

最適輸送理論とフェーズフィールド法を用いた画像データにもとづくモデル記述ツール

Imaging-data based model description tool using optimal transport theory and phase-field method

祐川 翼 (Tsubasa Sukekawa)¹, 谷地村 敏明 (Yachimura Toshiaki)²,
李 聖林 (Sungrim Serin-Lee)^{1,3}

¹ 京都大学高等研究院ヒト生物学高等研究拠点 (Kyoto University),

² 東北大学数理科学共創社会センター (Tohoku University),

³ 京都大学医学部

e-mail : sukekawa.tsubasa.2w@kyoto-u.ac.jp

1 概要

細胞の幾何学的形状を捉えることは生命現象の理解に重要である [1]. また, 形状データを反応拡散系などの数理モデルと組み合わせることで, 実際の細胞形状の影響を反映した *in silico* 実験が可能となる. 一方で, 光毒性などの細胞特有の要因や, 細胞変形・細胞遊走と化学反応の時間スケールの違いにより, 十分な時間解像度の形状データが得られない場合がある. 本研究ではこの制限を克服するために, 実験画像の時系列データから, 中間の細胞形状を推定する新手法を開発した. 本手法は最適輸送理論とフェーズフィールド法を組み合わせたものである.

最適輸送理論とは, 確率測度間の距離や最適マッチングを与える数学理論であり, コンピュータグラフィックス, 機械学習, 自然言語処理, 生命科学など多岐にわたる分野で用いられている [2], [3]. 最適輸送理論により, 確率測度の補間と補間の際の速度ベクトル場が求められる. 形状データは確率速度とみなせるので, 最適輸送理論の手法により, 有限の時系列データから中間時刻のデータを推定することができる. また, 先述した速度ベクトル場は細胞の変形や運動に対応するものと解釈できる.

しかし, 従来の最適輸送理論だけを用いる方法では, 細胞膜の物理的性質を考慮しておらず, 補間によって得られた中間時刻の細胞形状において, 亀裂のような変形が発生する場合がある. 我々はこの性質を改善するために, 最適輸送によって得られた速度ベクトル場をフェーズフィールドモデルと組み合わせる手法を開発した. 本講演では細胞の変形を示す例として *C.elegans* の受精卵の一細胞期における実験画像, 細胞遊走を示す例として HL-60 細胞の実験画像 [4] に対して本手法を適用した数値実験結果を紹介する.

本手法により, 離散的な画像データから, 連続的で細胞の境界が滑らかな形状データを生成することが可能となる. さらに, 本研究では生成した細胞形状と反応拡散系を組み合わせることによって, 実験画像データに基づく細胞形状の効果を取り入れた数理モデリング手法を提案する.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 22H05110, 及び JST, さきがけ, JPMJPR24KD の支援を受けたものです.

参考文献

- [1] Sugrim Seirin-Lee, Kazunori Yamamoto, and Akatsuki Kimura, The extra-embryonic space and the local contour are crucial geometric constraints regulating cell arrangement,

