

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「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」
研究課題「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」

研究終了報告書

研究期間 2019年10月～2025年03月

研究代表者: 谷口 隆晴
(神戸大学 大学院理学研究科 教授)

§1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本研究では、幾何学的離散力学を基礎として、数理学・情報科学の諸技術と統合し、モデリング・シミュレーションの基盤となる新理論・新技術を構築することを目的としてきた。代表的な研究は、以下のとおりである。

【離散ラグランジュ・ディラック力学の創出(吉村グループ)】 ラグランジュ・ディラック力学は、流体やメカニカルな系、非定常熱力学系などを統一的に扱うことが出来る理論であり、マルチフィジックスな連成系をモデル化・シミュレーションしようとする本研究の中核をなす理論である。吉村グループは、本研究において、新たに離散版の理論を構築することに成功した。連続版の理論だけでは、物理法則を保つ連成モデルの導出は可能な一方で、それに基づいてシミュレーションをする際に離散化が必要となり、その影響で物理法則が満たされなくなってしまう。吉村グループの開発した離散ラグランジュ・ディラック力学は、物理法則を保ちつつ、上記の現象が相互作用した、連成系の数値シミュレーションを可能にする。

【データ駆動型幾何学的科学技術計算の創出(谷ログループ、大森グループ、吉村グループ、高山グループ)】

谷ログループ・大森グループらは、エネルギー保存則や散逸則などを保つ物理モデルを深層学習やスパースモデリングなどで発見する方法、得られたモデルに基づくシミュレーションコードの自動生成手法、観測データから保存則を発見する方法など、幾何学的離散力学の知識を取り入れた機械学習と物理モデリング・シミュレーション技術の開発を行った。また、Physics-Informed Neural Networks や作用素学習についても、その理論性能解析や、効果的な学習法、物理法則を保つニューラル作用素なども開発した。これらは、谷ログループが専門としていた、離散力学や構造保存型数値解法の技術と、大森グループのメンバーである大森がもつスパースモデリングなどのデータ駆動型モデリング技術、松原のもつ深層学習の技術などの融合技術である。また、2023 年度から 2024 年度には、吉村グループも加わり、共同研究を進めることでディラック力学に基づく手法も構築した。これによって、非平衡熱力学、流体力学、メカニクスなどが相互作用した、マルチフィジックスな連成系に対して、機械学習手法によるモデリング・シミュレーション手法が完成した。さらに、高山グループが進めていた計算代数手法も、深層学習における neural tangent kernel に応用することができ、計算代数手法の機械学習への新たな展開が生まれた。以上のように、各グループの専門分野であった幾何学的離散力学・深層学習・スパースモデリング・計算代数などが連携した、データ駆動型幾何学的科学技術計算基盤が構築された。

これらは、総じて、観測データから、支配方程式や、それに基づくシミュレーション手法を導出したり、既知の数値モデルに基づいたシミュレーションを加速する方法である。特に、データやモデルの背後にある幾何学的力学の構造を利用することで、定性的な性質を壊さないようにモデリング・シミュレーションが可能であることが特徴であり、実際、数値実験結果においても、通常の方法に比較して、長期間における予測性能の向上などが確認された。

本研究で基盤を築いた「データ駆動型幾何学的科学技術計算」というような、新たな研究分野を構成しつつある。世界的には、本研究プロジェクトが開始された 2019 年ごろから、Scientific Machine Learning (SciML) と呼ばれる、機械学習と科学技術計算の融合研究が進んでいる。本研究は、SciML 分野において、特に、幾何学的力学を組み込むことで、物理法則を保つ手法を開発しており、通常の SciML 研究に比較して、より性質の良い方法を構築してきた。これらの研究成果は、海外からも高く評価されており、欧州を中心とした海外の主要グループと連携して、この新たな研究分野を牽引しつつある。また、日本語・英語の教科書の執筆や、多数の国内企業との共同研究も進めており、社会実装にも取り組んでいる。これは、戦略目標「数理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への展開」に貢献するものである。

