

平成 30 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2013～2017

課題番号：25120010

研究課題名(和文)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

研究課題名(英文)Extraction of laws of nature by merging physical modeling and sparse modeling

研究代表者

福島 孝治(Hukushima, Koji)

東京大学・大学院総合文化研究科・教授

研究者番号：80282606

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 47,100,000円

研究成果の概要(和文)：近年の実験・測定技術の発展に伴い、高次元データが取得されるようになり、自然現象の整理自体が容易でなくなってきた。本計画研究はスパースモデリングを基本として、自然科学の時空間データ駆動による普遍的なモデリング原理の構築を目的とした。典型例として3つの課題、固体物理の走査型トンネル顕微鏡・分光、脳科学のカルシウムイメージング、地球科学の岩石形成のダイナミクスを中心に研究を進めてきた。それらは、空間構造形成、時間発展ダイナミクス、時空間ダイナミクスの抽出例に対応している。我々はスパースモデリングとベイズ推論の枠組みで、研究分野の詳細に依存しない自然科学のモデリング指針を得ることが出来た。

研究成果の概要(英文)：Recent technological developments in experiments and measurements, which have made it possible to obtain high-dimensional data, mean it is no longer easy to organize natural phenomena. The purpose of our research project is to establish a universal modeling principle driven by spatiotemporal data for the extraction of laws of nature by applying sparse modeling. To do this, we conducted research mainly focusing on the three research subjects, as typical examples, which are scanning tunneling microscopy/spectrum in condensed matter physics, calcium imaging in neuroscience and dynamics of petrogenesis in earth science. They correspond to the extraction of laws of spatial structure formation, that of dynamics of time evolution, and that of spatiotemporal dynamics, respectively. Through the present research with the help of sparse modeling and Bayesian inference, we established a guiding principle of modeling in natural science independent of some details of research fields.

研究分野：統計物理学

キーワード：データ駆動科学 スパースモデリング ベイズ推論

1. 研究開始当初の背景

これまでの自然科学は実験により自然現象を法則として切り出し、理論的に基本法則を見出すことにより発展してきた。さらに、計算機を用いたシミュレーションは複雑な理論モデルの解析を可能とし、三つの方法をつき合わせながら自然現象を理解してきた。しかし、近年の実験・測定技術の発展に伴い、高次元データが取得されるようになると、自然現象の整理自体が容易ではなくなり、三つの方法をつき合わせるポイントを同定することが困難となっている。この状況は、自然科学の特定の分野に限った問題ではなく、それであるがゆえに分野の個別の特性に依存しない普遍的な方法論の整備・開発が望まれている。これまで理論的研究が基礎法則に根ざして発展してきた物理学においては、現象を説明する有効理論が複数提案され、実験的検証を通じて取捨選択されてきた。実験・計測データが豊富に得られるようになった現代においては、そのデータから有効モデルを直接構成する考え方も可能になるように思われる。このデータ駆動科学とも呼ぶべき方法論の整備はこのような背景では自然な考えである。

2. 研究の目的

上記の背景をもとに、本研究では、スパースモデリングにより高次元自然科学データから重要因子を抽出し、理論・シミュレーションの物理モデリングとの接点を探ることにより、自然法則を抽出する普遍的なモデリング原理の構築を目的とする。

3. 研究の方法

普遍的なモデリングを構築するためには、できるだけ普遍性を持つ典型的な自然現象を対象にすべきであり、本研究では研究方法の典型ケースを具体的に示すことが重要と考え、空間構造の形成法則の抽出、時間発展ダイナミクスの抽出、それらを融合する時空間ダイナミクスのそれぞれに対応する以下の三つの課題を中心に研究を進めていく。

【課題 1】走査型トンネル顕微鏡 (STM) のスパースモデリング

【課題 2】カルシウムイメージングのスパースモデリング

【課題 3】岩石形成ダイナミクスのスパースモデリング

4. 研究成果

課題 1 については、走査型トンネル顕微鏡 (STM) 画像解析の方法はクロスバリデーションにより L_1 正則化項のハイパーパラメータ推定が機能することを人工データにより確認し、方法論を確立した。その方法を用いて、StV03 の酸化物表面の実データに対するスパ

ースモデリング解析を行い、酸素欠損の空間分布を定量的に扱うことができ、空間統計に基づく解析により、短距離の斥力効果を同定するとともにその典型的なスケールの評価ができるようになった。また、同時に酸素欠損による格子ひずみの統計性も評価できるようになった。

