



# Deep Learning for Modelling and Simulations in Physics

陈, 钰涵

---

(Degree)

博士 (システム情報学)

(Date of Degree)

2023-09-25

(Date of Publication)

2024-09-01

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲第8745号

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/0100485929>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



(別紙様式 3)

## 論文内容の要旨

氏 名 \_\_\_\_\_ 陈 钰涵 \_\_\_\_\_

専 攻 \_\_\_\_\_ 計算科学専攻 \_\_\_\_\_

論文題目 (外国語の場合は、その和訳を併記すること。)

Deep Learning for Modelling and Simulations in Physics

(物理モデリングとシミュレーションのための深層学習)

指導教員 \_\_\_\_\_ 横川三津夫 \_\_\_\_\_

(注) 2,000字~4,000字でまとめること。

(氏名： 陈 钰涵 NO. 1 )

物理シミュレーションは、理工学の幅広い分野で実施されている。しかし、モデルが未知の現象に対してシミュレーションを行うためには、観測データからモデルを構築する必要がある。近年、これに対して、データ駆動型のモデリング手法、特に深層学習に基づく物理モデルが注目されている。本論文は、このような深層学習を利用した物理モデリングや物理シミュレーション手法に対して、新たな手法の開発や、既存手法の理論解析、応用など、幅広い観点からの研究を行ったものである。より具体的には、本論文の第2章では、カオス的な写像を、深層学習を用いてモデリングすることが重要であり、その意味で、深層物理モデリングの応用となっている。第3章は、深層学習を用いた新たな物理モデリング手法について説明し、第4章では、深層物理モデルに対する理論解析を行う。第5章や第6章は、深層学習によって得られたモデルを数値計算のために離散化する手法や、物理シミュレーション結果を超解像する手法という意味で、物理シミュレーションのための手法の開発について述べる。以下、それぞれの内容について、より詳細に説明する。

第2章では、カオス的な挙動を示す波動方程式とその同期現象を利用した、画像の秘匿通信システムに対して、その秘匿性を向上させる手法を提案する。既存手法として、ファンデルポール境界条件を与えた波動方程式を用いることで、カオス的な挙動を引き起こし、それによって、情報を隠蔽する手法が提案されていた。特に、波動方程式は時間・空間の2軸をもつ。この秘匿通信システムでは、この性質を利用することで、やはり2次元的なデータである画像を通信することが可能である。一方、この手法では、秘匿通信システムとしての鍵に境界条件のパラメータが用いられていた。しかし、境界条件のパラメータは3つの実数として与えられており、ブルートフォース攻撃によって、ある程度、画像を盗むことが可能であった。本研究では、この問題を、ファンデルポール境界条件をニューラルネットワークでモデル化することで解決した。ニューラルネットワークは、構造が複雑であり、多くのパラメータをもつことから、ブラックボックスであると言われることが多い。そこで、このブラックボックスと見なされるというニューラルネットワークの特徴を利用し、境界条件をブラックボックス化することで、秘匿性を向上させた。実際、従来法と比較し、秘匿通信のための鍵は、3つの実数パラメータからニューラルネットワーク中の全てのパラメータに変更されており、パラメータの総数は、少なくとも数百程度は存在するため、それらを総当たり法で破ることは困難である。この研究結果は、査読付き国際論文誌 *Entropy* に掲載された。

第3章では、深層学習の物理モデリングへの応用として、シンプレクティック形式をニューラルネットワークで学習する手法について述べる。深層学習による物理モデリング手法としては、ハミルトニアンニューラルネットワークがよく知られている。ハミルトニアンニューラルネットワークは、この分野の先駆的な手法ではあるが、ハミルトン方程式として、未知のエネルギー関数を用いて記述される、特殊な座標系でしか成り立たない式が仮

(氏名： 陈 钰涵 NO. 2 )

定されており、実データに対して適用できないという問題があった。本論文では、ハミルトン方程式の座標系に依存しない、幾何学的な表現を利用することで、この問題を解決した。具体的には、ハミルトン系はシンプレクティック多様体上のハミルトンフローとして、座標系に依存しない形で記述される。そこで、データの背後に存在するシンプレクティック形式を学習することで、この座標系に依存しない表現をモデリングで利用することを可能とした。ここで、シンプレクティック形式は、非退化で閉である微分2形式として定義される。特に閉であることを保証するために、シンプレクティック形式を導く微分1形式をニューラルネットワークで学習するという手法を新たに考案した。この研究結果は、査読付き国際会議 NeurIPS2021 に spotlight 講演として採択された。

