データに適用した結果(図 5-8 右)、LASSO より性能の高い組み合わせの変数を抽出できることが分かった。

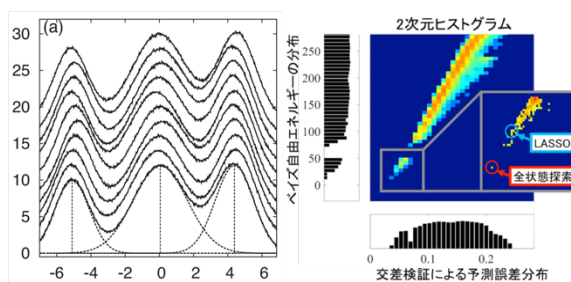


図 5-8 : 時間分割スペクトル分解(左), ES 法による密度分布推定と手法のマッピング

B01-3 物理モデリング班 : 実験・計測データに基づいて、その背後にあるダイナミクスを推定することは自然科学において最も重要な課題の一つである。典型例として、岩石-水相互作用を支配する不均質反応ダイナミクスに対するベイズ推論に基づいた推定アルゴリズムを地球科学班(A02-1)やセミパラメトリックベイズ班(C01-2)と共同開発した。図 5-9 に示すような実験系において、化学反応プロセスの中で時間的にまばらに部分観測される中間生成物のみから、反

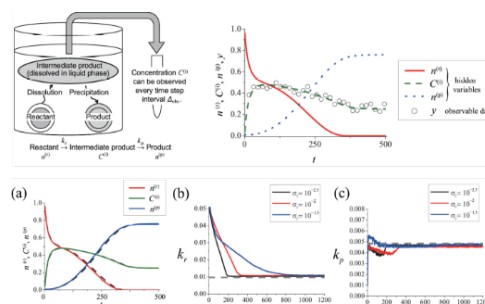


図 5-9 : 不均質化学反応ダイナミクスの部分観測からの反応定数推定

応ダイナミクスを支配する反応定数が推定可能であることが示された。また、人工データに対してノイズ強度や観測時間間隔の変化に伴う推定精度の頑健性を調べることで、実験系の計測データの信頼度について実験計画的知見を得ることができた。

**C01-1 非線形班**：多変量時系列から変数間の関係性を抽出する手法を開発した。多点電極を用いた脳活動データから神経細胞間の直接的な結合を抽出することを目的とし、脳科学班(A01-3)やスパースモデリング班(B01-2)と協働することで、従来対処できなかった結合関係の抽出法を開発した。脳活動の神経スパイクデータは、直接の結合ではなく何ステップか経由して結合されている細胞間も相関構造が抽出されてしまう。

また、多点計測とはいっても、数多くある神経細胞のうち観測されるのはごく一部だけのため、実際には観測されない細胞

からの変化も考慮する必要がある。提案手法はこれらの問題を考慮したものとなっており、具体的にラットを用いた実験でタスク遂行前・遂行中・遂行後での活動から結合関係を抽出した結果を図 5-10 に示してある。タスク遂行中にできた結合がタスク遂行後に残っている様子が観察される。

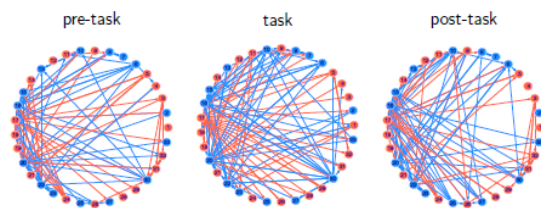


図 5-10：ラットに課した課題前後の結合の変化

**C01-2 セミパラメトリックベイズ班**：直接観測できない状態変数の遷移ダイナミクスと、その間接的な観測値とから、現在の状態を逐次的に推測するフィルタリングの問題において、観測系の単純なモデル化が不可能な状況でも有効に動作する、セミパラメトリックな逐次ベイズ推論法を 2 つ提案した。一つはモンテカルロサンプリングとカーネル法を融合したカーネルモンテカルロ(KMC)フィルタ、もう一つはガウス積分による陽なカーネル計算に基づく解析的方法である。両者をロボットの位置推定問題に適用した場合、ともに従来法に比べて推定精度が大幅に改善することが明らかとなった(図 5-11)。

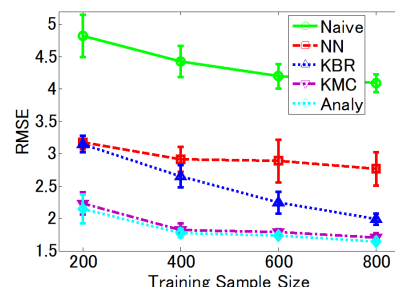


図 5-11：提案法によるロボット位置推定精度

**C01-3 大自由度班**：正則化を導入した統計的推定では、一般に、正則化項の強さをデータにもとづいて適切に定める必要がある。交差検証法はこの課題に対する汎用的な解決策を与えるが、計算負荷が高い、という欠点がある。我々は、スパース線形回帰に対し、統計力学由来の近似計算法であるキャビティ法のアイデアを用いることで、実際に交差検証することなしに、交差検証誤差を近似的に評価する方法を開発した。さらに、天文学班 (A02-3)、計測モデリング班 (B01-1) との協力の下、この方法をブラックホール撮像に関する画像再構成問題に適用し、必要な計算時間を従来の約 1/10 まで削減することに成功した(図 5-12)。

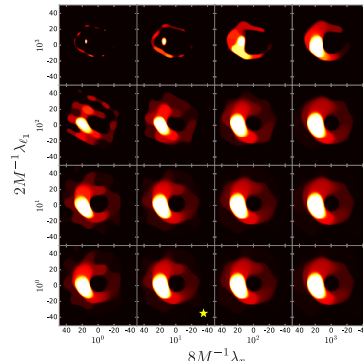


図 5-12：最良画像 (☆) が従来の 1/10 の計算時間で探索可能に

**C01-4 可視化班**：多次元スカラデータの次元とデータサンプルを対話的に同時クラスタリングする非対称バイクラスタリング視覚分析環境を開発し、天文学班(A02-3)が取り扱ってきた「Ia 型超新星」とよばれる天体の分類問題に適用した。同型の超新星は「シリコン吸収線の強度」と「ガスの膨張速度」を変数として分類することで「通常の系列」と「高速膨張する天体群」に分けられることが知られているが、図 5-13 に示す上記手法の適用結果のうち、下段中央の散布図に示される分類は、従来の天文学者による経験的な分類と概ね一致することがわかった。また、天体の距離指標として重要な「絶対等級 (明るさ)」はそれらの変数と弱い相関はあるが分散が大きく、絶対等級を決める物理要因は今回扱った変数以外にある可能性が示唆された。

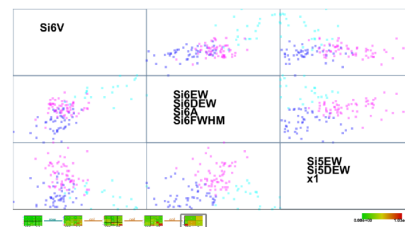


図 5-13：非対称バイクラスタリングによる Ia 型超新星データの分類

## 6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に\*印を付してください。
- 別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの（論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの）について記載したもののについては、冒頭に▲を付してください（前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください）。
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

<発表論文> 計 1,038 件(査読有 881 件, 査読無 157 件)

【A01-1】計 71 件 (査読有 71 件, 査読無 0 件)

- ▲ Ultrafast dynamic contrast-enhanced mri of the breast using compressed sensing: breast cancer diagnosis based on separate visualization of breast arteries and veins, \*N. Onishi, M. Kataoka, S. Kanao, H. Sagawa, M. Iima, M. D. Nickel, M. Toi, K. Togashi, *J Magn Reson Imaging*, 47(1), 97-104, 2018
- ▲ Magnetic resonance angiography with compressed sensing: An evaluation of moyamoya disease, T. Yamamoto, \*T. Okada, Y. Fushimi, A. Yamamoto, K. Fujimoto, S. Okuchi, H. Fukutomi, J.C. Takahashi, T. Funaki, S. Miyamoto, A.F. Stalder, Y. Natsuaki, P. Speier, K. Togashi, *PLoS One*, 13(1), e0189493, 2018
- ▲ Clinical evaluation of time-of-flight MR angiography with sparse undersampling and iterative reconstruction for cerebral aneurysms, \*Y. Fushimi, T. Okada, T. Kikuchi, A. Yamamoto, T. Okada, T. Yamamoto, M. Schmidt, K. Yoshida, S. Miyamoto, K. Togashi, *NMR Biomed*, 30(11), nbm.3774, 2017
- ▲ Non-contrast-enhanced 3D MR portography within a breath-hold using compressed sensing acceleration: A prospective noninferiority study, \*A. Ono, S. Arizono, K. Fujimoto, T. Akasaka, R. Yamashita, A. Furuta, H. Isoda, K. Togashi, *Magn Reson Imaging*, 43, 42-47, 2017
- ◎ ▲ Compressed Sensing 3-Dimensional Time-of-Flight Magnetic Resonance Angiography for Cerebral Aneurysms: Optimization and Evaluation, \*Y. Fushimi, K. Fujimoto, T. Okada, A. Yamamoto, T. Tanaka, T. Kikuchi, S. Miyamoto, K. Togashi, *Invest Radiol*, 51(4), 228-35, 2016
- ◎ ▲ Optimization of Regularization Parameters in Compressed Sensing of Magnetic Resonance Angiography: Can Statistical Image Metrics Mimic Radiologists' Perception?, \*T. Akasaka, K. Fujimoto, T. Yamamoto, T. Okada, Y. Fushimi, A. Yamamoto, T. Tanaka, K. Togashi, *PLoS One*, 11(1), e0146548, 2016
- ▲ Time-of-Flight Magnetic Resonance Angiography With Sparse Undersampling and Iterative Reconstruction: Comparison With Conventional Parallel Imaging for Accelerated Imaging, T. Yamamoto, \*K. Fujimoto, T. Okada, Y. Fushimi, A. F. Stalder, Y. Natsuaki, M. Schmidt, K. Togashi, *Invest Radiol*, 51(6), 372-8, 2016
- ▲ Grading meningioma: a comparative study of thallium-SPECT and FDG-PET, S. Okuchi, \*T. Okada, A. Yamamoto, M. Kanagaki, Y. Fushimi, T. Okada, M. Yamauchi, M. Kataoka, Y. Arakawa, J. C. Takahashi, S. Minamiguchi, S. Miyamoto, K. Togashi, *Medicine (Baltimore)*, 94(6), e549, 2015
- ▲ Visualization of lenticulostriate arteries at 3T: Optimization of slice-selective off-resonance sinc pulse-prepared TOF-MRA and its comparison with flow-sensitive black-blood MRA, S. Okuchi, \*T. Okada, K. Fujimoto, Y. Fushimi, A. Kido, A. Yamamoto, M. Kanagaki, T. Dodo, T. M. Mehemed, M. Miyazaki, X. Zhou, K. Togashi, *Acad Radiol*, 21(6), 812-6, 2014

【A01-2】計 29 件 (査読有 26 件, 査読無 3 件)

- ▲ Advances in NMR data acquisition and processing for protein structure determination, Experimental approaches of NMR spectroscopy -Methodology and application to life science and materials science, T. Ikeya, \*Y. Ito, *Springer*, 64-90, 2017
- ◎ ▲ Advances in stable isotope assisted labeling strategies with information science, \*T. Kigawa, *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 628, 17-23, 2017
- ◎ ▲ Selective isotope labeling strategy and computational interpretation of spectra for protein NMR analyses, \*T. Kasai, \*T. Kigawa, *Journal of Physics: Conference Series*, in press
- ◎ ▲ Impact of cellular health conditions on the protein folding state in mammalian cells, \*K. Inomata, H. Kamoshida, M. Ikari, Y. Ito, \*T. Kigawa, *Chemical Communications (Cambridge)*, 53(81), 11245-11248, 2017
- ▲ Improved in-cell structure determination of proteins at near-physiological concentration, \*T. Ikeya, T. Hanashima, S. Hosoya, M. Shimazaki, S. Ikeda, M. Mishima, P. Güntert, \*Y. Ito, *Sci. Rep.*, 6, 38312:1-11, 2016
- ◎ ▲ A Protein NMR Structure Refinement based on Bayesian Inference, \*T. Ikeya, S. Ikeda, T. Kigawa, Y. Ito, \*P. Güntert, *J. Phys. Conf. Ser.*, 699, 012003, 2016
- ◎ ▲ NMR spectral analysis using prior knowledge, \*T. Kasai, K. Nagata, M. Okada, \*T. Kigawa, *Journal of Physics: Conference Series*, 699(1), 012003, 2016
- ◎ ▲ Evaluation of the reliability of the maximum entropy method for reconstructing 3D and 4D NOESY-type NMR spectra of proteins, Y. Shigemitsu, T. Ikeya, A. Yamamoto, Y. Tsuchie, M. Mishima, B.O. Smith, P. Güntert, \*Y. Ito, *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 457, 200-205, 2015
- ◎ ▲ Influence of incomplete NOESY peaks of the interface residues on structure determinations of homodimeric proteins, \*Y.J. Lin, T. Ikeya, D.K. Kirchner, \*P. Güntert, *J. Chin. Chem. Soc.*, 61, 1297-1306, 2014

【A01-3】計 8 件 (査読有 8 件, 査読無 0 件)

