2.1.18 計算工学

(1) 研究開発領域の定義

製品やシステムの開発・設計・製造の段階で利用するデータの収集・解析、モデル化、シミュレーション に係る技術や研究開発を対象にする。

流体を中心とした、計算工学、CAE (Computer Aided Engineering)、数値流体力学(CFD)、機械工学、インフォマティクス、データ駆動型科学、デジタルツイン、シミュレーション技術、データ同化、データベース、計測・観測、異分野融合の研究動向を対象とする。デジタルツインの産業への実用化を見据えた研究開発の動向を含む。材料開発のためのインフォマティクス(マテリアルズ・インフォマティクス)はここでは対象外とする。

(2) キーワード

設計情報学、最適化、多目的設計探査、データ解析、データ同化、デジタルツイン、マルチフィジックス解析、 次元縮約モデル、計算機科学、機械学習、ホーリズム型流体解析

(3) 研究開発領域の概要

「本領域の意義〕

コンピュータの発展により、シミュレーション技術を活用して製品の設計・製造の支援を行うCAE (Computer Aided Engineering) が実用化され、CAEに関する研究分野である計算工学の重要性が高まっている。 CAEにより、さまざまな使用条件、あるいは製品仕様の変更に対して、予め性能評価を行うことができる。またこれらは製品設計に対する仮想的なデータベースとなり、さまざまな情報を提供することになるため、情報の管理、処理、知識の抽出に関わるインフォマティクスが重要となる。更にこれらを設計に活かすための設計情報学¹⁾ という学問分野も誕生している。一方、シミュレーションが高精度化し、詳細な結果を目にするにつれて、現実との詰め切れない差が明らかとなりつつある。気象学や海洋学の分野では、このようなシミュレーション技術の限界を、観測データをもとに乗り越えるデータ同化という技術が発展してきた。データ同化は、工学問題にも適用可能であることが示されつつある。なおCAEでは、流体力学や構造力学の単一の問題ではなく、それらの連成問題もマルチフィジックス解析として扱われている。以上を踏まえ、本稿では、計算工学を、設計情報学・データ同化・マルチフィジックス解析の3つの側面から俯瞰する。

「研究開発の動向」

【設計情報学】

近年実設計に応用されつつある最適化だが、多目的最適化による獲得物は最適解群である。最適解群に対する後処理としてデータマイニングが適用され多目的設計探査の概念が生まれた。その後データマイニングは、不十分な最適化計算に対する補間やフィードバックの役割も果たせる可能性が見出され、最適化と相補関係にあることが明らかとなった 2)。さらに、近年の情報科学の発展により、後処理として入力データセットに潜む設計情報を抽出し、明文化する役割を担うデータマイニングに代わり、抽出のみならず予測される設計情報の創出までを行う役割としてデータ解析を盛り込んだシステムである設計情報学が提唱されている 3)。過去の経験や勘に依存していた設計方法論を、能動的な設計仮説の導出に基づいた方法論に変革することが可能になる。

【データ同化】

データ同化は、数値モデルの不確定要因(初期・境界条件、モデルパラメータ等)を観測値により統計的に修正する方法であり、数値気象予測の精度向上を実現する手段として用いられてきた。しかしこのようなアプローチは工学分野においても有用であると考えられている。気象分野のデータ同化では数値気象予測のための初期条件推定が主な目的であるのに対して、工学分野のデータ同化ではモデルや計測の改善・最適化を積極的に行うことができると考えられている。例えば、CAEで用いられる多種多様な物理モデルや経験的モデルを計測データに基づく推定によって改善したり、実験計測データや運用データをCAEに同化する際に計測の有効性の事前検討や動的な計測方法の最適化をデータ同化の枠組みを用いて行ったりといった可能性がある。

計算機能力の向上によりCAEの高精度化が進み、実験計測との比較・検証を行う場面においては数値 モデル、計算条件および計測データの不確実性を適切に扱う必要性が高まっている。一方で、Internet of Things (IoT) にみられるようにセンサーの小型化・汎用品化が急速に進んでおり、高速通信の普及も相まっ て各種計測データの計算サーバーへの集約が更に容易になっていくと考えられている。まさにデータ同化のようなアプローチを活用する機運が高まっていると言える。

また、計測データとCAEモデルを融合するデータ同化はフィジカル空間とサイバー空間を繋ぐ枠組みとなることが期待され、デジタルツインを構築するための方法の一つと捉えることができる。機械学習・深層学習の応用分野の広がりによってベイズ推定の有用性が改めて認識されている。そのような中で、数値シミュレーションと計測データを使ってベイズ推定で実現するデータ同化は、数値シミュレーションや実験計測に取り組む研究者・技術者にとって問題解決のための新たなアプローチとなりうると期待される。

技術動向を探るためにJournal of Computational Physics(JCP)において出版された論文をMachine learning、Deep learning、Data assimilationというキーワードで検索してみると、機械学習・深層学習ともに近年の論文数の増加がみられた。2019年に出版されたデータ同化関連の論文で取り上げられている内容をいくつか挙げると次のようになる。逐次型データ同化や変分型データ同化においては、計算コストの増加に対処する工夫が見られた。多項式カオス法を使ってアンサンブルカルマンフィルタの確率分布を表現することによるアンサンブル計算のコスト削減⁴⁾ や、打ち切り特異値分解を使った変数削減による変分法のコスト削減⁵⁾ が行われていた。尤度評価を多数回繰り返す必要があるマルコフ連鎖モンテカルロ法では、変数のブロック分解⁶⁾ や次元縮約モデルによるコスト削減が提案されていた⁷⁾。また、アンサンブルカルマンフィルタのアンサンブルメンバー数を Kriging 応答曲面法により仮想的に増やすことで計算コストを抑える方法も提案されていた⁸⁾。検索結果には深層学習が関連する論文も多く、深層学習を用いたデータ駆動型の支配方程式推定が検討されていた⁹⁾、また深層学習によって決定されたモデル式に含まれるパラメータをデータ同化によって推定するといった複合的なアプローチも提案されていた¹⁰⁾。

