

2024年度共同利用研究報告書

2024年12月18日

所属・職名 金沢大学・学術メディア創成センター・准教授

中澤 嵩

		整理番号	2024a001	
1.研究計画題目	自動車性能の飛躍的向上を目指すData-Driven設計			
2.新規・継続	継続			
3.種別	一般研究			
4.種目	研究集会（I）			
5.開催方法	ハイブリッド開催			
6.研究代表者	氏名	中澤 嵩		
	所属 部局名	金沢大学・学術メディア創成センター	職名	准教授
7.研究実施期間	2024年10月07日(月曜日)～2024年10月08日(火曜日)			
8.キーワード	自動車工学, 流体工学, サロゲートモデル, 生成AI, PINNs			
9.参加者人数	59人			

10.本研究で得られた成果の概要

本研究集会は、中村優佑氏（マツダ株式会社技術研究所次世代人間中心システム研究部門）と中島卓司氏（広島大学大学院先進理工系科学研究科）、更には三坂孝氏（産業技術総合研究所）が講演した2023年度随時募集枠「流体数理・データ科学による乱流場の計測・予測・制御・設計」を開催した後に発展した議論をもとに企画している。

近年の自動車開発では、空力などの従来機能の高機能化に加え、自動運転などの新しい機能も検討しながら、より短い開発期間で完成させることが求められている。しかし、現状の物理モデルによるシミュレーションでは膨大なコストを必要とし、自動車会社における開発の現場では大きなボトルネックとなっている。そこで、サロゲートモデルなどにより迅速な検討及び新しい最適化技術を応用することで、全体最適された自動車開発が期待できる。

本講演では、主に数理・データサイエンス・AIを駆使した、最適設計を行っている研究者を御招きしてプログラムを構成した。特に、三坂孝志氏・中島卓司氏は2023年度随時募集枠「流体数理・データ科学による乱流場の計測・予測・制御・設計」でPINNsや生成AIの講演を行っており、昨年度からの進捗を期待できる。また、山崎渉氏（長岡科学技術大学大学院工学研究科）や矢地謙太郎氏（大阪大学大学院工学研究科）はサロゲートモデルでの最適化や勾配フリーのトポロジ最適化を研究しており従来手法では不可能であったような最適形状を得られる可能性がある。これらの研究内容を俯瞰しつつ、自動車開発で求められる数理・データサイエンス・AIに関する技術を講演者全員で議論した。

2024 年度 研究集会(I) 報告書
自動車性能の飛躍的向上を目指す Data-Driven 設計

高速流体機器を扱う産業界において、流れ場の予測と設計は必要不可欠な技術であることは言うまでもない。具体的には、AI によって流れ場を高速に予測することが可能となれば、デザイナーや設計者、実験者が会議の場でリアルタイムに議論することが可能となり、結果的に開発期間の短縮や他性能との最適化がクイックに実現できる。また、最新の Data-Driven アプローチを導入することで、過去に例を見ない新しい発想での設計・制御技術を構築することにつながり、性能の飛躍的向上を目指す。

このように、数値流体計算 (Computational Fluid Dynamics: CFD) に変わる流体予測モデルの構築や、サロゲートモデルによる 3D 形状設計が、今後ますます必要不可欠となる。そこで、2024 年 10 月 7 日(月) ~ 2024 年 10 月 8 日(火)に一般研究-研究集会 (I)「自動車性能の飛躍的向上を目指す Data-Driven 設計」を開催した。当該研究集会では、マツダ株式会社技術研究所次世代人間中心システム研究部門から中村優佑氏と瀬尾晃平氏、更にはマツダ株式会社と産学連携を推進している中島卓司 (広島大学大学院先進理工系科学研究科) を御招きし、特に自動車産業における「流れ場の予測と設計」に焦点を当てて、上記の科学的な課題について活発な討論が交わされた。更には、生成 AI を積極的に採用することが出来れば、これらの予測・設計が超高速に実現し得るだけでなく、どのような産業課題が解決できそうかについても議論が広がった。

