

5. Preliminary Thesis Exam Abstracts

※令和5年度対象者は計5名であったが、Abstract記載の研究内容や研究計画がジャーナル掲載前の情報のため、1名分については掲載無しとする。

吉田 航

Preliminary Thesis Exam 予稿

九州大学大学院マス・フォア・イノベーション連係学府博士後期課程2年 吉田航

1 研究概要

私は、線形ガウス状態空間モデルを用いた予測についての研究を行なっている。これまでの研究では、多変量時系列の相関関係を利用した予測を効率よく行う手法とその特徴を示し、論文化に至った [Yoshida and Hirose 2024]。また、モデル選択の平滑化手法である parametric bootstrap smoothing [Efron 2014] を使った予測についても興味があり、リサンプリングに用いる分布により予測精度がどのように変化するのかが研究している。

特に現在は、状態空間モデルのモデル選択部分に関連して、2通りの推定手法を構築している。1つ目は、一般の状態空間モデルに対して、状態ベクトルを逐次的にスパース推定する方法であり、本予稿2章で概要を説明する。2つ目は、一定時刻ごとに観測される、日別データを対象とした、多変量スパース動的回帰モデリングとその推定手法であり、3章で概要を説明する。この研究は、2023年9月6日(水)に行われた統計関連学会連合大会で発表を行った。

これらの一連の予測手法について、電力需要予測などに応用を行っている。いくつかの手法は、組み合わせることが可能であり、そのときの予測精度なども検証を行っている。また、数学創発モデリングでは、動的回帰モデルを用いて、弾性波速度変化の数値データに対して周期成分の分析を行っている。共創力強化インターンシップでは、京セラ株式会社様に受け入れていただき、多変量時系列データの異常検知についての研究に取り組んだ。

2 線形ガウス状態空間モデルの逐次的スパース推定

本研究では、一般的な線形ガウス状態空間モデルを取り扱う。具体的に、 y_1, y_2, \dots, y_n を $d \times 1$ 観測ベクトルとして、以下のようなモデルを考える。

$$\begin{cases} y_t = Z_t \alpha_t + \varepsilon_t, \\ \alpha_{t+1} = T_t \alpha_t + \eta_t, \end{cases} \quad (t = 1, 2, \dots, n),$$

ここで α_t は $p \times 1$ 状態ベクトル、 ε_t は $d \times 1$ 観測ノイズ、 η_t は $p \times 1$ 状態攪乱項、 Z_t は $d \times p$ 係数行列、 T_t は $p \times p$ 係数行列とする。また、 $\varepsilon_t \sim N(0, \Sigma_\varepsilon)$ 、 $\eta_t \sim N(0, \Sigma_\eta)$ 、 $\eta_1 \sim N(a_1, P_1)$ とする。このモデルにおいて、 α_t を逐次的に推定する方法として、以下のカルマンフィルタが挙げられる [Kalman 1960]:

$$\begin{cases} a_{t|t} = (Z_t^T \Sigma_\varepsilon^{-1} Z_t + P_t^{-1})^{-1} [Z_t^T \Sigma_\varepsilon^{-1} y_t + P_t^{-1} a_t], & a_{t+1} = T_t a_{t|t}, \\ P_{t|t} = P_t - K_t (Z_t P_t Z_t^T + \Sigma_\varepsilon) K_t^T, & P_{t+1} = T_t P_{t|t} T_t^T + \Sigma_\eta, \end{cases} \quad (t = 1, 2, \dots, n),$$

ただし $K_t := P_t Z_t^T (Z_t P_t Z_t^T + \Sigma_\varepsilon)^{-1}$ とする。 $a_{t|t}$ 、 a_{t+1} は、それぞれ時点 t における α_t の推定、 α_{t+1} の予測を表し、 $P_{t|t}$ 、 P_{t+1} はそれらの共分散行列を表す。ここで、Li et al. [2014] は、状態ベクトルの推定量 $a_{t|t}$ において、 $(Z_t^T \Sigma_\varepsilon^{-1} Z_t + P_t^{-1})^{-1}$ の値が不安定になる場合があることを指摘し、その改善手法として、以下の ridge type kalman filter を提案した:

$$a_{t|t}^{[RT]}(\lambda) = (Z_t^T \Sigma_\varepsilon^{-1} Z_t + P_t^{-1} + \lambda I_p)^{-1} [Z_t^T \Sigma_\varepsilon^{-1} y_t + P_t^{-1} a_t].$$

我々の研究では、ridge type kalman filter をスパース推定へと拡張することで、状態ベクトルの変数選択法の構築を行なっている。

3 スパース動的回帰モデルによる複数時刻の時系列分析

3.1 動的回帰モデルの変数選択

本研究では、一定時刻ごとに観測される日別データ $\{y_{j,t}\}$ を取り扱う。

IV 学生レポート 等

	1 日目	2 日目	...	n 日目
時刻 1	$y_{1,1}$	$y_{1,2}$...	$y_{1,n}$
時刻 2	$y_{2,1}$	$y_{2,2}$...	$y_{2,n}$
...
時刻 d	$y_{d,1}$	$y_{d,2}$...	$y_{d,n}$

このデータに対して、各時刻 j ごとに、状態空間モデルの一種である動的回帰モデルを当てはめる。記号の煩雑化を防ぐために、以下のように単回帰の場合を考える。

$$\begin{cases} y_{j,t} = x_{j,t}(\beta_{j,0} + \beta_{j,t}) + \varepsilon_{j,t}, \\ \beta_{j,t+1} = \beta_{j,t} + \eta_{j,t}, \end{cases} \quad (t = 1, 2, \dots, n),$$

