

グラフ畳み込みニューラルネットワークを用いた地下水流モデリング  
 Applicability of Groundwater Flow Modeling by Means of Graph Convolutional Neural Networks

○永里 赳義・田中 賢治  
 ○Takeyoshi NAGASATO, Kenji TANAKA

This study conducted high-resolution hydraulic head distribution estimation by means of Graph Convolutional Neural Network (GCN). Among the GCN, this study utilized spectral GCN. To verify the effectiveness of GCN, hydraulic head distribution estimation in a two-dimensional confined aquifer using GCN was investigated. Regarding creating the training dataset, the hydraulic conductivity, which is the parameter of numerical simulation was generated artificially. The target data was the water head distribution obtained by high-resolution numerical simulation. As for the input data, low-resolution hydraulic conductivity distribution, boundary conditions, and a hydraulic head distribution obtained from a low-resolution numerical simulation were used. The results show the high applicability of groundwater flow modeling by means of GCN.

### 1. はじめに

地下水流モデリングは水資源管理において重要である。ここで、数値モデルは水頭場だけでなく、水収支や地下水の流路等のデータも得られることから広く用いられている。一方で、数値モデルの計算コストは非常に高く、高度な計算資源が必要である。こうしたなか、数値モデルの代替として深層学習が注目され始めている。十分に訓練された深層学習モデルは解を高速に推論できるため、計算効率の点で有用である。なかでも Graph Neural Network (GNN) はメッシュ構造を学習・推論できることから、GNN を用いたサロゲートモデル構築の試みが行われてきた<sup>1)</sup>。しかしながら、深層学習はサンプル外予測が困難であるという問題がある。ここで、深層学習の入力に低解像度シミュレーションの結果を用いることで、数値シミュレーションの計算コストを低減しつつ、高い精度で解を推定できる可能性がある。したがって、本研究ではGNNの一種である Graph Convolutional Neural

Network (GCN) を用いて、低解像度の水頭分布、透水係数分布、および境界条件から高解像度の水頭分布を推定する (図1)。

### 2. 手法

GCN とは頂点とエッジで構成されるグラフの学習・推論に用いられる深層学習の一種である。GCN は下式で示すグラフ畳み込みを行うことでグラフのノードの特徴量を更新する。

$$H^{(l+1)} = \sigma \left( \hat{D}^{-\frac{1}{2}} \hat{A} \hat{D}^{-\frac{1}{2}} H^{(l)} \Theta^{(l)} \right)$$

$$\hat{A} = I_N + A$$

ここで、 $H^{l+1}$ は $(l+1)$ 層における潜在ベクトル、 $\sigma$ は活性化関数、 $\hat{D}$ は次数行列、 $A$ は隣接行列、 $I_N$ は $N$ 次元単位ベクトル、 $\Theta$ はGCNの学習によって調整される重みパラメータである。本研究では、数値シミュレーションにおけるセルの中心をグラフの頂点とみなし、セル同士の物理的な接続関係をエッジとみなすことでグラフを構成する。

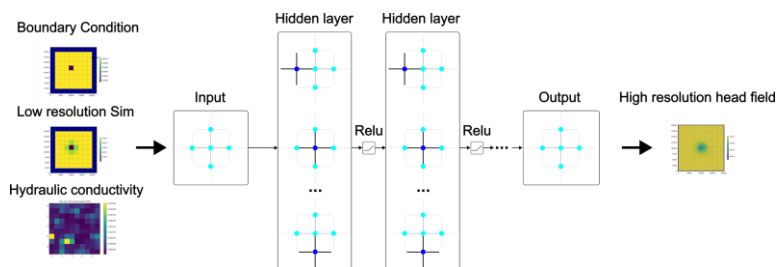


図1 本研究の概要

表1 各 Case 各データセットでの決定係数, および RMSE

Case	Training		Validation		Test	
	R2	RMSE	R2	RMSE	R2	RMSE
1	0.999	0.001	0.999	0.001	0.999	0.001
2	0.999	0.008	0.999	0.009	0.999	0.009
3	0.998	0.001	0.998	0.001	0.998	0.001

### 3. データセット

本研究では GCN を教師あり学習で実装する。したがって、数値シミュレーションを実行することで教師データを作成する必要がある。GCN の有効性の検証のため、水平 2 次元の被圧帯水層を対象に非定常シミュレーション実行し教師データを作成した。被圧帯水層は 20km 四方の大きさで層厚は 100m とする。計算領域をそれぞれ 200m, 2000m で離散化した数値シミュレーションの結果を対象データおよび入力データの一部とした。

数値シミュレーションにおけるパラメータの設定について、比貯留係数は  $7.5 \times 10^{-6}$ (-)とした。透水係数は平均 -10.68 (つまり,  $K = 2.3 \times 10^{-5}$ (m/s)), 分散 1 の対数正規分布に従っていると仮定し透水係数を生成した。透水係数の生成について、はじめに  $100 \times 100$  のグリッドのうち 100 点に乱数を生成し、次に逐次ガウスシミュレーションを用いて確率的な補間を行った。以上により、計 90 セットの透水係数を生成した。逐次ガウスシミュレーションによる補間では、バリオグラムモデルがガウス分布であることを仮定している。以上の透水係数場の生成方法は Sun, A. Y. (2018) の先行研究に基づいている<sup>2)</sup>。次に、低解像度シミュレーションのパラメータに用いる透水係数は逐次ガウスシミュレーションによって得た透水係数に  $10 \times 10$  のフィルタを用いて平均値プーリングすることで得た。

### 4. 適用

本研究ではデータセットをモデルの学習に用いる訓練データ、過学習が生じていないか確認する検証データ、訓練済みモデルの推定精度の検証を行うテストデータの 3 つに分割した。

GCN の評価のため、以下の 3 ケースを設定し、データセットを作成した。

- (1) 単一の井戸による地下水の汲み上げ
- (2) 複数の井戸による地下水の汲み上げ
- (3) 単一の井戸による周期的な地下水の汲み上げと涵養

### 5. 結果・考察

各 Case の各データセットにおける決定係数  $R^2$ , 平均平方二乗誤差 (RMSE) を表 1 に示す。いずれの Case においても訓練・検証・テストデータにおいて一貫して  $R^2 = 0.99$  以上を示している。したがって、GCN は高解像度の水頭分布を高精度に推定できていることが示された。Case2, Case3 におけるコンターから複数の井戸からの汲み上げ、地下水の涵養の過程も表現できていることが視覚的にも確認された (図略)。しかしながら、定水頭境界付近の RMSE が比較的大きかった (図略)。これは、学習データのグラフのうち定流量境界が設定されているノードが極端に少なかったことが原因であると考えられる。こうした不均衡データについて、訓練データのリサンプリングを行うことで深層学習モデルの推定精度が改善される可能性がある。

### 6. まとめ

本研究では GCN を用いて、低解像度の水頭分布、透水係数分布、および境界条件から高解像度の水頭分布を推定した。教師データとして仮定の水平 2 次元の被圧帯水層を対象とした非定常シミュレーションの解析結果を用いた。結果から GCN は高い精度で高解像度の水頭分布を推定できることが示された。

謝辞：本研究は JSPS 科研費 JP23KJ1327 の助成を受けたものです。

### 参考文献

1. Sanchez-Gonzalez, Alvaro, et al.: Learning to simulate complex physics with graph networks. *arXiv preprint arXiv:2002.09405*, 2020.
2. Sun, A. Y.: Discovering state - parameter mappings in subsurface models using generative adversarial networks, *Geophysical Research Letters*, 45(20), 11-137, 2018