

ACT-I「情報と未来」研究領域 領域活動・評価報告書 －2021年度終了研究課題－

研究総括 後藤 真孝

1. 研究領域の概要

情報学とそれに基づく技術開発の目覚ましい進展は、これまでに学術・産業・社会・文化的に新たな価値を生み続けてきましたが、今後も未来社会を創造する中心的技術として、その重要性がより一層高まっています。既に情報学・情報技術は、あらゆる学術分野の進展や、産業・経済の持続発展、物理空間・情報空間が融合した社会基盤の高度化、健康で文化的な生活の質の向上等において、本質的な役割を果たしています。そのため、情報学における独創的な研究開発を推進して、人類が現在および未来において直面する問題を解決しつつ新たな価値を創造することは、人類の未来を切り拓き、人類が持続発展していく上で不可欠です。

本研究領域では、情報学における研究開発によって未来を切り拓く気概を持つ若手研究者を支援するとともに、新しい価値の創造につながる研究開発を推進します。具体的には、人工知能、ビッグデータ、IoT、サイバーセキュリティ等を含む、情報学に関わる幅広い専門分野において、新しい発想に基づいた挑戦的な研究構想を求めます。今後の学術・産業・社会・文化を変えていくような多種多様な研究開発を、独創的な発想によっていかに推進するかが重要だと考えています。

研究推進においては、未来開拓型の研究開発、価値創造型の研究開発を募り、本研究領域で若手研究者同士がお互いに切磋琢磨し相互触発する場を設けることで、未来社会に貢献する先端研究を推進する研究人材の育成や、将来の連携につながる研究者のヒューマンネットワーク構築を促していきます。それによって、ひとときわ輝き存在感のある研究者がより一層増え、ひいてはより良い未来社会が切り拓かれることを期待します。

なお、本研究領域は文部科学省の人工知能/ビッグデータ/IoT/サイバーセキュリティ統合プロジェクト(AIP プロジェクト)の一環として運営していきます。

2. 事後評価対象の研究課題・研究者名

件数：3期生加速フェーズ・・・12件

※研究課題名、研究者名は別紙一覧表参照

3. 研究実施期間（本事後評価対象期間）

3期生加速フェーズ研究者：2020年4月～2022年3月

(注記：ACT-I標準期間2018年10月～2020年3月も研究に従事しているが、本評価対象期間には含まない)

4. 領域の活動状況

(1) 領域会議(非公開)：3期生加速フェーズ研究者・・・7回参加(ACT-I標準期間を含む)

第5回領域会議	2018年11月16日～18日開催	・・・3期生研究者
第6回領域会議	2019年6月21日～23日開催	・・・3期生研究者
第7回領域会議	2019年11月15日～17日開催	・・・3期生研究者
第8回領域会議	2020年6月13日～14日開催	・・・3期生加速フェーズ研究者
第9回領域会議	2020年11月14日～15日開催	・・・3期生加速フェーズ研究者
第10回領域会議	2021年6月19日～20日開催	・・・3期生加速フェーズ研究者
第11回領域会議	2021年11月20日～21日開催	・・・3期生加速フェーズ研究者

(2) 担当アドバイザーによるサイトビジット(非公開)

本領域の運営にあたっては担当アドバイザー制を採用した。これは各領域アドバイザーが、1、2名の研究者の担当となり、研究計画や進捗状況について確認、助言を行い、各研究者が個を確立するために細やかなサポートを行うことを支援する制度である。

担当アドバイザーによるサイトビジット(研究実施場所等の訪問)を3期生加速フェーズ研究者は5回ずつ(ACT-I標準期間を含む)実施した。サイトビジットでは各研究者と担当アドバイザーが個別に研究推進について議論を行った。

(3) 成果発表会(公開)

2022年3月12日(土)日本科学未来館

詳細:<https://www.jst.go.jp/kisoken/act-i/presentation2022/index.html>

5. 事後評価の手続き

研究者の研究報告書を基に、領域会議、サイトビジット、成果発表会等での発表・質疑応答、領域アドバイザーの意見などを参考に、下記の流れで研究総括が評価を行った。

(事後評価の流れ)

2021年12月1日	研究報告書提出
2021年12月	研究総括および領域アドバイザーによる評価
2022年3月	成果発表会(公開)
2022年3月~5月	被評価者への評価フィードバック

6. 事後評価項目

(1) 研究課題等の研究目的の達成状況

但し、未達成の場合であっても、独創性や挑戦性が認められ、将来的に高水準の発展が見込まれる場合は積極的に評価する。

(2) 研究実施体制及び研究費執行状況

(3) 研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果(今後の見込みを含む)

ACT-Iでは、「学術・産業・社会・文化を変えていくような多種多様な研究開発の推進」を支援しているため、学術・産業・社会・文化のいずれかへの波及効果(今後の見込みを含む)を評価する。

7. 評価結果

本領域では、若手研究者が個を確立し、自由な発想で主導権を握りながら挑戦的な研究開発を推進する支援をするとともに、将来の連携の土台となる人的交流の機会を提供してきた。こうした環境の中で、2018年度より研究を開始した3期生加速フェーズ研究者12名は学術・産業・社会・文化的に新たな価値を生み出し、未来を切り拓く気概を持って、今解決すべき問題、あるいは、未来に起こりうる問題の解決に向けて切磋琢磨し、情報学に関わる様々な成果が出てきた。今後も12名それぞれが研究活動や人的交流を継続して、多様な研究テーマで世界をリードする活躍をしていくことを期待したい。

(1) 穂山 空道 研究者 担当アドバイザー:井上アドバイザー

「次世代メモリデバイスによるアプリケーションの自動高速化」

本研究は、データにビット化け(エラー)が混入することを許容する代わりに DRAM のランダムアクセス遅延を改善する新技術 Approximate Memory を利用したアプリケーション高速化に取り組んできた。Approximate Memory はデバイスレベルでは様々な特性などが明らかにされているものの、それでアプリケーションを実際に高速化するためには課題が残されている。これまでは定性評価に留まっていたが、本研究ではアプリケーションのデータが持つエラー耐性の粒度と Approximate Memory においてエラー率を制御できる粒度が異なることに起因する問題を定量的に評価した。また、プログラムの入力誤差と出力誤差の関係をプログラムの微分値で数理的に理解する独自の提案をした。これらは Approximate Memory 実用化のために、エラー発生メカニズムを考慮した上でソフトウェア側からの利用方法を追求した独創的な成果で高く評価できる。若手奨励賞等も受賞しており、今後も本分野の中心的研究者としての活躍が期待される。

(2) 伊藤 伸志 研究者 担当アドバイザー:湊アドバイザー

「部分的フィードバックに基づくオンライン凸最適化」

本研究は、オンライン最適化問題において、「ハイブリッド型アルゴリズムの開発」、「敵対的外乱に対する頑健性の考察」、「問題設定の探索・拡張と解析」の3つの研究テーマに取り組んだものである。これまで ACT-I 標準期間中に機械学習分野での難関トップ会議として知られる NeurIPS 2019 に主著者として3件(1件は単著)採択されるという驚くべき成果を出していたが、加速期間中にも COLT 2021 に1件(単著)、NeurIPS 2020 に3件(1件は単著)、NeurIPS 2021 に2件(単著)の論文を主著者で通しており、研究活動の勢いは衰えていない。しかも、NeurIPS 2020 の3件は、いずれも spotlight presentation 枠(全投稿論文 中上位約 4%の評価)で採択されている。若手研究者としての突出した実績に基づく高い評価はすでにゆるぎないものとなっており、ACT-I 研究者の中でも尊敬を集めている存在であるといえる。今後は企業研究者

の立場も利用しつつ、社会の発展に寄与するような研究成果を着実に創出していく活躍が期待される。

(3) ヴァルガス ダニロ 研究者 担当アドバイザー:松尾アドバイザー

「頑強なハイブリッド深層学習モデルの自動探索システム」

本研究は、深層学習における頑健性につながる新しいパラダイムとアーキテクチャの発見を目指すものである。一般的な深層学習と異なる方法で、自己組織的な挙動により、変数をチャンキングするアルゴリズムは、AAAI 2021 に採択された。また、以前から研究開発を進めてきていた 1 ピクセル攻撃に関連して、ピクセルの変化がニューラルネットワークにどのように波及していくのかについての分析を行った。このように、新しいアイデアを次々と実装、検証し、論文成果につなげることができている。脳科学や生物進化にヒントを得ながら、深層学習の実装に活かしていくスタイルを確立しつつあり、今後、深層学習の分野に大きな発展をもたらす可能性がある。今後も本研究で行ったような大胆なアイデアと実装力で、分野全体を牽引していくことが期待される。

(4) 大城 泰平 研究者 担当アドバイザー:湊アドバイザー

「組合せ最適化と線形代数の交点における理論と応用の探求」

本研究は、重みなし組合せ最適化問題を重みつき組合せ最適化問題に拡張し、具体的な2つの問題を通して、重みなし問題と重みあり問題の間に存在する理論のギャップを埋め、「重みつき組合せ最適化問題」と「多項式行列の問題」の数学的な対応関係を明らかにすることを目指した。ACT-I 標準期間中には理論計算機科学のトップ国際会議 ICALP 2020 に採択されていたが、加速フェーズ期間中にも順調に研究を進捗させ、パフィアンペアをさらに線形マトロイドパリティ問題の世界に拡張することで「パフィアンパリティ」という構造を提案し、組合せ最適化問題の準トップ会議である ICPO 2021 に採択された。さらに、理論計算機科学の準トップ会議である ISSAC 2021 に相次いで採択され、その成果が当該分野の研究コミュニティでも認められている。今後も大いに活躍することが期待される。

(5) 鈴木 雄太 研究者 担当アドバイザー:土井アドバイザー

「材料計測データのモダリティ変換」

本研究は、X 線解析パターン(XRD)から結晶構造(3次元の原子配置)推定を高速かつ自動で行うものである。加速フェーズ期間中は、ACT-I 研究者との共同研究により、DNN を用いて XRD パターンから結晶構造を直接予測することを可能にし、さらにその過程で DNN を用いた結晶構造のベクトル表現を考案した。DNN を使ったモダリティ変換の枠組みは、XRD 以外の計測モダリティ(X線吸収スペクトル、中性子回折パターン、電子顕微鏡画像など)を増やして統合した学習と予測を可能にするような応用が期待できる。また、シミュレーションに用いる結晶構造物理モデルのパラメータ調整を、ブラックボックス最適化の問題として定式化することで、XRD のデータ解析を自動化し熟練者が手作業で数時間以上かかっていたデータ解析を自動かつ 30 分程度で終わるようにするという、想定以上の成果をあげた。今後も研究活動を発展させ、XRD 結晶構造解析ならびに材料情報学の分野で大いに活躍することが期待される。

(6) 中村 優吾 研究者 担当アドバイザー:川原アドバイザー

「多様な IoT デバイスを用いたコンテキスト認識に基づく次世代ナッジの創出」

本研究は、人々に強制することなく、望ましい選択や行動を導く「ナッジ」の考え方を IoT センサによるコンテキストウェア技術と組み合わせ、新たなサービス・アプリケーション開発に活用する挑戦的な研究である。加速フェーズ期間内に、IoT データ駆動ナッジ(IoT ナッジ)モデルの概念化を進め、コロナ禍で求められる健康行動変容シナリオを対象としてアプリケーションを開発した。一例である「eat2pic」と名付けられたシステムでは、カメラや IMU センサから得られる信号をマルチモーダルに解析することによって、栄養学上の知見に基づく食材の食べる順序や速度の意識づけを狙った。これらの研究成果について、国内外でも積極的な成果発表を行っており、その成果は受賞という形で研究コミュニティでも高く評価されていることがわかる。既に JST さきがけ「社会変革に向けた ICT 基盤強化」研究領域に 2021 年度に採択されており、IoT ナッジという新分野を切り拓く研究者として今後の活躍が期待される。

(7) 中山 悠 研究者 担当アドバイザー:原アドバイザー

「適応的に再構成する通信ネットワーク」

本研究は、Beyond 5G に向けて、デバイス間通信を促進するメカニズム、モバイルネットワークの水中へ

の拡張、ネットワークエッジにおける DDoS 攻撃の抑制、新たな通信チャネルとしての光カメラ通信など、多様な観点から適応的に再構成するネットワークの開発を目指すものである。本研究の成果は、通信分野で著名な論文誌や国際会議に多数採択されており、学術的に高く評価されている。本研究で取り組む課題は、Beyond 5G や IoT など今後のネットワーク環境における重要な課題を解決する基盤技術を構築するものであり、学術的な貢献に加えて、社会的な意義が大きい。ACT-I 研究者同士の共同研究を非常に活発におこなって論文発表してきた点も高く評価できる。既に JST さきがけ「IoT が拓く未来」研究領域に 2021 年度に採択されており、さきがけ研究者としても挑戦的な研究に取り組んで、今後も益々活躍し、情報学分野の中心人物となって分野全体をけん引していくことが期待される。

(8) 鳴海 紘也 研究者 担当アドバイザー:五十嵐アドバイザー

「デジタルファブリケーションによる生体模倣インタフェースの構築」

本研究は、生体機能をインタフェースやロボットシステムに組み込むことで、新しいインタラクションやファブリケーションの手法を実現しようとするものである。加速フェーズ期間ではサナギが成虫に変わるような生体の形態変化に着目し、自己組み立て(Self-assembly)や折り紙およびそれらを支援するインタフェースの研究を行った。具体的には、①3D モデルをカプトムシのサナギのように折りたたんだ状態で印刷し、印刷後に構造物を展開する手法、②折り紙の機構を備えた家具などのプロダクトデザインにおける設計・シミュレーション・製造を支援するソフトウェア、③計算機折り紙の分野に見られるテセレーションなどの非常に複雑な折り紙のパターンを自動で折ることのできる技術を開発した。いずれについても、これまでにない新しいインタラクションやファブリケーションを実現するものであり、高く評価できる。今後も大きなインパクトを与えるような活躍が期待される。

(9) 早志 英朗 研究者 担当アドバイザー:尾形アドバイザー

「生体信号の確率的生成モデルと推論ニューラルネット」

本研究では、解釈性が高く欠損値に強い確率的生成モデルと、高い表現能力と強力な学習能力を持つニューラルネットワーク(NN)を融合させ、両者の長所を相補的に生かす機械学習手法の基礎的な検討を行った。この融合という困難な問題に対し、(A) NN への確率モデル埋め込み、(B) NN による確率モデル推定、および、(C) 確率モデルによる NN 解釈、という形に整理し、着実にこれらに取り組んだ。そして、混合正規分布に基づくスパースな識別モデルと NN への埋め込みや、筋電識別に特化した Johnson 分布に基づく NN の提案、生成と識別のハイブリッドモデルと半教師有り学習への応用等の成果を創出した。それらの研究成果をトップ会議を含む 5 件の国際会議論文、1 件のジャーナル論文などで発表しており、高く評価できる。今後も、確率的生成モデルとニューラルネットワークモデルの融合における先駆的研究者としての活躍が期待される。

(10) 船橋 賢 研究者 担当アドバイザー:内田アドバイザー

「分布型触覚センサと機械学習に基づく多指ハンドによるタスク実現」

本研究は、触覚センサを各指に多数搭載したロボットハンドによって柔軟な把持動作を実現することを目指した、情報学とロボット工学の融合分野の研究である。触覚センサを多数搭載して 1152 点の触覚点を取得できる独自のロボットハンドのハードウェアを用いて、そのセンシング結果を Graph Convolutional Neural Networks (GCN)に入力し、次時刻の動作を決定する点に研究者の独創性がある。ロボットハンドのシステムを実装し、円筒物体把持の実験を通して、同システムの性能を検証している。さらに、外乱を与えた場合にも、高い割合で復旧動作が可能なることも確認している。一連の成果がロボット分野のトップ国際会議 ICRA、IROS で採択されているだけでなく、既にロボットハンドとアームの統合による操り動作のダイナミックなデモも実現している点が高く評価できる。今後もロボットハンド等でハードウェア・ソフトウェア両面の知識を兼ね備えた第一人者としての活躍が期待される。

(11) 宮武 勇登 研究者 担当アドバイザー:河原林アドバイザー

「連続型数理モデル構築のための不確実性定量化手法」

本研究は、時間連続的に変化する現象を扱う観測データなどから微分方程式のパラメータ推定を行う手法開発を目指している。具体的には、ACT-I 標準期間中に開発した微分方程式の数値計算の不確実性定量化手法が、本来の微分方程式のパラメータ・初期値推定の観点でどのような利点があるかを詳細に検討して、既存手法よりも適切に推定精度を評価できることを明らかにした。そして、数値計算の不確実性は時

間発展とともに増大する(信頼度は低下する)、という数値解析分野では一般的な仮定を制約条件から外し、不確実性を求める際に解く最適化問題の目的関数に正則化項を加える定式化を提案した。さらにその定式化を、新たに一般化近単調回帰理論を整備して理解可能にすることに成功した点も特筆できる。既にJST さきがけ「数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用」研究領域に 2021 年度に採択されており、今後はさきがけ研究者として、さらにインパクトの大きな成果を出すことが期待される。

(12) 横田 達也 研究者 担当アドバイザー:土井アドバイザー

「高階埋め込みテンソルモデリングの研究」

本研究は、従来のようにテンソルの原空間で数理モデルを適用するのではなく、高階かつ高次元な埋め込み空間で数理モデルを適用して解析する高階埋め込みテンソルモデリングに関する研究である。加速フェーズ期間では、多重遅延埋め込み変換(MDT)によって得られるブロックハンケルテンソルに対して低ランクテンソル分解を適用するアプローチについて研究し、MDT、テンソル分解、逆 MDT の 3 段階処理のスケラビリティの問題を、定式化を修正して克服し、メモリ使用量爆発問題を解決しつつ計算時間を 1/100 に縮小するなどの成果をあげた。さらに、MDTと多様体学習を組み合わせた新しい画像復元の手法 MMES (manifold modeling in embedded space)を提案し、により、ボケ復元や超解像などのタスクでは従来法を上回る高い復元性能を実証した。今後も研究の深化とともに、応用展開も含め、大いに活躍することが期待される。

8. 評価者

研究総括 後藤 真孝 産業技術総合研究所 人間情報インタラクション研究部門 首席研究員

領域アドバイザー (五十音順)

五十嵐 健夫	東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授
井上 大介	情報通信研究機構 サイバーセキュリティ研究所 室長
内田 誠一	九州大学 大学院システム情報科学研究所 教授
尾形 哲也	早稲田大学 理工学術院 教授
川原 圭博	東京大学 大学院工学系研究科 教授
河原林 健一	国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授
千葉 滋	東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授
土井 美和子	情報通信研究機構 監事
中小路 久美代	公立はこだて未来大学 情報アーキテクチャ学科 教授
原 隆浩	大阪大学 大学院情報科学研究科マルチメディア工学専攻 教授
松尾 豊	東京大学 大学院工学系研究科 教授
湊 真一	京都大学 大学院情報学研究科 教授

9. 外部発表件数、特許出願件数、受賞等、招待講演 (2020 年度～2021 年度)

(1) 外部発表件数

	国内	国際	計
論文	2	49	51
口頭	42	36	78
その他	9	13	22
合計	53	98	151

(2) 特許出願件数

国内	国際	計
2	5	7

(3) 受賞等

<2020 年度>

・稲山 空道 電子情報通信学会 コンピュータシステム研究専門委員会 研究会優秀若手発表賞:

- 複雑なデータ構造を持つアプリケーションを対象とした Approximate Memory 適応の検討
- ・鈴木 雄太 日本放射光学会 学生発表賞: ブラックボックス最適化を用いたリートベルト解析の自動化
- ・中村 優吾 IPSJ インタラクシオン 2021 優秀論文賞: eat2pic: 食事と描画の相互作用を用いた健康的な食生活を促すナッジシステム
- ・中村 優吾 IEEE PerCom 2021 Best Demo Award: eat2pic: Food-tech Design as a Healthy Nudge with Smart Chopsticks and Canvas
- ・鳴海 紘也 Best Paper Award Runner Up, IEEE International Conference on Soft Robotics (RoboSoft 2020): Liquid Pouch Motors: Printable Planar Actuators Driven by Liquid-to-gas Phase Change for Shape-changing Interfaces
- ・鳴海 紘也 Best Demo Award, 33rd Annual ACM Symposium on User Interface Software and Technology (UIST 2020): poimo: Portable and Inflatable Mobility Devices Customizable for Personal Physical Characteristics
- ・早志 英朗 第 23 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2020) インタラクティブ発表賞: 識別・生成のハイブリッドモデルと弱教師あり学習への応用

<2021 年度>

- ・穂山 空道 情報処理学会 システム・アーキテクチャ研究会若手奨励賞: Approximate Memory におけるエラー混入対象データの重要度の事前推定に関する検討
- ・伊藤 伸志 第 24 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2021) 優秀発表賞: ハイブリッド型バンディットアルゴリズム
- ・中村 優吾 ACM Ubicomp/ISWC2021 Best Poster Honorable Mention Award: IoT Nudge: IoT Data-driven Nudging for Health Behavior Change
- ・鳴海 紘也 People's Choice Best Demo Honorable Mention Award, 2021 ACM CHI Conference on Human Factors in Computing Systems (ACM CHI 2021): Flower Jelly Printer: Slit Injection Printing for Parametrically Designed Flower Jelly
- ・船橋 賢 ICRA2021 Cognitive Robotics Best Paper Award: Detection of Slip from Vision and Touch
- ・船橋 賢 ROBIO2021 Biomimetics Best Paper Award: A Multi-Fingered Robot Hand with Remote Center of Motion Mechanisms for Covering Joints with Soft Skin

(4) 招待講演

- 国際 5 件 (2020 年度: 2 件、2021 年度: 3 件)
- 国内 14 件 (2020 年度: 12 件、2021 年度: 2 件)

ACT-I「情報と未来」領域 事後評価実施 研究課題名および研究者氏名

3期生加速フェーズ研究者(12名)

研究者氏名 (参加形態)	研究課題名 (研究実施場所)	所属・役職(2022年3月末現在) (加速フェーズ開始時所属)	加速フェーズ 研究費(百万円)
稲山 空道 (委託先機関に所属)	次世代メモリデバイスによるアプリケーションの自動高速化 (東京大学)	東京大学 大学院情報理工学系研究科 助教 (東京大学)	14
伊藤 伸志 (委託先機関に所属)	部分的フィードバックに基づくオンライン凸最適化 (日本電気株式会社)	日本電気株式会社 データサイエンス研究所 主幹研究員 (日本電気株式会社)	20
ヴァルガス ダニロ (委託先機関に所属)	頑強なハイブリッド深層学習モデルの自動探索システム (九州大学)	九州大学 大学院システム情報科学研究院 准教授 (九州大学)	24
大城 泰平 (学生)⇒ (委託先機関に所属)	組合せ最適化と線形代数の交点における理論と応用の探求 (東京大学)	東京大学 大学院情報理工学系研究科 特任助教 (東京大学)	20
鈴木 雄太 (学生)	材料計測データのモダリティ変換 (総合研究大学院大学)	総合研究大学院大学 高エネルギー加速器科学研究科 物質構造科学専攻 大学院生 (総合研究大学院大学)	23
中村 優吾 (委託先機関に所属)	多様なIoTデバイスを用いたコンテキスト認識に基づく次世代ナッジの創出 (九州大学)	九州大学 大学院システム情報科学府 助教 (奈良先端科学技術大学院大学)	20
中山 悠 (委託先機関に所属)	適応的に再構成する通信ネットワーク (東京農工大学)	東京農工大学 工学研究院 先端情報科学部門 准教授 (東京農工大学)	22
鳴海 紘也 (委託先機関に所属)	デジタルファブ리케이션による生体模倣インタフェースの構築 (東京大学)	東京大学 大学院工学系研究科 特任講師 (東京大学)	20
早志 英朗 (委託先機関に所属)	生体信号の確率的生成モデルと推論ニューラルネット (九州大学)	九州大学 大学院システム情報科学研究院 助教 (九州大学)	20
船橋 賢 (学生)⇒ (委託先機関に所属)	分布型触覚センサと機械学習に基づく多指ハンドによるタスク実現 (早稲田大学)	早稲田大学 次世代ロボット研究機構 次席研究員 (早稲田大学)	25
宮武 勇登 (委託先機関に所属)	連続型数値モデル構築のための不確実性定量化手法 (大阪大学)	大阪大学 サイバーメディアセンター 准教授 (大阪大学)	18
横田 達也 (委託先機関に所属)	高階埋め込みテンソルモデリングの研究 (名古屋工業大学)	名古屋工業大学 大学院工学研究科大 准教授 (名古屋工業大学)	20

