

偏微分方程式の構造を保存する機械学習手法

株式会社 R I C O S 堀江正信

Masanobu Horie

RICOS Co. Ltd.

2026 年 3 月 27 日

1 序論

物質が流れによって移動する輸送現象の数値解析は、数学的に興味深い対象であるだけでなく、気象などの自然現象や、工業製品の設計・性能評価においても重要な位置を占めている。しかしながら、古典的な数値解析手法では予測の計算に時間がかかることが多く、また並列計算による高速化のためには膨大な計算機リソースが必要となってしまう、リアルタイム解析の障害となっている。そのため、数値解析の結果を機械学習モデルで予測することによって解析の高速化・効率化をはかる試みが近年盛んになってきている。

数値解析を学習する手法として様々なものが考えられるが、graph neural network (GNN) と呼ばれる構造の機械学習モデルを用いて、メッシュや点群といった数値解析でひろく用いられるデータ構造を持つ数値解析データを学習した研究が主流となってきている [1]~[3]。GNN は 1990 年代から 2000 年代にかけて提案された機械学習モデルであり [4]~[7]、グラフと呼ばれるメッシュを一般化したデータ構造に対して学習ならびに予測を実行できる。実際に、メッシュで表現されたデータに対して GNN を用いて形状認識を行っている例が存在する [8,9]。また、GNN はメッシュ以外にも化学物質 [10,11] やソーシャルネットワーク [12] などにも幅広く適用されている。

しかしながら、多くの GNN では入力形状に回転や平行移動といった変換を施すと入力データの値が異なってしまうため、予測結果が不安定になるといった問題が見られる。物理現象には、入力に回転や平行移動を施すと出力も同じ変換をうけるという同変性 (equivariance) と呼ばれる性質があるが、GNN をはじめとした通常の機械学習モデルは同変性を持たないことがその原因である。一方で、機械学習モデルに同変性を持たせると一般的にモデルが複雑化し、計算に時間がかかることが多い。

そこで筆者らは、高速に計算でき同変性を持つ GNN である IsoGCN と呼ばれるモデル [13,14] とそれを改善して輸送現象や非圧縮性流れなどに適用できる physics-embedded neural network (PENN) [15] を提案した。これらのモデルは、その構成から、以下の性質を持つことが報告されている：

- GNN をベースにしているため任意のメッシュや点群に適用することができる
- 特に、GNN を簡略化したモデルである GCN [16] をベースにしているため高速に計算することができる
- 回転・平行移動・鏡映など合同変換に対する同変性を有するため、入力データにそれらの変換が適用されても予測精度が劣化しない

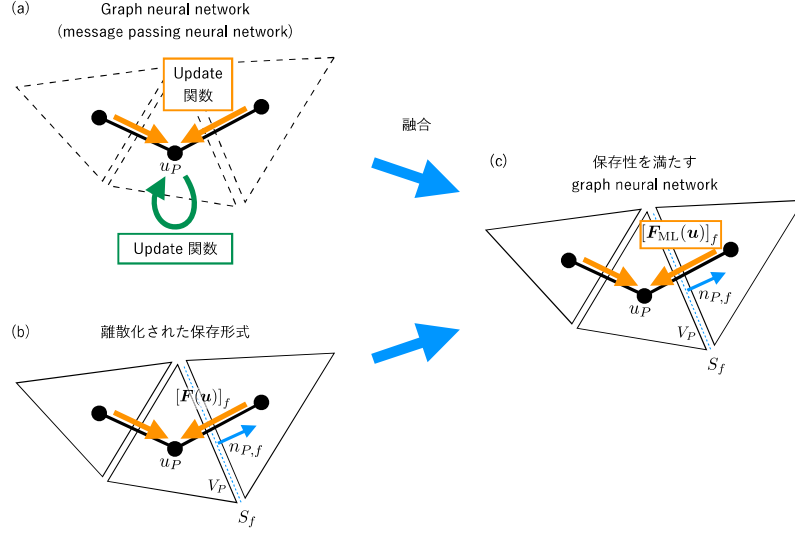


図 1: (a) GNN の代表的な形式である MPNN、(b) 空間離散化された保存形式、(c) 保存性を満たす GNN の模式図。

- 空間微分演算子を内包しているため、偏微分方程式の学習に適している
- 境界条件を満たすことが数学的に保証されている
- 陰解法ベースの時間発展により、時間刻み幅を大きくとっても計算が不安定化しにくい

