

## 拡散方程式に対する RBF-FD 法と GNN による時間発展近似の比較

松岡俊文

深田地質研究所

Comparison of time evolution approximation by RBF-FD method and GNN for diffusion equation

MATSUOKA Toshifumi

Fukada Geological Institute

要旨：本研究では拡散方程式に対して、有限差分法（FDM）、メッシュフリーの有限差分法（RBF-FD）、およびグラフニューラルネットワーク（GNN）を比較した。RBF-FD 法では、多項式を加えた多重調和スプラインを基底関数として用い、高い空間精度と安定性を実現した。グラフニューラルネットワークは、空間座標・初期値を入力とし、隣接関係に基づく情報伝播を通じて、各点の時間変化量を学習する構造を持つ。これは、拡散方程式におけるラプラシアン演算子をデータ駆動的に深層学習モデルに内在化するものであり、学習型時間発展写像とみなすことができる。数値実験の結果、GNN は学習時に用いた格子点数（ $50 \times 50$ ）とは異なる格子分解能（ $60 \times 60$ ）にも適用可能であり、空間分解能に依存しない汎化能力を示した。これらの結果から、本研究で構築したニューラルネットワークは、従来の差分法とメッシュフリー法の双方の利点を併せ持つ新しい数値解析枠組みとして有効であることが示された。

キーワード：有限差分法、放射基底関数近似有限差分法、グラフニューラルネットワーク、拡散方程式、汎化能力

Abstract: This study presents a comparative analysis of three numerical approaches applied to the diffusion equation: the conventional finite difference method, the mesh-free radial basis function-generated finite difference (RBF-FD) method, and a graph neural network (GNN) designed to approximate temporal evolution. In the mesh-free formulation, the RBF-FD approach constructs a local finite-difference operator using polyharmonic spline basis functions, achieving both high spatial accuracy and numerical stability. The GNN framework learns the temperature evolution directly from training data. Each node of the graph represents a spatial location characterized by its coordinates, initial conditions, and local neighborhood connectivity. Through successive message-passing operations, the network implicitly learns local diffusion-like interactions. Numerical experiments demonstrated that the GNN successfully reproduces the time evolution of diffusion even when applied to a spatial resolution different from the training resolution (from a  $50 \times 50$  to a  $60 \times 60$  grid). These findings indicate that the proposed GNN-based model serves as a flexible and accurate surrogate for classical numerical solvers, bridging traditional finite-difference and mesh-free approaches while enabling efficient, data-driven simulation of diffusion phenomena.

Keywords: finite difference method, RBF-FD method, graph neural network, diffusion equation, generalization ability

## 1. はじめに

偏微分方程式 (PDE) の数値解法は工学分野では不可欠であり、多様な手法が長い歴史をかけて開発されてきた。数学的には、微分に対する差分近似と言う概念自体は 18 世紀のオイラーの時代から知られていた。しかしながら実際の大規模な数値計算として広く利用されるようになったのは第二次世界大戦時の米国での弾道計算が有名である。一方で、戦前から気象や波動に対する有限差分の利用に関する研究は始められており、このとき用いられたのが、今日でいう有限差分法 (FDM) である。

有限差分法は格子 (メッシュ) の生成を前提としており、複雑な幾何形状や不均質な係数場を扱う場合には、格子生成や要素分割が計算コストや実装上の大きな負担となる。一方で、観測データとシミュレーション結果を比較する際、観測点が規則格子上に配置されていることはまれである。このため、観測データとの比較と言う場面などでも従来の規則格子は、数値解析の制約として指摘されてきた。こうした背景からメッシュフリー手法が数多く提案されてきた。有限差分近似の枠組みをメッシュフリーへ拡張した手法として RBF-FD (Radial Basis Function-generated Finite Differences) と呼ばれる手法が知られている。この手法は、規則格子点ではなく散乱した点上での高精度な微分演算子を近似できる実用的アプローチとして注目されている (Fornberg, B., Flyer, N. (2015)).

一方、AI 技術の発展を背景にデータ駆動型の深層学習を利用した偏微分方程式の解法が注目を集めている。代表例が Physics-Informed Neural Networks (PINNs) であり、Raissi (2019) らにより体系化された。PINNs は、座標 (必要に応じて時間も) を入力として、連続関数としての解を近似し、物理方程式や初期条件と境界条件などを損

失関数に直接組み込むことで、格子生成に縛られない柔軟な解法を可能にした。この意味において、PINNs は完全なメッシュフリーのシミュレーション手法と言える (松岡 2023, 2024)。しかしこの方法論は、教師データとしての観測点が限られる場合や高次導関数を多用する場合には、学習が不安定になることも指摘されている。

近年 Graph Neural Networks (GNNs) と呼ばれるネットワークを利用したシミュレーションも急速に進展している (佐藤, 2024)。GNN は 2000 年代の理論化を経て (Scarselli, F., et al., 2008), 2017 年の Message Passing Neural Network (MPNN) 枠組みで統一的に整理され普及が加速した (Gilmer, J., et al 2017)。物理シミュレーション分野では、粒子系やメッシュをグラフとして表現し、近傍とのメッセージパッシングを通じて局所的な相互作用や差分近似を学習する枠組みが、流体・弾性などで実証されている (GNS, MeshGraphNets など) (Sanchez-Gonzalez, A., et al. 2020, Pfaff, T., et al., 2021)。