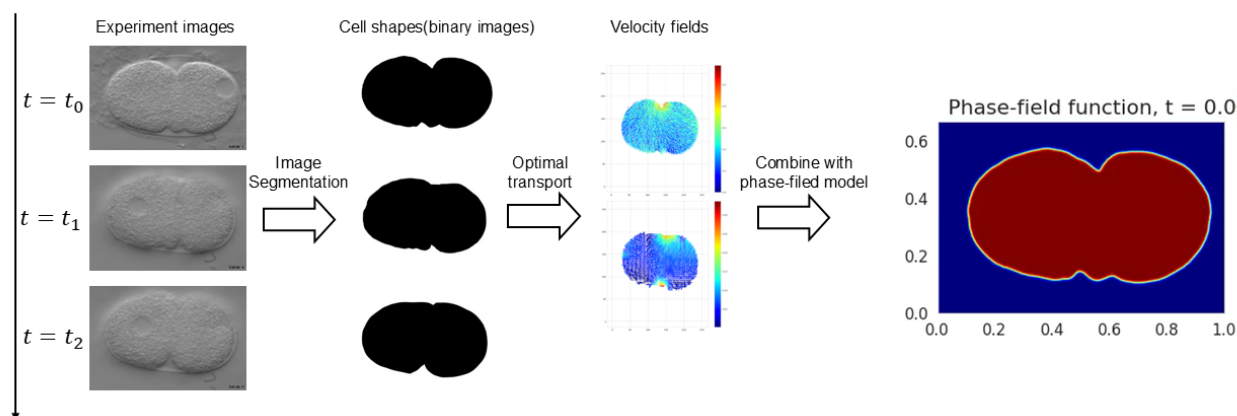


図 1. 本手法の概要

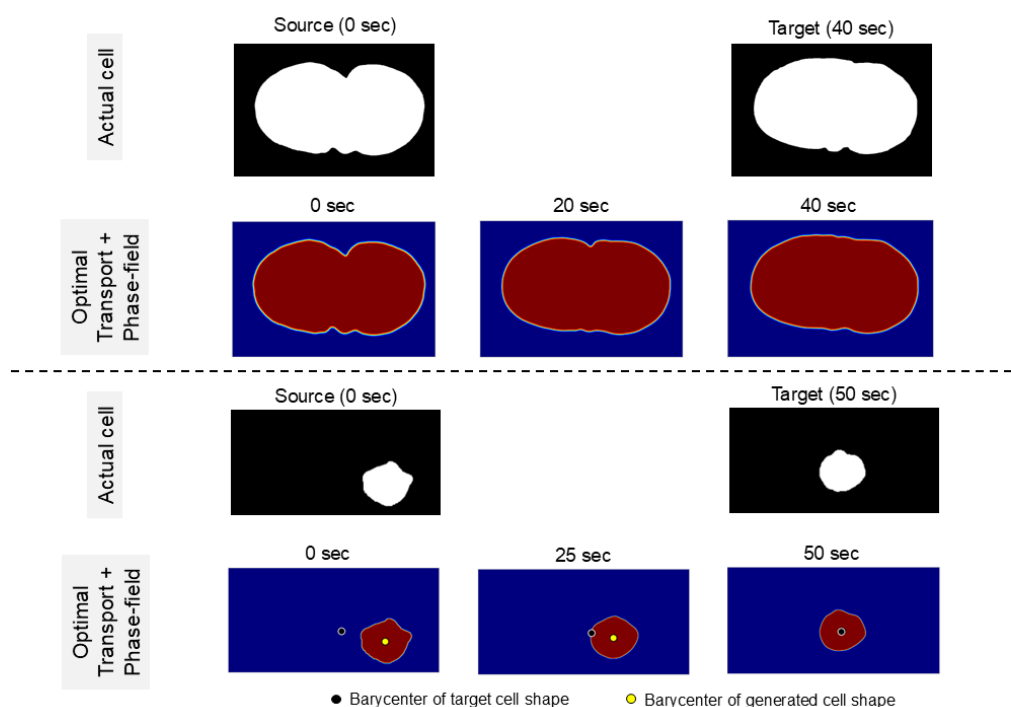


図 2. 数値計算例

- Development, 149 (2022), dev200401.
- [2] Gabriel Peyré, and Marco Cuturi, Computational optimal transport: With applications to data science, Foundations and Trends in Machine Learning, 11 (2019), 355–607.
 - [3] Toshiaki Yachimura, Hanbo Wang, Yusuke Imoto, Momoko Yoshida, Sohei Tasaki, Yoji Kojima, Yukihiro Yabuta, Mitinori Saitou, and Yasuaki Hiraoka, scEGOT: single-cell trajectory inference framework based on entropic Gaussian mixture optimal transport, BMC bioinformatics, 25(2024), 388.
 - [4] Daisuke Imoto, Nen Saito, Akihiko Nakajima, Gen Honda, Motohiko Ishida, Toyoko Sugita, Sayaka Ishihara, Koko Katagiri, Chika Okimura, Yoshiaki Iwadate, and Satoshi Sawai, Comparative mapping of crawling-cell morphodynamics in deep learning-based feature space, PLoS computational biology, 17 (2021), e1009237.

