

# 研究終了報告書

## 「物理現象を再現する深層ニューラルネットのベイズ学習法」

研究期間：2021年10月～2024年3月

研究者：田中 佑典

### 1. 研究のねらい

機械学習の進展はめざましく、今や様々な場面で使われ、成功を収めている。では、機械学習を用いて物理現象のシミュレーションをすることも可能だろうか。このような課題に対して、近年、物理学の知識を機械学習モデルに取り入れ、高精度かつ高速なシミュレーションの実現を目指す研究分野が活発化している。物理シミュレーションは科学・産業の発展のために重要なツールである。本研究分野の発展は、気象や海流等の自然現象のメカニズムの解明・予測、自動車や航空機等の製品設計の品質向上・効率化を通じて、科学・産業の発展・加速に貢献する。

深層学習をはじめとした機械学習モデルは、非常に高い表現力を持ち、大規模なデータを活用し、最適化を行うことで、高精度な予測器を自動的に獲得することができる。しかし、高い表現力を持つがゆえに、広大な探索空間の中から、物理現象を正確に再現するような機械学習モデルを最適化により特定することは容易ではない。特に、十分な質と量のデータが得られない場合には、よりいっそう問題は難しいものとなる。

このような状況においては、適切な学習を導くための「事前知識」の導入が有効である。物理学に由来する事前知識を学習のためのバイアスとして活用することで、探索空間を絞り込み、物理現象を正確に再現するようなモデルを効果的に推定できることが期待される。本研究では、物理法則の一つである「エネルギーの保存則」に注目し、ハミルトン力学の理論を機械学習モデルに融合する。また、確率モデリングに基づくベイズ学習アルゴリズムを導出することで、ノイズや欠損を含むデータに対しても頑健な学習を実現することを目指す。実際の物理系に対するシミュレーションデータを用いて、提案手法の有効性を評価する。

### 2. 研究成果

#### (1) 概要

本分野の代表的な手法であるハミルトニアンニューラルネットワーク (Hamiltonian Neural Network: HNN) は、ハミルトン力学に基づき、物理ダイナミクスを支配するエネルギー関数 (ハミルトニアンと呼ばれる) をニューラルネットワークにより推定することで、エネルギーの保存・散逸則を満たしつつ高精度なシミュレーションを実現した。しかし、HNN は、十分な質と量のデータを学習に使えることを暗に仮定しており、ノイズや欠損が多量に含まれるデータ (不完全データと呼ぶ) からの学習は困難であった。

そこで、不完全データからの学習に有利な確率モデリングを活用し、HNN の効果的な学習法について検討を進めた。しかし、HNN と確率モデリングを単に組み合わせるだけでは十分な効果が得られないことがわかった。ニューラルネットワークを用いるアプローチでは、一般に、不完全データに対しては十分な性能が得られないことも多く、HNN も例外ではなかった。そこで、アプローチの抜本的な改良を検討し、「エネルギーの保存・散逸則を満たすガウス過程モデル」の考案に至った。本提案手法は、ハミルトニアンをガウス過程でモデル化し、ベイズ学習アル

ゴリズムを導出することにより、不完全データからでも効果的な学習が可能である。評価実験により提案手法の有効性を示し、この研究結果は機械学習分野の最難関国際会議 NeurIPS2022 に採択された。

より大規模な物理系への適用を想定し、さらなる技術検討を進めた。流体などの運動は、偏微分方程式で表現されるが、従来の数値シミュレーションは計算量が大きく、大規模な系に対しては、多くの場合スーパーコンピュータを活用する必要がある。そこで、大幅な計算量の削減が見込める「作用素学習」に注目し、ハミルトン力学を考慮した効果的な学習法を考案した。

また、国内研究会でのチュートリアル講演や、国内学会誌での解説記事、NTT 主催の技術展示・講演などを通じて、「本研究分野の普及」にも貢献した。

ACT-X 研究を通じて人的ネットワークを構築し、「他研究者との連携」により研究を推進した。特に、学習理論、および、数理科学の専門家と協力し、自身の専門である機械学習の方法論との融合研究を行った。

