

論文審査の結果の要旨

氏名 石川 文啓

近年、機械学習の技術が大きく発展し、基礎研究への応用も精力的に研究されている。中でもニューラルネットワークと呼ばれる技術が大きな成果を上げ、物理学の分野でも、データからモデルや物理概念を自動的に抽出する試みなど、様々な応用が報告され始めている。これらのアプローチは非常に強力なものとして期待されているが、まだ発展途上である。そのような状況のもとで、本論文は、これまで困難とされてきた古典的な可積分系の探索を、ニューラルネットワークを用いて行うための手法を提案したものである。

本論文は5章およびアペンディックス A-C よりなる。

第1章はイントロダクションである。機械学習の歴史的発展を概観したのち、本論文が目標とする古典可積分系の探索が、これまでどのようにして行われてきたかを説明し、最後にニューラルネットワークを用いてこれまでと全く異なる手順により古典可積分系を探索するという本論文の目的を述べている。

第2章では、古典可積分系に関する説明と、先行研究の紹介を行なっている。初めにハミルトン形式による力学系の記述と正準変換の一般論について述べた後、古典可積分系の定義、可積分系を特徴づける作用角変数、運動の第一積分を構成するために以前から用いられてきたラックス対の解を仮定する手法を説明する。続いて多体古典可積分系の実例として、戸田格子とカロジェロ・モザー系を紹介している。

第3章では、本論文で用いられる人工ニューラルネットワークについて説明している。初めにニューラルネットワークの一般論について説明した後、先行研究で提案された、**Normalizing flow** と呼ばれるニューラルネットワークをもちいた正準変換の記述法と、アジョイント法を用いて変数の時間微分を計算し、運動方程式を積分する手法を説明している。この手法を用いた数値積分は、本論文第4章で用いられる。本章ではさらに、ニューラルネットワークを力学系に適用した先行研究として、物理変数の時間発展データを学習データとして、系のノーマルモードへの正準変換や系のハミルトニアンを記述するニューラルネットを求めた例を紹介している。

第4章は、ニューラルネットワークを用いた古典可積分系の探索について述べた章であり、本論文の研究成果にあたる部分である。先行研究では、ラックス対の解や運動方程式の解を仮定して可積分系を探索するという手法がとら

れてきたが、本論文ではその代わりに、作用角変数で記述された還元ハミルトニアンを仮定し、そこから逆に運動項とポテンシャル関数からなる自然なハミルトニアンを求めるという戦略を取る。すなわち、仮定した還元ハミルトニアンから古典的な積分可能性を示すポテンシャル関数を得るため、ニューラルネットワークを用いて作用角変数とポテンシャル関数の正準変換を構築することとし、そのために必要な計算手順とニューラルネットワークの学習に用いる損失関数を検討している。これらの損失関数は、系の運動に伴って作用角変数、エネルギー、統計的な性質が保存されることを保証するために用いるものである。本論文では4つの具体的表式について性能評価を行ない、適切な組み合わせを提案している。次に、このようにして得られた可積分系の探索に適した損失関数と適切に構成されたニューラルネットワークを、既知の古典可積分系である戸田格子に適用し、得られたニューラルネットワークを解析することで、自然なハミルトニアンと正準変換を見出すことに成功している。また、別の極めて簡単な還元ハミルトニアンを仮定し、そこから自然なハミルトニアンを得ることに成功している。結果的に、こうして得られたポテンシャルは新規なものではなかったが、本論文で提案した手法の有効性を示す一例となった。

第5章では本論文の結果の要約と、将来展望が述べられている。

またそれに続くアペンディックスの A では、アジョイント法とシンプレクティック積分を用いた時間発展計算法について、B では標準的な可積分系で用いられる式変形について、C ではハミルトニアンモンテカルロ法でボルツマン分布を実現する手法を、本論文で取り扱う戸田格子の例について詳述している。

以上のように、本論文では従来では難しいと考えられていた古典可積分系の探索を、ニューラルネットを用いて実現する手法を提案したもので、これは物理学における機械学習の新しい応用の道を切り拓き、物性物理学の発展に寄与する成果である。また、本研究は藤堂眞治氏、諏訪秀麿氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって立案、実施したもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。