

シミュレーション解析における機械学習の展開可能性

宮川尚紀ⁱ

The Possibility of Development of Machine Learning for Simulation in Computer Aided Engineering

Naoki MIYAGAWA

機械学習をはじめとするデータサイエンスの技術が近年注目されている。この技術と CAE におけるシミュレーション技術は、それぞれデータ駆動とする帰納的な手法かモデル駆動とする演繹的な手法かという方法の違いはあるものの「獲得されたデータに基づき、未知の現象を予測する」という問題の構造は共通のものである。この2つを組み合わせることにより、予測の高速化や構造最適化への活用が期待される。

(キーワード): CAE, computer aided engineering, 数値シミュレーション, 機械学習, 高速化, 逆問題

1 はじめに

画像認識が人間の認識を超え、将棋や囲碁でコンピュータが人を上回るなど、近年機械学習をはじめとするデータサイエンス分野が急速に発展している。これら手法の概略と CAE (computer aided engineering: コンピュータによる製品開発設計技術) におけるシミュレーション解析への展開の可能性についての紹介を行う。

2 データサイエンスとは

データサイエンスとは、データから帰納的に結果を推論や構造を理解する手法全般のことをいい、その中に統計学、機械学習、コンピュータサイエンスなどが含まれている。近年注目されている理由として、深層学習をはじめとするブレイクスルーやその成果のインパクト、並びに社会的なオートメーション化のニーズなどがあるが、最大の理由はコンピューティング技術の向上による解析可能な領域の拡大であると考えられる。これは演算能力の向上のみならず、コンピュータの省電力化や小型化によるデータ取捨能力の向上、ストレージ容量の増大とアクセス速度の向上、ならびにデータを転送・共有するネットワーク技術の向上などが与えた影響が大きい。

結果、データの収集・保存・共有が容易に行えるようになり、膨大に蓄えられたデータを用いて多自由度のパラメータを持つモデルに対して高速な機械学習を適用することで、従来よりも広い領域にデータサイエンスの手法を用いた解析を応用することが可能となった。こうした進歩により今までできなかったような応用例がいくつも実現され、注目を集めている。

2.1 教師つき機械学習とは

データサイエンスは複数の分野を含むが、ここでは特に教師つき機械学習についての説明を行う。教師つき機械学習は、入力データ X とそれに対応する出力データ y があるデータセットに対してモデルを構築する。このデータセット (X, y) を“教師”，すなわち正解として予測モデルに学習させることで、未知の入力データ X' に対しての出力 y' を予測する。ここで出力 y が離散値のときに分類問題、連続値のときに回帰問題と呼ばれる。分類問題の例として、画像になにが写っているか対応するラベルを学習させる画像認識のような多値分類や、機械の運転状況を示す時系列データから将来故障するか否かを予測するような二値分類が挙げられる。分類問題と回帰問題の違いは出力の形式の違いのみであるため、同一の手法を拡張したものが使われることが多い。

ⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム コンサルタント

3 CAE への活用可能性について

CAEにおけるシミュレーションは、現象の理解や設計・開発支援のために用いられる。熱流体、構造、伝熱、化学種輸送、電気化学、電磁解析など物理的な現象の物理的な現象を数値的に解く事により、解析対象の挙動を予測したり、実験では得られない全体の詳細な状態を計算したりすることができる。このシミュレーションを「獲得された入出力データに基づきモデルを構築し、未知の出力データを予測する」という問題として解釈すると、問題の構造は教師付き機械学習と同一のものであるといえる。二つの違いは、教師付き機械学習の場合、汎用的なモデルに対してデータからモデルパラメータを適合する、というデータ駆動型の帰納的な手法を用いているのに対し、シミュレーションでは現象に対してまずモデル化を行い、モデルに従って予測を行う、というモデル駆動型の演繹的な手法を用いる、という解決手法にある。これらは完全に切り離されるものではなく、例えばシミュレーションにおいても、モデリングが複雑な部分を機械学習による多項式モデルで置き換えることで高速化するアプローチを取る場合があるなど、互いに相関し発展してきた。

データサイエンスが再注目されている今、シミュレーションにおける機械学習モデルの活用の可能性を以下の観点から議論する。

1. 高速化のための活用
2. モデル化が困難な複雑な現象への活用
3. 逆問題・最適化への活用
4. 偏微分方程式の解法への活用
5. データ構造の理解への活用

3.1 高速化のための活用

シミュレーションの課題の一つは計算に要する時間であり、複雑な構造を詳細に解く場合や、複数の物理現象が絡むような問題を解く場合、あるいは長時間の時系列的な変化を追跡する場合では、演算の量が増えて出力に要する時間が増大する。対して、機械学習では入出力データに対してモデルを学習させることに時間がかかるものの、学習を終えてしまえば未知の入力に対する出力の予測を高速で行うことができる。そのため高速に予測を行いたい場合にシミュレーションの一部または全体を機械学習モデルで代替することが考えられる。特に、今後はリア

ルタイムに出力を要求される制御システムへの予測モデルの組み込みや、リアルタイムな可視化への活用、設計条件等の変更に対して高速な推測を行うことで設計を支援するシステムの構築など、高速なシミュレーションへの要求がますます高まると予想されるため、機械学習を用いた手法も重要となるものと考えられる。例えば、流体解析において畳み込みニューラルネットワークを用いてシミュレーションを近似する手法が報告されている¹⁾²⁾。

