

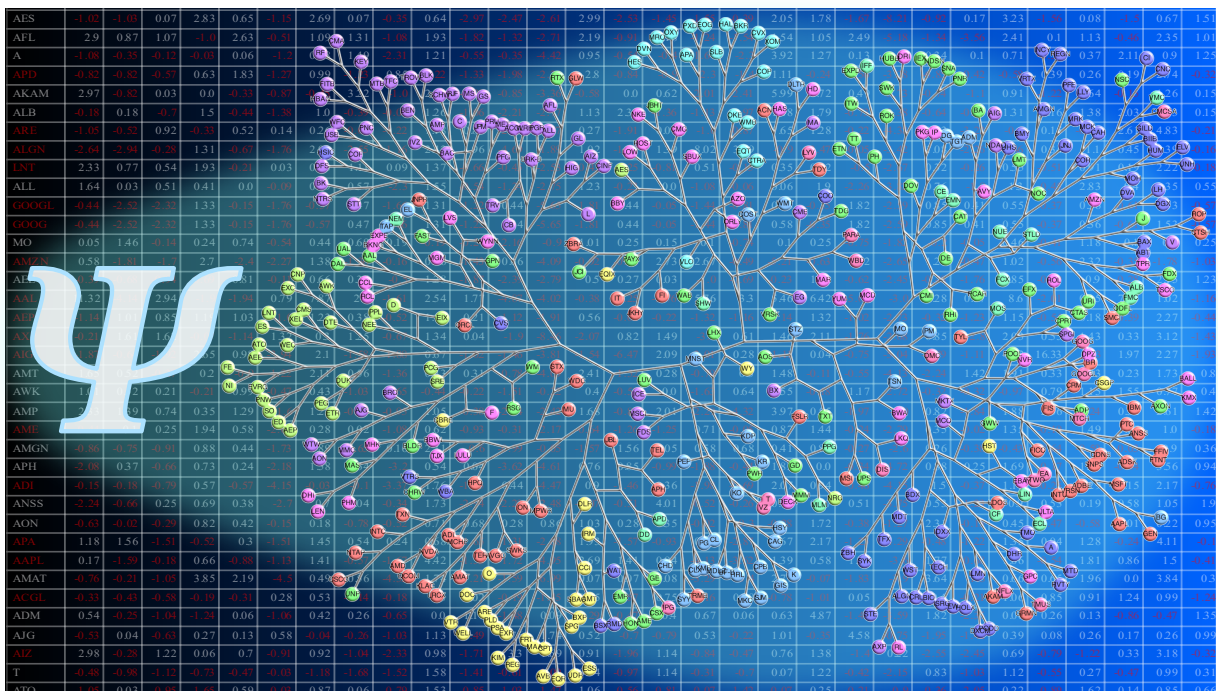
テンソルネットワークによる生成モデル

— 株式騰落パターンから相関構造が発現 —

概要

京都大学大学院情報学研究科原田健助教、東京大学大学院理学系研究科大久保毅特任准教授、東京大学物性研究所川島直輝教授は、テンソルネットワーク（以下 TN）^{注1}をベースとした生成モデル^{注2}の新しい構築法を提案し、その有効性を示しました。生成モデルはほとんどの場合ニューラルネットワークがベースとして使われており、ネットワーク構造の最適化についてはまだあまり研究が進んでいません。本研究では、ツリー型 TN として表現された波動関数と確率分布の対応関係を利用したボルンマシン^{注3}を考え、これに対してネットワーク構造最適化を行う生成モデル構成方法（適応的テンソルツリー、ATT）を提案し、その有効性を実証しました。具体例として、株式の騰落パターンのデータから ATT によって生成モデルを構築すると、学習が進むにつれて株式銘柄間の相関関係が自然とネットワーク構造に反映されていく様子が観察されました。ATT によってどのようなサンプルに対しても生成モデルを構築することができるため、従来は捕捉しにくかったさまざまな相関構造の解明や新しい AI 構築のための枠組みとしても役立つものと期待できます。

本研究成果は、2025 年 4 月 1 日に、国際学術誌「*Machine Learning: Science and Technology*」にオンライン掲載されました。



適応的テンソルツリー（ATT）をベースにしたボルンマシンが S&P500 の約 10 年分の騰落パターンを学習することで生成したツリー構造。各点は企業を表し、色は業種（セクター^{注4}）ごとに色を変えてある。業種情報は ATT に与えていないが、おおよそ業種ごとに近い関係にあることを「発見」していることがわかる。