- ▲ 3D topology of orientation columns in visual cortex revealed by functional optical coherence tomography, Y. Nakamichi, V.A. Kalatsky, H. Watanabe, T. Sato, U.M. Rajagopalan, \*M. Tanifuji, *J. Neurophysiol.*, in press, 2018
- Purkinje cells in the mouse cerebellar vermis directly project their axons to medial parabrachial nucleus, \*M. Hashimoto, A. Yamanaka, M. Tanifuji, H. Yaginuma, *Front Neural Circuit*, 12, 6, 2017
- ▲ Mechanisms for shaping receptive field in monkey area TE<sub>1</sub>, K. Obara, K. O'Hashi, \*M. Tanifuji, *J. Neurophysiol.*, 118, 2448-2457, 2017
- ▲ Functional optical coherence tomography of rat olfactory bulb with periodic odor stimulation, H. Watanabe, U.M. Rajagopalan, Y. Nakamichi, K. Igarashi, H. Kadono, \*M. Tanifuji, *Biomed. Opt. Express*, 7, 841-854, 2016
- ▲ Optical Intrinsic signal imaging for elucidating functional structures in higher visual area, \*T. Sato, M. Tanifuji, *Neurovascular coupling methods. M. Zhao, H. Ma, T.H. Schwartz (eds.) Humana Press.*, 161-175, 2014
- ▲ Stochastic process underlying emergent recognition of visual objects hidden in degraded images, \*Murata T, Hamada T, Shimokawa T, Tanifuji M, Yanagida T, *PLoS One*, 9(12), e115658, 2014
- ▲ Independent noise enhances synchronization in heterogeneous systems, G. Uchida, \*M. Tanifuji, *Journal of the Physical Society of Japan*, 83, 093801, 2014
- ▲ Object representation in inferior temporal cortex is organized hierarchically in a mosaic-like structure, Sato T, Uchida G, Lescroart M.D., Kitazono J, Okada M, \*Tanifuji M, *J Neurosci*, 33, 16642-16656, 2013

【A01-公募】計 109 件 (査読有 103 件, 査読無 6 件)

- ▲ 4D-MRI Reconstruction of Thoracoabdominal Organs in Free Breathing Using Low-Rank and Sparse Matrix Decomposition, Yukinojo Kitakami, Takashi Ohnishi, Yoshitada Masuda, Koji Matsumoto, \*Hideaki Haneishi, *Journal of Medical Imaging and Health Informatics*, in press
- ◎ ▲ Histone H3.3 sub-variant H3mm7 is required for normal skeletal muscle regeneration, A. Harada, K. Maehara, Y. Ono, H. Taguchi, K. Yoshioka, Y. Kitajima, Y. Xie, Y. Sato, T. Iwasaki, J. Nogami, S. Okada, T. Komatsu, Y. Semba, T. Takemoto, H. Kimura, H. Kurumizaka, \*Y. Ohkawa, *Nature Communications*, 9, 1400, 2018
- ▲ Deciphering hierarchical features in the energy landscape of adenylate kinase folding/unfolding, J. N. Taylor, M. Pirchi, G. Haran, \*T. Komatsuzaki, *The Journal of Chemical Physics*, 148, 123325-1-123325-14, 2018
- ▲ Phosphorylation-induced conformation of  $\beta$ 2-adrenoceptor related to arrestin recruitment revealed by NMR, \*Y. Shiraishi, M. Natsume, Y. Kofuku, S. Imai, K. Nakata, T. Mizukoshi, T. Ueda, H. Iwai, \*I. Shimada, *Nat. Commun.*, 9, 194, 2018
- ▲ Principal Components Analysis Based Unsupervised Feature Extraction Applied to Gene Expression Analysis of Blood from Dengue Haemorrhagic Fever Patients, \*YH Taguchi, *Scientific Reports*, 7, 44016, 2017
- ▲ Modeling and measurement of curing properties of photocurable polymer containing magnetic particles and microcapsules, Masato Yasui, \*Koji Ikuta, *Microsystems & Nanoengineering*, 3, 1-9, 2017
- ▲ SCoup: a probabilistic model based on the Ornstein-Uhlenbeck process to analyze single-cell expression data during differentiation, \*H. Matsumoto, H. Kiryu, *BMC Bioinformatics*, 17(1), 203-203, 2016
- ▲ Conductance of P2X<sub>4</sub> purinergic receptor is determined by conformational equilibrium in the transmembrane region, Y. Minato, S. Suzuki, T. Hara, Y. Kofuku, G. Kasuya, Y. Fujiwara, S. Igarashi, E. Suzuki, O. Nureki, M. Hattori, T. Ueda, \*I. Shimada, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 113, 4741-4746, 2016
- ▲ Dimensionality of Collective Variables for Describing Conformational Changes of a Multi-Domain Protein, Y. Matsunaga, Y. Komuro, C. Kobayashi, J. Jung, T. Mori, \*Y.



Sugita, *Journal of Physical Chemistry Letters*, 7, 1446-1451, 2016

36. ◎▲ Structure determination of uniformly <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N labeled protein using qualitative distance restraints from MAS solid-state <sup>13</sup>C-NMR observed paramagnetic relaxation enhancement, H. Tamaki, A. Egawa, K. Kido, T. Kameda, M. Kamiya, T. Kikukawa, T. Aizawa, T. Fujiwara, \*M. Demura, *Journal of Biomolecular NMR*, 64, 87-101, 2016
37. ◎▲ Multivariate analysis of magnetic resonance imaging signals of the human brain, \*Y. Miyawaki, *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 16, 2685 - 2693, 2016
38. ◎▲ Development of a method for reconstruction of crowded NMR spectra from undersampled time-domain data, T. Ueda, C. Yoshiura, M. Matsumoto, Y. Kofuku, J. Okude, K. Kondo, Y. Shiraishi, K. Takeuchi, \*I. Shimada, *J. Biomol. NMR*, 62, 31-41, 2015
39. ◎▲ Conformational equilibrium of  $\mu$ -opioid receptor determines its efficacies and functional selectivities, J. Okude, T. Ueda, Y. Kofuku, M. Sato, N. Nobuyama, K. Kondo, Y. Shiraishi, T. Mizumura, K. Onishi, M. Natsume, M. Maeda, H. Tsujishita, T. Kuranaga, M. Inoue, \*I. Shimada, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 53, 13376-13379, 2015
40. ▲ Nuclear dynamical deformation-induced hetero- and euchromatin positioning, \*A. Awazu, *Phys. Rev. E*, 92, 032709, 2015
41. ▲ Sequential data assimilation for single-molecule FRET photon-counting data, Y. Matsunaga, A. Kidera, \*Y. Sugita, *Journal of Chemical Physics*, 142, 214115:1-12, 2015
42. ◎▲ Functional dynamics of deuterated  $\beta$ 2-adrenergic receptor in lipid bilayers revealed by NMR Spectroscopy, Y. Kofuku, T. Ueda, J. Okude, Y. Shiraishi, K. Kondo, T. Mizumura, S. Suzuki, \*I. Shimada, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 53, 13376-13379, 2014
- 【A02-1】計 62 件 (査読有 56 件, 査読無 6 件)
43. ◎▲ Development of a predictive model for lead, cadmium and fluorine soil-water partition coefficients using sparse multiple linear regression analysis, K. Nakamura, \*T. Yasutaka, \*T. Kuwatani, T. Komai, *Chemosphere*, 186, 501-509, 2017
44. ◎▲ Statistical evaluation of two probability density functions for the microboudin palaeopiezometer, \*T. Matsumura, T. Kuwatani, T. Masuda, *Earth, Planets and Space*, 69, 83:1-12, 2017
45. ◎▲ Statistical model selection between elastic and Newtonian viscous matrix models for the microboudin palaeopiezometer, \*T. Matsumura, T. Kuwatani, T. Masuda, *Earth, Planets and Space*, 69, 83:1-12, 2017
46. ◎▲ Extraction of heavy metals characteristics of the 2011 Tohoku tsunami deposits using multiple classification analysis, \*K. Nakamura, T. Kuwatani, Y. Kawabe, T. Komai, *Chemosphere*, 144, 1241-1248, 2016
47. ◎▲ Free-energy landscape and nucleation pathway of polymorphic minerals from solution in a Potts lattice-gas model, \*A. Okamoto, T. Kuwatani, T. Omori, K. Hukushima, *Physical Review E*, 92, 042130:1-9, 2015
48. ◎▲ Markov-random-field modeling for linear seismic tomography, \*T. Kuwatani, K. Nagata, M. Okada, M. Toriumi, *Physical Review E*, 90, 042137:1-7, 2014
49. ◎▲ Machine-learning techniques for geochemical discrimination of 2011 Tohoku tsunami deposits, \*T. Kuwatani, K. Nagata, M. Okada, T. Watanabe, Y. Ogawa, T. Komai, N. Tsuchiya, *Scientific Reports*, 4, 7077:1-6, 2014
50. ◎▲ Markov random field modeling for mapping geofluid distributions from seismic velocity structures, \*T. Kuwatani, K. Nagata, M. Okada, M. Toriumi, *Earth, Planets and Space*, 66, 5:1-9, 2014
- 【A02-2】計 43 件 (査読有 35 件, 査読無 8 件)
51. ▲ Experimental study of heterogeneous organic chemistry induced by far ultraviolet light: Implications for growth of organic aerosols by CH<sub>3</sub> addition in the atmospheres of Titan and early Earth, \*P.K. Hong, Y. Sekine, T. Sasamori, S. Sugita, *Icarus*, 307, 25-39, 2018
52. Spectral decomposition of asteroid Itokawa based on principal component analysis, \*S.C. Koga, S. Sugita, S. Kamata, M. Ishiguro, T. Hiroi, E. Tatsumi, S. Sasaki, *Icarus*, 299, 386-395, 2018
53. ▲ Effects of primitive photosynthesis on Earth's early climate system, \*K. Ozaki, E. Tajika, P.K. Hong, Y. Nakagawa, C.T. Reinhard, *Nature Geoscience*, 11, 55-59, 2017
54. ◎▲ Cluster analysis on the bulk elemental compositions of Antarctic stony meteorites, \*H. Miyamoto, T. Niihara, T. Kuritani, P.K. Hong, J.M. Dohm, S. Sugita, *Meteoritics & Planetary Science*, 51, 906-919, 2016
55. ▲ Intensive hydration of the wedge mantle at the Kuril arc-NE Japan arc junction: implications from mafic lavas from Usu Volcano, northern Japan, \*T. Kuritani, M. Tanaka, T. Yokoyama, M. Nakagawa, A. Matsumoto, *Journal of Petrology*, 57 (6), 1223-1240, 2016
56. ◎▲ An automatic deconvolution method for Modified Gaussian Model using the Exchange Monte Carlo method: application to reflectance spectra of synthetic clinopyroxene, \*P.K. Hong, H. Miyamoto, T. Niihara, S. Sugita, K. Nagata, J.M. Dohm, M. Okada, *Journal of Geology & Geophysics*, 5: 3, 1-15, 2016
57. ▲ Production of sulphate-rich vapour during the Chicxulub impact and implications for ocean acidification, \*S. Ohno, T. Kadono, K. Kurosawa, T. Hamura, T. Sakaiya, K. Shigemori, Y. Hironaka, T. Sano, T. Watari, K. Otani, T. Matsui, S. Sugita, *Nature Geoscience*, 7, 279-282, 2014
58. ▲ Primary melt from Sannome-gata volcano, NE Japan arc: constraints on generation conditions of rear-arc magmas, \*T. Kuritani, T. Yoshida, J. Kimura, T. Takahashi, Y. Hirahara, T. Miyazaki, R. Senda, Q. Chang, Y. Ito, *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 167, 1-18, 2014
- 【A02-3】計 117 件 (査読有 116 件, 査読無 1 件)
59. ▲ Disk-driven rotating bipolar outflow in Orion Source I, \*T. Hirota, M. N. Machida, Y. Matsushita, K. Motogi, N. Matsumoto, M. K. Kim, R. A. Burns, M. Honma, *Nature Astronomy*, 1, id.0146(1-5), 2017
60. ▲ Superresolution Full-polarimetric Imaging for Radio Interferometry with Sparse Modeling, \*K. Akiyama, S. Ikeda, M. Pleau, V. L. Fish, F. Tazaki, K. Kuramochi, A. E. Broderick, J. Dexter, M. Mościbrodzka, M. Gowanlock, M. Honma, S. S. Doeleman, *The Astronomical Journal*, 153(4), id.159(10pp.), 2017
61. ◎▲ Optical polarization variations in the blazar PKS 1749+096, \*M. Uemura, R. Itoh, I. Liodakis, D. Blinov, M. Nakayama, L. Xu, N. Sawada, H.-T. Wu, I. Fujishiro, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 69 · 96, 1-12, 2017
62. ▲ Imaging the Schwarzschild-radius-scale Structure of M87 with the Event Horizon Telescope Using Sparse Modeling, \*K. Akiyama, K. Kuramochi, S. Ikeda, V. L. Fish, F. Tazaki, M. Honma, 他 7 名, *The Astrophysical Journal*, 838(1), id.1(13pp.), 2017
63. ▲ Repetitive patterns in rapid optical variations in the nearby black-hole binary V404 Cygni, \*Mariko Kimura, Keisuke Isogai, Taichi Kato, ..., Makoto Uemura, 他 64 名, *Nature*, 529, 54-58, 2016
64. The host galaxy of a fast radio burst, \*E. F. Keane, S. Johnston, S. Bhandari, E. Barr, N. D. R. Bhat, M. Burgay, M. Caleb, C. Flynn, A. Jameson, M. Kramer, E. Petroff, A. Possenti, W. van Straten, M. Bailes, S. Burke-Spolaor, R. P. Eatough, B. W. Stappers, T. Totani, M. Honma, H. Furusawa, *Nature*, 530(7591), 453-456, 2016
65. ▲ ALMA Imaging of Millimeter/Submillimeter Continuum Emission in Orion KL, \*T. Hirota, M. K. Kim, Y. Kuroko, M. Honma, *The Astrophysical Journal*, 801(2), id.82(17pp.), 2015
66. ◎▲ Variable selection for modeling the absolute magnitude at maximum of Type Ia supernovae, \*M. Uemura, K. S. Kawabata, S. Ikeda, K. Maeda, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 67(559), 1-9, 2015
67. ▲ Doppler tomography by total variation minimization, \*M. Uemura, T. Kato, D. Nogami, R. Mennickent, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 67(22), 1-12, 2015
68. ▲ 230 GHz VLBI Observations of M87: Event-horizon-scale Structure during an Enhanced Very-high-energy  $\gamma$ -Ray State in 2012, \*K. Akiyama, R. - S. Lu, V. L. Fish, S. S. Doeleman, A. E. Broderick, J. Dexter, K. Hada, M. Kino, H. Nagai, M. Honma, 他 10 名, *The Astrophysical Journal*, 807(2), id.150(11pp.), 2015
69. ▲ Anti-correlated Optical Flux and Polarization Variability in BL Lac, \*H. Gaur, A. C. Gupta, P. J. Wiita, M. Uemura, R. Itoh, M. Sasada, *The Astrophysical Journal Letters*, 781(L4), 1-5, 2014
70. ▲ Super-resolution imaging with radio interferometry using sparse modeling, \*M. Honma, K. Akiyama, M. Uemura, S. Ikeda, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 66(5), id.95(14pp.), 2014
- 【A02-公募】計 41 件 (査読有 36 件, 査読無 5 件)
71. ◎▲ Selection of tsunami observation points suitable for database-driven prediction, \*Junichi Taniguchi, Kyohei Tagawa, Masashi Yoshikawa, Yasuhiko Igarashi, Tsuneo Ohsumi, Hiroyuki Fujiwara, Takane Hori, \*Masato Okada, Toshitaka Baba, *Journal of Disaster Research*, 13(2), 245-253, 2018
72. ▲ Atomic-scale visualization of surface-assisted orbital order, H. Kim, \*Y. Yoshida, C. -C. Lin, T. -R. Chang, H. -T. Jeng, H. Lin, Y. Haga, Z. Fisk, Y. Hasegawa, *Science Advances* 3, 3, eaao0362, 2017
73. ▲ Revisiting the oscillations in the cosmic microwave background angular power spectra at  $l \sim 120$  in the Planck 2015 data, \*Koichiro Horiguchi, Kiyotomo Ichiki, Jun'ichi Yokoyama, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, Volume 2017 Issue 9, id.093E01, 2017
74. ◎▲ Discontinuous boundaries of slow slip events beneath the Bungo Channel, southwest Japan, \*R. Nakata, H. Hino, T. Kuwatani, S. Yoshioka, M. Okada, T. Hori, *Scientific Reports*, 7, 6129, 2017
75. ◎▲ Numerical study on jet-wake vortex interaction of aircraft configuration, \*T. Misaka, S. Obayashi, *Aerospace Science and Technology*, 70, 615-625, 2017
76. ◎▲ Ni grade distribution in laterite characterized from geostatistics, topography and the paleo-groundwater system in Sorowako, Indonesia, A. Ilyas, K. Kashiwaya, \*K. Koike, *Journal of Geochemical Exploration*, 165, 174-188, 2016
77. ◎▲ Geodetic inversion for spatial distribution of slip under smoothness, discontinuity, and sparsity constraints, \*R. Nakata, T. Kuwatani, M. Okada, T. Hori, *Earth Planets Space*, 1, 1-10, 2016
78. ▲ Face Inversion Decreased Information about Facial Identity and Expression in Face-Responsive Neurons in Macaque Area TE, \*Y. Sugase-Miyamoto, N. Matsumoto, K. Ohyama, K. Kawano, *Journal of Neuroscience*, 34, 12457-12469, 2014
79. ▲ Scanning tunneling microscopy/spectroscopy of picene thin films formed on Ag(111), \*Y. Yoshida, H. -H. Yang, H. -S. Huang, S. -Y. Guan, S. Yanagisawa, T. Yokosuka, M. -T. Lin, W. -B. Su, C. -S. Chang, G. Hoffmann, \*Y. Hasegawa, *J. Chem. Phys.*, 141, 114701, 2014
- 【B01-1】計 39 件 (査読有 39 件, 査読無 0 件)
80. ▲ "Slow-scanning" in ground-based mid-infrared observations, \*Ryou Ohsawa, Shigeyuki Sako, Takashi Miyata, Takafumi Kamizuka, Kazushi Okada, Kiyoshi Mori, Masahito S. Uchiyama, Junpei Yamaguchi, Takuya Fujiyoshi, Mikio Morii, Shiro Ikeda, *The Astrophysical Journal*, 857, 37, 2018

