

# 物理情報を活用した 機械学習によるモデリング

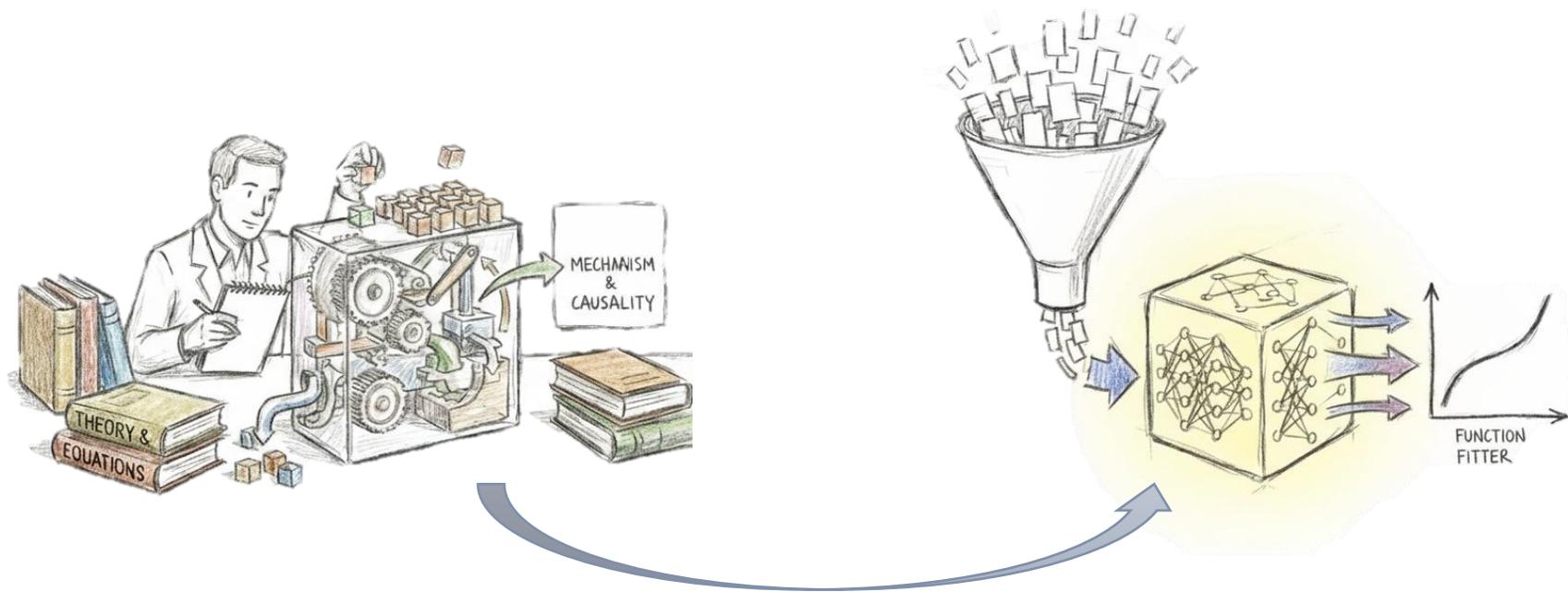
---

武石 直也 (東京大学)

2026-03-03

---

Many of the figures used in this presentation are reproduced from the cited papers. I do not own most of them.



## なぜ物理情報を活用したい？

- ~~気持ちの問題~~
- 必要な訓練データ量を抑える
- データを取得できない領域での挙動
- 物理的におかしくない予測

# 講演の内容

- 物理学的な事前知識を活用しつつ機械学習でデータに基づいてモデリングを行う方法について、方法論の立場から概観する
  - 物理知識に基づく ① 訓練データ、② モデル、③ 目的関数の設計

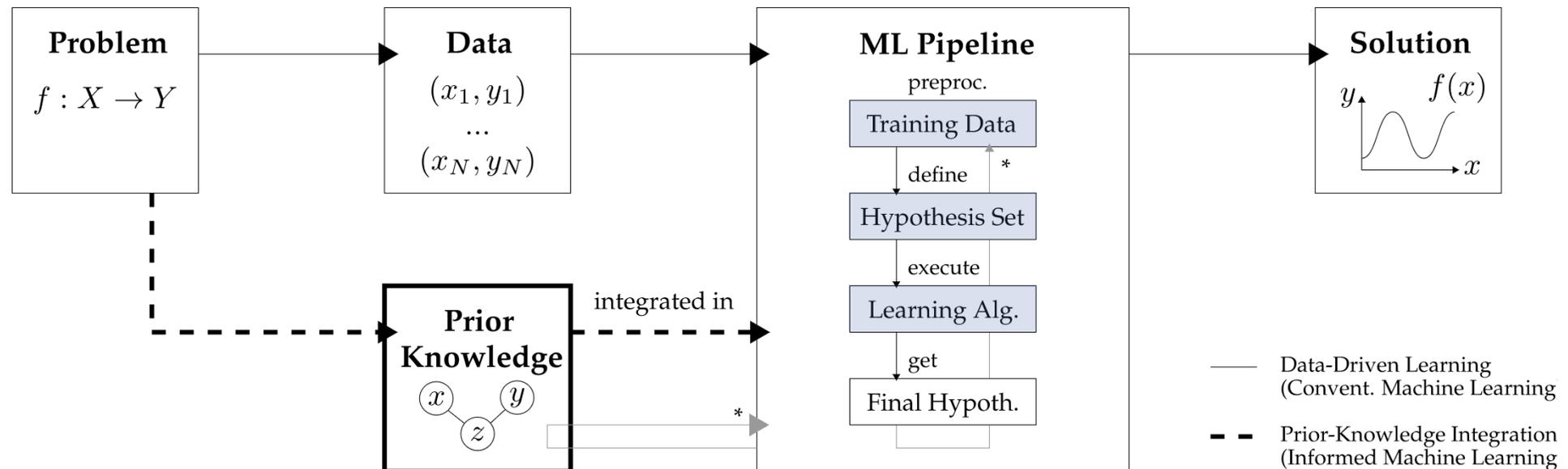


figure from [von Rueden+ 2023]

# 物理情報に基づく目的関数設計

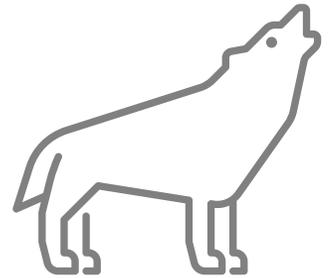
# 物理情報に基づく目的関数

- データ  $\{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$  と物理情報による制約  $R(x, y) = 0$  の両方を満たすように学習する

$$\text{minimize } \sum L(x, y) + \lambda R(x, y)$$

二乗誤差など

- 厳密に  $R(x, y) = 0$  を要請せず、ソフト制約として扱うことが多い
- 例
  - physics-informed neural nets (PINNs)
  - 制約付き生成モデル



# Physics-informed neural nets

- 偏微分方程式

$$\frac{\partial u(t, \mathbf{x})}{\partial t} - Lu(t, \mathbf{x}) = 0 \quad \text{for } t \in [0, T], \mathbf{x} \in \Omega$$



- 初期条件、境界条件

$$u(t_0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{for } \mathbf{x} \in \Omega$$

$$u(t, \mathbf{x}) = g(t, \mathbf{x}) \quad \text{for } t \in [0, T], \mathbf{x} \in \partial\Omega$$

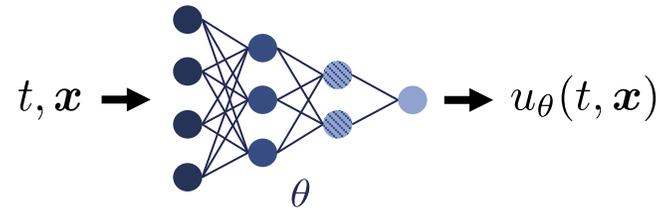
- 深層ニューラルネット  $u_\theta(t, \mathbf{x})$  で解  $u$  を表す [Raissi+ 2019; Sirignano+ 2018]

- メッシュフリーな表現ができる
- 微分方程式とデータの両方から情報を使える

# Physics-informed neural nets

- 深層ニューラルネット  $u_\theta(t, \mathbf{x})$  で解  $u$  を表す [Raissi+ 2019; Sirignano+ 2018]

