

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

2021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

新たなデータ駆動型アプローチとして、データからシンプレクティック形式を学習することで、ハミルトン方程式を座標系に依存しない形でモデル化する手法を新たに開発した。従来手法では、通常、データが特殊な座標系で与えられていると仮定されており、データの用意が困難であった。提案手法は、幾何学のもつ座標変換不変性を利用することで、実データの利用を可能にした。また、神経ネットワークダイナミクスに対しては、スパースモデリングの応用や部分的な計測データからの推定手法の構築も進んでいる。これらを組み合わせれば、例えば、学習時の脳細胞の変化などを解析できる可能性がある。

また、大規模システムのモデル化では、系を部分システムに分解してモジュール化し、モジュールごとに方程式の定式化を行い、それらを接続することで、系全体のシステムダイナミクスを再構成する手法が有効である。特に、非線形 LC 伝送回路に注目して、連続・離散のそれぞれでラグランジュ・ディラック系として定式化することが出来た。また、非平衡熱力学系に関する研究としては、新たにハミルトン的な構造を明らかにした。レイリー・ベナール対流に現れる複雑な混合現象に関する研究として、従来モデルでは、温度差に伴う摂動項が正確でないことを実験によって明らかにし、代替モデルを提案した。それによって、流体混合に伴うラグランジュコヒーレント構造を計算したところ、実験データと非常に合う結果が得られた。

連立線形微分方程式論や homology および cohomology 論をもちいた多重積分の研究も進めている。多重積分はベイズ統計や多変量解析、また物理分野の Feynmann 積分の研究で重要となる。これについて、計算代数の手法をもちいて多重積分の generic な一般系というべき GKZ 超幾何積分についての、種々の代数的公式を具体的に計算する方法を与えることができた。

## § 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

### 【引用した原著論文情報】

- 1) Hiroaki Yoshimura and Francois Gay-Balmaz, Dirac structures and variational formulation of thermodynamics for open systems, Geometric Structures of Statistical Physics. Information Geometry, and Learning, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics Vol.361, F. Barbaresco and F. Nielsen (Eds.): Springer Nature Switzerland AG 2021, SPIGL 2020, PROMS 361, pp. 221-246, 2021. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-77957-3\\_12](https://doi.org/10.1007/978-3-030-77957-3_12) (査読付)

- 2) Takahiro Ushioku, Hiroaki Yoshimura, Numerical investigation of cloud cavitation and its induced shock wave, Proc. ASME 2021 Fluids Engineering Division Summer Meeting. Paper No: FEDSM2021-65731, 9 pages. August 10-12, 2021. <https://doi.org/10.1115/FEDSM2021-65731> (査読付)
- 3) Yuhan Chen, Takashi Matsubara, and Takaharu Yaguchi, Neural Symplectic Form: Learning Hamiltonian Equations on General Coordinate Systems, Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021), Dec., 2021. (査読付, spotlight 3%)
- 4) Yuhan Chen, Takashi Matsubara, and Takaharu Yaguchi, KAM Theory Meets Statistical Learning Theory: Hamiltonian Neural Networks with Non-Zero Training Loss, Proc. of The Thirty-Sixth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2022), Feb., 2022. (査読付, oral 4.6%)
- 5) Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, and Takaharu Yaguchi, Symplectic Adjoint Method for Exact Gradient of Neural ODE with Minimal Memory, Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021), Dec., 2021. (査読付)