プラズマ・インフォマティクス ーデータ駆動科学のプラズマへの応用

Plasma Informatics – Application of Data Driven Science to Plasmas

1. はじめに

1. Introduction

浜口智志 HAMAGUCHI Satoshi 大阪大学工学研究科 (原稿受付:2019年9月30日)

近年,計算機(コンピュータ)の能力が格段に進歩した ことにより,膨大なデータ(ビッグデータ)を効率的に解 析して,そこから様々な知見を得ること,及び,その知見 を活用して,将来を予測したり,未知のものの特徴を推定 したりすることなどが可能になりつつある.言い換える と,過去の経験から学習し,その学習の成果を活用すると いう,これまでは人間が行っていた作業を,計算機に行わ せることができるようになってきた.計算機が行う作業で あるから,当然,人間が対応できないような膨大なデータ への対応が可能となり,また,取りこぼしや気まぐれの判 断が入らず,いつも同じアルゴリズムに従って,学習と学 習成果の活用が行える.このため,学習成果やその活用の 信頼性についても,科学的に評価・解析することが可能と なると期待される.

小特集

データを処理する科学的手法は、18世紀中頃から「統計 学」として明確に認識されるようになり、計算機の発明と ともに、計算法や人工知能等の理論の発展を取り込み、20 世紀後半からは情報学・情報科学という名で、今日まで発 展を続けている.特に、情報学のうち、実際にデータを活 用することに主眼をおく研究分野は、近年、「データ科 学」、「データ駆動科学」等とよばれている[1].ビッグ データや人工知能(AI)などがマスコミに取り上げられる ことが近年多いため、「データ駆動科学」が突然現れた新 しい科学分野のような印象を与えるかもしれないが、実情 は、上に述べたように、歴史ある統計学、情報学の一分野 である.ただし、近年の計算機の発展、特に、GPU(Graphics Processing Unit)などを活用した超並列計算技術の急速 な発達は、10年前には不可能であった大量のデータ処理を 今日可能としており、その成果が現代の科学・技術に与え る影響は極めて大きい.

実際に、材料科学の分野においては、データ駆動科学を 取り入れた研究が積極的に進められている.2011年に米国 のオバマ大統領(当時)が主導して開始された米国国家プ ロジェクト Materials Genome Initiative (MGI)は、これまで 勘と経験にたよっていた新規機能性材料開発に、データ駆 動科学の手法を取り入れ、その大幅な効率化に成功したと 言われている[2].同様の研究分野は、日本では、マテリア ルズ・インフォマティクス(MI)とよばれる.この分野では、 単に既存のデータを活用するばかりでなく、high-throughput experiment (THE)、あるいは high-throughput screening (HTS)とよばれる、材料データを極めて効率的に取得す る実験手法を開発した意義も、非常に大きい.

マテリアルズ・インフォマティクスより歴史が古いの が,バイオインフォマティクスで,1950年代からタンパク 質シーケンシングの必要性が高まるのをきっかけとし,情 報科学的手法の分子生物学への応用が始まった.近年で は,創薬に必要となる医薬品化学の応用研究等を対象に, 化学情報のインフォマティクスであるケモインフォマティ クスという研究分野も確立されている.

本小特集の目的は、このようなデータ駆動科学的解析手 法をプラズマ分野において活用した研究例を紹介すること にある.先に見たように、データ駆動科学とほぼ同義で、 インフォマティクスという言葉が使われることが多いた め、ここでは、主題に書いたように、データ駆動科学とプ

Osaka University, Suita, OSAKA 565-0871, Japan

author's e-mail: hamaguchi@ppl.eng.osaka-u.ac.jp

ラズマ科学の融合分野を「プラズマ・インフォマティク ス」と呼ぶことにする[3].

本小特集は、次の4編の論文から構成されている.第2 章に挙げる本小特集最初の論文は、村上らによる「原子分 子データベース」である.この研究では、プラズマ科学分 野で最も幅広く整備され、活用されているデータベースで ある「原子分子データベース」において、実測による決定 の難しい原子分子データの一部を、既存のデータやプラズ マの他の物理量に関するデータから推定する手法について 議論されている.また、論文の後半には、衝突輻射モデル シミュレーションの高速化手法についても議論されてい る.

第3章の論文は、木野らによる「機械学習によるプラズ マエッチング率予測」である.エッチング率とは、物質表 面に、あるイオンが入射することにより、表面物質が脱離 する現象(エッチング)において、一回のイオン入射当た り表面から脱離する表面原子の数(イールド)を意味する. 本論文では、既存のエッチング率データ活用し、エッチン グ率が未知の物質表面に対して、与えられた入射イオン種 と入射イオンエネルギーから、そのエッチング率を推定す る手法と、その関連解析法について、議論されている.

4章では,若月らによる論文「トカマクプラズマ運転へ の応用展開」を紹介する.この論文では,データ駆動科学 的研究手法を,トカマクのイオン温度勾配制御とディスラ プション予知に適用している.

5章の論文は、大舘による「画像計測における逆変換問 題とデータ科学」であり、核融合実験における新たなトモ グラフィーの画像解析技術を紹介している.

これらの研究例の多くは、(第2章後半で議論されてい る衝突輻射モデル計算の高速化を除くと,)非常に簡略化 して述べると、データをフィッティングする (回帰する) という作業に帰結する. 言い換えると、ある条件下で実現 される物理量(例えば、基板物質と入射イオン種、入射イ オンエネルギーが与えられた時のエッチング率、中性粒子 ビーム入射 (NBI) パワーとイオン温度上昇の関係,ある いは、トモグラフィーの計測データ)が与えられており、 求められているのはそれらのデータ点を滑らかにつなぐ 「曲線」(一般化して述べると、高次元空間内の一般化され た曲面)である.(第5章のトモグラフィーに関しては, その計測データを与える放射分布のフィッティング曲線を 求めることに対応する.) そうしたフィッティング曲線は, 誤差を含むデータ点を必ずしも通るわけではないので、ど のようなフィッティング曲線を用いるべきかについては, 任意性が高い、フィッティング曲線を決定しても、何か新 しい物理現象がわかるわけではない、という疑念や批判が 常について回る.

一方,本来であれば,物理学の研究においては,第一原 理に基づく理論から,当該データに対応する理論曲線を導 出し,それが,実験データ点の近くを通ることを確認する というのが王道であり,物理原理に基づかないフィッティ ング曲線の決定は,学問的に本質的でない.このような批 判が,プラズマ・インフォマティクスの研究に対して,よ くなされる.

プラズマ科学界に限らず,物理学界には,こうした批判 が今でも根強く,インフォマティクス研究がなかなか認知 されにくいようである.しかしながら,第一原理シミュ レーションが容易でない分野,例えば,素粒子実験や宇 宙・天文学分野では,かなり早くから,データ駆動科学的 研究手法が幅広く導入されている.プラズマ科学分野で も,近年ようやく,第一原理に基づいた研究手法だけは解 決できない,あるいは,解決できたとしてもコストがかか りすぎる研究に対して,新しい視点での研究の必要性が高 まり,プラズマ・インフォマティクスの研究に携わる人が 少しずつ増えてきている.

データ駆動科学は、常に次の仮説をおく.我々の観測す る自然現象の多くは比較的安定であり、データ点が多く存 在して、そのばらつきが大きくない場合、その近辺におけ る物理量は、データからの内挿で十分予測可能であろう と.データ駆動科学は、この仮説に基づいて論理構成され た厳密科学である.第一原理から演繹的に解を導出する、 あるいは、実験により厳密なデータ得る(仮にそれらが現 実的に可能だとして)際に得られる情報は確かに正確であ ろう.しかしながら、上記の仮説が成り立つ系では、その 正確さをある程度犠牲にしても、確率論的推論により、少 ない計算量・実験量で、その情報を推定することのほうが 価値ある場合も多々ある.

研究のコストは、実際に研究を進めるうえで、考慮すべ き極めて重要な因子の一つである.核融合プラズマの大型 実験や、大規模超並列数値シミュレーションは、極めてコ ストのかかる研究である.それらを異なる条件下で多数繰 り返して研究を進めることが事実上不可能な場合、得られ た貴重なデータをもとに、統計学的・情報学的手法を最大 限に活用して、新たな条件下における物理現象を、十分な 根拠をもって推定してくことは、科学研究の効率化に大き く貢献する.推定値の信頼性が低い場合、そのような条件 を優先的に実験・数値シミュレーションで研究していくこ とにより、実験計画の最適化にもつながる.

こうした観点も含めて、本小特集に掲載した4編の論文 を読んでいただければ幸いである.

参考文献

- [1] T. Hey, S. Tansley, and K.Tolle., (ed), The Fourth Paradigm Data-Intensive Scientific Discovery (Microsoft Research, Redmond, Washington, 2009).
- [2] M.L. Green et al., Appl. Phys. Rev. 4, 011105 (2017).
- [3] 浜口智志:静電気学会誌 43 (5)198 (2019).



2. 原子分子データベース

2. Atomic and Molecular Databases

村上 泉^{1,2)},藤井恵介³⁾,佐々木 明⁴⁾
 MURAKAMI Izumi^{1,2)}, FUJII Keisuke³⁾ and SASAKI Akira⁴⁾
 ¹⁾核融合科学研究所,²⁾総合研究大学院大学,³⁾京都大学工学部,⁴⁾量子科学技術研究開発機構
 (原稿受付: 2019年 8 月11日)

プラズマのミクロ過程を記述し、プラズマ分光診断に不可欠な原子分子データは、古くからデータベース化 が進んでいるが、近年の計算機性能の発展により多数のデータが理論計算で生産されるようになり、従来の手法 によるデータ評価が困難になってきた.高乙多価イオンの原子構造は複雑で非常に多数のエネルギー準位を扱う 必要があり、分光モデル構築の困難さ、スペクトル再現の困難さが現れてきた.これらに対するひとつの取組と してデータ科学的手法がある.分光解析と衝突輻射モデル計算へデータ科学的手法を取り入れた新たな取組を紹 介する.

Keywords:

Atomic and molecular data, spectroscopic diagnostics, collisional-radiative model, tungsten spectra, bayesian statistics, Monte-Carlo Markov Chain

2.1 はじめに

プラズマのミクロ過程を支配している物理過程のひとつ が原子分子過程であり、プラズマの状態の理解に欠かせない.その原子分子過程を記述する原子分子データは、原子 分子物理学研究によって生産され、データベースとして整 備されて、プラズマ研究者へ提供されている.プラズマ分 光診断の精度は使用される原子分子データの精度に大きく 依存しており、データ評価は精度を保障する重要な役割を 担っている.

日本における原子分子データベース活動は、1970年代に さかのぼり、プラズマ・核融合研究に必要な水素原子・分 子の原子分子データの収集から始まり[1]、それを計算機 に格納してデータベース化し、検索ができるシステムが構 築され、データを必要とするユーザーに提供する、という 形へ進化してきた[2,3].核融合プラズマ中の不純物挙動 研究や、熱輸送における不純物の放射損失効果の研究にお いて、分光計測と同時に、解析のための分光モデルと原子 分子データが必要とされ、データの精度はデータ評価に よって調べられてきていた[4].

原子物理学での原子データに関する研究は,電子が1個 の水素や水素様イオン,2個のヘリウムやヘリウム様イオ ンといった,簡単な系から研究が進み,だんだんと電子数 の多い多価イオンへと研究が発展していった.原子物理学 における実験や理論計算手法が発展し,計算機による理論 計算も高度化し,計算機の高速化に伴い多くのデータが生 産されるようになってきた.例えば,多価イオンの多数の 励起状態間の電子衝突励起速度係数は,もはや論文には一 部しか掲載されず,データは電子ファイルとして添付され るようになってきた.90年代まで行われていた一つ一つの 励起速度係数を比較したデータ評価[4] は不可能な状況に なってきた.

近年,プラズマ対向材料であるタングステンの原子デー タや分光モデルの研究が進んできたが,まだすべての価数 においてデータが整備されたとは言いがたい.電子数が多 く,特に,4f軌道電子をもつ多価イオンはその原子構造が 複雑で,原子構造の理解も原子データの整備もまだ途上で あるといえる.そのため,タングステン多価イオンの分光 モデルの研究は行われているが,大型ヘリカル装置 (LHD)などのプラズマからの発光スペクトルはまだ十分 には説明できていない[5].タングステン以外の原子番号 の大きな元素の原子データは,多くはほとんど未整備のま まである.

2017年8月に重力波天体として中性子星連星合体が検出 された[6].中性子星合体によって開放・放出された物質 の中で急激な中性子捕獲r過程による重元素合成が進み, 続く核崩壊によって発光がおこるキロノヴァの光学特性に 関する理論研究では,希土類元素の原子構造と吸収係数の 理論計算が重要な役割を果たした[7,8].重力波源に対す る光赤外天体同定にも貢献した[9].キロノヴァではプラ ズマの温度はさほど高くなく,吸収係数に寄与するのは1 価イオンが主であり,複雑な原子構造を持っている.希土 類であるネオジムの1価イオンの原子構造を粗視化して見 ると,エネルギーレベルの分布がおおよそ統計的であり, 歪んだ正規分布で記述できることが指摘された[10].1価

National Institute for Fusion Science, Toki, GIFU 509-5292, Japan

corresponding author's e-mail: murakami.izumi@nifs.ac.jp

イオンの原子構造や吸収係数などが統計的な手法で近似で きるならば,詳細な原子構造計算がない元素に対する予測 が可能となるかもしれない.

原子データ評価や原子構造計算そのもの,分光モデルや 発光スペクトル解析へのデータ科学手法の適用が,新たな 研究手法の開発につながる可能性を秘めている.以下に, 分光計測へのデータ科学応用と,分光モデルである衝突輻 射モデルへの応用について紹介する. (村上泉)

2.2 分光計測におけるデータ駆動科学

分光計測は古くからプラズマ診断に用いられてきたが、 その原理上、得られる結果は様々な影響により不確かさに なる. 例えば、ほぼ確立され広く使われているプラズマ分 光診断法の一つに,発光線強度比法がある.原子・イオン 発光線強度がプラズマの電子温度・密度に依存することを 利用し、逆に発光線強度を計測することで、温度・密度を 推定する方法である.この逆変換は非線形変換であるた め、計測スペクトルに含まれるノイズが最終的に求める温 度や密度の不確かさにどのように影響を与えるか知ること は難しい. さらにそれ以上に,発光スペクトルの視線積分 による影響、電子の速度分布がマックスウェル分布から外 れている影響,原子分子データ自身の精度など、ランダム でない事象に対する不確かさも結果に影響するため、状況 はよりいっそう複雑である(解釈できない解析結果がでて くると「(上のどれか一つ)の可能性が考えられる」などと 都合よく使われてしまうのである.)

