

Title	ディープラーニングに基づく推論による物質ダイナミクスの解明
Author(s)	DAO, DUC ANH
Citation	
Issue Date	2026-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	ETD
URL	https://hdl.handle.net/10119/20566
Rights	
Description	Supervisor: DAM Hieu Chi, 先端科学技術研究科, 博士

氏 名	DAO DUC ANH		
学 位 の 種 類	博士（知識科学）		
学 位 記 番 号	博知第 406 号		
学 位 授 与 年 月 日	令和 8 年 3 月 25 日		
論 文 題 目	Elucidating Material Dynamics with Deep Learning-based Inference		
論 文 審 査 委 員	DAM Hieu-Chi	北陸先端科学技術大学院大学	教授
	池田 満	同	教授
	HUYNH Van-Nam	同	教授
	郷右近 英臣	同	准教授
	木野 日織	統計数理研究所	教授

論文の内容の要旨

Scientific inquiry seeks to understand how objects behave under varying conditions, yet objects are never accessed directly. They are encountered only through observations obtained under specific experimental settings, each capturing a partial and condition-dependent manifestation. As a result, object behavior cannot be identified from individual observations alone. Instead, behaviors and behavior patterns are articulated as characteristic responses of an object, inferred from structured variability across collections of observations as observing conditions change.

This dissertation formulates object inquiry as a process of organizing and interpreting observational variability. Observations, representations, relations, and behaviors are assigned distinct roles. Observations constitute empirical records and exhibit substantial variability due to experimental conditions. Learned representations are introduced as organizational structures that arrange observations so that specific kinds of relations become examinable, including similarity, continuity, progression, and contextual dependence. These relations organize how observations vary, but do not themselves define behavior. Behaviors are characterized at the observation level as coherent and condition-dependent patterns of variability revealed through how such relations evolve under applied conditions. In this sense, inference refers to the construction of behavior-level understanding from structured observational variation, rather than to prediction or parameter estimation from isolated data instances.

Material dynamics are examined as a primary instantiation of this inquiry formulation. In material systems, behaviors such as diffusion, deformation, and transformation are distributed across time, scale, and measurement modality, and are manifested through complex and coupled sources of variability. Direct comparison of observations is therefore unreliable, and inquiry requires organizing large collections of heterogeneous observations to expose condition-dependent patterns of change. This requirement motivates the integration of deep-learning models as inferential instruments, selected according to the representational properties they provide.

Two complementary deep-learning–integrated inquiry approaches are developed. A generative-inference approach employs deep generative models to organize admissible variability and continuity among observations, enabling systematic exploration of plausible transformation pathways and statistical characterization of behavior patterns beyond direct observation. An attentive-inference approach employs attention-based transformer models to organize contextual relations within observational data, emphasizing how localized features contribute to global responses across space, time, and modality. These approaches address the same notion of object behavior, while exposing complementary facets of how behaviors are manifested and constrained.

Across multiple case studies in material dynamics, the dissertation demonstrates how deep learning can support object inquiry not as a predictive endpoint, but as a means of organizing variability and relations in ways that make behaviors and behavior patterns interpretable. The central contribution is a clarified account of deep learning-based inference in object inquiry, specifying how representations support the organization of relations from which object behavior can be systematically articulated.

Keywords: *Scientific inquiry, Material dynamics, Time-resolved microscopy, Deep generative models, Attention mechanisms*

論文審査の結果の要旨

科学的探究において、対象は直接的にアクセスされることはなく、特定の実験条件下で得られる観測を通じて間接的にのみ捉えられる。とりわけ材料ダイナミクスでは、拡散・変形・相転移といった動的挙動は個々の観測からは把握できず、時間・空間スケール・計測モダリティにわたる多数の観測間の関係性を体系的に検討することで初めて明らかになる。本論文は、こうした複雑な観測変動性のもとで材料の動的挙動を体系的に理解するための概念的枠組みと、それを実現する深層学習ベースの推論手法を提案している。

本研究ではまず、観測・表現・関係・挙動の各要素に明確な役割を与えた概念的探究枠組みを構築し、学習ベースの表現を通じて高次元・多スケール・マルチモーダルな観測データ間の関係性を体系的に検討可能にしている。この枠組みの基盤に関連する研究として、X線光子相関分光法と動的コヒーレント X 線回折イメージングの結合による粒子運動解析 (Physical Review Research 掲載) や、シングルショット CXDI のための深層学習手法 PID3Net (npj Computational Materials 掲載) にも、本論文で提案した枠組みを基礎として、データ科学・データ解析の主担当として貢献している。次に、深層生成モデルによる生成的探究手法を提案し、時間分解材料観測を構造化された潜在空間に組織化することで、直接観測を超えた変換経路の探索と挙動パターンの統計的特徴づけを可能にしている。ゴム複合材料中の銅粒子の動的挙動への適用により有効性を実証している (Digital Discovery 掲載)。さらに、注意機構に基づく深層学習を用いた注意的推論手法を提案し、局所的構造変化がグローバルな材料応答にどのように寄与するかを空間・時間・モダリティにわたって明らかにしている。マクロスケールの界面接触からナノスケールの変形に至る多様な材料系への適用を通じて、その汎用性を示している。

本論文は、概念的枠組みと深層学習による推論手法を統合的に扱い、観測変動性のもとで動的挙

動を体系的に明らかにする方法論を確立した点で極めて意義深い。生成モデルと注意機構という相補的なアプローチにより、予測の道具としてではなく、観測の組織化と関係性の検討を通じて挙動を解釈可能にするという深層学習の新たな役割を示している。本研究成果は、Digital Discovery 誌 (RSC)、Physical Review Research 誌 (APS)、npj Computational Materials 誌 (Nature Portfolio) に掲載され、多数の国際学会において発表として高い評価を受けている。

以上、本論文は極めて優れた内容を有しており、学術的に貢献するところが大きい。よって、博士（知識科学）の学位論文として十分価値あるものと認めた。