この様に近年開発が進められているこれらの深層学習を利用した偏微分方程式の解法の手法は、メッシュフリーの手法であり、格子生成のための労力から解放され、その利用価値は高い。本研究では、2 次元の熱伝導方程式を対象に、メッシュフリーの物理シミュレーションに関して議論を行う。具体的な適用例として RBF-FD と GNN 手法を検討した。

## 2. 問題設定

本研究では、放物型の偏微分方程式である熱伝導方程式を題材にして、有限差分法 (FDM)、メッシュフリーの差分法 (RBF-FD)、さらにグラフニューラルネットワーク (GNN) の 3 手法を用いた数値解法を実施し、これらを比較検討する。

比較が容易で公平となるように、計算モデルとしては解析解が存在する 2 次元の均質場とした。

対象とするのは以下の熱伝導係数  $K$  を持つ 2 次元熱伝導方程式である。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = K(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}) \quad (1)$$

ここで  $u(x, y, t)$  は温度分布であり、今回は熱伝導係数は座標には依存しない  $K=0.1$  の定数とする。境界  $\partial \Omega$  では Dirichlet 条件  $u(x, y, t) = 0$  を満足しているとする。すなわち境界はすべて吸収壁として扱い、領域内部の熱が外部に漏れ出す設定と

なっている。初期条件はディリクレ境界条件の場合のラプラシアン固有値問題の基底固有モード

$$u(x, y, 0) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad (2)$$

とした。すると初期条件と境界条件に対する解析解は以下のように、時間に対して熱伝導係数に比例して温度は拡散し、温度は指数関数的に減衰する。

$$u(x, y, t) = \exp(-2\pi^2 Kt) \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad t \geq 0 \quad (3)$$

本研究ではこの解析解を基準として、各シミュレーション手法の比較検討を進める。

計算領域は  $x$  方向、 $y$  方向ともに  $[0, 1]$  の単位正方形とした。時間発展は 0 から 0.12 までを対象とし、計 7 時刻とした。差分法における時間積分には Crank–Nicolson 法を適用する。図 1 に設定した初期条件の 2 次元分布を示す。また図 2 は時刻が 0 から 0.12 まで 7 時刻に関して、 $y = 0.5$  での断面における温度分布を示す。

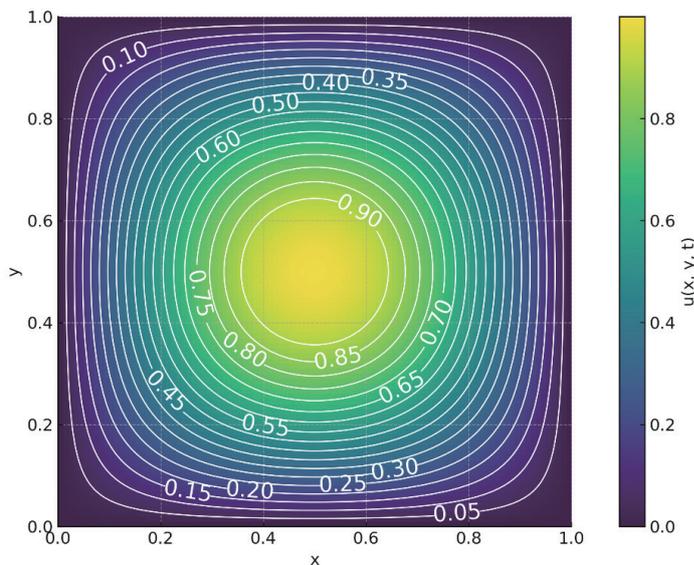


図 1 (式 2) で与えられる初期条件としての温度分布。

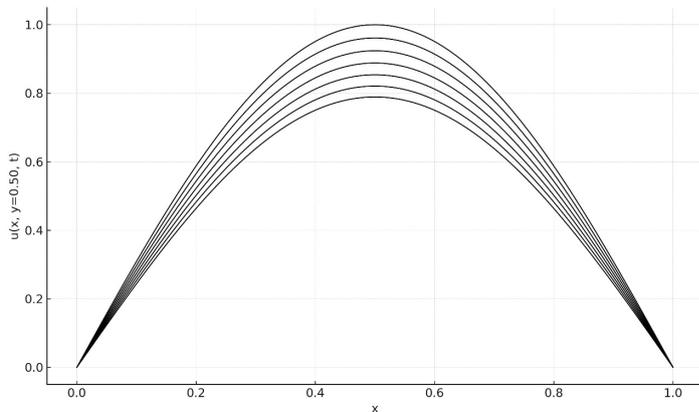


図 2  $y=0.5$  での断面線上での温度分布の解析解。時刻は 0 から 0.12 まで、0.02 刻みで、7 本の温度分布の変化が示されている。

### 3 有限差分法と RBF-FD 法

#### 3.1 有限差分法 (FDM)

有限差分法は、広く知られているように最も基本的な数値解法の一つであり、連続関数の微分を有限差分で近似する。本研究で対象とする熱伝導方程式においては、2 次精度の中央差分を用いて空間離散化を行い、時間発展には Crank–Nicolson 法を採用した。Crank–Nicolson 法は陰的かつ 2 次精度を持ち、数値安定性に優れることから熱伝導方程式の標準的な基準解法とさ

