

令和 6 年 6 月 17 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K11693

研究課題名（和文）ブラックボックス微分方程式モデルに対する保存則抽出手法とネットワーク解析への応用

研究課題名（英文）Method for extracting conserved quantities of black box differential equation models and its application to network analysis

研究代表者

谷口 隆晴 (Yaguchi, Takaharu)

神戸大学・理学研究科・教授

研究者番号：10396822

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：近年、ニューラルネットワークなど、ブラックボックス型の微分方程式モデルが注目されている。そのようなモデルは、数式で表されていないため、保存則など、性質の解明が困難である。本研究はブラックボックス微分方程式モデルに対して、保存則を探索するデータ駆動型モデルを構築した。具体的には、保存量をニューラルネットワークでモデル化し、この量が保存するようにモデルを修正したときに、モデル精度が向上するように、保存量を表すニューラルネットワークを学習する。実際、この方法で、様々な微分方程式モデルから保存則が抽出できることを確認した。ネットワークの構造変化解析については、別途、統計的な方法を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

開発した手法は、未知の保存量を抽出するだけでなく、発見した保存則を解析対象のブラックボックスモデルに追加することができる。従って、既存の数理モデルや、シミュレーションプログラムに対して、この方法を適用すると、未知の保存則を発見し、それを保存するようにモデルやシミュレーション結果を修正することができる。これは、モデルやシミュレーションプログラムの予測精度を向上させる効果をもつと期待され、既存のシミュレーションソフトウェアなどを改良することができる可能性をもつ。

研究成果の概要（英文）：In recent years, black-box differential equation models such as neural ordinary differential equations have been attracting much attention. Because such models do not admit symbolic representations, it is difficult to investigate their properties, including the existence of conservation laws.

In this study we constructed a data-driven method that finds conserved quantities for black-box differential equation models. More precisely, conserved quantities are modeled by neural networks, and the neural networks representing the conserved quantity are trained so that the model accuracy is improved when the black-box model is modified so that this quantity is conserved. We numerically confirmed that conservation laws can be certainly extracted from various differential equation models using this method. We developed a statistical method for the analysis of structural changes in networks.

研究分野：数値解析，深層学習，数理モデリング

キーワード：保存則抽出手法 ブラックボックスモデル 深層学習 社会ネットワーク解析

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本研究では、近年、発展している、深層学習などの技術により、データ駆動型モデルとして導出され、ブラックボックス化してしまった微分方程式に対し、保存則という理論的な性質を明らかにする手法を構築する。また、それを利用することで、時間とともに変化する社会ネットワークに潜むと思われる保存則を抽出し、異常なデータを検出する手法を開発する。さらに、具体的な応用例として、放牧牛のコミュニティ解析や、企業や金融機関のつくるネットワークの変化など、実データへの解析にも取り組む。

2. 研究の目的

本研究では、時間依存するネットワークデータに対する異常検知手法の開発を背景とし、深層学習などにより、データ駆動的に構築された微分方程式モデルに対し、その方程式がもつ保存則を明らかにする技術を開発する。これは、学術的には、データ駆動型モデルとして導出され、ブラックボックス化してしまった微分方程式に対し、保存則という理論的な性質を明らかにするという意義をもつ。また、それを応用し、時間発展型ネットワークデータに対する異常検知手法を構築する。さらに、具体的な応用例として、放牧牛のコミュニティや、企業や金融機関のつくるネットワークの変化など、実データへの解析にも取り組む。

3. 研究の方法

主なアイデアは、もしも、ある微分方程式が保存量をもつ場合、微分方程式を定めるベクトル場は、その保存量の勾配ベクトルと直交するということである。そこで、まず、解析対象となる微分方程式が保存量をもつと仮定し、保存量をニューラルネットワークなどでモデル化する。そして、微分方程式モデルを定めるベクトル場を、ニューラルネットワークなどで表された保存量に直交するように射影する。このようにすると、微分方程式モデルは、存在を仮定した量を保存するようになる。もしも、このように射影された微分方程式が、観測データにより適合するのであれば、この微分方程式モデルは、この保存則をもつと考えられる。本研究では、このようなアイデアに基づいて、実際に、プログラムを組み、保存則を抽出する方法を開発した。

また、ネットワーク解析については、ニューラルネットワークモデルについての研究を進める中で、ニューラルネットワークの誤差解析理論を応用できることに気がついた。社会ネットワーク解析の一つの問題は、ネットワーク自体の観測が難しいことである。例えば、交流ネットワークの解析を行うためには、誰と誰の間に交流があるかを調べなくてはならないが、そのような調査は、個人情報保護の観点から難しい。そのため、何人と交流があるか、といった匿名化されたデータからネットワークを解析する手法が必要となる。これまでの研究で、そのようなデータからネットワークを再構成する方法を考案してきたが、データに適合するネットワークの数は天文学的な数字になり、その中の1つを再構成しても、意味のある結論は得られないものと思われる。しかし、ニューラルネットワークの誤差解析理論を応用することで、このようなネットワーク再構成法の誤差解析が可能となることが分かった。そこで、実際に誤差解析を行い、意味のある結果が得られるかどうかを解析した。

