

LLMを用いた数値解析モデル構築の自動化検討

Text to CAE; Physics-based modeling and discussion with Large Language Model

高岸洋一¹⁾, 山上達也²⁾

Yoichi Takagishi and Tatsuya Yamaue

1) 博(理) 株式会社コベルコ科研 計算科学センター モデルベース解析技術室長
(〒658-0044 神戸市西区高塚台1丁目5番5号, E-mail: takagishi.yoichi@kki.kobelco.com)

2) 博(工) 株式会社コベルコ科研 計算科学センター長
(〒658-0044 神戸市西区高塚台1丁目5番5号, E-mail: yamaue.tatsuya@kki.kobelco.com)

With the recent explosive evolution and spread of Large Language Models (LLMs), there are growing expectations for automation of model construction and interpretation of results in the field of Physics-based simulations. In this study, we have proposed a scheme to automatically execute various tasks from investigation and determination of calculation methods, model construction, and summary and discussion of results by combining LLM and general-purpose CAE software available on the market and identify issues to be addressed.

Key Words : Large Language Models, Physics-based simulation, CAE

1. はじめに

最近のGPT-4^[1]やBERT^[2]をはじめとする大規模言語モデル (LLMs, Large Language Models) の爆発的な進化により, これまで困難であった自然言語を用いた複雑なタスク実行やプログラム生成が可能となり, テキストマイニング^[3], 回帰・分類・最適化^[4,5], あるいは材料探索^[6]など幅広い分野への適用が検討されている。

これまで, 偏微分方程式に基づく数値計算 (物理シミュレーション) に対するLLMsの活用方法として, Physics-informed Neural Networkへの接続^[7]や, 生化学反応式の数値モデルへの変換^[8]などが提案されているほか, ごく最近ではテキストからメッシュ生成やFEMモデリングへの適用が行われている^[9]。しかしながら, 多くのケースでは数値計算のためのインプットファイル作成への誘導にとどまっており, LLMsを用いて物理シミュレーションの選定や結果の解釈, 計算条件の改善などのフィードバック・ループを構築した事例は少ない。

本研究では, 数値計算による研究開発業務を想定し, 関係者による打合せ等の情報から解析ニーズの抽出と物理シミュレーションの選定, 計算指示書の作成, 汎用CAEソフトのインプットファイル変更, 結果まとめと解釈, インプットファイルの改善などのフィードバック・ループ (最適化) 構築を検討する。また, 多孔質電極を想定した電解液中の活物質の電気化学反応問題へ適用し, 技術的な課題の整理および従来型手法との比較・検討を行う。なお, ここではLLMsとしてgpt-4-vision-previewを用い, pythonコードからOpenAI APIを使用して各種プロセスを制御した, 汎用CAEソルバとしてCOMSOL Multiphysics™ ver.6.1 (以降COMSOLと記載) を使用した。

2. 数値解析の自動化スキーム

提案する自動化スキームの概要を図-1に示す。はじめに関係者で解決すべき課題や必要なデータを整理し, 計算方法や前提条件, 入力データおよび出力データを決定する。その際, chatbotに複数の“role” (材料工学の専門家 vs 製造プロセスエンジニア vs CAEエンジニアや, 第一原理計算 vs マクロシミュレーション vs システムシミュレーション, など) を設定し, お互いに議論させて結果を要約させることも有益である。

次に, 上記まとめたものを計算の指示書として, LLMsにCAE用のインプットファイルを生成させる。予めベースとなるインプットファイルを作成しておき 計算条件 (形状, 物性値, 境界条件など) を変更する手順をLLMsの“system”に読ませることで自動生成が容易となる。その際, 手順には必要な情報を質問するよう指示する。

