Deep learning and Physics 2020 第7回
日時: 7月30日10:30-11:30(JST)

物理学者と学習機械の効果的な協業に向けて：学習済み深層ニューラルネットワークからの解釈可能な物理法則抽出

Interpretable Conservation Law Estimation by Deriving the Symmetries of Dynamics from Trained Deep Neural Networks

https://arxiv.org/abs/2001.00111

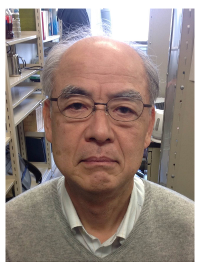
統計数理研究所 統計的機械学習研究センター
特任助教　本武 陽一

自己紹介

福岡県福岡市出身

学歴：

2008/3 東北大学　理学部　物理学科卒業



2010/3 北海道大学　大学院理学院　宇宙理学専攻

修士課程修了 指導教官：石川健三 教授（素粒子物理学、テーマ：波束のダイナミクス）

2013/3 東京大学　大学院総合文化研究科 広域科学専攻

修士課程修了 指導教官：植田一博 教授（認知科学、テーマ：脳活動を用いたHAI評価）

2016/3 東京大学　大学院総合文化研究科 広域科学専攻

博士課程修了 指導教官：池上高志 教授（**複雑系**、テーマ：深層学習、群れ）

職歴：

2016/5 〜 2019/3 東京大学　大学院新領域創成科学研究科　複雑理工学専攻

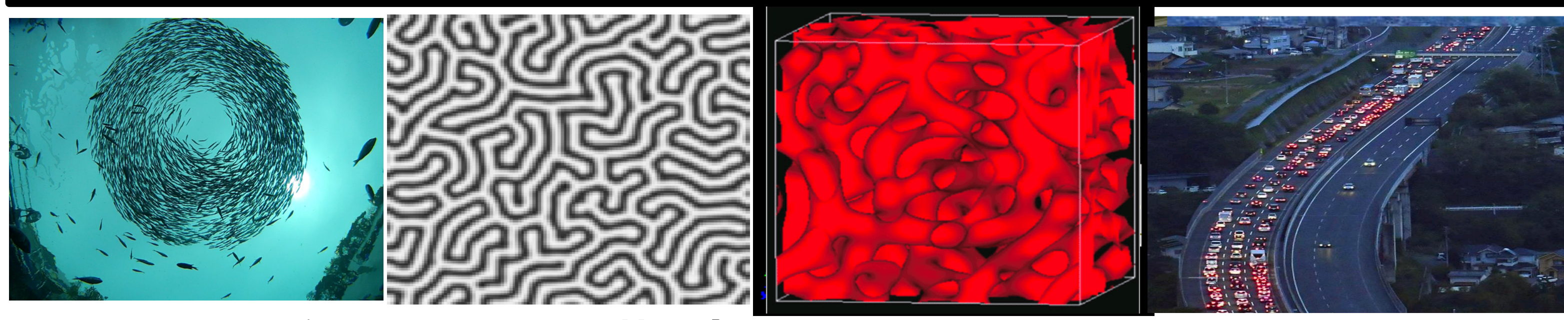
特任研究員　（岡田真人教授、テーマ：**データ駆動科学**）

2019/4 〜　統計数理研究所　統計的機械学習研究センター

特任助教　（福水健次教授、テーマ：**統計的機械学習**）

自己紹介

非周期的秩序構造を持つ集団運動



群れ現象　磁区構造　高分子構造　交通流

科学者の洞察
+ベイズ推論
による縮約

縮約モデル構築
プロセス

科学者の洞察
+データ多様体の
対称性評価

縮約モデル

大自由度群れ行動縮約モデル

ドメインパターン形成モデル

縮約座標系

古典的座標系:フーリエ基底 etc

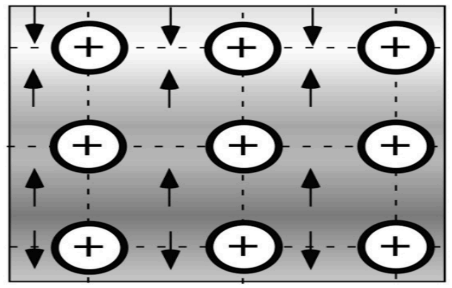
トポロジカルな特徴量空間

群れ現象画像：http://research.kyoto-u.ac.jp/service/topic/spirits/lists/h25list_j/sprits_h25ja_11_sakagami/
磁区構造画像：[Y. Mototake, M. Mizumaki, K, Kudo, and K. Fukumizu　in prep.] より
高分子構造画像：[M. Ito, S. Yamanaka, T. Aoyagi, and K. Ohnishi 2019] より
交通流画像： https://www.sankei.com/photo/story/expand/180506/sty1805060010-p1.html

集団運動の縮約モデル

●集団運動が完全に他の運動と分離されている場合に有効な枠組み [澤田 80]

秩序構造を持つ集団運動



[林 久史　2015]

プラズマ振動

液体・固体の音波や熱伝導,
重原子核の表面振動　etc.

渦運動

科学者の洞察

正準力学系としての縮約モデル構築

[Tomonaga Prog. of Theo. Phys.　1955]

[Saffman, Vortex Dynamics 1992]

科学者の洞察

正準運動方程式

集団運動モデル

渦運動モデル

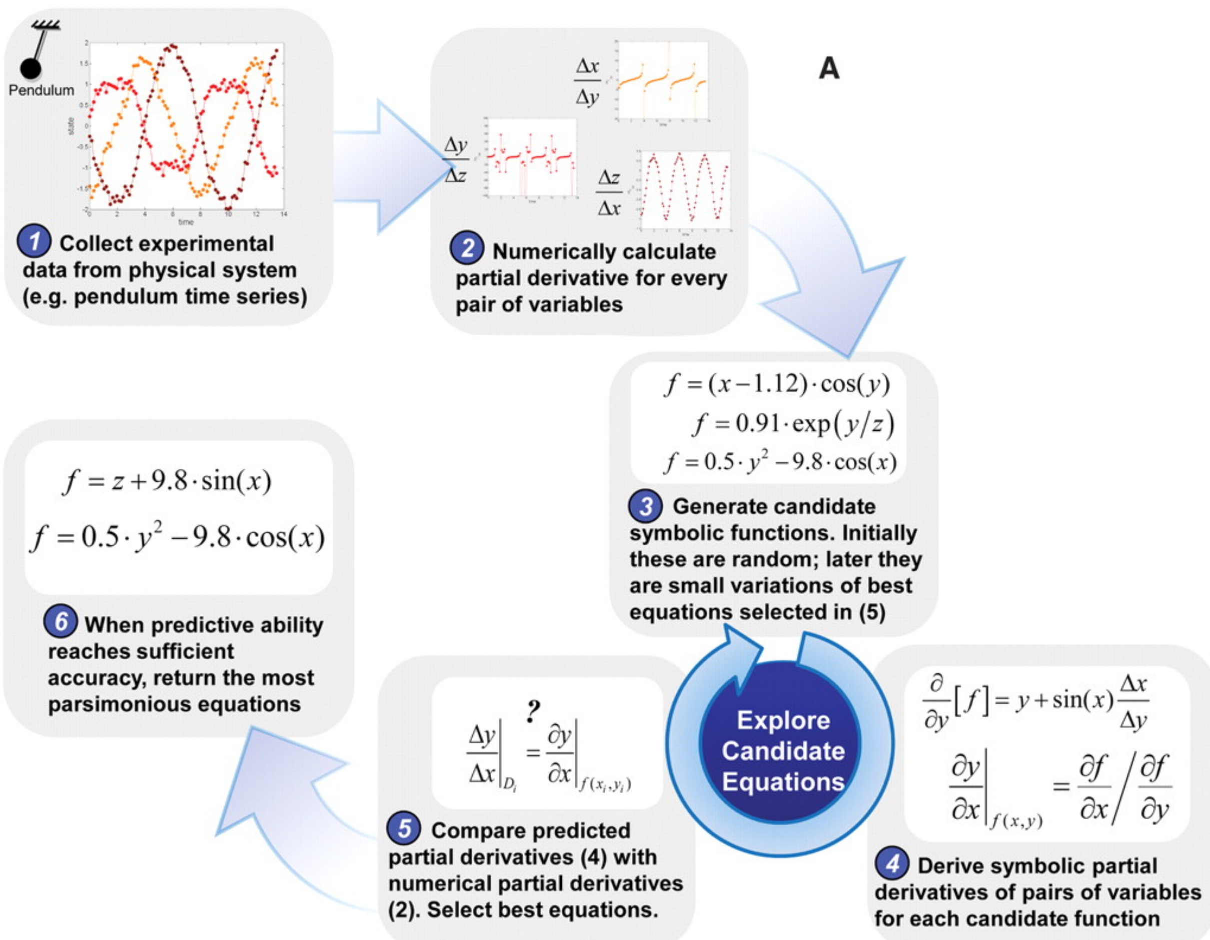
正準座標系

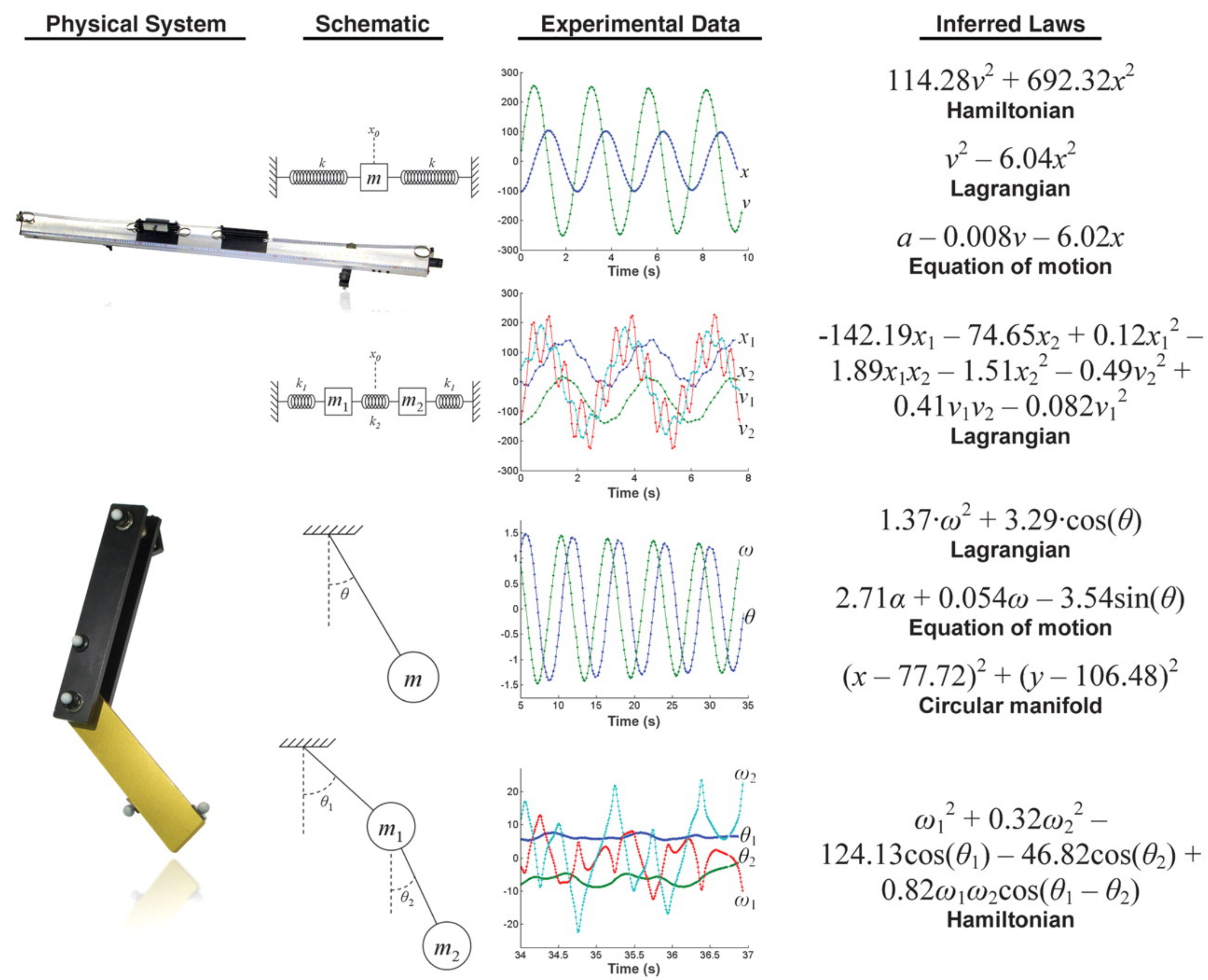
集団座標系（フーリエ基底等）

渦の特徴量空間

機械学習による物理モデル探索

●基底関数の結合によってハミルトニアンを構築



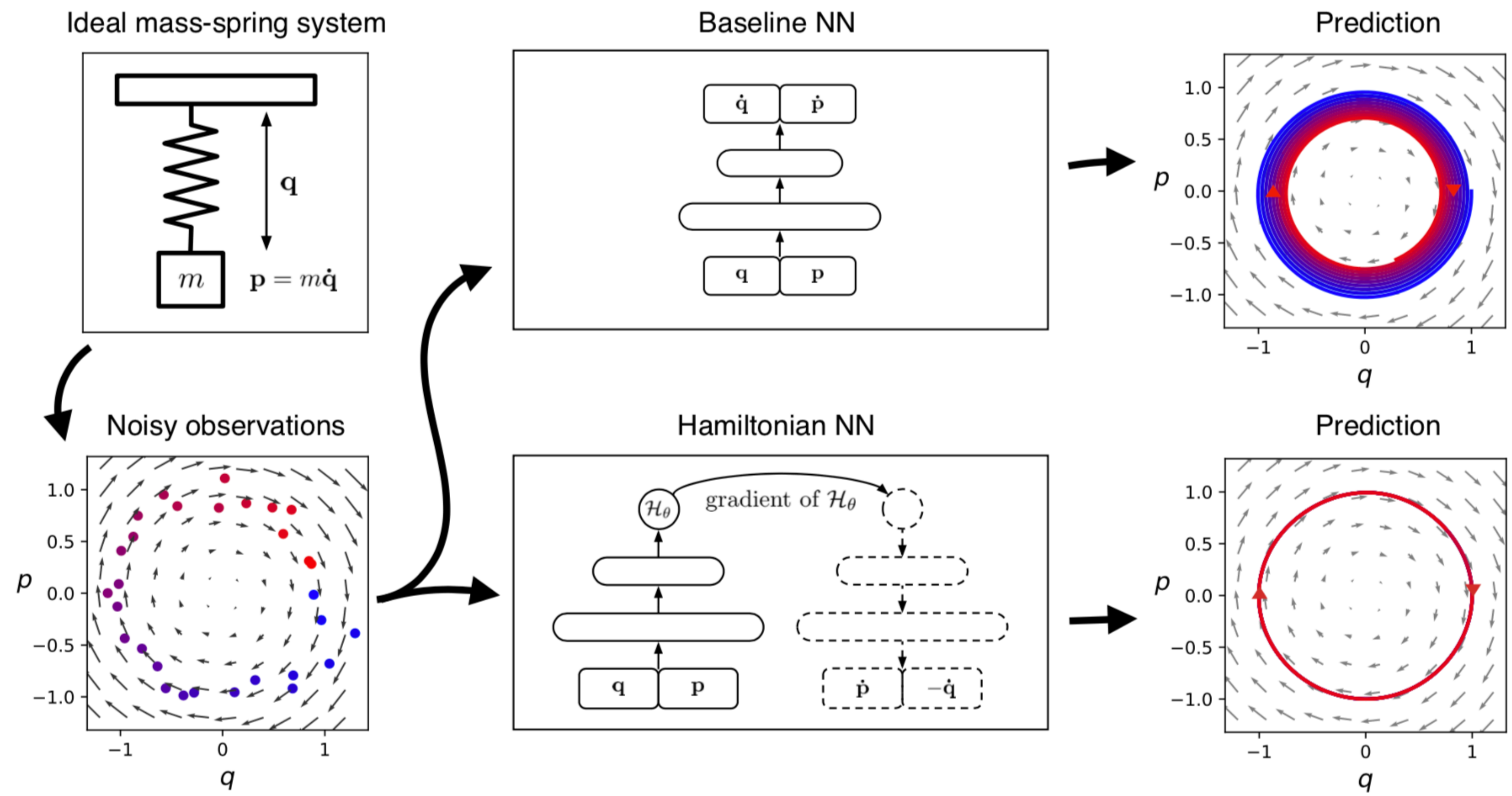


➡基底関数が未知の場合には対応が難しい

[Michael Schmidt1, and Hod Lipson, Science 2009]

機械学習による物理モデル探索

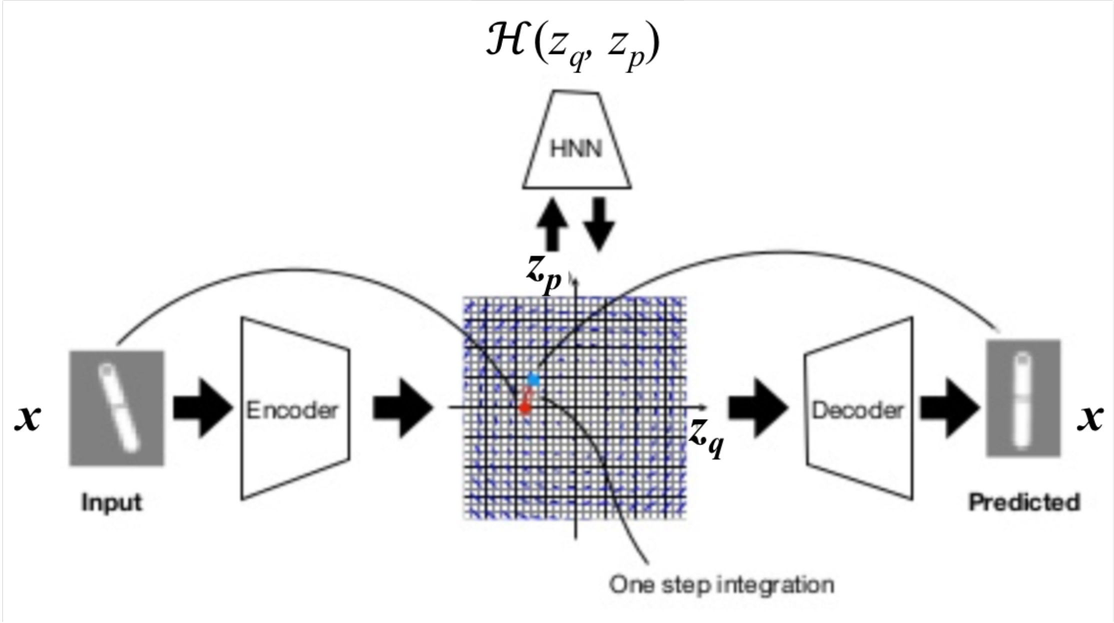
●深層学習によってハミルトニアンを構築

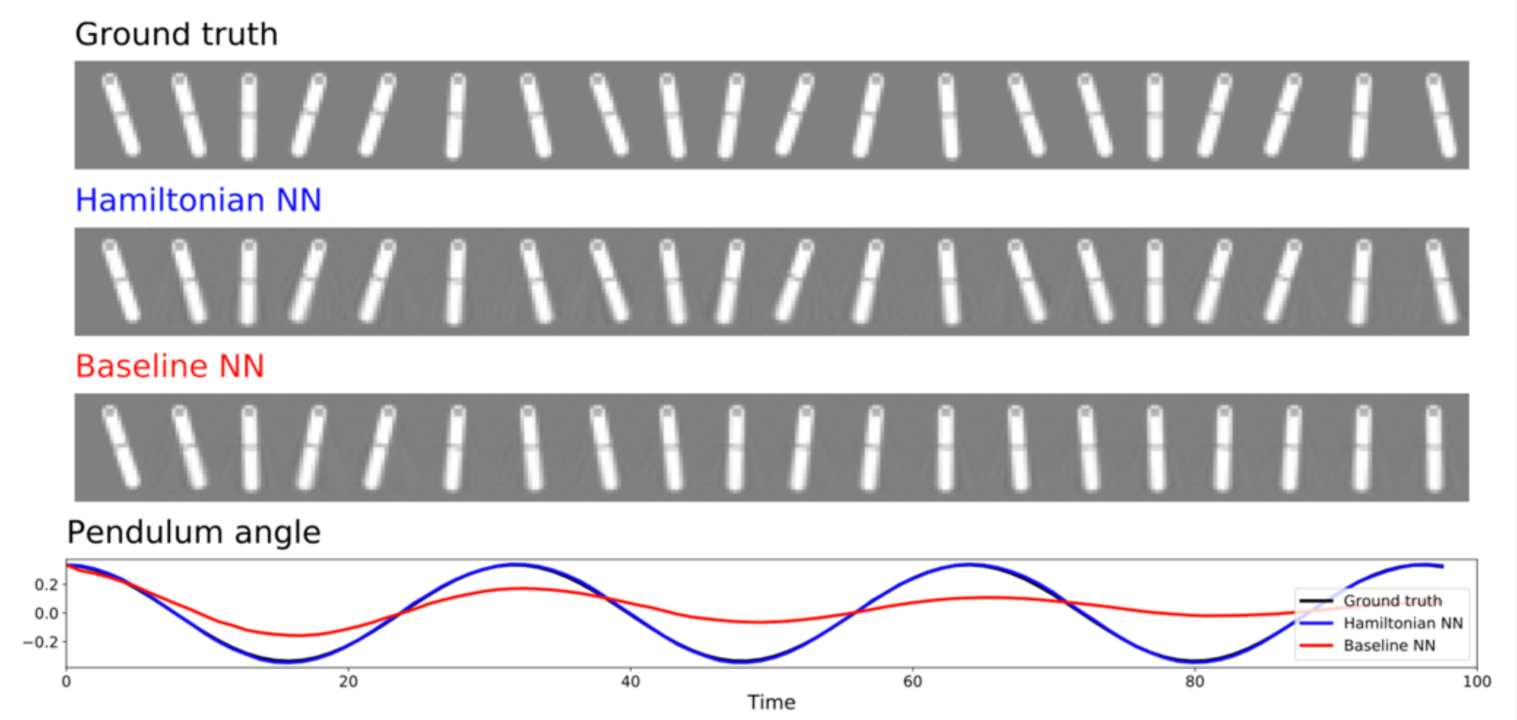


$$\mathcal{L}_{HNN} = \left\| \frac{\partial \mathcal{H}_\theta}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \right\|_2 + \left\| \frac{\partial \mathcal{H}_\theta}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \right\|_2$$