全体として、計算負荷が高くなりがちなベイズ推定における計算コスト削減に、既存の応答曲面法や次元 削減モデル、さらに近年の深層学習手法を利用しつつ、取り組むというのが共通の研究要素となっている。ま た、深層学習による「数値シミュレーションの物理モデル離れ(物理モデル式を緩く利用したデータ駆動型 の解析技術)」の動きもあり、様々なアプローチが提案されている。

国内においてもデータ同化の適用範囲が大きな広がりを見せている。例を挙げると、熱回路網における接触熱伝達の推定 $^{11)}$ 、超音波非破壊検査 $^{12)}$ 、フェーズフィールド法に基づく材料物性予測 $^{13)}$ 、鋳造における伝熱パラメータ推定 $^{14)}$ 、そして、人の流れの予測 $^{15)}$ などが行われている。

【マルチフィジックス解析】

マルチフィジックス解析は、異なる支配方程式で記述される2つ以上の物理系が相互に影響し合う現象の解析(連成解析)を指す。近年、既存の計算科学の各分野(流体・構造・燃焼(化学反応)・電磁気・伝熱等)ではCAE技術と計算機能力の向上により、高忠実解析(high-fidelity simulation)を実設計に取り入れることが現実味を帯びつつある。実験を含む実現象は本来マルチフィジックス現象であり、CAEモデル(物理モデル・数値解析手法)そのものをマルチフィジックス解析へと拡張していくことは、データ同化やCAEを援用した最適化に基づく設計手法の信頼性を大幅に向上させる可能性がある。

一方で、CAEモデル(物理モデル・数値解析手法)そのものの精度・計算速度の向上も、より高い精度でサイバー空間上の設計が可能となるデジタルツインを構築するために必須である。流体を中心としたマルチフィジックス解析(流体-構造連成、流体-音響連成、燃焼(流体-化学反応連成)解析等)では、近年多くの商用ソフトが流通し、実設計におけるCAEツールとして汎用的な手段となりつつあると言える。それに伴い、実験計測との整合性及び計算の効率化が高いレベルで要求されるようになり、マルチフィジックス解析そのものの精度向上に向けた高忠実解析手法の連成や、次元縮約モデルを用いた高効率解法は今後の課題として残されている。特に従来の個別の要素モデル(流体解析・構造解析等)に留まらず、実現象をより正確に表すマルチフィジックス解析を、データ駆動型の解析や最適設計などの工学設計手法に対して積極的に活用していくことが重要と考えられる。

流体を中心としたマルチフィジックス解析の代表例である流体-構造連成解析においては、物体適合型の非構造格子を用いた高次精度手法(Discontinuous Galerkin法等)の適用が進み^{16)、17)}、複雑形状周りの非定常高忠実解析に向けた大規模解析例が報告され始めている。一方で、埋め込み境界法に代表される物体非適合型の格子法に基づく流体構造連成解析も近年特に増加傾向にある^{18)、19)}。このような高忠実解析(非定常乱流-構造連成解析)の観点では、複雑形状の取り扱いの容易さと解析精度の高さの双方の観点から未だ多様なアプローチが比較・検討されている状態にある。より汎用性を高めた手法としてメッシュフリー解法も高精度化が進んでおり、代表的な解法である粒子法(Smoothed Particle Method: SPH、Moving Particle Semi-Implicit Method: MPS)に基づいて流体だけでなく構造解析まで一貫して行う事例も多く報告されている。特に、構造解析において不連続を基礎方程式レベルで表現するペリダイナミクス(PD)と粒子法の組み合わせは、これまでの格子法では不得意とされてきたき裂の分岐や物体の破砕なども表現できる可能性があるとして注目されている²⁰⁾。また、近年増加傾向にあるマルチフィジックス問題の対象として3Dプリンターを用いた積層造形に関する研究が挙げられる。樹脂の溶融・流動・射出・固化までを一貫して扱うだけでなく、複合材造形のため繊維入りの樹脂挙動解析を粒子法に基づき行う例が報告されている^{21)、22)}。このように、マルチフィジックス解析そのものが対象とする研究は多岐に渡るが、いずれも個々の数値解析技術の成熟に伴い、より高忠実な(実験計測条件に適合した)連成解析が可能になりつつあると言える。

一方、計算コスト削減の観点から、次元削減モデルを活用した低コスト解析手法が特に流体構造連成の分野で増加している。固有直交分解(Proper Orthogonal Decomposition: POD)とGalerkin Projectionを用いた古典的アプローチでは、埋め込み境界法の考え方を拡張し物体非適合格子において複数の円柱周りの流体構造連成解析を行う事例 23)や、PODモードとDEIM(Discrete Emprical Interpolation Method)に基づき非線形項の評価点を削減することで更なる計算コストの削減を図る試みも報告されている 24)。また、Galerkin Projectionを行わず支配方程式を限定しない形で流体構造連成解析のPOD-次元削減モデルを構築する例も出てきている 25)。しかしながら、マルチフィジックス解析としての次元削減モデルの活用は、流体構造連成解析を除いて未だ限定的であるように見受けられ、今後の拡張や研究

の進展が期待される分野と考えられる。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

JAXA S³TD 最適設計結果へのニーポイント検出法の適用²⁶⁾

多目的最適化では通常目的関数は互いにトレードオフの関係にある可能性があり、結果唯一解ではなく最適化群が得られる。意思決定者である設計者は、そのトレードオフを初期設計情報として分析し、設計者にとって好ましい解候補(選好解)群を非劣解群から抽出することがデータ解析の初期段階として行える。