↑  
学習すべきパラメタ



- 目的関数:

$$\begin{aligned} \underset{\theta}{\text{minimize}} \quad & \lambda_{\text{eq}} \sum_{t, \mathbf{x} \in [0, T] \times \Omega} \left\| \frac{\partial u_\theta(t, \mathbf{x})}{\partial t} - Lu_\theta(t, \mathbf{x}) \right\|^2 && \dots \text{微分方程式の残差} \\ & + \lambda_{\text{ic}} \sum_{\mathbf{x} \in \Omega} \|u_\theta(t_0, \mathbf{x}) - u_0(\mathbf{x})\|^2 && \dots \text{初期条件} \\ & + \lambda_{\text{bc}} \sum_{t, \mathbf{x} \in [0, T] \times \partial\Omega} \|u_\theta(t, \mathbf{x}) - g(t, \mathbf{x})\|^2 && \dots \text{境界条件} \\ & + \lambda_{\text{data}} \sum_{(t, \mathbf{x}, u) \in S} \|u_\theta(t, \mathbf{x}) - u\|^2 && \dots \text{データ} \end{aligned}$$

# PINNsの課題

- 最適化手法
  - lossを下げきるにはsecond-order
- 選点 (collocation points) の選び方
- 目的関数の各項の重み
- アーキテクチャ
  - ドメイン分割
  - ネットワーク構造 (MLP, CNN, Transformer, KAN, ...)
  - 活性化関数
- カリキュラム学習
- 不確かさ定量化

see, e.g., [Wang+ arXiv:2308.08468]

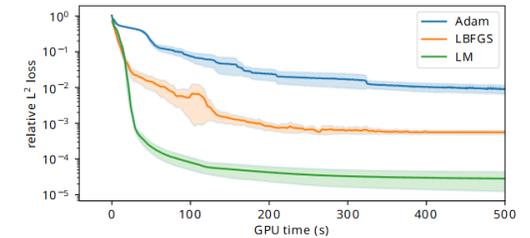


figure from [Bonfanti+ 2024]

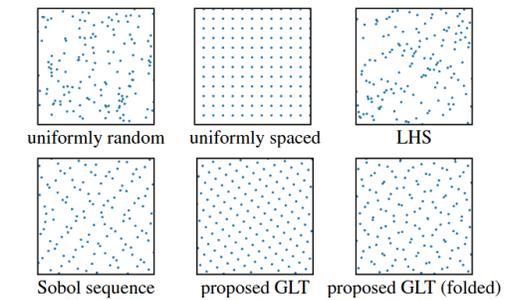


figure from [Matsubara & Yaguchi 2025]

# Diffusion models / flow matching

- データ分布  $\leftrightarrow$  ノイズ分布間の逐次的な変換を学習するタイプのモデル
- 柔軟な画像・軌道等の生成で強み

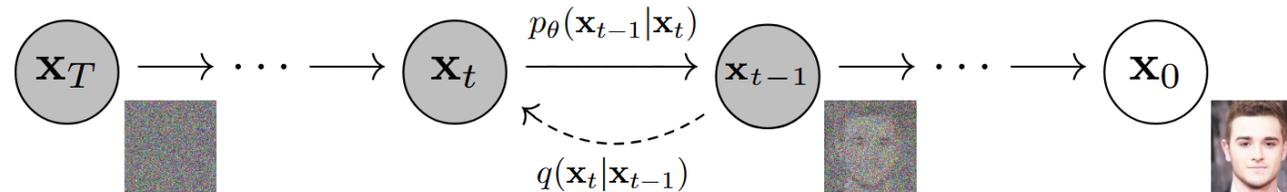


figure from [Ho+ 2020]

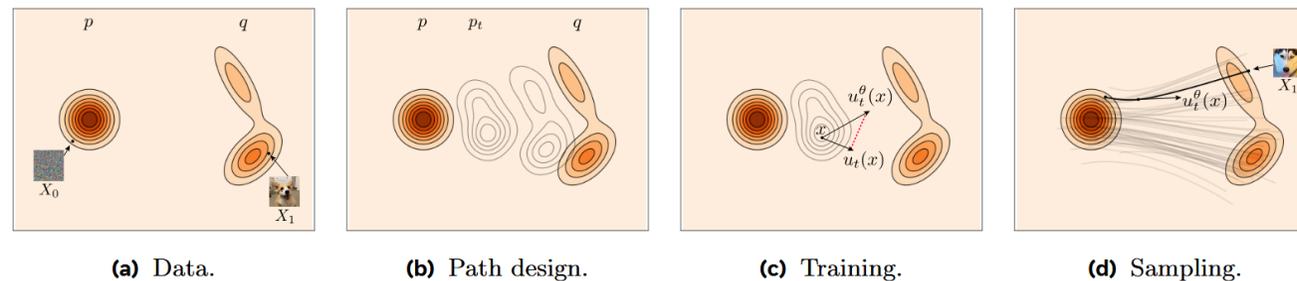


figure from Lipman+, Flow matching guide and code, arXiv:2412.06264

# 物理的な制約を満たすモデル学習

- シミュレータ出力に対して拡散モデルを学習しても、新しい生成結果が数理モデル（微分方程式など）を満たすとは限らない
- 最終的な生成結果が制約  $R(x) = 0$  を満たすよう正則化しながら学習

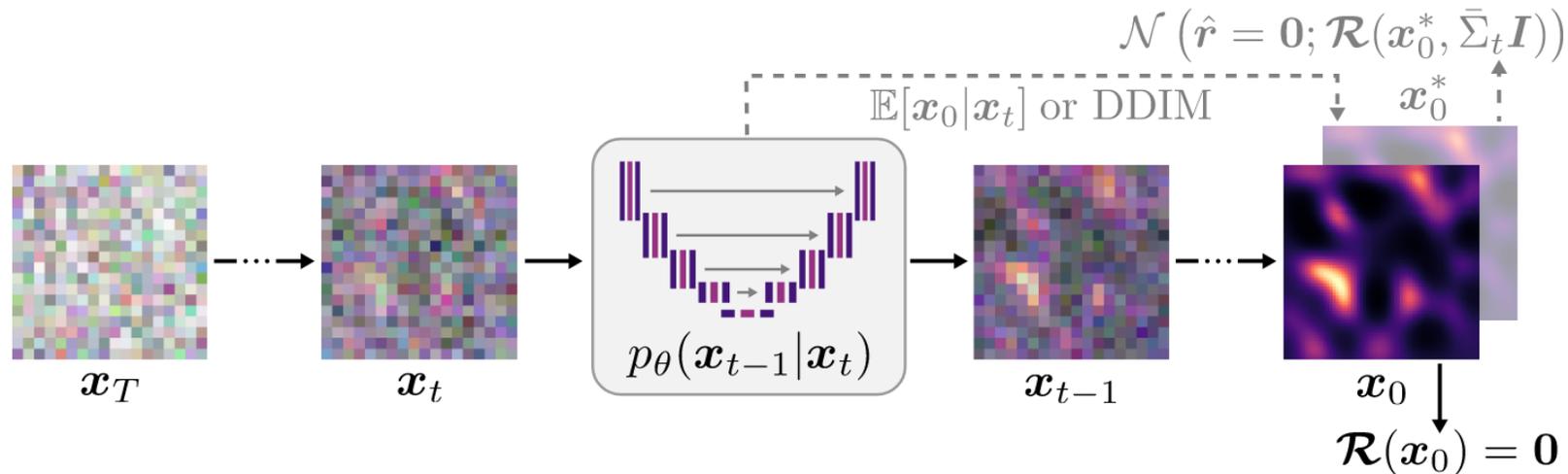


figure from [Bastek+ 2025]

# 物理的な制約を満たす生成プロセス

- まず、通常通り flow matching モデルを学習
- 物理的制約を満たすようサンプル生成; 各ステップ  $t = \tau$  で、
  - まず最終時刻  $t = 1$  まで生成する
  - 生成結果を制約を満たす集合  $R(x) = 0$  に (なるべく) 射影
    - Gauss-Newton法を1ステップだけ回す
  - フローを逆向きにたどって  $t = \tau + \Delta t$  に戻る

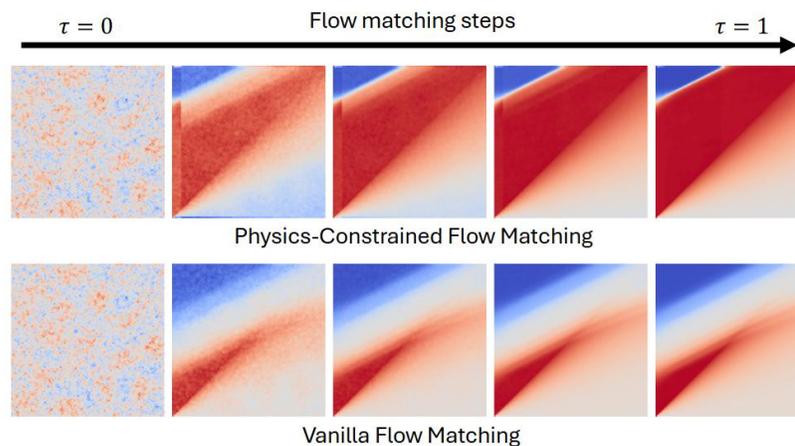


figure from [Utkarsh+ 2025]

