物理モデリング・シミュレーションのための機械学習手法

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所　谷口隆晴

Scientific Machine Learning：機械学習＋科学技術計算
物理モデリング・シミュレーションのパラダイムシフト

- 支配方程式が未知の現象のモデリング手法
- 支配方程式が既知の現象のシミュレーション加速手法

力学理論とデータ科学の手法・理論の無限次元化による作用素学習の新たな手法と理論基盤を構築

無限次元化

解析力学（シンプレクティック幾何学）	**幾何学的古典場の理論**
ニューラルネットワーク	**ニューラル作用素・作用素学習**
統計学的機械学習理論	**無限次元統計学による機械学習理論（functional data analysis）**

作用素学習（Operator Learning）

ニューラル作用素：無限次元版ニューラルネットワーク
関数空間から関数空間への非線形連続作用素が学習可能

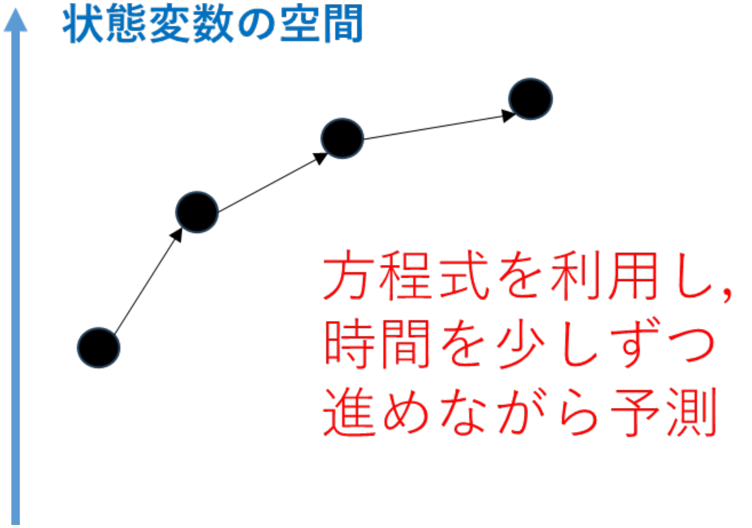
ニューラルネットワーク：$f_{\mathrm{NN}} \simeq f: R^n \to R^m$

無限次元拡張 → **ニューラル作用素：$F_{\mathrm{NN}} \simeq F: X \to Y$　（X, Y: Banach空間）**

ニューラル作用素は，偏微分方程式の解作用素 ≃ 解の公式を学習可能

古典的な数値計算

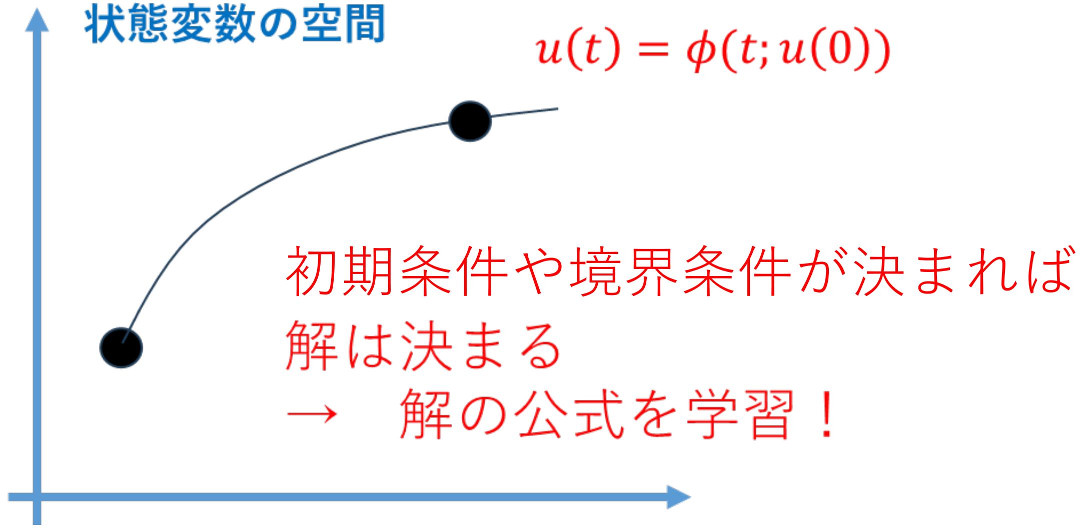
$$\frac{du}{dt} = u \Rightarrow u^{(n+1)} = u^{(n)} + \Delta t\, u^{(n)}$$



作用素学習

$$\frac{du}{dt} = u \Rightarrow u(t) = \mathrm{e}^t u(0)$$

これを
NNで学習！



Scientific Machine Learning（科学技術機械学習）

科学技術計算のパラダイムシフト

- 機械学習，特に**深層学習と科学技術計算を融合**.
- 2019年ごろから，世界のあちこちで独立に開始.
  （我々の研究グループも2019年から研究を開始．）
- 2021年ごろから，Microsoft，NVIDIA などの企業も参入.