以上

研究報告書

「次世代メモリデバイスによるアプリケーションの自動高速化」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50241
研究者：穂山 空道

1. 研究のねらい

計算機のメモリはプロセッサに比べ非常に遅いという問題がある。これは後者の性能の伸びに対して前者の性能伸びが著しく遅いからである。メモリを構成する DRAM のランダムアクセス遅延(キャッシュに乗っていないデータを要求してからそのデータが届くまでの時間)は、2007年と2020年のそれぞれ時点の仕様でほぼ同一である。一方同一の期間でプロセッサの性能はシングルコア性能だけでも数倍、コア数は32から64倍になっており、合計の数値計算性能は数百倍になっている。従って計算機上で実行されるソフトウェアの性能改善のためメモリの性能改善が急務である。

Approximate Memory とは DRAM のランダムアクセス遅延を改善する新技術であり、データにビット化け(エラー)が混入することを許す代わりに従来にない性能向上が可能である。これ DRAM 内部の電氣的動作に定められたタイミング制約を意図的に逸脱し、電氣的に完全に安定になるのを待たずに操作する技術である。

Approximate Memory はデバイスレベルでは様々な特性などが明らかにされているものの、Approximate Memory を使いアプリケーションを実際に高速化するためには課題が残されている。そこで本研究のねらいは、Approximate Memory によってアプリケーションを自動的に高速化することである。ここで自動的とは、ユーザはアプリケーションの最終出力に許容できる誤差(例:正しい結果から1%の誤差を許す)を指定するだけでそれを保証するために必要な制御は全てシステムがユーザの関与なしに行うことである。

2. 研究成果

(1)概要

研究のねらいを達成するため、本研究では (A) エラー制御粒度とエラー耐性粒度の違いによる Approximate Memory 実用化困難性の検証 および (B) プログラム出力の誤差を保証する制御パラメータ決定手法の研究 に取り組んだ。

研究テーマ (A) は、ACT-I 本期間で発見した Approximate Memory 実用化における課題について、これまで定性評価に留まっていたものを定量的に評価したものである。これにより当該課題が Approximate Memory 実用化の上で無視できない重要課題であることが示された。本成果はこれまで看過されていた問題を定性・定量の両面で明らかにしたものであり、課題の解決には至っていないもののその指摘・定量評価自体が大きな成果である。

研究テーマ (B) は、Approximate Memory の自動的な制御のためにプログラム出力の許容誤差からデバイスの制御パラメータを逆算する手法の必要要素である。この逆算には三段階の考慮すべきものがある(詳しくは「(2)詳細」を参照)が、そのうちこれまで最も議論が

されていない「プログラムの入力誤差と出力の誤差の関係」を理解する研究を行った。具体的には、プログラムの入力誤差と出力誤差の関係をプログラムの微分値を使って数理的に理解することを提案し、また Approximate Memory 制御の観点から微分値を求める際の課題を明らかにした。さらに課題の解決策としてサンプルデータに関して求めた微分値の再利用を提案し、どのようなアプリケーションならば再利用が可能なのかを実際のデータを用い議論した。コンピュータアーキテクチャ研究では実際の現象に基づいて帰納的に手法を提案する方法論が多い中、本研究は入出力の誤差の理解に数理的な手法を持ち込んだ点で価値が高い。

(2) 詳細

研究テーマ A「エラー制御粒度とエラー耐性粒度の違いによる Approximate Memory 実用化困難性の検証」

本テーマでは、ACT-I 本期間で発見・指摘したアプリケーションのデータが持つエラー耐性の粒度と Approximate Memory においてエラー率を制御できる粒度が異なることに起因する問題をさらに深ぼりし、本問題が実際に重要な問題であることを示した。

アプリケーションのデータが持つエラー耐性の粒度は、数バイトの単位になりえる。例えばグラフのノードを構造体で表現し、ノード同士をポインタで繋いでグラフを表現する例を考える。このケースでは 1 ビットのエラーも許されないポインタというデータと、よりエラー耐性の高いデータ(例えばノードの評価値)が 1 つの構造体に格納されメモリ上近接する。

しかし Approximate Memory ではエラー率を制御できる粒度はより大きく、512 バイトや数キロバイトである。これは低速なメモリが高速なプロセッサに追いつくために多くのビットを同時に駆動する必要性からくる制約であり、回避することは極めて難しい。

ACT-I 加速期間では本問題の重要性を証明するため、以下の 2 つの貢献をした：

- (1) ACT-I 本期間で行っていた現実のコード分析による類似ケース発見の強化
- (2) 既存のメモリアウト変換技術による性能低下を評価し、Approximate Memory の利点を打ち消してしまう可能性があることを示した。

貢献 (1) では新たに SPEC CPU 2017 のメモリアクセスパターンとソースコードを分析し、SPEC CPU 2006 と同様の傾向があることを確認した。

貢献 (2) では既存のメモリアウト変換技術について調査し、それを再現するようなメモリ配置をシミュレータで再現することで性能低下を評価した。メモリアウト変換技術とは、構造体の各メンバをメモリ上離れた位置(アドレス)に配置することでキャッシュヒット率の向上を目指す手法である。本手法によりエラー耐性の異なるデータ(上記の例ではポインタとそれ以外)をメモリ上離れた位置に配置でき、異なるエラー率を適用できる。

メモリアウト変換技術はキャッシュヒット率の向上を目的としているものの、逆にキャッシュヒット率を低下させてしまう場合もある。例えばグラフの評価値に応じたの子ノードを辿るかを選ぶプログラムを考えると、構造体内の評価値と子を指すポインタは時間的に近くにアクセスされる。この時ポインタとその他のデータをメモリ上離れた位置に配置するとキャッシュヒット率低下により性能が低下する。

メモリアウト変換技術による性能低下を Approximate Memory による利点と比較するため、図 1(研究成果リスト(1) の 1 より引用)のようなシミュレータを開発した。本シミュレー

タは入力にレイアウト変換を適用するデータのアドレスと当該データ内のどのメンバをメモリ上離れた位置に配置するかの情報を取る。これらの情報をもとにシミュレータはプログラムコードからは完全に独立に内部的にメモリレイアウトを変換する。プログラム実行にかかったサイクル数をメモリレイアウト変換なしのケースと比較することで性能低下を評価する。

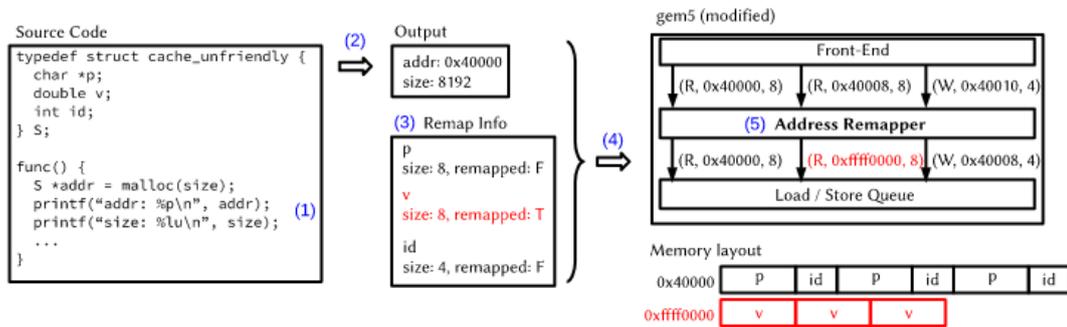


図 1: メモリレイアウト変換技術による性能低下を評価するためのシミュレータ

開発したシミュレータによる評価により、メモリレイアウト変換による性能低下が最悪ケースでは Approximate Memory の利点を打ち消すほど大きいことを発見した。

研究テーマB「プログラム出力の誤差を保証する制御パラメータ決定手法の研究」

本テーマでは Approximate Memory 上で動作せるプログラムの出力の誤差をユーザの希望以内に抑えるための手法を探った。これを実現するためには、Approximate Memory の制御パラメータからプログラムの出力誤差への三段階の影響を逆算する必要がある。第一に制御パラメータ(タイミング制約)とビット化け発生パターンとの関係、第二にビット化け発生パターンとプログラムの入力の誤差の関係、最後にプログラムの入力の誤差とプログラムの出力の誤差の関係である。

ACT-I 加速期間では三段階の影響のうちプログラムの入力の誤差とプログラムの出力の誤差の関係をプログラムの微分を用いて分析することを提案した。プログラムの微分とはプログラムを数学的な関数として微分する技術であり、入力 x のある値 x_t での微分係数を計算できる。微分係数は入力 x が dx だけずれたときの出力のずれであり、プログラムの入力の誤差とプログラムの出力の誤差を表現している。

プログラムの微分を Approximate Memory 制御に利用するために、微分をどのように求めるかが課題である。例えば x^2 の微分は $2x$ であるように、微分は入力に依存する。従って原理的には与えられた入力に関する微分を入力値ごとに計算する必要があるが、これにはプログラムの微分の原理からプログラムの通常実行と同じ時間計算量がかかる。しかし本研究の Approximate Memory 利用目的は高速化であり、微分の計算にプログラムの通常実行と同じ時間がかかっては無意味である。

そこで文献「その他の成果」の 4 では、サンプルデータに関して求めたプログラムの微分値がどのような場合に再利用可能であるかを研究した。数学的にはプログラムが入力に対して線形である場合、非線形であっても入力にかかる比例係数がごく小さい場合には微分値

の入力への依存性が低い。しかし実際のプログラムに関してどのような場合がこれに該当するかは議論されていない。

具体的に ACT-I 加速期間では、画像処理アプリケーションを対象にプログラムの微分値を実際に算出しその変動を議論した。アプリケーションはガウシアンフィルタ、ソーベルフィルタ、離散コサイン変換、バイラテラルフィルタ、簡単なニューラルネットワークの推論である。

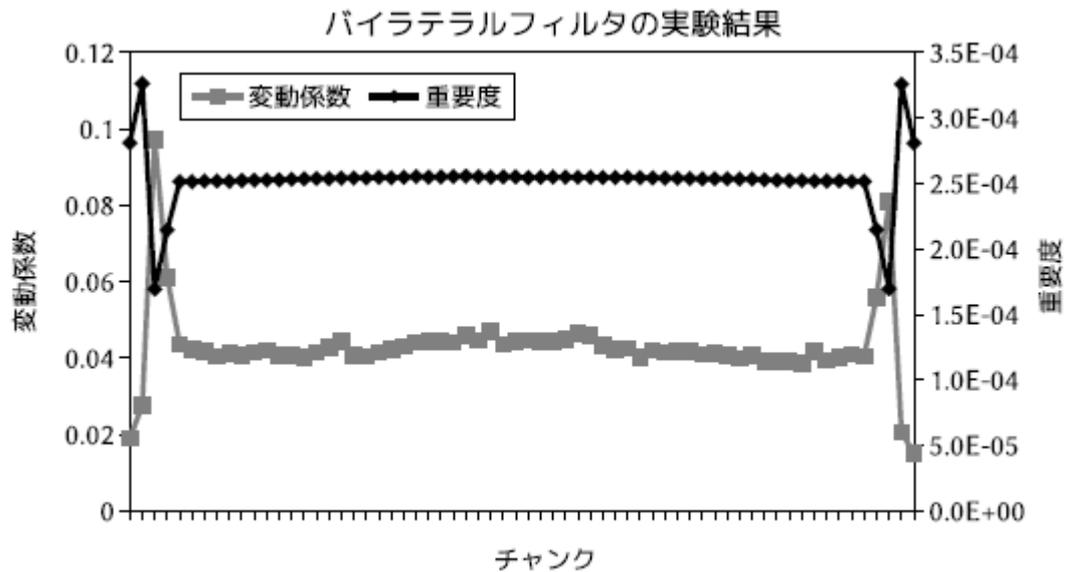


図 2: バイラテラルフィルタにおける画像のチャンク(行)の重要度とその変動係数

図 2 はバイラテラルフィルタアプリケーションについて、画像のチャンク(1 行)ごとに重要度とその変動係数を求めたものである。チャンク的重要度とは、そのチャンクに含まれる画素値がずれたときに出力値がどの程度ずれるかを示す値、変動係数とは重要度の複数の画像に対する平均を分散で割った値である。

図 2 からバイラテラルフィルタでは重要度の変動係数はおよそ 4%程度であり、本アプリケーションでは Approximate Memory 制御のためにサンプルデータに関して求めた微分値をその他のデータに関しても使いまわせる可能性が高い。詳細な実験設定やその他のアプリケーションに関する結果は文献「その他の成果」の 4 を参照のこと。

3. 今後の展開

今後の展開は (1) Approximate Memory の自動制御に向けた研究を引き続き推進すること、(2) 本研究で得られた知見をほかの Approximate Computing パラダイムにも適用し学術的波及効果を狙うこと、の二点である。

(1) について、本研究期間ではこれまで看過されていた課題を発見した点、これまで用いられてこなかった数的手法を導入した点で独創的な成果があったものの、大きな最終目標の達成には道半ばである。本研究期間で得た知見・技術を基に今後も目標達成に向け研究を行う。

(2) について、他の Approximate Computing パラダイムとは例えば CPU 内部の演算を高速・不正確に行うための回路研究などが該当する。例えば加算を高速・不正確に行うためには繰り上がりの伝播を途中で打ち切る手法が知られており、その制御(どこで打ち切るか)はアプリケーション

ンの最終出力の許容誤差から逆算し決定するべきと考えている。そのためには本研究で提案したようにプログラムの入出力の誤差同士の関係を数理的な理解が有効だと予想される。

4. 自己評価

研究目的の達成状況

研究目的の達成に向け着実に進捗している。本研究の成果はいずれもこれまでほかの研究者によって議論されていなかったものであり、Approximate Memory の自動的な制御に向けて本質的な課題を世界に先駆けて明らかにしている。今後も引き続き研究を続けることで最終目標を達成できると考える。

研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

研究費は状況に応じて臨機応変に執行することができた。新型コロナウイルス感染症拡大の影響により予定していた海外滞在や国際会議での情報収集ができなくなったが、その予算を有効活用し研究を進めることができた。

研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

研究成果の科学技術及び学術の波及効果は、Approximate Memory というハードウェア制御のためにプログラムの微分という数理的な手法を持ち込んだことが大きいと考える。コンピュータアーキテクチャ分野の多くの研究では具体的な事象に基づき改善策を提案する帰納的な方法論が多いが、本研究ではそれに一石を投じるものである。

研究課題の独創性・挑戦性

本研究課題は Approximate Memory 実用化のためにエラー発生メカニズムを考慮した上でソフトウェアからの利用方法を明らかにしようとする点で独創的である。これに対し従来の Approximate Memory 研究はデバイスレベルの特性を明らかにする最も下層レイヤーの研究および、エラー発生メカニズムを考慮しないソフトウェアレベルでの利用法を明らかにする最も上層レイヤーの研究がほとんどであった。またハードウェアからソフトウェアまですべてのレイヤーを考慮する必要性から挑戦性も高い。例えば研究成果の詳細に記したテーマ A ではハードウェアレベルの動作原理とソフトウェアレベルのメモリレイアウト変換技術両方の知識が必要だった。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Soramichi Akiyama, Ryota Shioya. The Granularity Gap Problem: A Hurdle for Applying Approximate Memory to Complex Data Layout. Proceedings of 12th ACM/SPEC International Conference on Performance Engineering (ICPE). 2021. pp. 125 – 132.

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. Soramichi Akiyama. Assessing Impact of Data Partitioning for Approximate Memory in C/C++ Code. The 10th Workshop on Systems for Post-Moore Architectures (SPMA). 2020. pp. 1 – 7.
2. 情報処理学会 システム・アーキテクチャ研究会若手奨励賞, 2021 年 7 月.
3. 電子情報通信学会 コンピュータシステム研究専門委員会(CPSY)研究会優秀若手発表賞, 2020 年 12 月.
4. 穂山 空道, 塩谷 亮太. Approximate Memory におけるエラー混入対象データの重要度の事前推定に関する検討. 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ. 2021 年 7 月. pp. 1 – 10.
5. 穂山 空道, 松宮 遼, 吉藤 尚生, 梶 信也. Approximate Memory 制御手法の評価のためのベンチマーク開発. 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ. 2021 年 7 月. pp. 1 – 9.
6. 穂山 空道, 塩谷 亮太. 複雑なデータ構造を持つアプリケーションを対象とした Approximate Memory 適応の検討. Hot Spring Annual Meeting. 2020 年 10 月. pp. 1 – 11.

研究報告書

「部分的フィードバックに基づくオンライン凸最適化」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50242
研究者：伊藤 伸志

1. 研究のねらい

評価指標が不確定ななかで意思決定を繰り返し逐次的に戦略を改善するための数理モデルとして、オンライン最適化の枠組みが知られている。この枠組みでは、複数のラウンドにわたって解の出力と目的関数の観測を繰り返しながら、それらの総和の最小化を目指す。ここで目的関数の情報は解を出力した直後に与えられる。

オンライン最適化の技術は、オンライン予測問題やオンラインポートフォリオ選択問題など、様々な逐次的意思決定問題において有用であるが、目的関数の情報について部分的なフィードバックしか得られない実問題には直接適用できない。そこで本研究課題では、部分的なフィードバックのもとでのオンライン凸最適化問題を考察し、アルゴリズムを開発するとともに、問題の複雑性を解析することで、ある意味での最適なアルゴリズムの開発と最適性の証明を目指す。これによって、制限された観測のもとでのオンライン予測問題などを含む、多くの逐次的意思決定問題に対する統一的なアプローチを提供する。

研究提案者はこれまでの研究を通して、線形の問題設定に対しては少情報性・計算効率性・最適性のトレードオフの問題を解決し、非線形の問題設定に対しても特定のクラスや仮定を加えた状況を考えることで、いくつかの進展を得た。その一方で、より一般の非線形の問題設定や、異なる評価指標での解析など、多くの重要な未解決問題が残っている。例えば、一般のバンディット凸最適化に対しては、計算効率性を無視した場合でも、達成可能な性能の限界が分かっておらず、大きな改善の余地を残している。また、損失関数が一定の確率分布に振る舞うかそうでないか判断できない場合には、どちら状況に対しても有効なハイブリッド型アルゴリズムを考えることが実用上重要であるが、現状知られるハイブリッド型アルゴリズムは非常に単純な問題クラスに限られている。本研究ではこれらの課題の解決に取り組む。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究では、オンライン最適化の理論の探求を目指しておもに「ハイブリッド型アルゴリズムの開発」、「敵対的外乱に対する頑健性の考察」、「問題設定の探索・拡張と解析」の3つの研究テーマに取り組んだ。オンライン最適化の研究領域においては、目的関数が定常的にふるまう確率的モデルや非定常的にふるまう敵対的モデルなどのさまざまな環境モデルが考察され、それぞれのモデルに適したアルゴリズムが提案されてきた。一方で、これらの結果を実問題に応用するとき、適切なアルゴリズムの選定がむずかしいという課題があった。「ハイブリッド型アルゴリズムの開発」においては、さまざまな環境モデルに自動的に適応し、複数の異なるアルゴリズムの強みを両立するアルゴリズムを提案した。また、「敵対的

外乱に対する頑健性の考察」においては、定常性と非定常性が混合されている状況を考え、その問題設定における最適な性能保証の特徴付けをあたえた。「問題設定の探索・拡張と解析」においては、フィードバック遅延がある状況や、通常と異なる性能指標の性質を考察し、新たなアルゴリズムの提案や性能の解析を与えた。

上記のそれぞれのテーマにおいて複数の論文を執筆し、そのうち3件の主著論文 [1, 2, 3] が機械学習の最難関国際会議 NeurIPS2020 の spotlight presentation 枠(全投稿論文中上位約 4%の評価)で採択され、発表を行った。また、1件の単著論文 [4] を機械学習理論の国際会議 COLT2021 で発表した。加えて、2 件の単著論文 [5, 6] が国際会議 NeurIPS2021 に採択された。

(2) 詳細

研究テーマ A「ハイブリッド型アルゴリズムの開発」

テーマ A の研究活動では、さまざまな環境に自動的に適応し、複数の異なるアルゴリズムの強みを両立するアルゴリズムを考察した。オンライン最適化の研究領域においては、目的関数が定常的にふるまう確率的モデルや非定常的にふるまう敵対的モデルなどのさまざまな環境モデルが考察され、それぞれのモデルに適したアルゴリズムが提案されてきた(図 1)。とくに、敵対的モデルに対しては、ばらつきの小さいデータ列や滑らかに変化するデータ列など、特定の構造をもつ目的関数列に対してより有効的に動作するアルゴリズムが構成されている。このような、特定の構造に対する有効性の理論保証はデータ依存リグレット上界とよばれる。一方で、これらの結果を実問題に応用するとき、適切なアルゴリズムの選定がむずかしいという課題があった。たとえば、部分的フィードバックに基づくオンライン最適化の枠組みにおいて、基本的な問題設定である多腕バンディット問題に対しては、(1)確率的モデル用アルゴリズム(2)敵対的モデル用アルゴリズムにくわえて、複数の(3)データ依存リグレット上界保証ありアルゴリズムが構成されており、それぞれ異なる強みをもつが、実問題への適用のさい、どのアルゴリズムが最も有効的であるかを事前に判断するのは困難である。既存研究では、(1)と(2)のそれぞれの長所を両立する、つまり確率的モデルにおいても敵対的モデルにおいてもほぼ最適に動作するアルゴリズムが提案されていたが、(3)のほうがより有効である可能性は残っていた。本研究では、この結果を拡張し、(1)(2)(3)すべての長所を両立する初のアルゴリズムを提案し、その有効性を数理的に証明した(図 2)。この結果をまとめた論文 [4] は機械学習理論の国際会議 COLT2021 に採択された。また、同様の結果をより一般的かつ複雑な問題設定である組合せセミバンディット問題、線形バンディット問題に拡張し、それらの結果をまとめた論文 [2, 6] はそれぞれ機械学習の国際会議 NeurIPS2020, NeurIPS2021 に採択された。

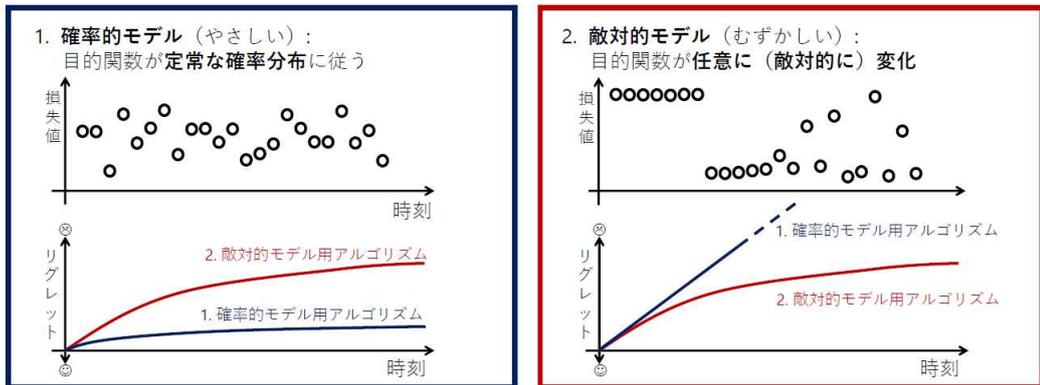


図 1. 二つの環境モデルの例とアルゴリズムの性能の傾向.