ベイズ推定を用いた Hodgkin-Huxley モデルによる高周波パワーアンプの非線形特性解析

Neuronal Nonlinearities in RF Power Amplifiers: A Bayesian Approach to Hodgkin-Huxley Differential Equations

Gao Yueyuan¹, Wang Siqu², Benlarbi-Delai Aziz²

¹ 島根大学 (Shimane University), ² ソルボンヌ大学 (Sorbonne University)

e-mail : yueyuangao@mat.shimane-u.ac.jp

1 概要

近年、通信ネットワークがその構成要素の非線形性を活かして計算能力を有することを示した通信・計算統合 (*J2C: Joint Communication and Computation*) の枠組みが提案されている [1]. 特に、送信機内のパワーアンプ (PA) などの無線周波 (RF) コンポーネントの非線形性が、ネットワークにニューラルネットワークとしての計算機能を与えることが示されている. J2C ネットワークでは、パワーアンプおよび無線チャネルがそれぞれニューロンやシナプスのように振る舞い、信号の送信と同時に計算を行うことが可能である. 文献 [1] では、パワーアンプの振る舞いを Saleh モデルで表現し、手書き数字認識データセット MNIST を用いたシミュレーションによってその性能を検証している. パワーアンプの非線形特性は神経活性化関数と類似しているものの、実際にどの程度ニューロンの振る舞いを模倣できるのかは依然として不明である.

本研究では、パワーアンプ (PA) の非線形挙動を Hodgkin-Huxley モデルにより解析する. このとき、入力信号は外部電流、出力信号は発火率として定義し、ベイズ推定によってモデルパラメータを同定する. その結果、実験ベンチで測定された PA の非線形特性が高精度に再現可能であることを示した. これにより、PA が生物模倣的な振る舞いを示すことが確認され、その非線形性を活用する J2C ネットワークの理論的基盤を提供する.

2 Hodgkin-Huxley モデル

Hodgkin-Huxley モデルは以下のように与えられる：

$$\begin{cases} \frac{dV_m}{dt} = \frac{1}{C_m} \left[I_{ext} - g_{Na} m^3 h (V_m - V_{Na}) - g_K n^4 (V_m - V_K) - g_L (V_m - V_L) \right] \\ \frac{dm}{dt} = \alpha_m(V_m) \cdot (1 - m) - \beta_m(V_m) \cdot m \\ \frac{dh}{dt} = \alpha_h(V_m) \cdot (1 - h) - \beta_h(V_m) \cdot h \\ \frac{dn}{dt} = \alpha_n(V_m) \cdot (1 - n) - \beta_n(V_m) \cdot n, \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 V_m は膜電位、 C_m は膜容量、 I_{ext} は外部電流を表す. V_{Na} , V_K and V_L は、それぞれナトリウム、カリウム、リーク電流の平衡電位である. また、 g_{Na} , g_K and g_L は、それぞれナトリウム、カリウム、リークチャネルの最大コンダクタンスを表す. m , h , n は、ナトリウムおよびカリウムチャネルの活性化・不活性化を記述する無次元のゲート変数である. 各ゲート変数に対応する α_i , β_i , $i \in \{m, h, n\}$ の定義および、 V_m , m , h , n の初期値については、文献 [2] に従う. 数値シミュレーションの結果、 V_m は周期的なパターンを示すことが観察された. その周期の逆数、すなわち、

ニューロンの発火率 (*firing rate*) をパラメータ推定に用いる.

3 Hodgkin-Huxley モデルに対するベイズ推定

本研究では、マルコフ連鎖モンテカルロ法の一つである Metropolis-Hastings アルゴリズムを用いて、数値シミュレーションによって得られる発火率と実測データの発火率との誤差を最小化するパラメータ集合 $\omega = \{g_{Na}, g_K, g_L, C_m\}$ を探索した.

事後分布において最も確率の高い値 (最頻値) を推定値として採用し、得られたパラメータは以下の通りである: $g_{Na} = 121.49 \mu\text{mho.cm}^{-2}$, $g_K = 12.55 \mu\text{mho.cm}^{-2}$, $g_L = 0.0018 \mu\text{mho.cm}^{-2}$ and $C_m = 3.86 \mu\text{F.cm}^{-2}$. この推定パラメータを用いて Hodgkin-Huxley モデルから膜電位 V_m より、ニューロンの発火率を計算し、実測データと比較を行った.

