

先端国際共同研究推進事業

2023 年度採択

次世代のための ASPIRE

AI・情報分野

2023 年～2024 年度

年次報告書・公開版

研究課題名 深層科学技術計算：数理科学を基盤とする物理構造と
深層学習の融合

日本側研究代表者 谷口 隆晴 神戸大学 教授

相手側研究代表者 Christopher Budd, Professor, University of Bath

研究期間 2024 年 2 月 1 日～2027 年 3 月 31 日

1. 研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

＜実施したこと＞ 本研究のアイデアの中核となる、物理シミュレーションのための深層学習モデルについて、その基礎を確立することを目指し、アイデアの実装を目指した。また、大規模な深層物理モデルの構築に関しても、その具体的な実装について検討を始めた。物理的手法と深層学習の融合研究や理論解析手法の構築にも取り組んだ。具体的には、近年、構築された新しい力学理論と深層学習と連携に取り組んだ。また、理論研究についても進めた。

＜得られた成果＞

物理シミュレーションのためのモデルについて、具体的なモデル式を導出し、その性質の理論解析や性能評価を行った。また、物理学に基づく作用素学習手法について、そのアイデアの実装を行った。一方、公開されているデータベースの物理シミュレーションデータは低精度であるため、自作の高精度データベースの構築が必要であることが分かった。そのため、そのようなデータベースの作成を開始した。

次に、深層学習と物理モデルの連携研究についてもモデル化手法の研究や、シミュレーション手法の加速方法などを構築した。理論的な研究としては、高次元学習モデルの理論開発として、比較的、単純なモデルの解析などを行った。

② 国際頭脳循環の促進にかかる成果

＜実施したこと＞

近年、Scientific Machine Learning と呼ばれる、物理シミュレーションのための機械学習手法が注目されているが、Scientific Machine Learning のための、理論から応用までをカバーする国際会議シリーズとしては、我々が知る限り、世界初の国際会議シリーズを立ち上げ、第 1 回および第 2 回を開催した。また、IEEE Conference of Artificial Intelligence 2024 で、Scientific Machine Learning に関する国際ワークショップを開催した。

国際共同研究として、連携先への訪問や、関連研究者の訪問・招へいを行い、共同研究のための議論を深めた。具体的には、ケンブリッジ大学の Schönlieb 教授、関連研究者である NTNU の Owren 教授や Celledoni 教授やその研究グループとの研究交流を進めた。9 月には、連携先の Bath 大学の Budd 教授を複数名で訪問し、ワークショップの開催や共同研究に向けた議論を行った。また、彼らの来日に合わせて、国際ワークショップを複数回開催した。また、先方から招待講演の依頼を受け、国際研究集会などで複数回の招待講演を行った。

＜得られた成果＞

国際会議シリーズ International Conference on Scientific Computing and Machine Learning の第 1 回目を 2024 年 3 月に、第 2 回目を 2025 年 3 月に京都で開催した。MIT の Rackauckas 博士をはじめとする、著名な研究者を多数招へいした。また、日本からも多数の若手研究者を参加させることができた。これは、若手研究者と、この分野の著名な研究者とのつながりを持たせるきっかけとなり得る。実際、これがきっかけで、メンバーのうちの 1 名は招待講演の依頼を受けた。6 月にシンガポールで開催した、IEEE CAI のワークシ

ヨップについても、海外の著名な研究グループとの連携の下地ができた。実際、共同研究プロジェクトの応募などの検討も行った。また、訪問・招へいした研究者らとの共同研究も進んでおり、そのうち、いくつかの研究については、トップレベルの国際会議などに論文を投稿した。

2. 研究実施体制

研究テーマ	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究テーマ1：深層科学技術計算：数理科学を基盤とする物理構造と深層学習の融合	谷口隆晴、 Christopher Budd	神戸大学・理学研究科・教授 Bath大学・数理科学科・教授
研究テーマ2：物理構造と幾何学的深層学習の融合による構造保存型深層学習の創出	谷口隆晴、 松原崇、 Christopher Budd	神戸大学・理学研究科・教授 北海道大学・情報科学研究院・教授 Bath大学・数理科学科・教授
研究テーマ3：高次元深層構造を持つ統計モデルによる科学技術計算の理論構築及び手法開発	谷口隆晴、 今泉允聡、 Christopher Budd	神戸大学・理学研究科・教授 東京大学・総合文化研究科・准教授 Bath大学・数理科学科・教授
研究テーマ4：物理学に由来する数理構造を組み込んだ作用素学習	谷口隆晴、 田中佑典、 Christopher Budd	神戸大学・理学研究科・教授 日本電信電話株式会社・NTTコミュニケーション科学基礎研究所・研究主任 Bath大学・数理科学科・教授

3. 代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, Number Theoretic Accelerated Learning of Physics-Informed Neural Networks, Proc of The Thirty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2025), Philadelphia, 28 Feb 2025

Yusuke Tanaka Takaharu Yaguchi, Tomoharu Iwata Naonori Ueda, Energy-consistent Neural Operators for Hamiltonian and Dissipative Partial Differential Equations, Proc of The 28th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, 2025 (accepted)