本研究集会は、中村優佑氏 (マツダ株式会社技術研究所次世代人間中心システム研究部門) と中島卓司氏 (広島大学大学院先進理工系科学研究科)、更には三坂孝志氏 (産業技術総合研究所) が講演した 2023 年度随時募集枠「流体数値・データ科学による乱流場の計測・予測・制御・設計」を開催した後に発展した議論をもとに企画している。なお、本研究集会は金沢大学数値・データサイエンス・AI 教育センター及び金沢大学学術メディア創成センターが後援となっている。

新規圧縮性流体ソルバーの開発

中澤嵩（金沢大学学術メディア創成センター）

航空工学や自動車工学では非定常・圧縮性（高レイノルズ数）流体を扱う必要があるため、圧縮性 Navier-Stokes 方程式が支配方程式として多く利用されるが、時間方向・空間方向の高精度な離散化を担保する必要があるため計算コストが膨大となる。そこで、最適設計を行う際には、圧縮性 Navier-Stokes 方程式と比較して計算コストを抑制することが可能な、式(1)に記述している保存系圧縮性 Euler 方程の利用が一般的である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1-a)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = 0, \quad (1-b)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot \{(\rho E + p) \mathbf{u}\} = 0. \quad (1-c)$$

この圧縮性流体を扱う際、非圧縮性流体と比較して、時空間に複雑な応力分布が発生し、局所的に密度が集中する衝撃波が発生する。このような場合には、衝撃波を高精度に捕捉する必要があるため、界面を高精度に解像することが可能な有限体積法や不連続ガラーキン法等を用いた空間離散化が行われるが、形状最適化を行う際には順問題だけでなく逆問題を解く必要があるためアルゴリズムが非常に煩雑となることが予想される。

近年、Multi Fidelity 設計を考慮したアプローチが注目を集めつつある。ここで、圧縮性 Navier-Stokes 方程式を用いた設計を High-Fidelity 設計とする。一方、圧縮性 Euler 方程式に対して何らかの数学的な操作を行った際に得られる簡易な数理モデルを用いた設計を Low-Fidelity 設計とすることで（厳密に圧縮性 Euler 方程式を解いていないが）、膨大な計算コストを緩和しつつ妥当な最適形状が得られると考えられる。ここでは、Low-Fidelity 設計を行う際の支配方程式として式(2)に記述している F. De Vuyst が提案している数理モデルを活用する。便宜上、本原稿では FDV 方程式と呼ぶこととする。

$$\frac{Da_p}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, a_p = \log(\rho), \quad (2-a)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \frac{p}{\rho} \nabla a_p = 0, \quad (2-b)$$

$$\frac{Da_p}{Dt} + \gamma \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, a_p = \log(p). \quad (2-c)$$

当該数理モデルでは、ガラーキン法で離散化が可能であり、更に移流項については直接法で演算が可能な特性曲線法を用いることで、計算コストを大幅に抑制することが可能となる。

サロゲートモデルを活用した大域的トポロジー最適設計の試み

山崎 渉 (長岡技術科学大学)

Wataru YAMAZAKI (Nagaoka University of Technology)

設計最適化の分野では、板厚などの直接的な寸法を最適化（調整）する寸法最適化と呼ばれる方法に始まり、その後、翼形状などの三次元的な複雑形状をパラメータ表現してそのパラメータを最適化する形状最適化と呼ばれる方法が開発された。また、当初は性能値の形状パラメータに対する勾配（感度）情報を用いた局所的な最適設計が行われていたが、近年では応答曲面法などの効率的な手法が開発され、初期形状に依存しない大域的な最適設計が許容可能な設計コストに収まり、工学的な実設計問題にも積極的に適用されている。更に構造設計分野を中心に、トポロジー最適化と呼ばれる、形状変化に加え、形態の変化（例：追加物体や穴の導入）を考慮できる最適化手法が提案されている。単純な形状設計（例：流管・翼の形状）のみならず、各種要素の結合や配置（例：流路の統合・分岐、複数枚翼の配置）についても最適設計が可能となるため、既存の形態及び設計者が経験的に想定する形態とは異なる、潜在的な革新形態を調査する事が可能である。

ただし、従来のトポロジー最適化は感度解析手法との組み合わせによる局所的な最適化手法であり、非線形性が強く性能値関数が多峰性を持つ流体設計問題には不向きな一面がある。局所的な最適化が行われてきたのは、その設計コストが小さい事が主たる理由である。また、様々な形態を設計対象に含めて最適化を行う上では、その形態表現自由度に対応するパラメータ（設計変数）の総数が膨大になるため、そのような大規模次元の設計変数空間で大域的最適化を行う事が現実的ではなかった事もその理由である。

