保存型・散逸型ハミルトン方程式に対する幾何学的構造を保つ作用素学習手法

谷口 隆晴
九州大学／理研 AIP

自己紹介

- 経歴
  - 2002 年, 東京大学 工学部 計数工学科 卒業（統計学）
  - 2004 年, 東京大学 情報理工学系研究科 数理情報学専攻 修士課程（CG，OR，離散数学，制御理論）
  - 2004 年, 東京大学 情報理工学系研究科 数理情報学専攻 助手
  - 2007 年, 東京大学 情報理工学系研究科 数理情報学専攻 助教（数値解析，離散数学）
  - 2011 年, 神戸大学 システム情報学研究科 計算科学専攻 講師，准教授（ハイパフォーマンスコンピューティング）
  - 2023 年, 神戸大学 理学研究科 数学専攻 教授
  - 2025 年, 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
  - 2026 年, 九州大学マス• フォア• インダストリ研究所 教授（物理モデリング・シミュレーションのための深層学習）
- 主な研究プロジェクト
  - JST CREST(2019-, 2024-)：物理モデリング• シミュレーションへの機械学習の応用
  - JST ASPIRE(2022-)，Horizon Europe MSCA Staff Exchanges(2024-)：イギリス，ノルウェー，オランダなどとの国際共同研究

研究テーマとキーワード

数値解析・シミュレーション

- 構造保存型数値解法，幾何学的数値積分法
- 数値流体力学，有限差分法，有限体積法，無反射条件
- 有限要素外積解析

数理物理

- 幾何学的力学理論，ハミルトン力学，ラグランジュ力学
- 変分法，ソリトン解
- 双曲型偏微分方程式，特異性の伝搬解析

社会科学

- 老年心理学，社会ネットワーク解析（ERGM など）
- マクロ経済学，システミックリスク解析

情報学（システム解析，機械学習，コンピューティング）

- データ駆動型モデリング，システム同定
- 深層物理モデル，幾何学的深層学習，統計的学習理論
- 並列計算，スーパーコンピュータ

最近の研究成果

- Yeang et al., Symplectic Neural Operators for Learning Infinite Dimensional Hamiltonian Systems, NeurIPS2026
- Furuya et al., Approximation of Maximally Monotone Operators : A Graph Convergence Perspective, NeurIPS2026
- Takabatake et al., State Space Model with Continuous Limit of HiPPO Matrix: Eigenvalue Analysis and Explicit Solution Formula, ICML2026
- Celledoni et al., UEPI: Universal Energy-Behavior-Preserving Integrators for Energy Conservative/Dissipative Differential Equations, NeurIPS2025
- Khosrovian et al., Poisson-Dirac Neural Networks for Modeling Coupled Dynamical Systems across Domains, ICLR2025
- Matsubara et al., Number theoretic accelerated learning of physics-informed neural networks, AAAI2025
- Matsubara et al., FINDE: Neural differential equations for finding and preserving invariant quantities, ICLR2023
- Chen et al., KAM theory meets statistical learning theory: Hamiltonian neural networks with non-zero training loss, AAAI2022
- Chen et al., Neural symplectic form: Learning Hamiltonian equations on general coordinate systems, NeurIPS2021

Scientific Machine Learning（SciML）

科学技術計算と機械学習の融合

Scientific Machine Learning の代表的な手法

- Physics-Informed Neural Networks（PINNs）
- 作用素学習（DeepONet，FNO など）
- 力学系の観測データからのシステム同定（Koopman 作用素，DMD，SINDy，Hamiltonian Neural Networks など）
- 保存則・対称性などの発見

期待される応用

- 物理シミュレーションの高速化
- 産業における製品開発の加速

作用素学習は物理シミュレーションを高速化するが，通常はエネルギー保存則などの物理法則を保存しない．本講演では，幾何学構造を保存することで物理法則を保つ作用素学習法を紹介．

ニューラル作用素と Fourier Neural Operator

ニューラル作用素：無限次元のニューラルネットワーク

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, \quad f \simeq f_{\mathrm{NN}}(x) = A_2\sigma(A_1 x + b_1) + b_2$$
$$\to \quad \mathcal{K} : X \to Y, \quad \mathcal{K} \simeq \mathcal{K}_{\mathrm{NO}} f = \mathcal{A}_2\sigma(\mathcal{A}_1 f),$$
$$\mathcal{A}_j f(x) = \int K_j(x,y) f(y) \mathrm{d}y + g_j(x)$$

Fourier Neural Operator

$$K(x,y) = \tilde{K}(x-y) \quad \to \quad \int K(x,y) f(y) \mathrm{d}y = \int \tilde{K}(x-y) f(y) \mathrm{d}y$$

- 空間の並進対称性を仮定.
- 無限次元の畳み込みニューラルネットワーク（CNN）に相当.
- 畳み込み積分を FFT により計算.

