

グレーボックス深層生成モデルの学習

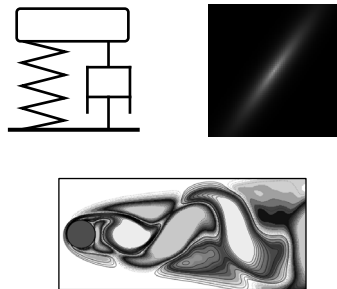
武石 直也（西スイス応用科学大 (HES-SO) / 理研AIP）

Joint work with Dr. Alexandros Kalousis (HES-SO)

概要 深層生成モデル（本発表では特に変分オートエンコーダ）において、生成過程（デコーダ）がニューラルネットと事前知識によるモデル（例：物理的な支配法則）からなる場合を考える。そのようなグレーボックスモデルは学習効率や潜在変数の解釈性などの点で有利であるが、学習の際には、ニューラルネットが事前知識モデルを無視しないように注意する必要がある。本研究では両者のバランスをとって学習するための正則化法を提案する。

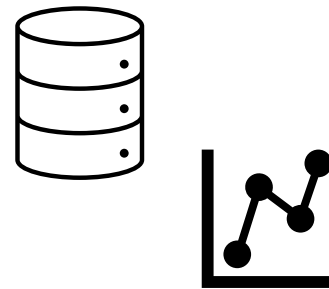
グレーボックスモデル

数理モデル
(物理、化学、生物、etc.)