ただし、 $x_{j,t}$ は説明変数、 $\varepsilon_{j,t} \sim N(0, \sigma_j^{(\varepsilon)2})$ 、 $\eta_{j,t} \sim N(0, \sigma_j^{(\eta)2})$ 、 $\beta_{1,t} \sim N(0, \sigma_j^{(\eta)2})$ とする。本モデルは、係数の時間変化を許した回帰モデルであり、 $\beta_{j,0}$ は回帰係数の初期値、 $\beta_{j,t}$ は変動をそれぞれ表している。そのため、例えば、電力需要を気温で回帰することを考えると、季節や社会情勢の変化などによる、両者の関係性の変動を推定することができる。一方で、実際に回帰係数が変化しているかは不明である。そこで、 $\sigma_j^{(\eta)}$ 、 $\beta_{j,0}$ に対してスパース推定を行うことで、以下のような回帰係数の特徴を選択することができる。

- (i) $\sigma_j^{(\eta)} = 0$ かつ $\beta_{j,0} = 0 \implies$ 時刻 j のモデルにおける回帰係数は 0 で一定。
- (ii) $\sigma_j^{(\eta)} = 0$ かつ $\beta_{j,0} \neq 0 \implies$ 時刻 j のモデルにおける回帰係数は $\beta_{j,0} (\neq 0)$ で一定。
- (iii) $\sigma_j^{(\eta)} \neq 0 \implies$ 時刻 j のモデルにおける回帰係数は時変。

3.2 隣接した時刻の回帰係数の類似性を考慮したスパース推定

時刻の近い時系列は、上記のような回帰係数の時変性など、モデルの特徴が類似していることが予想される。すなわち、 $\sigma_j^{(\eta)}$ 、 $\beta_{j,0}$ が 0 か非 0 かという特徴が、 j に近い時刻では類似していると考えられる。そこで本研究では、 $\sigma_j^{(\eta)}$ 、 $\beta_{j,0}$ に以下の Dynamic Spike-and-Slab(DSS) 事前分布 [Rockova and McAlinn 2021] を設定する。

$$\begin{cases} \sigma_1^{(\eta)} \sim (1 - \gamma_1)N(0, \lambda_{spike}) + \gamma_1 N(0, \lambda_{init}), & \sigma_j^{(\eta)} \sim (1 - \gamma_j)N(0, \lambda_{spike}) + \gamma_j N(\sigma_{j-1}^{(\eta)}, \lambda_{AR}), \\ \gamma_j \sim \text{Bern}(\theta_j), & \theta_1 = \Theta, \quad \theta_j = \frac{\Theta \phi(\sigma_{j-1}^{(\eta)} | \lambda_{init})}{\Theta \phi(\sigma_{j-1}^{(\eta)} | \lambda_{init}) + (1 - \Theta) \phi(\sigma_{j-1}^{(\eta)} | \lambda_{spike})}, \end{cases}$$

ただし、 $\phi(\cdot | \lambda)$ は、 $N(0, \lambda)$ の密度関数を表す。また、 $\beta_{j,0}$ の事前分布も $\sigma_j^{(\eta)}$ と同様である。DSS 事前分布は、微小な分散 λ_{spike} を持ち、原点でスパイクする分布 $N(0, \lambda_{spike})$ と、1 時刻前の値が平均となった分布 $N(\sigma_{j-1}^{(\eta)}, \lambda_{AR})$ の混合分布になっていて、これによりスパース推定が可能である。加えて、 θ_j の定義より、時刻 $j-1$ のパラメータの値が 0 に近いほど、時刻 j のパラメータはスパイクな分布から生じられやすくなる。従って、DSS 事前分布を用いることで、近接する時刻における回帰係数の特徴の類似性を考慮した分析が可能である。その上、DSS 事前分布はパラメータ推定の面で、複数時刻の動的回帰分析と相性が良いことが分かった。実際に、本研究では [Frühwirth-Schnatter and Wagner 2010] の手法を応用することで、ギブスサンプリングによる $\sigma_j^{(\eta)}$ 、 $\beta_{j,0}$ のベイズ推定手法を構築した。

4 今後の研究計画

今回は詳細に触れなかったが、parametric bootstrap smoothing についての研究は、論文として書く内容がほぼ決定したので、今年の 2 月中に提出できれどと考えている。また、現在行っている研究の時空間モデルへの拡張に取り組むことを考えている。加えて 2 つの手法について、数値実験等をより多くのパターン行い、精度の検証を行う予定である。

参考文献

Linlin Dai, Kani Chen, Zhihua Sun, Zhenqiu Liu, and Gang Li. Broken adaptive ridge regression and its asymptotic properties. *Journal of multivariate analysis*, 168:334–351, 2018.

- Bradley Efron. Estimation and accuracy after model selection. *Journal of the American Statistical Association*, 109(507):991–1007, 2014.
- Sylvia Frühwirth-Schnatter and Helga Wagner. Stochastic model specification search for gaussian and partial non-gaussian state space models. *Journal of Econometrics*, 154(1):85–100, 2010.
- Rudolph Emil Kalman. A new approach to linear filtering and prediction problems. 1960.
- Yongming Li, Qingming Gui, Yongwei Gu, Songhui Han, Kai Du, et al. Ridge-type kalman filter and its algorithm. *WSEAS Transactions on Mathematics*, 13:852–862, 2014.
- Veronika Rockova and Kenichiro McAlinn. Dynamic variable selection with spike-and-slab process priors. *Bayesian Analysis*, 16(1):233–269, 2021.
- Wataru Yoshida and Kei Hirose. Fast same-step forecast in sutse model and its theoretical properties. *Computational Statistics & Data Analysis*, 190:107861, 2024.

