

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：12102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K12735

研究課題名（和文）基底関数の物理特性を取り入れたスパースモデリング

研究課題名（英文）Sparse modeling using basis functions suitable for representing physical properties.

研究代表者

五十嵐 康彦 (Igarashi, Yasuhiko)

筑波大学・システム情報系・准教授

研究者番号：40733085

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では基底関数の物理特性を組み込んだSpM手法の開発を行った。その結果、XPSなどのスペクトルデータを対象にした高速なスペクトル分解アルゴリズムを構築した。さらに、理論公式をもとに基底関数をフーリエ展開から拡張することで放射光データ解析における効率的なデータ解析法を構築した。また、時系列データへの適用例として、超高速分光への展開を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では基底関数の物理特性を組み込んだスパースモデリング手法を開発し、計測データ解析への展開を行った。放射光データを対象にした解析法は、新規解析法として新規機能性材料や、熱電材料、二次電池の固体電解質材料等の物質の構造解明に応用され、電池の高機能化や長寿命化などに貢献することが期待される。また、コヒーレントフォノン計測への解析法は、光誘起構造相転移の光励起直後の初期ダイナミクスの解明等で重要な計測法で、物性物理学の様々な分野で盛んに研究が行われている。このように、スパースモデリングを汎用的に計測データへの解析に展開することで広範囲の波及効果が得られると考えられる。

研究成果の概要（英文）：In this study, we developed an SpM method that incorporates the physical properties of basis functions. As a result, we have constructed a fast spectral decomposition algorithm for spectral data such as XPS. Furthermore, an efficient data analysis method for synchrotron radiation data analysis was constructed based on the theoretical formulae, and the method was extended to ultrafast spectroscopy as an example of application to time series data.

研究分野：機械学習、計測科学

キーワード：スパースモデリング バイズ推論 機械学習 計測科学

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

計測において、これまで最も広く用いられている手法は、電波望遠鏡、NMR、MRI といったようにフーリエ変換後の周波数空間での計測である。しかし、計測時間の制約や計測器の性能限界による不可避の観測ノイズやデータ数の不足によって、得られたデータから現象を説明する周期性を抽出することが困難になりつつある。また、高次元データ処理の計算量は次元数に対して指数爆発(計算量爆発)する。

そこで、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、実際の時間でデータから最大限の情報を効率よく抽出できる技術である、スパースモデリング(Sparse Modeling, SpM)に注目が集まっており、実データを用いた周波数解析においても有効に機能することが明らかになりつつある。

計測データを y として、計測データを表現するためのフーリエ基底 Φ_k を用いて表現することを考える。 y の次元 N に比べてフーリエ基底 Φ_k の次元 P が多い場合 ($N < P$) が、計測等の制約によりデータ不足となっている場合に該当するが、この場合、解の一致性が満たされず、不定問題となる。SpM では、データに普遍的に内在するスパース(疎)性を仮定することで、不定問題を解消する。最も標準的な SpM である LASSO(Least absolute shrinkage and selection operator)においては、重みの絶対値(L1 ノルム)による正則化項を組み合わせた最適化を行うことで[Tibshirani 1996]、データを再構成しつづけるだけスパースな変数とするように最適化を行う。ただし、どの程度スパースか、非ゼロ変数の個数を決める正則化パラメータ λ の最適化が必要になり、重要な問題となっている。

2. 研究の目的

以上の研究背景から、本研究では基底関数の物理特性を組み込んだ SpM 手法の開発を行い、シミュレーションデータ及び実データへ適用する。研究期間内に以下三つの課題に取り組んだ。

A. 物理特性を組み込んだフーリエ計測の SpM 手法開発

周波数依存の正則化パラメータに対して、物理現象に特化した事前知識を利用して正則化パラメータのモデルを構築できると考えられる。S/N 比が低い計測回数の少ないデータからも、系の特徴を捉える重要なフーリエ基底を抽出する枠組みを提案する。本手法を他の基底関数抽出へも拡張する。