IsoGCN ならびに PENN は広いクラスの偏微分方程式に適用できる機械学習フレームワークであるが、一方で、輸送現象を考慮する上で重要となる、輸送される物質の保存性が考慮されていなかった。また、スケール変換に対しての同変性も有しておらず、したがって流体現象の汎用的な記述において中心的な役割を果たす相似則の考慮ができなかった。そこで本研究では、合同変換と拡大縮小を合わせた概念である相似変換に対する同変性に加え、保存性を満たす機械学習モデルである FluxGNN [17] について紹介する。

2 問題設定

本研究では、以下の形で表現される、保存形式 (conservative form) を考察する:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) + \mathbf{S} \quad (1)$$

ここに、 $\mathbf{u}$ は p 階の時空間に依存するテンソル場、 $\mathbf{F}$ は $p+1$ 階テンソル値関数であり、 $\mathbf{S}$ は p 階テンソルに値を持つ source 項である。保存形式では、局所的に物理量 $\mathbf{u}$ の保存性が満たされることが知られており、したがって $\mathbf{S} = \mathbf{0}$ かつ大域的に保存性が成り立つ境界条件においては大域的な保存性を満たす。

保存形式は多様な物理現象において見られる。例えば 1 階テンソル場の流速 $\mathbf{c}$ 、2 階テンソル場の拡散係数 $\mathbf{D}$ のもとでの source なしの移流拡散方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{c}\mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{D}\nabla \mathbf{u} \quad (2)$$

では

$$\mathbf{F}_{\text{conv.-diff.}}(\mathbf{u}) := \mathbf{c}\mathbf{u} - \mathbf{D}\nabla\mathbf{u} \quad (3)$$

かつ $\mathbf{S} = \mathbf{0}$ とし $\mathbf{F}_{\text{conv.-diff.}}$ を $\mathbf{F}$ に代入することで式 (1) に帰着することがわかる。同様に、Euler 方程式、Navier–Stokes 方程式など、物理現象にみられる多様な方程式がこの保存形式で表現できることが知られている。

3 GNN

本章では、任意の構造をもったメッシュを取り扱える機械学習モデルである GNN について紹介する。そのために、まずは基本となるグラフならびに GNN の多くのクラスを統一的に取り扱うことができる MPNN (message passing neural network) の定式化について述べる。

3.1 グラフ

解析領域を離散化して得られるメッシュはグラフデータとみなすことができる。グラフ $\mathcal{G}$ は頂点集合 $\mathcal{V}$ と頂点の繋がりを表す辺集合 $\mathcal{E} \subset \mathcal{V} \times \mathcal{V}$ の二つ組 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ によって表現される。ここで簡単のために、グラフの頂点に 1 から始まる連番の番号を付し、その番号と頂点集合の元を同一視する。したがって、今の場合、 $|\mathcal{V}|$ を集合 $\mathcal{V}$ の要素の個数とすると、 $\mathcal{V} = \{1, 2, \dots, |\mathcal{V}|\}$ である。また、グラフの頂点上に特徴量が定義されている場合は頂点の番号を用いて $\mathbf{H} = \{\mathbf{h}_v\}_{v \in \mathcal{V}}$ のように記述する。メッシュの頂点座標や頂点上の $\mathbf{u}$ の値などは頂点上の特徴量とみなせる。同様に、辺上に特徴量が定義されている場合は $\{\mathbf{e}_{ij}\}_{(i,j) \in \mathcal{E}}$ と記述する。