[G. Samuel, M. Dzamba, and J. Yosinski, NeurIPS 2019]

機械学習による物理モデル探索

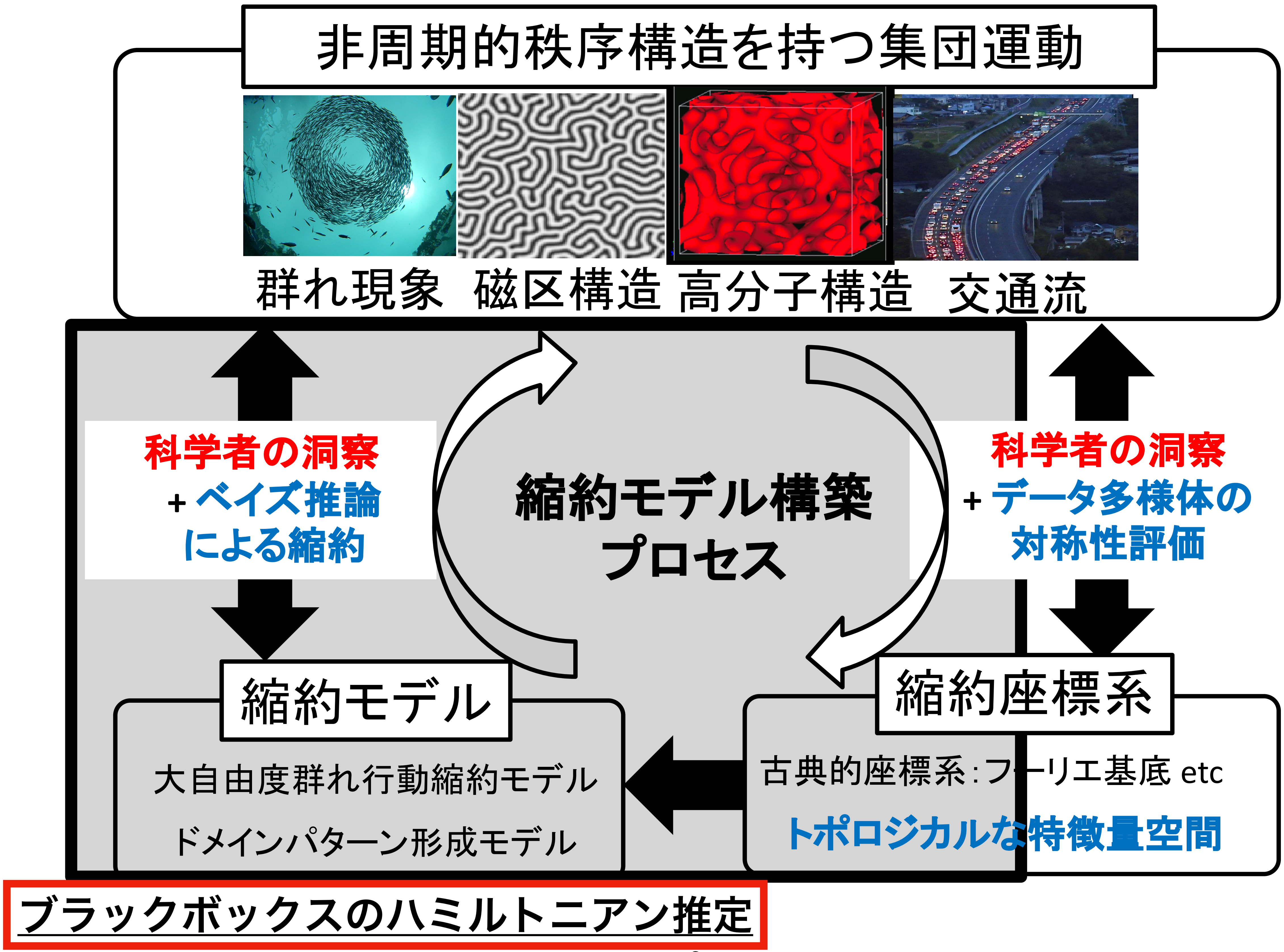




➡ハミルトニアンはブラックボックス

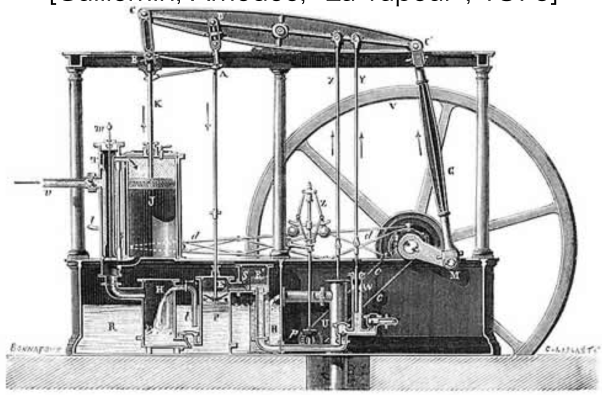
[G. Samuel, M. Dzamba, and J. Yosinski, NeurIPS 2019]

機械学習による物理モデル探索



抽象化と外挿による飛躍

[Guillemin, Amédée, "La vapeur", 1876]



蒸気機関

気体の現象論

$$PV = nRT$$

抽象的モデル化

$$dS = \frac{dQ}{T}$$

抽象モデルの外挿

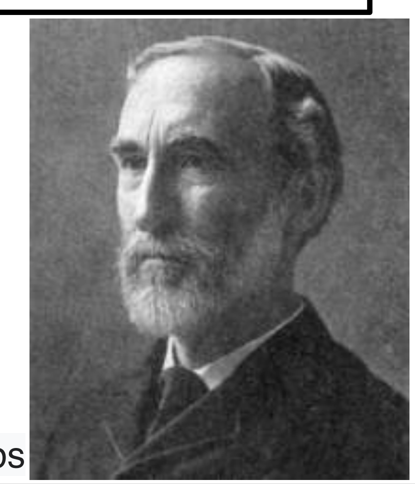
$$G = H - TS$$

化学熱力学

反応速度論 etc.

[田辺工業株式会社HP より]

化学産業

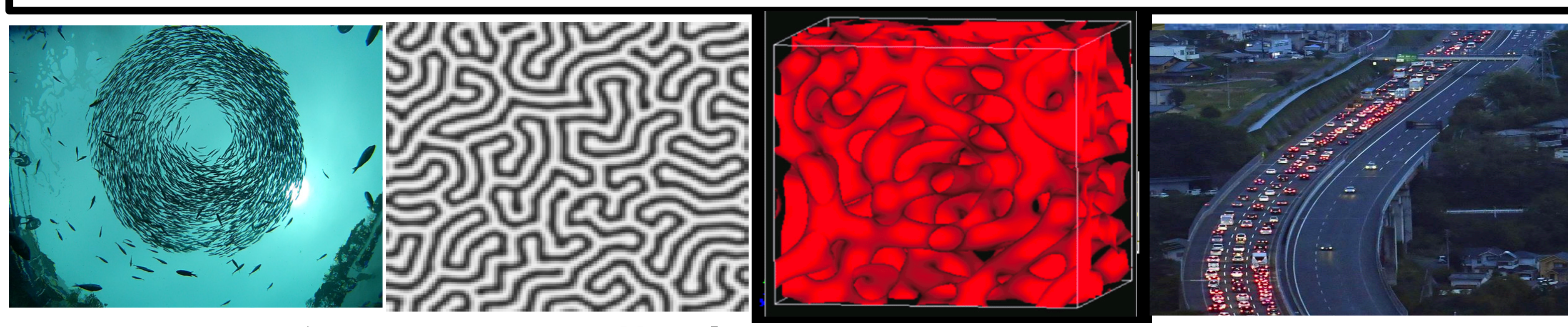


Willard Gibbs

物理学者の深い**<u>洞察</u>**に基づき，モデルや知見の抽象化と，その大胆な外挿によって多くの進歩が実現されてきた ➡ **機械学習にこのような外挿が実現できるとは思えない！**

研究の目的

非周期的秩序構造を持つ集団運動



群れ現象　磁区構造　高分子構造　交通流

科学者の洞察
+ ベイズ推論
による縮約

縮約モデル構築
プロセス

科学者の洞察
+ データ多様体の
対称性評価

縮約モデル

大自由度群れ行動縮約モデル

ドメインパターン形成モデル

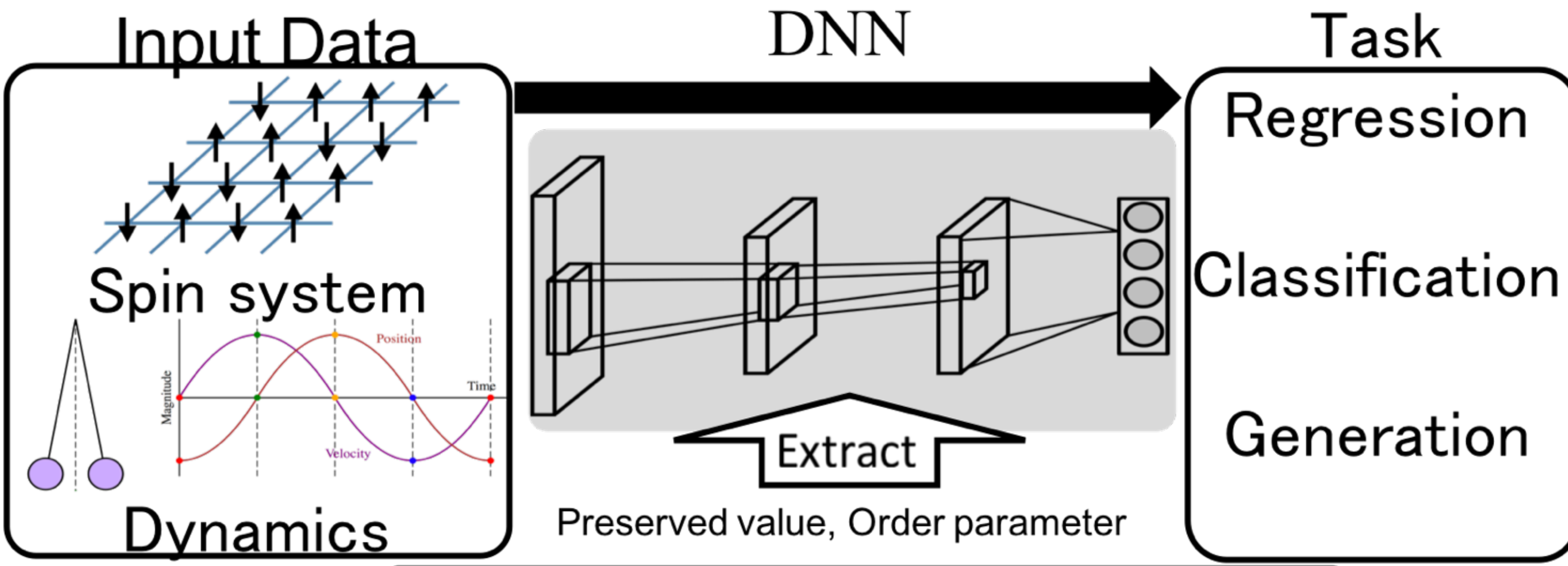
縮約座標系

古典的座標系：フーリエ基底 etc

トポロジカルな特徴量空間

目的：縮約座標系を探索する物理学者に，その座標系を評価できる情報を提示する

研究の目的



$$\boldsymbol{m} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mu_0\,\boldsymbol{\sigma}_i \qquad \boldsymbol{L} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

学習済みDNNからの系の対称性推定を試みる

提案手法の説明のながれ

前提情報

1. ネーターの定理と時系列データ多様体の関係を検討

2. DNNによるデータ多様体のモデル化について検討

手法

3. DNNから系の対称性を抽出する手法の説明

4. 抽出された対称性から保存則を推定する手法の説明

提案手法の説明のながれ

前提情報

1. ネーターの定理と時系列データ多様体の関係を検討

2. DNNによるデータ多様体のモデル化について検討

手法

3. DNNから系の対称性を抽出する手法の説明

4. 抽出された対称性から保存則を推定する手法の説明

ネーターの定理

ネーターの定理：

ハミルトン系の持つ連続対称性と保存則を結びつける定理 [Noether 1918].

ハミルトニアン$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$と正準運動方程式$\dfrac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial q_i} = -\dot{p}_i, \dfrac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial p_i} = \dot{q}_i$ が，無限小変換$(q_i', p_i') = (q_i + \delta q_{ij}, p_i + \delta p_{ij})$に対して不変であるとすると，保存量$G_j$との間に以下の関係式が成立する.

$$\boxed{(\delta q_{ij}, \delta p_{ij}) = \left(\frac{\partial G_j}{\partial p_i}, -\frac{\partial G_j}{\partial q_i} \right)}$$

ネーターの定理

保存則に対応する不変性

ハミルトニアンの不変性：$H'(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \equiv H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$

$$H'(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}) := H\left(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}),\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})\right)$$

正準運動方程式の不変性：$\begin{cases} \boldsymbol{Q}_{T+\Delta T} = \dfrac{\partial H'(\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T)}{\partial \boldsymbol{P}_T}\Delta T + \boldsymbol{Q}_T \\ \boldsymbol{P}_{T+\Delta T} = -\dfrac{\partial H'(\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T)}{\partial \boldsymbol{Q}_T}\Delta T + \boldsymbol{P}_T \end{cases}$

系を不変にする座標変換と無限小変換

$$\mathbb{C}(\boldsymbol{\theta}):\ (\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \longmapsto (\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}) := (\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\theta}),\boldsymbol{P}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\theta}))$$

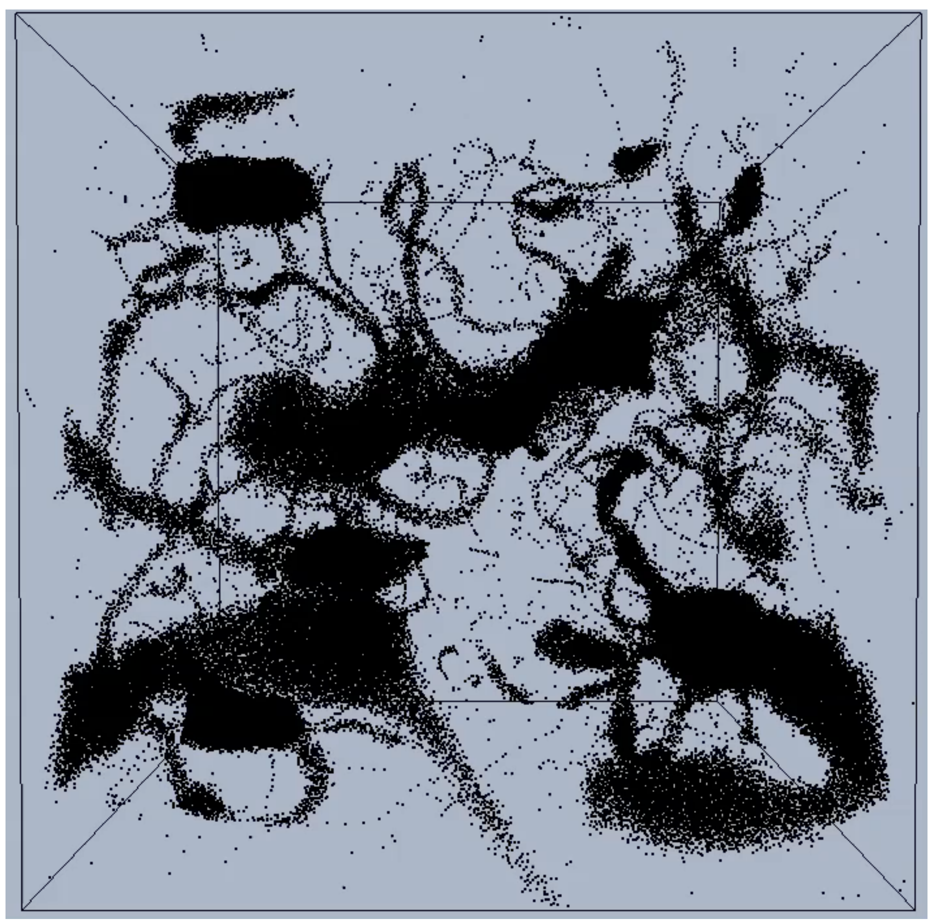
$$\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\theta}=\overrightarrow{0}\right) = \boldsymbol{q},\ \boldsymbol{P}\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\theta}=\overrightarrow{0}\right) = \boldsymbol{p}$$

$$(\delta q_{ij}, \delta p_{ij}) = \left(\varepsilon \left.\frac{\partial Q_i(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j}\right|_{\boldsymbol{\theta}=\overrightarrow{0}}, \varepsilon \left.\frac{\partial P_i(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j}\right|_{\boldsymbol{\theta}=\overrightarrow{0}} \right) \qquad |\varepsilon| \ll 1$$

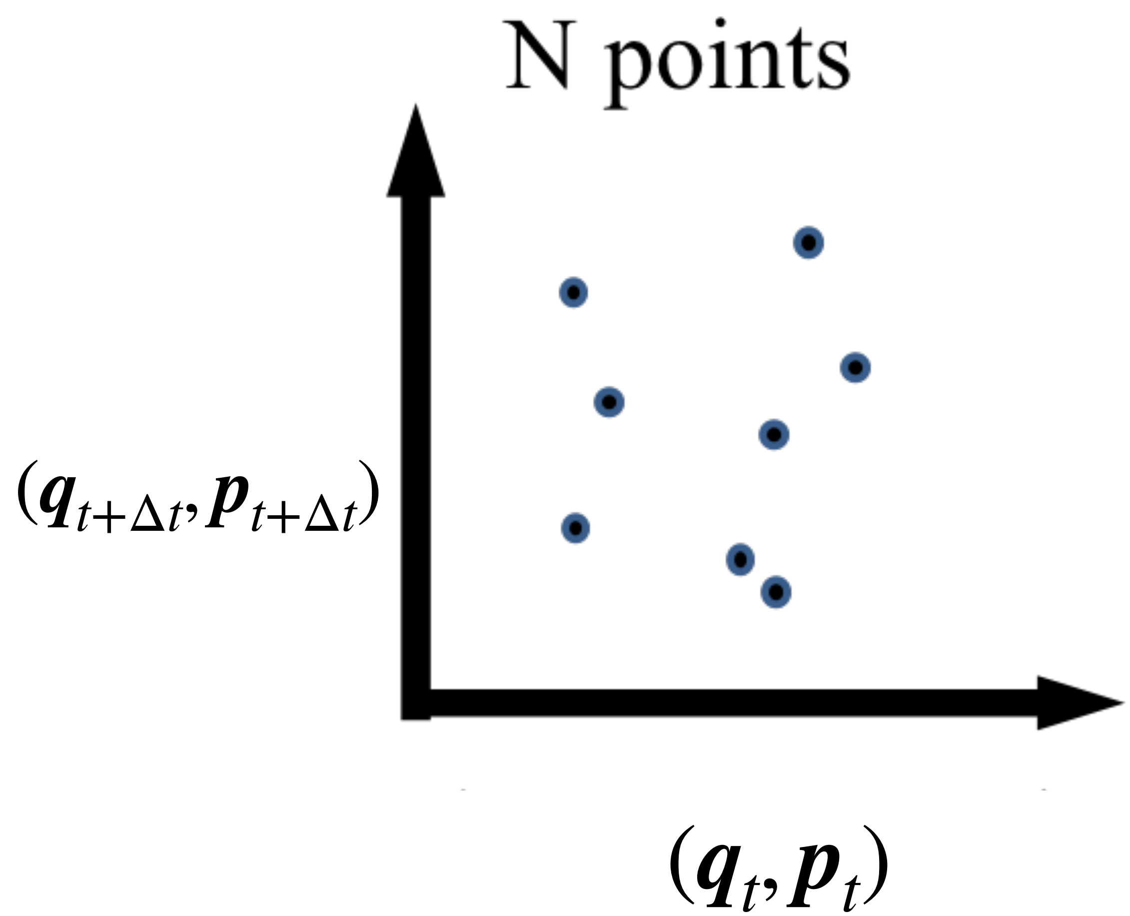
時系列データとネーターの定理

本研究における力学系時系列データの定義

$$D := \left\{ \boldsymbol{q}^i_{t_i}, \boldsymbol{p}^i_{t_i}, \boldsymbol{q}^i_{t_i+\Delta t}, \boldsymbol{p}^i_{t_i+\Delta t} \right\}_{i=1}^{N}$$



[Mototake et al. 2015]



時系列データとネーターの定理

ハミルトン系の対称性

ハミルトニアンの不変性：$H'(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \equiv H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$

$$H'(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}) := H\left(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}),\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})\right)$$

正準運動方程式の不変性：$\begin{cases} \boldsymbol{Q}_{T+\Delta T} = \dfrac{\partial H(\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T)}{\partial \boldsymbol{P}_T}\Delta T + \boldsymbol{Q}_T \\ \boldsymbol{P}_{T+\Delta T} = -\dfrac{\partial H(\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T)}{\partial \boldsymbol{Q}_T}\Delta T + \boldsymbol{P}_T \end{cases}$

$$D := \left\{\boldsymbol{q}^i_{t_i},\boldsymbol{p}^i_{t_i},\boldsymbol{q}^i_{t_i+\Delta t},\boldsymbol{p}^i_{t_i+\Delta t}\right\}_{i=1}^{N}$$

$\Updownarrow$

力学系時系列データ多様体の対称性

ハミルトニアンの不変性：$\forall E, \{\boldsymbol{q},\boldsymbol{p} \mid H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = E\} = \{\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P} \mid H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = E\}$

正準運動方程式の不変性:$\left\{\boldsymbol{q}_{t+\Delta t},\boldsymbol{p}_{t+\Delta t},\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t \;\middle|\; \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \dfrac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \dfrac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t}\right\}$

$$= \left\{\boldsymbol{Q}_{T+\Delta T},\boldsymbol{P}_{T+\Delta T},\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T \;\middle|\; \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t}\right\}$$

時系列データとネーターの定理

ハミルトン系の対称性

ハミルトニアンの不変性：$H'(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \equiv H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$

$$H'(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}) := H\left(\boldsymbol{q}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P}),\boldsymbol{p}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})\right)$$

正準運動方程式の不変性：$\begin{cases} \boldsymbol{Q}_{T+\Delta T} = \dfrac{\partial H(\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T)}{\partial \boldsymbol{P}_T}\Delta T + \boldsymbol{Q}_T \\ \boldsymbol{P}_{T+\Delta T} = -\dfrac{\partial H(\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T)}{\partial \boldsymbol{Q}_T}\Delta T + \boldsymbol{P}_T \end{cases}$

$$D := \left\{\boldsymbol{q}^i_{t_i},\boldsymbol{p}^i_{t_i},\boldsymbol{q}^i_{t_i+\Delta t},\boldsymbol{p}^i_{t_i+\Delta t}\right\}_{i=1}^N$$