B. フーリエ基底を用いた実データへの応用

課題 A で開発した手法を、フーリエ基底を用いた実計測データである脳科学データと天文データに適用する。具体的には神経活動から視覚の応答特性の高速推定などに展開する。

C. 3次元データと時空間データの少数モード展開への応用

3次元データや時空間データ解析手法へ適用するため、球面調和関数の基底展開や、sparse Dynamical Mode Decomposition(sDMD)に対して本手法を拡張する。次に、材料探索を行うための物性データなどの実データに本手法を適用する。

3. 研究の方法

A. 物理特性を組み込んだ、フーリエ計測の SpM 手法開発

基底の次元 P がデータ次元 N に比べて少ない場合 ($N < P$)、誤差関数を 0 とするパラメータは、不定となる。そこで、正則化により解を絞り込む。重みの絶対値(L1)正則化では、パラメータを 0 にするような解を選ぶようになり、スパースな解を抽出できる。ところが、通常の LASSO では周波数応答への SpM を適用する上で、各フーリエ基底への正則化パラメータ λ は一定のため、測定ノイズが大きすぎると、不要な高周波成分が抽出される。

そこで、本研究では各々の物理現象に特化した事前知識を利用して正則化パラメータのモデルを構築する。これにより S/N 比が低い計測回数の少ないデータからも、系の特徴を捉える重要なフーリエ基底を抽出する枠組みを提案する。シミュレーションデータに対し提案手法の評価を行うとともに、Fused Lasso、縮小ランク回帰といった物理構造を恣意的に導入している先行研究との比較を評価する。

B: フーリエ基底を用いた実データへの応用

課題 A で開発した手法を、フーリエ基底を用いた実計測データである放射光データへの適用を行う。

C: 3次元データと時空間データの少数モード展開への応用

フーリエ基底だけでなく、少数の球面調和関数による空間パターンの展開や、時空間データを時間成分と空間成分にスパースな行列分解する手法であるスパース Dynamical Mode Decomposition (DMD) に対して、正則パラメータ λ の最適化手法による物理構造を事前知識として組み込んだ SpM 解析手法を開発する。前者の手法を、コヒーレントフォノン計測データへ適用することで、物性情報の効率的な抽出につなげ、材料開発の効率化に繋げる。

4. 研究成果

(1) スパースモデリングを用いたベイズ的スペクトル分解

我々は、スパースモデリングを用いた高速なベイズ的スペクトル分解アルゴリズムの開発に取り組んだ。スペクトル分解の問題は、「基底探索」と「回帰」の問題に分離できると考えられる。基底探索では、実現し得る基底の全ての組み合わせについて探索することが理想である。しかし基底の候補数 N に対して、組み合わせ探索の計算量は指数的に増大してしまう。そこで我々は、有効な基底セットの空間だけを効率的に探索する λ -scan 法を開発を行った。開発した λ -scan 法は、スパース制約を用いることで、モデル化を行う上で有効な基底セットの探索を少数のパラメータ (連続値) の操作の問題にマップすることを実現した。本手法を、XPS などスペクトルデータを模したシミュレーションデータに適用することで物理情報に適した基底情報を抽出することができた。

(2) スパースモデリングによる、広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS: Extended X-Ray Absorption Fine Structure) からの物理情報抽出

電池、電子デバイスなどの機能性部材の新機能発現や性能向上を実現するには、それらを構成する物質の構造とその変化を原子レベルで解明する必要がある。そこで原子スケールでこのマイクロ構造を解析できる「広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS: Extended X-Ray Absorption Fine Structure)」測定法が汎用的に使用されている。本研究では、物質を構成する原子がその化学構造や結合状態を反映して規則的に点在 (配位) し、そのため着目する原子から隣接原子までの距離が離散的、言い換えればまばら (スパース) である事実に着目した。そこで、EXAFS 振動スペクトルの解析に適切な基底関数を用いることでこうした課題が解決可能であると考え、SpM を適用した。その結果、従来法では必要とされたマイクロ構造の事前知識を必要とせず、測定データのみから、観測対象とする原子近傍 10 Å (1 nm) 程度までのマイクロ構造と、近接原子の構造ゆらぎや可動性を推定することを可能にした (図 1、[Akai et al., J. Phys. Soc. Jpn, 2018; Setoyama et al., J. Phys. Soc. Jpn, 2020])。この方法は、新規解析法として新規機能性材料や、熱電材料、二次電池の固体電解質材料等の物質の構造解明に応用され、電池の高機能化や長寿命化などに貢献することが期待される。