これまで難しかったことが可能に！

- 支配方程式が未知の現象のシミュレーション
- 複雑な現象のリアルタイムシミュレーション
- これまで計算不可能だった支配方程式をもつ現象のシミュレーション

社会実装（産業応用）例

- シミュレーションの高速化による製品開発の加速
  製品の性能評価にかかる時間が，数時間 → 数秒に！
- 不測の事態に対する，リアルタイム予測・制御入力の再設計
  （例：製品製造に，外乱による影響を予測し，入力を再設計）
- 支配方程式が未知の現象の制御・最適化

作用素学習（Operator Learning）

ニューラルネットワーク：$f_{\mathrm{NN}} \simeq f: R^n \to R^m$

無限次元拡張

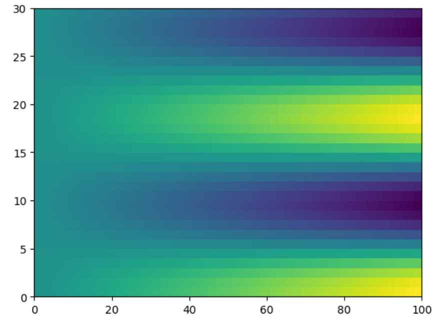
ニューラル作用素：$F_{\mathrm{NN}} \simeq F: X \to Y$ （X, Y: Banach空間）

超高速計算を可能にする次世代の科学技術計算手法

リアルタイムでの制御入力再設計，解作用素に基づく制御法などに期待

作用素学習に基づく大規模物理モデルの出現は時間の問題

→手法の信頼性が大事！



PDEの制御では，
境界条件や領域形状を
制御入力に利用可能

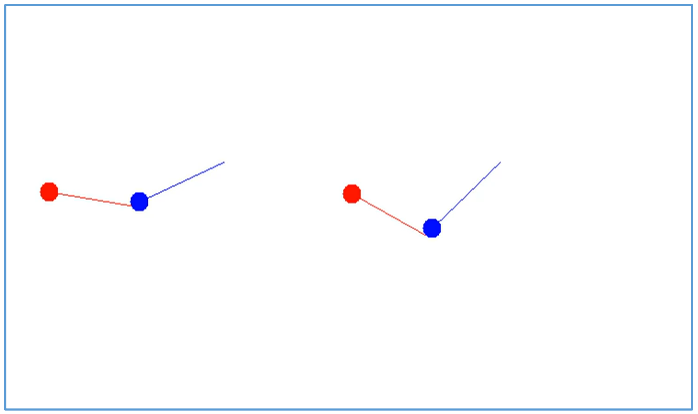
- 大規模深層物理モデルの開発と並行して，
- 手法の信頼性を保つための数理科学研究が必要！

手法の信頼性を保つための数理科学研究が必要！

大規模物理モデルに必要な信頼性とは？

物理学的な信頼性

エネルギー保存則などの物理法則や受動性を保つ構造保存型作用素学習手法



左側：普通の数値計算法でのシミュレーション

右側：シンプレクティック性をもつ数値計算法

エネルギー保存則

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0$$

シンプレクティック性

$\mathcal{L}_X \omega = 0 \Leftrightarrow$ 局所的にハミルトン系

受動性

$$\frac{dx}{dt} = f(x,u), \quad y = h(x)$$

$$\frac{dV}{dt} = \nabla V \cdot f(x,u) = y \cdot u - g(x)$$

手法の信頼性を保つための数理科学研究が必要！

大規模物理モデルに必要な信頼性とは？

数学的な信頼性

(≠ probably)

無限次元統計学によるProvableな作用素学習のための基盤理論の構築

ニューラルネットワーク：$f_{\mathrm{NN}} \simeq f: R^n \to R^m$

無限次元拡張 ⟹ **ニューラル作用素：$F_{\mathrm{NN}} \simeq F: X \to Y$　（X, Y: Banach空間）**

Provableな作用素学習：理論的な性能評価を伴う作用素学習手法

【構築したい定理の例】

丁寧に設計されたランダムデータ N個から F の近似 F_N で

$$\mathrm{P}\left[\left|\left|F - F_N\right|\right| < \frac{1}{N^\alpha}\right] > 0.999$$

となるものを構成可能.

「データ効率が良い」ことを証明付きで保証（αが大きい場合）

実用に向けて：データ構築の自動化・AIとの連携

これらの方法は強力な方法である一方，

- データの準備が大変　　→　データの自動生成
- 専門家が少なく，企業などでの利用が困難

　→　AIとの連携による自然言語の利用

計算領域とシミュレーションデータの
自動生成による学習の自動化