

領域代表者	京都大学・大学院理学研究科・教授 橋本 幸士（はしもと こうじ）	研究者番号:80345074
研究領域情報	領域番号：22A202 キーワード：基礎物理学、機械学習	研究期間：2022年度～2026年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

● 研究の全体像

従来、実験と理論の両輪により進展してきた物理学において、理論的な原理や数理の探索と技術の発展による実験の発展が、宇宙と物質の新しい姿を明らかにしてきた。この両方に寄与してきた計算科学では近年、機械学習という技術革新が社会的変革をもたらしている。そこで我々は「学習物理学」領域を創成し、機械学習やそれを含むデータ科学の手法、緩和数理やネットワーク科学等を物理学の理論的手法群と統合し、基礎物理学の根本課題である新法則の発見、新物質の開拓を行う。素粒子・物性・重力・計算物理学のそれぞれと機械学習の融合を、数理・統計・位相幾何の観点から統合的に遂行し、新領域「学習物理学」を勃興させる。

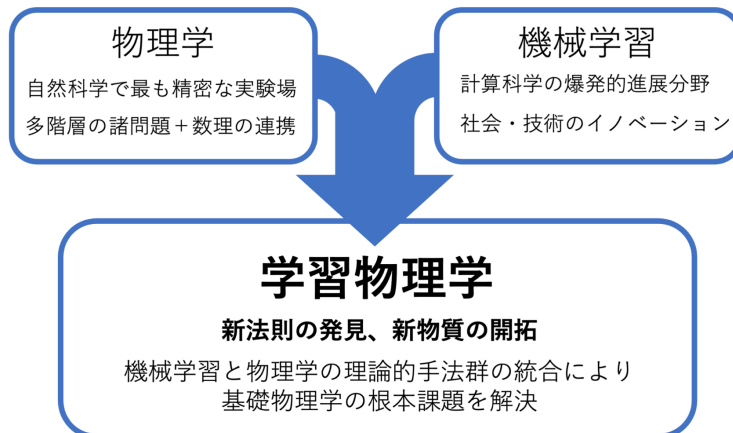


図1 本研究領域のイメージ図

● 分野を勃興させる論文群から領域形成へ

本提案に参画する研究者は、物理学に機械学習を応用する手法を世界に先駆けて2016～2017年ごろに発表し先鞭をつけた。これらの先駆的研究は、計算物理学、素粒子物理学、原子核物理学、物性物理学、量子重力理論、統計力学といった広範囲の物理学に及んでいる。また、その後の潮流を生む基礎となっているため、日本で機械学習と物理学の領域を創成できるグループとして、本領域が作られた。

● 学習物理学領域を形成する土壌が存在

2020年に領域代表者が領域の主構成員の田中・富谷・永井と開始したオンラインコミュニティ「Deep Learning and Physics (DLAP)」には、2021年夏には1000名以上の研究者・学生が登録し、隔週で研究講演や議論、集中講義を行っている。本領域はこのコミュニティからの支持を受けており、活発な研究領域の誕生が待望されていた。このコミュニティは大学生や大学院生など若手も多く含んでおり教育組織としても機能していることが特徴であり、本領域の誕生は人材育成も含むベストタイミングであった。

このコミュニティ形成は、数々の国内・国際研究会の主催を通じてボトムアップで行われたものである。領域代表者は2017年6月に、機械学習と基礎物理学を融合する研究会DLAPを日本で初めて組織し、国内の本分野が創始された。その後、2018年に続編の研究会、2019年に日本物理学会シンポジウム「機械学習と物理」を組織、2019年秋には初めての国際研究会となるDLAP2019を京都大学で主催した。また橋本・田中・富谷は機械学習と物理学に関する複数の教科書を執筆、国内の若手研究者が多く本領域に参加する道が築かれてきた。

●素粒子物理学から物性物理学まで広く基礎物理学の課題を機械学習で扱う独創的領域

2017年ごろから、物理学の個別の分野で独立に深層機械学習を利用する動きが進んでいる(例として、高エネルギー分野では2014年ごろから深層学習を利用する試みが始まり2017年から劇的に論文が増加している(Inspire-HEPによる、図2))。すなわち本領域が取り扱うテーマは自然科学において劇的に重要性を増しつつあるテーマであり、大きな潮流が訪れようとしている。特に本領域は、個別分野の試みを統合し、物理学全体と機械学習の数理との融合領域を創成する。融合の交点を束ね、線から面にしていくことで、学習物理学という地図を作り、計算物理学・素粒子物理学・物性物理学・重力物理学が学術変革で結びつく一つのプラットフォーム上で議論することで、物理学全体を進展させることを目標としている。

