

令和 5 年 6 月 28 日現在

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19K12154

研究課題名(和文) スペクトル分解のためのFPGAを用いた確率的サンプリングマシンの開発

研究課題名(英文) Development of a Probabilistic Sampling Machine for Spectral Decomposition using FPGA

研究代表者

庄野 逸 (Shouno, Hayaru)

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：50263231

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では計算コストの高い計算モデルをFPGA上に実装し、どの程度の演算が可能かどうかの検証を行うためのプロジェクトである。主な成果としてはマルコフチェーンモンテカルロ(MCMC)法をFPGA上に実装すべく、計算量評価とプログラミングを行い、FPGA上での実現に一定の成果を得ることに成功した。具体的には、イジングスピンモデルを用いた計算モデルをFPGA上で実現し、このモデルの状態計算を行うためにMCMC法を適用した。さらに、この方法をスペクトル分解に適用すべく、スペクトル分解に対して温度交換型MCMC法や進化計算を適用した計算アルゴリズムを構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

省電力で計算コストが安価なFPGAはエッジデバイスとして、今後の計算機発展において重要な役割を果たすと考えられる。本研究ではFPGAを中心として、実問題へアプローチするために計算モデルを簡略化してどの程度の成果が得られるのかを試行している。その結果、計算モデルにおけるビット演算精度を落とすといった工夫を用いることにより、一定の計算精度を担保した形で、深層学習やマルコフチェーンモンテカルロ法などの計算手法がFPGA上で実現できることを示した。

研究成果の概要(英文)：This project aims to verify the feasibility of implementing computationally expensive models on FPGAs. The main objectives of this project include evaluating computational costs and programming the Markov Chain Monte Carlo (MCMC) method for FPGA implementation. Specifically, we implemented a computational model based on the Ising spin model on an FPGA and applied the MCMC method to compute the states of this model. Additionally, to apply this method to spectral decomposition, we developed a computational algorithm that combines the temperature-exchange MCMC method and evolutionary computation for spectral decomposition.

研究分野：ソフトコンピューティング

キーワード：エッジデバイス FPGA MCMC法

### 1. 研究開始当初の背景

統計的機械学習において、計算機の手速度は重要なファクターを占める。計算を加速させるハードウェアとしては、並列化された Central Processing Unit (CPU) や、Graphical Processing Unit (GPU) が、そのメインストリームを占める。CPU や GPU は、大規模な計算に適合しているが、データを計算機が接続されているストレージに集めてから処理を行う必要があり、大量のデータを扱う場合はネットワークの転送量がボトルネックとなることが多い。このような背景のもとで、データを収集するセンサー(エッジ)側において一定の処理を施し、中間状態のデータを転送するといった方法がエッジコンピューティングとして模索されている。エッジ側は大電力を用いる CPU や GPU などでの処理が期待できないため、論理合成回路をプログラムから生成する Field Programmable Gate Array (FPGA) と呼ばれる演算ユニットを用いた計算が注目を集めている。

機械学習手法は、様々な分野に応用されているが、近年では材料科学の分野においても Materials Informatics (MI) という名目で浸透しつつある。MI 分野では様々な応用が考えられているがその基盤となるものは計測であり、観測データから得られる情報が最も重要である。ここでは観測データを解釈する手法としてスペクトル分解を考える。右図にスペクトル分解の概要を示す。スペクトル分解は、観測データに含まれるピーク推定を行う手法であり、動径基底関数(Radial Basis Function: RBF)と呼ばれるニューラルネットワークモデルと捉えることもできる。スペクトル分解の応用範囲は広く、分光学、材料科学などの多岐に渡る分野に現れる課題である。