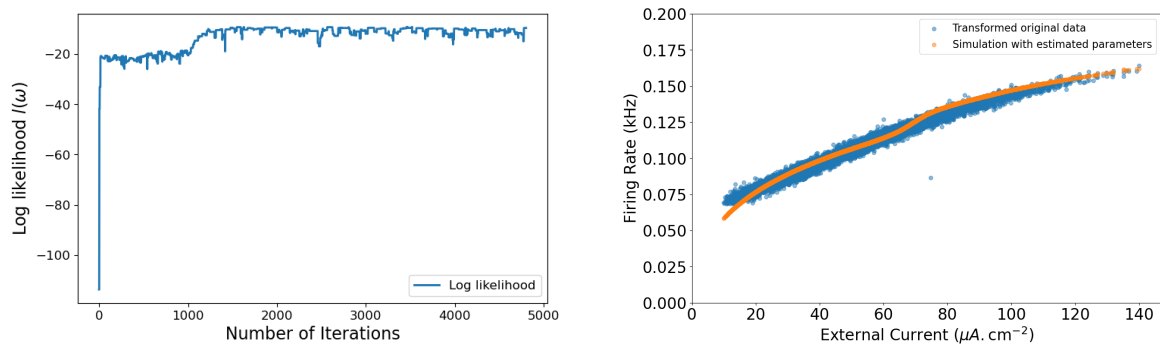


図 1. 左: 未フィルタデータに対する MCMC 法による対数尤度. 右: 元の未フィルタデータと, 推定値に基づくシミュレーション結果の発火周波数の比較.

4 まとめ

Hodgkin-Huxley モデルに対してベイズ推定を適用することで、パワーアンプの非線形性を高精度にモデル化できる一連のパラメータを同定した. その結果、パワーアンプの振る舞いが生物模倣的であり、パワーアンプのネットワークが理論的にはニューラルネットワークとして機能し得ることが示された. 本研究は、文献 [1] で提案された J2C ネットワークの基礎的仮説を支持するものであり、将来の 6G 通信システムへの貢献が期待される.

謝辞 本研究は、在日フランス大使館による「Exploration Japon 2024」プログラムの一部支援を受けた.

参考文献

- [1] S. Wang, A. Özçelikkale, and A. Benlarbi-Delai, Joint Communication and Computation Using RF Amplifier-based Neural Network, in: 2024 54th European Microwave Conference (EuMC), Sept. 2024, pp. 1-4.
- [2] S. Pant. Information sensitivity functions to assess parameter information gain and identifiability of dynamical systems, *J. R. Soc. Interface*, 2018, **15**, 20170871.

実時間TDDFTから得られる時系列データに関するSVD解析

SVD Analysis of Time-Series Data Obtained from Real-Time TDDFT

谷 直樹 (Naoki Tani)¹, 善甫 康成 (Yasunari Zempo)¹

¹ 法政大学 (Hosei University)

e-mail: naoki.tani.7x@stu.hosei.ac.jp

1 概要

時間依存密度汎関数法 (TDDFT) は電子の励起状態を求める優れた手法である。特に線形応答を用いて実時間・実空間を用いる手法は安定した数値計算が可能である。この手法 (実時間 TDDFT) は第一原理計算により時系列データを求め、次に光学スペクトルを得るという大きく二つの部分から構成されている。前者の第一原理計算は並列計算に適した改良がなされてきた。一方、後者のスペクトル導出においては伝統的に Fourier 変換 (FT) を用いるのが一般的である。実時間 TDDFT によって双極子モーメントの時間発展が時系列データとして得られる。通常はこれを FT することで全エネルギー領域における光学スペクトルを得る。しかし、FT を用いて発光や光吸収に関連するバンド端のスペクトルを正確に得るためには十分長い時間発展が必要であり、それに伴って計算コストも増大する。そこで我々は情報分野において発展してきた時系列データの取り扱い手法を用いることでスペクトル解析を改良してきた。

我々が提案する特異値分解 (SVD) を用いる手法は、短時間の時系列データから効率的にスペクトルを導出することができる。特異スペクトル解析 (SSA) を用いた手法では時系列データを構成する主要な振動成分を分離し解析することができる[1]。さらに動的モード分解 (DMD) を用いると、比較的短い時系列データから固有の振動モードを求められる[2]。FT や SSA より高精度のスペクトル解析が可能である。実時間 TDDFT から得られる時系列データの解析を従来の手法と比較した結果を報告する。

2 方法

TDDFT は電子の時間依存を記述することによって励起状態の計算が可能である。実時間 TDDFT では通常密度汎関数法 (DFT) で定常状態を求めてから系に外部ポテンシャルを加え、線形応答を実時間で追跡する。式(1)に示す時間依存の Kohn-Sham 方程式 (KS) において、ハミルトニアン H は KS ハミルトニアン H_{KS} に摂動 V_{ext} が加わった形である。

