

jh230043

## 時間発展する流体シミュレーションを予測する代理モデルの開発

下川辺 隆史 (東京大学)

**概要** 格子に基づくシミュレーションは高性能計算分野の重要なアプリケーションである。時間発展を行う数値シミュレーションは、高精度に計算するために、多数の格子点を必要とし、多くの時間ステップを刻む必要がある。近年、深層学習が持つ高速な推論性能に依拠して、データ駆動アプローチによって数値シミュレーション結果を高速に予測する研究開発が盛んに行われている。本研究課題では深層学習を利用して、従来の数値シミュレーション手法を代替し、その結果を高速に予測する代理モデルの開発を目指す。本年度は、乱流シミュレーションで格子解像度よりも細かいサブグリッドスケール(SGS)の渦の効果を表すSGS応力を再現するハイパーグラフニューラルネットワーク(HGNN)の構築を進めた。教師データには直接数値シミュレーション(DNS)の結果を用いる。教師データの無次元化などを行い、高レイノルズ数であっても学習が進むことを示した。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

東京大学 情報基盤センター

大阪大学 サイバーメディアセンター

#### (2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

#### (3) 共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)

超大規模数値計算系応用分野

超大規模データ処理系応用分野

#### (4) 参加研究者の役割分担

- 下川辺 隆史 (東京大学) : 流体予測の代理モデルの開発
- 深川 宏樹 (DeepFlow 株式会社) : 代理モデルの開発
- 埜 敏博 (東京大学) : 大規模深層学習に関する助言
- 中島研吾 (東京大学) : 計算科学に関する助言
- 今野 雅 (東京大学) : 流体計算に関する助言
- 長尾 大道 (東京大学) : 機械学習に関する助言

- 松葉 浩也 (東京大学) : 機械学習実行環境に関する助言

- 芝 隼人 (東京大学) : グラフニューラルネットワークモデルの開発

- 佐久間 大我 (東京大学) : 流体計算の支援

- Ziheng Yuan (東京大学) : 流体計算の支援

- 小野寺 直幸 (日本原子力研究開発機構) : 数値流体力学に関する助言

- 石井 大海 (DeepFlow 株式会社) : 代理モデルの開発

- 蓑毛 崇章 (DeepFlow 株式会社) : 流体計算の実施

- 神志那 純 (DeepFlow 株式会社) : 代理モデルの開発

- 小井土 真一 (DeepFlow 株式会社) : 代理モデルの開発

- 石原 拓哉 (DeepFlow 株式会社) : 代理モデルの開発

- 渡辺 亮 (DeepFlow 株式会社) : 代理モデルの開発

### 2. 研究の目的と意義

格子に基づくシミュレーションは高性能

計算分野の重要なアプリケーションである。時間発展を行う数値シミュレーションは、高精度に計算するために、多数の格子点を必要とし、多くの時間ステップを刻む必要がある。大規模で高精度なシミュレーションでは、多くの計算資源と計算時間が必要であるため、従来から様々な高速化の取り組みが行われている。MPI による領域分割や適合格子細分化法の適用による局所的高精細化などの取り組みがなされている。

近年、画像認識分野では深層学習を用いた研究が活発に行われている。深層学習は、機械学習手法の一つで、入力層と出力層の間に複数の層をもつディープニューラルネットワーク (DNN) で学習を行う。DNN の一つである畳み込みニューラルネットワーク (CNN) は、画像認識や解析、分類問題で大きな成功を収めている。深層学習は、演算加速装置である GPU により高速に学習と推論が可能である。深層学習が持つ高速な推論性能に依拠して、データ駆動アプローチによって数値シミュレーション結果を高速に予測する研究開発が盛んに行われてきた。

本研究課題では深層学習を利用して、流体計算の数値シミュレーション結果を高速に予測する代理モデルを開発する。データ駆動アプローチによる先行研究の多くは特定の問題に特化した代理モデルの開発を行っているが、本研究課題が目標とするのは汎用的に従来の流体計算の数値シミュレーション手法を代替する方法を開発することである。

