



RICOS

令和 5 年 3 月 2 3 日

科学技術振興機構（JST）
Tel：03-5214-8404（広報課）

株式会社 R I C O S
Tel：03-5615-9777（代表）

A I による流動現象の高精度・高速な予測に成功 ～設計・製造における評価プロセスの加速に期待～

ポイント

- これまでは、汎用（はんよう）性が高く、速さと精度を両立させたA I（人工知能）による流動現象の予測が困難だった。
- 物理シミュレーション^{注1)}とA I技術を組み合わせることにより、信頼性・汎用性を担保しつつ、A Iの強みを生かした高速な予測を実現した。
- 流動現象のシミュレーションの高速化は、設計・製造における評価プロセスの加速や、気象予報の高精度化のための重要な一歩となる。

JST 戦略的創造研究推進事業において、株式会社R I C O Sの堀江 正信 氏らは、A I技術を用いて、水や空気などの運動に代表される流動現象の高精度・高速な予測に成功しました。今回の技術により、既存の物理シミュレーションやA I技術では到達することのできなかつた、精度と計算時間（同一の計算機上で測定）の高度なバランスを実現したことは大きな成果です。

現在、流動現象を予測するためには物理シミュレーションを用いることが主流ですが、現象を精度良く詳細に解析しようとするると計算に時間がかかり、反対に計算時間を短縮するために処理を簡略化すると予測精度が低下するという、精度と計算時間のトレードオフが見られました。

また、近年、機械学習^{注2)}と呼ばれるA Iの基盤技術を用いた物理現象の予測モデルの構築について盛んに研究がなされてきていますが、従来型の物理シミュレーションで扱われているような複雑な条件でのシミュレーションに適用できないことが多く、信頼性・汎用性において課題がありました。

本研究グループは、物理シミュレーションの技術と機械学習の技術を組み合わせることによって、信頼性・汎用性を担保しつつ、既存のデータを活用して予測を行うという機械学習の強みを生かした高速な予測モデルを実現しました。あらかじめ作成しておいた高精度なシミュレーションデータを学習させることにより、従来型の物理シミュレーションと比較して精度を大幅に損なうことなく高速な予測を達成しています。また、既存の機械学習技術では同じ現象でも異なる視点から見ると予測精度が落ちてしまうことがあったのに対し、今回開発した技術では予測精度が低下しないことを理論的に証明で

きます。

また、流動現象の物理シミュレーションにおいては「空気が入ってくる部分」や「空気を通さない壁の部分」といった形で解析したい現象の条件を付与しますが、既存の機械学習技術ではこのような条件を厳密に考慮することはできませんでした。今回、本研究グループでは、機械学習の良さを失わずにこのような条件を考慮する手法の開発に成功し、機械学習でも従来型の物理シミュレーションと同等の汎用性を持つことができる可能性を示しました。

今回の技術は、設計・製造においてボトルネックとなり得る流動現象のシミュレーションによる評価プロセスを高速化し、設計・製造プロセス全体の効率化を加速させるものと期待できます。その他にも、飛沫（ひまつ）による感染症予防のための換気の効率化や、気象予報の高精度化のための重要な一歩となると考えられます。

本研究は、筑波大学 システム情報系の三目 直登 助教と共同で行いました。

本研究成果は、2023年3月22日（日本時間）に機械学習トップ国際会議「Advances in Neural Information Processing Systems」のオンライン版で公開されました。

本成果は、以下の事業・研究領域・研究課題によって得られました。

JST 戦略的創造研究推進事業 個人型研究（さきがけ）

研究領域：「複雑な流動・輸送現象の解明・予測・制御に向けた新しい流体科学」

（研究総括：後藤 晋 大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授）

研究課題名：機械学習と数値解析を融合した流動モデリング

研究者：堀江 正信（株式会社RICOS 基盤研究部 部長）

研究期間：令和3年10月～令和7年3月

グラント番号：JPMJPR2109

さきがけ「複雑な流動・輸送現象の解明・予測・制御に向けた新しい流体科学」領域では、近年その発展が目覚ましい、流れの数値シミュレーションのための環境や手法、流れの計測技術、そして、これらにより得られた膨大なデータを解析する応用数学的手法を駆使し、これまで困難であった複雑な流動・輸送現象の抜本的な解明や、より正確な予測および高度な制御法の確立に向けた、新しい流体科学の基盤を構築することを目的とします。上記研究課題では、柔軟な機械学習モデルであるグラフニューラルネットワークと流動・輸送現象に適した数値解析手法である不連続ガラーキン法と組み合わせることで、物理現象の要請である座標変換に対する同変性と流動・輸送現象において重要な保存則を満たし、高精度かつ高速に予測ができる機械学習・数値解析手法の開発に取り組んでいます。