# 物理情報に基づく訓練データ設計

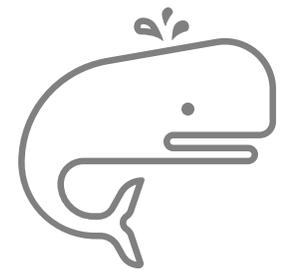
# 物理情報に基づく訓練データ

- シミュレータ  $y = f(x)$  を使って訓練データ

$$\{(x_1, y_1 = f(x_1)), \dots, (x_n, y_n = f(x_n))\}$$

を生成

- 訓練データを介して、シミュレータからの情報が間接的に学習される
- 例
  - 解作用素の学習 (neural operators)
  - 機械学習による逆問題解法 (simulation-based inference)



# (解)作用素の学習

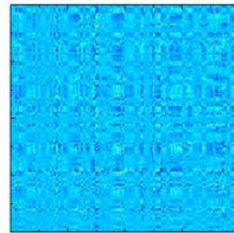
- 例えば「初期条件  $\rightarrow$  時刻  $t$  での解」の作用素を学習

- 他の関数ペアでもよい

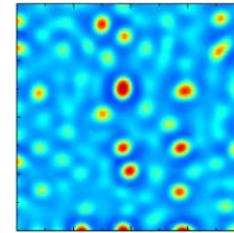
[e.g., Li+ 2021; Kovachki+ 2023; Lu+ 2021]

- データは数値計算で作る

- 関数から関数への写像をニューラルネットで表現



$$u(0, \mathbf{x}) = a(\mathbf{x})$$



$$u(t, \mathbf{x})$$

[Huboedeker, wikimedia commons](#)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(t, \mathbf{x})}{\partial t} - Lu(t, \mathbf{x}) &= 0 \quad \text{for } t \in [0, T], \mathbf{x} \in \Omega \\ u(0, \mathbf{x}) &= a(\mathbf{x}) \quad \text{for } \mathbf{x} \in \Omega \end{aligned}$$

# Fourier neural operators [Li+ 2021]

- 入力関数から出力関数へのmapを複数のkernel integral operatorsで表す

$$v_{i+1}(y) = \sigma \left( \int K^{(i)}(x, y) v_i(x) dx + b^{(i)}(y) \right)$$

- translation-invariant kernel  $K^{(i)}(x, y) = k^{(i)}(x, y)$  を使って、積分をFFT+畳み込みで高速に計算できるようにする

$$v_{i+1} = \sigma \left( W_i v_i + \mathcal{F}^{-1} (R_i \cdot \mathcal{F}(v_i)) + b_i \right)$$

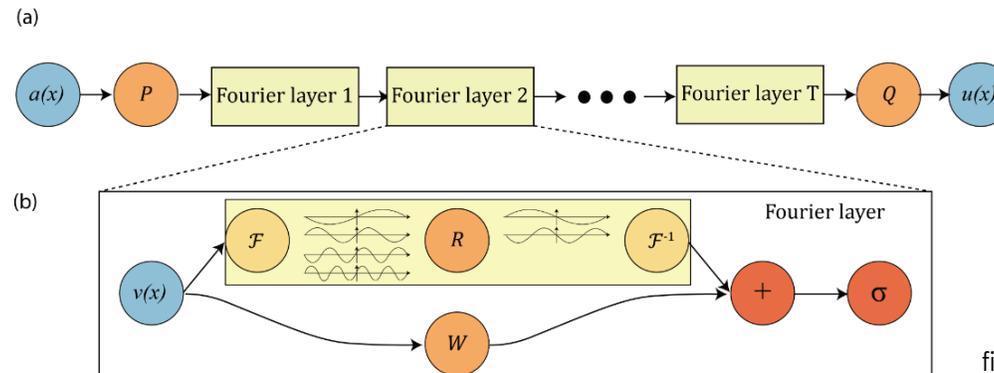


figure from [Li+ 2021]

# DeepONet [Lu+ 2021]

- Branch net: 入力関数の評価点  $x_1, \dots, x_m$  での値をencode
  - $b_1(u(x_1), \dots, u(x_m)), \dots, b_p(u(x_1), \dots, u(x_m)))$  の  $p$  次元の潜在表現ができる
- Trunk net: ↑潜在表現を出力関数の評価点  $y$  についてdecode

**Theorem 1 (Universal Approximation Theorem for Operator).** Suppose that  $\sigma$  is a continuous non-polynomial function,  $X$  is a Banach Space,  $K_1 \subset X$ ,  $K_2 \subset \mathbb{R}^d$  are two compact sets in  $X$  and  $\mathbb{R}^d$ , respectively,  $V$  is a compact set in  $C(K_1)$ ,  $G$  is a nonlinear continuous operator, which maps  $V$  into  $C(K_2)$ . Then for any  $\epsilon > 0$ , there are positive integers  $n, p, m$ , constants  $c_i^k, \xi_{ij}^k, \theta_i^k, \zeta_k \in \mathbb{R}$ ,  $w_k \in \mathbb{R}^d$ ,  $x_j \in K_1$ ,  $i = 1, \dots, n$ ,  $k = 1, \dots, p$ ,  $j = 1, \dots, m$ , such that

$$\left| G(u)(y) - \sum_{k=1}^p \sum_{i=1}^n c_i^k \sigma \left( \underbrace{\sum_{j=1}^m \xi_{ij}^k u(x_j) + \theta_i^k}_{\text{branch}} \right) \underbrace{\sigma(w_k \cdot y + \zeta_k)}_{\text{trunk}} \right| < \epsilon \quad (1)$$

holds for all  $u \in V$  and  $y \in K_2$ .

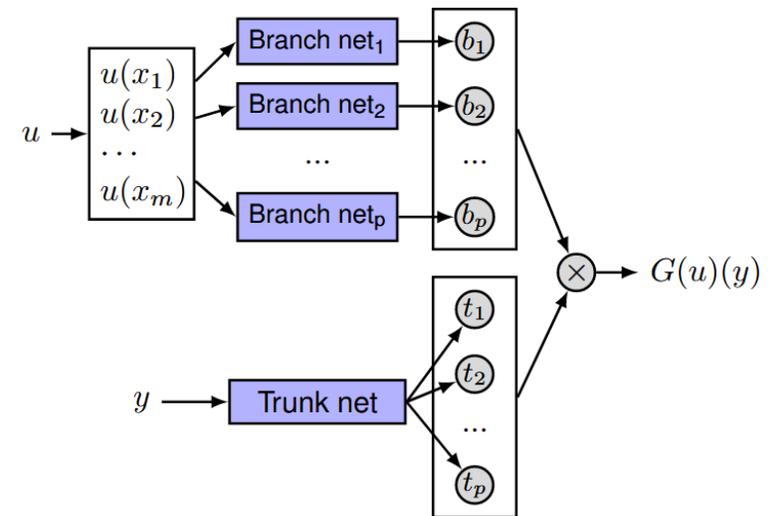
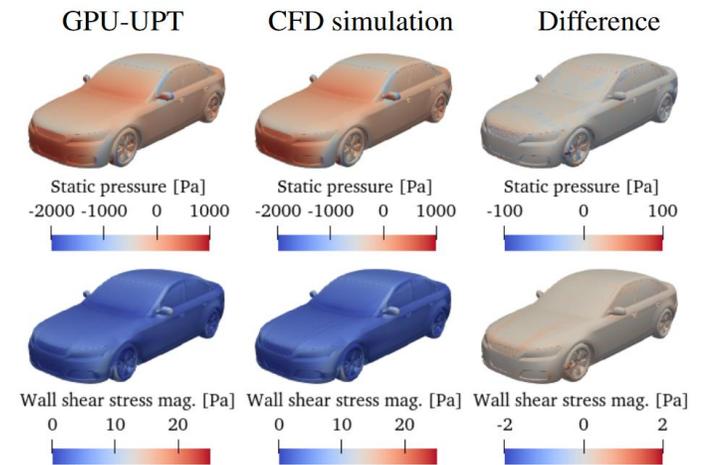
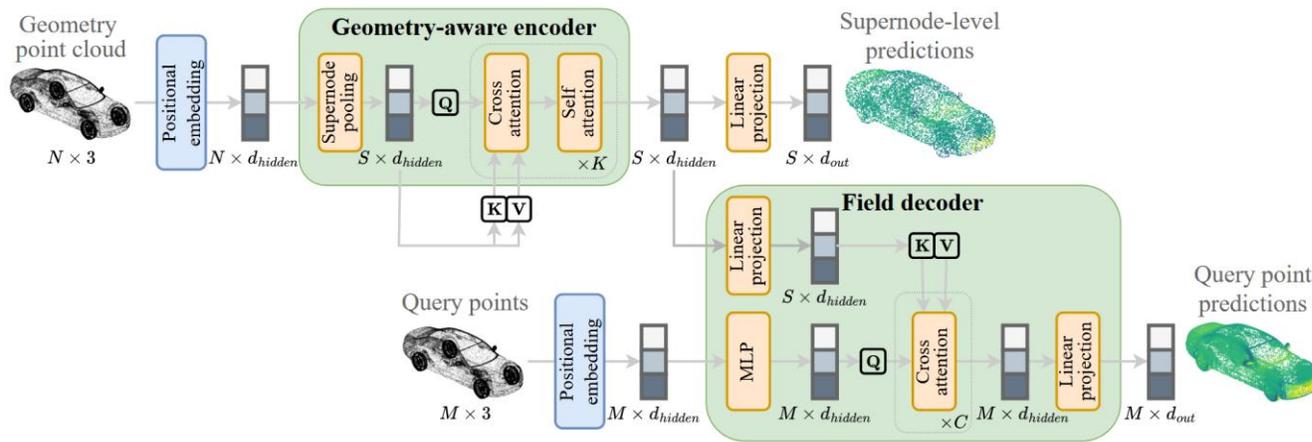


figure from [Lu+ 2021]

