

ものづくりをめぐる今後の流体工学解析とAIサロゲートモデル

— スーパーシミュレーションは風力連成構造解析をリアルタイム化できるか? —

松岡 浩*

1. はじめに

日本も含め世界120か国以上の国々が「2050年までのカーボンニュートラル実現」を宣言している。こうした中、風力エネルギーの利用拡大にも大きな期待が寄せられ、大規模な風力発電ファームの設置などが進められている。しかし、施設の規模と投資額が巨大になるほど、事故停止の防止と運転性能の向上が厳しく求められる。このため、設計段階では、構造的な安全設計や性能推定をより高精度に行う“マルチスケールでかつマルチフィジクスな数値解析”，すなわち“スーパーシミュレーション”が必要になる。また、運転段階では、より長期間にわたり安定した操作を行うため、疲労損傷の蓄積を少なくするシステム制御を時々刻々行う必要がある。従って、理想的には、スーパーシミュレーションのリアルタイム化の考慮も必要になり、流体工学解析における数値計算の速度向上への要求は極めて強い。

流体工学解析では、従来から、ナビエ・ストークス方程式等の微分方程式を数値的に解く方法が王道である。しかし、計算速度を飛躍的に向上させるには、何か基本的に別の発想が必要だと思われる。

本稿では、そのひとつの可能性として“格子ガス法AIサロゲートモデル”を紹介する。これは、流体挙動を導く「微分方程式」の代わりに、その代替（サロゲートモデル：Surrogate Model）として「格子ガス法」と呼ばれる流体解析法の仮想粒子モデル¹⁾を用いる。このモデルの粒子イメージを介して、物理挙動のファジィ推論が可能になる。また、ニューラルネットの計算構造に対応させることで実測データの学習アルゴリズムを得る。

なお、本モデルは、開発途上であり、現時点で有効性を検証するシミュレーションや実験等との比較を完了していない。このため、本稿では、散文的になるが、この概念に至る考え方を中心に整理した。

2. 今後の風力エネルギー利用拡大と流体解析

2.1 風力等の流体工学で高解像予測が必要

カーボンニュートラルの実現を目指して、再生可

能エネルギーの利用をめぐる大型プロジェクトが多数進行している。特に、風力エネルギーについては、巨大なウインドファームの設置が次々と進められつつある。また、次世代に向けて、風力支援運航船（例：ウインドチャレンジャー¹⁾）や帆走型洋上風力発電船（例：ウインドハンター¹⁾）の開発なども始まっている。

このようなプロジェクトでは、規模が大型になり投資額が巨大になるほど、設計段階では、システムが安全にかつ高い性能を発揮するのに適した設置場所や運航場所の選定が重要である。このため、できるだけ高精度な数値シミュレーションによる事前評価が要求される。しかし、一般論としては、構造物周辺を通過する流体の挙動を精度よく予測するには、構造物周辺で生じる様々な大きさの流体渦をすべて解像する必要がある。ある時刻において実際に存在する渦を解像できなければ、次の時刻のその周辺における流体挙動の予測は誤ったものになる。このため、流速を計算する位置である“格子点”は、最小渦の直径と同程度の細かい間隔で配置することが望まれる。最小渦の大きさが、構造物の大きさに対して非常に小さい場合には、構造物周辺に配置すべき格子点の数が膨大になる。3.1に後述するが、ウインドファームの場合、「解像すべき最小渦の大きさ」から「構造物全体の大きさ」までの長さスケールの幅が数桁以上に及ぶので、非常に高解像度の“マルチスケール流体解析”が必要になる。

2.2 マルチスケール流体解析の困難性

「一般に、“構造物の大きさ（代表長さ）”と“最小渦の直径”の比の値は、レイノルズ数の $3/4$ 乗に比例すること²⁾（ただし、レイノルズ数 \equiv 代表流速 \times 代表長さ \div 動粘性係数）」が流体力学の次元解析によって知られている。また、この比の値は、「最小渦まで解像する場合に、1次元方向に配置すべき格子点の個数の目安」になる。従って、流体挙動を正確に予測しようとする場合、レイノルズ数がある大きさを超えると、配置すべき格子点の個数が3次元方向の積に比例して急増するので、実用的に許容できる時間では数値計算を完了できなくなる。すなわち、マルチスケール流体解析は、レイノルズ