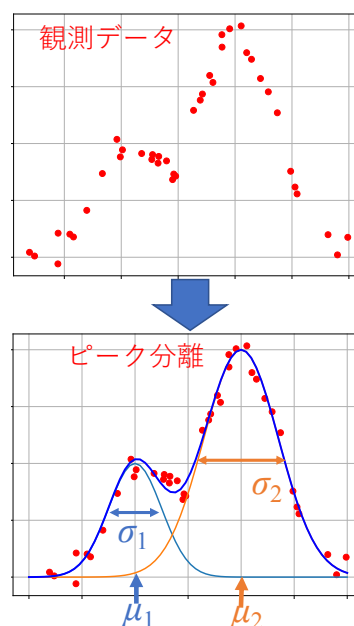


図 1: スペクトル分解概略

### 2. 研究の目的

FPGA は GPU や CPU に比べて安価で低電力なユニットであるため、機械学習テーマにおいて汎用的なアルゴリズムを記述でき、かつ実験規模が小規模は予備実験的な使用方法であれば十分に使用に耐えうると考えられる。特に FPGA は、カスタマイズ可能な論理回路をプログラミング言語から落とし込む高位合成と呼ばれる技術が熟成しつつあり、モデルのプロトタイプを作るだけであれば比較的簡単に実現可能となってきている。

一方、上述のスペクトル分解などで用いられる手法は、その説明性の高さからベイズ手法が用いられることが多く、ベイズ手法では、数理モデルの状態遷移でサンプルを生成させ、生成したサンプルの統計量を用いることでモデルのパラメータ推定を行う。その一方で論理回路を用いた FPGA がどの程度、このサンプル生成に対応可能かは不明である。このような背景のもと、本研究では、主に、高速で高並列なサンプリング手法を、エッジデバイスに対して実装することを目的とした。サンプリング手法は、モデルにおいて近似的な取り扱いをすることが少なくなるため、複雑なモデルに対しても比較的妥当な結果を算出することが可能な手法であり、スペクトル分解にも対応できる。特に Markov-Chain Monte Carlo (MCMC) 法は、サンプリング手法の中でも可用性が高く、様々な計算に用いられることが多いため、この手法を FPGA 上で実現することを目的とした。

### 3. 研究の方法

上述のように研究の対象としては、ベイズ手法を用いたスペクトル分解をターゲットとした MCMC 法の実装を目指した。ベイズ推定では期待値計算の精度と速度が運用上の鍵となるため、この部分に対して、安価で高速サンプルが可能な FPGA 計算システムを開発し提供する。この実現のために、以下の3つの課題を設けた。

- ・ FPGA を用いた数値計算上の問題の整理
- ・ スペクトル分解のための FPGA を用いた MCMC 法の実装
- ・ 階層型ベイズ推論への展開

最初の課題では、FPGA 特有の計算ロジックや乱数を扱う場合の数値評価と解析を行い、現状の FPGA でどの程度の問題規模が対処可能なのかを調査した。このため、スペクトル分解だけではなく様々な MCMC 法を FPGA の上で実現することを目指した。これらの計算上の結果を踏まえた上で、次の課題として FPGA 上にスペクトル分解の為の MCMC 法の実装を行い、トイ問題を解くことで性能評価を行った。最後の課題としては、これら2つの課題で得られた知見をもとに、構築したシステムをスペクトル分解の問題に適用した上で、実装の改良を行い、フィードバックすることで、構築モデルの精緻化とブラッシュアップを試みた。

#### 4. 研究成果

研究初年度では、FPGA を用いた場合の機械学習の問題点の洗い出しなどを行った。最初の FPGA ボードとしては Xilinx 社製の PYNQ-Z1 評価ボードを用いて、Ising モデルを用いた MCMC 法の実装を行った [6]。右に PYNQ-Z1 評価ボードの図を示す。PYNQ-Z1 は、安価で入手可能な FPGA ボードで、システムとしては Linux と Python の環境が動作するため予備実験に最適である。実験対象とした Ising 模型は磁石のモデルである。Ising 模型を選択した理由は、理論的な解析などが行われていること、CPU を用いた MCMC 法の結果など信頼できる比較対象が多くあることから、我々の計算結果がどの程度の精度を担保できるのかが議論可能という判断からである。この結果、Ising 模型の素子数が、ある程度あれば、一定の計算制度を保持できるということがわかってきた。