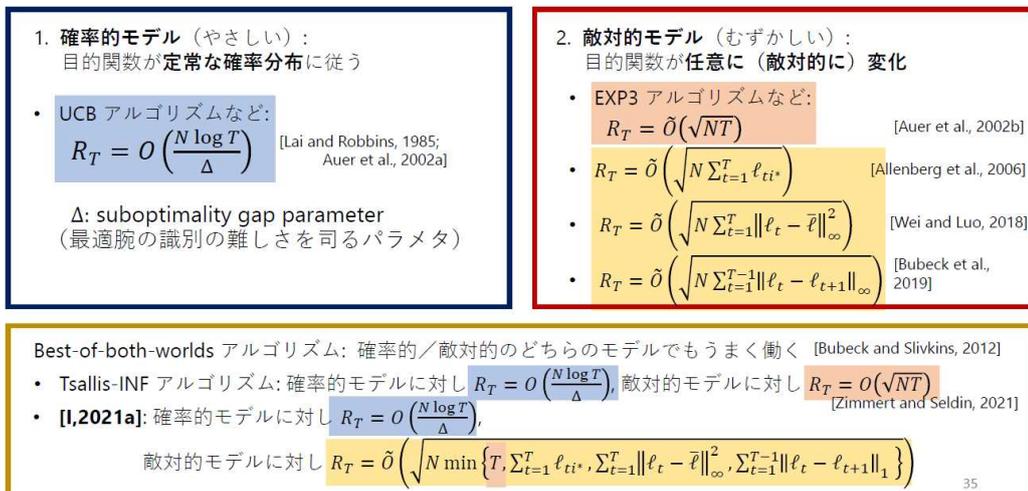


図 2. 確率的モデル用アルゴリズム (薄青), 敵対的モデル用アルゴリズム (薄赤) データ依存リグレット上界 (薄期黄) と提案アルゴリズム ([I, 2021a]).

研究テーマ B「敵対的外乱に対する頑健性の考察」

テーマ B の研究活動では、定常性と非定常性が混合されている状況を考え、その問題設定における最適な性能保証の特徴付けをあたえた。テーマ A のハイブリッドアルゴリズムに関する取り組みにおいては、定常的な確率的モデルと非定常的な敵対的モデルのそれぞれに適応する方法を考察したが、現実には、完全に定常的な状況や完全に非定常的な状況は珍しく、むしろこのふたつのモデルの中間的な状況が多く見られる。本研究では、そのような中間的な状況の具体例として、定常的なモデルから生成された目的関数列に非定常的な外乱が加わるモデルを考察した。一般に、このモデルに対してのアルゴリズムの性能を解析することで、そのアルゴリズムの訓練データの改ざんに対する頑健性を評価できる。本研究では、エキスパート問題、多腕バンディット問題、組合せセミバンディット問題などさまざまなオンライン最適化問題において、敵対的改変付き確率的モデルを考察し、あるクラスのア

ゴリズムが最適な性能保証をもつことを証明した。主要な結果をまとめた論文 [5] が国際会議 NeurIPS2021 に採択された。論文 [6] も敵対的改変付き確率的モデルに対する性能解析の結果を含む。

研究テーマ C「問題設定の探索・拡張と解析」

テーマ C の研究活動では、フィードバック遅延がある状況や、アルゴリズムの性能指標の性質を考察し、新たなアルゴリズムの提案や性能の解析を与えた。オンライン最適化の標準的な枠組みでは、決定した行動とその時点の目的関数についてのフィードバックが行動の直後に得られる状況が想定されるが、実問題においてはそのような即時的なフィードバックが得られるとは限らない。本研究では、そのような状況に対応できるよう遅延フィードバックの問題設定を考察した。とくに、遅延フィードバックの敵対的線形バンディット問題を考察し、この問題設定に対するアルゴリズムを提案、その最適性を数理的に証明した。この結果をまとめた論文 [3] は国際会議 NeurIPS2020 に採択された。また、swap regret と呼ばれるアルゴリズムの性能指標の性質を解析した。この指標は、複数の意思決定主体がオンライン最適化の枠組みに基づいて意思決定を繰り返したときの振る舞いに関連しており、アルゴリズム的ゲーム理論の領域においても研究されてきたが、この指標を最小化する問題の達成可能限界は明らかにされていなかった。本研究では、この問題の複雑性解析を改善し、達成可能限界を初めて明らかにした。

2. 今後の展開

これまでの研究を通して、凸性や線形性の構造をもつ一部のオンライン最適化問題に対してハイブリッド型オンライン最適化アルゴリズムや、外乱に対して頑健なアルゴリズムを構成することができた。その一方で、一般の非線形の問題設定や、各時刻での意思決定がそれ以降の意思決定の制約に影響する階層的な意思決定問題などで、同様のアルゴリズムを構成可能かという問題ははまだ未解決である。また、最適行動が時刻変化するような任意の環境変化への追従を実現するには、標準的な解析技法を超えた新たな技法が必要と考えられているが、その考察対象は現時点では非常に単純な問題クラスに限られている。今後の研究ではこれらの課題の解決に取り組む。並行して、オンライン最適化ソフトウェアの開発を推進する。現状では、理論に留まっているオンライン最適化の研究成果が多くあり、実世界での応用例や利用しやすいソフトウェアはあまり知られていない。今後の研究活動では、この課題の解決も目指す。

4. 自己評価

研究の達成状況を振り返ると、ハイブリッド型アルゴリズムの開発については当初の計画を超えた進展があり、満足のいく結果が得られたと考える。オンライン最適化の理論研究コミュニティにおいては、特定の環境下における最適なアルゴリズムが何かという問題意識が重視され、環境に特化したアルゴリズムが主な考察対象になっていたが、その産業応用や社会実装を見据えると、環境の識別・有効的なアルゴリズムの選定が重要な課題である。この課題に注目した研究は世界的にも珍しいものであるが、本研究の成果はこの課題を解決し、応用へのハードルを下げると考えている。また、敵対的外乱への頑健性の研究成果は、最適な頑健性をもつアルゴリズムとその数理的構造を明らかにした点から学術的なインパクトがあるだけでなく、機械

学習システムの信頼性への解析を与えた点から、産業応用の促進にも一定の波及効果があると見込んでいる。

研究の進め方については、研究費を活用してほかの研究者との交流の機会をもち、新たな共同研究を開始できた点はよかったと思う。しかし、理論研究に集中して論文等の成果はだせた一方で、ソフトウェアの開発など実応用に向けた活動の範囲が限定的であった点は反省点である。今後、自身の専門性から離れた人との協働などを通して、視野を広げるとともに実応用の機会を探索し、自身の研究成果の波及効果をより大きくしていきたいと考える。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

- | |
|---|
| 1. Shinji Ito. A Tight Lower Bound and Efficient Reduction for Swap Regret. <i>Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)</i> . 2020, 33, 18550–18559, selected for spotlight presentation. |
| 2. Shinji Ito, Shuichi Hirahara, Tasuku Soma, Yuichi Yoshida. Tight First- and Second-Order Regret Bounds for Adversarial Linear Bandits. <i>Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)</i> . 2020, 33, 2028–2038, selected for spotlight presentation. |
| 3. Shinji Ito, Daisuke Hatano, Hanna Sumita, Kei Takemura, Takuro Fukunaga, Naonori Kakimura, Ken-ichi Kawarabayashi. Delay and Cooperation in Nonstochastic Linear Bandits. <i>Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)</i> . 2020, 33, 4872–4883, selected for spotlight presentation. |
| 4. Shinji Ito. Parameter-Free Multi-Armed Bandit Algorithms with Hybrid Data-Dependent Regret Bounds. <i>Proceedings of Thirty Fourth Conference on Learning Theory (COLT2021)</i> , 2021, 2552–2583. |
| 5. Shinji Ito. On Optimal Robustness to Adversarial Corruption in Online Decision Problems. <i>Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)</i> . 2021, 34, in press. |
| 6. Shinji Ito. Hybrid Regret Bounds for Combinatorial Semi-Bandits and Adversarial Linear Bandits. <i>Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)</i> . 2021, 34, in press. |

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 5 件

研究報告書

「頑強なハイブリッド深層学習モデルの自動探索システム」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50243
研究者：ヴァルガス ダニロ

1. 研究のねらい

Current deep learning methods lack robustness to be employed in critical applications such as autonomous driving, medical aiding systems. The objective of this research is to investigate new paradigms and architectures that could lead to greater robustness in machine learning methods. Specifically, we investigated machine learning robustness from three completely different perspectives: (a) from a security perspective, (b) from a deep learning model perspective and (c) from a novel self-organizing paradigm that does not rely on optimization to learn (this novel paradigm also differs completely from self-organizing maps, using merely dynamical equations to learn patterns).

2. 研究成果

(1) 概要

The research here discovered a novel paradigm for machine learning. This new paradigm called Self-Organizing Dynamical Equations does not rely on optimization or parametrized models to learn, instead it uses only dynamical equations. Experiments have shown that the new paradigm surpasses state-of-the-art unsupervised deep learning methods most of the time. In fact, the proposed paradigm is inherently adaptive and robust. Input fluctuations and changes in the problem structure does not affect the model learning capabilities which is something unheard of in machine learning research [Vargas, Asabuki, AAAI2021]. Beyond these results, investigation into the vulnerabilities of deep learning models revealed a clearer picture of the problems ahead for this research direction.

(2) 詳細

Research Theme [Robust and Adaptive Machine Learning with Self-Organizing Dynamical Equations]

In the search to find a new foundation for machine learning that can be as robust as solutions found in Nature, I raised the question of “can learning happen without optimization?”. This is not a random guess, Nature itself does not seem to rely on complex optimization strategies. Evolution itself has a very simple logic that works both in ecosystems and immune systems alike. Albeit the simplicity, it seems that the complexity, adaptation, and robustness of Nature is orders of magnitude beyond our best artificial creations. Many of these systems, however, are self-organizing ones, which have many local interactions and complex emerging features.

Motivated by such cues, I tried to create equations that mimic Hebbian learning (i.e., would pull weights close together when they activate together) together with an unusual anti-Hebbian rule (i.e., repel weights that do not activate together) that could reach equilibrium when used together (Fig. 1). Interestingly, I found out that for chunking variables in sequences, such weights create a space in which the distances are proportional to the correlation between input states. In fact, the space created is accurate enough, that clustering in this space surpasses other unsupervised algorithms of the state-of-the-art most of the time [Vargas, Asabuki, AAAI2021]. Beyond this, the equilibrium of the system is defined by the input and the dynamical equations, when the input structure changes, the previous equilibrium state also vanishes. This creates an inherently adaptive system that changes itself together with changes in the input.

When analyzed closely, the dynamical equations lead to the emergence of attractor–repeller points which shape the clusters and are in themselves the patterns learned. Changes in the structure of the problem also changes the place and existence of such attractor–repeller points [Tham, Vargas, 2021].

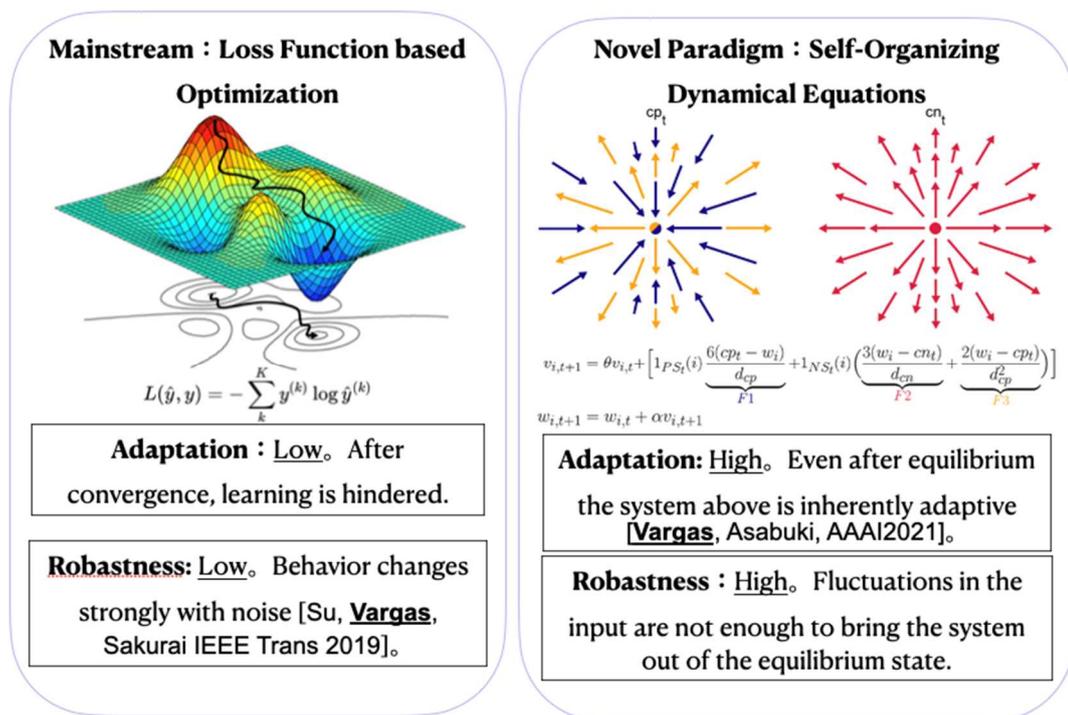


Figure 1 Overview of the Self-Organizing Dynamical Equations' paradigm

In fact, the investigation in the first phase of the ACT-I (before the acceleration stage) have identified a couple of features that are related to robustness in machine learning. The two main ones were (a) dynamical properties and (b) nonlinearity. This novel paradigm beyond adaptive has the two key features responsible for robustness and shows promising results towards a novel foundation for machine learning based on self-organization and dynamical equations rather than optimization and parametrized models.

Research Theme [Understanding and Evaluation of Robustness]

To further understand the problems of the mainstream of machine learning, especially current deep learning methods, I created some experiments to understand the reason for such a vulnerability [Kotyan, Vargas, AI Safety at IJCAI2021], [Vargas, Su, AI Safety at IJCAI2021]. One experiment investigated what happens with pixels modified in images and how change in such pixels propagate through the network. The result can be seen in Fig. 2, in which the perturbation is shown to reach the deeper levels of a ResNet even when the modification is not originally from an adversarial sample (a sample in which the modification made the classification change). The reason for that is lack of non-linearity and dynamism in the model.

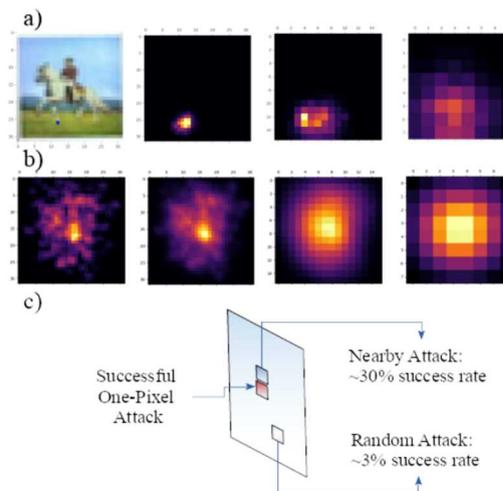


Figure 2 a) Propagation Maps of a successful one-pixel attack on Resnet shows how the influence of one pixel perturbation grows and spreads (bright colors show differences in feature map that are close to the maximum original layer output). b) Average Propagation Map over the entire set of propagation maps shows the overall distribution of attacks and their propagation. c) Illustration of locality analysis.

Research Theme [A Multidisciplinary View of Intelligence]

Robust and adaptive intelligence is barely understood not only in machine learning but also in psychology, neuroscience, decision making, among other areas. A multidisciplinary view of intelligence might be the key to understand its most intricate mechanisms. Such multidisciplinary understandings can also ignite new methods in machine learning creating a mutual benefit cycle.

Based on this, I also investigated decision making [Vargas, Lauwereyns, Cognitive Neurodynamics2021] and started still unpublished research on psychology and neuroscience. Such an unusual multidisciplinary approach might seem unnecessary at first glance; however, they were the basis of the main result of this research project (namely the Self-Organizing Dynamical Equations paradigm). This reveals the importance of such a holistic multidisciplinary view.

3. 今後の展開

Motivated by the strong results from this research proposal, I will continue to investigate (a) self-organization adaptive and robust paradigms that could transform the field of artificial intelligence, (b) architectures for deep learning that could increase robustness substantially and (c) study intelligence from a multi-disciplinary perspective using psychology and neuroscience, aiming at understanding how intelligence is developed in live beings as well as utilize this information to improve methods in machine learning. The advances in robustness for machine learning would allow applications to critical systems such as autonomous driving while understanding intelligence from a multi-disciplinary perspective can open borders for applications, collaborations, among other social economical benefits.

4. 自己評価

The objective of this research proposal was to investigate paths to robustness with different paradigms.

• Achievement – The main objective was achieved with an unexpected strong success! A primer into a possible new foundation for machine learning which is robust and adaptive right from its first smaller element was created, i.e., Self-Organizing Dynamical Equations.

• Research Progress – Progress and planning for new foundations rarely follow a linear path, because they need some key ideas or developments to ignite. Despite the expected nonlinearity, the progress was unusually fast and steep for such foundational research.

• Future Prospects – Further developments on the novel paradigm proposed here should allow for inherently adaptive and robust machine learning systems to be employed in real world applications. This is especially important for tasks in which deep learning do not convince, i.e., robotics, autonomous driving, and other critical applications.

• Novelty – In the research here, a new foundation for machine learning has been shown to be possible.

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

- | |
|---|
| 1. Danilo Vasconcellos Vargas, Toshitake Asabuki (2021), "Continual General Chunking Problem and SyncMap", Accepted, AAAI 2021. (Acceptance rate 19.8%) |
| 2. Y. F. Tham and Danilo Vasconcellos Vargas, "Towards learning Hierarchical Structures with SyncMap", CYBCONF 2021. |
| 3. Danilo Vasconcellos Vargas, Johan Lauwereyns, "Setting the space for deliberation in decision-making", Cognitive Neurodynamics, 1-13, 2021. (Impact Factor: 3.9) |
| 4. Shashank Kotyan and Danilo Vasconcellos Vargas, "Deep neural network loses attention to adversarial images", AI Safety Workshop at IJCAI, 2021. |

5. Danilo Vasconcellos Vargas, and Su, J., “Understanding the one-pixel attack: Propagation maps and locality analysis”, AI Safety Workshop at IJCAI2020.

(2) 特許出願

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

受賞：

2022 - IEEE Transactions on Evolutionary Computation Outstanding Paper Award 2022

本：

Van Uytsel, S., & Vargas, D. V. (2021) *Autonomous Vehicles: Business, Technology and Law*. Springer. ISBN: 978-981-15-9254-6.

招待公演：

2021 - “On the Deeper Secrets of Deep Neural Networks and a Path Forward”, Beyond AI – Summer School, Virtual Vehicle Research GmbH, Austria (Online)

2021 - "SAN (ノベルティに基づくサブポピュレーションアルゴリズム)による多目的最適化の最先端" IMI 研究集会「進化計算の数理」, Kyushu University, Japan

2020 - "1ピクセルで誤魔化される人工知能が人間を超えた?" 第7回 AI Optics 研究会, Online

研究報告書

「組合せ最適化と線形代数の交点における理論と応用の探求」

研究期間：2020年4月～2022年3月
 研究者番号：50244
 研究者：大城 泰平

1. 研究のねらい

組合せ最適化とは、複数の選択肢の中から最もよいものを探す問題の枠組みであり、一部の問題は線形代数学における行列理論を経由して効率的に解くことができる。また逆に、ある種の線形代数学の問題を組合せ最適化の道具立てを用いて解く手法も知られている。これらの「組合せ最適化問題」と「線形代数の問題」の対応は、理論計算機科学や数理工学の分野において古くから研究が行われており、理論的に興味深いだけでなく、動的システム解析における実問題への応用ももつ。

本研究課題では、この両分野の交点に位置する、代数的組合せ最適化理論のさらなる深化を目指す。特に、行列式を用いた組合せ構造の数え上げ技術の統一、変数を含む行列の階数計算手法の代数的一般化、および動的システム解析手法への組合せ最適化理論の応用に取り組み、理論と応用の両面からの発展を探求する。

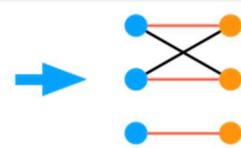
2. 研究成果

(1) 概要

選択肢の中から一番よいものを探す「組合せ最適化」理論と、高次元の真っ直ぐな空間を扱う「線形代数学」の間に関係があるということは、古くから知られてきた。例えば、行列の階数は、その行列から作られる二部グラフがもつマッチングの最大サイズで上から抑えられる(右図)。

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

行列
階数 = 2



二部グラフ
マッチングの最大サイズ = 3

また、Kirchhoff の行列木定理は、グラフの中に存在する全域木の個数を、行列式を用いて数え上げる美しい定理である。グラフにおいて全域木がもつ性質と、行列の列ベクトル集合がもつ線形独立性は、マトロイドという構造として共通して抽象化される。今日では、マトロイドは組合せ最適化における基本的な考察対象の一つであり、工学における幅広い応用ももつ。

前述の例では行列から二部グラフを構成したが、逆に、二部グラフからそのマッチングの最大サイズと階数が一致するような行列を構成することもできる。二部マッチング問題の一般化である一般マッチング問題や、線形マトロイド交叉問題・線形マトロイドパリティ問題といったマトロイド上の問題でも同様の行列表現が知られている。ここで構成する行列はいずれも線形記号行列とよばれる、各要素に多変数一次式をもつ行列であり、その階数は変数に乱数を代入することで効率的に計算できる。

一般の線形記号行列の階数を計算する問題は Edmonds 問題とよばれる。この問題が決定

的(乱数を用いずに)多項式時間可解であるかどうかは回路計算量理論における重要な未解決問題である。一方、各変数を積に関して非可換だとみなした場合の階数を計算する非可換 Edmonds 問題は決定的多項式時間可解であるということが近年明らかとなった。

非可換性は工学においては微分および差分作用素の形で現れる。線形時変システムを記述する伝達関数行列は微分・差分作用素の多項式を各要素にもつ行列であるため、非可換性をもつ行列の解析は線形システムの解析に応用可能である。一方、実際の工学における動的システムのモデリングにおいては、非線形方程式が必要となることも多い。

本研究では、組合せ最適化問題の行列表現、線形記号行列の非可換階数、そして動的システム解析を題材にした三つの研究テーマ「数え上げ可能な組合せ構造の統一化」「分割的離散付値斜体における Dieudonné 行列式の付値計算」「非線形微分代数方程式の構造修正法」に取り組み、組合せ最適化と線形代数の両面を横断する理論の深化と応用技術の開発を行った。

(2) 詳細

研究テーマ A「数え上げ可能な組合せ構造の統一化」

組合せ最適化問題の解の数え上げは、解のランダムサンプリングにつながる重要な技術の一つである。しかし、解の個数は一般に入力の指数個となるため、解を一つずつ列挙し数え上げる手法は実用的でない。特殊な組合せ最適化問題については、その解の個数を行列式計算によって計算できるということが知られており、その一例が Kirchhoff の行列木定理である。同様に平面的グラフのマッチングは、各辺をうまく向きづけることで得られる行列の行列式を計算することで数え上げ可能である。これらの手法の原理は、Edmonds 問題の観点からは、線形記号行列の各変数に対して定数を非常にうまく選択し代入することで、行列式の展開時の各項の符号を一致させているものとみなすことができる。この解釈を最初に与えたのは Webb(2004)の博士論文であり、同論文では全域木と二部マッチングの数え上げを線形マトロイド交叉に共通して拡張した「パフィアンペア」という構造を提案した。

本研究テーマでは、パフィアンペアをさらに線形マトロイドパリティ問題の世界に拡張することで「パフィアンパリティ」という構造を新たに提案した(右図:各問題の関係)。



に提案した(右図:各問題の関係)。パフィアンパリティはパフィアンペアと一般グラフのマッチングの数え上げの共通の一般化であり、他にも 3-一様 3-ハイパーグラフのハイパー全域木や無向グラフの最短点素 STU パスの数え上げを特殊ケースとして含む。このように、パフィアンパリティは効率的に数え上げ可能な様々な組合せ構造を同時に一般化し、それらが効率的に数え上げ可能である説明を与える。

さらに、本研究では重み付きの問題設定において、パフィアンパリティの最小重みの解を数え上げる決定的多項式時間アルゴリズムも与えた。この結果は Broder-Mayr (1994)および Hayashi-Iwata (2017)によって与えられた、最小重み全域木や有効全域木の数え上げアルゴリズムの一般化である。

