

講座

# ニューラルネットワークを用いた 物理モデリング・シミュレーション

## Physical Modeling and Simulation Using Neural Networks

### 1. はじめに

#### 1. Introduction

谷口 隆晴

YAGUCHI Takaharu

神戸大学大学院 理学研究科・理化学研究所革新知能統合研究センター

(原稿受付：2025年7月20日)

大規模言語モデルをはじめとする、近年の深層学習の急速な発展は社会に大きな影響を与えている。物理モデリング・シミュレーションに対しても、2019年ごろから、深層学習の応用が急速に発展している。科学全体への応用研究についてはAI for Science などと呼ばれることもあるが、特に、科学技術計算に関係した研究はScientific Machine Learning (SciML, 機械学習科学技術計算) と呼ばれることがある。これは、従来の科学技術計算手法と機械学習、特に、深層学習を連携させたものであり、物理モデリングやシミュレーションを大きく加速するものと期待されている。SciMLは、大きく分けて次のような代表的な3つのアプローチに分けられる：

- 作用素学習：主に偏微分方程式の初期値・境界値問題に対して解作用素を学習する手法 ([1, 2]),
- Physics-Informed Neural Networks (PINNs)：ニューラルネットワークによる偏微分方程式の近似解法や逆問題への応用 ([3] など),
- 深層物理モデル：ニューラルネットワークを利用した物理モデリング手法 ([4] など).

これらの手法は、物理シミュレーションによる予測を大幅に加速したり、物理シミュレーションのプログラミングを容易にすると期待されており、例えば、従来、スーパーコンピュータを必要とするようなシミュレーションに対してもリアルタイム、あるいは、それ以上の速度での予測が可能となりつつある。また、これを受けて、産業界では、リ

アルタイム予測・制御への応用なども期待されている。なお、このような研究が始まってから数年が経過したことにより、現在では、これらの区別は徐々に少なくなっている。作用素学習でPINNsの方法が利用されることもある。逆に作用素学習を用いて、支配法則が未知の現象に対し、そのモデルを構築することもできる。またAI for Science とSciMLも、あまり区別されなくなっており、ほとんど同じ意味で使われるようになりつつある。

本講座では、主に、上記の3つのアプローチについて、それぞれ、その概略を解説する。第2章では、PINNsについて説明する。PINNsは、主に、偏微分方程式の解をニューラルネットワークで近似しようとするものであり、偏微分方程式自体を利用してニューラルネットワークを学習する。これは、偏微分方程式の数値解法に利用できるほか、未知パラメータを同時に学習すれば逆問題に適用することも可能である。また、偏微分方程式を深層学習の損失関数に利用すること自体を指すこともあり、作用素学習などの他の方法にも応用されている。特に、偏微分方程式の数値解法としては、有限差分法や有限要素法などの従来法と比較して、次元の呪いの影響を受けず、高次元の問題に適用可能であること、メッシュ生成が不要なこと、時間方向の並列計算が可能であり高速化が可能なこと、プログラミングが容易であることなどといった特徴をもつ。例えば、ニューラルネットワークは、関数の合成によって構成

されていることが多いが、この構造は、よく考えてみると、領域を分割することに相当していると考えることができ、実質的にアダプティブメッシュ法と同等と思うことができる。つまり、ニューラルネットワークを利用することで、自動的にアダプティブメッシュが適用されたシミュレーションコードを、簡単に記述することができるようになる。第2章では、逆問題への応用を含め、PINNsの基本的な考え方と適用例、発展的な話題などについて解説する。

第3章では、物理モデリングのための方法について説明する。物理シミュレーションによって物理現象を予測するためには、通常、まず、その現象を記述する微分方程式モデルを構築し、それを解くことでシミュレーションが行われる。しかし、複雑な現象に対しては、必ずしも、このようなモデルが既知であるとは限らず、また、その導出は困難かもしれない。そこで、深層学習を利用して、支配法則が未知の現象に対し、その観測データから方程式を導出するための方法が研究されている。このような方法は、もちろん、現象の理解とシミュレーションによる予測に有用であるが、それ以外にも、サロゲートモデルの構築や、シミュレーションの加速にも利用出来る。実際、シミュレーションデータを観測データの代わりに利用して、それを表す簡易版のモデルが構築できれば、それは、シミュレーションのためのサロゲートモデルとなる。特に、このモデルを離散時間モデルとして構築すれば、モデル自体をシミュレーションコードとして利用することができ、それはシミュレーションの加速のための方法となるであろう。本講座では、このようなアプローチについて、特に基本的な手法について説明する。

