

拡散モデルの収束について

中野 張

東京工業大学情報理工学院数理・計算科学系

e-mail : nakano@c.titech.ac.jp

本発表では, [1] において提案されているノイズ除去拡散確率モデル (Denoising Diffusion Probabilistic Model; DDPM) の厳密な収束について報告する. DDPM は拡散生成モデルの一つで, 近年コンピューター・ビジョンや時系列生成などの分野に盛んに応用されている. 拡散モデルに対する厳密な理論解析はいくつか先行研究があるものの ([2], [3], [4]), オリジナルの DDPM に対する収束証明は現在のところ知られていない.

μ_{data} を \mathbb{R}^d 上のボレル確率測度, 数列 $\{\alpha_i\}_{i=1}^n$ は $0 < \alpha_i < 1$ を満たすとする. \mathbf{x}_0 と Z は完備確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 上の確率変数で, それぞれ μ_{data} と $N(0, I_d)$ に従うとする. ただし I_d は d 次元単位行列である. DDPM は学習のための順時間過程 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=0}^n$ と生成のための逆時間過程 $\{\hat{\mathbf{x}}_i\}_{i=0}^n$ から構成される. $\{\mathbf{x}_i\}_{i=0}^n$ は

$$\mathbf{x}_i = \sqrt{\alpha_i} \mathbf{x}_{i-1} + \sqrt{1 - \alpha_i} Z_i, \quad i = 1, \dots, n$$

により定義される. ここで $\{Z_i\}_{i=1}^n$ は $N(0, I_d)$ を共通の分布とする独立同分布列で, \mathbf{x}_0 と独立とする. $\{\hat{\mathbf{x}}_i\}_{i=0}^n$ は

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{x}}_n = \xi_n, \\ \hat{\mathbf{x}}_{i-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_i}} \left(\hat{\mathbf{x}}_i - \frac{1 - \alpha_i}{\sqrt{1 - \bar{\alpha}_i}} z_i(\hat{\mathbf{x}}_i) \right) + \sigma_i \xi_i, \quad i \in \{1, \dots, n\}, \end{cases} \quad (1)$$

により定義される. ここで, $\xi_1 = 0$ で, $\{\xi_i\}_{i=2}^n$ は $N(0, I_d)$ を共通の分布とする独立同分布列である. さらに, $\sigma_i^2 = (1 - \alpha_i)/\alpha_i$ であり, $\{z_i\}_{i=1}^n$ は所与の関数列で, ここでは各 z_i は \mathbb{R}^d 上有界連続と仮定する. DDPM において, この z_i は順時間過程で加えられたノイズを予測するための関数であり, 目的関数

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E} |Z_i - z_i(\sqrt{\alpha_i} \mathbf{x}_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_i} Z_i)|^2 \quad (2)$$

に関する学習アルゴリズムにより決定される. ただし $\bar{\alpha}_i = \prod_{k=1}^i \alpha_k$. 目的関数 (2) は, 生成モデルの対数尤度の変分下限から導出した目的関数を単純化したものでもある ([1] をみよ). また, 目的関数 (2) の最適化はスコア・マッチングを目標とする最適化と同値であることが知られている. 実際, 関数 $\mathbf{s}_i(x) := -(1/\sqrt{1 - \bar{\alpha}_i}) z_i(x)$ と \mathbf{x}_i のスコア関数 $\nabla \log \mathbf{p}_i(\cdot)$ を用いて,

$$\mathbb{E} |\mathbf{s}_i(\mathbf{x}_i) - \nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i)|^2 = \frac{1}{1 - \bar{\alpha}_i} \mathbb{E} |z_i(\mathbf{x}_i) - Z_i|^2 + \mathbb{E} [|\nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i | \mathbf{x}_0)|^2 - |\nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i)|^2]$$

が成り立つ. この点を踏まえ,

$$L := (1/n) \sum_{i=1}^n \mathbb{E} |\mathbf{s}_i(\mathbf{x}_i) - \nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i)|^2$$

を考える.

(1) により定まる生成アルゴリズムの収束を議論するため, まず μ_{data} に次の条件を課す.

