

# 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

shimokawabe@cc.u-tokyo.ac.jp  
http://www.cspp.cc.u-tokyo.ac.jp/shimokawabe/

共同研究者

小野寺 直幸 (日本原子力研究開発機構)  
Wei-Chung Wang (National Taiwan University)  
Cheng-Ying Chou (National Taiwan Normal University)  
Mei-Heng Yueh (National Taiwan University Hospital)  
Che-Yu Hsu (National Taiwan Normal University)

YuehChou Lee (National Taiwan University)  
嶋 敏博 (東京大学)  
中島研吾 (東京大学)  
今野 雅 (東京大学)  
長尾 大道 (東京大学)

松葉 浩也 (東京大学)  
芝 隼人 (東京大学)  
大森拓郎 (東京大学)  
畠山昂 (東京大学)  
佐久間 大我 (東京大学)  
Ziheng Yuan (東京大学)

## 1 研究背景と研究目的

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。

近年、画像認識分野では深層学習を用いた研究が活発に行われている。深層学習は、機械学習手法の一つで、入力層と出力層の間に複数の層をもつディープニューラルネットワーク (DNN) で学習を行う。DNN の一つである畳み込みニューラルネットワーク (CNN) は、画像認識や解析、分類問題で大きな成功を収めている。深層学習は、演算加速装置である GPU により高速に学習と推論が可能である。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きた。

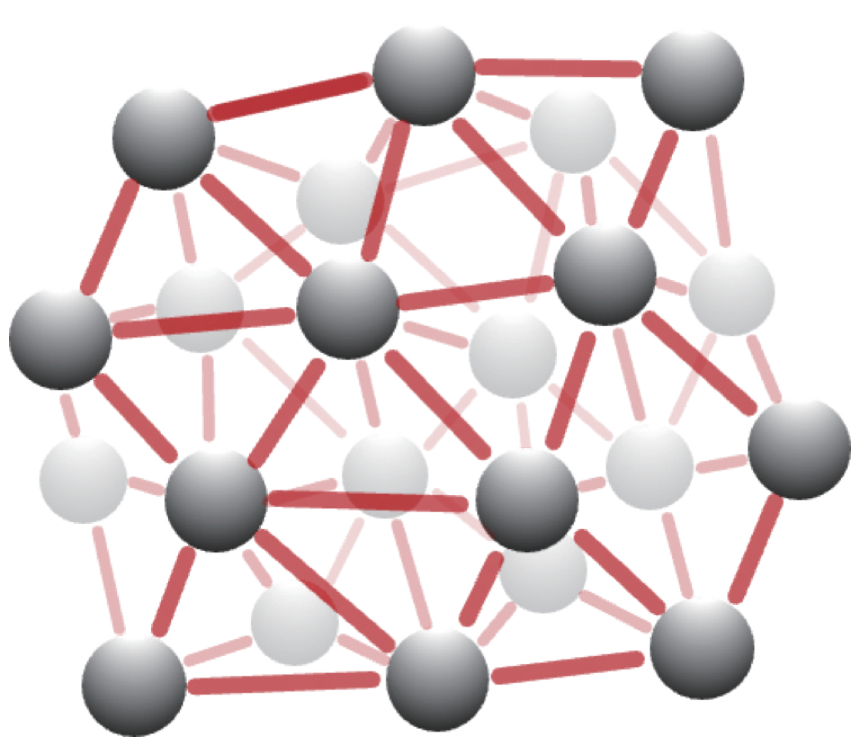
本研究課題では深層学習を利用して、数値シミュレーション結果を高速に予測する代理モデルを開発する。データ駆動アプローチによる先行研究の多くは特定の問題に特化した代理モデルの開発を行っているが、本研究課題が目標とするのは汎用的に従来の数値シミュレーション手法を代替する方法を開発することである。数値シミュレーションは、物体などを粒子により離散化する粒子法と空間などを格子により離散化する格子法の大きく二つに分けられる。本研究課題では、両者のシミュレーションが時空間での相関を積極的に取り扱っている共通性に着目し、深層学習で予測することを目指す。予備的な研究で、粒子系シミュレーションの再現にはグラフニュー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

## 2 GNN による長時間分子動力学予測

GNN による長時間分子動力学予測では、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。

本課題では、粒子配置と粒子間位置関係を、グラフの節 (ノード) とそれらを結ぶリンク (エッジ) としてトポロジ的に表現する GNN を用いる。先行研究により、GNN は従来の物理手法をいずれも凌駕する高い正確性をもって各粒子の長時間粒子易動度の予測ができることが知られている。本課題では、先行研究を発展させ、粒子配置に加えて、節点間の距離情報をグラフのリンク線上で学習する BOnd TArgeting Network (BOTAN) モデル\* を提案し、より広い時空情報をカバーする動力学予測を行う。最終的に、粒子系の遅い動力学計算に対する汎用性を高めた代理モデル構築を目指す。