# 最近の展開

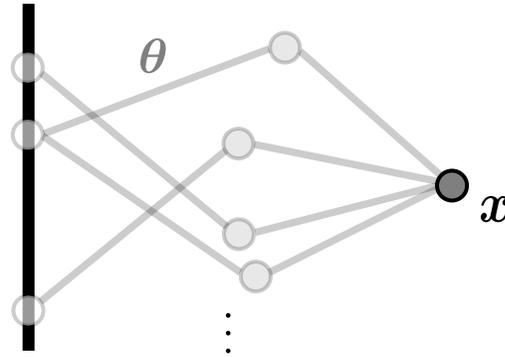
- 複雑な形状まわりの流れ場を予測 [Bleeker+ 2025]
  - 形状を点群で表現する
  - Transformerベースのアーキテクチャ



figures from [Bleeker+ 2025]

# 逆問題、特に劣決定な逆問題

- ある観測  $x$  を実現するパラメタ  $\theta$  がいくつもある (無数に) ある

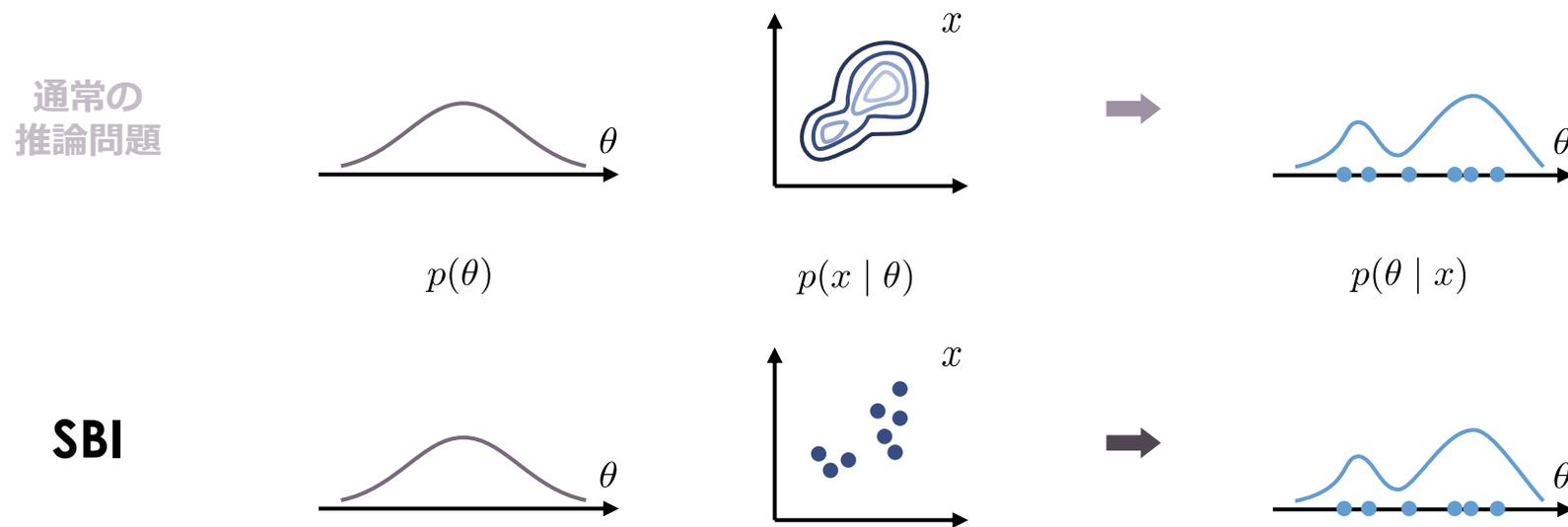


- 正則化 何らかの規準  $g(\theta)$  を設定して、「好ましい」  $\theta$  を選択
- **ベイズ推論** 事前分布  $p(\theta)$  を設定して、事後分布  $p(\theta | x)$  を推論

$$p(\theta | x) = \frac{p(x | \theta)p(\theta)}{p(x)}$$

# Simulation-based inference

- 尤度関数  $p(x | \theta)$  の値を計算せず、事後分布  $p(\theta | x)$  を推論する問題
  - 「尤度なし推論 (likelihood-free inference)」 または「シミュレーションに基づく推論 (simulation-based inference; **SBI**)」



# 深層学習によるSBI: 事後分布を直接学習 (NPE)

- 観測  $x_o$  が与えられたとき、事後分布  $p(\theta | x = x_o)$  (からのサンプル) を得たい
- Neural posterior estimation (NPE)

**Input** 事前分布, シミュレータ

**Output** ニューラルネットによる事後分布の近似  $q_\phi(\theta | x)$

- 1  $i = 1, \dots, N$  について、
- 2 事前分布とシミュレータから、 $(\theta_i, x_i)$  を生成して保存
- 3 保存した  $\{(\theta, x)\}$  から、事後分布  $q_\phi(\theta | x)$  (normalizing flowsなど) を学習

基本的には  
一度だけ実行



**Input** 観測  $x_o$ , 近似した事後分布  $q_\phi(\theta | x)$

**Output** 事後分布の評価値  $q(\theta | x = x_o)$

- 1  $q(\theta | x = x_o)$  を計算

# 深層学習によるSBIの利点

- 深層生成モデルで複雑な事後分布を表現できる
  - normalizing flow, diffusion model, flow matching, ...
- シミュレーションの実行は、基本的にはデータ生成時のみに起こる
  - 新たな観測に対する事後分布推論は、NNの実行だけ
  - 新たな観測に対してデータ生成とモデル訓練を都度行う方法もある (sequential SBI)
- ちなみに: PINNも逆問題に使える
  - 実際、多くの研究でPINNによる「逆問題」が扱われている
  - neural likelihood estimationの特殊な場合といえる
  - PINNに未知パラメタも入力して、同時に推定／後から最適化

# SBIの応用例

- 物体把持のためのロボット姿勢推論 [Marlier+ arXiv:2109.14275]
  - デプス画像を入力して、物体把持するためのアームの位置姿勢（の分布）を出力
  - シミュレーションでランダムにアームを動かして成功した例をデータとして保存
  - domain randomziation

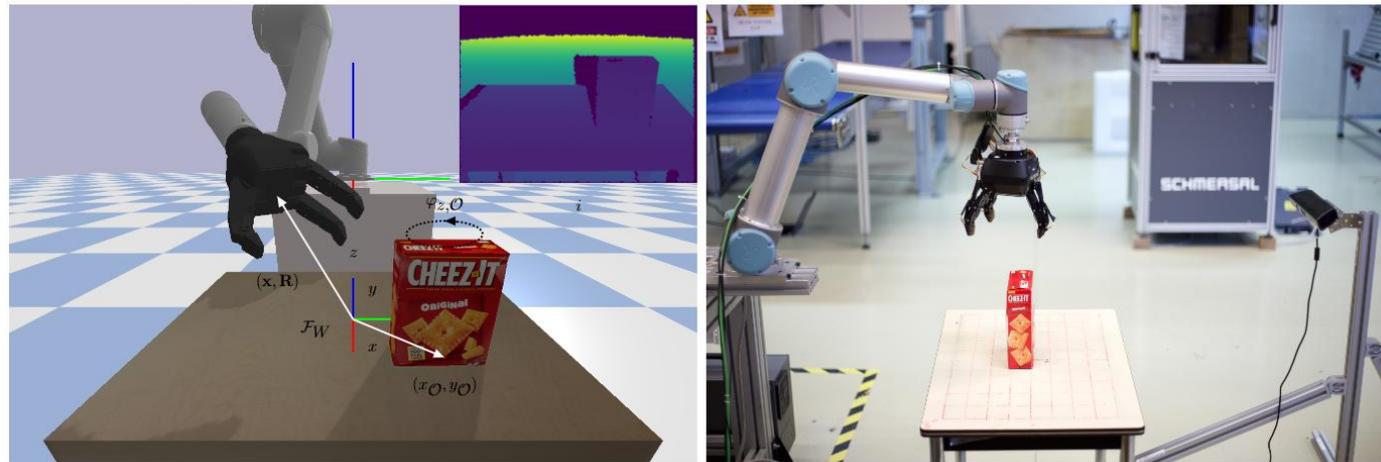


figure from [Marlier+ arXiv:2109.14275]