81. ▲Data compression for the Tomo-e Gozen using low-rank matrix approximation, \*Mikio Morii, Shiro Ikeda, Shigeyuki Sako, Ryo Ohsawa, *The Astrophysical Journal*, 835, 1, 2017
82. ▲Sparse modeling approach to analytical continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data, \*Junya Otsuki, Masayuki Ohzeki, Hiroshi Shinaoka, Kazuyoshi Yoshimi, *Physical Review E*, 95, 1-6, 2017
83. ▲PRECL: A new method for interferometry imaging from closure phase, \*Shiro Ikeda, Fumie Tazaki, Kazunori Akiyama, Kazuhiro Hada, Mareki Honma, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 68, 45, 2016
84. ▲Statistical mechanical models of the integer factorization problem, \*Chihiro H. Nakajima and Masayuki Ohzeki, *Journal of the Physical Society of Japan*, 86, 14001, 2016
85. ▲L1-regularized Boltzmann machine learning using majorizer minimization, \*M. Ohzeki, *Journal of Physical Society of Japan*, 84, 54801, 2015
86. ▲Entropic risk minimization for nonparametric estimation of mixing distributions, \*Kazuho Watanabe and Shiro Ikeda, *Machine Learning*, 99, 119-136, 2015
87. ▲Detection of cheating by decimation algorithm, \*S. Yamanaka, M. Ohzeki, A. Decelle, *Journal of Physical Society of Japan*, 84, 24801, 2015
88. ▲Bin mode estimation methods for Compton camera imaging, \*S. Ikeda, H. Odaka, M. Uemura, T. Takahashi, S. Watanabe, S. Takeda, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, 760, 46-56, 2014
89. ▲Belief Propagation with multipoint correlation and its application to inverse problem, \*Masayuki Ohzeki, *Journal of Physics: Conference Series*, 473, 12005, 2013  
【B01-2】計43件 (査読有43件, 査読無0件)
90. ◎▲ES-DoS: Exhaustive search and density-of-states estimation as a general framework for sparse variable selection, Yasuhiko Igarashi, Hiroko Ichikawa, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Hikaru Takenaka, Daiki Kawabata, Satoshi Eifuku, Ryoji Tamura, Kenji Nagata, Masato Okada, *Journal of Physics: Conference Series*, in press
91. ◎▲Analysis of Coherent Phonon Signals by Sparsity-promoting Dynamic Mode Decomposition, Shin Murata, Shingo Aihara, Satoru Tokuda, Kazunori Iwamitsu, Kohji Mizoguchi, Ichiro Akai, Masato Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 87, 1-5, 2018
92. ◎▲Exhaustive Search for Sparse Variable Selection in Linear Regression, Yasuhiko Igarashi, Hikaru Takenaka, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Makoto Uemura, Shiro Ikeda, Masato Okada, *Journal of Physics Society of Japan*, No.4, 044802, 2018
93. ◎▲Bayesian inference of metal oxide ultrathin film structure based on crystal truncation rod measurements, Masato Anada, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Masato Okada, Tsuyoshi Kimura, \*Yusuke Wakabayashi, *Journal of Applied Crystallography*, Vol. 50, pp.1611-1616, 2017
94. ▲Sparse approximation based on a random overcomplete basis, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Tomoyuki Obuchi, Masato Okada, \*Yoshiyuki Kabashima, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016, 063302, 2016
95. ▲Three levels of data-driven science, Yasuhiko Igarashi, Kenji Nagata, Tatsu Kuwatani, Toshiaki Omori, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Masato Okada, *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012001, 2016
96. ◎▲Extraction of Latent Dynamical Structure from Time-series Spectral Data, Shin Murata, Kenji Nagata, Makoto Uemura, \*Masato Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 85(10), 104003, 2016
97. ◎▲Maximum tsunami height prediction using pressure gauge data by a Gaussian process at Owase in the Kii Peninsula, Japan, Yasuhiko Igarashi, Takane Hori, Shin Murata, Kenichiro Sato, Toshihiko Baba, \*Masato Okada, *Marine Geophysical Research*, 37(4), 361, 2016
98. ◎▲Bayesian Approach to Effective Model of NiGa2S4 Triangular Lattice with Boltzmann Factor, Hikaru Takenaka, Kenji Nagata, Takashi Mizokawa, \*Masato Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 86(12), 124003, 2016
99. ◎▲An exhaustive search and stability of sparse estimation for feature selection problem, K. Nagata, J. Kitazono, S. Nakajima, S. Eifuku, R. Tamura, \*M. Okada, *IJPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications*, 8(2), 23-30, 2015
100. ◎▲Model selection of NiGa2S4 triangular lattice by Bayesian inference, Hikaru Takenaka, Kenji Nagata, Takashi Mizokawa, \*Masato Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 83, 124706, 2014
101. ▲Distribution estimation of hyperparameters in Markov random field models, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Kenji Nagata, Havaru Shouno, \*Masato Okada, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(4), 045001, 2014  
【B01-3】計36件 (査読有34件, 査読無2件)
102. ▲Real-Space Analysis of Scanning Tunneling Microscopy Topography Datasets Using Sparse Modeling Approach, \*Masamichi J. Miyama, Koji Hukushima, *Journal of Physical Society of Japan*, 87(4), 044801-1-8, 2018
103. ▲Bayesian optimization for computationally expensive probability distributions, \*Ryo Tamura, Koji Hukushima, *PloS one*, 13(3), e0193785, 2018
104. ◎▲Frame rate upconversion using sparse spatio-temporal auto regressive model, Y. Tanaka, D. Kishimoto, \*T. Omori, *Proceedings of 18th International Symposium on Advanced Intelligent Systems*, 107-114, 2017
105. ◎▲Belief propagation for probabilistic slow feature analysis, \*T. Omori, T. Sekiguchi, M. Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 86, 084802:1-6, 2017
106. ▲Irreversible simulated tempering, \*Yuji Sakai, Koji Hukushima, *Journal of the Physical Society of Japan*, 85(10), 104002-1-7, 2016
107. ◎▲Extracting nonlinear spatiotemporal dynamics in active dendrites using data-driven statistical approach, \*T. Omori, K. Hukushima, *Journal of Physics: Conference Series*, 699(1), 012011:1-8, 2016
108. ▲Typical performance of approximation algorithms for NP-hard problems, \*S. Takabe, K. Hukushima, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016, 113401:1-21, 2016
109. ◎▲Compressed sensing in scanning tunneling microscopy/spectroscopy for observation of quasi-particle interference, Y. Nakanishi-Ohno, M. Haze, Y. Yoshida, K. Hukushima, Y. Hasegawa, \*M. Okada, *Journal of the Physical Society of Japan*, 85(9), 093702:1-5, 2016
110. ◎▲Bayesian inversion analysis of nonlinear dynamics in surface heterogeneous reactions, \*T. Omori, T. Kuwatani, A. Okamoto, K. Hukushima, *Physical Review E*, 94, 033305:1-11, 2016
111. ◎▲Sparse estimation of spike-triggered average, S. Yotsukura, T. Omori, K. Nagata, \*M. Okada, *IJPSJ Transaction on Mathematical Modeling and Its Applications*, 7(1), 52-58, 2014  
【B01-公募】計121件 (査読有75件, 査読無46件)
112. ▲Application of the inverse Batschelet distribution to measuring the preferred orientation of tourmaline grains, \*T. Matsumura, T. Kuwatani, Y. Ando, T. Masuda, *the Journal of Structural Geology*, in press
113. ▲Bayesian Spectroscopy of Admixed Photoluminescence Spectra with Exciton, Biexciton and Electron Hole Droplet States in a GaAs/AlAs Type-II Superlattice, \*K. Iwamitsu, Y. Furukawa, M. Nakayama, M. Okada, I. Akai, *J. Lumin.*, 197, 18-22, 2018
114. ▲White noise analysis for the correlation-type elementary motion detectors with half-wave rectifiers, \*H. Ikeda, T. Aonishi, *Neural Networks*, 102, 96-106, 2018
115. ▲High precision modeling of a damped oscillation in coherent phonon signals by Bayesian inference, \*S. Aihara, M. Hamamoto, K. Iwamitsu, M. Okada, I. Akai, *AIP Adv.*, 7, 045107, 2017
116. ▲Preconditioned dynamic mode decomposition and mode selection algorithms for large datasets using incremental proper orthogonal decomposition, \*Y. Ohmichi, *AIP Advances*, 7(7), 075318, 2017
117. ▲Multiuser Detection based on MAP Estimation with Sum-of-Absolute-Values Relaxation, H. Sasahara, \*K. Hayashi, M. Nagahara, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 65(21), 5621-5634, 2017
118. ▲Mean Squared Error Analysis of Quantizers with Error Feedback, \*S. Ohno, T. Shiraki, M. R. Tariq, M. Nagahara, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 65(22), 5970-5981, 2017
119. ◎▲Cu Diffusion in Amorphous Ta2O5 Studied with a Simplified Neural Network Potential, \*W. Li, Y. Ando, S. Watanabe, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 86, 104004, 2017
120. ◎▲Study of Li atom diffusion in amorphous Li3PO4 with neural network potential, \*W. Li, Y. Ando, E. Minamitani, and S. Watanabe, *J. Chem. Phys.*, 147, 214106, 2017
121. ▲Symbol Detection for Faster-Than-Nyquist Signaling by Sum-of-Absolute-Values Optimization, H. Sasahara, \*K. Hayashi, M. Nagahara, *IEEE Signal Processing Letters*, 23(12), 1853-1857, 2016
122. ◎▲Sparse modeling of EELS and EDX spectral imaging data by nonnegative matrix factorization, \*M. Shiga, K. Tatsumi, S. Muto, K. Tsuda, Y. Yamamoto, T. Mori, T. Tanji, *Ultramicroscopy*, 170, 43-59, 2016
123. ▲Discrete Signal Reconstruction by Sum of Absolute Values, \*M. Nagahara, *IEEE Signal Processing Letters*, 22(10), 1575-1579, 2015
124. ◎▲Colorful carbon nanopopcorns formed by co-depositing C60 with diamond-like carbon followed by reaction with water vapor, \*W. Xie, A. Kawahito, T. Miura, T. Endo, Y. Wang, T. Yanase, T. Nagahama, Y. Otani, \*T. Shimada, *Chem. Lett.*, 44, 1205-1207, 2015
125. ◎▲Novel method to classify hemodynamic response obtained using multi-channel fNIRS measurements into two groups: Exploring the combinations of channels, \*H. Ichikawa, J. Kitazono, K. Nagata, A. Manda, K. Shimamura, R. Sakuta, M. Okada, M. 他3名, *Frontiers in Human Neuroscience*, 8, 480:1-10, 2014
126. ▲Phase reduction approach to synchronization of spatiotemporal rhythms in reaction-diffusion systems, \*Hiroya Nakao, Tatsuo Yanagita, Yoji Kawamura, *Physical Review X (American Physical Society)*, 4, 021032, 2014  
【C01-1】計25件 (査読有22件, 査読無3件)
127. ▲Progressive evolution of whole-rock composition during metamorphism revealed by multivariate statistical analyses, \*Kenta Yoshida, Tatsu Kuwatani, Takao Hirashima, Hikaru Iwamori, Shotaro Akaho, *Journal of Metamorphic Geology*, 36(1), 41-54, 2018
128. ▲Adaptive design of an X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy experiment with Gaussian process modelling, \*T. Ueno, H. Hino, A. Hashimoto, Y. Takeichi, M. Sawada, K. Ono, *npj Computational Materials*, 4, 1-8, 2018
129. ◎▲Geochemical Discrimination and Characteristics of Magmatic Tectonic Settings: A Machine-Learning-Based Approach, \*K. Ueki, H. Hino, T. Kuwatani, *Geochemistry*, 19, 20pages, 2018