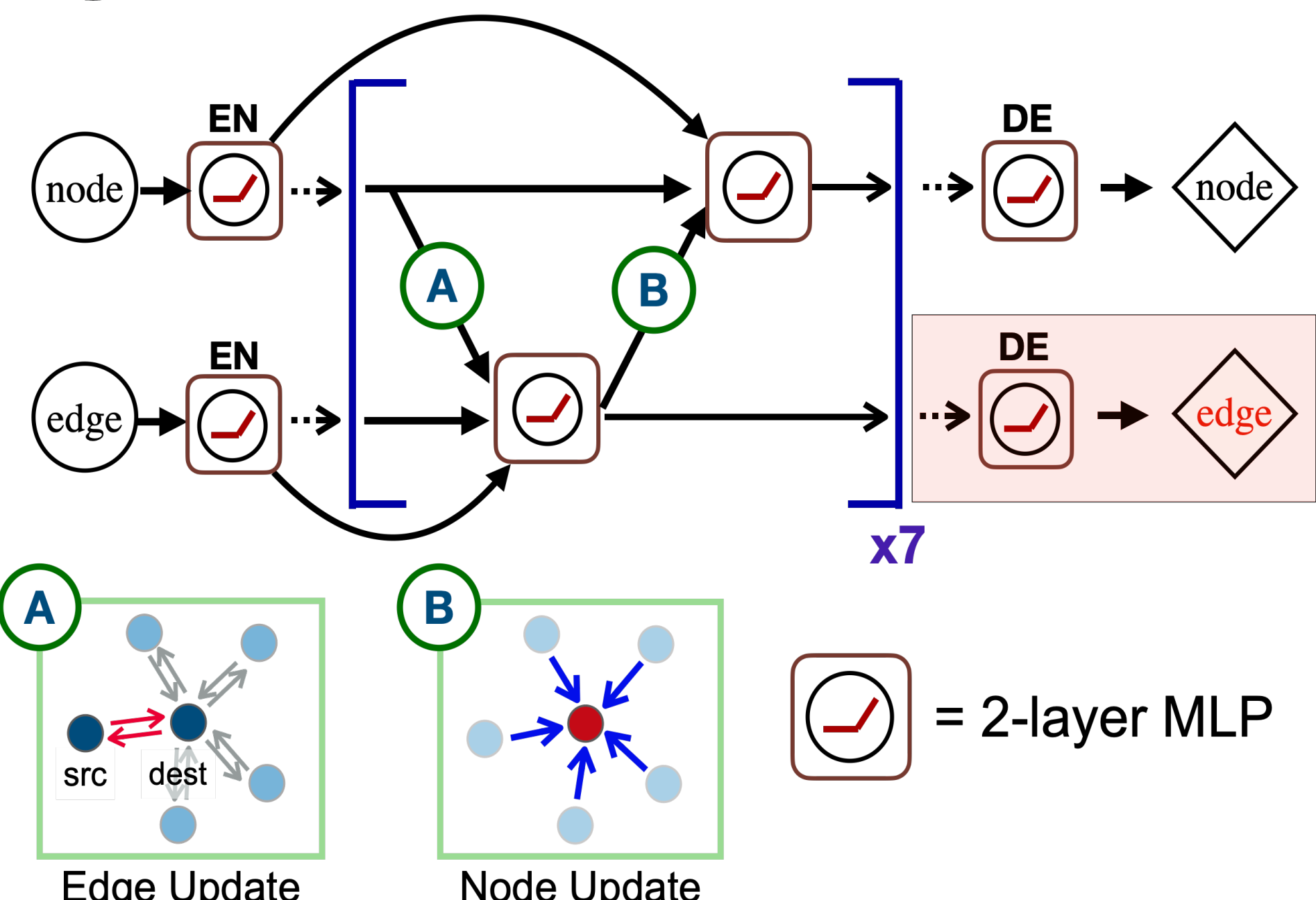
\* [https://github.com/h3-Open-BDEC/pyg\\_botan](https://github.com/h3-Open-BDEC/pyg_botan)