著者らはこの問題に対し、機械学習技術及び応答曲面法を活用した、大域的なトポロジー最適化手法を提案している[1]。また、次元削減技術を用いて設計変数空間を低次元化する手法についても検討を進めている[2,3]。本講演は、その研究の状況について報告したものであり、以下に講演で用いたスライド（の一部）を添付する。

References

- [1] Ban, N., and Yamazaki, W., “Black-Box Function Aerodynamic Topology Optimization Algorithm via Machine Learning Technologies,” AIAA Journal, Vol.59, No.12 (2021), pp. 5147-5185.
- [2] Yamazaki, W., Buyanbaatar, N., “Comparative Study of Dimension Reduction Methods for Efficient Design Optimization,” Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing, Vol.17, No.3 (2023), p.JAMDSM0036.
- [3] 高村, 今井, 山崎, 王, “複数精度 CFD と POD を用いた自動車フロントエンド冷却開口の最適化計算,” 自動車技術会論文集 Vol.53, No.2 (2022), pp.437-442.

機械学習を利用した進化的トポロジー最適化

矢地謙太郎

大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻

発表の概要

本研究は、機械学習技術を基盤とした進化的トポロジー最適化の新たな枠組みを提案し、その適用可能性と有効性を検討したものである。従来のトポロジー最適化手法は、設計者の経験に頼らずに最適化構造を導出する点で優れている一方、設計空間の自由度が極めて高いことから、多峰性や非線形性の課題に直面しやすいという問題があった。また、解の探索には膨大な計算リソースとパラメータスタディが必要であり、実用化の妨げとなる要因でもあった。

本研究ではこの課題を克服するため、生成モデルを利用した「かたちの交叉」に着目し、データ駆動型の進化的トポロジー最適化手法を開発した。生成モデルにはニューラルネットワークを活用し、形状データを効率的に生成・交叉する手続きを実現している。具体的には、変分オートエンコーダ (VAE) や最適輸送理論を活用して新しい材料分布を生成する過程を交叉と捉え、進化的アルゴリズムにおける選択や突然変異といった操作を埋め込む進化的アルゴリズムを提案している。このアプローチにより、従来の勾配法では困難であった高次元の設計空間を効率的に探索できるようになり、設計解の多様性も確保することを可能とした。

さらに、位相的データ解析を導入することで、設計変数空間における解の多様性を定量的に評価する手法も組み込んでいる。従来の単純な L2 距離による評価では十分でなかった多様性の測定を、パーシステントホモロジーを用いて抜本的に改善した。その結果、設計変数空間において有意義な多様性を持つ解を得ることが可能となった。

提案手法の有効性を検証するため、熱伝導問題や熱流体問題への適用を実施した。ヒートシンク設計においては、限られた高熱伝導材料の配置を最適化することで放熱性能を向上させ、熱流体問題では冷却性能を最大化する流路構造を創成した。

本研究の成果は、設計支援ツールとしてのトポロジー最適化の可能性をさらに広げるものであり、今後は制御設計との同時最適化や意匠性を考慮した設計への展開が期待される。

医工学分野における流体データ同化の課題

大谷 智仁(大阪大学 大学院基礎工学研究科)

Tomohiro OTANI (The University of Osaka, Graduate School of Engineering Science)

医工学分野において、患者個別の医用データに基づく循環器の血流場の理解や、その診断支援の試みが始まって約四半世紀が経過した。この過程で、患者個々の血管形状に対する血流動態の数値流体力学計算[1]や、磁気共鳴イメージング (Magnetic resonance imaging: MRI) による血液流速分布の非侵襲計測[2]など、血流動態や血管への力学負荷の評価技術の開発が進められ、具体的な疾患に対する応用や商用展開へ発展した。一方で、数値計算に用いられる理想化・簡易化や、計算条件の不確かさ、MRI 計測における分解能の制約や複数の系統誤差 (バイアス) の混入など、各々の手法の制約・限界が可視化されることになり、分野全体における技術的イノベーションの需要が高まっている。