Preliminary Thesis Exam

名前：楊曼

学生番号：3MI22001P

①研究の背景・過程・今後の戦略

研究の焦点は確率的均質化理論です。均質化理論は、偏微分方程式の解における振動の影響を調査する理論です。近年、多くの研究者が確率的な係数を持つ放物型方程式を分析し、それによって定性的な均質化の結果や定量的な結果を得ています。しかし、低次の項に対する確率的均質化の結果はまだ得られていません。

したがって、低次の項が均質化過程に及ぼす影響を理解するために、確率的な低次の項を持つ楕円型方程式および放物型方程式を研究し、その近似解の存在と収束率を計算します。現在完成しているのは、定性的な結果です。まだ行われているのは、特定の仮定の下で、その定量的な結果、すなわち収束率を求めることです。

今後の研究方針としては、正則性理論を深く掘り下げ、様々な仮定における結果を探求していきたいと考えている。特に、非対称係数と非線形の場合の均質化の研究方法を学び、この方法を用いて、低次の項を持つ楕円型方程式の解を研究します。

②数学共創モデリング・数学創発モデリングの報告

研究テーマ：ディープラーニングを用いて、自然現象を研究や予測します。

活動内容：ディープラーニングの基礎知識を勉強することプログラミングツール python の使い方を勉強していました。そして、Ton 先生と他の研究者の議論ゼミナーに参加しました。その研究内容は、ディープラーニングを用いて自然現象を研究し、特に確率微分方程式モデリングを通じて魚の移動軌跡の予測に取り組むことです。この議論ゼミナーから、数学を現実の世界に応用する方法を学びました。

感想：ディープラーニングと Python のプログラミングスキルを磨くことは、現代の研究において非常に重要だと思います。これらのツールを使いこなすことで、複雑なデータセットからパターンを抽出し、有益な情報を取り出すことが可能になります。また、先生や他の研究者との議論ゼミナーへの参加は、異なる視点からの意見を取り入れ、研究に新たな刺激を与える良い機会となります。数学を現実の世界に応用する方法を学ぶことは、理論的なアプローチと実践的な課題の橋渡しをする重要なスキルです。特に確率微分方程式モデリングは、実世界の複雑な現象をモデル化し、理解する上で有意義です。

③共創力強化インターンシップの報告

受入機関：ドレスデン工科大学。

研修期間：令和5年9月20日から令和5年12月17日まで。

研究テーマ：確率均質化理論の研究。

活動内容：このインターンシップでは、Neukamm 先生の下で、一緒に研究する機会を得ました。確率均質理論を特定の偏微分方程式に应用するという課題において、Neukamm 先生のご指導のもと、積極的に取り組みました。また、インターンシップ期間で、週に二回の Neukamm 先生の講義「周期的均質化理論入門」にも積極的に参加しました。この講義は周期的均質化理論の理論的な基盤と応用について包括的な概要を提供しました。この講義を通じて、研究活動において理解を深めることができました。研究室の先輩と同期たちとの学生セミナーにも積極的に参加し、研究成果やアイデアのシェアとフィードバックの交換を行いました。これにより、異なる視点からの洞察を得ると同時に、自身の研究を他者に明示し、議論するスキルを向上させました。

成果：新しい知識や研究の手法を学びました。そして、先生の指導の下で、私が研究していることの半分以上は基本的完成しました。つまり、特定の仮定の下で、定量的な結果一部を得ました。

感想：このインターンシップを通じて、新しい知識や研究の手法を学び、成果を上げる過程での喜びを実感しました。特に、確率均質理論に関する理解が深まり、これが将来の研究において重要な基盤となることを実感しました。一方で、研究や授業において未だ理解しきれていない部分もあり、それが今後の課題となりました。特に、数学的な概念や計算手法において深化が必要であると感じています。これらの課題に対処するためには、引き続き積極的な学習と実践が不可欠です。また、研究室のメンバーとのコミュニケーションにおいて、もっと積極的に意見交換や質問を行うことができれば、より効果的な共同作業ができたかもしれません。

IV 学生レポート等

④卓越大学院プログラムの種々の活動報告

ポスター発表：

Forum Mathematics for Industry 2022 (2022/11/19 – 2022/11/26)

3rd International Workshop on Education and Research for Future Electronics
(2023/1/19 - 2023/1/20)

The Fifth Workshop on Interdisciplinary Sciences (WIS 2023) (2023/9/14-15)

研究集会発表:

The 20th Symposium Stochastic Analysis on Large-Scale Interacting Systems
(2022/12/7-2022/12/9)

確率論シンポジウム (2022/12/19-2022/12/22)

セミナー発表：

Rough paths, stochastic partial differential equations, and related topics(Berlin)
(2023/12/13-12/14)

Numbers and Theorems of the University of Illinois
(2023/2/22-2023/2/24)

スタディグループ：

173 European Study Group with Industry (ESGI173) (2023/6/19-2023/6/23)

⑤最終年度のプログラム生としての活動計画

最終年度のプログラム生として、私は確率的均質化理論の定量的研究を完了させることに全力を注いでいます。その後、これまでの定性的な結果を組み合わせ、博士論文を完成させます。

最終年度では、さまざまな研究集会にも積極的に参加し、他の研究者の話聞くことで、今後の研究への刺激にしたいと思います。

また、私自身もディープラーニングに関する研究プロジェクトを行っています。簡単に説明すると、ESGI173に参加したことで、研究分野が違う2人の九大生と一緒にグループワークして、面白い研究内容を発見しました。詳しくは、数学のグラフ理論を用いて、アルゴリズムを最適化する研究プロジェクトです。それから、三人と一緒にその研究を始めました。ですから、最終年度でもこの研究を遂行し、完成させるつもりです。