### GNN (グラフニューラルネットワーク)

要素間の関係をノードとエッジで表現したグラフ上で入出力が可能なニューラルネット

- ノード (頂点) = 位置座標
- エッジ (辺) = 隣接関係・結合

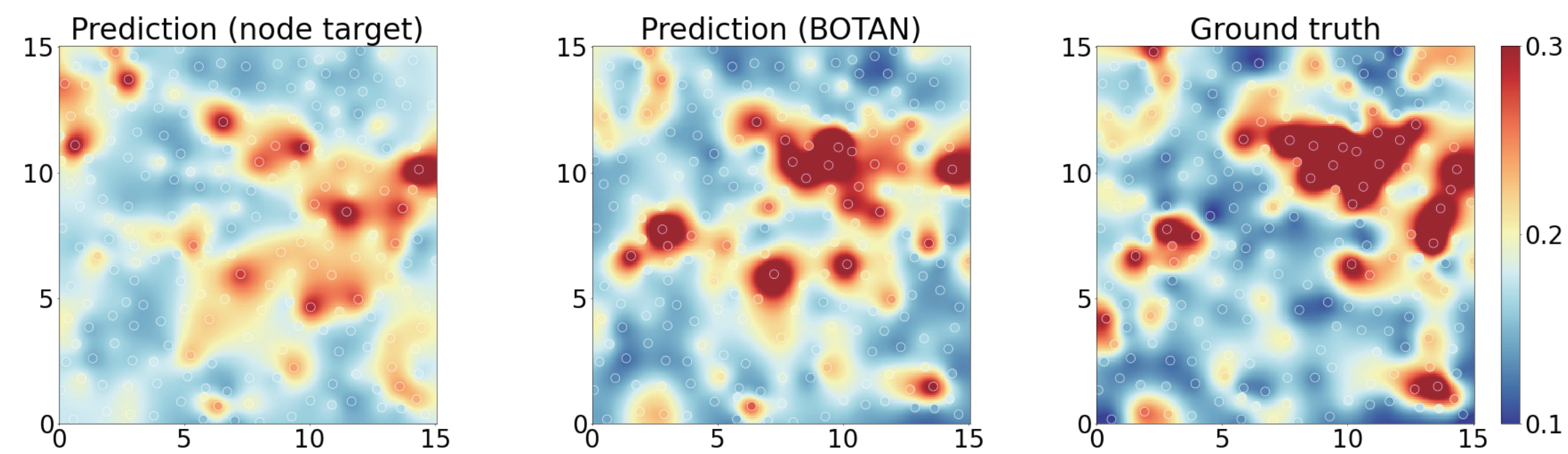


### BOTAN モデル

ノードとエッジを同時に学習する GNN モデル BOTAN

入力: ノード、エッジ  
出力: ノード、エッジ

## GNN による粒子運動度の予測

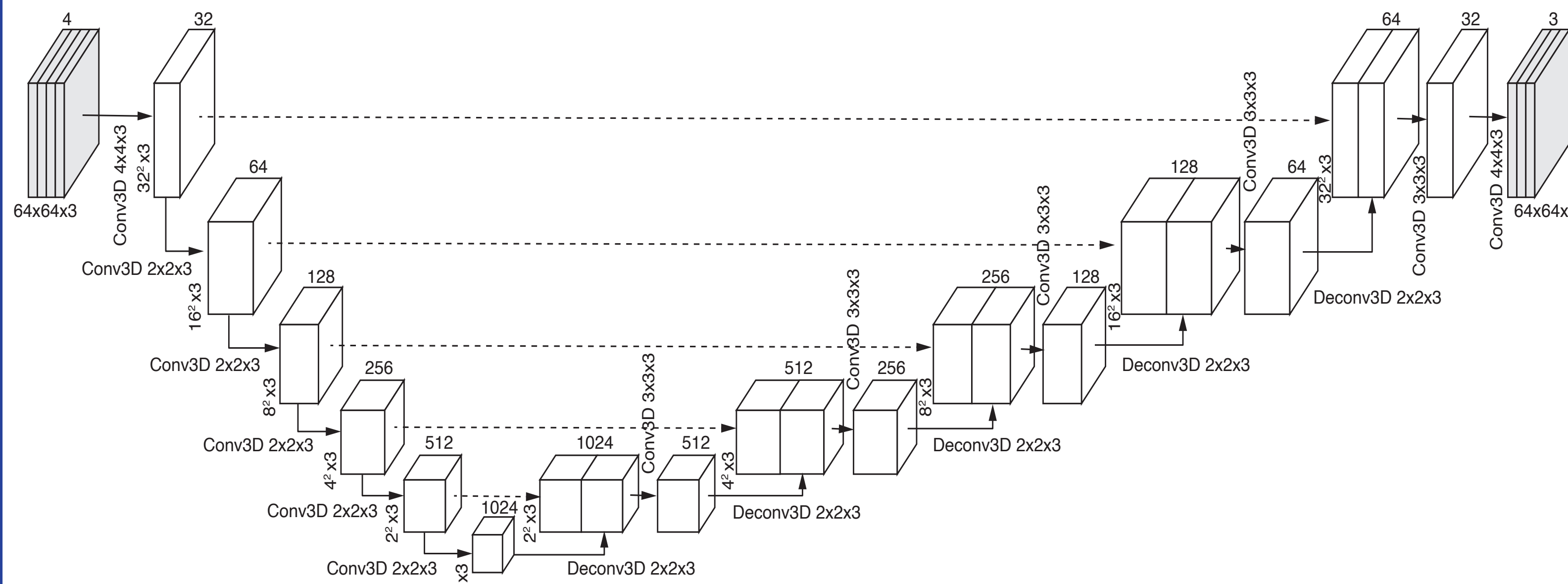


先行研究での予測 (左)、ノードとエッジを同時学習した提案モデル BOTAN による予測 (中)、分子動力学計算による結果 (右)  
3次元系から2次元断面を切り出して、等高線プロットしている

## 3 CNN による非圧縮性流体計算予測

CNN による非圧縮性流体計算予測では、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進める。深層学習による予測をパッチ的に分割して適用することで、大規模な計算領域のシミュレーション結果を予測する手法を開発する。教師データ作成には自前で開発している格子ボルツマン法コードを活用する。時間発展する流れの予測が可能となった後に、開発手法を時間的に発展しない定常流れへ応用することを検討する。特に定常流の血流計算の予測への応用も視野に入れている。