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_j(\mathbf{r}, t) = H \psi_j(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ion}^{ps}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}, t) + V_{XC}[\rho(\mathbf{r}, t)] + V_{ext}(\mathbf{r}, t).$$

ここで、 ψ_j は j 番目の電子の波動関数を表す。各項はイオンの擬ポテンシャル V_{ion}^{ps} 、ハートリーポテンシャル V_H 、交換相関ポテンシャル V_{XC} である。摂動 V_{ext} は非常に弱い電場 $E(t)$ として $t = 0$ で $E_{ext}(t) = -k\delta(t)$ の形で加えると ξ 方向に $V_{ext}(t) = -k\delta(t)\xi$ のポテンシャルが生じる。この応答として動的な双極子モーメント $\mu_\xi(t)$ が発生する。分極率 $\alpha_\xi(\omega)$ は $\mu_\xi(t)$ の FT から求められる。

$$\alpha_\xi = \frac{1}{k} \int dt e^{i\omega t} \mu_\xi(t). \quad (2)$$

また全振動子強度 $S(\omega) = 2\omega \text{Im} \alpha(\omega) / \pi$ と求められる。双極子モーメントの時間発展 $\mu_\xi(t)$ は離

散的な時間ステップ Δt で総点数 N , 総時間 $T = N\Delta t$ まで数値的に求める。

この制限に対処するため, 時系列データ $\mu_\xi(t)$ に対して DMD を適用する. 実時間 TDDFT のデータに適用する場合は 1 変数の DMD となる. 初めに時系列データ $F = (f_1, f_2, \dots, f_N)$ に対して, 各時間ステップでの回帰を考慮する窓幅 τ のデータ群であるトラジェクトリー行列 X を作成する.

$$X = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \\ f_2 & f_3 & \cdots & f_{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_\tau & f_{\tau+1} & \cdots & f_N \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \dots, x_n), \quad \begin{cases} X_0 = (x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \\ X_1 = (x_2, x_3, \dots, x_n) \end{cases} \quad (3)$$

ここで, $n = N - \tau + 1$ としている. ここでは $\tau = N/2$ とした. X を X_0 および Δt だけ時間発展させた X_1 に分割し, これらの回帰 $X_1 = AX_0$ を行列 A で表す. 未知の行列 A を直接求めるには X_0 の疑似逆行列 X_0^\dagger を用いて $A = X_1 X_0^\dagger$ とすればよい. A に含まれるすべての固有モードを取り出すには $A\phi = \phi\Lambda$ として解けばよいが, これは高次元のノイズも含んでおり, また計算量も大きくなる. そこで X_0 に SVD を適用し $X_0 \approx U_r \Sigma_r V_r^T$ として適切なランク r までの次元削減を行う. この左直交行列 U_r を用いて A の縮約 $\tilde{A} = U_r^* A U_r = U_r X_1 V_r \Sigma_r^{-1}$ を求める. そして \tilde{A} についての固有値問題 $\tilde{A}W = W\Lambda$ を解くことで効率よく固有モードを見つける. このようにして求めた基本的な振動モード (DMD モード) は $\phi = X_1 V_r \Sigma_r^{-1} W$ で表される. また各モードの周波数 $\Omega = \log \Lambda / \Delta t$, その振幅 $b = \psi^\dagger x_1$ である. これらから各モードの時間発展 $f(t) = \phi e^{\Omega t} b$ と表せる. またこれは連続な時間 t での解となっている. 離散系および連続系での状態方程式の関係から, \tilde{A} を対角化する行列 U_r を共通して用いることができる. Ω は離散系から求めた固有値で表されることから, 離散的な時間 ($N\Delta t$) のデータから連続な時間 (t) での解を求められる. これが DMD の最大の特徴である. 従来の FT を用いる場合と比較して, DMD モードの周波数はデータ数に依存せず分解能が非常に高いという長所がある.

3 結果

実時間 TDDFT から得られた時系列データから FT と DMD で求めたスペクトルを比較した. 図 1 はエチレン (C_2H_4) に適用した結果である. 計算において時間ステップ $\Delta t = 0.002$ [1/eV] として 5000 ステップまで時間発展を行った. このとき FT によるスペクトルの分解能 $\Delta\omega = 2\pi/10$ [eV] である. そのため FT ではスペクトルの漏れが見られ, 正しいピーク位置が得られない.

