

jh220052

時空間発展するシミュレーションを予測する代理モデルの開発

下川辺 隆史 (東京大学)

概要 粒子を用いたシミュレーションや格子に基づくシミュレーションは高性能計算分野の重要なアプリケーションである。時間発展を行う数値シミュレーションは、高精度に計算するために、多数の粒子や格子点を必要とし、多くの時間ステップを刻む必要がある。近年、深層学習が持つ高速な推論性能に依拠して、データ駆動アプローチによって数値シミュレーション結果を高速に予測する研究開発が盛んに行われている。本研究課題では深層学習を利用して、従来の数値シミュレーション手法を代替し、その結果を高速に予測する代理モデルを開発する。本年度は、新しいGNNであるBOTANを提案し、これを用いたガラス・過冷却液体の長時間緩和動力学の予測手法を開発した。BOTANによる予測結果は、先行研究による予測と比較してはるかに正確にシミュレーション結果を予測できる。CNNによる非圧縮性流体計算予測では、損失関数を工夫することで、精度向上を実現した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名(該当するものを残す)

東京大学 情報基盤センター

(2) 課題分野(該当するものを残す)

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野(HPCI 資源を利用している研究課題のみ, 該当するものを残す)

超大規模数値計算系応用分野

超大規模データ処理系応用分野

(4) 参加研究者の役割分担

- 下川辺 隆史 (東京大学): 流体予測の代理モデルの開発
- 小野寺 直幸 (日本原子力研究開発機構): 流体計算コードの提供と数値流体力学に関する助言
- Wei-Chung Wang (National Taiwan University): 代理モデルに関する助言
- Cheng-Ying Chou (National Taiwan Normal University): 流体計算と医療画像に関する助言
- Mei-Heng Yueh (National Taiwan

University Hospital): 医療におけるCFD利用の助言

- Che-Yu Hsu (National Taiwan Normal University): 流体計算に関する助言
- YuehChou Lee (National Taiwan University): 流体計算に関する助言
- 埴 敏博 (東京大学): 大規模深層学習に関する助言
- 中島研吾 (東京大学): 計算科学に関する助言
- 今野 雅 (東京大学): 流体計算に関する助言
- 長尾 大道 (東京大学): 機械学習に関する助言
- 松葉 浩也 (東京大学): 機械学習実行環境に関する助言
- 芝 隼人 (東京大学): MD計算の代理モデルの開発
- 大森 拓郎 (東京大学): 流体計算の支援
- 畠山 昂 (東京大学): 流体計算の支援
- 佐久間 大我 (東京大学): 流体計算の支援
- Ziheng Yuan (東京大学): 流体計算の支援
- 深川 宏樹 (DeepFlow 株式会社): 機械学

- 習および流体計算に関する助言と支援
- 石井 大海 (DeepFlow 株式会社) : 機械学習および流体計算に関する助言と支援
 - 簗毛 崇章 (DeepFlow 株式会社) : 機械学習および流体計算に関する助言と支援
 - 神志那 純 (DeepFlow 株式会社) : 機械学習および流体計算に関する助言と支援
 - 小井土 真一 (DeepFlow 株式会社) : 機械学習および流体計算に関する助言と支援
 - 石原 拓哉 (DeepFlow 株式会社) : 機械学習および流体計算に関する助言と支援

2. 研究の目的と意義

粒子を用いたシミュレーションや格子に基づくシミュレーションは高性能計算分野の重要なアプリケーションである。時間発展を行う数値シミュレーションは、高精度に計算するために、多数の粒子や格子点を必要とし、多くの時間ステップを刻む必要がある。大規模で高精度なシミュレーションでは、多くの計算資源と計算時間が必要であるため、従来から様々な高速化の取り組みが行われている。

本研究課題では深層学習を利用して、数値シミュレーション結果を高速に予測する代理モデルを開発する。データ駆動アプローチによる先行研究の多くは特定の問題に特化した代理モデルの開発を行っているが、本研究課題が目標とするのは汎用的に従来の数値シミュレーション手法を代替する方法を開発することである。数値シミュレーションは、物体などを粒子により離散化する粒子法と空間などを格子により離散化する格子法の大きく二つに分けられる。本研究課題では、両者のシミュレーションが時空間での相関を積極的に取り扱っている共通性に着目し、深層学習で予測することを目指す。粒子系シミュレーションの再現にはグラフニューラルネットワーク (GNN) が、格子系シミュレ