* 事業開発本部 環境・再生可能エネルギー部

数が大きいほど計算時間の点で実現が困難になる。

2.3 現在の数値流体力学による高解像予測

ここで、ものづくりのための流体力学解析において、高解像度なシミュレーションを実現するための一般論を筆者なりに整理しておく。

スーパーコンピュータの著しい性能向上の結果、かなり高解像度な格子点配置であっても、実用的な時間で必要な時間発展計算を完了できるようになってきた。とは言え、許容できる時間で計算を完了できる最高の格子点個数というものがある。従って、高解像度なシミュレーションを実現するには、まずは、そのぎりぎりの格子点の個数を配置してみる。実験・試作規模の流体解析の場合は、レイノルズ数がそれほど過大にならないため、その格子点配置の細かさで最小渦まで解像できているかもしれない。この場合、「格子点間のさらなる細部の流体状態を考慮する」という余計な手間は必要ない。すなわち、この手間が不要な“直接流体シミュレーション (DNS)” が可能であり、正確なシミュレーション結果を得ることができる。他方、実機規模の流体解析の場合、レイノルズ数が過大になる。このため、最小渦まで解像できるシミュレーション計算をDNSだけで実行することは、現在のスーパーコンピュータでもまだ困難である。そこで、各格子点における流速等の物理量を求めた後、格子点間隔よりも細かい部分については、「ある仮定 (モデル) を設定して内挿補間的な推測を行う」という“乱流モデル”の方法が採用されている。シミュレーションの目的によるが、この方法で十分な精度を確保できる場合もある。しかし、このモデルの仮定は、物理的に一般性をもたない場合が多いので、このことに起因する不正確性が、シミュレーション結果に許容できない影響を及ぼす場合もある。

3. 夢の目標設定とバックキャスト思考の試み

3.1 1次元あたり5～6桁幅が理想の解像度

昨年末であるが、電気新聞に「2021年11月24日、スペインのシーメンス・ガメサ・リニューアブル・エナジーが、フィンランド最大の陸上風力発電所向けに、風車69基を受注した。」との記事があった。これは、ローターの直径が約170m、タワーの高さはおよそ150mということである。風車のブレード各部における空力計算に必要な解像度について、ここでは、実際の最小渦 (コルモゴロフ・スケール) よりも大きめに見積もって、仮に約5mmであると仮定してみる。これは、実質的な乱れの最小スケールは、コルモゴロフ・スケールの約5倍程度で担わ

れていること³⁾などを考慮した結果であるが、目標解像度の達成を容易にする方向の仮定になっている。この場合でも、ブレード長さとの比較において、“長さスケール”の違いは4桁もある。

また、ウインドファームにおいては、ある風車の後流は、下流側の風車の存在やその風車の後流との重なりの影響を受けて、さらに下流の風車に対して複雑な後流となって到達する。精度の高い発電量の予測には、地形を考慮した風況予測に加えて、このような後流の状況をウインドファーム全体について解析する必要がある。このため、水平方向には数km～10km、鉛直方向には500m以上の広大な空間領域について、各部における流体渦の大きさを考慮しながら格子点の疎密配置を調整する。特に、すべての風車のローター近傍では5mm間隔程度の高解像度な格子点配置を行うとすれば、ウインドファーム全体では、巨大な個数の格子点配置が必要になる。水平方向を考えると、 $5\text{km} \div 5\text{mm} = 10^6$ であるが、すべての長さにわたって5mm間隔程度の超高解像度な格子点配置が必要なわけではないので、1次元あたり $10^{5\sim6}$ 個の格子点配置が“夢の目標”の目安になる。