+

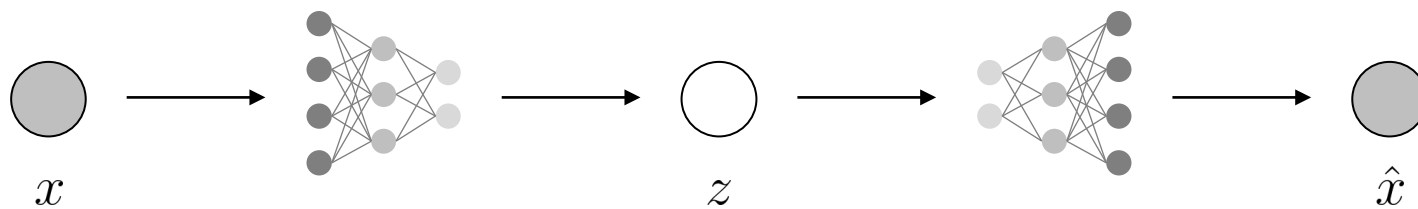
データ駆動モデル



効率的な学習、一部解釈性 など

深層生成モデルでも同様のことができるか？

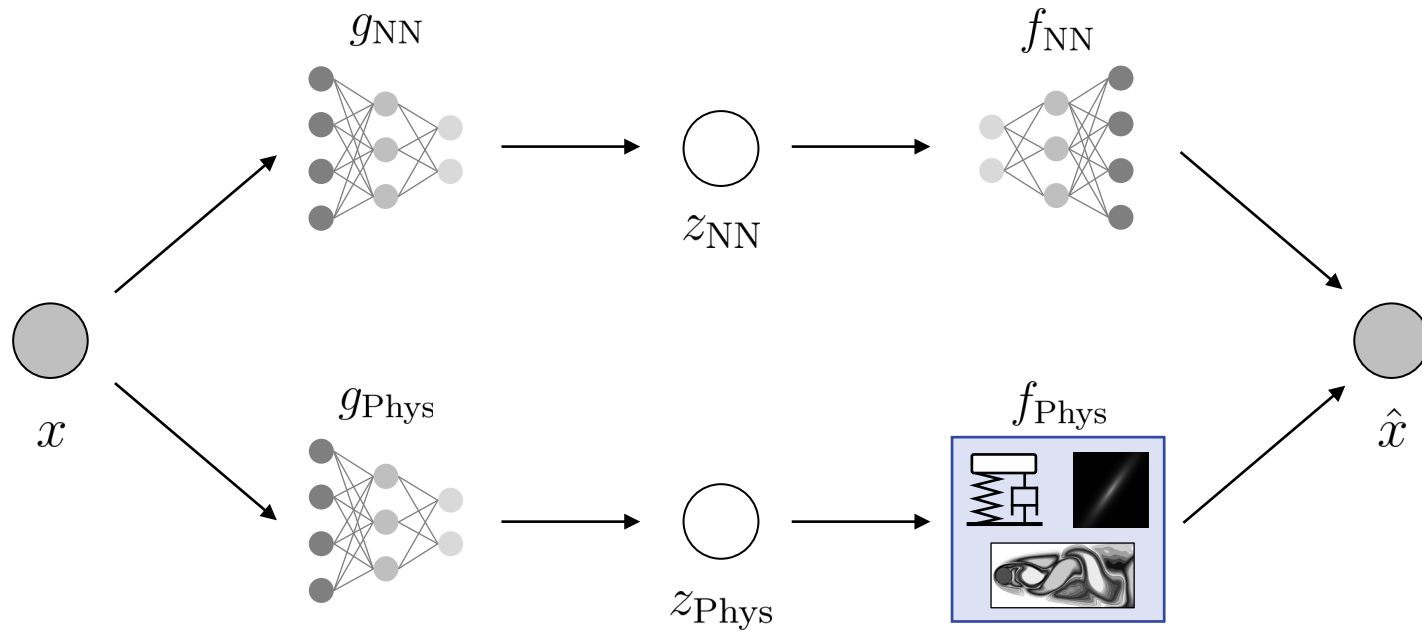
通常の (V)AE



$$\mathbb{E}z = g(x)$$

$$\mathbb{E}\hat{x} = f(z)$$

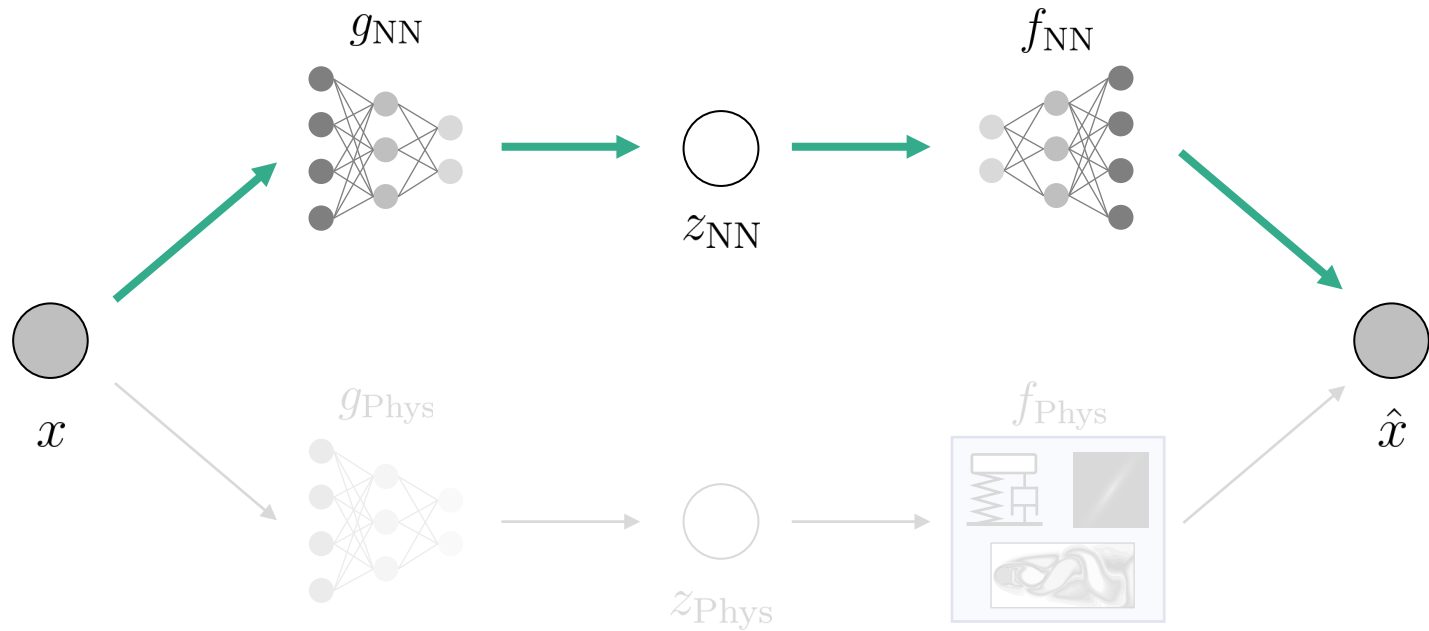
グレーボックス VAE