上記課題の解決手法の一つとして、MRI 画像の各画素で定義される流速ベクトルを計測データとする流体データ同化技術の導入が提案された [3]。本手法は計測と数値計算それぞれの流速分布の誤差最小化問題であり、数値計算の初期値・境界値を制御変数とおく数理最適化問題として整理され、随伴変数法や深層学習による計算手法の開発が進められている。ただし、誤差関数の定義にあたり、MRI に対するバイアス混入が問題となるが、誤差の度合や分布を記述する観測モデルが無く、MRI に対する流体データ同化の適用対象は、誤差の影響が小さいと考えられる、単純な大血管流れなどに制約されてきた。

著者らは上記課題の解決を目指し、既知の流速分布に対して、実際の MRI の計測条件を反映した MRI 流動計測の数値シミュレータの構築を進めている [4]。本研究では、外部磁場の印可に伴う巨視的な磁化運動を解き、磁気信号の取得から速度再構成までの一連の手順を全て記述することで、計測や信号処理における複数種類の誤差混入やその度合を出力する。本講演は、分野全体の研究開発の動向や、著者らの研究の進捗について報告したものであり、以下に講演で用いたスライド(の一部)を添付する。

References

1. Mittal R, Seo JH, Vedula V, Choi YJ, Liu H, Huang HH, et al. Computational modeling of cardiac hemodynamics: Current status and future outlook. *J Comput Phys.* 2016;305: 1065–1082.
2. Soulat G, McCarthy P, Markl M. 4D flow with MRI. *Annu Rev Biomed Eng.* 2020;22: 103–126.
3. Nolte D, Bertoglio C. Inverse problems in blood flow modeling: A review. *Int J Numer Method Biomed Eng.* 2022;38: e3613.
4. Otani T, Sekine T, Sato Y, Alves EC, Wada S. An Eulerian formulation for the computational modeling of phase-contrast MRI. *Magn Reson Med.* 2025;93: 828–841.

多数の空力解析結果のデータ解析による車両周り流れの特徴抽出

中島 卓司 (広島大学)

Takuji NAKASHIMA (Hiroshima University)

近年の自動車の空力開発では、大規模な計算資源を用いて多数の候補車両形状の空力解析が実施され、より良い空力性能を持つ車両形状が追及されている。一方で、それらの解析結果は膨大なデータ量となることから、人手によってその全てを分析、評価することは困難である。より効果的に設計技術者を支援し、実際の製品開発に貢献するためには、活用されていない大規模データを統計的に解析し、設計に有用な知識を抽出することも重要である。このような流れの特徴抽出例としては、多目的最適化で得られたパレート解に対する固有直交分解(POD)法の適用[1, 2]が報告されている。また、自動車の空力技術者はこれまで、自動車周辺の流れの構造やトポロジーに着目して、空力性能と流れの現象との関係を議論してきた。そこで、多数の車両の空力解析結果に対するデータ解析を行い、抽出された自動車周りの流れの特徴と空力性能との関係について統計的分析を行えば、これまで熟練の空力技術者しか持ちえなかった流れと空力性能の関係性のノウハウが客観的情報として得られることが期待される。

そこで本研究では、約 200 台の 1/5 スケールのセダン型自動車モデルを対象とした空力解析結果から特徴的な流れを抽出するため、各車両周り流れの時間平均速度場のデータ群に POD と同様なデータ解析手法である PCA (主成分分析) を適用した[3]。さらに、抽出した流れの構造と自動車モデルの空力性能との関係を統計的に分析し、空力特性と相関のある流れの特徴を明らかにした。その結果、従来の知見[4]と一致する、セダン型自動車の空気抵抗を増大させる流れパターンが抽出された。また、特徴的な流れを抽出する際に、各車両の空力係数値を考慮する PLS (部分最小二乗) 法の適用についても検討し、共通な潜在構造を抽出する特徴量抽出法では、目的変数への寄与が大きいモードが優先的に抽出されることが確認された。

