

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 5 月 26 日現在

機関番号：33910

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K03635

研究課題名（和文）ニューラルネットワークに対する幾何学的力学系理論

研究課題名（英文）Geometric Mechanics of Neural Networks

研究代表者

後藤 振一郎 (Goto, Shin-itiro)

中部大学・AI数理データサイエンスセンター・准教授

研究者番号：60749282

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：ニューラルネットワーク周辺領域で用いられる（熱）力学系を幾何学を積極的に用いた記述とその応用に関する研究をおこなった。当初は、よりニューラルネットワークに則した力学系に注力する予定であったが、より数理として基本的なイジング模型周辺の力学系を主に扱った。また熱力学モデルも予定を変更して取り扱った。本研究により種々の（熱）力学系の接触幾何学、情報幾何学、離散幾何学、アファイン幾何学的記述法を示した。さらにその記述法の特徴や応用も示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

力学系理論や熱統計力学は理工学のような分野で応用され、汎用性の高い方法論を提供してきた。特にニューラルネットワークなどの脳を模したモデルの解析は、人工知能分野の近年の発展にも寄与した。更なる関連基礎数理の発展が期待されている。また一方、シンプレクティック幾何学などの幾何学分野は、力学系理論の発展と共に発展してきた。本研究では力学系理論や熱統計力学と、これまであまり結びつきが強くなかった接触幾何学、情報幾何学、離散幾何学、アファイン幾何学を結びつけ、ニューラルネットワークより更に基本となるモデル群に対して（熱）力学系の緩和時間の幾何学的記述やその限界を具体的に示した。

研究成果の概要（英文）：In this research project, dynamical systems and thermodynamic systems related to Neural networks have been studied. Although neural network models were scheduled to be focused in the original plan, more basic and fundamental models have been focused in this research project. Additionally, some thermodynamic systems have been studied. It is shown that various dynamical and thermodynamic models were shown to be described in the languages of contact, information, and discrete geometries. In addition, the properties of this description and applications were shown.

研究分野：応用数学

キーワード：幾何学的力学系理論 ニューラルネットワーク 微分幾何学 力学系理論 統計力学 最適化問題 接触幾何学 シンプレクティック幾何学

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

我々人類の脳機能を数理的に理解するため、これまでに様々な数理モデルが提案されてきた。その中でも代表的なモデル群は、ニューラルネットワークと呼ばれるネットワーク上の数理モデル群であり、力学系理論分野や非平衡熱統計力学分野、数理工学分野などでの手法で解析されてきた。これらのモデル群は脳機能の理解のみならず、近年では機械学習分野の特に深層学習に用いられている。機械学習は既に実社会で応用されており、様々な意味で更なる発展が期待されている。これらの期待を実現すべく、様々な研究が進行中である。そして本研究がその役割の一端を担う数理的基礎研究の進展も、社会での応用に貢献することが期待できる。数理解析の視点では、ある種のニューラルネットワークモデル群は力学系と見做せるが、これまでの力学系理論の発展には微分幾何学的手法を取り入れることも大きく関わっており、これらモデル群に対しても微分幾何学によるアプローチが有効であることが期待できる。微分幾何学的手法以外にも種々のアプローチが存在するが、どのアプローチをもってしても「深層学習がなぜ効率的に機能するか」という問いに対する十分な回答は得られていない。

