

創発的研究支援事業

終了報告書

研究担当者	杉山 磨人
研究機関名	国立情報学研究所
所属部署名	情報学プリンシプル研究系
役職名	准教授
研究課題名	過剰パラメータ化が導く学習原理の再設計
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2022 年 9 月 30 日

研究成果の概要

現代的な機械学習手法が持つ高い汎化性能を達成するためには、過剰パラメータ化と呼ばれるデータ数をも超える大量パラメータを使用するモデルが重要であるが、一旦汎化誤差が減少した後増加して再び減少する二重降下現象など、従来のモデル選択基準やバイアスバリエーショントレードオフでは適切な取り扱いが困難であることが知られており、今後の機械学習の発展には理論と実践双方からの研究推進が欠かせない。そこで本研究では、空間の体積などを利用した幾何学的なアプローチを創出することで、過剰パラメータ化のもとでの汎化性能を理論的に解析し、理論をもとに過剰パラメータ化を活用する機械学習アルゴリズムを構築することを目的として研究を実施した。特に、線形モデル、決定木アンサンブルモデル、生成モデルといった代表的な機械学習モデルについて、過剰パラメータ化の解析と検証を実施した。

特筆すべき成果として、決定木アンサンブルにおける過剰パラメータ化の解析が挙げられる。決定木アンサンブルは、機械学習応用で頻繁に用いられている手法であり、幅広い状況で良い性能を示す。この手法における過剰パラメータ化を解析するために、木の本数の無限大に増やしたときの振る舞いを Neural Tangent Kernel (NTK) を用いて解析した。NTK を用いることで、学習過程を関数空間で記述することができ、無限本の木のアンサンブルモデルを直接解析的に扱うことができるようになる。さらに、無限のパラメータを持つ過剰パラメータ化モデルと等価な振る舞いを、NTK を用いたカーネルリッジ回帰でシンプルに実現することができる。この結果を理論的に示すとともに、木の深さ方向や、パラメータの共有などについての解析を進め、パラメータ数無限大では、oblivious tree と呼ばれる同じ深さでのパラメータ共有をおこない効率的に学習を進めるモデルと、そうでないモデルの学習能力が等価であることを理論的に示すことに成功した。この結果は、機械学習・深層学習分野でのトップ会議 The 10th International Conference on Learning Representations (ICLR 2022) で報告した。

創発的研究支援事業

終了報告書

研究担当者	澤田 洋平
研究機関名	東京大学
所属部署名	大学院工学系研究科附属総合研究機構
役職名	准教授
研究課題名	数値社会空間予測の創発による社会変革の先導
研究実施期間	2021 年 4 月～2022 年 6 月 30 日

研究成果の概要

研究の3つの柱、「社会空間データ同化」「社会空間不確実性定量化」「数値社会空間制御」のそれぞれについて、研究成果が得られた。「社会空間データ同化」については多種多様な結合系を抽象的に模擬した joint-Lorenz96 モデルを使用した網羅的なデータ同化実験により、強結合データ同化が有効となる条件に付いて整理した。

「社会空間不確実性定量化」については気象モデル Weather Research and Forecast (WRF) のモデルパラメータにモデル構造の選択を表すパラメータを加え、合計 35 パラメータの感度解析と観測データに基づく事後確率分布を推定できるシステムを構築した。これにより通常天気予報の現業で行われている初期値・境界値の不確実性に加えて、予測モデルに内在する不確実性を考慮して極端気象現象のアンサンブル予測を行えるようになった。このようなアンサンブル予測を使って台風がもたらす高潮リスクの推定を行い、災害の詳細なシナリオ分析を可能にすることができた。

「数値社会空間制御」については、過去の洪水警報発出の成否に応じて、官への社会的信頼度が変化する力学系モデルを開発した。これにより、水害、洪水予報、被災経験、信頼、リスク認知の相互作用を解析した。開発したモデルは、気象災害予報に基づく人々の準備行動を扱う既存の社会水文モデルよりも尤もらしく振舞うことを、様々な既往の実証研究との比較によって明らかにした。

以上のように、自然科学－社会科学結合系を解くことで災害予測のあり方を革新しようとする本研究において必要な要素技術の開発が進み、今後これらの技術を統合することで新しい価値を生み出せることが期待できる。

創発的研究支援事業

終了報告書

研究担当者	安藤 和也
研究機関名	慶應義塾大学
所属部署名	理工学部
役職名	准教授
研究課題名	角運動量流電子技術
研究実施期間	2021 年 4 月～2022 年 6 月 10 日

