

## 圧縮センシングのデータ駆動診断

○中西（大野） 義典<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>同志社大学文化情報学部

### Data-driven diagnosis for compressed sensing

○Yoshinori Nakanishi-Ohno<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Culture and Information Science, Doshisha University

表面真空科学においても、計測に要する時間を省くことにより効率よく実験を実施することは重要である。そのようなことを可能にするために議論されるのが圧縮センシングである。圧縮センシングでは、間引かれた計測により得られるデータに対して、情報学的手法を用いて解析することにより、物性を解明するのに必要なデータ量を減らし、結果として実験時間を短縮することができると考えられている。圧縮センシングはこれまでも様々な分野の計測法に対して適用されてきた。医工学における磁気共鳴撮像法、生化学における核磁気共鳴法、天文学における電波干渉法はその代表例である。表面真空科学においても走査トンネル分光法（STS）による準粒子干渉実験に対してその適用が議論されている[1,2]。

STS を例に圧縮センシングの原理について説明する。本来 STS は物質表面上の計測点を等間隔にとり、1 枚の画像としてデータを取得する。その画像データをフーリエ変換することにより分散関係を明らかにすることが準粒子干渉実験の目的である。圧縮センシングでは、計測点を間引いて虫食い画像のようなデータを取得する。不十分に思えるデータからでも分散関係を抽出するために重要なのは、物性に関する事前知識を活用することである。分散関係をもつということを改めて考えると、それはあるエネルギー（バイアス電圧）を与えたときにとりうる運動量（波数）の値が少数に限られるということである（値が小さいということではない）。ところで情報学では、運動量に限らず、適切な基底で展開したとき零でない係数が少ないことをスパースであるという。対象がスパースであるときに、データから対象についての情報をどのように明らかにするかということはスパースモデリングといわれて盛んに議論されている。実際、対象がスパースであれば推定すべき係数の数が実質的に少なくなるので必要なデータ数も少なく抑えられると考えられる。

本講演では、圧縮センシングの結果をどのように信用するかということについて議論する。どれだけ優れた情報学的手法を用いても、必要なデータを少なくするには限度がある。ここで重要なのは、その限度というのが、今まさに計測しようとしている対象のスパース性の程度に依存しており、あらかじめ知ることはできないということである。標準試料や人工データを用いるようなシミュレーションの場合はさておき、正解を知らないという現実的な状況では、圧縮センシングが成功しているのか失敗しているのかということを実有データのみに基づいて診断しなければならない。

講演者は、交差検証と呼ばれる伝統的な統計学的手法に着目してデータ駆動診断法を開発している[3-5]。交差検証の考え方では、これから取得する未来のデータを説明できることを良しとする。しかしながら、未来のデータを取得することはできない。そこで、現有データを訓練データと検証データとに分けて、訓練データのみを解析した結果を用いて検証データを説明できるかを調べる。解析に用いない検証データを敢えてとっておくことにより、未来のデータを仮想的に用意できるのである。このとき訓練データと検証データとに分ける比率を変えた時の振る舞いが、データが十分であるときとそうでないときとで定性的に異なることを発見した。この事実に基づいて圧縮センシングの成否をデータ駆動的に診断する。

### 文 献

- 1) Y. Nakanishi-Ohno, M. Haze, Y. Yoshida, K. Hukushima, Y. Hasegawa, M. Okada: Journal of the Physical Society of Japan, **85**, 093702 (2016).
- 2) J. Oppliger and F. D. Natterer: Physical Review Research, **2**, 023117 (2020).
- 3) Y. Nakanishi-Ohno and K. Hukushima: Journal of Physics: Conference Series, **1036**, 012014 (2018).
- 4) Y. Nakanishi-Ohno and K. Hukushima: Physical Review E, **98**, 052120 (2018).
- 5) 中西（大野）義典, 福島孝治: 固体物理, **54**, 343 (2019).

\*E-mail: ynakanis@mail.doshisha.ac.jp