# SBIの応用例

- diffusion modelベースの状態量推定による全球の気象再解析

[Andry+, arXiv:2504.18720]

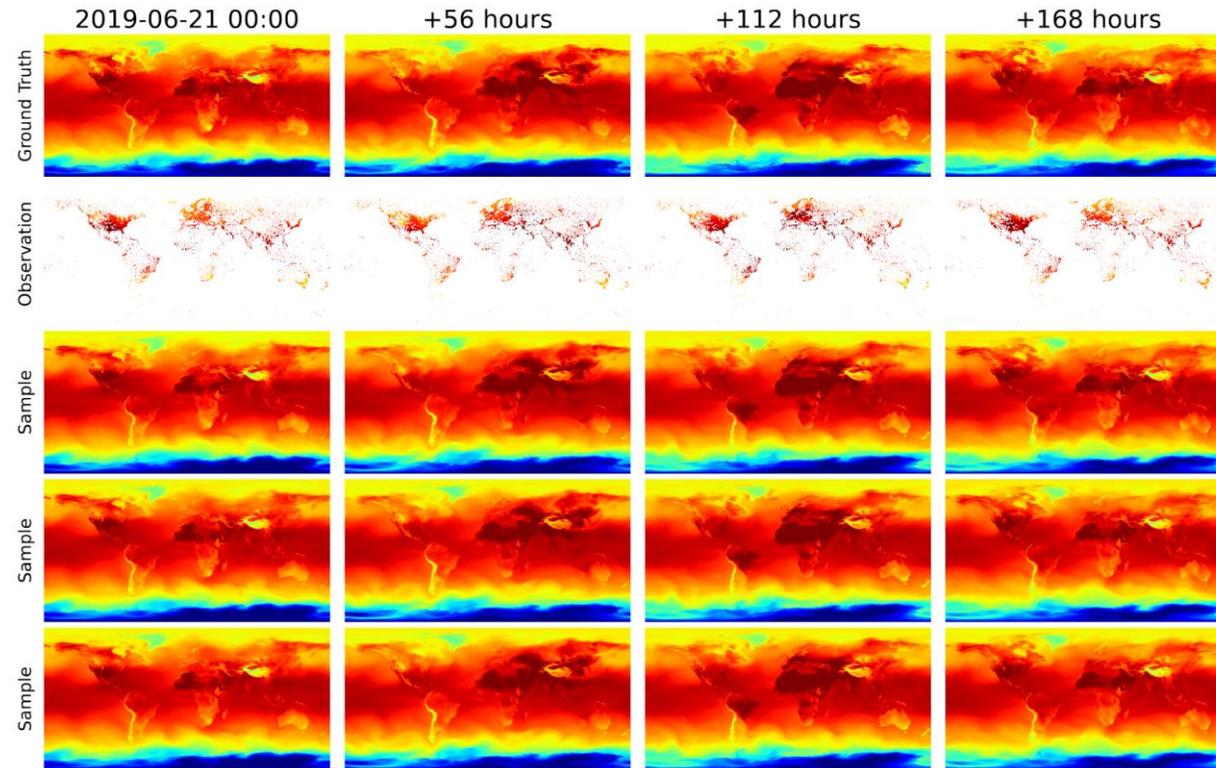


figure from [Andry+ arXiv:2504.18720]

# 物理情報に基づくモデル

# 物理情報に基づくモデル

## ■ 機械学習モデル

(ニューラルネット, 決定木, カーネル法, ...)

- 大量のパラメタをもつことがある
- 同質かつ多量のデータが必要
- 実際のデータに適応できる
- 解釈しにくい

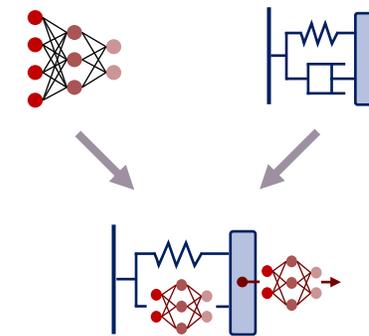
## ■ 科学モデル

(微分方程式, 数値計算, グラフ, 論理式, ...)

- 少数のパラメタで表現される (べき)
- 多様な少量のデータの蓄積
- 抽象化・理想化のために  
実際のデータと合わないことがある
- 理解に貢献

## ■ 両者の「良いところ取り」ができないか？

- 予測をよりよく
- 解釈しやすく
- 融合の程度は様々
  - ・ 「物理で出てくる構造っぽいを使う」から  
「具体的な微分方程式を使う」まで



# Hamiltonian neural networks [Greydanus+ 2019]

- ハミルトニアンをニューラルネットで構成

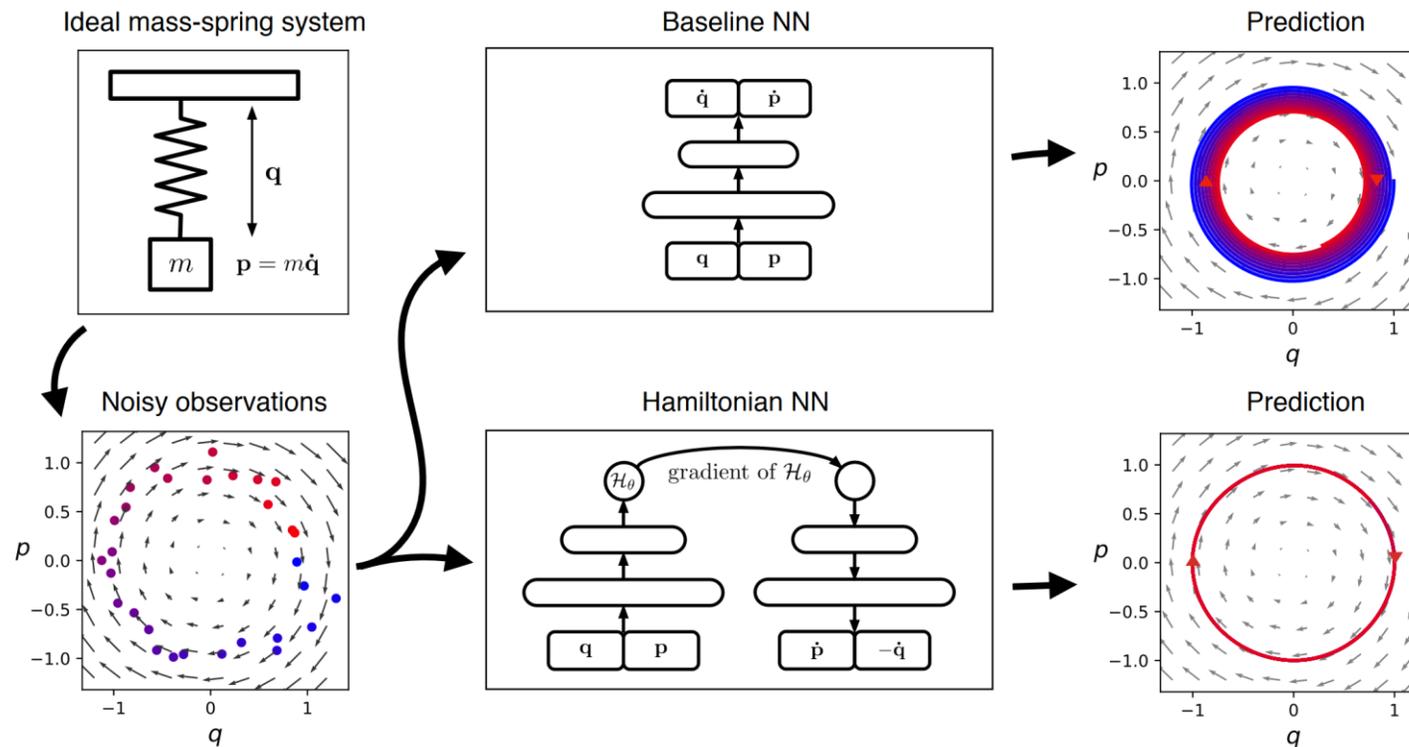


figure from [Greydanus+ 2019]