そのためか,プラズマ・核融合の分野の中では比較的早 い段階で,高度な確率論を取り入れたデータ解析手法の適 用がなされてきた.特に,ドイツのグループがベイズ統計 による分光スペクトルデータ解析を熱心に行ってきた.

ベイズ統計とは、大雑把に言えば、様々な現象を確率に 基づいてモデル化することで、計測データからどこまでの ことが言えるかを定量化する方法論である. 誤差伝播の法 則を高度にして、独立ガウスノイズ以外の不確かさも扱え るようにしたものだと考えてもよいかもしれない.

例えば、Fisher らは未知の連続光と原子発光線が重なっ て計測されたスペクトルから、原子発光線強度とその不確 かさを推定する方法を提案している.背景光スペクトルは 未知であるけれども連続的であるというようにモデル化す ることに基づく[11].その変動の具合(周波数レンジや振 幅)を計測スペクトルの他の部分から推定することで、興 味のある発光線と重なった領域での背景光強度を推定して いる.

一方核融合プラズマ診断としては、Verdoolaege らが荷 電交換分光計測の結果と、制動放射光の可視受動分光計測 結果とを組み合わせることで、JET プラズマにおける実効 電荷(Z_{eff})分布を高精度に推定する方法を提案している [12].荷電交換分光では局所的な炭素イオン密度を推定で きるが、その他の不純物イオン密度については情報を与え てくれず、一方で制動放射光は全不純物イオンによる効果 を知ることが出来るが、線積分計測となり局所値を知るこ とができない.この相補的な2つの診断法を組み合わせる ことで、より精度よく推定できたと報告している.

2.3 原子分子データの不確かさ

このように、ベイズ統計を使うことで、プラズマ分光診 断における様々な不確かさを排除、もしくは定量化する方 法が確立されつつある.最後の難関は基礎となる原子・分 子データの精度である.技術革新によりCCDカメラや分光 システムが高性能化し、ノイズの少ないきれいなデータが 手に入るようになってきた.しかし、依然としていくつか の原子分子データ(例えば多電子イオンの励起断面積な ど)は非常に不確かな状況のままである.解析に用いる原 子・分子データ自体に誤差があれば、いくら計測データが 低ノイズであったとしても、結果は当然不確かなものにな る.

国際熱核融合実験炉 ITER のプラズマ診断に必須である 原子分子データの一つに、タングステン多価イオンの相対 密度(fractional abundance)データが挙げられる.ITER プラズマ内にはタングステンが多価イオンとなって存在す ることになるが、そのイオン密度を求めるためには、特定 の価数のタングステンイオンから得られる発光スペクトル から、当該価数のイオン密度を導出するだけでは不十分で ある.結果を相対密度データと比較することにより他の価 数のイオンがどの程度存在するかを推定して、それらを合 計することで初めてタングステンイオン密度を推定でき る.この相対密度はこの電子温度に大きく依存することは わかっているものの、高精度な理論計算が難しく、複数の グループによる計算結果が大きく異なっている状況である (図1).さらに、実験的にも直接は計測できない量であ り、統一的な見解が得られていない状況である.

著者らは近年,LHDが多数のプラズマ計測システムを有 していることに着目し、それらのデータを組み合わせるこ



図1 23-28価タングステンイオンに対する相対密度データの電子
 子 温度依存性、上から、Asmussenら[13]、Putterich [14]、Sasakiら[15]によって評価されたもの、LHD 実験データのベイズ統計解析によって初めて実験的に評価されたものを4段目に示す、この結果はPutterich のものに最も近いが、200 eV 程度、低温度側にシフトしている。

とでタングステン相対密度データ初めての実験的推定を 行った.LHDプラズマに固体タングステンペレットを打ち 込んでプラズマにタングステンイオンを蓄積させ,さらに 加熱パワーを変化させることなどで電子温度分布を様々に 変化させる.複数の価数のタングステンイオン発光線強度 の時間・空間分布が,プラズマ中の電子温度分布と強く相 関する様子が得られた(図2).各時刻・空間位置におけ るタングステンイオン密度に加え相対密度データは不明で ある.一方で,タングステンイオン密度は各発光線に対し て共通であり,相対密度データは各時刻を通して共通であ る.これらの相補的な依存性をモデル化し,実験データを 最もよく再現する条件を探すことで,多価タングステン相



図2 解析したLHDプラズマにおける計測結果の一例.(a)電子 温度(1段目),電子密度(2段目)の時間変化.本解析に より求めたタングステン密度を3段目に,相対密度を4段 目に示す.(b)各価数(28価-24価)のタングステンイオン からの発光強度の時間変化(マーカー).これらの時間変 化(と空間分布の変化)と電子温度変化から、タングステ ン密度と相対密度データを推定した.

対密度データを初めて実験的に評価することができた [16].得られた結果(図1下段)は過去に報告された結果 の一つに比較的近いものの,少し違いがあることが明らか になった.

このように、これまでは実験的に計測できなかった原子 分子データを、多角的な実験計測と、高度な確率モデリン グを組み合わせることで定量的に評価できるようになって きた.原子分子データは核融合に限らず、プラズマ研究に 広く関わるものである.パラメータ領域の異なる異分野 データを集めて総合的に解析することが、今後の原子分子 データベースを拡充する上で新たな切り口になるに違いな い. (藤井恵介)

2.4 マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法の衝 突輻射モデル計算への応用

2.4.1 多価イオンの衝突輻射モデル

衝突輻射モデル (Collisional Radiative Model, あるいは CR モデル)は、プラズマの温度、密度から、発光スペクト ル、輻射損失の大きさを評価するために用いられる. CR モデルでは、プラズマ中に存在するイオンの原子や分子状 態の分布 (ポピュレーション)が、電子衝突や輻射による、 電離、再結合、励起、脱励起などの原子分子過程によって 変化する過程を、レート方程式によって計算する.

発光スペクトル,輻射損失などを正確に評価するために は、プラズマ中に存在すると考えられるイオンの原子状態 をもれなく取り入れたCRモデルが必要になる。例えば、将 来の核融合炉の壁材として用いられているタングステン は、それがプラズマに混入することで輻射損失を起こすこ とが問題になると考えられている[17].タングステン原子 は、プラズマの温度が上がるに従って、60価程度の多価イ オンまでのイオンの状態をとり、それぞれの価数のイオン に多くの励起状態がある。そのため、10⁴以上の原子状態を 取り入れた CR モデルが必要になる[13-15].

CR モデルの実際の計算を行うためには、それぞれの原 子状態と原子過程のデータが必要である.タングステンの ような多電子、多価電離イオンにおいて、原子過程の種類 と数はしばしば非常に多くなり、かつてはそのデータをど うやって得るかが問題であった.しかし最近は、GRASP [18]、Fac[19]、HULLAC[20]などの計算コードが用いら れるようになり、コンピュータの計算速度が速くなったこ とにも助けられ、CR モデルを用いた特性の評価ができる ようになった.

このようにしてレート方程式を立てることができれば, それを解く計算は,連立1次方程式を解く問題に帰着する ので,一般的に難しいとは考えられないが,原子状態の数 が多くなると計算時間が長くなる.ここでは,その効率的 な計算のためのマルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法を 用いる方法を紹介する[21].

2.4.2 計算手法と計算例

プラズマ中の一個のタングステンイオンに注目すると, 電離,励起の過程を経て,ある状態から別の状態へと移り 変わる遷移を繰り返していると考えられる.これはマルコ フ過程なので,モンテカルロ法によってその変化を追跡す ることにより,原子状態の分布を求めることができると考 えられる.例えば,ある一定の温度,密度の条件で,十分 長時間状態の変化を追跡し,各状態の滞在時間を求める と,その経過時間に対する比からポピュレーションを求め られると考えられる.

そこで著者らはそのような計算を行うプログラムを作成 し、図3に示すように、従来の手法による計算と比較して 検証を行った.用いたCRモデルの詳細は文献に譲るが [22],非相対論的電子配置で平均化した原子状態を考え、 HULLACコードによって計算した、エネルギー準位、輻射 遷移確率、自動イオン化率及び、経験式による電子衝突電 離、励起の確率を用いている.

タングステンイオンのポピュレーションは、各イオンの 基底状態と、そこへの輻射遷移が禁止されている準安定状 態において大きいのに対し、励起状態においてはずっと小 さい特徴を持っている.従来手法と提案手法の結果を比較 すると、ポピュレーションが10⁻¹⁵程度より大きい状態に ついては、両者はほぼ完全に一致する.プラズマの価数や スペクトル、輻射損失などはこれらの状態のポピュレー ションによって決まるので、提案手法によってプラズマの 代表的な特性を、精度を良く求めることができるというこ とが言える.

図4に,従来手法と提案手法の性能,計算時間を比較した結果を示す.連立1次方程式の解法に Gauss の消去法系



図3 従来手法(a)と提案手法(b)によって計算された,電子温度 及び電子密度がそれぞれ2keV,10¹⁴/cm³におけるタング ステンイオンのポピュレーション.横軸は原子状態のエネ ルギーを示す[21].



図4 従来手法(●)と提案手法(○)による計算時間の原子状態 の数に対する依存性[21].

の手法を用いた従来手法の計算時間は,原子状態の数の三 乗に比例して増加するのに対し,提案手法の計算時間の増 加は1.2 乗程度であり,原子状態の数が多くなった時に計 算時間が大きく減少することを示す.これはタングステン プラズマにおいて,多くのポピュレーションを持つ状態の 数が少ないことに起因する.

2.4.3 CR モデルの計算手法についての考察

核融合用プラズマ中のタングステンのような,多電子, 多価電離イオンの CR モデルでは,複雑な原子過程を取り 扱うために,効率的な計算手法は役立つと考えられる.こ れまで困難だった,ポピュレーションの時間発展の計算な どにも応用できると考えられる.

また,近年プラズマ原子過程の研究課題として取り上げ られている,半導体リソグラフィ用 EUV 光源に用いられ るようなレーザー生成プラズマでは,CRモデルは,プラズ マの状態方程式や輻射輸送係数を求めるためや,流体力学 モデルや輻射輸送モデルの統合シミュレーションに応用す ることも期待されている[23].しかしこのようなシミュ レーションは,これまで知られている物理モデル,計算手 法を使うと,計算量が多すぎ,実際に行うことはむずかし い.より進んだモデル,手法の研究が今後も重要と考えら れる. (佐々木明)

参 考 文 献

- [1] 高柳和夫: IPPJ-DT-44 (1974).
- [2] T. Kato *et al.*, Phys. Scr. 23, 198 (1981).
- [3] I. Murakami *et al.*, Trans. Fusion Sci. Technol. 51, 139 (2007).
- [4] Y. Itikawa *et al.*, Atomic Data Nucl. Data Tables 33, 149 (1985).
- [5] I. Murakami *et al.*, Nucl. Fusion 55, 093016 (2015).
- [6] B.P. Abbott et al., Phys. Rev. Lett. 119, 171101 (2017).
- [7] M. Tanaka et al., Astrophys. J. 852, 109 (2018).
- [8] G. Gaigalas et al., Astrophys. J. Suppl. 240, 29 (2019).
- [9] Y. Utsumi et al., Publ. Astron. Sco. Japan 69, 101 (2017).
- [10] D. Kato et al., NIFS-PROC-114, p11-16. (2019).
- [11] R. Fischer et al., Phys. Rev. E 61, 1152 (2000).
- [12] G. Verdoolaege *et al.*, IEEE Trans. Plasma Sci. 38, 3168 (2010).

- [13] K. Asmussen et al., Nucl. Fusion 38, 967 (1998).
- [14] T. Pütterich *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **50**, 085016 (2008).
- [15] A. Sasaki and I. Murakami, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46, 175701 (2013).
- [16] K. Fujii *et al.*, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. **50**, 055004 (2017).
- [17] N. Noda et al., J. Nucl. Mater. 241, 227 (1997).

- [18] I.P. Grant, Adv. Phys. 19, 747 (1970).
- [19] M.F. Gu, Astrophys. J. 590, 1131 (2003).
- [20] A. Bar-Shalom, et al., J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 71, 169 (2001).
- [21] A. Sasaki, et al., High Energy Density Phys. 32, 1 (2019).
- [22] A. Sasaki, High Energy Density Phys. 9, 1 (2013).
- [23] K. Nishihara et al., Phys. Plasmas 15, 056708 (2008).



3. 機械学習によるプラズマエッチング率予測

3. Prediction of Plasma Etching Yields by Machine Learning

木 野 日 織, 幾 世 和 将¹⁾, DAM Hieu Chi²⁾, 浜 口 智 志¹⁾ KINO Hiori, IKUSE Kazumasa¹⁾, DAM Hieu Chi²⁾ and HAMAGUCHI Satoshi¹⁾ 物質・材料研究機構,¹⁾大阪大学大学院工学研究科,²⁾北陸先端科学技術大学院大学 (原稿受付: 2019年 6 月20日)

単元素物質表面の単元素イオンによる物理スパッタリングは、最も単純なプラズマプロセスの1つであるが、 そのスパッタリング率の予測は簡単ではなく、今世紀に入っても評価関数の修正が続けられている.物理スパッ タリングは、演繹理論だけでなく、実験やシミュレーションのデータからの回帰も一部併用して評価式を決めざ るを得ない複雑な物理現象である.このため、具体的にどの物理過程や物理量が、観測される物理スパッタリン グ現象を本質的に決定づけるのか、定量的に判断することは極めて難しい.著者らはデータ駆動解析(情報理論 に基づくデータの解析)を活用し、物理スパッタリング率を最も単純に説明できるモデルを探すことを目的に、 その記述子(関連物理量)の重要性を評価した.具体的には、理論的に重要と考えられる理論駆動記述子グルー プを、データ駆動解析で定義される記述子分類と結びつけるために、記述子間の距離を定義し、それを用いて記 述子の階層クラスタリングを行い、理論駆動記述子グループとデータ駆動的記述子グループとの対応関係をつけ た.この過程で不要な記述子の視覚的な削除が可能になる.次に、サンプル間の距離を用いたカーネルリッジ法 により、記述子組み合わせに関して全探索を行った.更に、記述子部分グループの重要性を評価する樹形図によ る subgroup relevance analysis により、物理スパッタリングのしきい値エネルギー E_{th}及びスパッタリング率が最 大となるイオン入射エネルギー E_{max}の予測能を明らかにし、また、それらを記述する重要な記述子を評価した.