カルシウムイメージング解析では樹状突起の時空間ダイナミクスのモデリングを行い、部分的な膜電位の観測データから未観測データと背後の物理法則のパラメータ推定までが系統的に行えるようになった。非線形ダイナミクスへの対応が可能となり、汎用性の高い解析方法が確立された。

課題 3 としてあげていた時空間ダイナミクス推定問題に関して、地球科学班との共同研究を本格的に開始した。まず豊かな相構造をもつフォワードモデルの探索として、シリカなどの多形固相を表現可能なモデルを探索し、その相構造やダイナミクスと自由エネルギー地形を明らかにした。また、不均一反応のモデリングにカルシウムイメージング解析でも用いた方法を適用し、化学反応の生成物の部分的な時間発展データのみから化学反応定数を推定する方法を応用した。また、同じ問題に近似的ベイズ計算が機能することを明らかにし、並列計算への実装を行った。

これらの当初計画していた課題の他に、ベイズ推論の基盤技術であるモンテカルロ法の開発も続けて、詳細つりあい条件を破るタイプの方法についての性能評価など基礎的で重要な知見が明らかになった。

さらに、課題 3 としてあげていた時空間ダイナミクス推定問題に関して、公募班の佐々木班との共同研究を本格的に開始した。ここでは化学反応の触媒反応の時系列データの解析を考えるが、触媒過程が空間構造を考慮する必要があり時空間ダイナミクスの典型となっている。課題 1 の発展として走査型トンネル分光への展開として、公募班の吉田班と圧縮センシングを応用する研究が成果として挙げられる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 24 件)

1. Takabe Satoshi, Maehara Takanori, Hukushima Koji, Typical approximation performance for maximum coverage problem, Physical Review E, 97, 2018, 022138 1 9, 査読有, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.022138>

2. Tamura Ryo, Hukushima Koji, Bayesian optimization for computationally extensive probability distributions, PLOS ONE, 13, 2018, 0193785, 査読有, <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0193785>
3. Miyama Masamichi J., Hukushima Koji, Real Space Analysis of Scanning Tunneling Microscopy Topography Datasets Using Sparse Modeling Approach, Journal of the Physical Society of Japan, 87, 2018, 044801-1-8, 査読有, <https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.044801>
4. S Yabuuchi, T Omori, Nonparametric Estimation for Membrane Resistances Distributed Non Uniformly in Neurons, Proceedings of International Conference on Intelligent Systems, Metaheuristics & Swarm Intelligence, 2017, 237 1 6, 査読有
5. H Inoue, T Omori, Bayesian Estimation of Neural Systems using Particle Gibbs, Proceedings of International Conference on Intelligent Systems, Metaheuristics & Swarm Intelligence, 2017, 350-1-6, 査読有
6. Tamura Ryo, Hukushima Koji, Method for estimating spin spin interactions from magnetization curves, Physical Review B, 95, 2017, 064407-1-8, 査読有, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.064407>
7. Takahashi Jun、Takabe Satoshi、Hukushima Koji, An Exact Algorithm Exhibiting RS-RSB/Easy-Hard Correspondence for the Maximum Independent Set Problem, Journal of the Physical Society of Japan, 86, 2017, 073001-1-5, 査読有, <https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.073001>
8. Yoshinori Nakanishi□Ohno, Masahiro Haze, Yasuo Yoshida, Koji Hukushima, Yukio Hasegawa, and Masato Okada, Compressed sensing in scanning tunneling microscopy/spectroscopy for observation of quasi particle interference, Journal of the Physical Society of Japan, 85, 2016, 093702 1 6, 査読有, 10.7566/JPSJ.85.093702
9. Y Nishikawa, K Hukushima, Phase transitions and ordering structures of a model of chiral helimagnet in three dimensions, Physical Review B, 94, 2016, 064428 1 11, 査読有, 10.1103/PhysRevB.94.064428
10. Y Sakai, K Hukushima, Irreversible simulated tempering, Journal of the Physical Society of Japan, 85, 2016, 104002 1 7, 査読有, 10.7566/JPSJ.85.104002
11. T Omori, T Kuwatani, A Okamoto, K Hukushima, Bayesian inversion analysis of nonlinear dynamics in surface heterogeneous reactions, Physical Review E, 94, 2016, 033305 1 11, 査読有, 10.1103/PhysRevE.94.033305
12. S Takabe, K Hukushima, Typical performance of approximation algorithms for NP hard problems, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 11, 2016, 113401 1 21, 査読有, 10.1088/1742 5468/2016/11/113401
13. Satoshi Takabe and Koji Hukushima, Statistical mechanical analysis of linear programming relaxation for combinatorial optimization problems, Physical Review E, 93, 2016, 053308 1 12, 査読有, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.053308>
14. M Sasaki, K Hukushima, Numerical Detection of Ergodicity Breaking in a Glass Model, Journal of the Physical Society of Japan, 85, 2016, 7460285 1 5, 査読有, 10.7566/JPSJ.85.074602
15. Toshiaki Omori and Koji Hukushima,

