

# 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

解析力学  
(シンプレクティック幾何学)

ニューラルネットワーク

統計学的機械学習理論

幾何学的古典場の理論

ニューラル作用素・作用素学習

無限次元統計学による機械学習理論  
(functional data analysis)

無限次元化



# 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： $f_{\text{NN}} \simeq f: R^n \rightarrow R^m$

無限次元拡張

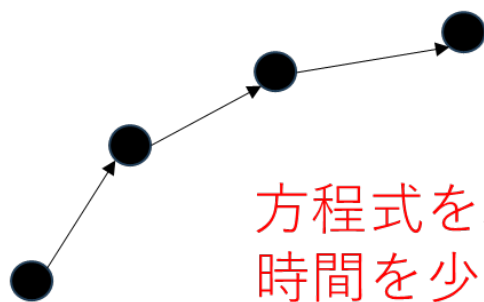
ニューラル作用素： $F_{\text{NN}} \simeq F: X \rightarrow Y$  ( $X, Y$ : Banach空間)

ニューラル作用素は、**偏微分方程式の解作用素**  $\simeq$  **解の公式**を学習可能

古典的な数値計算

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

状態変数の空間



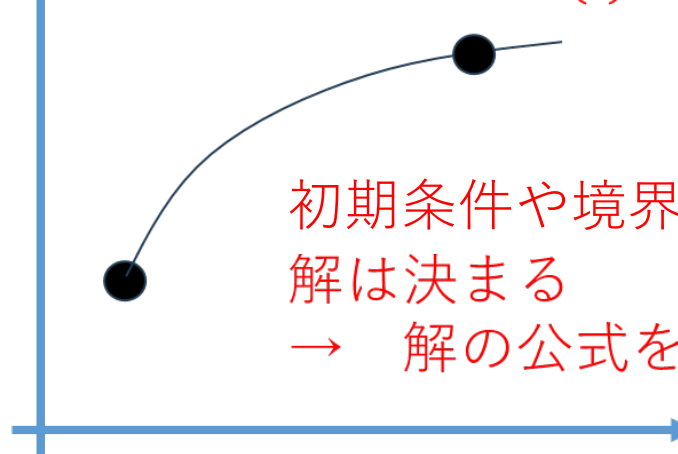
方程式を利用し、  
時間を少しずつ  
進めながら予測

作用素学習

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

これを  
NNで学習!

状態変数の空間



初期条件や境界条件が決まれば  
解は決まる  
→ 解の公式を学習!

# 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  
製品のパフォーマンスにかかると時間が、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 :  $f_{\text{NN}} \simeq f: R^n \rightarrow R^m$

無限次元拡張



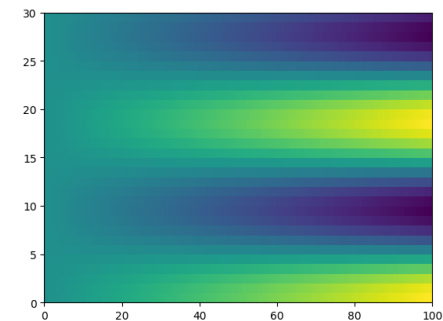
ニューラル作用素 :  $F_{\text{NN}} \simeq F: X \rightarrow Y$  ( $X, Y$ : Banach空間)

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

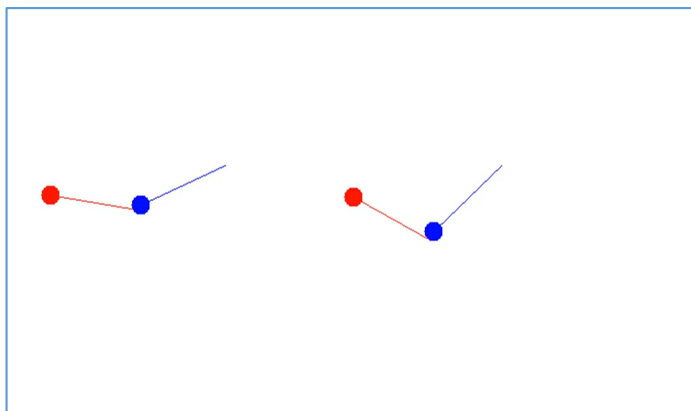
- 大規模深層物理モデルの開発と並行して,
- 手法の信頼性を保つための数理科学研究が必要!