成重 椋太

Preliminary Thesis Exam 要旨

励起子トランジスタの室温動作実証と励起子輸送の機構解明

マス・フォア・イノベーション連係学府 システム情報科学系 博士後期課程 2年 成重椋太

① 研究の背景・過程・今後の戦略

【背景】チップ内伝送の光化が注目されている。電気配線から光配線への置き換えて、伝送の2桁の高速化と2桁の低消費電力化が実現すると言われているが、そこでの電子デバイスと光デバイスをつなぐ電気-光信号変換として期待されているのが励起子トランジスタ (exciton transistor: EXOT) である。EXOT のキャリアとなる励起子 (電子-正孔ペア) には、i 室温安定、ii 高移動度、iii 長寿命、iv (ドレイン領域での) 高い再結合確率、という4つの相反する性質が要求される。本研究は、上記4つの特長を併せ持つ励起子を、オリジナル材料 $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ (以下 ZION) からなる歪量子井戸内に生成することで、高速・高出力・室温動作型 EXOT の実現を目指す。ZION の特長の一つに、高すぎず、低すぎない励起子束縛エネルギー (30-60 meV) がある。従って、結晶欠陥の少ない高品質 ZION が形成されれば、高移動度かつ室温安定な励起子が実現すると期待される。また ZION は大きいピエゾ定数を持ち、歪量子井戸を形成すると MV/cm 級の大きなピエゾ電界が発生する。これが、電子と正孔の波動関数を空間的に分離し、励起子を長寿命化すると期待される。本研究ではこの ZION 歪量子井戸から成る EXOT のデバイス動作実証を目指すとともに、デバイス動作の根幹でありながら未解明な部分も多い「電界による励起子輸送機構」の解明を試みる。

【過程】室温・長寿命・高移動度励起子の生成を目指し、まず ZION 膜の高品質単結晶成長を行った。転位や粒界、点欠陥は非輻射再結合中心となり、励起子短寿命化の原因となるからである。ここでのボトルネックは ZION に同種基板が存在しないことである。そこでまず、候補となる基板の格子定数やモフォロジー等が ZION の膜質に与える影響を詳細に調べ、高品質化の鍵となる基板パラメータの抽出を行った。次にこれを基に量子井戸の基本となる高品質ヘテロ界面の形成を行った。以下に得られた成果を示す。なお、本研究では全ての ZION 膜を RF マグネトロンスパッタリング法により作製した。

- ・成果 1-高品質結晶成長 on 異種基板のためのキーパラメータ獲得 (Narishige et al., Jpn. J. Appl. Phys. 2021) : ZION 膜の性能指数を、膜表面の二乗平均平方根粗さと (002) 面 X 線ロッキングカーブ半値幅の積の逆数と定義し、基板の影響を定量的に評価した。結果、基板の格子不整合度と表面高さ分布の歪度、面極性の3つが ZION 膜品質を決定づけるキーパラメータであることが分かった。後者二つは薄膜成長においてこれまで殆ど注目されてこなかったパラメータであるが、いずれも基板表面でのスパッタ粒子のマイグレーションを左右するものであり、これらを適切に選ぶことで高品質 ZION が形成されることを見出した。

- ・成果 2-高品質 ZnO/ZION ヘテロ界面の実現 (Narishige et al., J. Matter. Res. 2023 (招待論文)) : 成果 1 で得られた知見を元に、ZION という 4 元系材料において初めて、原子レベルで急峻な ZION/ZnO ヘテロ界面を形成することに成功した。この時 ZION 膜は ZnO に対し

IV 学生レポート等

てシュードモルフィックに成長しており，歪量子井戸が形成可能であることが示された。

・成果3-高品質 ZION 膜の低温形成 & 低残留キャリア濃度の実現：ZION 膜成長ではこれまで，基板温度が膜中 In-N 結合の分解温度（ $\sim 550^\circ\text{C}$ ）以下に制限されるため，十分なマイグレーション長が得られず，高い結晶品質が得られないという課題があった。しかし成果1の知見を元にマイグレーションを最大化させることで，基板温度 150°C 以下の低温においても，高い結晶品質を有する ZION 膜を得た。また驚くべきことに，ScAlMgO₄ 基板上に室温形成することで，既報の ZION 膜に比べて1桁以上低い， $8.4 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ の残留キャリア濃度を実現した（世界初。論文執筆中）。

今後は，これら成果を集結し，まずは歪量子井戸構造を形成，室温・長寿命励起子を実現する。最終的には上記歪量子井戸に電極をパターン形成し，デバイスの室温動作を目指す。近接場光学顕微鏡やストリークカメラを用いて，励起子再結合光を時間・空間ともに極めて高い分解能で検出し，励起子の移動度や移動経路を明らかにする。

② 数学共創モデリング・数学創発モデリングの報告

EXOT における励起子輸送機構の解明のため，励起子の輸送に関する論文を調査し，まずは，Unucheck (Nature, 2018) らの論文に記載された以下の拡散方程式にてその記述を試みた。

$$D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{D}{k_b T} \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + G - \frac{n}{\tau} = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (1)$$

ここで n, τ, ϕ, G はそれぞれ励起子の濃度，寿命，ポテンシャル，生成率である。 D は拡散係数， $k_b T$ は熱エネルギーである。定性的には式により，EXOT 動作時の励起子の濃度分布が確かに再現されたが，一方で，当該モデルでは電界の向き(z)と励起子輸送の方向(x)が直交することが前提となっており，電子-正孔ペアである励起子が，電界（しかも輸送方向と直交する電界）からどのような力を受け，輸送されるのかは未解明の部分が多い。今後は，数学モデリングで立てた幾つかの仮説（シュテルンゲルラッハ実験の励起子版等）を実デバイスで検証する，という作業を通して，引き続きその解明を試みる。