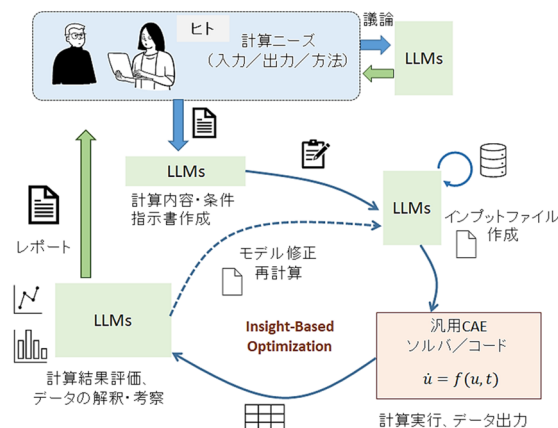


図-1 LLMsを用いた数値解析の自動化スキーム。

続いて、汎用CAEソルバを起動し生成したインプットファイルを実行する。計算結果の画像（分布等のコンター）や数値データをLLMsへ渡し、結果の解釈や考察、修正案を出力させ、さらに修正案をもとに再度インプットファイルを生成しCAEソルバ起動する。これにより、従来型の特定アルゴリズムによって目的関数を最大化（または最小化）するアプローチではなく、逐次計算結果を解釈・理解しながら自動的な条件の改善を行うフィードバック・ループが可能となる。次章では、提案の自動化スキームを多孔質電極の反応効率最適化問題へ適用する。

3. 多孔質電極の反応効率最適化問題への適用

(1) 問題設定

リチウムイオン電池に代表される多孔質電極に要求されるエネルギー密度や出力密度、寿命や安全性は日増しに高くなっており、各部材の新材料開発に加え、多孔質からなる電極のメソスケール構造の設計が極めて重要となる^[9,10]。ここでは電気化学反応を担う活物質粒子の配置に着目し、反応量を最大化する配置の探索を行う。

(2) 計算の仕様書とCAEインプットファイル修正

前節の問題設定から、計算の仕様書をTable形式で生成した（図-2参照）。これをもとにゼロベースでCOMSOLのインプットファイル（M-ファイルなど）を作成することも可能と思われるが^[8,11] モデリングの自由度が高く条件分岐が非常に複雑になる。そこで、ここでは予めベースとなるCOMSOLモデル（mphファイル）をヒトが作成して置き、このジオメトリなどの条件変更を行うbatchコマンドをLLMsにより生成した。

生成された仕様書に基づき、電解液流れはストークス方程式および連続の式：

$$0 = \nabla \cdot [-pI + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T)], \tag{1}$$

$$\rho \nabla \cdot u = 0 \tag{2}$$

に従うとする。ここで、 u は流速ベクトル、 p は圧力、 μ は粘性係数、 ρ は密度を表す。また、電解液イオン濃度場 c の評価には移流・拡散方程式を適用する。即ち、

$$\nabla \cdot (-D \nabla c) + u \cdot \nabla c = 0 \tag{3}$$

とする。ただし、 D は拡散係数である。活物質表面では電気化学反応により電解液イオンが消費されるものとする。ここでは単純化のため線形化Butler-Volmer式を使用する。

$$j = i_0 \frac{zF}{RT} \eta \tag{4}$$

なお、 F はファラデー定数、 R は気体定数、 T は温度を表し、過電圧 η は一定値とする。交換電流密度 i_0 は

$$i_0 = k \left(\frac{c}{c_0} \right)^n \tag{5}$$

を仮定する。ここで、 c_0 は初期濃度、 k は反応速度定数、 n は係数である（ 1 を仮定する）。電解液の流入境界における

イオン濃度を $1000 \text{ (mol/m}^3\text{)}$ 一定とし、流入速度を 100 (um/s) 固定とした。また、出口境界はフラックスなしのノイマン条件および圧力 0 とした。

