

# 観測データから物理現象を再現する機械学習技術

## ～データ駆動型アプローチに基づく物理シミュレーション～

Machine learning that reproduces physical phenomena from data  
 - Physics simulation based on a data-driven approach -



NTT コミュニケーション科学基礎研究所 上田特別研究室 (現在、協創情報研究部)

**田中 佑典**

Yusuke Tanaka

### ●プロフィール

NTT コミュニケーション科学基礎研究所 協創情報研究部 研究主任。2010年神戸大学工学部電気電子工学科卒業。2013年京都大学大学院情報学研究科修士課程修了。同年、NTT入社。2020年京都大学大学院情報学研究科博士課程修了。博士(情報学)。機械学習、データマイニングの研究に従事。電子情報通信学会、人工知能学会の各会員。

機械学習技術の進展はめざましく、今や様々な場面で使われ、成功を収めつつあります。では、機械学習を用いて物理現象のシミュレーションをすることも可能でしょうか。本講演では、この課題に対して、物理法則を事前知識として活用することで、観測データから物理現象を正確に再現するための機械学習技術を紹介します。これまでの歴史で培われてきた物理学の知識が、どのようにして機械学習に融合されるのかに焦点を当てます。また、このような研究の今後の展望、および生み出されるであろう価値についてお話しします。

### 機械学習×物理シミュレーション

自然科学分野において、多くの物理現象のダイナミクスは、ニュートンの運動方程式のような「微分方程式」を用いて記述されます。これまでの歴史では、各分野の専門家たちが現象の観察や理論的検討を通じて、現象を再現するために適切な方程式を導き出してきました。これらの方程式を解くことで現象のシミュレーションが可能となり、現象の理解や予測につなげることができます。

一方、昨今の情報通信技術の進展により、データ駆動型アプローチが注目を集めています。特に、機械学習技術の発展により、実世界における様々な問題が、大規模なデータを活用することによって非常に高い精度で解けることが明らかになっています。では、機械学習技術を用いて物理現象のシミュレーションをすることも可能でしょうか。このような課題に対して、私たちは、観測データから物理現象を正確に再現するための機械学習技術について研究を進めています。上述した従来のアプローチと異なり、私たちの研究では、現象に合わせて方程式を設計することなく、データから高精度なシミュレータを自動構築できるようになります(図1)。

### 学習の難しさ

機械学習モデルは非常に高い表現力を持つことが知られ、大規模かつ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、「機械学習モデルが持つ広大な探索空間」(図2)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。特に、少量のデータしか与えられない場合や、データにノイズや

欠損が多く含まれるような場合には、学習はより一層難しくなります。

### 物理学の知識の導入

データが少なく、かつ、データにノイズや欠損が多く含まれる場合には、適切な学習を導くための「事前知識」の導入が有効です。物理学に由来する事前知識を学習のためのバイアスとして活用することを目的とした研究分野は、physics-informed machine learning [1]と呼ばれており、近年研究が活発になり始めています。これにより、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できることが期待されます(図2)。

事前知識を導入するための最も素朴な方法は、図1の従来のアプローチに記載したような方程式を仮定し、方程式に含まれる物理パラメータ(図1の $\alpha$ や $\beta$ )をデータから学習することが考えられます。しかし、この方法では、探索空間を絞り込みすぎてしまい、機械学習モデルの持つ高い表現力を活かせず、既知の方程式では表しきれないような複雑な現象には適用することが困難です。そこで、私たちは、物理現象であれば満たすべき「物理法則」を事前知識として組み込むという方法に着目しました。これにより、機械学習モデルの表現力を維持しつつ、探索空間を適切に絞り込んだ上で学習を行うことができます。より具体的には、解析力学の一形式である「ハミ

ルトン力学」の理論を、機械学習モデルの一つである「ガウス過程」に組み込んだ、新たな手法を提案しました [2, 3]。これにより、最も基本的な物理法則の一つである「エネルギーの保存・散逸則」を満たす機械学習モデルを、データから自動構築することができます。また、ガウス過程に基づくモデル化により、データが少なく、かつ、ノイズや欠損が多く含まれる場合でも、物理現象を高精度にシミュレーションすることができます [4]。本技術について、本講演でご紹介するとともに、展示3番「物理現象を再現する機械学習技術」にて、詳細にご説明いたします。

### 今後の展望

本研究分野は今まさに黎明期にあり、多くの研究課題が残っています。例えば、実世界における気象や海流などの流体のダイナミクスは、非線形、非定常かつカオスであり、極めて複雑かつ大規模な物理現象です。そのような現象を、正確に、かつ、効率よくシミュレーション可能な機械学習技術は未だ存在しません。私たちはこのような課題に対して、数理学と情報科学の融合を深めることにより、解決へとアプローチしていきます。将来は、科学や産業への応用を進め、データ駆動型アプローチの立場から、物理現象のメカニズム解明や予測、工学設計の高精度化や効率化などに貢献することをめざします。

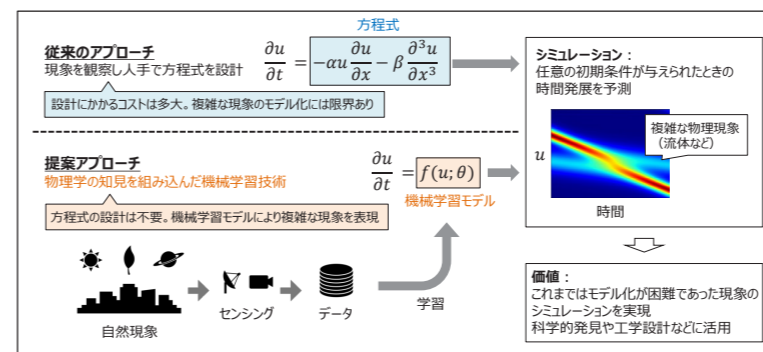


図1：アプローチの違い

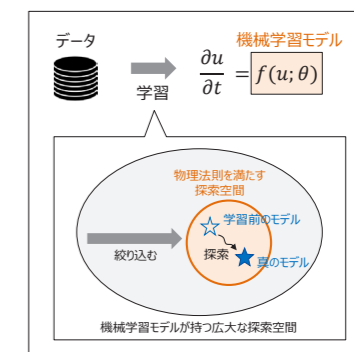


図2：事前知識による探索空間の絞り込み

### ●参考文献

- [1] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang, "Physics-informed machine learning," *Nature Reviews Physics*, Vol. 3, No. 6, pp. 422-440, 2021.
- [2] Y. Tanaka, T. Iwata, N. Ueda, "Symplectic spectrum Gaussian processes: Learning Hamiltonians from noisy and sparse data," in *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 2022.
- [3] 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.
- [4] 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).