$$\begin{aligned}\mathbb{E}z_{\text{NN}} &= g_{\text{NN}}(x) \\ \mathbb{E}z_{\text{Phys}} &= g_{\text{Phys}}(x)\end{aligned}$$

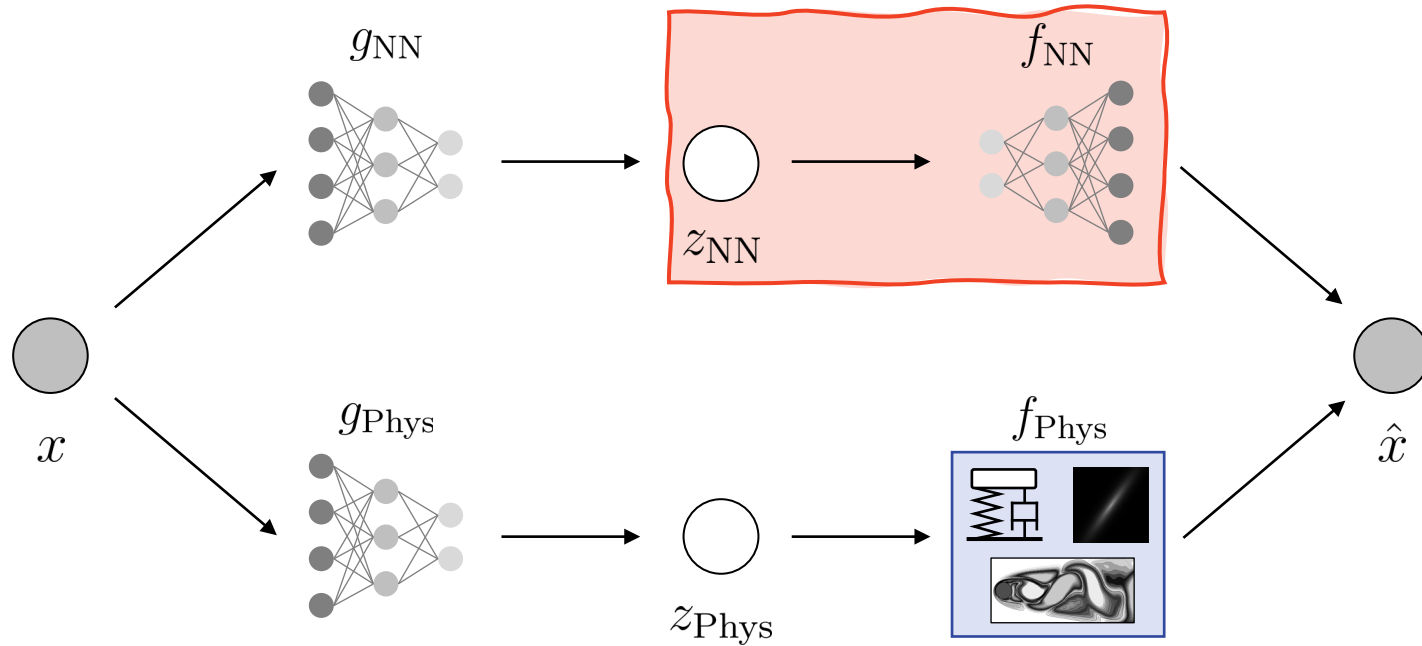
$$\mathbb{E}\hat{x} = \mathcal{F}[f_{\text{NN}}, f_{\text{Phys}}; z_{\text{NN}}, z_{\text{Phys}}]$$

