深層学習による物理モデリング・

シミュレーションフレームワークの展開

谷口 隆晴
神戸大学 大学院システム情報学研究科 計算科学専攻

1. はじめに

近年、深層学習の物理モデリングや物理シミュレーションへの応用が注目されている。モデリングに関する研究としては、物理現象に対する観測データが与えられたときに、そのデータに適合するような運動方程式を推定することが行われている。このような研究の代表例としては、ハミルトニアンニューラルネットワーク(1)やラグランジアンニューラルネットワーク(2)が知られている。これらは、データに適合するハミルトン方程式やオイラーラグランジュ方程式を、深層学習を用いて学習する手法である。これらの方法では、方程式そのものを推定するのではなく、ハミルトニアンやラグランジアンなどといった、系のもつエネルギー関数を推定する。それと解析力学の理論を組み合わせることで、物理法則を保ったモデルを導出する。この方法は、物理シミュレーションへも応用をもつ。実際、このような手法に対して、シミュレーション結果をデータとして利用することも可能であり、そのようなデータから上手く低次元の系としてモデル化することができれば、シミュレーションのためのモデル縮減が可能となる。物理シミュレーションに関するその他の手法としては、低解像度のシミュレーション結果を高解像度のものに変換する、超解像手法などが知られている。

本研究では、これまで、我々のグループで進めてきた、深層学習の物理モデリング・物理シミュレーションへの応用に関する研究をさらに発展させるものである。今年度は、非平衡熱力学系を記述する理論的なフレームワークである、GENERIC 系に対するモデリング手法、ニューラル作用素を用いた超解像手法、動画からの支配方程式の学習などについての研究を進めた。以下、これらについて、簡単に概要を説明する。

2. 深層学習による GENERIC 系に対するモデリング手法

GENERIC（general equation for the non-equilibrium reversible-irreversible coupling）系は、エネルギーの保存則とエントロピー増大則を同時に満たすことが出来るようなシステムであり、非平衡熱力学系の記述などに用いられる。
GENERIC 系の運動方程式は以下の通りである。

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = L\frac{\partial E}{\partial u} + M\frac{\partial S}{\partial u} \tag{1}$$

ここで u は系の状態を表す変数であり、E、S は系のエネルギーとエントロピーを表す u の関数である。また、L は歪対称行列、M は半正定値行列である。これらの行列は、一般に、状態 u に依存する。この方程式は、条件

$$L\frac{\partial S}{\partial u} = 0、M\frac{\partial E}{\partial u} = 0 \tag{2}$$

を満たすならば、エネルギー保存則、エントロピー増大則を満たす、すなわち、次の式が成り立つことが知られている。

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = 0, \qquad \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} \geq 0 \tag{3}$$

このような系に対して、観測データから方程式を推定する、すなわち、与えられた u や $\mathrm{d}u/\mathrm{d}t$ のデータから、E、S、L、M を推定する手法を考案したい。
既存研究としては、GFINNs (3)と呼ばれる手法が知られている。この方法では、L、M を、それぞ

れ、歪対称行列、半正定値行列となるように

$$L \simeq A_{\mathrm{NN}} - A_{\mathrm{NN}}^{\top}, \qquad M \simeq B_{NN} B_{NN}^{\top}$$

などとモデル化する。ここで、A_{NN}やB_{NN}はニューラルネットワークである。また、エネルギーやエントロピーについても、同様にニューラルネットワークでモデル化する。また、条件 (3) を成立させるために、学習時に、この項を、ペナルティ項として与える。

この手法は、確かに GENERIC 系を学習することが出来るが、ペナルティ項は完全にゼロになるとは限らず、そのため、条件(3)は完全に成り立つとは限らない。その結果、エネルギーの保存則やエントロピー増大則が完全には成り立たない可能性がある。そこで、これらが成り立つようにモデルを改善したい。改善のアイデアは以下のとおりである。まず、条件 (3) は

$$\frac{\partial S}{\partial u} \in \mathrm{Ker}\, L, \qquad \frac{\partial E}{\partial u} \in \mathrm{Ker}\, M$$

と書き換えられる。そのため、条件 (3) を課すためには、行列 L、M をカーネルが分かるように学習すれば良い。そこで、特に行列 M をカーネルが明らかになるような形で学習する。M は半正定値行列であるが、特に、対称行列であるので、直交行列で対角化できる。直交行列の集合は Lie 群をなすことが知られており、特に、その Lie 代数は歪対称行列である。そこで、M を

$$M = P\,\mathrm{diag}(\lambda_1、\ldots、\lambda_k、0、\ldots、0)\,P^{\top},$$
$$P = \exp\,(C_{NN} - C_{NN}^{\top})$$