本年度は、現在開発中の CNN ベースのネットワークモデルを高度化する。昨年度の研究で、U-Net 型ネットワークを導入し、学習時に用いる損失関数として直接値に加えて空間勾配を考慮した値を利用すると予測精度が向上することがわかってきた。本年度は、これを発展させ、物理的な制限を考慮した損失関数を導入し、長時間先を予測できるネットワークモデルの構築を目指す。また、複雑

物体周りの流れの予測を可能とするため、物理量を任意の空間座標とその位置関係で保持することを表現できるグラフニューラルネットワーク (GNN) を導入した予測手法の構築を目指す。

### 3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本課題は流体計算のシミュレーションの汎用的な代理モデルを構築することを目指す。深層学習で代理モデルの学習を行うためには、多数かつ多様な教師データを作成する必要があるため、大規模な計算リソースが必要である。さらに、深層学習モデルは多数のパラメータを学習で求める必要があり、これに大規模計算を要する。また、より高い精度を求めるためには、モデル変更に伴うハイパーパラメータ調整を行うことが必須であり、多くの試行回数を必要とする。これらの深層学習の学習と推論では、これらを高速に実行できる GPU を利用する。また、CNN モデルの教師データの作成には GPU 上で動作する格子ボルツマン法コードを用い、GNN モデルの教師データの作成には CPU 上で動作する離散微分形式を用いた流体計算コードを用いる予定である。以上のように、本課題では、教師データの作成および代理モデルの学習に主な計算資源として NVIDIA A100 GPU および Intel Xeon CPU を用いる計画であり、東京大学の Wisteria-Aquarius および大阪大学の SQUID (CPU および GPU) は本研究を遂行する上で最適な計算環境である。課題代表者および副代表者はこれらの計算環境を現在利用中であり、準備は整っている。本研究は、数値流体力学、大規模深層学習、高性能計算分野の専門家が密に連携して実施され、当拠点公募型共同研究として実施する必要性が極めて高い。

#### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

昨年度までの課題では、GNN によるガラス・過冷却液体の長時間緩和動力学の予測および CNN による非圧縮性流体計算の予測に取り組んだ。GNN による長時間緩和動力学の予測では、グラフのノードで表される粒子の運動に加えて、粒子間の関係を表現するグラフのエッジを学習することで、より優位な予測ができることが明らかになり、その成果として BOTAN の公開に至った。一方で、CNN による流体予測では、ネットワークモデルを単純な Encoder-Decoder 型から U-Net 型へ変更し、損失関数として物理変数の空間勾配を扱うことで精度向上することがわかった。しかし、依然として長時間の予測および複雑形状周りの流れに対しては予測精度が低く、本年度は流体計算の予測に注力することとし、新しい損失関数および GNN の導入によって、これらを解決し、予測精度の向上を目指す。

#### 5. 今年度の研究成果の詳細

本研究課題では、複雑形状まわりの流体計算の予測を柔軟に精度良く行うため GNN を利用することを目指している。そこで、本年度は、GNN を用い、流体計算の一部である乱流計算に対する代理モデルの開発を進めた。

並行して、物理的な制限を考慮した損失関数を導入することで、長時間先の結果を予測できるネットワークモデルの構築を継続して進めている。DNN 特有の誤差によって長時間先の予測は難しく、当初の計画通り物理的な制限を考慮した損失関数の導入を進めている。

ここでは、GNN を用い、流体計算の一部である乱流の計算に対する代理モデルの開発について報告する。

##### 5.1 GNN を用いた SGS 応力の再現

産業応用を目的とする実用的なシミュレーションでは高レイノルズ数流体での乱流

を忠実に再現することの困難さがしばしば問題となる。細かいメッシュを使って直接数値シミュレーション(DNS)を実施するには計算コストがかかるため、実用的には粗いメッシュを使い、メッシュサイズよりも小さい Subgrid Scale(SGS)をモデル化する Large Eddy Simulation(LES)が使われる。これまで様々な LES が考えられてきたが、どのモデルにも DNS の結果を参照して求められる経験的な変数が含まれ、適用範囲が限定されてきた。近年では、ディープラーニング(DL)技術を用いた LES モデルの開発も行われるが、高レイノルズ数流体で学習することが難しいなどの課題がある。