進化計算では多数目的問題に対するアルゴリズム開発が近年のトピックの一つだが、一般に、多数目的問題の非劣解面は高次元曲面になるため散布図による力業的可視化は不毛であり、広範な高次元非劣解面の網羅的調査は現実的ではなく、特に重要であろう箇所に焦点を絞るべきと考えられている。この絞り込みの際に重要な概念がニーポイントで、局所的に最もトレードオフ比のバランスの良い"中庸な解"に相当するため、実用的であることが多い。そのため Reeb グラフ²⁷⁾ に基づくニーポイント検出法を用が JAXA 静粛超音速研究機 (S^3TD) の第1次最適設計結果 (S^3TD) の第1次最適設計結果 (S^3TD) に適用されている。

本問題は5目的、58設計変数、および形状制約で定義され、4ヶ月程かけて集団サイズ16個体に対して12世代を重ね、実機に採用可能な58個体が非劣解として得られ、様々な設計情報を用いた設計者達の多数回の議論プロセスを経て最終選好解1個体が決定されている。本数値実験では、非劣解群58個体にReebグラフを適用し、最終選好解の検出可否を調査した。本数値実験の結果、設計者達の議論により決定された最終選好解ID56を含む選好解群が検出された。非劣解面のニーポイントを効用関数の極小点として定義し、それらの位置関係をReebグラフに基づき把握することで、最適解候補を適切に検出している。

• サロゲートモデルを用いた高並列計算に適したマルチフィジックス連成解析手法²⁹⁾

大規模な流体構造連成解析では、流体解析と構造解析を分離して実行し、平衡状態に収束するまで反復演算を行うことが一般的である(分離反復解法)。このような連成解析の計算効率を向上させるためには、反復演算に用いる手法の収束性を高めることが有用であり、分離反復解法における収束性向上に関する研究は多数報告されてきた。しかし当然ながら、収束に至るまで繰り返す反復計算は逐次的に行わなければならず、領域分割を主とした計算の並列化も含め、計算効率・速度の抜本的な改善は未だ大きな課題である。これに対し近年、White²⁹⁾ らは連成解析の平衡状態を探索するサロゲートモデルを用いた手法を提案している。まず、流体解析と構造解析のそれぞれをいくつかの条件(境界変形、境界荷重)に対して独立に実行し、流体解析から得た境界変形に関するサロゲートモデルと、構造解析から得た境界変形に関するサロゲートモデルの交点を探索することで、流体構造連成の平衡解を得る。解の精度としては通常の収束反復に基づく手法に劣るものの、当該文献では小規模な問題(NACA0012 翼型の片持ち梁に対する流体構造連成解析)ながら半分以下の計算時間を実現している。このように本手法では流体解析と構造解析を完全に独立に実行するため高並列処理が容易であり、これまで逐次的な反復実行によって得られていた平衡解を全く違うアプローチながら高速に求められる可能性がある。未だ検証の余地は多く残されるものの、並列化効率と収束反復性能の向上が課題とされてきたマルチフィジックス連成解析において、高並列計算機の利用に適した手法として新たな展開が期待されると考えられている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

• 3次元OAT15A 翼周りの非定常 CFD 解析結果へのパーシステントホモロジーの適用30)

航空機の安全性の2つの脅威は目下予測不能な非定常物理現象とヒューマンエラーである。本プロジェクトは前者、つまり、現在に至るも物理メカニズムが未解明なため予測不能とされている非定常物理現象に興味を持ち、その中でも遷音速バフェット現象³¹⁾の物理メカニズム解明を目指している。

データマイニングの1手法であるクラスタ分析は、高次元データセットをグループ化する方法である。数学的視点では、この操作はデータが内包する位相情報の抽出と解釈できる。高次元データの位相は高次元データ自体から理解できる自明な定量値しか得られないため、高次元データに何らかの変換操作を施すことで、自明でない位相的定量値を定義できる。このような観点で概念が導入され、その後様々に発展してきた位相幾何学的手法の一つがパーシステントホモロジー³²⁾であり、TDAと呼ばれるデータ解析分野の一翼を担い、材料科学を始めとした諸科学への応用が始まっている³³⁾。

本プロジェクトでは、CFD解析による流体物理量の時系列非定常データ³⁴⁾から、パーシステントホモロジーを用いて、現象の有無によるデータ構造のパターンや時間的空間的差異を定量化する。入力データには、超臨界遷音速翼型OAT15A周りに対するZDES(Zonal Detached-Eddy Simulation)³⁵⁾解析結果を用いた。 3次元形状に対し非定常計算を実施し、奥行き方向に平均化処理することで解析結果を2次元面に圧縮する。 次に、時系列物理量データセットを計算空間内に配置した各モニタ点上で取得し、それをパーシステントホモロジーのための入力データとする。本研究では幾何モデルとしてVietris-Rips複体³⁶⁾が用いられている。

解析の結果、各条件下の物理現象の差異がPDで定量表現されている。過去の研究では、迎角3.5 deg以上での遷音速バフェット現象の発生が確認されているが、PDでは迎角3.0 degから微小な自励振動を検知しており、遷音速バフェットの有無をデータ構造の差異として定量表現できている。

• デジタルツイン

生産ラインの設計から個体差に対応した制御・管理においてデジタルツインの概念は計算工学の発展を牽引する大きな需要である。リアル空間における事象をサイバー空間で完全再現し、なおかつリアルとサイバーの双方を大容量高速通信で連結することで、過去の事故解析、現在のリアルタイム制御、ならびに将来の発生事象の予測を可能とする。サイバー空間では時間軸の伸縮や逆転が許されることが最大の利点であり、デジタルツインは機械工学のR&Dにおける新しいプラットフォームとなることが期待されている。流体力学では強非線形事象が多いためCFDシミュレーションでは解を何通りにも出力するが、デジタルツインは現実事象の進展とデータ同化した予測性能をもつため、従来の確率論から脱却し、将来事象を高い確度で予測・制御可能となる。この概念が実装されると、長年の問題であった個体差と偶発性に対応できる技術開発や、災害対応を含む環境問題の高精度の制御が可能となる。