⇕

力学系時系列データ多様体の対称性

$$\forall E,\ \left\{\boldsymbol{q}_{t+\Delta t},\boldsymbol{p}_{t+\Delta t},\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t \,\middle|\, H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)=E,\boldsymbol{p}_{t+\Delta t}=\boldsymbol{p}_t-\frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t},\boldsymbol{q}_{t+\Delta t}=\boldsymbol{q}_t+\frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t}\right\}$$

$$=\left\{\boldsymbol{Q}_{T+\Delta T},\boldsymbol{P}_{T+\Delta T},\boldsymbol{Q}_T,\boldsymbol{P}_T \,\middle|\, H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)=E,\boldsymbol{p}_{t+\Delta t}=\boldsymbol{p}_t-\frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t},\boldsymbol{q}_{t+\Delta t}=\boldsymbol{q}_t+\frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t,\boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t}\right\}$$

時系列データとネーターの定理

<u>問題の困難さの緩和</u>：全エネルギーという条件の緩和

$$\forall E,\ \left\{ \boldsymbol{q}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t \ \middle|\ H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

$$= \left\{ \boldsymbol{Q}_{T+\Delta T}, \boldsymbol{P}_{T+\Delta T}, \boldsymbol{Q}_T, \boldsymbol{P}_T \ \middle|\ H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

ハミルトニアンを不変にする変換，$\forall E, \{\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p} \mid H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = E\} = \{\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P} \mid H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = E\}$は
を変えない ➡ あるエネルギーに対応する時系列データ多様体の持つ対称性の中に，
系の対称製の候補が必ず含まれる．

$$\left\{ \boldsymbol{q}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t \ \middle|\ H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E_i, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

$$= \left\{ \boldsymbol{Q}_{T+\Delta T}, \boldsymbol{P}_{T+\Delta T}, \boldsymbol{Q}_T, \boldsymbol{P}_T \ \middle|\ H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E_i, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

時系列データとネーターの定理

<u>問題の困難さの緩和</u>：全エネルギーという条件の緩和

$$\forall E,\ \left\{ \boldsymbol{q}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t \;\middle|\; H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

$$= \left\{ \boldsymbol{Q}_{T+\Delta T}, \boldsymbol{P}_{T+\Delta T}, \boldsymbol{Q}_T, \boldsymbol{P}_T \;\middle|\; H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

ハミルトニアンを不変にする変換，$\forall E, \{\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p} \mid H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = E\} = \{\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P} \mid H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = E\}$は
を変えない ➡ あるエネルギーに対応する時系列データ多様体の持つ対称性の中に，
系の対称製の候補が必ず含まれる.

$$S_i := \left\{ \boldsymbol{q}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t \;\middle|\; H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E_i, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

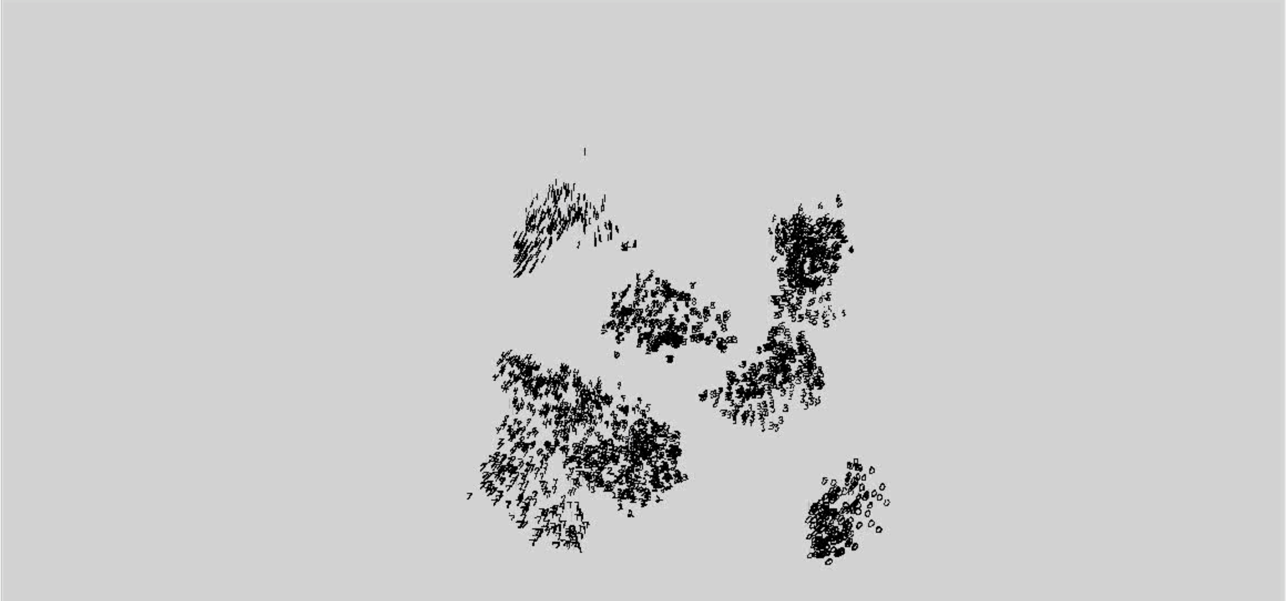
➡ある特定エネルギーE_iでの時系列データ多様体S_iの対称性を調べることが目標になった！！

深層ニューラルネットと多様体仮説

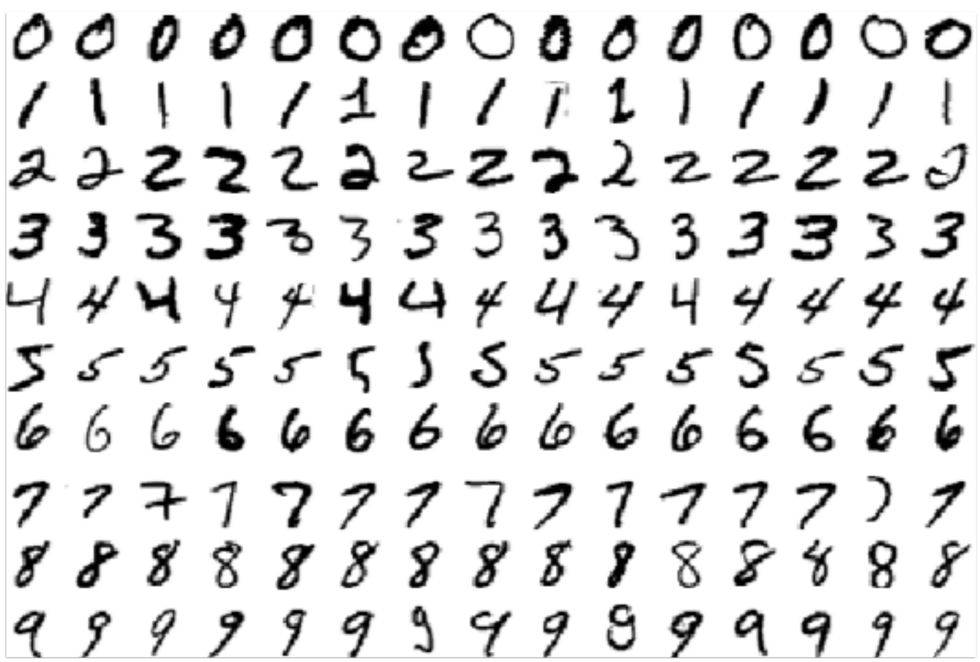
多様体仮説

the *manifold hypothesis* (Cayton, 2005; Narayanan and Mitter, 2010), according to which real-world data presented in high dimensional spaces are expected to concentrate in the vicinity of a manifold $\mathcal{M}$ of much lower dimensionality $d_{\mathcal{M}}$, embedded in high dimensional input space $\mathbb{R}^{d_x}$. This can be a potentially

↓Embedding result of hand write digit dataset(MNIST) using manifold learning (t-SNE

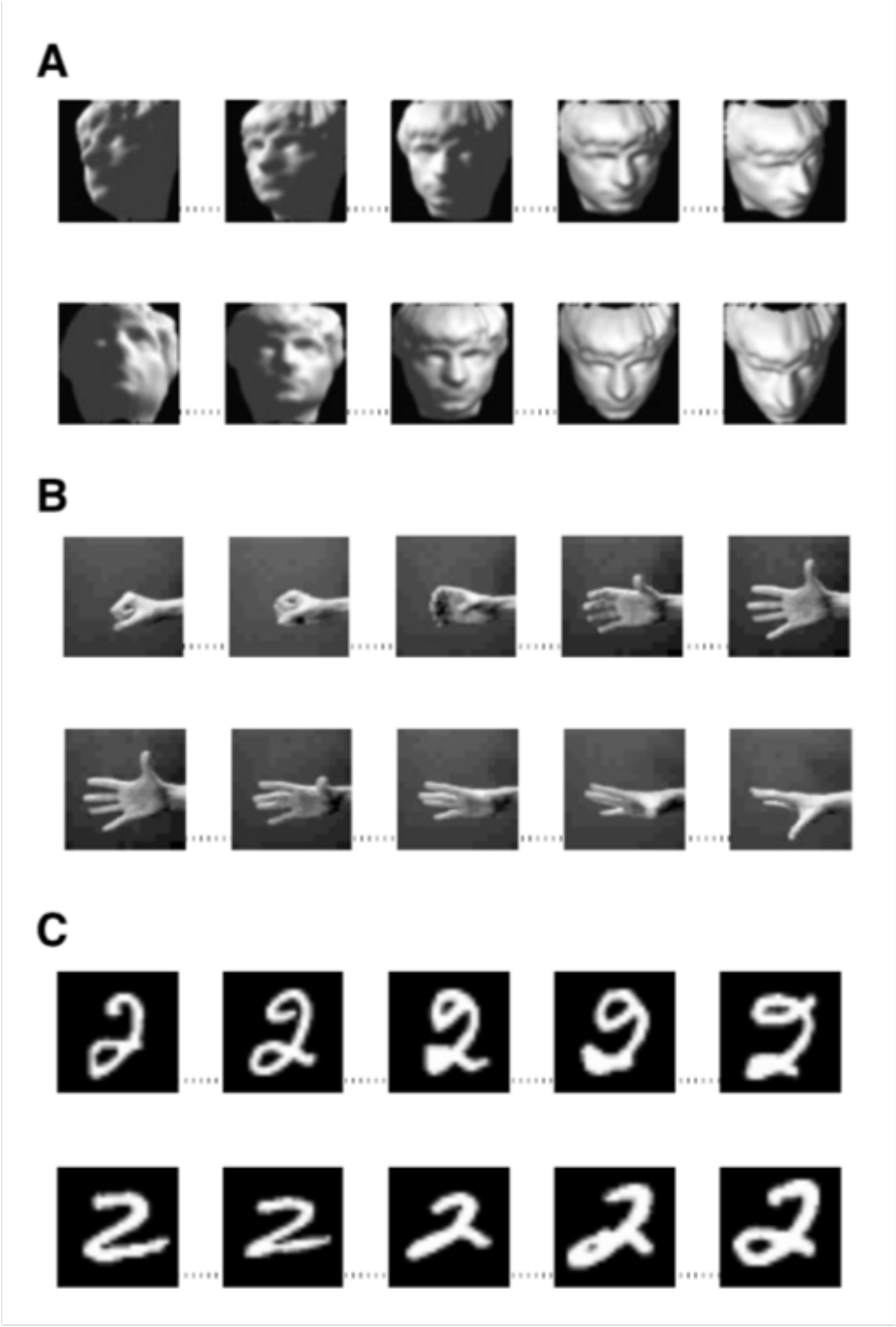


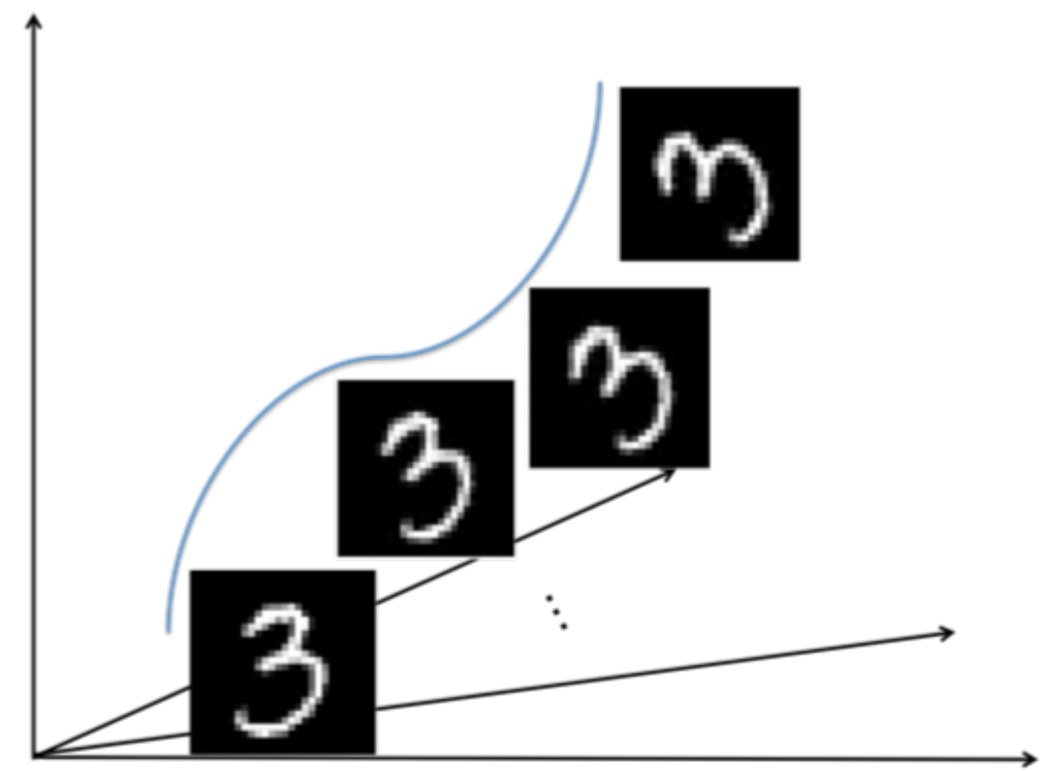
Laurens van der Maaten
http://lvdmaaten.github.io/tsne/



深層ニューラルネットと多様体仮説

多様体仮説





[J.B. Tenenbaum 2000]
Interpolations along straight lines
in the Isomap coordinate space

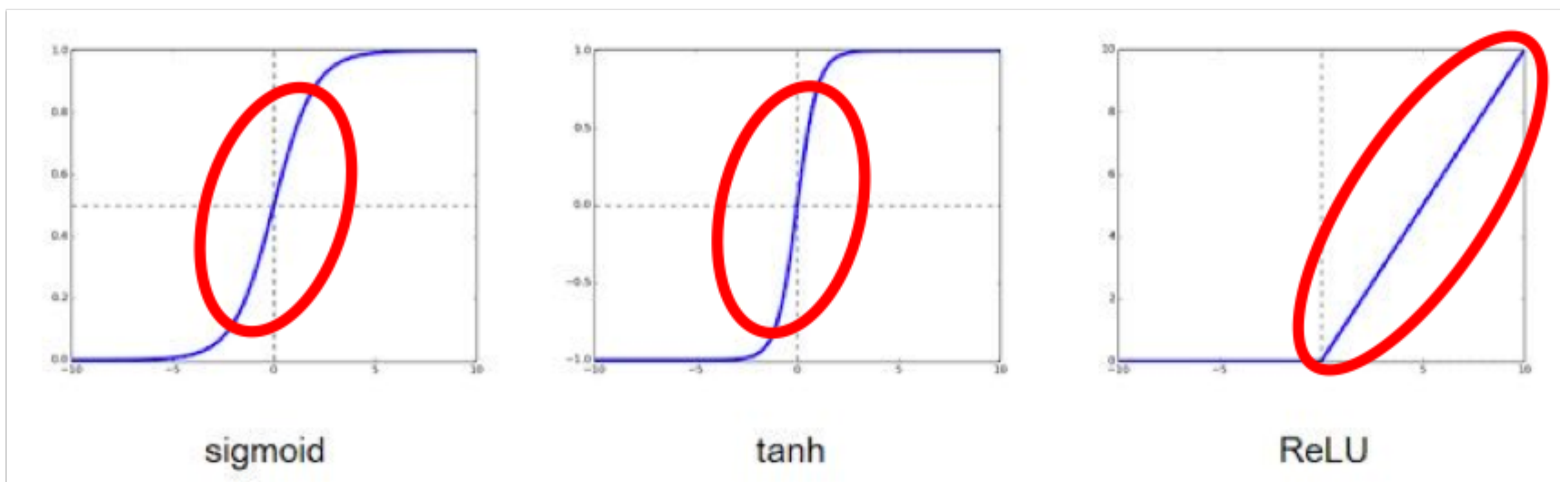
深層ニューラルネットと多様体仮説

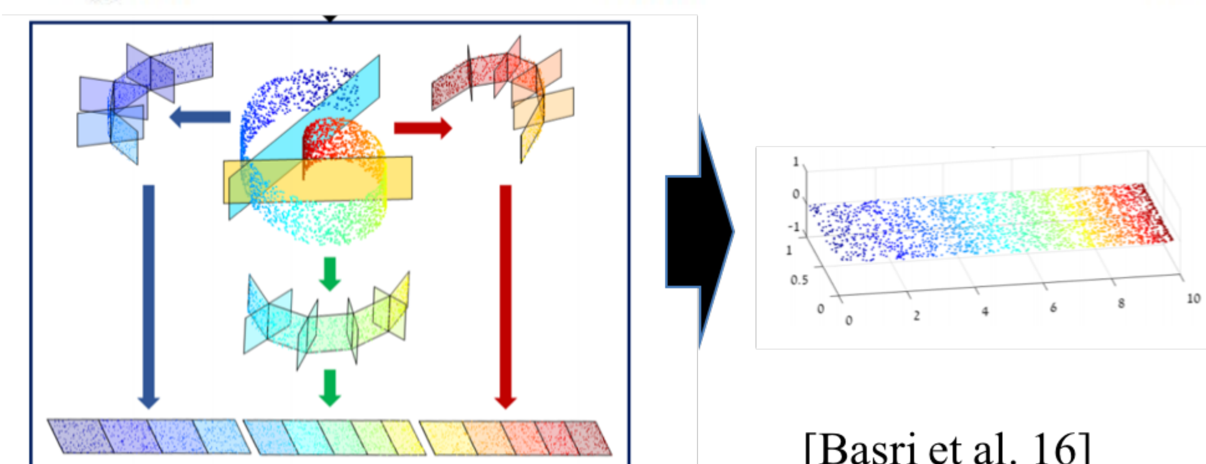
<u>ニューラルネットとデータ多様体</u>

$$\boldsymbol{h} = (h_1, h_2, \cdots, h_{d_h})$$

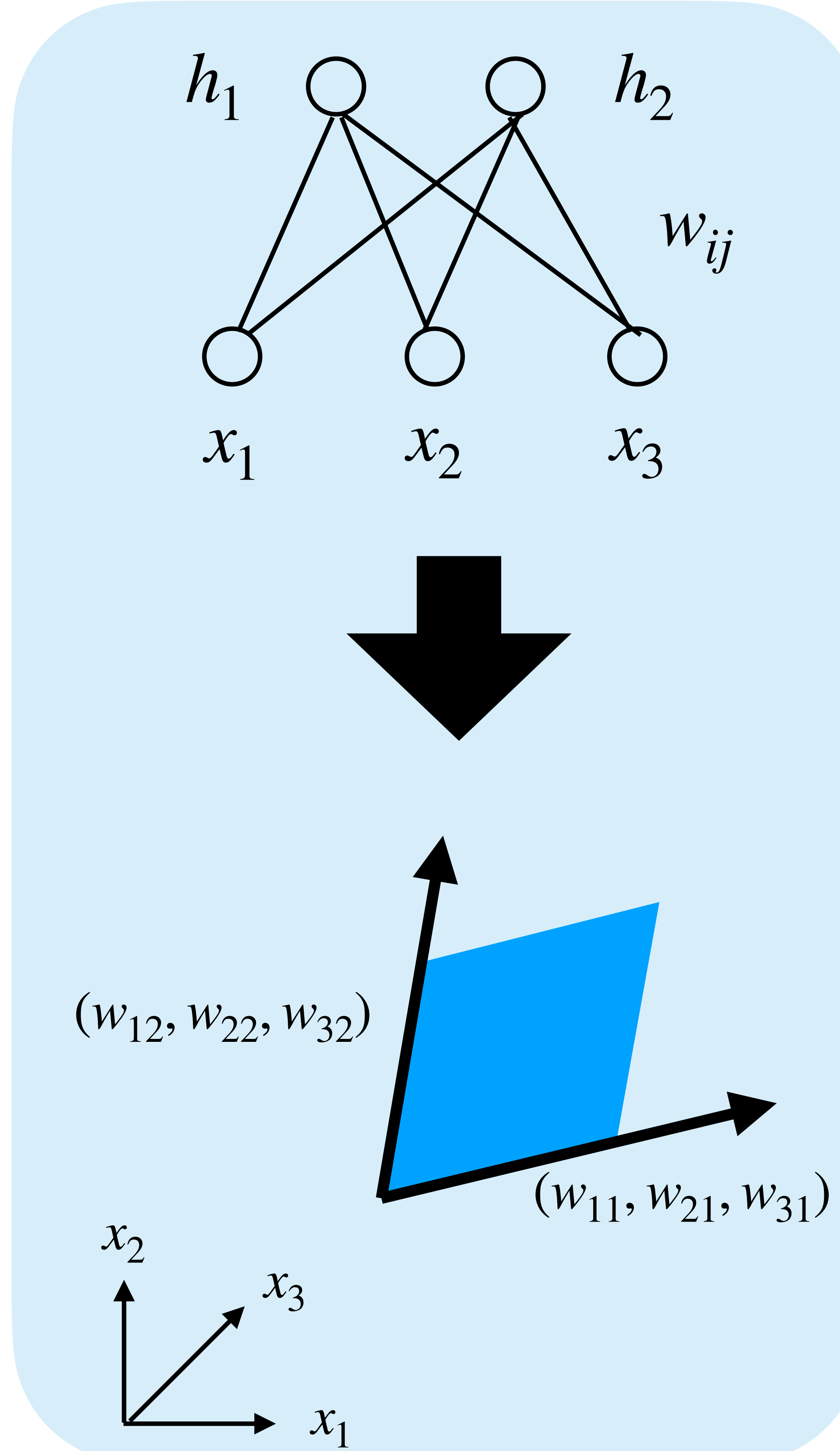
$$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{in}}\boldsymbol{x}) = (\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_{d_h}), \varphi_j = \varphi\left[\sum_{i}^{d_{\mathrm{in}}}\left(w_{ij}^{\mathrm{in}} x_i\right)\right]$$

活性化関数：$\varphi(x)$





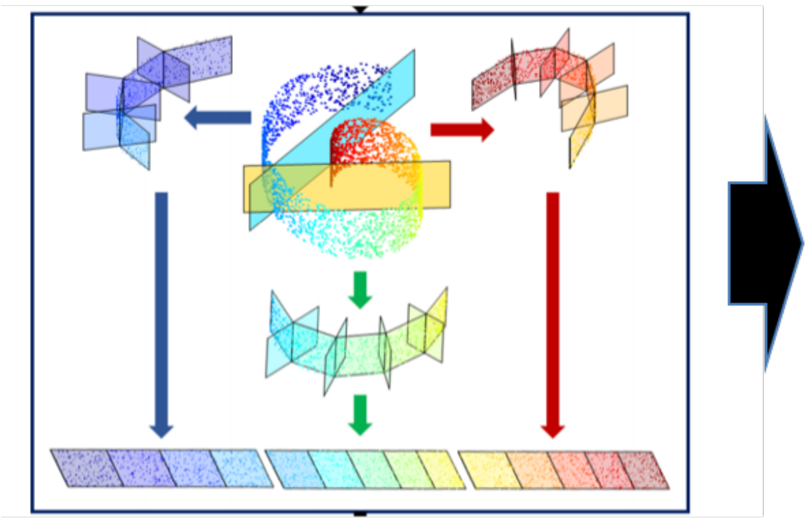
[Basri et al. 16]

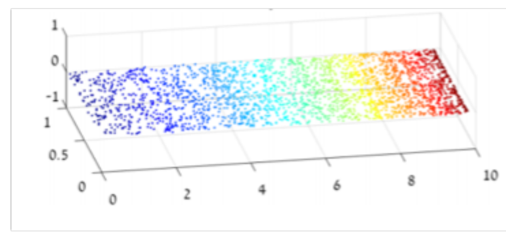


ニューラルネットは，区分的な超平面の張り合わせで多様体をモデル化可能.