Keywords:

physical sputtering yield, kernel-ridge regression, exhaustive search, importance of descriptor group, subgroup relevance analysis

3.1 はじめに

半導体デバイス技術の急速な進歩により,より高精度 で,かつ高効率な微細加工技術開発の要求は,半導体プロ セス業界において,ますます高まっている.プラズマプロ セスはそのような要求を満たす最も重要な解決策の一つで ある.プラズマプロセスにおいて,物理スパッタリングは 最も基本的なプロセスであるが,その原子レベルでの衝突 機構の詳細は,完全に理解されているわけではない.例え ば,最も簡単であると思われる単元素物質に対する単元素 イオン衝突による物理スパッタリング率の予測ですら,演 繹的な理論式で正確に導くことはできていない.

物理スパッタリングでは,基板に入射されたイオンは基 板内における衝突により,徐々に運動エネルギーを失う. この失われたエネルギーの一部は基板固体の電子励起を引 き起こし,また一部は古典的な衝突により基板内の原子の 運動エネルギーに直接変化する.前者は誘電率から評価が 可能であり,軽い原子においては第一原理計算による評価 が行われている.一方,後者は,基板内原子と入射イオン の間のすべての原子間ポテンシャルが既知の場合,古典力 学的に(数値シミュレーション等を用い,少なくとも原理 的には)評価を行うことが可能である.基板原子に与えら れた運動エネルギーは、複雑に格子振動や格子欠陥などを 引き起こし、運動エネルギーがあるしきい値より高いと基 板表面から飛び出し、スパッタリング率(=スパッタされ、 表面から脱離した原子数/入射イオン数)という統計量と して観測される.

3.2 データ駆動的手法による物理スパッタリン グ率解析

3.2.1 目的

本研究では、単元素物質に対する単元素イオン衝突によ る物理スパッタリング率を、データ駆動の立場(物理現象 を物理原理から演繹的に導くのではなく、現象を記述する データを情報理論に基づき解析する立場)から予測し、更 に、そのために重要な記述子の評価を行う.ここで、「記 述子」とは、目的変数(本章では、スパッタリング率やし きい値エネルギー等、興味の対象となる物理量)が依存す ると考えられる変数のことであり、物理現象においては、 一般的に、関連する物理量が記述子となる.物理スパッタ リング現象を対象とする本章の場合、例えば、基板を構成 する原子や入射イオン原子の原子番号、質量などが記述子 の例である.

National Institute for Material Science, Tsukuba, IBARAKI 305-0044, Japan

corresponding author's e-mail: KINO.hiori@nims.go.jp

今回我々は、山村・俵の式[1]から、データ数が少ない元 素同位体を除いたものを学習データとして用意した.な お、山村・俵の式は、過去に得られた実験及びシミュレー ションから得られたスパッタリング率に関するデータに対 し、(主として、イオン入射エネルギーの関数として)解 析関数をフィットすることで作成されている.読者として は、山村・俵の式という解析的な評価式があるのに、なぜ そこからわざわざデータを作成して,再度,データ駆動解 析を用いて、そのデータのフィッティング関数を求めるよ うな作業(回帰)を行うのか、不思議に思うかもしれない. もちろん、ある公式から生成したデータを用いて、その公 式を, データ駆動的に回帰して近似的に求めるだけでは, あまり意味がない.本章では、データ駆動解析により、 (もちろん,そのような回帰も行えるが,それ以上に),次 の2点を明らかにし、その知見を得ることを目的としてい る.まず第一に、論文[1]に元々なかった基板・イオンの組 み合わせに対して,本手法がどの程度予測性能がある(は ずなの)か、また、第二に、どの記述子が重要のなのか、の 2点である。例えば、山村・俵が用いている解析式は、先 行研究からなる歴史的な研究の流れに従って構成されてお り、今回の我々の新たな解析により、より簡単な表式の存 在を示唆できるかもしれない.

本研究の流れは以下のようになる.まず,回帰と同じ枠 組みで記述子に対するクラスタリングを行い,物理的知見 とデータ駆動的手法による知見をつなげる.この過程で, 不必要な記述子は除く.次に,網羅探索により目的変数 (本章では,物理スパッタリング率やしきい値エネルギー 等)を最も単純に説明できるモデルを探す.最後に,膨大 な網羅探索結果から,人間が整理,理解できる形での表示 を行う.解析においては膨大なデータの一部のみ可視化す ることしかできないが,本章では,先に決定した物理的知 見とデータ駆動解析により得られる知見を組み合わせるこ とで,より解釈しやすい可視化方法を開発した.

3.2.2 記述子・記述子グループの重要性の評価手法

記述子の重要性を定量的に評価する手法は幾つか知られ ている. 最も有名な手法は, 多数の分解木回帰の平均によ り目的変数を評価する random forest 回帰を用いた記述子 の「重要性」評価である.無批判にこの値を記述子の重要 度として議論する研究も多いが、評価関数によっては、回 帰性能と記述子重要度が直接結びついておらず、また、記 述子重要度評価手法として欠点があることが知られている [2]. 一方,回帰性能と直接結びつけた手法には relevance analysis がある[3,4]. これは、ある記述子が含まれるモデ ルと含まれないモデルの間の回帰性能の差から直接記述子 の重要度を測る手法であり、いわば記述子の「線形応答」 である.この手法の欠点は、異なる記述子の組み合わせの もとで最適な回帰モデルを網羅的に計算をしなければなら ないという点である.現代の計算機性能からすると小規模 なデータであれば十分に網羅計算が可能であるが、大規模 なデータには適用できない

ここで網羅計算の結果について短く説明する.網羅探索 を行うと、一般に、ほぼ同じ予測性能を持つ記述子の組み 合わせが数多く見つかる.より詳細に関しては文献[5]を 参照されたい.使用する回帰モデル選択肢が多いというこ とは利点とも取れるが,記述子の重要性を評価するという 立場では困難が伴う.この網羅探索結果の冗長性という困 難を乗り越えるためにも,記述子重要性を評価する relevance analysis は有用である.

3.2.3 回帰手法

様々な回帰手法があるが、ここではサンプル点間の距離 から定義される最も簡単な Radial Basis Function (RBF) カーネルを用いたカーネルリッジ回帰を行った.この回帰 は、回帰式

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i} c_{i} \exp\left(\frac{-\left|\left|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}\right|\right|^{2}}{\sigma^{2}}\right)$$
(1)

を用いて損失関数

$$c = \sum_{i} (y_{i} - f(x_{i}))^{2} + \lambda \sum_{i} ||c_{i}||^{2}$$
(2)

を最小化することで得られる.ここで σ と λ はハイパーパ ラメータと呼ばれる未定定数であり,記述子とサンプル点 から,損失関数が最小化するように決定する.ハイパーパ ラメータが決まると c_p は数値的に一意に決まる.また $||x-x_i||^2 = \sqrt{\sum_j (x-x_i)^2}$ は、データ点 $x \ge x_i$ の間の距離で あり、それぞれのデータ点は記述子セットからなるベクト ルで定義される.このため記述子の組み合わせにより距離 の評価値が異なる.この点から、同じデータ点でも、記述 子に依存する距離の評価値になるため、記述子選択が重要 になることは容易に理解されよう.

カーネルジッジ回帰を用いる利点は、解析モデルの形を 仮定しないため極めて高い回帰性能を持つこと、そして、 ハイパーパラメータ調整とクロスバリデーションによる統 計誤差を除けば、例えば、ニューラルネットワーク回帰と 異なり、誰が回帰を実行しても結果が同じになる点であ る.ここでは brute force 探索によりハイパーパラメータを 精密に決定しており、また leave-one-out cross validation により統計誤差を廃している.これにより回帰から曖昧さ の少ない形で記述子の重要性の解析を行っている.

カーネルジッジ回帰はノンパラメトリック回帰と呼ば れ、線形回帰などとは異なり、具体的な解析的評価式は存 在せず、完全にデータだけから定量的な予測を行う.理論 的な研究に戻ると、今回用いた山村・俵の式[1]以後にも 物理スパッタリング式の改良は行われており、例えば、参 考文献[6,7]では物理過程を考えた解析式のパラメタを決 める形でなく、データに合うように試行錯誤してパラメタ を決定した解析的評価式の比率を増している.本研究は更 にそれらを推し進め、内部に解析式のためのパラメータが 存在しない形の予測式を与える.

3.2.4 理論駆動記述子グループとデータ駆動記述子グ ループ

本解析で用いた記述子候補を,表1に,その種類ごとに 分類した.これ以降はイオン入射エネルギー(incident energy E)以外は,基板(target)もしくは入射イオン(ion)

			target	ion
periodic		atomic	Z	Z
table		atomic	mass	mass
energy	thrmodynamic	crystal	melting	melting
			temperature	temperature
		liquid	boiling	boiling
			temperature	temperature
		gas	evaporation	evaporation
			heat	heat
	binding energy	crystal	heat of	
			formation	
real space	length	crystal	vdw radius	
		atomic	atomic radius	
			covalent	
			radius	
	density	crystal	density	
electric energy		atomic	ionization	ionization
			potential	potential
		crystal	work function	
incident				E
energy				E

表1 理論駆動グループで分類した各記述子.

と種類を組み合わせて、例えば、target_heat_of_formation のような記述子の表示を行う.(回帰理論では target 変数 は目的変数と解釈されるが、本稿では、target は基板の意 味のみで用いる.)ここで、基板に関する記述子 target_ heat_of_formation は、山村・俵の式における surface binding energy と同じ値をとる.山村・俵の式において、顕わ に(陽に)依存する変数は、**表1**において、太字で示す.ま た、山村・俵の式では、この他にフィッティングによるパ ラメータが3つ存在する.

解析の手続きとして,まずデータに対して記述子のクラスタリングを行う.記述子p,qの間の距離をピアソンの相関係数 r_{bq} を用いて

$$d_{pq} = 1 - |r_{pq}| \tag{3}$$

$$r_{pq} = \frac{\sigma_{pq}}{\sigma_p \sigma_q} \tag{4}$$

と定義する.ここに σ_{pq} は共分散であり, σ_p は標準偏差である.これは標準的な距離の定義の1つである.

target 側でこの距離を用いて記述子の関係性を樹形図の ように配置して表示する階層的クラスタリングを行った結 果を図1に示す.(全体は図3を参照されたい.)異性体を 除いているために,基板原子の原子番号 Z(図中の target_Z) と,その質量(図中の target_atomic_weight)が元々比例 関係にあることを反映し,それらの間の距離 d はほぼ0で ある.この両者は,回帰時にほぼ同じ寄与をするため,本 章では,記述子 Z は除いた.

また、target記述子とion記述子がきれいに分かれるのは もちろんのこと、それ以外の各記述子の理論的に予想され る分類「理論駆動記述子グループ」と、上述の手法で解析 して分類した「データ駆動記述子グループ」が、ほぼ一致 することがわかる.これで理論駆動とデータ駆動の記述子

の橋渡しができた.

次はこのデータ駆動記述子グループ(以下ではグループ と書く)を用いて解析を行うことになる.この過程は通常 軽視されるが,領域専門分野と情報理論の知見を繋ぐため には重要である[8].

3.2.5 subgroup relevance analysis

relevance analysis には二通りあるが、ここではあるグ ループを追加した場合の回帰性能の変化(weak relevance)の値により重要性を評価する[8]. この手法では 単一モデル間の比較ではなく、記述子組み合わせが変わる と回帰モデルを作り直し、それらの最善なモデルと比較す る点にも注意して欲しい、「線系応答」なのでどこから変 化させるかという基準が必要なのだが、データ科学は演繹 法ではなく帰納法なので、対話的に目的に応じて決定して いく.

この基準を作るには、図1の階層的クラスタリング図を 用いる.ここでは、グループを定義することだけが目的な ので、図1の樹形図の幹(横線)のどこを選んでも良い.そ の基準の距離が小さい側をデータ駆動のグループとみなし て解析する.後で示すが、解析結果が単純な構造になるよ うに基準を決めることで問題の単純な理解が可能とする指 針、いわば問題の捉え方も与えることができる.

3.3 解析結果

3.3.1 スパッタリング率

スパッタリング率のエネルギー依存部分は,文献[6]に よると,reduced energy という1つの曲線上に乗ると言 う.また,その大まかな形は,しきい値エネルギー(*E*_{th}), スパッタリング率の最大値,そして,スパッタリング率の 最大値を与えるイオンの入射エネルギー(*E*_{max}),それら の半値となるエネルギーで決まるだろう(ここで,しきい 値エネルギーとは,スパッタリング率が0となる最大のイ オンの入射エネルギーを指す).なお,本章では,イオンの 入射角度は,基板の法線方向に対して0°,すなわち,垂直 入射に関するスパッタリングイールドのデータのみを扱っ ている.本章では,スパッタリング率それ自体でなく,ま



図1 階層クラスタリングによる target の記述子グループ. 横軸 は記述子間の距離 *d* を示す.

ずはスパッタリング率のエネルギー依存性を決める代表的 な値について回帰を行う.

3.3.2 スパッタリング率しきい値エネルギー

まず、スパッタの起きる入射イオンエネルギーのしきい 値(E_{th})の回帰を行う、山村・俵の式ではこの E_{th} は表面 結合エネルギー、基板原子の質量(target_mass)及び入射 イオンの質量(ion_mass)の関数で示されており、ま た、その比ion_mass/target_massが1以上か未満で、2つ の表式を切り替える区分モデルとして与えられている。

記述子組み合わせが7つまでの範囲内で全探索を行い, 各組み合わせ個数での最良値とその記述子を図2に記す. 記述子数4未満と4以上とで,決定係数 R^2 の値に大きな差 があることがわかる.今回は7つの記述子組み合わせまで しか行っていないが,他の問題に対する経験を踏まえる と,記述子数を増やすと R^2 はだらだらと上がり最大値を 持った後だらだらと減少することが多い.記述子組み合わ せ数が少ない領域を議論するため組み合わせ数をここで止 めている.この計算範囲では最適な決定係数は $R_{best}^2 = 0.9816$ である.使用したデータの範囲内ではあるが,十分な予測 能があることが期待できる.