参考文献

- 1) Oyama, A., Nonomura, T., and Fujii, K.: Data mining of Pareto-optimal transonic airfoil shapes using proper orthogonal decomposition. *Journal of Aircraft*, vol.47, no.5, pp.1756-1762, 2010.
- 2) Oyama, A., Verburg, P., Nonomura, T., Hoeijmakers, H. and Fujii, K.: Flow Field Data Mining of Pareto-Optimal Airfoils Using Proper Orthogonal Decomposition. *The Proceedings of 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, AIAA 2010-1140, 2010.
- 3) 池田 隼, 中野 樹, 福本 浩章, 大山 聖, 平岡 武宜, 清水 圭吾, 中島 卓司, 坪倉 誠: 空気抵抗および揚力の低減を目的としたセダン型簡易車両の多目的形状最適化. 第 97 期流体工学部門講演会講演論文集, Session ID IS-15, 2019.
- 4) 農沢 隆秀, 岡田 義浩, 大平 洋樹, 岡本 哲, 中村 貴樹: 自動車の空気抵抗を増大させる車体周りの流れ構造: 第 2 報, セダン車体の特徴的な流れ構造(流体工学, 流体機械). 日本機械学会論文集, 75 巻, 757 号, p. 1807-1813, 2009.

不変解に基づく乱流熱伝達の予測と制御

本木 慎吾

大阪大学 大学院基礎工学研究科

近年、持続可能な社会に向けたエネルギーの有効利用の観点から、伝熱促進を目的とした効率的な流体制御技術の需要が急速に高まっている。熱交換器等の流体による熱の輸送を伴う伝熱機器のさらなる高効率化は自動車の設計開発においても重要な課題であり、自動車性能の飛躍的な向上をもたらすと期待される。

熱や運動量、および物質の輸送において重要な役割を担う乱流の解明・予測・制御は、工学から物理学分野にわたる重要な研究課題であり、国内外の多くの研究者により精力的に研究が行われてきた。特に近年、計算機技術の発展により大規模数値解析が可能となったことで、乱流中の管状渦や壁乱流における縦渦とストリークといった代表的な秩序構造の理解が進んでいる。さらに、流体運動を記述する Navier-Stokes 方程式の非線形不変解が乱流の構造および統計的性質を再現することが明らかとなり、このような不変解に基づく乱流の理論的な解明への試みが行われている [1]。

本研究では、多孔質体で構成される壁面のような透過性を有する壁面に着目し、その乱流熱伝達を明らかにした。具体的には、多孔質壁面を模擬する透過壁条件を用いた直接数値シミュレーション [2,3] および実験を実施し、壁面の多孔性に起因する大規模構造 (大規模ブリュム、大規模スパン方向渦) の出現により、自然対流および強制対流のどちらにおいても究極熱伝達 (壁面熱流束が流体の熱伝導率に依存しない熱伝達) を達成し得ることを見出した。さらに、透過壁条件を伴う Navier-Stokes 方程式の非線形不変解 (定常解) を求めることで、大規模構造と究極熱伝達の間を理論的に示した [4]。

熱対流 (温度差に起因する浮力によって駆動される対流) について、Boussinesq 方程式 (非圧縮 Navier-Stokes 方程式+温度の移流拡散方程式) の 3次元定常解がマルチスケール性を示し、乱流の秩序構造および統計法則を再現することを発見した [5]。また、その水平周期の最適化を行うことで、不変解が乱流状態よりも顕著に高い熱伝達を達成することを見出した。さらに、磁気力 (水平方向の減衰力) の導入により、熱対流における乱流熱伝達を制御し得ることを示すと同時に、伝熱面の形状と磁気力を最適化することで、極めて顕著な伝熱促進が可能であることを明らかにした。

本研究の成果は、偏微分方程式の非線形不変解に基づくアプローチの可能性を示すとともに、自動車性能の向上にも資する高効率の熱交換技術の研究開発に新しい展開をもたらすものと期待される。

References

- [1] G. Kawahara *et al.*, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **44**(1), 203–225, 2012.
- [2] K. Kawano *et al.*, *J. Fluid Mech.*, **914**, A13, 2021.
- [3] S. Motoki *et al.*, *J. Fluid Mech.*, **931**, R3, 2022.
- [4] S. Motoki *et al.*, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **380**, 20210037, 2022.
- [5] S. Motoki *et al.*, *J. Fluid Mech.*, **914**, A14, 2021.