深層ニューラルネットと多様体仮説

ニューラルネットとデータ多様体

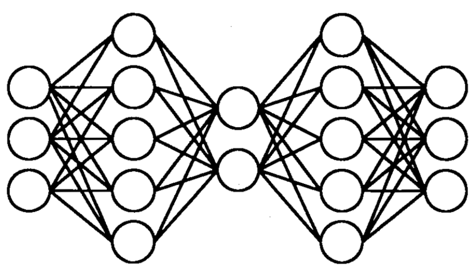


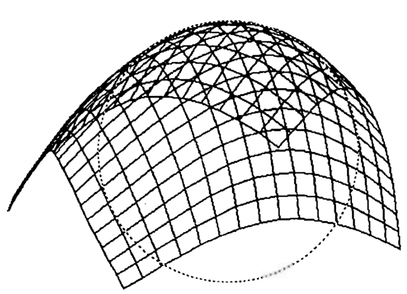


[Basri et al. 16]

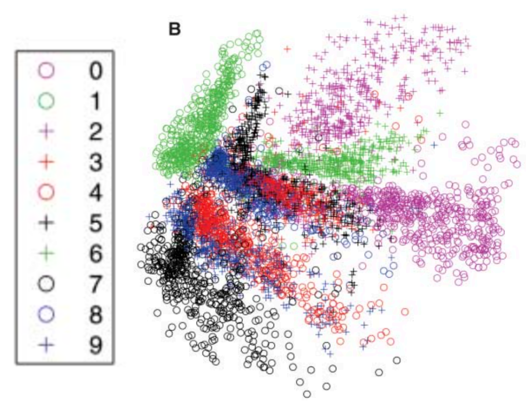
接空間のtangent方向の右特異ベクトル

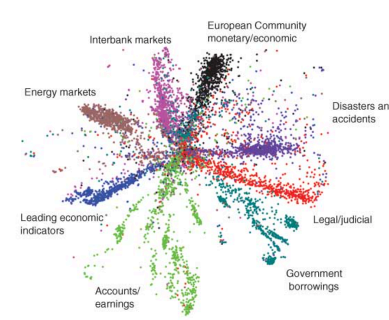
[Bengio et.al, 2012] [Refai, & Bengio et al., 2011]

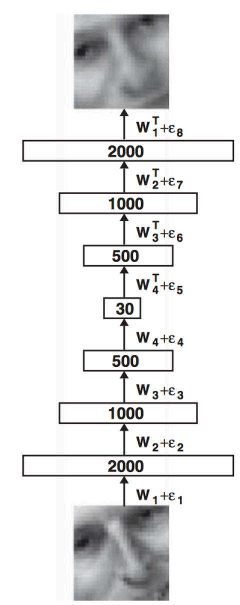




[入江・川人， 90]







[Hinton et.al 06]

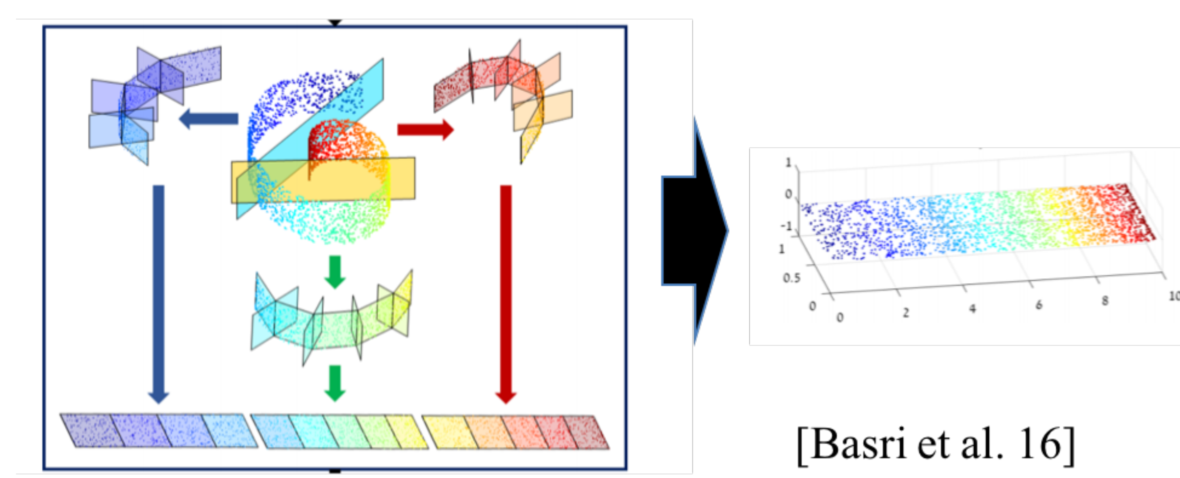
性能の高いDNNの中にデータ分布を多様体としてモデル化しているようにみえるものが多い.

ここまでのまとめ

- 時系列データ多様体S_iの座標変換に対する対称性をみることで，保存則がわかる.

$$S_i := \left\{ \boldsymbol{q}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t}, \boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t \;\middle|\; H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t) = E_i, \boldsymbol{p}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{p}_t - \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{q}_t}, \boldsymbol{q}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{q}_t + \frac{\partial H(\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{p}_t)}{\partial \boldsymbol{p}_t} \right\}$$

- DNNは多様体を超平面の貼り合わせのような形で表現できる.



[Basri et al. 16]

提案手法の説明のながれ

前提情報

1. ネーターの定理と時系列データ多様体の関係を検討

2. DNNによるデータ多様体のモデル化について検討

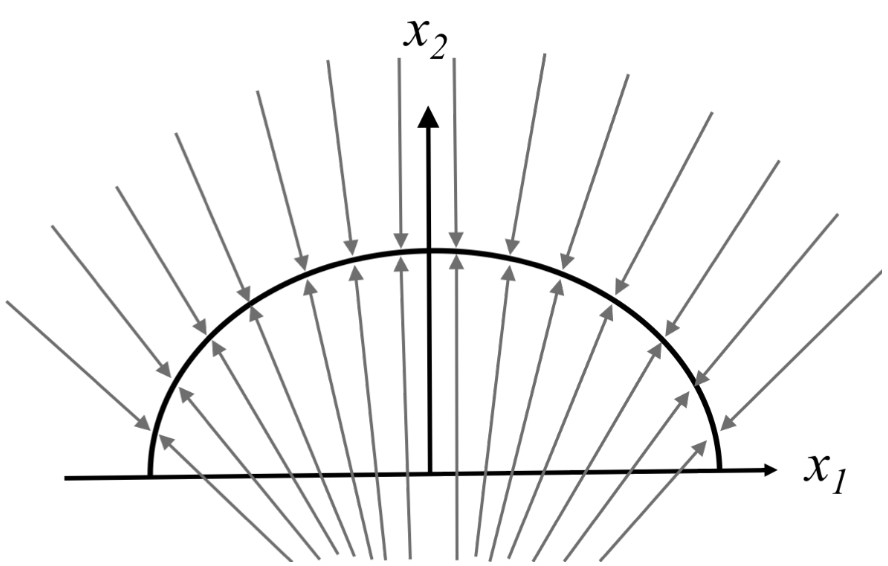
手法

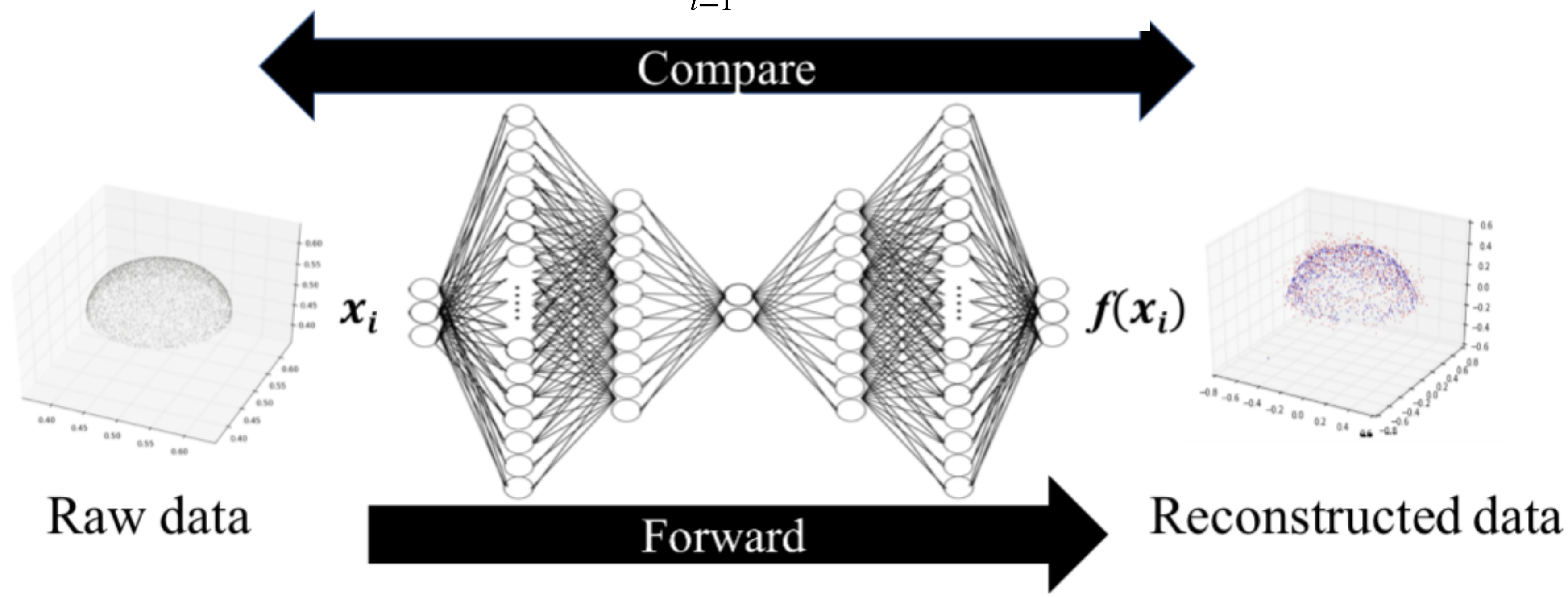
3. DNNから系の対称性を抽出する手法の説明

4. 抽出された対称性から保存則を推定する手法の説明

手法1：対称変換の抽出

$$E_{\mathrm{samp}}[\boldsymbol{X}(\,\cdot\,)] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\{\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}_i) - \boldsymbol{f}_{\mathrm{DNN}}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}_i)]\right\}^2$$



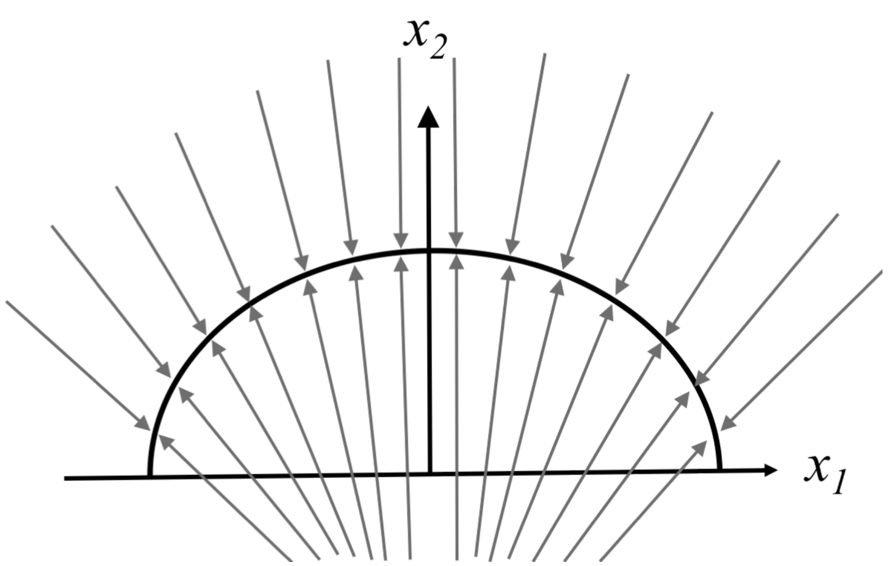


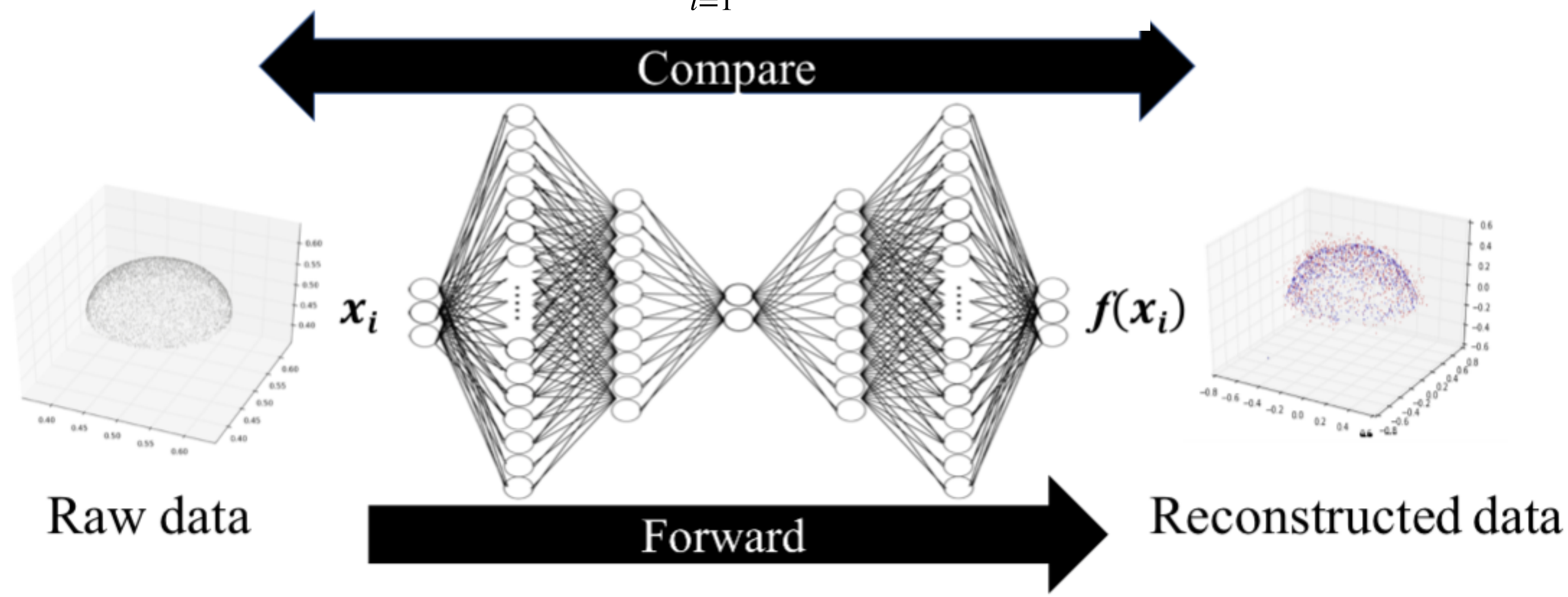
$$\left\{ \boldsymbol{X}(\,\cdot\,) \;\middle|\; \underset{\boldsymbol{X}}{\arg\min}\, E_{\mathrm{samp}}[\boldsymbol{X}(\,\cdot\,)] \right\}$$

を満たす変換$\boldsymbol{X}(\,\cdot\,)$の集合として対称変換の集合が得られる

手法1：対称変換の抽出

$$E_{\mathrm{samp}}[\boldsymbol{X}(\,\cdot\,)] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\{\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}_i) - \boldsymbol{f}_{\mathrm{DNN}}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}_i)]\right\}^2$$





$$\left\{\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,),\boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)\;\middle|\;\underset{\boldsymbol{Q}(\cdot,\cdot),\boldsymbol{P}(\cdot,\cdot)}{\arg\min}\;E_{\mathrm{samp}}\left[\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,),\boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)\right]\right\}$$

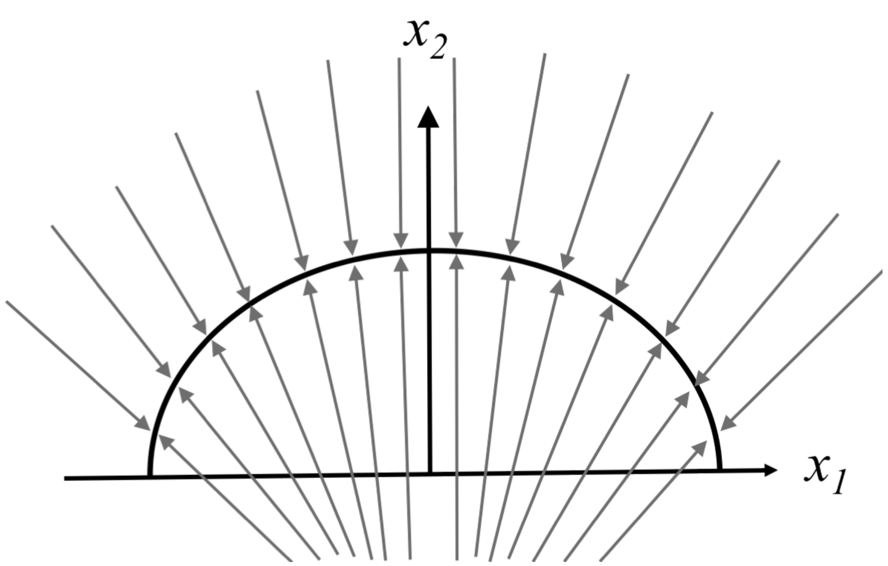
を満たす変換$\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,),\boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)$の集合として対称変換の集合が得られる

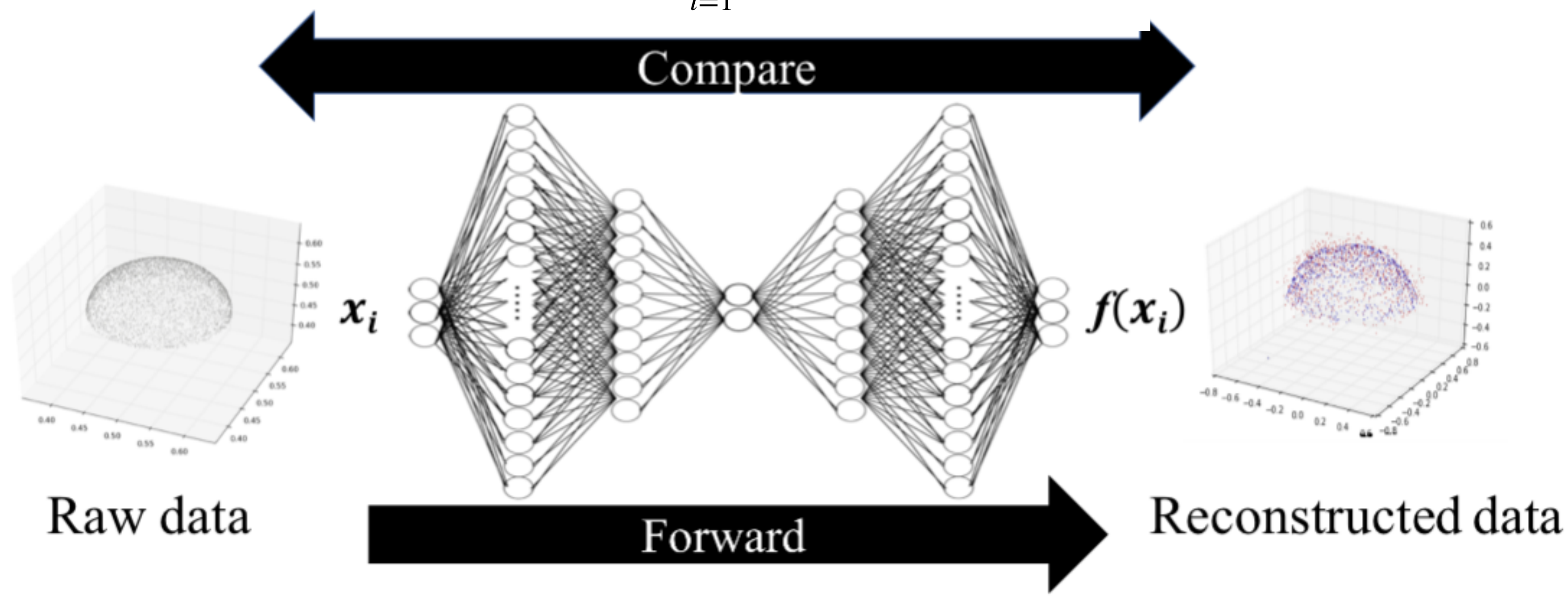
サンプリング問題に置き換え

$$\mathrm{P}\left(\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,),\boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)\right) \sim \frac{1}{Z}\exp\left\{-\frac{N}{2\sigma^2}E_{\mathrm{samp}}\left[\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,),\boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)\right]\right\}$$

