

# Neural High-performance Computing

高見 利也

大分大学 工学部, JST CREST

## 1. 時間方向並列計算

様々な科学分野の数値計算が、京コンピュータなどの大規模並列計算機上で行われている。通常、偏微分方程式などの初期値問題を解く場合は、空間的に離散化することにより、時間発展方向に逐次的に計算を進めるが、この逐次演算の長さが問題になる。この依存性を回避して、時間方向に並列化を実施しようとするアプローチが **Parallel-in-Time (PinT)** という手法で、ここ 10 年ぐらいの間に広く行われるようになってきた。<sup>1), 2)</sup> 一方、近年、多層のニューラルネットワークに対する学習手法 (Deep Learning) の発展により、脳の構造を模したネットワーク系の計算が画像認識系を中心にして幅広く実施されるようになってきている。

本発表では、数値計算の手法として、最近発展したニューラルネットワークを適用するための手法について考察する。まだ、アイデア段階のものであり、詳細な解析は今後実施する形だが、以下に示すように、ニューラル系の計算を PinT 法と組み合わせることにより、これまでほとんど別の研究領域として実施されていた、ニューラルネットワークと高性能計算 (High-performance Computing (HPC)) の領域を融合する手法として発展させる。

## 2. 近似としての Neural Map

時間発展計算は一般に、直前の時刻の物理状態から、少しだけ時間を進めた状態への写像として実施される。乱流などの非常に不安定な系の時間発展計算を除いて、現実に応用されている初期値問題の計算では、それほど不安定な状態が扱われるわけではないが、偏微分方程式の離散化の過程で不安定性が入ることになり、陽的な時間発展計算では時間刻みを必要以上に小さくすることが求められる。通常は、この部分に空間的に粗いメッシュを導入することにより、近似計算を行う手法が広く使われており、上記の PinT 法においても、時間を先に進めるための近似計算として導入される。

時間発展計算が多自由度の写像であるならば、多次元ベクトルを入力とするニューラルネットワークを使って、近似できないだろうか、というのがここ

でのアイデアである。数値制度を確保するために完全な写像を導入することには困難があると予想されるが、ある程度の誤差を許容する近似としてであれば、実現の可能性があると考えられる。実際、可視化やゲーム動力学などの分野では、粒子法による流体計算にニューラルネットの計算を応用する手法が導入されており<sup>3)</sup>、ある程度は実用性に期待が持てる状態である。

そこで、ニューラルネットの応用による数値計算手法の実現可能性について、様々な観点から議論したい。

## 参考文献

- 1) Ruprecht, D., Speck, R., Krause, R. 2016. Parareal for diffusion problems with space-and time-dependent coefficients, LNCSE vol. 104, pp. 371-378.
- 2) Takami, T., Fukudome, D. 2014. An Identity Parareal Method for Temporal Parallel Computations, LNCS 8384, pp.67-75.
- 3) Ladicky, L. Jeong, S., Solenthaler, B., Pollefeys, M., Gross, M. 2015. Data-driven Fluid Simulations using Regression Forests. ACM Trans. Graph. 34, 6, Article 199 [9 pages].

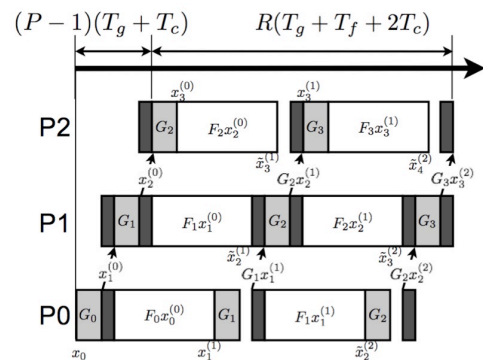


図1 PinT法の実装