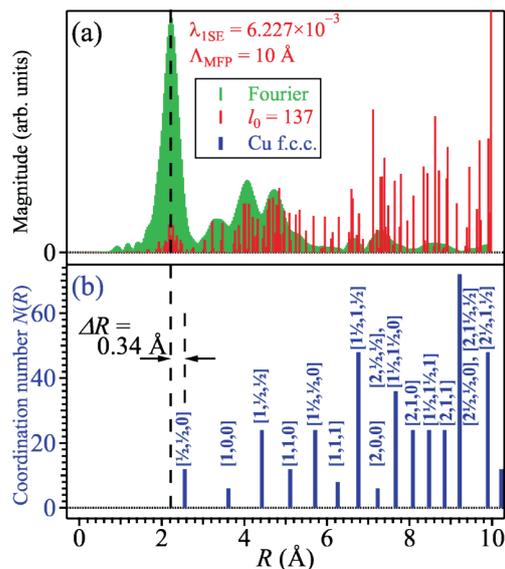


図 1. EXAFS へのスパースモデリングによる解析

(3) スパースモデリングを用いたベイズ推論の高速化と超高速分光への展開

本年度は、Bayesian LARS-OLS をコヒーレントフォノン (CP) 信号に適用した。近年のレーザー技術の進歩によって、パルス幅がフェムト秒オーダーの超短光パルスを、様々な物性とそのダイナミクス (時間変化) の計測 (図 2) に利用できるようになった。そのダイナミクス測定には、時間原点に強いポンプ光パルスを試料に入射し、光路差をつけて遅延させた弱いプローブ光を計測に用いるポンプ・プローブ法が用いられる。このポンプ・プローブ法は、

光検出器等の遅い電氣的応答に制限されず、光パルスのパルス幅できまる時間分解能で、超高速の物性変化を捉えることが出来る。図 2 に示したコヒーレントフォノン(CP) 信号は、ポンプ光の照射によって物質内に位相を揃えてフォノン振動が励振された結果、周期的に変動する物質の透過率や反射率をプローブ光で計測したものである。この CP 計測は、特に光誘起構造相転移の光励起直後の初期ダイナミクスの解明等で重要な計測法で、物性物理学の様々な分野で盛んに研究が行われている。

この CP 信号から、振動の振動数や初期位相等の物質の固有振動モードの物性情報を抽出するため、従来フーリエ変換が用いられてきた。しかし、CP 信号は減衰振動である上、実験データには必ず実験的アーティファクトが重畳するため、フーリエ変換スペクトル形状が周波数空間上で大きく広がってしまいピーク構造を捉え難く、初期位相の情報も失われる。さらに、CP 信号中の成分には物質の様々な格子振動を表す複数の固有振動モードが含まれており、適切に固有振動モードの

振動数や初期位相の情報を抽出するためには、少数の固有振動モードのみを抽出するモード選択を行う必要がある。先行研究では、フーリエ解析に変わる解析手法として CP の物理的性質に基づく減衰振動信号を解析可能である Sparsity-promoting Dynamic Mode Decomposition (SpDMD) による解析が提案されている。この既存手法では、データの実験ノイズの大きさを既知としてその大きさを規範にモード選択を行っている。しかしながら、実験ノイズは計測が困難な場合がありノイズの大きさが未知であることも多い。そこで、本研究では実験ノイズを用いずにモード選択を行う枠組みを提案する。先行研究で用いられた SpDMD によって候補となる振動モードを同定し、ベイズ的自由エネルギー最小化の枠組みで候補の中の組み合わせを選択する。選択されたモードが先行研究で選択されたモードと定性的に一致することを示した。また、モード分解によって抽出されたモードにガウスノイズを加えた人工データを作成し推定されたモードからもとの信号に対応するモードの再抽出が可能であることを示した[Sakata et al., STAM, 2020]。