項目	詳細
目的	電極内に配置された円形活物質の表面での電気化学反応と、それに伴う電解液中の化学種の消費パターンを理解すること。反応効率の最適化と、電解液の流れと化学種の分布の可視化を目指す。
ジオメトリ	領域は $100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ の2次元平面。この領域内に半径 $10\mu\text{m}$ の円形活物質粒子が等間隔で配置される。領域の形状と活物質粒子の配置は、シミュレーションの要件に応じて調整可能。
支配方程式と対応する境界条件	<ul style="list-style-type: none">• ストークス方程式：非常に低い流速のため、非圧縮性の電解液流れをストークス流れで近似。• 質量輸送方程式（拡散方程式）：電解液中の化学種の濃度分布を記述。• 電気化学反応の速度方程式：活物質表面での化学種の消費を記述。 境界条件には、流入口での速度と濃度の指定、流出口での開放境界条件、活物質表面での化学種消費関連条件、その他の領域での対称または無滑り境界条件を含む。
メッシュサイズ	活物質粒子周辺や流入口近くでは細かいメッシュ（例えば $2\mu\text{m}$ 以下）を使用して、化学種の濃度勾配や流れの詳細を捉える。領域の残りの部分では、計算コストを考慮して粗いメッシュ（例えば $5\mu\text{m}$ ）を使用する。適応的メッシュリファインメントを検討。
アウトプット	活物質表面での化学種の消費速度、電解液中の化学種の濃度分布、流速と圧力分布、時間経過に伴うこれらのパラメータの変化、電極内の反応効率に関する定量的評価。

図-2 LLMsにより生成された計算仕様の例。

(3) 計算実行と結果の解釈、条件変更の提案

生成されたbatchコマンドを用いて、Python環境からCOMSOLを呼び出し初期条件における電解液の流れと移流拡散・電極反応の連成計算を実行した^[11]。ジオメトリ、メッシュ外観、定常状態の流速分布（絶対値）、電解液イオン濃度分布を図-3に示した。図の上端が電解液の流入境界、下端が出口境界である。円形領域が活物質粒子を表し、残りが電解液領域である。活物質粒子が比較的隣接・凝集しているため、狭窄領域で流速が低く停滞しており、かつ同領域においてイオン濃度の低下が見られ、この配置での反応効率の低さが伺える。

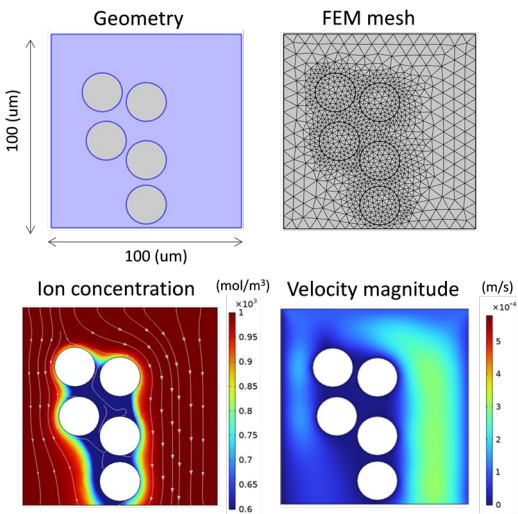


図-3 初期条件におけるジオメトリ、FEMメッシュ、電解液イオン濃度分布および流速分布（絶対値）。

次に、これらの結果データをLLMsへインプットし、結

果の解釈および活物質粒子の配置の修正を提案させ、再度計算実行するプロセスを反復させた。結果評価に使用するデータは、電解液濃度分布のコンター図と、トータル反応量（式(4)を全活物質粒子表面で積分した値）とした。図-4は各反復回数におけるジオメトリ、電解液イオン濃度分布、およびLLMsによる結果解釈と配置修正の提案（抜粋）である。比較的初期の反復では大きな配置修正の方針が示され、その後具体的な粒子の位置変更の提案がされている（粒子A-Eのラベリングは反復ごとに変更されている点に注意）。方針だけでなく、計算結果に基づいて反復ごとに微調整が試みられている点が興味深い。ただし、「各活物質粒子が接触しないこと」「計算領域から出ないこと」を指示しているにも関わらず、これらが守られない配置が提案されることがあった。そのため、反復ごとに粒子座標をチェックし、違反があった場合にはその旨のメッセージをインプットした。8回まで反復させた結果、活物質粒子は逆V字型の配置が提案され、トータル反応量は極大となった。

