

平成 30 年 5 月 31 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13529

研究課題名(和文) STMデータ解析における統計物理学的モデル推定手法の構築

研究課題名(英文) Study on model inference technique based on statistical physics to STM dataset analysis

研究代表者

観山 正道 (Miyama, Masamichi)

東北大学・情報科学研究科・特任助教

研究者番号：60639095

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：STMトポグラフィ像に現れる原子を表すピークについて、その中心位置や幅といったパラメータをスパースモデリングを用いたベイズ推定によりデータそのものから推定可能にするアルゴリズムを開発した。これにより、超伝導を示すSrVO₃薄膜上の酸素原子位置を局所的な歪みや欠損位置まで含めて推定することができるようになった。さらに、原子欠損間に働く有効相互作用を推定することで背後にある物理過程を推測することや、二種類以上の原子が含まれるSTMトポ像から原子位置の特定と原子種の弁別をも可能にするアルゴリズムを開発した。また、モデル選択において重要な交差検証誤差について、再重率法を用いた高速な計算手法を開発した。

研究成果の概要(英文)：We developed an algorithm to estimate the peak position that represents atoms appearing in STM topography data by using the sparse modeling approach. Our algorithm is applicable to the real material samples, for example, SrVO₃ thin films. On top of that, we developed algorithms for investigating the effective interaction between the peaks from the experimental data, and for determining the species of atoms from STM topography datasets. We also developed a faster algorithm to calculate Leave-One-Out cross validation errors by using reweighting algorithm with Markov-chain Monte Carlo method.

研究分野：物理学

キーワード：統計物理 スパースモデリング データ解析 情報統計力学

1. 研究開始当初の背景

走査型トンネル顕微鏡は、ナノスケールの探針で試料表面を非接触的に走査し、表面の原子構造や電子状態を探るための技術である。これにより表面の凹凸情報を表す STM トポグラフィ像が原子解像度で得られる。

測定でデータに対する既存の解析手法は主にフーリエ解析を元にしており、大域的な表面構造の把握は可能であるが、格子の局所歪みや原子欠損の不均一な配置といった局所的な構造情報を定量的に抽出することはノイズが大きいと困難である。これらの局所情報は、例えば高温超伝導を示す金属酸化物薄膜や単原子層物質の物性発現機序の理解に重要である。

また、原子の種類や構造・物性に寄与する電子軌道に関する情報は、膨大な量の局所電子状態密度データに含まれているが、これを系統的に解析する手法は未だ存在せず、手つかずのままのデータが大量にある。

2. 研究の目的

走査型トンネル顕微鏡 (STM) によって得られるトポグラフィ (凹凸) データなどの二次元マップデータからノイズに埋もれて今まで見えなかった情報を取り出すため、マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) を用いたモデル推定などの統計物理学の新奇な知見を用いた新たなデータ解析手法の確立を目指す。具体的には、全原子位置の抽出のためのモデル推定法の構築とその推定精度の理論的検証を踏まえて、未知の金属酸化物薄膜における局所不均一構造の解明を第一段階の目標とする。さらに、電子状態密度分布データを含めたデータ解析から今まで困難であった原子種の同定や相互作用の解明を、大量のデータを組み合わせることによって可能にするための統計物理学的手法を確立する。

3. 研究の方法

測定対象の物質系における原子の位置や電子軌道を、二次元ガウス関数などの目的に応じた基底関数の重ね合わせとした物理モデル化を行う。例えば、原子位置推定においては、トポグラフィ像に現れるピークひとつひとつが原子や不純物、欠陥といった物理的対象そのものに対応しており、このピークを中心位置を推定することが原子位置を決めることに相当する。さらに、ピークの幅や高さといった情報はピークの種類や弁別にもちいることができ、そこから原子種の自動的な決定を行うことができる。

与えられたデータからのピーク分離を行うため、ベイズ推定を基礎とするアルゴリズムを開発した。具体的には、関連ベクトルマシンの概念を応用したモデルに対し、スパースモデリングで広く用いられる L_1 ノルム正則化を適用した。

さらに、複数の原子種を含むトポグラフィ像における原子種弁別のために、上記のアル

ゴリズムで推定したピーク強度を入力として、EM アルゴリズムを用いる。

4. 研究成果

一般的に、ピーク分離問題はピーク数が未知の場合について困難であることが知られており、本研究も計画立案当初においてはピーク数既知の状況についてのモデル推定手法の構築を目指していた。しかしながら、研究進展に伴い、機械学習で用いられる関連ベクトルマシン (RVM) を用いたデータモデルを構築することで、ピーク数未知の状況においても正しくピーク数、ピーク位置、ピーク強度を推定することが可能となった。

新たに実装された解析手法をダミーデータに適用することで我々の解析手法を用いることでデータピクセル数の解像度を越えた精度での原子位置推定が可能となったことが確かめられた。さらに、SrVO₃ 表面における STM トポグラフィデータに対しても本データ解析手法が有効であることが確かめられ、実際のデータに対しても格子歪みを検出できる精度での原子位置推定が可能となった。

