

令和 6 年 6 月 16 日現在

機関番号：14501

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2022～2023

課題番号：22K21278

研究課題名（和文）時間発展型の現象のモデル化における解釈性や因果に関する基礎研究

研究課題名（英文）Basic research on interpretability and causality in modeling time-dependent phenomena

研究代表者

小松 瑞果（Komatsu, Mizuka）

神戸大学・システム情報学研究科・助教

研究者番号：80856766

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,100,000円

研究成果の概要（和文）：近年、機械学習と計算科学の複合領域において、両分野の技術を連携する手法に関する研究が進んでいる。この分野において、モデルの解釈性や現象における因果の扱いに関して、発展の余地があると考えられる。そこで、本研究では、観測された時系列データから、現象に関する科学的知見の獲得を目指すモデリングにおいて、これらの観点に着目したいくつかの手法を構築した。特に、現象が従う微分方程式の少なくとも一部が既知の場合に有効な、代数的パラメータ推定手法と、支配方程式が未知の場合に有効な、深層学習ベースの手法を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

時系列データから現象に関する知見の獲得を目指す場合、用いられるモデルとして、支配方程式のような解釈性の高いモデルと、深層学習ベースの解釈性の低いモデルがある。前者に関して、モデルの構造によっては、データからパラメータが一意に定まらず、解析結果の信憑性が担保されないという問題がある。本研究では、これを回避すべく代数に基づく推定手法を提案した。後者に関して、時系列グラフ等を導入し解釈性を向上した。

研究成果の概要（英文）：In recent years, research utilizing techniques from both machine learning and computational science has been conducted in the interdisciplinary field. However, there is room for advancement particularly in the interpretability of models and treatment of causality in phenomena within this domain. Based on this, in this study, several approaches were developed with a focus on these aspects of modeling aimed at acquiring scientific insights into observed time-series data.

In broad terms, two researches were conducted as follows:
parameter estimation methods based on algebraic techniques for the case where the governing equations of the phenomenon are at least partially known and deep learning-based approaches are effective when the equations governing the phenomena are unknown.

研究分野：応用代数，モデリング

キーワード：SciML 深層学習 応用代数 微分方程式 時系列データ

1. 研究開始当初の背景

近年、機械学習と計算科学(科学技術計算)の複合領域において、両分野の技術を連携させる研究が盛んに行われている。例えば、従来、計算科学の分野で扱われていた、支配方程式に基づく時間発展型の現象のモデル化を、深層学習に導入した手法として Physics-Informed Neural Networks などが提案されている。この分野は Scientific Machine Learning などと呼ばれ、急速に発展しているが、支配方程式に基づくモデル化と様々な違いがあり、課題は多い。その一つとして、モデルの解釈性や現象における因果の扱いが挙げられる。以上を踏まえ、本研究では、観測された時系列データから、現象に関する科学的知見の獲得を目指すモデリングにおける、モデルの解釈性や現象における因果の扱いなどに焦点をおくこととした。

2. 研究の目的

本研究では、時間発展型の現象を、微分方程式を用いて記述するモデリングに着目する。また、本研究では、解釈可能なモデルパラメータ、及び、時間発展型の現象に内在する因果に焦点をおき、時系列データからこれらを抽出するためのモデリング、あるいは、これらを活用したデータ駆動型モデリング手法の構築を目的とする。

3. 研究の方法

時間発展型の現象のモデリングによる科学的知見の抽出に向け、本研究では、解釈可能なモデルパラメータ、及び、時間発展型の現象に内在する因果に焦点をおき、現象が微分方程式などに従う場合に注目する。このような問題設定におけるモデリングのアプローチは、以下の二つに大別される。

A) 現象が従う微分方程式が既知あるいは部分的に既知と考えるアプローチ

B) 現象が従う微分方程式が未知と考えるアプローチ

本研究では、これらのそれぞれに対し、いくつかの手法を構築した。このうち、A については、方程式に隠れた情報を取り出すべく、代数的手法を導入した。提案手法の応用として、生物学分野、神経科学分野、スポーツ科学分野を対象とした研究にも取り組んだ。

4. 研究成果

以下、成果を表す番号は、上記のアプローチを表す A または B と組み合わせて表記している。以下に示す成果は、全て国際会議または国内学会で発表済み(または発表確定済み)である。また、A1・A3 については論文査読中、A2、B1、B2 については論文準備中である。