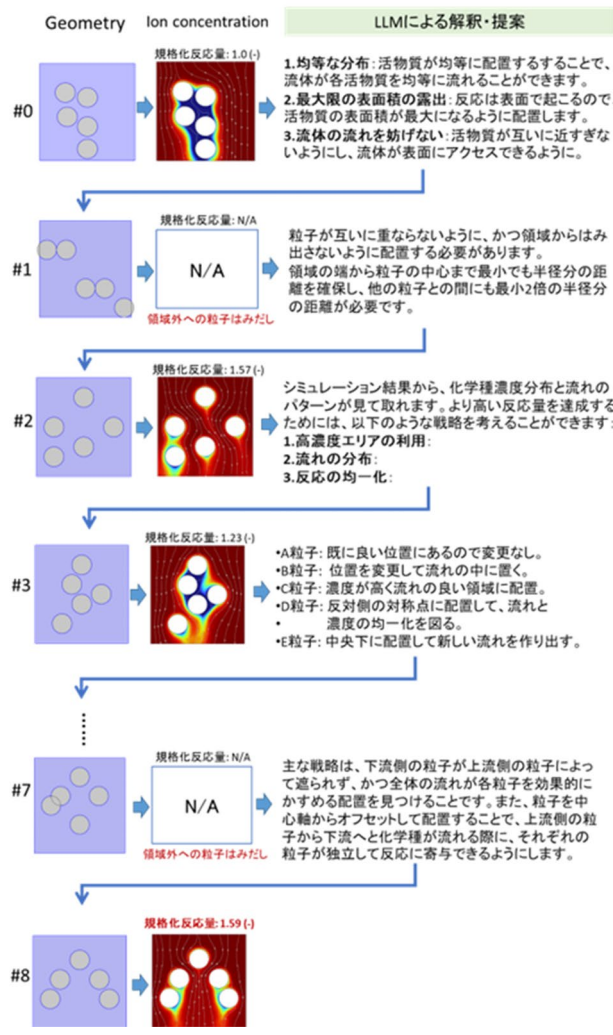


図-4 反復ごとのジオメトリ、電解液イオン濃度分布、および LLM による結果解釈と配置修正の提案（抜粋）。

(4) 結果まとめ、報告書の生成

ここまで検討した結果に対して、概要、目的、検討方法、検討結果、考察、今後の課題の各項目をレポート形式で生成させた。その要約版を図-5に示す。反応を効率化するために活物質粒子同士の間隔を広げることや、下流側粒子が上流側の陰にならないように（遮蔽効果避けるように）配置することなど、本質をとらえた考察がなされている。また、モデルの制約条件の理解に問題があった旨の反省が述べられている。これらの報告書はヒトが検討結果を理解する助けになるだけでなく、次回検討時に”system”の履歴に追加することで、より高度な考察が可能になると期待される。

概要、目的	このプロジェクトの目的は、2 次元の電気化学反応シミュレーションを使用して、活物質粒子の配置を最適化し、化学反応の効率を最大化することでした。
検討方法	検討方法としては、初期の粒子配置から始まり、反応量のデータと流体の流れのパターンを元に、粒子の配置を逐一調整していきました。濃度分布、流れのパターン、粒子間の距離など、異なるパラメータが最終的な反応効率にどのように影響するかを観察し、配置の最適化を図りました。
検討結果	様々な配置案を試した結果、最初のトータル反応量を基準値 1 として、その後の反応量を相対値で示した場合、改善を続けることで 1.59 という値まで反応量を増加させることができました。
考察	粒子配置による濃度勾配と流れの影響が反応効率に大きく関わっていることがわかりました。特に、上流の粒子によって下流の粒子が「陰」に隠れないように配置すること、また粒子間の適切な距離を保つことが重要であることが確認されました。しかし、いくつかの試みで粒子が重なる配置を提案してしまうなどの問題が発生しました。これは、粒子の正確な位置を調整する過程で、モデルの制約条件を十分に考慮できていなかったためです。
今後の課題	提案された最適化された配置は、現在利用可能なデータとシミュレーション条件下での理論的なものです。より実際に近い条件下での検証、さらには 3 次元化など、現実の複雑な条件を取り入れたシミュレーションが今後の課題です。