のようにモデル化する。ただし、C_{NN}はニューラルネットワークでモデル化された行列である。また、k は非ゼロの固有値の数であり、これはハイパーパラメータとする。これを用いて、$\mathrm{Im}\, M$ とその直交補空間への射影作用素 $\Pi_{\mathrm{Im}\, M}$、$\Pi_{(\mathrm{Im}\, M)^{\top}}$を定める。これらの作用素を利用して、モデルを以下のように定める。

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = L\Pi_{(\mathrm{Im}\, M)^{\top}} \frac{\partial E}{\partial u} + M\Pi_{\mathrm{Im}\, M} \frac{\partial S}{\partial u}$$

ただし、行列 L については、単純に歪対称行列になるだけでなく、エントロピー項がない場合にはハミルトン系になることが保証されるように、シンプレクティック形式に対応するように学習する。シンプレクティック形式の学習手法については、Chen et al. [(4)]を参照されたい。

このようにして定められたモデルは、残念ながら、学習された E や S に関するエネルギー保存則・エントロピー増大則をもたない。しかし、あるエネルギー関数 E とエントロピー関数 S が存在して、それらに対するエネルギー保存則・エントロピー増大則が成り立つことを証明することができる。そのため、系のダイナミクスが十分に真のダイナミクスに近ければ、この未知のエネルギー・エントロピーは真のエネルギー・エントロピーに近いことが期待され、その結果、このモデルは、真のエネルギー関数やエントロピー関数に対して、良い保存性・増大性をもつことが期待される。

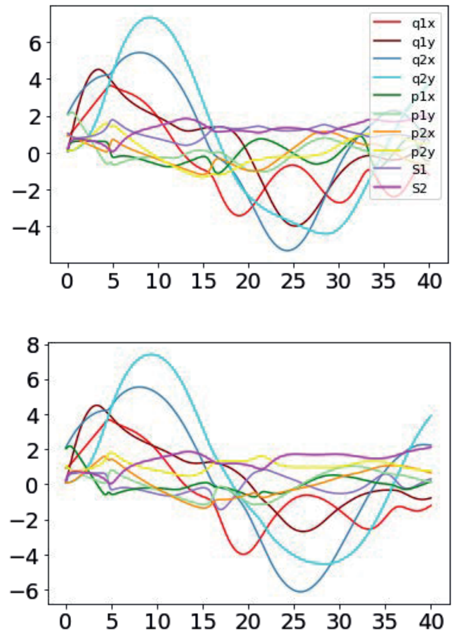

図 1 GENERIC 系の学習実験における真の軌道（上段）と提案モデルの予測結果（下段）の例の例。横軸は時刻を表す。

実際に学習した場合の結果の例を図 1 に示す。これは、熱弾性二重振り子の運動を表している。通常の二重振り子とは異なり、熱によって長さが変化するようなモデルである。詳細については

GFINNs [3]を参照されたい。予測結果は、真の軌道に十分に近いことが確認できる。

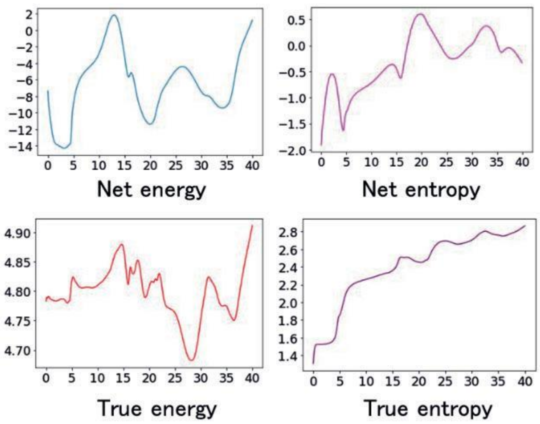

図 2 提案モデルにおける、ニューラルネットワークを用いて学習したエネルギー（net energy）・エントロピー（net entropy）と真のエネルギー（true energy）・真のエントロピー（true entropy）の変化の様子の例。横軸は時刻を表す。

また、学習したモデルのシミュレーション結果について、エネルギー・エントロピーの時間変化を計算したものを図 2 に示す。予想された通り、ニューラルネットワークでモデル化されたエネルギー・エントロピーについては、保存則や増大則が成り立たない。しかし、真のエネルギーや真のエントロピーについては、高い精度で保存則・増大則が成り立っていることが確認できる。