研究成果の概要

スピン軌道相互作用とスピン流を中心とした近年のスピン트로ニクスの基盤としてスピンホール効果がある。スピンホール効果は、電流と直交する方向にスピン流が誘起される現象であり、スピン流に起因する新現象・新機能発現の鍵となっている。スピンホール効果の微視的な起源は、古くから知られる強磁性体中の異常ホール効果と同様にスピン軌道相互作用にある。これまでの長い物性研究の歴史の中で膨大な実験データが蓄積されてきた異常ホール効果に関しては、ホッピング伝導領域からバンド領域に及ぶ極めて広範囲の伝導領域において、電気伝導度に対する異常ホール伝導度の物質に依存しない普遍的なスケーリングの存在が見出されてきた。このことは、物質のバンド構造に起因する内因性機構と不純物散乱に起因する外因性機構によるスピン依存伝導現象の本質的理解へとつながった。一方、スピンホール伝導度に関してもバンド伝導領域で同様のスケーリング則の存在が近年示唆されはじめたが、ホッピング伝導が支配的となる絶縁領域まで含めたスピン流の一般的振る舞いは未解明であった。本研究は、代表的なスピンホール物質である Pt の酸化レベル制御により、これまで未開拓であったホッピング伝導領域におけるスピンホール効果の振る舞いを明らかにした。これにより、バンド伝導領域からホッピング伝導領域にわたる広範囲の伝導領域において、異常ホール効果と同様のスケーリング則がスピンホール効果に対しても成り立つことが初めて明らかになった。これまでのスピン流研究は実験・理論ともに電気伝導度の高いバンド伝導領域に集中しており、スピン트로ニクス現象の理解はこの領域に限られてきた。本成果は、バンド伝導・ホッピング伝導と本質的に異なる伝導機構が支配的となる系におけるスピン流物性に関する系統的知見を初めて与えたものであり、今後、スピン流量子物性の体系的理解の基盤となることが期待される。

創発的研究支援事業 終了報告書

研究担当者	好田 誠
研究機関名	東北大学
所属部署名	大学院工学研究科
役職名	教授
研究課題名	電子スピン波情報担体の創発
研究実施期間	2021 年 04 月 01 日～2023 年 03 月 31 日

研究成果の概要

半導体のスピン軌道相互作用は電子スピンに対し有効磁場として働く。電子スピンの有効磁場方向を回転軸として進むため、スピン空間構造を生み出すことが可能となる。本創発研究では、半導体において電子スピンが回転しながら空間伝搬することで生まれるスピンの波＝「電子スピン波」の基本物性を明らかにし、新たな情報担体として活用できる新機能を生み出すことを目的として研究を進めた。

電子スピン波の物性探索に向け時間・空間分解カール顕微鏡を構築し、GaAs/AlGaAs 半導体量子井戸構造における電子スピン波ダイナミクスの計測基盤を構築した。半導体量子構造には、図 1(a) (b)に示す 2 種類の波 ((a)ヘリカルスピン波, (b)均一スピン波)が、スピン拡散方程式の固有状態として安定に存在できる。円偏光光励起により空間均一なスピン偏極電子を生成したのち、半導体量子構造の内部有効磁場の回りで歳差運動しながら空間発展しヘリカルパターンのスピン空間構造が形成されることを観測した。さらにフーリエ変換することで実空間から波数空間での解析を可能にし、電子スピン波を波数分解して時間ダイナミクスが計測できる新たな測定系の構築を進めた。この様な電子スピン波の光学的検出では励起・検出用レーザーのエネルギーがバンドギャップエネルギーに対応する必要があり、電子スピン波を検出できる材料系に限られる課題があった。しかし、これまでの光学的検出法では、光学遷移選択則の制限から、図 1(a)のヘリカルスピン波のみしか検出できず、情報担体として利用できる全ての波(図 1(a)および(b))を同時検出する手法は確立されて

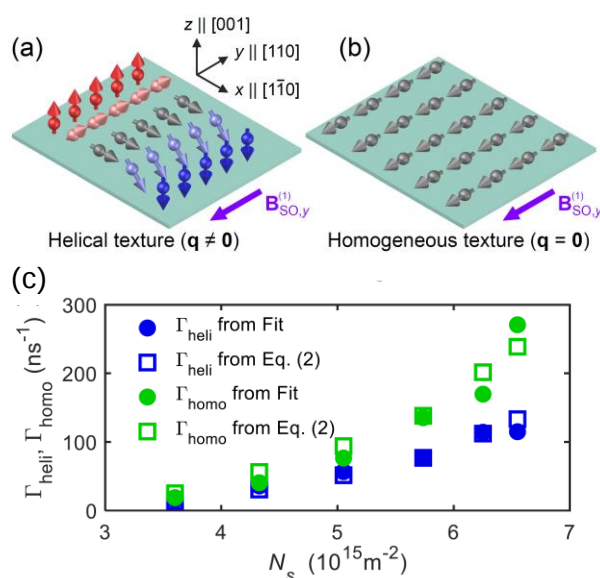


図 1. 半導体中で安定に存在できる(a)ヘリカルスピン波(b)と均一スピン波の模式図. (c)磁気伝導測定における量子干渉効果から求めたヘリカルおよび均一スピン波の緩和レートのカリヤ濃度依存性