### 時間変化する流れを予測する CNN モデル (2次元)



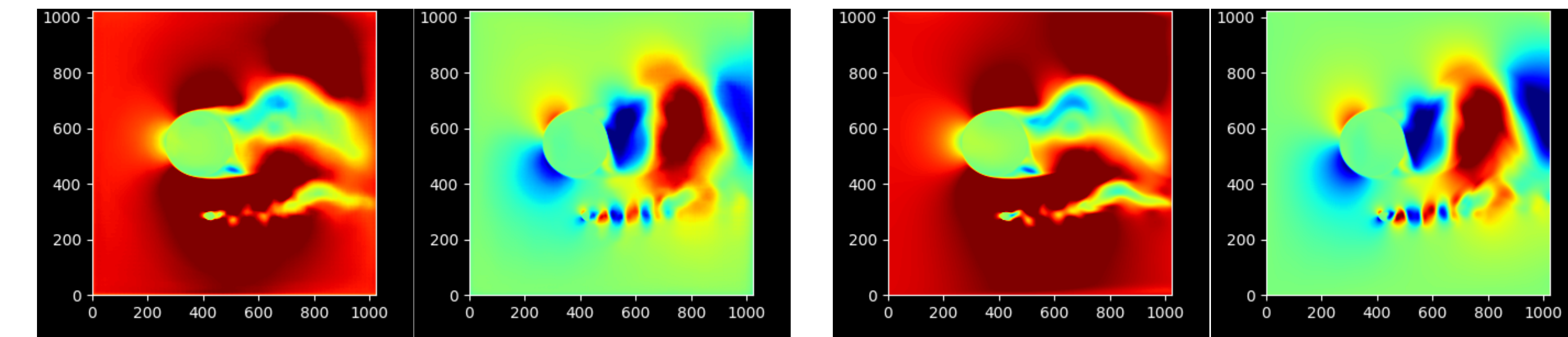
x, y, t の3次元畳み込み層と逆畳み込み層の Encoder-decoder 型で、スキップ接続を導入している

3フレームのデータを時間の1次元とする

入力: 密度、流速、物体形状 (符号付き距離関数)

出力: 密度、流速

### CNN による流速の予測



CNN モデルによる x, y 方向の流速予測 (左)、格子ボルツマン法の計算による x, y 方向の流速 (右)

## 4 まとめと今後の研究計画

GNN による長時間分子動力学予測では、提案モデルの BOTAN で静的構造からガラスの動力学を高速に予測できることが明らかになった。特に、先行研究と異なり、粒子の隣接関係を GNN のエッジとして学習させることで、正確な動力学の予測が可能である。今後は GNN による高精度予測を反応座標としてサンプリングに活用することなど、分子動力学の加速への利用を進める。

CNN による非圧縮性流体計算予測では、提案した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る。今後は、損失関数の工夫や、GNN で得られたノードとエッジを同時に学習することで局所的な流れの特徴を大域的な予測の精度向上に利用する手法などを検討して、導入する予定である。