(H1) μ の密度関数 p が存在し次を満たす: ある有界開集合 $S \subset \mathbb{R}^d$ が存在し, $p \in C^3(\overline{S})$ で S 上 $p > 0$, $\mathbb{R}^d \setminus S$ 上 $p = 0$. さらに,

$$\max_{j,k=1,\dots,d} \sup_{x \in S} \left| \left(\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_k \partial x_k} \right) \log p(x) \right| < \infty.$$

次に, 以下では, 時間ステップ数 n に依存する量 a をしばしば $a^{(n)}$ と書く. 例えば, $L = L^{(n)}$, $z_i = z_i^{(n)}$ など. この記法の下, 以下を課す.

(H2) ノイズスケジュール $\alpha_i = \alpha_i^{(n)}$ は次を満たす: $\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{\alpha}_n = 0$ および

$$-\log \min_{1 \leq i \leq n} \alpha_i^{(n)} = O\left(\frac{\log \log n}{n}\right), \quad n \rightarrow \infty.$$

(H3) ノイズ予測関数 $z_i(x) = z_i^{(n)}(x)$ は次を満たす: ある定数 $\kappa_1 > 0$ が存在し,

$$\max_{i=1,\dots,n} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |z_i^{(n)}(x)| = O((\log n)^{\kappa_1}), \quad n \rightarrow \infty.$$

(H4) スコア推定誤差 L は次を満たす: ある定数 $\kappa_2 > 0$ が存在し,

$$L^{(n)} = O\left(\frac{1}{n^{\kappa_2}}\right), \quad n \rightarrow \infty.$$

以下が本発表の主定理である.

定理 1 条件 (H1)–(H4) の下で, $n \rightarrow \infty$ のとき $\hat{\mathbf{x}}_0^{(n)}$ の分布は μ_{data} に弱収束する.

定理 1 の証明では, (1) を適当な逆時間確率微分方程式の時間離散化とみなし, 確率解析の議論に持ち込む. 詳細については [5] をみよ.

謝辞 本研究は科研費 (課題番号:24K06861) の助成を受けたものである.

参考文献

- [1] Ho, J. and Jain, A. and Abbeel, P., Denoising diffusion probabilistic models, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 33 (2020), 6840–6851.
- [2] Chen, S. and Chewi, S. and Li, J. and Li, Y. and Salim, A. and Zhang, A., Sampling is as easy as learning the score: theory for diffusion models with minimal data assumptions, *International Conference on Learning Representations*, 2023.
- [3] Lee, H. and Lu, J. and Tan, Y., Convergence of score-based generative modeling for general data distributions, *International Conference on Algorithmic Learning Theory*, 946–985, 2023, PMLR.
- [4] De Bortoli, V., Convergence of denoising diffusion models under the manifold hypothesis, *arXiv:2208.05314[stat.ML]*, 2022.
- [5] Nakano, Y., Convergence of the denoising diffusion probabilistic models, *arXiv:2406.01320[math.PR]*, 2024.

Takens 埋め込みと位相的データ解析を用いた文章埋め込みベクトル解析手法

佐藤 哲¹

¹パーソルキャリア株式会社テクノロジー本部デジタルテクノロジー統括部
e-mail : tetu-s@computer.org

1 はじめに

自然言語処理の研究及び応用において、自然言語文章を数値で表す埋め込みベクトルの生成及び評価は重要な課題である。自然言語による文章は多くの情報を含むため、ベクトルで表すと次元が大きくなることは避けられない。従って人間が理解したり計算機で効率的に扱うためには、ベクトルを解析して特徴量を取り出し、低い次元のベクトルに変換することが求められる。そこで本研究では、Takens 埋め込みによって自然言語文章の埋め込みベクトルを低次元空間に埋め込み、さらに位相的データ解析によって特徴量を抽出することで、低次元ベクトルの集合で自然言語文章を表す手法を提案する。本稿では、埋め込みベクトルを、自然言語を数値の列で表したベクトルという意味で使い、埋め込みを、数学的に構造を保存する写像という意味で用いる。