この目安は、他の流体力学解析の分野でも案外妥当である。例えば、走行中の自動車の空気抵抗については、自動車と大気が触れ合う境界近傍の解像度を0.1mmのオーダーまで細かくした数値解析 (LES) を行うと、実車フルスケールモデルによる風洞実験値に対して1～2%の誤差で予測可能という研究結果が坪倉によって発表⁴⁾されている。また、船舶の全抵抗係数については、模型船 (約5.5m) を曳航する水槽試験の状態を、約320億個の格子点配置により約0.05mmの解像度で数値解析 (DNS) を行った結果、水槽試験の計測誤差である1%以内の精度で予測できたことが西川によって発表⁵⁾されている。

以上のことから、定量的には、「1次元あたり $10^{5\sim6}$ 個の格子点を並べる高解像度なマルチスケール解析の実現」が、ものづくりをめぐる今後の流体力学解析における野心的な目標になると考える。

3.2 目標達成を阻むマルチフィジクスの要求

2.1に述べた“ウインドファーム”、“風力支援運航船”、“帆走型洋上風力発電船”という3つの事例では、いずれも、流体 (大気や海水) は、弾性変形可能な構造物 (風車のブレードや船体の帆等) と相互作用をする。特に、ウインドファームの場合、前述したように、風車は、極めて複雑な後流の中に置かれる。他方、その構造解析では、弾性変形を伴う強度解析や、寿命の長い安定した運転を実現するた

めの疲労解析をできるだけ高精度に行いたい。また、“風力支援運航船”や“帆走型洋上風力発電船”の場合は、流体部分に気相（大気）と液相（海水）が共存し、両者の界面で構造物がダイナミックに揺れ動く状況にある。このような複雑な運動が継続する状況下で構造物の健全性を評価するためには、流体と構造物に関する異なる物理方程式を時々刻々連成させて計算する“マルチフィジクス連成解析”が不可欠になる。この連成解析では、マルチスケール解析に要求される高解像度な格子点配置を維持したまま、その時間発展計算にマルチフィジクスの計算を組み込むので、計算時間のかなりの増大が通常は避けられない。その分、3.1に掲げたマルチスケール流体解析の数値目標の達成も遠のくことになる。

3.3 目標達成を阻むリアルワールドの要求

現実世界（リアルワールド）の自然環境では、風況等の予期せぬ急変が多発する。従って、運用段階では、風況急変に伴う異常が生じてもそれを事故に発展させないこと、また、このような場合にも、疲労損傷の過度な蓄積を防止してシステムの長寿命化を図ることが大切である。このためには、外部環境の急変に即応できるフィードバック制御が必要になる。この制御を高精度に実行しようとするれば、現地における計測情報を迅速にシミュレーションに反映させる“リアルタイムデータ同化（実時間計測融合シミュレーション）”の技術が求められる。従って、フィードバック制御にシミュレーション計算の結果をどのように反映させるか？という手法の選択によるが、データ同化の計算に要する時間が全体の計算時間の増加につながるものが通常は避けられない。

3.4 スーパーシミュレーション高速化の夢

3.1に掲げたマルチスケール流体解析の数値目標は、超高速計算機の構成技術から見ると、超大規模メモリー間で超並列な超高速データ転送を実現するという課題である。すなわち、それ自体が非常に達成困難な目標である。この目標を、3.2に述べた“マルチフィジクスの要求”や3.3に述べた“リアルワールドの要求”も満足させつつ実現することは、“夢のまた夢”であるように思われる。

現在、マルチスケール流体解析に構造物との相互作用に関する連成解析を組み合わせた“スーパーシミュレーション”については、流体部分の挙動をナビエ・ストークス方程式等の差分法で、構造物部分の挙動を有限要素法で計算し、時々刻々、両者の状態量に関する情報をやりとりして時間発展計算を進めるという方法が王道的なアプローチになっている。実際、このようなアプローチは、有意義な成果を挙げており⁶⁾、足元から技術を固めるという意味

で、極めて合理的なアプローチであると言える。

しかしながら、本稿では、“スーパーシミュレーション”のリアルタイム化の夢を追求し、3.1に掲げたマルチスケールの数値目標からバックキャスト思考で検討を行う。少しでも夢の実現可能性を見出すことが目的である。この観点から、まずは、高解像度なマルチスケール解析を計算機で実行する際に、計算機負荷を桁違いに低減する方法を探求する。