一般に学習対象になんらかの制約があるときに学習モデルも制約を考慮したものにすると、学習効率が良くなることが知られている。そのような制約は帰納バイアスと呼ばれる。流体の場合、相互作用が局所的である局所性、様相が座標系に依存しないという座標変換不変性の 2 つの制約がある。そこで、我々はこの 2 つの帰納バイアスを離散微分とハイパーグラフニューラルネットワーク(HGNN)を用いることで学習モデルに取り込み、高レイノルズ数の多様なシステムにおける DNS データから直接 SGS 応力項を予測する ML-SGS モデルの開発を進めた。

現在のコンピュータの性能では、大規模な流体機械のシミュレーションを DNS で計算することは難しい。本件研究で精度の良い LES モデルが得られれば、計算量を抑えた実用的なシミュレーションができる。

DeepFlow 社で開発する物理シミュレータである Elkurage を使用して DNS データを作成した。また、このデータに対して機械学習モデルを作成し、SGS モデルの学習を行った。Elkurage は完全陽的解法を用いており、相互作用は完全に局所的なものとして計算される。多くの場合、流体シミュレーションでは、計算結果はデカルト座標系での値として出

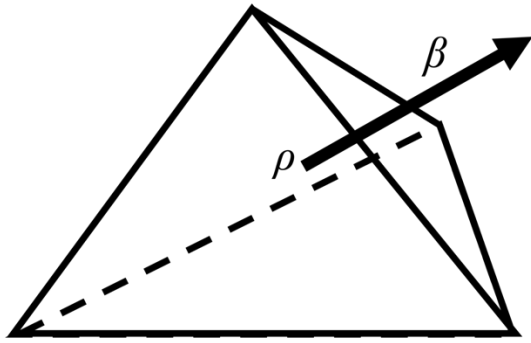


図1 メッシュ上の密度  $\rho$  と流束  $\beta$  の配置

力され、このままでは学習モデルは座標変換不変性を帰納バイアスとして持ち得ない。そこで、本研究では、離散微分形式でシミュレーション結果を用意し、これを教師データとした。微分形式はベクトル解析を一般化したものであり、離散化微分形式は微分形式の離散化になる。我々は図1に示すように離散化した質量密度  $\rho$  をメッシュ内の平均値とし、質量流束  $\beta$  を単位時間あたりにメッシュ表面を通過する物質の質量とした。これはスタガード格子の自然な拡張になっており、これにより座標系を使わずに流体の運動を表記できる。

ニューラルネットワークには、離散微分形式上のDNSデータを扱うのに最適なハイパーグラフニューラルネットワーク(HGNN)モデルを採用する。ハイパーグラフ(HG)とは、グラフを一般化したもので、エッジが任意個数のノードを連結できる。あるメッシュ内にある質量の時間変化はメッシュ表面から出入りする流束密度  $\beta$  の総和で決まる。このとき、メッシュとそれを覆う面の関係は、HG上のエッジとノードの関係と捉えることができる。また、 $\beta$ の総和はHGNN上の畳み込みと同じ計算になる。つまり、HGは離散微分形式で出力したデータと等価な構造をもち、相互作用の局所性はHGNN上の畳み込みとして取り込まれる。これにより、本研究の学習モデルは、座標変換不変性と局所性を帰納バイアスとして持ち、効率よくSGS応力  $\tau$  の学習ができ