第4章では、深層物理モデルの理論解析として、万能近似性の解析や汎化誤差解析を行った。よく知られているように、ニューラルネットワークは、連続関数や滑らかな関数に対して万能近似性をもつ。また、その誤差解析として、汎化性能についても理論解析が進められている。一方、深層物理モデルでは、エネルギー関数をニューラルネットワークで近似するが、このエネルギーをそのままモデルで利用するのではなく、その勾配を利用するという点で、通常のニューラルネットワークとは異なる使い方がされる。そのため、万能近似性や汎化誤差解析は自明ではない。本論文では、まず、実際にハミルトニアンニューラルネットワークなどの深層物理モデルが万能近似性をもつことを証明した。また、その結果、活性化関数として ReLU 関数を用いた場合に万能近似性が得られないことも明らかにした。次に、汎化誤差についても理論的に解析を行った。深層物理モデルでは、勾配を利用するために、通常のニューラルネットワークとは異なる構造が現れる。これについて、活性化関数に実用上、無視できる程度の仮定をおくことで、複雑な構造を簡潔に評価する方法を与えた。最後に、これらの解析結果を、物理学における摂動理論であるKAM理論と組み合わせることで、可積分系のモデルに利用した場合の挙動についての理論解析を行った。この研究結果は、査読付き国際会議 AAAI2022 に oral 講演として採択された。第5章は、ハミルトニアンニューラルネットワークやニューラルシンプレクティック形式などで得られたモデルに基づき、数値シミュレーションを行うための数値解析手法として、変分的数値積分器を提案した。一般に、ハミルトン系などの数値計算を行う場合には、特殊な数値計算法を用いなければ、エネルギー保存則などの物理法則は成り立たなくなってしまう。物理法則を保つように設計された数値計算法は、構造保存型数値解法と呼ばれる。変分的数値積分器は、そのような方法の一つである。変分的数値積分器を設計するためには、方程式の背後に存在する変分原理が必要である。また、ニューラルネットワークはブラックボックスと呼ばれており、変分における式変形を解析的に行うことができない。そこで、ニューラルネットワークモデルに対して、自動微分などを利用したアルゴリズム的な変分計算が可能であるような変分原理が存在するかどうかを調べる必要がある。本研究では、実際に、ハミルトニアンニューラルネットワークやニューラルシンプレクテ

(氏名： 陈 钰涵 NO. 3 )

ティック形式について、そのような変分原理が存在することを明らかにし、また、それに基づく変分的数値積分器を提案した。特にニューラルシンプレクティック形式については、シンプレクティック形式を導くための1形式が作用積分に現れており、単純な歪対称行列の学習などを用いた場合には、変分原理が得られないことが明らかになった。この結果は、査読付き国際会議プロシーディングス IEICE Proceedings に掲載された。また、結果の一部は、国際会議 ICML のワークショップである New Frontiers in Learning, Control, and Dynamical Systems に採択された。

第6章は、物理シミュレーション結果の超解像手法についての研究結果を述べた。深層学習の一つの応用は、画像などの超解像、すなわち、低解像度の画像を高解像度に変換する手法である。物理シミュレーションの分野においても、このような方法は応用されはじめており、低解像度の数値計算結果から高解像度の計算結果を得る方法が提案されている。しかし、多くの手法では、低解像度・高解像度の画像や数値計算結果として、特定の解像度が固定されてしまっている。そのため、特に、解像度をさらに上げたい場合には、モデルをもう一度学習しなおす必要があった。これに対して、本研究では、DeepONet と呼ばれる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、入力と出力に関数をとることができるように拡張されたニューラルネットワークである。特に、出力は関数となるため、これを利用すれば、低解像の数値計算結果を超解像した結果として、高精度な近似解を関数として出力することが可能となる。提案手法では、出力が関数となっているため、既存手法のように、特定の解像度のみ限定されることがなく、自由に解像度を上げられるという特徴をもつ。この研究結果は、国際会議 NOLTA2023 に採択された。