本研究成果は組合せ最適化の国際会議 The 22nd Conference on Integer Programming and

Combinatorial Optimization (IPCO '21)に採択され、口頭発表を行った(5. 主な研究成果リスト(1)2)。

研究テーマB「分割的離散付値斜体における Dieudonné 行列式の付値計算」

重みつき組合せ最適化問題とは、選択肢を構成する各要素に重みとよばれる実数値が付随する設定において重みの和を最大化する選択肢を求める問題である。重みなし問題が通常の(重みなし)Edmonds 問題に帰着される一方で、重みつき問題は重みつき Edmonds 問題(線形多項式行列とよばれる行列の行列式の次数計算)に帰着される。この重みつき Edmonds 問題は、重みなし問題の場合と同様に可換・非可換の問題設定がそれぞれ考えられ、重みつき非可換 Edmonds 問題は効率的に解けるということが Hirai (2019)や Hirai-Ikeda (2020)によって示されている。

本研究では、可換・非可換どちらの場合においても、重みつき Edmonds 問題が重みなし Edmonds 問題に決定的疑多項式時間帰着可能であるということを示した。これは Moriyama-Murota (2013) によって与えられた、多項式行列の拡大行列の階数と小行列式の次数の Legendre 共役性の結果の拡張に基づく。この結果は基礎体が有理数体の場合に計算途中のビット長を多項式長に抑える初めてのアルゴリズムである。本結果は理論計算機科学の国際会議 The 47th International Colloquium on Automata, Languages and Programming (ICALP '20)に採択され、口頭発表を行った(5. 主な研究成果リスト(1)1)。

また、本アルゴリズムおよび Murota(1995)による組合せ緩和法が本質的に必要とする条件を抽出し、重みつき Edmonds 問題の代数的一般化を行った。この問題設定は「分割的離散付値斜体とよばれる代数構造上の行列に対し、その Dieudonné 行列式(通常の行列式の斜体への拡張)の付値を計算する」という抽象的なものであるが、重みつき Edmonds 問題のほか、微分・差分演算子の多項式を要素にもつ行列(歪多項式行列)の Dieudonné 行列式の次数計算を特殊例として含む。歪多項式行列の Dieudonné 行列式の次数は、対応する線形微分・差分方程式系の解空間の自由度(解を唯一に定めるために与えなければならない初期値の数)と一致するため、本アルゴリズムは線形システムの自由度解析に応用することができる。この結果は代数計算の国際会議 The 46th International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC '21)に採択され、口頭発表を行った(5. 主な研究成果リスト(1)3)。

研究テーマC「非線形微分代数方程式の構造修正法」

微分代数方程式(DAE)は微分方程式と代数方程式の要素を併せ持つ方程式であり、動的システムの解析に広く用いられる。DAE の数値的な解きにくさは、指数とよばれる特性量によって特徴づけられ、DAE で記述された動的システムの高精度な数値計算を行うためには、与えられた DAE を低指数の DAE に変換する操作が重要である。しかし、多くの DAE ソルバで採用されている Mattsson-Söderlind (1993)の指数減少法は SA-amenable という性質をもつ DAE のみに適用可能である。回路解析における修正節点解析法は SA-amenable でない DAE を出力することもあり、そのような DAE に対しては精度の良い数値解を得ることが困難であった。

本研究では、SA-amenable でない非線形 DAE を SA-amenable な DAE に修正する手法を提案した。本手法の肝は Murota(1995)による組合せ緩和法を、記号計算システムと融合することで非線形方程式系へ適用範囲を拡張した点にある。提案手法を実際の平面ロボットアーム・リング変調器・トランジスタ増幅器を記述する SA-amenable でない DAE に適用し、SA-amenable な DAE に変形でき、また指数減少法を通して数値解を計算できるということを確認した。この結果は数値計算の論文誌 IMA Journal of Numerical Analysis への採録が決定した(5. 主な研究成果リスト(1)4)。

3. 今後の展開

本研究における各研究テーマの成果に対し、下記のような様々な学術的展開が考えられる。

研究テーマ A 本研究で新たに定義した構造は、効率的に数え上げ可能な多くの組合せ構造の統一的理解を与える枠組である。抽象的概念を適切に定義することは、定義から定理を生み出す数学という学問にとって最も重要なステップである。今後、今まで各組合せ構造に個別に与えられてきた議論を統一する様々な後続研究が生まれることが期待される。

研究テーマ B 本研究は組合せ最適化・理論計算機科学・代数計算・科学計算の四分野にまたがるものであるため、それぞれの学問分野における展開について述べる。組合せ最適化においては、Legendre 共役性という最適化において重要な性質が今回の代数的な問題設定でも現れたという点で興味深く、代数構造と組合せ構造のつながりが今後も明らかになっていくことが期待される。理論計算機科学においては、重みつき Edmonds 問題と重みなし Edmonds 問題の間の関係を明らかにした本研究が、重みなし可換 Edmonds 問題の決定的多項式時間可解性を解決する緒となれば望ましい。代数計算においては、歪多項式行列の行列式の次数計算に組合せの手法を適用した初めての技法を与えた。このような組合せ的技法は代数計算の分野においてまだまだメジャーとは言い難いものであり、他の代数計算手法に対する今後の発展が期待される。科学計算においては、線形微分・差分方程式系の自由度の効率的な解析手法を設計した。特に、差分方程式系の自由度の行列式の次数を用いた特徴づけを陽に与えたのも本研究結果が初めてであり、実際の線形システム解析への応用が期待される。

研究テーマ C 本研究で与えた手法は動的システムの高精度なシミュレーションを行うための基礎技術の一つである。提案手法を実験的に実装したソースコードは公開しているものの、実際のものづくりの現場にそのまま利用可能な質ではない。今後既存のシミュレーションソフトウェアに提案手法の実装が追加・保守され広く使われることとなれば、動的システムのシミュレーションの世界においてインパクトを与えることが期待される。

4. 自己評価

- **研究目的の達成状況**

本研究課題「組合せ最適化と線形代数の交点における理論と応用の探求」は、当初の研究計画から一部修正を行った点もあるものの、組合せ最適化・理論計算機科学・代数計算・数値計算の4分野にまたがる3本の論文の国際会議採択と1本の論文誌採択につながり、理論・応用の両面においておおむね達成したものと考えている。会議に採択された論文は完全版を論文誌に投稿中であり、今後も成果物としての論文リストが増えていくことが期待される。

- **研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)**

本研究は個人型の理論研究であるため、実際の研究および論文執筆は共著論文(5. 主な研究成果リスト(1)2)を除き代表研究者のみで実施した。研究費は主に書籍の購入と計算機環境の構築に利用した。特に、高性能な数値計算用計算機を導入し、成立が予想される定理の反例探索に役立てた。COVID-19の影響により研究計画時に予定していた国内外の出張をほぼ全て取りやめることとなったことが心残りである。

- **研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果**

「今後の展開」において前述したように、本研究成果は、組合せ最適化、理論計算機科学、代数計算、科学計算において理論・応用の両面から様々な学術的展開が考えられる。理論研究は、その成果が産業や社会へただちに還元されるような性質をもつものではないが、新たな価値を創造する種となるだろう。応用研究の側面では、シミュレーションという現代の産業を支える基礎技術の信頼性を補強する、地味ながら確かな価値を生み出せたと考えている。

- **研究課題の独創性・挑戦性**

組合せ最適化と線形代数を基軸とし、情報科学における4つの分野をつなぐ本研究課題の独創性および挑戦性は十分に認められるものであると考える。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Taihei Oki. On Solving (Non)commutative Weighted Edmonds' Problem. In <i>Proceedings of the 47th International Colloquium on Automata, Languages and Programming (ICALP '20)</i> , LIPIcs 168, pp. 89:1–89:14, 2020.
2. Kazuki Matoya and Taihei Oki. Pfaffian pairs and parities: counting on linear matroid intersection and parity problems. In <i>Proceedings of the 22nd Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO '21)</i> , LNCS 12707, pp. 223–237, 2021.
3. Taihei Oki. Computing valuations of the Dieudonné determinants. In <i>Proceedings of the 46th International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC '21)</i> , pp. 321–328, 2021.
4. Taihei Oki. Improved structural methods for nonlinear differential–algebraic equations via combinatorial relaxation. <i>IMA Journal of Numerical Analysis</i> , to appear.

(2)特許出願

研究期間累積件数:0件

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

国内会議発表:1件

1. 大城 泰平. 分割的付値斜体における Dieudonné 行列式の付値計算. 日本応用数理学会 2021 年度年会, 芝浦工業大学, 東京(オンライン開催), 2021 年 9 月.

研究報告書

「材料計測データのモダリティ変換」

研究期間：2020年4月～2022年3月

研究者番号：50245

研究者：鈴木 雄太

1. 研究のねらい

現在の材料開発では、日々取得される計測データの効率的な解析が課題となっています。本研究では、計測データの解析、すなわち計測データから材料の特徴を推定する操作をデータのモダリティ変換として捉え、機械学習の枠組みに乗せることを着想しました。これにより、データ解析において手間と時間を要していた試行錯誤が不要となり、多種多様なデータを自動かつ高速に解析できるようになると見込まれます。さらに、物理モデルに基づく既存のデータ解析法を自動化し、機械学習モデルによる予測と組み合わせることにより、単に高速だけでなく、物理的な妥当性を担保した手法とすることを目指します。これら一連のアイデアを、材料の結晶構造(原子の3次元配置)の分析法として普及している粉末X線回折(XRD)法において実証します。

2. 研究成果

(1)概要

物質の性質は結晶構造によって支配されるため、結晶構造の同定は物質科学の始点です。結晶構造を調べるために、粉末X線回折(XRD)法という測定法が広く用いられていますが、測定したXRDパターンから結晶構造の情報を得るためには、条件を変えながらシミュレーションを繰り返す必要があり、このデータ解析が研究のボトルネックになっていました。そこで本研究では、シミュレーションを使わず機械学習でXRDパターンから結晶構造(3次元の原子配置)を直接予測するアプローチと、数理最適化の技術を応用して既存のシミュレーション法を自動化するアプローチの2つで研究に取り組みました。これら2つは相補的なものであり、2つを組み合わせることで、「XRDから結晶構造を高速に予測→予測した構造をベースにシミュレーションし、さらに精密な構造を得る」というワークフローが実現します。アプローチ1については、ディープニューラルネットワーク(DNN)を用いて任意の結晶構造を出力する手法が確立されていないことが課題となっていました。他のACT-I研究者の皆様との共同研究においてこれを開発し、DNNを用いてXRDパターンから結晶構造を直接予測することを可能にしました。さらにその過程において、DNNを用いて結晶構造のベクトル表現を与える手法を考案しました。これは結晶構造の持つ抽象的な特徴を計算機上で扱えるようにする基礎技術であり、情報の検索や可視化など様々な応用が期待されます。アプローチ2については、シミュレーションに用いる物理モデルのパラメータ調整を、数理最適化の一分野であるブラックボックス最適化の問題として扱うことにより、シミュレーションによるXRDのデータ解析を自動化することができました。これにより熟練者が手作業で数時間以上かかっていたデータ解析を自動かつ30分程度で終わるようになり、熟練者と同等以上の精度が得られることも実証できました。

(2) 詳細

研究テーマ 1「XRD パターンから結晶構造を直接予測する機械学習技術の確立」

XRD パターンから結晶構造(3次元の原子配置)を直接予測するためには、結晶構造を何らかの方法で機械学習モデルから出力する必要がありますが、結晶構造を出力する手法は確立されておらず、この技術要素の開発が必要でした。結晶構造の出力における課題は、結晶構造を構成する原子の個数が不定であり、画像のように一定サイズのデータで表現するのが難しいことにあります。そこで、原子の数や位置を直接学習するのではなく、「原子が配列している場(field)」を学習するというアプローチによって、任意の原子個数や形の結晶構造の出力を可能にしました。このアプローチに基づく結晶構造デコーダーを DNN により構成し、畳み込みニューラルネットワークに基づく XRD エンコーダーと組み合わせることで、入力された XRD パターンから結晶構造を予測し直接出力することを可能にしました(論文準備中)。

研究テーマ 2「計測データへの物理モデルのフィッティングを自動化する技術の開発」

一般的に、計測データから材料の情報(物理量)を得るためには、様々な条件でシミュレーションを行い、計測データに最も一致するシミュレーション条件がその計測データに対応した物理量である、というアプローチを取ります。よって、シミュレーション条件の試行錯誤のために大きな手間と時間に加え熟練が必要とされていました。本研究では、この問題が機械学習モデルのハイパーパラメータ調整(HPO)と同じであると気づき、HPO と同じ枠組みで解決できるのではと着想しました。このアイデアのもと、シミュレーションに用いる物理モデルのパラメータ調整を、数理最適化の一分野であるブラックボックス最適化の問題として定式化し、ベイズ最適化に基づきこの最適化問題を解くことによって、シミュレーションによる XRD のデータ解析を自動化することができました。これにより熟練者が手作業で数時間以上かかっていたデータ解析を自動かつ 30 分程度で終わるようになり、熟練者と同等以上の精度が得られることも実証できました。さらに、自動化により多くの設定を探索できるようになったことで、手動探索では見つけられなかった構造の候補も発見できることを示しました。

2021 年 11 月現在、上記の 2 つのテーマを統合した、end-to-end な自動 XRD データ解析の実証を進めています。

3. 今後の展開

まず材料計測に関して、XRD の自動データ解析については、ACT-I 本フェーズおよび加速フェーズの研究においてある程度道筋をつけることができたと考えています。開発した手法について、ユーザーからのフィードバックを受けながら改善点の洗い出しと社会実装を進めていきます。

これらの研究で提案した方法論およびアイデアは XRD に限らず他の計測手法にも応用可能であることから、他の研究グループと連携しつつ応用の幅を広げていこうと考えています。特に、

DNN を使ったモダリティ変換の枠組みでは、DNN への入力に XRD 以外の計測モダリティ(例:X線吸収スペクトル、中性子回折パターン、電子顕微鏡画像など)を増やすことで、様々な情報を統合した学習と予測が可能になります。材料開発においては、マイクロ・メゾスコピック・マクロと、材料の空間的な階層性を統合して材料の性質を理解・モデリングすることが重要な研究テーマとなっていることから、各特徴に対応した計測モダリティを組み合わせたマルチモーダル学習によってこの問題に貢献できると考え、ACT-I 研究を発展させる形で研究に取り組んでいきます。

さらに、材料の計測を離れた展開も計画しています。日本刀が焼入れにより硬さを増すように、材料は同じ成分でも合成プロセス(=レシピ)によってその性質が大きく変わります。よって、狙った特性を備える材料の合成プロセスの開発は材料開発における中心的な問題の一つですが、プロセス開発におけるデータや情報処理技術の活用は始まったばかりです。今後、これまでの研究の知見を活かして、プロセスの記述や予測、生成に取り組んでいきます。

上記のテーマを中心として、最新の情報処理技術や機械学習の技術を応用することによる材料の問題解決に取り組むつつ、機械学習やデータ分析分野にも新たな課題を提供することを目指して、分野間をつなぐ研究を深めていきたいと思えます。

4. 自己評価

- 研究目的の達成状況について
 - 研究目的は概ね予定通り達成することができたと考えている。また研究目的に向かう過程で、結晶構造の embedding 学習など副次的な成果を得ることもできた。一方で、査読に遅れが生じるなどの背景はあったものの、論文の出版に時間を要している点は反省点である。
- 研究の進め方について
 - COVID-19 の影響で学会参加や海外の研究室との連携が難しくなるといった影響が出たが、研究費は計算リソースのほか論文投稿費等として有効に活用することができた。
 - 研究実施体制も適正であったと考えている。
- 研究成果の波及効果
 - 本研究で開発した手法はオープンソースソフトウェアとして公開しており、既に国内外の大学や研究機関、企業への普及が進みつつあることから、実用という観点での波及は着実に進んでいる。
 - これから発表予定の研究成果も含め、本研究は様々な材料に適用可能で、材料開発を支える基盤技術の一つとなるものである。よって高性能な材料の開発を加速するという形で、本研究成果は間接的にも科学技術や産業、社会に波及していくと見込まれる。
- 研究課題の独創性・挑戦性
 - 加速フェーズの研究課題は、物理法則からのボトムアップを離れ、いわばトップダウンな考え方に基いて計測データの解析を機械学習のモダリティ変換とみなすという点で、材料科学的には非常に独創性の高いものであったと考える。技術的にも、結晶構造のデコードを始めとして、本研究課題は他の ACT-I 研究者の皆様との共同研究のもので最新の機械学習技術を発展させた技術開発の上に実現されたものであり、挑戦性が高い研究と考える。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

- | |
|---|
| 1. Yuta Suzuki, Hideitsu Hino, Takafumi Hawaii, Kotaro Saito, Masato Kotsugi, Kanta Ono. Symmetry prediction and knowledge discovery from X-ray diffraction patterns using an interpretable machine learning approach. Scientific Reports. 2020, 10, 21790. |
| 2. Yoshihiko Ozaki, Yuta Suzuki, Takafumi Hawaii, Kotaro Saito, Masaki Onishi, Kanta Ono. Automated crystal structure analysis based on blackbox optimization. npj Computational Materials. 2020, 6, 75. |
| 3. ほか投稿中 1 本、投稿準備中 1 本 |

(2)特許出願

研究期間累積件数:1 件(出願準備中)

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

学会発表

1. 鈴木雄太, 尾崎嘉彦, 羽合孝文, 斉藤耕太郎, 大西正輝, 小野寛太, "ブラックボックス最適化を用いたリートベルト解析の自動化", 放射光学会 学術講演会, 10, Jan. (2021)
2. Yuta Suzuki, Hideitsu Hino, Takafumi Hawaii, Kotaro Saito, Kanta Ono, "Machine learning approach for on-the-fly crystal system classification from powder x-ray diffraction pattern", TMS 2020 Annual Meeting, 23-27, Feb. (2020)

招待講演

1. 鈴木雄太, 奥野智也, 佐々木勇和(3 人による分担発表), "深層学習と物質探索", 応用物理学会第 1 回 インフォーマティクス応用研究グループ 研究会, 26, Nov. (2020)
2. 鈴木雄太, 小野寛太, "量子ビーム計測データ解析における機械学習の応用", 日本表面真空学会 学術講演会, 19, Nov. (2020)
3. Yuta Suzuki, "Machine-learning-aided data analysis in X-ray diffraction and absorption for high-throughput measurement", International Young Researchers Workshop on Synchrotron Radiation Science 2019, 3-4, Sep. (2019)

解説記事

1. 鈴木雄太, 尾崎嘉彦, 小野寛太, "解説:情報学的手法を用いた触媒開発 ブラックボックス最適化による結晶構造解析の自動化", 触媒. 63, 294-298, (2021)
2. 奥野智也, 佐々木勇和, 鈴木雄太, "深層学習を用いた新物質探索に関するサーベイ", 情報処理学会論文誌 データベース. 13 3, 1-10, (2020)

書籍

1. 鈴木雄太, 小野寛太, "マテリアルズ・インフォーマティクスのためのデータ構築技術と材料開発へのアプローチ" 11 章第 8 節 "機械学習によるスペクトルデータ解析とその事

例”(分担執筆), 技術情報協会. (2021)

受賞

1. 鈴木雄太, 学生発表賞, 日本放射光学会 (2021 年 1 月)

プレスリリース

1. X 線回折パターンからの対称性予測における知識発見-熟練者の勘・コツの定式化に成功-
<https://www.kek.jp/ja/press/20201211/>
2. 結晶構造解析の自動化 -ブラックボックス最適化により熟練者を上回る解析精度を達成-
<https://www.kek.jp/old/ja/newsroom/2020/06/05/1942/>

研究報告書

「多様なIoTデバイスを用いたコンテキスト認識に基づく次世代ナッジの創出」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50246
研究者：中村 優吾

1. 研究のねらい

近年、人々を強制することなく、望ましい選択肢や行動に導く仕組みとして、ナッジが注目を集めている。ナッジ理論は行動経済学の分野を中心として体系化が進められてきており、健康・医療分野における生活習慣の改善から、教育、マーケティング、省エネルギー化にいたるまで様々な分野での応用が期待されている。しかしながら、世の中に導入されている既存のナッジの多くは、特定の状況下での静的な情報提示やワンパターンな介入にとどまっているため、効果が一時的であり持続しにくいという問題を抱えている。

そこで、本研究では、ACT-I 標準フェーズで研究開発を進めてきた多様なIoTデバイスを用いたコンテキスト認識技術と行動経済学で培われたナッジ理論を融合することによって、上記の問題の解決を目指す。具体的には、ユーザの生活環境に存在する多様なIoTデバイスを相互に連携・連動させながら、「現在、作業中なのか休憩中なのか?」、「今日、どれくらい活動したのか?」といった対象者の細かな行動コンテキストを認識し、その認識結果に応じて、適切なタイミング、適切な情報量、適切な手段で連続的に介入することで、継続的な効果を発揮する次世代ナッジの創出を目指す。

加速フェーズ研究期間では、図1に示すように、IoTセンサを用いたコンテキスト認識技術とナッジ理論を統合した次世代ナッジのコンセプトと設計空間を整理するとともに、健康行動変容を一つのテーマに掲げつつ、日常生活空間に溶け込むIoTデバイスを活用した斬新かつユニークなナッジシステムの設計開発を進める。そして、それぞれのシステムが人々にもたらす行動変容効果を調査する。また、複数のIoTナッジを時間的・空間的に連携・連動させながら、連鎖的な行動変容を促すための仕組みについても検討を進める。

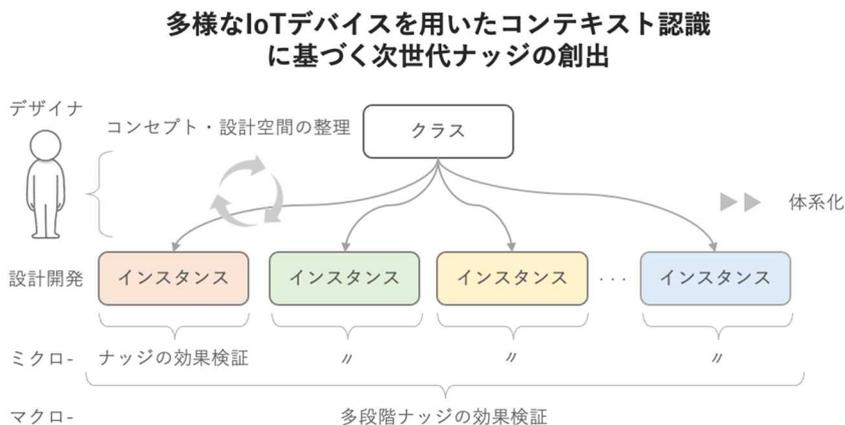


図1. 研究課題の概要

2. 研究成果

(1)概要

本研究では、IoT センサを用いたコンテキスト認識技術とナッジ理論を統合した次世代ナッジを実現するべく、IoT データ駆動ナッジ (IoT ナッジ) モデルの概念化を進めた。この研究内容に関する成果は、ユビキタスコンピューティング領域のトップカンファレンスである ACM UbiComp2021 にて、Best Poster Honorable Mention Award (上位 3 件) を受賞している。

次に、コロナ禍で求められる健康行動変容シナリオ (免疫力を高める食行動や衛生行動の促進、運動増進など) を対象として、IoT ナッジモデルを具現化するユニークな応用システムアイデア出しとプロトタイピングを行った。その中で、新規性や有用性が見込まれた案である「eat2pic」に関して、発明の権利化を進めるとともに、提案システムの行動変容効果に関する洞察を得るためのユーザスタディを実施し、学会発表を行なった。eat2pic 以外にも、有用性が見込まれたアイデアに関して、システムの設計開発および評価実験を進め、学会発表を行なった。これらの成果は、1 件の優秀論文賞 (上位 2 件: IPSJ インタラクシオン 2021) と 1 件の Best Demo Award (上位 1 件: IEEE PerCom2021) の受賞を果たした。また、アウトリーチ活動の一環として、国内外の展示会 (CES2020, イノベーションストリーム KANSAI2020, Maker Faire Kyoto 2021 など) で研究成果の発表を行なった。メディア掲載実績としては、1 件のテレビ出演 (NHK 奈良) と、2 件の WEB メディアの記事 (電波新聞, IT media news) という成果が得られた。