手法1：対称変換の抽出

$$E_{\mathrm{samp}}[\boldsymbol{X}(\,\cdot\,)] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\{\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}_i) - f_{\mathrm{DNN}}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}_i)]\right\}^2$$





$$\mathrm{P}\left(\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,), \boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)\right) \sim \frac{1}{Z}\exp\left\{-\frac{N}{2\sigma^2}E_{\mathrm{samp}}\left[\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,), \boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)\right]\right\}$$

$$A(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} a_{11}(\boldsymbol{\theta}) & \dots & a_{1d}(\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{d1}(\boldsymbol{\theta}) & \dots & a_{dd}(\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix}$$

変換 $\boldsymbol{Q}(\,\cdot\,,\cdot\,), \boldsymbol{P}(\,\cdot\,,\cdot\,)$ を，線形変換

$$(\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P})^t = A(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})^t$$

に限定して考える.

$$\mathrm{P}(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d}) = \frac{1}{Z}\exp\left[-\frac{N}{2\sigma^2}E_{\mathrm{samp}}(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d})\right]$$

手法1：対称変換の抽出

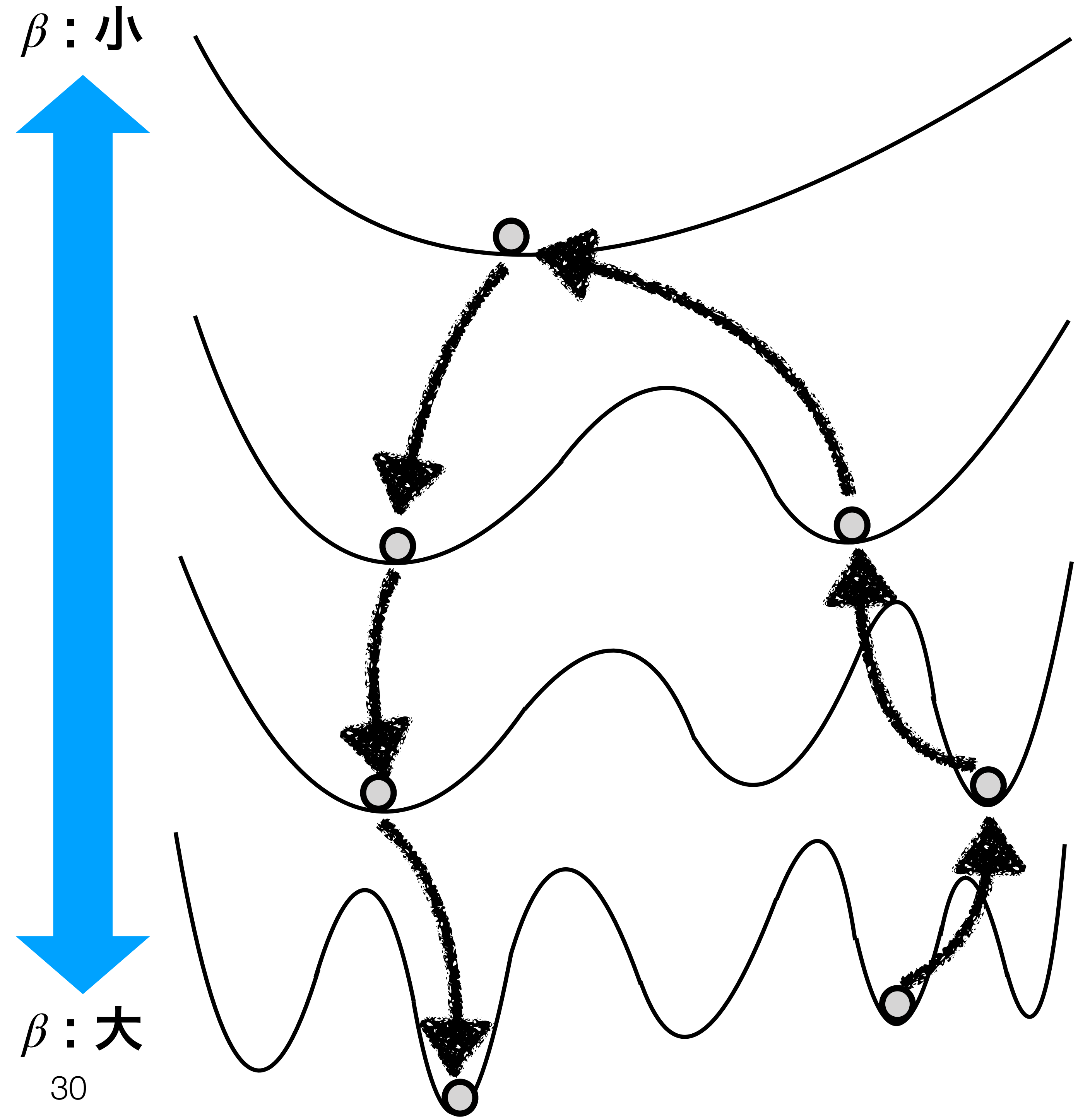
$$\mathrm{P}(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d}) = \frac{1}{Z}\exp\left[-\frac{N}{2\sigma^2}E_{\mathrm{samp}}(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d})\right]$$

- 交換モンテカルロ法 [Hukushima and Nemoto 1995]

$$\mathrm{P}(A^l) = \frac{1}{Z}\exp\left[-\beta\frac{N}{2\sigma^2}E_{\mathrm{samp}}(A^l)\right]$$

以下の同時分布からMCMCサンプリング

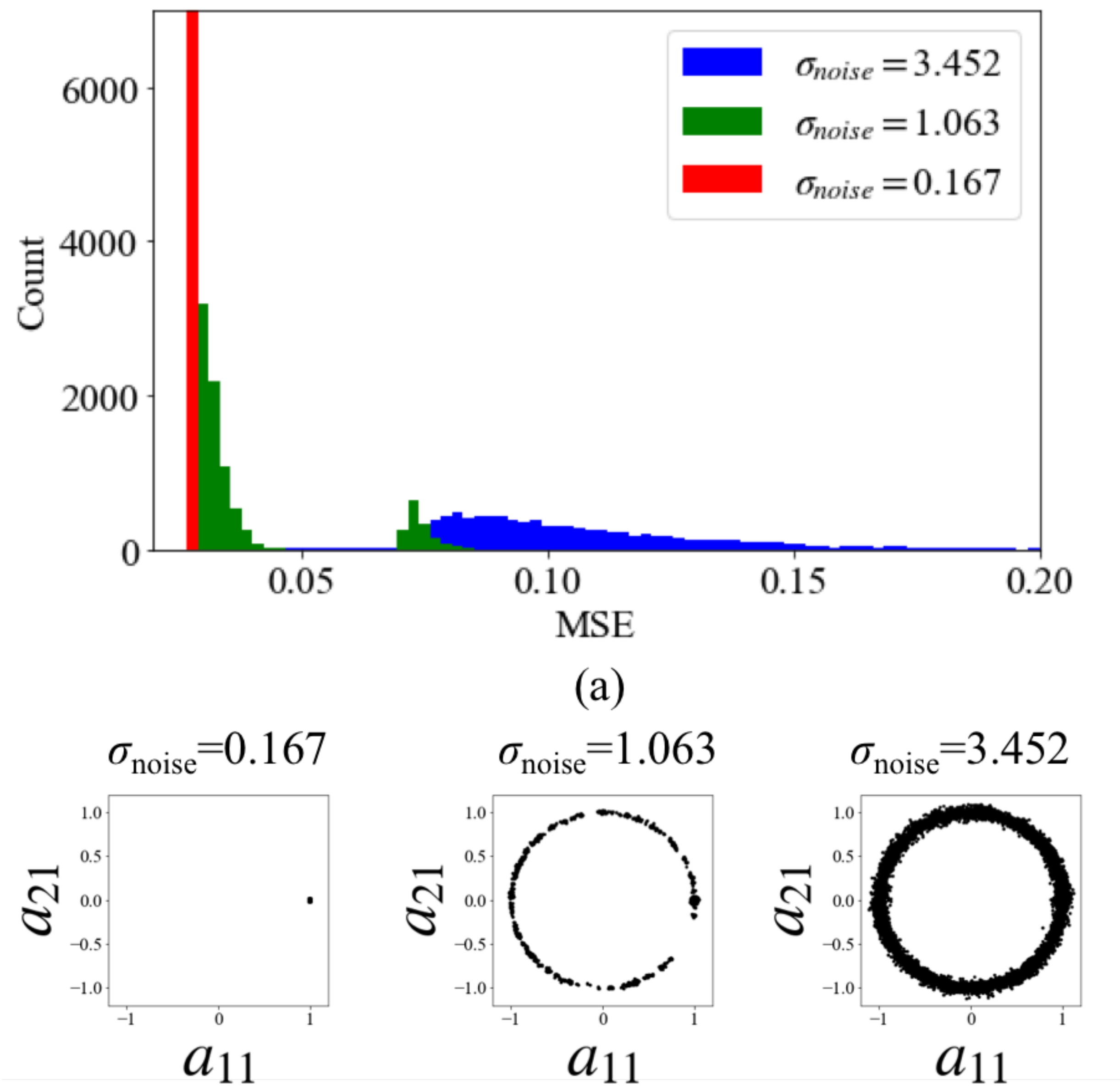
$$\boxed{\mathrm{P}(A^1, A^2 \cdots A^L) = \prod_{l-1}^{L}\mathrm{P}(A^l)}$$



手法1：対称変換の抽出

$$\mathrm{P}(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d}) = \frac{1}{Z}\exp\left[-\frac{N}{2\sigma^2}E_{\mathrm{samp}}(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d})\right]$$

- 交換モンテカルロ法 [Hukushima and Nemoto 1995]



手法1：対称変換の抽出

Algorithm 1 Estimation of the invariant transformation set

Input: dataset $D = \left\{\boldsymbol{q}^i_{t_i}, \boldsymbol{p}^i_{t_i}, \boldsymbol{q}^i_{t_i+\Delta t}, \boldsymbol{p}^i_{t_i+\Delta t}\right\}_{i=1}^{N}$ in a given coordinate system.

Output: Invariant transformation set $D_a = \{(a_{11}, a_{12} \cdots, a_{1d}, a_{21} \cdots, a_{2d\,2d})_{n_a}\}_{n_a=1}^{N_a}$.

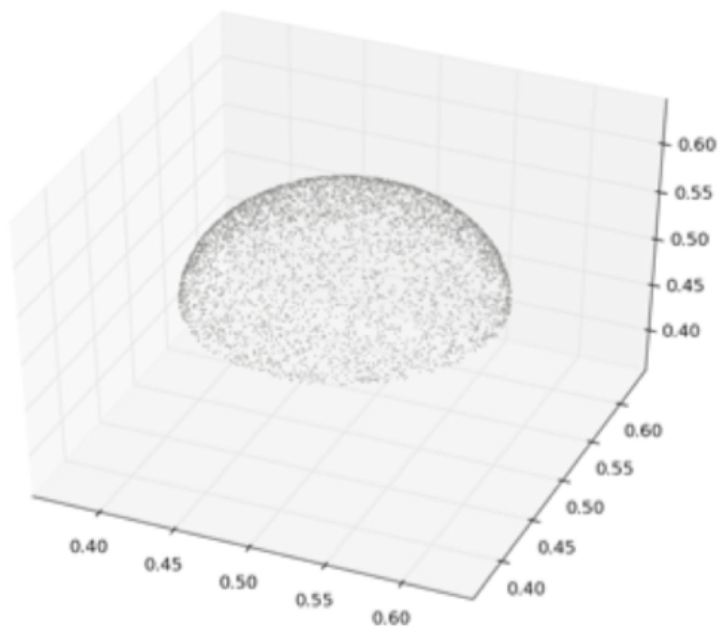
Step 1: Train the deep autoencoder with dataset D.

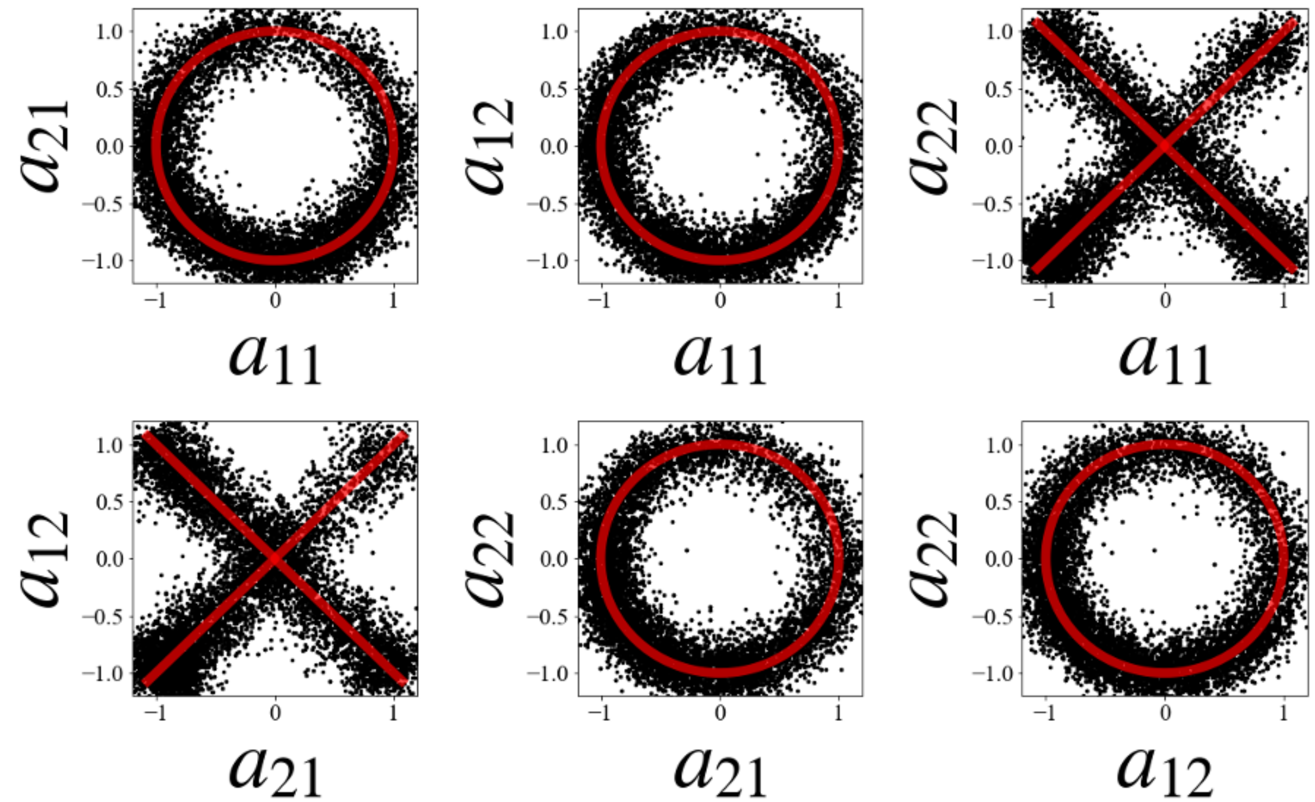
Step 2: Using the trained deep autoencoder and REMC method, sampling transformation parameters $a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d}$ from multiple probability distributions $P'(a_{11}, a_{12}, a_{21}, \cdots, a_{2d\,2d})$ corresponding to different noise intensities σ'.

Step 3: Select σ' from the distribution structure of the sampling results and output the sampling result of the selected σ' state as D_a.

手法２：無限小変換の推定

対称な変換の集合 $D_a := \{(a_{11}, a_{12}\cdots, a_{1d}, a_{21}\cdots, a_{2d\,2d})_{n_a}\}_{n_a=1}^{N_a}$





$$(\delta q_{ij}, \delta p_{ij}) = \left(\varepsilon \frac{\partial Q_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j}\bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\vec{0}}, \varepsilon \frac{\partial P_i(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j}\bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\vec{0}} \right)$$

無限小変換

$$M_{\mathrm{invariant}} \sim \left\{ A(\boldsymbol{\theta})\begin{pmatrix}\boldsymbol{q}\\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} \,\middle|\, \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{d_\theta} \right\}$$

リー群のなす多様体の接空間 $T_I M_{\mathrm{invariant}}$

手法２：無限小変換の推定

対称変換の集合

$$D_a := \{(a_{11}, a_{12}\cdots, a_{1d}, a_{21}\cdots, a_{2d\,2d})_{n_a}\}_{n_a=1}^{N_a}$$

$$A'(\boldsymbol{\theta}) = (a'_1(\boldsymbol{\theta}), \cdots, a'_{d'}(\boldsymbol{\theta})) := (a_{11}(\boldsymbol{\theta}), \cdots, a_{1d}(\boldsymbol{\theta}), a_{21}(\boldsymbol{\theta}), \cdots, a_{2d}(\boldsymbol{\theta}), \cdots, a_{d1}(\boldsymbol{\theta}), \cdots, a_{2d\,2d}(\boldsymbol{\theta}))$$

$$\begin{cases} f_1(a'_1, \cdots, a'_{d'}) = 0 \\ \vdots \\ f_{d'-d_\theta}(a'_1, \cdots, a'_{d'}) = 0 \end{cases}$$

リー群のなす多様体の陰関数表示

a_{ij} **の一部を変換のパタメータ** θ **とする➡**

陰関数定理より

ただし, $J_{kl} = \dfrac{\partial f_k(a'_1, \cdots, a'_{d'})}{\partial b_l}$

が正則であるとする.

$(b_1, b_2, \cdots, b_{d_\theta}) \subset A'$, $\quad \{c_k\}_{k=1}^{d'-d_\theta} := A' \backslash \{b_l\}_{l=1}^{d_\theta}$, $\quad c_k = g_i(b_1, \cdots, b_{d_\theta})$

$$\begin{cases} h_1(c_1, b_1, \cdots, b_{d_\theta}) = 0 \\ \vdots \\ h_{d'-d_\theta}(c_{d'-d_\theta}, b_1, \cdots, b_{d_\theta}) = 0 \end{cases}$$

手法２：無限小変換の推定

bをθのかわりの連続パラメータと考えて，無限小変換を推定

$$
\begin{cases}
\frac{\partial}{\partial b_l} h_1(c_1, b_1, \cdots, b_{d_\theta}) |_{A'=e_I} = 0 \\
\qquad \vdots \\
\frac{\partial}{\partial b_l} h_{d'-d_\theta}(c_{d'-d_\theta}, b_1, \cdots, b_{d_\theta}) |_{A'=e_I} = 0
\end{cases}
$$

$$
\begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{q}_l \\ \delta \boldsymbol{p}_l \end{pmatrix} = \varepsilon \left. \frac{A(b_l)}{\partial b_l} \right|_{A=\boldsymbol{I}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \frac{\partial a_{1\,1}}{\partial b_l} |_{A=\boldsymbol{I}} & \cdots & \frac{\partial a_{2d\,1}}{\partial b_l} |_{A=\boldsymbol{I}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial a_{1\,2d}}{\partial b_l} |_{A=\boldsymbol{I}} & \cdots & \frac{\partial a_{2d\,2d}}{\partial b_l} |_{A=\boldsymbol{I}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix}
$$

手法２：無限小変換の推定

サンプリング結果 $D_b \equiv \{(c_k, b_1, b_2, \cdots, b_{d'_\theta})_{n_a}\}_{n_a=1}^{N_a}$ を，

$$\hat{h}_k(c_k, b_1, b_2, \cdots, b_{d'_\theta}; \beta, \gamma, d'_\theta) := \sum_{s_0=0}^{d_b} \sum_{s_1=0}^{d_b} \cdots \sum_{s_{d'_\theta}=0}^{d_b} \gamma_{s_0 s_1 s_2 \cdots s_{d'_\theta}} \beta_{s_0 s_1 s_2 \cdots s_{d'_\theta}} c_k^{s_0} b_1^{s_1} b_2^{s_2} \cdots b_{d'_\theta}^{s_{d'_\theta}} = 0$$

で直交距離回帰して，多様体の陰関数表示を得る.

$$\begin{cases} h_1(c_1, b_1, \cdots, b_{d_\theta}) = 0 \\ \qquad \vdots \\ h_{d'-d_\theta}(c_{d'-d_\theta}, b_1, \cdots, b_{d_\theta}) = 0 \end{cases}$$

ここで， β は回帰係数, γ は基底選択を表現するバイナリベクトルとする.

γ はベイズ情報量基準（BIC）で決定する.

手法２：無限小変換の推定

Algorithm 2 Estimation of infinitesimal transformation

Input: Sampling results of Method 1, $D_a = \{(a_{11}, a_{12} \cdots, a_{1d}, a_{21} \cdots, a_{2d\,2d})_{n_a}\}_{n_a=1}^{N_a}$

Output: Infinitesimal transformation, $\delta \boldsymbol{q}_l$, $\delta \boldsymbol{p}_l$.

Step 1: Extract $D_b = \{(c_k, b_1, b_2, \cdots, b_{d'_\theta})_{n_a}\}_{n_a=1}^{N_a}$ from D_a.

Step 2: Fit D_b with the implicit polynomial function $\hat{h}_k(c_k, b_1^l, b_2^l, \cdots, b_{d'_\theta}^l; \beta, \gamma, d'_\theta)$ [Eq. (54)] for each c_k.

Step 3: Estimate the likelihood [Eq. (G1)] by numerical integration of Z [Eq. (G2)].

Step 4: Select the indicator vector γ and the dimension d'_θ of $M_{\mathrm{invariant}}$ in Eq. (54) for each c_k using the BIC,

.

Step 5: Determine whether the Jacobi matrix $J_{kl} = \frac{\partial h_k(c_k, b_1, \cdots, b_{d_\theta})}{\partial b_l}$ is nonsingular. If J_{kl} is singular, return to Step 1 and re-extract D'_b.