グレーボックス VAE の問題点



数理モデル部分が無視されてしまう

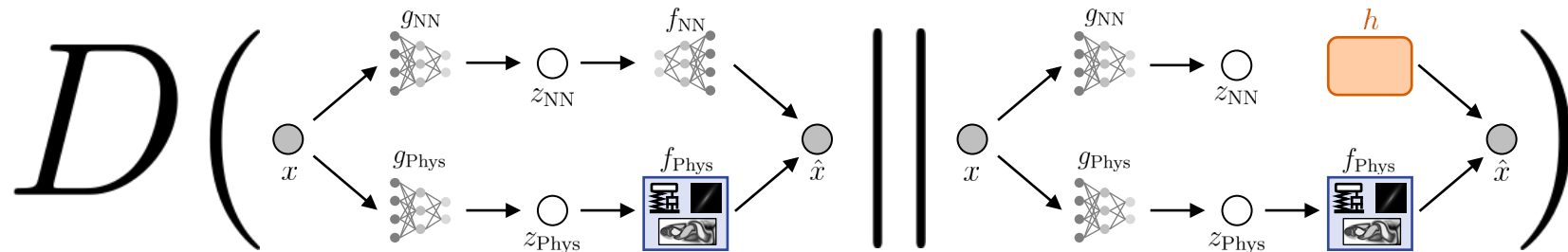
正則化 (1)



デコーダのうち、**データに基づいて学習される部分**の自由度を抑えたい

正則化 (1) cont'd

Minimize



もとのモデル

“数理モデルオンリー”版

$$\mathbb{E} z_{\text{NN}} = g_{\text{NN}}(x)$$

$$\mathbb{E} z_{\text{Phys}} = g_{\text{Phys}}(x)$$

$$\mathbb{E} \hat{x} = \mathcal{F}[f_{\text{NN}}, f_{\text{Phys}}; z_{\text{NN}}, z_{\text{Phys}}]$$



$$p(\hat{x} \mid X_{\text{data}})$$

~~$$\mathbb{E} z_{\text{NN}} = g_{\text{NN}}(x)$$~~

$$\mathbb{E} z_{\text{Phys}} = g_{\text{Phys}}(x)$$

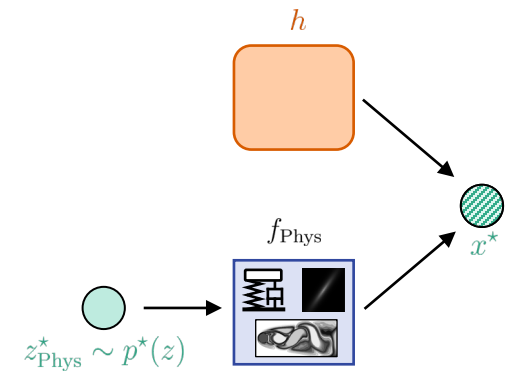
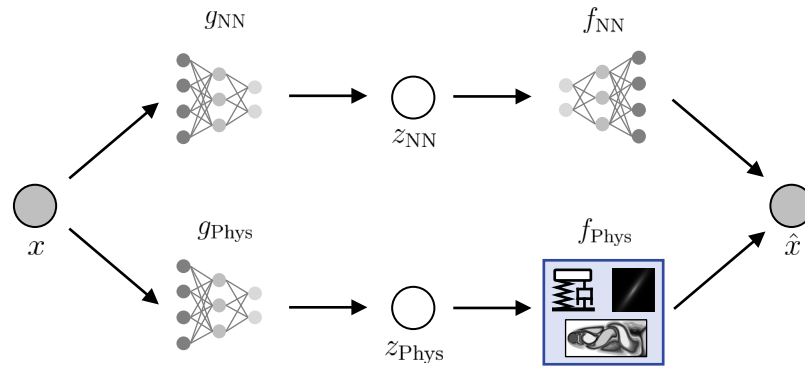
~~$$\mathbb{E} \hat{x} = \mathcal{F}[\underline{f_{\text{NN}}}, f_{\text{Phys}}; \underline{z_{\text{NN}}}, z_{\text{Phys}}]$$~~

