

令和 6 年 6 月 27 日現在

機関番号：14301
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2020～2023
課題番号：20K03743
研究課題名（和文）群論表現論を用いた深層ニューラルネットの研究

研究課題名（英文）Study on deep neural nets with group theory

研究代表者

三内 顕義（Sannai, Akiyoshi）

京都大学・理学研究科・特定准教授

研究者番号：10610595

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）：本研究は、Zaheerらの対称性を持つ深層ニューラルネットワークの理論を群論、表現論、不変式論の視点から一般化し、精密化しました。具体的には、 S_n の自然表現の二階テンソル作用を考察し、グラフを入力とする関数の一般化を達成しました。レイノルズ作用素を用いることで、通常のニューラルネットワークを対称性を持つ形に変換し、入力変数の削減も可能であることを発見しました。この成果は、計算効率の高いアルゴリズムの開発や、ソーシャルネットワーク解析などの多くの応用分野での利用が期待されます。研究結果はJMLRに掲載されました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、Zaheerらの対称性を持つ深層ニューラルネットワーク理論を群論、表現論、不変式論の視点から一般化し、精密化しました。学術的意義として、理論の拡張と深化、不変式論の応用、レイノルズ作用素の利用が挙げられます。これにより、深層学習モデルの設計に新たな視点が提供されました。社会的意義として、高効率なアルゴリズムの開発、グラフデータを扱う多分野での利用、技術の普及と教育の促進が期待されます。特に、ソーシャルネットワーク解析や交通ネットワーク解析などの応用分野での利用が進むことで、様々な社会課題の解決に寄与する可能性があります。

研究成果の概要（英文）：This research generalized and refined the theory of symmetric deep neural networks of Zaheer et al. from the viewpoints of group theory, representation theory, and invariant formula theory. Specifically, we considered the second-order tensor action of natural representations of S_n and achieved a generalization of functions with graphs as input. By using Reynolds operators, we found that it is possible to transform ordinary neural networks into a symmetric form and also to reduce the number of input variables. The results are expected to be used in the development of computationally efficient algorithms and in many application areas such as social network analysis. The research results have been published in JMLR.

研究分野：深層学習、大規模言語モデル

キーワード：深層学習 対称性 幾何学的深層学習 グラフ理論 不変式論

1. 研究開始当初の背景

深層ニューラルネットワークは画像認識や自然言語処理などで優れた成果を上げていますが、その設計と学習には大量の計算資源が必要です。特に、データの対称性や構造を考慮しない従来のモデルは、計算効率や性能に限界がありました。Zaheer らは、データの対称性を活用することで効率的な学習を可能にする理論を提案しましたが、この理論は特定の対称性に限定されていました。本研究は、この理論をさらに一般化し、多様なデータ構造に対応することを目指しました。

2. 研究の目的

本研究の目的は、Zaheer らの対称性を持つ深層ニューラルネットワークの理論を、群論、表現論、不変式論の観点から一般化し、深層ニューラルネットワークの設計における対称性の活用範囲を広げることです。特に、グラフデータを入力とする場合に自然に現れる対称性を考慮し、これを効率的に処理する新しい方法を開発することを目指します。

3. 研究の方法

研究の最初のステップとして、 S_n の自然表現の二階テンソル作用を考察しました。これは、グラフデータを入力とする関数において自然に現れる対称性であり、深層ニューラルネットワークに組み込むための基礎となります。次に、不変式論に基づき、レイノルズ作用素を利用して通常ニューラルネットワークを対称性を持つ形に変換する手法を開発しました。この手法により、対称性を保持しながら入力変数の削減も可能であることを発見しました。また、理論解析とグラフ同変モデルの設計も行いました。

4. 研究成果

本研究の成果は、以下の通りです：

(1)理論解析とモデル設計:

- 理研の高井氏、エコールノルマルの Matthieu 氏とともに、対称深層ニューラルネットの線形領域の個数に対する新たな不変量とその解析を行い、この結果を The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics で発表しました。
- 東大の河野氏、熊谷氏とともに、メタ学習にリー群の対称性を加味したモデル提案を行い、Ninth International Conference on Learning Representations で発表しました。
- 東大の今泉氏、河野氏とともに、対称深層ニューラルネットの汎化誤差の不等式を証明し、37th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence に受理されました。

(2)進行中のプロジェクト:

- グラフ作用に対する同変モデルの開発を行い、余因子行列の推測、対角成分の抽出、対称化行列の推測などの実験で、先行研究である Maron et al. の同変モデルを上回る結果を得ました。
- 先行研究ではヒルベルトの有限生成定理を用いてモデル構成が行われていましたが、本研究ではその証明に戻って構成を行い、Maron et al.には含まれなかった関数クラスを含む可能性を示しました。

