

数理・情報のフロンティア
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

田中佑典

日本電信電話(株) NTT コミュニケーション科学基礎研究所
研究主任

物理現象を再現する深層ニューラルネットのベイズ学習法

§ 1. 研究成果の概要

データ駆動型アプローチに基づき物理現象を表すダイナミクスを獲得するための機械学習手法について研究を行う。本年度は、ノイズを含むスパースな時系列データから、ダイナミクスを獲得するための機械学習モデルの定式化を行った。一般に、スパースなデータからの学習では、ノイズを含む観測に対して過学習が生じ、予測精度が低下することが起こり得る。本研究では、過学習を防ぐための有望なアプローチであるガウス過程を導入する。ガウス過程を用いることで、データに由来する不確実性を扱えるようになり、ノイズを含むスパースな時系列データからでも、過学習を抑制し、適切な学習を可能とすることが期待できる。しかし、物理現象を学習するためにガウス過程を素朴に適用するだけでは、(1)物理現象を表す上で重要なエネルギーの保存・散逸則を満たすようなダイナミクスを獲得することが難しいことや、(2)数値シミュレーションに基づく学習アルゴリズムの計算量が膨大になる、という問題が生じる。このような問題を解決するために、ハミルトン力学の理論を取り入れたガウス過程とその近似表現を考案した。これにより、ノイズを含むスパースな時系列データから、エネルギーの保存・散逸則に従うダイナミクスを学習するための効率的なアルゴリズムを構築することが可能となる。今後は、提案手法に深層ニューラルネットを組み込むことで、さらなる適用範囲の拡大を狙う。