れている。

### 3.2 RBF-FD 法 (Radial Basis Function-generated Finite Differences)

RBF-FD 法は規則格子を前提としない差分近似であり、散乱点集合上で微分演算子を高精度に近似できる手法である。熱伝導方程式 (式 1) を数値的に解くには、各時刻で 2 次の偏微分の値

$$\Delta u(x_0) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (4)$$

を評価する必要がある。このため、中心  $x_0 = (x_0, y_0)$  の近傍で選んだ  $N$  点  $\{x_j\}_{j=1}^N$  の散乱点

$$\mathcal{X} = \{x_j = (x_j, y_j)\}_{j=1}^N \quad (5)$$

を使って以下のようにラプラシアンを重み付けで近似する。

$$\Delta u(x_0) \approx \sum_{j=1}^N w_j u(x_j) \quad (6)$$

本研究では散乱点として  $N=31$  点のケースのテストを行った。重み  $\{w_j\}$  は、以下の 2 種類の厳密再現条件を満たすように決定される。

まず、放射基底関数 (RBF)  $\phi(r)$  を導入する。ここで  $r = \|x - x_j\|$  とする。各  $j = 1, \dots, N$  について以下の等式が成立していることを最初の制約条件とする。

$$(L\phi(\|x - x_j\|))|_{x=x_0} = \sum_{k=1}^N w_k \phi(\|x_j - x_k\|) \quad (7)$$

ここで  $L$  はラプラス演算子とする。さらに次数 3 以下の多項式基底を導入する。

$$\{1, x, y, x^2, xy, y^2, x^3, x^2y, xy^2, y^3\} \quad (8)$$

この基底多項式  $p_m(x)$  ( $m = 1, \dots, M$ ) ( $M = 10$ ) に対しても、次の等式が成立する条件を加える。

$$(Lp_m(x))|_{x=x_0} = \sum_{k=1}^N w_k p_m(x_k) \quad (9)$$

ここで、上記の多項式条件を加える理由は、RBF 条件のみでは、重みを求める際の連立方程式が悪条件化し不安定になるためである。多項式再現性を課すことで、もし  $u(x)$  が 3 次多項式であれば厳密に微分演算を再現でき、数値的安定性も保証される。上記の 2 つの条件を同時に満たす  $w$  を得るために、ラグランジュ乗数  $\lambda \in \mathbb{R}^M$  を利用する。すると  $w$  は、次の連立方程式を解くことによって得られる。

$$\begin{bmatrix} \Phi & P \\ P^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ell_r \\ \ell_p \end{bmatrix} \quad (10)$$

ここで

$$\Phi_{jk} = \phi(\|x_j - x_k\|), \quad P_{jm} = p_m(x_j), \\ \ell_r = [(L\phi(\|x - x_j\|))|_{x=x_0}]_{j=1}^N, \quad \ell_p = [(Lp_m(x))|_{x=x_0}]_{m=1}^M \quad (11)$$

この連立方程式の未知数は  $w \in \mathbb{R}^N$  と  $\lambda \in \mathbb{R}^M$  の合計  $N + M$  個であり、式の数も同じく  $N + M$  本となる。ここでは  $N = 31, M = 10$  なので、未知数は合計 41 となる。

本研究では放射基底関数 (RBF) とし、数値安定性の高い多重調和スプライン関数 (Polyharmonic Spline (PHS)) を用いた。

$$\phi(r) = r^5 \quad (12)$$

このとき 2 次元では

$$\Delta \phi(x) = 25r^3 \quad (r > 0) \quad (13)$$

が成り立つ。具体的に放射基底関数 (RBF) と規定多項式、さらに散乱点の座標値が与えられると、上記の連立方程式の行列要素と右辺が計算出来て、重み  $w$  は一意に求まる。そのため前処理で全ての散乱点に対して重みは計算しておく。また拡散係数は均質媒質の為、重み  $w_j$  は時間発展によって変化することはない。

時間発展には Crank–Nicolson (CN) 法を用い、RBF-FD による離散ラプラシアンを  $L_h$  とすると

次式のように書ける.

$$\left( I - \frac{\Delta t}{2} KL_h \right) u^{n+1} = \left( I + \frac{\Delta t}{2} KL_h \right) u^n \quad (14)$$

となる. ここで  $u^n$  は時刻  $t^n$  における解ベクトル (既知) であり,  $u^{n+1}$  は次の時刻における未知ベクトルとなる. すなわち現在の  $u^n$  は既知であり, CN スキームを解くために  $L_h u$  が必要になるが, その  $L_h u$  を RBF-FD の重み  $w_j$  を使って (式 6) で近似することになる. このように RBF-FD 法はメッシュフリーで, 不規則な点での温度の値を基に, 次の時刻の温度を求めることができる. さらに, 重み係数の数や, 多項式基底の次数を調整することで精度の制御が可能になる. また多項式基底を導入したため, 方程式が正則化され計算の安定性も保証されている.