## (2) 詳細

### 「エネルギーの保存・散逸則を満たすガウス過程モデル」

研究の対象とする問題設定を図1に示す。ノイズを含むスパースな軌跡データから、未知のダイナミクスを学習し、任意の初期状態からの予測を行う。ここで、スパースな軌跡データとは、(1)軌跡を観測するための試行回数が少なく、(2)時間解像度が低いことを意味する。また、「ダイナミクスを学習すること」は、「ベクトル場(図1参照)を学習すること」に対応する。一般に、スパースなデータからの学習では、ノイズを含む観測に対して過学習が生じ、予測精度が低下するということが起こり得る。過学習を防ぐための有望なアプローチとして、ガウス過程と呼ばれる確率モデルが存在する。本研究では、ノイズを含むスパースな軌跡データから未知のダイナミクスを獲得するために、ガウス過程に基づく学習フレームワークの開発を行った。ガウス過程を用いることで、データに由来する不確実性を扱えるようになり、ノイズを含むスパースな軌跡データからでも、過学習を抑制し、適切な学習が行えることが期待される。しかし、物理現象を学習するためにガウス過程を素朴に適用するだけでは、以下のような問題がある。

- 物理現象を表すために重要なエネルギーの保存や散逸則を満たすようなダイナミクスを学習することが難しい
- 数値シミュレーションに基づく学習アルゴリズムの計算量が膨大になる

このような問題を解決するために、ハミルトン力学の理論を取り入れることにより、エネルギーの保存・散逸則に従うダイナミクスを学習するためのガウス過程モデルを考案した(図2参照)。