<研究の背景と経緯>

水や空気などの運動に代表される流動現象は私たちの身の回りの至るところで生じています。呼吸をするときの空気の流れ、血流、海や川の流れなど、流動現象と私たちの生活は切り離せません。工業的には、自動車・船舶・航空などの輸送機械や鋳造・樹脂流動などの製造工程、その他多くの領域において流動現象が重要な役割を占めています。しかし、その複雑さから流動現象を完全に予測することは難しく、従来型の物理シミュレーションによって仮想的な予測を行い、設計・製造・気象などさまざまな領域での意思決定に用いられているのが現状です。

また、従来型の物理シミュレーションは、複雑な流動現象を解析しようとする計算に時間がかかることが多く、これが産業の発展を妨げています。例えば、車や航空機などの周りの空気の流動現象を解析するためには数日から数週間を要することが多く、物理シミュレーションの結果を基に設計の修正をする回数にも限りが出てきてしまいます。

従来型の物理シミュレーションの計算コストの問題を解決するべく、近年では機械学習と呼ばれるAIの基盤技術を用いて、従来型の物理シミュレーションの代わりに機械学習によって物理現象の予測モデルを構築する研究が盛んになってきました。しかし、機械学習による予測モデルでは従来型の物理シミュレーションで扱われているような複雑な条件でのシミュレーションには適用できないことが多く、信頼性・汎用性において課題がありました。

<研究の内容>

本研究グループは、物理シミュレーションの技術と機械学習の技術を組み合わせることによって、信頼性・汎用性を担保しつつ、既存のデータを活用して予測を行うという機械学習の強みを生かした高速な予測モデルを実現しました。現在、流動現象を予測するためには物理シミュレーションを用いることが主流ですが、現象を精度良く詳細に解析しようとする計算に時間がかかり、反対に計算時間を短縮するために処理を簡略化すると予測精度が低下するという、精度と計算時間のトレードオフがみられました。今回の技術では、既存の物理シミュレーションやAI技術では到達できていなかった、精度と計算時間の高度なバランスを実現しました（図1）。

既存の機械学習技術では、同じ現象でも異なる視点から見ると予測精度が落ちてしまうことがあったのに対し、今回の技術では予測精度が低下しないことを理論的に証明しました（図2）。この性質は、観測者によって現象の性質が変わらないという「対称性」と呼ばれる性質に対応しており、物理学の観点からも大いに意義があります。また、この技術は機械学習アルゴリズムの内部に物理シミュレーションの計算手法を組み込む方法であり、本研究グループが熱解析に対して開発した以前の研究を流動現象に適用した発展形と言えます。

具体的には、空気は気圧の高いほうから低い方に流れるなど、物理量の相対的な関係（空間微分）によって流れを始めとする運動が生じますが、この関係を計算する物理シミュレーションの手法を機械学習アルゴリズムの内部に導入しました。さらに、流動現象では流れの情報が瞬時に遠方に伝わることもあり、この特徴が熱解析と比較して流動現象の解析を困難にしている側面があります。これに対して本研究グループは、機械学習アルゴリズム

ム内部での予測処理を繰り返し行うとともに、その繰り返し計算をより高精度に行う手法を開発し、この問題を解決しました。

また、流動現象の物理シミュレーションにおいては「空気が入ってくる部分」や「空気を通さない壁の部分」といった形で解析したい現象の条件を付与しますが、既存の機械学習技術ではこのような条件を厳密に考慮することはできませんでした。今回の技術では、機械学習アルゴリズムの内部で取り扱われる抽象的な高次元のデータ空間において、入力された物理的な条件に対応する条件の定式化を導くことにより、世界で初めて機械学習アルゴリズムと物理現象の条件の厳密な取り扱いの両立に成功しました。

このことは、今回の技術の特徴である、物理シミュレーションの計算手法が機械学習アルゴリズムの内部に組み込まれているという特徴があったからこそ実現できたことです。具体的には、機械学習アルゴリズム内部での処理を物理シミュレーション内部での処理と見比べることにより、物理的な条件を課すべき部分を明らかにし、その対応関係から物理的な条件に対応する機械学習モデル内部での条件の定式化を導くことができました。これは、物理シミュレーションとの明確な対応関係を持たない既存の機械学習アルゴリズムでは達成が困難なものでした。

<今後の展開>

今回の技術は、設計・製造においてボトルネックとなり得る流動現象のシミュレーションによる評価プロセスを高速化し、設計・製造プロセス全体の効率化を加速させるものと期待できます。その他にも、飛沫による感染症予防のための換気の効率化や、気象予報の高精度化のための重要な一歩となると考えられます。具体的には、換気装置が室内に複数あるような複雑な条件下の気流に対しても、今回の技術は汎用性が高く、高速かつ高精度な予測が可能であると考えられます。そのため、各部屋に小規模なコンピューターを設置するだけで、飛沫による感染症予防のための換気装置の運転の効率化が行えると考えられます。