Step 6: Differentiate the obtained simultaneous equations with respect to b_l around a point $e_{\boldsymbol{I}}$ to obtain Eq. (52).

Step 7: Solve the simultaneous equations in Eq. (52) and obtain the infinitesimal transformation, $\delta \boldsymbol{q}_l$, $\delta \boldsymbol{p}_l$.

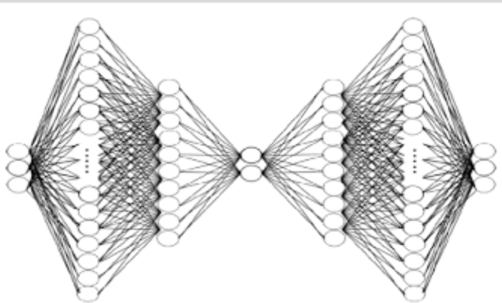
提案手法のまとめ

Definitions

$$H: M_E \to \mathbb{R}$$
$$H': M'_E \to \mathbb{R}$$
$$M_E \coloneqq \{\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t \mid H(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t)=E\}$$
$$M'_E \coloneqq \{\mathbf{Q}_T, \mathbf{P}_T \mid H'(\mathbf{Q}_T, \mathbf{P}_T)=E\}$$
$$\mathbb{u} : (\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t) \mapsto (\mathbf{q}_{t+1}, \mathbf{p}_{t+1})$$
$$\mathbb{u}' : (\mathbf{Q}_t, \mathbf{P}_t) \mapsto (\mathbf{Q}_{t+1}, \mathbf{P}_{t+1})$$
$$\mathbb{c} : (\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t, \mathbf{q}_{t+1}, \mathbf{p}_{t+1}) \mapsto (\mathbf{Q}_T, \mathbf{P}_T, \mathbf{Q}_{T+1}, \mathbf{P}_{T+1})$$
$$f_{\mathrm{DNN}}(x) = \begin{cases} x & \text{if } x \in M_E \times \mathbb{u}(M_E) \\ y & \text{else} \end{cases}$$
where $y \neq x$.

$T_I M$: tangent space of M at identity mat.

G_l: $\mathbb{R}$ (conserved value)



f_{DNN} : deep auto encoder trained by $M_E \times \mathbb{u}(M_E)$

Relationship between time series dataset $M_E \times \mathbb{u}(M_E)$ and symmetry transformation set $M_{\mathrm{invariant}}$

$$\begin{tikzcd}
\mathbb{R} & & \mathbb{R} \\
\boxed{M_E \times \mathbb{u}(M_E)} \arrow[u, "H"] \arrow[rr, "\mathbb{c}"] \arrow[d, "f_{\mathrm{DNN}}"] & & \boxed{M'_E \times \mathbb{u}'(M'_E)} \arrow[u, "H'"] \arrow[d, "f_{\mathrm{DNN}}"] \\
M_E \times \mathbb{u}(M_E) & & f_{\mathrm{DNN}}([M'_E \times \mathbb{u}'(M'_E)])
\end{tikzcd}$$

$$M_{\mathrm{invariant}} \coloneqq \forall E \, \{\mathbb{c} \mid M_E \times \mathbb{u}(M_E) = M'_E \times \mathbb{u}'(M'_E)\}$$

【Method 1: Inferring the symmetry (Sec. III A)】

$$M_{\mathrm{invariant}} \approx \forall E \, \{\mathbb{c} \mid [M'_E \times \mathbb{u}'(M'_E)] = f_{\mathrm{DNN}}([M'_E \times \mathbb{u}'(M'_E)])\}$$

【Method 2: Inferring the conservation law (Sec. III B)】

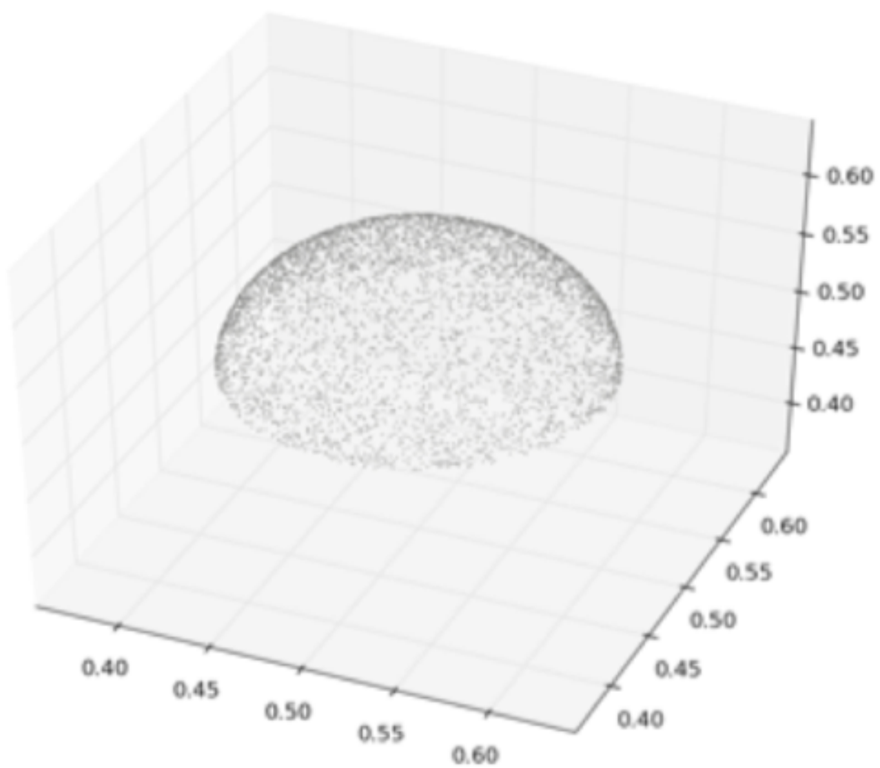
$$[T_I M_{\mathrm{invariant}}]_l = \left(\frac{\partial G_l}{\partial p}, -\frac{\partial G_l}{\partial q}\right)$$

Derived from Noether's theorem. (Sec. II)

結果1

モデル

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = r,\ (x_3 > 0)$$



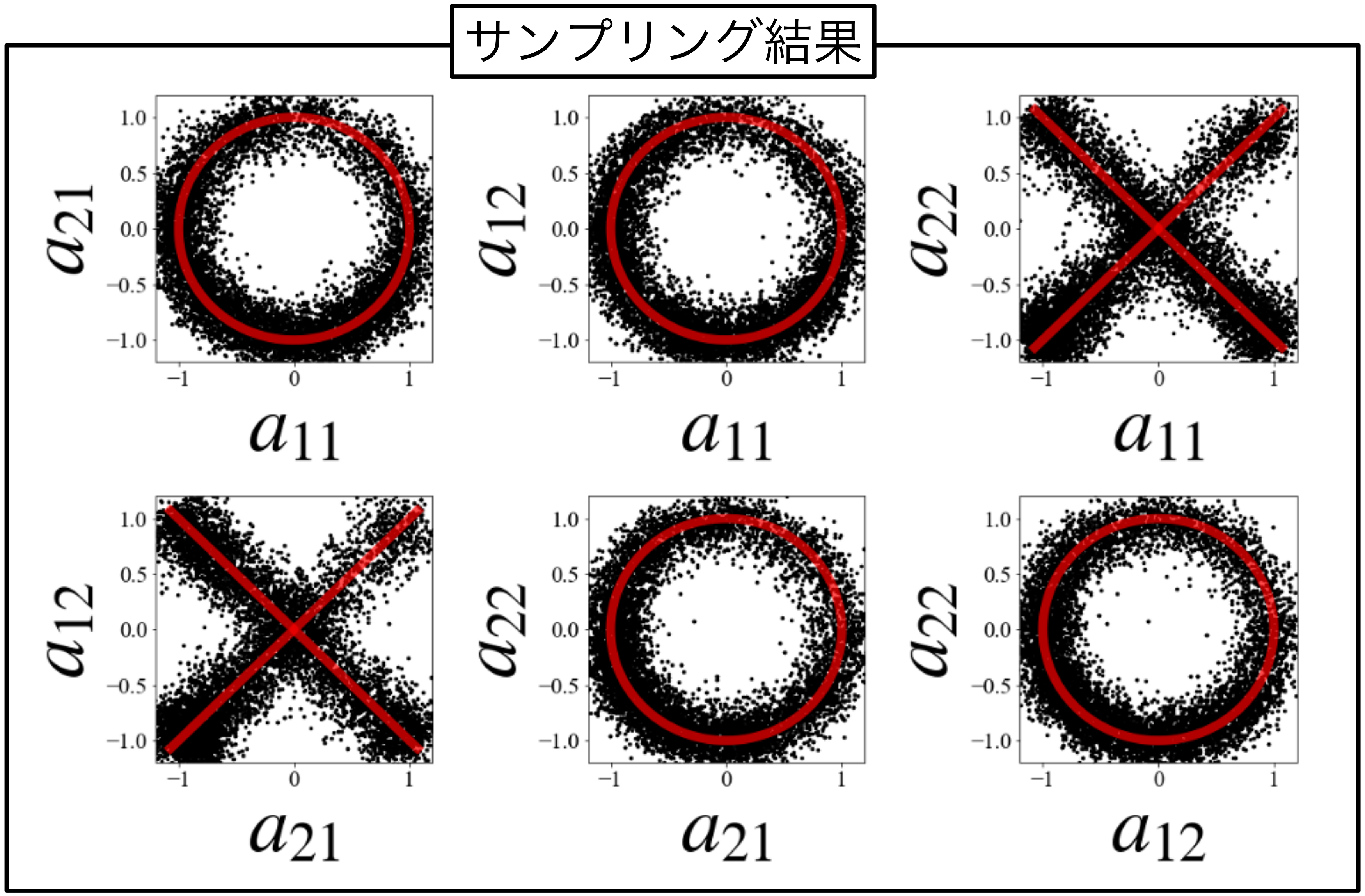
座標系

$$(x_1, x_2, x_3)$$

変換行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & 0 \\ a_{12} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

結果1



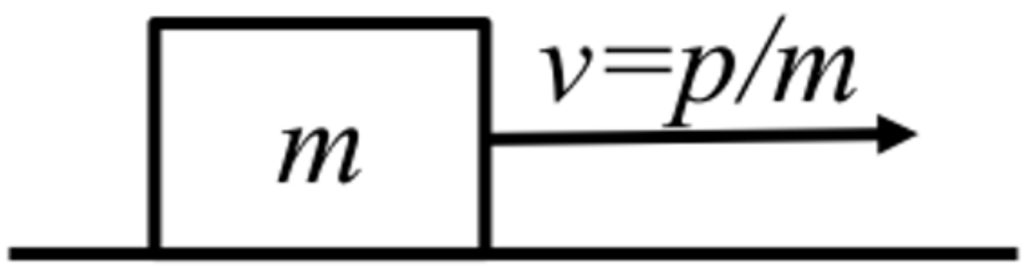
陰関数の回帰結果

$$
\begin{cases}
a_{11}^2 + 0.99a_{21}^2 = 1 \\
a_{11}^2 + a_{12}^2 = 1 \\
a_{11}^2 - a_{22}^2 = 0 \\
a_{21}^2 - a_{12}^2 = 0 \\
a_{21}^2 + a_{22}^2 = 1 \\
a_{12}^2 + a_{22}^2 = 1
\end{cases}
$$

結果2

モデル

$$H_2 = \frac{p^2}{2m}$$



座標系

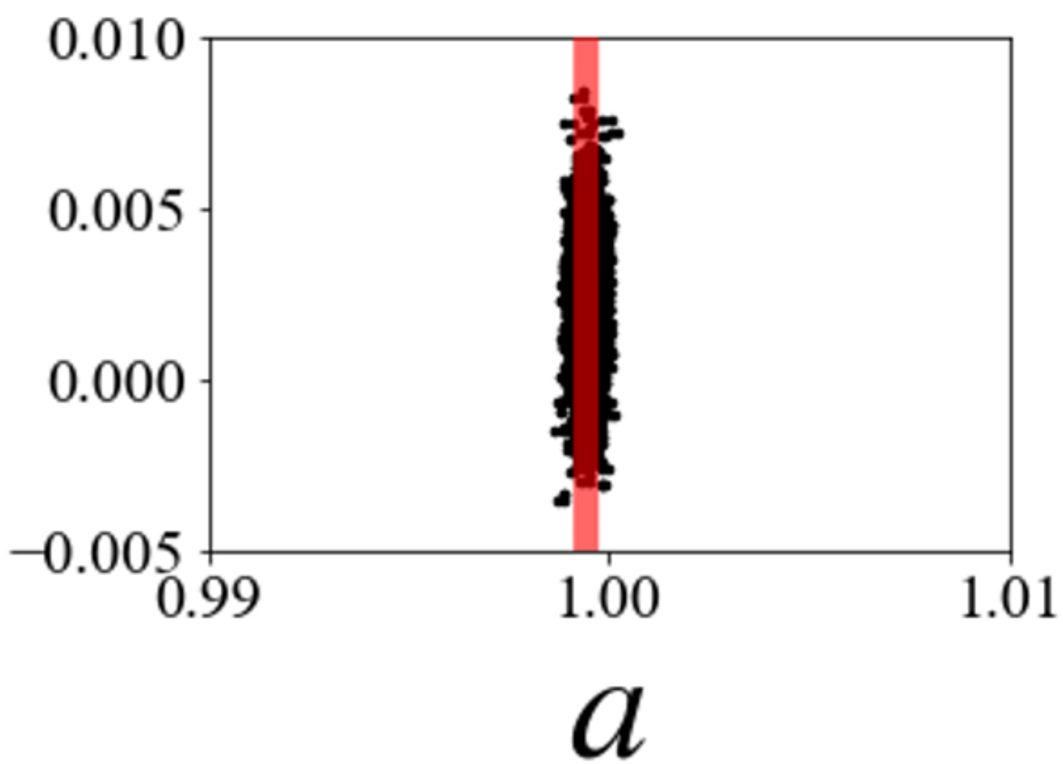
$$(q,1,p,1)$$

変換行列

$$A = \begin{pmatrix} a & b & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

結果2

サンプリング結果



陰関数の回帰結果

$$a = 1.0$$

無限小変換の推定結果

$$\begin{cases} \delta q = \epsilon \dfrac{\partial a}{\partial b} q + \epsilon \dfrac{\partial b}{\partial b} = \epsilon \\ \delta p = \epsilon \dfrac{\partial a}{\partial b} p = 0 \end{cases}$$

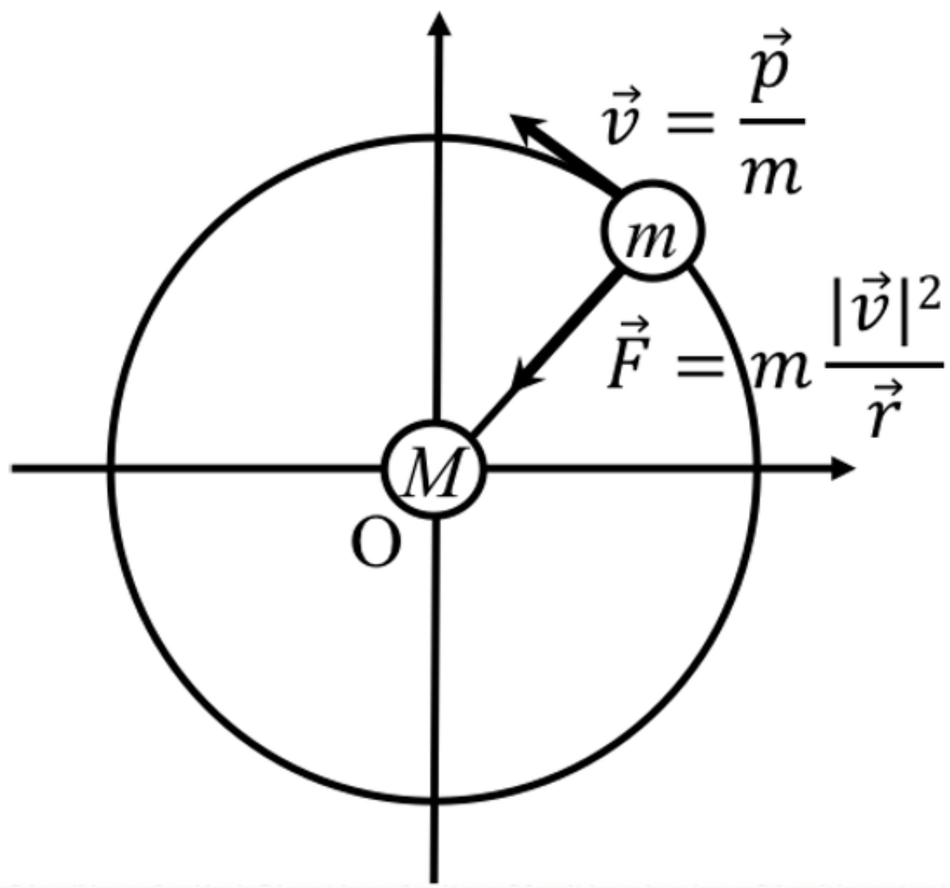
保存則

$$G_\delta = 1.0\varepsilon p$$

結果3

モデル

$$H_3 = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + G\frac{mM}{|\boldsymbol{q}|}$$



座標系

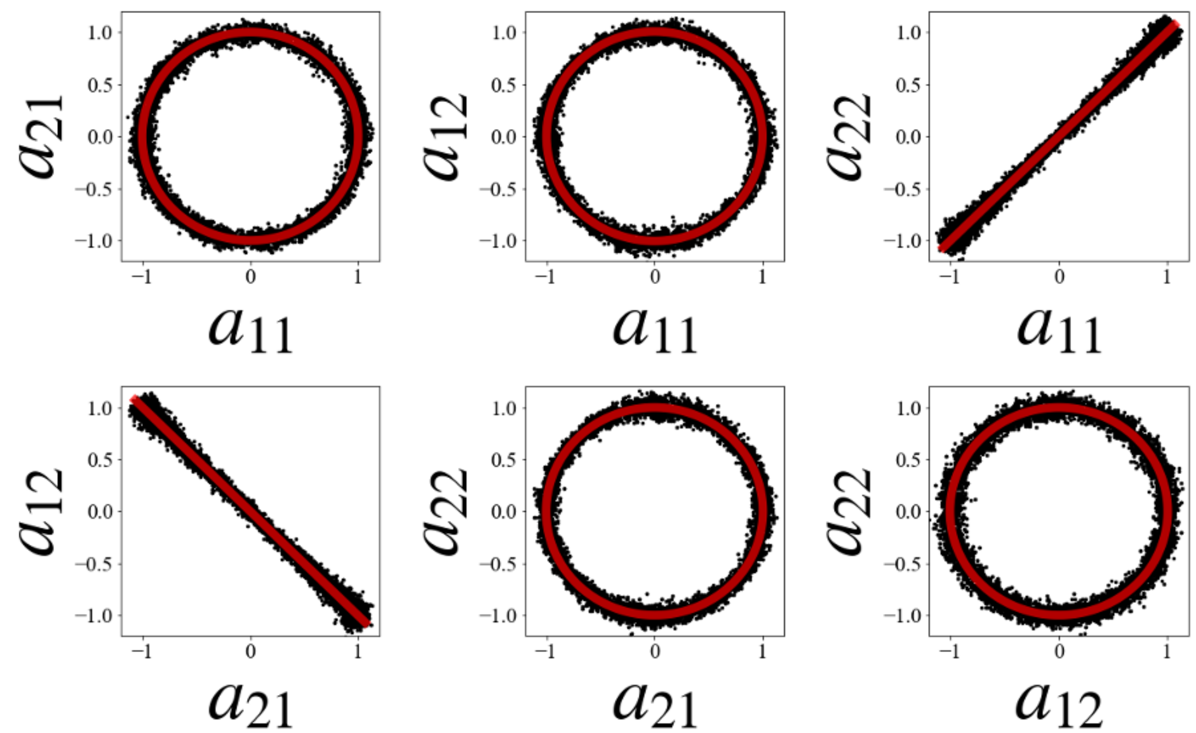
$$(q_1, q_2, p_1, p_2)$$

変換行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & 0 & 0 \\ a_{12} & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{11} & a_{21} \\ 0 & 0 & a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}$$

結果3

サンプリング結果



陰関数の回帰結果

$$
\begin{cases}
a_{11}^2 + 0.99a_{21}^2 = 1 \\
a_{11}^2 + 0.98a_{12}^2 = 1 \\
a_{11} - a_{22} = 0 \\
a_{21} + 0.99a_{12} = 0 \\
a_{21}^2 + 1.01a_{22}^2 = 1.01 \\
a_{12}^2 + 1.02a_{22}^2 = 1.02
\end{cases}
$$

無限小変換の推定結果

$$
\delta \boldsymbol{q} = \varepsilon \begin{pmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \\ \frac{\partial a_{12}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \end{pmatrix} \boldsymbol{q} = \varepsilon \begin{pmatrix} \left.\frac{-2\times 0.99a_{21}}{2a_{11}}\right|_{A=I} & 1 \\ -1/0.99 & \left.\frac{-2a_{21}}{1.01\times 2a_{22}}\right|_{A=I} \end{pmatrix} \boldsymbol{q} = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ -1.01\varepsilon & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{q} \approx \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ -\varepsilon & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{q}
$$

$$
\delta \boldsymbol{p} = \varepsilon \begin{pmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \\ \frac{\partial a_{12}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \end{pmatrix} \boldsymbol{p} \approx \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ -\varepsilon & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{p}
$$