### 3.3. 数値実験結果

最初に規則格子に対して 5 点中央差分による有限差分法を用いて, 熱伝導方程式の解を求めた. 次に FDM 法の結果の値と, 格子点での解析解との誤差を評価した. 次にこの規則メッシュの全ての格子点の座標値を 20% ランダムに変化させて,

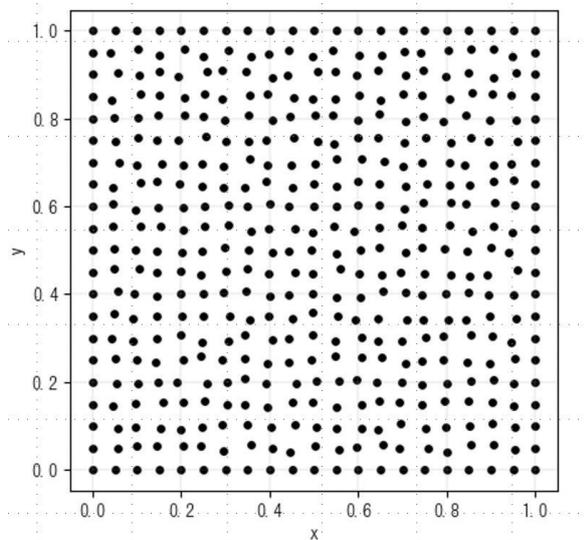


図 3 RBF-FD で設定したメッシュフリーの格子点分布.

RBF-FD で用いる散乱点を作った. 作られたメッシュフリーの散乱点の分布を図 3 に示す. この散乱点に対して上記に述べた RBF-FD 法を適用し, シミュレーションを実施し解析解との誤差を評価した. これらの 2 つの差分法の誤差の比較を表 1 に示す. 表中の  $L^2$  と  $L^\infty$  誤差は以下の式で評価した.

$$\|e\|_{L^2} \approx \sqrt{\sum_{i,j} e_{ij}^2 h_x h_y}, \quad \|e\|_{L^\infty} \approx \max_{i,j} |e_{ij}| \quad (15)$$

数値実験 ( $21 \times 21$  格子,  $k = 0.1$ ,  $\Delta t = 0.02$ ,  $T=0.12$ ) では, RBF-FD は通常の FDM に対し  $L^2$  で約 22 倍,  $L^\infty$  で約 21 倍小さい誤差を示した (表 1 参照). この結果は奇異に感じられるが, この差は空間微分の近似特性に起因する.

RBF-FD は, 多項式再現性と等方性の高い局所近似により, 高精度なラプラシアン近似を与える手法である. 多項式次数  $p = 3$  の付加により, 次数 3 以下の多項式は厳密に再現され, 滑らかな解に対して形式的により高次の空間精度 (実効的には 3 ~ 4 次程度) が得られる. 一方, 5 点中央差分での空間精度は 2 次である. 本研究では  $N = 31$  とし, 周囲点からの情報を等方的に取り込み, 格子整列誤差や分散誤差を抑制できるため, FDM より小さい誤差となった. これらは RBF-FD の代表的な理論的・実証的知見と整合する結果である (Flyer, et al. 2016, Bayona, 2019). 本研究の設定 (PHS  $r^5$ ,  $p = 3$ ,  $N = 31$ ) は RBF-FD 推奨構成に沿っており, 粗めの規則

表 1 規則格子に対する FDM と RBF-FD を適用した場合のシミュレーション結果を解析解との誤差解析結果. 誤差の定義は本文の (式 15) による.

	$L^2$	$L^\infty$
規則格子の FDM	1.80e-4	3.60e-4
RBF-FD	8.25e-6	1.72e-5

格子においても FDM を有意に上回る精度が得られた。

## 4. グラフニューラルネットワーク (GNN)

### 4.1 概要

グラフニューラルネットワーク (Graph Neural Networks; GNNs) は、ノードとエッジから成るグラフ構造を入力として、ノード間の情報交換 (メッセージパッシング) を繰り返すことで特徴量を更新する深層ニューラルネットワークである。ここでは物理シミュレーション (2次元拡散方程式) への適用を考える。まずノードは有限差分法の格子点に対応する概念であるが、ノードの配置は規則格子である必要はなく、メッシュフリーの解法と考える。ただし今回はデータ駆動型の深層学習を使い規則格子とした。しかしながら教師データはこれらの規則格子の全てで与えるのではなく、ランダムに選んだ、50, 100, 1000 点のデータで行った。そのため学習データに関してもメッシュフリーと呼んでも良いと考えている。

今回は各ノードに対して以下のような6つの指標値を与えた。時刻  $t = 0$  での初期値, 推定したい時刻,  $x$  と  $y$  の座標値, この座標点での熱伝導係数  $k$ , さらにマスク値 (その点が境界であるか内部の点であるかの指標値)  $[u_0, t, x, y, k, \text{mask}]$  である。この入力に対して最初に埋め込みを行い, 各ノードの特徴量を 128 次元のベクトルに拡張した。このベクトル量に対して以下のような深層学習の演算操作を行い, 初期値から  $\Delta t$  後の初期値との差分  $\Delta u_i$  を推定した。この値を使って, 更新式  $u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta u_i$  とし, 時間発展を模倣した。本研究ではエッジには特徴量を持たせず, ノード間の 8 近傍接続として構成した。時刻は 0.0 から