③ 共創力強化インターンシップの報告

2023年10月31日から12月22日まで，台湾のIC設計企業であるCMSCでインターンシップを行った。インターンシップのテーマは「DC-DC 降圧コンバータの次世代の構造の調査と設計演習」である。業務内容として DC-DC コンバータの最新の研究の調査と次世代の構造についての考察と DC-DC コンバータの基礎的な構造についての設計演習を行った。

初めに DC-DC 降圧コンバータの最新の研究の調査と次世代構造の考察に関して記載する。ここでは DC-DC 降圧コンバータ回路のトポロジーの中で，マルチフェーズ DC-DC 降圧コンバータに着目して最新の研究の調査と次世代の構造の考察を行った。マルチフェーズ DC-DC 降圧コンバータは，それぞれが独自のインダクタとパワー MOSFET のセットを備えた降圧電力段を並列に接続したトポロジーであり，シングルフェーズの回路と比較した

際の利点は、出力電圧や電流のリップルを低減することができることや負荷変動に対する応答が速くなること等がある。マルチフェーズ DC-DC 降圧コンバータについて、最新の研究を調査しまとめる作業を行った結果、マルチフェーズ DC-DC コンバータの性能向上のための研究として、効率から最適な相数を決定する方法の研究、インダクタやトランジスタといったコンポーネントの改良についての研究、スイッチフォルトのマネジメントについての研究、各相での電流のバランスやコントロールの方法についての研究などがあることが分かった。また、これらの研究について調べる中で、マルチフェーズ DC-DC コンバータの応用先によってコンバータに求められる要件が異なり、どの要件をどのように向上させるかを考えることが重要だと考えた。

続いて設計演習の成果について報告する。設計ソフトの使用手法や、設計を行う際に注意すべきことを学ぶために、Cadence 社の回路設計ソフトウェア及びシミュレーションソフトウェアを使用して、入力電圧 $V_{in} = 5\text{ V}$ を出力電圧 $V_{out} = 1.8\text{ V}$ に降圧する DC-DC コンバータ回路の設計とシミュレーションを行った。初めに、インダクタンス $L = 100\text{ }\mu\text{H}$ 、キャパシタンス $C = 100\text{ }\mu\text{F}$ 、FET のゲート幅 $w = 1\text{ }\mu\text{m}$ 、ゲート長 $l = 180\text{ nm}$ として DC-DC 降圧コンバータの回路を作成した。シミュレーションを行った結果、 $V_{out} = 710\text{ }\mu\text{V}$ が得られ、目標としている 1.8 V を大幅に下回る結果となった。次に回路パラメータを $L = 20\text{ }\mu\text{H}$ 、 $C = 10\text{ }\mu\text{F}$ 、 $w = 430\text{ }\mu\text{m}$ 、 $l = 180\text{ nm}$ に修正してシミュレーションを行なった。L は式(1)によって決定した。

$$L = \frac{(V_{in} - V_{out}) \times V_{out}}{V_{out} \times \frac{di}{I_{out}} \times I_{out} \times freq} = 20\text{ }\mu\text{H} \quad (2)$$

ここで I_{out} は負荷に流れる出力電流、 $freq$ はスイッチング周波数、 di はインダクタリップルである。w については w を $200\text{--}500\text{ }\mu\text{m}$ の範囲で変えながらシミュレーションを行ない、 $V_{out} = 1.8\text{ V}$ となる w を決定した。結果として 1.8 V の出力電圧を得ることに成功した。次に、DC-DC 降圧コンバータ回路の機能向上のため、パルス幅変調(Pulse Width Modulation: PWM)機能の追加を試みた。入力電圧 $5\text{--}7\text{ V}$ の範囲でパルス幅を制御し $V_{out} = 1.8\text{ V}$ を出力するコンバータ回路の設計に成功した。

④ 卓越大学院プログラムの種々の活動報告

研究業績

- [1] R. Narishige, Y. Nakano, N. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, H. Kiyama, K. Koga, M. Shiratani, H. Yabuta, and N. Itagaki, "Low temperature epitaxial growth of $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ films on ZnO substrates by magnetron sputtering", MRS Bulletin. (招待論文, 投稿準備中)
- [2] R. Narishige, N. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, K. Koga, M. Shiratani and N. Itagaki, "Effects of substrate surface polarity on heteroepitaxial growth of pseudobinary ZnO-InN alloy films on ZnO substrates.", J. Mater. Res., 38 (2023). (招待論文)
- [3] R. Narishige, N. Itagaki and M. Shiratani, "Sputtering growth of metal oxynitride semiconductors

IV 学生レポート等

for excitonic devices.” Proceedings of IEEE EDTM 2021. (国際会議論文;査読有).