<参考図>

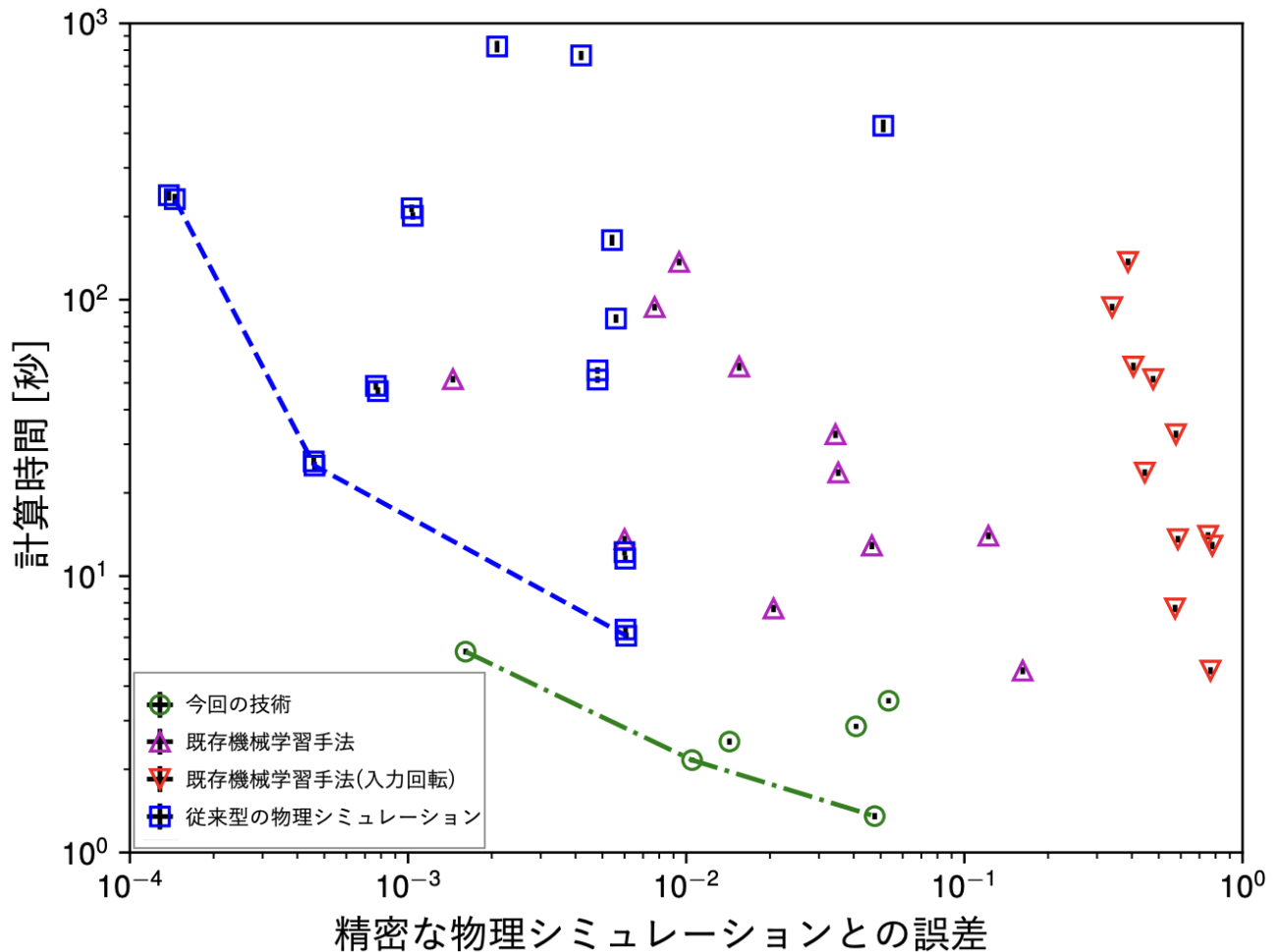


図1 精密な物理シミュレーションとの誤差（横軸）と計算時間（縦軸）との関係
グラフ内の左下の領域に行くほど、高精度かつ高速な予測を意味している。今回の技術（緑）では、従来型の物理シミュレーション（青）や既存の機械学習手法（ピンク・赤）[Brandstetter et al. ICLR, 2022]では達成できない、精度・速度の高度なバランスが実現されていることが分かる。また、既存の機械学習手法では、入力データを回転してしまうと、精度が落ちてしまう（図2を参照）。