• 5G/6G 時代の大容量高速通信が可能とする流体工学

流体工学におけるR&Dは、実験設備、計測器材、演算装置を現場に揃えてから開始するものであった。しかし大容量高速通信網の普及により、この3つの組み合わせを現場に設置することが不要になりつつある。CFD分野では操作端末の場所は世界中のどこでも自由であるが、実験計測分野でもその展開が進む。例えばPIVでは画像取得から画像演算に至る一連のシステムはリアルタイム大容量動画転送が実現すれば、解析装置の場所を問わない。超音波やレーザーなどもリモート制御可能で、データは世界中からモニタリングし、研究者間で共有できる。デジタルツイン構想を牽引するデータ同化は、計算と計測を大容量かつリアルタイム

でデータ結合するものであり、5G/6G時代における新しい流体工学の扉を開けるものである。10,000のダイナミックレンジのデータを異なる研究機関で共有し、計算と計測の間で融合すれば、20世紀末までに一旦、諦める領域に入っていた強非線形の流体予測・制御が可能となる。加えて深層学習などのAIのアルゴリズムを取り込むことで、大規模・大空間の流動現象の予測と制御に革命が起こる。大容量通信技術による学問のイノベーションとも言われる。

(5) 科学技術的課題

計測と計算のより柔軟な融合

データ同化の応用事例は今後も増えていくことが予想されるが、近年活用が爆発的に進んでいる深層学習との関係を見過ごすわけにはいかない。深層学習ではニューラルネットを幾重にも重ねることでデータの再現精度の高さと手法の汎用性を実現している。一方、データ同化では物理法則に基づくモデルを用いるため、計測データと理論に基づく推定を行うことができるものの、あらゆる計測データに対応できるような汎用性は持ち合わせていない。学習データ量という観点では、深層学習がニューラルネットの学習に大量のデータを必要とするのに対して、データ同化においては物理モデルを利用することで比較的少ないデータでモデルパラメータを推定し、予測を行うことができる。したがって、深層学習のような柔軟性を持ちつつ、物理モデルに基づくデータ同化の信頼性を兼ね備えた手法の実現により、計測データとCAEを融合した状態推定手法を更に発展させられるであろうと予想されている。

もう一つの観点は、データ同化によりフィジカル空間とサイバー空間が融合したサイバーフィジカルシステムが構築されたあとのアクションである。計測データとCAEに基づくデータ同化により状態推定を行い、リッチな情報に基づく制御を行うことができれば、より高度な機能の実現に繋がると期待されている。

• 計算機科学と計算工学諸分野の更なる協調

近年の計算機能力の進歩は著しく、GPU(Graphic Processing Unit)に代表されるアクセラレータの台頭もあり、計算機そのものの複雑性・多様性が急速に高まっている。例えば近年利用が拡充している機械学習はGPUを用いた高効率実行が比較的容易である一方、既存の計算工学諸分野での研究開発に用いられるソフトウェア(流体解析ソルバー等)はアクセラレータの利用を想定していない場合が未だ多いと考えられるため、今後更に需要が増加するであろう高忠実解析の実行において効率的な研究開発が困難となるケースが生じることが危惧される。既に、計算機の特性を理解したソフトウェアの実装工程(コード開発)と研究開発内容そのものに乖離が存在しており、その差は今後ますます拡大していくと考えられる。このような差を埋める優れたプログラミング手法の研究開発(OpenCLといったAPIを含む)や、計算手法の研究においても単純な演算速度だけでなく計算機の特性を意識したアルゴリズムの開発を行うなど、計算機科学と既存の計算工学分野の協調を加速させていくことが重要と考えられている。

(6) その他の課題

• 時空間 4 次元事象のデータ同化と次元縮約モデル

現実の流動現象より早く結果を出せるような乱流の直接数値シミュレーション(DNS)は存在しない。 DNSは境界条件が厳密に規定された流れの非線形構造の理解や、実測困難な基礎変数分布の取得のための 数値実験として価値を高めてきた。リアル空間の時間軸上における流れの予測を目的としたDNSは30年後 でも達成困難との見方もある。一方、データ同化はこの問題を埋めるための方法論である。近年では実験流 体力学で発展する各種センサー開発と大容量高速通信技術の普及が、流れの計測・予測・制御の三体データ同化技術を創出可能とする段階にある。ただし、流れは常に三次元空間における自由自在な速度勾配テンソルを発生する物質運動であり、時空間 4 次元の6 変数解析(3 速度成分、圧力、密度、および粘度)でのデータ同化の実現は当面、不可能と考えられている。そのため、データ同化専用の次元縮約モデルの開発に関心が集まっている。3 次元非定常流れの予測に実測値を融合することで、2 次元または1 次元以下の計算空間で高精度の予測を補償するというものである。既に医療機器開発や災害シミュレーションでは導入が進むが、学術論文としては2010 年以降、流体力学研究の新しいアプローチとして PIV などの大容量実測データと CFD 予測を融合したハイブリッド解析や、その結果から組成・物性分布を割り出す方法など、自由な流体運動に対応した高度なデータ同化の方法が発表されるようになった。流体工学の研究者・技術者は過去30年間、実験系と計算系に二分されてきたが、データ同化は双方に精通した専門家が開発する対象であり、新たな学術大系の敷設が開始されようとしている。