- [4] R. Narishige, Y. Nakano, N. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, H. Kiyama, K. Koga, M. Shiratani, H. Yabuta, and N. Itagaki, “Pseudomorphic growth of $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ films on ZnO substrates by magnetron sputtering using $\text{Ar}/\text{N}_2/\text{O}_2$ discharges”, XXXV ICPIG, Egmond aan Zee, Netherlands, July 2023.
- [5] R. Narishige, N. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, K. Koga, M. Shiratani, and N. Itagaki, “Effects of surface polarity of ZnO substrates on epitaxial growth of $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ films fabricated at room temperature”, ISCSI-IX, Aichi, Japan, September 2022.
- [6] R. Narishige, N. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, K. Koga, M. Shiratani, and N. Itagaki, “Epitaxial growth of atomically flat single-crystalline $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ films on O-polar ZnO substrates by magnetron sputtering”, 2022 MRS Spring Meeting & Exhibit, Hawaii, US, May 2022.
- [7] R. Narishige, D. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, K. Koga, M. Shiratani, and N. Itagaki, “Epitaxial growth of $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ films on ZnO substrate by magnetron sputtering: impact of substrate surface polarity”, 2021 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, US, December 2021.
- [8] R. Narishige, D. Yamashita, K. Kamataki, T. Okumura, K. Koga, M. Shiratani, and N. Itagaki, “Epitaxial growth of $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ films by magnetron sputtering: effects of surface polarity of ZnO substrates”, Plasma Thin Film International Union meeting 2021, Antibes, French Riviera, September 2021.
- [9] 成重 椋太, 中野 祐太郎, 山下 尚人, 鎌滝 晋礼, 奥村 賢直, 木山 治樹, 古閑 一憲, 白谷 正治, 藪田 久人, 板垣 奈穂, “ZnO および ScAlMgO_4 ステップ基板上への $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ 膜の室温エピタキシャル成長”, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 熊本, 2023 年 9 月.
- [10] 成重 椋太, 山下 尚人, 鎌滝 晋礼, 奥村 賢直, 古閑 一憲, 白谷 正治, 板垣 奈穂, “室温で作製した $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ 膜の表面モフォロジーに及ぼす基板極性の影響”, 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 宮城, 2022 年 9 月.
- [11] 成重 椋太, 山下 大輔, 鎌滝 晋礼, 奥村 賢直, 古閑 一憲, 白谷 正治, 板垣 奈穂, “マグネトロンスパッタリング法で作製した $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ 膜の表面モフォロジーに及ぼす基板極性の影響”, 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 愛知, 2021 年 9 月.
- [12] 成重 椋太, 山下 大輔, 鎌滝 晋礼, 奥村 賢直, 古閑 一憲, 白谷 正治, 板垣 奈穂, “ $(\text{ZnO})_x(\text{InN})_{1-x}$ 膜のスパッタエピタキシーに及ぼす基板表面極性の影響”, 令和 3 年度日本表面真空学会九州支部学術講演会, 2021 年 6 月.

また, 下記の卓越大学院プログラム関連のイベントに参加し, 研究紹介を行った.

- [1] プログラム中間評価現地調(2023 年 10 月)
- [2] 富士通研究所との技術交流会(2023 年 3 月)
- [3] イリノイ大学研究会 Numbers and Theorems(2023 年 2 月)
- [4] 卓越プログラムオフィサー訪問(2022 年 1 月)

[5] 大学院教育改革フォーラム 2021(2022年1月)

⑤ 最終年度のプログラム生としての活動計画

これまで ZION 膜のヘテロエピタキシャル成長における高品質化のためのキーパラメータを獲得し、その精緻な制御により原子レベルで急峻な ZnO/ZION ヘテロ界面を有する ZION 膜のコヒーレント成長を実現した。また、低温成膜により二次核発生を抑制することで、これまで報告されている中で最も低い残留キャリア濃度を有する ZION 膜を得た。今後は高品質な ZION 膜を用いて歪量子井戸構造を形成し、室温・長寿命励起子を実現する。最終的には上記歪量子井戸に電極をパターン形成し、デバイスの室温動作を目指す。さらに励起子の輸送機構について上記の実験と数値解析の両方から議論する。加えて、上記の結果について論文執筆、学会発表を行う。

等値面の相対位置関係を解析する可視化研究

発表者：藤井 彬人
 指導教員：小野謙二教授

February 8 2024

1 研究の背景・過程・今後の戦略

1.1 研究の背景

等値面は、あるドメイン M に対する、スカラー場 $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ のある閾値 $l_i \in \mathbb{R}$ の逆像 $f^{-1}(l_i)$ の連結成分と定義され、可視化分析で用いられる、データの特徴の一つである。等値面を可視化することによって、複数のスカラー場 $\{f_i\}_i$ を含むシミュレーションデータや自然現象の観測データなどの解釈・理解の手助けになっている。しかし、等値面を可視化する際、ユーザは、各スカラー場から、閾値 l_i を選択しなければならない。ユーザは、さまざまな閾値の組み合わせでの等値面の振る舞いを理解したいが、一般に、閾値は浮動小数点数であることから、無限個の選択が存在する。また、閾値のわずかな違いが、等値面のトポロジーを大きく変えることによって、可視化された現象の解釈が大きく変わってしまうことがある。

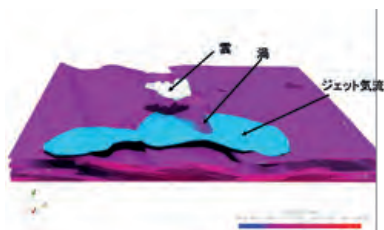


図1 ジェット気流の上に平たい渦が発生し、そのさらに上に雲が発現している現象 [5]

例えば、図1のような雲、渦、ジェット気流が、ある相対位置関係をなしているような物理現象を考えてみる。雲、渦、ジェット気流はそれぞれ、データから対応する場の閾値を選択し、抽出された等値面である。図1で可視化されている等値面の閾値の組み合わせでは、雲とジェット気流の間に、渦が発生していることを確認することができる。一方で、雲の等値面、ジェット気流の等値面の閾値は固定し、渦の等値面の閾値を 10^{-3} だけ



図2 雲とジェット気流の間に、渦が発現していない現象 [5]

変化させた時の可視化を図2に示した。この図では、雲とジェット気流の間に、紫色の渦の等値面が存在していないことが確認できる。

等値面を用いた可視化解析では、一般に、ユーザは、いくつかの閾値を選択し、抽出された等値面で再現された現象から解析を行うため、特に、複数のスカラー場からなるデータに含まれている等値面の相対位置関係全てを考慮に入れ、ユーザの立てた仮説を検証したり、新たな発見をしたりすることは難しい。したがって、等値面解析に潜在している恣意性の課題を、軽減したいと私は考えた。