提案手法の特徴

ニューラル作用素：無限次元のニューラルネットワーク

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, \quad f \simeq f_{\mathrm{NN}}(x) = A_2\sigma(A_1 x + b_1) + b_2$$
$$\to \quad \mathcal{K} : X \to Y, \quad \mathcal{K} \simeq \mathcal{K}_{\mathrm{NO}} f = \mathcal{A}_2\sigma(\mathcal{A}_1 f),$$
$$\mathcal{A}_j f(x) = \int K_j(x, y) f(y) \mathrm{d}y + g_j(x)$$

Fourier Neural Operator

$$K(x, y) = \tilde{K}(x - y) \quad \to \quad \int K(x, y) f(y) \mathrm{d}y = \int \tilde{K}(x - y) f(y) \mathrm{d}y$$

主に偏微分方程式の解作用素の学習に利用．しかし...

- エネルギー保存則などの物理法則が成り立たない
  → シンプレクティック性などの幾何構造を保存
- 幾何学構造を保存すると Physics-Informed Loss が使えない
  → 幾何学構造を保つ PINNs
- 微分方程式ごとに学習が必要
  → １つのモデルで様々な系を予測可能な手法

保存・散逸ハミルトン系の幾何学構造

簡単のため，

- ハミルトン常微分方程式を例に幾何学構造を説明．
- 相空間は，一般の多様体ではなく線形空間であると仮定．

ハミルトン系とシンプレクティック構造

ハミルトン系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = X, \omega(X, \cdot) = \mathrm{d}H(\cdot)$$

シンプレクティック構造：ベクトル場 X が局所的にハミルトンであることと，$\omega = \mathrm{d}q \wedge \mathrm{d}p$ が保存されることは同値：

$$\mathcal{L}_X \omega = 0.$$

シンプレクティック構造を保存する手法

- シンプレクティック数値積分法：1 ステップ写像がシンプレクティック
  例：シンプレクティック Euler 法，Störmer–Verlet 法，変分的数値積分法
- Scientific ML：シンプレクティック性をもつニューラルネットワーク
  例：SympNets，Symplectic Neural Flow

散逸型ハミルトン系

ハミルトン系に散逸項を加えた系：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \partial_q H \\ \partial_p H \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}, \quad \gamma < 0, \tag{1}$$
$$H(q,p) = \tfrac{1}{2}\|p\|^2 + V(q).$$

性質

- エネルギーは減少：$\mathrm{d}H/\mathrm{d}t = \gamma\, p^\top \partial_p H \le 0.$
- シンプレクティック形式 $\omega = \mathrm{d}q \wedge \mathrm{d}p$ は，フローに沿って収縮．

系の幾何学的な表現

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \begin{pmatrix} O & I \\ -I & O \end{pmatrix}\nabla_u H + \gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} u, \quad u = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = X, \quad \omega(X,\cdot) = \mathrm{d}H - \gamma\theta$$

ω：シンプレクティック 2 形式，θ：1 形式，$\omega = -\mathrm{d}\theta$．

共形シンプレクティック構造

シンプレクティック多様体 $(\mathcal{M}, \omega)$ 上のベクトル場 X が，定数 γ に対して

$$\mathcal{L}_X \omega = \gamma \omega$$

を満たすとき，X を共形ベクトル場という．そのフローが生成する力学系を**共形ハミルトン系**という．

そのフロー $\phi_t : u_0 \mapsto u(t)$ に対して，Lie 微分に関する公式から

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \phi_t^* \omega = \phi_t^* \mathcal{L}_X \omega = \gamma \, \phi_t^* \omega$$

したがって

$$\phi_t^* \omega = e^{\gamma t} \omega.$$

この性質を保ちつつ，解作用素 ϕ_t を学習する機械学習手法を構築したい！

提案手法：
Conformal Symplectic Neural Flows（CoSynFlow）

共形ベクトル場の分解

共形ベクトル場は，次のように分解できることが知られている：

$$X = X_H + \gamma Z, \qquad \gamma \in \mathbb{R}.$$

- X_H：ハミルトンベクトル場，$\mathcal{L}_{X_H}\omega = 0$.
- Z：Liouville ベクトル場，$\mathcal{L}_Z\omega = \omega$.