PINNsを活用した流体データ同化

三坂 孝志 (産業技術総合研究所)

1. はじめに

支配方程式を拘束条件として学習を行う「物理に基づくニューラルネットワーク (Physics-informed neural network, PINN)」は、入出力を近似する代替モデルであると同時に、学習データを必ずしも必要としないため支配方程式の近似解を求める手法にもなっている[1]. 近年、機械学習技術を用いた科学技術計算のアプローチとして様々な対象への応用が行われている[2]. PINNの学習では支配方程式の微分項を評価する際に、PyTorchなどの機械学習フレームワークに備わっている自動微分機能を利用している. 一方、随伴変数法 (アジョイント法) による感度情報を利用した最適化やデータ同化は長く行われてきているが、近年、Taich[3]やNVIDIA Warp[4]など微分情報を比較的容易に利用可能な数値シミュレーションフレームワークが開発されている (Differentiable simulation). 本発表ではSlide 2に示すように、支配方程式の弱拘束 (PINN) および強拘束 (随伴変数法) による微分 (感度) 情報を用いたデータ同化という切り口で事例を紹介する.

2. PINNを用いたデータ同化

データ同化は実空間の観測データを用いて、仮想 (計算) 空間の数値シミュレーションにおける不確かな条件・パラメータを学習する手法である. アンサンブルカルマンフィルタや4次元変分法などのデータ同化手法が提案されているが、アンサンブル計算による計算コスト増大やアジョイントコード開発など、利用する際の障壁は小さくない (Slide 4). そこで本研究ではPINNを用いたデータ同化を検討する (Slide 5). PINNはRaissiらの2019年の論文で提案され、その論文の引用数の急増から多くの分野に影響を与えていると考えられる (Slide 6). PINNはPyTorchなどの機械学習フレームワークを用いて比較的簡単に実装することができるためデータ同化を容易にすると期待されるが、全結合ネットワークを用いて素直に実装されたPINNでは単純な低レイノルズ数円柱まわり流れを再現することも難しい場合がある (Slide 7). 特によどみ点圧力や流量保存のような数値シミュレーションにおける基本的な条件も、個別に拘束を加えなければ精度良く再現することができない. それらの改善のために様々なPINN手法が提案されている.

本研究では発想を転換し、データ同化への適用を前提として数値シミュレーション結果と観測データの差に対してPINNモデルを構築する. これにより、数値シミュレーション結果を観測データに近づけるための境界条件やパラメータの修正にPINNの微分情報を用いる. ベースとなる流れ場自体は数値シミュレーションによって得られているため、PINN単体による流れ場の再現に腐心する必要性が減ると期待される. この数値シミュレーションとPINNの重ね合わせの模式図を、一次元ポアソン方程式に関してSlide 8に示す. データ同化手法としては、アンサンブルカルマンフィルタや粒子フィルタなどのアンサンブル手法に対して、本アプローチは随伴方程式を用いた勾配法に分類できると考えられる (Slide 9). 通常、4次元変分法などのデータ同化手法では随伴方程式や対応する随伴コードが必要になるが、本アプローチではまず数値シミュレーションと観測データの差をPINNモデルで近似し、機械学習フレームワークの自動微分を用いて得た勾配情報を利用することになる. Slide 10に示すように本アプローチの利点はいくつか挙げられるが、PINN構築のための学習時間は課題となる.

本研究ではマルチブロック直交格子フレームワーク (Building Cube Method, BCM) [5]において、並列処理を行うマルチブロック領域毎にPINNを構築するアプローチを検討した (Slide 11). PINNには全結合ネットワークおよびtanh活性化関数を用い、PyTorchを用いて実装した. 支配方程式の残差および境界条件などからなる損失関数の最小化にはAdamを用いた. 解析においてはBCMフレームワーク[6]をFortranで扱い、