1. 背景

現在、いろいろな面で世界を大きく変えつつある AI は多くの場合大規模言語モデル (LLM) と呼ばれる生成モデルが使われており、通常そのベースになるのがニューラルネットワークです。ニューラルネットワークをベースとした AI では、学習の過程でダイナミックにネットワーク構造を最適化することを普通は行いませんが、時間とともに学習データが変動する場合や、あらかじめネットワーク構造を推定しがたい場合など、動的構造最適化が望ましい場合があります。今回、生成モデルのベースとして採用した TN は相互情報量^{注5}などの計算が容易にできるという利点があり、本研究でもネットワーク最適化において相互情報量を利用しています。本研究チームはこれまでも TN を用いて、物性理論研究において登場するさまざまな確率分布関数に関する研究を行っていましたが、本研究では京都大学モビリティ基盤数理研究ラボ「流れと物理」グループ（グループリーダー：京都大学情報学研究科辻本諭教授）のメンバーとして、物性物理学で発展してきた情報処理技術の社会実装に向けて、より一般の確率分布関数への応用を模索する中で、本研究の構想にたどり着きました。

2. 研究手法・成果

本研究では、ツリーが全体として表す関数と、最終的に表現したい確率分布関数との間をボルン則で関係づけるボルンマシンとよばれる枠組みを使っています。ボルンマシンを採用することによって、ツリーが表す関数自体が負の値となるようなものであっても、全体としては正の確率分布関数とみなせるために、ツリーの構成要素であるテンソルを最適化する際の拘束条件がなくなり、最適化が容易になります。これに対して、仮にツリーが直接表す関数自体をターゲットである確率分布関数に近づけようとする、とテンソルの成分の最適化の際に全体の符号が正でなければならない、という条件が必要となり、最適化が困難になります。また、ボルンマシンは、原理的には量子計算^{注6}としても実現可能なので、将来の量子計算の応用先になり得ることも本研究の特徴として挙げられます。

本研究のもう一つの特徴は、テンソルの成分の最適化だけでなく、ツリー構造自体の最適化も同時におこなっていることです。ツリー型のネットワークでは、任意の1本の枝を仮に切断するとツリーが2つのサブツリーに分割されますが、こうしてできる2つのサブツリー間の相互情報量が大きい場合、その枝はそれだけ大きな相互情報量を仲介していることになり、正確に分布関数を表現するためには枝を太くする必要があります。しかし枝を太くするとその分計算の負荷が重くなります。このように相互情報量が一本の枝に集中してしまうことはツリー型ネットワークの欠点です。反面、ツリー型ネットワークには計算を複雑にする閉じたループの経路が無いために、計算速度上の大きな利点があります。本研究で提案している適応的テンソルツリー (ATT) では、ツリー構造による高速計算の利点を活かし、特定の枝に相互情報量が集中しすぎないように構造自体を最適化していくことで、ツリー構造の欠点を補いつつ全体としての高い性能を目指しています。具体的には、最適化の各瞬間で各枝が担っている相互情報量をモニターし、高い負荷がかかっている枝の周辺について優先的に組み換えを行って負荷を減らすことで、このような最適化を実現しています。

学習が期待どおりに行われるかどうかの実証研究として、本研究では、単純なランダムビット列や、人工的に生成したベイジアンネットワーク^{注7}、手書き文字のビットイメージ、米国の標準的な株価指数 S&P500 に含まれる株式銘柄の騰落データ、の4つのサンプル集合についてボルンマシン ATT を適用しました。これらすべてについて、負の対数尤度^{注8}が最適化の進行とともに順調に減少していることや、ネットワーク構造の最適化が効いていることなどが確認されました。さらに、ベイジアンネットワークなど、ターゲット分布関数自体がツリー構造を持っている場合には、それを学習させた ATT の構造がターゲットと同じものに収束していく様子も確認できました。株価データに関しては、ターゲット分布関数には元来そのようなツリー構造はあり

ませんが、学習が進むにつれて銘柄（会社）間の相関関係が自然とネットワーク構造に反映されていき、最終的に得られたネットワーク上では、同じセクターに属する会社がつりー上でも近距離に配置されることが分かり、ATT が学習の仮定で自然とデータにある構造を「発見」している様子が確認されました。

3. 波及効果、今後の予定

ATT によってどのようなサンプルに対しても生成モデルを構築することができるため、従来は捕捉しにくかったさまざまな相関構造の解明に役立つものと期待できます。たとえば、さまざまな生物の系統樹、諸言語の系統樹、観測されない変数を多数含んだ因果関係ネットワークの推定、3 体以上の多体相関関係が支配的である確率分布関数、時系列への応用、などが考えられます。このように方法の特性をより明らかにしながら応用範囲を広げていくことによって、最終的には AI への応用の可能性もあると考えています。それが実現できれば、従来の AI と比較して、より可塑性のある脳に近い AI が実現できるかもしれません。また、本研究で考察したボルンマシンは安定した収束性に優れている反面、正であることが保証されるのがサンプルに含まれている変数についての分布関数だけであるため、サンプルに含まれていない変数まで想定して因果関係を推定したいような場合、局所的にネットワークの一部を取り出しても一般には値が負になってしまい、そのままでは条件付き確率とは解釈できない困難があります。各テンソル成分を非負としたネットワークによって直接分布関数を表現する方法を取り入れることができれば、この点が改善できますが、計算技術的にそれが可能かどうかは今後の研究のテーマとなりえるでしょう。最後に、ボルンマシンによる実装は、量子計算としても原理的には実現可能であるため、そのような可能性をより具体的に探求することも重要なテーマとなりえるでしょう。