数値解析ではさまざまな節点数、要素コネクティビティを持つメッシュを取り扱う必要があるが、古典的なニューラルネットワークでは可変長の入力に対応できないため、それらを扱うことは困難である。したがって、メッシュデータを適切に取り扱うためには GNN が必要となる。

3.2 MPNN

GNN にはさまざまな種類が提案されているが、その多くは MPNN [10] の枠組みで理解できる。MPNN はふたつの学習可能関数 (通常ニューラルネットワークが用いられる)、message 関数 f_{message} と update 関数 f_{update} を用いて

$$\mathbf{m}_i := \sum_{j \in \mathcal{N}_i} f_{\text{message}}(\mathbf{h}_{\text{in},i}, \mathbf{h}_{\text{in},j}, \mathbf{e}_{\text{in},ij}) \quad (4)$$

$$\mathbf{h}_{\text{out},i} := f_{\text{update}}(\mathbf{h}_{\text{in},i}, \mathbf{m}_i) \quad (5)$$

と記述できる図 1 (a)。ここに、 $\{\mathbf{h}_{\text{in},i}\}_{i \in \mathcal{V}}$ は入力頂点特徴量、 $\{\mathbf{e}_{\text{in},ij}\}_{(i,j) \in \mathcal{E}}$ は入力辺特徴量、 $\mathcal{N}_i$ は頂点 i と隣接している (辺でつながっている) 頂点の集合である。また、この演算 1 回でグラフの 1 ホップ隣の情報まで考慮できるが、 k 回同様の演算を繰り返すことにより、 k ホップ先の情報まで考慮することが可能である。

4 保存性・さまざまな対称性を満たすモデルの考察

保存性を満たす機械学習モデルを構成するために、保存形式式 (1) の積分形を考える:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V dV \mathbf{u} = - \oint_{\partial V} dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) \quad (6)$$

ここで空間的に離散化されたメッシュを考え、式 (6) を以下のように空間的に離散化する:

$$\frac{\partial}{\partial t} V_P \mathbf{u}_P = - \sum_{f \in \mathcal{F}_P} S_f \mathbf{n}_{P,f} \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{u})]_f \quad (7)$$

ここに、 P は現在着目しているメッシュのセル番号であり、 V_P はセル P の体積、 $\mathcal{F}_P$ はセル P に隣接する面番号の集合、 S_f と $\mathbf{n}_{P,f}$ はそれぞれ面 f における面積と (セル P から見た) 外向き法線ベクトルである (図 1 (b))。また、セル P における $\mathbf{u}$ の値を、セルの重心における $\mathbf{u}$ の値で代表させることにより、空間 1 次精度の補間を行っていることに相当し、したがってこの離散化は空間 2 次精度となる。この表式は有限体積法や不連続 Galerkin 法など、さまざまな保存的数値解析スキームで用いられている。

以上より、保存性を満たす機械学習モデルは以下のような形式で記述できることがわかる:

$$\frac{\partial}{\partial t} V_P \mathbf{u}_P = - \sum_{f \in \mathcal{F}_P} S_f \mathbf{n}_{P,f} \cdot [\mathbf{F}_{\text{ML}}(\mathbf{u})]_f \quad (8)$$

ここに、 $\mathbf{F}_{\text{ML}}$ が学習可能関数である。この形式は、グラフの頂点をセル、グラフのエッジを面とみなした場合、MPNN における update 関数を省略し、message 関数に $\mathbf{F}_{\text{ML}}$ を用いたものとみなすことができる (図 1 (c))。

また、 $\mathbf{F}_{\text{ML}}$ をテンソルの変換則を満たすように構成することで、相似変換について対称性を満たしつつ保存性を実現する機械学習モデルが構成できる。