130. ▲Local Intrinsic Dimension Estimation by Generalized Linear Modeling, \*H. Hino, J. Fujiki, S. Akaho, N. Murata, *Neural Computation*, 29(7), 1838–1878, 2017
131. ▲Simultaneous Estimation of the Spatio-Temporal Slip Distribution and Duration of the Slow Slip Event by a Switching Model, \*Takamitsu Araki, Tadafumi Ochi, Norio Matsumoto, Shoutaro Akaho, *Journal of Signal Processing*, 21(6), 297-308, 2017
132. ▲An Entropy Estimator Based on Polynomial Regression with Poisson Error Structure, \*H. Hino, S. Akaho, N. Murata, *Lecture Notes in Computer Science*, 9948, 11-19, 2016
133. ▲Non-parametric e-mixture of Density Functions, \*H. Hino, K. Takano, S. Akaho, N. Murata, *Lecture Notes in Computer Science*, 9948, 3-10, 2016
134. ▲Nonparametric e-Mixture Estimation, K. Takano, \*H. Hino, S. Akaho, N. Murata, *Neural Computation*, 28, 2687-2725, 2016
135. ▲Time-Varying Transition Probability Matrix Estimation and Its Application to Brand Share Analysis, T. Chiba, \*H. Hino, S. Akaho, N. Murata, *PLOS ONE*, 12, e0169981, 2016
136. ▲An efficient sampling algorithm with adaptations for Bayesian variable selection, \*T. Araki, K. Ikeda, S. Akaho, *Neural Networks*, 61, 22-31, 2015
137. ▲Intrinsic Graph Structure Estimation Using Graph Laplacian, A. Noda, \*H. Hino, M. Tatsuno, S. Akaho, N. Murata, *Neural Computation*, 26, 1455-1483, 2014
138. ▲Verification of Effectiveness of a Probabilistic Algorithms for Latent Structure Extraction Using an Associative Memory Model, K. Wakasugi, \*T. Kuwatani, K. Nagata, H. Asoh, M. Okada, *Journal of Physical Society of Japan*, 83, 104801, 2014
139. ▲A kernel method to extract common features based on mutual information, \*T. Araki, H. Hino, S. Akaho, *Lecture Notes in Computer Science*, 8835, 26-34, 2014  
【C01-2】計 49 件 (査読有 45 件, 査読無 4 件)
140. ◎▲Taxonomy matching between asteroids and meteorites: supervised clustering approach, \*Y. Saito, P. Hong, T. Niihara, H. Miyamoto, K. Fukumizu, *Journal of Physics: Conference Series*, , accepted, 2018
141. ▲Support Consistency of Direct Sparse-Change Learning in Markov Networks, \*S. Lju, T. Suzuki, R. Relator, J. Sese, M. Sugiyama, K. Fukumizu, *Annals of Statistics*, 45(3), 959-990, 2017
142. ▲A Linear-Time Kernel Goodness-of-Fit Test, \*W. Jitkrittum, W. Xu, Z. Szabo, K. Fukumizu, A. Gretton, *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS 2017)*, 30, 262--271, 2017
143. ▲Learning sparse structural changes in high-dimensional Markov networks, \*S. Lju, K. Fukumizu, T. Suzuki, *Behaviormetrika*, 44(1) , 265-286, 2017
144. ▲Trimmed Density Ratio Estimation, \*S. Lju, A. Takeda, T. Suzuki, K. Fukumizu, *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS 2017)*, 30, 4518--4528, 2017
145. ▲Characteristic Kernels and Infinitely Divisible Distributions, \*Y. Nishiyama, K. Fukumizu, *Journal of Machine Learning Research*, 17(180), 1-28, 2016
146. ▲Convergence guarantees for kernel-based quadrature rules in misspecified settings, \*M. Kanagawa, B. K. Sriperumbudur, K. Fukumizu, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 30, 3288-3296, 2016
147. ▲Structure Learning of Partitioned Markov Networks, \*S. Lju, T. Suzuki, M. Sugiyama, K. Fukumizu, *Journal of Machine Learning Research, W & CP (ICML2016)* , 48, 439-448, 2016
148. ▲Filtering with State-Observation Examples via Kernel Monte Carlo Filter, \*M. Kanagawa, Y. Nishiyama, A. Gretton, K. Fukumizu, *Neural Computation*, 28(2), 382-444, 2015
149. ▲Kernel-Based Information Criterion, \*S. Danafar, K. Fukumizu, F. Gomez, *Computer and Information Science*, 8, 10-24, 2015
150. ▲Hyperparameter Selection in Kernel Principal Component Analysis, \*A. MD Alam, K. Fukumizu, *Journal of Computer Science*, 10(7), 1139-1150, 2014
151. ▲Convex Tensor Decomposition via Structured Schatten Norm Regularization, \*R. Tomioka, T. Suzuki, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 26, 1331-1339, 2014
152. ▲Gradient-based kernel dimension reduction for regression, \*K. Fukumizu, C. Leng, *Journal of the American Statistical Association*, 09(505), 359-370, 2014
153. ▲Kernel Bayes' Rule: Bayesian Inference with Positive Definite Kernels, \*K. Fukumizu, L. Song, A. Gretton, *Journal of Machine Learning Research*, 14, 3753-3783, 2013  
【C01-3】計 46 件 (査読有 38 件, 査読無 8 件)
154. ▲Comparative analysis on the selection of number of clusters in community detection, \*T. Kawamoto, Y. Kabashima, *Physical Review E*, 97, 022315(1-20), 2018
155. ◎▲Accelerating cross-validation with total variation and its application to super-resolution imaging, \*T. Obuchi, S. Ikeda, K. Akiyama, Y. Kabashima, *PLoS ONE*, 12, e0188012(1-14), 2017
156. ▲Cross-validation estimate of the number of clusters in a network, \*T. Kawamoto, Y. Kabashima, *Scientific Reports*, 7, 3327(1-17), 2017
157. ▲Bayesian online compressed sensing, \*P. V. Rossi, Y. Kabashima, J.-i. Inoue, *Physical Review E*, 94, 022137(1-8), 2016
158. ▲Relative species abundance of replicator dynamics with sparse interactions, \*T. Obuchi, Y. Kabashima, K. Tokita, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016, 112502(1-28), 2016
159. ▲Statistical mechanics analysis of thresholding 1-bit compressed sensing, \*Y. Xu, Y. Kabashima, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016, 083405(1-16) , 2016
160. ▲Cross validation in LASSO and its acceleration, \*T. Obuchi, Y. Kabashima, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016, 053304(1-36) , 2016
161. ▲Typical reconstruction performance for distributed compressed sensing based on L2,1-norm regularized least square and Bayesian optimal reconstruction: influences of noise, \*Y. Shiraki, Y. Kabashima, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016, 063304(1-27) , 2016
162. ◎▲Approximate cross-validation formula for Bayesian linear regression, \*Y. Kabashima, T. Obuchi, M. Uemura, *Proceedings of 2016 54th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computation*, , 596-600, 2016
163. ▲Typical reconstruction limits for distributed compressed sensing based on L2,1-norm minimization and Bayesian optimal reconstruction, \*Y. Shiraki, Y. Kabashima, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2015, P05029(1-22), 2015
164. ▲Statistical mechanics of dictionary learning, \*A. Sakata, Y. Kabashima, *EPL(Europhysics Letters)* , 103, 28008(1-6), 2013  
【C01-4】計 71 件 (査読有 39 件, 査読無 32 件)
165. ▲Optical Polarization Variations in the Blazar PKS1749+096, \*Makoto Uemura, Ryosuke Itoh, Ioannis Liodakis, Dmitry Blinov, Masanori Nakayama, Naoko Sawada, Hsiang-Yun Wu, Issei Fujihiro, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 69(6), 96:1-96:12, 2017
166. ▲Making Many-to-Many Parallel Coordinate Plots Scalable by Asymmetric Biclustering, Hsiang-Yun Wu, Yusuke Niibe, Kazuho Watanabe, Shigeo Takahashi, Makoto Uemura, Issei Fujihiro, in *Proceedings of the 10th IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis 2017)*, 305-309, 2017
167. ▲Projection to mixture families and rate-distortion bounds with power distribution measures, \*K. Watanabe, *Entropy*, 19(6), 262, 2017
168. ▲TimeTubes: Design of a Visualization Tool for Time-Dependent, Multivariate Blazar Datasets, Longyin Xu, Masanori Nakayama, Hsiang-Yun Wu, Kazuho Watanabe, Shigeo Takahashi, Makoto Uemura, Issei Fujihiro, in *Proceedings of the NICOGRAPH International 2016*, 15–20, 2016
169. ▲Rate-distortion functions for gamma-type sources under absolute-log distortion measure, \*K. Watanabe, S. Ikeda, *IEEE Transactions on Information Theory*, 62(10), 5496-5502, 2016
170. ▲ TimeTubes: Visualization of Polarization Variations in Blazars, \*Makoto Uemura, Ryosuke Itoh, Longyin Xu, Masanori Nakayama, Hsiang-Yun Wu, Kazuho Watanabe, Shigeo Takahashi, Issei Fujihiro, *Galaxies*, 4(3), 23:1-23:9, 2016
171. ▲Data-driven approach to Type Ia supernovae: variable selection on the peak luminosity and clustering in visual analytics, \*Makoto Uemura, Koji S. Kawabata, Shiro Ikeda, Keiichi Maeda, Hsiang-Yun Wu, Kazuho Watanabe, Shigeo Takahashi, Issei Fujihiro, *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012009, 2016
172. ▲Asymmetric biclustering with constrained von Mises-Fisher models, \*Kazuho Watanabe, Hsiang-Yun Wu, Shigeo Takahashi, Issei Fujihiro, *Journal of Physics: Conference Series*, 699, 012028, 2016
173. ▲Entropic risk minimization for nonparametric estimation of mixing distributions, \*K. Watanabe, S. Ikeda, *Machine Learning*, 99(1), 119-136, 2015
174. ▲Variational inference with ARD prior for NIRS diffuse optical tomography, \*A. Miyamoto, K. Watanabe, K. Ikeda, Masa-aki Sato, *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 26(5), 1109-1114, 2015
175. ▲Analysis of variational Bayesian latent Dirichlet allocation: weaker sparsity than MAP, \*S. Nakajima, I. Sato, M. Sugiyama, K. Watanabe, H. Kobayashi, *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS2014)*, 27, 1224-1232, 2014  
【C01-公募】計 128 件 (査読有 95 件, 査読無 33 件)
176. ◎▲Asymptotic expansion of a nonlinear oscillator with a jump-diffusion process, Y. Ishikawa, \*T. Yamanobe, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, , 34, in press
177. ▲Learning Koopman Invariant Subspaces for Dynamic Mode Decomposition, \*N. Takeishi, Y. Kawahara, T. Yairi, *Advances in Neural Information Processing Systems 30 (Proc. of NIPS'17)*, , 1130-1140, 2017
178. ◎▲System identification of signaling dependent gene expression with different time-scale data, T. Tsuchiya, M. Fujii, N. Matsuda, K. Kunida, S. Uida, H. Kubota, K. Konishi, \*S. Kuroda, *PLoS Computational Biology*, vol. 13(12), e1005913, 2017
179. ▲Support Vector Machine Histogram: New Analysis and Architecture Design Method of Deep Convolutional Neural Network, \*Satoshi Suzuki, \*Hayaru Shouno, *Neural Processing Letters*, , 1-16, 2017
180. ▲Subspace Dynamic Mode Decomposition for Stochastic Koopman Analysis, \*N. Takeishi, Y. Kawahara, T. Yairi, *Physical Review E*, 96, 03310, 2017
181. ▲Representative Selection with Structured Sparsity, \*H. Wang, Y. Kawahara, C. Weng, J. Yuan, *Pattern Recognition*, 63, 268–278, 2017
182. ◎▲Sparse Parallel Algorithms for Recognizing Touch Topology on Curved Interactive Screens, \*K. Miura, K. Nakada, *IEEE Access*, 5, 14889-14897, 2017
183. ▲Generalized sparse learning of linear models over the complete subgraph feature set, \*Takigawa I, Mamitsuka H, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 39(3), 617-624, 2017
184. ◎▲Mining approximate patterns with frequent locally optimal occurrences, \*A. Nakamura, I. Takigawa, H. Tosaka, M. Kudo, H. Mamitsuka, *Discrete Applied Mathematics*, 200, 123–152, 2016
185. ▲Joint estimation of preferential attachment and node fitness in growing complex networks, \*T. Pham, P. Sheridan, H. Shimodaira, *Scientific Reports*, 6, 32558, 2016
186. ▲Dynamic Mode Decomposition with Reproducing Kernels for Koopman Spectral Analysis, \*Y. Kawahara, in *Advances in Neural Information Processing Systems 29 (Proc.*

of NIPS'16), 911-919, 2016

187. ▲Noisy Data Aggregation with Independent Sensors: Insights and Open Problems, \*T. Murayama, P. Davis, *Journal of Multimedia and Information System*, 3, 21-26, 2016  
188. ▲Diffusion-on-Manifold Aggregation of Local Features for Shape-based 3D Model Retrieval, \*Takahiko Furuya, Ryutarou Ohbuchi, *Proc. ACM International Conference on Multimedia Information Retrieval (ICMR) 2015*, June 2015, 171-178, 2015  
189. ▲Multi-Frame Image Super Resolution Based on Sparse Coding, \*T. Kato, H. Hino, N. Murata, *Neural Networks*, 66, 64-78, 2015  
190. ▲Non-Parametric Entropy Estimators Based on Simple Linear Regression, \*H. Hino, K. Koshijima, N. Murata, *Computational Statistics and Data Analysis*, 89, 72-84, 2015  
191. ▲Patchworking Multiple Pairwise Distances for Learning with Distance Matrices, K. Takano, \*H. Hino, Y. Yoshikawa, N. Murata, *Lecture Notes in Computer Science*, 9237, 287-294, 2015