1.2 過程

上記の課題を解決するために、私は、Reeb graph [3] に着目した。Reeb graph は、あるスカラー場 $f_i: M \rightarrow \mathbb{R}$ に対し、閾値 l_i を変えたとき、等値面がどのようにトポロジー変化するかを記述しており、データ上で、そのスカラー場のオーバービューを提示するため、閾値を選択する手助けをする [1]。しかし、Reeb graph は、あるスカラー場 f_i に対する等値面のトポロジー変化は教えてくれるが、複数のスカラー場で、複数の等値面の位置関係が等値面の閾値を変えたときにどのように変化しているかは教えてくれない。そこで、私は、最終目的として、Reeb graph に等値面の相対位置関係を統合することを考えた。簡単のため、まずは、2つのスカラー場 $\{f_i\}_i = \{f_1, f_2\}$ を対象とし、等値面のペアのトポロジカルな関係の一つとして、交差の有無の情報を Reeb graph に統合することに着手した。2つのスカラー場からそれぞれ抽出された等値面の全てのペアを記述する数理構造として、Reeb

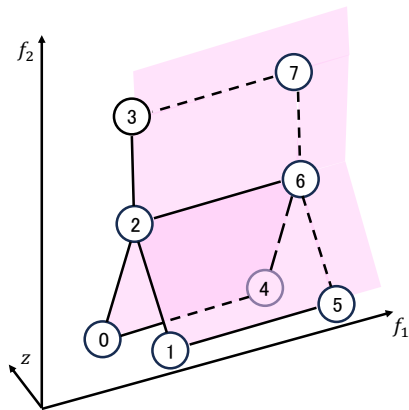


図3 Reeb graph × Reeb graph の例

graph × Reeb graph (図3) を考え、その構造を、交差している等値面のペアと交差していない等値面のペアを示す領域に分離した。交差している等値面のペアを示す領域は、Reeb space [2] を用いることで記述することができることに気づき、Reeb space に対応する、等値面のペアの領域を Reeb graph × Reeb graph から取り除いた数理構造、Reeb complement を新たに提案した。図4に Reeb complement の例を示した。図3、4の例では、ドメインを \mathbb{R}^2 、スカラー場 $f = (f_1, f_2)$ として、 $f_1 = |x| + |y|, f_2 = \begin{cases} |x-1| + |y| & (x \geq 0) \\ |x+1| + |y| & (x < 0) \end{cases}$ の時の、具体例の一部を示している。赤色の領域が、Reeb complement であり、この領域では、等値面のペアは、交差していないことが、図からも確認できる。また、Reeb complement の特徴として、分離されている各赤い領域内では、等値面のペアの関係性が、トポロジ的に変わらないと言える。すなわち、例えば、等値面のペアが分離しているような関係と、包含関係にあるような等値面のペアが、同じ赤色の領域に所属することはない。

この新しい数理概念によって、等値面のペアが成す交差の有無に基づくトポロジカルな関係を分類することに成功した。Reeb complement の数理、および計算アルゴリズムについては、SoCG (Symposium on Computational Geometry) に論文を投稿済みである。

1.3 今後の戦略

Reeb complement は、閾値のペアを与えた時、それぞれの閾値を持つ等値面のペアが交差しているか、交差していないかを知ることはできる。しかし、実データでの解析を考えると、交差の有無の判定だけでは、あまり

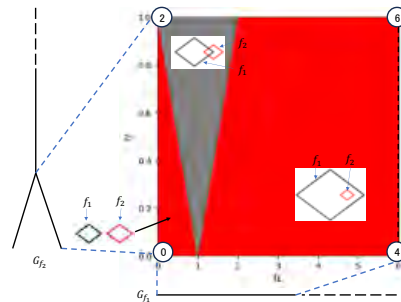


図4 図3の頂点 0, 2, 6, 4 からなる四角形上の Reeb complement

使い勝手の良いものではないことが予想される。そのため、等値面が交差していない時、それらの等値面が例えば、上下、あるいは左右など、どのような相対位置関係にあるか、という情報も追加してユーザーに提供することが望まれる。

ユーザーが自身の望む等値面の相対位置関係がすでわかっており、その相対位置関係をデータから探すタスクを考える。その場合、普通、望む等値面の相対位置関係をユーザーが定式化し、数式などをシステムに渡すことがユーザーには求められる。しかし、上下、左右などの抽象的な概念の定式化は、難しいことが考えられる。



図5 ChatGPT を用いた対話型等値面解析システムのイメージ例

そこで、ユーザーが欲しい等値面の相対位置関係を自然言語でシステムに投げかけ、その要求に合う応答を開発したシステムが自然言語ベースで答える、現在ホットな ChatGPT を介したチャットベースの等値面解析のシステムの提案を考えている。現在、考えているシステムのイメージを図5に示した。ユーザーは、ChatGPT に自然言語で、解析したい等値面の相対位置関係を要求する。それに対し、ChatGPT を介し、Reeb complement、および、Reeb graph × Reeb graph 上の各四角形に対し、

相対位置関係を計算する。計算結果から ChatGPT が読み取ったユーザの要求を満たす等値面の相対位置関係を探索し、見つけた閾値のペアの情報を含めた回答を ChatGPT が自然言語で返す。このような ChatGPT を用いた等値面の相対位置関係を解析するシステムを現在開発中で、図 5 ② 部分の実装がほぼ完成している。このシステムについては、2024 年 3 月 6 日の IEEEVis に投稿する予定である。

2 数学共創モデリング・数学創発モデリングの報告

2.1 数学共創モデリング

数学共創モデリングでは、佐伯修教授のセミナーに参加し、松本幸夫著「4 次元のトポロジー」を勉強し、勉強した内容をセミナーで発表したり、セミナーに参加している別の数理学府の学生の発表を聞きながら、トポロジーについて、基礎知識を身につける作業をおこなった。成果としては、本に記載されているトポロジーの数学的な基礎知識が身についたこと、また、数理学府の学生の発表の聴講を通して、定義から始まり、定理・命題を提案し、それを証明するという、数学的な厳密な議論の進め方について学ぶことができたことが挙げられる。