h



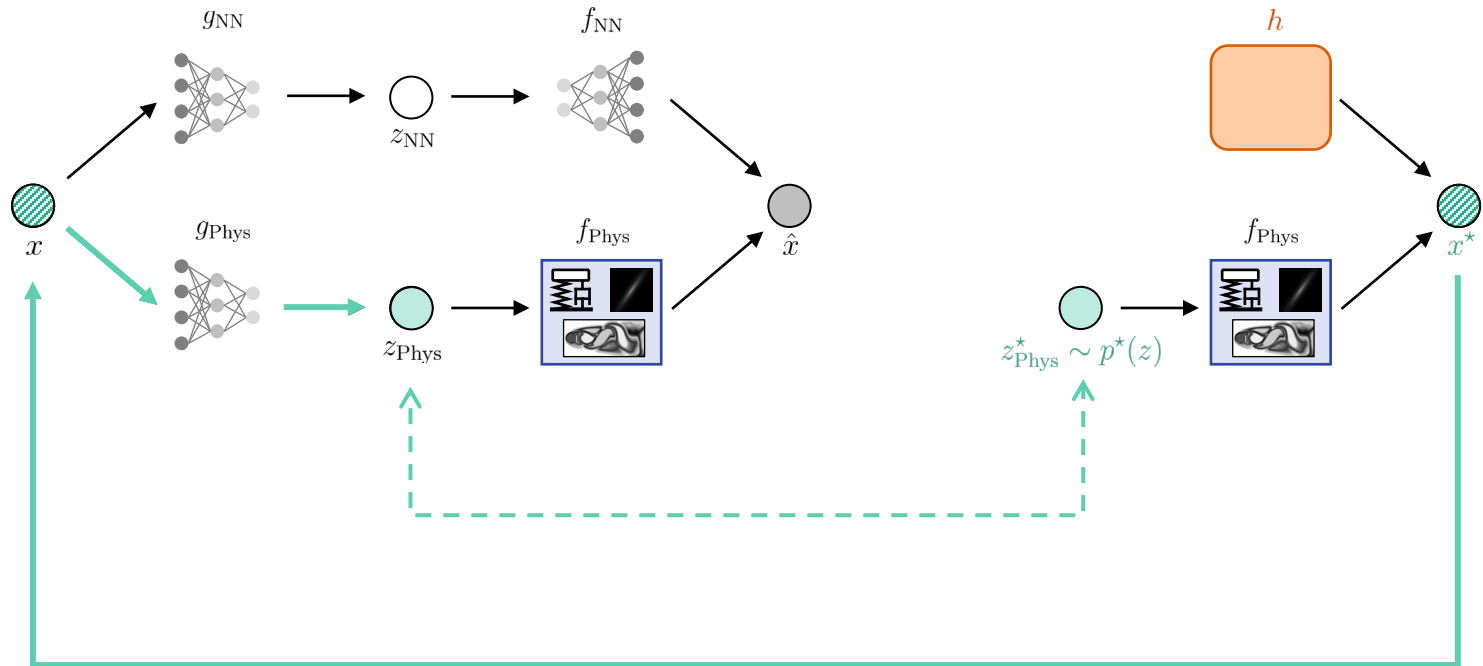
$$p_{\text{reduced}}(\hat{x} \mid X_{\text{data}})$$

正則化 (2)