ーションの再現には畳み込みニューラルネットワーク (CNN) が有望であることがわかってきている。具体的には、GNN を用いて、乱雑な粒子配置を持ったガラス・過冷却液体の長時間緩和動力学を高速・高精度に予測する手法を構築する。また、CNN を用いて、工学的に重要となる物体周りの時間発展する非圧縮性流体計算を精度よく高速に予測する手法の開発を目指す。

近年、スパコンに対する電力と設置面積の制約はますます大きくなっており、数値シミュレーション自身も大幅に高速化して少ない消費電力で計算が完了する手法が求められている。深層学習で得られた推論に基づく数値シミュレーションの代理モデルは従来的高速化手法とは全く異なるアプローチであり、従来手法を凌駕する可能性を秘めており、本研究の完成を目指す意義は大きい。

3. 当拠点の公募型研究として実施した意義

本課題は数値シミュレーションの汎用的な代理モデルを構築することを目指す。深層学習で代理モデルの学習を行うためには、多数かつ多様な教師データを作成する必要があるため、大規模な計算リソースが必要である。さらに、深層学習モデルは多数のパラメータを学習で求める必要があり、これに大規模計算を要する。また、より高い精度を求めするためには、モデル変更に伴うハイパーパラメータ調整を行うことが必須であり、多くの試行回数を必要とする。教師データを作成する分子動力学計算や格子ボルツマン法による流体計算は GPU で高速に計算でき、深層学習も GPU で高速に学習と推論が行える。本課題では、教師データの作成および代理モデルの学習に主な計算資源として NVIDIA A100 Tensorcore GPU を用いる計画であり、東京大学の Wisteria-Aquarius は本研究を遂行する上で最適な計算環境である。本研究は、分子動力学計算、数値流体力学、大規模深層

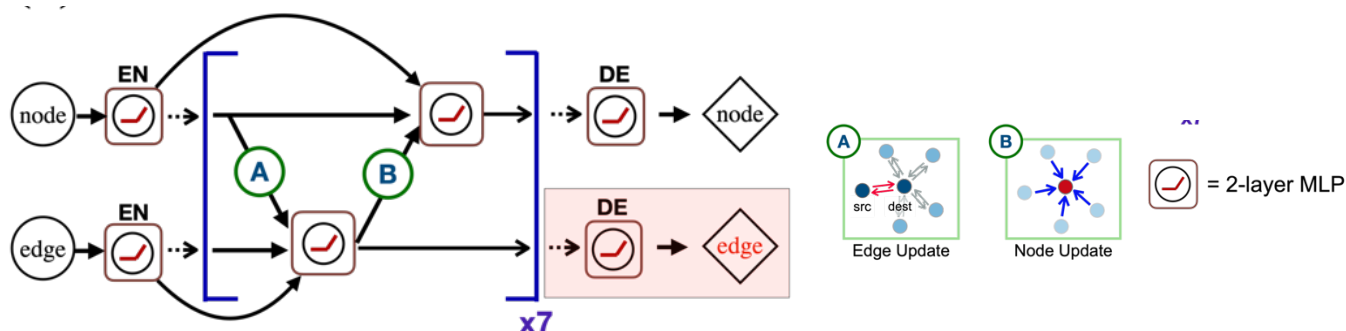


図 1: 開発したモデル BOTAN のブロックダイアグラム図

学習、高性能計算分野の専門家が密に連携して実施され、当拠点公募型共同研究として実施する必要性が極めて高い。

明する。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

該当しない。

5. 今年度の研究成果の詳細

本研究課題は、(1) GNN (グラフニューラルネットワーク) による長時間分子動力学予測と (2) 非圧縮性流体計算の CNN (畳み込みニューラルネットワーク) による高速予測手法の開発を並行して行う。大規模な深層学習を利用する点、それにより数値シミュレーションの代理モデルの構築を目指す点は共通であり、相補的に研究を遂行した。