<書籍> (計 22 件)

- 【著書】 劣モジュラ最適化と機械学習 (機械学習プロフェッショナルシリーズ), 河原吉伸, 永野清仁, 講談社サイエンティフィック, 2015.12.  
【著書】 機械学習入門-ボルツマン機械学習から深層学習まで-, 大関真之, オーム社, 2016. 大関真之 機械学習入門-ボルツマン機械学習から深層学習まで- オーム社 2016 年  
【著書】 機械学習・人工知能 業務活用の手引き ~導入の判断・具体的応用とその運用設計事例集~, 湯山 茂徳, 安藤 康伸他, 情報機構, 2017.11.  
【著書】 ベイズ推定入門-モデル選択からベイズの最適化まで-, 大関真之, オーム社, 2018. 大関真之 ベイズ推定入門-モデル選択からベイズの最適化まで- オーム社 2018 年  
【著書】 T. Sato, M. Tanifuji, (2014) Optical Intrinsic signal imaging for elucidating functional structures in higher visual area. In: Neurovascular coupling methods. M. Zhao, H. Ma, T.H. Schwartz (eds.) Humana Press. pp 161-175  
【著書】 「確率的最適化」, 鈴木大慈, 講談社, 2015.  
【著書】 「確率的グラフィカルモデル」, 鈴木謙, 植野真臣, 黒木学, 清水昌平, 湊真一, 石直正和, 樺島祥介, 田中和之, 本村陽一, 玉田嘉紀, 共立出版, 2016.7.  
【著書】 「ランダム行列の数理と科学」, 渡辺澄夫, 永尾太郎, 樺島祥介, 田中利幸, 中島伸一, 森北出版, 2014.4.  
【著書】 「ネットワーク・カオス - 非線形ダイナミクス, 複雑系と情報ネットワーク -」, 中尾裕也, 長谷川幹雄, 合原一幸, コロナ社, 2018.1.15.  
【著書】 倒立振り子で学ぶ制御工学, 川田編著, 永原ほか著, 森北出版, 2017.2.  
【著書】 スパースモデリング, 永原, コロナ社, 2017.10.

<ホームページ・新聞など> TV・ラジオ 計 24 件, 新聞・雑誌 計 73 件, web 計 83 件, その他 計 4 件

- 【TV】 和風総本家スペシャル「巨大な日本を作る職人たち」, 2015.7.9.  
【TV】 深海のロストワールド, NHK BS プレミアム, 2014.3.21.  
【TV】 Science view, "What is Sparse Modeling?", NHK World, 2017.5.3.  
【TV】 Science Documentary BEYOND シーズン 2017・エピソード 63, 韓国 EBS, 2017.  
【TV】 「ニュースほっと関西」どこまで進んでいるか 人工知能の最新研究, NHK 総合, 2016.9.23.  
【TV】 「サイエンス ZERO」情報科学の名探偵! 魔法の数式スパースモデリング, NHK Eテレ, 2015.8.23.  
【TV】 「ロズミックフロント」若田宇宙飛行士が見た宇宙絶景, NHK BS プレミアム, 2014.10.16.  
【新聞】 筆頭著者論文「筋肉の再生を促進させるスイッチの発見〜筋肉の再生治療の応用に期待〜」, 科学新聞, 2018.4.27.  
【新聞】 脳科学と融合, 社会変える, 日経産業新聞, 2016.3.18.  
【新聞】 脳の反応 広告評価測定 NTT データなど 実証実験で確認, 日経産業新聞, 2015.8.10.  
【新聞】 脳データ×AI で CM の印象を読み取り 日本の研究チーム開発, 朝日新聞, 2017.11.18.  
【新聞】 脳が見る世界を解説, 日刊工業新聞, 2017.8.1.  
【新聞】 動画広告の効果を脳で測定, NTT データが実用化, 日本経済新聞, 2015.8.25.  
【新聞】 東京ドームに東大研究室 子どもと科学の触れ合う場, 日本経済新聞, 2014.8.25.  
【新聞】 地下断層のすべり現象 豊後水道で領域特定, 日刊工業新聞, 2017.7.24.  
【新聞】 太古代の地球は温暖 東大がメカニズム解明, 日刊工業新聞, 2017.12.12.  
【新聞】 太古の地球, メタンで温暖 東大 複数の細菌が生成, 日本経済新聞, 2017.12.17.  
【新聞】 世界初, NICT と NTT データ 脳情報解読技術で, ニューロマーケティング, 経済産業新報, 2016.5.5.  
【新聞】 酸化物質の表面構造を解析できるソフト開発—情報科学を活用, 日刊工業新聞 阪大, 2017.10.24.  
【新聞】 産業界との融合的連携研究制度, 化学工業日報, 2017.12.18.  
【新聞】 基質パライオマス 成分量を正確に決定, 化学工業日報, 2016.2.24.  
【新聞】 映像印象 脳活動から推測 情通機構 1 万通りの単語で表現, 日経産業新聞, 2017.11.14.  
【新聞】 宇宙資源の開発に挑む, 日本経済新聞, 2018.3.9. 国内・新聞 日本経済新聞, 宇宙資源の開発に挑む, 2018 年 3 月 9 日 日経産業新聞,  
【新聞】 ニュースを読み解く ドローンの可能性と規制について, 京都新聞, 2015.8.15.  
【新聞】 スパースモデリング (永原著), 日刊工業新聞, 2017.12.21.  
【新聞】 NTT データ 脳科学使い業務支援 fMRI 採用で精度高く, 日刊工業新聞, 2016.8.26.  
【新聞】 CM 動画広告の効果測定 脳情報解読技術を活用 NTT データなど, 日刊工業新聞, 2015.8.27.  
【新聞】 2017 年 4 月: 早稲田大との共同研究「世界初・染色体の新しい構造ユニットの特殊な立体構造を解明 癌をターゲットとした創薬研究に重要な基盤情報を提供」, 日刊工業新聞, 日経産業新聞, 読売新聞(4/14 掲載), 朝日新聞(5/4 掲載)  
【新聞】 <育てよう! 科学魂> 嫌いだっただ生物が面白く, 東京新聞, 2014.1.14.  
【新聞】 「脳が顔を認識するしくみは?」, 日本経済新聞, 2015.1.25.  
【新聞】 「サンデーサイエンス」 宇宙や津波, 数学で迫る一少ないデータで「本質」解析—, 日本経済新聞, 2015.5.3.  
【新聞】 「サルと挑む脳解明」, 常陽新聞, 2015.4.23.  
【新聞】 「電気通信大学・読売講座 情報 - 脳活動から視覚解く」, 読売新聞, 2016.10.15.  
【新聞】 「電気通信大学・読売講座 - 人の夢 脳活動で判別」, 読売新聞, 2016.10.9.  
【新聞】 「電気通信大学・読売講座 - 脳とこころ情報科学で解明」, 読売新聞, 2016.10.7.  
【雑誌】 注目のスパースモデリング データ駆動科学は化学に何をもちたらすのか, 化学と工業, 71, 185-187, 2018.3.1.  
【雑誌】 「脳情報」- ヒトの脳から直接情報を読み出す研究, TV Bros. わらしべマッドサイエンティスト, 2015.3.18.

<主催シンポジウム等の状況>

- 【国内開催】 "Workshop on Functional Inference and Machine Intelligence (FIMI)", 東京, 2018.2.19-21.  
【国内開催】 "Probabilistic Graphical Model Workshop: Sparsity, Structure and High-dimensionality", 東京, 2016.3.23-25.  
【国内開催】 "International Symposium on Object Vision in Human, Monkey, and Machine", 電気通信大学, 東京都調布市, 2015.11.5-6.  
【国内開催】 "International Meeting on "High-Dimensional Data-Driven Science"", メルパルク京都, 京都, 2017.9.10-13, 2017  
【国内開催】 "11th International Workshop on Water Dynamics", 東北大学, 仙台, 2014.3.12-14. (2018 年まで毎年開催)  
【国際開催】 "The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells", Telluride Intermediate School, アメリカ合衆国, 2017.6.20-24.  
【国際開催】 "Deciphering complex energy landscape and kinetic network from single molecules to cells: a new challenge to make theories meet experiments", Hotel Mercure Dijon, フランス, 2017.9.3-8.  
【国際開催】 "13th International Symposium on Mineral Exploration", ベトナム国家大学ハノイ校, ベトナム, 2014.9.22-24.

<アウトリーチ活動> 計 199 件

- 【小・中・高向け授業】 計 52 件, 【一般向け講演会・セミナー】 計 81 件, 【広報誌・パンフレット】 計 17 件  
【サイエンスカフェ・イベント出展】 計 18 件, 【プレスリリース】 計 31 件

<受賞> 計 87 件

- 【受賞】 文部科学大臣表彰の科学部門, 本間希樹(研究代表者), 2017.4.  
【受賞】 平成 28 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞, 大関真之, 2016.  
【受賞】 自然科学研究機構若手研究者賞, 本間希樹(研究代表者), 2014.6.  
【受賞】 第 4 9 回市村学術賞 (貢献賞), 西本伸志, 2017.  
【受賞】 東京大学総長賞, 秋山和徳(研究協力者), 2015.3.  
【受賞】 東京工業大学挑戦的研究賞・学長特別賞 (2014 年度), 鈴木大慈, 2014.  
【受賞】 東京大学大学院 総合文化研究科 広域科学専攻博士論文特別賞, 西川宜彦, 2018. 2018 H29 3  
【受賞】 第 11 回日本統計学会研究業績賞 (2017 年度), 鈴木大慈, 2017.9.5.  
【受賞】 第 10 回資生堂女性研究者サイエンスグラント, 坂田綾香, 2017.6.  
【受賞】 Neural Information Processing Systems 2017 Best Paper Award, K. Fukumizu, 2017.12.  
【受賞】 1st International Conference on Intelligent Systems, Metaheuristics & Swarm Intelligence, Excellent Oral Presentation Award, H. Inoue, 2017.3. 2017 H29 1  
【受賞】 Magna Cum Laude 受賞, S. Okuchi et al., ISMRM(国際磁気共鳴医学会)25th Annual Meeting & Exhibition, Hawai'i Convention Center, Honolulu, USA, 2017.  
【受賞】 Magna Cum Laude 受賞, N. Onishi et al., RSNA(北米放射線学会) 102nd Scientific Assembly and Annual Meeting, Chicago, USA, 2016.  
【受賞】 IEEE Young Research Award, IEICE Neuro Computing, S. Suzuki, 2016.3.  
【受賞】 IEEE Young Research Award, IEICE Neuro Computing, A. Suzuki, 2017.3.  
【受賞】 IEEE Computational Intelligence Society Japan Chapter Young Researcher Award (Neurocomputing) , M. Sato, 2015.3.