0.12 まで 0.02 刻みで合計 7 つの時刻のデータを用意した。

### 4.2 GNN 実装

入力層は初期グラフ  $h^{(0)}$  とし, 各ノード  $i$  の入力特徴は 6 次元ベクトル

$$h_i^{(0)} = [u_i^n, t, x, y, K_i, \text{mask}] \in \mathbb{R}^6 \quad (16)$$

とする。ただし  $u_i^n$  は時刻  $n$  の解である温度,  $K_i$  熱伝導係数である。このままでは表現力が不足するため, 1 層目に埋め込みを行い 128 次元へ拡大写像する。

$$h_i^{(1)} = \sigma(W^{(0)}h_i^{(0)} + b^{(0)}), \quad W^{(0)} \in \mathbb{R}^{128 \times 6}, b^{(0)} \in \mathbb{R}^{128} \quad (17)$$

ここで  $\sigma$  は活性化関数 (ReLU) である。この  $h^{(1)}$  を使って, 層構造が全結合型のニューラルネットワークと同様に  $h(2) \cdots h(N)$  と作ることができる。

全結合型のニューラルネットワークと違って, GNN の場合はノードに影響を及ぼすのは, 近傍のノードのみと考える。この影響を評価する方法は, グラフサンプリング集約法 (GraphSAGE : Graph Sample and aggregate) と呼ばれ, 具体的にはエッジでつながれたノードの特徴量の総和, 平均値, 最小値, 最大値などが知られている。ここでは中間層には GraphSAGE (平均) を用いる。 $l$  層目において, ノード  $i$  の近傍集合  $N(i)$  の平均を

$$m_i^{(l)} = \frac{1}{|N(i)|} \sum_{j \in N(i)} h_j^{(l)} \quad (18)$$

と定義し, 自己特徴と結合して次層を

$$h_i^{(l+1)} = \sigma(W_{\text{self}}^{(l)} h_i^{(l)} + W_{\text{nei}}^{(l)} m_i^{(l)} + b^{(l)}) \quad (19)$$

で更新する。ここで  $W_{\text{self}}^{(l)}, W_{\text{nei}}^{(l)} \in \mathbb{R}^{128 \times 128}$ ,  $b^{(l)} \in \mathbb{R}^{128}$  は学習パラメータである。この演算

を  $L$  層重ねることで、ノード  $i$  の特徴には  $L$ -hop 先の情報まで伝播する。

出力は  $\Delta u$  を予測し、最後に

$$\Delta \hat{u}_i = w_{\text{out}}^T h_i^{(L)} + b_{\text{out}}, \quad \hat{u}_i^{n+1} = u_i^n + \Delta \hat{u}_i \quad (20)$$

で次時刻解を得る。

教師データ  $u_i^{n+1}$  が与えられるとき、損失関数

は各ノードでの平均二乗誤差

$$\mathcal{L} = \frac{1}{|\Omega_{\text{lab}}|} \sum_{i \in \Omega_{\text{lab}}} (\hat{u}_i^{n+1} - u_i^{n+1,*})^2 \quad (21)$$

とし、誤差逆伝播によりパラメータ  $\{W^{(0)}, W_{\text{self}}^{(L)}, W_{\text{nei}}^{(L)}, w_{\text{out}}, \dots\}$  を Adam 法を用いて最適化する。この一連の学習は、 $\Delta t$  ステップの時間発展作用素を近似しているといえる。