• 流体工学における機械学習とホーリズム型流体解析

人工知能のアルゴリズムを流体工学・流体機器のシステム予測に活用する事例が急増している。その中核は機械学習であり、中でも多因子多出力に対応する深層学習の導入試験が佳境を迎えている。特にDNSやPIVなどの大規模数値データに対して、人による解釈に限界が来ており、深層学習に解釈と判断を任せるというトレンドになっている。すなわち膨大な数値データの中に潜む因果関係を、高度な統計演算技術で自動的に明らかにし、それを発見して論文発表し、あるいは産業上の設計基準とする流れである。過去50年間の流体工学は全体の因果関係を理解するために、人が構成要素に分解し、それを組み合わせて再構築することでシステム全体を設計するという、いわば要素還元主義を貫いてきた。第一原理まで回帰して紐解くことが学術・技術の両面での流体工学の専門家の仕事と認識されてきた。しかし非線形的に支配される流動現象は、要素の線形結合では全体システム性能が再現されない場合が多い。深層学習はこの課題を解決する手段となろうとしている。情報学で基盤となる全体構造主義(ホーリズム)型のアプローチであり、物理法則の予備知識さえ一切不要となるという特徴がある。ナビエ・ストークス方程式など各種保存方程式を介さないため、複雑流体や混相流ひいては物性不明の物質の流れでさえも、実測値さえ教師データとして整備すれば、問題解決を実現するという手段である。前述のデータ同化とは対照を成す手段であり、流体工学と情報科学の学際融合領域を形成している。

米国ではJohn's Hopkins Universityが中核となり全米の流体工学研究機関と連携し、AIによるDNSデータの解読事業が進められている。また、2019年にSan Fransciscoで開催されたASME-JSME-KSME流体工学合同会議では、流体工学のAI導入に関するセッションは3日間にわたり立ち見となる盛況ぶりであった。

• ダイナミックレンジ1万を超えたクロススケール問題解決

CFDシミュレーションやPIV計測、超音波イメージングなどの計測器材は、現状では空間データ出力レートは1方向あたり1,000のオーダーである。これは流れ場の波数スペクトルを3桁にわたり解像するもので、キロ(k)、メガ(M)、ギガ(G)、テラ(T)、という理工学単位系でのダイナミックレンジの区切りにも対応している。この区切りは扱う空間スケールで流体工学者を分業化するという結果をもたらしており、スケールを跨ぐ現象の橋渡し解析、とくにミクロからマクロへの接続・再構築に向けての障壁をもたらしている。例えば、風車の乱流場、界面分布を伴う混相流、燃焼などの反応流、分子動力学から連続体への接続問題などでは3桁では不足である。実測や計算の単一器材としてのダイナミックレンジを10,000にすると、従来ス

ケールでの仕切りを取り払い、4桁ごとの新たな区切りが設定され、クロススケール問題の解決へと繋がる。いうなれば漢字文化圏がもつ命数法(万・億・兆・京~)に対応すべく、広帯域のスペクトル特性を一括して予測・制御するブロードバンド型の流体工学を創設する試みである。既に画像機器では8Kカメラなどが万に迫っているが、人の視覚への訴え以上に、PIVを初めとする流体の定量計測に活かされ、そこでしか見いだせない乱流カスケード現象や、マルチスケール干渉をもつ現象の発見が始まろうとしている。

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	0	7	設計情報学:様々なデータセットに対する試行錯誤が続く 26 。カオス的な要素を持つ時系列データに対応できない深層学習に替わり、近年では進化的機械学習 37)や位相データ解析 38)といった新たな方法による試行を実施している 21,30 。データ同化:データ同化の応用は近年多くの工学分野で行われており、流動計測最適化 39)、構造パラメータ推定 40)、超音波非破壊検査 12)、フェーズフィールド法に基づく材料物性予測 13)、鋳造における伝熱パラメータ推定 14)、そして、人の流れの予測 15)などが発表されている。機械学習研究においても流体などのダイナミカルシステムを扱う場合にはデータ同化と重複する部分が多く、高解像度化 41)、次元縮約モデルの導出 42)、実験計測データとスパースモデリングを組み合わせた計測の最適化 43 などが行われている。
	応用研究・開発	0	7	設計情報学:応用研究・開発には至っていない。 データ同化:国内企業の動向としては、株式会社日立製作所においてデータ同化を用いた熱回路網における接触熱伝達の推定 ¹¹⁾ 、株式会社構造計画研究所においてデジタル画像相関法によって得られたデータによる構造解析の高精度化 ⁴⁴⁾ が行われている。また、機械学習に関連して日産自動車株式会社において形状データから空力係数を高速に予測するモデルの構築 ⁴⁵⁾ が行われている。
米国	基礎研究	•	7	設計情報学:Michigan State UniversityのProfessor Kalyanmoy Debが、"innovization"という概念を提案している ^{46)、47)} 。多目的最適化問題の最適解群間の有用な関係を自動的に解読し、設計者や実務者の理解を深めることを目的にした概念である。設計情報学が目的とする、能動的なアイデアの創出にまでは至っていないが、多目的最適化がそれ自体では完結せず、後処理による最適化結果の有効活用が可能になることに言及している点で、類似した考えである。データ同化:流体などのダイナミカルシステムを扱う機械学習はデータ同化を目的に含んでいるが、呼称としては機械学習・深層学習が米国においては優勢である。特に流体分野では機械学習・深層学習の限界から流体の支配方程式を利用したPhysics informed なアプローチが多く見られるが、データ同化のような手法の必要性(もしくはデータ同化のような手法への帰着)を暗に示唆しているかもしれない。ブラウン大のG. E. KarniadakisらのグループではPhysics-informed neural networks (PINN)により物理モデルを用いたネットワーク学習を行っている(例えば文献 ⁹⁾)。乱流モデルの計測データに基づく改善としては、ベイズパラメータ較正 ⁴⁸⁾ やレイノルズ応カテンソルの DNSに基づく推定 ^{49)、50)} が行われている。ワシントン大のJ. N. Kutzらのグループでは機械学習やスパースモデリングを用いた次元縮約モデルの研究が行われている(例えば文献 ⁵¹⁾)。プリンストン大のC. Rowleyらのグループでは、流体システムの解析やそれに基づく次元縮約モデルの研究が行われている(例えば文献 ⁵²⁾)。フロリダ州立大のI. M. Navonらのグループでは、次元縮約モデルや機械学習を利用したデータ同化研究が行われてきている(例えば文献 ⁵³⁾)。