## 7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況（2 ページ以内）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、総括班研究課題の活動状況も含め、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

### 1) 基本的な研究戦略と研究開始当初の状況

本領域では、自然科学と情報科学の緊密な融合・連携を目指し、1.研究領域の目的及び概要で示した三つの重点目標である、A:データ駆動科学の実践、B:モデリング原理の確立、C:数理基盤の形成に対し、実験 G(A01,A02)、モデル G(B01)、情報 G(C01)の三つの研究項目をおいた(図 1-2)。

研究開始当初、実験 G(A01,A02)は主として線形回帰のような基礎的統計手法を用いており、高度な手法を仮説検証ループに組み込むノウハウや手法のハイパーパラメータの解釈・決定に関するノウハウが不足していた。一方、本領域には種々の統計的手法が自然科学に有用というビジョンがあったので、情報 G(C01)は最先端手法を幅広くカバーするように計画し、本領域で重点投資する SpM の他に、パラメトリックおよびその対極となるノンパラメトリックな手法や、そのいいとこ取りを目指すセミパラメトリックな方法を扱う班を配置し、さらに高次元データの可視化班を配置した。そして、実験

G(A01,A02)と情報 G(C01)を接続するため、データ駆動科学の実践と数理基盤の形成双方の経験がある研究者を基軸にモデル G(B01)を構成した。円滑な研究開始を目的として、共同研究実績がある研究者間でタイトに「A-B-C」チームを構成したため、結果として図 6-1 のように縦の連携が強く、横はまだ薄い状況であった。

公募との連携も図る横串型の有機的連携を実現するには、経験則で回っていた連携をクリアに定型化する必要があった。そこで生まれた指導原理が「データ

駆動科学の三つのレベル」である。三つのレベルではモデル G(B01)は、実験 G(A01,A02)と情報 G(C01)の双方に仮説検証ループを意識させ、実験 G(A01,A02)と情報 G(C01)間の要請を調整する。そこでは、いきなり高度な手法を使うのではなく、基本に立ち返って簡単な例で実験するための VMA (virtual measurement analysis) をモデル G(B01)が構築し、議論の基盤を整える。VMA では、問題の本質を抽出し、人工データによってコントロール実験が可能ない Toy モデルを構成し、Toy モデルを通じて解析の効果検証やパラメータの解釈を実験 G(A01,A02)と情報 G(C01)とともにコンセンサスを得る。この Toy モデルをリファレンスとして用いることにより、当初の問題意識から外れることなく情報 G(C01)でより高度で効率的なアルゴリズムに発展させることができ、実験 G(A01,A02)で追加の要請が生じた場合は常に Toy モデルにフィードバックすることで、問題の本質の変化を容易に追跡できる。さらに、Toy モデルは「その場」解析という形でデータ駆動科学への参入の敷居を下げる効果ももたらし、「三つのモデル」として定型化されたこれらの方法論は、

図 6-2 に示すように領域内外との幅広い有機的な横串的な共同研究につながった。また、この指導原理が計画・公募班に周知されたことで、最終的には A-C 融合研究の例も見られた。これはすべての研究者にモデリングの心、三つのレベルの心が浸透したからこそである。

### 2) 領域で構築されたモデリング基盤と研究成果

上記体制に基づき、本領域のモデリング基盤を構築する【連携成果 1】 SpM 手法の深化と創成、【連携成果 2】 ベイズ手法の深化と創成、【連携成果 3】 統計的手法を統一的に評価するための ES-DoS 法が得られた。以下で個別の成果について解説する。

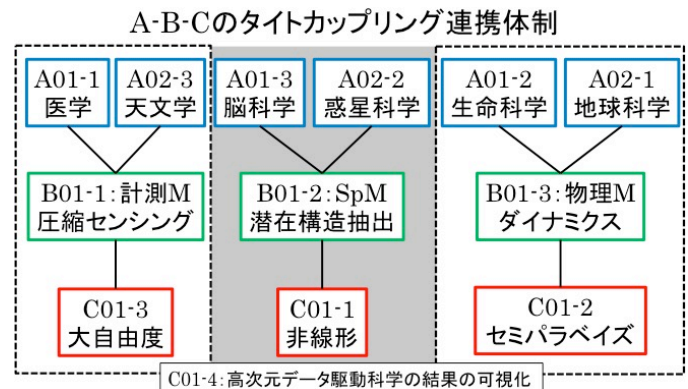


図 6-1 : 領域開始時の連携体制に関する方策

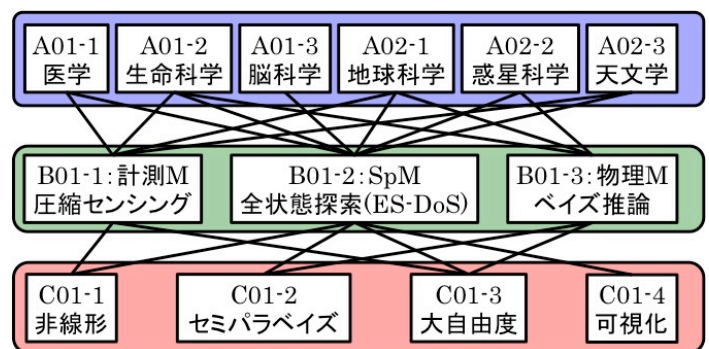


図 6-2 : 領域終了時の連携成果の全体像

### 【連携成果 1】 SpM 手法の深化と創成

基底の用意方法次第で変化する LASSO の次元削減性能を解析する研究を通じて、スパースモデリング班(B01-2)は、過完備基底を用いると理論的最適性能に近い優れた次元削減を達成できることを発見した。また、大自由度班(C01-3)は、高速に交差検証誤差を推定し、最適な正則化項の重みを求める方法を開発し、統計的に説明可能な最適な基底選択を実現した。これら LASSO の深化と創成により、LASSO を自然科学の仮説・検証ループに取り込むことに成功し、計測モデリング班(B01-1)主導のもと、実験 G(A01,A02)との連携によって下記の応用研究がもたらされた。

医学班(A01-1)では、MRI データへの適用により従来の精度では診断困難とされるような症状の早期発見が可能とした。また、天文学班(A02-3)では、VLBI の計測データへの適用により、解明が困難であった現象の詳細を現在の計測技術でも観測可能となりつつある。生命科学班(A01-2)では、NMR 計測における基底抽出の高速・高精度化に成功した。SpM 手法の深化と創成をに基づいた応用研究を推進するために、医学班(A01-1)や天文学班(A02-3)が各分野へ適用した圧縮センシングの領域内外へのワークショップの開催によって、計画研究だけでなく、実験 G(A01,A02)の公募班やモデル G(B01)との連携が幅広く展開できた。

### 【連携成果 2】 ベイズ手法の深化と創成

物理モデリング班(B01-3)を中心として、図 6-4 に示す領域内連携により、ベイズ推論に基づく仮説・検証ループを用いたモデル抽出の研究を推進した。SpM など潜在構造が抽出されたとき、これを生成モデルとし、ベイズ推論の前提知識として確率的に組み込むことにより、パラメータや構造の推定精度向上や信頼度推定が可能となり、時空間パターンやダイナミクス抽出に関する研究が発展した。物理モデリング班の要素技術である MCMC に基づいたベイズ推定の枠組みを活用し、生命科学班(A01-2)とは、タンパク質の立体構造のパターン解析を NMR データから行う研究で、天文学班(A02-3)とはブラックホール近傍を観測することにより得られるデータから相対論的ダイナミクスを抽出する研究で、それぞれ連携が進んでいる。また、吉田公募班(A02)が主導するスピン偏極 STM についても協働して成果を上げ、イメージングデータ解析の深化を着実に推進した。

### 【連携成果 3】 統計的手法を统一的に評価するための ES-DoS 法

スパースモデリング班(B01-2)が中心となって ES-DoS 法を開発し、基底ごとの予測誤差からなる度数分布(統計物理の状態密度に対応する)に各手法で抽出された基底をマッピングすることで、手法間の特性評価を可能にした。ES-DoS 法により、仮説・検証ループを回すための統計的手法に関する統一的な見方が得られた。また、ES-DoS 法により複数の最適組み合わせが存在する問題にもアプローチ可能となり、交換モンテカルロ法による高速近似計算も実現した。ES-DoS 法を用いて、地球科学班(A02-1)は、津波堆積物の起源が、鉱山起源の重金属類を多く含んだ沿岸域の海底堆積物であることを新たに明らかにした他、A02 馬場公募班は海底水圧系センサーから津波高を予測するための最適なセンサー組み合わせを求めることに成功した。さらに、B01 市川公募班は近赤外分光法により ASD (自閉症スペクトラム) 児と ADHD (注意欠陥・多動性障害) 児の判別を行う方法を開発した。

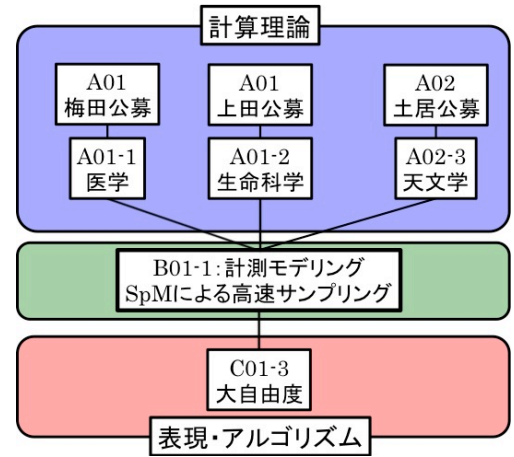


図 6-3 : 【連携成果 1】での連携

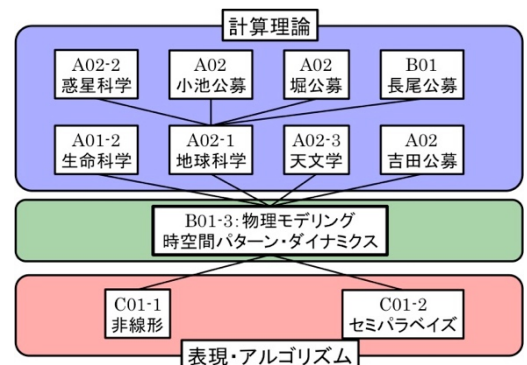


図 6-4 : 【連携成果 2】での連携

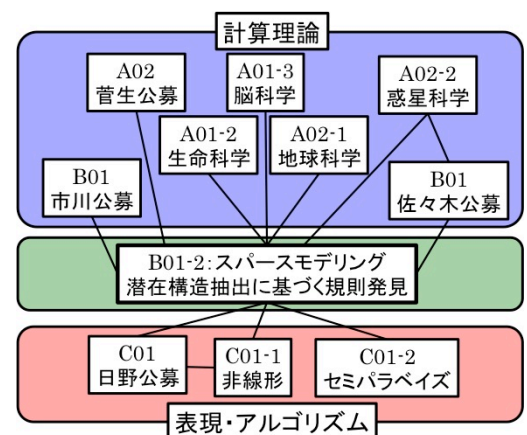


図 6-5 : 【連携成果 3】での連携

## 8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む。）（1ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について記述してください（総括班における設備共用等への取組の状況を含む。）。

### (1) 領域予算の概要

#### 領域全体予算の内訳

様々な分野での領域内融合を効率的かつ効果的に進めるため、本領域は公募研究が75件と多く、その予算が多いことが特徴である。実際に、公募研究が参画し始めた平成26年度から平成29年度までの予算内訳は、計画研究が約60%、公募研究が約35%、総括班が約5%である。

### (2) 設備等の活用状況

高次元データ駆動科学の研究過程において必要となるサーバーを中心に支出を行った。モデルG(B01)や情報G(C01)のサーバーを共有化し、実験G(A01,A02)でのデータ解析に利用するなどして、設備の有効利用を図った。また、既存のサーバーへのメモリ拡張、GPUやHDD補充などの対応により、大規模データ解析に対する盤石な体制を整えた。

### (3) 人件費の有効活用

本領域において、総括班の融合支援員と各計画研究の博士研究員をのべ49名雇用した。このことは、自然科学と情報科学の両方の知識を備えた優秀な若手人材の輩出につながっており、ポスドク・RA・若手研究者から、主任研究員やさきがけ研究員など常勤研究職に計52名も就職し、次世代のデータ駆動科学を担う若手人材育成の骨格を形成した。

### (4) 総括班研究課題の活動状況

#### 国際学会の開催

平成27年度と29年度の計2回の国際会議(International Meeting on “High-Dimensional Data-Driven Science(HD<sup>3</sup>)”)の会議費を計上し、そこでの紀要を論文誌として発行することで、データ駆動科学の国際的プレゼンスを高めた。

#### チュートリアル・公開シンポジウムの開催

平成26年度から29年度にかけてチュートリアル講演会および公開シンポジウムを関東、関西において計4回行う経費を計上し、その結果、述べ約2100名もの参加者があった。また、チュートリアル講演集および公開シンポジウム抄録集を作成・配布し、我が国における高次元データ駆動科学の水準向上を狙った。統計数理研究所や理化学研究所などの分野の異なる4名の著名な研究者方にもご講演いただき、高次元データ駆動科学が特定分野に限らず分野を横断して重要であることが改めて認識された。

#### 公開セミナーの開催

医学や天文学といった、実験G(A01, A02)の各分野におけるセミナーを開催し、各領域におけるデータ駆動科学の推進を図った。また、理科第2分野だけでなく、物理学等の他分野への5年後以降の本領域の発展性を見据え、スパースモデリング班(B01-2)と吉田公募班(A02)との共同で東京大学物性研究所にて研究会「走査プローブ顕微鏡を用いた先端計測でアプローチする物性研究 第一回研究会」を主催し、この研究会での発表者が、その後のマテリアルズ・インフォマティクスにおける若手の中心となっている。さらに、今後SpMの数理基盤形成にとって有用だと期待される課題に着目し、平成26年8月に公開セミナー「劣モジュラ最適化と圧縮センシング」を開催するなど、データ駆動科学の推進をより一層支援した。

#### 広報活動

平成25年度と平成27年度には、キックオフシンポジウム及び公募説明会をのべ全国25箇所で行った。その結果、平成25年度には当初募集予定の4倍以上となる132件もの公募応募を得られ、平成27年度には93件もの公募応募が得られた。また、JPGU, AOGSをはじめ、国内外の学会で10件の企画セッションを開催した。こうした活動を通じて、高次元データ駆動科学の周知に努めた。

#### 領域内交流の推進

領域の発足時から領域内会議を始め、様々な領域内会議の会議費や交通費を計上した。これにより領域内交流を活性化し、モデルG(B01)を中心とした自然科学と情報科学の緊密な連携・融合を推進した。

#### 異分野学術交流の推進

本領域外の新学術領域研究（「計算限界解明」、「ナノ構造情報」、「地殻ダイナミクス」など）との合同シンポジウムを催すことで連携を図り、学術集会を共同開催している。また、近年は、本領域内メンバーが、情報計測CREST・さきがけ、ビックデータCREST、マテリアルズインフォマティクスさきがけなどのデータ駆動科学を目的とした科学推進拠点事業に参画することで、異分野学術交流を積極的に推進している。

・研究費の使用状況（（１），（２），（３）を合わせて３ページ以内）

（１）主要な物品明細（計画研究において購入した主要な物品（設備・備品等。実績報告書の「主要な物品明細書」欄に記載したもの。）について、金額の大きい順に、枠内に収まる範囲で記載してください。）