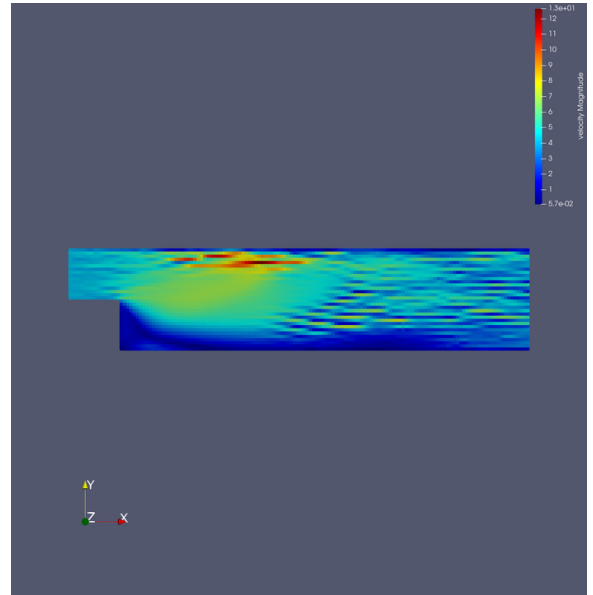
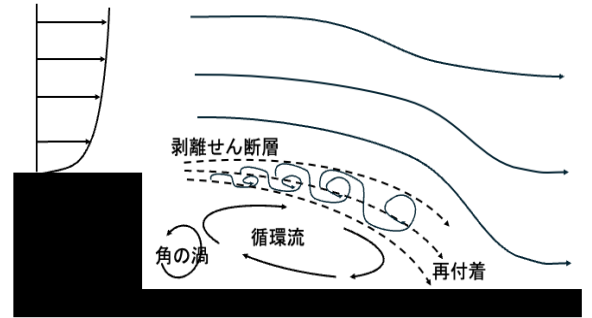


図2 バックステップ流れの概要図と計算例

る。

メッシュ内の平均量を  $\bar{\rho}$  とし、SGS 応力は

$$\tau := \overline{u \otimes \beta} - \bar{u} \otimes \bar{\beta} \quad (1)$$

となる。 $u$ は速度場で質量流束  $\beta$  と質量密度  $\rho$  から定まる。流体シミュレーションでは  $\bar{\rho}$  と  $\bar{\beta}$  の時間発展は求められ、各時刻での  $\bar{u} \otimes \bar{\beta}$  は求まるが  $\overline{u \otimes \beta}$  は求まらず、SGS 応力  $\tau$  は求まらない。そこで、LESではSGS 応力  $\tau$  をモデル化し、 $\bar{u}$  と  $\bar{\beta}$  の関数で与える。本研究ではDNSより得られる  $\bar{u}$ 、 $\bar{\beta}$ 、 $\tau$  を教師データにして、 $\bar{u}$  と  $\bar{\beta}$  から  $\tau$  を出力する予測器の開発を行った。