幾何学的な特徴：

- ハミルトン部分：シンプレクティック形式を保存する.
- Liouville 部分：シンプレクティック形式を定数倍する.

解を学習するためのアイデア：

ハミルトンフローと Liouville 型のスケーリングフローを組み合わせる

CoSynFlow：共形シンプレクティックフロー

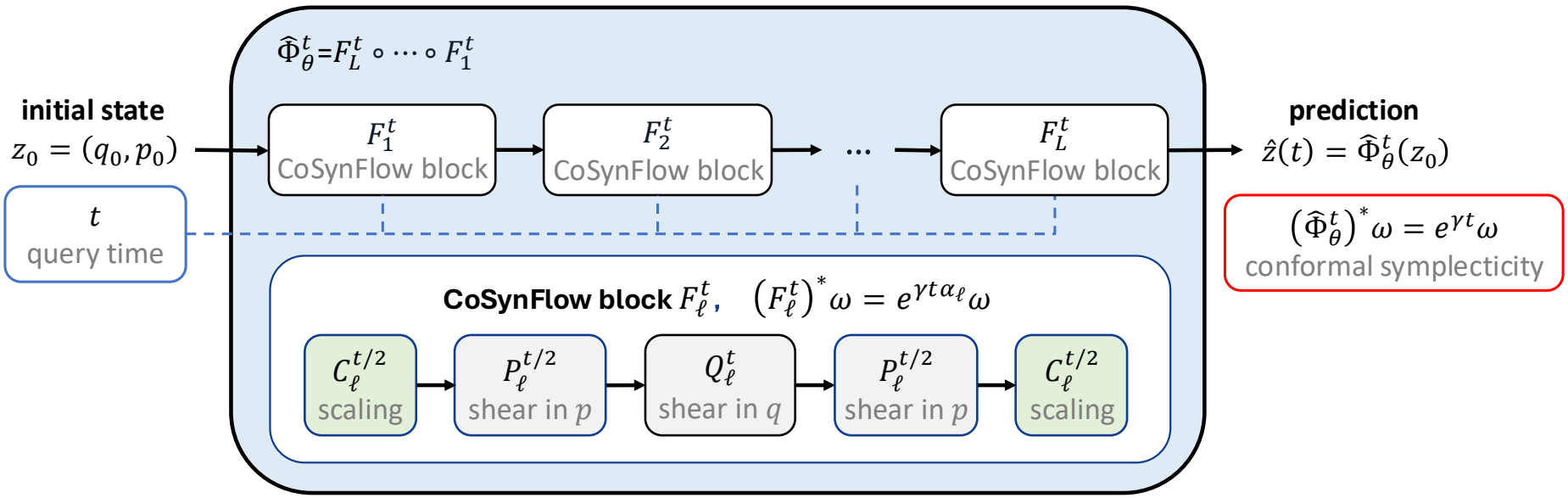
第 ℓ 層のスカラーポテンシャルを $\widetilde{A}_\ell, \widetilde{B}_\ell$，配分係数を α_ℓ とする：

$$P_\ell^{t/2}(q,p) = \left(q,\ p - \tfrac{t}{2}\nabla_q \widetilde{A}_\ell(q;t)\right), \qquad Q_\ell^{t}(q,p) = \left(q + t\nabla_p \widetilde{B}_\ell(p;t),\ p\right),$$

$$C_\ell^{t/2}(q,p) = \left(q,\ e^{\gamma t \alpha_\ell/2} p\right), \qquad \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell = 1.$$

対称なブロックと全体のフローを次のように定める：

$$F_\ell^t = C_\ell^{t/2} \circ P_\ell^{t/2} \circ Q_\ell^t \circ P_\ell^{t/2} \circ C_\ell^{t/2}, \qquad \widehat{\Phi}_\theta^t = F_L^t \circ \cdots \circ F_1^t.$$