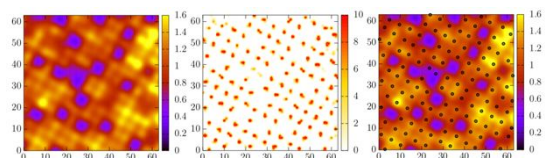


図 1. 開発したピーク分離アルゴリズムによる結果。左図は SrVO₃ 薄膜の STM トポグラフィデータ、中図はピーク強度分布、右図は抽出された原子位置 (黒点が酸素原子)

これを実データに対し適応する際には様々な困難がある。すなわち、スペクトル分解に用いる基底関数の選択、またサンプル表面の鉛直方向の不均一性 (すなわち、テラスなどの表面特有の構造) による誤判定などが挙げられる。しかし、東工大一杉研究室から提供された SrVO₃ 薄膜表面における STM トポグラフィデータに対する応用では、当初想定した二次元ガウス関数によるピーク分解が有効であることがわかり、実際に欠損の正確な密度推定、分布の特徴づけ、原子位置のゆらぎを高精度で定量化することが可能となった。特に、酸素原子欠損の分布に関しては、空間統計学の応用から 4 格子間隔程度までは排他的 (欠損間の斥力の存在を示唆)、それより長距離のスケールではランダムな配置であることが明らかとなり、局所的な不均一さがもたらす物性発現の解明に重要な物理量を定量化した。

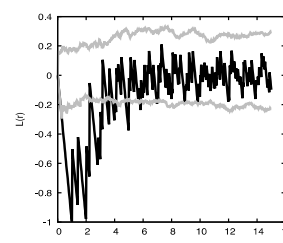


図 2. 酸素欠損分布に関するリプリーの L 関数の距離依存性。4 格子までは斥力的でそれより長距離ではランダムである。

さらに、Fe(Te, Se)などの鉄系超伝導物質においては、Te, Se という二つの種類の原子が共存しており、これらの空間分布や間に働く相互作用は不明である。我々のピーク分離アルゴリズムを新たな物質系に適用し、得られたピーク強度から各々のピークの種類を弁別することに成功した。

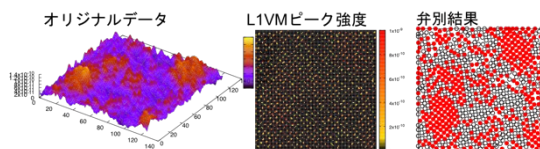


図3. EMアルゴリズムを用いたピーク強度からのピーク種の弁別。Fe(Te, Se)上のSTMトポグラフィデータに対して、Te, Se原子の弁別を行うことができた。

さらに、ボルツマン機械学習のアイデアを敷衍し、それぞれの間に関与する有効相互作用(引力か、斥力か、あるいはその相互作用長)を推定する枠組みを構築した。

また、これまでの推定において例えば、ピーク幅を決定する際に重要な交差検証エラーの平衡統計力学における再重率法を応用したマルコフ連鎖モンテカルロ法による新たなサンプリング手法を開発し、計算コストを小さくしたハイパーパラメタの決定を行うための手法が確立された。

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 1 件)

- Masamichi J. Miyama and Koji Hukushima, “Real-Space Analysis of Scanning Tunneling Microscopy Topography Datasets Using Sparse Modeling Approach”, 査読有, Journal of Physical Society of Japan, 87, 2018, 044801.
DOI: 10.7566/JPSJ.87.044801

〔学会発表〕(計 9 件)

- Masamichi J. Miyama, Bayesian inference of an effective interaction between atomic defects on the surface of SrVO₃, International Meeting on High-Dimensional Data Driven Science (HD3-2017), 2017 年
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, 2017 年 9 月, 日本物理学会
観山正道, 福島孝治, STM トポ像からの SrVO₃ 表面における原子欠損空間分布の推定, 日本物理学会, 2017 年 3 月 17 日, 大阪大学 (大阪府豊中市)
観山正道, 福島孝治, 非負値制約を用いたモデル推定とスパースモデリング, 日

本物理学会, 2016 年 9 月 16 日, 金沢大学 (石川県金沢市)

Masamichi J. Miyama and Koji Hukushima, Sparse modeling approach to STM datasets analysis, STATPHYS26, 2016 年 7 月 18 日~22 日, Lyon France

観山正道, 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 I, 日本物理学会, 2016 年 3 月 20 日, 東北学院大学 (宮城県仙台市)

Masamichi J. Miyama, Sparse modeling approach for STM data analysis by using LARS-LASSO, International Meeting on High-Dimensional Data Driven Science (HD3-2015), 2015 年 12 月 16 日, メルパルク京都 (京都府京都市)

観山正道, 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, 2015 年 9 月 19 日, 日本物理学会, 関西大学 (大阪府吹田市)

Masamichi J. Miyama, Sparse modeling approach to STM topography data analysis, “New Frontiers in Non-equilibrium Physics 2015”, 2015 年 7 月 21 日, 京都大学基礎物理学研究所 (京都府京都市)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

取得状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

〔その他〕
ホームページ等
<https://qard.is.tohoku.ac.jp>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

観山 正道 (Miyama, Masamichi)
東北大学・情報科学研究科・特任助教
研究者番号 : 60639095

(2)研究分担者 ()

研究者番号：

(3)連携研究者 ()

研究者番号：

(4)研究協力者 ()