ニューラルネットワークなどを用いた機械学習の学習方式は、与えられた関数の最適化問題として定式化される場合が多い。もしその関数が凸関数であれば、発達した凸解析学におけるさまざまな概念や手法を用いることが可能となり、数学的に精密な議論が可能になる。また一方で、凸解析学における洗練された概念や手法は、ヘッセ幾何学や情報幾何学(アファイン微分幾何学)と呼ばれる幾何学で用いられ、凸関数を使った微分幾何学の発展に寄与してきた。ここで、情報幾何学(アファイン微分幾何学)は、数理統計学や制御理論の一部でも用いられる幾何学であり、接触幾何学と呼ばれる幾何学と結びつくことも知られている。この接触幾何学とは、ハミルトン力学に起源を持つシンプレクティック幾何学の奇数次元類似として知られ、熱力学の幾何学的定式化にも用いられる。以上を踏まえると、上述の微分幾何学、つまりヘッセ幾何学、情報幾何学(アファイン微分幾何学)、接触幾何学を用いれば、ニューラルネットワークによる学習過程をある意味で上手く記述できる可能性に気付く。少なくとも、そのような可能性に近付くための理論体系の構築が可能であろう。しかし、この可能性を深く探索するためには、関連する複数分野の基礎知識をある程度習得する必要がある、そのような研究者はあまりおらず、研究進展の余地がある。

## 2. 研究の目的

上記の学術的背景を鑑み、微分幾何学的手法や言語を用いて数理モデル群を記述し、その応用を探ることを本研究の目的とする。もう少し具体的には、ニューラルネットワークモデルなどのモデル群をヘッセ幾何学、情報幾何学(アファイン微分幾何学)や接触幾何学などの微分幾何学での言語を用いて記述し、ニューラルネットワークに対する幾何学的力学系理論と呼ぶべき体系の基盤を与えることを研究目的とする。ニューラルネットワークの数理解析は、力学系理論分野や非平衡熱統計力学分野、数理工学分野でも扱われてきたため、それら関連分野での応用も見つけやすいことが期待できる。そのため、関連分野での具体的応用を与えることも目的とする。具体例として、統計物理学における雛形モデルとして知られ、ニューラルネットワークとも結びつく動的イジングモデルの微分幾何学的記述法の定式化が挙げられる。また、数理工学でも用いられ、ニューラルネットワークの研究でも用いられるマスター方程式の幾何学的記述法の定式化とその応用の探索も挙げられる。さらにマクロ的システムの現象論として用いられ、統計力学と密接な関係がある熱力学の幾何学的定式化や、最適化問題の微分幾何学を援用した数値的解法の開発もそれらの応用に含まれる。

## 3. 研究の方法

研究当初、比較的単純なニューラルネットワークモデルを対象として研究を行っていたが、それにも関わらず数理として明快な理論の構築に時間を要することが判明した。そのため、数理としてより基本的で、かつ研究目的をある程度達成できるモデルに研究対象を変更することにした。具体的には非平衡熱統計力学でも頻繁に用いられるマスター方程式、動的イジングモデル、および熱統計力学の体系自体を研究対象にし、それらの幾何学的定式化と応用に注力することにした。ここでマスター方程式とはグラフ上のある種の線形力学系を指し、ニューラルネットワークでの力学系とも関連が深い。以下のような研究方法により研究を進め、研究目的の達成に近づく。なお必要に応じ、力学系理論やリーマン幾何学などでよく知られた概念や手法も用いる。相転移を示す熱力学系では一般に、熱力学相空間で特異点等を生じ、通常の微積分学の適用ができない場合がある。これらに対応する場合は、特異点論で知られる処方箋などを学び、用いる。

(i) マスター方程式から導出される動的イジングモデルを情報幾何学で知られる統計多様体や接触多様体上で記述する。この記述に対して更に、多様体上にリーマン計量を導入し、リーマン

幾何学的解析を行う。特に、非平衡状態と平衡状態の間の距離を定義し、計算する手法や、平衡系への緩和時間を与える。また、ある種の幾何学的要請と平衡状態への緩和実現などの物理的要請を組み合わせて、新たな非平衡系を表現するモデルを提案する。そして、幾何学とは無関係に得られている既存モデルとの相違を解明する。

(ii) あるクラスのマスター方程式群はある極限で拡散方程式に帰着することが知られているが、幾何学的方法を用いて、拡散方程式とマスター方程式の可能な限り広いクラスとの間の関係を明らかにする。マスター方程式はグラフ上の力学系なので、連続体力学などと相性の良いリーマン多様体などのよく知られた幾何学的言語が機能しない可能性がある。その場合は適切な幾何学を用いて研究を実行する。