複数の系を予測する手法への拡張

これまでのブロックは，**一つの固定された** (H, γ) に対して定義される．

- 一つのハミルトニアンで学習したモデルを別の系に適用するには，再学習が必要．
- しかし，多くの応用では，**多数の異なる系**に対して解作用素を学習したい．

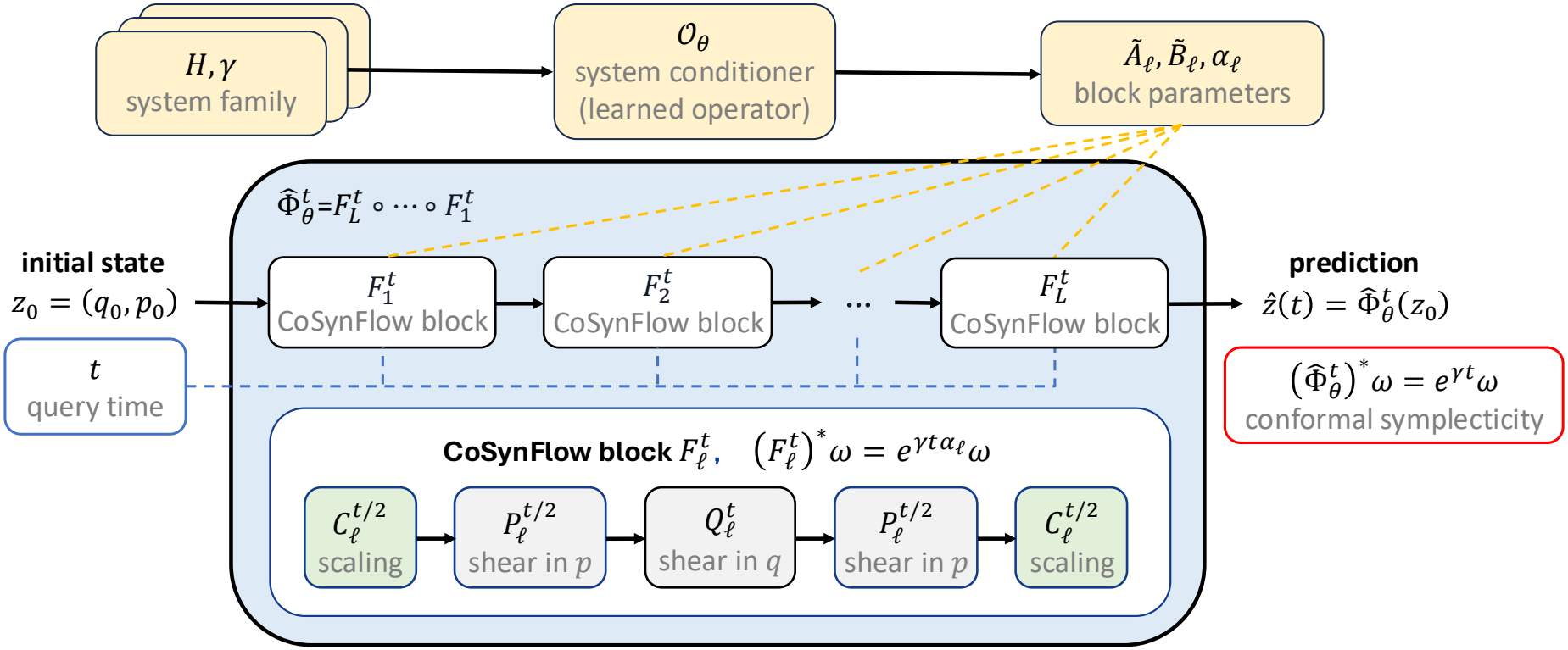
アイデア：アーキテクチャ全体を「系を特徴づける量」に依存

系の記述子 (H, γ) を入力として取れるようにモデルを修正：

$$\widehat{\Phi}^t_\theta(\,\cdot\,; H, \gamma) \approx \Phi^t_{H,\gamma}.$$

さらに，条件として与えた**すべての系**で，幾何学構造が厳密に成立させる．

系の記述子に依存した CoSynFlow



作用素学習によって，系の記述子であるハミルトニアンと減衰率から全ブロックのパラメータであるポテンシャルへの写像を学習：

$$\mathcal{O}_\theta : (H, \gamma) \longmapsto \big(\{\alpha_\ell\}, \{\widetilde{A}_\ell, \widetilde{B}_\ell\}\big), \qquad h_H = \big(H(r_1), \ldots, H(r_m)\big).$$