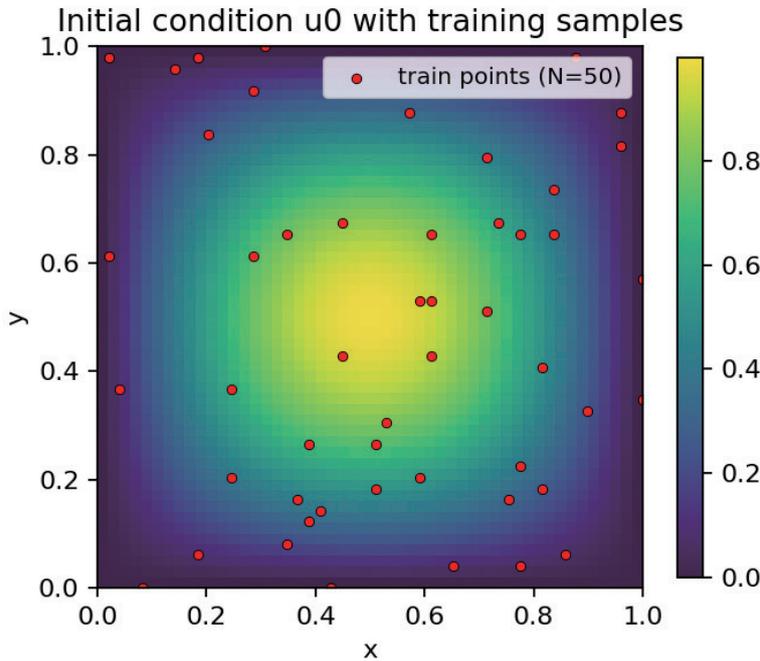


図 4 データ駆動型の GNN で与えた 50 個の学習データ点の分布。

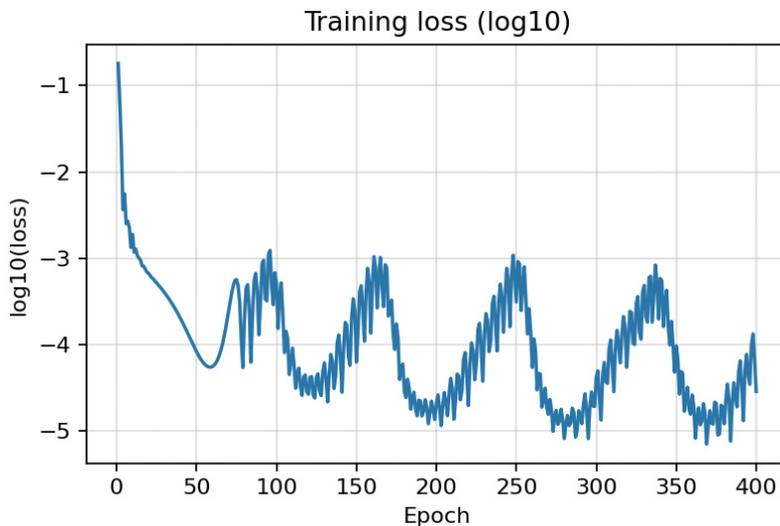


図 5 GNN の学習における損失関数の推移。

### 4.3 数値実験結果

今回は計算領域に対して  $50 \times 50$  の格子を設定したため、計算総格子点数は 2,500 となっている。この格子点に対してランダムに 50 点を選び、この点において学習データを解析解から作った。図 4 に今回のデータ駆動型 GNN の学習に使用した 50 個の教師データを与えた場所の分布を示す。図 5 はこの条件での学習時の損失関数の推移を示す。図 6 は解析解と推定した温度を重ねたグラフを示す。この図 6 で表示されているのは時刻 0.12 と 0.18 に対応する温度分布である。前述したように学習に用いたのは時刻 0.12 までの値であり、時刻 0.18 は学習に使用した範囲を超えており、この意味で GNN は時間軸に関して汎化能力があることが分かる。これらの結果からグラフニューラルネットワークはデータ駆動型の深層学習を行う事で、物理シミュ

レーションが可能であることが分かった。

次に教師データを 100 と 1,000 個に増やして、全く同様の学習を行った。これら 3 つの場合の解析解と、予測値との誤差解析に結果を表 2 に示す。この表から、教師データを増やすことで誤差は減少することが分かる。興味深いのは、格子点数が 2,500 点に対して、教師データ数と誤差の大きさは比例関係ではなく、50 点のデータを与えれば十分実用レベルでのシミュレーション結果が得られていることが分かる。

本研究で構築した GNN モデルは、モデルが連続場上の局所的な空間相関関係をグラフ構造を介して学習しているため、学習時に用いた格子点配

表 2 GNN の学習時に使用した教師データの個数に対して、学習後の予測値と解析解との誤差解析結果。誤差の定義は本文の (式 15) による。

教師データの個数	$L^2$	$L^\infty$
50	1.78e-02	2.91e-02
100	1.59e-02	2.23e-02
1,000	1.56e-02	1.69e-02

置に厳密に依存しないという特徴を有する。その結果、学習に  $50 \times 50$  格子を用いた場合でも、同一領域をより高密度な  $60 \times 60$  格子に離散化して、同じ学習後のモデルを適用することが可能である。つまり、GNN は各ノード間の関係性（隣接構造）と局所的特徴の伝播を通じて場の変化を表現しており、固定的な格子インデックスやメッシュ構造に依存しない汎化能力を持つ。これは GNN が有する興味深い特徴であり、従来の差分法や有限要素法のように節点数の一致を必要とせず、異なる空間分解能への拡張が容易となる。このような観点から GNN はメッシュフリーな手法と呼んでも良い。この結果を図 7 (予測時刻 0.12) と図 8 (予測時刻 0.18) に示す。両者ともに予測された温度の値は、解析解とほとんど重なっており、十分実用的なシミュレーション結果を示していると言える。

