

# AI社会を支える機械学習アルゴリズム ～ 非線形動力学の知見からのアプローチ



研究室紹介

河原吉伸\*

Machine Learning Algorithms for an AI-powered Society:  
An Approach Informed by Nonlinear Dynamics

Key Words: Machine Learning, Dynamical Systems, Data-Driven Science, Surrogate Modeling

## はじめに

急速に社会に浸透するAI技術は、我々の社会を大きく変えようとしています。その背景には、深層学習を中心とした(統計的)機械学習の方法論、特に学習アルゴリズムの発展があります。機械学習は、我々生物が持つような、過去の経験からの認知や将来予測を行う能力を、データ(過去の経験に相当)に基づき計算機に実現するための情報技術で、特に深層学習は、ニューラルネットワークと呼ばれる学習モデルを用いて極めて高い精度でこの能力を実現しています。特に、画像・音声の認識や、自然言語の処理など、個々の認知・予測機能については、人間を超えるレベルで実現できるようになってきています。ニューラルネットワーク自体は、その研究の歴史は古く、1957年にフランク・ローゼンブラット氏が考案したパーセプトロンに端を発します。長い歴史を持つニューラルネットワークですが、その能力を計算機で実現するハードウェア技術の進歩と協調しつつ、大規模言語モデルで主に用いられるトランスフォーマーや、画像生成モデルで注目された拡散モデルなど、その後も様々な技術的革新があり今日も日進月歩で研究が進んでいます。

著者は、大阪大学大学院情報科学研究科で機械学習システム論講座(研究室)<sup>1)</sup>を主宰し、機械学習の新たな原理の構築や、これに基づく方法論、つまり機械学習のモデルやアルゴリズムに関して研究に取り組んでいます。またこれら研究で得られた知見や研

究成果を、種々の科学分野や、産業・社会における課題へと適用して解決を目指す応用研究にも関わっています。本稿では、当研究室で実施されているこれら研究のうち、主要な最近の取り組みについて紹介します。

## 複雑な動的現象の解析・予測のための機械学習

ジム・グレイ氏が第4の科学の概念を提唱<sup>2)</sup>して久しい今日ですが、飛躍的な計測技術の発展を背景に、近年様々な科学領域において現象解明のためにデータ駆動型のアプローチが不可欠となりつつあります。また一方で、Google DeepMind社が2022年に発表した気象予測モデルGraphCast<sup>3)</sup>のように、複雑で動的な現象の(将来)予測のための基盤モデルの発展は今日目を見張るものがあります。これらに共通して根幹となる主要な情報技術の一つは、動的な現象、つまりデータを生成するメカニズムが時々刻々と複雑に変化するような現象に対して、そのメカニズムを理解したり、将来の状態を予測したりするための機械学習です。このような技術は、産業においても大きな影響を与えています。例えば、種々の産業プロセスでは、その設計や解析において、対象とするシステム(例えば自動車など)に対する様々な数値シミュレーションが活用されていますが、従来のCFD(数値流体力学)などの数値計算は膨大なコストがかかります。これに対して、機械学習を用いて現象を表すモデルをデータから効率的に獲得して代替するサロゲートモデルの活用などが進んでいます。

当研究室では、このような、動的な現象を解析・予測するための機械学習に対して、特に、数学における力学系や、非線形物理学といった数理的な知見を活用した、新たな原理の構築や、これを利用した実用的なアルゴリズムの開発に取り組んでいます。特に、現象に対する事前知識(例えば、支配方程式や保存量・



\* Yoshinobu KAWAHARA

1980年4月生まれ  
東京大学 大学院工学研究科 博士後期課程 修了(博士(工学)、2008年)  
現在、大阪大学 大学院情報科学研究科 情報システム工学専攻 教授  
TEL: 06-6879-4520  
E-mail: kawahara@ist.osaka-u.ac.jp

