

令和 5 年 10 月 23 日現在

機関番号：32661

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2022

課題番号：18K03469

研究課題名（和文）機械学習による多自由度力学系の縮約

研究課題名（英文）Reduction of the degrees of freedom of dynamical systems by machine learning

研究代表者

能川 知昭（NOGAWA, Tomoaki）

東邦大学・医学部・講師

研究者番号：00399982

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：本課題では、分子の集団のようなきわめて大きな自由度を持つ系の時間発展のルールがわかっているときに、例えば内部エネルギーのような少数のマクロ変数の間で閉じた時間発展のルールの導き出すという、これまで研究者の直観に頼りがちであったタスクを、機械学習によって行う一般的な枠組みの構築を行った。系を記述するのに最適なマクロ変数を自動的に生成する点に特徴がある。セルオートマトンやスピン系（Pottsモデル）のような離散自由度の系の場合に学習の実装を行い、その有用性をテストした。その中で、例えば、初期条件の対称性と閉じた力学系を構成できる最小自由度の関係などについてもっともらしい分析ができることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究が対象とするのは、大きな自由度を持つ複雑な系を人間が理解するために不可欠な次元（情報）の削減である。これはあらゆる科学にまたがる極めて普遍的な営みであると言える。統計物理学は特にこれを主たる目的としてきた学問分野であるが、ほとんどの場合には研究者の直観にたよった大胆な近似を行うのが常道であり、近似の妥当性を確立されたミクロなモデルから正当化できることは稀である。本研究では近年発展の著しい機械学習の助けによってデータに基づく根拠を持った縮約モデル（現象論）を構築する新しい方法を提示し、具体的な適用例によって有用性を示した。

研究成果の概要（英文）：In this project, we developed a general framework supported by machine learning to derive closed time-evolution rules for a small number of macroscopic variables, such as internal energy, from the time-evolution rules for a system with large degrees of freedom, such as condensed matter, which has been done by the intuition of researchers in most cases. We examined its usefulness by applying the method to the system with discrete variables such as cellular automata and spin systems (Potts model). These yields a plausible result, e. g., about the relationship between the symmetry of the initial conditions and the minimum degrees of freedom to constitute a closed dynamical system.

研究分野：統計物理学

キーワード：機械学習 非平衡ダイナミクス 縮約理論 相転移ダイナミクス

1. 研究開始当初の背景

統計物理学の主眼は、ミクロな自由度に対する法則からマクロな系のふるまいを説明することである。熱平衡状態にある系に関しては、物性値を予測する一般的な処方箋が(その遂行可能性はともかくとして)確立されているのに比べ、非平衡ダイナミクスに関しては、線形非平衡領域を越えれば、一般論はおろか限定されたクラスのモデルを理解することすら困難なことがほとんどである。なかでも、本研究の対象である非定常ダイナミクスの場合、ミクロな自由度から出発するときには数値シミュレーション以外の一般的なアプローチはないに等しい。しかし数値シミュレーションでは前提と結果の間のほぼすべてがブラックボックス化してしまうため、たとえ物性値の時系列を予測することができて現象を深く理解したとは言いがたい。一方、いわゆる非線形動力学と呼ばれる分野では、少数のマクロ変数に対する力学系を考察の対象とすることが多い。そこでは現象を理解するのに有用な概念が多く見出されてきたが、あくまで現象論的なモデルに立脚しており、ミクロな自由度の力学系からの基礎付けという点が取り残されている。また、そもそもマクロな系が少数自由度の力学系で一般に記述可能なのか、あるいは可能な条件は何なのかといった基本的な問題も未解決である。これは決して目新しくはなく、抽象的な問題ではあるが、統計物理学に残された原理的な課題である。

筆者はかねてより、気液転移などの1次転移ダイナミクスに興味を持ち、本課題と同じ方向を目指す研究も行ってきた。マクロ変数を恣意的に選んだときに、それに関する力学系を導く方法を考案しその解析をすることができたが、どのようにマクロ変数を選ぶべきかについて方針をたてることができないという問題を残していた。情報統計力学の最近の進展、特にディープラーニングやスパースモデリングといった方法に学会等でふれているうちに、これらがその問題を解決するのに好適であることに思い至った。

2. 研究の目的

上述した問題にとりくむため、与えられた具体的な系に応じてミクロ変数の力学系(確率過程も含む)から少数のマクロ変数の力学系への縮約を数値的に実行する汎用的な手法を確立するというのが本研究の目的である。手法を確立したあかつきには、それを用いて先に述べた1次転移ダイナミクスに止まらず、デモンストレーション的な分析事例を積み上げ、非平衡ダイナミクスを普遍的に捉える新しい視点をつくることも目指す。具体的には、指定するマクロ変数の個数と、その自由度で縮約された力学系のマクロ変数の時系列に関する近似精度の関係を系統的に評価する。このような分析はさまざまな系のダイナミクスを共通の尺度で比較することを可能にし、非平衡現象一般に有用な視点を与えることが期待できる。