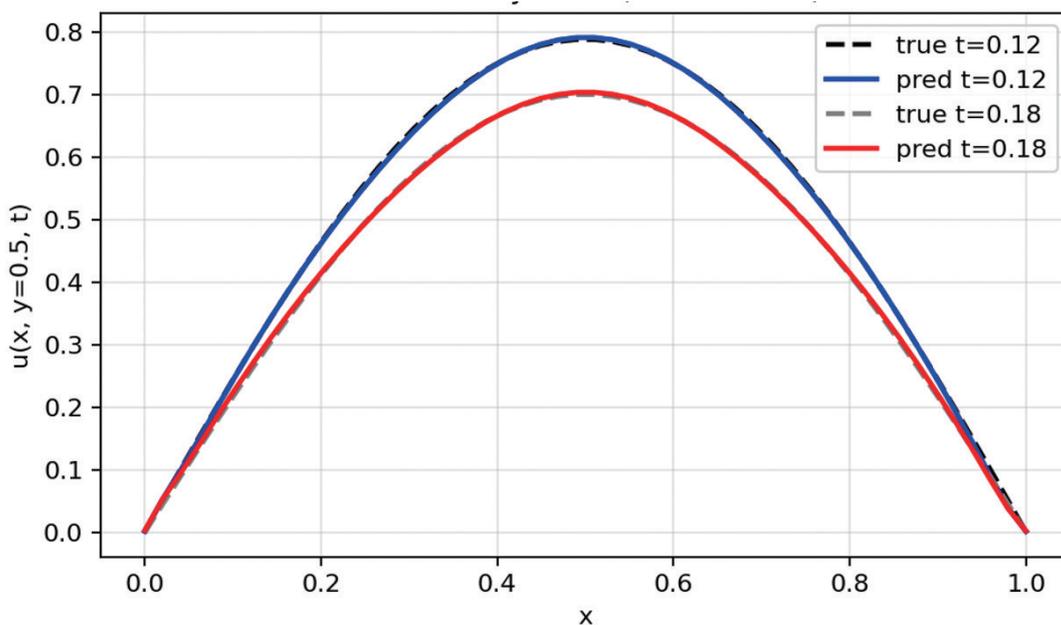


図 6 GNN で推定された値と、解析値との比較。

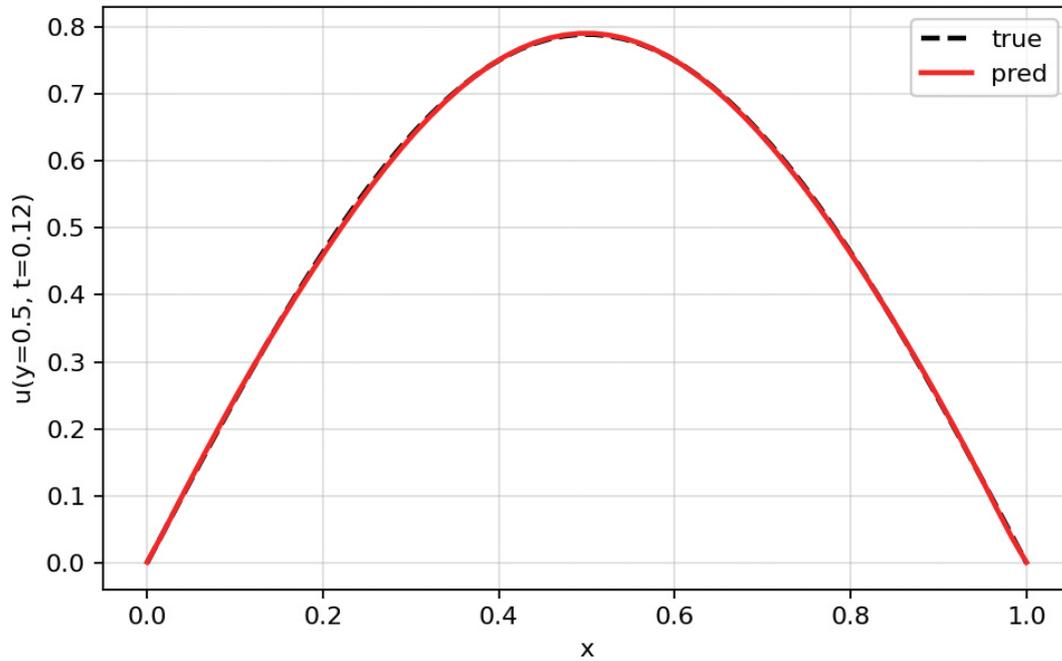


図7 計算領域の格子を  $50 \times 50$  で学習を行い, 学習されたモデルを格子が  $60 \times 60$  の場合に適用して推定した温度分布. 解析解と重ねて表示している. 時刻は  $0.12$  であり, この時刻は教師データを  $50$  個与えた時刻である.