最初に図2に示すように2次元バックステップ流れに対してベンチマーク計算を行った。学習データとして、バックステップ流れのDNSデータを用いた。図2に概要図と計算

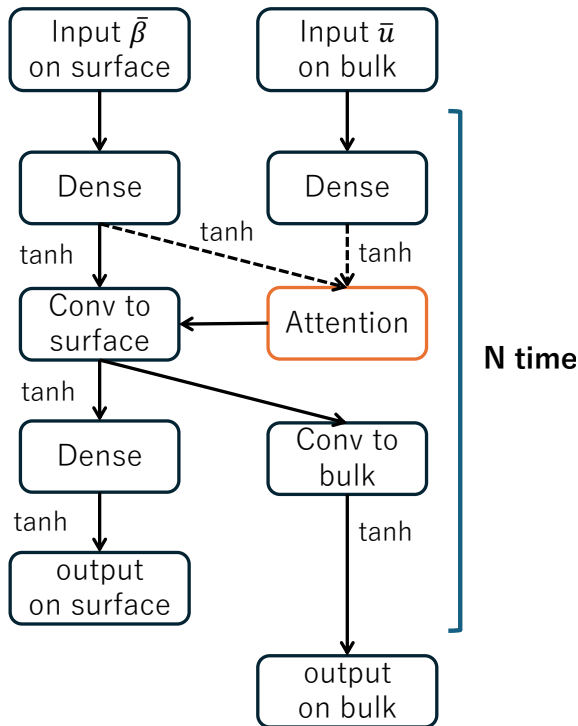


図 3 HGNN モデルの概要図

例を示す。左から流れが入り、段差（ステップ）のところで流れが剥離し、ある程度進んだところで流れが再付着して壁に沿って流れる。流れが剥離し、再付着する領域には、図示したように剥離せん断層、循環流、角の渦、と様々な様相の渦が生まれる。解析の条件は、流入速度  $U$  とステップ高さ  $H$  に基づくレイノルズ数が 36000 となるものを用い、メッシュ数が約 10000 とした。学習に使う領域は図 2 における剥離せん断層と角の渦の 2 領域に注目した。ここで、学習データは、50 秒間の時間発展の中で 1 秒ステップごとにサンプルしたデータのうち、剥離層に流れが流入し始めたときからおおよそ定常流が観測されるまでの時間として、(20, 40) 秒の間からサンプリングを行い、おおよそ 4600 点の入力データを用意した。本研究では、SGS 応力を学習を目的としており、細かい渦がある剥離せん断層と比較的粗い渦がある角の渦領域のデータを教師データとした。もし、2つの領域

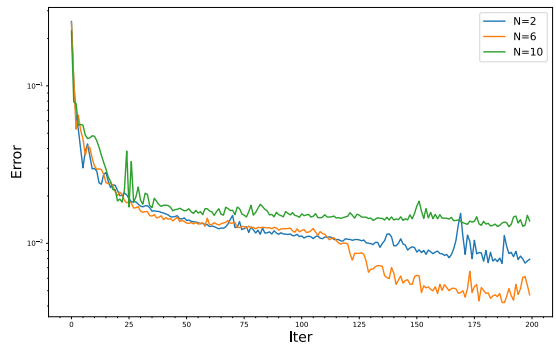


図 4 2次元バックステップ流れにおける損失関数(剥離せん断層領域)

を同時に学習できるのであれば、それは汎化性能をもてると言えるが、今回は剥離せん断層と角の渦の 2 領域をそれぞれ分けて学習した。このとき、各時間ステップでの値の分散の違いを抑えるために出力値を  $[-1, 1]$  の範囲に正規化を施した。機械学習モデルは図 3 のアーキテクチャに従った。モデルは活性化関数を  $\tanh$  とした Encoder-Decoder モデルアーキテクチャに従った。具体的にはモデルの内部には、 $u \otimes \beta$  を計算するようなエッジからノードの畳み込みと発散  $\text{div}$  と等価なノードからエッジへの畳み込み演算が含まれる。中間層の畳み込み回数を  $N$  とした。畳み込み回数が増えれば増えるほど、遠くのメッシュ上の影響が SGS 応力の計算に含まれる。

損失関数の結果が図 4 である。横軸  $\text{Iter}$  を同じデータに対する学習の反復回数、縦軸を平均 2 乗誤差とした。この図より適切な畳み込み回数がシステムによって存在することを示唆している。例えば、今回の系では畳み込み数が 10 回と大きいときに最も性能が悪くなった。当該系において前処理をする前の SGS 応力はほとんど 0 であるために、0 を出力するように急速に学習が進んでしまい、トラップしてしまっただと考えられる。また、学習過程では何度か振動が観測されたが、これはいくつかの時間点のデータを学習に利用しているからで、系や時

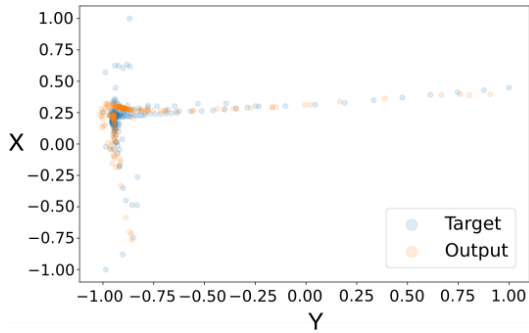


図 5 N=6 時の SGS 応力のターゲット値と予測値の比較(剥離せん断層領域)