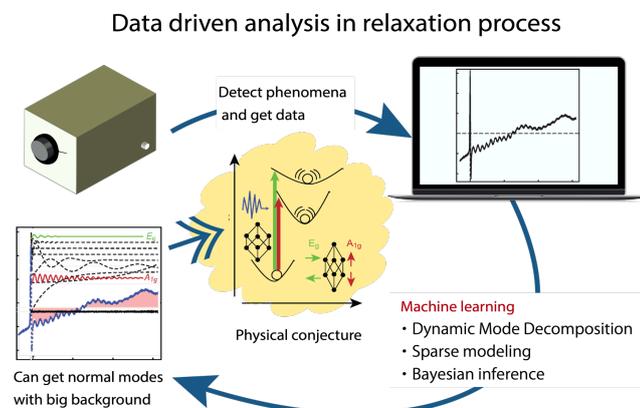


図 2. コヒーレントフォノン計測

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

| | |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名 Sakata, I., Nagano, Y., Igarashi, Y., Murata, S., Mizoguchi, K., Akai, I., & Okada, M | 4. 巻 21 |
| 2. 論文標題 Normal mode analysis of a relaxation process with Bayesian inference. | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials | 6. 最初と最後の頁 67-78 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/14686996.2020.1713703 | 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 Masashi Yoshikawa, Yasuhiko Igarashi, Shin Murata, Toshitaka Baba, Takane Horii & Masato Okada | 4. 巻 40 |
| 2. 論文標題 A nonlinear parametric model based on a power law relationship for predicting the coastal tsunami height | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Marine Geophysical Research | 6. 最初と最後の頁 467-477 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s11001-019-09388-4 | 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 Yasuhiko Igarashi, Hiroko Ichikawa, Yoshinori Nakanishi-Ohno, Hikaru Takenaka, Daiki Kawabata, Satoshi Eifuku, Ryoji Tamura, Kenji Nagata, and Masato Okada | 4. 巻 1036 |
| 2. 論文標題 ES-DoS: Exhaustive search and density-of-states estimation as a general framework for sparse variable selection | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series | 6. 最初と最後の頁 1-13 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-6596/1036/1/012001 | 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 Ichiro Akai, Kazunori Iwamitsu, Yasuhiko Igarashi, Masato Okada, Hiroyuki Setoyama, Toshihiro Okajima and Yasuhiro Hirai | 4. 巻 87(7) |
| 2. 論文標題 Sparse Modeling of an Extended X-Ray Absorption Fine-Structure Spectrum Based on a Single-Scattering Formalism | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan | 6. 最初と最後の頁 1-7 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.87.074003 | 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 Yasuhisa Nakashima, Yasuhiko Igarashi, Yasushi Naruse and Masato Okada | 4. 巻 87(8) |
| 2. 論文標題 Robust One-dimensional Phase Unwrapping using a Markov Random Field Model | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Physics Society of Japan | 6. 最初と最後の頁 1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.084801 | 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 Junichi Taniguchi, Kyohei Tagawa, Masashi Yoshikawa, Yasuhiko Igarashi, Tsuneo Ohsumi, Hiroyuki Fujiwara, Takane Hori, Masato Okada, and Toshitaka Baba | 4. 巻 13 |
| 2. 論文標題 Selection of tsunami observation points suitable for database-driven prediction | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Disaster Research | 6. 最初と最後の頁 245-250 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.20965/jdr.2018.p0245 | 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 吉川真史, 五十嵐康彦, 村田伸, 馬場俊孝, 堀高峰, 岡田真人 | 4. 巻 117(293) |
| 2. 論文標題 べき乗則をもとにした津波高予測のための非線形パラメトリックモデル | 5. 発行年 2017年 |
| 3. 雑誌名 信学技報 | 6. 最初と最後の頁 261-267 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし | 査読の有無 無 |
| 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13件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件)