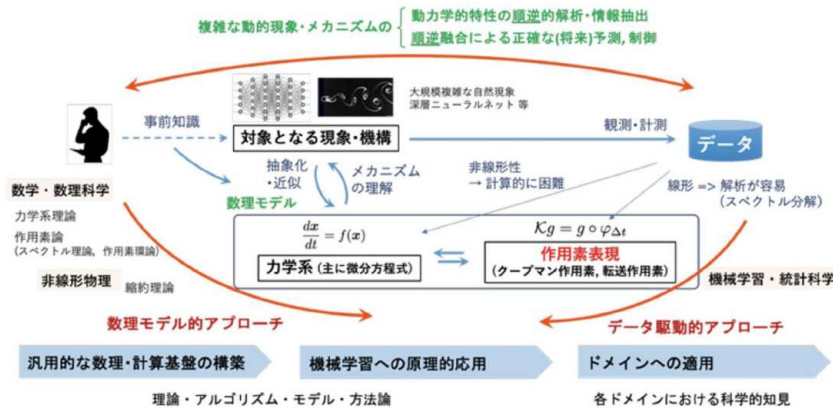


図1. 作用素論的データ解析に基づくアプローチ

不変量)を、学習プロセスの中にも取り入れ利用することで、順方向的な知識と、逆方向的な抽出情報を融合した学習アルゴリズムの開発に注力しています。当研究室では、このような目的のためのアプローチとして、クープマン作用素と呼ばれる力学系を扱うための表現と機械学習の数理的親和性に世界的にもいち早く着目し、これまで多くの成果をあげてきました。クープマン作用素は、(一般に非線形な)系の時間発展を作用素表現を介して(関数空間における)線形性を利用することにより、数理的に直接扱うことが困難である非線形性を回避して系の動的特性の解析・予測を行うもので、近年データ駆動科学の文脈で高い注目を集める動的モード分解とも密接に関連しています<sup>4)</sup>。著者らは、この考え方を取り入れた高精度な将来予測や制御・強化学習のアルゴリズムを提案し、NeurIPSやICML等の機械学習分野のトップ会議で多数の成果を報告してきました。科学技術振興機構における戦略的創造研究推進事業CREST「数理的情報活用基盤」領域においても、「作用素論的データ解析に基づく複雑ダイナミクス計算基盤の創出」<sup>5)</sup>(代表:河原)という課題名で、数学や物理の研究者らと共同で関連する研究も実施しています(図1も参照)。また著者は関連する研究成果により、令和2年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞も受賞しています<sup>6)</sup>。今後はこれらの成果をさらに発展させ、大規模で複雑な現象をより正確に解析・予測・制御することを可能にする機械学習アルゴリズムの開発に取り組み、これを応用することで気象・災害といった社会問題や、産業プロセスの効率化に資する情報技術の開発を行っていきたいと考えています。

### ダイナミクスを利用した機械学習アルゴリズムの開発

冒頭でも述べたように、昨今のAI技術の発展を支える機械学習は日進月歩で研究が進んでいて、新しいモデルやアルゴリズムが毎日のように報告されています。このような研究の積み重ねは、ソフトウェアとして様々な情報システムの中に実装され、我々は知らず知らずのうちにそれらを利用しています。

当研究室においても、機械学習の新しいモデルやアルゴリズムを開発するための基礎的な研究に取り組んでいます。一般に、ニューラルネットワークをはじめとした機械学習のモデルは、入力されたデータを処理して、予測に有用な情報へと変換して利用します。専門的には、このような変換過程を特徴抽出と言ったり、変換自体の学習に焦点がある場合には表現学習と呼んだりします。このような信号の変換は、ある種の力学系として捉えられるため、力学系の理論や非線形動力学の知見を援用することで、より効率的で性能の高い機械学習モデルやアルゴリズムを構築する手がかりになることが期待できます。またこのような視点は、機械学習において、データから情報がどのように変換されていくかを原理的に理解する手助けとなります。当研究室では、これらの理論的枠組みに基づき、ニューラルネットワークの内部表現の動的構造を解析する研究や、このような動力学的構造を活用した新たなモデルの開発に取り組んでいます。これにより、従来の手法では捉えきれなかった複雑なデータ構造の理解と予測が可能となり、様々な応用分野への展開が期待されています。

### 科学研究や産業プロセスへの応用

大量に取得される観測・計測データを基点とした科学研究における知識の発見は、現在の科学研究に

