

2023 年度年次報告書

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

2021 年度採択研究代表者

本武 陽一

一橋大学 大学院ソーシャル・データサイエンス研究科
准教授

解釈可能 AI によるパターンダイナミクスの数理構造抽出と材料情報学への応用

研究成果の概要

本研究課題の目的は、材料科学分野等でよくみられる複雑なパターンダイナミクスの物理法則・原理を発見することを試みる科学者をサポートする解釈可能 AI を開発することである。具体的には、機械学習でパターンダイナミクスの縮約モデルを構築し、そこから解釈可能情報を抽出する枠組みの開発を目指す。本年度も、縮約モデルを深層ニューラルネットワーク (DNN) で構築するアプローチと、基底関数の線形和で構築するアプローチのそれぞれで枠組み開発を実施した。また、それらの解釈可能 AI の枠組み開発の過程で見出された新たな課題を解決するために、ベイズ推論に基づいた枠組み開発にも着手した。これらの詳細について以下で詳述する。

DNN 型アプローチでは 2 つの枠組み開発を実施した。1 つ目は、ハミルトニアン・ニューラルネットワーク型のモデルで大自由度な勾配系の縮約ポテンシャルを学習し、そこから解釈可能情報を抽出する枠組みの開発である。開発した枠組みを磁性材料の磁区構造形成過程のシミュレーションデータに適用した結果、学習された縮約ポテンシャルが、元の大自由度系のエネルギー関数の勾配構造を再現することが確認された¹⁾。2 つ目は、力学系で訓練された DNN から系の非線形な対称性を推定する枠組みである。研究代表者がこれまでに開発した DNN からの対称性情報抽出手法を、ルンゲ・レンツベクトルの保存則を導く非線形な対称性の推定に適用した結果、その推定が可能であることが確認された²⁾。

基底関数型アプローチの枠組み開発では、選択した基底関数が系を表現するすべての情報を包含しないような状況に対応する手法開発を実施した。具体的には、力学系を構成する変数のうち、一部の変数のみが部分観測されるという状況で、素朴な最適化計算によって観測されなかった変数の時系列を推定して力学系全体を再構成する手法を開発した³⁾。

解釈可能 AI の枠組みを開発して行く過程で、推定対象の物理モデルがデータから一意に定まらない場合があるというケースに直面した。このような場合に、DNN などの表現能力の高い機械学習モデルで学習を行うと、物理的に不適切なモデルが選択されることになる。そのような機械学習モデルから解釈可能な情報を抽出すると、実際とは異なる誤った物理的解釈に繋がり問題である。本研究を通して、このような状況が様々な分野で現れることも確認された。この問題に対応するため、ベイズ推論と代数幾何的学习理論に基づく物理モデルの不定性評価枠組みの開発⁴⁾と、不定性の影響を事前分布によって低減するための事前分布設計枠組みの開発⁵⁾を実施した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Shunya Tsuji, Ryo Murakami, Hayaru Shouno, **Yoh-ichi Mototake**, NeurIPS2023 Workshop on Machine Learning and the Physical Sciences (MLPS), 2023.
- 2) **Yoh-ichi Mototake**, NeurIPS2023 Workshop on AI for Sciences: from Theory to Practice, 2023.
- 3) Akifumi Okuno, Yuya Morishita and **Yoh-ichi Mototake**, IEEE Access, vol. 12, 24621-24630, 2024.
- 4) Kenji Nagata, **Yoh-ichi Mototake**, arXiv:2406.00369, 2024.

- 5) Hiroyuki Kumazoe, Kazunori Iwamitsu, Masaki Imamura, Kazutoshi Takahashi, **Yoh-ichi Mototake**, Masato Okada, Ichiro Akai, Scientific Reports 13, 13221, 2023.