偏微分方程式への拡張と Brinkman 法への応用

偏微分方程式への拡張

正準ハミルトン偏微分方程式を考え，CoSynFlow を次のように拡張：

- $\omega = \mathrm{d}q \wedge \mathrm{d}p$ を，次の形式に置き換える：

$$\omega(\begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} q_2 \\ p_2 \end{pmatrix}) = \int_\Omega (q_1 p_2 - q_2 p_1)\mathrm{d}x.$$

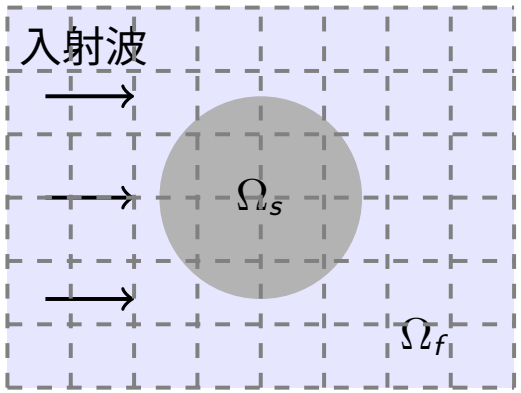
- ∇A_{NN} を変分微分 $\frac{\delta A_{\mathrm{NN}}}{\delta u}$ に置き換える（自動微分により計算）

$$P_\ell^{t/2}(q,p) = \left(q,\ p - \tfrac{t}{2}\frac{\delta \widetilde{A}_\ell(q;t)}{\delta q}\right), \qquad Q_\ell^t(q,p) = \left(q + t\frac{\delta \widetilde{B}_\ell(p;t)}{\delta p},\ p\right)$$

応用：複雑形状領域における解作用素の学習

- 通常の方法：境界適合格子の生成に大きなコストがかかる．
- Brinkman ペナルティ法
  - 固体領域 Ω_s にペナルティ項を導入し，直交格子上で複雑形状領域を扱う．
  - 形状変更は Ω_s の指示関数 $\chi(x)$ を変更するだけでよい．

$$\chi(x) = \begin{cases} 1 & x \in \Omega_s \\ 0 & x \in \Omega_f \end{cases}$$



複雑形状領域における波動方程式

簡単のため，複雑な境界をもつ領域 $\Omega_f \subset \mathbb{R}^d$ 上の波動方程式を考える：

$$u_{tt} = c^2 \Delta u \quad \text{領域内：} \Omega_f, \qquad u = 0 \quad \text{境界上：} \partial\Omega_f$$

$$u_{tt} = c^2 \Delta u - \frac{\chi(\boldsymbol{x})}{\eta} u_t,$$

$$\Omega = \Omega_f \cup \Omega_s, \ \chi(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{x} \in \Omega_s \text{（固体領域）} \\ 0 & \boldsymbol{x} \in \Omega_f \text{（流体領域）} \end{cases}$$

- $\eta \ll 1$: ペナルティパラメータ
- $\eta \to 0$：固体領域で $u_t \to 0$ となり，$u \to 0$（Dirichlet 境界条件）を得る．

この方程式は直交格子上で解ける．$\chi(\boldsymbol{x})$ を変更するだけで領域形状を変えられ，χ をニューラル作用素の入力にできる．

多重シンプレクティック構造

波動方程式の多重シンプレクティック定式化

$v = u_t$，$w = cu_x$ を導入すると，波動方程式 $u_{tt} = u_{xx}$ は以下のように書き換え可能：

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{K} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}_t + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & -c \\ 0 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{L} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}_x = \nabla S(\boldsymbol{z})$$

$$S(\boldsymbol{z}) = \tfrac{1}{2}(v^2 - w^2)$$

この方程式は多重シンプレクティック保存則 $\partial_t \omega + \partial_x \kappa = 0$ をもつ．この構造は散逸系へ拡張可能？

共形多重シンプレクティック構造

定理　Brinkman 法を適用した波動方程式

$$u_{tt} = c^2 \Delta u - \frac{\chi(\boldsymbol{x})}{\eta} u_t$$

は，次のように表すことができる：

$$\boldsymbol{K} \boldsymbol{z}_t + \boldsymbol{L} \boldsymbol{z}_x = \nabla_{\boldsymbol{z}} S(\boldsymbol{z}) - \frac{\chi(\boldsymbol{x})}{2\eta} \boldsymbol{K}\, \boldsymbol{z}$$