				このほかにもNvidiaのSPNetsは深層学習ネットワークに流体シミュレーションモデルを統合して流体モデルに含まれるパラメータの推定を行っているが ⁵⁴ 、コンピューターグラフィックスにおける流体表現が高度化するにつれて、工学分野の流体解析との境界線があいまいとなってきており、それが機械学習によってさらに加速しているようである。
	応用研究・開発	0	7	設計情報学:応用研究・開発には至っていない。 データ同化:Ansys 社はAnsys Twin builderにより、CAE、次元縮約 モデル、そして、計測データを繋いだデジタルツインを構築するための枠 組みを提供している ⁵⁵⁾ 。
欧州	基礎研究	0	7	データ同化: 【ドイツ】 敵対的生成ネットワーク(GAN)によって流動現象を表現するDeep fluidがミュンヘン工科大学の研究者を含むグループで開発されている ⁵⁶⁾ 。 【英国】 Readingにあるヨーロッパ中期予報センター(ECWMF)は気象分野のデータ同化のメッカであるが、例えば、インペリアルカレッジの C. Pain らのグループでは工学分野のデータ同化応用も行われている ⁵⁾ 。 【フランス】 INRIAのD. Heitzらのグループでデータ同化の流体工学分野への応用が行われている(例えば文献 ⁵⁷⁾)。 【オランダ】 デルフト大でOpenDAというサイトを立ち上げ、データ同化コードを提供している ⁵⁸⁾ 。
	応用研究・開発	0	7	データ同化: 【フランス】CADLM社のソフトウェアODYSSEEにより、AIとシミュレーション/実験データを利用したリアルタイムソリューションを提供している ⁵⁹⁾ 。
中国	基礎研究			_
	応用研究・開発	ı		
韓国	基礎研究	_	_	_
	応用研究・開発		_	

(註1) フェーズ

基礎研究:大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発:技術開発(プロトタイプの開発含む)の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価

◎:特に顕著な活動・成果が見えている ○:顕著な活動・成果が見えている

△:顕著な活動・成果が見えていない ×:特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3)トレンド ※ここ1~2年の研究開発水準の変化

ノ:上昇傾向、→:現状維持、↘:下降傾向

関連する他の研究開発領域

- ・破壊力学(環境・エネ分野 2.1.17)
- ・気候変動観測(環境・エネ分野 2.2.1)
- ・気候変動予測(環境・エネ分野 2.2.2)
- ・水循環 (水資源・水防災)(環境・エネ分野 2.2.3)
- ・機械学習(システム・情報分野 2.1.1)
- ・データに基づく問題解決(システム・情報分野 2.1.6)
- ・サービスサイエンス (システム・情報分野 2.3.2)
- ・マテリアルズ・インフォマティクス (ナノテク・材料分野 2.5.3)

参考・引用文献

- 1) K. Chiba, Y. Makino and T. Takatoya, "Design-informatics approach for intimate configuration of silent supersonic tech- nology demonstrator", *Journal of Aircraft* 49, no. 5 (2012): 1200–1211, doi: 10.2514/1.C031116
- 2) K. Chiba et al., "Multidisciplinary design optimization and data mining for transonic regional-jet wing", *Journal of Aircraft* 44, no. 4 (2007): 1100–111, doi: 10.2514/1.17549
- 3) K. Chiba and M. Nakata, "From extraction to generation of design information paradigm shift in data mining via evolu- tionary learning classifier system", *Procedia Computer Science* 108 (2017): 1662–1671, doi: 10.1016/j.procs.2017.05.223
- 4) Y. Wang et al., "Optimal observations-based retrieval of topography in 2D shallow water equations using PC-EnKF", *Journal of Computational Physics* 382 (2019): 43-60, doi: 10.1016/j.jcp.2019.01.004
- 5) R. Arcucci et al, "Optimal reduced space for variational data assimilation", *Journal of Computational Physics* 379 (2019): 51-69, doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.042
- 6) N. Chen and A. J. Majda, "A new efficient parameter estimation algorithm for high-dimensional complex nonlinear turbulent dynamical systems with partial observations", *Journal of Computational Physics* 397 (2019): 108836, doi: 10.1016/j.jcp.2019.07.035
- 7) B. Kramer et al., "Multifidelity probability estimation via fusion of estimators", *Journal of Computational Physics* 392 (2019): 385-402, doi: 10.1016/j.jcp.2019.04.071
- 8) V. Mons, Q. Wang and T. A. Zaki, "Kriging-enhanced ensemble variational data assimilation for scalar-source identification in turbulent environments", *Journal of Computational Physics* 398 (2019): 108856, doi: 10.1016/j.jcp.2019.07.054
- 9) M. Raissi, P. Perdikaris and G. E. Karniadakis, "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations", *Journal of Computational Physics* 378 (2019): 686-707, doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.045
- 10) H. Chang and D. Zhang, "Identification of physical processes via combined data-driven and data-assimilation methods", *Journal of Computational Physics* 393 (2019): 337-350, doi:

