

## ■会議報告

### 第10回日本放射光学会若手研究会 「放射光科学×インフォマティクス」報告

小林正起 (東京大学)  
山崎裕一 (物質・材料研究機構)  
木村隆志 (北海道大学)

第10回日本放射光学会若手研究会「放射光科学×インフォマティクス」を、2018年9月3日(月)から4日(火)にかけて東京大学本郷キャンパスの工学部2号館241講義室で開催いたしました。研究会には120名の方々にご参加いただき、大盛況のうちに無事終了いたしました(図1)。講演者と参加者の皆様、会場で力を貸してくれたアルバイトならびに放射光学会事務局の方々に心より感謝申し上げます。

発展し続ける放射光分光技術や計測技術(ハードウェア)の発展に伴い、大量の画像データや高速計測による多量の分光データなどからの効率かつ正確な情報抽出法や自動計測による効率的な計測データ収集手法の需要が高まっています。また、X線自由電子レーザー(FEL)施設SACLAにおけるシングルショット計測や時分割計測、高輝度放射光施設における非弾性散乱計測など、最先端の光源を用いることで初めて計測できるような現象においても、フォトン数の制限から計測データの計数が必ずしも高くないデータや短時間の低精度な計測データからより正確な特徴量を抽出できる解析技術の開発も求められています。他方で、人工知能や機械学習、数理情報処理技術の爆発的な発展により、それらの技術を放射光科学や計測に応用する可能性への期待も高まっています。本研究会では、放射光科学のニーズを持つ研究者や、放射光と計測の融合をすでに試みている研究者、インフォマティクス分野の最先端の研究者を一同に会して、放射光科学とインフォマティクスの融合と発展を目指しました。

表1に本研究会のプログラムを示します。今回の研究会では、物理や化学、生物といった科学の分野ではなく、

データと情報科学の繋がりでセッションを分けました。また、チュートリアル講演として放射光以外の分野の先生方にご講演をお願いしました。データと情報科学との関連を軸にすることで、様々な分野の講演者に参加していただいたことが今回の研究会の特徴と言えます。

研究会は9月3日(月)の13:00から開始しました。世話人の一人である小林正起による研究会趣旨説明の後、セッション1「大量データの収集と処理」では、放射光やFEL実験で得られる大量のデータをどう扱うかに関して、ご講演をいただきました。まず、理化学研究所の宮下治先生は、単分子や生きた細胞を観測するための実験手法で得られたデータをどのようなモデルに基づいて解析するかについて講演されました。理化学研究所の小林周先生は、細胞の構造解析をするためのコヒーレントX線回折イメージング測定について、大量のデータをどう取得してそれらを処理するかについて講演されました。高輝度放射光科学センターの城地保昌先生にはSACLAでのデータ収集と迅速なデータ処理の枠組みを紹介していただきました。セッションを通して、細胞などの生体分子の観測にはSACLAにおいて多量のデータを得る必要性があり、そのデータ処理にインフォマティクスが必須であることが論じられました。

続いてのセッション2「データ科学と計測の融合1」は、理化学研究所の三好建正先生のチュートリアル講演から始まりました。先生には、気象学を専門としており、時々刻々と変化する気象の観測データと京によるシミュレーションを結びつけるデータ同化という方法について講演をいただきました。データ同化は気象だけでなく、エネルギーや



図1 全体集合写真。

表1 研究会プログラム。

1日目：9月3日(月)

## Session 0：オープニング

13：00-13：05 小林正起(東京大学)

「はじめに：研究会の趣旨」

## Session 1：大量データの収集と処理(座長：木村隆志)

13：05-13：35 宮下 治(理化学研究所)

「XFEL単粒子観測実験データ解析アルゴリズムの開発」

13：35-14：05 小林 周(理化学研究所)

「コヒーレントX線回折イメージング実験における高効率データ収集法の開発」

14：05-14：35 城地保昌(高輝度光科学研究センター)

「SACLAのデータ解析環境と溶液中試料のナノイメージング」

## Session 2：データ科学と計測の融合1(座長：小林正起)

チュートリアル講演1

14：50-15：30 三好建正(理化学研究所)

「データ同化：シミュレーションと実測データを融合するデータサイエンス」

15：30-16：00 溝口照康(東京大学)

「第一原理計算と機械学習を用いたXANESの解釈」

16：00-16：30 山地洋平(東京大学)

「機械学習による光電子分光からの自己エネルギー再構成と有限温度分光光学スペクトルの計算科学」

チュートリアル講演2

16：45-17：25 矢谷浩司(東京大学)

「次の「当たり前」をデザインする ～HCI研究がお手伝いできること～」

17：40-19：40 懇親会(工学部2号館電気系会議室)

2日目：9月4日(火)

## Session 3：放射光先端計測技術(座長：和達大樹)

9：00-9：30 岩澤英明(広島大学)

「Diamondにおける最先端ARPES：計測技術と高効率化」

9：30-10：00 石黒 志(理化学研究所)

「イメージングXAFS法による固体触媒材料系の化学状態可視化」

10：00-10：30 上野哲朗(量子科学技術研究開発機構)