2 自然言語文章の埋め込みベクトルからの特徴抽出

自然言語を計算機で処理できるようにするために、自然言語の文章を数値の列で表したものを埋め込みベクトルと呼ぶ。文章の埋め込みベクトルを生成する手法は数多く提案されているが、近年では、大規模な自然言語データにより訓練されたニューラルネットワークによる言語モデル（以下、LLM）を利用する手法が主流である。一般に、LLM により作成した埋め込みベクトル（以下、埋め込みベクトル）は、300 次元から 5 万次元程度と高い次元を持つため、ベクトルの低次元化が求められている。そのため本研究では、まず Takens 埋め込みを導入する [1]。Takens 埋め込みは、ベクトル系列を高次元のベクトル空間で表現する手法であり、 $t \in \mathbf{R}$ をパラメータ、 $\tau \in \mathbf{R}$ 及び $M \in \mathbf{N}$ を定数、 $x : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ をパラメータの関数とすると、写像 $F_{\tau,M} : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^M$

$$F_{\tau,M}(t) : (x(t), x(t - \tau), x(t - 2\tau), \dots, x(t - (M - 1)\tau)) \quad (1)$$

は 1 次元から M 次元への滑らかな埋め込みであり、 $x(t)$ の性質を保存していることを主張する。また、 $L, N \in \mathbf{N}$ 及び $t_0 \in \mathbf{R}$ を定数として、集合

$$\phi_{\tau,M,N}(t_0) : \{F_{\tau,M}(t_0), F_{\tau,M}(t_0 + L), F_{\tau,M}(t_0 + 2L), \dots, F_{\tau,M}(t_0 + (N - 1)L)\} \quad (2)$$

は M 次元ベクトルの集合となり、やはり $x(t)$ の性質を保存している。ここで、 τ を Lag, L を Stride と呼ぶ。提案手法では、高次元ベクトルの成分を一次元ベクトルの列とみなし、Takens 埋め込みを利用することにより高次元ベクトルを M 次元空間で表す。すなわち、 $t = t_k$ として、 $x(t_k)$ は埋め込みベクトルの k 番目の成分であり、 t_0 及び N は、埋め込みベクトルの次元により決まる。さらに、M 次元空間のベクトルデータ集合から特徴量を抽出して 2 次元空間で表す手法として、位相的データ解析を導入する [2]。式 (2) で表される集合は点群とみなせるので、点群に対しパーシステンス図を計算することにより 2 次元ベクトルの集合を得ることができる。本研究では、位相的データ解析の特性から Takens 埋め込みの定数 M は 3 に固定する。これらの手法により、埋め込みベクトルから特徴量を抽出し、2 次元ベクトルの集合として表すことができる。

3 実験例

LLM が出力する埋め込みベクトルから、自然言語文章の意味的な特徴を捉えた低次元ベクトル群を出力できているかを確認するために、文章の類似度測定タスクを使って評価する。使用するデータは、機械学習モデルの評価に広く使われている GLUE データセット [3] の、STS-B タスクデータとする。STS-B タスクデータは、文章の類似度を評価するためのデータセットで、一对の文章に対し 0 以上 5 以下の数値で意味的な類似度を表すラベルが付けられている。一对の文章の埋め込みベクトルを低次元化してベクトル同士の類似度を計算した結果は、ラベルに対応していることが期待される。類似度と距離は反比例するため、出力された低次元ベクトル同士の距離を計算し、ラベルとの相関係数を計算すると、相関係数が-1 に近いほど、埋め込みベクトルを良好に低次元空間に射影できていると考えられる。また、埋め込みベクトルの次元削減及び可視化にしばしば使われる t-SNE を比較手法として採用する。提案手法のハイパーパラメータは Lag と Stride であり、t-SNE は Perplexity と呼ばれる量である。提案手法の距離計算には Wasserstein 距離を使い、t-SNE では L2-norm を用いている。

実験例として、基礎的な検証に広く使われている Sentence Bert[4] の訓練済みモデル all-MiniLM-L6-v2 を使った文章埋め込みベクトルを解析する。このモデルが出力する埋め込みベクトルの次元は 384 次元であり、STS-B タスクデータに対し、(1) 一对の文章から 384 次元の埋め込みベクトルを求める、(2) 埋め込みベクトルから低次元ベクトルを求める、(3) 低次元ベクトル同士の距離を計算する、(4) 距離とラベルの相関係数を計算する、という処理を実行する。ハイパーパラメータチューニングをすると、提案手法において、 $\tau = 1$, $L = 8$ のときにスパイマンの相関係数が-1.0, $\tau = 16$, $L = 4$ のときに、ピアソンの相関係数が-0.96 という結果が得られた。t-SNE では、パラメータ perplexity=1 のときにピアソンの相関係数が-0.87, スパイマンの相関係数が-0.9 という結果が最も-1.0 に近い結果であり、いずれにせよ提案手法の方が良い結果が得られた。