【俯瞰的視点】仮想世界から現実収束する方法

“ものづくりをめぐる流体工学解析”に利用される計算機シミュレーションのアプローチを大雑把に整理してみる。

一般に、現実世界の現象は、多くの現象が相互に影響しあい、幅広い空間的・時間的なスケールにわたって変動している。従って、現実の挙動を数値シミュレーションで忠実に再現しようとする、より多くの物理現象を連成させる“マルチフィジクス性”と、より幅広い空間・時間範囲で変動をとらえる“マルチスケール性”を備えた複雑かつ精緻なシミュレーションモデルが必要になる。

例えば、以前、スーパーコンピュータ“地球シミュレータ（初代）”の開発プロジェクトチームにいたことがあり、当時、次のようなことが言われていた。

「地球温暖化の予測において重要な現象のひとつに“海水の地球規模での大循環（海洋大循環）”がある。この挙動のシミュレーションでは、物理法則に立脚した近似方程式を解くことによって海水のみの循環を模擬する物理モデルが中核にある。それを現実世界の現象に近づけるためには、海面上の空気による海水の駆動力や降雨・蒸発等による海面高度の変化を考慮できるよう“大気大循環”と連成させたモデルに進化させる必要がある。さらに、『氷山による下降海水流』や『生態系による空気組成の変化が温室効果を通じて大気や海水に与える影響』などを計算できるモデルとの連成を行えば、現実世界をより忠実に模擬できるであろう。」

このような“近似方程式の数値解法とモデルの精緻化”によるアプローチは、従来からの数値シミュレーションにおける第1の王道である（cf. 図1）。しかし、精緻化を進めるほどモデルの計算が複雑になり実用的な時間で計算を完了できなくなってしまう。これに対して、第2のアプローチとして、“より根源的な基礎方程式からの出発”という方法がある。例えば、分子動力学で流体工学規模の現象をシミュレーションする試みがこれにあたる。この場合、我々が注目している現実の世界は、アボガドロ数のオーダー（10の24乗）以上の分子集団にな

る。従って、分子の大きさの世界から計算を積み上げていくと、マルチスケールの桁の広がりが増え、1次元あたり8桁以上になってしまう。進歩が著しい現在の高性能計算機でも、この計算を実用的な時間で完了させるには、まだまだ演算速度や記憶容量が追いつかない。

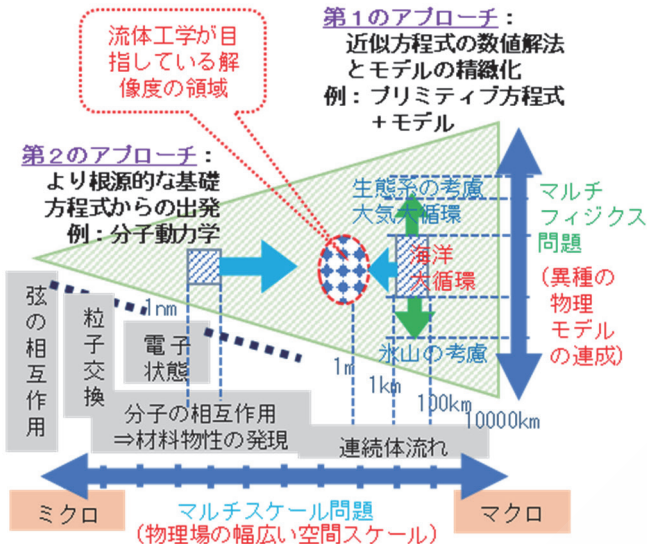


図1 マルチスケールとマルチフィジクス⁷⁾

こうした中、第3のアプローチ (cf.図2) として、「解析したい現象の空間・時間スケールよりも一段階だけ細かいスケールで仮想的な世界を想像し、その世界の時間発展を支配する単純な規則を設定して、これを計算機で高速に解き、得られた仮想世界の挙動をある適切な空間及び時間の範囲で平均化して現実世界の現象を導く方法」がある。このような「仮想世界からの現実収束」というアプローチは、計算時間を大幅に短縮でき、リアルタイム化の観点からは明らかに有利である。具体的な手法としては、格子ガス法、格子ボルツマン法などが挙げられる。

