

粒子法による固体・流体力学解析を代替する深層学習の構築

Learning particle method simulation for solid and fluid mechanics

西尾 真由子

筑波大学 システム情報系

1. 研究目的

本研究では、固体・流体をメッシュフリーデータとして扱いリアルタイムで数値解析を行うことを目指し、数値解析を代替する機械学習モデルの開発を行っている。機械学習で数値解析を代替することによって、数値解析に比べ大幅に計算時間を短縮することが可能になる。リアルタイムで数値解析を解く意義として、デジタルツインや制御への展開が可能になる点が挙げられる。また、数値解析法を基にした機械学習モデルを開発することによって、モデルの精度向上を図るとともに、解釈性・説明性が高い機械学習モデルを構築する。具体的には、Lagrange 的に粒子を追跡する自由表面流れを対象とし、次の(A)(B)を実施した。

- (A) 通常の PointNet に SPH 法に基づく微分演算を内包した深層学習モデルを開発し、微分演算を内包することにより精度と速度にどのような影響を与えるか検証する。
- (B) 高速な数値解析手法である低次元モデルへの応用を見据えて、PointNet を基盤とした物理場のモード分解手法を定式化し深層学習モデルを構築する。

2. 研究成果の内容

研究期間を通じて、(A)(B)それぞれの検討項目について、以下の知見を得た。

(A) について、Lagrange 的に粒子を追跡する自由表面流れを対象として PointNet に SPH 法に基づく微分演算を内包した深層学習モデル Differential PointNet (Di-PN) を構築し、その精度と計算効率について、微分を内包しない通常の PointNet と比較して、その有効性を検証した。入力を粒子の位置と速度、出力を速度の差分として、粒子位置を時間ステップごとに更新した。Di-PN においては、速度のラプラシアンを微分演算として内包した。検証の結果、PointNet では短い時間ステップであればおおよそ予測可能である一方で、予測時間が長くなると誤差が発散し、境界外へ粒子が離散してしまった。一方、Di-PN は短いステップにおいても PointNet よりも高精度であり、なおかつ長期的に誤差が発散することもなかった。これらのことから微分演算を内包することで計算精度の大幅な向上を確認した。しかし、Di-PN も長期的には粒子間距離が近くなり、通常の粒子法よりも低精度であったことから予測精度向上のためにはさらに高度な深層学習モデルが必要となる。一方、計算速度に関しては PointNet の方が Di-PN よりも 3 倍程度高速であった。これは、粒子位置が毎ステップ変わる Lagrange

的記述においては、微分をするために注目粒子の周辺粒子を探索する必要があることに起因すると考えられる。通常の PointNet はこのような近傍点探索の処理が含まれないため、大幅に高速化であったと考察される。以上のことから、短い予測時間をより高速に解析したい場合に対しては PointNet などを用いて、より長時間を正確に解析したい場合は、Di-PN を始めとした高度な深層学習モデルが必要であると考えられる。

(B) について、PointNet のプーリングを空間積分に置き換えることで、高次元な物理場のデータを低次元の時間モードと空間モードに分解する定式化を行った。この定式化を基に深層学習モデル (NMD) を構築し、Lagrange 的に解析された自由表面流れの解析データをモード分解および再構成する検証を行った。入力各粒子の位置と速度と圧力、出力は各粒子の速度と圧力とした。その結果、時間モードと空間モード共に 16 次元程度で元の流れ場をある程度詳細に再構成可能であった。モードの次元数と再構成精度の関係についても調査した結果、時間モードと空間モード共におおよそ 8 次元程度まで大幅に精度が向上するが、その後精度の向上は低下していた。このことから、移動境界を有する様な複雑な問題においても、少ない次元で元の物理場を十分表現可能であることが確認できた。また、得られた低次元の時間モードおよび空間モードの可視化を行った。その結果、時間モードは時間の情報を入れなくても異なる時間であれば異なる時間モードを獲得できており、空間モードは境界付近に急峻な勾配があるなど、物理現象の予測に沿ったモードを獲得することができていた。以上のことから、NMD により適切に Lagrange 的に解析された自由表面流れの情報を捉えることができていたと考える。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

(A)(B) の両項目において、大量の数値解析データを使用した深層学習モデルの学習および評価を行う必要があった。学習データは数量およそ 100 万の数値解析出力の snapshot であり、通常のワークステーションだと学習に 3 日必要となる。そのため、10 ケース程度ハイパーパラメータを変更したケースを検証しようとする、1 か月以上かかってしまう。しかし、学際共同利用プログラムの Pegasus を使用することで、全てのケースを同時に計算することができる。よって、学習コードを並列化しない場合であっても 3 日で 10 ケースの解析を行うことができた。このように、学際共同利用プログラムにより、検証の速度を大幅に向上させることができたことから、学際共同利用プログラムは研究の加速に大きな意義を持つと考える。

4. 今後の展望

今後は、特に (B) で提案したモード分解手法を低次元モデルへと発展させる。(B) で提案した手法は、モード分解法に基づくものであり、時間変数が低次元の時間モードだけに依存している。そのため、時間モードだけを用いて時間発展させることで元の高次

元場での解析と比較して大幅な計算速度の向上が見込まれる。

5. 成果発表

- (1) 学術論文：的野玄, 西尾真由子. 高速な深層学習メッシュフリー数値解析のためのニューラルモード分解の定式化と自由表面流れの再構成. 日本計算工学会論文集. 2024; 2024(1): 20241003
- (2) 学会発表：的野玄, 才田大聖, 西尾真由子. SPH 法に基づく微分演算を内包した深層学習による粒子法代替モデルの説明性向上. 第 28 回計算工学講演会. 2023 年 6 月 1 日.
- (3) その他

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Pegasus	○	4500	
Cygnus			
Wisteria/BDEC-01			
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			