図-5 LLMs による結果まとめ（要約版）。

4. 従来型最適化手法との比較

形状や配置の最適化問題に対して、これまで多くのアルゴリズムが提案されてきた。ここでは、シンプルかつ実績の山登り法（Hill Climbing, HC）^[12] を電解液流れ中の活物質粒子の最適配置問題に適用し、LLMsによる考察に基づく最適化との比較を行った。

初期条件は図-3と同様とし、各活物質粒子を一様乱数に基づいて移動させ、トータル反応量が大きければその座標を採用する。ただし、粒子同士の重なりや領域外へのはみ出しは許容しないものとする。

図-5に、それぞれの方法における反復回数ごとのトータル反応量の変化を示す。LLMsに基づく最適化では初期からわずか反復2回でトータル反応量が1.58倍、反復8回で1.60倍に達した。また、反復回数ごとに大きく上下している点も特徴的である。一方、従来型のHCではトータル反応量の上昇に多くの反復を必要としており、提案手法と同等の1.58倍に達するまでの反復回数は約200であった。

これは、HCの場合は活物質粒子の初期配置から徐々に変更されるのに対し、提案手法では方針や考察に基づいて大胆な配置変更が行われるためと考えられる。

初期、反復回数50、100、150、200および250の活物質粒子配置における、電解液イオン濃度分布を図-6に示した。初期条件では各粒子が凝集しているが、反復が進むほど徐々に粒子間の間隔が広がり、分散される様子が確認される。これは、LLMsによる最適化において考察された粒子の均等な分布、実効的は表面積の最大化、遮蔽効果の抑制のアプローチと一致していると思われる。また、提案手法とHCでの粒子配置の違いも特徴的である。前者では、方針や計算結果をもとに規則的に（縦や横、斜めに）整列させる場合が多いのに対し、HCでは不規則に配置されている。ただし、さらに反復回数を増やすことで結果が変わり得ることに注意が必要である。

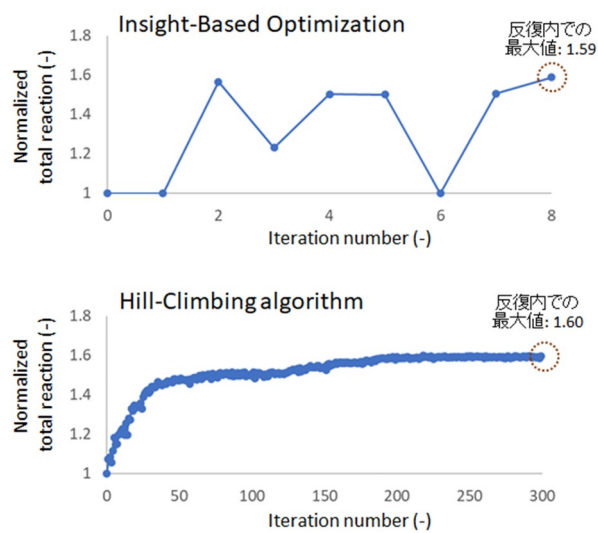


図-5 LLMs を用いた方法および従来型最適化アルゴリズム（HC）のトータル反応量の比較.

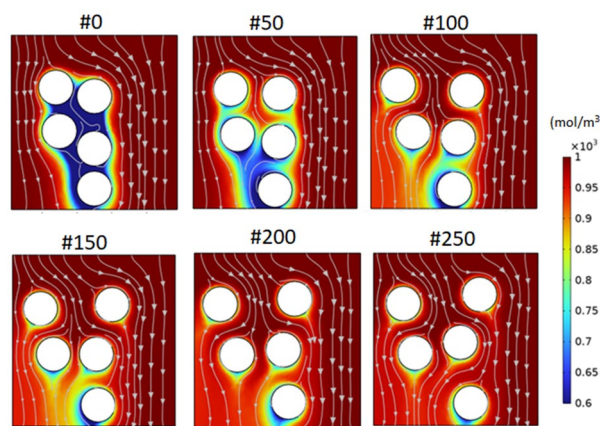


図-6 HC 法における、代表的な反復回数での電解液イオン濃度分布.