# 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

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

シンプレクティック性

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

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： $f_{\text{NN}} \simeq f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$

無限次元拡張  
→ ニューラル作用素： $F_{\text{NN}} \simeq F: X \rightarrow Y$  ( $X, Y$ : 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

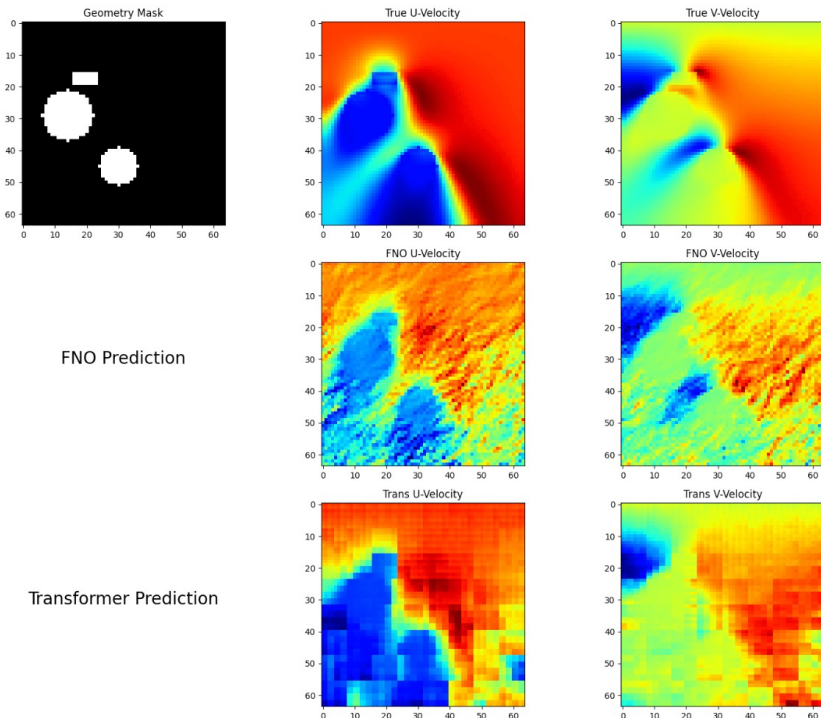
$$P \left[ \|F - F_N\| < \frac{1}{N^\alpha} \right] > 0.999$$
 「データ効率が良い」ことを証明付きで保証 ( $\alpha$  が大きい場合)  
となるものを構成可能.

# 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



Physics Simulation Agent  
離散勾配法 × Ollama LLM

qwen2.5:7b

ハミルトニアン推定 (軌道データから)

CSVファイルをドラッグ&ドロップ  
またはクリックして選択  
✓ テストデータ: pendulum.csv

変数名 例: q,p または q1,q2,p1,p2  
q, p

エポック数 3000 摩擦係数 g 0.0

閾値 係数の有意性判定 (小さいほど多項)  
0.05

単振り子  $H=p^2/2-\cos(q)$  ▼ テストCSV

ハミルトニアンを推定

例題物理系

Mass-Spring (質量バネ系)  
 $0.5*p^2/m + 0.5*k*q^2$

Simple Pendulum (単振り子)

[ハミルトニアン推定] 変数: [q, p]  
エポック数: 3000 摩擦係数: 0 閾値: 0.05

... 考えています...

シミュレーション結果

Hamiltonian Learning Result  
Estimated  $H = 0.5010q^2 + 0.4960p^2 - (0.0374)q^4$

Training Loss

Observed Phase Space

Learned  $H(q,p)$  Contour

Observed State Variables

Equation of Motion Residuals

Basis Coefficients ( $R^2=1.0000$ )

ハミルトニアン推定完了

推定されたハミルトニアン

$H \approx 0.5010*p^2 + 0.4960*q^2 - (0.0374)*q^4$

自然言語で物理系を説明してください (LLM経由)。例: 二重振り子をシミュレート