

機械学習と偏微分方程式

非線形応用数理研究室 古屋貴士

現代社会における科学技術の発展は、自然現象や工学的プロセスを理解し、予測・制御するための理論と手法に支えられています。その中で特に重要な役割を果たすのがシミュレーションです。シミュレーションは、複雑な現象を数理モデルによって記述し、数値的に解くことで実現され、科学から産業に至る幅広い分野に応用されています。

しかしながら、多くの現象は非線形性や高次元性を伴うため、有限要素法など従来の手法では高精度な計算に膨大なコストが必要となります。そこで注目されているのが、機械学習を活用した計算効率化です。物理法則をニューラルネットワークに組み込む「Physics-informed Neural Networks (PINNs)」、あるいは「解作用素」そのものを学習する「Neural Operator」や「Deep Operator Network」といったアプローチが登場し、Scientific Machine Learning (SciML) と呼ばれる新しい研究分野を形成しています。さらに近年では、ChatGPT など大規模言語モデルに使われているトランスフォーマーも、解作用素を学習するモデルとして注目されています。

特にニューラル作用素は、初期条件・境界条件・領域といった入力から解を返す「解作用素」を直接学習できる点で画期的です(図 1 参照)。これは単なる一つの解を予測するのではなく、現象を支配する法則そのものを学習によって再構成するという、新しい枠組みを提供します。この「解作用素の学習」は、例えば、順問題では現在の状態から未来を予測(例: 台風の進路予測)、逆問題では望ましい状態を得るための条件を推定(例: 災害の予防や制御)といった応用に強力な基盤を与えることが期待されます。

私の研究室では、こうしたネットワークモデルの理論的・数学的解析に重点を置いています。数理科学と機械学習の接点から新しい原理を見出すことに、大きな意義を感じています。学生に対しては、必ずしも理論的テーマや SciML 分野に限定することなく、各自の興味に応じた課題設定を行っています。数学や機械学習を深く学び、研究に挑戦してみたい方は、ぜひ研究室で一緒に取り組んでいただければと思います。

