

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

2020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

§ 1. 研究成果の概要

近年の工業製品は複雑・大規模な連成系としてモデル化されることが多いが、一般に、連成系のモデリングは難しい。また、モデルが構築出来たとしても、そのモデルに基づいてシミュレーションするには、適切にシミュレーション手法を設計しなければ、計算が破綻してしまいやすい。さらに、連成系に含まれる個々の系についても、精密なシミュレーションのためには、個別の製品に合わせてモデルを調整する必要がある。本研究では、このような場合を想定し、幾何学的離散力学や計算代数学、データ駆動型モデリング手法などを組み合わせ、系の望ましい性質を再現するような、頑健なモデリング・シミュレーションフレームワークを構築することを目的としている。本年度の取り組みとしては、まず、ホロノミック拘束をもつ連成系に対する離散ディラック力学の構築、エネルギー保存則・散逸則を保ったまま、深層学習を用いて物理法則を抽出する技術の構築などを行った。これによって、多くの複雑な連成系に対して、そのダイナミクスを表す運動方程式をデータから推測することが可能となり、また、同時に、物理法則を壊すことなく、それらを連成することが可能となった。

これに加え、観測された部分的なデータから、逐次モンテカルロ法とスパースモデリングを組み合わせ、ダイナミクスを推定する手法の構築、ホロノミック勾配法における数値計算法やコホモロジー交叉数の計算手法の開発などをも行った。特に、コホモロジー交叉数の計算は、ファインマンパラメータ積分などといった数理物理学分野の問題などとも密接に関係していることが分かり、これらの分野の研究者らと連携しつつ、発展させつつある。

§ 2. 研究実施体制

(1) 谷口グループ

① 研究代表者: 谷口 隆晴 (神戸大学システム情報学研究科 准教授)

② 研究項目

- ・離散ラグランジュ・ディラック力学によるエネルギー保存解法
- ・自動離散微分による数値解法の自動導出
- ・アルゴリズム的数値解析の基礎理論
- ・実用性改善付き数値計算
- ・微分同相群の部分群近似定理
- ・乳がん診断システムや乱流計算等への応用、企業との共同研究

(2) 吉村グループ

① 主たる共同研究者: 吉村 浩明 (早稲田大学理工学術院 教授)

② 研究項目

- ・離散ラグランジュ・ディラック力学
- ・ディラック系による様々なシステムのモデリング

・非平衡熱力学への応用

(3) 大森グループ

① 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)

② 研究項目

- ・構造保存的システムモデリング
- ・シンプレクティック・スパースモデリング
- ・幾何学的構造を事前知識とするシステムモデリング

(4) 高山グループ

① 主たる共同研究者: 高山 信毅 (神戸大学理学部数学科 教授)

② 研究項目

- ・モデリング・シミュレーションのための計算代数

【代表的な原著論文情報】

- 1) Takashi Matsubara, Ai Ishikawa and Takaharu Yaguchi, Deep Energy-Based Modeling of Discrete-Time Physics, *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)* 33, 13100-13111, 2020.
- 2) Francois Gay-Balmaz and Hiroaki Yoshimura, Dirac structures in nonequilibrium thermodynamics for simple open systems, *Journal of Mathematical Physics*, 61, 092701, 2020. <https://doi.org/10.1063/1.5120390>
- 3) Saiei-Jaeyeong Matsubara-Heo and Nobuki Takayama, An algorithm of computing cohomology intersection number of hypergeometric integrals, *Nagoya Mathematical Journal*, DOI: 10.1017/nmj.2021.2
- 4) Hiroaki Inoue, Koji Hukushima and Toshiaki Omori, Replica Exchange Particle-Gibbs Method with Ancestor Sampling, *Journal of the Physical Society of Japan*, 89, 104801:1-7, 2020