5 数値実験

構成した機械学習モデルの有用性を検証するために、混相流のモデルのひとつである混合体モデル (mixture model) での数値実験を行った。混合体モデルは、以下の方程式系で記述される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) = & -\nabla \cdot [\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \rho \nu (\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^\top) + p_{\text{pgy}} \mathbf{I}] \\ & - \mathbf{g} \cdot \mathbf{y} \nabla \rho, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha = -\nabla \cdot [\mathbf{u} \alpha - D_\alpha \nabla \alpha], \quad (10)$$

$$\rho = \alpha \rho_{\text{low}} + (1 - \alpha) \rho_{\text{high}} \quad (11)$$

ここに、 $\mathbf{u}$ 、 ρ_{high} 、 ρ_{low} 、 α 、 $\mathbf{I}$ 、 ν 、 D_α はそれぞれ流速、高密度流体の密度 (=1000)、低密度流体の密度 (=990)、低密度流体の体積分率、単位行列、動粘度 (= 10^{-3})、体積分率の拡散係数 (= 10^{-6}) である。また、 $p_{\text{pgy}} := p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}$ は重力ポテンシャルの影響を除いた圧力であり、 $\mathbf{g}$ 、 $\mathbf{y}$ はそれぞれ重力加速度、解析領域の y 座標 (高さ方向) である。境界条件は系が孤立的になるように設定した。このとき、 α が大域的な保存量となり、 $\frac{d}{dt} \int_\Omega dV \alpha = 0$ が満たされる。この支配方程式に対し、training、validation、test dataset としてそれぞれ 5、2、2 のサンプルを作成し、学習を行った。また、手法の外挿性能の評価のため、test dataset に回転をほどこした rotation、ス

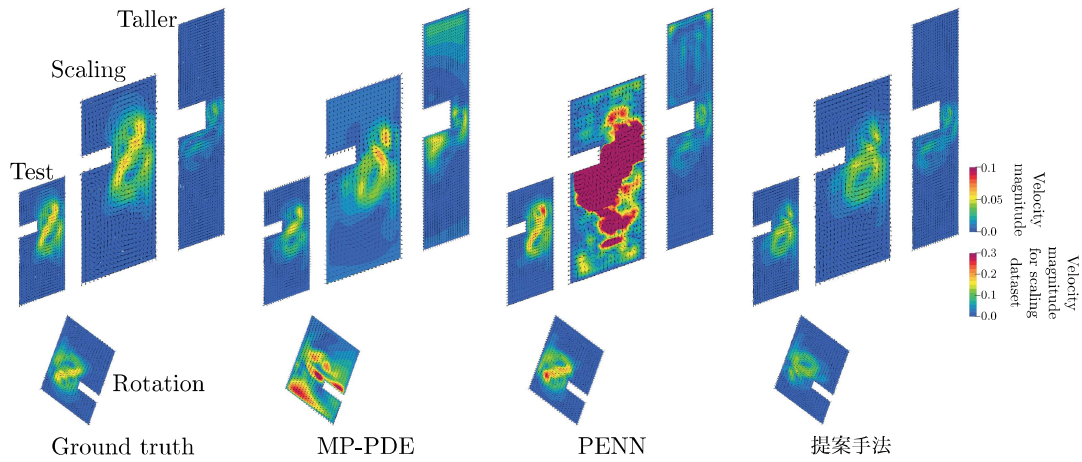


図 2: それぞれの機械学習モデルでの予測結果の流速の可視化。

ケーリングをほどこした scaling dataset のほかに、学習データよりも解析領域が高さ方向に高い taller dataset を作成した。

機械学習手法の比較対象として、提案手法と同様に非構造型格子に適用でき、境界条件の考慮が可能である MP-PDE および PENN を選択した。また、既存の数値解析手法として、提案手法とコードの大部分が共通している有限体積法 (以下 FVM) を比較した。この比較をすることにより、プログラミング言語やアルゴリズムの実装の差による計算速度の違いを極力排除し、機械学習モデルを導入した効果の評価が可能となる。