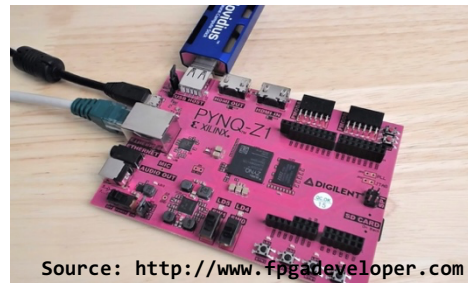


図 2: FPGA ボード

次年度以降の研究では、実際のスペクトル分解のアルゴリズム構築と [1-4], FPGA への実装を行った [5]。X 線光電子スペクトル (XPS) などに代表される分光法は、材料表面に存在する元素の定量評価だけでなく化学的結合状態分析ができる手法として広く知られている。このような組成分析では、さまざまな原子状態のスペクトルが重ね合わさった状態で検出されるため、これを図 1 のようなモデルを用意して分解する手法が重要となる。ピーク分離に関しては、非線形最小二乗法などの手法が主流であるが、推定されたパラメータがどの程度信頼できるかは重要である。このため、確率的な記述を導入し、ベイズ法を用いたアルゴリズムの構築を行ってきた。FPGA での実装は、サンプル適応型の MCMC (SA-MCMC) 法、メトロポリスヘイスティンズ (MH) 法の実装を行った。SA-MCMC ほうは Zhu らによって 2019 年に発表されたアルゴリズムであり、MH 法は 1970 年代に発表された古典的な MCMC 法のアルゴリズムである。MH 法はパラメータを事前分布から生成し、得られたパラメータをコスト関数に応じて受諾もしくは棄却する手法である。この手法は比較的単純であるが、分布が定常状態に達するまでの計算時間が多くかかる。これに対して SA-MCMC 法は、生成したサンプルが、できるだけ無矛盾になるように次のステップの状態生成をコントロールすることで定常状態に至る計算時間を小さくする手法である。図 3 に SA-MCMC 法の FPGA 上での実装をブロックダイアグラムとして示す。図 4 に FPGA 上で得られた人工的なスペクトルデータに関するフィッティング結果を図示する。スペクトルの基底関数はガウス関数状  $f_k(x; A_k, \mu_k, \alpha_k) = A_k \exp(-\alpha_k(x - \mu_k)^2)$  を用いた。擬似的なデータとしては、この基底関数を 2 つ用意してノイズを頂上したものを用いた。図 4 左の赤線は真の分布、黒点はデータ点、一点鎖線が予測したスペクトルとなる。図 4 左の推定スペクトルがノイズ環境下でも、良好な推定結果を示しているのが見て取れる。図 4 右は、定常状態から得られた生成サンプルの分布である。図 4 左の推定スペクトルは、この分布の MAP 推定から得られた図となる。

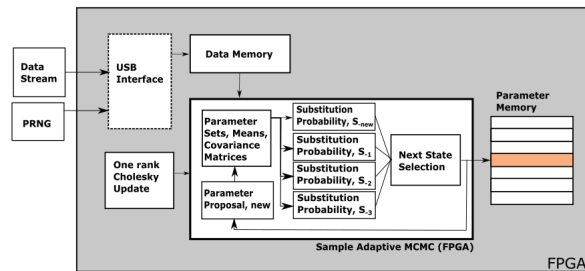


図 3: FPGA 内部のブロックダイアグラム ([5]より抜粋)

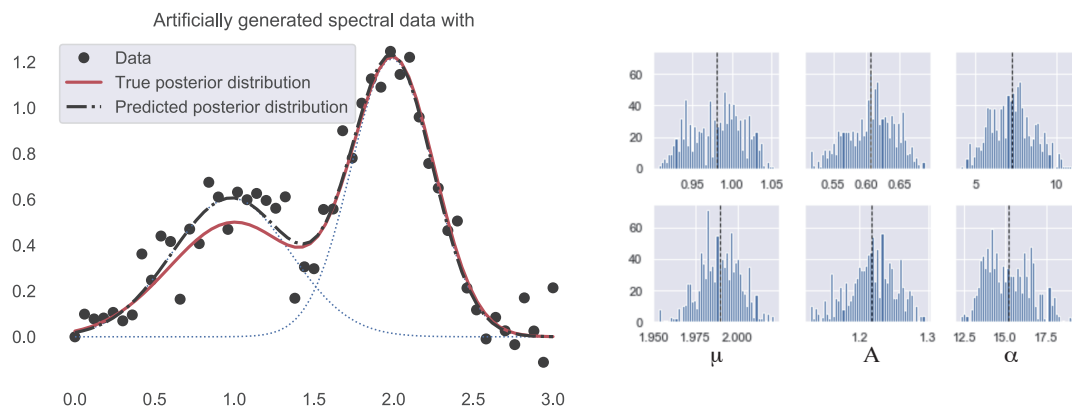


図 4: FPGA による推定スペクトルの結果 ([5]より抜粋)