4. 研究プロジェクトについて

本研究は、以下の補助金、施設の資金・資源の援助によって行われました。京都大学とトヨタ自動車の共同研究プロジェクト「モビリティ基盤数理の研究」、文部科学省科学研究費補助金（20K03766、22K18682、23H01092、23H03818、24K06886）、学術変革領域研究(A)「極限宇宙の物理法則を創る－量子情報で拓く時空と物質の新しいパラダイム」（21H05182、21H05191）、「量子ソフトウェア」寄付講座、国立研究開発法人科学技術振興機構の共創の場形成支援プログラム「量子ソフトウェアと HPC・シミュレーション技術の共創によるサステナブル AI 研究拠点」（JST Grant No. JPMJPF2221）、東京大学物性研究所スーパーコンピュータ。

<用語解説>

注 1) テンソルネットワーク (TN) 量子力学における波動関数や、統計力学における格子モデルなどを多数のテンソルの部分縮約として表現したもので、統計力学分野でスピンモデルの解法に古くから用いられていたが、量子情報の研究者が波動関数の表現手法として利用したことから注目されるようになった。計算手法として用いられることが多い一方、近年は解析的な理論構築のための基礎としても有用であることが分かり、その応用範囲の広さから近年盛んに研究されている。

注 2) 生成モデル 多数のサンプルからその背後にある確率分布関数を学習し、その確率分布に従って新しいサンプルを生成する仕組み。現在は、大規模言語モデルを通じて多くの AI に取り入れられている。

注 3) ボルンマシン 波動関数によってターゲットとなる分布関数を表す方法。一般に、量子力学においては、波動関数の振幅の 2 乗が確率分布を表すが、これをボルン則という。本研究では、現実の量子系ではなく、仮想的な波動関数を考えている。そうすることで、波動関数が非負実数でなくても確率分布に対応させることが

でき、テンソル成分の最適化の際の拘束条件がなくて済むという計算上の利点がある。また、ボルンマシンは量子ゲートによる実装が原理的には可能であり、本研究の ATT が将来的には量子計算として実現できる可能性もある。

注 4) セクター S&P500 の銘柄を業種ごとに分類したもので、全部で 11 のセクターがある。

注 5) 相互情報量 確率変数の集合間の相関を数値化したもので、確率変数の数が増えると計算量が飛躍的に多くなるが、本研究のツリー型 TN の場合、枝の切断によって定義される 2 つの確率変数の集合間の相互情報量は容易に計算できる。

注 6) 量子計算 重ね合わせをとる量子状態に対して量子力学的な操作を行うことで計算を実行。古典的な状態を用いる普通のコンピュータよりも飛躍的な高速計算が可能になると期待されて、最近研究が活発に行われている。

注 7) ベイジアンネットワーク 多くの確率変数が互いに因果関係で結ばれたネットワーク。本研究では、ツリー型のネットワークを考えて、ベンチマークテストのためのターゲット確率分布関数の一つとし、これによって生成されたサンプルを ATT に学習させた。

注 8) 負の対数尤度 Negative log-likelihood。2 つの確率分布関数の間の遠さを数値化したもので、本研究では、値が小さいほど ATT がサンプルを忠実に再現していると言える。

<研究者のコメント>

「テンソルネットワーク構造として、株価の騰落データやベイジアンネットワークなどさまざまなデータ内の関係構造が発現するとわかった時は、単純な原理を用いてできることに驚きました。」(原田)

「テンソルネットワークを使うことで量子情報科学の知見を機械学習にも活用できることが示せて、とても嬉しいです。」(大久保)

「物性論と最適化の関わりは学生のときのテーマだったので、そこに戻ってこられて嬉しいです。」(川島)

<論文タイトルと著者>

タイトル：Tensor tree learns hidden relational structures in data to construct generative models (テンソルツリーは生成モデルの構成においてデータ内の隠れた関係を学習する)

著者：Kenji HARADA, Tsuyoshi OKUBO, Naoki KAWASHIMA

掲載誌：Machine Learning: Science and Technology DOI：10.1088/2632-2153/adc2c7