第4章では、作用素学習を取り扱う。作用素学習は、作用素を学習する手法であるが、ここでいう作用素とは、関数を別の関数に変換する写像を意味する。この方法は、例えば、偏微分方程式の初期値・境界値問題に対して、その解作用素を学習することで、物理シミュレーションを高速化する方法として利用される。偏微分方程式論における代表的な問題の一つは、その well-posedness, すなわち、解の存在および一意性、また、初期値・境界値に関する連続性の理論的証明である。この well-posedness は、様々な偏微分方程式に対して証明されてきているが、well-posedness が「解は初期値・境界値の連続関数となる」ことを意味することと、ニューラルネットワークが連続関数に対する万能近似性、すなわち、任意の連続関数が近似可能という性質をもつことを考慮すると「初期値・境界値から解を与える連続関数をニューラルネットワークで近似できる」と期待される。作用素学習では、これを学習することで、偏微分方程式の求解を加速し、物理シミュレーションを高速化する。この方法は、いわば、偏微分方程式に対して、その解の公式をデータから学習しようとするものであり、確かに、これが出来れば、従来のような時間逐次型のシミュレーションを行う必要はなくなる。そのため、単純な関数評価だけで解が求まることになり、リアルタイム以上の速さで気象予測などが可能となりつつある。第4章では、こ

のような手法について、問題設定や望ましい性質、代表的なモデルなどについて説明する。

最後に、興味をもった方向けに、このような方法が利用できるソフトウェアについて、少し紹介しておこう。有名なものとしては、Yale大学のLu氏が開発している DeepXDE が代表的である。このライブラリでは、PINNs や作用素学習のプログラムが簡単に組めるように工夫されている。例えば、偏微分方程式を PINNs で解きたいときには、ユーザーは、実質的に、偏微分方程式や初期条件、境界条件などをプログラム中に書くだけで解ける。NVIDIA が開発している PhysicsNeMo も同様のライブラリである。ややインストールが難しいが、商用利用が許可されているなど、ライセンス上は使いやすい。作用素学習については、Neural Operators というライブラリが開発されている。このライブラリは、開発が速い印象で、ときどき、新しい手法が追加されているようである。ただし、過去のバージョンと使い方が変わることもあり、必要に応じて古いバージョンを利用するほうが良いかもしれない。物理モデリングのためのライブラリについては、あまりまとまったものが存在しておらず、各論文ごとに公開されているコードを利用するのが良さそうである。

この分野は、機械学習の他の分野と同じく、発展が非常に速い。例えば、2019年に発表された PINNs についての論文は、2025年7月時点で15000回以上引用されている。そのため、この分野全体をカバーする解説を書くことは難しいが、より詳細な内容については [7-10] などのサーベイ論文や最新の論文を参照されたい。

## 参考文献

- [1] N. B. Kovachki *et al.*, J. Mach. Learn. Res. **24**, Article 89 (2024).
- [2] Z. Li *et al.*, arXiv:2010.08895 (2020). Available from: <http://arxiv.org/abs/2010.08895>
- [3] M. Raissi *et al.*, J. Comput. Phys. **378**, 686 (2019).
- [4] S. Greydanus *et al.*, Adv. Neural Inf. Process. **23**, 15379 (2019).
- [5] L. Lu *et al.*, SIAM Rev. **63**, 208 (2021).
- [6] PhysicsNeMo Contributors. <https://github.com/NVIDIA/physicsnemo> (2023)
- [7] J. Kossaifi *et al.*, arXiv:2412.10354 (2024) Available from: <https://arxiv.org/pdf/2412.10354>
- [8] J. Hyeonjung *et al.*, arXiv:2304.13807 (2023). Available from: <http://arxiv.org/abs/2304.13807>
- [9] S. Huang *et al.*, arXiv:2211.05567 (2022). Available from: <https://arxiv.org/abs/2211.05567>
- [10] C. Meng *et al.*, Mach. Learn. Comput. Sci. Eng. **1**, Article 20, (2025) .
- [11] J. Watson *et al.*, arXiv:2408.09840 (2024). Available from: <https://arxiv.org/abs/2408.09840>



やぐち たかはる  
谷口 隆晴

神戸大学大学院理学研究科数学専攻教授，理化学研究所革新知能統合研究センター 計算物理機械学習チーム チームディレクター．応用数学・情報学全般の研究に従事．現在は，主に Physics-Informed Neural Networks や作用素学習など，機械学習の物理モデリング・シミュレーションへの応用に取り組んでいる．