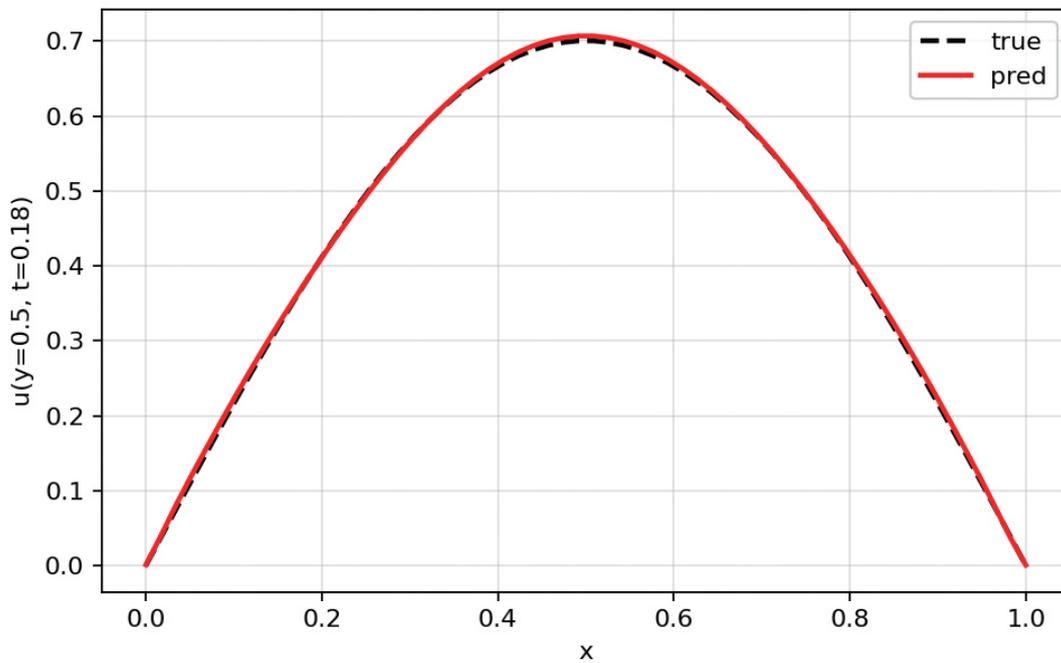


図8 計算領域の格子を  $50 \times 50$  で学習を行い, 学習されたモデルを格子が  $60 \times 60$  の場合に適用して推定した温度分布. 解析解と重ねて表示している. 予測時刻は  $0.18$  であり, 学習データの範囲を超えている. この結果を見ると GNN には汎化能力があることが分かる.

## 7. まとめ

本論文においてはメッシュフリーな物理シミュレーション法に関して検討を行った。有限差分法や有限要素法に関してはメッシュ分割の問題が課題と考えられ、古くから色々な方法が提案されてきた。ここでは有限差分法で利用されているRBF-FD法を取り上げて、場合によっては規則格子を利用した有限差分法よりも精度の高い結果を示す場合があることを示した。

一方、近年急速に研究が行われている深層学習を利用した物理シミュレーション法に関して、今回はグラフニューラルネットワークの手法を検討した。この手法は計算対象となる場を、格子点で覆い、格子点をグラフのノードと見なし、このノードに熱伝導率などの物性値や座標値、温度情報などをノードの特徴量として与える。そして、このグラフを入力として、128次元の特徴埋め込み層の後に、4層のGraph Neural Network (GraphSAGE)層を重ね、最後に線形出力層によって $\Delta u$ を推定する構造を採用した。数値実験の結果、少数サンプルでも高精度で時刻外挿にも強いGNNを構築できた。

今後の課題としては、不均質と異方性を持つ場への適用、さらにPINNsの考え方の導入などが考えられる。今回の非常に簡単なGNNによる物理シミュレーションでは、この手法は演算子を学習しているという点と、汎化能力が大きいという事が分かった。これは物理シミュレーション問題に対しては非常に重要な特性である。GNNは、まだまだ開発途上の手法であり今後の研究によってより広範囲な適用が示されると考えられる。今後もこの手法の発展に寄与したい。

## 文献

- Bayona, V. (2019): An insight into RBF-FD approximations augmented with polynomials. *Computers and Mathematics with Applications*, **77**, 2337-2353.
- Flyer, N., Fornberg, B., Bayona, V. and Barnett, G. A. (2016): On the role of polynomials in RBF-FD approximations: I. Interpolation and accuracy. *Journal of Computational Physics*, **321**, 21–38.
- Fornberg, B. and Flyer, N. (2015): Solving PDEs with radial basis functions. *Acta Numerica*, **24**, 215–258.
- Gilmer, J., Schoenholz, S. S., Riley, P. F., Vinyals, O. and Dahl, G. E. (2017): Neural message passing for quantum chemistry. *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning (ICML 2017)*, **70**, pages 1263–1272.
- 松岡俊文 (2023) : 物理情報に基づくニューラルネットワークの利用可能性, 深田地質研究所年報, **24**, 195-204.
- 松岡俊文 (2024) : ニュートンの法則に基づく質点運動の軌道推定と逆問題へのPINNsの応用. 深田地質研究所年報, **25**, 113-124.
- Pfaff, T., Fortunato, M., Sanchez-Gonzalez, A. and Battaglia, P. W. (2021): Learning mesh-based simulation with graph networks. *International Conference on Learning Representations (ICLR 2021)*
- Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G. E. (2019): Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear PDEs. *Journal of Computational Physics*, **378**,

686–707.

Sanchez-Gonzalez, A., Godwin, J., Pfaff, T., Ying, R., Leskovec, J. and Battaglia, P. (2020): Learning to simulate complex physics with graph networks. *International Conference on Machine Learning (ICML 2020)*, **119**, 8459–8468.

Scarselli, F., Gori, M., Tsoi, A. C., Hagenbuchner, M. and Monfardini, G. (2008): The graph neural network model. *IEEE Transactions on Neural Networks*, **20**(1), 61-80.

佐藤竜馬 (2024) : グラフニューラルネットワーク. 講談社, 336p.