これまでに図1の樹形図を用いた表示により, グループ 及び部分グループを定義した.ここでは, それらの部分グ ループの概念を活用し, 記述子組み合わせに関する全モデ ル集合のうち, ある記述子(あるいは記述子グループ)を 除く, もしくは追加することにより, どのように回帰性能 が変化するかを調べ, これにより, その記述子(あるいは 記述子グループ)の重要度を評価する(一つの予測モデル 内記述子の重要性では無いことに注意していただきた い).この解析を, relevance analysis という.基準を様々 に選ぶことが可能だが, *E*th に対して, target グループと

n	R^2	descriptors		
2	0.8396	target_mass ion_vdw_radius		
3	0.9086	target_mass target_heat_of_formation ion_vdw_radius		
4	0.9741	target_mass target_heat_of_formation ion_mass ion_vdw _radius		
5	0.9759	target_mass target_heat_of_formation ion_mass ion_first _ion_en ion_vdw_radius		
6	0.9778	target_mass target_heat_of_formation ion_mass ion_first _ion_en ion_atomic_radius ion_vdw_radius		
7	0.9816	target_mass target_heat_of_formation ion_mass ion_firs 16_ion_en ion_atomic_radius ion_covalent_radius_slater io n_vdw_radius		



図 2 記述子数に対する *E*th の LOOCV による回帰性能(*R*²)表 (上) とその図(下).

ion グループとの2つに分けると、かなり複雑な構造となる.

そこで、単純な構造になるように対話的に決定した weak relevance 結果を図3に示す.ここで縦線がグループ の選択基準を示している.図3の数値はそれぞれの部分グ ループの $\Delta R^2 = R_{best}^2 - R^2$ を示す.ここで計算している数 値は定義した5つのグループのうち、それぞれの部分グ ループで少なくとも1つの記述子が含まれる場合の R^2 の 最高値である. R^2 が大きいほど良い値なので、 ΔR^2 が小さ い幹ほど R^2 を上昇させるのに有効であるという意味で重 要であることを示している.

図3の見方を説明する.例えば一番下の記述子 target_ bulk_modulus (基板物質の体積弾性率)から記述子 target_density (基板物質の質量密度)までのグループを 考える.0.0となる ΔR^2 は距離が大きな幹から,記述子 target_mass (基板原子の質量)まで続いている.これが意味 することは,このグループでは1つの記述子 target_mass で代表できるということである.同じことが,記述子 target_melting_poin (基板の融点)から記述子 target_ heat_of_formation (基板物質の生成熱)までのグループで も見て取れる.このグループでは,記述子 target_heat_of_ formation 1 つでグループ全体を代表できる.

一方, ion 側で定義したグループの構造はやや複雑に なっている.各グループには $\Delta R^2 = 0$ となる単一記述子は 存在しないが,最も ΔR^2 が小さくなる記述子を選ぶと,記

weak relevance



図 3 樹形図による Eth に対する weak relevance analysis. 横軸 は記述子間の距離 d を示す.

述子 ion_vdw_radius (入射イオン原子のファンデルワール ス半径) と記述子 ion_mass (入射イオン原子の質量) にな ることが分かる.

最後に、上で述べなかったグループについて考える.記述子 target_vdw_radius(基板原子のファンデルワールス 半径)から記述子 target_workfunction(基板物質の仕事関 数)までのグループ全体での ΔR^2 は0でなく,0.021となる. これはこのグループの記述子を入れると回帰性能が下がっ てしまうという意味で、グループとして重要でないことを 意味する.記述子 ion_melting_point(入射イオン原子によ り構成される物質の融点)から記述子 ion_evaporation_ heat(入射イオンに対応する原子から構成される物質の情 発熱)までのグループも同様に重要ではない.(入射イオ ン原子間の相互作用は、入射イオンが基板中に原子として 多数残存しない場合、物理スパッタリング現象に影響がな いはずなので、こうした記述子が重要でないことは、物理 的に明らかであるが、そのことが、データ駆動解析から導 かれている.)

図3をまとめ、重要な記述子を各グループから4つ挙げ ることができる.target_mass(基板原子の質量),target_ heat_of_formation(基板物質の生成熱),ion_mass(入射 イオンの質量),ion_vdw_radius(入射イオン原子のファ ンデルワールス半径)である.これは図2の4つ記述子数 のときの最も重要な記述子と一致している.5個以上の記 述子の場合はtarget_mass,target_heat_of_formationは同 じであるが,ion側の記述子の組み合わせだけが異なって おり,これはion側の ΔR^2 の複雑な構造を反映していると 思われる.

さて、今回我々は山村・俵の式からデータを作成したの だが、その式に現れないion_vdw_radius 記述子(入射イオ ン原子の半径)の重要性が高いと回帰で評価した.データ からは記述子が4つ必要でion_vdw_radius が重要なのは 間違いないのだが、これは、データの生成元である式(山 村・俵の式)には、本来含まれていない情報である.これ はデータ駆動的解析手法の適用の失敗であろうか.以下、 この点について、考察する.

まず第一に注目すべきなのは、本章の手法では、山村・ 俵の式という解析式の因果関係でなく、その式が生成する データを用いて、データの相関により重要な記述子を決め ているという点である.このため、目的変数(ここでは、し きい値エネルギー E_{th})が、多数の記述子に複雑に依存する 場合、そのなかで、数値的に相関が高い記述子は、重要性 が高いと評価される.本章の研究では、特に、イオン側の 記述子(入射イオン原子に関する物理量)に関して、その ような評価が現れたと考えられる.

また,第二に注意すべき点は,山村・俵の式におけるし きい値エネルギー $E_{\rm th}$ の表現が,先行研究の結果を大きく 引きずっていて,現実の物理機構と異なる表式を使用して いる可能性がある,という点である.スパッタ率回帰とい う点では山村・俵の式は,十分に意味があると思われる が,一方, $E_{\rm th}$ の回帰図(文献[1]の図2)を見ると,同じ 質量比でも直交する方向に,少なくとも,もう一軸あるの が見て取れる。物理スパッタリングの原子レベルの機構を 考察すると、基板原子と入射イオン原子の大きさの比によ り、基板の原子をはじき出す(スパッタリグを起こす)深 さが,異なると考えられる.入射イオンの半径が,基板原 子の半径に比べて大きい場合, 基板表面でスパッタリング が起きるであろうし、その逆の場合、入射イオンは、基板 深くに入射され、基板物質内部での衝突の連鎖により、表 面からの基板原子のスパッタリングが起きると考えられ る. 基板物質内部における衝突過程は、特に、入射イオン エネルギーが高い場合において、より重要であると考えら れる. 基板内部における衝突過程は、原子間ポテンシャル から計算されるはずの物理量なので、対応する散乱断面積 に相当する物理量があることは容易に想像される.しかし ながら,山村・俵の式のEthの表現においては,こうした物 理量が顕わに見えない形になっている.また、もし何かの 半径比が重要であるため、本解析により、記述子 ion_vdw_ radius(入射イオン原子のファンデルワールス半径)が重 要な記述子として選ばれたのならば、基板側の原子半径に 関係した記述子が重要と判定されても良さそうである.こ の点は Eth の定義を含めて、元データを用いた更なる解析 が必要と思われる.

3.3.3 スパッタリング率を最大化するイオン入射エネル ギー

次に、山村・俵の式でスパッタ率が最大になるイオン入 射エネルギー E_{max} の weak relevance による対話的な解析 結果を図4に載せる.このエネルギー値 E_{max} は、しきい値 エネルギー E_{th} とは異なる物理機構で決定されているはず である.この最大スパッタ率を与えるエネルギー値 E_{max} は、山村・俵の式では、かなり複雑な式の数値的な最大値 として与えられる.この場合は、記述子は、ion グループと target グループという2つの単純な形で分けることがで き、それぞれで重要な記述子は ion_mass (入射イオンの質 量)と target_mass (基板原子の質量)という単純な形に書 けることがわかる. $R_{best}^2 = 0.9985$ であるが、記述子 ion_mass と記述子 target_mass だけ用いた R^2 は 0.9970 でありこの2つの記述子で実際十分であろう.

3.4 まとめ

はじめに述べた通り、単原子種間の多体衝突が引き起こ す物理現象である物理スパッタリングといえど、物理的に はかなり複雑な過程であり、これまでの研究が、先行研究 を引きずって定式化がされたことも否めないだろう.本研 究では、これまでとは全く異なるデータ駆動解析を用い、 subgroup relevance analysisを用いることで、例えば、物理 スパッタリングの基本的物理量であるしきい値エネルギー *E*th と、最大スパッタリング率を与えるエネルギー*E*max に関して、それらが強く依存する物理量、すなわち、重要 な記述子が大きく異なり、かつ、またそれら記述子を与え る基準も大きく異なる、ということを示した.ここでいう 「基準」とは、図3,4の縦線で示したように、高い回帰性 能得るために必須な記述子の部分グループの選び方、定義 の仕方の基準を意味する.物理的に言うと、この「基準」で



weak relevance

図4 樹形図による *E*_{max}に対する weak relevance analysis. 横軸 は記述子間の距離 *d* を示す.

定義した部分グループが,目的変数を理解するために必須 な部分グループであり,この部分グループに含まれる記述 子が多いほど,目的変数の表す現象の複雑さを表してい る.

例えば、しきい値エネルギー E_{th} は、入射イオンエネル ギーが低い際に、基板表面から、基板原子が脱離するかど うかという条件を示す物理量であり、基板原子と入射イオ ン原子の相互作用が複雑に関係した物理量であることは、 容易に想像される.そのため、関連する物理量(重要な記 述子)の数も多いと考えられる.一方、それより高エネル ギーである E_{max} は、高エネルギーの衝突現象であり、もっ と単純に、入射イオン質量(記述子 ion_mass)と基板原子 質量(記述子 target_mass)という2つの記述子で高精度 に回帰できるということも物理的には理解しやすいことと 思う.

このような解析から目的変数(この場合, *E*_{th} および *E*_{max})を表す物理現象の物理機構に依存して, それら目的 関数を記述する重要な記述子(物理量)が全く異なること が, データ駆動解析を用いることで, 客観的に明らかに なった.すなわち,データ駆動的解析は,背後にある物理 の大きな違いを客観的に指摘することが可能である.今後 は,対話的に最適なモデルを作成しながら,更に同様な作 業を進めることにより,重要かつ直接的に相関する記述子 を過不足なく取り込んだモデルの作成も可能であろう.

本章では、紙面の都合で示していないが、スパッタリン グ率それ自体も、十分に回帰が可能である.今後は実験値 を更によく回帰するスパッタリング率の簡易的な式を与え ることや、化学スパッタリング率への適用も視野に入れて 研究を行っていく予定である.

3.5 最後に

データ駆動解析は,原理から出発する演繹理論ではな く、目的に応じて最適な手法を考える対話的帰納理論であ る. データ駆動解析には、同じ目的にも、全く異なった複 数の手法が存在する.この記事では回帰能の向上と記述子 の重要性を評価するためにカーネルリッジ回帰を用いた. この解析において、クラスタリングは、記述子間の距離を 基準にして行っており、一方、回帰は、データの間の距離 を用いて行った.このように、本解析では、データから得 られる情報を最大限に利用してデータ解析を行っている. また、ここで用いたカーネルリッジ法は、情報理論の初心 者でも知っている手法の1つで、既に研究しつくされてい ると思うかもしれない.しかし、カーネルリッジ法を、デー タ空間のクラスタリングに直接利用する手法を開発した最 近の木野,ダムらによる研究成果もあり[9],データ駆動 科学の観点から、まだまだ発展の余地がある. 情報理論と いうと、現在はディープラーニングが全盛であるが、目的 に対して手法が適切かどうかを考えてから適用したほうが 賢明であるのは言うまでもないことを最後に記しておく.

参考文献

- [1] T. Tayamura and H. Tawara, At. Data Nucl. Data Tables 62, 149 (1996).
- [2] T. Parr *et al.*, https://explained.ai/rf-importance/
- [3] L. Yu and H. Liu, J. Mach. Learn. Res. 5, 1205 (2004).
- [4] S. Visalakshi and V. Radha, IEEE Int. Conf. Computational Intelligence and Computing Research (2014) p. 1.
- [5] K. Nagata et al., IPSJ Online Trans. 8, 25 (2015).
- [6] R.K. Janev et al., J. Nucl. Mater. 290, 104 (2001).
- [7] Kh I. Grais *et al.*, Phys. B : Condensed Matter **405**, 1775 (2010).
- [8] Hieu Chi Dam et al., J. Phys. Soc. Jpn. 87, 113801 (2018).
- [9] Duong-Nguyen Nguyen *et al.*, J. Phys.: Mater. **2**, 034009 (2019).



4. トカマクプラズマ運転への応用展開

4. Application Development for Tokamak Plasma Operation

若月琢馬, 横山達也¹⁾, 大山直幸, 山田弘司^{1,2)}

WAKATSUKI Takuma, YOKOYAMA Tatsuya¹⁾, OYAMA Naoyuki and YAMADA Hiroshi^{1,2)} 量子科学技術研究開発機構,¹⁾東京大学大学院新領域創成科学研究科,²⁾自然科学研究機構 核融合科学研究所 ^(原稿受付:2019年6月13日)

トカマクプラズマ運転への応用について,異なる源流と思想を持つニューラルネットワークと統計的機械学 習によるスパースモデリングそれぞれに基づく具体的な事例を紹介し,この方面への機械学習のアプローチの動 向と展開を議論する.ニューラルネットワークの応用例は内部輸送障壁を伴うプラズマのイオン温度勾配の制 御,スパースモデリングの応用例はディスラプション予知を課題としたものである.これらは輸送特性の変化や 破壊的突発現象という非線形性が際立った端的な例であり,いずれも,要素還元された物理の時間発展微分方程 式で表現するようなモデルによって精確に予測し,制御することは現状として難しい.このため,実験およびシ ミュレーションからのデータと機械学習の手法を用いてその解決をめざすデータ駆動型アプローチが近年注目さ れている.世界的に実機への応用は未だ途上であり,様々な試みがなされる中,ここで紹介する2例はトカマク プラズマ運転の研究開発に対して,適応的制御と仮説の提供という大きな展開の可能性を持っている.

Keywords:

neural network, deep learning, internal transport barrier, sparse modeling, support vector system, disruption predictor

4.1 トカマクプラズマ運転におけるデータ駆動 型アプローチ

本小特集の背景として既に論じられているように,人口 知能や機械学習の物理への応用が盛んになっている[1,2]. プラズマは生物ほどではないにしろ,複雑系の典型であ り,要素還元された物理モデルによってシステム全体の挙 動を理解,すなわち予測し,制御することはできるであろ うか?特に本章で議論するトカマクプラズマにあっては, 国際熱核融合実験炉ITERの実験開始や原型炉建設を見据 えた時間軸に沿って,このような対象に対して要素還元的 なアプローチと相補的・相乗的にデータ駆動型アプローチ によって研究開発の加速を図ることは理に適ったものと言 える.