それぞれの機械学習モデルでの可視化結果を図 2、3、4 に示す。MP-PDE では回転 (rotation)・拡大縮小 (scaling) に対して同変性を有さないため、それらの変換に対して精度が劣化している。PENN では回転に対して同変性があるため精度の劣化はないが、拡大縮小に対しては精度が大幅に低下している。提案手法では回転・拡大縮小に対して同変性があるためこれらの変換に対して精度の劣化が数値誤差程度に小さい。加えて、教師データよりも高さが高いデータセット (taller) に対しても精度が劣化していない。MP-PDE や PENN では高さが増加した領域において非物理的な流速・圧力・体積分率の変化が見られるが、提案手法はそれらが抑えられている。これは、提案手法が有する保存性が汎化性能の向上に寄与しているためと考えられる。

それぞれの機械学習モデルでの予測精度および保存性の誤差の評価結果を表 1 に示す。Test、rotation データセットではモデルの表現力の高さと回転同変性のため PENN が優越しているが、scaling、taller データセットでは拡大縮小同変性と保存性による汎化性能の向上のため提案手法の精度が最も高い結果となった。さらに、提案手法は FVM と同等の保存性を有しており、保存性のグラフニューラルネットワークへの導入が成功したことがわかる。

6 結論

本研究では、保存性を満たす機械学習モデルのための条件について考察し、実際に構成した機械学習モデルが保存性を満たすことを確認した。今後は、より複雑な形状などに適用し、実問題において機械学習モデルの有用性を確認する予定である。

■謝辞: 本研究は、筑波大学三日直登助教との共同研究に基づく。また、JST さきがけ JPMJPR21O9、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度 JPJ004596、JSPS 科研費 22H03601、23H04532、23KK0182 の支援を受け