GNN による長時間分子動力学予測では、新しい GNN である BOTAN を提案し、これを用いたガラス・過冷却液体の長時間緩和動力学を高速・高精度に予測する手法を開発した。非圧縮性流体計算の CNN による高速予測手法の開発では、新しく損失関数を導入したことで、比較的長時間の予測において精度を向上させることを実現した。なお、BOTAN を用いて、ガラスの原子配置から、原子の運動によって構造が変化する様子を予測する新手法を開発し、予測精度の世界記録を大きく更新し、これについてプレスリリースをおこなった [6]。

以下では、それぞれの研究成果について説

5.1 新しい GNN である BOTAN による長時間分子動力学予測

乱雑な粒子配置を持ったガラス・過冷却液体の長時間緩和動力学の予測について SOTA を達成するグラフニューラルネットワーク (GNN)、Bond Targeting Network (BOTAN) を開発、公開した [GitHub: h3-open-bdec/pyg_botan]。BOTAN は、原子の運動に加え、近くの原子同士の距離の変化の情報を利用してガラスの原子構造の時間変化を学習し、ある時点のガラスの原子配置 (スナップショット) のみからそのガラスが将来示す複雑な運動を、精密かつ短時間で予測する。BOTAN は、このガラスの動力学予測についての先に SOTA を達成した先行研究 [V. Bapst et al., Nature Physics, 2020] で提案されたモデルを拡張したモデルであり、新たに PyTorch Geometric により新既実装されている。BOTAN のブロックダイアグラムを図 1 に示す。ネットワークは典型的な encoder-process-decoder 型となっており、先行研究ではノード、エッジそれぞれの上で粒子種・粒子間の相対位置をそれぞれエンコードし、ノード上で粒子の運動距離をデコードするものであった。本研究では、エッジ上に粒子間の相対運動距離に対するデコーダーを追加した。このデコーダーの付与により、ノードとエッジで学習された粒子の自己運動と