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価（円）	金額（円）	設置(使用)研究機関
25	計算機	HP社 PoliantDL380pGen8	1	4,781,400	4,781,400	京都大学
	MRI 痛覚刺激装置	メディカル・エイジ メント社 Intercross-210	1	3,045,000	3,045,000	京都大学
	計算機	HPCテクノロジー ズ社 HPC-ProFSD PeT 620R	1	2,047,500	2,047,500	東京大学
26	計算機	HP社 ProLiant DL380p Gen8 E5 v2	1	4,696,812	4,696,812	京都大学
	大規模ストレージ	QNAP Turbo NAS 向け 校正脳容量拡張オ プション	1	3,365,280	3,365,280	京都大学
27	可視・近赤外 領域分光器	ARCOptix S.A 社 HL-2000-HR	1	3,078,000	3,078,000	東京大学
	眼球計測装置	Tobii Pro X3-120 & Tobii Studio プロフ ェッショナル	1	3,178,440	3,178,440	東京大学
	計算機	日本コンピューティ ングシステム社 ワークステーション	1	2,764,800	2,764,800	国立天文台
28	計算機	アップル社 MacPro CTO	1	2,209,032	2,209,032	京都大学
	磁気共鳴断 層撮影装置 GPU再構成 装置	シーメンス社製 MAGNETOM Skyra用GPU 再構成装置	1	1,998,000	1,998,000	京都大学
29	ディープリン グマシン	ディープリング マシン	1	1,512,000	1,512,000	京都大学
	計算機	HPCテック社 マルチコア CPU HPCT R125s	1	4,594,320	4,594,320	東京大学
	磁気共鳴撮 影装置ソフ トウェア	シーメンス社 Magnetom Skyra 用 オプションソフト	1	3,240,000	3,240,000	京都大学
	タンパク質 合成用試薬	タンパク質合成用試 薬	1	2,072,520	2,072,530	理化学研究所



(2) 計画研究における支出のうち、旅費、人件費・謝金、その他の主要なものについて、年度ごと、費目別に、金額の大きい順に使途、金額、研究上必要な理由等を具体的に記述してください。

【平成25年度】

・旅費

**地球惑星科学班：**サンフランシスコにおける太陽系内の岩石の分布や変成過程等に関する地質学的共同研究の実施(執行額 1,000,000 円)。惑星科学におけるデータ解析に必要な情報収集及び共同研究を行った。

**計測モデリング班：**レイク・タホ(米国)において開かれた、機械学習のトップカンファレンスである NIPS2013 に参加し(施行額 568,560 円)、スパースモデリングの最新状況について情報収集を行った。

**天文学班：**ウクライナより京都大学に9月18日から12月17日まで、PAVLENO Olena 氏の招聘する際の旅費を支出した。これにより、天文学におけるスパースモデリングの適用について検討、共同研究を行った。

・人件費・謝金

**スパースモデリング班：**実験・計測グループとの共同研究を進めるため、博士研究員を一名雇用した(執行額 3,312,469 円)。それにより、実験・計測グループとの共同研究を促進するとともに、それらに共通するスパースモデリングにおける普遍的な問題に取り組んだ。

・その他

**天文学班：**天文における計測データの解析ソフト、FITS-IDI における IO ライブラリ開発費を支出した(執行額 2,077,950 円)。これにより、天文学の実観測データへのスパースモデリング適用を促進した。

**計測モデリング班：**エクセルソフト社からのライセンス購入費を計上し(施行額 378,000 円)、多様な計測データに対するスパースモデリングを促進した。

**総括班：**新学術領域のホームページ制作費用を計上した(施行額 305,340 円)。このホームページを積極活用することで、国内外に対して、本新学術領域の広報と支援を行った。

【平成26年度】

・旅費

**地球惑星科学班：**ブラウン大学、ジョンズ・ホプキンス大学における短期滞在費用を計上し(執行額 1,027,660 円)、惑星科学におけるデータ解析に必要な情報収集及び共同研究を行った。

**天文学班：**イタリアにおける、12th European VLBI Network Symposium and Users Meeting に参加し(施行額 741,890 円)、スパースモデリングの天文学への適用状況について情報収集を行った。

**大自由度班：**Institut d'Etudes Scientifiques de Cargese に参加し(施行額 670,222 円)、情報統計力学によるスパースモデリング等の機械学習の理論評価の現状について情報収集を行った。

・人件費・謝金

**脳科学班：**脳科学データに対してスパースモデリングへの適用を行うことで、脳内神経細胞における物体像表現を研究する博士研究員を一名雇用した(執行額 7,158,852 円)。

**可視化班：**スパースモデリングによって抽出されたデータに対する有効な可視化について検証することで、高次元データの解析処理の手法について研究する博士研究員を一名雇用した(執行額 4,728,200 円)。

・その他

**脳科学班：**スパースモデリングの適用予定であった神経細胞の実験データ等を保存したハードディスクのデータ復旧費を計上した(執行額 760,431 円)。

**計測モデリング班：**エクセルソフト社からのライセンス購入費を計上し(施行額 388,800 円)、多様な計測データに対するスパースモデリングを促進した。

**総括班：**スパースモデリングの展開が期待できる、劣モジュラ最適化を用いた機械学習と疎性モデリングへの応用について、公募班の若手研究者による研究会の開催費用を計上した(施行額 341,632 円)。

【平成27年度】

・旅費

**医学班：**ニューヨーク大学における短期滞在費用を計上し(執行額 1,027,660 円)、MRI を対象としたスパースモデリング適用に必要な情報収集及び共同研究を行った。

**地球科学班：**地球科学データに対するスパースモデリング適用の共同研究を目的として、2月3日から3月31日まで、外国人招聘研究者の東北大学への招聘旅費を支出した(執行額 998,765 円)。

**大自由度班：**Inn at Loretto/スタンフォード大学/Technische Universitat Berlin への分担者の短期滞在費用(執行額 895,224 円、1月18日から2月7日)を計上し、情報統計力学によるスパースモデリングの理論構築を推進した。

・人件費・謝金

**脳科学班：**脳科学データに対してスパースモデリングへの適用を行うことで、脳内神経細胞における物体像表現を研究する博士研究員を一名雇用した(執行額 7,205,343 円)。

**可視化班：**スパースモデリングによって抽出されたデータに対する有効な可視化について検証することで、高次元データの解析処理の手法について研究する博士研究員を一名雇用した(執行額 4,739,618 円)。

・その他

**総括班：**スパースモデリングの国際的な展開と意見交換を促進するため、国際会議 HD<sup>3</sup>-2015 を開催し、京都メルパルクにおける会議費費用を計上した(施行額 3,146,076 円)。

**地球科学班：**スパースモデリング適用の対象である地球科学データの計測機器である、ELAN9000 DRC II の修理費用を計上した(執行額 1,492,560 円)。

**地球科学班：**スパースモデリング適用の対象である地球科学データの計測機器である、ICP 発光分析装置 iCAP 6300 Duo の修理費用を計上した(執行額 1,377,000 円)。

【平成28年度】

・旅費

**医学班**：国際活動支援班より、4月1日より10月19日までのニューヨーク大学における長期滞在費用を計上し(執行額 3,695,520 円)、MRI へのスパースモデリング適用に必要な情報収集及び共同研究を行った。

**地球科学班**：地球科学データに対するスパースモデリング適用の共同研究を目的として、1月8日から3月9日まで、外国人招聘研究者の東北大学への招聘旅費を国際活動支援班より支出した(執行額 1,109,986 円)。

**計測モデリング班**：スペインにおいて開かれた、情報科学のトップカンファレンスである IEEE International Symposium on Information Theory(ISIT2016)に参加し(執行額 820,130 円)、研究成果発表およびスパースモデリングの最新状況について情報収集を行った。

・人件費・謝金

**惑星科学班**：惑星科学データに対してスパースモデリングへの適用を行うことで、高次元データから有効な特徴量を抽出する研究に従事する博士研究員を一名雇用した(執行額 6,577,624 円)。

**セミパラメトリックベイズ班**：簡単なモデル化が困難な場合でも対応可能なセミパラメトリックなベイズ推論による、スパースモデリングの方法論の研究に従事する博士研究員一名を雇用した(執行額 5,570,255 円)。

・その他

**地球科学班**：スパースモデリング適用の対象である地球科学データの計測機器である、ICP 発光分析装置 iCAP 6300 Duo の修理費用を平成27年度に引き続き追加で計上した(執行額 783,000 円)。

**医学班**：MRI データへのスパースモデリング適用を目的として、京都大学大学院医学研究科附属脳機能総合研究センターMRI 装置利用負担金 (MAGNETOM 7T 平成29年1月-2月利用分) を計上した(執行額 475,000 円)。

**総括班**：スパースモデリングの国内展開と意見交換を促進するため、公開シンポジウムを開催し、東京大学武田ホールにおける会議費費用を計上した(執行額 363,000 円)。

【平成29年度】

・旅費

**医学班**：アメリカ・シカゴにおける第103回北米放射線学会(RSNA2017)に参加し(執行額 929,710 円)、MRI データのスパースモデリングへの適用に関する最新状況について情報収集を行った。

**計測モデリング班**：ドイツにおいて開かれた、情報科学のトップカンファレンスである IEEE International Symposium on Information Theory(ISIT2017)に参加し(執行額 890,930 円)、研究成果発表およびスパースモデリングの最新状況について情報収集を行った。

・人件費・謝金

**脳科学班**：脳科学データに対してスパースモデリングへの適用を行うことで、脳内神経細胞における物体像表現を研究する博士研究員を一名雇用した(執行額 6,813,716 円)。

**惑星科学班**：惑星科学データに対してスパースモデリングへの適用を行うことで、高次元データから有効な特徴量を抽出する研究に従事する博士研究員を一名雇用した(執行額 6,577,624 円)。

・その他

**総括班**：スパースモデリングの国際的な展開と意見交換を促進するため、国際会議 HD<sup>3</sup>-2017 を開催し、メルパルク京都における会議費費用を計上した(執行額 3,016,840 円)。

(3) 最終年度(平成29年度)の研究費の繰越しを行った計画研究がある場合は、その内容を記述してください。

本領域では、最終年度に研究費の繰越しを行った計画研究はないため、該当しない。

## 9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1ページ以内）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

本領域が学界へ与えた最も大きいインパクトは、「データ駆動科学」という既存の学問分野に属さない新しい融合型の学問分野が創成されたことである。「仮説・検証ループを回すための統計的手法の深化と創成」という基本学理と「データ駆動科学の三つのレベル」という指導原理に基づき、自然理解のための普遍的・系統的な数理・情報科学的手法の構築を実現し、学融合研究推進のロールモデルが出来上がった。これにより、JST CREST・さきがけの情報計測領域の戦略目標で本領域の活動が引用されたほか、領域代表の岡田は、(研)物質材料機構の統合型材料開発・情報基盤部門のMI(マテリアルズインフォマティクス)全体に関してアドバイザーに任命された。さらに、情報科学と個別科学の両方に通じた新しいタイプの若手人材が多数輩出されたことは、本領域の課題設定が適切であることを物語っている。これら本領域の研究と教育の実績により、領域代表所属の東大新領域では、本領域の課題名「データ駆動科学」の名を持つ「高次元データ駆動科学教育プログラム」が2017年から発足し、東大柏キャンパスにおける横串の役割を果たしている。これは当初設定の「我が国のデータ駆動科学のコアを形成する」という目標の具現化である。

**情報科学分野への貢献：**本領域が与えた最も大きな影響の一つは、最近の SpM の隆盛である。以前から情報科学においてスパース性を利用した情報処理技術が注目されてきたが、本領域が集中的に投資したことで、その流れはより一層強いものとなった。本領域で深化・創成した SpM とベイズ推論の手法、世界にさきがけて提案した状態密度付き全状態探索法(ES-DoS)は、情報科学分野の state of the art となり、本領域の課題名である SpM の深化は十二分に達成された。

もう一つのインパクトは、情報科学者が自然科学のデータ解析を一般的に行うようになったことである。上記の MI の流れに代表されるこれらの machine learning for science の流れは、今まで機械学習分野にはなかったトレンドである。これは、本領域が与えたインパクトは、単なる SpM の流布ではなく、情報科学における自然科学の存在理由を与え、情報科学でのデータ駆動科学の大きな潮流を作り出したことを意味する。

**自然科学各分野への貢献：**本領域がきっかけとなり、多くの自然科学分野において、統計的手法を活用した仮説・検証ループが回るようになった。特に、本領域が集中投資した SpM と ES-DoS 法、加えてベイズ推論の情報処理は、各分野で目に見える影響と大きな波及効果を与えている。

地球科学では、SpM によりプレート境界のすべり現象を高解像度にとらえることが可能になり、他の新学術領域での主テーマであるスロー地震の物理解釈に貢献した。また、津波堆積物判定や津波高予測に ES を用い、東北の津波警戒アラートシステムにも今後実装予定である。惑星科学では、はやぶさ 2 に搭載される分析装置の方針が決定された。ブラックホールの可視化では、当該領域での SpM 研究がさきがけとなり、国際プロジェクトが立ち上がり、天文学と数理科学が連携する新プロジェクト（ビッグデータ CREST 吉田グループ）が走っている。医学分野では、SpM を使った MRI 解析について、実機への実装に近い将来実現する予定である。生命科学においても、NMR の解析に SpM が導入され、さらにベイズ推論による新たな展開の端緒がうかがえる。脳科学についても、スパース性という切り口により、視覚パターン認識に関して新たな研究が展開された。また、公募班として、物理学や化学を含む新たな研究分野を選定した。その結果、当初の予定を超えた成果が多数得られ、各分野において SpM が急速に浸透した。物理学分野では SpM を用いた STM 解析がなされ、化学分野においては、SpM を用いた触媒の高速探索、心理学分野においては ES-DoS を用いた脳活動量の計測データに基づく発達障害の症状診断法など、計画研究の枠を超えた研究が実現された。