2.2 数学創発モデリング

数学創発モデリングでは、1.2 節で記載した、Reeb complement の数理、並びに、計算アルゴリズムについて、基本的には隔週で、2 時間程度、佐伯修教授と議論した。成果は、新しい概念の数理化・深化の技術を磨いたことが挙げられ、具体的には、Reeb complement の定式化、Reeb complement の簡単な計算アルゴリズムが完成した。

3 共創力強化インターンシップの報告

私は、卓越社会人博士として、富士通株式会社人工知能研究所で、2022 年 5 月から統計的因果探索に関する研究を行なっている。本資料では、2022 年 5 月から 2023 年 3 月までに行なった研究テーマに関して報告する。研究テーマは、大規模変数データに対する安定的な因果発見技術である。

3.1 背景

医療やマーケティングなど様々な業務において、実問題解決のために AI を活用して施策を立案することが増えてきている。解決したい問題の重要な要因を特定し、施策を立案するためには、変数 A と B の間に関連があるという相関関係だけでなく、A だから B であるという原因と結果を表した因果関係に注目する必要がある。富士通では、データから因果関係を発見する因果探索技術を開発しており、そこには、*DirectLiNGAM*

[4] という因果探索アルゴリズムが搭載されている。*DirectLiNGAM* は、データの変数の数 d に対し、計算量が $O(d^3)$ であるため、数千、数万規模の変数データだと、現実的な時間で因果探索を完了させることができないという問題があった。そこで、フランスの Inria と共同研究を行い、大規模変数データに対する新たなアルゴリズム *ICID* を開発した。*DirectLiNGAM* は、16 スレッドで 1,000 変数規模のデータから因果関係を 9 時間程度で推定できるが、*ICID* は 1 スレッドでも同じ時間で 3,000 変数のデータの因果関係を推定できた。しかし、どんなデータであっても変数の数のみで *ICID* の方が良いと判断できるのかという課題があり、それぞれの手法で、得意不得意なデータの性質を推定し、その推定結果を用いて、適切な手法選択基準が作りたいたいという課題に取り組んだ。

3.2 活動内容・成果

各手法が仮定している数理をもとに、それぞれの手法が得意とするデータの特長について仮説を立て、その仮説を検証するために、上記のデータの特長を持った人工データを作成し、両手法に因果探索を行わせる実験を行った。本実験の評価では、因果探索にかかる計算時間の違いではなく、推定される因果関係の精度の違いを調査した。結果として、2 つの知見を得ることが出来た。1 つ目が、因果探索を行う入力データの統計的な性質によって両手法に得意不得意があるということだ。入力データがガウス分布に従っているかどうかで、推定される因果関係の精度に差が出るということが、今回の実験で明らかになった。2 つ目が、データに存在している因果関係の数に応じて得意不得意があるということだ。従来手法では、顕著な差は見られなかったが、提案手法では、因果関係の数が多くなると推定する因果関係の精度が落ちる傾向にあるということが明らかとなった。

4 卓越大学院プログラムの種々の活動報告

2022 年 4 月から現在に至るまで、卓越社会人博士として、富士通株式会社研究本部人工知能研究所に在籍し、富士通の独自技術でもある因果発見の課題解決に向けて理論寄りの研究を行いながら、私が、専門としているトポロジカルデータ解析の知識が活かせるような仕事にも取り組み、課題解決を行っている。

2023 年 3 月 29 日、富士通株式会社と九州大学の技術交流会で、「トポロジー的に等価なコンタの配置を探す Reeb Complement」を発表した。

5 最終年度のプログラム生としての活動計画

6 月 6 日の TopoInVis に向けて、IEEEVis に投稿予定の ChatGPT を用いた等値面解析のシステムの課題

解決を 4 月から 6 月まで行う。

本研究で提案した新しい数理的な概念 Reeb complement を計算幾何・可視化分野に周知させるために、学会発表を行う。具体的な学会としては、6 月開催の SoCG, 10 月開催の IEEEVis など現在は計画している。残りの期間は、博士論文の執筆にあてる。

また、卓越社会人博士としても、富士通株式会社の次年度の研究課題に取り組み、成果をあげる。

参考文献

- [1] Chandrajit L Bajaj, Valerio Pascucci, and Daniel R Schikore. *The contour spectrum*. IEEE, 1997.
- [2] Herbert Edelsbrunner, John Harer, and Amit K Patel. Reeb spaces of piecewise linear mappings. In *Proceedings of the twenty-fourth annual symposium on Computational geometry*, pages 242–250, 2008.
- [3] Georges Reeb. On the singular points of a completely integrable pfaff form or of a numerical function. *Comptes Rendus Acad. Science Paris*, 222:847–849, 1946.
- [4] Shohei Shimizu, Takanori Inazumi, Yasuhiro Sogawa, Aapo Hyvarinen, Yoshinobu Kawahara, Takashi Washio, Patrik O Hoyer, Kenneth Bollen, and Patrik Hoyer. Directlingam: A direct method for learning a linear non-gaussian structural equation model. *Journal of Machine Learning Research-JMLR*, 12(Apr):1225–1248, 2011.
- [5] 櫻井大督. 仮説のオントロジーに基づく可視化. JSPS 科研費若手研究 20K19809 (令和 2 年度) .

九州大学マス・フォア・イノベーション卓越大学院プログラム

活動報告書 2023

2024年10月発行

〒819-0395 福岡市西区元岡744
E-mail: gpmioffice@jimu.kyushu-u.ac.jp
Website: <https://www.jgmi.kyushu-u.ac.jp/>

Graduate Program of Mathematics for Innovation