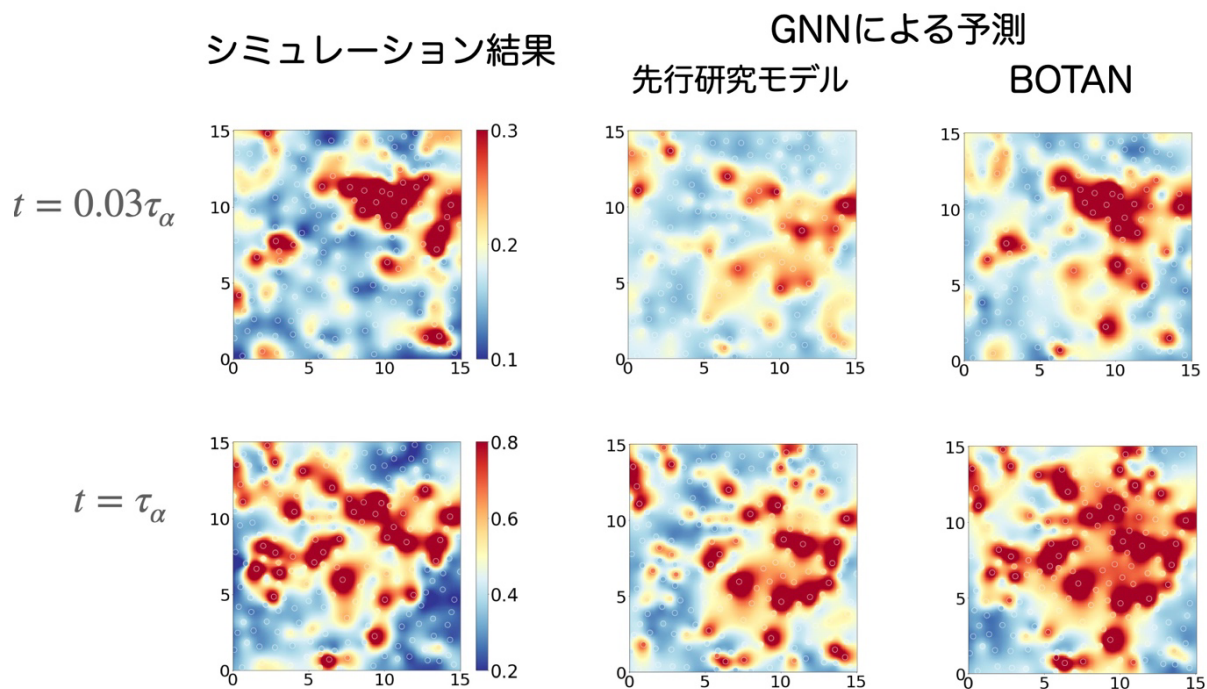


図 2：シミュレーション結果と GNN による予測の比較

ガラスの原子の運動のシミュレーション結果と、先行研究による予測、本研究 (BOTAN) による予測の図を並べた。各原子が最初の位置 (白丸) から、より大きく動いている部分をより赤く表示している。上段は短時間 (図 4 の $0.03 \tau_\alpha$)、下段は長時間 (同 τ_α) のものであり、全て 3 次元のシミュレーションから断面を切り出した図を示している。BOTAN の予測結果は、先行研究による予測と比較して正確にシミュレーション結果を予測できている。

相対運動を相補的に学習することが可能となる。

このネットワークでは、ノードとエッジで粒子種と粒子構造を入力として得たのち、エッジの特徴量とノードの特徴量のアップデートを繰り返す。この相互情報交換を 7 回繰り返したのち動力学的情報の予測値を出力し、学習時には回帰処理を行う。図中のニューラルネットワークは全て ReLU 活性化関数で実装された 2 層 MLP である。

図 2 は、先行研究と本課題で開発した GNN モデル BOTAN との予測の正確さを比較した例を表している。ここでは、原子間の配置がわずかに入れ替わる程度の時間 (図 3 における左側の破線、 $0.03 \tau_\alpha$) 経過した後と、原子の構造の比較的多くが入替わる程度の時間 (右側の破線、 τ_α) 経過した後の、各原子の動きの予測を示している。図は 3 次元のシミュレーションや予測のある断面を表しており、各原子が最初の位置から、より大きく動いている部分をより赤く表示している。先行研究と比べ、本研究の BOTAN がはるかに正確にシミュレーションの結果を予測できていることがわかる。

図 3 は、予測の対象となる時間ごとにどれくらい予測精度が得られるかを示すもので、同一のデータセットで学習を実施したグラフニューラルネットワークを用いて、テストデータの粒子構造からそれぞれの粒子の運動距離を予測した結果が、実際にシミュレーションに実施した結果にどの程度近いかを定量化したピアソン係数を示している。3 次元 Kob-Andersen 2 成分液体を過冷却した状態 (温度 $T = 0.44$) に対する BOTAN (赤) および先行研究の GNN (黒) の予測性能を示している。横軸には、シミュレーションステッ

