

物理現象を再現する機械学習技術

<p>どんな研究</p>	<p>物理現象を観測したデータから、機械学習を用いて、その背後にある物理法則に従う振る舞いを再現することは可能でしょうか。この展示では、ハミルトン力学の理論をガウス過程モデルに組み込み、物理現象を正確に再現し、高精度にシミュレーションできる機械学習技術を考案しました。</p>
<p>どこが凄い</p>	<p>物理現象を表す方程式を人手で設計することなく物理シミュレーションを行うことができます。観測データが少なく、かつ、ノイズを含む場合でも、エネルギーの保存・散逸則に従う物理現象を高精度にシミュレーションできることを示しました。</p>
<p>めざす未来</p>	<p>本研究により、複雑な物理現象に対する高精度なシミュレータを観測データから自動構築できるようになります。気象現象の高精度な予測や航空機設計の効率化および品質向上など、科学や産業の発展への貢献が期待できます。</p>

データ駆動型物理シミュレータ

物理現象を観測したデータから、機械学習を用いて、その背後にある物理法則に従う振る舞いを再現します。物理現象を表す方程式を人手で設計することなく物理シミュレーションを行うことができます。

従来のアプローチ
現象を観察し人手で方程式を設計

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\alpha u \frac{\partial u}{\partial x} - \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$$

設計コストは多大。複雑な現象のモデル化には限界あり

シミュレーション
任意の初期条件が与えられたときの時間発展を予測

複雑な物理現象 (流体など)

提案アプローチ
物理法則を組み込んだ機械学習技術

方程式の設計は不要。機械学習により複雑な現象を表現

機械学習モデル

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(u; \theta)$$

位置 x
時間 t

複雑な物理現象 (流体など)

価値
これまではモデル化が困難であった物理現象のシミュレーションを実現。科学的発見や工学設計などに活用

物理法則の導入

難しさ
機械学習モデルは非常に高い表現力を持ち、大規模で複雑な物理現象を適切にモデル化できる可能性があります。しかし、高い表現力を持つがゆえに、広大な探索空間から物理現象を正確に再現するモデルを推定するのは簡単なことではありません。

核となるアイデア
物理法則を事前知識として導入することで、探索空間を絞り込み、物理現象を正確に再現するようなモデルを効果的に推定します。

提案手法 [1-3]
任意の連続関数を近似可能な機械学習モデルである「ガウス過程」に「ハミルトン力学」の理論を組み込んだ新技術を開発しました。

ポイント①
ダイナミクスではなくエネルギーをガウス過程で推定

ポイント②
「ハミルトンの運動方程式」によりダイナミクスを導入。得られたダイナミクスはエネルギーを保存する。

ポイント③
ノイズを含むデータ(赤い点)の観測モデルを導入

既存の機械学習モデルの限界

実験により、標準的な機械学習モデルでは物理現象を正確に再現することが難しい場合があることが分かりました。特に、データが少なく、ノイズが大きい場合には顕著な性能劣化が見られました。

物理系と観測データの例

振り子
相空間における振り子のダイナミクス
観測データ

エネルギーの保存則により黒点が緑の軌道を周回

振り子に対する観測データに対し、標準的なニューラルネットを適用した結果

ノイズ小
ノイズ大
ノイズ大&データ少

シミュレーションされた軌跡 (青から赤へと時間発展)

時間の経過とともに正解の軌道から離れていってしまう様子が分かります。

実験結果

データが少なく、かつ、ノイズが大きい場合でも、エネルギーの保存則に従う物理現象を高精度にシミュレーションできることを示しました。

従来手法
ハミルトニアンのニューラルネット

提案手法

エネルギーの時間変化

緑: 真のエネルギー
青: 従来手法による推定エネルギー
赤: 提案手法による推定エネルギー

関連文献

[1] Y. Tanaka, T. Iwata, N. Ueda, "Symplectic spectrum Gaussian processes: Learning Hamiltonians from noisy and sparse data," in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 2022.

[2] 田中佑典, 岩田具治, 上田修功, "エネルギーの保存・散逸則を満たすガウス過程モデル," 第25回情報論的学習理論ワークショップ, 2022.

[3] 田中佑典, "ガウス過程と物理現象のモデル化 (特集「AIとシミュレーション」)," *人工知能学会誌*, Vol. 38, No. 3, 2023 (印刷中).

連絡先

田中 佑典 (Yusuke Tanaka)
協創情報研究部 知能創発環境研究グループ