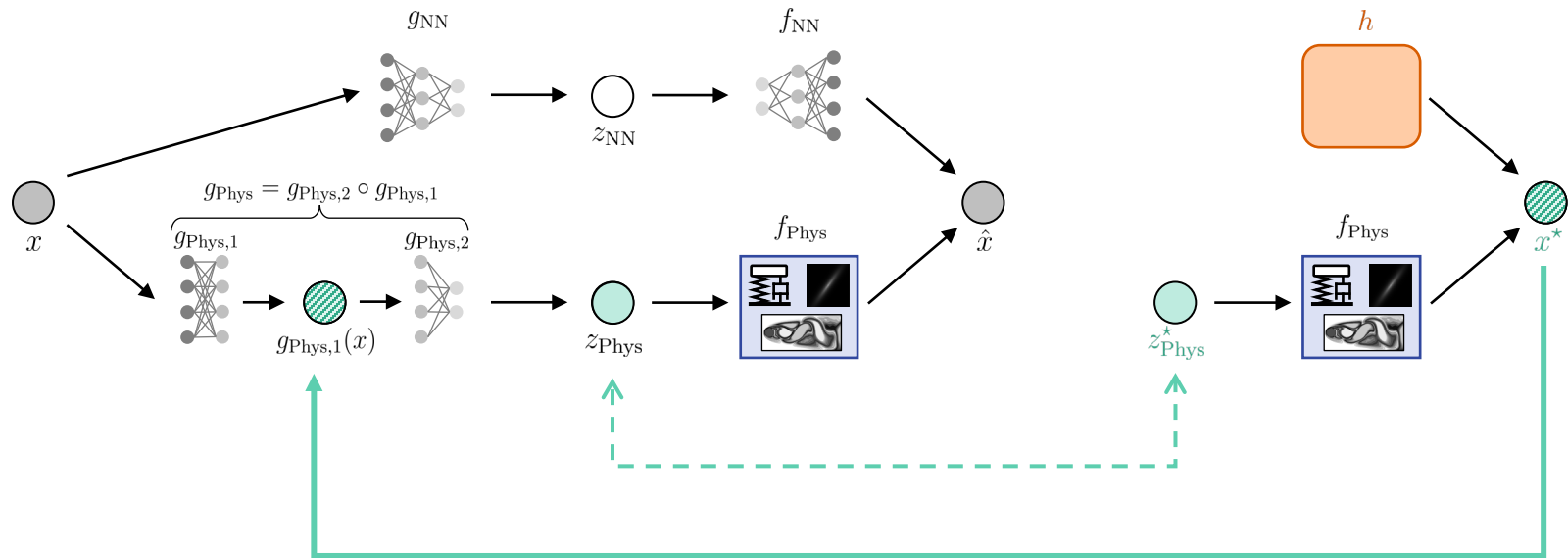
数理モデル部分を使って人工データを生成できるが、

正則化 (2)