この他、ブラックボックスモデルから保存則を抽出する方法としてはクーブマン作用素が利用できる。そこで、クーブマン作用素をネットワークデータに適用し、保存則を探索することを試みた。また、ブラックボックス型微分方程式モデル自体の改良にも取り組んだ。

4. 研究成果

主要な成果は以下の通りである。

- ニューラルネットワークモデルを利用した保存則抽出法を、上記のアイデアに従って、実際に構築した。2体問題や電気回路の方程式などに適用したところ、確かに、保存則が抽出され、モデルの予測性能を改善できることが明らかになった。また、2体問題の場合には、抽出された保存量が運動量に対応することをシンボリック回帰を利用して確認した。電気回路方程式については、保存則の数を未知と仮定して実験を行った。ニューラルネットワークでモデル化する保存則の数を徐々に増やしていったところ、真の保存則の数を越えたところで誤差が大幅に増加し、保存則の数をこの方法で明らかにすることが可能であることが確かめられた。
- ニューラルネットワークを利用したモデリング手法においては、その誤差解析も重要である。ニューラルネットワークモデルの誤差解析としては、統計的機械学習理論に基づく方法が知られているが、特に物理モデルなどに対しては、その解析が不十分であった。そこで、統計

的機械学習理論を応用し、実際に誤差解析を行った。特に、離散化されたモデルについての誤差解析においては、離散化に用いた数値積分法に、誤差がほぼ依存しないことが明らかとなった。

- ニューラルネットワークによる微分方程式モデルに関する新たなアプローチとして、作用素学習手法が提案された。これは、作用素、すなわち、関数を関数に移す写像をデータから学習する手法である。この方法を利用すると、特に、微分方程式に対して、その解作用素を求められる。解作用素は、初期値などのデータから微分方程式の解を直接与える写像であり、これが学習できれば、数値シミュレーションを大幅に加速できるものとして、期待されている。
本研究では、この方法を様々な応用した。まず、関数から関数が得られることに着目し、流体シミュレーションなど、偏微分方程式の数値計算における計算結果の超解像手法を提案した。具体的には、計算結果を入力として、恒等写像を学習することで、計算結果を関数に置き換え、実質的に補完する。これによって、確かに、精度のよい解が得られることを確認した。また、GENERIC系と呼ばれる、非平衡熱力学モデルについて、作用素学習を適用した。GENERIC系は、エントロピー増大則や、エネルギー保存則などの物理法則をもつことが知られているが、作用素学習の予測結果は、これらの性質を満たさないものになってしまう。そこで、これらの性質が満たされるように、物理法則を利用した損失関数を設定してファインチューニングすることで保存則を満たすように改良する方法を提案した。
- 作用素学習は、関数から関数への写像を学習できる。ここで、偏微分方程式は、一般に、微分作用素などを用いて表されるため、作用素学習を利用すれば、データから偏微分方程式を推定することも可能になりそうである。そこで、実際に、偏微分方程式を推定する手法を構築し、数値実験によって、有効性を確認した。その結果、移流方程式など、複数の偏微分方程式に対して、観測データを説明する偏微分方程式を探索することが可能であることが明らかになった。
- 作用素学習手法の代表例はDeepONetである。DeepONetに関しては、その提案者による誤差解析結果が知られているが、この誤差解析結果は、実際に用いられているDeepONetとやや構造が異なるものに対する結果となっていた。そこで、本研究では、この誤差解析結果の証明を書き直すことで、既存の誤差解析結果が、確かにDeepONetに対して適用可能であることを証明した。
- クープマン作用素は、微分方程式に対するデータ駆動型アプローチの一つである。この作用素は、観測データを、少し先の時刻の観測データに移すように定義される。簡単に確認できるように、これは線形作用素となり、かつ、実務で利用するときには有限次元空間上の作用素となるため、単純な行列で表される。従って、その固有値・固有ベクトルを計算すれば、固有値1に対応する固有ベクトルは保存量に対応する。これは、ブラックボックスモデルに対して保存則を抽出する有用な方法と期待できる。しかし、これを用いて、時間発展型ネットワークの保存則を抽出しようとしたところ、ある程度、実際に予測することはできたが、実問題に適用するには、計算量が膨大であることが判明した。そこで、クーブマン作用素の推定手法を改良する研究も進めた。特に、クーブマン作用素を推定するとき、スパース性を利用することを試みた。その結果、スパース推定を行うことでクーブマン作用素の推定結果が向上することを確認した。
- ブラックボックス型微分方程式モデルとしては、ニューラル微分方程式がよく知られている。しかし、ニューラルネットワークは万能近似性をもつが、万能近似性のために、広すぎる範囲の微分方程式をモデル化できてしまう。特に、物理現象の観測データについては、エネルギー保存則などの物理法則が成り立つようにモデルを組みたいが、ニューラル微分方程式は、あまりに広い範囲の方程式をモデル化できてしまうため、物理法則を満たすモデルといった限定的なモデルを見つけることができない。そのため、物理法則を満たすようなニューラルネットワークモデルの構築が望ましい。本研究では、実際に、そのようなモデルを提案した。提案したモデルでは、エネルギー関数が多層パーセプトロンなどでモデル化されており、自動離散微分というアルゴリズムを用いて、離散版のエネルギー勾配を求め、離散版の運動方程式を導出する。これは、離散勾配法と呼ばれる数値計算法に基づく方法であり、このように設計するとエネルギー保存則や散逸則が保たれることが知られている。実際に、この方法を用いてモデル化を行ったところ、ニューラル微分方程式に対して、確かに長期予測に優れたモデルが構築できることが確認できた。
- 先述の、ニューラルネットワークによる物理モデルでは、特に、ハミルトン方程式として標準形の方程式が仮定されていた。しかし、この形に方程式を表すためには、一般化座標および一般化運動量と呼ばれる、特殊な座標系でデータを表す必要がある。しかし、この特殊な座標系は、一般には未知であるエネルギー関数に依存しており、エネルギー関数が分からなければ、データを用意することができず、実質的に実問題に応用出来ない方法であった。一方、ハミルトン方程式は、座標系に依存しない、幾何学的な表示をもつ。そこで、そのような幾何学的な表示を用いることで、一般化運動量の式を必要としないモデルを構築した。また、実際に、一般化運動量でない座標系で与えられたデータから、方程式を導出し、現象の予測が可能であることを数値実験で確認した。
- 開発したニューラルネットワークによる微分方程式モデルの主な用途は、物理シミュレーション