3. ニューラル作用素による超解像

ニューラルネットワークの応用の一つは画像などの超解像である。これは、低解像度の画像を高解像度の画像に変換する手法である。画像を物理シミュレーションのシミュレーション結果と読み替えると、この手法は、物理シミュレーションの高精度化に応用することができる。より具体的には、差分法などで離散化した偏微分方程式の数値解について、粗い格子で解いた数値解を低解像度画像、細かい格子で解いた数値解を高解像度画像とみなすことで、超解像手法を適用する。しかし、通常の超解像手法では、低解像度・高解像度のそれぞれについて、解像度は固定する必要がある。そのため、超解像された数値計算結果が、十分な解像度をもたず、さらに高解像度に変換したい場合には、モデルの学習をやり直す必要があった。

本研究では、これに対して、ニューラル作用素を利用した超解像手法を提案した。ニューラル作用素は、関数を関数に変換することが可能なように、通常のニューラルネットワークを拡張したものである。特に、出力が関数となるため、これを利用した超解像手法である提案手法では、自由に解像度を変化させることができる。

実際に、非線形楕円型偏微分方程式

$$u_{xx} = u^2 + f(x), u(0) = u(1) = 0 \qquad (4)$$

に対して適用した場合の例を示す。ニューラル作用素としては、DeepONet[5]を利用した。データとしては、(4)を中心差分で離散化した場合の数値解を利用した。計算領域を 10 分割したものを粗い格子とし、1000 分割したものを細かい格子とした。また、外力項 $f(x)$ としては、ランダムな係数を与えた多項式を利用した。図 3 に超解像結果を、図 4 に与えた外力関数を示す。図 3 における青い点は粗い格子での数値計算結果である。また、オレンジの曲線は 1000 分割した格子での数値計算結果であり、青い曲線はモデルの出力結果である。出力結果は関数として与えられているため、任意の解像度で出力できるが、ここでは、学習データと同様、1000 分割したものを表示した。これらを見ると、モデルの出力は、細かい格子での計算結果に非常に近い結果を与えていることが分かる。

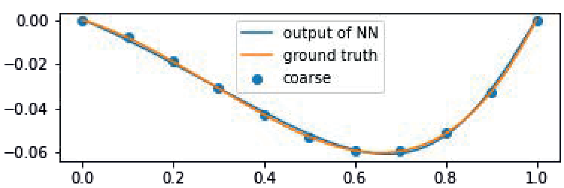

図 3 DeepONet による非線形楕円型方程式の数値解の超解像結果。横軸は空間座標を、縦軸は解の値を表す。

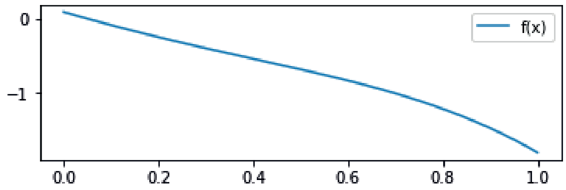

図 4 DeepONet による実験において利用した外力関数。横軸は空間座標を、縦軸は関数値を表す。

4. 動画像データからの運動方程式の学習手法

最後に、動画像データからの運動方程式の学習手法に関しても研究を進めた。基本的なアイデアは、オートエンコーダーなどを用いて、動画像を構成する各画像を表す潜在変数を抽出し、それが満たすハミルトン方程式を求めるというものである。これについては、特に、ニュートンの方程式では学習ができないであろうデータに対しても、なぜか、モデル化誤差が十分に下がり、一見、モデル化できてしまうということが起こった。そこで、このことについての理論的な解析を行った。その結果、このような潜在変数をデータから抽出する手法に関しては、運動方程式として表すことができないデータについても、適当に補助変数を導入することで運動方程式として表すことが可能であることが分かった。

5. おわりに

近年、深層学習の物理モデリングや物理シミュレーションへの応用研究が盛んに行われるようになってきている。本研究では、特に、GENERIC 系の学習、DeepONet を用いた超解像手法の提案、動画像データからの学習における、見かけ上の運動方程式としての学習に関する理論的な研究などを行った。一方、どの研究も、適用例は、比較的、小さなデータであるものが中心であった。今後は、より巨大なシミュレーションデータについても適用していきたい。

参考文献

(1) S. Greydanus, M. Dzamba, J. Yosinski, Adv. Neural Inf. Process. Syst., 33, (2019).

(2) M. Cranmer, S. Greydanus, S. Hoyer, P. Battaglia, D. Spergel, S. Ho, arXiv:2003.04630, (2020).

(3) Z. Zhang, Y. Shin, G. Em Karniadakis, Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci. 380, 20210207, (2022).

(4) Y. Chen, T. Matsubara, T. Yaguchi, Adv. Neural Inf. Process. Syst., 34, (2021).

(5) L. Lu, P. Jin, G. Pang, Z. Zhang, G.E. Karniadakis, Nature Machine Intelligence. 3, 218–229, (2021).