(iii) 非平衡熱統計力学系をアファイン微分幾何学により記述し、熱力学相空間上に微分幾何学分野で標準的に導入される接続や、情報幾何学で知られる幾何学的ダイバージェンスなどの幾何学量を導入する。さらに既存の接触幾何学的熱力学と提案理論体系を比較する。

(iv) ニューラルネットワークなどを使った機械学習で用いられる、制約なし凸関数に対する最適化問題の新たな数値解法を、接触幾何学やシンプレクティック幾何学を使って構築する。

#### 4. 研究成果

研究方法で述べた項目ごとに得られた成果を説明する。

(i) マスター方程式で記述される力学系である動的イジングモデルの、特に解析解が得られる場合に焦点を絞り、その解析解を使って種々の幾何学量を具体的に書き下した。ここでの幾何学量とは、情報幾何学で知られる  $\theta$  ポテンシャルやその双対ポテンシャル、フィッシャー計量などである。マスター方程式の時間発展は非平衡状態から平衡状態への緩和を示すが、その緩和をある接触ハミルトン力学系により陽に記述することに成功した。この研究により、トイモデルではあるが、情報幾何学や接触幾何学を使った統計力学的モデルの解析法を具体的に示すことができた。以上を論文にて報告した [S. Goto, H. Hino, “Information and contact geometric description of expectation variables exactly derived from master equations” Phys. Scr., 95, 0152207[14pages], 2020]。

上述のトイモデルの相空間上にリーマン計量等を導入した。これにより、リーマン多様体上の力学系とし、緩和や非平衡状態を曲率を含む幾何学的量を使って表すことに成功した。以上を査読付き会議論文と査読付きブックチャプターにて報告した [S. Goto, H. Hino, “Expectation variables on a para-contact metric manifold exactly derived from master equations”, GSI2019:Geometric Science of Information, 239–247, 2019] および [S. Goto, H. Hino, “Contact Hamiltonian systems for probability distribution functions and expectation variables: A study based on a class of master equations”, Chapter 4(57–87), Progress in Information Geometry, Springer, 2021]。

トイモデルより非自明で、非平衡熱統計力学やニューラルネットワークモデルで用いられる平均場相互作用をもつ動的イジングモデルを対象に研究を行った。この系が誘導する熱力学系は一次相転移を示し、準安定状態やヒステリシス現象を示す。本研究により、この非平衡系の接触幾何学的記述に成功した。特に準安定状態から最安定平衡状態への遷移についての動力学は、接触幾何学を用いればある程度可能であることを示し、論文にて報告した [S. Goto, “Nonequilibrium thermodynamic process with hysteresis and metastable states—A contact Hamiltonian with unstable and stable segments of a Legendre submanifold”, J. Math. Phys., 63, 053302[25pages], 2022]。

上の平均場系に対し、接触ハミルトニアンと呼ばれる関数を、相転移点近くで特異点論の手法も用いて具体的に構成した。更にこの接触幾何学モデルでは、幾何学とは無関係に構成された既存モデルを完全には記述できないことを証明した。以上を論文にて報告した [S. Goto, S. Lerer, L. Polterovich, “Contact geometric approach to Glauber dynamics near a cusp and its limitation”, J. Phys. A:Math. Theor., 56, 125001[16pages], 2023]。

(ii) 連続時間マスター方程式に対し、幾何学的定式化を行った。特に離散幾何解析学と呼ばれる体系で知られている方法を用いた。遷移率が一般の場合に対し、マスター方程式は連続の方程式になることを確認し、詳細釣り合い条件を満たす場合に対して離散幾何解析と変数変換を用いてマスター方程式が空間離散拡散方程式に変換できることを一般的に示すことに成功した。この結果により、非平衡熱統計物理学の教科書にしばしば載っている、空間連続極限における時空連続拡散方程式の導出が一般化されたことになる。拡散方程式はさまざまな物理系で導出され、数学解析も進んでいるので、将来、例えば緩和に関するより精密な情報が得られることなどが期待できる。以上を論文にて報告した [S. Goto, H. Hino, “Diffusion equations from master equations—A discrete geometric approach”, J. Math. Phys., 61, 113301[27pages], 2020]。