(2)詳細

研究テーマ A:「IoT データ駆動ナッジングの概念化」

研究テーマ A では、対象者の細かな行動コンテキストを認識し、その認識結果に応じて、適切なタイミング、適切な情報量、適切な手段で情報提示することで、継続的な効果を発揮する次世代ナッジを具現化するべく、そのメタコンセプトとして IoT データ駆動ナッジ (IoT ナッジ) モデルの概念化を進めた。図 2 に、IoT ナッジモデルの概念図を示す。

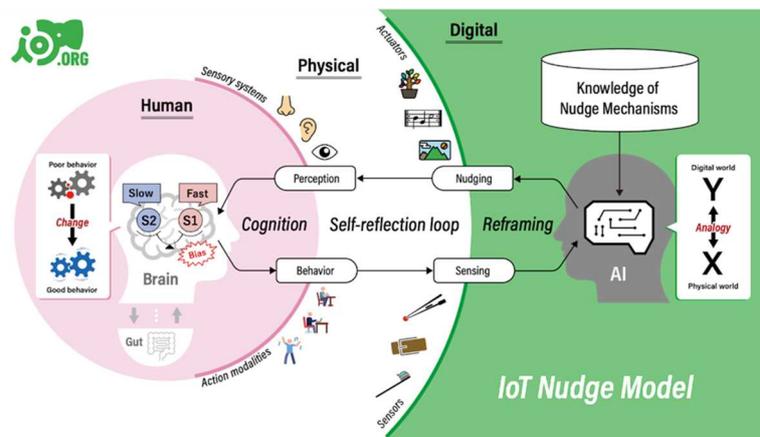


図 2. IoT ナッジモデルの概要

IoT ナッジモデルでは、私たちの日々の生活行動が環境に溶け込む身の回りの IoT デバイスに反映され、その IoT デバイスの遊び心のある表現の変化が一つ一つの行動に対する内省や気づきをもたらし、ゆっくりと時間をかけて生活習慣をより良い方向へと後押しするという好循環の確立を目指している。この好循環を確立するべく、IoT ナッジは、(1) 日用品を模した IoT センサによる行動のセンシング、(2) アナロジーに基づいて行動コンテキスト X を異なるコンテキスト Y に変換するコンテキスト・リフレーミング、(3) 日常的なオブジェクトを模した IoT アクチュエータによる行動のナッジングという 3 つのプロセスで構成される。本研究では、IoT ナッジを具現化するべく、日常生活における健康行動変容シナリオを題材として、eat2pic, fit2plant, brush2music の 3 つのプロトタイプシステムをデザインした(図 3)。

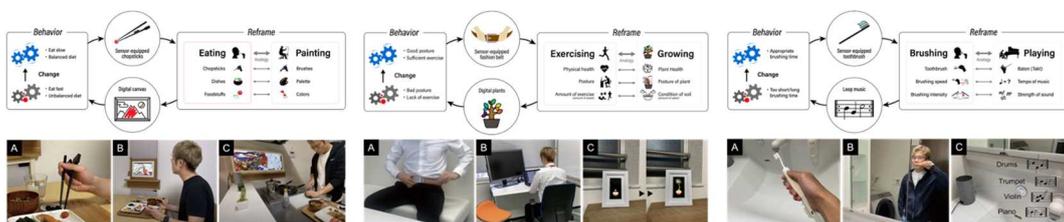


図 3. IoT ナッジシステム的具体例 (eat2pic, fit2plant, brush2music)

それぞれ、「eat2pic」は、IoT 箸とデジタルキャンバスで構成されており、ユーザの「食べる」という行動を観測し、それをデジタル絵画の「色塗り」にリフレーミングすることで、ユーザの食習慣における色バランスの意識を高め、健康的な食生活を後押しする IoT ナッジである。「fit2plant」は、IoT ベルトとデジタル観葉植物で構成されており、ユーザの日々の行動で消費される「エネルギー量」を、観葉植物の「養分」にリフレーミングすることで、植物がしおれる・枯れるといった状態の変化から自身の猫背や運動不足という状況に対する気づきを与え、運動増進を後押しする IoT ナッジである。「brush2music」は、IoT 歯ブラシとスマートスピーカーで構成されており、歯ブラシを指揮棒バトンと見立て、ユーザの「歯磨き」という行動を、音楽の「指揮」にリフレーミングし、程よい強さでまんべんなく磨くことを後押しする IoT ナッジである。

研究テーマ A に関する内容は、ユビキタスコンピューティング領域のトップカンファレンスである ACM UbiComp2021 にて、Best Poster Honorable Mention Award (上位 3 件) を受賞している。

研究テーマ B: 「eat2pic: 健康的な食生活を後押しする IoT ナッジ」

研究テーマ B では、研究テーマ A で検討したシステムの中で、新規性や有用性が見込まれる案である「eat2pic」に焦点を絞り、発明の権利化を進めるとともに、提案システムの行動変容効果を検証するためのユーザスタディを実施した。eat2pic のシステム概要図およびユースケースシナリオを図 4, 5 に示す。

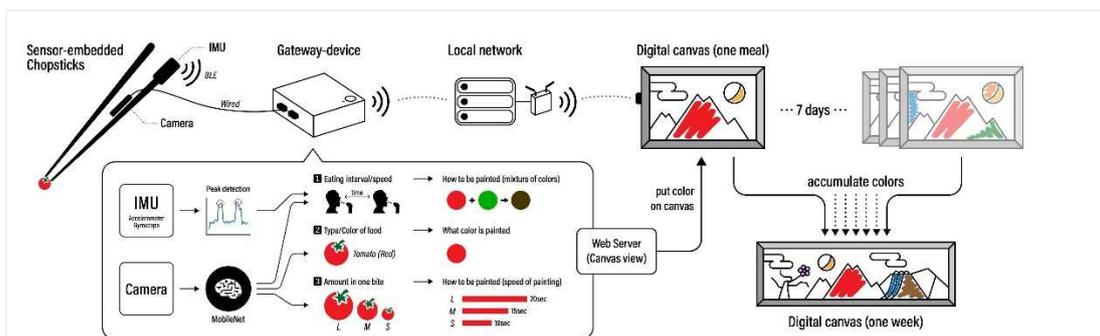


図 4. eat2pic のシステム概要図



図 5. eat2pic のユースケースシナリオ

eat2pic は、IoT 箸とそれぞれ 1 食分および 1 週間分の食習慣を反映する 2 つのデジタルキャンバスで構成されたシステムである。eat2pic では、一般的に普及しているスマートフォンを活用した食事管理アプリとは異なり、箸の先端にある小型カメラと箸に装着された IMU センサから得られる信号をマルチモーダルに解析することによって、これまで得られなかったユーザが一口ごとに何の食材をどのくらいの速度で食べたかというコンテキストを認識することが可能となっている。eat2pic の食べるという行動を色塗りにリフレーミングする仕掛けは、食生活における色バランスの意識を高めることが健康的な食生活を送るための直感的な方法として役立つという栄養学上の知見に基づいている。食生活は、食べるだけでなく、日常生活のふとしたタイミングで自身の食生活を振り返ることが可能な情報をユーザに提示し、個人の意識の中で健康的な食生活に対する存在感を高める仕掛けが必要である。そこで、図 5 に示すように、eat2pic では、1 回の食事行動を反映する小さなキャンバスと 1 週間の食生活を反映する大きなキャンバスの 2 つで多段階的にフィードバックする設計を採用した。eat2pic の評価実験では、IoT 箸が一口ごとの摂取タイミング、種類、食べ物の量を高い精度で認識することを確認し、キャンバスを用いたそれぞれのフィードバックが、早食いの改善や色バランスの良い食事メニューの選択という行動を後押しするナッジとして機能する可能性が示唆された。

研究テーマ B に関して、1 件の特許出願、国内最大級のインタラクション系の学会である IPSJ インタラクション 2021 にて優秀論文賞受賞 (上位 2 件)、ユビキタスコンピューティング領域のトップカンファレンスである IEEE PerCom2021 にて、Best Demo Award 受賞という成果を得ている。

3. 今後の展開

「eat2pic」に関して、現在進行中である長期的な実証実験の評価結果を統合し、国際ジャーナル化を進める予定である。また、人々の健康増進を後押しするという観点では、健常者だけでなく何らかの疾患を有する患者も受容可能なシステムを構築することが求められる。そのため、病院やデイケアセンター等と協力しつつ、より健康行動変容の必要性が高い人々を対象とした検証についても並行して進めていく予定である。一方、現在までに検討してきた応用システムは、ミクロな視点から個人の生活を対象とした行動変容シナリオの検討にとどまっている。そのため、マクロな視点から実社会を巻き込んだ行動変容シナリオを検討するとともに、数百人規模の実証実験を実施し、IoT ナッジが人々に与える行動変容効果について長期的な視点で研究を進める予定である。

4. 自己評価

<研究目的の達成状況>

対象者の細かな行動コンテキストを認識し、その認識結果に応じて、適切なタイミング、適切な情報量、適切な手段で情報提示することで、継続的な効果を発揮する次世代ナッジの創出という挑戦的な研究目標に対して、IoT ナッジという概念モデルを導き出し、そのコンセプトを具現化する複数のプロトタイプを構築した。また、社会的インパクトが見込める要素技術に関して特許出願（1件）を行い、IoT ナッジのクラスとインスタンスに対してそれぞれ国内外の学会での受賞（3件）という成果を挙げることができた。以上より、一定以上の目標を達成することができたと考えられる。

<研究の進め方>

コロナ禍の影響により、実証実験の計画が後ろ倒しになるなどいくつかの課題はあったものの、領域会議やサイトビジットでの研究議論を通じて軌道修正を行い、研究を滞りなく進めることができた。また、研究予算執行に関しては、適切かつ有効に執行することができた。

<研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果>

本研究の成果が、ユビキタスコンピューティング領域のトップカンファレンスである ACM Ubicomp および IEEE PerCom のそれぞれでの受賞を果たしていることから、IoT ナッジという概念とそれを具現化するシステムのそれぞれで学術的に高い注目を集めたといえる。また、本研究で生まれた要素技術のさらなる応用を探究する取り組みとして、リハビリテーション学や栄養学の先生方との共同研究が始まっており、IoT ナッジの異分野にまたがる波及効果が期待できる。

<研究課題の独創性・挑戦性>

本研究課題は、行動経済学の分野で活発に議論されてきたナッジ理論とユビキタスコンピューティング領域において、提案者がこれまで研究開発を進めてきた多様な IoT デバイスとそれらを用いたコンテキスト認識技術を駆使して、これまでにない斬新かつユニークな次世代ナッジの実現を目指す独創的な試みである。また、本研究提案は、日常生活に溶け込む一つの IoT ナッジをきっかけとして、連鎖的な健康行動の誘発を試みる、言わば、行動変容におけるバタフライ・エフェクト現象の実現を目指す取り組みであることから、高い挑戦性を備えている。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

1. Yugo Nakamura, Yuki Matsuda: IoT Nudge: IoT Data-driven Nudging for Health Behavior Change, Adjunct Proceedings of the 2021 ACM International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing and Proceedings of the 2021 ACM International Symposium on Wearable Computers, pp. 51–53, 2021.
2. Rei Nakaoka, Yugo Nakamura, Yuki Matsuda, Shinya Misaki and Keiichi Yasumoto: eat2pic: Food-tech Design as a Healthy Nudge with Smart Chopsticks and Canvas, 2021 IEEE International Conference on Pervasive Computing and Communications Workshops and other Affiliated Events (PerCom Workshops), pp. 389–391, 2021.
3. Sopicha Stirapongsasuti, Kundjanasith Thonglek, Shinya Misaki, Yugo Nakamura, Keiichi Yasumoto: INSHA: Intelligent Nudging System for Hand Hygiene Awareness, Proceedings of the 21st ACM International Conference on Intelligent Virtual Agents, pp. 183–190, 2021.
4. Yuji Kanamitsu, Koki Tachibana, Yugo Nakamura, Yuki Matsuda, Hirohiko Suwa, Keiichi Yasumoto: Using Interaction as Nudge to Increase Installation Rate of COVID-19 Contact-Confirming Application, Adjunct Proceedings of the 2021 ACM International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing and Proceedings of the 2021 ACM International Symposium on Wearable Computers, pp. 36–37, 2021.
5. Sopicha Stirapongsasuti, Kundjanasith Thonglek, Shinya Misaki, Bunyapon Usawalertkamol, Yugo Nakamura, Keiichi Yasumoto: A nudge-based smart system for hand hygiene promotion in private organizations, Proceedings of the 18th Conference on Embedded Networked Sensor Systems, pp. 743–744, 2020.

(2)特許出願

研究期間累積件数:1 件

発 明 者: 中村 優吾, 松田 裕貴, 中岡 黎, 安本 慶一

発 明 の 名 称 : カトラリー型情報収集装置、情報収集提示システム、方法及びプログラム

出 願 人: 奈良先端科学技術大学院大学

出 願 日: 2020/12/18

出 願 番 号: 特願 2020-210842

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

<国内学会発表>

- ・中岡黎, 中村優吾, 松田裕貴, 三崎慎也, 安本慶一: eat2pic: 食事と描画の相互作用を用いた健康的な食生活を促すナッジシステム, 第 25 回一般社団法人情報処理学会シンポジウム(インタラクシオン 2021), pp.1–10, オンライン, 2021 年 3 月.

<受賞>

- ・ACM Ubicomp 2021 Best Poster Honorable Mention Award
- ・IEEE PerCom 2021 Best Demo Award
- ・IPSJ インタラクシオン 2021 優秀論文賞

研究報告書

「適応的に再構成する通信ネットワーク」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50247
研究者：中山 悠

1. 研究のねらい

モバイル端末等の送受信する通信トラフィックは爆発的な増大を続け、その時空間的な変動も顕著になっている。このトラフィック変動に対し、従来の通信ネットワークでは、設備効率悪化やサービス品質低下などが問題になる。また Beyond 5G に向けた研究開発が本格化し、カバレッジの拡大などが大きな課題とされている。そこで本研究では、適応的に再構成するネットワークを検討する。その中でも特に、デバイス間通信を促進するメカニズム、モバイルネットワークの水中への拡張、ネットワークエッジにおける DDoS 攻撃の抑制、新たな通信チャネルとしての光カメラ通信などについて研究し、提案コンセプトの拡張・実証を目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究は、「適応的に再構成する通信ネットワーク」と題して、5G 以降に向けたモバイルネットワークを中心に検討を進めてきた。特に、高周波数化により多数のスマートセル基地局 (RU; Radio Unit) を高密配置する必要が生じる一方で、従来の C-RAN (Centralized Radio Access Network) 構成では広範囲の高密カバーは高コスト化し困難である、という課題に着目することで、トラフィック需要の時空間変動に応じて適応的に再構成するネットワークを提案してきた。具体的な取り組みとして、(A) デバイス間通信、(B) 水中ネットワーク、(C) DDoS 攻撃抑制、(D) 光カメラ通信についての検討を進めた。モバイル/IoT ネットワークをオンデマンドかつ安全に構成するための技術について多面的なアプローチで取り組み、各テーマについて実機検証などにより有効性を示した。

(2) 詳細

テーマ A: デバイス間通信

ユーザ端末間でのデバイス間通信によりキャリアをまたいだ通信エリアの拡大、さらに通信ビジネスのオープン化を目指す取り組みとして、通信データ量を取引する市場を考案し、IEEE Communications Magazine に採録された。また、移動するユーザ間での接続の安定性向上に向けて、適切な接続先ホスト選択手法を開発し、IEEE Internet of Things Journal に採録された。

テーマ B: 水中ネットワーク

モバイルネットワークの水上／水中への拡張に向けた検討を行った。深層学習を用いて各種符号化や信号処理を一括で行う手法について、水中音響通信への適用について検討し、

IEEE GLOBECOM 等に採録された。さらに、水中ドローンの位置などに応じて水上ノードを適切に再配置させ動的に接続する水上フロントホールのコンセプトを提案した。これらの技術については、北海道支笏湖において地元自治体や大学、漁協などの協力を得て水中伝送実験を行い、音響信号の疎通に成功した(図1)。



図1 支笏湖での水上传送実験の様子

テーマ C: DDoS 攻撃抑制

急増する DDoS 攻撃に対してネットワークエッジでの検出と緩和を行うため、レイヤ 2 スイッチなどのノードのキューイング機能を活用する周期的キューイング法を開発した。理論解析とシミュレーションにより性能評価を行い、MCQ 法の有効性と、検出に要する平均時間等の性能を示し、代表的な国際会議である IEEE CCNC 2021 および ICC 2021 で発表した。さらに、北陸 StarBED 研究センターにおいて実機検証を実施し(図2)、実機により提案手法を実行可能なことを検証済である。

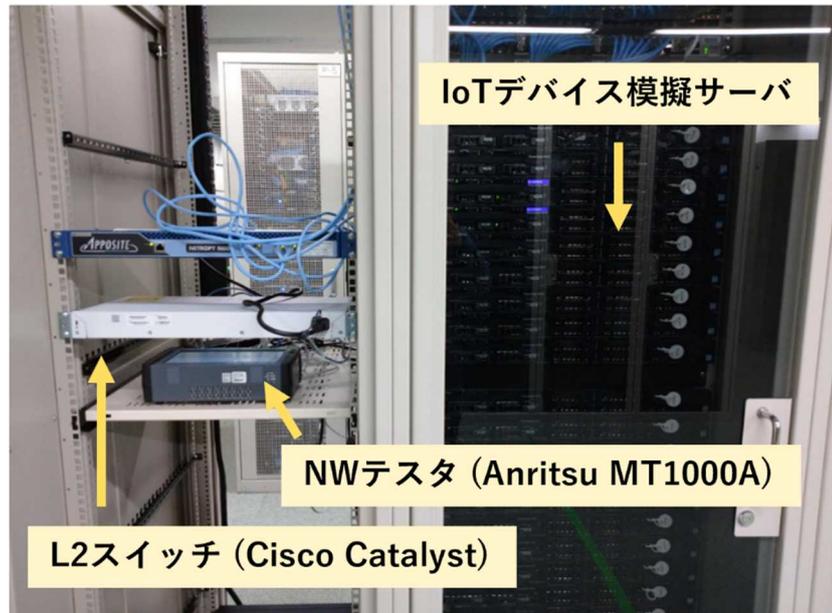


図2 北陸 StarBED 研究センターでの実機検証

テーマ D: 光カメラ通信

LED 等の光源から光信号として送出されたデータを、カメラの撮影画像から検出して復調する光カメラ通信(OCC: Optical Camera Communication)についての基礎検討を進めた。OCC には、CSMA/CA のような同一チャネル干渉回避機構が不要なため光源追加とともにスループットを増加可能な特長がある。ドローンに光源を搭載し被災地のモニタリングに用いるユースケース、また複数光源間の干渉回避などの検討を進め、GLOBECOM 等の国際会議で発表した。さらに OCC の不透過性を公開鍵交換・デバイス認証に利用するセキュリティ技術も考案し、CCNC 2022 で発表した(図 3)。



図 3 光チャネルによるデバイス認証

3. 今後の展開

まず学術的な観点での今後の展開を述べる。増え続けるデバイス間でのオンデマンドな通信を促進するメカニズムの検討は非常に重要なテーマであり、今後も新たな手法を取り入れながら大規模な実証をも目指して取り組んでいく。水中ネットワークおよび光カメラ通信については、今後重要となる未開拓な技術であり、先駆的な検討を進めていきたい。

産業面では、本テーマは Beyond 5G や IoT を支えるネットワークの基盤技術となるものであり、産業活用に向けて企業との連携なども進めていく。特に水中ネットワークなどの実験については、単独での実施が難しい面もあり、連携を進めることがポイントになると考えられる。最後に、社会文化的には、スマートホームやスマートシティをはじめネットワークサービスがインフラの一部として必須化していく中で、それを支える基盤となる技術として波及効果が大きい。また、水中ネットワーク技術により、水中環境のモニタリングなどが容易となり、環境保全などに対する貢献も期待される。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

いずれのテーマについても、トップ論文誌や国際会議への採録など、定量的には十分な成果をあげ、研究目的を達成できたと考えている。定性的にも、本加速フェーズに新たに水中ネットワークや光カメラ通信に取り組み、先駆的な成果を得た。水中実験については、関係各所との調整の上で自治体とも協力した実験体制の構築にも成功し、非常に良かったと考えている。

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

各テーマについて、関連するACT-I内外の研究者と協力して実験を行うなどすることができ、効率的に研究を進め、共著論文の発表などに繋げることができた。また研究費に関しても計画的に執行し、研究遂行にあたり非常に有効的に活用できた。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果(今後の見込みも重視してください。)

本研究成果は5G以降のモバイルネットワークの基盤となり得るものであり、各種産業の発展を支える技術として波及効果は大きいと考えられる。さらに、今後の通信ビジネスにおける公平性やオープン性を高め、新たな市場やビジネスの開発に繋げられる可能性がある。

・研究課題の独創性・挑戦性

本研究課題は、従来のモバイルネットワークの課題をまったく新しい方法で解決する取り組みであり、共有経済システムなど、他にない挑戦的なメカニズムについて検討した。また、水中ネットワークや光カメラ通信については、今後有望と期待される一方で、まだ取り組んでいる者が少なく、挑戦的かつ先駆的な検討を進めることができた。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

- | |
|---|
| 1. Yu Nakayama, Ryoma Yasunaga, Kazuki Maruta, "Banket: Bandwidth Market for Building Sharing Economy in Mobile Networks", IEEE Communications Magazine, vol. 59, no. 1, pp. 110--116, 2021. (IF: 11.052) |
| 2. Yu Nakayama, Kazuki Maruta, "Age of Information based Host Selection for Mobile User Provided Networks", IEEE Internet of Things Journal, vol. 8, no. 2, pp. 672--683, 2021. (IF: 9.515) |
| 3. Yu Nakayama, "Horizontal Integrated Framework for Mobile Crowdsensing", IEEE Access, vol. 9, pp. 127630--127643, 2021. (IF: 3.367) |
| 4. Yu Nakayama, Ryo Yaegashi, Anh Hoang Ngoc Nguyen, Yuko Hara-Azumi, "Real-time Reconfiguration of Time-Aware Shaper for ULL Transmission in Dynamic Conditions", IEEE Access, vol. 9, pp. 115246--115255, 2021. (IF: 3.367) |
| 5. Yu Nakayama, Daisuke Hisano, Kazuki Maruta, "Adaptive C-RAN Architecture with Moving Nodes Towards Beyond 5G Era", IEEE Network, vol. 34, no. 4, pp. 249--255, 2020. |

(2)特許出願

研究期間累積件数:0

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. Yukito Onodera, Hiroki Takano, Daisuke Hisano, Yu Nakayama, "Avoiding Inter-Light Sources Interference in Optical Camera Communication", IEEE Global Telecommunications Conference (GLOBECOM), Madrid, Spain, Dec. 2021.
2. Tianwen Li, Yukito Onodera, Daisuke Hisano, Yu Nakayama, "Multi-Channel Authentication for Secure D2D using Optical Camera Communication", IEEE 19th Annual Consumer Communications & Networking Conference (CCNC), Las Vegas, USA, Jan. 2022.
3. Yukito Onodera, Hiroki Takano, Daisuke Hisano, Yu Nakayama, "Adaptive N+1 Color Shift Keying for Optical Camera Communication", IEEE 94th Vehicular Technology Conference (VTC-Fall), Virtual, Sep. 2021.
4. Yu Nakayama, Kazuki Maruta, "Cell Zooming for Green Mobile Networks with Vehicle-Mounted Radio Units"IEEE Global Telecommunications Conference (GLOBECOM), Taipei, Taiwan, Dec. 2020.
5. 2019年度 船井研究奨励賞

研究報告書

「デジタルファブリケーションによる生体模倣インタフェースの構築」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50248
研究者：鳴海 紘也

1. 研究のねらい

これまで、Human-Computer Interaction (HCI)やロボティクスの分野では、生体で言うところの神経のような機能を実現するために導体などによるセンサが用いられ、また筋肉のような機能を実現するために様々な種類のアクチュエータが用いられてきた。そこで私は、このような生体のアナロジーを拡張し、神経や筋肉以外の、従来あまり利用されてこなかった生体機能をインタフェースやロボットシステムに組み込むことで、新しいインタラクションやファブリケーションの手法を実現しようとした。