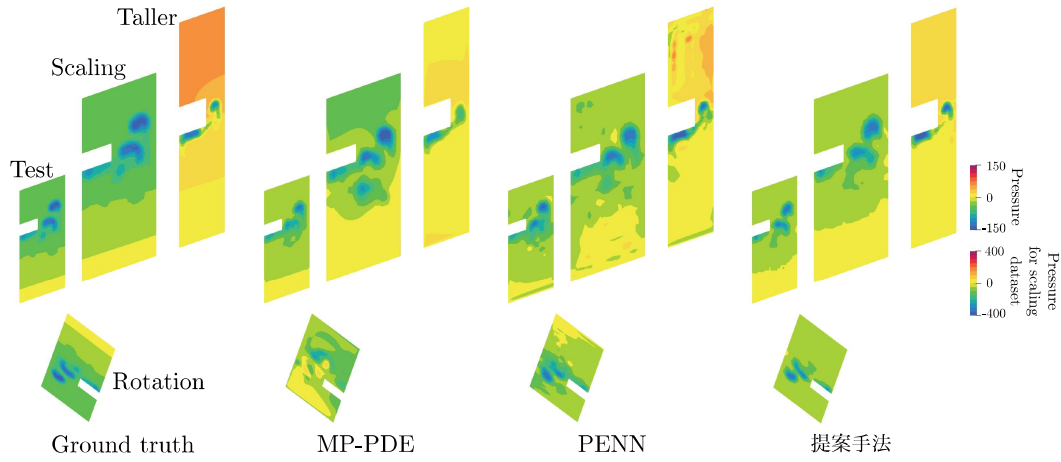


図 3: それぞれの機械学習モデルでの予測結果の圧力の可視化。

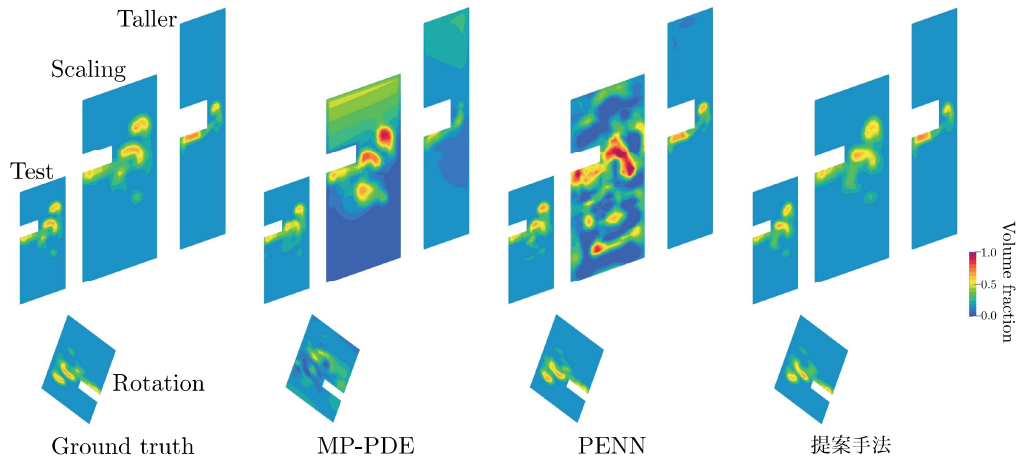


図 4: それぞれの機械学習モデルでの予測結果の体積分率の可視化。

たものである。

参考文献

- [1] Ferran Alet, Adarsh Keshav Jeewajee, Maria Bauza Villalonga, Alberto Rodriguez, Tomas Lozano-Perez, and Leslie Kaelbling. Graph element networks: adaptive, structured computation and memory. In *ICML*, 2019.
- [2] Alvaro Sanchez-Gonzalez, Jonathan Godwin, Tobias Pfaff, Rex Ying, Jure Leskovec, and Peter W Battaglia. Learning to simulate complex physics with graph networks. *arXiv preprint arXiv:2002.09405*, 2020.
- [3] Kai-Hung Chang and Chin-Yi Cheng. Learning to simulate and design for structural engineering. In *International Conference on Machine Learning*, pp. 1426–1436. PMLR, 2020.
- [4] Igor I Baskin, Vladimir A Palyulin, and Nikolai S Zefirov. A neural device for searching direct correlations between structures and properties of chemical compounds. *Journal of chemical information and computer*

表 1: 数値流体解析データ群における MSE loss ($\pm$ 平均標準誤差) と保存性の誤差の比較結果。

手法	データセット	MSE u ($\times 10^{-1}$)	MSE p ($\times 10^{-1}$)	MSE α ($\times 10^{-1}$)	保存性の誤差 α ($\times 10^{-5}$)
FVM	test	19.501 $\pm$ 0.149	37.706 $\pm$ 0.194	2.896 $\pm$ 0.030	0.01 $\pm$ 0.00
MP-PDE	test	1.532 $\pm$ 0.010	0.941 $\pm$ 0.008	1.021 $\pm$ 0.010	1001.95 $\pm$ 120.43
PENN	test	0.619 $\pm$ 0.005	0.598 $\pm$ 0.005	0.358 $\pm$ 0.005	1356.62 $\pm$ 283.00
提案手法	test	1.202 $\pm$ 0.008	1.143 $\pm$ 0.008	0.349 $\pm$ 0.005	0.06 $\pm$ 0.03
FVM	rotation	18.363 $\pm$ 0.128	22.366 $\pm$ 0.123	2.930 $\pm$ 0.030	0.01 $\pm$ 0.00
MP-PDE	rotation	11.523 $\pm$ 0.075	10.883 $\pm$ 0.078	9.528 $\pm$ 0.072	5307.85 $\pm$ 1009.04
PENN	rotation	0.622 $\pm$ 0.004	0.592 $\pm$ 0.005	0.355 $\pm$ 0.005	1302.98 $\pm$ 153.02
提案手法	rotation	1.207 $\pm$ 0.007	1.175 $\pm$ 0.008	0.351 $\pm$ 0.005	0.01 $\pm$ 0.00
FVM	scaling	19.411 $\pm$ 0.149	38.106 $\pm$ 0.193	2.918 $\pm$ 0.030	0.01 $\pm$ 0.00
MP-PDE	scaling	5.072 $\pm$ 0.034	4.211 $\pm$ 0.040	5.604 $\pm$ 0.046	6401.93 $\pm$ 1806.50
PENN	scaling	NaN $\pm$ NaN	NaN $\pm$ NaN	NaN $\pm$ NaN	NaN $\pm$ NaN
提案手法	scaling	1.219 $\pm$ 0.009	1.228 $\pm$ 0.008	0.356 $\pm$ 0.005	0.05 $\pm$ 0.01
FVM	taller	NaN $\pm$ NaN	NaN $\pm$ NaN	NaN $\pm$ NaN	NaN $\pm$ NaN
MP-PDE	taller	8.377 $\pm$ 0.081	2.472 $\pm$ 0.024	2.823 $\pm$ 0.033	16770.80 $\pm$ 3293.59
PENN	taller	1.476 $\pm$ 0.016	1.887 $\pm$ 0.014	0.357 $\pm$ 0.006	4799.89 $\pm$ 1574.43
提案手法	taller	1.184 $\pm$ 0.009	0.966 $\pm$ 0.008	0.337 $\pm$ 0.006	0.02 $\pm$ 0.00