(iii) 平衡および非平衡熱力学の体系を、情報幾何学で頻繁に用いられるアファイン微分幾何学で用いられる言語により記述可能であることを示した。これまでに熱力学の体系はリーマン幾何学を中心に幾何学的記述とその応用の探究が行われてきた。それにより、相転移点での曲率などの幾何学的量の異常などの議論が行われ、一定の成果があった。一方で情報幾何学ではアファイン微分幾何学が積極的に用いられ、かつ情報幾何学は熱力学との類似点が多いことが知られている。そのため、新たに、自然な熱力学の幾何学的記述としてアファイン微分幾何学を用いる方法の存在に気が付く。本成果は、この記述を具体的に整備したことに等しい。一方で、非平衡熱力学の一部は接触幾何学を用いて記述されることも知られている。その既存研究との本研究との関係を明確にするためにも、アファイン微分幾何学による記述と接触幾何学での記述が整合的であることも示した。これらの結果により、熱力学とは独立して発達したアファイン微分幾何学や情報幾何学の手法を、熱力学の枠組みへとり込めることになった。以上を論文にて報告した[S.Goto, “Affine geometric description of thermodynamics”, J. Math. Phys., 64, 013301[23pages], 2023]。

(iv) 機械学習において、数理最適化問題の高速数値解法は要素技術の一つである。本研究では制約なし凸最適化問題において、新たに収束レート付き解法を微分幾何学での言語により定式化し、アルゴリズムを実装し、いくつかの数値例を示し有用性を示した。特筆すべき点は、幾つかの既存アルゴリズムが非自励接触ハミルトン力学系により記述できることを示した点、非自励接触ハミルトン系のシンプレクティック化の開発行った点、シンプレクティック性の存在が非自明な最適化アルゴリズムに対し、一般に数値的安定性をもつことで知られるシンプレクティック積分法を用いることを示した点などが挙げられる。以上を論文としてまとめ、投稿した[S.Goto, H.Hino, “Fast symplectic integrator for Nesterov-type acceleration method” arXiv:2106.07620]。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Goto Shin-itiro, Lerer Shai, Polterovich Leonid	4. 巻 56
2. 論文標題 Contact geometric approach to Glauber dynamics near a cusp and its limitation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 125001 ~ 125001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/acbe81	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Goto Shin-itiro	4. 巻 64
2. 論文標題 Affine geometric description of thermodynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 013301 ~ 013301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0124768	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Goto Shin-itiro	4. 巻 63
2. 論文標題 Nonequilibrium thermodynamic process with hysteresis and metastable states -- A contact Hamiltonian with unstable and stable segments of a Legendre submanifold	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 053302 ~ 053302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0062495	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Goto Shin-itiro, Hino Hideitsu	4. 巻 -
2. 論文標題 Contact Hamiltonian Systems for Probability Distribution Functions and Expectation Variables: A Study Based on a Class of Master Equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Progress in Information Geometry	6. 最初と最後の頁 57 ~ 87
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-65459-7_4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Goto Shin-itiro, Hino Hideitsu	4. 巻 61
2. 論文標題 Diffusion equations from master equations:A discrete geometric approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 113301 ~ 113301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0003656	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shin-itiro Goto and Hideitsu Hino	4. 巻 95
2. 論文標題 Information and contact geometric description of expectation variables exactly derived from master equations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physica Scripta	6. 最初と最後の頁 15207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1402-4896/ab4295	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shin-itiro Goto and Hideitsu Hino	4. 巻 11712
2. 論文標題 Expectation Variables on a Para-Contact Metric Manifold Exactly Derived from Master Equations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 GSI 2019, Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 239-247