まず本研究期間の前身にあたる ACT-I「情報と未来」の加速以前のフェーズでは、生体模倣の1つの側面として、例えば人間の肌のように一度傷ついても勝手に修復する自己修復素材を用いたインタフェースを研究した。

そして本研究期間に該当する加速フェーズでは、生体模倣の別の側面として、例えばサナギが成虫に変わるような生体の形態変化に着目し、自己組み立て(Self-assembly)や折り紙およびそれらを支援するインタフェースの研究を行った。

より具体的には、大きく分けて3つの研究を実施した。発表タイミングの都合上、研究詳細は Pop-up Print について公開する。

- **Pop-up Print:** 背の高い構造物を3Dプリントする際に問題となる、長い造形時間と大量のサポート材消費を回避するために、3Dモデルをカブトムシのサナギのように折りたたんだ状態で印刷し、印刷後に構造物を展開する手法

2. 研究成果

(1) 概要

前述の通り、本研究では生体の形態変化を模した自己組み立て(Self-assembly)や折り紙に関して3つの研究を行った。発表タイミングの都合上、研究詳細は Pop-up Print について公開する。

- **Pop-up Print:** 背の高い構造物を3Dプリントする際に問題となる、長い造形時間と大量のサポート材消費を回避するために、3Dモデルをカブトムシのサナギのように折りたたんだ状態で印刷し、印刷後に構造物を展開する手法

(2) 詳細

研究テーマ1: Pop-up Print

- 研究背景

3Dプリンタで大きな構造物を作製する際には、3つの点が問題となりやすい:

1. 長い造形時間。造形方式にもよるが、一般的に 3D プリンタは水平方向に大きな構造物よりも垂直方向(Z 方向)に背の高い構造物を印刷する際に長い時間を要する
2. 大量のサポート材消費。造形方式にもよるが、3D プリンタの中にはオーバーハングなどを精度よく印刷するためにサポート材と呼ばれる材料を印刷する機種がある。このようなサポート材は印刷が終わったあとで取り除かれ廃棄される。そのため、サポート材がいたずらに増えることは、完成物のクオリティとは無関係に環境負荷を増大させる。
3. 低い収納性。現状の 3D プリンタの一般的な用途が試作であるため、ユーザはたくさんの方の構造物を印刷することがあるが、大きな構造物はかさばるため収納に困る。

一方、生物の変態に目を向けると、カブトムシはサナギの状態ですでにツノなどの構造を「折りたたんだ」膜として格納しており、成虫になるときにその折りたたまれた膜構造に体液を注入することで最終的な形状を得る。つまり、ツノはあらかじめ折りたたまれた状態で作られている。これを逆折り紙と呼ぶこともある。

本研究は、このような生体の逆折り紙を背の高い構造物の 3D プリントに応用したものである。つまり、3D プリンタに入力するモデルのデータを適切に折りたたんだ形状に変換しておき、印刷に必要な時間やサポート材消費を低減する。そして、印刷が完了したあとで造形物を展開することで、当初必要だった形状に復元する。この折りたたみと展開は繰り返し行うことができるため、使わないとき・収納するときだけたたんでおくというような利用法が可能となる。

- 結果

図 1 は、Pop-up Print の処理の概要である。まずユーザは折りたたみ前の STL ファイルを入力する (図 1a)。すると、ソフトウェアは折りたたみ可能な領域を赤で可視化する (図 1b)。その際ユーザはモデルを回転するなどして、好みの折りたたみ角度などを指定することができる。その後、ソフトウェアはモデルを折りたたみ (図 1c)、3D プリントに必要な素材の割り当てを行う (図 1d)。本研究では、構造物の中でも折りたたみの際にたわむ部分は黒の柔軟素材で出力している。なお、本手法では、大雑把に言った場合「先細り」の部分の折り返すことでたたみを実現しているが、図 2 に示すように入力が折りたたみに適さない非先細り形状だった場合でも、ソフトウェアが元の形状をなるべく維持しながらモデルを折りたたみ可能な形状に修正することもできる。

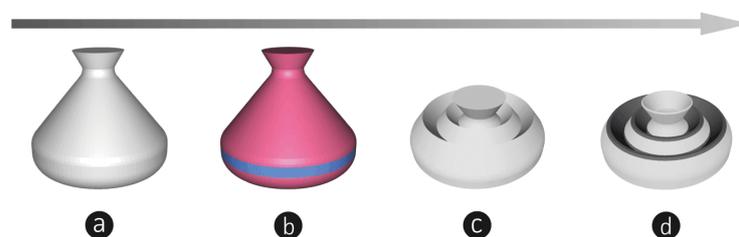


図 1: Pop-up Print の処理の流れ

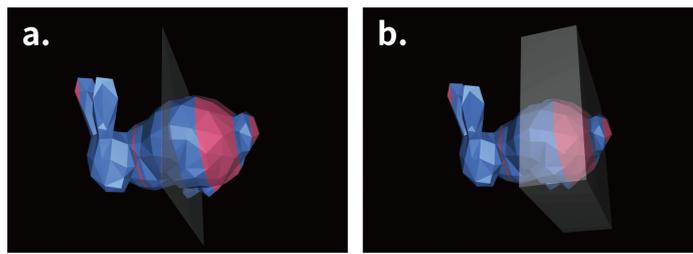


図 2: 折りたたみ不可能な領域をユーザが選択することで、形状を大きく変えることなく折りたたみ可能な形状に修正することができる

図 3 は、折りたたみ前のモデルと折りたたんで印刷された実際の構造物の例である。徳利や Huffman's Cone のようにたたむのが簡単な形状の他に、Stanford Bunny のような一般的なモデルでも折りたたみが可能なことが示された。また、最大で印刷時間とサポート材消費量の双方をもととのモデルの 50%以下に抑えられることがわかった。さらに、(実装の詳細は省くが)造形物は折りたたんだ状態と展開した状態の両方で機械的に安定するように設計されており、必要のないときには畳んで収納することが可能であることも確認した。

name	properties ^{*1}	view of design tool	printed objects
a Tokkuri (& Choko)	<i>without folding</i> print time: 10 h 24 min support: 477 g <i>folded</i> print time: 5 h 20 min support: 342 g		
b Huffman's Cone	<i>without folding</i> print time: 15 h 13 min support: 741 g <i>folded</i> print time: 3 h 27 min support: 139 g		
c Starfish	<i>without folding</i> print time: 3 h 22 min support: 108 g <i>folded</i> print time: 2 h 39 min support: 106 g		
d Two-hump Dome	<i>without folding</i> print time: 3 h 38 min support: 124 g <i>folded</i> print time: 1 h 57 min support: 59 g		
e Stanford Bunny	<i>without folding</i> print time: 7 h 16 min support: 149 g <i>folded</i> print time: 5 h 25 min support: 141 g		

^{*1} Print time and support consumption was obtained from the simulation result of Objet 260 Connex 3 (Digital Material Mode, computed after auto replacement).

図 3: たたむ前のモデルと、畳んだ状態で印刷した構造物の例

3. 今後の展開

研究提案の時点で私が目標としたのは、生体の形態変化に着目した、変形機構を利用するインタフェースの開発である。そしてこの研究期間に生み出された3つの研究成果は、カブトムシの変態などに見られる「逆折り紙」から着想を得るファブリケーション手法である。Pop-up Print で示したような「折りたたんだ状態」での3Dプリントは、大きな構造物の作製に必要な時間と素材を低減し、効率的かつサステナブルな造形を実現できるという観点で有用である。また、キャンプなどに用いられる折りたたみ式のコップを一般的な形状に拡張したものと考えることもできるため、高い収納性を持つ形状の実現方法としても有効だと思われる。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

加速フェーズ以前は生体の自己修復に着目したインタフェースに取り組み、本加速フェーズでは生体の形状変化に着目したファブリケーション手法に取り組んだ。当初提案として記載していた「逆折り紙の3Dプリント」「インクジェット印刷による自己折り」はそれぞれ Pop-up Print と Inkjet 4D Print のプロジェクトとして達成できた。

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

ACT-I 開始時には博士学生であったが、助教などを経て現在は特任講師の身分となっていることもあり、研究実施には学生の協力を得ることになった。研究費執行状況に関しては、COVID-19の蔓延により研究が遅延したことや海外渡航が不可能になったことなどにより、当初の予定より遅れた。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果(今後の見込みも重視してください。)

Crane や Inkjet 4D Print は、論文の発表順調整や権利化の都合によりなかなか公開できない状況が続いていたが、その分インパクトの大きい成果になったと考えている。すでに折り紙やファブリケーションを専門とする大学の教員や企業からは非常に高い評価を受けており、産業化の可能性は高いと考える。現状、Self-folding 技術を産業レベルで実現している例はほぼ存在しないため、大きな波及効果が期待できる。

・研究課題の独創性・挑戦性

もともとは Human-Computer Interaction、ソフトロボティクス、マテリアル工学などの融合領域で研究を実施していたが、本研究期間で計算機折り紙とCGの分野に参入することができた。特に、これまで任意の水密な折りを実現できるアルゴリズムなどは知られていたが、幅広い折りパターンの「デジタル・ファブリケーション」という観点では、世界的にも独創的かつ挑戦的な研究になったと考える。成果発表が一通り済んだ段階で、「折り紙ファブリケーションの分野を開拓した」という評価を得られることを願う。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Yuta Noma, Koya Narumi, Fuminori Okuya, Yoshihiro Kawahara. Pop-up Print: Rapidly 3D Printing Mechanically Reversible Objects in the Folded State. Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on User Interface Software and Technology (UIST' 20), Pages 58-70, Virtual (previously Minneapolis, US), Oct. 2020, DOI: 10.1145/3379337.3415853
2. 野間裕太, 鳴海紘也, 奥谷文徳, 川原圭博. Pop-up Print: 双安定な折りたたみ 3D プリント. 第 28 回インタラクティブシステムとソフトウェアに関するワークショップ(WISS2020), Dec. 2020.
3. Junichiro Kadomoto, Takuya Sasatani, Koya Narumi, Naoto Usami, Hidetsugu Irie, Shuichi Sakai, Yoshihiro Kawahara. Toward Wirelessly Cooperated Shape-Changing Computing Particles. IEEE Pervasive Computing, 2020, DOI: 10.1109/MPRV.2021.3086035.

(2) 特許出願

研究期間累積件数:1 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

招待講演

1. 鳴海紘也, Self-healing UI: 機械的かつ電氣的に自己修復するセンシング・アクチュエーションインタフェース, FIT2020 トップコンファレンスセッション, 2020/9/1
2. 鳴海紘也, マテリアル・インタラクション, はこだて未来大学学術講演会, 2020/7/20
3. 鳴海紘也, HCI におけるコンピューショナルファブリケーション, 豊田中央研究所, 2021/11/10

受賞

1. **Best Paper Award Runner Up**, K. Narumi, H. Sato, K. Nakahara, Y. Seong, K. Morinaga, Y. Kakehi, R. Niiyama, and Y. Kawahara, "Liquid Pouch Motors: Printable Planar Actuators Driven by Liquid-to-gas Phase Change for Shape-changing Interfaces," IEEE International Conference on Soft Robotics (RoboSoft), 2020/6/30
2. **Best Demo Award**, R. Niiyama, H. Sato, K. Tsujimura, K. Narumi, Y. a. Seong, R. Yamamura, Y. Kakehi, and Y. Kawahara. 2020. poimo: Portable and Inflatable Mobility Devices Customizable for Personal Physical Characteristics. In Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on User Interface Software and Technology (UIST ' 20), 2020/7/23
3. **People's Choice Best Demo Honorable Mention Award**, Mako Miyatake, Koya Narumi, Yuji Sekiya, and Yoshihiro Kawahara. 2021. Flower Jelly Printer: Slit Injection Printing for Parametrically Designed Flower Jelly. Proceedings of the 2021 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems. Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, Article 425, 1-10. DOI: <https://doi.org/10.1145/3411764.3445346>, 2021/5/14

研究報告書

「生体信号の確率的生成モデルと 推論ニューラルネット」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50249
研究者：早志 英朗

1. 研究のねらい

パターン認識をはじめとする自然情報処理において、データの特性をどのようにモデル化するかは重要な課題である。確率的生成モデルはデータのモデル化手法の一種であり、データの生成過程を確率分布の組み合わせでモデル化し、観測データからモデルパラメータを推論することでパターン認識問題へ応用できる。領域知識を柔軟に組み込むことができ、解釈性が高く欠損値に強いといった様々な利点があるものの、複雑なモデルの場合パラメータや潜在変数の推論が困難になる課題があった。一方、ニューラルネットワーク(NN)は入力の線形和の非線形変換に基づくニューロンモデルを多層に結合したモデルであり、高い表現能力と強力な学習能力を持つことからパターン認識に多用される。ただし、内部の解釈性が低く、ブラックボックス的になる問題があった。

本研究では、確率的生成モデルと NN を融合することで両者の長所を相補的に生かす機械学習手法の基礎的な検討を行う。そして、それにより得られた知見を生体信号などの実世界データ解析につなげることを目的とする。

具体的には、以下の3つのテーマに取り組む：(A) NN への確率モデル埋め込み、(B) NN による確率モデル推定、および(C) 確率モデルによる NN 解釈。(A)では、解析対象の特性を良く表す確率モデルを構造に展開した NN を開発する。そして、これを誤差逆伝播法で学習させることで、効率的なモデル推論を行う。(B)では、NN を用いて事前に仮定した確率分布を推定することにより、半教師あり学習や時系列予測へ応用する。(C)では、確率モデルの知識を利用して、NN の学習挙動や内部状態の解釈に取り組む。

2. 研究成果

(1) 概要

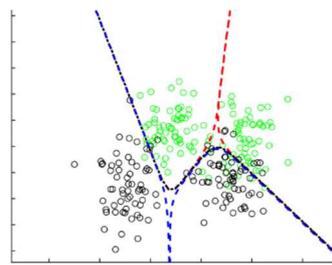
確率的生成モデルとニューラルネットワーク(NN)を融合した機械学習手法の開発およびその応用研究に従事した。具体的には、(A) NN への確率モデル埋め込み、(B) NN による確率モデル推定、および(C) 確率モデルによる NN 解釈の3つのテーマに分割し研究を遂行した。研究成果は、ICLR や ICASSP といったトップ会議を含む5件の国際会議発表、1編のジャーナル論文、および7件の国内会議発表として公表した。

(2) 詳細

研究テーマ A 「NN への確率モデル埋め込み」

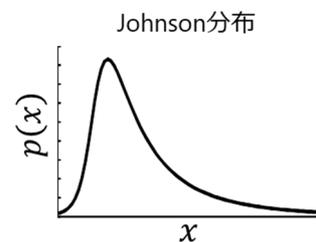
・混合正規分布に基づくスパースな識別モデルと NN への埋め込み

混合正規分布に基づくスパースな識別モデルを提案した。提案法では、混合正規分布に準ずるモデルを事後確率最大化により学習させる問題において、Sparse Bayesian learning に基づいて重み係数をスパース化することにより、汎化性能を向上させるとともに、混合正規分布のコンポーネント数を自動決定できることを示した。また、理論的な貢献として、関連ベクトルマシンと混合正規分布の関係性に新しい解釈を与えた。さらに、提案ネットワークを畳み込み NN の最終層として利用し End-to-end で学習することで、特徴量を正規分布状に埋め込み、かつ Softmax 関数を利用したときと比較しクラス間のマージンを広げられることを示した。本研究は機械学習のトップ会議である ICLR2021 へ採択された。



・Johnson 分布に基づく NN と筋電識別への応用

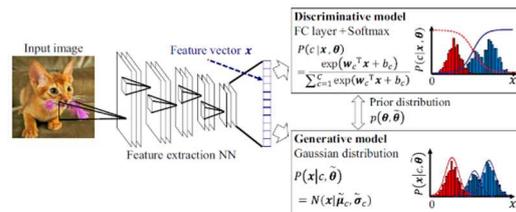
筋電識別に特化した Johnson 分布に基づく NN を提案した。筋電信号は皮膚表面から筋活動を計測した信号であり、インタフェース制御等に応用される。筋電信号の識別の際は整流平滑化などの信号処理が加えられることが一般的である。本研究では、信号処理後のデータ分布が歪度や尖度を持つことに着目し、この知識を埋め込んだ NN を提案し、筋電位識別の精度を向上させられることを示した。具体的には、Johnson 分布と呼ばれる 4 種類のパラメータと非線形変換を組み合わせた右図のような確率分布に基づく NN を提案した。Johnson 分布に基づくクラス事後確率計算の過程の NN による表現は、要素間の積を計算する層やハイパボリックサイン関数などの特殊な活性化関数を利用することによって実現した。本研究は IEEE Access へ掲載された。



研究テーマ B 「NN による確率モデル推定」

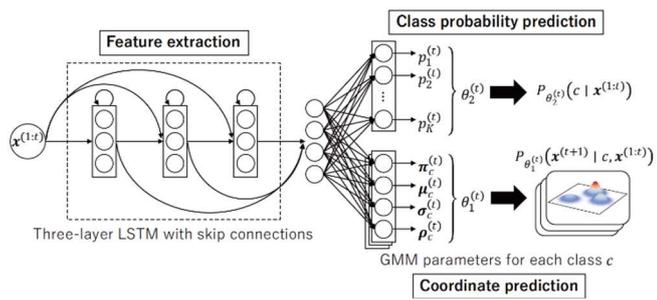
・生成と識別のハイブリッドモデルと半教師有り学習への応用

生成モデルと識別モデルを協調的に学習する方法を提案し、半教師有り学習へ応用した。生成モデルはデータの生成過程をモデル化する手法であり、パターン認識問題においてはラベル付きデータのみならず、分布推定にラベル無しデータを活用できる。識別モデルは識別に必要なクラス事後確率を直接モデル化するため、識別モデルは一般的に生成モデルと比較して高い分類性能を持つと言われるが、ラベル無しデータを扱うことができない。本研究では、両者の長所を兼ね備えた生成と識別のハイブリッドモデルを提案し、半教師あり学習への有効性を示した。具体的には、NN の識別層として一般的に用いられる softmax 層が、正規分布に基づく識別モデルと解釈できることを利用し、これと対になる正規分布に基づく生成モデルを同時に学習する。この際、各モデルのパラメータが相関を持つように事前分布を設定することで、両者を融合する。本研究は MIRU2020 において発表した。



・生成モデルと NN を融合した時系列予測手法

生成モデルと NN を融合した時系列予測手法を提案し、筆記予測へ応用した。時系列予測において、全ての系列を一意的に予測することは困難であり、途中でクラスが分岐する可能性 (bifurcation) を考慮する可能性

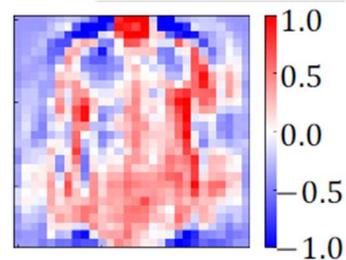


がある。例えば筆記予測において、`0`と`6`は途中までは同じ軌跡であるが、途中から分岐する。提案モデルではクラス分岐を考慮した時系列予測手法を提案した。具体的には、次の時刻の座標を混合正規分布に基づきモデル化する。そして、混合正規分布のパラメータを分岐の可能性があるクラス確率とともに推定することにより、分岐を考慮した予測を行う。本研究は ICFHR において発表した。

研究テーマ C 「確率モデルによる NN 解釈」

・NN の単位初期化と内部特徴解釈への応用

NN の重みを単位初期化した際の勾配消失が防止できる条件を明らかにするとともに、単位初期化が内部特徴解釈への応用できる可能性を示した。具体的には等幅な十分に深い多層パーセプトロンの重みを単位行列の定数倍で初期化した際の勾配消失が防止できる条件を、dynamical isometry の理論に基づき入出力ヤコビアン固有値を調べることで導出した。また、単位初期化した NN は学習後においてもスパースな重みを学習し、出力層周辺においても入力データの構造をおおよそ保存することから、特徴量の解釈に応用できる可能性を示した。本研究は信号処理のトップ会議である ICASSP2021 へ採択された。



3. 今後の展開

本研究提案で設定した課題を解決することによって、これまでの機械学習の研究で得られた知見と、実世界データ解析とのギャップを埋めることができる。近年の深層学習の成功は、大量の教師付きデータを用いた学習によるところが大きい。そのため、ベンチマークデータのような整備されたタスクに対しては強力な性能を発揮するが、実社会のデータに応用する場合にはいくつかの壁がある。具体的には(1) 教師なしデータを用いた学習、(2) 欠損値や不確実なデータへの対応、(3) モデルの解釈性の向上、の3点が必要不可欠であると考えられる。確率的生成モデルはこれら3つの要素を全て統一した自然な枠組みで扱うことのできる方法である。提案法のような確率モデルに基づくニューラルネットワークの構築法を発展させていけば、ディープニューラルネットワークのような大規模なモデルにおいてもこれら3点の課題を解決することができると思われる。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

(A) NN への確率モデル埋め込み, (B) NN による確率モデル推定, および(C) 確率モデルによる NN 解釈の各テーマにおいて, ジャーナル論文や複数のトップ会議論文を公表でき, 一定の成果を達成できたと考える. しかしながら, 本来の計画では(D)確率モデルへの NN 埋め込み, というもう一つのテーマを掲げており, これに関しては公開可能な成果を挙げるができなかった. これは, このテーマにおいて CTG と呼ばれる生体信号のモデル化を目的としており, これには医師の協力および助言が必要不可欠であったにもかかわらず, 新型コロナウイルスの影響で共同研究が中断したことが主な理由である.

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

【研究実施体制】研究全体の統括および遂行を代表者の早志が担った. また, 九州大学の学生 3 名がデータ整理や解析に従事した. 加えて, 外部の研究協力者として, 富士通研究所の早瀬友裕氏と単位初期化について共同研究を進め, 主に理論部分について助言を仰いだ.

【研究費執行状況】GPU サーバの購入やレンタル, 生体信号センサの購入に主に利用し, これらは有効に活用された.

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

現在ディープニューラルネットワークをはじめとした機械学習は急速な発展をみせているが, 産業や医療など実社会に貢献するためには整備されていないデータに対する手法を発展させていく必要がある. 本研究の確率モデルとニューラルネットワークを融合するアプローチは, 欠損を含むデータに適用でき, 整備されていない実データに対して有効であると考えられる. また, 確率モデルを利用することで実現できる不確実性の推定や解釈性の向上は, 医療のようなシビアな判断が必要な場面において重要となる.

・研究課題の独創性・挑戦性

確率モデルと NN を複数の異なる観点から融合する点にある. これにより, データに関する領域依存知識に基づいて解析対象の確率的生成モデルを NN へ埋め込んだり, 逆に NN を用いて確率的生成モデルを推論したりすることが可能となる.

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Hideaki Hayashi and Seiichi Uchida, A Discriminative Gaussian Mixture Model with Sparsity Proceedings of the 9th International Conference on Learning Representations (ICLR), 2021.
2. Shohei Kubota*, Hideaki Hayashi*, Tomohiro Hayase, Seiichi Uchida (*Equal contribution), Layer-Wise Interpretation of Deep Neural Networks Using Identity Initialization, Proceedings of the 45th International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP), 2021.
3. Takato Otsuzuki, Heon Song, Seiichi Uchida, Hideaki Hayashi, Meta-learning of Pooling Layers for Character Recognition, Proceedings of the 16th International Conference on Document Analysis and Recognition (ICDAR), pp. 188-20, 2021.
4. Takato Otsuzuki, Hideaki Hayashi, Yuchen Zheng, Seiichi Uchida, Regularized Pooling,

Proceedings of the 29th International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), pp. 241–254, 2020.

5. Masaki Yamagata, Hideaki Hayashi, and Seiichi Uchida, Handwriting Prediction Considering Inter-Class Bifurcation Structures, Proceedings of the 17th International Conference on Frontiers of Handwriting Recognition (ICFHR), 2020.

6. Hideaki Hayashi, Taro Shibasaki, and Toshio Tsuji, A Neural Network Based on the Johnson SU Translation System and Related Application to Electromyogram Classification, IEEE Access, vol. 9, pp. 154304–154317, 2021.