PINN部分をPyTorchで処理するためにForpy[7]を利用した。MPI並列はBCMフレームワーク側で扱い、各GPUにCubeを配分する[8]。Slide 12に示すように、隣接Cube間のPINNの接続はFinite basis physics-informed neural networks (FBPINNs)を用いて行う[9]。FBPINNsではCubeの重合領域で加算後の値が1となる微分可能な重み関数を考え、ニューラルネットワークの出力にその重み関数をかけて学習を行う。これによりCube境界で滑らかに接続されたPINNの出力が得られる。重合領域ではPINNの予測値やその微分値が使われるが、これらの量はそれぞれの分割領域のネットワークパラメータから計算することができることから、本研究では隣接Cube間でネットワークパラメータをやりとりした。FBPINNsは単に領域分割による並列化にとどまらず、素朴に実装されたPINNでは高周波現象の近似が難しいという難点に対して、領域分割によって1つのニューラルネットワークが扱う実効周波数を小さくして近似精度を向上させる効果がある。Slide 13に4分割した領域で二次元ラプラス方程式を解いた例を示す。

PINNを用いたデータ同化問題として、流れ場に埋め込まれた多孔質媒体に起因する巨視的抗力係数の推定を考える。Slide 14は単位直径の円柱が正方形断面の流路に埋め込まれた計算領域を示している。ここではレイノルズ数を200に設定している。多孔質媒体は円柱の後流に示される直径0.5の球状領域内に定義される。多孔質媒体に誘起される抗力は、流速に比例するようにモデル化する。多孔質媒体の抗力の大きさを制御する係数と対応する流れ場は、参照となる有限差分解を真値として、そこから空間的な間引きによって抽出された擬似観測値に基づいて推定される。前述のようにPINNの損失関数は観測値と多孔質媒体を含まない有限差分解との差に対して構築される (Slides 15-16)。すなわち、非圧縮性ナビエ・ストークス方程式の流れ変数 $\mathbf{u} = (u, v, w, p)^T$ を $\mathbf{u} = \mathbf{u}_F + \mathbf{u}_P$ と分解する。分解した変数を非圧縮性ナビエ・ストークス方程式に代入し、 \mathbf{u}_F が多孔質媒体を含まない非圧縮性ナビエ・ストークス方程式を満たすと仮定することで、観測値と有限差分解の差に対する \mathbf{u}_P の方程式を得てPINNの学習に用いる。これによりPINN単体では再現の難しい流れ場を対象としつつ、PINNを用いた様々な推定を行うことができる。また、BCMフレームワークを活用することで、時空間適応的にPINNモデルを構築することも期待できる。

Slide 18に主流方向速度の断面分布の比較を示す。(a)は有限差分解 \mathbf{u}_F にPINN解 \mathbf{u}_P を重畳した流れ場 $\mathbf{u}_F + \mathbf{u}_P$ 、(b)は擬似観測値と有限差分解の差に対して抗力係数を推定しつつ構築したPINN解 \mathbf{u}_P である。一方、(c)は真値として用いた有限差分解、(d)は(c)から多孔質領域の無い流れ場を差し引いたPINNで予測すべき流れ場であり、(b)と比較する場である。Slide 19に多孔質媒体の抗力係数の推定履歴と損失関数の履歴を示す。真値に近い抗力係数が推定されていることが確かめられる。乱流モデルを用いた高レイノルズ数流れへの適用に関しても当日発表を行ったが、本資料からは除いている。

3. 随伴変数法とDifferentiable Simulation

データ同化手法として数値気象予測にも長く利用されている4次元変分法は、Sasakiによってその基礎が提案された (Slide 21)。偏微分方程式の最適制御法として随伴変数法 (アジョイント法) を導入することにより、大規模気象モデルに4次元変分法を適用することが可能になった (Slide 22)。アジョイント法は形状最適化などにも用いられており、航空分野ではJamesonらによって翼最適設計への応用が行われている (Slide 23)。データ同化への応用としては、数値気象予測に加えて、航空機のフライトデータに基づく晴天乱気流の推定が行われている (Slide 24)。近年、自動微分による微分情報を利用可能な数値シミュレーションフレームワークによるDifferentiable Simulationが行われている (Slide 25)。これらのDifferentiable SimulationフレームワークはPyTorchなどの機械学習フレームワークと同様の使用感を実現しており、さらに機械学習フレームワークとの組み合わせも可能であるため、シミュレーションモデルとニューラルネットワークを直接つないだシステムも構築可能である。Slide 26および27にNvidiaの資料から引用した各種フレームワークの比較を示す。当日の発表ではインフレータブル構造体のシミュレーションモデルと圧力制御用のニューラルネットワークをつないだシステムを紹介したが、本資料からは除いている。