氏名	陈钰涵 CHEN YUHAN		
論文 題目	Deep Learning for Modelling and Simulations in Physics (物理モデリングとシミュレーションのための深層学習)		
審査 委員	区 分	職 名	氏 名
	主 査	教授	横川 三津夫
	副 査	教授	陰山 聡
	副 査	教授	佐野 英樹
	副 査	教授	谷口 隆晴
	副 査		
要 旨			
<p>物理シミュレーションは、理工学の幅広い分野で実施されている。しかし、モデルが未知の現象に対してシミュレーションを行うためには、観測データからモデルを構築する必要がある。近年、これに対して、データ駆動型のモデリング手法、特に深層学習に基づく物理モデルが注目されている。本論文は、このような深層学習を利用した物理モデリングや物理シミュレーション手法に対して、新たな手法の開発や、既存手法の理論解析、応用など、幅広い観点からの研究を行ったものである。より具体的には、本論文の第2章では、カオス的な写像を、深層学習を用いてモデリングすることで、暗号のセキュリティを高める方法が提案されており、深層物理モデリングの応用を与えている。第3章は、深層学習を用いた新たな物理モデリング手法について説明し、第4章では、深層物理モデルに対する理論解析を行っている。第5章や第6章は、深層学習によって得られたモデルを数値計算のために離散化する手法や、物理シミュレーション結果を超解像する手法という意味で、物理シミュレーションのための手法の開発について述べている。以下、それぞれの内容について、より詳細に説明する。</p> <p>第2章では、カオス的な挙動を示す波動方程式とその同期現象を利用した、画像の秘匿通信システムに対して、その秘匿性を向上させる手法を提案している。既存手法として、ファンデルポール境界条件を与えた波動方程式を用いることで、カオス的な挙動を引き起こし、それによって、情報を隠蔽する手法が提案されていた。特に、波動方程式は時間・空間の2軸をもつ。この秘匿通信システムでは、この性質を利用することで、やはり2次元的なデータである画像を通信することが可能である。一方、この手法では、秘匿通信システムとしての鍵に境界条件のパラメータが用いられていた。しかし、境界条件のパラメータは3つの実数として与えられており、ブルートフォース攻撃によって、ある程度、画像を盗むことが可能であった。本研究では、この問題を、ファンデルポール境界条件をニューラルネットワークでモデル化することで解決した。ニューラルネットワークは、構造が複雑であり、多くのパラメータをもつことから、ブラックボックスであると言われることが多い。そこで、このブラックボックスと見なされるというニューラルネットワークの特徴を利用し、境界条件をブラックボックス化することで、秘匿性を向上させた。実際、従来法と比較し、秘匿通信のための鍵は、3つの実数パラメータからニューラルネットワーク中の全てのパラメータに変更されており、パラメータの総数は、少なくとも数百程度は存在するため、それらを総当たり法で破ることは困難である。この研究結果は、査読付き国際論文誌 <i>Entropy</i> に掲載された。</p> <p>第3章では、深層学習の物理モデリングへの応用として、シンプレクティック形式をニューラルネットワークで学習する手法について述べられている。深層学習による物理モデリング手法としては、ハミルトニアンニューラルネットワークがよく知られている。ハミルトニアンニューラルネットワークは、この分野の先駆的な手法ではあるが、ハミルトン方程式として、未知のエネルギー関数を用いて記述される、特殊な座標系でしか成り立たない式が仮定されており、実データに対して適用できないという問題があった。本論文では、ハミルトン方程式の座標系に依存しない、幾何学的な表現を利用することで、この問題を解決した。具体的には、ハミルトン系はシンプレクティック多様体上のハミルトンフローとして、座標系に依存しない形で記述される。そこで、データの背後に存在するシンプレクティック形式を学習することで、この座標系に依存しない表現を、モデリングで利用することを可能とした。ここで、シンプレクティック形式は、非退化で閉である微分2形式として定義される。特に閉であることを保証するために、シンプレクティック形式を導く微分1形式をニューラルネットワークで学習するという手法が新たに考案されている。この研究結果は、査読付き国際会議 NeurIPS2021 に spotlight 講演として採択された。</p>			