4 おわりに

Takens 埋め込みと位相的データ解析を利用し、埋め込みベクトルを低次元ベクトルの集合で表す手法を提案した。今後の課題としては、他の LLM を対象に実験するとともに、その LLM の微分可能性などの特性を確認しその影響を調べることなどがあげられる。

謝辞 本研究の一部は、パーソルキャリア株式会社テクノロジー本部デジタルテクノロジー統括部生成系 AI・LLM 検証プロジェクトの支援による。

参考文献

- [1] F. Takens, Detecting Strange Attractors in Turbulence, Lecture Notes in Mathematics(Berlin Springer Verlag), Vol. 898, pp. 366–381, 1981.
- [2] 平岡裕章, 位相的データ解析とパーシステントホモロジー, 数学, Vol. 68, pp. 361–380, 2016.
- [3] A. Wang, A. Singh, J. Michael, F. Hill, O. Levy and S. R. Bowman, GLUE: A Multi-Task Benchmark and Analysis Platform for Natural Language Understanding, arXiv.1804.07461, 2018.
- [4] N. Reimers and I. Gurevych, Sentence-BERT: Sentence Embeddings using Siamese BERT-Networks, arXiv: 1908.10084, 2019.

強化学習における SARSA・Q 学習を組み合わせた簡便なハイブリッドアルゴリズム

石渡 哲哉¹, 河西 航也²

¹ 芝浦工業大学, ² 日本総合研究所

e-mail: tisiwata@shibaura-it.ac.jp

強化学習は機械学習の一分野であり、エージェントが与えられた (動的) 環境の中で試行錯誤 (相互作用) を繰り返すことで、報酬を最大化する行動を学習する手法である (例えば, [1] 参照). この強化学習を記述する基本的な要素として、エージェント、環境、状態、行動、報酬の 5 つがある. エージェントは行動決定の主体であり、報酬を最大化することを目的とする. エージェントが相互作用する対象である環境に対し、各時間ステップごとに、環境の現在の状態 (State, s) を観測し、観測した状態に基づいて行動 (Action, a) を選択し、その行動の結果として環境から報酬 (Reward, r) を受け取る. ここで、報酬はエージェントの行動がどれだけ「良い」かを示す尺度である. また、行動の選択の際、状態を行動に対応付ける関数またはルールがある場合、これを方策 (Policy) と呼ぶ. エージェントは得られた報酬を基に、後述する行動価値関数などを更新する. これにより、将来より良い行動を選択できるようになることが期待できる.

このような強化学習のコンセプトに対して、表題にある SARSA(State-Action-Reward-State-Action) と Q 学習 (Q-Learning) は共に代表的なアルゴリズムとして知られ、どちらも Q 値 (行動価値関数) を更新 (学習) することで、エージェントが報酬を最大化する行動を選択できるようにするものであり、ある条件下で最適な Q 値に収束することが知られている. 以下、 $Q(s, a)$ を、状態 s で行動 a を取ったときの Q 値とし、それぞれのアルゴリズムでどのように $Q(s, a)$ を更新するか説明する. なお、以下で α は学習率 ($0 < \alpha < 1$), γ は割引率 ($0 < \gamma < 1$) を表すとする. (なお、学習率は時間ステップにより変えてもよく、収束性のためには適切な減衰条件が課される.)