# COVID-19 感染者数予測 [Arik+ 2020]

- SIRモデルの係数を移動者数などの統計データから予測

$$\begin{aligned}
 S[t] &= S[t-1] - (\beta^{(d)} \cdot I^{(d)}[t-1] + \beta^{(u)} \cdot I^{(u)}[t-1]) \cdot S[t-1] / N[t-1] + \eta \cdot (R^{(d)}[t-1] + R^{(u)}[t-1]), \\
 E[t] &= E[t-1] + (\beta^{(d)} \cdot I^{(d)}[t-1] + \beta^{(u)} \cdot I^{(u)}[t-1]) \cdot S[t-1] / N[t-1] - \alpha \cdot E[t-1], \\
 I^{(u)}[t] &= I^{(u)}[t-1] + \alpha \cdot E[t-1] - (\rho^{(I,u)} + \gamma) \cdot I^{(u)}[t-1], \\
 I^{(d)}[t] &= I^{(d)}[t-1] + \gamma \cdot I^{(u)}[t-1] - (\rho^{(I,d)} + \kappa^{(I,d)} + h) \cdot I^{(d)}[t-1], \\
 R^{(u)}[t] &= R^{(u)}[t-1] + \rho^{(I,u)} \cdot I^{(u)}[t-1] - \eta \cdot R^{(u)}[t-1], \\
 R^{(d)}[t] &= R^{(d)}[t-1] + \rho^{(I,d)} \cdot I^{(d)}[t-1] + \rho^{(H)} \cdot (H[t-1] - C[t-1]) - \eta \cdot R^{(d)}[t-1], \\
 H[t] &= H[t-1] + h \cdot I^{(d)}[t-1] - (\kappa^{(H)} + \rho^{(H)}) \cdot (H[t-1] - C[t-1]) - \kappa^{(C)} \cdot (C[t-1] - V[t-1]) - \kappa^{(V)} \cdot V[t-1], \\
 C[t] &= C[t-1] + c \cdot (H[t-1] - C[t-1]) - (\kappa^{(C)} + \rho^{(C)} + v) \cdot (C[t-1] - V[t-1]) - \kappa^{(V)} \cdot V[t-1], \\
 V[t] &= V[t-1] + v \cdot (C[t-1] - V[t-1]) - (\kappa^{(V)} + \rho^{(V)}) \cdot V[t-1], \\
 D[t] &= D[t-1] + \kappa^{(V)} \cdot V[t-1] + \kappa^{(C)} \cdot (C[t-1] - V[t-1]) + \kappa^{(H)} \cdot (H[t-1] - C[t-1]) + \kappa^{(I,d)} \cdot I^{(d)}[t-1],
 \end{aligned}$$

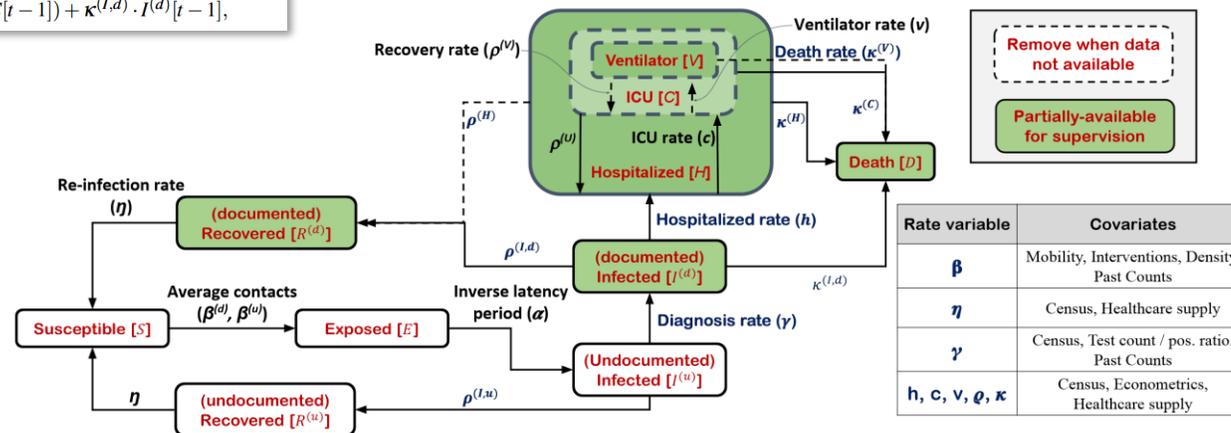
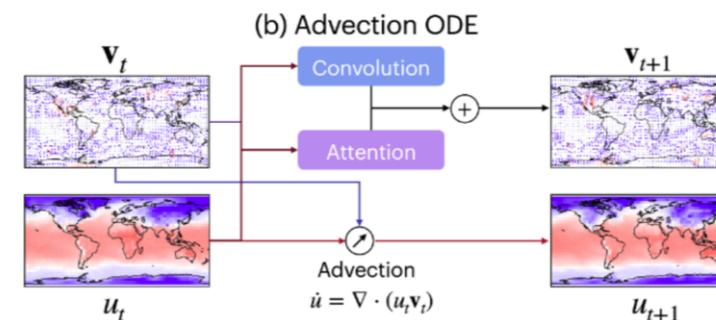
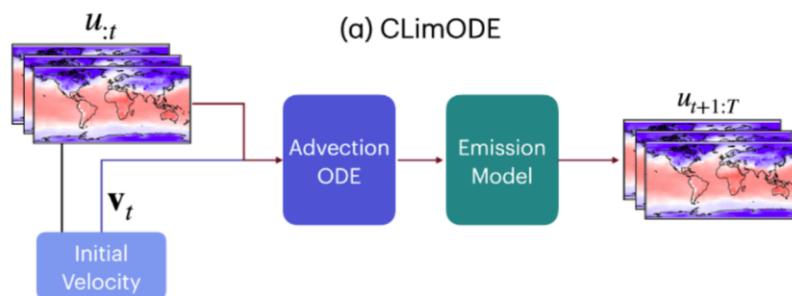
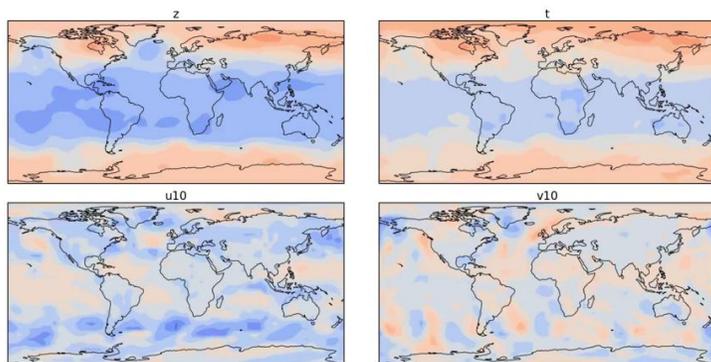


figure from [Arik+ 2020]

- 予測値が移流方程式に従うNN



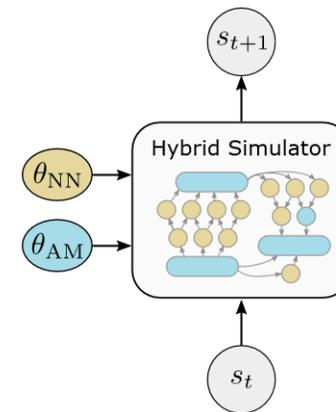
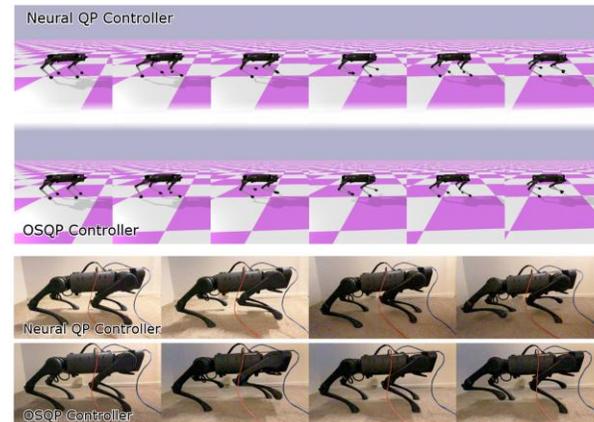
figures from [Verma+ 2024]



video from the project page of [Verma+ 2024]  
<https://yogeshverma1998.github.io/ClimODE/>

# 接触などのある剛体シミュレーション

- ロボットなどのシミュレーションでは、接触判定、摩擦力、空気力などの精緻な再現が難しい
  - 難しい部分は機械学習でデータから獲得  
[Ajay+ 2018; Hwangbo+ 2019; Zeng+ 2019; Golemo+ 2018; Heiden+ 2021]



figures from [Heiden+ 2021]