こなかった。そこで磁気伝導現象にあらわれる量子干渉効果に着目し、2種類の電子スピン波を電氣的に検出する原理を提案、その実証を進めてきた。磁気伝導シミュレーションから電子スピン波の緩和時間に着目し、量子干渉効果の新たな理論式を導き、2種類のスピン波の寿命を電氣的手段で測定できる原理を見出した。そして GaAs/AlGaAs 半導体量子井戸を用いて温度 $T = 0.3 \text{ K}$ での磁気伝導測定を進めた。その結果、図 1(c)に示すようにヘリカルおよび均一スピン波の緩和レートを抜き出すことに成功した。複数の電子スピン波を同時に検出できる基盤を確立できた。

以上の結果より、半導体量子構造における電子スピン波物性に対して、時空間分解力一回転測定法を用いた光學的および量子干渉効果を用いた電氣的手法を併用することで、電子スピン波に関する基礎物性とその検出手法に関し学理構築と機能創製を果たすことができた。

創発的研究支援事業

終了報告書

研究担当者	Vincenot Christian
研究機関名	京都大学
所属部署名	情報学研究科
役職名	助教
研究課題名	Pioneering the Discipline of Radar Aeroecology for the Global Study and Conservation of Airborne Animals
研究実施期間	2021 年 4 月 1 日～2022 年 9 月 30 日

研究成果の概要

This project has generally progressed according to schedule, however, due to circumstances unrelated to the project itself, the research was terminated much earlier than planned. The initial research stage was tackled as planned. We reviewed in great depth radar technologies and infrastructures available in Japan and have contacted relevant stakeholders. Furthermore, we have reviewed knowledge available about Japan's flying fauna and related environmental issues and we also acquired and evaluated radar data structure from the different agencies. We also explored the design of new technologies to improve radar tracking of animals. Consequently, we are in the process of formulating an assessment of challenges and solutions for radar-based ecological studies.

創発的研究支援事業

終了報告書

研究担当者	浅井 禎吾
研究機関名	東北大学
所属部署名	大学院薬学研究科
役職名	教授
研究課題名	合成生物学を基盤とする革新的天然物創製研究
研究実施期間	2021 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本創発研究プロジェクトでは、合成生物学を基盤として「天然物の探索」、「天然物の構造展開」および「天然物の供給」にイノベーションを起こすことで、天然物を再び医薬品開発の主要なモダリティにすることを目的として研究に取りくむこととした。フェーズ 1 の研究では、特に「天然物の探索」と「天然物の構造展開」に焦点を絞った研究を展開することにした。まず、本研究計画の全ての共通資源となる糸状菌のドラフトゲノムライブラリーの拡充を進めた。独自に分離した植物や昆虫の内生糸状菌 30 種の糸状菌のゲノム解読を実施し、累計 50 種の糸状菌のドラフトゲノムライブラリーを整備し、ユニークな骨格形成遺伝子や生合成遺伝子クラスターを多数発見した。その中で、様々な活性が期待される骨格に着目したゲノムマイニングを実施し、新規メロテルペノイドや新規デプシペプチドの探索創製し、アミロイド β の凝集を抑制する天然物の発見に成功した。また、ユニークなドメイン構造を有するポリケタイド合成酵素 DiapA に着目したゲノムマイニングでは、植物以外で初めてとなる糸状菌のカルコン合成酵素の発見に成功した。本研究で発見した糸状菌カルコン合成酵素 DiapA は、植物や藻類で普遍的に存在する単一ドメインからなる III 型ポリケタイド合成酵素とは異なる反復型 I 型ポリケタイド合成酵素であり、天然物生合成のこれまでの概念に一石を投じる結果である。さらに、有用天然物の一群である植物フラボノイドの共通前駆体である *S*-ナリングニンに関して、本研究で発見した DiapA に加えて酵母由来のチロシンアンモニアリアーゼと植物由来のカルコン異性化酵素を共発現させることで、糸状菌である麹菌を宿主とした *de novo* 生合成に成功した。これをプラットフォームとして、植物遺伝子や糸状菌の様々な修飾酵素遺伝子を導入することで、多様な天然型や非天然型フラボノイドの生産が期待される。

以上、本研究では、独自に収集した糸状菌の遺伝子資源を材料として、新規天然物の合理的な探索および有用天然物の構造多様性拡充に向けたプラットフォームの構築を達成した。