ここで，

$$\boldsymbol{z} = (u, v, w)^T, \boldsymbol{K} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -c \\ 0 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S(z) = -\frac{\chi(\boldsymbol{x})^2 u^2}{8\eta^2} + \frac{1}{2}(v^2 - w^2).$$

数値実験

学習に用いる系とベンチマーク

学習に用いる系の族. $\mathcal{Q} = [-3, 3]^2$ 上の 2 自由度のハミルトン系：

$$H(q, p) = \tfrac{1}{2}\|p\|^2 + V(q), \qquad V = V_{\mathrm{q}} + V_{\mathrm{GP}}.$$

- V_{q}: ランダムな 4 次関数, V_{GP}: ガウス過程による摂動
- 散逸係数 $|\gamma| \in [0.1,\, 0.4]$，学習時間区間の長さ $T = 4$
- 学習用 38,000 系，検証用・テスト用各 1,000 系，各 32 軌道

4 つのベンチマーク系（学習には使用しない）.

$$V_{\mathrm{q}}(q) = \tfrac{1}{2}\left(b_1 q_1^2 + b_2 q_2^2\right) + c\, q_1 q_2 + \tfrac{1}{4}\left(a_1 q_1^4 + a_2 q_2^4 + 2a_3 q_1^2 q_2^2\right)$$

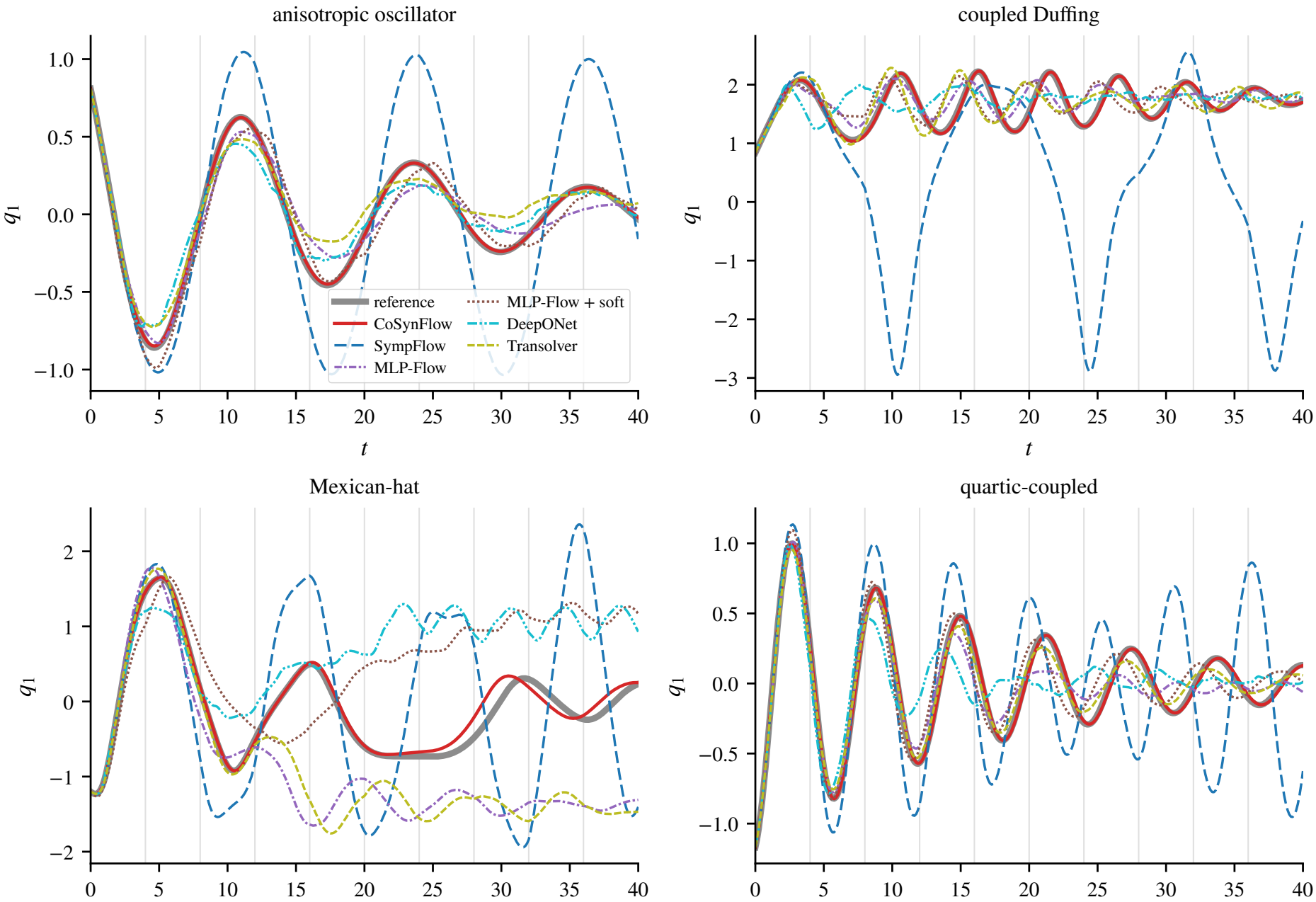
	系	b_1	b_2	c	a_1	a_2	a_3
B1	異方性振動子	0.25	1.96	0	0	0	0
B2	結合 Duffing 系	−0.5	−0.5	0.3	0.25	0.25	0
B3	メキシカンハット	−0.5	−0.5	0	0.25	0.25	0.5
B4	4 次結合系	1	1	0	0	0	0.5