- 10.1016/j.jcp.2019.05.008
- 11) 佐藤航, 磯島宣之, 「熱回路モデルとデータ同化を利用したペルチェ素子の温度特性係数推定手法」 『日本機械学会論文集』 82 巻 844 号 (2016): 1-14, doi: 10.1299/transjsme.16-00207
- 12) 中畑和之,「超音波非破壊検査へのデータ同化の導入 大規模シミュレーションと多点計測をつなぐ 』『非破壊検査』68巻2号(2019): 44-49, http://www.jsndi.jp/bulletin/J_01_Feb19.html#A01(2020年12月26日アクセス)
- 13) S. Ito et al., "Data Assimilation for Massive Autonomous Systems based on Secondorder Adjoint Method", Physical Review E 94, no. 4 (2016): 043307-1-10, doi: 10.1103/ PhysRevE.94.043307
- 14) 岡ゆきみ,大野宗一,松浦清隆,「データ同化に基づく鋳造プロセスにおける伝熱解析のパラメータ推定』 と鋼』103巻12号(2017): 755-762, doi: 10.2355/tetsutohagane.TETSU-2017-031
- 15) F. Togashi et al., "Using Ensemble Kalman Filter to Determine Parameters for Computational Crowd Dynamics Simulations", *Engineering Computations* 35, no. 7 (2018): 2612-2628, doi: 10.1108/EC-03-2018-0115
- 16) A. Corrigan, A. D. Kercher and D. A. Kessler, "A moving discontinuous Galerkin finite element method for flows with interfaces", *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 89, no. 9 (2018): 362-406, doi: 10.1002/fld.4697
- 17) A. L. Spina et al., "A weakly compressible hybridizable discontinuous Galerkin formulation for fluid–structure interaction problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 372 (2020): 113392, doi: 10.1016/j.cma.2020.113392
- 18) S. Tschisgale and J. Fröhlich, "An immersed boundary method for the fluid-structure interaction of slender flexible structures in viscous fluid", *Journal of Computational Physics* 423 (2020): 109801, doi: 10.1016/j.jcp.2020.109801
- 19) J. Ma et al., "An immersed boundary-lattice Boltzmann method for fluid-structure interaction problems involving viscoelastic fluids and complex geometries", *Journal of Computational Physics* 415 (2020): 109487, doi: 10.1016/j.jcp.2020.109487
- 20) Wei-Kang Sun, Lu-Wen Zhang and K.M. Liew, "A smoothed particle hydrodynamics–peridynamics coupling strategy for modeling fluid–structure interaction problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 371 (2020): 113298, doi: 10.1016/j.cma.2020.113298
- 21) Zhenyu Ouyang et al., "A smoothed particle hydrodynamics simulation of fiber-filled composites in a non-isothermal three-dimensional printing process", *Physics of Fluids* 31, no. 12 (2019): 123102, doi: 10.1063/1.5130711
- 22) Yoshiaki Abe and Tomonaga Okabe, "Interaction Between Fibers and Viscous Flow Evaluated by Simplified Bead-Chain Model and Generalized SPH", *72nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics* 64, no. 13 (2019): A28.00001, http://meetings.aps.org/Meeting/DFD19/Session/A28.1 (2020年12月26日アクセス)
- 23) Elisabeth Longatte et al., "Parametric study of flow-induced vibrations in cylinder arrays under single-phase fluid cross flows using POD-ROM", *Journal of Fluids and Structures* 78

- (2018): 314–330, doi: 10.1016/j.jfluidstructs.2017.12.011
- 24) Denis Sipp, Miguel Fosas de Pando and Peter J. Schmid, "Nonlinear model reduction: A comparison between POD-Galerkin and POD-DEIM methods", *Computers and Fluids* 208, no. 104628 (2020): 1-30, doi: 10.1016/j.compfluid.2020.104628
- 25) Vilas Shinde et al, "Galerkin-free model reduction for fluid-structure interaction using proper orthogonal decomposition", *Journal of Computational Physics* 396 (2019): 579-595, doi: 10.1016/j.jcp.2019.06.073
- 26) N. Hamada and K. Chiba, "Knee point analysis of many- objective Pareto fronts based on Reeb graph", 2017 IEEE Congress on Evolutionary Computation (2017): 1603–1612, doi: 10.1109/CEC.2017.7969494
- 27) G. Reeb, "On the singular points of a completely integrable Pfaff form or of a numerical function", *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences* 222 (1946): 847–849, https://ci.nii. ac.jp/naid/10024635920/
- 28) K. Chiba, Y. Makino and T. Takatoya, "Evolutionary-based multidisciplinary design exploration for silent supersonic tech-nology demonstrator wing", *Journal of Aircraft* 45, no. 5 (2008): 1481–1494, doi: 10.2514/1.33272
- 29) Trent D. White et al., "Uncoupled Method for Massively Parallelizable 3D Fluid-Structure Interaction Analysis and Design", *AIAA AVIATION 2020 Forum* (2020): 3126, doi: 10.2514/6.2020-3126
- 30) K. Chiba et al., "Quantitative Prescription of Transonic-airfoil-buffet Occurrence by Persistent Homology", *Aerospace Europe Conference* (2020), https://www.researchgate.net/publication/337631991
- 31) B. H. K. Lee, "Self-sustained shock oscillations on airfoils at transonic speeds", *Progress in Aerospace Sciences* 37, no. 2 (2001): 147–196, doi: 10.1016/S0376-0421 (01) 00003-3
- 32) H. Edelsbrunner, D. Letscher and A. Zomorodian, "Topological persistence and simplification", *Discrete Computational Geometry* 28 (2002): 511–533, doi: 10.1007/s00454-002-2885-2
- 33) Y. Hiraoka et al, "Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology", *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 113, no. 26 (2016): 7035–7040, doi: 10.1073/pnas.1520877113
- 34) T. Ishida et al., "Transonic buffet simulation over supercritical airfoil by unsteady-FaSTAR code", *AIAA* (2016): 1310, doi: 10.2514/6.2016-1310
- 35) S. Deck, "Numerical simulation of transonic buffet over a su- percritical airfoil", *AIAA Journal* 43, no. 7 (2005): 1556–1566, doi: 10.2514/1.9885
- 36) M. Gromov, Hyperbolic Groups. Essays in Group Theory (New York: Springer-Verlag, 1987), 75-263, doi: 10.1007/978-1-4613-9586-7_3
- 37) H. Al-Sahaf et al., "A survey on evolutionary machine learning", *Journal of the Royal Society of New Zealand* 49, no. 2 (2019): 205-228, doi: 10.1080/03036758.2019.1609052
- 38) G. Carlsson, "Topology and data", Bulletin of the American Mathematical Society 46 (2009):