これらの手法では、連続的な流体の挙動を“サブマクロスケールの仮想粒子の集団挙動”で模擬することに特徴がある。ここで言う“サブマクロスケール”とは、解析したい現象の時空間スケールよりも一段階だけ細かいスケールのことである。この“サブマクロのスケール”においては、現実の世界を忠実に模擬しようとはしない。実際、サブマクロスケールで現実の流体を眺めても“連続体”のままであり、“粒子”のような存在は見えてこない。すなわち、現実とは明らかに異なることを知りながら、“サブマクロスケールの大きさをもつ仮想的な粒子”を想定し、その挙動を支配するメカニズムを考える。この“サブマクロ粒子モデル”が、“連続体に見える現実の大分子集団”の妥当な“代理モデル (サロ

ゲートモデル)”になっているか否か?は、それをある適切な時空間の範囲で平均化した際に、現実の挙動に合うようにパラメータを調整できるか否か?によって判定される。

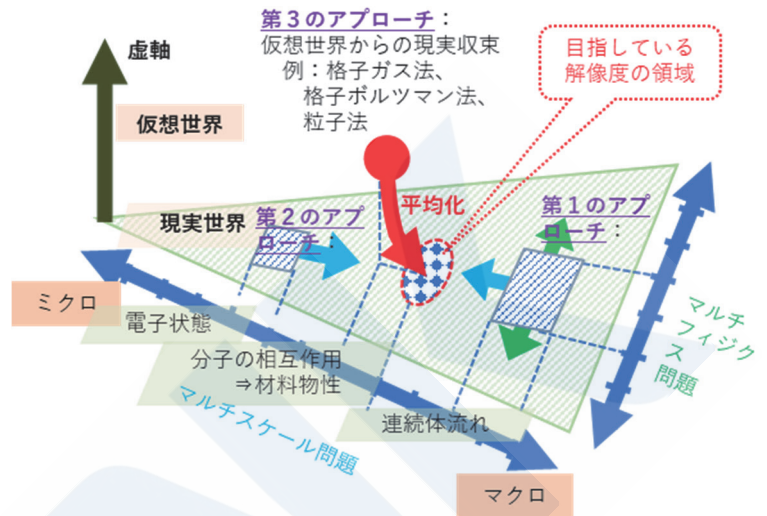


図2 “仮想世界からの現実収束”アプローチ⁷⁾

なお、様々なマルチフィジクスシミュレーションに適用可能な“粒子法”⁸⁾という強力なシミュレーション手法がある。粒子法における“仮想粒子”は、マクロスケールにおける流体塊等を、そのままのスケールで“粒子モデル”に置き換えたものである。このため、平均化(疎視化)の操作は不要である。しかし、その計算結果を人間が見て現実の物理挙動を理解する段階では、頭の中で“個々の粒子の動き”をある時空間の範囲で平均して、粒子の集団行動を概観していると考えられる。そこで、筆者は、粒子法も、格子ガス法や格子ボルツマン法と同じ“仮想世界からの現実収束”のアプローチに分類している。

4. マルチスケール高速計算の実現を目指して (実数表現を全廃する簡易モデルの提案)

4.1 疎密格子に1格子点1ビット幅の演算

4.1.1 “格子ガス法”を基本手法として選択

“格子ガス法”, “格子ボルツマン法”, “粒子法”は、いずれも“仮想粒子”の挙動計算を行うが、計算効率の観点からは、それぞれ一長一短がある。ここでは、時間発展計算を行うときに取り扱う“物理量の表現”の違いに注目する。粒子法では、仮想粒子の位置を拘束する格子が存在しない(メッシュレス)。このため、仮想粒子の位置は自由な実数値をとり得る。また、仮想粒子の速度も時々刻々変化する実数で表現される。格子ボルツマン法では、仮想粒子の位置は格子点上に拘束され、その速度もある

