

信頼される AI の基盤技術
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

松原 崇

大阪大学 大学院基礎工学研究科
准教授

望まれる性質を設計段階で保証する幾何学的深層学習の構築

§ 1. 研究成果の概要

人間社会に導入される人工知能システムは、安全性や信頼性のために、対象システムが持つ構造や法則といった性質を保証することが望ましい。数理モデルは必要な性質を持つよう設計されているが、データへの適合性に限界がある。深層学習は高度にデータに適合するが、一般に必要な性質を保証できない。そこで、必要な性質を幾何学的に表現して組み込むことで、深層学習の設計段階でその性質を演繹的に保証できる幾何学的深層学習を提案する。

対象システムが持つ構造が最も数学的に明確な例は物理現象である。2021年度は主として、深層学習で物理現象をモデル化する際に、物理法則を保証する方法を研究した。この分野では2019年にHamiltonian neural networks (HNN)が提案されている。この手法は対象システムの時間発展を直接学習するのではなく、ハミルトン方程式に現れるエネルギー関数を学習しており、エネルギー保存則等の性質を保証できる。しかし、HNNが任意のハミルトン方程式を学習できるかは不明であった。我々はHNNが正準系のハミルトン方程式に対して万能近似性を有することを証明した³⁾。一方で、振り子などの物理システムは非正準系のハミルトン方程式で記述されるため、HNNでは学習できない。ハミルトン方程式はシンプレクティック形式と呼ばれるテンソル場を用いて定義され、これが特定の形をとるとき正準系という。そこで我々は、シンプレクティック形式を深層学習で近似することで、適切な条件下で任意のハミルトン方程式を近似できる手法を提案した²⁾。

また数値解析の知見を用いた学習の効率化も行った。深層学習を訓練するには途中結果をメモリに保存する必要があるが、物理現象などの連続時間システムを学習するには膨大なメモリを消費する。代わりに数値的な近似を用いると、今度は計算量が増大する。数値解析分野で知られる微分と勾配の間の幾何学的関係を用いることで、省メモリ性と高速性を両立した勾配計算法を提案した¹⁾。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, and Takaharu Yaguchi, “Symplectic Adjoint Method for Exact Gradient of Neural ODE with Minimal Memory,” Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021), Dec., 2021.
- 2) Yuhan Chen, Takashi Matsubara, and Takaharu Yaguchi, “Neural Symplectic Form: Learning Hamiltonian Equations on General Coordinate Systems,” Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021), Dec., 2021.
- 3) Yuhan Chen, Takashi Matsubara, and Takaharu Yaguchi, “KAM Theory Meets Statistical Learning Theory: Hamiltonian Neural Networks with Non-Zero Training Loss,” Proc. of The Thirty-Sixth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2022), Feb., 2022.