本章では、データ駆動型アプローチの方法論として、機 械学習の中でも異なる源流を持つ、ニューラルネットワー クとスパースモデリングの具体的応用例を紹介する.

強化学習にニューラルネットワークを利用した技術は深 層強化学習と呼ばれ,近年,Alpha GO[3]に代表されるよ うにゲーム[4]やロボット制御[5]を対象にして目覚ましい 発展を遂げている.ここでは,内部輸送障壁を伴うプラズ マのイオン温度勾配を加熱パワーで制御するシステムの, 輸送シミュレーションによるデータを元とする学習を通じ た開発が述べられる.

 一方,統計的機械学習の流れにあるスパースモデリング
 [6]とは、様々な分野に高次元データに共通して潜在する National Institute for Fusion Science, Toki, GIFU 509-5292, Japan スパース(疎)性を利用し、効率的に最大限の情報を抽出 することをめざすものである.いわゆる「オッカムの剃刀」 を合理的に手にする方法論と言える.ここでは、ディラプ ションの有無という分類を未知のデータに対して精度良く 予測して行う分類器の開発が述べられる.そこでは、特に 2クラス分類問題の手法であるサポートベクトルマシン (Support Vector Machine)[7]が利用される.

4.2 イオン温度勾配制御への応用

4.2.1 内部輸送障壁を伴うプラズマの制御

実験やシミュレーションで得られるデータに基づく学習 を制御システムに利用する一例として,イオン温度勾配制 御への応用が検討されている.

JT-60Uでは高性能プラズマの定常維持をめざして,中 性粒子ビーム入射 (NBI)を用いた内部輸送障壁 (ITB)を 持つプラズマのイオン温度勾配の実時間制御実験が行われ た[8]. ITB プラズマではイオン温度勾配の応答が非線形 性を示すため,比例・積分・微分 (PID)制御を用いながら も,比例ゲインをプラズマ中心のイオン温度に依存する可 変の値とすることで実時間制御を実現したが,可変ゲイン のイオン温度依存性を決定するために,事前に NBI に対す るイオン温度分布の応答特性を調べるための放電を行う必 要があった.

しかしながら, ITB プラズマにおけるイオン温度分布の 応答特性は, 第一壁のリサイクリング量など実験条件の違

corresponding author's e-mail: yamada.hiroshi@nifs.ac.jp

いによって大きく変化するため,幅広い運転条件に適用で きるフィードバック制御を実現する可変ゲインを決定する のは困難である.また,長時間放電時にリサイクリング量 が時間とともに変化することによって,ITBの特性が動的 に変化してしまうような場合にも適切な制御を行うことは 難しい.そこで,データ駆動型アプローチとして,統合輸 送コードを用いてイオン温度分布の応答特性を様々に変化 させたプラズマに対する制御シミュレーションのデータを 作成し,それらに対して学習を行うことで,幅広い運転条 件に適応して適切な制御を行うことができるシステムを構 築することをめざした.

4.2.2 深層強化学習のアルゴリズム

ここでは、学習したシステムの動作をJT-60Uの実験 データと比較して検証するため、実験と同様に荷電交換分 光計測 (CXRS) による2つの計測点間のイオン温度差 ΔT_i の制御を通じてイオン温度勾配を制御することを考え る. ITB プラズマの MHD 不安定性を回避することをめざ し、2つの計測点は規格化小半径 $\rho \sim 0.4$ に存在する q = 2の有理面を挟んだ2点 ($\rho \sim 0.3, 0.5$) とした.

イオン温度差 ΔT_i 制御のための最適な加熱 NBI パワー P_{NB} はプラズマの輸送特性,特にイオンの熱拡散係数 χ_i の空間分布に依存する.しかし,ITB プラズマの χ_i の時空 間発展を実験前に正確に予想することは難しく,適切な P_{NB} の波形を事前に決定することは困難である.一方で, P_{NB} に対する ΔT_i の応答特性は現在から過去一定の時間の P_{NB} と ΔT_i の計測データから予測できると期待できる.そ こで,以下の状態ベクトル \mathbf{s}_i

$$\mathbf{s}_{j} = [P_{\text{NB}}(t_{j}), P_{\text{NB}}(t_{j-1}), \cdots, P_{\text{NB}}(t_{j-k}), \\ \Delta T_{i}(t_{j}), \Delta T_{i}(t_{j-1}), \cdots, \Delta T_{i}(t_{j-k}), \\ \Delta T_{i}^{\text{target}}(t_{j+1})]$$
(1)

を入力し,最適な P_{NB} を出力できるニューラルネットワークを学習することとした.ここで, t_j はj番目の制御ステップの時刻, $\Delta T_i^{\text{target}}$ は ΔT_i の制御目標である.

学習のためには、サンプルとなる制御シミュレーション のデータを作成する必要がある.NBIの入力パワーは使用 するユニット数によって決定され、JT-60Uでは7つの離 散値を取る.そのため、100ステップ程度の制御周期分のシ ミュレーションデータを網羅的に作成しようとした場 合、7の100乗回のシミュレーションを行う必要となって しまい、現実的ではない.そこで、制御性能の向上に効果 的な学習サンプルを選択的に収集することで、少ない学習 サンプルから効率よく制御システムの学習を行う必要があ る.

試行錯誤を通じて制御システムを訓練する試みの一つに 強化学習がある.強化学習の枠組みでは、学習に用いるサ ンプルの収集と制御システムの訓練を同時に行い、学習の 各時点で制御システムが最適だと予想する解の近傍のサン プルを重点的に収集する.これにより、少ないサンプル数 (試行回数)で効率よく制御システムの性能を向上するこ とが可能になる.

強化学習では学習のために reward (報酬) と呼ばれる量

が定義される.これは、制御システムの各制御ステップに おける制御の"よさ"を表す量であり、この量を最大化す るように制御システムは学習される.そこで、 ΔT_i 制御を 行うシステムの学習のために、各制御ステップの ΔT_i の制 御誤差が小さくなるにつれて大きくなるような reward を 設定した.ここで、ある制御ステップにおける reward を r_j 、制御出力ベクトル(ここでは $P_{\rm NB}$ のみを成分とする 1次元ベクトル)を \mathbf{a}_j とするとき、強化学習の問題設定 は、ある状態ベクトル \mathbf{s}_j が与えられたとき、それ以降の制 御ステップで得られる reward の和 $R_j = \Sigma_k r_{j+k}$ を最大化す るように制御出力ベクトル \mathbf{a}_j を最適化することと定義で きる.

強化学習にニューラルネットワーク,特に従来では学習 の難しかった多層ニューラルネットワークを利用した技術 は深層強化学習と呼ばれ,目覚ましい発展を遂げている. 深層強化学習のアルゴリズムは年々開発が進んでおり様々 な種類が存在するが、ここでは ΔT; 制御システムの学習に 用いた Actor-Critic 法と呼ばれるアルゴリズム[9-11]の概 要を説明する (図1参照). Actor-Critic 法では状態ベクト ル s; に対する最適な制御出力ベクトル a; の関係を表す方 策関数 $\pi(\mathbf{s}_i)$ と、状態ベクトルが \mathbf{s}_i である時点で、制御出 カベクトルa;が選択されたときの、その後の報酬和R;を計 算する行動価値関数 $Q^{\pi}(\mathbf{s}_i, \mathbf{a}_i)$ を考え, これらをそれぞれ ニューラルネットワークで近似する. ランダムに初期化さ れた方策関数 π(s;) に基づいて制御シミュレーションを行 うことから始まり、試行錯誤を通じて得られる s_i , a_i , r_i の組み合わせから $Q^{\pi}(\mathbf{s}_i, \mathbf{a}_i)$ の予測誤差を最小化するよう にニューラルネットワークを訓練する. そしてそれと同時 に、 $Q^{\pi}(\mathbf{s}_i, \mathbf{a}_i)$ の予測に基づいて、得られる報酬和が多く なる制御出力ベクトル a; が選ばれる確率が上がるように 方策関数 $\pi(\mathbf{s}_i)$ のニューラルネットワークのパラメータを 更新する.この繰り返しにより、最適解周辺の報酬和の予 測精度の改善とそれに基づく方策関数の改善を通じ, 効率 的な制御システムの最適化を達成することができる.以上 が使用した深層強化学習アルゴリズムの概要である.

なお,深層強化学習のアルゴリズムの特性上,必要とす る制御特性を獲得するためには reward の適切な設計が重 要である.例えば,ニューラルネットワークの学習を安定 に行うためには reward の値を 0 から 1 の間の値に tanh



図1 Actor-Critic法を用いたイオン温度差⊿T制御の深層強化学 習のフローチャート.

関数などを介して規格化するのが一般的であるが,規格化 のスケールを小さくとりすぎると,初期のランダムな方策 では reward が有意に大きくなるケースに遭遇する確率が 非常に少なくなってしまい,学習が進まなくなる.一方で 規格化のスケールを大きくとりすぎると,大きな制御誤差 が残った状態でも reward が頭打ちとなり,それ以上学習 が進まなくなる.そこで,最終的に得たい制御成績と学習 のためにかける計算時間との兼ね合いから,適切な規格化 のスケールを選択する必要があった.

4.2.3 シミュレーションを用いた学習と結果

ここからは、実際に学習したイオン温度差 *ΔT*;の制御シ ミュレーションについて説明する.シミュレーションは統 合輸送コード TOPICS [12] を用いて行った. NBI の入射位 置やエネルギー、プラズマ形状、プラズマ電流分布、そし て電子密度分布は JT-60U の実験データを使用し、イオン 温度分布と電子温度分布の時間発展を計算した. 1回のシ ミュレーションで2.1秒間の温度分布の時間発展を計算し、 その間 0.02 秒周期で P_{NB} 制御を行う.幅広い輸送特性のプ ラズマに対して学習するため,弱い ITB プラズマから強い ITB プラズマまで、4段階の勾配強度についての熱輸送モ デルをシミュレーション開始時にランダムに採用してシ ミュレーションを行った.数千回程度のシミュレーション 結果を学習することにより、4種類すべての熱輸送モデル に対して適切な AT: 制御ができるようになった. これによ り、学習した制御システムでは与えられた状態ベクトル s_iから, ITB の強さに依存して変化する ΔT_i の応答の強さ を推定し、その応答特性に適応した適切な制御を行うこと ができるようになることがわかった.

しかし、一般にデータに対する学習で得られた最適化シ ステムは、学習に使ったサンプルに対して高い性能を示し たとしても、学習サンプルとは異なる新規のデータに対し て望ましい結果を得られない、いわゆる過学習の可能性が ある. そこで、訓練された制御システムが実際の実験に適 用可能であるかどうか JT-60U の実験データを用いて検証 した.実験データから,ある P_{NB}の波形とその時の *ΔT*_i の時間発展が得られるが、制御のシミュレーションでは実 験時とは異なる PNB 波形となった時の △Ti の応答を予測す る必要がある.そこで,JT-60U実験のイオン温度,電子温 度分布の時間発展を再現する熱輸送モデル(実験データに 基づく熱輸送モデル)を構築し、そのモデルに対する △Ti 制御のシミュレーションを行った.その結果,図2に示す 通り、学習に使ったモデルとは異なる、実験データに基づ く輸送モデルに対しても適切な *ΔT*; 制御が行えることがわ かった.また,示している2つの結果は、トロイダル磁場 を変更した影響でITBの強さが大きく異なる2つの放電を 模したモデルに対する制御結果であり、実験で現れる幅広 い応答特性に適応して制御が行える可能性があることを示 す結果である.

4.2.4 イオン温度勾配制御への応用 - まとめ-

応答特性の予測が困難な内部輸送障壁を伴うトカマクプ ラズマの制御への強化学習の応用を紹介した.統合輸送シ ミュレーションを用い,加熱パワーに対するイオン温度勾



図2 JT-60Uの実験データに基づく輸送モデルに対して,強化学 習を用いて訓練した ΔT_i制御システムの動作を検証した結 果. 点線は実験と同じ P_{NB}入射波形での計算結果を示す. この ΔT_iが実験時の計測結果を再現するようにそれぞれの 放電に対して輸送モデルが調整されている. この ΔT_iを制 御目標として制御を行った結果が実線で示されており, ITB の強さの異なる 2 放電を模したシミュレーションにお いて, 十分よい制御を行えることが示されている.

配の多様な応答特性に対して強化学習を行うことによって 制御システムを構築した.このシステムは実際に実験で現 れる内部輸送障壁の応答特性を模したシミュレーションに 対しても適切な制御を実現できるものであり,今後,様々 な条件に適応した制御を可能とするシステムへ展開できる と期待される.原型炉ではより広範なパラメータ範囲にお けるロバストな制御システム,すなわち適応的な制御が必 須である.強化学習を用いた制御システムの最も大きな特 長はこの適応的な制御を実現できる,という点にある.

4.3 スパースモデリングによるディスラプション予知

4.3.1 機械学習を用いたディスラプション研究

ディスラプション現象は、トカマク方式の核融合プラズ マに特有の突発的な崩壊現象である.ディスラプションの 回避・緩和・予知はトカマク方式の核融合炉を実現するた めに克服しなくてはならない最重要課題の1つであるが、 その物理的背景は未だ完全には解明されてはいない [13,14].

中でもディスラプションの発生を予知することをめざす 研究が, JET, DIII-D などの実験装置で行われている [15-17]. これらの研究ではニューラルネットワークやサポー トベクトルマシン (SVM) といった機械学習モデルに放電 中のプラズマパラメータの値を入力し,放電がディスラプ ションを起こすか否かを判定するという問題設定がよくな される. このような研究では,モデルに入力するプラズマ パラメータは各々の研究者の物理考察に基づいて選択され ることが多い.一方,ディスラプション現象に関連するパ ラメータを偏りなく,適切かつ合理的に選択することがで きれば,予知の性能はさらに向上できることが期待され る. 本セクションでは,機械学習を用いたディスラプショ ン予知研究に全状態探索を用いたスパースモデリングを導 入し,入力パラメータの選択を実施した例を紹介する.

4.3.2 全状態探索を用いたスパースモデリング

分類問題における変数選択では、単に個々の変数の分布

だけから検討するのではなく、変数同士の組合せによる効 果を十分に考慮する必要がある. そこで, 実現可能なすべ ての組合せについてモデルの評価と訓練を行って最適な変 数の組合せを求める,全状態探索(Exhaustive search, ES)の手法が考案された[18].しかしESには、パラメー タの数 N が増えると変数の組合せの数が指数関数的に増 えるという問題がある.