結果 1：機械精度レベルの構造誤差

モデル	MSE	構造誤差 $\mathcal{E}_\omega$
Symplectic Flow	1.3×10^{-2}	8.2×10^{-1}
MLP Flow	1.2×10^{-2}	2.6×10^{-1}
MLP Flow（ソフト制約）	1.9×10^{-2}	1.3×10^{-1}
DeepONet	2.7×10^{-2}	7.4×10^{-1}
Transolver	7.8×10^{-3}	2.2×10^{-1}
CoSynFlow	$\mathbf{3.4 \times 10^{-4}}$	$\mathbf{1.3 \times 10^{-15}}$

- 構造誤差 $\mathcal{E}_\omega = \| D\widehat{\Phi}_\theta^\top J\, D\widehat{\Phi}_\theta - e^{\gamma t} J \|_F \,/\, \| e^{\gamma t} J \|_F$ は共形シンプレクティック性の確認．倍精度で評価．
- 提案手法は共形シンプレクティック性を丸め誤差レベルで保存．

結果 2：学習時間区間の 10 倍先までの予測



結果 3：物理法則に基づく学習

$\widehat{\Phi}_\theta^t$ は時刻 t に関して**連続かつ微分可能**であるため，学習したフローそのものに対して支配方程式の残差を定義できる：

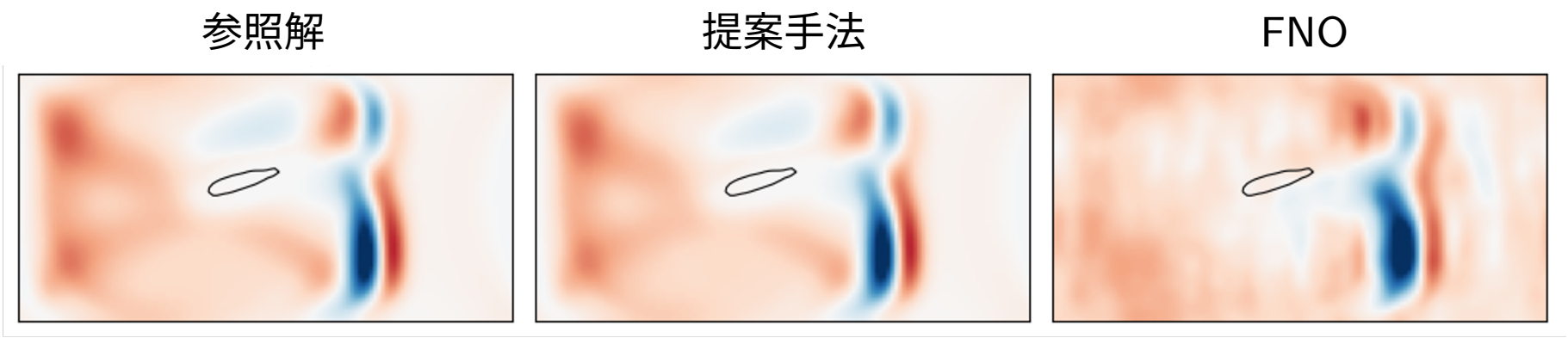
$$\mathcal{L}_{\mathrm{PI}} = \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{(z,t)\in\mathcal{C}} \left\| \partial_t \widehat{\Phi}_\theta^t(z) - X\big(\widehat{\Phi}_\theta^t(z)\big) \right\|^2.$$