間における移流項の値の変化に対して堅牢なデータ前処理、またはモデルの開発が必要であることがわかった。

図 4 において、損失関数の誤差が最も小さかった畳み込み回数 6 回のモデルのある時点の SGS 応力の予測値とターゲットの値を直接比較したものが図 5 である。図 5 から、本モデルはある程度ターゲット値を再現できていることがわかる。しかし、 $X < 0.25$ ,  $Y < -0.75$  付近は再現できていない。

次に、様々な SGS 応力を含むデータの学習に移行するため、本モデルをレイノルズ数 36000 の 3 次元バックステップ流れに適用した。しかし、3 次元では、 $\bar{u}$ 、 $\bar{\beta}$ 、 $\tau$  の値が領域によって大きく異なるため、単純に正規化する前処理だけでは、重要な特徴量が潰れてしまうことがわかった。これは 2 次元流れの場合と比較して、サブグラフ領域間での流れの性質の違いが顕著に出やすいという理由と、数値計算的な発散値によるものであると判断した。当該課題は、様々なシステムに同時に適用し汎化性能を上げる際の障壁となる。そこで、参考文献 A. Abekawa, et al., Physics of Fluids 35, 015162 (2023) を参考に、これに導入された特徴量の無次元化を実施した。このとき、 $\bar{u}$ 、 $\bar{\beta}$ 、 $\tau$  のピーク値の取りうる範囲がレイノルズ数によらず同程度になることを図 6 で確認した。図 6 のデータはある時点における系全体の SGS 応力の値の分布を示している。上の段は生データの分布、下の段は我々の手法によって無次元化された値の