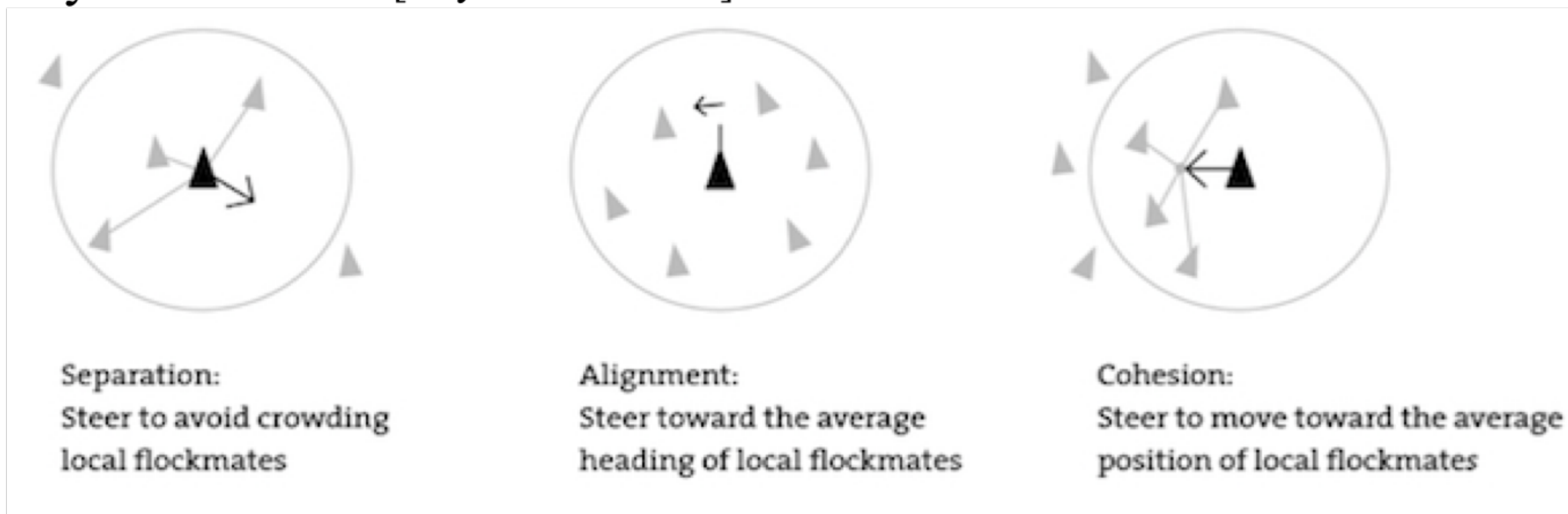
保存則

$$
G_\delta = \varepsilon(x_1 p_2 - x_2 p_1)
$$

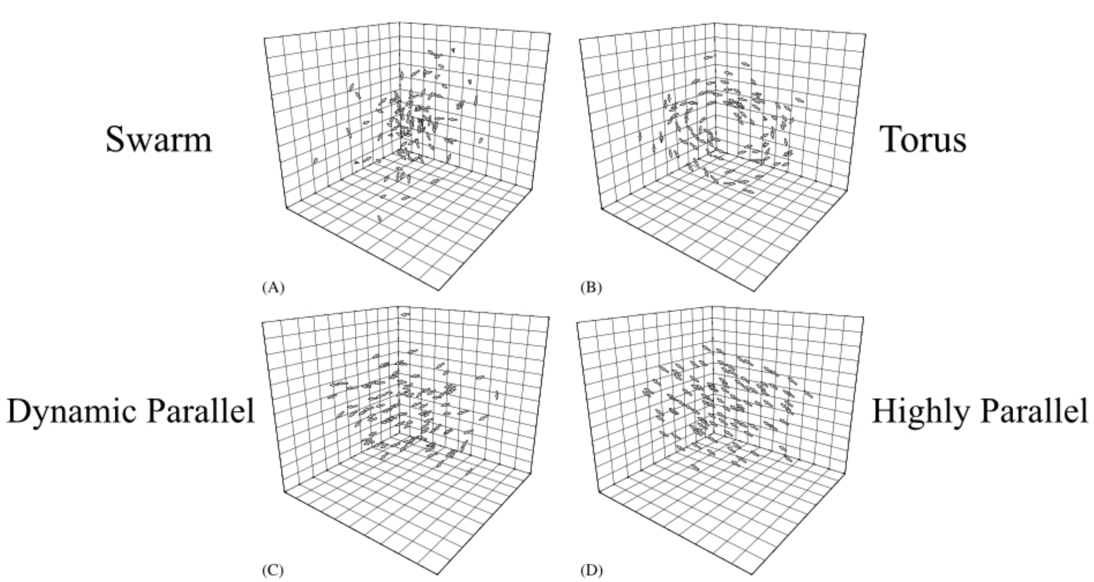
結果4

モデル

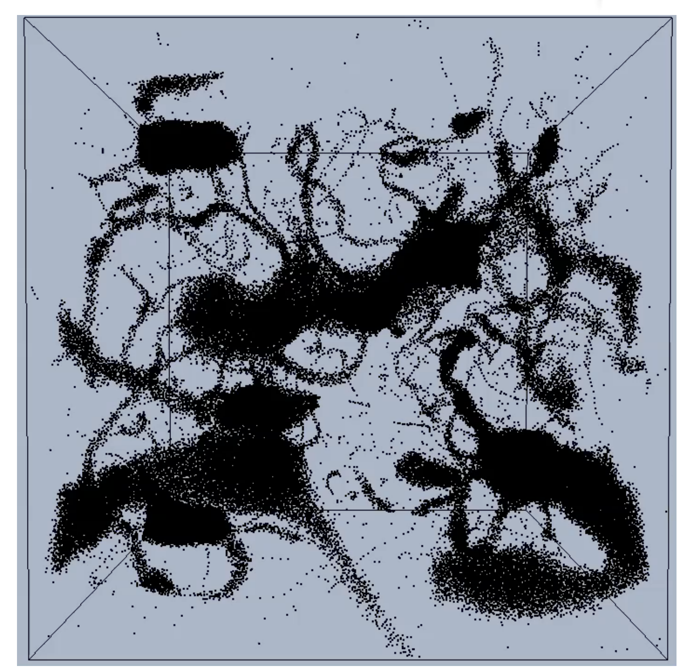
Reynolds model [Reynolds et al. 86]



$$\frac{dv}{dt} = \vec{F}_{separation} + \vec{F}_{alignment} + \vec{F}_{cohesion}$$



[Couzin et.al　2002]

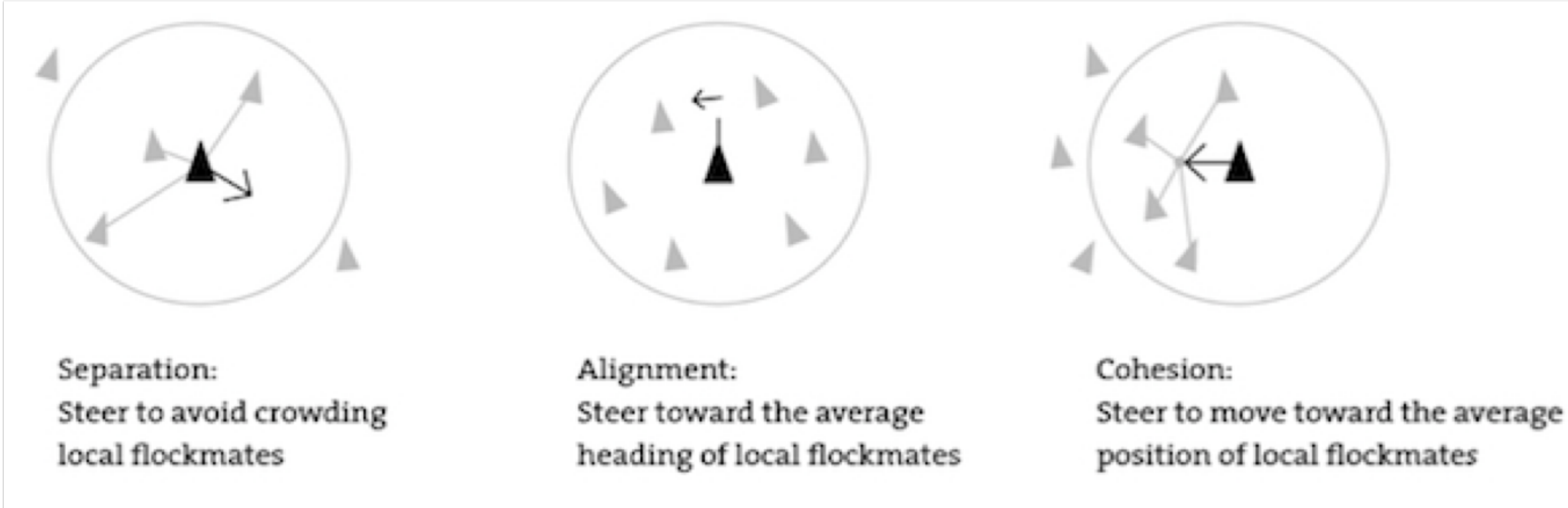


[Mototake et.al　2015]

結果4

モデル

Reynolds model [Reynolds et al. 86]



$$\frac{dv}{dt} = \vec{F}_{separation} + \vec{F}_{alignment} + \vec{F}_{cohesion}$$

座標系

$$D = \{\tilde{\boldsymbol{q}}(t_i)_i, \tilde{\boldsymbol{p}}(t_i)_i, \tilde{\boldsymbol{q}}(t_i + \Delta t)_i, \tilde{\boldsymbol{p}}(t_i + \Delta t)_i\}_{i=1}^{N_{\mathrm{R}}T}$$

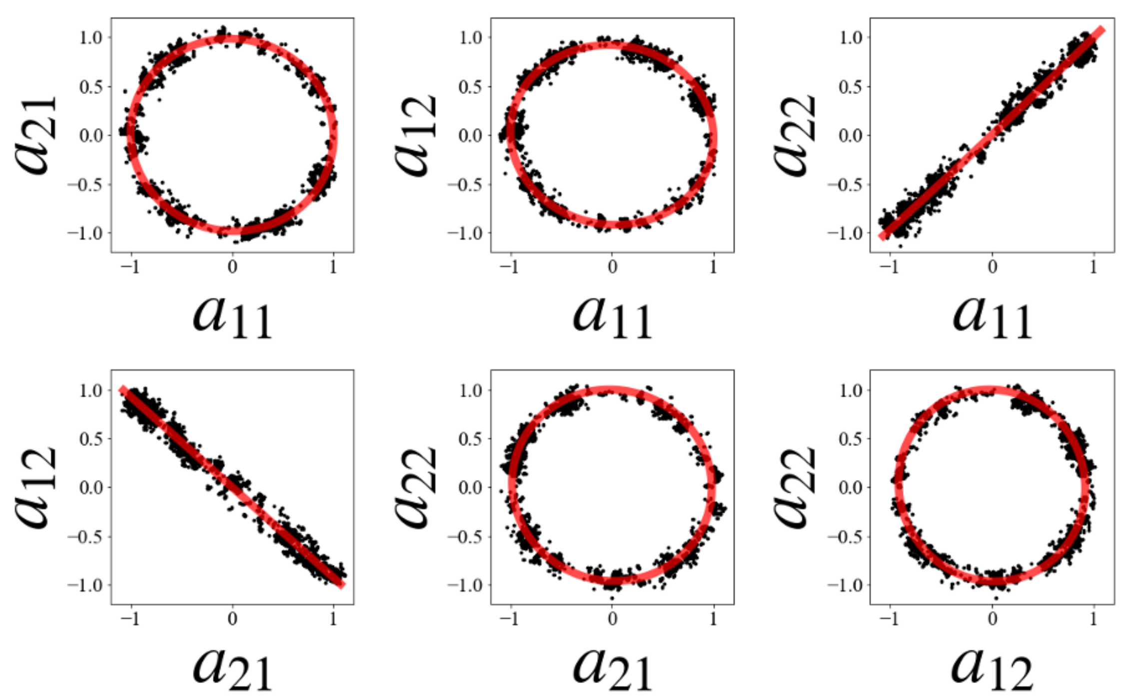
$$(\tilde{\boldsymbol{q}}, \tilde{\boldsymbol{p}}) = (q_1 - \bar{q}_1, q_2 - \bar{q}_2, p_1 - \bar{p}_1, p_2 - \bar{p}_2)$$

変換行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & 0 & 0 \\ a_{12} & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{11} & a_{21} \\ 0 & 0 & a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}$$

結果4

サンプリング結果



陰関数の回帰結果

$$
\begin{cases}
a_{11}^2 + 1.03a_{21}^2 + 0.039a_{11}a_{21} = 1 \\
a_{11}^2 + 1.18a_{12}^2 + 0.077a_{11}a_{12} = 1 \\
a_{11} - 1.016a_{22} + 0.016a_{11}^2 = 0 \\
a_{21} + 1.077a_{12} = 0 \\
-0.038a_{22} + a_{21}^2 + 1.005a_{22}^2 + 0.051a_{21}a_{22} = 0.967 \\
-0.031a_{22} + a_{12}^2 + 0.877a_{22}^2 + 0.056a_{12}a_{22} = 0.845
\end{cases}
$$

無限小変換の推定結果

$$
\delta \boldsymbol{q} = \varepsilon \begin{pmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \\ \frac{\partial a_{12}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \end{pmatrix} \boldsymbol{q} = \varepsilon \begin{pmatrix} \left.\frac{-1.03 \times 2a_{21} - 0.039a_{11}}{2a_{11} + 0.039}\right|_{A=I} & 1 \\ -1/1.077 & \left.\frac{-2a_{21} - 0.051a_{22}}{1.005 \times 2a_{22} - 0.038 + 0.051a_{12}}\right|_{A=I} \end{pmatrix} \boldsymbol{q} = \begin{pmatrix} 0.019\varepsilon & \varepsilon \\ -0.928\varepsilon & 0.026\varepsilon \end{pmatrix} \boldsymbol{q} \approx \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ -\varepsilon & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{q}
$$

$$
\delta \boldsymbol{p} = \varepsilon \begin{pmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \\ \frac{\partial a_{12}}{\partial a_{21}} & \frac{\partial a_{21}}{\partial a_{21}} \end{pmatrix} \boldsymbol{p} \approx \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ -\varepsilon & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{p}
$$

先行研究 [Couzin et.al 2002]
で示された結果と一致➡

保存則

$$
G_\delta = \varepsilon(x_1 p_2 - x_2 p_1)
$$

議論

- 時系列データ多様体から，ハミルトン系の対称性の候補が推定可能であることを示した.
- 学習済みのDNNから，時系列データ多様体の対称性を推定できる可能性を示唆した.
- 保存則の数が増えると，ヤコビ行列が正則でなくなる可能性が高まる等，推定が困難になると予想される.
- 位相空間の次元が増えると，サンプリング法による対称性抽出に困難が生じると思われる.

まとめと今後の展望

- サンプリングによって変換群を推定するのではなく，リー環を直接推定する効率的な手法を開発したい.

- DAEだけでなく他のDNNモデルへの手法適用を試みたい.

- 未知の保存量，あるいは推定が困難とされる保存量の推定を実現したい.

まとめと今後の展望

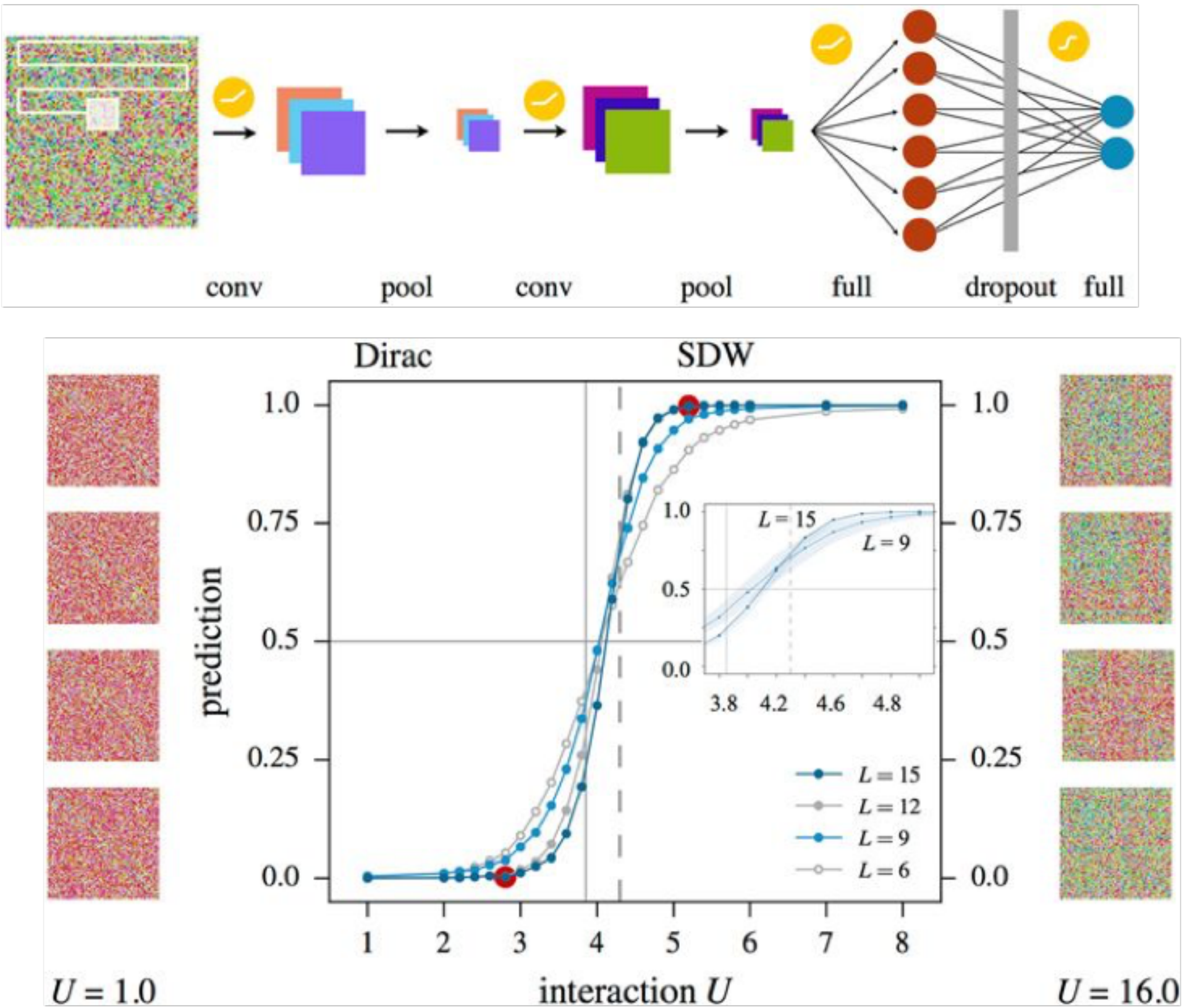
- サンプリングによって変換群を推定するのではなく，リー環を直接推定する効率的な手法を開発したい.

- DAEだけでなく他のDNNモデルへの手法適用を試みたい.

- 未知の保存量，あるいは推定が困難とされる保存量の推定を実現したい.

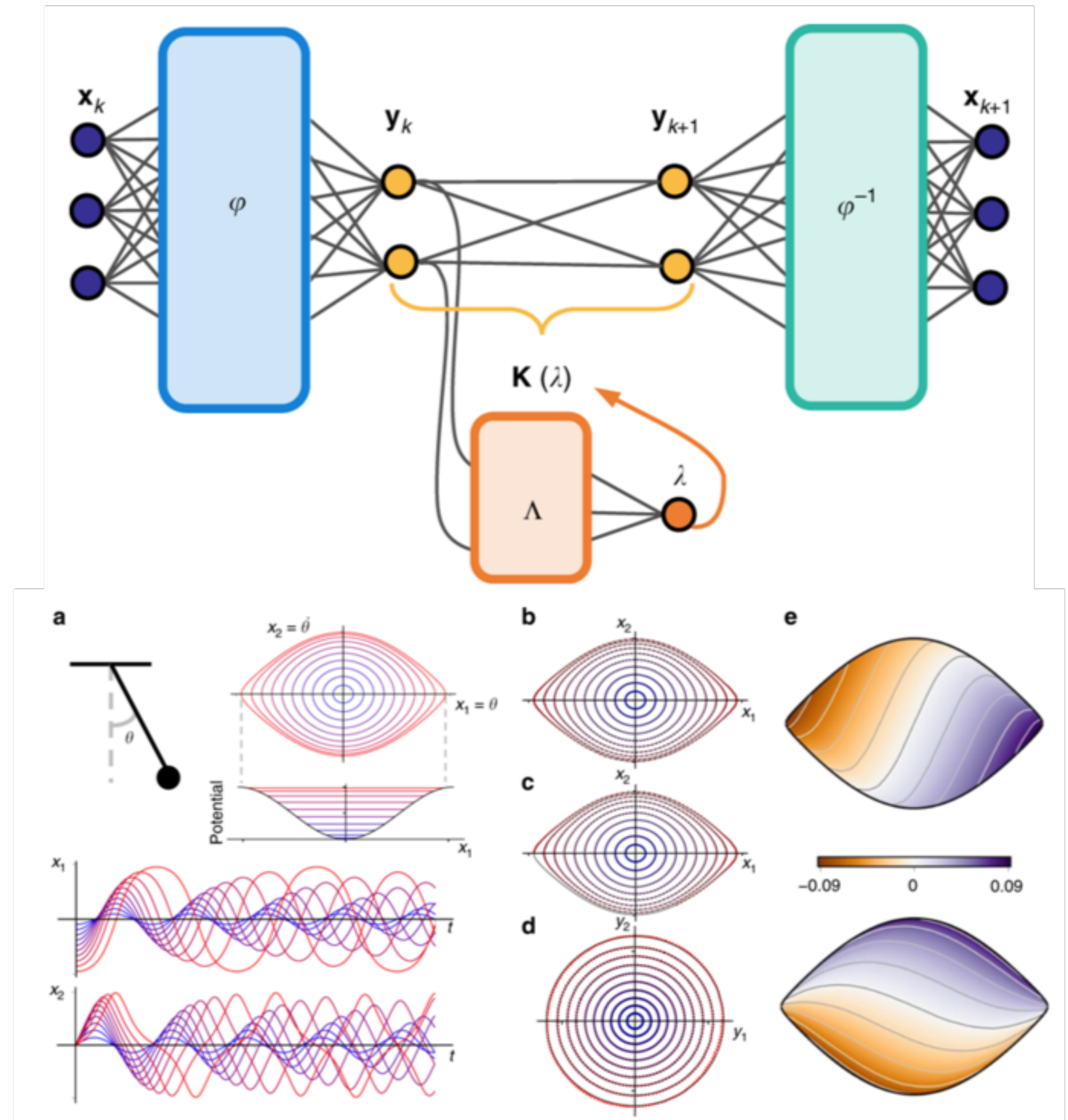
他のDNNモデルへの手法適用

スピン系の相転移状態推定



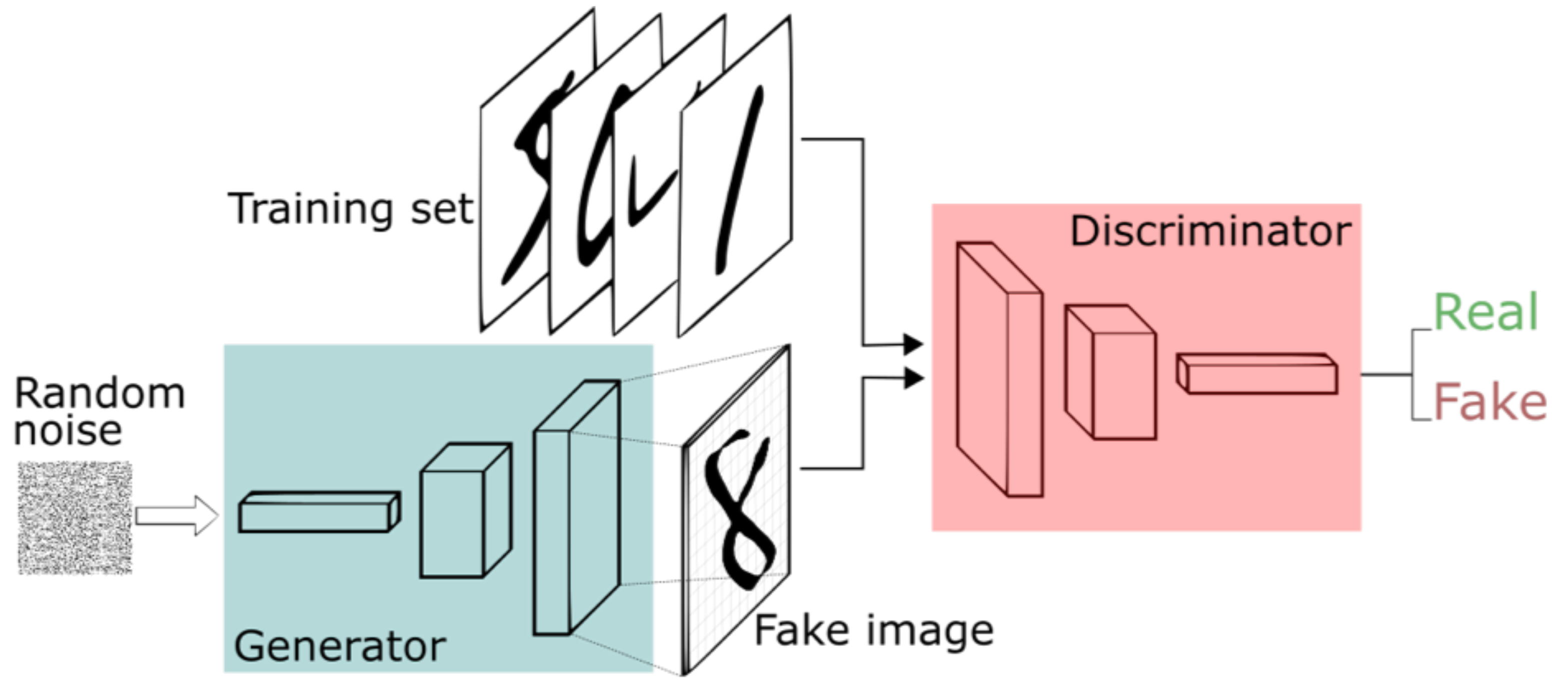
[Carrasquilla, J. and Melko, R.G., Nature Phys., 2017]