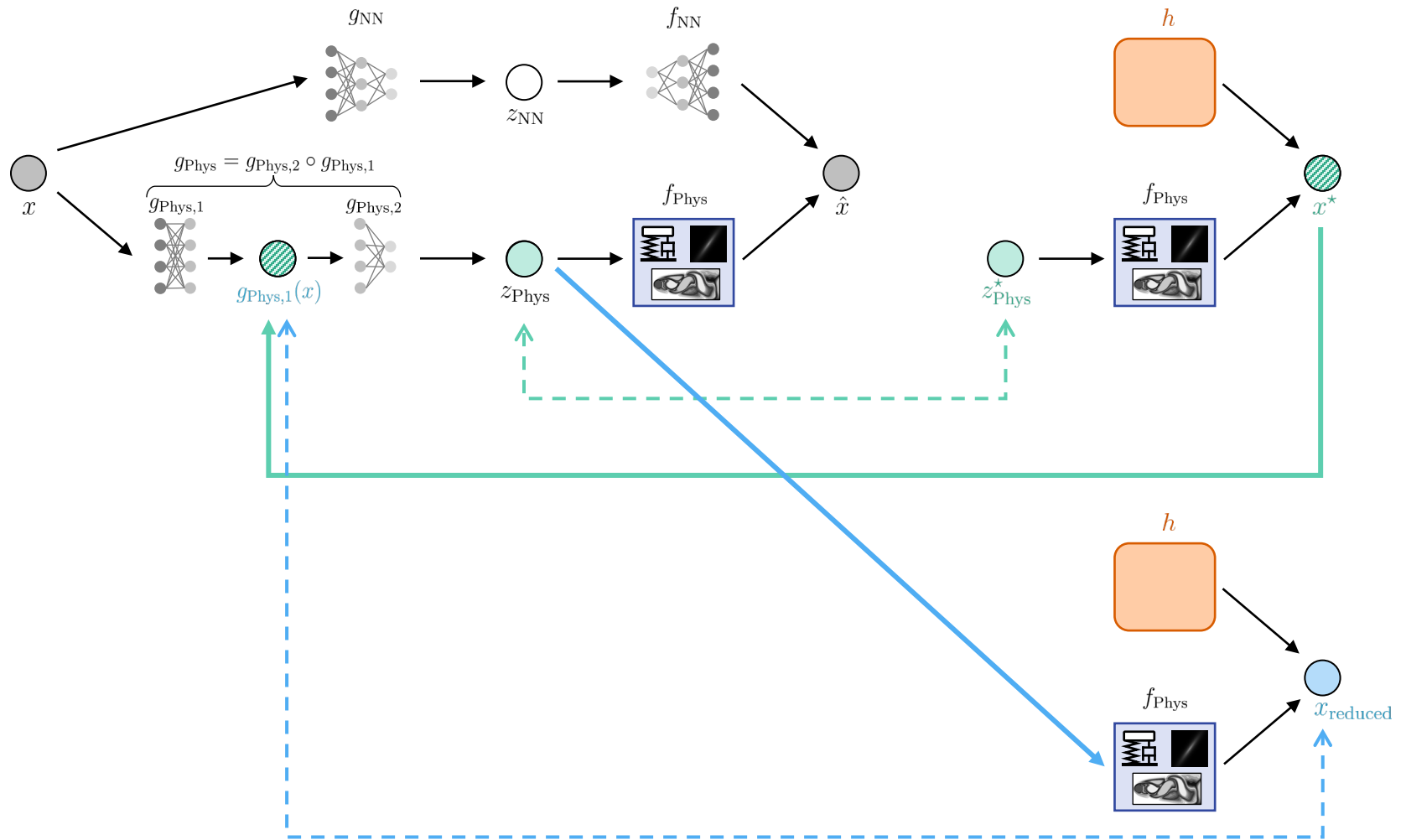


数理モデル部分を使って人工データを生成できるが、
 x と x^* は基本的に性質が違う 😞

正則化 (2) cont'd



正則化 (2) cont'd



実験 (1)

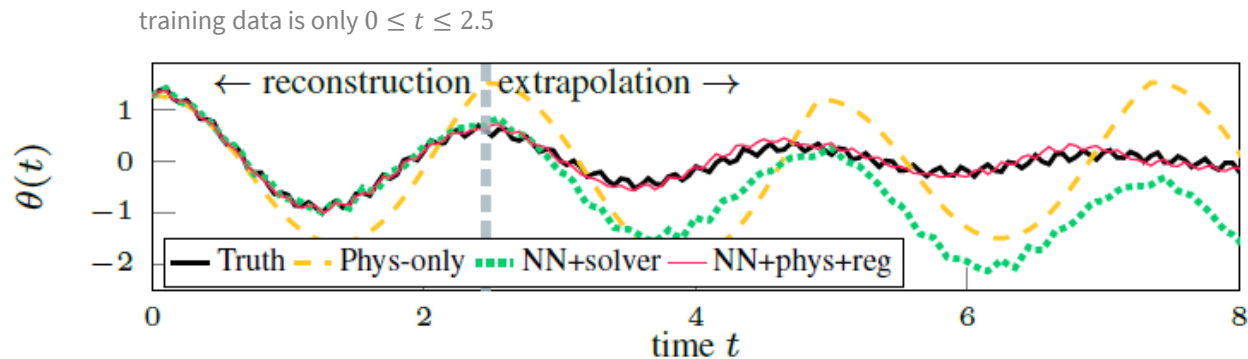
- データ: 各データ点 = 振り子角度 ϑ の時系列

$$\ddot{\vartheta} + \omega^2 \sin \vartheta + b \dot{\vartheta} - A \omega^2 \cos(2\pi \phi t) = 0$$