決まった離散的な有限個の値しかとり得ない。しかし、仮想粒子がそれぞれの速度をとる確率分布が実数で表現され、これが時間発展計算の際に使用される。これに対し、格子ガス法では、格子ボルツマン法と同様に、仮想粒子の位置は格子点上に拘束され、その速度はある決まった離散的な有限個の値しかとり得ない。違いは、時間発展計算の際に、確率分布の計算は行わずに、その確率分布に従って生じ得る結果のいずれかを実際に生じさせる点にある。従って、実数値による表現はまったく不要である。

理由は、4.2に後述するが、マルチスケール流体解析における記憶容量の節約と計算時間の短縮を桁違いに向上させるひとつの方法として、実数値の表現をなくすことが非常に効果的である。そこで、「**記憶容量を節約し時間発展計算を高速化できる実数表現全廃モデルであること**」を、マルチスケール流体解析を大幅に高速化するための指導原理と考える。そして、この条件を満たす“格子ガス法^{9) 10)}の“仮想粒子モデル”を考察の出発点にした。

なお、記憶容量の節約と計算時間の短縮を桁違いに向上させる方法がもうひとつある。それは、構造物の周辺など最小渦の直径が小さい領域では格子点を細かく配置し、構造物から遠く離れ、最小渦の直径が大きい領域では格子点を粗く配置することである。これにより、格子点の総数を減らすことができる。しかし、格子点配置の疎密が変化する部分で、格子点配列が不規則になる非構造格子では、一般に、計算上の手間が増えるという欠点がある。そこで、規則正しい構造で、疎密度だけが異なる格子を階層的に配置する方法がとられる。通常の数値流体力学(CFD)で利用される典型的な手法としては、“直交格子積み上げ法(階層直交格子法, Building-Cube Method, BCM)”が知られている。

格子ガス法においても、これに似た手法が、1993年にボッシュ(Robert P. Bosch, Jr.)によって既に考案されている。ボッシュの論文題目は、「格子ガス用マルチグリッドアルゴリズム¹¹⁾」である。この格子点配置法では、粗い格子点網と細かい格子点網がつながる接続領域に位置する格子点上において、“粗い格子点網だけを移動できる重い仮想粒子”と“細かい格子点網だけを移動できる軽い仮想粒子”を相互に変換する操作を行う。このとき、“重い仮想粒子”がもつ質量と運動量は、これと変換される複数の“軽い仮想粒子”がもつ質量と運動量の和に等しくなければならない。しかし、この条件を満たす“重い仮想粒子”と複数の“軽い仮想粒子”が同じ位置に同時にやってくる確率は極めて低

い。そこで、“重い仮想粒子”と“軽い仮想粒子の”変換過程に、負の質量をもつ仮想粒子の生成消滅過程を導入して、質量と運動量の局所的な保存則を常に満足させている。本稿では、この「マルチグリッドアルゴリズム」を利用することを前提としている。

4.1.2 格子ガス法4次元FCHCモデルの概要

ここで、筆者が利用している格子ガス法の具体的なモデルを説明する。

格子ガス法流体解析では、流体が存在する空間中に規則正しく格子点を配置し、特定の質量と運動量を担う多数の仮想粒子が、①格子点上での“衝突散乱”と②格子点間の“並進移動”を繰り返しながら移動していく。この様子を平均して、マクロな流体物理量(密度、運動量、速度等)の挙動を得る(cf. 図3)。このとき、仮想粒子がもつ質量や運動量が衝突散乱の前後で保存されるような粒子衝突を想定する限り、その挙動は、自然界におけるある条件下の流体挙動とかなり似たものになる。しかしながら、仮想粒子の速度が、自然界の流体分子のように連続的な値をとれないため、格子ガス法が導くマクロな挙動は、連続流体を仮定している一般的な数値流体力学(CFD)が導く流体挙動とは多少異なったものになる。この“多少の差異”を解消する計算法は、1993年にテシャラ(Christopher M. Teixeira)が考案¹²⁾しており、格子ガス法は、現在、理論的にもCFDと同等な精度をもった流体解析手法となっている¹³⁾。