一方, DMD ではデータ数の制約を受けずに高い精度でスペクトルの位置と強度を求められた. そのため DMD を用いることで少数のデータから効率的にスペクトルを得られ, TDDFT の計算時間のさらなる短縮が期待できる.

参考文献

- [1] 谷直樹, 狩野覚, 善甫康成, 実時間 TDDFT の時系列データに関する特異スペクトル解析. *J. Comput. Chem. Jpn.* **23**(3), pp.68-70, (2024).
- [2] Steven L. Brunton, J. Nathan Kutz, Data-Driven Science and Engineering: Machine Learning, Dynamical Systems, and Control, 2nd ed. Cambridge University Press, 2022

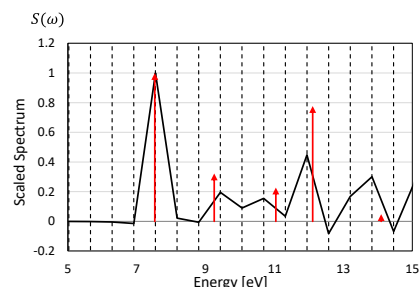


図 1. エチレンの TDDFT 計算 (5000 ステップ) から FT (実線) と DMD (赤矢印) で求めた振動子強度. DMD ではピークの位置と強度が求まる. 強度はピークの値で規格化している. 破線は FT の分解能を表す.

ハミルトン偏微分方程式のスペクトル表現に基づく 構造保存型作用素学習

Structure-Preserving Operator Learning for Hamiltonian PDEs via Spectral Representation

田中 佑典 (Yusuke Tanaka)¹, 谷口 隆晴 (Takaharu Yaguchi)^{2,3}

¹NTT 株式会社 (NTT, Inc.), ²神戸大学 (Kobe University), ³理化学研究所 (RIKEN)

e-mail : ysk.tanaka@ntt.com

1 概要

本研究では、ハミルトン偏微分方程式に対する構造保存型の作用素学習法を提案する。提案手法では、ハミルトン偏微分方程式を有限で打ち切ったフーリエ級数展開によってスペクトル表現し、有限次元のハミルトン系として定式化する。この定式化に基づき、時間発展を表すシンプレクティック写像をニューラルネットワークによりモデル化することで、高速かつ構造保存的なデータ駆動型シミュレーションを実現する。

2 ハミルトン偏微分方程式

ハミルトン偏微分方程式は、無限次元のハミルトン系として定式化され、エネルギー保存などの保存則を満たす力学系を記述する上で有力な枠組みである [1]。 $\mathcal{T} = \mathbb{R}_{\geq 0}$ を時間ドメインとし、 $\mathcal{X} = [0, L]$ を空間ドメインとする。ヒルベルト空間 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^{\mathcal{T} \times \mathcal{X}}$ を考え、 $u \in \mathcal{U}$ が周期境界条件の下で、以下の形で表されるハミルトン偏微分方程式に従うとする。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}, \quad \mathcal{H}[u] = \int_{\mathcal{X}} F(u, u_x, u_{xx}, \dots) dx. \quad (1)$$

ここで、 $\mathcal{H} : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ はハミルトニアン (エネルギー汎関数) と呼ばれ、ハミルトニアン密度 $F : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ の \mathcal{X} 上における積分として定義される。また、 $\delta \mathcal{H} / \delta u$ は \mathcal{H} の変分導関数であり、フレシェ微分で定義される変分 $d\mathcal{H}[u]$ により、任意の $u, v \in \mathcal{U}$ に対して、

$$d\mathcal{H}[u] = \left. \frac{d}{d\epsilon} \mathcal{H}[u + \epsilon v] \right|_{\epsilon=0} = \left\langle \frac{\delta F}{\delta u}, v \right\rangle \quad (2)$$

を満たす関数として定義される。ここで、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は \mathcal{U} 上の内積を表す。

3 問題設定

機械学習分野において、作用素学習と呼ばれる新たな枠組みが提案され、物理シミュレーションの劇的な高速化に向けて注目を集めている [2]。本研究では、作用素学習の枠組みに基づき、初期条件 $u_0(x) = u(0, x)$ から時刻 t における解 $u_t(x) = u(t, x)$ への写像を以下のようにモデル化する。

$$u_t(x) = \mathcal{S}_\theta[u_0](x). \quad (3)$$

ここで、 \mathcal{S}_θ はパラメータ θ をもつ作用素である。訓練データとして $\{(u_0, u_t)\}$ が与えられたとき、最適化に基づいて θ を学習する。学習された \mathcal{S}_θ を用いることで、高速なシミュレーションが可能であると期待されている。以下では、ハミルトン偏微分方程式が持つ数値構造に着目し、スペクトル表現に基づく近似により、シンプレクティック構造を保存する作用素 \mathcal{S}_θ を構築する。