(2)特許出願

なし

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- ・第 23 回画像の認識・理解シンポジウム(MIRU2020)インタラクティブ発表賞
- ・早志英朗, 内田誠一, 識別・生成のハイブリッドモデルと弱教師あり学習への応用, 画像の認識・理解シンポジウム (MIRU), IS3-1-21, オンライン開催, 2020 年 8 月 2 日-5 日

研究報告書

「分布型触覚センサと機械学習に基づく多指ハンドによるタスク実現」

研究期間：2020年4月～2022年3月
 研究者番号：50250
 研究者：船橋 賢

1. 研究のねらい

ロボットが介護や協働などで活躍するためには様々な道具・物体を人間と同様に扱えることが求められるが、それらの人間が行う操りは様々な把持姿勢の組合せ[1]によって為されている。これらの把持姿勢は把持する物体のサイズ・形状やその物体を用いて達成する目的に合わせて変更されるが、指先から手の平を含むような様々な部位の接触を伴っているため、把持している物体が複雑な形をしていたり、握りつぶしてしまうような柔らかい物体であったりする場合、手の上どの部位で接触しているかを考慮しなければならない一方、それらの接触(触覚)情報を駆使出来れば、そのような物体の複雑な操りの達成ができる可能性がある。

それを達成する時の課題として、①操り時にいつも指同士が並んでいる把持姿勢になるとは限らず、ACT-I 期間に提案した手法のように単純に指上のセンサ配置を並べることは必ずしも正しくなく、困難な場合がある。特に、②操り中には関節角度の変化により指の向きが変わり、時々刻々と空間的なセンサ配置が変化する。この時、操り動作は指同士の連携した動きによって精密に為されるものであり、互いのセンサ配置などを考慮することが出来れば、柔らかい物体を潰さずに操るなどの動作が出来る可能性がある。また、潜在的には人間のように触覚情報を取得可能な多指ハンドは、様々な物体を適応的に安定して操ることが出来るが、③それは対象把持物体の柔らかさや重さなどの物体特性を把握しながら、多指の操りに反映し動きを調整する難しさをはらみ、数式によるモデル化を行うのは容易ではない。そこで、本研究の目的を操り中に変化する複雑なセンサ配置と物体特性に対応し、多指操りを達成することとした。

[1] T. Feix, et al., “The GRASP Taxonomy of Human Grasp Types”, IEEE Transactions on Human-Machine Systems, 04 September 2015, pp. 66 – 77.

2. 研究成果

(1) 概要

多指ロボットハンドは人間と同様に多くの器用な操作タスクを実現するために使用される可能性がある。触覚センサは様々な物体に対する操作の安定性を高めることが出来る。しかし、多指ハンドの触覚センサには様々なサイズや形状のものがある。畳み込みニューラル

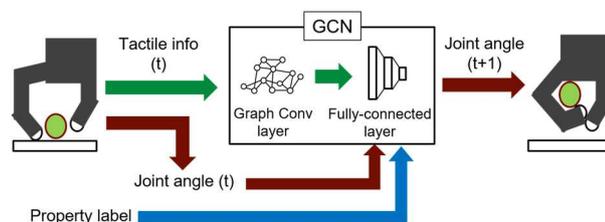


図1 提案手法概要

ネットワーク(CNN)は触覚情報の処理に有用であるが、多指ハンドからの情報ではCNNが

矩形の入力を必要とするため、任意の前処理が必要であり、動作や認識の結果が不安定になる可能性がある。そのため、このような複雑な形状の触覚情報をどのように処理し、操り動作の実現が出来るかは未解決の課題である。本研究では、グラフ畳み込みネットワーク(GCN)を用いて複雑な配置の触覚センサから測地的特徴を抽出する制御方法を提案する。さらに、対象物体の特性ラベルを GCN に与えることで操り動作を調整することを目指した。Allegro Hand の指先、指腹、手のひらに 3 軸の触覚センサを取り付け、1152 点の触覚点を取得した。人間の器用な操り動作をロボットハンドに直接伝えるためにデータグローブを使って学習データを収集した。

結果として GCN による操り動作を高い確率で成功させることが出来た。また、GCN に正しい物体特性ラベルを与えた場合、柔らかい物体の変形が少なくなることを確認した。また、GCN の特徴量を PCA で可視化したところ、ネットワークが測地的な特徴を獲得していることが確認できた。さらに実験者が把持した物体を引っ張るなどの外乱を起こした場合や未学習物体の操りにおいても安定した動作生成を達成した。

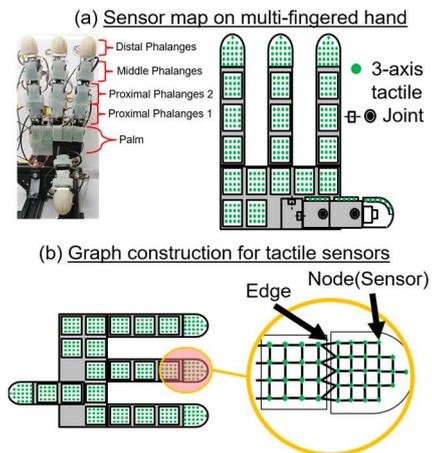


図 2 センサ配置とグラフ構造

(2) 詳細

研究テーマ A:「センサ配置を考慮した GCN と物体特性ラベルによる動作生成」

図 3 に示す 4 つのモデルを使用した。成功の定義は最終的な把持姿勢において Allegro Hand の手のひらと対象物の距離が 2cm 以下、手のひらに対する対象物の向きが 15 度以下になったかどうかである。各モデルに対して 5 回の実験を行った。対象物としては、細長い形状で高さや向きの測定が容易なポテトチップスの円筒を用いた。図 3 に各モデルが最終的に生成した把持姿勢の一例を示す。モデル I が最も高い成功率を得ており、5 回中 5 回成功している。ここで重要なのは、各指が協調して操作を行っていることである。例えば、人差し指と親指で対象物をつまんだ後、中指が対象物に接触し、人差し指が接触を解いて別の接触位置で再び対象物に接触するなどの指の動きがよく観察された。興味深いことに一部の指は同期して動き、シリコンの皮膚の摩擦を利用して対象物をダイナミックに持ち上げたり回転させたりして最終的な把持姿勢に到達した。一方、畳み込み層が少ないモデルでは、挟み込みには成功したものの、最終的な把持姿勢には至らず、距離の誤差は 2cm 以上であった。畳み込み層を持っていないモデル IV などでは持ち上げることすら叶わなかった。

	Model I	Model II	Model III	Model IV
Conv Layer	[14, 28, 56, 112, 112, 112]	[14, 28, 56, 112]	[14, 28, 56]	-
Final Grasping Posture				
Height Error [cm] Avg./Var.	0.6/0.3	3.3/0.8	4.8/0.2	5.0/0.0
Orientation Error [deg] Avg./Var.	5/3	11/4	1/1	0/0
Success Rate	5/5	1/5	0/5	0/5

図 3 畳み込み層数の比較

また、物体特性ラベルの有効性を確認するためにラベルを変更して操り動作の比較実験を行

った。柔らかいプラスチックチューブを対象物とし、対象物のラベルを指定して GCN(モデル I)に入力した。入力された特性ラベルには、「正しいラベル」と「正しくないラベル」の 2 種類を用意した。正しいラベルは、

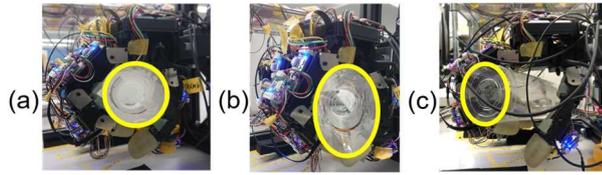


図 4 特性ラベルの比較

対象物の特性である「軽い」「柔らかい」「滑る」からなり、間違っただラベルは実際にはサララップの特性である「重い」「硬い」「滑る」からなる。なお、今回はラベルなしで学習した GCN(モデル I)も用意した(図 4-(c))。机に物を押し付けたり、指を伸ばして最終的に掴む姿勢をとったりと試行ごとに異なる動作をしてしまい、操りは成功しなかった。これはモデルが目的の動作を学習できず、特性ラベルのないランダムな動作を生成してしまったためと思われる。正しいラベル(図 4-(a))と誤ったラベル(図 4-(b))を使用した場合の、最終的な把持姿勢の側面図である。正しいラベルを使用した場合はプラスチックの円柱がつぶれず、誤ったラベルでは軟質プラスチックの円筒が押しつぶされてしまった。この結果から、正しいラベルを使用した場合、手は適切な把持力で操作を行うことができ、対象物を潰さずに済んだと考えられる。このように、物体の特性に応じて変化する複数の指の操作動作を 1 つの GCN が同時に学習し、特性ラベルがその動作を調整することができることを確認した。

研究テーマ B:「提案 GCN による汎化性能の検証」

提案手法のロバスト性を評価するために Fig.5 に示すような GCN(モデル I)による操り中に、実験者が把持した物体を下や横に引っ張るといった実験を行った。物体の把持状態や位置を一変させるような大きな外乱が発生しても最終的な把持姿勢に到達することができた。興味深いのは例えば引き下げ外乱が発生したとき、関節角度の状態は最終的な把持姿勢の状態に近く、触覚情報の状態は初期の把持状態(指先で物体を触った状態)の状態に近くなる点がある点である。このような状況は学習データにはなかったが、提案モデルはこのような状況にも対応することができた。これにより、提案したモデルのロバスト性を示した。広く分布している触覚センサに関して外乱の後にも確実に物体に接触するので有益であると予想される。

さらに図 6 に示すように多くの未学習物体で操りに成功した。その多くは学習データにない物理的特性の違いがあるにも関わらず、巧みに操られた。プラスチック製のビーカーでは対象物が 45 度以上傾いていたため、親指と人差し指でつまんでも元に戻らないように見えたが中指と小指が他の指を支えることで最終的な把持姿勢に至ることができた点が注目された。また、おもちゃのサイコロ



図 6 未学習物体の操り

図 5 外乱下における物体の操り

操った際にはサイコロが大きいために他の物体ほど動作が大きくなかったが、それでも最終的

な把持姿勢に到達することができた。これはモデルが目標とする把持状態を十分に学習していることを示している。全体として、未学習の物体に対する操作の成功率は 73.85%となった。これらの結果は ICRA2021 のワークショップにて発表されており、ICRA2022 に投稿されている。

3. 今後の展開

今回の研究成果において様々な研究課題ないしテーマを発見することが出来たと考えている。ロボットは常にソフトウェアとハードウェアに関係性を考える必要があり、どちらが欠けても環境とのインタラクションや自律的な行動決定は望みがたい。また、ロボットアームとロボットハンドの統合は単純な発想でありながら、多くの展望の検討材料になったと考える。改めて、今回の研究にて多くの課題とテーマが見えてきた。

ソフトウェアで言うと、今回はシンプルな GCN を用いたが他のグラフベースのネットワークはどうかまず挙げられる。特に多指ハンド上の触覚センサは操り中に 3 次元的にその位置関係を変えることになるため、より条件に適したネットワークを検討する必要がある。また、今回はラベル入力によって対象物体に対する動作の変更を行うことが出来たが、今後はその特徴量の用意の仕方も検討しなければならない。また、GCN は触覚センサを通してロボット自身の身体の特徴量を得ることが出来ている。この結果はロボティクスだけでなく認知の分野にも応用できる可能性を秘めている。

さらにハードウェアの観点も非常に重要で今回は 1 種類のロボットハンドと触覚センサしか試していないが他のデバイスではどうなるかなどの汎用性の評価が必要である。また、特に今回大きく課題として残したのはデータ収集時の人間への力覚フィードバックがないことであった。これによって、物体の特性に合わせて操るためのデータが上手く取得できなかったと言わざるを得ない。しかし、現状では本実験設定に適した遠隔操作デバイスは存在しないため、これらの開発も急務である。今回課題として顕になったのは、ロボットハンドの関節間のギャップである。人間の手には存在しないため何となくギャップが無いほうが良いと感じるものの、本研究者の知る限り、それを真剣に研究開発するものは無いが、今回ロボットが失敗する事例としてそのギャップに物体が挟まり動かせなくなるということがあった。当然触覚センサもその部分にはないため、どう動作すれば良いのかが分からないという結果になった。

最後にロボットハンドにアームを取り付けることで、最終的にはダイナミックなデモを達成することを目指したが、これも新たな研究テーマを生む重要な研究開発になったと自負している。特にロボットアームで腕を伸ばしつつ、多量の触覚センサの搭載されたロボットハンドによって様々な物体の入っている箱を探るなど、ダイナミックかつ巧みなタスクを達成することが出来ると考えられる。特に今回の研究のような単一のタスクを達成するというようなもの以上に、Tactile Exploration のような、より自律的に環境を認識して動作生成を行えるようなタスクを検討することが出来ると考えている。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

本研究では大きく分けて 3 つのタスクを計画しており、それら全てにおいて一定の成果を得ることが出来たと自負している。

一つ目は操り対象とするための物体特性認識である。最終的にはラベル情報を動作生成モデルに導入することで各物体に合わせた動作生成を達成できたが、それらを行うまでに対象とする物体やその物体特性の選定、そこからどのような手法を用いて認識の部分の達成するかなどの検討に時間をかけた。当初は物体特性を認識するモデルを作成し、学習時には認識率 99%という非常に高い成果を出せたものの、実機実験では学習データとの違いによる誤差が大きく、とても導入できるものではなかった。また物体特性の特徴量の選定もさらなる検討が求められる状況であり、オートエンコーダ型のネットワークを組み合わせることでより自律的な認識器を開発する必要がある。

二つ目は操り動作の生成である。こちらは成功回数は高いとは言えないものの非常に多くの未学習物体の操りや外乱下での操り動作の復帰など、汎化性能の高い結果を出すことが出来た。先述したように物体ごとの動作の変化も行うことが出来ている。これらの結果を ICRA+RA-Letter に提出し、査読者から高い評価を得ることが出来た。

三つ目はロボットハンドとアームの統合による操り動作のダイナミックなデモの実現である。こちらのメインの目的は実験というよりデモの実現であるが、その過程でも多くの課題やテーマの発見に寄与しており、触覚情報の様々な使い方を検討することが出来ると考えている。現在はこのシステムの開発をすまし、デモの達成を行うことが出来た。

以上のように、それぞれの項目で足りない部分はあるものの一定の成果を出すことは出来た。今後は、それぞれの課題を新しい研究テーマとして取り組み、本研究を軸とした研究テーマの拡大を目指す。

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

研究環境として、触覚センサを開発している企業と密接にいられたことがまず大きい。これにより、迅速な実験の進行、実験環境の修復を行うことが出来た。また、ACT-I 関係の研究者からの機械学習に関するフィードバックによって、実験結果に対する方向の修正などを行うことが出来た。さらに、ACT-I から提供される研究費によって必要な触覚センサの調達や制御モデルの計算機の利用など、これらが無ければ確実に得られなかった研究成果を出すことが出来た。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

本研究が重きを置いているのは多指ハンドによる巧みな操りと触覚センサによる安定した把持状態の達成である。まず、多指ハンドは人型であるが故の親しみやすさ、直感的な使いやすさ、人間が扱う様々な道具を使うことが出来る多機能性、これらのスマートフォンにも似た優位点は産業や社会に多大な影響を及ぼすと考えられる。例えば、展示会では見学に来る人々は人間の手を連想したタスクの解決を要望することが多い。

学術的な波及効果は 3. 今後の展開にも述べていることだが、ソフトウェアとハードウェア双方で新たなテーマを創出することが出来、ロボット以外の認知の分野にも影響与える可能性を秘めている。文化的側面は人間のように触覚センサを持ったロボットハンドが握手など人間との触れ合いを通じて得られる成果を期待できるかもしれない。

・研究課題の独創性・挑戦性

本研究以前まで、多指ロボットハンドの研究では強化学習、深層学習、モデリング最適化など様々な手法が試されてきた。しかし、そのどれも多量の触覚情報を処理することが難しく、指先のみ限定されたタスク、単一の物体のみを対象としたタスク、シミュレータ上でのみ評価されているタスクなどが散見された。しかし、本研究では、模倣学習と物体特性に対するラベル特徴量、多量の触覚情報を用いることで、様々な日常物体と外乱に対する巧みな操りを達成することが出来た。本研究までに手の平全面に多量の触覚センサを搭載し、様々な物体の多指操りを目指した研究は例がなく極めて挑戦性の高い研究となった。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Satoshi Funabashi, Tomoki Isobe, Fei Hongyi Atsumu Hiramoto, Alexander Schmitz, Shigeki Sugano and Tetsuya Ogata, "Multi-Fingered In-Hand Manipulation with Various Object Properties Using Graph Convolutional Networks and Distributed Tactile Sensors," in the IEEE Robotics and Automation Letters (RA-L).
2. Satoshi Funabashi, Yuta Kage, Hiroyuki Oka, Yoshihiro Sakamoto, Shigeki Sugano, "Object Picking Using a Two-Fingered Gripper Measuring the Deformation and Slip Detection Based on a 3-Axis Tactile Sensing," 2021 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS).
3. Gang Yan, Alexander Schmitz, Satoshi Funabashi, Sophon Somlor, Tito Pradhono Tomo, Shigeki Sugano, "A Robotic Grasping State Perception Framework with Multi-Phase Tactile Information and Ensemble Learning," in the IEEE Robotics and Automation Letters (RA-L).
4. Gang Yan, Alexander Schmitz, Tito Pradhono Tomo, Sophon Somlor, Satoshi Funabashi, Shigeki Sugano, "Detection of Slip from Vision and Touch," 2022 International Conference on Robotics and Automation (ICRA).
5. Satoshi Funabashi, Tomoki Isobe, Shun Ogasa, Tetsuya Ogata, Alexander Schmitz, Tito Pradhono Tomo and Shigeki Sugano, "Stable In-Grasp Manipulation with a Low-Cost Robot Hand by Using 3-Axis Tactile Sensors with a CNN", 2020 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS).

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 0件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. Cognitive Robotics Best Paper Award, Namiko Saito, Tetsuya Ogata, Satoshi Funabashi, Hiroki Mori, Shigeki Sugano, “How to select and use tools? : Active Perception of Target Objects Using Multimodal Deep Learning,” 2021 International Conference on Robotics and Automation (ICRA), 2021/6/2.
2. Biomimetics Best Paper Award, Gagan Khullar, Alexander Schmitz, Chincheng Hsu, Prathamesh Sathe, Satoshi Funabashi and Shigeki Sugano, “A Multi-Fingered Robot Hand with Remote Center of Motion Mechanisms for Covering Joints with Soft Skin,” IEEE ROBIO 2021, 2021/12/9.

研究報告書

「連続型数理モデル構築のための不確実性定量化手法」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50251
研究者：宮武 勇登

1. 研究のねらい

現象から数理モデルを構築し、現象に対する理解を深め、さらに予測を行うことは、現代の科学や産業を支える根幹技術の一つである。特に、波の伝搬のように時間連続的に変化する現象を扱う場合、数理モデルとして微分方程式を考えることが多く、観測データなどから微分方程式のパラメータ推定を行う必要が生じる。この際、データと微分方程式の解が何らかの意味でよく当てはまるパラメータを推定することになるが、一般に微分方程式の厳密解は手に入らないため数値解で代用せざるを得ない。しかし、数値解の精度が十分でない場合、数値解の誤差(=数値解と厳密解の差)により推定結果に大きなバイアスが入りうる。これまで、数値解析学の文脈で二世紀近くにわたって様々な数値解法が提案されてきたが、扱う問題の大規模性や計算機環境の制約などから、現代でも、十分な精度の数値解を得られないことも多い(また、画像処理のように、例えば倍精度浮動小数点数で十分高精度な計算は必要ではないが、一方で計算精度は粗すぎてもいけないといったシチュエーションも多い)。従って、推定の文脈において、微分方程式に対する数値解の誤差を扱う手法や理論の構築が期待される。

そのために本研究では、近年、欧米の統計学や機械学習の分野を中心に研究が進められている確率の数値解法に着目した。ACT-I の機関では、数値計算の信頼度は時間発展とともに低下するという仮定のもとで、数値解の誤差を定量化する手法を提案したが、その仮定は理論的にも強すぎると思われ、また、実用性も未知数であったため、加速フェーズにおいてはより多角的な観点で定量化手法を発展させることを目的としていた。

2. 研究成果

(1) 概要

ACT-I 期間中に開発した微分方程式の数値計算の不確実性定量化手法を理論・応用の様々な観点から検討・発展させるべく研究を行った。

第一に、ACT-I 期間中に開発していた手法が、本来の微分方程式のパラメータ・初期値推定の観点でどのような利点があるかを詳細に検討した。この観点に関して、パラメータ・初期値推定の精度が向上するか否かは問題依存だが、多くの場合、推定精度の評価を既存手法よりも適切に行えることが分かった。

第二に、ACT-I 期間中に開発していた手法では不確実性は時間発展とともに増大するという強い仮定を課していたが、制約条件からこの仮定を外し、代わりに不確実性を求める際に解く最適化問題の目的関数に正則化項を加える定式化を提案した。この定式化は、統計学の観点でも、単調回帰理論を二段階に拡張した一般化近単調回帰として理解することが

でき、一般化近単調回帰理論そのものの整備も行った。この考察を通し、適切な正則化パラメータの指定方法も提案した。

その他、微分方程式のパラメータ推定を行う際、パラメータに依存する数値解を用いて定義された目的関数の最小化問題を解くことになるものの、目的関数の勾配計算が必ずしも自明ではないという問題に対して、ACT-I 期間から継続していくつかのアルゴリズムを提案した。

(2) 詳細

(A) 離散化誤差定量化手法がパラメータ推定に与える効果の検討

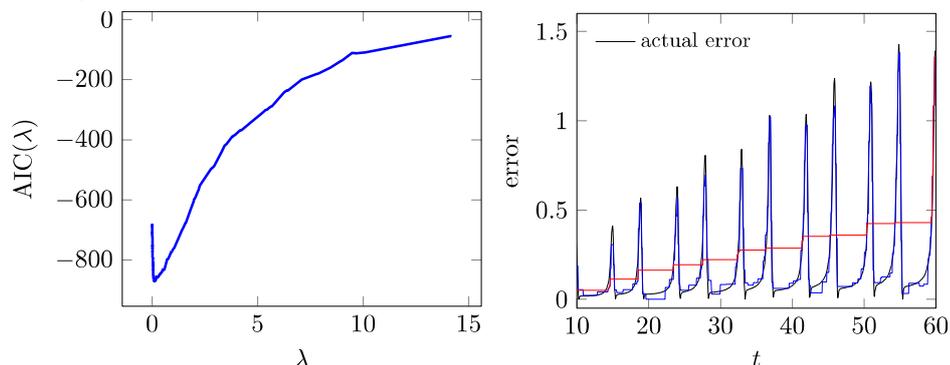
ACT-I 期間中に開発した離散化誤差定量化手法が、本来の関心であるパラメータや初期値の推定にどのような効果を与えるのか検討を行った。まず、推定精度の向上が期待されるが、これについては問題依存の傾向が非常に強いことが分かった。特に、パラメータの性質によって、全く異なるパラメータでも解軌道が似ることがある場合には、フェアな比較自体が困難であり、個別の問題に対してより詳細に検討する余地はあるものの、全体的な傾向としてどのような場合でも推定精度の向上が強く期待できるとは言い難い。一方で、推定結果に対して適切な信頼性評価を得る手法の開発も行った。以下の表は、5-(1)-1 からの抜粋だが、ある問題に対して、初期値とパラメータを推定したとき、95%になることを狙って構築した信頼区間の中に実際に真値が含まれた確率を表したものである。実際には 80%台の値にはなったが、離散化誤差を無視して(数値計算を過度に信頼して)同様の信頼区間構築を行おうとすると、そもそもその過程の計算が破綻したり、求めた区間が小さすぎて 10%程度になつたりすることもあり、それと比較すると、十分に適切な信頼性の評価が得られているといえる。

Estimand	Coverage probability (%)	Average length
$x_1(0)$	83	0.5976
$x_2(0)$	88	0.3291
$x_3(0)$	86	0.1799
σ	84	0.1891
ρ	82	0.0636
β	87	0.0149