- エンコーダ = ニューラルネット

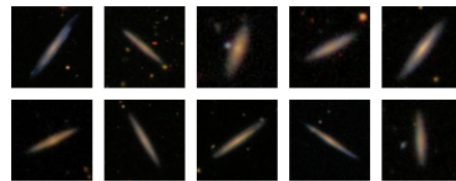
- デコーダ = $f_{\text{NN},2}(\text{ODESolve}_{\vartheta}[f_{\text{Phys}}(\vartheta, z_{\text{Phys}}) + f_{\text{NN},1}(\vartheta, z_{\text{NN}}) = 0], z_{\text{NN}})$

$$\text{where } f_{\text{Phys}}(\vartheta, z_{\text{Phys}}) = \ddot{\vartheta} + z_{\text{Phys}}^2 \sin \vartheta$$



実験 (2)

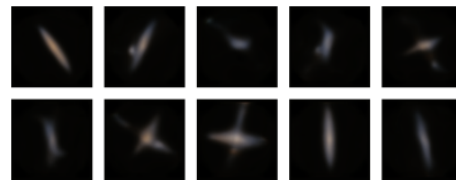
- データ: 銀河の画像
- エンコーダ = CNN
- デコーダ = $f_{\text{NN}}(f_{\text{Phys}}(z_{\text{Phys}}), z_{\text{NN}})$
 - f_{NN} = U-Net
 - f_{Phys} = Gaussian profile, $z_{\text{Phys}} = [a, b, \theta, I]$
 - ✓ a & b = semi-major/minor axes of ellipse, θ = tilt, I = intensity



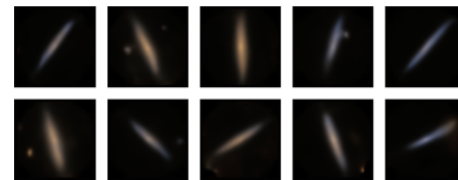
Data



NN-only

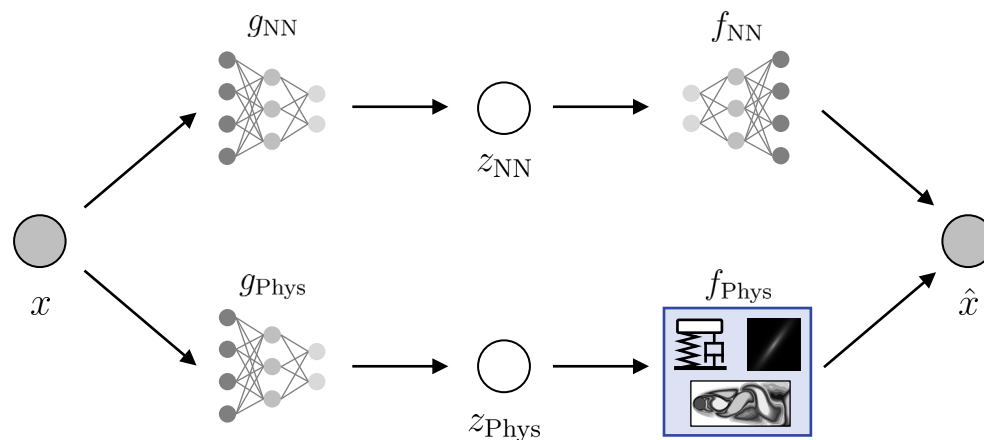


NN+phys



NN+phys+reg

まとめ



- グレーボックスモデリング、特に自由度の高いMLモデルとの場合、数理モデル側が無視されないように気を付ける必要がある
- More information:
 - preprint available at <https://arxiv.org/abs/2102.13156>
 - Takeishi & Kalousis, Physics-integrated variational autoencoders for robust and interpretable generative modeling, to appear in NeurIPS 2021