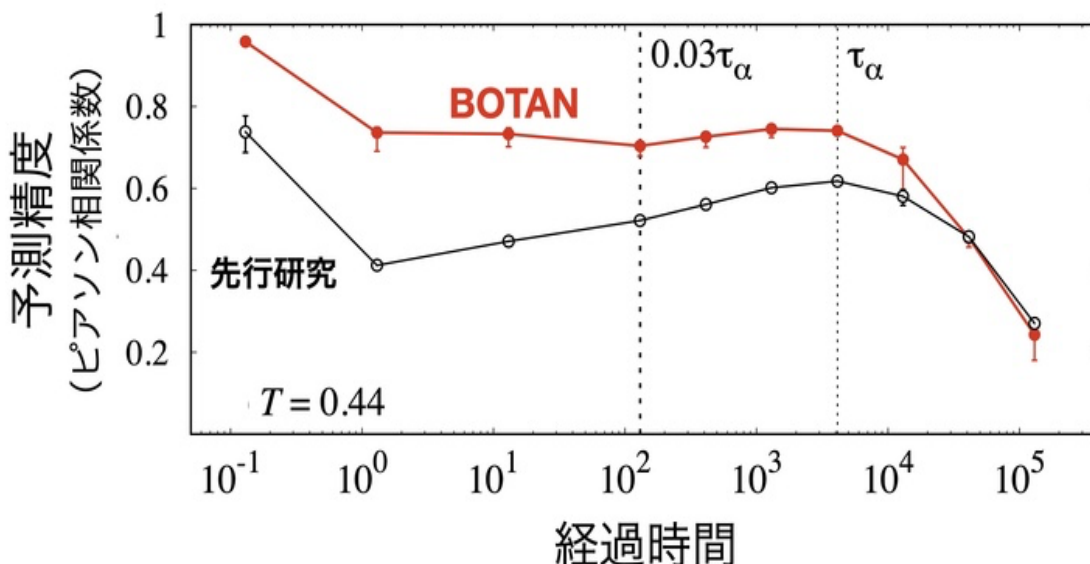


図 3:経過時間ごとの予測精度の変化

経過時間ごとの予測精度の変化をピアソン相関係数を用いて比較した図。図の上端に近いほど正確に予測ができて示す。経過時間の単位はレナードジョーンズ単位時間と呼ばれる、液体の原子が熱運動で原子 1 個分移動できる程度の時間を基準にしたもの。本研究で取り扱っているガラスの構造緩和時間(τ_α)はその約 4000 倍に相当する。先行研究では経過時間が 1 から 100 の範囲では予測精度の低下が見られたが、本研究 (BOTAN) では、そのような低下は見られず、経過時間が 10000 以下のすべての範囲で高い予測精度であることがわかる。