## 主な研究発表

### 論文発表

- [1] Ryo Murakami, Hayaru Shouno, Kenji Nagata, Hiroshi Shinotsuka, and Hideki Yoshikawa, Determination of Common Peak Structure from Multiple X-Ray Photo-Electron Spectroscopy Data Sets. *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 1 (1): 182-91. (2021)
- [2] Atsushi Machida, Kenji Nagata, Ryo Murakami, Hiroshi Shinotsuka, Hayaru Shouno, Hideki Yoshikawa, and Masato Okada, Bayesian Estimation for XPS Spectral Analysis at Multiple Core Levels. *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 1 (1): 123-33. (2021)
- [3] Hiroshi Shinotsuka, Kenji Nagata, Hideki Yoshikawa, Yohichi Mototake, Hayaru Shouno, Masato Okada Development of spectral decomposition based on Bayesian information criterion with estimation of confidence interval, *Science and Technology of Advanced Materials*, 21(1), pp. 402-419(2020)
- [4] Ryo Murakami, Hiromi Tanaka, Hiroshi Shinotsuka, Kenji Nagata, Hayaru Shouno, Hideki Yoshikawa, Development of multiple core-level XPS spectra decomposition method based on the Bayesian information criterion, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 245, 147003(2020)

### 口頭発表, その他

- [5] Patrick Tchicali, Implementation Consideration for an FPGA-based MCMC System for Spectral Analysis, 電気通信大学 修士論文 (2021)
- [6] Patrick Tchicali, Hayaru Shouno, Implementation of an FPGA-based energy-efficient MCMC method for 2D Lenz-Ising model, 電子情報通信学会ニューロコンピューティング研究会, NC2019-45, pp. 55-60, Dec. (2019)

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Murakami Ryo, Shouno Hayaru, Nagata Kenji, Shinotsuka Hiroshi, Yoshikawa Hideki	4. 巻 1
2. 論文標題 Determination of common peak structure from multiple X-ray photo-electron spectroscopy data sets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 182 ~ 191
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.1957304	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Machida Atsushi, Nagata Kenji, Murakami Ryo, Shinotsuka Hiroshi, Shouno Hayaru, Yoshikawa Hideki, Okada Masato	4. 巻 1
2. 論文標題 Bayesian estimation for XPS spectral analysis at multiple core levels	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 123 ~ 133
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.1943172	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Murakami Ryo, Tanaka Hiromi, Shinotsuka Hiroshi, Nagata Kenji, Shouno Hayaru, Yoshikawa Hideki	4. 巻 245
2. 論文標題 Development of multiple core-level XPS spectra decomposition method based on the Bayesian information criterion	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena	6. 最初と最後の頁 147003 ~ 147003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.elspec.2020.147003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shinotsuka Hiroshi, Nagata Kenji, Yoshikawa Hideki, Mototake Yoh-Ichi, Shouno Hayaru, Okada Masato	4. 巻 21
2. 論文標題 Development of spectral decomposition based on Bayesian information criterion with estimation of confidence interval	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 402 ~ 419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2020.1773210	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 村上 諒, 庄野 逸, 永田 賢二, 篠塚 寛志, 吉川 英樹
2. 発表標題 参照スペクトルを使った多元素XPSスペクトルの解析手法の開発
3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 村上 諒, 庄野 逸, 篠塚 寛志, 永田 賢二, 吉川 英樹
2. 発表標題 多量のスペクトルデータを利用した参照スペクトルの推定手法の開発
3. 学会等名 第81回日本応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Patrick Tchicali, Hayaru Shouno
2. 発表標題 Implementation of an FPGA-based energy-efficient MCMC method for 2D Lenz-Ising model
3. 学会等名 電子情報通信学会ニューロコンピューティング研究会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	永田 賢二  (Nagata Kenji)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・主任研究員  (82108)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------