- Extracting nonlinear spatiotemporal dynamics in active dendrites using data-driven statistical approach, Journal of Physics: Conference Series, 699, 2016, 12011-1-8, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/699/1/012011>
16. 大森敏明, 回帰問題への機械学習のアプローチ—スパース性に基づく回帰モデリング—, システム制御情報学会, 59, 2015, 33-38, 査読有,
 17. Yoshihiko Nishikawa, Manon Michel, Werner Krauth, and Koji Hukushima, Event-chain algorithm for the Heisenberg model: Evidence for $z = 1$ dynamic scaling, Physical Review E, 92, 2015, 63306-1-5, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.92.063306>
 18. Atsushi Okamoto, Tatsu Kuwatani, Toshiaki Omori and Koji Hukushima, Free-energy landscape and nucleation pathway of polymorphic minerals from solution in a Potts lattice-gas model, Physical Review E, 92, 2015, 042130-1-9, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.92.042130>
 19. Takashi Takahashi and Koji Hukushima, Evidence of one-step replica symmetry breaking in a three-dimensional Potts glass model, Physical Review E, 91, 2015, 020102(R)-1-4, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.91.020102>
 20. S. Takabe and K.Hukushima, Typical behavior of the linear programming method for combinatorial optimization problems: a statistical-mechanical perspective, Journal of the Physical Society of Japan, vol. 83, 043801-1-4, 2014. 査読有
 21. T.Omori, Estimating nonlinear spatiotemporal membrane dynamics in active dendrites, Neural Information Processing, 1, 27-24, 2014, 査読有
 22. A.Takeuchi and T.Omori, Estimation of hyperparameters in probabilistic slow feature analysis, Proceedings of Joint 7th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 15th International Symposium on Advanced Intelligent Systems, 1606-1608, 2014. 査読有
 23. T. Shimamoto, T.Omori and S.Ozawa, Simulation for effect of extracellular electric field on neuronal response, Proceedings of Joint 7th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 15th International Symposium on Advanced Intelligent Systems, 1614-1616, 2014. 査読有
 24. S.Takabe and K.Hukushima, Minimum vertex cover problems on random hypergraphs: replica symmetry solution and a leaf removal algorithm, Physical Review E, 89, 062139-1-8, 2014, 査読有
- 〔学会発表〕（計 28 件）
1. 福島孝治, 交差検証法による圧縮センシングの成功判定, ナノテクイニシヤティブ研究会, メーブル有馬(兵庫県神戸市), 2017
 2. 福島孝治, データ解析の成功と失敗を判定する交差検証法, 「先端計測インフォマティクス 大量データ時代の情報活用」ワークショップ(招待講演),物質・材料研究機構(茨城県つくば市), 2017
 3. Koji Hukushima, A simple entropy driven phase transition, "30th Annual CSP Workshop Recent Developments in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics"(招待講演)(国際学会), ジョージア大学(アメリカ), 2017
 4. 大森敏明, 神経樹状突起における電氣的