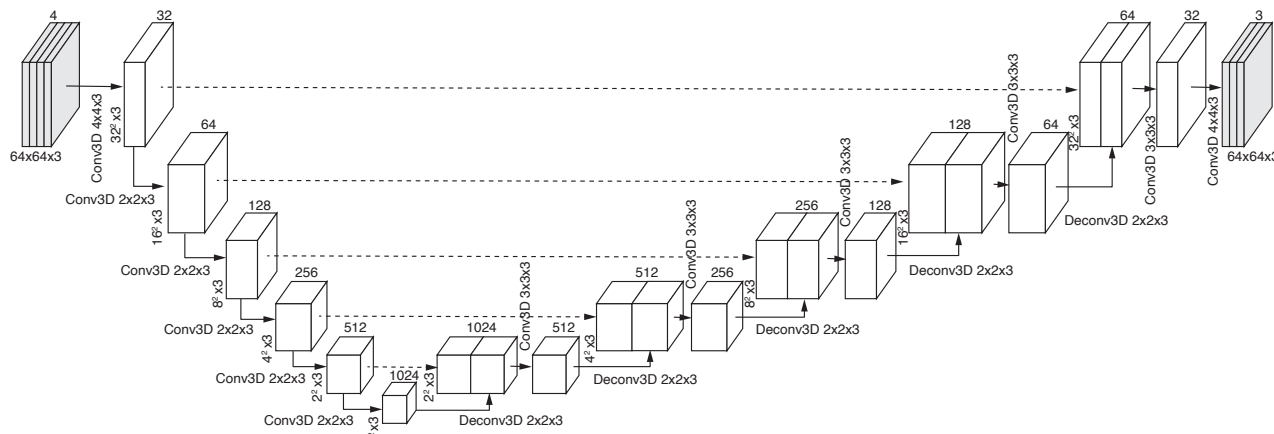


図 4: 時間変化する流れを予測するニューラルネットワーク構造

ブ数をとっている。劇的な性能向上が得られていることがわかる。

5.2 非圧縮性流体計算の CNN による予測向上のための損失関数

非圧縮性流体計算を予測するニューラルネットワークは昨年度までの課題で開発し

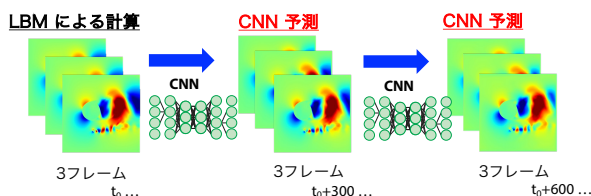


図 5: CNN の連続適用による先の予測

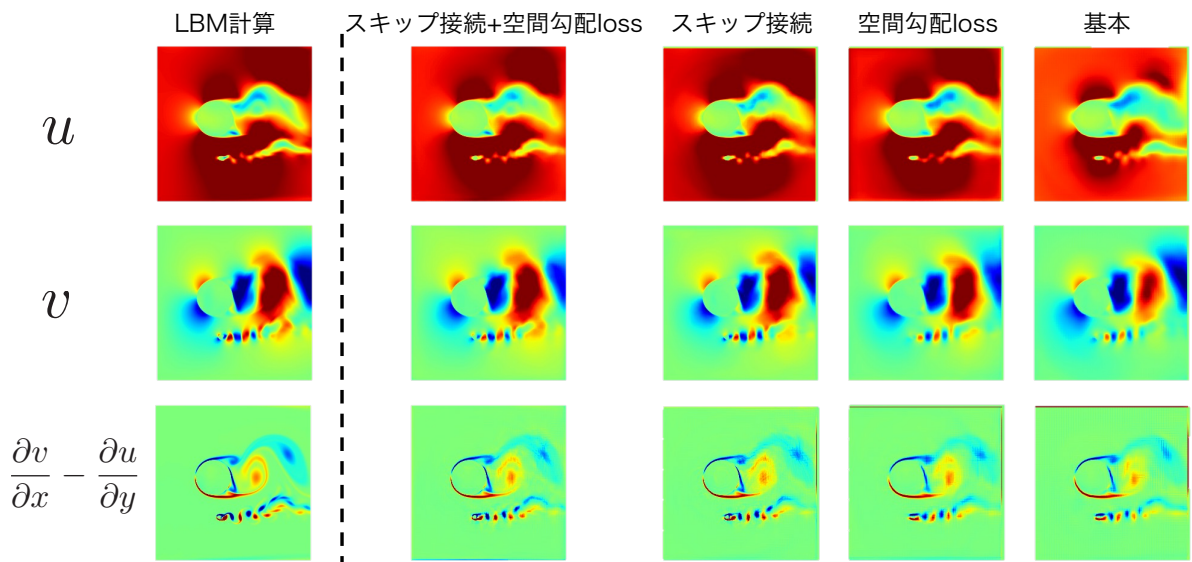


図 6: 損失関数およびスキップ接続の有無による予測精度の比較。

LBM 計算は格子ボルツマン法によるシミュレーション結果を表し、スキップ接続なし、格子点の密度と速度場の値のみによる損失関数を導入したものを「基本」とし、そこから、スキップ接続の有無、密度と速度場の空間勾配損失関数の有無を変更している。

た。図 4 にそのニューラルネットワークの構造を示す。本手法ではニューラルネットワークの入力として、 64×64 の領域全域の流体の密度、 x と y 方向の速度と、物体形状を表す符号付き距離関数の 3 フレーム分を与える。出力として、流体の密度、 x と y 方向の速度の 3 フレーム分の予測を得る。この出力は入力データに続くタイムステップとなるようにする。この手法で用いたネットワークも大きく前半と後半の二つの構造で構成されており、前半は複数の畳み込み層からなり、後半は複数の逆畳み込み層からなる。流体の時間発展を予測するため、 x と y 方向の 2 次元に加え、時間軸を 3 次元目とした 3 次元の畳み込み層と逆畳み込み層を用いたネットワーク構造としている。活性化関数は tanh 関数を用い、入力層と出力層以外の層ではバッチ正規化を導入している。予測精度を上げるために、畳み込み層とそれに対応する逆畳み込み層の間に U-net などを用いられるスキップ接続を導入している。

本年度は、このネットワークを用いた予測

の精度向上のため、損失関数として、それぞれの格子点の密度と速度場に加えて、それらの空間勾配の真の値と予測値の平均二乗誤差を用いる実装を導入した。この新しい損失関数を導入して学習したニューラルネットワークでシミュレーション結果が予測できるか確認するため、図 5 のように、シミュレーションの 100 ステップごとの 3 フレームを入力として、それに続く 3 フレームを予測する。さらにその先を予測するために、ニューラルネットワークで得られた予測結果を入力とし、次の 3 フレームの予測を行う。

図 6 は、損失関数の違いおよびスキップ接続の有無による予測精度の比較を示している。図からわかるように、密度と速度場の空間勾配を考慮した損失関数を導入することで、予測結果が大きくシミュレーション結果の近付くことがわかる。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