SARSA では、以下の更新式を使用して Q 値を更新する:

$$Q(s, a) \leftarrow Q(s, a) + \alpha \delta^{(S)}, \quad \delta^{(S)} := r + \gamma Q(s', a') - Q(s, a).$$

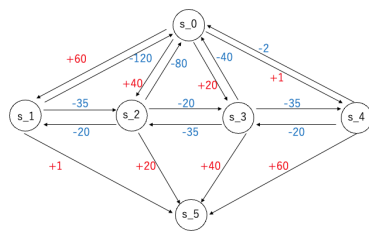
ここで、 r は行動 a に対する報酬、 s' は、状態 s で行動 a を選んだ後の次の状態、 a' は、次の状態 s' でエージェントが方策に基づき選ぶ行動である. つまり、SARSA はエージェントが次に方策より決まる行動 a' に基づいて現在の状態 s での Q 値を更新する. (on-policy 型のアルゴリズムと呼ばれる.)

これに対して Q 学習では、以下の更新式を使用して Q 値を更新する:

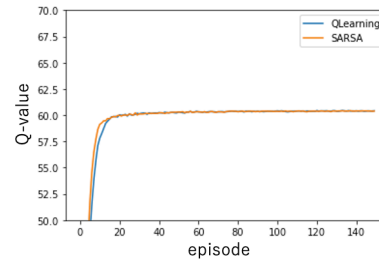
$$Q(s, a) \leftarrow Q(s, a) + \alpha \delta^{(Q)}, \quad \delta^{(Q)} := r + \gamma \max_{a'} Q(s', a') - Q(s, a).$$

SARSA との違いは、 δ の第 2 項のみで、 $\max_{a'} Q(s', a')$ は次の状態 s' での最も高い Q 値 (最適行動の Q 値) を用いて更新することになり、方策は用いない. (off-policy 型のアルゴリズムと呼ばれる.)

上式に現れる $\delta^{(S)}, \delta^{(Q)}$ は共に TD 誤差 (Temporal Difference Error) と呼ばれ、どちらのアルゴリズムも TD 誤差を小さくし、最終的にはゼロにするように学習が進められ、上述したように最適な Q 値への収束性が示されている. この意味ではどちらを用いても良さそうであるが、実際には強化学習では Q 学習や Q 学習をベースにした手法が多く用いられているようである. ただし、アルゴリズム

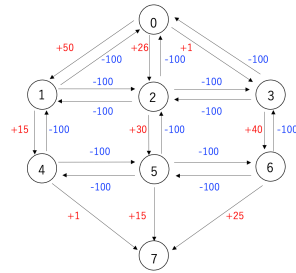


環境

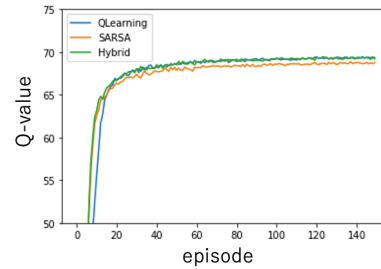


学習挙動

図 1. s_0 から s_5 への経路探索の例



環境



学習挙動

図 2. 0 から 7 への経路探索の例

ムの優劣については一概に言えず，解く問題の特性にも依存することが知られている．講演では複数の環境において簡単な経路探索問題をこれらのアルゴリズムで解いた際の学習挙動に紹介する．この実験では報酬の分散が大きくなると，初期段階では SARSA の Q 値の上昇が速い傾向が確認できた (Fig. 1 参照)．しかし，常に報酬の分散が指標となりうるのかはよく分かってはいない．以上のことから，この 2 つのアルゴリズムのいいところりをする簡便なハイブリッドアルゴリズムを提案する．

ハイブリッドアルゴリズム

$\delta_1^{(S)}, \delta_1^{(Q)}$ をそれぞれ SARSA, Q 学習の初期ステップの TD 誤差とする．また， $\frac{\delta^{(S)}}{\delta_1^{(S)}} \geq \frac{\delta^{(Q)}}{\delta_1^{(Q)}}$ となる事象を X とする．このとき， Q 値の更新式を以下とする：

$$Q(s, a) \leftarrow Q(s, a) + \alpha \left(\mathbf{1}_X \delta^{(Q)} + (1 - \mathbf{1}_X) \delta^{(S)} \right).$$

このアルゴリズムによる経路探索問題の学習挙動の例が Fig. 2 である．提案手法による学習曲線は SARSA と Q 学習のいいところりをしていることが観察できる．また，SARSA と Q 学習と同様の条件下で収束性を示すことができる．なお，上記アルゴリズム中における手法の切り替えをコントロールする事象 X については，再考の余地がある．今回は環境が動的に変化しないテストケースでの数値実験であり，状況に応じ他の事象を設定することも考えられる．

