

計算科学アライアンス海外派遣報告書

理学系研究科天文学専攻博士二年 平島敬也

今回、計算科学アライアンスの海外派遣制度を利用し、アメリカ・ニューオーリーズで開催された NeurIPS 2023 Workshops 「AI for Science」にて研究発表を行いました。NeurIPS は最も参加者の多い機械学習分野の学会の一つですが、私が参加した「AI for Science」は特に機械学習を天文・物理・化学・生物学など自然科学への応用にフォーカスした workshop です。

この研究会では、昨年 Flatiron Institute (ニューヨーク) に滞在して開発した機械学習モデルを発表しました。本研究では、銀河形成シミュレーションにおける超新星爆発の数値計算の結果を機械学習により予測させ、全体のシミュレーションの高速化を試みています。銀河形成シミュレーションでは、星・ダークマターの重力の相互作用による構造の進化を計算しながら、同時に流体の相互作用(ナビエ・ストークス方程式など)を計算します。さらに、流体計算では、高密度領域で新しい星が生まれたり、星の一生の最後である超新星爆発による衝撃波が起こったりするため、マルチスケールな物理プロセスを計算する必要があります。特に、超新星爆発周辺の高密度・高温環境下では数値計算のタイムステップが非常に小さくなるため、重力計算と比較して3桁程度局所的に計算量が増加し、スケーリング(並列化性能)を著しく悪化させるため、達成されるシミュレーションの質量分解能には限界がありました。そこで、小規模な高解像度な超新星爆発の計算結果を学習した機械学習モデルを利用することにより、銀河形成シミュレーションの高速化・高解像度化を試みました。現状では、予測された爆発による非一様な衝撃波面の構造、熱エネルギー、運動量などがシミュレーション(正解ラベル)と比較して十分乖離が小さいことを確認しました。また、計算量も100倍程度圧縮することに成功しています。

発表の際には、本手法の新しい応用先の議論なども行うことができました。また、AI for Science 以外には、Diffusion model や数学、物性などのワークショップの発表を聴講することができ、多分野での応用事例を確認する良い機会となりました。さらに、全体として、「Foundation model」というキーワードを使った研究が多い点も印象的でした。

本プログラムによる充実したサポートにより、本ワークショップに参加することができました。今後は、今回発表したモデルを用いて実際に銀河形成シミュレーションを行うなど、本研究を今後も発展させていき、国際論文・学会などで成果を発表していきたいと思っています。