そこで、この問題を解決するためにK-スパース全状態探 索 (ES-K) という拡張を用いる. ES-K では, 変数の最適な 組合せはK個のパラメータからなる, すなわちK-スパース であると仮定して、考えられる_NC_K通りのすべての組合せ を網羅的に調べ、最適な組合せを求める.

最適なパラメータの組合せを求めるために、 それぞれの 組合せで得られた予知器モデルの未知のデータに対する分 類性能である汎化性能を比較することが必要である. ここ で用いられるのが交差検証法である. 交差検証法では、利 用可能なデータを訓練データと評価データに分割し、訓練 データを用いて訓練したモデルの評価データに対する分類 性能を汎化性能とする. ここではこのプロセスを10回実施 して結果を平均する10分割交差検証法を使用して、訓練 データと評価データの分割によるデータの偏りの影響を除 外している.

4.3.3 ディスラプション予知器モデルの作成

1) データセットの作成

ここではJT-60Uで行われた高ベータプラズマ実験中の ディスラプションを対象とした. この実験キャンペーン は、プラズマ回転を利用して抵抗性壁モードの成長を抑制 し, 高いベータ値のプラズマの生成をめざしたものであ る. ディスラプション発生前における規格化ベータ値 β_N は、キンク不安定性が生じる目安である壁なし限界ベータ $\beta_n^{no-wall} \sim 3l_i$ を超えるものが多い[19].

この実験キャンペーン中の放電データを用いて機械学習 モデルを訓練・評価するためのデータセットを作成した. データセットには、ディスラプションに関する10種類の巨 視的なパラメータ $(l_p, \beta_N, \beta_P, l_i, q_{95}, \delta, \kappa, |B_r^{n-1}|,$ $f_{\rm GW} = \overline{n}_{\rm e}/n_{\rm GW}, f_{\rm rad} = P_{\rm rad}/P_{\rm input},$ それぞれ, プラズマ電流, 規格化ベータ,ポロイダルベータ,内部インダクタンス, 安全係数,三角度,楕円度,磁場揺動強度,グリーンワル ド密度割合, 放射パワー割合) とそのうち7種類のパラ メータの時間微分値,及び空間分布を持つ4個のパラメー タとその小半径方向微分値 (V_t , $dV_t/d\rho$, T_i , $dT_i/d\rho$, ρ/a , s, それぞれ, トロイダル回転速度, その径方向微分, イオ ン温度、その径方向微分、規格化小半径、磁気シア)から たる

各放電は予めディスラプション放電・非ディスラプショ ン放電に分類した.このうちディスラプション放電とは, プラズマ電流の減衰が始まった時刻を基準時刻として,あ る閾値以下の時間で電流が消滅している放電のみを指すも のとした.

2) サポートベクターマシンを用いた予知器モデル

SVM[7]は教師あり機械学習モデルの一種であり、多次 元の入力データ x_i を予め設定したラベル $y_i \in \{-1,1\}$ に

従って分類する分類器として用いることができる.本研究 では、分類境界面の方程式が $w \cdot x + b = 0$ と記述できると仮 定する線形 SVM を使用した.線形 SVM の訓練,すなわち 分類境界の方程式中の重みw 及びバイアスbの決定は,両 クラスからの距離が最大になるように決定される.この方 法はマージン最大化(Margin Maximization)と呼ばれる.

3) モデルの訓練と評価

モデルの訓練においては、訓練データに含まれるすべて のデータを個別のデータ点として取り扱っている.一方 で、モデルの評価においては各放電を時系列データとして 取り扱うことで、ディスラプション予知器の実時間での運 用を模擬し、ディスラプション発生前の各時刻における予 知性能を計算することを可能にしている.

ディスラプション予知器には,「ディスラプションの発 生を早く正確に予知する」「ディスラプションが発生しな い場合に誤って警報を出さない」の2つの異なる性能が求 められる. そこで、モデルの評価基準には以下の2種類を 用いた.

予測成功率 (Prediction Success Rate, PSR)

正しくディスラプションと判定された放電の数 ディスラプション放電の総数

誤警報率 (False Alarm Rate, FAR)

- <u>誤ってディスラプシ</u>ョンと判定された放電の数 非ディスラプション放電の総数

ES-K の結果は、ディスラプション発生の 200 ms 前から 30 ms 前までの 5 ms 毎の累積 PSR および累積 FAR を用い て比較した. K=7の場合の結果を示した図3(a)のよう に、縦軸に PSR、横軸に FAR をとった平面に ES-K で求め た組合せの数をプロットした2次元ヒストグラムを2次元 状態密度図 (2D-DoS, Density of Status) と呼ぶ. 組合せ同 士の比較には、理想的な予知機の性能である PSR=100%, FAR=0%を表す2D-DoS上の点から各組合せによる性 能までの距離を用いた.この距離が小さいほど予知機の性 能が理想に近く、良い性能であると言える.また、図3(b) には、各組合せに含まれるパラメータを濃淡で示した.各 列は組合せに対応し、左から理想的な性能に近い順に並ん でいる. このような図をインディケータダイアグラムと呼 ぶ.



図3 ディスラプションの発生の30 ms前でのES-7-SVMの結果 を示す(a) 2D-DoS と(b) 理想的な性能に近い組合せに含ま れるパラメータを示すインディケータダイアグラム.

4.3.4 全状態探索の結果

図4に, ES-K-SVM を実施した結果を示した.各Kにおいて最も理想的な性能に近い性能を示した組合せについて,その時の理想的な性能との2D-DoS上での距離を図4(a)に,各組合せに含まれるパラメータを図4(b)に,それぞれ示した.K=23の結果は,データセット中のすべてのパラメータを用いた場合の結果であり,適切にパラメータを選択することでディスラプション予知器の性能を向上できることが示された.最も理想的な性能に近くなったのはK=7のとき,すなわち7個のパラメータからなる組合せを用いたときであるが,その前後では距離が横ばいであり,組合せに含まれるパラメータも共通していることが読み取れる.

ここで、図**3**に示した*K*=7の場合の結果を見ると、上 位の結果には β_{P} , q_{95} , κ , f_{GW} , T_i が共通に含まれている. SVM で得られた境界面の方程式中の重み付けを見ると、 これらのパラメータの重みは他の共通でないパラメータの 重みよりも大きく、中心的な役割を果たすパラメータであ ると考えられる.

これらのパラメータについて,上位6組の組合せ中での 重みを平均し,平均化された分類境界面の方程式を次のよ うに得た.

 $1.32\beta_{\rm P} - 0.288q_{95} + 1.57 \kappa + 1.58f_{\rm GW} - 0.889T_{\rm i} - 1.61 = 0$

この表式は、ディスラプションの起こりやすい領域とそう でない領域との境界面であり、抽出されたパラメータに基 づくディスラプションの発生しやすいパラメータ領域の表 現と解釈することができる.

4.3.5 スパースモデリングによるディスラプション予知 -まとめ-

機械学習を用いたディスラプション予知研究にスパース モデリングを導入し,機械学習モデルに入力するプラズマ パラメータを選択した研究を紹介した.入力パラメータを 適切に選択することでディスラプション予知の性能を向上 できることが示されたほか,抽出されたパラメータに基づ いて,ディスラプションの発生しやすいパラメータ領域を 表現することができた.

スパースモデリングの特長は、ここで取り上げたディス ラプション予知のように要素還元的なアプローチではモデ ル化が困難な課題に対して、高次元データから情報を抽出 することによってモデルや仮説を提供できることである.



図4 ES-K-SVM の各 K で最も良い性能を示した組合せの(a)理 想的な性能からの最小距離と(b)それぞれの組合せに対応 するインディケータダイアグラム.

今後異なる研究対象におけるデータ駆動型のアプローチで も応用されることが期待される.

4.4 議論とまとめ

トカマクプラズマ運転に限らないが、複雑なシステムの 挙動を予測し、制御するために、モデルとなる微分方程式 を解くのではなく、機械学習によるデータ駆動型アプロー チが注目されている.ここで、機械学習と言っても魔法の 杖ではなく、多種多様な方法論があり、それぞれに特徴と 対象に対する適不適がある.さらに、学習であるからには、 既存のデータに基づく、あくまで帰納的帰結であるから、 学習(経験)していないものへの汎化誤差への丹念な対応 が、特に原型炉への研究開発の加速と学術研究としての拡 がりのためには欠くことができない.そこでは標本選択バ イアスへの注意と並んで、物理的な洞察や専門的な知見を 盛り込むことが鍵となる.

例えば、ジャイロ運動論による輸送モデリングをニュー ラルネットワークによって効率化する研究で、温度臨界勾 配が電子系とイオン系で同じ閾値を取るという物理からの 要求を取り込むことによって精度を格段に向上させた例が ある[20].また、4.3で述べたディスラプション予知では、 分離境界面を物理パラメータの線形方程式で表現したが、 物理の自己相似性を鑑みれば、指数で表現する方が仮説の 構築に、より役立てることができるかもしれない.

本章では機械学習という方法論にあっても源流と思想が 異なり,対照的とも言えるニューラルネットワークによる 深層強化学習と全状態探索によるスパースモデリングの例 を紹介した.それぞれ,より外乱に対して強い適応的制御 への展開,黒白の判定だけでなく灰色度合いの重要なパラ メータによる表現を通じた仮説へのヒントという大きな広 がりを期待させるものである.

謝 辞

4.2で紹介した研究は JSPS 科研費 JP19K14697の助成を 受けたものである. 深層強化学習についてオープンソース の深層学習フレームワークである Chainer[21]と,その強 化学習ライブラリ ChainerRL[22]を利用した.また,有益 な助言,議論をいただいた量子科学技術研究開発機構鈴木 隆博氏にも感謝申し上げる.

4.3で紹介した研究は量子科学技術研究開発機構のトカ マク炉心プラズマ共同研究により実施され,また JSPS 科 研費 JP17H03508の助成を受けたものである.さらに研究 の遂行にあたっていただいた東京大学大学院岡田真人教授 および五十嵐康彦助教からのご指導に感謝申し上げる.

参 考 文 献

- [1] 特集「物理学とAI」人口知能 33 (2018年7月) pp.319.
- [2]シリーズ「人口知能と物理学」日本物理学会誌 74 No.1 (2019)から掲載開始.
- [3] D. Silver *et al.*, Nature **529**, 484 (2016).
- [4] V. Mnih et al., Nature 518, 529 (2015).

- [5] T. Haarnoja *et al.*, arXiv preprint arXiv:1812.05905 (2018).
- [6] 科学研究費助成事業 新学術領域「スパースモデリン グと高次元データ駆動科学創成への支援と広報」(2013-2017)研究代表者:岡田真人 研究成果報告書, https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-ORGANIZER-25120001/25120001seika.pdf
- [7] C. Cortes and V. Vapnik, Machine learning 20, 273 (1995).
- [8] M.Yoshida et al., Fusion Eng. Des. 84, 2206 (2009).
- [9] R.S. Sutton and A.G. Barto, *Reinforcement Learning: an Introduction* (MIT Press, Cambridge, 2018).
- [10] Z. Wang et al., arXiv preprint arXiv:1611.01224 (2016).
- [11] T. Wakatsuki et al., Nucl. Fusion 59, 066022 (2019).
- [12] N. Hayashi and JT-60 Team, Phys. Plasmas 17, 056112 (2010).

- [13] T. Hender et al., Nucl. Fusion 47, S128 (2007).
- [14] A.H. Boozer, Phys, Plasmas 19, 058101 (2012).
- [15] A. Murari et al., Nucl. Fusion 58, 056002 (2018).
- [16] C. Rea et al., Plasma Phys. Cont. Fusion 60, 084004 (2018).
- [17] J.K.Harbeck et al., Nature 568, 526(2019).
- [18] Y. Igarashi et al., J. Phys. Soc. Jpn 87, 044802 (2018).
- [19] G. Matsunaga et al., Nucl. Fusion 50, 084003 (2010).
- [20] K.L. van de Plassche *et al.*, in proceedings of 45th EPS Conference on Plasma Physics (Prague, 2018) P2.1086.
- [21] Chainer.
- https://chainer.org [22] ChainerRL Library.
 - https://github.com/chainer/chainerrl



5. 画像計測における逆変換問題とデータ科学

5. Inverse Problems in the Imaging Diagnostics and Its Relation to Data Science

大 舘 曉 OHDACHI Satoshi 核融合科学研究所 (原稿受付: 2019年7月20日)

近年のデータ駆動科学の発展はスパースモデリングを使った回帰問題の解の有用性を明らかにしてきた.ト モグラフィー逆変換の問題にもスパースモデリングの考え方を取り入れることが可能で,条件のわるいトモグラ フィー問題の解法として有望と考えられる.

Keywords:

sparse modeling, tomographic reconstruction.

5.1 はじめに

近年,データ駆動科学は科学技術の幅広い分野を対象と して活用され、大きな成功をおさめている. データ駆動科 学という言葉が示すものの中には多様な技法が存在してい るが、その基盤には複数の変数の間の関係性を整理し理解 する回帰分析の技法が使われている.この,回帰分析の解 法に「スパースモデリング」の考え方が極めて有効である ころが広く知られてきた.スパースモデリングは「より少 ない」数の説明変数をつかって目的変数を表現する考え方 である.なかでもL1正則化と呼ばれる手法を使えば、線形 の回帰問題をより少ない説明変数を使って表現できる.L1 正則化を実現する高速のアルゴリズムが開発されてきたこ とがスパースモデリングの手法の急速な発展を支えてい る.スパースモデリングの科学技術への応用は、科学研究 費補助金・新学術領域「スパースモデリングの深化とデー タ駆動科学の創成」1の枠組みの元で活発に行われ、ブラッ クホールシャドウの可視化[1]などに有効に活用されたこ となどから、その有効性が広く認識されるようになった. この、回帰問題のデータサイエンス的な考え方は、プラズ マ計測におけるトモグラフィー再構成の問題の対処法とか なり重なり合っており、しかもスパースモデリングを取り 入れたトモグラフィー再構成の技法は、かなり良い性質を 持っていると考えている. この分野には新しい進展が次々 に生まれており、両者の関係を筆者も完全に理解できてい るわけではないが、現在考えていることを本章でまとめて みたい.