3. 研究の方法

以下で本研究で開発する機械学習の基本的なアイデアを説明する(図1参照)。まず与えられたミクロな変数の力学系にしたがって、時系列データのサンプルを適当な条件のもとで生成する。このデータから学習する「関数」は2段で構成される。入力ミクロ変数であり、まず縮約変換を経て中間量であるマクロ変数になり、さらに速度変換を経てマクロな速度として出力される。後段が求めるマクロな力学系に相当する。暫定的な縮約変換が与えられれば、マクロな速度はミクロ変数の時系列の差分からも直接計算できるので、これを「正解」として速度変換の出力と比較し、その差を最小化するような縮約変換と速度変換のパラメータを同時に推定する。

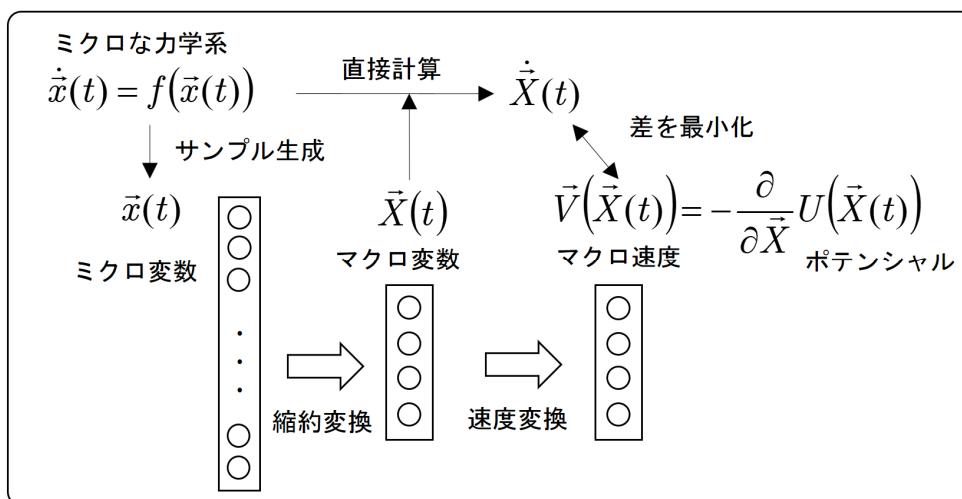


図 1

この方法を用いて考察するのは、与えられた系のマクロ変数の数をどれだけ小さくできるかという問題である。これを、設定されたマクロ変数の数と「正解とのずれの最小値」、すなわち自由度の不足によって生じる誤差との間を通して系統的に評価する。ミクロな力学系には

例えば温度のような環境パラメータが付随する。初めは、いくつかの環境パラメータの場合を独立に調べる。次に環境パラメータがデータ間で分布を持つ場合も取り扱えるようにする。機械学習が導き出したマクロ変数がどんな量であるか考察することも考察の対象である。

4. 研究成果

(1) 手法の確立とプログラム実装

マクロ変数への縮約変換とその変数の時間発展写像の同時学習という基本的なアイデアを次項で説明する系に適用できるように実装する試行錯誤の結果、以下に列挙するような仕様へたどりついた。

(ア) 縮約変数の示量性

マクロ変数としては示量性の条件を課す。すなわち局所量の空間的な和をとったものであるとする。現段階では、ミクロ変数は有限個の値のみをとり、格子の各点に配置されている場合の実装となっている。このとき局所量としては、各格子点上の変数だけで決まる1体関数や隣接する2つの格子点上の変数で決まる2体関数などになる。マクロ変数は可能な「ミクロ変数の局所配置の割合」の線形結合で表される。このことにより学習データを、ミクロ変数の集合から、この割合に置き換えることができ、学習における計算量を著しく削減することができる。

(イ) 直交規格化条件の必要性

あるマクロ変数(の組)が閉じた力学系を構成するとき、そのマクロ変数の任意の関数も閉じた力学系を構成する。このためなんらかの条件を課して不定性をなくす必要がある。上記の示量性もそのひとつであるが、さらにデータ空間における直交規格化条件を課す。もし規格化条件がなければスケール変換の自由度によって、マクロ変数の解として、恒等的にゼロという無意味なものになることが回避される。また直交条件によって複数のマクロ変数の間に独立性を保証する。ただしここでの独立性は線形の範囲であり、非線形な相関は排除できず、今後の課題となっている。