- 応答特性の抽出 データ駆動型アプローチによるダイナミクス推定 , 北海道大学大学院理学研究院 数学部門,北海道大学電子科学研究所附属 社会創造数学研究センター・クロスボーダーシンポジウム(国際学会), 北海道大学(北海道札幌市), 2017
5. 安倍雅史, 福島孝治, 中西(大野)義典, 水野雄太, 佐々木岳彦, 板子健太郎, 生成物時間分析による触媒反応ダイナミクスのベイズ推論, 日本物理学会, 2017
 6. 観山正道, 福島孝治, STM トポ像からの原子欠損間の有効相互作用推定, 日本物理学会, 2017
 7. 高橋惇, 福島孝治, 交換モンテカルロ法による stochastic な量子断熱計算のシミュレーション, 日本物理学会, 2017
 8. 中西(大野)義典, 福島孝治, 交差検証による圧縮センシング成否診断法の開発, 日本物理学会, 2017
 9. 福島孝治, スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の展開, 第 61 回システム制御情報学会研究発表講演会 (SCI17), 2017
 10. 福島孝治, 近似的ベイズ計算による岩石 - 水相互作用における表面積モデル選択, 日本地球惑星科学連合大会, 幕張メッセ (千葉県千葉市), 2016
 11. Koji Hukushima, Dynamics and phase transition of a three dimensional Potts glass model, STATPHYS26(統計力学国際会議)(国際学会), リヨン(フランス), 2016
 12. Koji Hukushima, Recent development of Monte Carlo sampling techniques, 生物物理学会(招待講演), つくば国際会議場 (茨城県つくば市), 2016
 13. 福島孝治, データ駆動科学と計算物質科学の接点, 研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」(招待講演), 電気通信大学(東京都調布市), 2016
 14. Koji Hukushima, Introduction to exchange Monte Carlo methods for an inverse problem, 3rd International Symposium on Kumamoto Synchrotron Radiation (ISKSR3): Data Analysis and Data Driven Science(招待講演)(国際学会), 2016
 15. 福島孝治, マルコフ連鎖モンテカルロ法の最近の話題について, 第 39 回情報理論とその応用シンポジウム SITA2016(招待講演), 高山グリーンホテル(岐阜県高山市), 2016
 16. Toshiaki Omori, Bayesian inversion analysis of dendritic nonlinear dynamics, Cell Symposia: Big Questions in Neuroscience(国際学会), サンディエゴ(アメリカ), 2016
 17. 福島孝治, モンテカルロ法の基礎と最近の展開, スパースモデリング・チュートリアル講演会(招待講演), 神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール(兵庫県神戸市), 2016
 18. 福島孝治, 岡本敦, 桑谷立, 大森敏明, 近似的ベイズ計算による岩石 水相互作用における表面積モデル選択, 日本物理学会 第 71 回年次大会, 東北学院大学 泉キャンパス (仙台市泉区), 2016
 19. 大森敏明, 桑谷立, 岡本敦, 福島孝治, 岩石水相互作用を支配する不均質反応ダイナミクスの統計的推定, 日本物理学会 第 71 回年次大会, 東北学院大学 泉キャンパス (仙台市泉区), 2016
 20. 観山正道, 岡田佳憲, 一杉太郎, 福島孝治, スパースモデリングを用いた STS 測定データの解析手法 1, 日本物理学会 第 71 回年次大会, 東北学院大学 泉キャンパス (仙台市泉区), 2016
 21. 高邊賢史, 福島孝治, プーリアン圧縮センシングの統計力学, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 関西大学 千里山キャンパス(大阪府吹田市), 2015

22. 観山正道, 岡田佳憲, 一杉太郎, 福島孝治, スパースモデリングを用いた STM トポグラフィデータの解析手法, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 関西大学 千里山キャンパス(大阪府吹田市), 2015
23. Toshiaki Omori, Extracting nonlinear spatiotemporal dynamics in active dendrites using data-driven statistical approach, International Meeting on High-Dimensional Data Driven Science (HD3-2015)(国際学会), メルパルク京都(京都府京都市), 2015
24. Masamichi J. Miyama and Koji Hukushima, Sparse modeling approach for STM data analysis by using LARS-LASSO, International Meeting on High-Dimensional Data Driven Science (HD3-2015)(国際学会), メルパルク京都(京都府京都市), 2015
25. 福島孝治, 物性物理へのデータ駆動型アプローチ, 日本物理学会第 70 回年次大会, 早稲田大学 早稲田キャンパス(東京都新宿区), 2015
26. 観山正道, 福島孝治, STM トポグラフィデータからの原子・欠損位置の推定, 日本物理学会第 70 回年次大会, 早稲田大学 早稲田キャンパス(東京都新宿区), 2015
27. 観山正道, 福島孝治, 混合正規分布を用いた STM トポグラフィデータの解析, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 中部大学春日井キャンパス(愛知県春日井市), 2014
28. K.Hukushima, Inference of an effective physical model from STM imaging data, Cooperation of Computational Materials Science and Mathematicstoward Smart Materials Design II, 東北大学 WPI-AIMR(宮城県仙台市), 2014

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<https://scholar.google.co.jp/citations?user=L45cnxIAAAAJ&hl=ja>

https://www.researchgate.net/profile/Koji_Hukushima

6 . 研究組織

(1)研究代表者

福島 孝治 (HUKUSHIMA,Koji)

東京大学・大学院総合文化研究科・教授

研究者番号 : 8 0 2 8 2 6 0 6

(2)研究分担者

大森 敏明 (OHMORI, Toshiaki)

神戸大学・工学研究科・准教授

研究者番号 : 10391898

(3)連携研究者

中西 義典 (NAKANISHI, Yoshinnori)

東京大学・大学院総合文化研究科・助教

研究者番号 : 00767296

藤堂 眞治 (TODO, Shinji)

東京大学・理学系研究科・准教授

研究者番号 : 10291337