ョンである。物理シミュレーションのためには、微分方程式モデルを離散化しなくてはならないが、その際、物理法則が失われてしまう可能性がある。そこで、ニューラルネットワークで表された微分方程式モデルに対して、物理法則を失わないような数値計算手法を開発した。特に、座標系に依存しないモデルについては、方程式が変分原理から導出されることに着目し、変分原理を離散化することで計算手法を導出する、変分的数値積分法を適用した。ここで、ニューラルネットワークモデルは、必ずしも変分原理をもつとは限らないため、変分原理からモデルが導かれることを、あらかじめ示す必要がある。今回、開発した方法は、正準 1 形式と呼ばれる、変分原理に関係の深い量をニューラルネットワークでモデル化しており、それを利用することで、変分原理の存在を明らかにすることができた。また、導かれた数値計算法で数値計算を行った結果、確かに、エネルギー保存則などが成り立つことが確認できた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 7件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 松原 崇、陳 鈺涵、谷口 隆晴	4. 巻 91
2. 論文標題 幾何学的深層科学技術計算	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 応用物理	6. 最初と最後の頁 629-633
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.11470/oubutsu.91.10_629	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Baige Xu, Yuhan Chen, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi	4. 巻 2022
2. 論文標題 Learning GENERIC Systems Using Neural Symplectic Forms	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2022)	6. 最初と最後の頁 29-32
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Yuhan Chen, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi	4. 巻 2022
2. 論文標題 Variational Integrator for Hamiltonian Neural Networks	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2022)	6. 最初と最後の頁 .25-28
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Terakawa Shunpei, Yaguchi Takaharu	4. 巻 14
2. 論文標題 Symplecticity of coupled Hamiltonian systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 37-40
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.14.37	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 陳鈺涵, 松原崇, 谷口隆晴	4. 巻 36
2. 論文標題 KAM Theory Meets Statistical Learning Theory: Hamiltonian Neural Networks with Non-Zero Training Loss	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Thirty-Sixth AAAI Conference on Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 陳鈺涵, 松原崇, 谷口隆晴	4. 巻 34
2. 論文標題 Neural Symplectic Form: Learning Hamiltonian Equations on General Coordinate Systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yuhan Chen, Hideki Sano, Masashi Wakaiki, Takaharu Yaguchi	4. 巻 23
2. 論文標題 Secrete Communication Systems Using Chaotic Wave Equations with Neural Network Boundary Conditions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Entropy	6. 最初と最後の頁 904
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/e23070904	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Matsubara, Ai Ishikawa, Takaharu Yaguchi	4. 巻 33
2. 論文標題 Deep Energy-Based Modeling of Discrete-Time Physics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)	6. 最初と最後の頁 13100-13111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計24件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 安田 諒子, 松原 崇, 谷口 隆晴
2. 発表標題 神経ネットワーク動画像からのモデリングの試み
3. 学会等名 日本数学会2022年度秋季総合分科会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徐 百歌, 陳 鈺涵, 松原 崇, 谷口 隆晴
2. 発表標題 一般化 Dissipative SymODEN の GENERIC 形式
3. 学会等名 日本数学会2022年度秋季総合分科会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 陳 鈺涵, 松原 崇, 谷口 隆晴
2. 発表標題 ニューラルシンプレクティック形式と変分原理の両立性について
3. 学会等名 日本数学会2022年度秋季総合分科会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徐 百歌, 陳 鈺涵, 松原 崇, 谷口 隆晴
2. 発表標題 GENERICシステムに対する構造保存型深層物理モデル
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松原 崇, 谷口 隆晴
2. 発表標題 深層学習を用いてデータから力学系の第一積分を発見し保存するモデル化法