(B) 離散化誤差定量化の際の単調性の仮定を外した手法の提案

ACT-I 期間中に開発した離散化誤差定量化手法は、離散化誤差は時間発展とともに単調に増大する(すなわち、数値計算の不確実性は時間発展とともに単調に増大する)という仮定を制約条件として定式化を行っていた。しかし、勾配系や周期的な振る舞いをする微分方程式系に対しては、あまりに強すぎる(あるいは不自然な)仮定のようにも感じられる。そこで、制約条件から単調性を外し、代わりに、それを緩めた形で正則化項として組み込んだ定式化を提案した。ここでは、正則化パラメータの選択が重要であり、これが十分大きければ単調性を課す定式化に帰着される一方、(0 以上かつ)ある値よりも小さければ、単調性の破れが許される。この定式化そのものは、統計学における単

調回帰理論を二段階に拡張した一般化近単調回帰として理解することができ、この一般化近単調回帰理論そのものの整備も行った(一般化単調回帰と近単調回帰という二種類の拡張は知られていたが、それらを組み合わせた議論は本研究が初である)。この整備を通し、適切な正則化パラメータを見つけるための情報量規準 AIC を提案した。例えば、以下の図は FitzHugh-Nagumo 方程式を数値計算したときの(第一変数に関する)離散化誤差を提案手法で定量化した結果である。左図は正則化パラメータに応じて AIC がどのように変化するかを表したもので、AIC を最小にする正則化パラメータを用いたときの離散化誤差定量化が右図の青線である。黒線で実際の誤差を示しており、単調性を課したときの結果(赤)と比較して、実際の誤差の振る舞いに近い定量化が行えている様子が確認できる。



このように、新しい定式化では、より実際の誤差の振る舞いに近い定量化が期待できるが、一方で、本来の関心である微分方程式のパラメータや初期値推定に利用したときの利点についてはケースバイケースであり、今後、問題を限定して詳細な考察を行う必要がある。

(C)勾配計算

微分方程式のパラメータ推定を行う際、パラメータに依存する数値解を用いて定義された目的関数の最小化問題を解く必要がある。このためには、目的関数の勾配計算が通常必要だが、その計算は必ずしも自明ではない。原理的には、自動微分を用いて厳密に計算することが可能だが、単純に既存のソルバを利用すると、計算コストやメモリの観点で大きな障害がある。また、近似計算を行うと、想定以上の誤差が混入することが多い。そこで、数値解析学的観点に立ち、効率よく厳密に勾配計算を行えるアルゴリズムを導出するフレームワークの研究を行った。ACT-I 期間に引き続き、2 階微分を計算する状況や、微分方程式を分離型 Runge-Kutta 法で離散化する状況について研究を行い、さらに、データ同化だけではなく、深層学習の文脈における研究も行った。

以上の研究は、理化学研究所 ユニトリリーダー 松田孟留氏、東京大学 助教 伊藤伸一氏、大阪大学 准教授 松原崇氏、神戸大学 准教授 谷口隆晴氏との共同研究に基づく。

3. 今後の展開

数値計算の不確実性定量化に関する研究は、研究基盤が全く整備されておらず、自らの研究を進めるのみならず、研究コミュニティの強化を行い、研究分野として成熟させていく必要がある。現在、ACT-I の研究を通していくつかの論文を発表し、少しずつ分野としての基礎が見え始めた段階であり、今後は、特に理論の観点では、これまでの手法を発展させていくと同時に、それに縛られず自由な発想で、様々な視点で研究を推進していく必要がある。また、このような理論研究を行う際には、より実用的な問題に対する検証が必要不可欠である。ACT-I の活動を通し、固体地球科学(特に地震学)の研究者と積極的に交流してきており、将来的に我が国において非常に重要なトピックである地震予測などにおける波及効果を狙っていききたい。

また、数値計算の不確実性定量化は、応用数学における数値解析理論と組み合わせることで、安全を期して必要以上に高精度な計算を行っている場合に、「あとどのくらいラフに計算しても大丈夫か」という観点でサポートできる可能性が高い。スーパーコンピュータなどを用いた数値計算は電力使用量も大きな問題であり、省エネの観点でも波及効果を狙っていききたい。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

当初は、ACT-I 期間で提案した手法の実問題での検証も強く念頭においていたが、上述の通り、数値計算の信頼度の単調性を緩めた研究により注力した。そこから派生して、数値計算の信頼度の定量化以外へも応用可能な手法として整理することができた。また、研究活動を通して例えば地震学の研究者との交流も深めており、今後、より実用的な問題で検証する地盤も整いつつある。従って、当初の計画から注力するテーマはやや変更があったが、概ね順調に研究が進められたと考えている。

・研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)

理論的研究が中心であり、特に上述の松田氏・伊藤氏と頻繁に議論しながら研究を進め、さらに地震学の研究者との交流も深めている。当初は、国際交流を積極的に行う予定であり、旅費を多く計上していたが、コロナ禍において、当初の計画の実行は困難であったため、代わりに高性能計算機を購入し効率よく研究を進めることができた。実際、人工的な例題であっても、想定していた以上に計算リソースが必要であることが多く、高性能なワークステーション・サーバーは非常に役立った。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果(今後の見込みも重視してください。)

本研究は、数値解析学と統計学の融合によって、パラメータ推定における数値計算の不確実性を定量化するための第一歩であり、少しずつではあるが、多くの数理モデリング分野への新しい貢献の形が見え始めた段階である。今後も理論・応用両面からの研究をすすめることによって一層の発展が期待される。また、特に地震学の研究者との交流を行っており、今後数年のスパンで、地震学への応用・協働を行っていききたい。

・研究課題の独創性・挑戦性

ACT-I から継続しているテーマではあるが、問題設定そのものが新しいため、具体的に何を研究すべきかを(様々な批判を真摯に受け止めながら)明確にすることから研究を行ってきた。その中で、新しいアイデアで研究を進めることができ、研究課題・手法どちらも独創的・創造的であると考えている。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

- | |
|---|
| 1. T. Matsuda, Y. Miyatake, Estimation of ordinary differential equation models with discretization error quantification, SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif. 9 (2021) 302–331. |
| 2. S. Ito, T. Matsuda, Y. Miyatake, Adjoint-based exact Hessian computation, BIT Numer. Math. 61 (2021) 503–522. |
| 3. T. Matsuda, Y. Miyatake, Generalization of partitioned Runge–Kutta methods for adjoint systems, J. Comput. Appl. Math. 388 (2021) 113308. |
| 4. T. Matsuda, Y. Miyatake, Generalized nearly isotonic regression, arXiv:2108.13010 |
| 5. T. Matsubara, Y. Miyatake, T. Yaguchi, Symplectic adjoint method for exact gradient of neural ODE with minimal memory, NeurIPS, 2021. |

(2)特許出願

研究期間累積件数:0件

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

研究報告書

「高階埋め込みテンソルモデリングの研究」

研究期間：2020年4月～2022年3月
研究者番号：50252
研究者：横田 達也

1. 研究のねらい

高階埋め込みテンソルモデリングは、情報処理における入力データ(テンソル)を高階なブロックハンケルテンソルで表現し、その高階テンソルに対して数理モデルを適用する新しいテンソル情報処理のアプローチである。本研究では、与えられたテンソルを高階なブロックハンケルテンソルへ変換する処理を提案し、それを**多重遅延埋め込み変換(MDT: Multi-way Delay-embedding Transform)**と呼んでいる。通常の遅延埋め込み(delay-embedding)は1次元信号を曲線(多様体)として高次元空間に埋め込む操作であり、カオス時系列解析などに用いられる。それに対してMDTは、遅延埋め込みを多次元信号(テンソル)へ拡張したものになっている。

遅延埋め込みをすることにより、一見複雑に見えていた時系列信号が高次元空間では単純な(例えば線形な)モデルで近似できることがある。この事象は、サイン、コサイン、指数関数などに基づく時系列信号の多くで見ることができる。画像処理ではJPEG圧縮の離散コサイン変換や、JPEG2000のウェーブレット変換などが良く用いられることから分かる通り、MDTを導入した**新しい画像モデリングの手法の開発**が期待できる。

高階埋め込みテンソルモデリングの研究はテンソル情報処理における新しい枠組みのさきがけになると私は期待している。与えられたテンソル信号を直接モデリングする従来の枠組みに対して、新しい枠組みでは与えられた信号を何かしらの変換(本研究ではMDT)によって高階テンソル化し、その高階テンソルをモデリングする(図1)。これは情報処理の土台である**情報表現に切り込む研究**である。例えば、画像データひとつについて考えてみても、その表現方法にはベクトル、行列、テンソル、点群、関数、グラフなどさまざまな種類を考えることができ、それぞれの表現方法に基づいた別々の数理モデルが存在する。MDTは新しい表現の1つに過ぎず、テンソルという枠組みに収まってはいるが、テンソルデータをそのまま処理をするという従来の枠組みを超える1つのアイデアである。

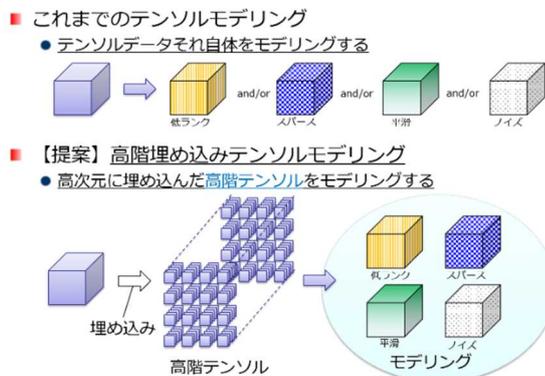


図 1: 高階埋め込みテンソルモデリングの概念図

2. 研究成果

(1) 概要

高階埋め込みテンソルモデリングの研究では、テンソルの新しい表現を得る方法として MDT について考える。研究においては MDT によって得られるブロックハンケルテンソルをどのように扱うか、という問いに取り組む。具体的には以下の事項について検討し、アルゴリズム開発や実験などを行った。

研究テーマ A: 「高階埋め込み多重線形モデリング」

研究テーマ B: 「高階埋め込み多様体モデリング」

研究テーマ C: 「動的 PET 画像再構成への応用」

(2) 詳細

研究テーマ A: 「高階埋め込み多重線形モデリング」

この研究テーマでは、MDT によって得られるブロックハンケルテンソルに対して低ランクテンソル分解を適用するアプローチについて研究する。この技術は埋め込み空間においてテンソルの低ランク性が仮定できるような画像データの復元に用いることができる。本フェーズでは、MDT、低ランクタッカー分解、逆 MDT の 3 段階の処理によってテンソルの欠損値補完を行う手法を提案した。加速フェーズでは、これをさらに発展させ、タッカー分解ではなくテンソルトレイン分解を行う手法を提案した。この研究成果は、**IEEE Signal Processing Letters** に掲載された(論文・発表リスト 1)。

また、MDT をテンソル分解へ導入するアプローチは、テンソル分解による画像モデリングへ新しい枠組みを提供している。それは画像のテンソル化、そしてテンソル分解の適用という流れのことである。本研究では、これまでに行われてきたテンソルの直接的なモデリングから、テンソル化を用いる新しい枠組みへ向かっていく研究分野の流れをいち早く発信する目的で、洋図書 **Tensors for Data Processing** へ book chapter「**Tensor methods for low-level vision**」の寄稿をした(論文・発表リスト 2)。

これまでの研究によって MDT、テンソル分解、逆 MDT の 3 段階処理にはスケーラビリティの限界が浮き彫りになってきた。具体的には、遅延幅 τ が増加に伴って MDT 後に得られるブロックハンケルテンソルの要素数が劇的に増加し、すぐにメモリ上限を超えてしまうことが問題点として挙げられる。本研究では、この問題を克服するために 3 段階処理についての見直し(つまり定式化の修正)、巡回式遅延埋め込みの適用、高速フーリエ変換の活用などにより大幅な効率化を実現した(図 2)。これによりメモリ爆発の問題が解消され、計算時間が約 100 倍短縮された。この研究成果は、国際会議 **APSIPA ASC 2021** で発表した(論文・発表リスト 3)。

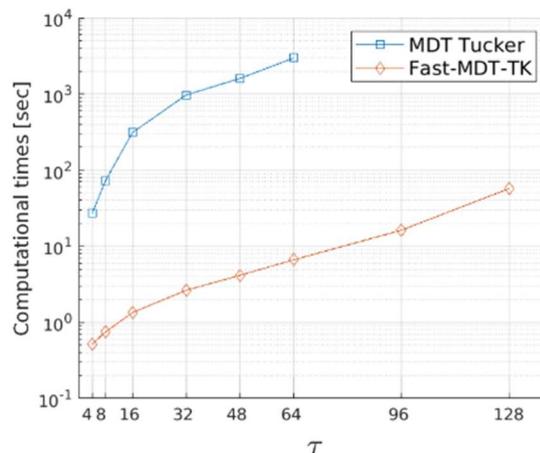


図 2 高速アルゴリズムの計算時間

研究テーマ B: 「高階埋め込み多様体モデリング」

画像データの MDT は、画像の内にあるすべての局所パッチを抽出する操作として解釈することができる(図 3)。これら全てに対して同一のパターンとの内積をとる操作は畳み込みと呼ばれ、現在盛んに研究されている畳み込みニューラルネットワーク(CNN)と密接な関係がある。畳み込みニューラルネットワークを用いる画像復元の代表例の一つに

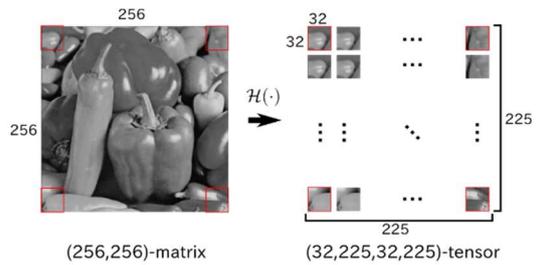


図 3 パッチ抽出としての MDT

Deep Image Prior がある。これは CNN の

ネットワーク構造の中に画像モデルが含まれていることを示す興味深い結果である。実際にそれがどのような画像モデルであるのか？はブラックボックスであり、解釈や説明の困難性が問題になっている。そこで本研究では、MDT と多様体学習を組み合わせた新しい画像復元の手法 MMES(manifold modeling in embedded space)を提案した。MMES は、MDT、多様体学習、逆 MDT の 3 段階からなるネットワーク構造である。これは CNN 構造の 1 つでありながら、画像モデルとしての解釈や説明が可能である点で強いメリットがある。つまり、CNN を用いる Deep Image Prior との接点があり、これに代替可能な画像復元手法である。計算機実験では Deep Image Prior とかなり類似した画像復元の特徴を有していることが分かった。さらに、ボケ復元や超解像など特定のタスクでは、従来法を上回る非常に高い復元性能をしめした。この研究成果は **IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems** に掲載された(論文・発表リスト 4)。

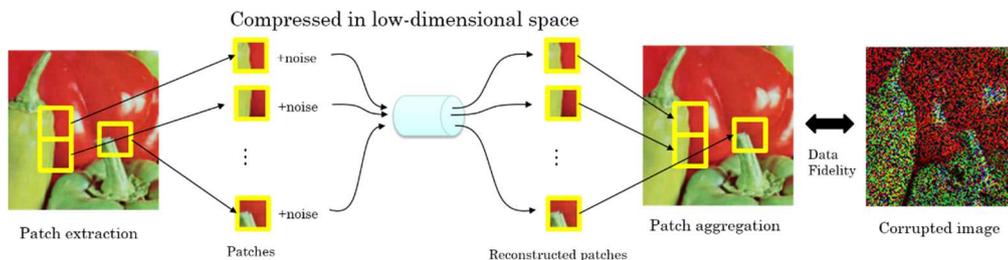


図 4 高階埋め込み多様体モデルの概念図

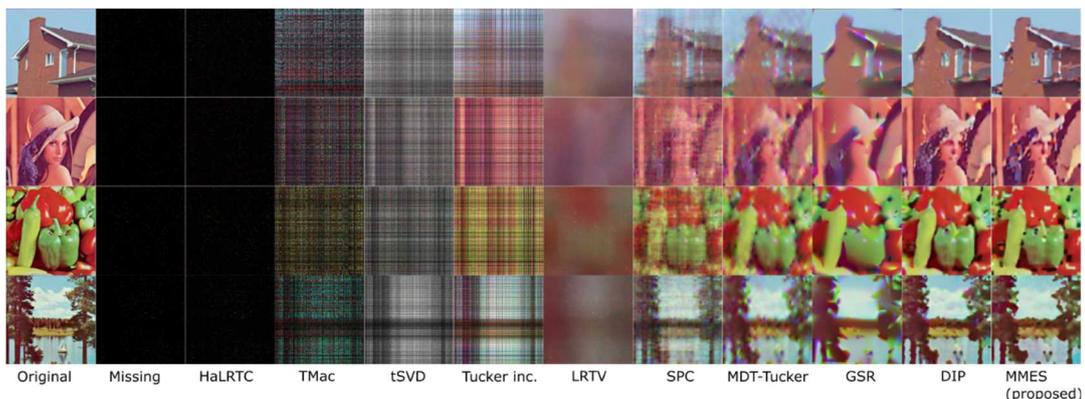


図 5 画像復元の実験結果: 一番右の列が提案法

研究テーマ C: 「動的 PET 画像再構成への応用」

本研究テーマではより実応用へ向けた課題として、動的 PET 画像再構成の問題に取り組んだ。動的 PET 画像はアルツハイマー病や癌などの診断に良く用いられる計測機器である。被験者の体内に薬剤を投与し、その薬剤が発する放射線を検出することによって体内における薬剤の動態を知ることができる。検出器には無視できないノイズが混入するため、高精度なセンサデータの画像再構成(イメージング)の技術が求められている。本フェーズでは Deep Image Prior と非負行列分解を組み合わせた数理モデルを用いて動的 PET 画像再構成を行うアルゴリズムを提案した。加速フェーズでは、これをさらに高解像化する超解像技術を開発中である(図 6)。

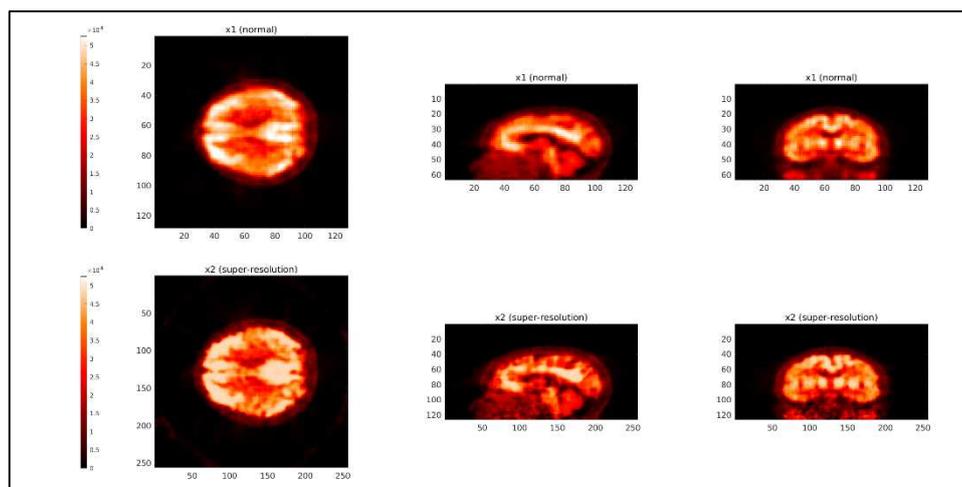


図 6 再構成された PET 画像の例: 上が低解像, 下が高解像

3. 今後の展開

本研究では、遅延埋め込み、テンソル分解モデル、多様体モデルをそれぞれお組み合わせることで新しくかつ有効な画像モデリングの手法を開発することができた。今後は遅延埋め込みを活用していくと同時に、遅延埋め込みにとらわれず新しい表現について考えることも検討していきたいと考えている。つまり、本研究の枠組みをさらに一般化し、テンソル化とテンソルネットワークによって導かれるクラスの情報処理手法について検討し、その特性について調べることが面白いと考えている。また、テンソル表現の他にもグラフ的な情報の表現も注目されている。テンソル表現とグラフ表現の接点について議論することもまた興味深い。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

本研究の目的は、遅延埋め込みとテンソルモデリングを組み合わせた新しい情報処理の枠組みを提案すること。また、それに付随して生成される様々な数理モデルについて検討することであった。結果的に、多重線形モデリングに基づいて、タッカー分解、テンソルトレイン分解、テンソルリング分解などさまざまな派生が生まれた。また、逆 MDT に基づく畳み込み再構成によってタッカー分解の大幅な高速化や効率化なども実現した。多様体モデルに基づくアプローチでは、ノイズ除去自己符号化器との組み合わせにより新しい画像復元モデルを提案し、周辺手法との比較や接点の議論なども行った。動的 PET 画像再構成の問題に着手し実応用へ向けた研究も進めることができた。これらの結果から、本研究の目的は十分に達成できたと考えている。

・研究の進め方

本研究は数理モデルや最適化に関する高度な知識, 画像モデリング, 医用画像処理などに関わる実応用的な知見など幅広い技術や知識基盤が必要であったため, 国内外の研究者と意見交換を行いながら進めた. 研究費は, 調査, 計算機環境の構築, 研究成果発表(英文校正, オープンアクセス費)などに執行した.

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

多重遅延埋め込み(またはその他の線形変換)を用いたテンソル処理は, 2018 年の最初の研究成果論文から少しずつ波及している実感がある. 国際会議での 2 度のチュートリアル講演や, 書籍への寄稿を通して体系化した知識の提供をすることができた点も大きいと考えている. 今後はこの技術が画像処理以外の系列データ処理に用いられたり, これを発展させた新しい枠組みが提案されたりするかもしれない. また, そのような発展を牽引していきたい.

・研究課題の独創性・挑戦性

高階埋め込みテンソルモデリングは, これまでの直接的なテンソルモデリングと異なり, 高階化したあとのテンソルをモデリングするアプローチである. これは, カオス時系列解析で考えられているように, 一見複雑な信号を, 単純なモデルによって処理するというアイデアに基づく. これをテンソルに対しても考えることが本研究の目的であり, 高度な数学的知識やアルゴリズム開発の技術などが必要な独創的, 挑戦的なテーマである. また, 基礎研究の段階であるが, 医用画像処理, 気象データなどさまざまな実応用も潜在的には考えることができ発展も期待できる.

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. F. Sedighin, A. Cichocki, **T. Yokota**, and Q. Shi, "Matrix and Tensor Completion in Multiway Delay Embedded Space Using Tensor Train, with Application to Signal Reconstruction", *IEEE Signal Processing Letters*, vol. 27, pp.810-814, 2020.
2. **T. Yokota**, C.F. Caiafa, and Q. Zhao, "Chapter 11: Tensor methods for low-level vision", in *Tensors for Data Processing*, Elsevier, 2021.
3. R. Yamamoto, **T. Yokota**, A. Imakura, H. Hontani, "Fast algorithm for low-rank tensor completion in delay-embedded space", in *Proceedings of APSIPA-ASC*, 2021.
4. T. Yokota, H. Hontani, Q. Zhao, and A. Cichocki, "Manifold modeling in embedded space: An interpretable alternative to deep image prior", *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2021.

(2) 特許出願

特になし.

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- ・招待講演, "Dynamic PET Image Reconstruction Using Nonnegative Matrix Factorization Incorporated With Deep Image Prior", MIRU2020, 2020 年 8 月

- ・招待講演, "画像復元のための高階埋め込み多様体モデルの研究", FIT2020 併催 MI 研究会, 2020 年 9 月
- ・招待講演, "Non-negative Matrix Factorization in Application to Dynamic PET Image Reconstruction", RIKEN-AIP Open Seminar, 2020 年 11 月
- ・招待講演, "信号処理と機械学習による画像復元", 第 5 回統計・機械学習若手シンポジウム, 2020 年 12 月
- ・チュートリアル, "Tensor Representations in Signal Processing and Machine Learning", APSIPA-ASC, 2020 年 12 月
- ・チュートリアル, "Advanced Topics of Prior-based Image Restoration: Tensors and Neural Networks", APSIPA-ASC, 2021 年 12 月