4 ハミルトン偏微分方程式のスペクトル表現

ハミルトン偏微分方程式の解 u や、他の \mathcal{U} に属する関数がフーリエ級数展開を用いて

$$u(t, x) = \frac{a_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} [a_k(t) \cos(k\omega x) + b_k(t) \sin(k\omega x)] \quad (4)$$

などと表せると仮定する．ここで、 $a_0(t), a_k(t), b_k(t)$ は各モードのフーリエ係数であり、 $\omega = 2\pi/L$ は基本角周波数である．式 (2) における $d\mathcal{H}$ は \mathcal{U} の双対空間 \mathcal{U}^* の元であるため、リースの表現定理が成り立ち、式 (1) における $\delta\mathcal{H}/\delta u$ は \mathcal{U} に属する関数として表され、仮定からフーリエ級数展開できる．この事実に基づき、式 (1) のハミルトン偏微分方程式をフーリエ基底に射影すると、各モードの係数の時間発展は、

$$\dot{a}_k = k\omega \frac{\partial H}{\partial b_k}, \quad \dot{b}_k = -k\omega \frac{\partial H}{\partial a_k} \quad (5)$$

と表される．ここで、 H はフーリエ係数 $\{(a_k, b_k)\}_{k=1}^{\infty}$ を変数とするスカラー関数である．また、式 (1) のハミルトン偏微分方程式は質量保存則が成り立ち、 $\dot{a}_0 = 0$ である．

5 シンプレクティック構造を保存する作用素モデル

前節で導出したスペクトル表現に基づき K 個のモードを用いて作用素モデルを構築する． $\mathbf{z} = (a_1, \dots, a_K, b_1, \dots, b_K)^\top \in \mathbb{R}^{2K}$ とすると、ハミルトン偏微分方程式は、

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{\Omega} \nabla H(\mathbf{z}), \quad \mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{G} \\ -\mathbf{G} & \mathbf{O} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \omega \cdot \text{diag}(1, \dots, K) \quad (6)$$

と有限次元の力学系として近似することができる．証明は割愛するが、式 (6) の力学系に対するフロー $\phi_t: \mathbb{R}^{2K} \rightarrow \mathbb{R}^{2K}$ は、 $\mathbf{\Omega}$ によって規定されるシンプレクティック条件 $\mathcal{J}_{\phi_t}^\top \mathbf{\Omega} \mathcal{J}_{\phi_t} = \mathbf{\Omega}$ を満たす．ここで、 \mathcal{J}_{ϕ_t} は ϕ_t のヤコビ行列を表す．本研究では、シンプレクティック写像 ϕ_t をニューラルネットワークでモデル化することにより、作用素を以下のようにモデル化する．

$$\mathcal{S}_\theta = \mathcal{F}^{-1} \circ \phi_t \circ \mathcal{F}. \quad (7)$$

ここで、 \mathcal{F} および \mathcal{F}^{-1} はフーリエ変換および逆変換を表し、 \circ は写像の合成を表す．また、行列 $\mathbf{S} = \text{diag}(\mathbf{G}^{-1/2}, \mathbf{G}^{-1/2})$ による座標変換 $\tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{S}\mathbf{z}$ を考えると、式 (6) は正準方程式に変換できるため、 ϕ_t は SympNets [3] によりモデル化可能である．フーリエ変換はユニタリ変換であり、フーリエ係数空間上における写像 ϕ_t が持つシンプレクティック形式を元の関数空間に引き戻すことができるため、式 (7) はシンプレクティック構造を保存する作用素モデルを表す．

謝辞 本研究は JST CREST JPMJCR1914, JST ASPIRE JPMJAP2329 の助成を受けた．

参考文献

- [1] S. B. Kuksin, Analysis of Hamiltonian PDEs, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- [2] N. Kovachki et al., Neural operator: Learning maps between function spaces with applications to PDEs, JMLR, 24(89):1 – 97, 2023.
- [3] P. Jin et al., SympNets: Intrinsic structure-preserving symplectic networks for identifying Hamiltonian systems, Neural Networks, 132:166–179, 2020.