| |
|--|
| 1. 発表者名 H. Kumazoe, Y. Igarashi, F. Iesari, K. Iwamitsu, T. Okajima, Y. Seno, M. Okada, I. Akai |
| 2. 発表標題 L1 Regression Method to Analyze Microscopic Structure for Extended X-Ray absorption fine structures |
| 3. 学会等名 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials, Kobe, Japan. (国際学会) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 五十嵐康彦, 瀬戸山寛之, 岡島敏浩, 赤井一郎, 岡田真人 |
| 2. 発表標題 EXAFSスペクトル解析における, ベイズ推論を用いた基底選択 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会, 10pK36-10, 岐阜大学. |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 イェザーリ・ファピオ, 瀬戸山寛之, 五十嵐康彦, 岡田真人, 熊添博之, 岩満一功, 赤井一郎, 妹尾与志木, 岡島敏浩 |
| 2. 発表標題 Sparse Modeling analysis of EXAFS data using two-body formalism |
| 3. 学会等名 第22回XAFS討論会, 京都大学. |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Yasuhiko Igarashi, Hiroyuki Setoyama, Toshihiro Okajima, Ichiro Akai, Masato Okada |
| 2. 発表標題 Bayesian basis selection and reliability inference for extended X-ray absorption fine structures (EXAFS) |
| 3. 学会等名 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (NCM14), Nichii, PortIsland, Kobe. (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 柏原健之朗, 吉川真史, 五十嵐康彦, 馬場俊孝, 堀高峰, 岡田真人 |
| 2. 発表標題 海底水圧データを用いた津波高予測手法の比較 |
| 3. 学会等名 人工知能学会全国大会(第32回) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yasuhiko Igarashi |
| 2. 発表標題 A nonlinear parametric model based on power law for tsunami height prediction at Owase in the Kii Peninsula, Japan |
| 3. 学会等名 Asia Oceania Geosciences Society(AOGS) (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 柏原健之朗, 吉川真史, 五十嵐康彦, 馬場俊孝, 堀高峰, 岡田真人 |
| 2. 発表標題 海底水圧データと沿岸津波高の相関を利用した津波高予測 |
| 3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2018年大会 |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 柏原健之朗, 吉川真史, 五十嵐康彦, 馬場俊孝, 堀高峰, 岡田真人 |
| 2. 発表標題 海底水圧データを用いた津波高予測手法の比較 |
| 3. 学会等名 人工知能学会全国大会(第32回) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Junichi Taniguchi |
| 2. 発表標題 Regression of coastal tsunami height from tsunami height of offshore observation points with L1 regularization |
| 3. 学会等名 International Tsunami Symposium(ITS) 2017 (国際学会) |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 吉川真史 |
| 2. 発表標題 べき乗則をもとにした津波高予測のための非線形パラメトリックモデル |
| 3. 学会等名 第20回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS2017) |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名 五十嵐康彦 |
| 2. 発表標題 共通ノイズを持つ系のスパイク3次相関の相互情報量解析 |
| 3. 学会等名 第27回日本神経回路学会全国大会(JNNS2017) |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 吉川真史 |
| 2. 発表標題 べき乗則をもとにした津波高予測のための非線形パラメトリックモデル |
| 3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2017年大会 |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 谷口純一 |
| 2. 発表標題 L1正則化項付き線形回帰による津波予測に適した観測点配置の検討 |
| 3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2017年大会 |
| 4. 発表年 2017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 |
|--|---------------------------|-----------------------|----|
|--|---------------------------|-----------------------|----|

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 |
|---------|---------|
|---------|---------|