参考文献

- [1] 森村哲郎，強化学習，講談社，2019．

ラグランジュ・ディラック系を規範としたニューラルネットワークとホロノミック拘束系への応用

奥脇 健心¹, 吉村 浩明²

¹ 早稲田大学 大学院, ² 早稲田大学

e-mail : ¹okuken0824@fuji.waseda.jp, ²yoshimura@waseda.jp

1 概要

新たな機械学習の手法として、物理法則に基づくニューラルネットワークが注目されている。特に、ハミルトン系やラグランジュ系などの幾何学的力学理論を規範とした手法では、システム構造を把握することで、組織的に物理モデルを推定することができる。一方、拘束を受ける力学系に対するニューラルネットワークの手法は十分に確立されていない [1]。そこで本発表では、配位多様体の余接バンドル上のディラック構造に基づくラグランジュ・ディラック系を考え [2]、それを規範モデルとする新たな深層学習法を提案する。ホロノミック拘束を持つ力学系の例として、二重振り子に関する数値実験をおこない、本手法の有用性を示す。

2 ラグランジュ・ディラック系に基づくニューラルネットワーク

n 次元の微分多様体 Q を配位空間に持つ力学系を考える。 Q の接バンドル TQ にラグランジアン $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ が与えられているとする。 Q 上の拘束ディストリビューションを $\Delta_Q \subset TQ$ として、その零化元を $\Delta_Q^\circ \subset T^*Q$ と定義する。この時、 Δ_Q から誘導された T^*Q 上のディラック構造 $D_{\Delta_Q} \subset TT^*Q \oplus T^*T^*Q$ は、各点 $(q, p) \in T^*Q$ で

$$D_{\Delta_Q}(q, p) = \{((q, p, \dot{q}, \dot{p}), (q, p, \alpha, w)) \mid \dot{q} \in \Delta_Q(q), w = \dot{q}, \alpha + \dot{p} \in \Delta_Q^\circ(q)\}$$

と定義される。一方、 L のディラック微分 $\mathbf{d}_D L : TQ \rightarrow T^*T^*Q$ は、各点 $(q, v) \in TQ$ で

$$\mathbf{d}_D L(q, v) = \left(q, \frac{\partial L}{\partial v}, -\frac{\partial L}{\partial q}, v \right)$$

で与えられる [2]。よって、ラグランジュ・ディラック系は、余接バンドル上の接ベクトル $(q, p, \dot{q}, \dot{p}) \in T_{(q,p)}T^*Q$ と余接バンドル上の余接ベクトル $\mathbf{d}_D L(q, v) \in T_{(q, \frac{\partial L}{\partial v})}^*T^*Q$ が、余接バンドル上のディラック構造を介して、各点 $(q, v) \in TQ$ と $(q, p) \in T^*Q$ で

$$((q, p, \dot{q}, \dot{p}), \mathbf{d}_D L(q, v)) \in D_{\Delta_Q}(q, p)$$

を満足するものとして与えられる。これより、ラグランジュ・ディラック方程式

$$p = \frac{\partial L}{\partial v}, \quad \dot{q} \in \Delta_Q(q), \quad v = \dot{q}, \quad \dot{p} - \frac{\partial L}{\partial q} \in \Delta_Q^\circ(q) \quad (1)$$

を得る。ここで、第一式のルジャンドル変換はベース点が一致する条件より求められる。 $TQ \oplus T^*Q$ の点 (q, v, p) の局所座標 q^i, v^i, p_i 及び未定乗数 λ_r を用いて、式 (1) を表すと

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial v^i}, \quad \frac{\partial \phi^r}{\partial q^i} \dot{q}^i = 0, \quad v^i = \dot{q}^i, \quad \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q^i} + \lambda_r \frac{\partial \phi^r}{\partial q^i}, \quad i = 1, \dots, n; \quad r = 1, \dots, m < n.$$