- 選点 (z, t) において参照軌道データは必要ない．

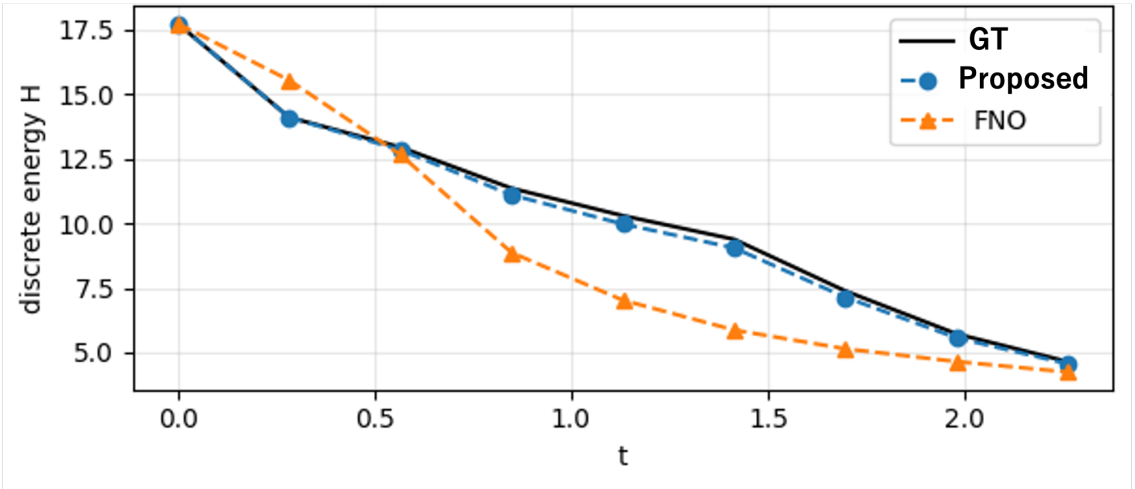
単一の系・2 本の軌道	状態誤差	エネルギー誤差
$\mathcal{L}_{\mathrm{pred}}$	1.2×10^{-2}	2.9×10^{-3}
$\mathcal{L}_{\mathrm{pred}} + \mathcal{L}_{\mathrm{PI}}$	$\mathbf{2.9 \times 10^{-3}}$	$\mathbf{4.9 \times 10^{-4}}$

少量のデータ，あるいは軌道データなしでも学習できる．

結果 4：偏微分方程式への適用



Brinkman 法を適用した波動方程式の解の予測



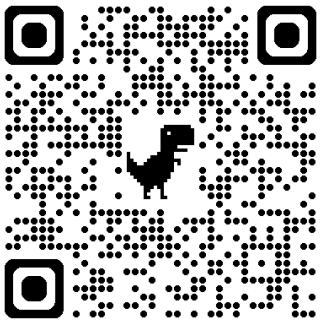
FNO の予測では，エネルギーが不自然に減少．

提案手法による解のエネルギー挙動は参照解に近い．

まとめ

- **提案手法はアーキテクチャにより，共形シンプレクティック構造を厳密に保存．**
- **一つのモデルで，複数の異なる系の解を予測可能．**
- **時刻 t に関する微分可能性により，Physics-Informed loss が利用可能．**
- **応用：複雑形状領域上の偏微分方程式．**

Baige Xu, Takaharu Yaguchi, CoSynFlow: Conformal Symplectic Neural Flows for Cross-System Prediction of Dissipative Hamiltonian Dynamics, arXiv:2608.00571



Scientific Machine Learning に関する国際会議を毎年開催

SCML 2027

INTERNATIONAL CONFERENCE ON SCIENTIFIC COMPUTING AND MACHINE LEARNING

2027年9月にノルウェー科学技術大学（NTNU）で開催予定.



2026年はBath大学（イギリス）で開催.

- 参加者数 約130名

2026年の講演数

- チュートリアル　2 件
- キーノート・招待講演　20件
- Accept 論文数 78件

Asian Workshop on Scientific Machine Learning (仮)

アジアを中心とした SciML についての国際ワークショップを企画中

- 毎年開催．2027年は日本，2028年は韓国の予定.
- 2027年4月，福岡で開催を企画.