(2)顕著な成果

＜優れた基礎研究としての成果＞

1. ディラック力学の展開と離散ラグランジュ・ディラック力学の創出

概要：吉村グループを中心に進めてきた、ディラック力学の展開と離散ラグランジュ・ディラック力学の理論は、ニュートン力学に代表される古典力学に加え、電気回路、化学反応、熱力学、生命現象などを統一的に記述可能である、新しい理論である。特に、ラグランジュ・ディラック系の離散化により、非ホロノミック積分法が、ディラック構造を保存する数値解法であることが明らかになった。この方法を活用することにより、機械系、回路系、流体系や熱系など、異なる原理からなる物理現象の連成系、いわゆるマルチフィジックスへの応用が可能となると同時に、物理法則を保つ構造保存型のモデリング及び数値シミュレーションが可能となった。

2. Physics-Informed Neural Networks やハミルトニアンニューラルネットワークの理論解析

概要：機械学習と物理モデリング・シミュレーションの研究は Scientific Machine Learning(SciML)と呼ばれる。SciMLの代表的な研究として、Physics-Informed Neural Networks やハミルトニアンニューラルネットワークが知られている。本研究では、Physics-Informed Neural Networks に対し、アプリオリ誤差評価、アポステリオリ誤差評価を与えた。また、ハミルトニアンニューラルネットワークについても、汎化誤差解析を行い、その結果をハミルトン系の摂動理論である KAM 理論と組み合わせることで、可積分系のもつ準周期的な挙動が学習されたニューラルネットワークモデルでも保たれ得ることを理論的に証明した。

3. コホモロジーの計算理論とその理論物理学への応用

概要：高山グループを中心に進めてきた、コホモロジーの計算理論は、これまで値の評価が困難であった積分値を正確に計算するための新たな方針を与えるものである。特に、これを利用したファインマンダイアグラムに関する積分計算では、コホモロジー計算によって計算対象の積分の基底を明らかにした後、それらの間の関係式を導出することで、積分計算のための再帰型公式を導出する。これは、これまで困難であった積分計算を可能とするものであり、物理学における新たな知見の発見に結びつく。また、同様の手法は、ベイズ統計にも応用可能である。

＜科学技術イノベーションに大きく寄与する成果＞

1. 深層学習による構造保存型物理モデリングフレームワークの創出

概要：大森グループ・谷口グループを中心として、エネルギー保存則などを保つ深層物理モデリングの研究を進めてきた。その結果、偏微分方程式への拡張、散逸系、特に、フェーズフィールドモデルへの拡張、離散時間モデルの構築による、シミュレーション時の離散化誤差の除去、座標変換不変性の導入による実データに適用可能なモデルの構築、データからの保存則の発見などを行ってきた。これらは、製品開発等における物理モデリングを強力にサポートすると同時に、科学的な新たな発見にも繋がる結果である。

2. データ駆動科学と連携した構造保存型物理シミュレーションフレームワークの創出

概要：項目 1 に挙げた深層物理モデリングの手法は、エネルギー関数など、方程式を定めるための量をデータから学習する手法であるが、これらが既知の場合には、シミュレーションフレームワークとしても利用可能である。特に、深層学習フレームワークでは、CPU/GPU による並列計算をサポートするため、エネルギーを記述するだけで、大規模な物理シミュレーションが可能となり得る。項目 1 と合わせた両研究の成果は、近年、注目され始めている AI for Science の研究として世界に先駆けて進めているものであり、この分野をリードしている。

3. 非ホロノミック系に対する離散ディラック構造を保存する数値解法の開発

概要：非ホロノミック積分法は、シンプレクティック構造が破れる数値解法であるにも拘らず、保存系に対する長時間積分において安定な数値解法であることが知られていた。本研究では、離散ディラック構造を提案し、特に、非ホロノミック拘束から誘導される余接バンドル上のディラ

ック構造の離散化を行い、離散ラグランジュ・ディラック系の開発に成功した。さらに、離散ディラック構造と整合する離散ラグランジュ・ダランベール・ポントリヤーギン原理を見出すことに成功した。この成果により、これまで解明されていなかった非ホロノミック積分法が離散ディラック構造を保存する数値解法であることを示すことができた。