(A1) Physics-Informed Neural Network(PINN)という深層学習モデルに代数的可観測性を取り入れることで、観測変数が少ない場合にも有効なパラメータ推定手法を構築した。PINN は、着目する現象の支配方程式が部分的に既知あるいは部分的に既知である場合(A に該当)に、データと支配方程式をできるだけ満たすような関数を学習する深層学習モデルである。また、このような関数を学習すると同時に、方程式がもつ未知パラメータを推定することもできるとされている。本研究では、支配方程式が微分方程式で表され、データは多変量時系列データとして与えられる場合に注目する。実問題において、支配方程式に現れる変数全てに対応する時系列データが観測されないことがあるが、このような場合にナイーブな PINN を適用すると、関数の学習と未知パラメータの推定で望ましい結果が得られないことが多い。そこで、本研究では、代数的可観測性の概念を導入し、支配方程式を用いて、観測されないデータを補うことを提案した。提案手法により、学習性能が向上し、パラメータ推定の精度も向上する可能性が示唆された。また、感染症の数理モデリングへの応用を行った。図 1 は結果の一例である。代数的可観測性を導入しない既存手法では、観測されていないデータの予測精度が著しく低い(図 1、青線・緑線・赤線の予測が大きく外れている)が、提案手法では、これらも高い精度で予測できていることが分かる。

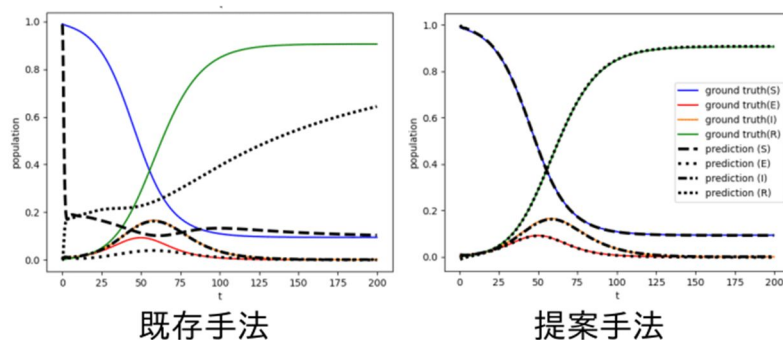


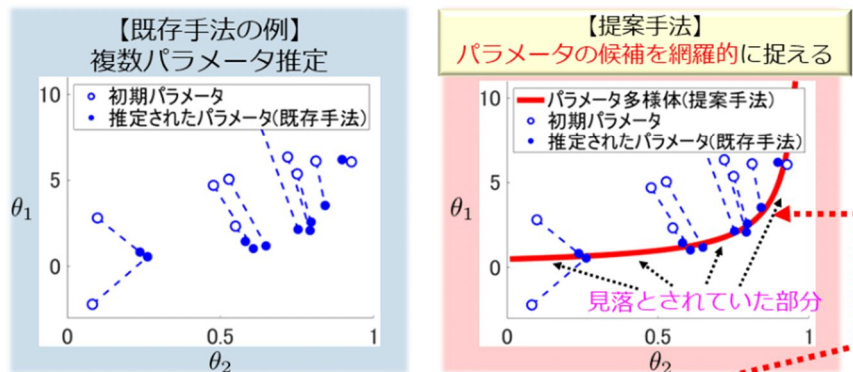
図 1: (A1) の結果の例

- (A2) 与えられたデータから統計的モデルあるいは微分方程式モデルのパラメータが一意に定まらない場合に、そのパラメータは同定不可能という。特に、データにノイズが含まれていない場合に、微分方程式モデルのパラメータが一意に定まらない場合、構造的に同定不可能という。パラメータが同定不可能な場合、同じデータに適合する複数のパラメータが存在することになるため、解釈性の観点で注意が必要である。本研究では、このような場合であっても有効な手法として、データに適合する微分方程式モデルのパラメータを網羅的に抽出する代数的方法を構築し（図 2）、その応用を行った。特に、神経科学分野や生物分野で扱われる馴化という現象を対象にこの手法を応用し、馴化を示す系における記憶機能と刺激への感度のバランスの重要性が示唆された。また、モデル可同定性は、医療分野で重視されている個別化医療に向けたモデリングにおいても重要な観点となる可能性が示唆された。

状態空間モデルのパラメータ推定において

観測されたデータが限定的/複雑なモデル⇒パラメータが一意に定まらない

推定手法の細かな設定によって、得られるパラメータ及び考察が変わると、困る！



この曲線のようなパラメータの集合の推定手法を構築

図 2: (A2)の手法の概念図

- (A3) 近年、物理系を用いた計算の枠組みが注目されている。このような系、すなわち、物理計算系を上手く活用するには、その精密な設計が重要とされている。先行研究では、物理計算系の設計に向け、学習ベースの設計方法や理論解析が提案されている。前者は、理論保証が弱く、後者は個別の物理計算系に対する具体的な設計指針が得られないという問題点がある。特に、ダイナミクスが微分方程式等で表される物理計算系において、そのパラメータは物理的な意味をもつことを考慮すると、パラメータに関する具体的な設計指針が得られることが望ましい。そこで、本研究では、代数に基づく理論を導入し個別の物理計算系の具体的な設計指針を得る手法を構築した。具体的には、物理計算系を用いて所望のターゲット時系列を生成するためのパラメータの設定方法・入力的设计方法に加え、ある物理計算系を別の物理計算系で置き換えるための設計方法を構築し、提案手法の有効性について、数値実験等を通して確認した。