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-26980-7_25	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計18件 (うち招待講演 13件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 S. Goto
2. 発表標題 Contact geometric approaches to thermodynamic processes with metastable equilibrium states
3. 学会等名 Forschungszentrum Julich GmbH, Peter Grunberg Institute (PGI), Ansari's Research Group Seminar (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 後藤振一郎
2. 発表標題 ヒステリシス系の接触幾何学的記述：非平衡熱力学の幾何学化に向けて
3. 学会等名 量子と古典の物理と幾何（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 後藤振一郎
2. 発表標題 ルジャンドル部分多様体を固定点集合とする接触ハミルトン力学系：熱力学相転移・ヒステリシス系への応用
3. 学会等名 2021年度冬の力学系研究集会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 日野英逸、後藤振一郎
2. 発表標題 Symplectic integrator via contact geometry for Nesterov-type ODE
3. 学会等名 Workshop on Functional Inference and Machine Intelligence（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 後藤振一郎、日野英逸
2. 発表標題 非自励ハミルトン系を用いた制約なし凸最適化問題の構造保存数値解法
3. 学会等名 統計物理と統計科学のセミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 後藤振一郎、日野英逸
2. 発表標題 接触多様体のシンプレクティック化を用いた制約なし凸最適化問題の構造保存数値解法
3. 学会等名 Poisson幾何とその周辺2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤振一郎
2. 発表標題 マスター方程式と離散拡散方程式の関係 --離散幾何学による解析--
3. 学会等名 統計数理研究所オープンハウス ( オンライン開催 )
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤振一郎、日野英逸
2. 発表標題 マスター方程式の離散幾何学 --拡散方程式の厳密な導出--
3. 学会等名 RIMS共同研究「数理科学の諸問題と力学系理論の新展開」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Goto and H. Hino
2. 発表標題 Information and contact geometries for expectation variables exactly derived from a class of master equations
3. 学会等名 Workshop on Emerging Themes in Computational Statistics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤 振一郎 日野 英逸
2. 発表標題 マスター方程式の離散幾何学--拡散方程式の厳密な導出--
3. 学会等名 第25回交通流と自己駆動粒子系のシンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 後藤 振一郎 日野 英逸
2. 発表標題 マスター方程式の離散幾何学--拡散方程式の厳密な導出--
3. 学会等名 第25回非線形局在モード勉強会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 後藤 振一郎 日野 英逸
2. 発表標題 マスター方程式から厳密に得られる期待値変数の情報幾何学, 接触幾何学およびその周辺
3. 学会等名 科研費シンポジウム「統計学と機械学習の数理と展開」 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shin-itiro Goto and Hideitsu Hino
2. 発表標題 Expectation variables on a para-contact metric manifold exactly derived from master equations
3. 学会等名 Geometric Science of Information, 4th Edition (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shin-itiro Goto
2. 発表標題 Hessian-information geometric formulation of neural network models having a Lyapunov function
3. 学会等名 RIMS研究集会「力学系 -新たな理論と応用に向けて-」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shin-itiro Goto and Tatsuaki Wada
2. 発表標題 Hessian-information geometric formulation of Hamiltonian systems and generalized Toda's dual transform
3. 学会等名 Geometry, Mechanics, and their Applications, 「幾何学と力学とその応用」(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 後藤 振一郎
2. 発表標題 応用接触幾何学
3. 学会等名 福岡大学応用数学科セミナー(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤 振一郎
2. 発表標題 マスター方程式と拡散方程式の関係--離散幾何学によるアプローチ--
3. 学会等名 中部大学 工学基礎教室 セミナー(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shin-itiro Goto
2. 発表標題 Contact geometric approaches to nonlinear RLC circuit models in contact with heat bath
3. 学会等名 Seminar at Laboratory of Automatic Control, Chemical and Pharmaceutical Engineering, Lyon 1, France (招待講演)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
イスラエル	Tel Aviv University		