- 255-308, doi: 10.1090/S0273-0979-09-01249-X
- 39) R. Yoshimura et al., "Application of Observability Gramian to Targeted Observation in WRF Data Assimilation", *Tellus A* 72, no. 1 (2020): 1-11, doi: 10.1080/16000870.2019.1697602
- 40) 秋田剛,「アンサンブルカルマンフィルタを用いた片持ちはりの逐次データ同化実験」『航空宇宙技術』18 巻 (2019): 101-107, doi: 10.2322/astj.JSASS-D-18-00040
- 41) K. Fukami, K. Fukagata and K. Taira, "Super-resolution reconstruction of turbulent flows with machine learning", *J. Fluid Mech.* 870 (2019): 106-120, doi: 10.1017/jfm.2019.238
- 42) T. Murata, K. Fukami and K. Fukagata, "Nonlinear mode decomposition with convolutional neural networks for fluid dynamics", *J. Fluid Mech.* 882 (2020): A13, doi: 10.1017/jfm.2019.822
- 43) Y. Saito et a., "Data-Driven Vector-Measurement-Sensor Selection Based on Greedy Algorithm", *IEEE Sensors Letters 4*, no. 7 (2020): 7002604, doi: 10.1109/LSENS.2020.2999186
- 44) 綿引壮真,佐々木健吾,「デジタル画像相関法を用いた逐次データ同化による材料パラメータと境界条件推定」『日本機械学会第32回計算力学講演会講演論文集』(2019): 090, https://www.kke.co.jp/thesis/manufacturing/list.html
- 45) 赤坂啓,陳放歌,寺口剛仁,「機械学習を用いた自動車空気抵抗係数のインタラクティブ予測ツール開発」『2020年度人工知能学会全国大会』(2020): 206-GS-13-02, https://ci.nii.ac.jp/naid/130007857065
- 46) K. Deb et al., "An integrated approach to automated innovization for discovering useful design principles: Case studies from engineering", *Applied Soft Computing* 15 (2014): 42-56, doi: 10.1016/j.asoc.2013.10.011
- 47) K. Deb, Innovization: Discovering innovative solution principles through optimization (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2021), https://www.springer.com/gp/book/9783540731726
- 48) J. Ray et al., "Bayesian Parameter Estimation of a k- ϵ Model for Accurate Jet-in-Crossflow Simulations", *AIAA Journal* 54, no. 8 (2016) : 2432-2448, doi: 10.2514/1.J054758
- 49) J. Ling et al. "Uncertainty Analysis and Data-Driven Model Advances for a Jet-in-Crossflow", ASME Journal of Turbomachinery 139, no. GT2016-56191 (2017): 021008-1, doi: 10.1115/GT2016-56191
- 50) H. Xiao et al., "Quantifying and Reducing Model-Form Uncertainties in Reynolds-Averaged Navier–Stokes Simulations: A Data-Driven, Physics-Informed Bayesian Approach", *Journal of Computational Physics* 324 (2016): 115–136, doi: 10.1016/j.jcp.2016.07.038
- 51) S. Rudy, J. N. Kutz and S. L. Brunton, "Deep learning of dynamics and signal-noise decomposition with time-stepping constraints", *Journal of Computational Physics* 396, no. 1 (2019): 483-506, doi: 10.1016/j.jcp.2019.06.056
- 52) E. A. Deem et al., "Adaptive separation control of a laminar boundary layer using online dynamic mode decomposition", *Journal of Fluid Mechanics* 903 (2020): A21, doi: 10.1017/jfm.2020.546
- 53) S. Pawar et al., "Long short-term memory embedded nudging schemes for nonlinear

- data assimilation of geophysical flows", *Physics of Fluids* 32, no. 7 (2020): 076606, doi: 10.1063/5.0012853
- 54) C. Schenck and D. Fox, "SPNets: Differentiable Fluid Dynamics for Deep Neural Networks", *Computer Science* (2018) . https://arxiv.org/abs/1806.06094
- 55) Ansys, "Ansys Twin builder", Ansys, https://www.ansys.com/ja-jp/products/systems/ansystwin-builder (2020年12月26日アクセス)
- 56) B. Kim et al., "Deep Fluids: A Generative Network for Parameterized Fluid Simulations", Computer Graphics Forum 38, no. 2 (2018), doi: 10.1111/cgf.13619
- 57) P. Chandramouli, E. Mémin and D. Heitz, "4D large scale variational data assimilation of a turbulent flow with a dynamics error model", *Journal of Computational Physics* 412 (2020): 109446, doi: 10.1016/j.jcp.2020.109446
- 58) M. E. Ridler et al., "Data assimilation framework: Linking an open data assimilation library (OpenDA) to a widely adopted model interface (OpenMI)", *Environmental Modelling & Software* 57 (2014); 76-89, doi: 10.1016/j.envsoft.2014.02.008
- 59) CADLM, "ODYSSEE", CADLM, https://www.cadlm.org/services-1 (2020年12月26日アクセス)