今年度は、当初の計画通り、新しい GNN である BOTAN を用いたガラス・過冷却液体の長

時間緩和動力学の予測手法の開発と、CNN を用いた非圧縮性流体計算の予測手法の開発を進めた。特に、BOTAN については、論文発表、ライブラリの公開、プレスリリースの発表につながる大きな成果となった。

GNN については、BOTAN の開発を継続する。BOTAN はこれまでのガラス的緩和現象の予測手法を全て凌駕する非常に優れた予測性能を示している。次の大きな目標として、さまざまな時間経過したのちの動力学を学習した結果として、任意の時間の動力学を同一のネットワークで予測可能な GNN の開発を実施したい。先行研究における GNN では大きな汎化性能を持ち、温度や時間が変化したケースについても一定の予測能があることが示されており、BOTAN でもこれを検証する。また、予測は系全体の運動度などを過大に評価してしまうなど、実装の詳細に起因して解消されていない予測誤差もある。このような予測誤差について、ニューラルネットワークの設計変更や損失関数の改善などによるさらなる精度改善を目指す予定である。

CNN による非圧縮性流体計算予測では、短時間の予測は可能であるものの、長時間の予測では誤差が大きくなり、実用する上ではさらなる高精度化が必要であることがわかってきた。本年度の研究で得た知見から、学習時に用いる損失関数として直接値に加えて空間勾配を考慮した値を利用すると予測精度が向上することがわかってきた。来年度は、これを発展させ、物理的な制限や流体運動を表す微分方程式を考慮した損失関数を導入し、長時間先を予測できるネットワークモデルの構築を目指す。また、CNN を用いた流体計算の予測手法では物体形状の表現には限界があり、CNN では直交格子で表現しきれない複雑物体周りの流れの予測をさらに高精度化することは難しい。これを解決するため、物理量を任意の空間座標とその位置関係で保持することを表現できる GNN を用いた予測

手法の構築を目指す。本年度の研究で開発した BOTAN を流体計算の予測に適用することを目指していく予定である。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

[1] Hayato Shiba, Masatoshi Hanai, Toyotaro Suzumura, Takashi Shimokawabe, “BOTAN: B0nd TArgeting Network for prediction of slow glassy dynamics by machine learning relative motion”, The Journal of Chemical Physics Vol. 158 Issue 8, pp. 084503/1-11 (2023 年 2 月)

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

該当なし。

(3) 国際会議発表 (査読なし)

該当なし。

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[2] 芝 隼人, 華井 雅俊, 鈴村 豊太郎, 下川 辺 隆史, 「静的構造からのガラス動力学の深層学習予測」, 日本物理学会 2022 年秋季大会 (13pH121-7), 2022 年 9 月 13 日

[3] 下川 辺 隆史, 「深層学習による流体シミュレーション結果の予測」第 35 回計算力学講演会, 2022 年 11 月 17 日 (招待講演)

[3] 芝 隼人, 華井 雅俊, 鈴村 豊太郎, 下川 辺 隆史, 「グラフニューラルネットワークによる静的構造からのガラス動力学の深層学習予測」, 第 36 回分子シミュレーション討論会 (211S), 2022 年 12 月 6 日

[4] 芝 隼人, 「ガラス的動力学への数値的アプローチ — シミュレーションからデータ駆動計算へ」, 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム & 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2022, 2023 年 2 月 13 日

(5) 公開したライブラリなど

[5] BOTAN : https://github.com/h3-Open-BDEC/pyg_botan

(6) その他（特許，プレスリリース，著書等）

[6] プレスリリース「深層学習でガラスに眠る未来を掘り起こす - 原子同士の動き方の関係まで理解するグラフニューラルネットワーク -」2023 年 2 月 27 日

https://www.u-tokyo.ac.jp/focus/ja/press/z0310_00042.html

[7] オンライン記事 Tech+ （株式会社マイナビ）「東大、ガラスの構造変化予測を大幅に高精度化する新たな深層学習手法を開発」2023 年 2 月 28 日

<https://news.mynavi.jp/techplus/article/20230228-2603589/>