**産業界への貢献：**産業界(企業等)との共同研究は、平成 26 年度から 27 年度にかけて伸びており、全期間を通じてのべ 70 社以上と行われた。また、公開シンポジウムやチュートリアル参加者の企業関係者割合は非常に高く（例えば 2018/3/31 主催の最終シンポジウムにおいて 51%）、アカデミックだけでなく産業界への貢献に対する期待も非常に大きいことがうかがい知れる。これは当初の予定を超える波及効果である。

**まとめ：**本領域の成果として、新たな学問分野「データ駆動科学」が創成された。自然科学分野および情報科学分野で数理・機械学習の活用が一般的になり、また、情報科学と個別科学を縦横無尽に行き来する新しいタイプの若手研究者を多数輩出し、今後の各分野および学界全体をけん引することが期待される。本領域が推し進める学融合は、蛸壺化してしまった現在の学問領域を、どの分野にも普遍的な「データ解析」を軸にすることで、再び統一する契機の一つになるものと強く期待される。

## 10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1 ページ以内）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者（※）の研究終了後の動向等を記述してください。

※研究代表者・研究分担者・連携研究者・研究協力者として参画した若手研究者を指します。

本領域に参画した研究者は 985 人年であり、そのうち 39 歳以下の若手研究者は半数近い 437 人年である。本領域には数多くの若手研究者が参画し、領域参画したポスドク・RA・若手研究者から、主任研究員やさきがけ研究員など常勤研究職に計 52 名も就職し、次世代のデータ駆動科学を担う人材を着実に輩出した。

本領域の特徴は自然科学と情報科学が融合していることであり、これを最大限に活用して若手研究者の育成に取り組んだ。研究では、自然科学の若手研究者は単に各分野に閉じることなく、最先端の情報科学手法の素養に触れることにより他の分野で有用な手法を逸早く取り入れられる柔軟性を身に着けた。一方、情報科学の若手研究者は、複数の分野を同時に取り組むことにより、異なって見える問題に潜む共通の構造を見出し頑健な数理手法を提案した。いずれの立場であろうと、データ駆動科学という観点で俯瞰的に学問全体を見渡すことのできる視野の広さを備え、そのような若手研究者が領域内で共同研究を行うことの相乗効果は絶大である。

さらに特に優れた若手研究者には領域主催の国際シンポジウムやチュートリアル講演会で講演する機会を与えた。異なる分野の研究者や産官からの聴衆に説明することは、自身の分野の学会で話す場合と異なり、議論の前提条件から見直す必要があったり、平易な言葉を極力用いる必要があったりする。自身の研究を別の視点から客観的に捉えなおす経験は若手研究者にとって重要であり、周辺分野を含めて理解を深めるきっかけとなる。

具体的な実績は、紙面の都合上すべてを記載することはできないが、次の通りである。実験 G(A01,A02), モデル G(B01), 情報 G(C01)いずれの分野の若手研究者も満遍なくステップアップを果たした。

### 【研究分担者】

- [A01-3] 大橋一徳 理研・BSI・研究員→(2016) 精神・神経医療研究センター・流動研究員
- [A02-1] 桑谷立 東北大・環境・助教→(2015) 海洋機構・研究員→(2016) JST・さきがけ（兼）
- [B01-2] 永田賢二 東大・新領域・助教→(2015) JST・さきがけ（兼）→(2016) 産総研・主任研究員
- [C01-1] 日野英逸 筑波大・助教→(2016) 筑波大・准教授→(2018) 統数研・准教授
- [C01-2] 富岡亮太 東大・情報理工・助教→(2015) Microsoft Research・Researcher
- [C01-2] 西山悠 統数研・特任助教→(2014) 電通大・助教
- [C01-3] 竹田晃人 東工大・総合理工・助教→(2013) 茨城大・工・准教授
- [C01-4] 渡辺一帆 奈良先端大・助教→(2016) 豊橋技科大・講師

### 【連携研究者】

- [A01-2] 葛西卓磨 理研・生命システム・研究員→(2016) JST・さきがけ（兼）
- [B01-1] 大関真之 京大・情報・助教→(2016) 東北大・情報・准教授
- [B01-3] 中西義典 東大・新領域・博士研究員→(2016) 東大・総文・助教→(2017) JST・さきがけ（兼）
- [C01-2] Song Liu 統数研・特任助教→(2017) University of Bristol, Lecturer
- [C01-3] 坂田綾香 学振 PD→(2014) 理研・基礎特研→(2015) 統数研・助教

### 【研究協力者】

- [A01-1] 日野田卓也 京大・医・大学院生→(2018) 神戸市立医療センター中央市民病院・副医長
- [A02-2] 新原隆史 東大・総合研究博物館・特任助教→(2018) 東大・工・助教
- [B01-2] 五十嵐康彦 東大・新領域・大学院生→(2014) 東大・新領域・博士研究員→(2017)JST・さきがけ
- [B01-3] 高邊賢史 東大・総合文化・大学院生→(2016)名工大・助教

### 【公募研究代表者・連携者】

- [A01 公] 松永康佑 理研・計算科学研究機構・研究員→(2016)JST・さきがけ（兼）
- [A01 公] 永野惇 JST・さきがけ→(2015)龍谷大学・農・講師
- [A02 公] 三坂孝志 東北大・学際研・助教→(2018)産総研・研究員
- [B01 公] 安藤康伸 東大・マテ工・助教→(2017)産総研・研究員
- [B01 公] 市川寛子 中央大・文・学振 PD→(2015)東理大・理工・講師
- [B01 公] 国田勝行 東大・理・特任助教→(2017)奈良先端大・バイオサイエンス・助教
- [C01 公] 瀧川一学 北大・創成研究機構・特任助教→(2014)北大・情報・准教授

## 11. 総括班評価者による評価（2ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

### (1) 総括班評価者による評価体制

本領域の研究体制である実験 G(A01,A02), モデル G(B01), 情報 G(C01)のそれぞれの研究項目に対して, 各1名の評価者を設けた. いずれも各分野を代表する国立研究所の所長やセンター長であり, 多様な分野を対象とする本領域の評価者として適任である. また, 海外からの評価者としてもう1名加え, 総括班評価者は合わせて右の5名である. このうち, 国内の評価者には, 平成29年12月18日~20日の三日間で本領域の最終成果報告会の一環として開催した公開シンポジウムにご参加いただき, 本領域の活動状況を把握していただくとともに, 招待講演者として今後さらなる発展が見込まれるデータ駆動科学に期待することについてご講演いただいた. また, 海外の評価者は本領域が研究期間中に主催した国際会議に招待し, その後も総括班構成員と密に連絡を取り続けている. データ駆動科学というユニークな研究形態は国際的にみても我が国が先んじており, その意義を高く評価いただいている.

1. 柳田敏雄 (A01 生物学)
  - ・ 理化学研究所・生命システム研究センター・センター長
  - ・ 脳情報通信融合研究センター・センター長
2. 林 正彦 (A02 地学)
  - ・ 国立天文台・台長
3. 樋口知之 (B01 モデリング)
  - ・ 統計数理研究所・所長
4. 甘利俊一 (C01 情報)
  - ・ 理化学研究所・脳科学総合研究センター・特別顧問
5. Jukka Corander (海外)
  - ・ オスロ大学/ヘルシンキ大学/ケンブリッジ大学・教授

### (2) 外部評価委員による本領域に対する評価コメント

#### 1) A01(生命科学)評価担当: 柳田敏雄 外部評価委員のコメント

本領域は, 幅広い実験・計測系とデータ科学および数理科学の理論系が密に連携し, スパースモデリングに基づき, 高次元データから隠れた規則性を発見する高次元データ駆動科学の創成を目指してきた. その目的の達成のため, 実験・計測系と理論系をつなぐ役割を担うモデリンググループを配置し研究を進めてきた.

生物は物質科学的側面からみると超多自由度で非線形な複雑系である一方, そのイメージングデータは他領域と比べて遥かにノイズであり, 動的観測の時空間データも超高次元である. このような系から有効な情報を抽出するには, 対象となる系をモデル化してデータ解析することが不可欠である. その観点からも, 本領域の組織形態は達見である. この新領域が数多くの研究成果を上げ, 領域内の融合も円滑に促進されていることから, この方針が正しいことがわかる.

私達は, 理研の生命科学において, 数理科学を使って一細胞オミックスと動的なイメージングデータをスパースな特徴空間を介して対応付けるデータ駆動型のアプローチにより, 細胞を観ただけで詳細情報を推定しその予測や操作までも目指す DECODE プロジェクトを推進している. このように, 本領域が提唱する, スパースモデリングによるデータ駆動型のアプローチは, 生命科学に必須の情報解析技術となっている.

以上のように本領域は, 今までに類を見ない魅力的で新たなパラダイムを創成しており, 高い評価を与える.

#### 2) A02(地球惑星科学・天文学)評価担当: 林正彦 外部評価委員のコメント

本新学術領域の A02 分野では地球・惑星科学および天文学にスパースモデリングとデータ駆動科学的手法を導入し, 従来法を超える成果の創出を進めた. 天文班ではスパースモデリングを電波干渉計撮像に用いることで画像の解像度向上が実証され, これを用いた巨大ブラックホールの撮像解析が現在進められている. さらに, 同手法の ALMA (Atacama Large Millimeter/ submillimeter Array)への適用も進んでおり, 今後の電波干渉計データ解析の国際標準となりうる点で優れた成果であるといえる. また, 電波干渉計だけでなく, 天文学分野へもスパースモデリングやデータ駆動科学的手法の広範な応用に挑戦したことも評価される. 特に本領域の天文班が中心となって開催した日本天文学会の企画セッションでも多くの参加者があるなど, 天文学分野での最先端のデータ科学的手法の導入の必要性が強く認識されるようになっており, これも本領域の成果である. また, 惑星探査分野では小惑星分類の研究等や新たな惑星探査プロジェクトの創出にもスパースモデリングが大きく貢献したことを評価する. また, 地球科学分野では, 津波堆積物の研究をはじめとする分野で優れた成果があがっており, 地球から宇宙まで幅広い分野でスパースモデリングの有効性が実証されている. このように, 本領域は当初計画の予定どおり地学分野の幅広い分野でインパクトを与えることに成功しており, 地学分野でデータ科学的アプローチの大きな潮流を創出したことを高く評価する.

### 3)B01(モデリング)評価担当：樋口知之 外部評価委員のコメント

本新学術領域では、実験計測グループ、モデリンググループ、情報科学グループの三つの階層を用意し、モデリンググループを経由して、実験計測と情報科学が機能的に融合する研究戦略面での工夫を行った。近年産業界においては、基盤技術と応用領域（ユースケース）の異なる二軸を、時代のニーズに合わせて適切に組み合わせるマトリックス戦略が、イノベーションの起点となるものとして、とみに重要視されている。本新学術領域は、その二軸が重なる点、つまり実験計測と情報科学の重なる点をイノベーションへと成長させるためには、モデリングが大きな役割を果たすことを実証的に示した。この成功により、学術分野における新領域創成のためのメソッドが確立されたと言え、本新学術領域の設置意義を高く評価する。メソッドの確立とともに、若手人材育成とコミュニティの創成も、本新学術領域の素晴らしい点である。特に、公募研究により、広範な分野の研究者や大学院生を巻き込み、計画研究との有機的な連携を保ちながら全体を運営した領域代表者のバランス感覚は見事としか言いようがない。事実、本新学術領域の若手研究者が、マテリアルズインフォマティクス(MI)や情報計測のJST さきがけ研究者に多数選ばれたことは、本新学術領域内における若手人材育成体制および推進手腕が非常にうまく機能した証左である。以上で述べたように、本新学術領域は、データ駆動科学の創成を真の意味で実現したプロジェクトとして、後進に伝えられるであろう。

### 4)C01(数理科学・情報学)評価担当：甘利俊一 外部評価委員のコメント

情報技術の発展により巨大な量のデータが蓄積され利用可能になっている。この宝庫を活用して、第4次産業革命が到来するとまで言われるようになった。多量のデータから隠された構造を抽出するには、多様で複雑な現象からその背後に潜む本質的な構造を抽出し、これを法則として定式化する必要がある。

ある結果を惹き起こす要因は極めて膨大であるものの、実際に発現するのは多くの場合少数であり、現象の多様性はどの少数の要因が選ばれたのか、組み合わせの多様性にあることが多い。これを基にするのが疎性科学技術であり、従来の統計科学を一新した。本新領域はこの知見をいち早く取り入れ、信号処理分野だけでなく、天文学、地球科学、材料科学、医学など多くの科学技術の代表的な領域で、スパースモデルに基づいたデータ駆動型の科学技術を確立することを試みた。その構想は時代を先駆け、異なる多くの分野を共通の方法で結ぶ新しい科学技術の到来を告げるものとなった。

本グループは従来の主流である線形ガウス型統計モデルを脱却し、非線形、確率推論、ノンパラメトリック学習など、従来の統計科学、情報科学を超える新しい構想で細分化した研究に統合の新しい突破口を開くものとして高く評価したい。

### 5) Jukka Corander 海外外部評価委員のコメント

The topic is very timely internationally and most universities around the world are actively pursuing research initiatives in high-dimensional and Big Data analysis. However, your initiative sets itself positively apart from the majority of these activities by being focused on the modeling and inference to obtain sparse and interpretable representations of systems, in contrast to pure data mining and less structured approaches which are popular globally. The sparse modeling techniques explored and advocated within your initiative are at the forefront of gaining essential insight and predictions for complex systems such as human brain, cellular processes, astrophysics, evolution of bacterial populations, and so on. An appropriate use of empirical data is of utmost importance in these fields studying very high-dimensional phenomena, because unlike in the past, theoretical hypothesis driven work can no longer make advances at a rapid pace. The feedback from empirical studies performed through the lens of sparse modeling is now becoming the most essential ingredient for forming the theories for the future, since the explosion in the degrees of freedom of the system models. I sincerely hope that the success of your initiative will feed into future funding possibilities of continuing similar activities on a national scale, as these are important for coordination of the research across universities and rapid dissemination of major advances in techniques and applications.