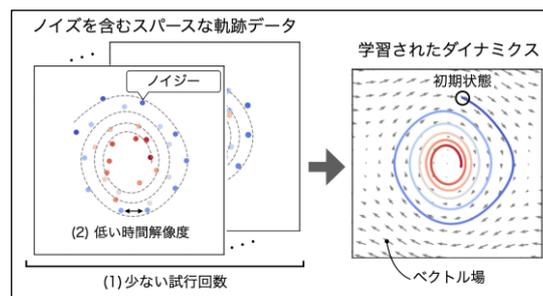


図1:問題設定. 各点は状態を表し、その色は時間発展を表す。始点は青、終点は赤とする。

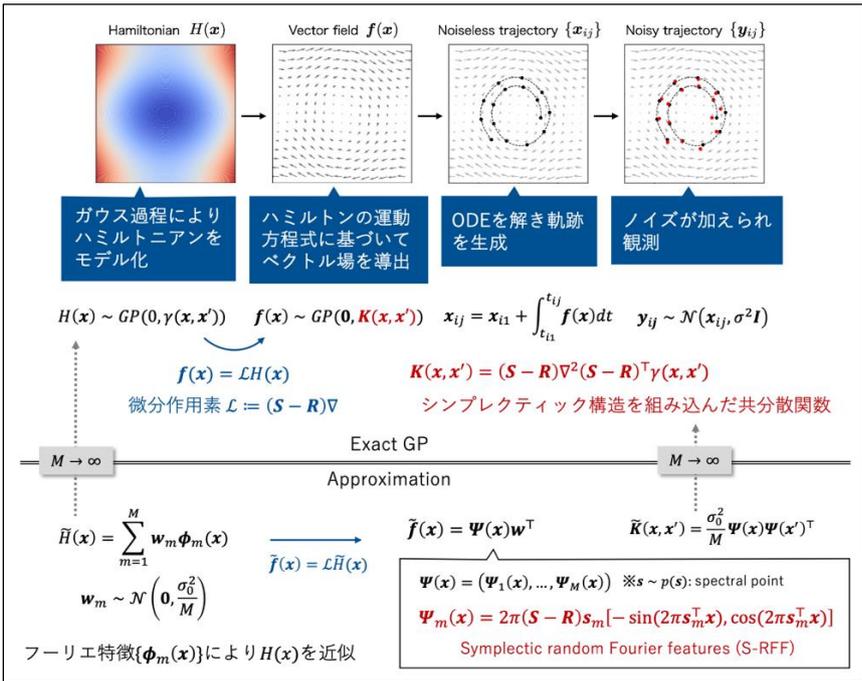


図2: エネルギーの保存・散逸則を満たすガウス過程モデル

確率モデリングのフレームワークでは、図2の上部のように、ノイズを含む観測データを生成するプロセスをモデル化する。ガウス過程によりハミルトニアンをモデル化し、ハミルトンの運動方程式を用いることにより、ダイナミクスを表すベクトル場を表現する。これにより、シンプレクティック構造と呼ばれる幾何学的構造を組み込んだガウス過程が導出され、エネルギーの保存・散逸則に従うダイナミクスを表現することができる。このような確率モデルを仮定し、観測データからモデルを学習する。しかし、素朴な実装方法では、計算量が膨大になってしまうため、図2の下部のように、乱択化フーリエ特徴に基づく提案モデルの近似表現を考案した。近似表現を構成するために、Symplectic Random Fourier Feature (S-RFF)を導出した。S-RFFは、乱択化フーリエ特徴にハミルトン力学系が持つ幾何学的構造を組み込んだ初めての例である。S-RFFに基づいて表現されるベクトル場は、エネルギーの保存・散逸則を満たす。S-RFFによる近似表現を用いることにより、上述のような問題を解決しつつダイナミクスを学習するための効率的なアルゴリズムを構築できるようになった。図3にHNNと提案手法によるダフィン振動子に対するシミュレーション結果を示す。提案手法がHNNに比べ、高精度にシミュレーションを行っていることが確認された。

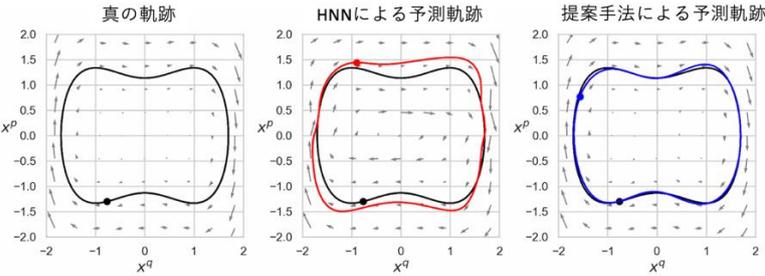


図3: ダフィン振動子に対する実験結果

### 「ハミルトン系のための作用素学習」

作用素学習では、入力関数(方程式の初期条件など)と出力関数(方程式の解)との間の写像を深層学習によって推定する。このアプローチでは、シミュレーションのための数値計算が必要ないため、大幅な高速化が期待でき、流体など偏微分方程式で表される物理現象に対しても効果的であるという利点がある。しかし、高精度な学習には、大量の入出力関数のペアが必要であるという欠点がある。そこで、ハミルトン力学に基づく罰則項を導入し、シミュレーション結果がエネルギーの保存則を満たすように学習を導く。これにより、学習データが少ない場合でも、効果的な学習を行えることが期待できる。

### 「本研究分野の普及活動」

「エネルギーの保存・散逸則を満たすガウス過程モデル」の研究に関連して、人工知能学会誌の特集「AI とシミュレーション」において、ガウス過程と物理現象のモデル化について解説記事を寄稿した。また、国内における機械学習に関する最大の研究会 IBIS2023 において、「物理シミュレーションのための機械学習入門」という題目で、本分野全体のチュートリアル講演を行った。さらに、NTT における一般向けイベントである NTT コミュニケーション科学基礎研究所オープンハウス 2023 において、研究講演「観測データから物理現象を再現する機械学習技術～データ駆動型アプローチに基づく物理シミュレーション～」および、研究展示「物理現象を再現する機械学習技術～エネルギー保存則を組み込んだガウス過程モデル～」を行った。以上のような活動を通じて、本研究分野の普及に貢献した。

### 「他研究者との連携」

ACT-X 3期生の藤澤将広先生(理研 AIP)とは、物理シミュレーションのための機械学習モデルの理論解析について共同で研究を行った。本研究分野でよく使われる手法の一つであるフーリエニューラル作用素に対して、平均場理論を用いた性能解析を行い、パラメータの初期値依存性についての新たな考察を与えた。本研究は国内会議 IBIS2023 において発表し、学生最優秀プレゼンテーション賞を受賞した。また、「ハミルトン系のための作用素学習」では、JST CREST「数理的情報活用基盤」研究代表者の谷口隆晴先生(神戸大学)と共同で研究を進めており、数理科学における知見を機械学習手法に取り入れている。