となる。提案するニューラルネットワークは入力（訓練データ）が $q(t), v(t)$ で、出力をラグランジアン L とする。また、 L の微係数と、教師データとして $\dot{p}_i(t), p_i(t), \lambda_r(t)$ を用いて損失関数 L_{loss} を

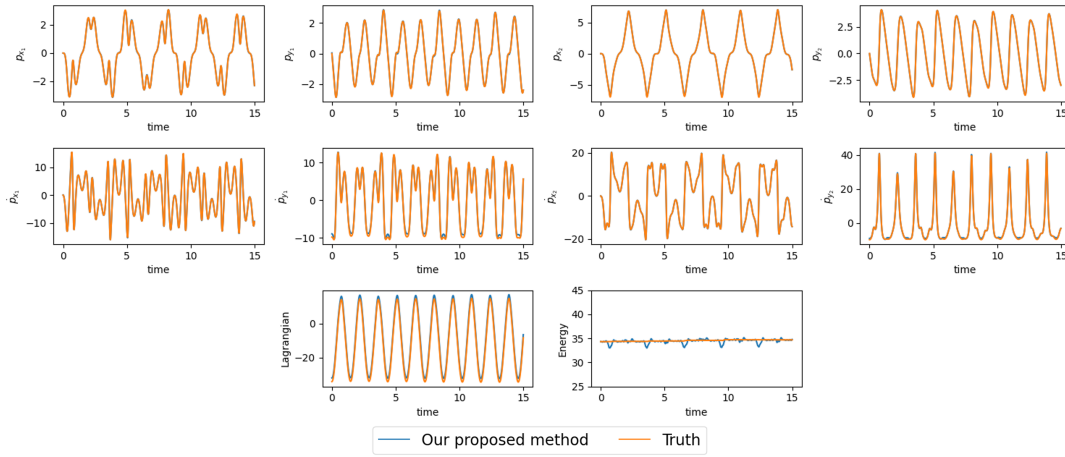


図 1. 学習されたニューラルネットから導かれる各変数の時間変化

$$L_{\text{loss}} = \left\| \dot{p} - \frac{\partial L}{\partial q} + \sum_{r=1}^m \lambda_r \frac{\partial \phi^r(q)}{\partial q} \right\|_2 + \left\| p - \frac{\partial L}{\partial v} \right\|_2$$

と定義する．ここで $\|\cdot\|_2$ は L_2 ノルムである．

3 二重振り子による数値実験

例として，ホロノミック拘束を持つ二重振り子を対象に数値計算を行った．隠れ層のユニット数を 256 とし，活性化関数はハイパボリックタンジェントである 4 層のニューラルネットワークを用いた．損失関数の最適化アルゴリズムとして Adam を採用し，学習率は 10^{-3} ，40 イテレーションでパラメータ更新を行った．学習データは，80 点の異なる初期値で，時間ステップ $\Delta t = 0.01$ で微分代数方程式を陰的ルンゲクッタ法で数値積分した 80 本の軌道を使用している．

学習されたニューラルネットを用いて，テストデータを入力した結果から導かれるラグランジアン，エネルギー，運動量，運動量の時間変化の結果を図 1 に示す．図 1 より学習されたニューラルネットから推定される各変数は力学系を数値計算した結果を上手く表現できていることがわかる．

4 まとめ

本研究では，余接バンドル上のディラック構造を用いたラグランジュ・ディラック系を模倣とするラグランジュ・ディラックニューラルネットワークを提案した．数値実験より，本研究で提案した手法で学習したラグランジアンによって，正しい物理現象を再現できていることを示した．

謝辞 本研究の一部は，科研費基盤研究 (C)(22K03443)，JST CREST(JPMJCR1914)，早稲田大学特定課題研究 (2024C-102) による援助を受けている．ここに謝意を表します．

参考文献

- [1] Finzi, M., Wang, K. A., and A. G. Wilson, “Simplifying Hamiltonian and Lagrangian neural networks via explicit constraints”, *In Advances in Neural Information Processing Systems*, Curran Associates, Inc., Vol. 33, pp. 13880-13889, 2020.
- [2] Yoshimura, H. and J. E. Marsden, “Dirac structures and Lagrangian mechanics Part I: Implicit Lagrangian systems”, *J. Geometry and Physics*. Vol.57, pp. 133-156, 2006.