5.1.1 トモグラフィー計測と従来の再構成の技法

高温プラズマ実験では物理量の直接測定は困難であり, 局所量を何らかの重ね合わせをした形で計測されることが

¹ http://sparse-modeling.jp/

National Institute for Fusion Science, Toki, GIFU 509-5292, Japan

多い.軟X線トモグラフィーはトモグラフィー計測の典型 的な例であるが、プラズマの外に設置した軟X線検出器を 使って、視線に沿った積分値としてプラズマの軟X線放射 強度測定を行う.積分量から局所量を推定・逆変換を行う わけである.このトモグラフィー再構成[2]の問題は本質 的に計測値の空間的な微分が必須であり、ノイズに大変弱 く、安定したアルゴリズムを開発することは積年の課題で あった.核融合学会誌にも岩間らによる一連の解説記事に より各種の技法が詳細に議論されてきた[3-5].

トモグラフィー再構成の技法を解説するための例として、図1に示すように計測器を配置した計測システムを考える.円形のポロイダル断面を持つプラズマをそれぞれ24 chの検出器アレイ5セットが観測しているという状況を模している.



図1 トモグラフィー再構成技法の説明のための仮想的な計測器 とプラズマの配置を示す.

author's e-mail: ohdachi@nifs.ac.jp

Special Topic Article

各検出器の出力を g_m ($m = 1, 2, \dots M, M = 120$) とし, 放 射強度分布を $f(\mathbf{r})$ と書けば, 計測値は検出器の視線l上で の積分であるから

$$g_{\rm m} = \int_{l} c(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \,\mathrm{d}l \tag{1}$$

となる. 2次元の放射強度分布を矩形の画素で離散化して, k 番目の画素のチャンネル m への寄与を h_{mk} とすれば,

$$g_m = \sum_{k=1}^{K} h_{mk} f_k \tag{2}$$

と書ける. 行列形で書き直せば,

$$\mathbf{g} = H\mathbf{f} \tag{3}$$

となる. $H \operatorname{th}_{mk}$ を要素とした行列で, \mathbf{g} , $f \operatorname{tl} g_m$, f_k を要素 としたベクトルである. トモグラフィー再構成問は観測値 \mathbf{g} から \mathbf{f} を推定する問題となる. ここで,多くの場合画素数 K > M である. 例えば, 図1の例では21×21個の画素を仮 定した. これは441個の未知数 (= K)を設定したことを意 味し, 観測値の個数 (ここではM=120)を考えれば決める べき未知数より関係式が少ない不良設定問題である. つま り $\mathbf{g} = H\mathbf{f}$ を満たす無数の解が存在するので, $(\mathbf{g} - H\mathbf{f})^2$ を 最小化する \mathbf{f} を解とするとはできない. 多くの解のなかか ら,可能な限り真の解に近い解を決めるために,解を制約 するペナルティー項と呼ばれる項を加えてそれを最小化す る \mathbf{f} を求めて解とすることを考える.

ベクトル**x**のノルムを一般的に $||\mathbf{x}||_{p} \equiv \sum x_{i}^{p}$ と書けば,標準的に使われている Tikhonov 正則化ではペナルティー項 として**f**のユークリッドノルム (p = 2)使用して

$$\|\mathbf{g} - H\mathbf{f}\|_2 + \alpha \|C\mathbf{f}\|_2 \tag{4}$$

の最小化を考えることになる.ここで、一般的に記述する ためにfに作用する行列*C*を導入したが、通常のTikhonov 正則化では、*C*は単位行列となる.*a*は最小化すべき二つ の項の間の重みを示す.ここで Moore-Penrose の一般化逆 行列を考えれば、 HC^{-1} の特異値分解 $U\Sigma V^{t} = HC^{-1}$ によっ て生成される、二つの正規直交ベクトル **u**m、**v**m を使って、 fは以下の級数展開として書ける[6].

$$\mathbf{f} = \sum_{m=1}^{M} \omega_m \left(\alpha \right) \frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_m}{\sigma_m} \left(C^{-1} \mathbf{v}_m \right), \qquad (5)$$

$$\omega_m(\alpha) = \frac{1}{1 + \alpha/\sigma_m^2} \tag{6}$$

ここで σ_i は Σ の対角項で特異値を示し,大きさが次第に減 少する正値をとる.このような形式に書き直せば解の意味 はより明確になる.解を構成する基底パターン $C^{-1}v_m$ (図2(a)-(d))はmの増大とともに空間周波数が増大して いく画像であり,各基底の重み(展開係数)は基底パター ンそれぞれに対応する仮想的な観測値 u_m と計測データgとの相関 $g \cdot u_m$ によって決まる.任意の関数のフーリエ展 開と比較すると,フーリエ展開においては基底パターンは 三角関数であり,展開係数がその基底関数と,もとの関数 とのコンボリューションで決めることができることを想起 すれば,この解はある種のフーリエ展開的な展開とみるこ ともできる.

 $\omega_m(\alpha)$ の式の形から明らかなように、 $\omega_m(\alpha)$ は σ_m が大きい程大きな値をとり、十分小さい σ_m に対してはほぼ0になる.すなわち、空間周波数の低い大域的な構造を主として反映して、空間周波数の高い細かい構造の寄与を無視することになる。細かい構造を反映させないことで安定な解を得るわけである.

磁場閉じ込めプラズマの断面像のトモグラフィーの場合 には放射強度がなめらかな分布を持つことが多いため(プ ラズマの輸送を考えればあまり放射強度分布が急峻になる ことは考えにくい), C として, 2次元関数のなめらかさ を示すラプラシアン演算子を近似する行列を使用すること が考えられる[7]. このときは滑らかな放射分布を持つ解 が式(4)を最小化する. **図2**(2a)-(2d)に示した分布は滑 らかであり,それらを足し合わせて滑らかな分布が得られ るとを考えれば極めて自然な手法である. **図3**に α の値に 対応した解と,その時のGCVの値を示す.GCVは,式(7) のように定義される量で,分子が示す誤差の減少と,分母 に示すフィルタリングの効果のバランスで決まり,GCV 最小付近の α が最もよい解を与えると考えられている. こ の例では $\alpha \sim 10^{-8}$ 付近に最適値があるようである.



図 2 C=Iの場合の特異値の分布を(1)に、C⁻¹vmを(1a)-(1d)に示す.(2),(2a)-(2d)はCとしてラプラシアン演算子を使用した場合を示す.(3)には色の値の関係をカラーバーとして示す.本解説で使用するグラフのカラーバーはすべて(3)で示したものと同じものである.



図 3 (a) α の値に対する GCV. (b) 再構成を試みた放射強度分布. (c1)-(c6) に C としてラプラシアンを使用した場合の解. (d1)-(d6) に C = I の場合の解を示す.

$$GCV(\alpha) = \frac{\frac{1}{M} ||H\mathbf{f} - \mathbf{g}||_2}{1 - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^N \omega_i(\alpha)}$$
(7)

どちらの手法もトモグラフィー再構成問題の本質的な悪 条件を克服してリーズナブルな分布が得られているが, *C* としてラプラシアン演算子を使用した場合の方が, スムー スな放射強度分が得られているという意味で, 核融合プラ ズマのトモグラフィー計測としてはより良い結果が得られ ているといえる.最大エントロピー法, フィシャー情報量 最小化などの手法も, 異なった形のペナルティ項を使用す る技法であると考えれば, 同じ枠組みで理解することがで きる[4].

式(6)では, 解を構成する基底パターンは計測器の視線 の配置で決まっていたが, 核融合プラズマの放射分布の特 徴, たとえば, 放射強度が磁気面上で一定になること, な どを活用した展開法も有力になる. 次節よりは基底パター ンを独立に生成し, トモグラフィー再構成に利用する場合 ことを考え, 展開係数をどのように決めるかについて議論 する.

5.2 データ駆動科学における正則化

前節で議論した Tikhonov 正則化は,データ駆動科学に おいては L2 正則化 (Ridge 正則化)と通常呼ばれる.これ はペナルティー項に説明変数のべき乗和 (p=2)を考える ためと考えられる (式(8)).p=0の場合にはこのペナル ティー項は変数の個数を意味する.最も少ない項を使って 解を表現するという意味ではこのやり方がふさわしいが, 最小化するための適切な解法が知られていないため, p = 1 OL1正則化またはLasso 正則化 (least absolute shrinkage and selection operator (Lasso) regression)がよ く使われている.

$$\|\mathbf{g} - H\mathbf{f}\|_2 + \alpha \|\mathbf{f}\|_1 \tag{8}$$

L1 正則化においても多くの不必要な展開係数がゼロに なることが期待でき,最小の説明変数で表現するという目 的を達することができる.このことは図4に示すような概 念図を使ってしばしば説明される.

ここでは二次元の図で説明するために,説明変数を2つ に減らして単純化している.図4の同心円の部分は最小二 乗項で凸の分布を持つ.式(8)の最小値はL1正則化の場合 なら|f₁|+|f₂|=constのひし形との交点,L2正則化なら



Special Topic Article

 $f_1^2 + f_2^2 = \text{const} の楕円との交点となる. L1 の場合にはひし$ 形の尖った形状の角部で最小値を取り,その場合,もう一 $つの説明変数<math>f_2$ がゼロになるわけである. L2の場合には多 くの説明変数をつかうが,説明変数のノルムが最も小さい 解が選択されることがわかる.説明変数は通常は2つより も多いが,その場合でも多次元の尖った図形と,最小二乗 項に対応する超曲面の交わる位置は尖った先端部になるこ とが期待できるためL1 正則化では多くの項がゼロになる と考えられる.

5.2.1 直交パターンを使った展開を使ったトモグラ フィー再構成とスパースモデリング

このL1 正則化を式(3)に直接適用しても結果はあまり よくない. 説明変数である画素が,多くの場所でゼロに なってしまい,なめらかな分布を得ることはできないから である.そこで,トモグラフィー解法のもう一つの有力な 手法の一つである,級数展開法への応用をここでは紹介す る.

級数展開法では,放射強度分布gが以下のようなシリーズの画像 \mathbf{b}_i で展開されることを仮定する.このシリーズの 画像は通常は互いに直交しているが,本章では必ずしも直 交していなくても,基底パターンと呼ぶこととする.

$$\mathbf{g} = \sum \beta_i \mathbf{b}_i, \qquad (9)$$

ここで β_i は基底パターンの展開係数である.これを式 (3)に代入すれば

$$\mathbf{f} = H \sum \beta_i \mathbf{b}_i = \boldsymbol{\beta} \cdot H \mathbf{b} \tag{10}$$

となる.この関係は以下のように書き直せる.

$$\mathbf{f} = \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{x},\tag{11}$$

ここで **x** = *H***b**. 展開係数 β_i は正則化の考え方を使って 以下の式を最小化する値として決める. $\beta = \arg \min_{\beta} \{\sum_i (f_i - \beta \cdot \mathbf{x}_i)^2 + \lambda \sum_i |\beta_i|^{\alpha}\}$. 展開係数 β_i が決まれば,放射強度分布 g は式(9)より簡単に求められ る. 基底パターンとしては、コーマック法[8]、フーリ エ・ベッセル展開[9]がよくつかわれており、また、斉藤の ラプラシアン固有関数[10,11]を使うことも考えらえれる.

本章の例ではプラズマの断面が円形であるので,式(12) に示すような正規直交基底であるフーリエ・ベッセル展開 の基底パターンで展開することを考える.

$$\Psi_{I}^{m}(\rho,\theta) = \exp(im\theta) \mathbf{J}_{m}(\lambda_{m}^{l}\rho).$$
(12)

ここで, J_m は m 次のベッセル関数で λ_m^l はその l 番目のゼ ロ点を示す.図5にこのフーリエ・ベッセル展開の基底パ ターンの例を示す.

図6に三種類の放射強度分布をこの展開法で再構成した 例を示す.コア部で偽イメージ(図6(b3)中心部の十字型 の部分)が出ているものの,傾向の違う3つのタイプの分 布に対して安定した再構成ができていることがわかる.こ の再構成はスパースモデリングの考え方を使ったものであ



図5 フーリエ・ベッセル展開で作った基底パターンの例.



図6 フーリエ・ベッセル展開とL1正則化を使った再構成例.シ ンセティックイメージを(a1)-(a3)に示し再構成例を (b1)-(b3)に示す.(1)は磁気軸をシフトさせた中心ピー クの放射強度分布.(2)は周辺部にピークした放射強度分 布.(3)はm=2の磁気島的構造を持つ放射強度分布を仮定 した.

り,この例ではL1正規化を用いて各項の係数を決定してい る².フーリエ・ベッセル展開が初めて長山[9]により提案 されたときには,*m*,*l*に上限を設定し,細かい構造をもつ *m*,*l*に対応する項を使わないことでノイズに強い安定し た解を作っていた.前節で議論したTikhonov 正則化と同 様にローパスフィルターを通して安定した解を得るという 戦略であった.本章で示したようにL1正則化を使った手法 では,空間周波数で要・不要を決めるのではなく,データ 自体から不要と判断できる項を積極的にゼロにして,項数 を可能な限り少なく制限している.この手法も長山の方法 と同様にノイズに強い再構成手法として成立している.

L1 正則化の場合にはノイズが大きくなって条件が悪く なっても,解に与える影響が小さいことが利点としてあげ られる.図7は、同じ磁気島タイプのパターンのシンセ ティックイメージにノイズを付加したものに対してトモグ ラフィー再構成を行った結果を示す. ラプラシアン型のペ ナルティー項を持つ Tikhonov 正則化(a) とフーリエ・ベッ セル展開+L1 正則化(b), フーリエベッセル展開+L2 正則 化(c)を比べたものである. L1 正則化によるものが最もノ イズの影響が小さいが、これは前節でのべたように、ノイ ズ成分に対しての重要な項のみをもちいる L1 の特質によ るものである. L1 正則化と, L2 正則化の係数を図8 に示す が、L1正則化においては多くの係数がゼロとなっているこ とがよくわかる.特に元の画像での主要項である m=2 以外の係がほとんどゼロになっている。このため、ノイズ が大きくなっても逆変換した画像に大きな影響が出ないも のと考えられる.このように、L1 正則化の考え方はトモグ ラフィー逆変換の問題に対しても有効であり、再構成が難 しい状況に対して良い結果を示すように思われる.