< 代表的な論文 >

1. Takashi Matsubara, Ai Ishikawa, Takaharu Yaguchi, Deep Energy-based Modeling of Discrete-Time Physics, Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2020.
概要: エネルギー保存則・散逸則といった物理法則を壊さずに、物理現象のシミュレーションや、観測データからのモデリングを行う技術を構築した。本手法で用いた離散勾配法は、人が解析的に導出する必要があり、深層学習などと組み合わせられなかった。本研究で提案した自動離散微分は、この問題を解決すると同時に、シミュレーションコードの自動生成も可能にした。本研究は、NeurIPS2020 に採択率 1.1% の oral 枠で採択され、日経クロステック、日本経済新聞に加え、Tech Xplore など海外でも報道された。
2. Yuhan Chen, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi, Neural Symplectic Form: Learning Hamiltonian Equations on General Coordinate Systems, Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2021.
概要: 既存の深層物理モデリング手法では、正準座標系という特定の座標系が仮定されていた。そのため、データの用意が困難であったり、用意出来ても、規格化などの前処理が自由にできなかった。本研究では、この問題を、幾何学のもつ座標変換不変性を応用することで解決した。本研究は、NeurIPS2021 に採択率 3% の spotlight 枠で採択され、日刊工業新聞などに加え、海外でも、フランス語、中国語など、様々な言語のサイエンスニュースサイトで報道された。
3. Yuya Note, Masahito Watanabe, Hiroaki Yoshimura, Takaharu Yaguchi and Toshiaki Omori, Sparse Estimation for Hamiltonian Mechanics, Mathematics, 12(7), 974 (2024)
概要: 大森グループ、谷口グループの連携によって、ハミルトン方程式が持つ性質を保ったシステムモデルをデータ駆動で推定するためのスパースモデリング手法を構築した。また、吉村グループと共同で、吉村グループが取り組んでいる流体モデリングに応用し、動的システムの精緻な推定や長期予測を実現することを示した。

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

①「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」グループ

研究代表者: 谷口 隆晴 (神戸大学 理学研究科 教授)

研究項目

- ・離散ディラック力学系 (エネルギー保存的アプローチ) の構築
- ・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
- ・乱流計算等への応用、企業との共同研究

②「ラグランジュ・ディラック力学の展開とその応用」グループ

主たる共同研究者: 吉村浩明 (早稲田大学 理工学術院 教授)

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 「構造保存的システムモデリング」グループ

主たる共同研究者: 大森敏明 (神戸大学 工学研究科 准教授)

研究項目

- ・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 「モデリング・シミュレーションのための計算代数」グループ

主たる共同研究者: 高山信毅 (神戸大学 理学研究科 教授)

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

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

谷口グループは、2024 年から開始となった、NTNU (ノルウェー) の Owren、Celledoni らが中心となって立ち上げた Horizon Europe MSCA Staff Exchanges Project: Research Exchanges in the Mathematics of Deep Learning with Applications (REMODEL) に 2024 年から参加している。このプロジェクトは、NTNU の他、Bath 大学の Chris Budd、Cambridge 大学の Carola Bibiane Schönlieb、TU Eindhoven の Wil Schilders、Emory 大学の Lars Ruthotto、Simon Fraser University の Ben Adcock らが率いる、各大学の研究グループとの共同研究である。また、企業との共同研究についても、いくつかの企業と、深層学習の物理モデリング・シミュレーションへの応用について議論をしている。

高山グループは、イタリアの理論高エネルギー物理のグループと、ファインマンダイアグラムに付随する積分計算についての共同研究を進めてきた。この分野のブレイクスルーとなる可能性のある成果が得られており、また、その研究成果は、ソフトウェアとしても公開されている (<http://www.math.kobe-u.ac.jp/OpenXM/Math/amp-MM/>)

大森グループは、海洋研究開発機構(JAMSTEC)と不均質反応ダイナミクスの推定に関する共同研究を進めており、Entropy に掲載された論文が Editor's Choice に選出された。また、生理学研究所 (NIPS) との脳皮質可塑性に関与する樹状突起ダイナミクスの数理モデリングは脳とこころの研究推進プログラム (領域横断的かつ萌芽的脳研究プロジェクト) に採択された。University of California, San Diego (UCSD) の Supercomputer Center (SDSC) と、神経システムのデータ駆動型モデリング技術の開発についての合同シンポジウムも開催するとともに、科研費・国際共同研究加速基金 (海外連携研究) に採択されている。

吉村グループは、非平衡熱力学系及びラグランジュ・ディラック力学系に関する研究を、南洋理工大学 (シンガポール) の Gay-Balmaz らと進めている。また、Max Planck Institute の Kraus らとも幾何学的力学や構造保存型数値解法などについての研究を進めている。