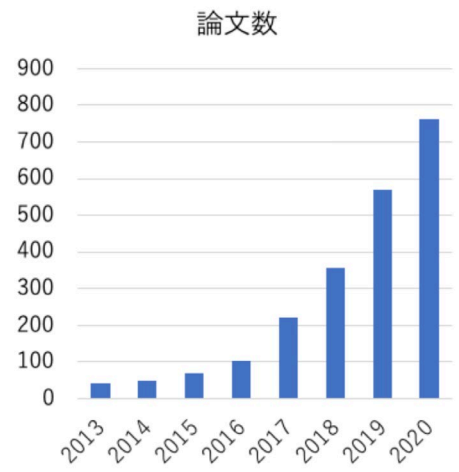


図2 論文数の経年増加

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●物理学と機械学習を融合することで、基礎物理学における根本課題を解決する

物理学とは元来、データから法則性を見出して事象の挙動を理解し、それをユニバーサルに拡大することで、この宇宙を支配する新法則・新現象を発見し新物質を開拓する学問である。特にマイクロなスケールを支配する量子物理学において現代は実験技術の多様な発展により法則の検証・整備が可能な時代となった。機械学習の発展は、この理論と実験データの相互検証の關係に、膨大なデータから機械的に特徴を抽出して最適化するような新しいアルゴリズムを提供する。機械学習で培われた手法を基礎物理学の根本課題に適用することは、物理学に残る難問に新しい突破口を開き、既存の物理学を刷新する「学習物理学」領域を創成する。本提案は特に次に掲げる根本課題を解決することを目指す。

- 計算物理学における量子配位生成の革新的な加速。
- 素粒子物理学における大型加速器実験の発見感度向上と、対応する理論の精密化。
- 物性物理学における量子複雑領域までの拡張/量子ゆらぎ量子纏れの解明。
- 量子・重力物理学における時空概念の創発の仕組みの解明。

●機械学習と物理学の親和性を活かす新領域により物理学の課題解決手法を開発する

機械学習の本質は高い表現能力を持つ関数の最適化による特徴量の抽出であるが、一方この数世紀の物理学の発展は、人間の観察力による自然からの特徴量の抽出に依拠していた。物理系の背景にある数理的構造に基づいて、対称性に基づいたテンソル表現論がデータのモデル化に用いられ、最小作用の原理による最適化が基礎物理学の心臓部に存在している。この機械学習の数理構造と、物理学の数理構造の明らかな親和性に基づき、多様な課題解決のために進化したニューラルネットワークの博物学を、物理学の多スケールの諸問題とマッチングさせることは喫緊の課題である。機械学習の物理学的研究を推進し、基礎物理学の根本課題へそれを適用するため、本領域では機械学習の研究課題を次のように設定した:

- 物理学のドメイン知識を用いた深層学習の機構の数理解明と課題対処法の分類。
- 統計力学による学習計算困難の問題の克服/理論と実践を通貫する枠組みの整備。
- 位相幾何学による物理学親和的なニューラルネットワーク学習手法の開発。

●学習物理学地図の作成により融合研究を革新的に加速する

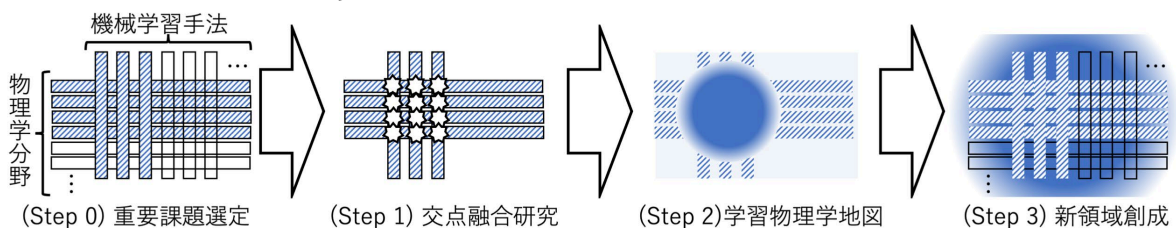


図3 学習物理学地図の作成と領域の創成