(ウ) パラメータ削減(ドロップアウト)による物理量の意味推定の容易化

マクロ変数は、示量変数と仮定することによって、「ミクロ変数の局所配置の割合」を基底とする線形結合となることを先に述べたが、マクロ変数の意味はこの線形和の係数によって特徴づけられる。学習によって得られたマクロ変数の意味を人間が理解するためには基底の数が少ないことが好ましい。しかし、マクロ変数の数や局所量の引数の数の増加によって、この係数の数は急速に増大する。この係数の数の人為的削減(ドロップアウト)を行うことによって得られた縮約変数の意味が、人間にとってわかりやすくなる枠組みも実装した。

(エ) 外部パラメータの分布への対応

研究開始当初は、温度や磁場のような外部パラメータが決まった値であるデータによる学習を取り扱った。次の段階としてこれらのパラメータが分布を持つデータの場合を扱えるように拡張を行った。

(オ) 使用方法の多角化

本研究の基本的な目的は大自由度系のダイナミクスを記述するのに最適な縮約変数を求めるというものであったが、実用的には特定の関心がある量の時間発展ルールを知りたいということが想定される。これにはひとつのマクロ変数を恣意的に固定するだけで対応できる。また、ダイナミクスにおける保存量を探したいという場合には時間発展写像のほうを恒等的なものに固定することでまかなえる。

(2) セルオートマトンモデルへの適用

単純な大自由度力学系として1次元セルオートマトン系への適用を試みた。3つの連続する変数によって決まる256通りの時間更新ルールのダイナミクスはそれぞれ、安定固定点に収束するもの、周期軌道に収束するもの、真にカオス的なもの、カオスの縁的なもののいずれかに分類されることが知られている。安定固定点に収束するものについては3体の示量変数によってよく記述できることがわかった。周期軌道に収束するものについては保存量が解になった。カオス的なものについては時間発展が予測可能なマクロ変数を得ることができなかったが、射影によって軌道不安定性が視認しやすい表現が得られることがわかった。

(3) Potts モデルへの適用

セルオートマトン系に続いてスピン系の非平衡緩和ダイナミクスへ適用した。時間発展はメトロポリス法による状態更新を採用した。この時間発展は確率的なものであるが、縮約変数に示量性を課すことによって、その時間発展は熱力学極限(サイズ無限大)において決定論的なものとなる。3状態Pottsモデルを採用することにより、3種類の対称性を持つランダムな初期状態を用意することができる。それぞれについて次元縮約を行うと縮約変数の次元がある閾値より上で、熱力学極限で厳密に閉じた力学系が得られることを示唆する結果を得た。この閾次元は初期状態の対称性が高いほど小さくなることがわかった。図2に一例を示す。これは3つのスピン状態のうち2つが同数であるという初期条件の場合の結果であり、学習で得られた2次元のマクロ変数の変位ベクトルを示している。固定点の様子から、2つの変

数はそれぞれ磁化と内部エネルギーのような量だと推測される。また、このしきい次元より上では、縮約変数は閾値の次元の多様体上に貼りついており、次元を拡張することに意味がないこともわかった。温度が均一でないデータによる学習も均一な場合とほぼ同様な結果を得た。このことは最適なマクロ変数が温度によらずロバストであることを意味する。また、基底のドロップアウトを行った結果、この系の場合には極端に基底の数を減らしても結果が変わらないことがわかった。

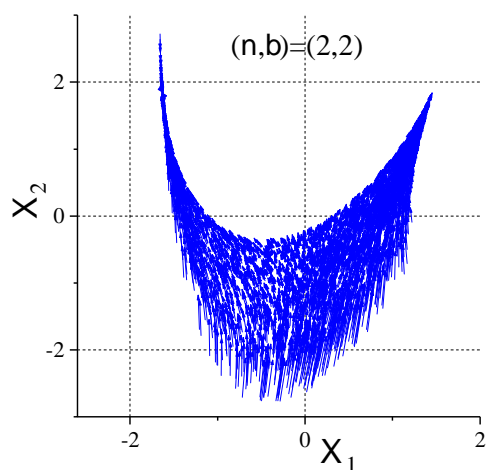


図 2

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 能川知昭
2. 発表標題 機械学習によるGlauberダイナミクスの自由度縮約
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomoaki Nogawa
2. 発表標題 Dimensional Reduction of Dynamical Systems by Machine Learning
3. 学会等名 FSP2019: Frontiers of Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 能川知昭
2. 発表標題 機械学習による力学系の次元縮約 III
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 能川知昭
2. 発表標題 機械学習による力学系の次元縮約 IV
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 能川知昭
2. 発表標題 機械学習を用いた力学系の自由度縮約II
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
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
---------	---------