Ajay+, Augmenting Physical Simulators with Stochastic Neural Networks: Case Study of Planar Pushing and Bouncing, IROS 2018

Hwangbo+, Learning Agile and Dynamic Motor Skills for Legged Robots, Science Robotics, 2019

Zeng+, TossingBot: Learning to Throw Arbitrary Objects with Residual Physics, RSS 2019

Golemo+, Sim-to-Real Transfer with Neural-Augmented Robot Simulation, CoRL 2018

Heiden+, NeuralSim: Augmenting Differentiable Simulators with Neural Networks, ICRA 2021

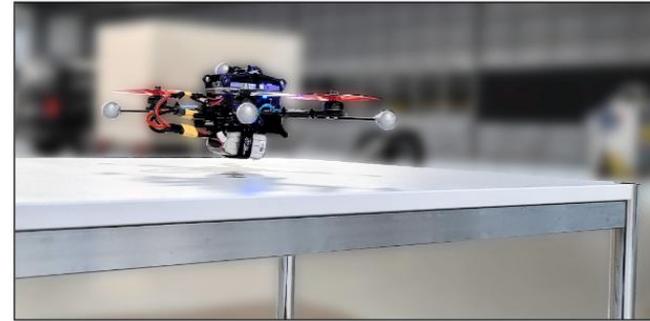
# クワッドロータのモデリング

- 剛体運動の運動方程式 + 空気力を予測する機械学習モデル

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = f_{\mathcal{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + f_{\mathcal{D}}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$$

$$f_{\mathcal{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} v_W \\ \mathbf{q}_{WB} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\omega}_B/2 \end{bmatrix} \\ \frac{1}{m} \mathbf{q}_{WB} \odot \mathbf{T}_B + \mathbf{g}_W \\ \mathbf{J}^{-1} (\boldsymbol{\tau}_B - \boldsymbol{\omega}_B \times \mathbf{J} \boldsymbol{\omega}_B) \end{bmatrix}$$

$$f_{\mathcal{D}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_2 \\ f_{\mathcal{D}_\theta}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ f_{\mathcal{D}_\psi}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \end{bmatrix}$$



(a)

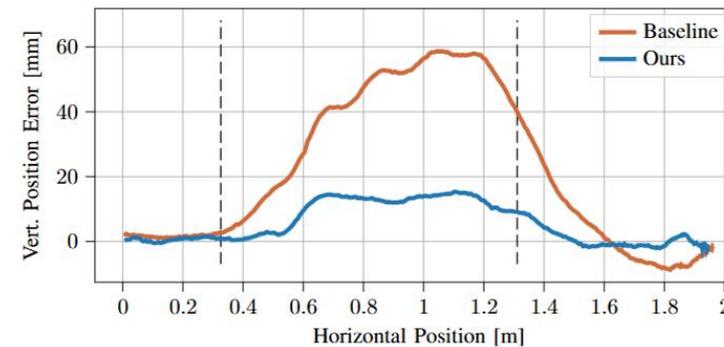
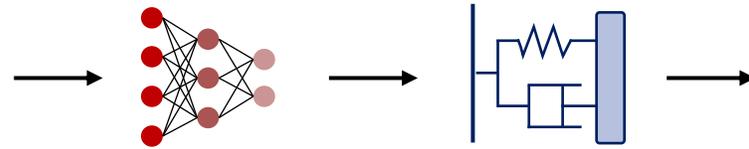


figure from [Saltzman+ 2023]

# ハイブリッドモデルの作り方

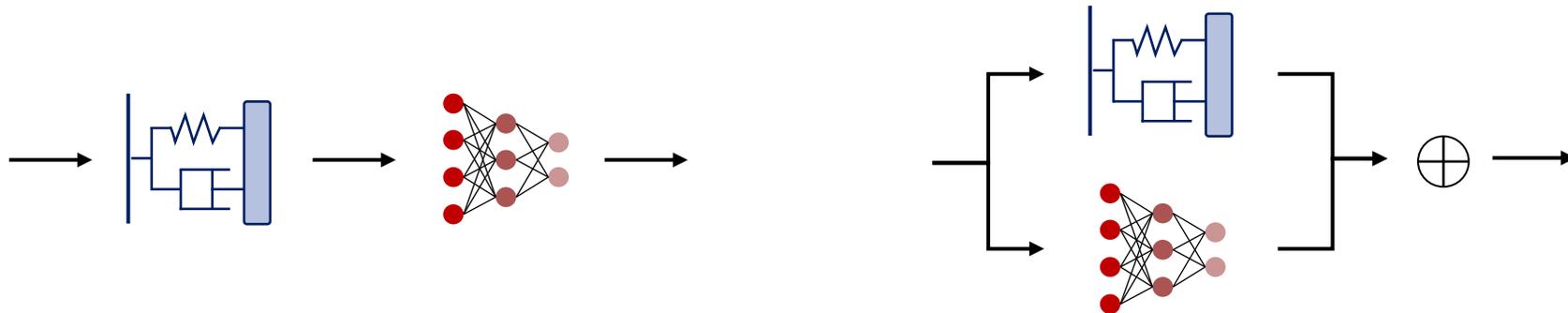
- 科学モデルが「後 / 外側」

- 機械学習による feature extraction / parametrization / submodel / ...



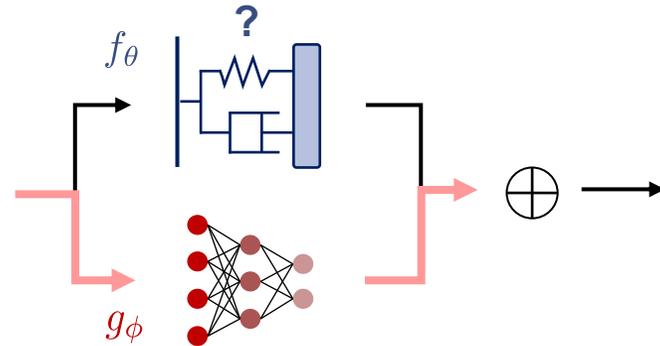
- 科学モデルが「先 / 内側」

- 機械学習による closure / residual physics / discrepancy modeling [Kaheman+ 2019]  
 $\Delta$ -ML [Ramakrishnan+ 2015] / ...



# 科学モデルの未知パラメータ推定

- 機械学習モデルが「外」にあるとき、科学モデルの未知パラメータがうまく推定できない可能性
  - 機械学習モデルだけでデータにフィットできてしまう



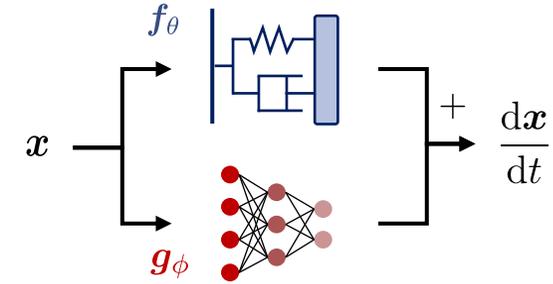
- 例えば、  $y = f_\theta(x) + g_\phi(x)$ 
  - $g_\phi(x)$  が  $y - f_\theta(x)$  にフィットして、 $\theta$  はなんでも良い、となってしまう
  - $g_\phi(x)$  の過剰な表現力を抑えるべき

# 制約 / 正則化によるハイブリッドモデル学習 1/2

- 加法的ハイブリッドモデルの学習 [Yin+ 2021]

- 特に、ハイブリッドな neural ODE:

$$\frac{dx}{dt} = f_{\theta}(x) + g_{\phi}(x) \quad \dots (*)$$



- 機械学習モデル  $g_{\phi}$  のノルムがなるべく小さくなるように学習

$$\underset{\theta, \phi}{\text{minimize}} \quad \|g_{\phi}\| \quad \text{s.t.} \quad \forall \mathbf{X} \in \mathcal{D}, \mathbf{X} = \text{ODESolve}(\star)$$

訓練データ (pointing to  $\mathcal{D}$ )

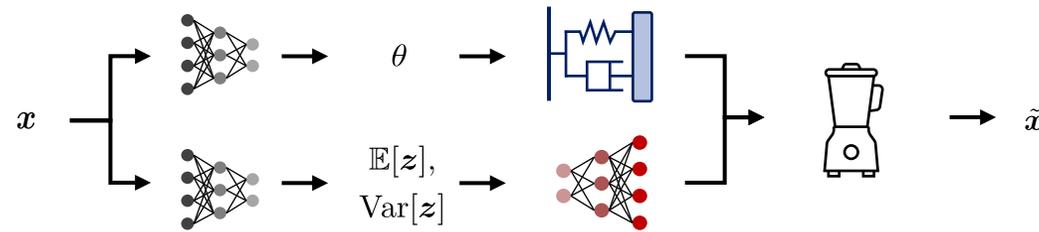
訓練データ中のエピソード (pointing to  $\mathcal{D}$ )