表-1に、本検討で扱ったそれぞれの最適化アプローチ

の特徴をまとめた。従来型最適化手法であるHCでは、目的関数であるトータル反応量を最大化するよう確率的に活物質粒子位置を変更するため、最大値を実現する厳密な配置情報が得られるものと期待される。ただし、最適化の方針は結果として得られるものであり、事後的に理解せざるを得ない。また、焼きなまし法や遺伝的アルゴリズム^[12]など局所解から脱するための工夫が必要となる。一方、提案手法では方針が明示されており、かつ途中の計算結果に対する考察が入るため、ヒトにとっての解釈性が高い。ただし、数値的に最適値に到達する保証がないのに加え、LLMsが同じメッセージのループに陥らないように、定期的に結果をまとめさせ優先順位を変動させる工夫が必要となる。また、LLMsからの返答待ち時間が発生するため、計算が長時間化する傾向もある。このように、それぞれの手法で特徴があることから、LLMsを用いた提案手法は単独で使用するよりも従来型手法と組み合わせるなどの検討が必要と思われる。

表-1 提案手法と従来手法の特徴まとめ.

	提案手法 (LLMs使用)	従来型手法 (HCなど)
方針	テキストで指示可能	アルゴリズムにより指定
解釈性	非常に高い	事後的
精度	保証なし	高い
粒子の配置	規則的	非規則的
反復回数	少ない	多い
計算時間	LLMs応答の影響あり	数値計算が律速
備考	LLMメッセージがループしないよう工夫が必要. 制約条件などからの逸脱がないか、反復ごとに検証が必要.	

5. まとめ

本研究では、LLMsを用いて解析ニーズの抽出、物理シミュレーションの選定、計算指示書の作成、汎用CAEソフトのインプットファイル変更、結果まとめと解釈、インプットファイルの改善などのフィードバック・ループの構築を検討した。提案のスキームを多孔質電極の配置最適化問題へ適用し、方針や途中の計算結果を解釈・考察しながら反復計算するモデルを構築した。また、従来型のアルゴリズムに基づく最適化手法と比較し、それぞれの

特徴や適用可能性を議論した。

今後は、最適化方針を含む大域的な探索をLLMsベースに、比較的局所的な探索を従来型アルゴリズムに適用するなど、両者を組み合わせたモデル構築を検討する。

参考文献

- [1] Open, <https://openai.com/> (Accessed: April 5, 2024).
- [2] Devlin, J. et al.: BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding, *arXiv:1810.04805v2* (2018).
- [3] Törnberg, P.: How to use LLMs for Text Analysis, *arXiv:2307.13106v1* (2023).
- [4] Yang, C. et al.: Large Language Models As Optimizers, *arXiv:2309.03409v2* (2023).
- [5] Yang, S.D. et al.: FLUID-GPT (fast learning to understand and investigate dynamics with a generative pre-trained transformer): efficient predictions of particle trajectories and erosion, *Ind. Eng. Chem. Res.* 62 (37) 15278 (2023).
- [6] Lei, G. et al.: Materials science in the era of large language models: a perspective, *arXiv:2403.06949* (2024).
- [7] Kumar, V. et al.: MyCrunchGPT: A chatGPT assisted framework for scientific machine learning, *arXiv:2306.15551v2*, 2023.
- [8] Amosy, O. et al.: Text2Model: Text-based Model Induction for Zero-shot Image Classification, *arXiv:2210.15182*, 2022.
- [9] Long, W. J. et al.: Three-Dimensional Battery Architectures, *Chemical Review* Vol.104, 4463, 2004.
- [10] Takagishi, Y. et al.: Machine Learning Approaches for Designing Mesoscale Structure of Li-Ion Battery Electrodes, Batteries, Vol.5, pp.54, 2019.
- [11] Livelink for MATLAB User's guide.
- [12] Yang, Xin-She.: in Nature-Inspired Optimization Algorithms, 2014.