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徐 百歌, 谷口隆晴, 増本康平, 原田 和弘, 近藤 徳彦, 岡田 修一
2. 発表標題 交流アンケートデータからのネットワーク特徴量推定について
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Baige Xu, Yuhan Chen, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi
2. 発表標題 Learning GENERIC Systems Using Neural Symplectic Forms
3. 学会等名 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE) 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuhan Chen, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi
2. 発表標題 Theoretical analysis of approximation properties of Hamiltonian neural networks
3. 学会等名 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE) 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuhan Chen, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi
2. 発表標題 Neural symplectic form and coordinate-free learning of Hamiltonian dynamics
3. 学会等名 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE) 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 延安歩美, 安田諒子, 松原崇, 谷口隆晴
2. 発表標題 潜在変数をもつハミルトニアンニューラルネットワークのハミルトン構造をもたないデータへの適用について
3. 学会等名 環瀬戸内応用数理第26回シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 植田大晴, 松原崇, 谷口隆晴
2. 発表標題 ハミルトン系に対するカーネル法によるモデリング
3. 学会等名 環瀬戸内応用数理第26回シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 陳鈺涵, 徐百歌, 松原崇, 谷口隆晴
2. 発表標題 ニューラルシンプレクティック形式とその応用
3. 学会等名 日本応用数理学会第18回研究部会連合発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 シンプレクティック形式の学習による一般座標系での 深層物理モデル
2. 発表標題 陳鈺涵, 松原崇, 谷口隆晴
3. 学会等名 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会第25 回シンポジウ ム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 ハミルトニアニューラルネットワークの安定性について
2. 発表標題 小川乃愛, 谷口隆晴
3. 学会等名 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会第25 回シンポジウ ム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takaharu Yaguchi
2. 発表標題 Geometric Energy-Based Deep-Learning Models for Physics
3. 学会等名 DMV-OMG Annual Conference 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 搦本有望, 谷口隆晴
2. 発表標題 非平衡熱力学による摩擦付き質点バネ系に対する数値解法とその刻み幅条件
3. 学会等名 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会第25 回シンポジウ ム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺川 峻平, 松原 崇, 谷口隆晴
2. 発表標題 常微分方程式モデルの学習における離散化手法の影響について
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 徐 百歌, 谷口 隆晴
2. 発表標題 Koopman 作用素を利用した発展型ネットワーク予測の試み
3. 学会等名 日本応用数理学会第17回研究部会連合発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shunpei Terakawa, Takashi Matsubara, Takaharu Yaguchi
2. 発表標題 The Error Analysis of Numerical Integrators for Deep Neural Network Modeling of Differential Equations
3. 学会等名 NeurIPS2020 Workshop on Machine Learning and the Physical Sciences (ML4PS)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松原 崇, 谷口隆晴
2. 発表標題 深層フェーズフィールドモデリング
3. 学会等名 2020年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小松 瑞果, 谷口 隆晴
2. 発表標題 潜在変数をもつニューラル微分方程式に対する代数的考察
3. 学会等名 2020年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 谷口 隆晴
2. 発表標題 Deep Energy-Based Modeling of Discrete-Time Physics
3. 学会等名 日本ディープラーニング協会主催 NeurIPS 2020 技術報告会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷口 隆晴
2. 発表標題 DGNet: エネルギー保存・散逸則を保つ深層物理モデリングとそれに関する理論・応用
3. 学会等名 数値解析セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷口 隆晴
2. 発表標題 深層学習を用いたエネルギーベースのモデリング・シミュレーションフレームワーク
3. 学会等名 明治大学共同利用・共同研究拠点研究集会「高度な自動運転を実現するための数理の現状と課題」(招待講演)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------