「ガウス過程回帰によるX線スペクトル測定の適応型実験デザイン」

10：45-11：15 山崎裕一(物質・材料研究機構)

「スパースモデリングを活用したコヒーレント軟X線回折磁気イメージング」

11：15-11：45 高橋幸生(大阪大学)

「情報科学を活用したコヒーレントX線イメージングの新展開」

## Session 4：バイオインフォマティクス(座長：山田悠介)

チュートリアル講演3

13：00-13：40 岩崎 渉(東京大学)

「生物学×インフォマティクス：これまでの30年とこれから」

13：40-14：10 千見寺浄慈(名古屋大学)

「X線結晶構造解析から得られたタンパク質立体構造データの網羅的情報解析による知識抽出」

14：10-15：10 ポスターセッション&amp;コーヒープレイク

## Session 5：データ科学と計測の融合2(座長：山崎裕一)

15：10-15：40 中西義典(東京大学)

「物理計測により得られる物質科学の画像データについて準粒子干渉実験の圧縮センシングから考えること」

15：40-16：10 小岡真人(東京理科大学)

「放射光データからの情報抽出」

16：10-16：40 安藤康伸(産業技術総合研究所)

「効率化と理解の観点からみる物質データに対する機械学習の応用について」

## Session 6：クロージング

16：40-17：10 進行：山崎裕一, 小林正起

「総合討論：放射光と計測インフォマティクスの融合を推進するには」

物作り、生物など様々な分野に応用可能な技術であり、予測科学という新しい科学の創生が期待されています。東京大学の溝口照康先生は、X線吸収スペクトルに対して機械学習を取り入れることで、スペクトルからの電子状態についての解釈を助け、スペクトルと物質情報との相関性を見出せることを講演されました。山地洋平先生は、高温超伝導体における角度分解光電子分光で得られるスペクトルには隠されたピーク構造が存在することを、逆問題の機械学習により明らかにしたことを講演されました。その後には休憩を挟んで、2件目のチュートリアル講演を東京大学の矢谷浩司先生にいただきました。先生は、Human-Computer Interaction (HCI) を研究しており、人の生活に役に立つデバイスやアプリケーションの設計・実装・評価を行なっています。実際の例を踏まえて、HCIデザインの考え方について講演をいただきました。将来の放射光実験における計測インターフェイスの設計に関して、重要な内容だと思われます。このセッションを通して、スペクトル解析にインフォマティクスを取り入れることで、物理的な特徴量を抽出できることが分かりました。

その後、会場と同じ建物の電気系会議室にて懇親会を行いました。40名以上の研究者ならびに学生の方々にご参加いただき、放射光科学とインフォマティクスの融合に関して、分野を超えて交流・話し合いが行われました。

2日目は9月4日(火)の9:00より研究会を再開しました。セッション3「放射光先端計測技術」では、インフォマティクスと親和性の高い、あるいはインフォマティクスを取り入れた放射光先端計測技術についてご講演をいただきました。広島大学の岩澤英明先生には、イギリスの第3世代放射光施設Diamondにおけるナノ集光ビームによる角度分解光電子分光の紹介と、その将来展望について講義をいただきました。理化学研究所の石黒志先生は、イメージングX線吸収微細構造(XAFS)法を用いた触媒反応の化学状態可視化について講演されました。特に、時間分解・空間分解したXAFSの解析には、ベイズ推定を用いた機械学習解析が有効であることを論じました。量子科学技術研究開発機構の上野哲朗先生は、ガウス過程回帰モデリングを用いることで、少数の計測データから高精度のスペクトルを予測できること、また同手法は計測にも応用できることを講演されました。コーヒープレイク後、世話人の一人である物質・材料研究機構の山崎裕一は、コヒーレントX線回折イメージングにおける、スパースモデリングによる位相回復アルゴリズムについて講演いたしました。大阪大学の高橋幸生先生には、タイコグラフィックXAFSやシングルショットX線回折イメージングにおいて、圧縮センシングによる画像の復元や機械学習による特徴的な情報の抽出について講義をいただきました。このセッションを通して、最先端の放射光計測技術で観測された空間分解・時間分解測定から得られる高次元(>3次元)のデータやその計測を最適化するために、インフォマティ

クス技術との融合の重要性が論じられました。

昼食休憩後のセッション4「バイオインフォマティクス」では、無機・有機物質科学よりも早期にインフォマティクスを取り入れていた、バイオの分野でのインフォマティクス研究に関して講演をいただきました。チュートリアル講演として、東京大学の岩崎渉先生には、歴史的な背景からこれまでの30年でバイオインフォマティクスがどのように学術分野を確立してきたか、またこれからどのように発展していくかについて講演をいただきました。名古屋大学の千見寺浄慈先生は、X線結晶構造解析から得られたタンパク質の立体構造データを、どのように情報解析するかについて講演されました。このセッションを通して、放射光科学におけるインフォマティクスを普及させていくためには、バイオインフォマティクスに倣い、学問領域の標準化とたゆまぬ技術の開発が必要であることが示唆されます。