sciences, Vol. 37, No. 4, pp. 715–721, 1997.

- [5] Alessandro Sperduti and Antonina Starita. Supervised neural networks for the classification of structures. *IEEE Transactions on Neural Networks*, Vol. 8, No. 3, pp. 714–735, 1997.
- [6] Marco Gori, Gabriele Monfardini, and Franco Scarselli. A new model for learning in graph domains. In *Proceedings. 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks, 2005.*, Vol. 2, pp. 729–734. IEEE, 2005.
- [7] Franco Scarselli, Marco Gori, Ah Chung Tsoi, Markus Hagenbuchner, and Gabriele Monfardini. The graph neural network model. *IEEE Transactions on Neural Networks*, Vol. 20, No. 1, pp. 61–80, 2008.
- [8] Matthias Fey, Jan Eric Lenssen, Frank Weichert, and Heinrich Müller. Splinecn: Fast geometric deep learning with continuous b-spline kernels. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 869–877, 2018.
- [9] Federico Monti, Davide Boscaini, Jonathan Masci, Emanuele Rodola, Jan Svoboda, and Michael M Bronstein. Geometric deep learning on graphs and manifolds using mixture model cnns. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 5115–5124, 2017.
- [10] Justin Gilmer, Samuel S Schoenholz, Patrick F Riley, Oriol Vinyals, and George E Dahl. Neural message passing for quantum chemistry. In *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning-Volume 70*, pp. 1263–1272. JMLR. org, 2017.
- [11] Johannes Klicpera, Janek Groß, and Stephan Günnemann. Directional message passing for molecular graphs. In *ICLR*, 2020.
- [12] Wenqi Fan, Yao Ma, Qing Li, Yuan He, Eric Zhao, Jiliang Tang, and Dawei Yin. Graph neural networks for social recommendation. In *The World Wide Web Conference*, pp. 417–426, 2019.

- [13] Masanobu Horie, Naoki Morita, Toshiaki Hishinuma, Yu Ihara, and Naoto Mitsume. Isometric transformation invariant and equivariant graph convolutional networks. In *International Conference on Learning Representations*, 2021.
- [14] 堀江正信, 森田直樹, 井原遊, 三目直登. グラフニューラルネットワークを用いたメッシュベース数値解析の汎用的な学習. 日本計算工学会論文集, Vol. 2020, No. 1, pp. 20201005–20201005, 2020.
- [15] Masanobu Horie and Naoto Mitsume. Physics-embedded neural networks: Graph neural PDE solvers with mixed boundary conditions. In Alice H. Oh, Alekh Agarwal, Danielle Belgrave, and Kyunghyun Cho, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2022.
- [16] Thomas N. Kipf and Max Welling. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In *ICLR*, 2017.
- [17] Masanobu Horie and Naoto Mitsume. Graph neural PDE solvers with conservation and similarity-equivariance. In *Forty-first International Conference on Machine Learning*, 2024.