5.3 まとめと今後の展開

トモグラフィー逆変換の問題と,機械学習の回帰・推定 の問題とはかなり重なり合った問題であり,異なった用 語,異なった概念を使っているとはいえ,実際の処理はか なり類似している.データ駆動科学・機械学習の分野で進 展したスパースモデリングの考え方をトモグラフィー逆変 換に適用すると,かなり良好な性質を持つ解法となること が分かった.筆者らはこの手法をさらに逆変換の条件の厳 しい接線カメラ[12]の2次元イメージ逆変換の問題の解法



 図7 シンセティックイメージに対して、ノイズを付加しない (1),7.5%(2),15%(3),22.5%(4)のノイズを加えたときの再構成の例を示す.(a1)-(a4)はラプラシアン演算子を使ったTikhonov正則化、(b1)-(b4)はフーリエ・ベッセル展開+L1正則化、(c1)-(c4)はフーリエ・ベッセル展開+L2正則化を使用した逆変換.



² L1 正則化解の計算には scikit-learn のライブラリを使用した.(https://scikit-learn.org/stable/)

Special Topic Article

として活用することをめざしている[11].

本章では、基底パターンとしてフーリエベッセル展開を 用いたものを紹介した.今後の発展としては基底パターン をさらに最適化することが考えられる.本文で述べたよう に、磁気面上にフーリエベッセル展開に類似したパターン を構成した場合には、磁気面に沿ってなめらかな分布を持 つ基底パターンを使うことになるためにより少ない基底パ ターンで実験データを構成できていると考えられる.これ は、プラズマの放射強度分布がスムーズな分布を持つとい う仮定を入れた岩間の手法[7]がトモグフィー計算におい て極めて有効であることを想起すれば、その手法の自然な 拡張になっているとも考えられる.すなわち磁気面垂直方 向、水平方向の分布の滑らかさを変えて最適条件を考えた ことに相当する.この考え方をさらに拡張して実験の計測 データを学習することでトモグラフィー再構成に適した基 底パターンを生成することも有望な手法と考えられる.

また,接線からの観測の場合に二次元の基底パターンは トロイダル対称性を仮定できるトカマク等では有用である が,3次元の平衡を持つヘリカル系を対象にした場合には 適用が難しく,3次元の基底パターンを使うことも有効な 手段ではないかと考えている.斉藤のラプラシアン固有関 数を使った3次元の基底パターンを生成する試みも行われ ている.

謝 辞

この原稿を書くチャンスをくださった編集委員のみなさ ま,正則化の技法や様々な文献についてご教示下さった岩 間尚文教授,逆変換に関する議論につきあってくれました 鈴木康浩准教授に深く感謝いたします.本研究は,日米科 学技術協力事業(核融合分野)の助成を得て実施されまし た.

参考文献

- [1] K. Akiyama et al., Astrophys. J. 153, 159 (2017).
- [2] L.C. Ingesson et al., Fusion Sci. Technol. 53, 528 (2008).
- [3] 岩間尚文:核融合研究 68,586 (1992).
- [4] 岩間尚文, 大舘 暁: プラズマ・核融合学会誌 82,399 (2006).
- [5] 岩間尚文, 大舘 暁:プラズマ・核融合学会誌 92,743 (2016).
- [6] 岩間尚文:核融合研究 74,1310 (1998).
- [7] N. Iwama et al., Appl. Phys. Lett. 54, 502 (1989).
- [8] A.M. Cormack, J. Appl. Phys. 35, 2908 (1964).
- [9] Y. Nagayama, J. Appli. Phys. 62, 2702 (1987).
- [10] N. Saito, J. Plasma Fusion Res. 92, 905 (2016).
- [11] S. Ohdachi et al., Plasma Fusion Res. 14, 3402087 (2019).
- [12] S. Ohdachi *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 74, 2136 (2003).

●●● 小特集 プラズマ・インフォマティクスーデータ駆動科学のプラズマへの応用

6. まとめ

6. Summary

浜 口 智 志 HAMAGUCHI Satoshi 大阪大学工学研究科 (原稿受付: 2019年9月30日)

人間は、自然を観測し、更には、制御された条件下で自 然をより詳しく観測するための「実験」を行うことにより、 自然界に関する多くの知見を得てきた.一方、並行して、 「理論」を構築することにより、森羅万象の世界を、より統 一的に理解しようと努力を続けた.後に、近代ヨーロッパ 数学が確立されると、「理論」は、数学を用いて、より詳し く記述されるようになり、今日に至るまで、理論研究は数 学の研究とともに大きく発展してきている.これが大方、 自然科学の歴史的発展の流れであろう.

この流れに画期的な変化を引き起こしたのは,20世紀中 期における計算機(コンピュータ)の発明である.計算機 の出現により,具体的な条件下において,理論方程式の数 値解を具体的に構成することが可能となった.この研究手 法は,「数値シミュレーション」と呼ばれ,「実験」,「理 論」に続く第3の科学研究手法として,現在,確立されて いる.

近年,「データ駆動科学」は,「実験」「理論」「数値シ ミュレーション」に次ぐ,第4の科学研究手法として注目 されている[1].それは,「データ駆動科学」が,「実験」 および「数値シミュレーション」研究の生成する大量の データから,重要な情報を抽出できると期待されるからで ある.「理論」と「数値シミュレーション」が,物理学の第 一原理から,演繹的に結論を導き出すのに対して,「デー タ駆動科学」は,実験データ,あるいは,数値シミュレー ションデータから,帰納的に結論を導き出す.理論から演 繹的に結果を出す数値シミュレーションのデータを使っ て,帰納的に結論を出すというと,論理的に不自然だと思 うかもしれないが,実際の研究では,極めて有効な手法で ある.

近年,ビッグデータの活用がマスコミで話題になること が多いが,一般に,物理学研究では,ビッグデータという ほど,データの量が多くない場合が多い.この場合,不足 しているデータを,数値シミュレーションを使って補うこ とで,データの質と量を高めることが可能な場合がある. データ量が少ない場合,深層学習などを適用しても,十分 な学習が行われず効果が出ない.一方,科学研究において は、これまでの研究から、基礎原理の大体のところはわ かっていることが多い.今後、プラズマ・インフォマティ クス研究に、基礎原理から導出されたシミュレーション結 果を含める等、基礎原理に関する科学的知見を積極的に導 入することにより、データ解析の精度を高めることができ ると期待される.

本小特集で掲載した論文の場合,第2章において,原子 データを例に,不足しているデータをインフォマティクス の手法を用いて予測する方法,第3章ではプラズマ表面相 互作用研究へ,第4章ではプラズマ計測制御へ,第5章で は画像解析へのインフォマティクス手法の適用例を紹介し た.これらの研究の中にも,不足しているデータを数値シ ミュレーションにより補足する例が挙げられている.

本小特集で紹介できなかった例で、今後重要になると考 えられのが、大規模数値シミュレーション (HPC) の低コ スト化である.磁気核融合研究分野では、超並列スーパー コンピュータを用いたジャイロ運動論シミュレーション研 究が盛んに行われているが、大量のプロセッサを用いる数 値シミュレーションは、実験と同様に高コストである、ま た, 生成するデータも膨大であり, 基本方程式が明確な第 一原理から演繹した結果とはいえ、その生成するデータの 物理的意味を理解するのは、容易ではない、また、実用的 な観点から、計算精度を多少犠牲にしても、早く計算の終 了する効率的な数値シミュレーションへの要求は極めて高 い.特に、プラズマ制御にシミュレーションを活用する際 には、実際の実験と並行して実施できる実時間数値シミュ レーションの存在が理想的で, そのようなシミュレーショ ン・ツールの開発も進められている. 当然, そんなに早く 計算するためには、複雑な物理モデルは取り入れることが できず、いわゆる代理モデル (surrogate model) [2,3]を精 度よく作成することが、こうした研究を成功に導く鍵とな る.

核融合研究以外のプラズマ科学,例えば,プラズマの産 業応用分野であるプラズマ・プロセスにおいても,データ 駆動科学的手法の導入による半導体製造装置(エッチング 装置や薄膜堆積装置)の制御の高度化や,新規プロセス開

Osaka University, Suita, OSAKA 565-0871, Japan

author's e-mail: hamaguchi@ppl.eng.osaka-u.ac.jp

発の効率化など,期待される技術は多い.例えば,文献[4] では,エッチングプロセスの形状とプロセスパラメータの 相関の機械学習により,エッチングプロセス開発の効率化 に成功した例が紹介されており,また,文献[5]では,分光 データも含めた装置データと,プロセス結果の相関を明ら かにすることにより,実際のプラズマ計測を行うことな く,プラズマの内部状態を予測する技術(仮想計測:virtual metrology)開発の最新成果が紹介されている.

第1章で述べたように、マテリアルズ・インフォマティ クスでは、high-throughput screening(HTS)のような実 験技術を開発し、データの数を増やすことによって、新材 料の効率的開発が可能となった.プラズマ研究の場合、時 間発展データも多く、マテリアルズ・インフォマティクス とは異なる形のデータが豊富である.つまり、学問分野ご とに、インフォマティクスの技法は、異なった形で発展し ていくことが期待される.プラズマ科学の「理論」や「計 算機シミュレーション」が、物性物理学や流体力学の「理 論」や「計算機シミュレーション」と異なる形で独自の発 展を遂げたように、データ駆動科学的アプローチも、プラ ズマ科学特有の発展をしていくことと考えられる.プラズ マ・インフォマティクス分野の最近の研究成果は,研究会 [6,7]等で数多く発表されている.

参 考 文 献

- [1] T. Hey et al., (ed), The Fourth Paradigm Data-Intensive Scientific Discovery (Microsoft Research, Redmond, Washington, 2009.
- [2] A. Ho *et al.*, 46th EPS Conference on Plasma Physics (Milan, 2019) P5.1074.
- [3] van de Plassche, *et al.*, 2nd International Conference on Data Driven Plasma Science (Marseille, 2019) p.251272.
- [4] T. Ohmori *et al.*, Proc. Int. Symp. Dry Process, (Tokyo, Nov. 2017), pp. 9-10.
- [5] S. Park *et al.*, Plasma Process Polym. **16** (9) 1900030 (2019) (2019).
- [6] Mini-Conference on Machine Learning, Data Science, and Artificial Intelligence in Plasma Research, 60th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Bull. Am. Phys. Soc. 63 (2018).
- [7] 2nd International Conference on Data Driven Plasma Science (13-17 May, 2019, Marseille, France).





浜口智志

大阪大学工学研究科教授.東京大学理学部物 理学科卒,同大学院修士・博士課程を経て, ニューヨーク大学クーラン数理科学研究所 (大学院数学科)博士課程修了.理学博士,Ph.

D. 専門はプラズマおよびプラズマ表面相互作用の理論・シ ミュレーション.



村上 泉

自然科学研究機構 核融合科学研究所 ヘリカ ル研究部 核融合システム研究系 教授.博士 (理学)(東京大学大学院理学系研究科天文学 専攻).プラズマ原子分子過程,衝突輻射モデ

ル,分光解析,原子分子データベースなどの研究に従事.中高 生となった子ども二人と日々格闘中.原子分子データ応用 フォーラム理事長.



藤井恵介

京都大学工学研究科.光計測,原子過程,機械 学習,原子物理,プラズマ物理に関する確率的 モデリング,機械学習に取り組んでいます. 妻,子との一年間の海外滞在を終えドイツか

ら帰国しました.帰国後さっそく、日本の保育園システムを勘 違いしていたことが発覚.妻の職場復帰直前になって保育園 探しに明け暮れています.

č 々 木 明

量子科学技術研究開発機構,関西光科学研究所,上席研究 員.核融合科学研究所,大阪大学レーザー科学研究所との共同 研究を行い,プラズマ分光,原子過程のシミュレーション研 究,極端紫外リソグラフィ (EUVL)技術に関わるプラズマ物 理,複雑系の統計力学のシミュレーション研究を主なテーマ にしています.特定非営利活動法人 (NPO)原子分子データ応 用フォーラムの役員として,原子分子データベースの構築,利 用,普及の活動を行なっています.

https://www.facebook.com/akira.sasaki.969



き の ひ おり 木 野 日 織

(国)物質・材料研究機構 統合型材料開発・ 情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠 点 主任研究員.1996年に東京大学大学院理 学系研究科博士課程を終了.以前は固体物理

を研究してきました.現在は第一原理計算から自動計算によ るデータ作成,機械学習までを行うマテリアルズインフォマ ティクスを行っています.

幾世和将

DAM Hieu Chi



若月琢馬

量子科学技術研究開発機構那珂核融合研究所 先進プラズマ研究部主任研究員.2014年東京 大学 博士(理学).主に統合輸送コードや実 験を通じたトカマク放電シナリオの研究開発

を行っています.3歳の息子と0歳の娘の子育てに妻と力を 合わせて奮闘中.趣味はサッカー.今年の年会での第二回 Plasmer League Football でゴールを決めることを目標として, 毎日昼休みのミニゲームに精を出しています.



横山達也

東京大学大学院新領域創成科学研究科先端エ ネルギー工学専攻博士課程1年.修士課程在 学時より,JT-60Uにおけるディスラプション 現象のスパースモデリングを用いた解析に取

り組み,博士課程からは LHD におけるプラズマ崩壊現象にも 着手.アウトリーチ活動に興味があり,今年度は北海道大学の 科学技術コミュニケーター養成講座を遠隔受講しています.



おお やま なお ゆき大山直幸

量子科学技術研究開発機構 那珂核融合研究 所 先進プラズマ計画調整グループ&先進プ ラズマ実験グループ・グループリー

ダー. 1999年筑波大学大学院博士課程物理学 研究科・博士(理学)取得,2019年より現職. JT-60では,高 圧力プラズマの定常化研究,Hモード・ELM特性研究,ミリ 波反射計開発に従事.現在は,JT-60SA計画全体調整や計測装 置開発の責任者として,JT-60SAで早く実験ができるよう奮 闘中.



やま だ ひろ し

自然科学研究機構核融合科学研究所教授,東 京大学大学院新領域創成科学研究科客員教 授.これまで磁場閉じ込めに関する研究に回 帰統計やベイズ統計を使ってきました.もう

ちょっと発見的なアプローチができないかと、機械学習を若 い人におわれて眺め始めました.そもそも予知とは何ぞ や?,あるいはエルゴード仮説との関係は?とついつい哲学 的思索に入り込んでしまいます.楽しみつつも,お見せできる 成果をあげないといけません.



大舘暁

核融合科学研究所・ヘリカル研究部・教授. 工学博士(名古屋大学).専門はイメージング 技術を使った揺動計測.最近はデータサイエ ンスに取り組んでいます.楽しみにしていた

小説が18年ぶりに出版・完結?, MCUは今夏でひと区切り, SW は年末に完結, Eva は来年完結予定.いろいろ終わるけど,また新しいお楽しみを見つけたいものです.