講演での活発な議論（図2左）に引き続き、全19件のポスターセッションが同会場で行われました（図2右）。データ駆動科学への施設の取り組みや先端的な放射光解析、インフォマティクスを用いたデータ解析など、幅広い分野に関する発表が行われ、放射光科学とインフォマティクスの融合について盛んに議論されました。

ポスターセッション後に、セッション5「データ科学と計測の融合2」が行われ、計測にどのようにインフォマティクスを活かすかについて講演をいただきました。東京大学の中西義典先生は、物理画像の解析に関して、走査トンネル顕微鏡で得られる準粒子干渉パターンを例として、圧縮センシングやスパースモデリングといった情報科学的処理について講演されました。東京理科大学の小嗣真人先生には、磁性体における磁区構造でみられるメイズパターンにおいて、マクロな物理量とミクロな磁区構造との相関を明らかにするためのパーシステントホモロジー解析について講演をいただきました。産業技術総合研究所の安藤康伸先生には、機械学習の技術的な側面に加えて、実験系と情報系の研究者が共通の課題に対してどのように取り組むかということに関して講演をいただきました。このセッションを通して、放射光で得られたデータや放射光計測とイン

フォマティクスをどのように組み合わせるかが論じられました。

最後にクロージングセッションとしての総合討論では、具体的にどのように放射光と計測インフォマティクスの融合を推進していくかが議論されました。特にバイオインフォマティクスがどのように発展してきたかについて岩崎渉先生にご意見をいただき、バイオインフォマティクスの領域では下記に取り組んできたことを教えていただきました：

- 公開データを利用してデータ解析のコンペティションを行ってきた。
- 夏の学校を開催して学生から若手研究者まで裾野を広げる努力をしてきた。

また、三好建正先生からは、理化学研究所では年に1回1週間程度のデータ同化の勉強合宿が行われていることを教えていただきました。放射光とインフォマティクスの融合に関しても、扱いやすいオープンなデータベースの構築や勉強合宿があると、学生や研究者にとって勉強する機会を与えられるのではないかとということが論じられました。

研究会に参加した方の所属機関は（図3）、大学と研究所を合わせて約8割ですが、企業の方が2割弱であり、学術的な研究だけでなく企業研究についてもインフォマティクス技術が重要になっていると考えられます。研究会で

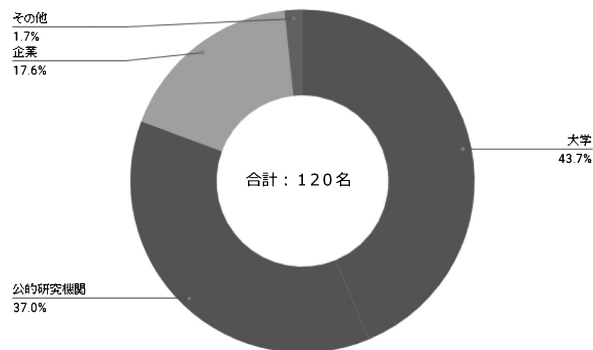


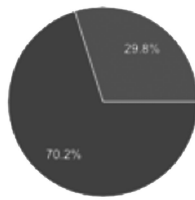
図3 参加者所属機関。



図2 講演会場とポスターセッションの様子。

## 研究会に参加して良かったと思えますか？

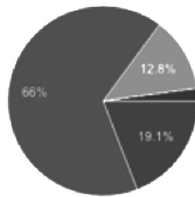
47 responses



- とても良かった
- 良かった
- 普通
- あまり良くなかった
- 良くなかった

## 計測インフォマティクスについて

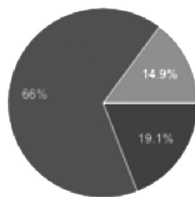
47 responses



- すでに取り組んでいる
- 非常に興味を持った
- やや興味を持った
- あまり興味を持たなかった
- 興味を持たなかった

## 理解は深まりましたか？

47 responses



- よく理解できた
- まあまあ理解できた
- あまり理解できなかった
- 理解できなかった

図4 アンケート結果。

のアンケートの結果から（図4），多くの方に研究会参加に満足をいただき，計測インフォマティクスに興味を持っていただいたので，参加者の情報科学に対する垣根が下がったことが期待されます。ただし，参加者のインフォマティクスへの理解度を見ると，初心者の方にも分かりやすくするためのより一層の努力・工夫が必要であると感じました。

研究会を通して，放射光だけでなく中性子などの他の量子ビームの方々も興味を持っており，物理・化学・生物の分野を超えてインフォマティクス技術が重要であるという確かな手応えを感じることができました。アンケートでいただいたご意見を考慮すると，ハンズオン合宿などの機会を作り，学生や研究者の方が実際に情報科学技術に触れる機会を創生することが大切だと感じています。今後も放射光科学とインフォマティクス融合を推進するために，今回の研究会を単発のものにせず，分野を横断してデータと情報科学を軸とした研究会を継続していくことを，世話人一同で取り組んでいきたいと考えています。