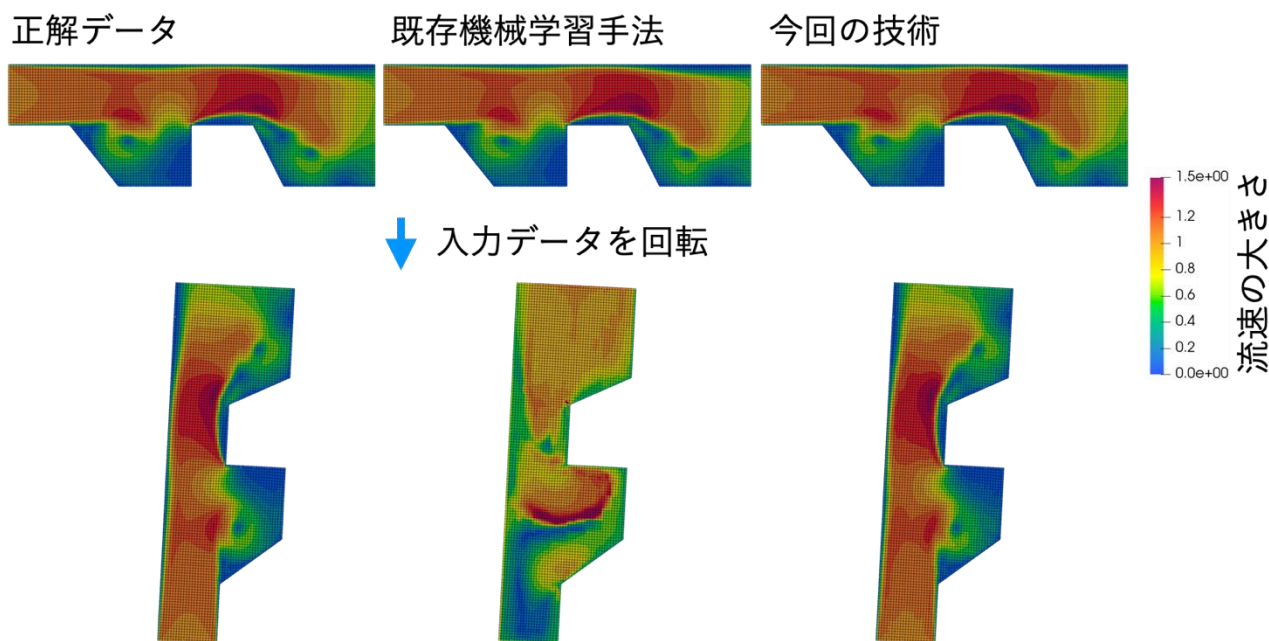


図2 (左から) 正解データ、既存機械学習手法 [Brandstetter et al. ICLR, 2022]、今回の技術の予測結果の比較

物理現象では、観測者の視点が変わると形状が回転したように見えるが、同じ現象を観測した場合、起きている現象は同一のものとなる。その結果、正解データでは入力データを回転させても現象の性質は変わらない。これを対称性という。一方で、既存機械学習手法では、そのような物理現象の対称性が考慮されていないため、入力データを回転しただけで予測精度が大幅に低下してしまう。他方、今回の技術では、正解データ同様、物理現象の対称性が考慮されていることが分かる。これによって信頼性の高い予測が可能であることが示された。

<用語解説>

注1) 物理シミュレーション

物理法則を基に、コンピュータで計算を行うことで物理現象を予測する技術の総称。現実には生じている物理現象の多くはメカニズムや物理現象が生じる対称である物体の形状などが複雑であるため物理法則を表す数式を直接解くことは難しく、物理シミュレーションを用いて近似的に解くことが設計・製造・気象などの分野で広く行われている。

注2) 機械学習

既知のデータから法則性を見だし、未知のデータに対して予測が行えるモデルを得る手法の総称。AI（人工知能）を実現するための基礎的な手法として注目されており、高い柔軟性を持つニューラルネットワークなどが主に用いられる。

<論文タイトル>

“Physics-Embedded Neural Networks: Graph Neural PDE Solvers with Mixed Boundary Conditions”

<お問い合わせ先>

<研究に関すること>

堀江 正信（ホリエ マサノブ）

株式会社R I C O S 基盤研究部 部長

〒100-0005 東京都千代田区丸の内二丁目2番3号

Tel : 03-5615-9777 Fax : 03-5615-9778

E-mail : horie[at]ricos.co.jp

<JST事業に関すること>

嶋林 ゆう子（シマバヤシ ユウコ）

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

Tel : 03-3512-3526 Fax : 03-3222-2066

E-mail : presto[at]jst.go.jp

<報道担当>

科学技術振興機構 広報課

〒102-8666 東京都千代田区四番町5番地3

Tel : 03-5214-8404 Fax : 03-5214-8432

E-mail : jstkoho[at]jst.go.jp