初期値問題ソルバ (初期値は所与としたり、推定したり) (pointing to  $\text{ODESolve}(\star)$ )

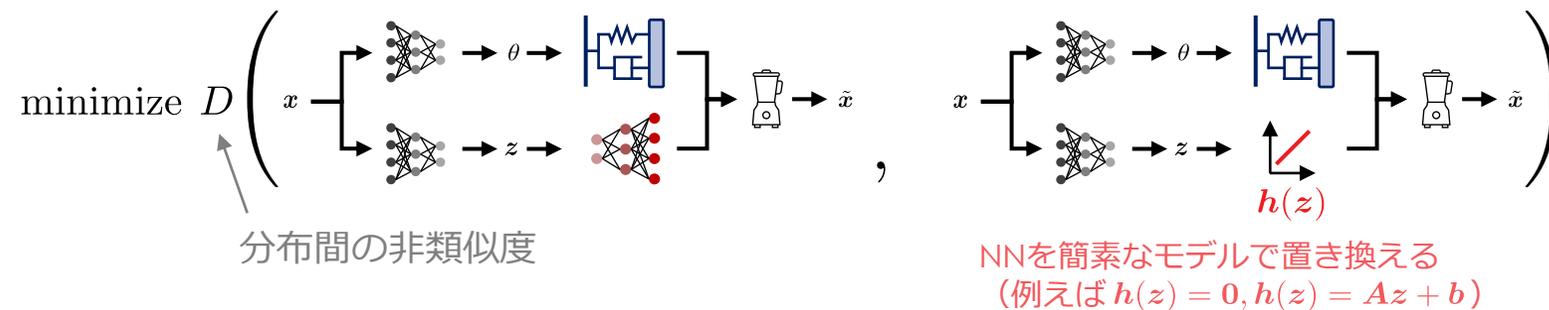
- 拡張ラグランジュ法で解く
- 関数ノルムで「表現力」をあらわすという考え方；自然だが、本当にそれだけか？

# 制約 / 正則化によるハイブリッドモデル学習 2/2

- より一般の結合方法を想定 [Takeishi & Kalousis 2021]
  - 特に、デコーダ部分がハイブリッドな(変分)オートエンコーダ



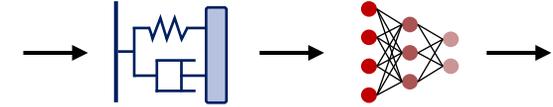
- ハイブリッドモデルと「科学モデルだけの場合」の差を小さくなるよう正則化



# sharpness-aware minimizationによる学習

- 一般のハイブリッドモデル

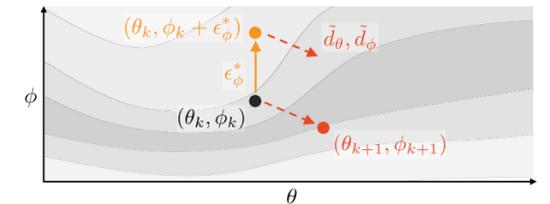
$$y = g_\phi(f_\theta(x); x)$$



の学習

- 損失関数が  $\phi$  についてなるべく平坦な局所解を探す [Takeishi arXiv:2602.06837]

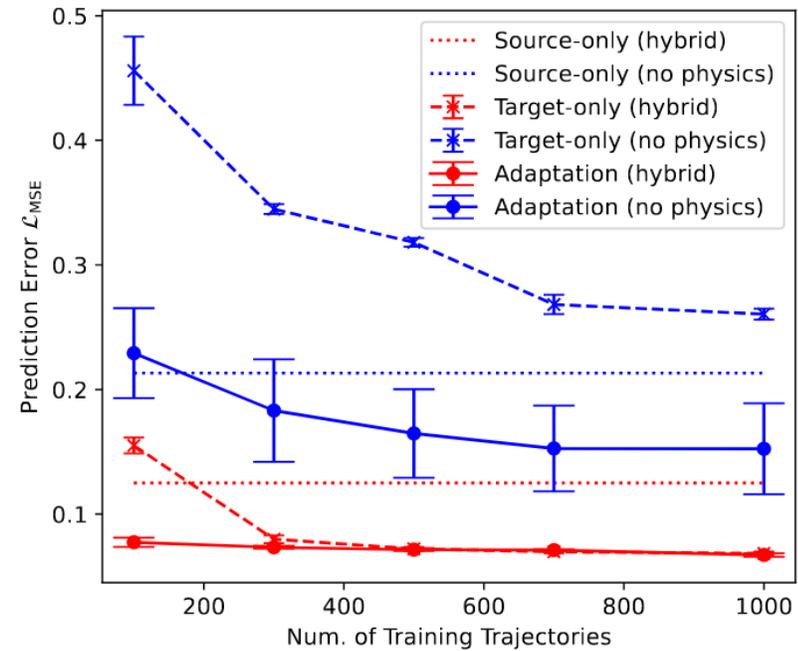
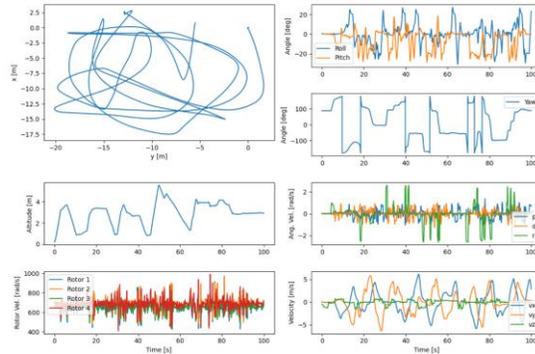
- 損失が平坦 = パラメタの表現に必要な情報量が少ない  
= その意味でモデルがシンプル [Hochreiter & Schmidhuber 1997]
- sharpness-aware minimization [Foret+ 2021] を使う



- 普通に学習するより  $\theta$  をあてやすい
- モデル構造によらず適用可能

# クワッドロータのモデリング 再び

- 通常のNNよりハイブリッドモデルのほうが転移学習の設定でも有利



# まとめ

- **物理学的な事前知識**を活用しつつ**機械学習**でデータに基づいてモデリングを行う方法について、方法論の立場から概観する
  - 物理知識に基づく ① **訓練データ**、② **モデル**、③ **目的関数** の設計

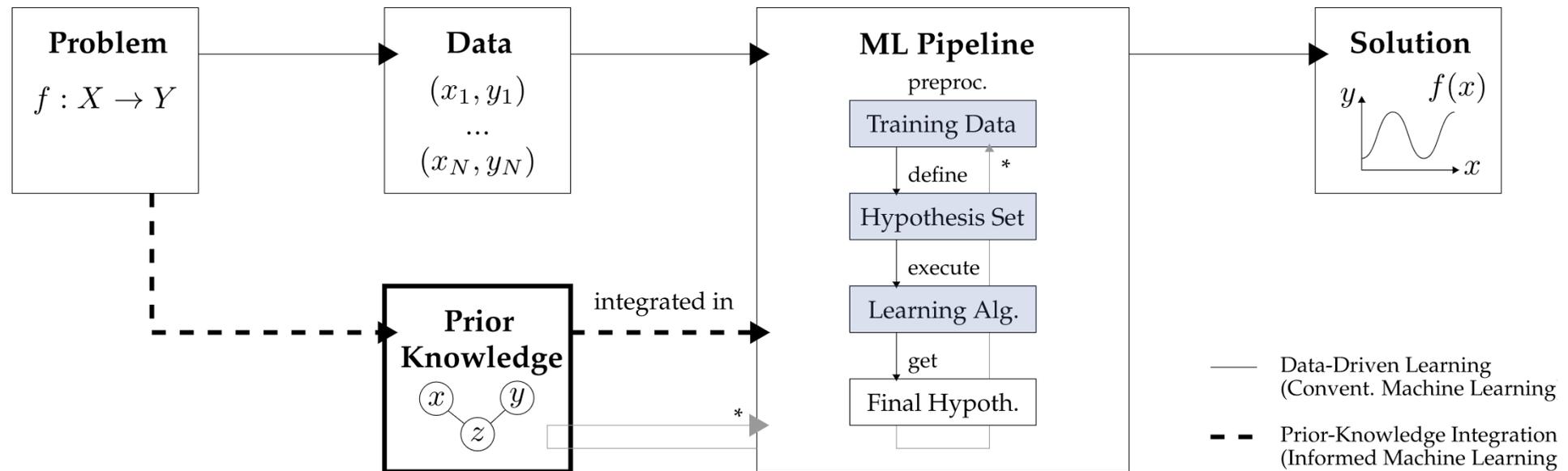


figure from [von Rueden+ 2023]