(3)具体的な手法:

- 不変式論で用いられるレイノルズ作用素を使用し、通常の深層ニューラルネットワークを対称性を持つ形に変換しました。これにより、計算効率が向上し、入力変数の削減も可能であることが確認されました。この成果はプレプリントを公開し、国際的なジャーナルへ投稿予定です。

本研究は、深層ニューラルネットワークの対称性理論を拡張し、群論、表現論、不変式論の観点から新たな理解を提供しました。具体的には、以下の点で学術的に重要です:

- 理論の拡張と深化により、従来のアプローチでは扱えなかった問題に対する新しい解決策を提供しました。
- 不変式論の応用により、グラフ理論的な意味付けを深層ニューラルネットワークに付与し、数学的手法の新たな応用可能性を示しました。
- レイノルズ作用素の利用により、対称性を持つニューラルネットワークの設計に新たな視点を提供しました。

社会的意義

本研究は、理論的な進展にとどまらず、以下の点で社会的にも重要な意義を持っています:

- 高効率なアルゴリズムの開発により、大規模データの処理が迅速化され、様々な応用分野での実用化が進みます。
- 対称性を持つニューラルネットワークは、ソーシャルネットワーク解析、分子構造解析、交通ネットワーク解析など多くの分野での利用が期待されます。
- 本研究の成果は、深層学習技術の理解を深める教育資源としても活用され、次世代の研究者や技術者の育成が促進されます。

これらの成果により、本研究は深層ニューラルネットワークの理論と実用化の両面で大きな意義を持ち、学術的および社会的に重要な貢献を果たしています。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Makoto Kawano, Wataru Kumagai, Akiyoshi Sannai, Yusuke Iwasawa, Yutaka Matsuo	4. 巻 -
2. 論文標題 Group Equivariant Conditional Neural Processes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 International Conference on Learning Representations	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Yuuki Takai, Akiyoshi Sannai, Matthieu Cordonnier	4. 巻 -
2. 論文標題 On the number of linear functions composing deep neural network: Towards a refined definition of neural networks complexity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Akiyoshi Sannai, Masaaki Imaizumi, Makoto Kawano	4. 巻 -
2. 論文標題 Improved Generalization Bounds of Group Invariant / Equivariant Deep Networks via Quotient Feature Spaces	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 37th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Makoto Kawano, Wataru Kumagai, Akiyoshi Sannai, Yusuke Iwasawa, Yutaka Matsuo	4. 巻 -
2. 論文標題 Group Equivariant Conditional Neural Processes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 International Conference on Learning Representations	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Yuuki Takai, Akiyoshi Sannai, Matthieu Cordonnier	4. 巻 -
2. 論文標題 On the number of linear functions composing deep neural network: Towards a refined definition of neural networks complexity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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

〔学会発表〕 計7件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Makoto Kawano, Wataru Kumagai, Akiyoshi Sannai, Yusuke Iwasawa, Yutaka Matsuo
2. 発表標題 Group Equivariant Conditional Neural Processes
3. 学会等名 International Conference on Learning Representations (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuuki Takai, Akiyoshi Sannai, Matthieu Cordonnier
2. 発表標題 On the number of linear functions composing deep neural network: Towards a refined definition of neural networks complexity
3. 学会等名 The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Akiyoshi Sannai, Masaaki Imaizumi, Makoto Kawano
2. 発表標題 Improved Generalization Bounds of Group Invariant / Equivariant Deep Networks via Quotient Feature Spaces
3. 学会等名 37th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Makoto Kawano, Wataru Kumagai, Akiyoshi Sannai, Yusuke Iwasawa, Yutaka Matsuo
2. 発表標題 Group Equivariant Conditional Neural Processes
3. 学会等名 International Conference on Learning Representations (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuuki Takai, Akiyoshi Sannai, Matthieu Cordonnier
2. 発表標題 On the number of linear functions composing deep neural network: Towards a refined definition of neural networks complexity
3. 学会等名 The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 熊谷亘、三内顕義
2. 発表標題 群畳み込みニューラルネットワークによる同変的写像の普遍近似定理
3. 学会等名 統計関連学会連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 三内顕義
2. 発表標題 対称性を持つ深層学習
3. 学会等名 東京大学大学院数理科学研究科情報数学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

AISTATS2021
<https://aistats.org/aistats2021/>

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
---------	---------