FY2025/2025年度

Computational Physics Machine Learning Team

Takaharu Yaguchi

計算物理機械学習チーム　谷口 隆晴

RIKEN　AIP Center for Advanced Intelligence Project

研究内容： Scientific Machine Learning

機械学習，特に深層学習と科学技術計算を融合.

- 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

などが中心.

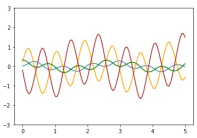
物理シミュレーションなどの大幅な加速が期待.

一方，有限要素法などの古典的な方法に比較して信頼性は不十分 → 信頼性の高い手法の開発が必要！

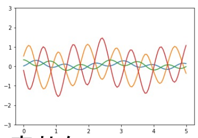
本チームの主な研究目的

エネルギー保存則･シンプレクティック性などの物理法則を保つ Scientific Machine Learning手法の構築

例）2重振り子の予測：素朴な方法は長時間予測に失敗.
物理法則を保つ方法は長期予測可能！

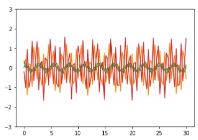


物理法則を保つ手法

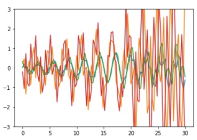


素朴なニューラルネットワーク

短期予測



物理法則を保つ手法



素朴なニューラルネットワーク

長期予測

エネルギー保存則・散逸則を保つ数値解法を学習する機械学習手法

以下の形の微分方程式はエネルギーの保存則･散逸則をもつ：

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = S(u)\nabla H(u) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0 \ \text{if} \ S^T = -S, \qquad \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} \le 0 \ \text{if} \ S \le O$$

H: エネルギー関数

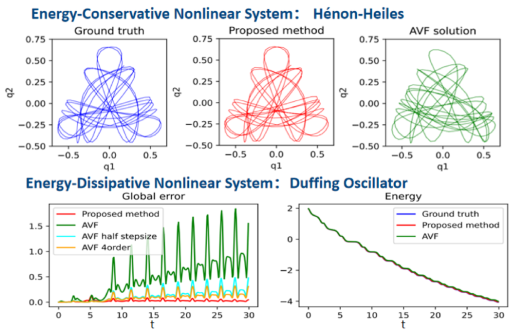
離散勾配法：エネルギー保存則･散逸則を保つ数値計算法

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n)}}{\Delta t} = S\bar{\nabla}H(u^{(n+1)}, u^{(n)})$$

ただし，$\bar{\nabla}H(u,v)$は離散勾配と呼ばれ，以下を満たす：

$$H(u) - H(v) = \bar{\nabla}H(u,v)(u-v), \bar{\nabla}H(u,u) = \nabla H(u)$$

主結果（Celledoni, Owren, Shen, Xu, Yaguchi, 2025）：このような数値計算法に対して普遍近似性をもつ機械学習手法を開発！



様々な保存系･散逸系に対して，既存の手法よりも高速･高精度な数値計算法を発見！

シンプレクティックなニューラルネットワークの複数のハミルトン系の学習への拡張

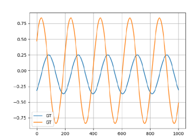
シンプレクティック形式の保存則はハミルトン方程式を特徴づける性質 ⇒ この性質を保つことで，エネルギー保存則などの物理法則が再現可能！

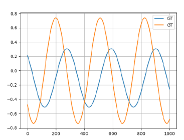
先行研究：SympNets (Jin et al., 2020)

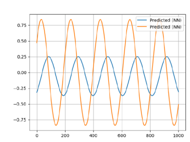
- シンプレクティック写像となるようにニューラルネットワークを設計．単一のハミルトン系に対して長時間予測が可能.
- ただし，ハミルトン系ごとにネットワークの学習が必要.

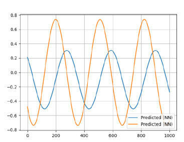
→ 複数のハミルトン系に対して汎化する方法を開発したい！

アイデア：
シンプレクティックなニューラルネットワークのパラメータであるポテンシャル関数を，作用素学習を応用してハミルトン系に依存して学習









1 番目のハミルトン系の予測　　2 番目のハミルトン系の予測

上段は真の解，下段は提案手法による予測.

1つのモデルで，様々なハミルトン系に対してエネルギーを保存しつつ解を予測することが可能

Navier-Stokes方程式に対するPINNsの事後誤差評価

Physics-Informed Neural Networks(PINNs) は偏微分方程式の新たな解法として注目されているが誤差が大きくなりやすい.

→ 得られた数値解を利用した，事後誤差評価によって，精度を保証する手法を開発したい.

本研究の目的：Navier-Stokes方程式

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + u_j\dfrac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + v_j\dfrac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial q}{\partial x_i} + \nu\Delta u_i + g_i & \text{in } \Omega \times [0,T], \\ \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 & \text{in } \Omega \times [0,T], \\ u_i(x,t) = 0 & \text{in } \partial\Omega \times [0,T], \\ u_i(x,0) = (u_0)_i(x) & \text{in } \Omega. \end{cases}$$

に対する，解をニューラルネットワークで近似するPINNsについての事後誤差評価.

Theorem (Xu and Yaguchi, 2025)

v を有界領域 Ω で定義された Navier–Stokes 方程式の古典解とし，$\tilde{v}$ を２回微分可能な活性化関数をもつニューラルネットワークで近似された，PINNs の解とする．方程式の残差を g とし，任意の $0 \le s \le t$ に対して $g(\cdot,s) \in L^2(\Omega)$ であるとき，方程式の真の解に依存しない定数 C_1, C_2, と C_3 が存在して，速度場の近似解の誤差 $\|u\|_{L^2(\Omega)}(t) := \|\tilde{v}(\cdot,t) - v(\cdot,t)\|_{L^2(\Omega)}$ は

$$\|u\|^2_{L^2(\Omega)}(t) \le \left(\mathcal{L}_0 + \frac{C_3\mathcal{L}_g}{C_1 + C_2\mathcal{L}_g}\right)\exp\left((C_1 + C_2\mathcal{L}_g)t\right) - \frac{C_3\mathcal{L}_g}{C_1 + C_2\mathcal{L}_g}$$

でおさえられる．ただし，$\mathcal{L}_0 = \|u_0\|^2_{L^2(\Omega)}$，$\mathcal{L}_g = \sup_{0\le s\le t}\|g\|_{L^2(\Omega)}(s)$.