3.2 モデル化が困難な複雑な現象への活用

シミュレーションを行う場合には、まず対象のモデリングが必要となる。モデリングを行うことにより演繹的な解析が可能となり、本来観測が不可能な状態に関しても予測を行えるのだが、中にはモデリングが困難な現象も存在する。例えば、気象条件や製造時の環境に起因するばらつきなど外的な要因によるもの、乱流現象における境界層の振舞いや電池材料に代表される不均一な多孔体構造と内部挙動、化学反応など、よりミクロな現象に基づくものなどがある³⁾⁴⁾⁵⁾。こうした複雑なモデリングに際しては、経験的な式や実験データを活用し、多項式などの単純なモデルに落としこんで適合させる手法が以前から使用されているが、データの増大やモデルの詳細化に応じて、ニューラルネットワークや勾配ブースティング決定木などより高次で機械学習モデルでの適合の必要性が生じてくるだろう。

3.3 逆問題・最適化への活用

シミュレーションでは指定された設計に対しての性能を解析するという順方向の解析だけではなく、指定された性能を実現するための最適な設計を求める逆問題の解法が求められる。こうした逆問題に対しては、応答曲面法を用いた二次関数近似による最適化や遺伝的アルゴリズムのようなブラックボックス最適化に基づく探索により解を求める手法が、従来用いられてきた。

このような最適解の探索を高度化する手法として、機械学習モデルの適用が考えられる。これは1の高速化のように、入出力データそのものやその逆関数を機械学習モデルによって近似し、その近似モデルを用いて最適解を探索するものである。例えば、近似モデルを用いて探索の回数を増やすことで進化的アルゴリズムの最適探索を効率化する手法として Surrogate-assisted ES が提案されている⁶⁾。また近似

させた関数からクリギングに代表されるベイズ最適化の手法を用いて、最適解を探索する手法も提案されている。特に材料科学における材料設計の効率化への応用が報告されている⁷⁾。

3.4 偏微分方程式の解法への活用

3.1~3.3 の活用についてはすべて入出力データが存在している、もしくはシミュレーションにより作成された上での活用方法であった。一方で、偏微分方程式の解法そのものをニューラルネットワークで近似する方法も提案されており、これにより高速な出力が可能となる利点⁸⁾やメッシュフリーな数値計算が可能となる利点⁹⁾がある。現状では精度の面で完全に置き換わるものではないが、今後の展開に期待したい。

3.5 データ構造の理解への活用

シミュレーションは入力に対する出力結果を示すことができるが、例えば結果の要因を解釈するためには、解析に用いたモデルに関する知識と理解が必要になる。機械学習を活用することにより、入出力データから相関を解析したり、次元削減のような手法を用いてデータ構造そのものを理解したりすることで、さらなる簡易的なモデリングを行うための情報の抽出や、対象となる系の挙動を基底に分解することによる構造の理解、あるいは異常な結果の予測、といった一歩進んだ解析が可能となる。例えば流体解析においては固有直交分解 (POD) や動的モード分解 (DMD) などの手法が知られており、連成問題への適応などさらなる展開が期待される^{10),11)}。

4 最後に

以上で CAE における機械学習の展開の可能性を述べたが、現時点での応用例の報告は多くない。その理由として、シミュレーションモデルを機械学習モデルに置き換えると入力に対する出力がブラックボックス化し、なぜそのような結果になったか、という解釈性を失う点が懸念されてきたためと考えられる。3.5 節において議論したような結果の解釈を補助するような形の機械学習の活用も進んでおり、今後の展開が期待される状況にある。一方、シミュレーションに対する高速化の要求は高まり続けており、必ずしも解釈性が求められず、高速化や出力の再現が求められる部分においては、機械学習を用い

てシミュレーションを高速化する手法は十分に効果を発揮する。今後これまでのシミュレーションや実験でのデータを活用する形で、CAE におけるシミュレーションが発展していくのではないかと期待する。

引用文献

- 1) Kutz, J. Nathan. "Deep learning in fluid dynamics." *Journal of Fluid Mechanics* 814 (2017): 1-4.
- 2) Guo, Xiaoxiao, Wei Li, and Francesco Iorio. "Convolutional neural networks for steady flow approximation." *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. ACM, 2016.
- 3) Zhang, Jingliang, and Jay Lee. "A review on prognostics and health monitoring of Li-ion battery." *Journal of Power Sources* 196.15 (2011): 6007-6014.
- 4) Morawietz, Tobias, et al. "How van der Waals interactions determine the unique properties of water." *Proceedings of the National Academy of Sciences* (2016): 201602375.
- 5) Kiyohara, Shin, et al. "Prediction of interface structures and energies via virtual screening." *Science Advances* 2.11 (2016): e1600746.
- 6) Loshchilov, Ilya. *Surrogate-assisted evolutionary algorithms*. Diss. Université Paris Sud-Paris XI; Institut national de recherche en informatique et en automatique-INRIA, 2013.
- 7) Seko, Atsuto, et al. "Prediction of low-thermal-conductivity compounds with first-principles anharmonic lattice-dynamics calculations and Bayesian optimization." *Physical review letters* 115.20 (2015): 205901.
- 8) Tompson, Jonathan, et al. "Accelerating Eulerian Fluid Simulation With Convolutional Networks." *arXiv preprint arXiv:1607.03597* (2016).
- 9) Sirignano, Justin, and Konstantinos Spiliopoulos. "DGM: A deep learning algorithm for solving partial differential equations." *arXiv preprint arXiv:1708.07469* (2017).
- 10) Schmid, Peter J. "Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data." *Journal of fluid mechanics* 656 (2010): 5-28.
- 11) Rowley, Clarence W., et al. "Spectral analysis of nonlinear flows." *Journal of fluid mechanics* 641 (2009): 115-127.