## 3. 今後の展開

本研究では、実世界データへの適用を見据えて、不完全データからの高精度な物理シミュレーションを実現するための機械学習手法の開発に取り組んだ。本分野は、今まさに盛り上がりを見せつつあり、今後5~10年の間に技術は飛躍的に進歩するものと思われる。現時点で話題となっている大規模言語モデルのように、データ駆動型物理シミュレータも大規模化し、実問題への応用が進むであろう。その際にも、不完全データからの学習手法は必須であると考えられる。一方、大規模化に合わせて他にも重要な課題がいくつも残っている。その中でも最も重要な課題の一つは、シミュレーション精度と計算コストのトレードオフであると考えられる。問題が大規模化すると計算コストは膨大となり、数値シミュレーションを活用するアプローチでは手に負えない場合が出てきてしまう。今後は、この課題を解決すべく、作用素学習など新たなアプローチの導入を検討する。作用素学習は、計算コストは低く抑えられるが、十分な精度のシミュレータをデータから学習することは困難であるというのが現時点での問題である。このような問題に対しても、今回の ACT-X 研究のように、データに加えて、物理や数学の知

見を活用しつつ、効果的な学習法を開発することが、問題解決への近道であると考え。

4. 自己評価

当初からの目的であった「不完全データからのハミルトン系の学習」について、確率モデリングの枠組みに基づく新技術の考案、計算機実験による検証を実施し、最難関国際会議 NeurIPS2022 に採択された。また、研究を通じて得られた研究課題(精度と計算コストのトレードオフなど)について、新たなアプローチ(作用素学習)を採用した研究を引き続き推進している。ACT-X のつながり等を活用して他研究者(理研 AIP 藤澤先生/神戸大学 谷口先生など)との共同研究を実施し、互いの強みを生かして新たな研究課題に取り組んだ。さらに、人工知能学会誌での解説記事や国内会議 IBIS2023 でのチュートリアル講演などを通じて、本研究分野の普及にも貢献した。研究費は主に GPU マシンなどの計算機環境を整えるために活用し、これらの研究を加速させた。

データ駆動型の物理シミュレーションは、気象予測による防災や工業製品設計などの高精度化・効率化に応用ができ、科学・産業において今後重要となる技術である。実世界への技術適用を想定すると、データはノイズや欠損を含む不完全なものとなることが多い。したがって、本成果は、将来、社会実装を行う際に重要な技術となりうる。

以上より、重要な成果創出、研究者ネットワークの構築、成果の外部アピールなどを通じて、主体的に研究に取り組むことで、自身が研究者としての個を確立できたと言える。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数:4件

1. Yusuke Tanaka, Tomoharu Iwata, Naonori Ueda, Symplectic Spectrum Gaussian Processes: Learning Hamiltonians from Noisy and Sparse Data, Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2022, 35, 20795–20808.
データ駆動科学に基づき物理現象をモデル化することは、未知の現象の理解や予測につながる。本研究では、ハミルトン力学におけるシンプレクティック構造を組み込んだガウス過程モデル、および、変分推論に基づく学習アルゴリズムを提案する。評価実験では、ノイズを含み、かつ、スパースな観測が与えられた場合でも、エネルギーの保存・散逸則を満たしつつ現象を高精度に予測できることを示す。
2. 田中佑典, ガウス過程と物理現象のモデル化, 人工知能, 2023, Vol. 38, No. 3, pp. 318 – 325.
ガウス過程は、ノイズや欠損を含むような不完全データからの学習において、不確実性を考慮することにより、頑健な学習が可能である。本稿では、ガウス過程の基礎事項の解説に加え、ガウス過程を用いて物理現象をモデル化するアプローチについて紹介する。
3.

(2)特許出願

研究期間全出願件数:2件(特許公開前のもも含む)

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. 田中佑典, 岩田具治, 上田修功, エネルギーの保存・散逸則を満たすガウス過程モデル, 第25回情報論的学習理論ワークショップ, 2022.
2. 田中佑典, 物理シミュレーションのための機械学習入門, 第26回情報論的学習理論ワークショップ, チュートリアル講演, 2023.
3. AI・機械学習分野の難関国際会議 NeurIPS に NTT グループから7件採択, NTTトピックス, 2022.
4. NTT コミュニケーション科学基礎研究所「オープンハウス 2023」を開催 ~「観測データから物理現象を再現する機械学習技術」, NTT ニュースリリース, 2022.