氏名

陈钰涵

CHEN YUHAN

第4章では、深層物理モデルの理論解析として、万能近似性の解析や汎化誤差解析を行っている。よく知られているように、ニューラルネットワークは、連続関数や滑らかな関数に対して万能近似性をもつ。また、その誤差解析として、汎化性能についても理論解析が進められている。一方、深層物理モデルでは、エネルギー関数をニューラルネットワークで近似するが、このエネルギーをそのままモデルで利用するのではなく、その勾配を利用するという点で、通常のニューラルネットワークとは異なる使い方がされる。そのため、万能近似性や汎化誤差解析は自明ではない。本研究では、まず、実際にハミルトニアンニューラルネットワークなどの深層物理モデルが万能近似性をもつことが証明されている。また、その結果、活性化関数として ReLU 関数を用いた場合に万能近似性が得られないことも明らかになった。次に、汎化誤差についても理論的に解析を行っている。深層物理モデルでは、勾配を利用するために、通常のニューラルネットワークとは異なる構造が現れる。これについて、活性化関数に、実用上、無視できる程度の仮定をおくことで、複雑な構造を簡潔に評価する方法が提案されている。最後に、これらの解析結果を、物理学における摂動理論である KAM 理論と組み合わせることで、可積分系のモデルに利用した場合の挙動についての理論解析が行われている。この研究結果は、査読付き国際会議 AAI2022 に oral 講演として採択された。

第5章は、ハミルトニアンニューラルネットワークやニューラルシンプレクティック形式などで得られたモデルに基づき、数値シミュレーションを行うための数値解析手法として、変分的数値積分器が提案されている。一般に、ハミルトン系などの数値計算を行う場合には、特殊な数値計算法を用いなければ、エネルギー保存則などの物理法則は成り立たなくなってしまう。物理法則を保つように設計された数値計算法は、構造保存型数値解法と呼ばれる。変分的数値積分器は、そのような方法の一つである。変分的数値積分器を設計するためには、方程式の背後に存在する変分原理が必要である。また、ニューラルネットワークはブラックボックスと呼ばれており、変分における式変形を解析的に行うことができない。そこで、ニューラルネットワークモデルに対して、自動微分などを利用した、アルゴリズム的な変分計算が可能であるような変分原理が存在するかどうかを調べる必要がある。本研究では、実際に、ハミルトニアンニューラルネットワークやニューラルシンプレクティック形式について、そのような変分原理が存在することを明らかにし、また、それに基づいて変分的数値積分器が提案されている。特にニューラルシンプレクティック形式については、シンプレクティック形式を導くための 1 形式が作用積分に現れており、単純な歪対称行列の学習などを用いた場合には、変分原理が得られないことが明らかになった。この結果の一部は、査読付き国際会議プロシーディングス IEICE Proceedings に掲載され、また、その他の部分は、国際会議 ICML のワークショップである New Frontiers in Learning, Control, and Dynamical Systems に採択された。

第6章は、物理シミュレーション結果の超解像手法についての研究結果が述べられている。深層学習の一つの応用は、画像などの超解像、すなわち、低解像度の画像を高解像度に変換する手法である。物理シミュレーションの分野においても、このような方法は応用されはじめており、低解像度の数値計算結果から高解像度の計算結果を得る方法が提案されている。しかし、多くの手法では、低解像度・高解像度の画像や数値計算結果として、特定の解像度が固定されてしまっている。そのため、特に、解像度をさらに上げたい場合には、モデルをもう一度学習しなおす必要があった。これに対して、本研究では、DeepONet と呼ばれるニューラル作用素を利用した超解像手法が提案されている。ニューラル作用素は、入力と出力に関数をとることができるように拡張されたニューラルネットワークである。特に、出力は関数となるため、これを利用すれば、低解像度の数値計算結果を超解像した結果として、高精度な近似解を関数として出力することが可能となる。提案手法では、出力が関数となっているため、既存手法のように、特定の解像度のみ限定されることがなく、自由に解像度を上げられるという特徴をもつ。この研究結果は、査読付き国際会議プロシーディングス IEICE Proceedings に採択された。

本研究は、深層学習の物理モデリング・シミュレーションについて、その基礎的なモデル・アルゴリズムの構築とその理論的性質、応用の可能性を研究したものであり、物理モデリング・シミュレーションのための深層学習手法について、重要な知見を得たものとして価値ある集積である。提出された論文はシステム情報学研究科学学位論文評価基準を満たしており、学位申請者の CHEN YUHAN は、博士（システム情報学）の学位を得る資格があると認める。