時系列データ多様体の抽出



[Lusch, B., Kutz, J.N. and Brunton, S.L., Nature Com., 2018]

他のDNNモデルへの手法適用



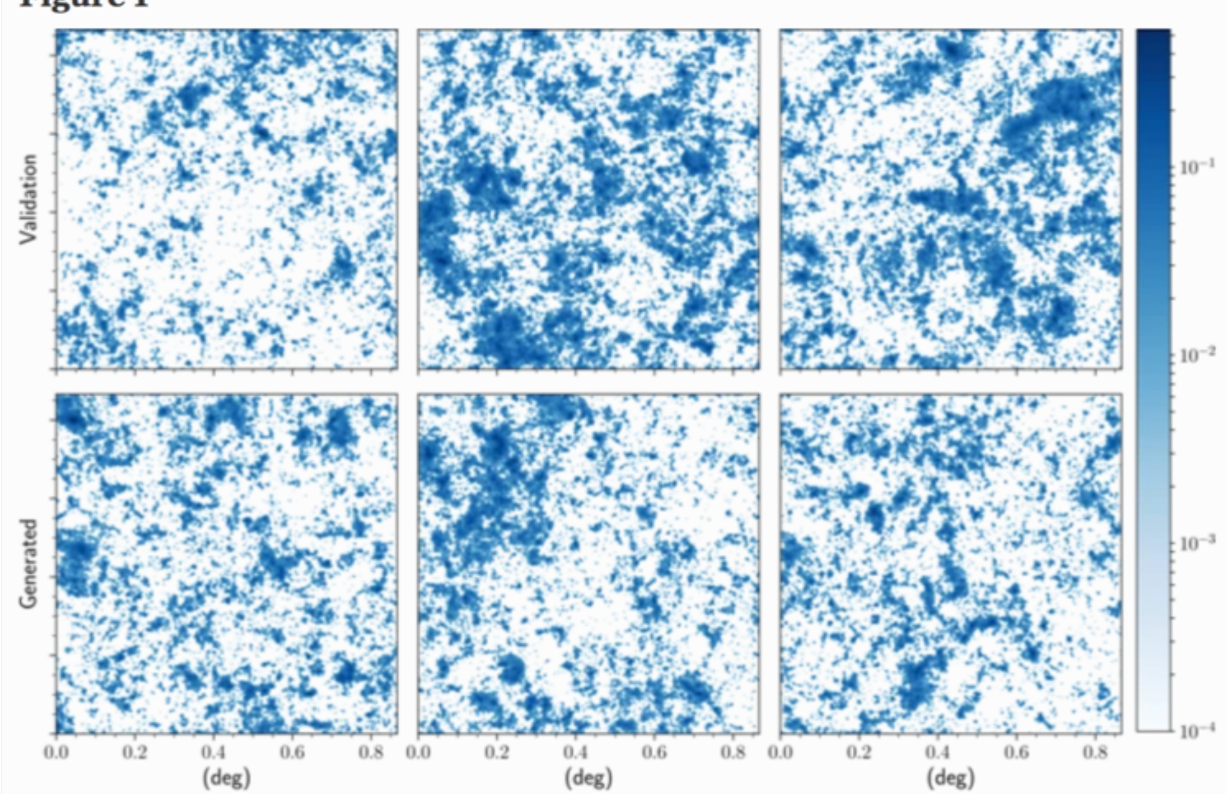


Figure 1

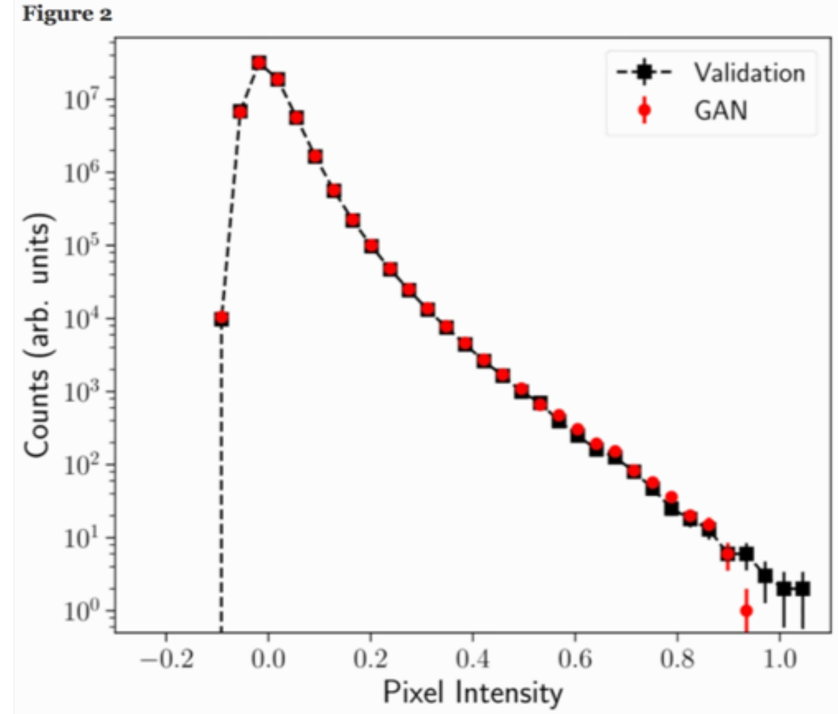
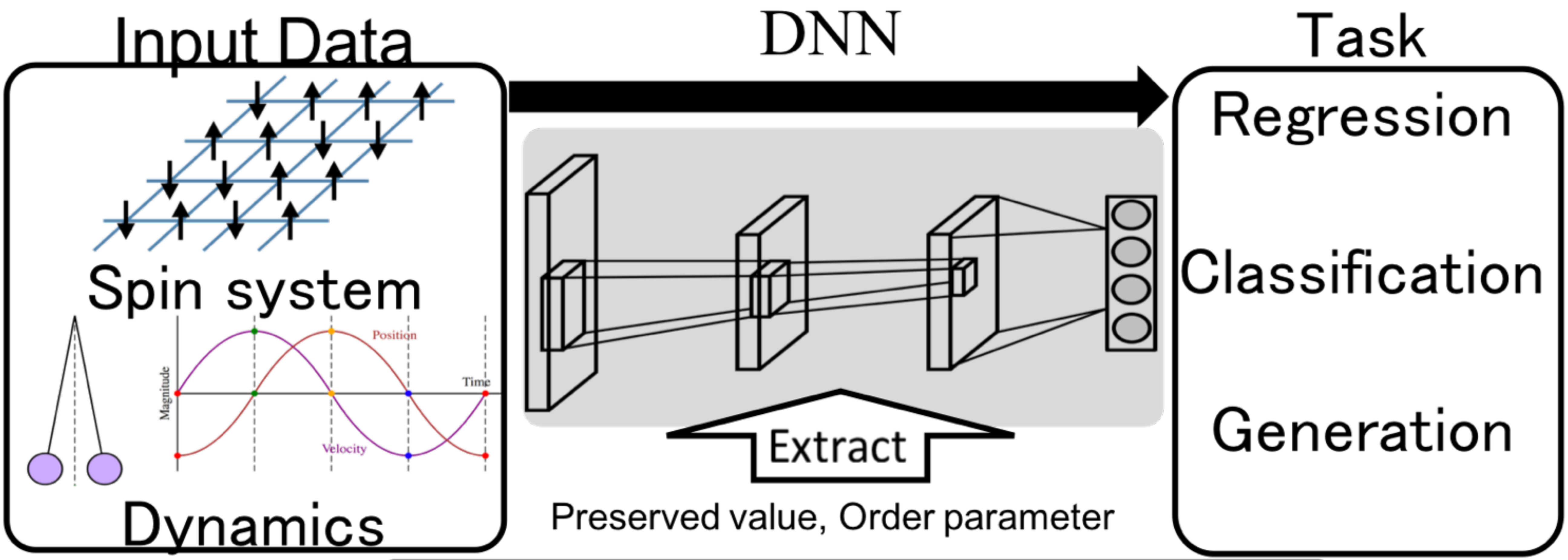


Figure 2

[Mustafa et al. 19]

他のDNNモデルへの手法適用

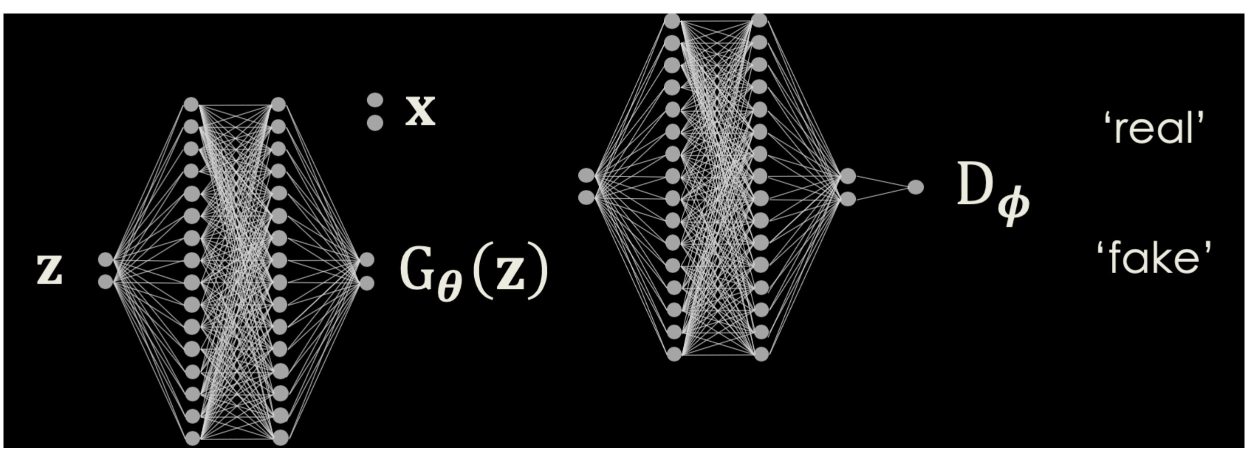


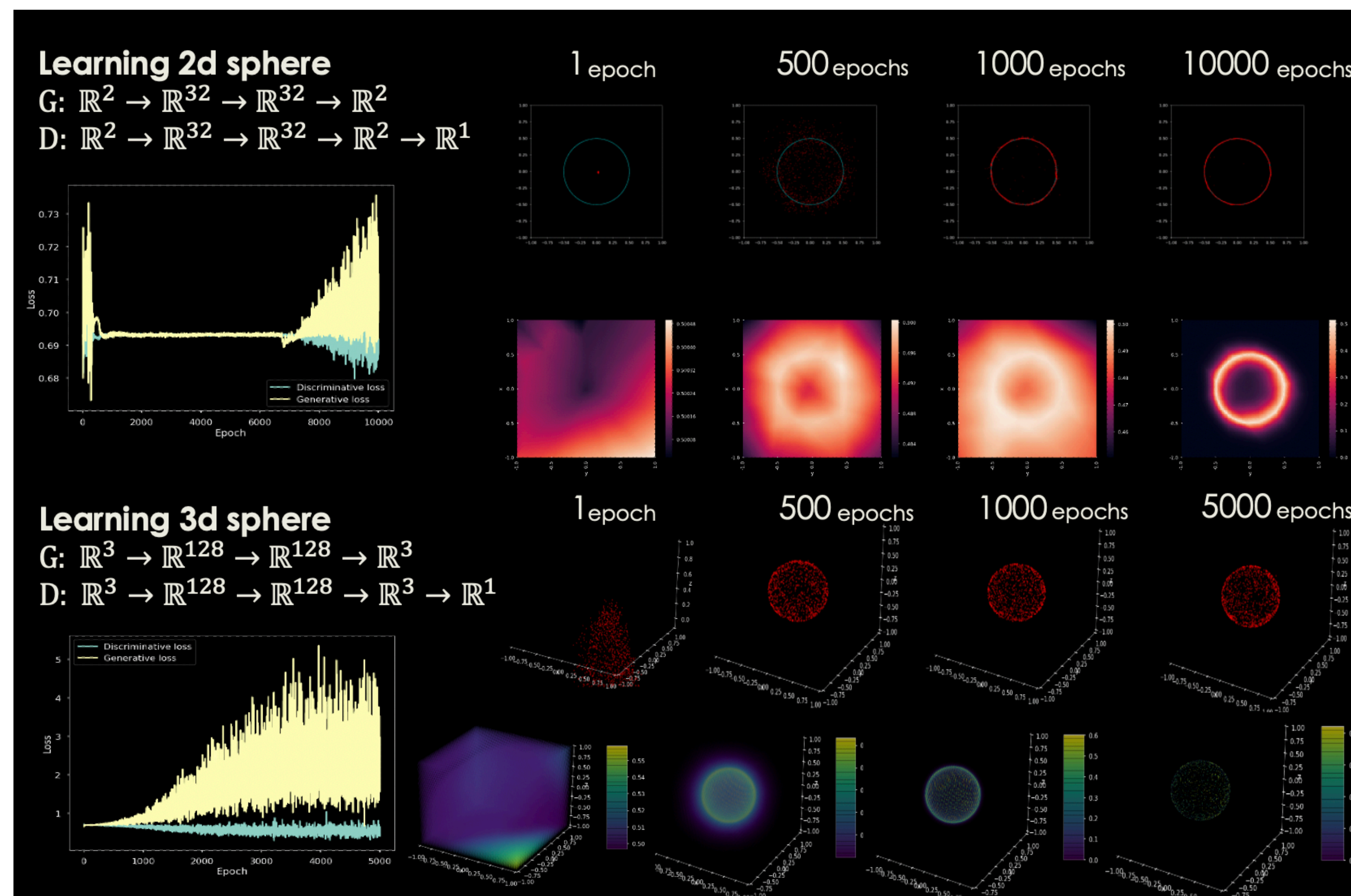
$$\boldsymbol{m} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mu_0\, \boldsymbol{\sigma}_i \qquad \boldsymbol{L} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

他のDNNモデルへの手法適用

Towards a Geometrical Understanding of Physical Phenomena via Extraction of Data Manifolds Using a GAN

Kotaro Sakamoto (Univ. of Tsukuba), Yuichiro Mori (Univ. of Tokyo), Yoh-ichi Mototake (ISM)





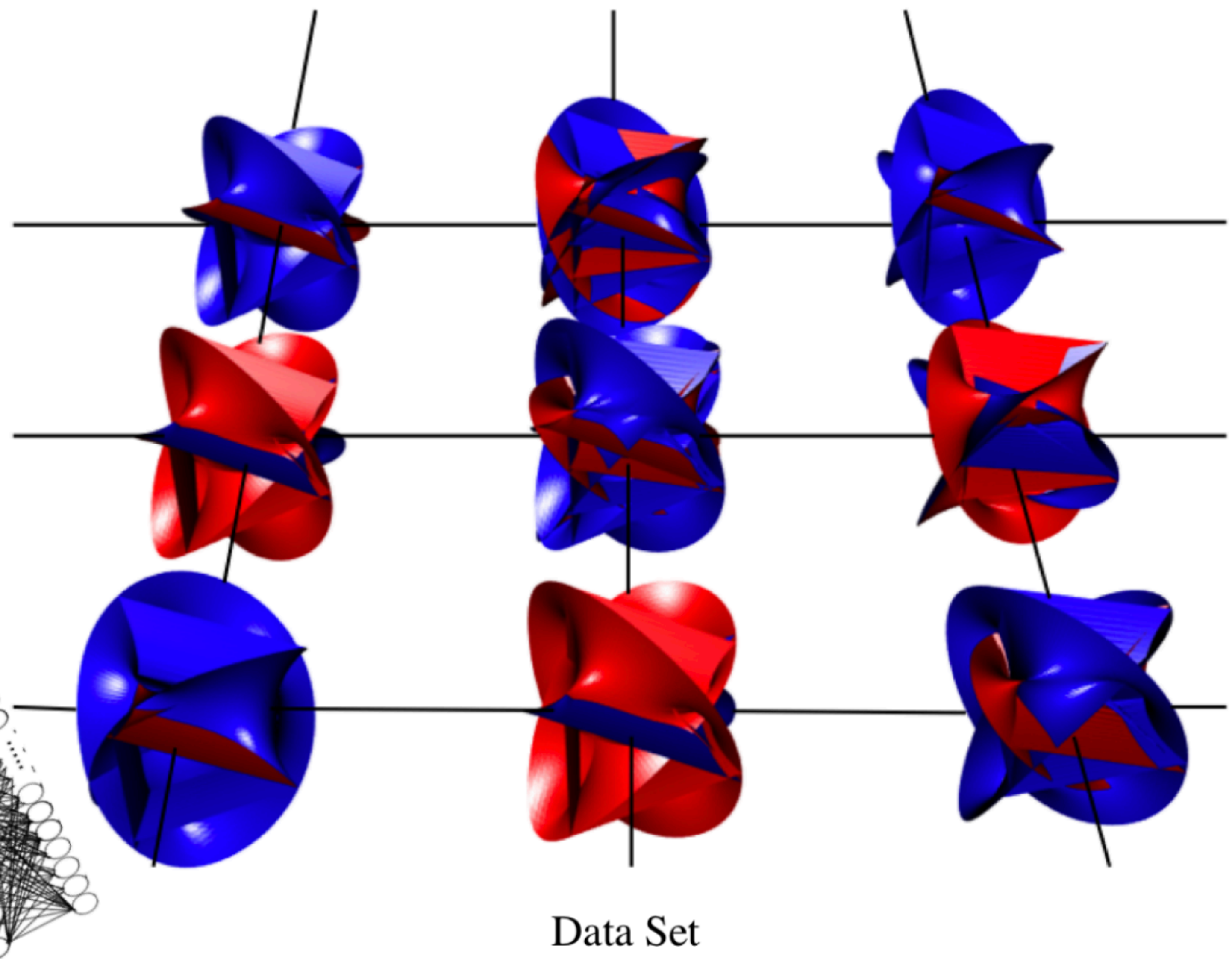
皆様と議論したいこと

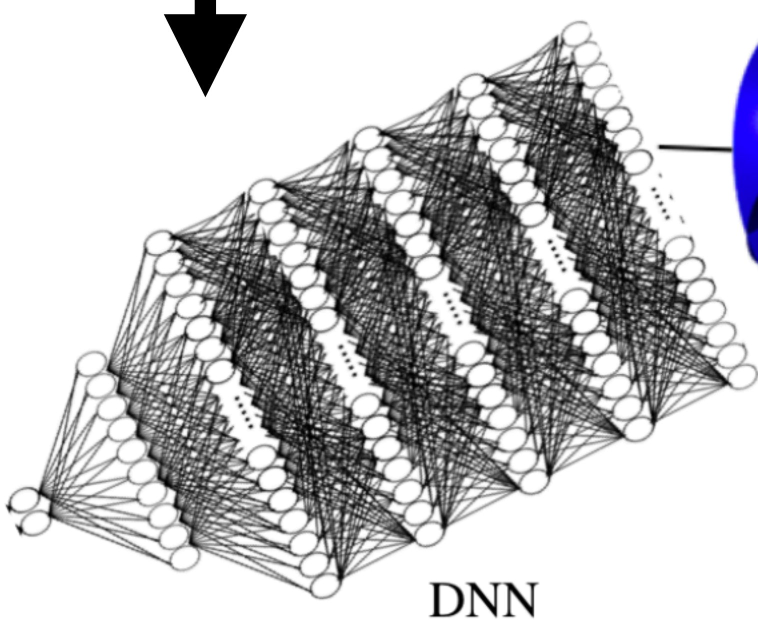
- 提案手法を適用すると面白そうな物理系について

- 物理学者と機械学習の協業のあり方について

大目標

[郡山市ふれあい科学館より, イラスト・高部哲也]





[Y. Mototake, D. thesis: “Geometrical Structures Embedded in High Dimensional Data Sets and Deep Learning”, 2016]