

数学・数理科学と情報科学の連携・融合による情報活用基盤の創出と社会課題解決に向けた展開

2019年度採択研究代表者

2022年度  
年次報告書

谷口 隆晴

神戸大学 大学院システム情報学研究科  
准教授

幾何学的離散力学を核とする構造保存的システムモデリング・シミュレーション基盤

主たる共同研究者:

大森 敏明 (神戸大学 大学院工学研究科 准教授)

高山 信毅 (神戸大学 大学院理学研究科 教授)

吉村 浩明 (早稲田大学 理工学術院 教授)

## 研究成果の概要

データ駆動型アプローチとしては、力学系に関する観測データから深層学習によって保存則を抽出する手法を開発した。また、シンプレクティック数値積分法の応用した誤差逆伝播法によらない微分法を用いて、ニューラル微分方程式を学習する省メモリな手法を開発した。また、神経システムのダイナミクスについては、膜電流に関して多数の非線形項の候補が存在しており、部分的に観測される計測データに基づいて潜在ダイナミクスを抽出する必要がある。そこで、データ駆動型手法として、逐次モンテカルロ法とスパースモデリングを融合したアルゴリズムを構築し、データに潜在する重要な非線形項の抽出を実現するとともに、潜在変数と非線形膜電流の精緻な同時推定を実現した。離散ディラック力学についての研究としては、離散ディラック構造を提案し、離散ディラック構造を保存する離散ディラック系の定式化理論を構築した。これにより、非ホロノミック系の構造保存型積分法への展開が可能となると考えられる。また、レイリー・ベナル対流に関する摂動を受けるハミルトン系モデルについて、周期解の大域的な分岐現象を調査した。さらに、単純閉鎖系の非平衡熱力学の変分的定式化について、非線形かつ非ホロノミックな拘束を受けるハミルトン系による枠組みを示した。計算代数学による方法については、パラメータ付きの多重積分についての研究で進展があった。パラメータ付きの多重積分はベイズ統計や多変量解析、また物理分野の Feynman 積分の研究で重要な役割を果たしている。これらの多重積分はパラメータについての Pfaffian 方程式系(グレブナー基底と同値)を満たすが Macaulay matrix を用いた Pfaffian 方程式系の効率的構成アルゴリズムおよびその実装を与え積分の数値解析への有効性も示した。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, Takaharu Yaguchi, The Symplectic Adjoint Method: Memory-Efficient Backpropagation of Neural-Network-Based Differential Equations, IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, pp. 1-13, 2023.
- 2) Masahito Watanabe and Hiroaki Yoshimura, Resonance, symmetry, and bifurcation of periodic orbits in perturbed Rayleigh-Benard convection, Nonlinearity, Vol. 36, No. 2, pp. 955-999, 2022.
- 3) Hiroaki Yoshimura and Francois Gay-Balmaz, Hamiltonian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics of simple closed systems. IFAC Papers Online, Vol. 55, No. 18, pp. 81-86, 2022.
- 4) Takuma Ihara, Toshiaki Omori, Estimation of Nonlinear Neural Dynamics Through Sequential Monte Carlo Method and Sparse Modeling, Proceedings of 28th International Symposium on Artificial Life and Robotics, pp. 709-713, 2023.
- 5) V. Chestnov, F. Gasparotto, M. K. Mandal, P. Mastrolia, S. J. Matsubara-Heo, H. J. Munch, N. Takayama, Macaulay Matrix for Feynman Integrals: Linear Relations and Intersection Numbers, Journal of High Energy Physics volume 2022, Article number: 187 (2022)