- (B1) 馴化現象のモデリングへの一般的なアプローチは、(A2)で言及したようなアプローチである。すなわち、馴化現象に関する事前知識をもとに、微分方程式を具体的に記述するアプローチである。事前知識とは、例えば、「馴化は与えられた刺激に対する応答と、これを抑制する機能の両者によって生じている」といった知見である。馴化現象を表す微分方程式はいくつか提案されているものの、確立されたモデルはない。また、(A2)のようなアプローチでは、馴化に関する定性的な解析にとどまり、定量的な考察が得られにくく、また、データを十分に活用できていないという問題があり、新たなアプローチが求められている。本研究では、その第一ステップとして馴化を表すモデルをデータ駆動型モデルの構築を試みた。従来、機械学習タスクの多くは、ユークリッド空間からユークリッド空間への写像の学習、すなわち、関数の学習であった。一方、近年、関数空間から関数空間への写像の学習、すなわち、オペレータ学習という枠組みの有効性が注目されている。また、これを行う深層学習モデルを総称してニューラルオペレータといい、その実装の一つとして、DeepONet が提案されている。馴化は反復刺激なる入力関数を応答減衰なる出力関数に変換するオペレータとみなすことができる、オペレータ学習を適用し、少ないデータで十分な精度のモデルが得られることが確認できた。提案手法の解釈性の確認については今後の課題となった。

- (B2) グラフ畳み込みニューラルネットワークと時系列予測に用いられる深層学習モデルを組み合わせ、グラフに時系列性を導入することで、時系列グラフ上の空間特徴とその時系列特徴を捉えるモデリング手法を考案した。このように時系列グラフを用いることで、データの背後にあるグラフ構造が時系列性をもつ場合の予測精度の向上及び解釈性の向上が期待される。応用例として、サッカーの試合における選手のセンサーデータに基づくパフォーマンス解析を行った。今後、脳波データの解析等にも展開していく予定である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 小松瑞果
2. 発表標題 未観測変数をもつPhysics-Informed Neural Networksに関する代数的考察
3. 学会等名 日本応用数理学会 環瀬戸内応用数理研究部会 第26回シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Mizuka Komatsu
2. 発表標題 Differential algebraic analysis of state space models and its applications
3. 学会等名 超幾何学校2023（ワークショップ）（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mizuka Komatsu
2. 発表標題 Algebraic approaches to quantitative modeling of dynamic biological systems
3. 学会等名 OKO International Symposium 2023（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Mizuka Komatsu
2. 発表標題 Algebraic design of physical computing system for time-series generation
3. 学会等名 NeurIPS 2023 Workshop on ML with New Compute Paradigms (MLNCP)（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 安井賢俊
2. 発表標題 DeepONetを用いた馴化のモデリング
3. 学会等名 日本応用数理学会第9回学生研究発表会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 中井空
2. 発表標題 Tysonらのモデルに基づく馴化のシミュレーション及び代数的解析
3. 学会等名 日本応用数理学会第9回学生研究発表会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Mizuka Komatsu
2. 発表標題 Application of differential elimination for physics-informed neural networks
3. 学会等名 XII. Conference on Differential Algebra and Related Topics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 小松瑞果
2. 発表標題 個性の定量化とModel Identifiability
3. 学会等名 第6回日本メディカルAI学会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 小松瑞果	4. 発行年 2022年
2. 出版社 酵素工学研究会	5. 総ページ数 4
3. 書名 酵素工学ニュース Vol. 88	

1. 著者名 青木敏, 大杉英史, 野呂正行, 土谷昭善, 間野修平, 小松瑞果, 谷口隆晴, 松原宰栄, 高山信毅, 篠原直行, 伊藤琢真, 黒川貴司, 荒井迅, 龍田真	4. 発行年 2024年
2. 出版社 サイエンス社	5. 総ページ数 100
3. 書名 数理科学2024年3月号 <<グレブナー基底>>のすすめ 理論と実践が織り成す数理の世界	

〔産業財産権〕

〔その他〕

共同研究者の個人ウェブページ http://www.lix.polytechnique.fr/Labo/Gleb.POGUDIN/

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1件

国際研究集会 International Conference on Scientific Computing and Machine Learning 2024	開催年 2024年~2024年
--	--------------------

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