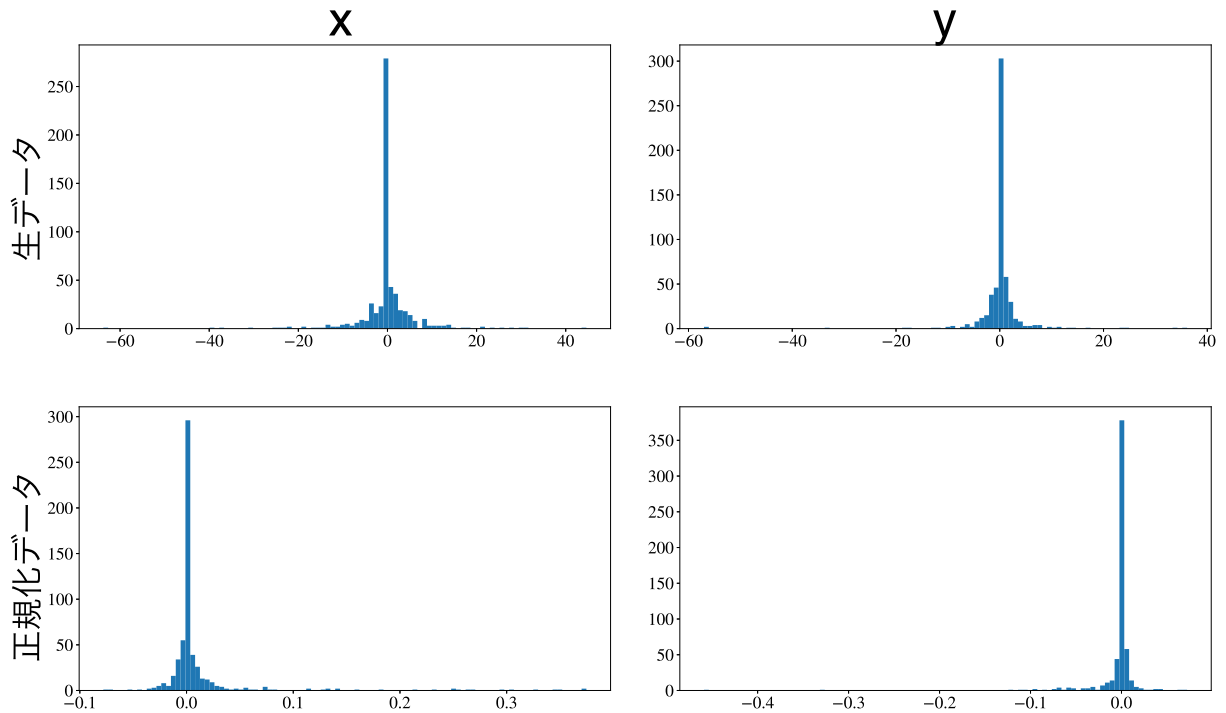


図 6 ある時刻における系全体の SGS 応力の値の分布。無次元前（上段）と無次元後（下段）を示している。

分布である。左右の段は x 軸、y 軸の値を示している。このことから分かる通り、生データは値が大きく広がる傾向にあり、x 軸と y 軸で取りうる値の範囲が異なる傾向にもある、一方で無次元化されたデータは、分布の形は大きくは変わらず x 軸、y 軸の値がある程度正規化されていることがわかる。

以上より、正規化を行ったデータを使うことで、多くのシステム、時間幅の学習データをバッチ学習的にモデルに渡すことができるため、学習モデルが汎化性能を得るのに向いていると考えられる。

## 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

本年度は、主に従来の機械学習では難しかった高レイノルズ数流体の SGS 応力項の導出を行った。最初に、乱流モデルの教師データとなる DNS データの作成を行い、次に、それを学習する HGNN の構築を行った。これにより、座標変換不変性と局所性の 2 つの帰納バイアスを学習モデルに取り込むことに成功し、高レイノルズ数であっても学習が進むことを示せた。最後に、汎化性能を得るために教師データの無次元化を行った。

本研究では、データから学習し検証するまでをパイプライン化し、HGNN モデルはモジュール化しており、開発体制を整えている。今後は、学習モデルが高レイノルズ数流体に対応できるか、汎化性能を持っているかなどを検討していく予定である。このために、今後より大規模な学習データの用意が必要である。具体的には、およそ 2 次元・3 次元の 1 万、500 万、2000 万、1 億メッシュ数の乱流直接シミュレーション (DNS) を実行予定である。学習に使うシミュレーションモデルのサイズが大きくても、学習には全てのメッシュ上にあるデータを使うわけではないので、学習時間がシミュレーションモデルのサイズに線形で増えることにはならない。データサイズに応じて、シミュレーションモデルを

小規模、中規模、大規模、超大規模に分類し、それぞれ数種類作る。このデータの学習の際は適宜本研究で検討した無次元化などでデータを前処理しバッチをつくることで複数 GPU の並列学習を実施する予定である。

将来的には、学習モデルから得られた SGS 応力をシミュレータに組み込むことを予定している。設計開発では、計算条件を変えて流体シミュレーションを繰り返すパラメトリックスタディを行い、最適設計を探索する。このとき、計算時間と計算コストを下げるために、粗いメッシュでシミュレーションが望まれる。メッシュの粗い LES で DNS と変わらない精度で計算できるのであれば、設計のコストを下げ、品質を大幅にあげることができると期待できる。

## 7. 研究業績

### (1) 学術論文 (査読あり)

該当なし

### (2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

該当なし

### (3) 国際会議発表 (査読なし)

該当なし

### (4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] ハイパーグラフニューラルネットワークを用いた LES モデルの改良、渡辺亮、石井大海、深川宏樹、芝隼人、下川辺隆史、液体・ガラスへのデータ駆動アプローチ - グラフニューラルネットワークとその周辺 -, ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター、2023/11/28

[2] 深層学習を用いたシミュレーション結果を予測する代理モデル開発の取り組み、下川辺隆史、第 7 回 HPC ものづくり統合ワークショップ、東京、2023/12/5 【招待講演】

(5) 公開したライブラリなど

該当なし

(6) その他（特許，プレスリリース，著書等）

該当なし