4. おわりに

機械学習との関わりからPINNやDifferentiable Simulationなど微分情報を活用した数値シミュレーションが盛んになってきている。発表ではPINNを大規模流体問題に適用するための並列化や数値シミュレーションとの併用の可能性を述べた。また、Differentiable Simulationフレームワークの活用についても述べた。

参考文献

- [1] Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E., Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, Vol. 378, pp. 686–707, 2019.
- [2] 白鳥英, 中村耀, 杉原伊織, Physics-Informed Neural Network の研究動向と液膜流れの問題への適用例, *人工知能学会誌*, Vol. 38, pp. 335–344, 2023.
- [3] Taichi Lang: High-performance parallel programming in Python, <https://www.taichi-lang.org/>.
- [4] NVIDIA Warp, <https://developer.nvidia.com/warp-python>.
- [5] Nakahashi, K., High-density mesh flow computations with pre-/post-data compressions, 17th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA Paper 2005-4876, 2005.
- [6] Misaka, T. Space-time adaptive model order reduction utilizing local low-dimensionality of flow field. *Journal of Computational Physics*, Vol. 493, p. 112475, 2023.
- [7] Forpy: A library for Fortran-Python interoperability, <https://github.com/ylikx/forpy>.
- [8] Misaka, T., Mizuno, Y., Nakasumi, S., Furukawa, Y., Domain-decomposed physics-informed neural network prediction on Cartesian CFD framework, *International Conference on Scientific Computing and Machine Learning 2024*, 2024.
- [9] Moseley, B., Markham, A., Nissen-Meyer, T., Finite basis physics-informed neural networks (FBPINNs): a scalable domain decomposition approach for solving differential equations, *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 49, p. 62, 2023.



開催日:2024/10/07~2024/10/08

自動車性能の飛躍的向上を目指すData-Driven設計 | 2024a001

カテゴリ:イベント

タグ: 一般研究 研究集会I

開催概要

- 開催方法:Zoomミーティングによるハイブリッド開催
- 開催場所:九州大学 伊都キャンパス ウェスト1号館 D棟 4階 IMIオーディトリウム (W1-D-413) 及びJR博多シティ9階会議室2
- 主要言語:日本語
- 主催:九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
- 後援:金沢大学数理・データサイエンス・AI教育センター
- 種別・種目:一般研究-研究集会(I)
- 研究計画題目:自動車性能の飛躍的向上を目指すData-Drive設計
- 研究代表者:中澤 嵩(金沢大学・学術メディア創成センター・准教授)
- 研究実施期間:2024年10月7日(月)~2024年10月8日(火)
- 公開期間:2024年10月7日(月)~2024年10月8日(火)
- 研究計画詳細:https://joint1.imi.kyushu-u.ac.jp/research_chooses/view/2024a001

プログラム

10月7日(月) IMIオーディトリウム

9:00-10:00

中村 優佑(マツダ株式会社技術研究所次世代人間中心システム研究部門)

データ分析技術を応用した自動車周りの流れ場の可視化

10:00-11:00

瀬尾晃平(マツダ株式会社技術研究所次世代人間中心システム研究部門)

自動車の空力開発におけるデータ分析技術の応用

11:00-12:00

中澤嵩(金沢大学・学術メディア創成センター)

新規圧縮性流体ソルバーの開発

13:00-14:00

山崎渉(長岡技術科学大学大学院工学研究科)

サロゲートモデルを活用した大域的トポロジー最適設計の試み

14:00-15:00

矢地謙太郎(大阪大学大学院工学研究科)

機械学習を利用した進化した型トポロジー最適化

15:00-16:00

本木慎吾(大阪大学大学院基礎工学研究科)

不変解に基づく乱流熱伝達の予測と制御

10月8日(火) JR博多シティ9階会議室

9:00-10:00

三坂孝志(産業技術総合研究所)

PINNsを活用した流体データ同化

10:00-11:00

中島卓司(広島大学大学院先進理工系科学研究科)

多数の空力解析結果のデータ解析による車両周り流れの特徴抽出

11:00-12:00

大谷智仁(大阪大学大学院基礎工学研究科)

医工学分野における流体データ同化の課題

ポスター