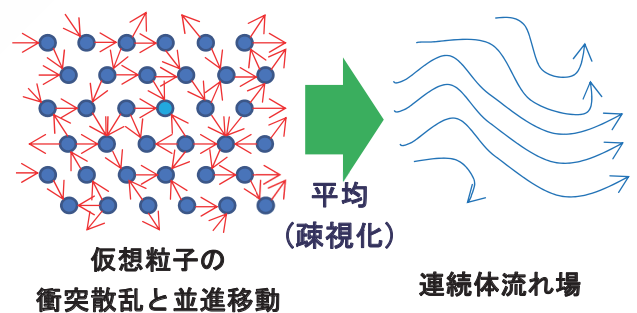


図3 仮想粒子の挙動を平均して連続体流れ場へ

特に、テシャラの「格子ガス法FCHC54速度モデル¹²⁾」については、その計算結果を、非圧縮性流体に関するCFDの計算結果と比較した場合、マッハ数に関する3次の精度まで理論的に一致することがテシャラの論文で示されている。このモデルでは、ひとつの格子点に「静止粒子が最大6個、遅い速さの粒子が24の異なる向きにそれぞれ1個までで合計最大24個、速い速さの粒子も24の異なる向きにそれぞれ1個までで合計最大24個、総合計では、最大54(=6+24+24)個」の仮想粒子が存在し得

る。なお、仮想粒子が存在できる格子点配置は、応力テンソルの等方性を保つため、テシャラは“4次元面心超立方体格子（FCHC格子）”を採用している。モデルの要点とシミュレーション事例（cf.図4, 5, 6）を次に示す。

【参考】テシャラの格子ガス法54速度モデルの要点

(1) 仮想粒子は、すべて同じ質量： $m[\text{kg}]$ をもつ。
 (2) 仮想粒子は、4次元空間中に存在する最小格子点間隔が $\Delta L[\text{m}]$ の“FCHC格子”の格子点上を、一定の時刻ステップ間隔($\Delta\tau[\text{sec}]$)ごとに同期して並進移動し、その移動を実現するのに必要な4次元速度： $\vec{C}_{ji}[\text{m/sec}]$ （エネルギーが $\varepsilon_{ji} \equiv (1/2)m(\vec{C}_{ji} \cdot \vec{C}_{ji})[\text{J}]$ で、速度の向きが i ）をもつ。

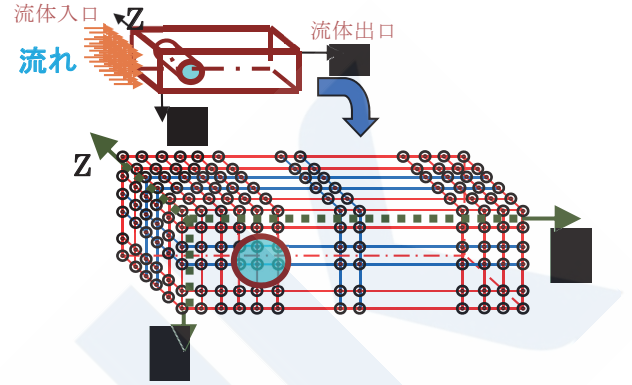
仮想粒子がもち得る速度は、以下のとおり。

- ①エネルギー0の粒子：存在可能粒子数 $d_0=6$
 $\vec{C}_{ji}=(0,0,0,0) [\text{m/sec}]$ （←静止粒子）
 - ②エネルギー $mc^2[\text{J}]$ の粒子：可能な速度 $d_1=24$ 通り
 $\vec{C}_{ji}=(\pm c, \pm c, 0, 0), (\pm c, 0, \pm c, 0), (\pm c, 0, 0, \pm c), (0, \pm c, \pm c, 0), (0, \pm c, 0, \pm c), (0, 0, \pm c, \pm c) [\text{m/sec}]$
 ここで、 $c \equiv \Delta L / \Delta\tau [\text{m/sec}]$
 - ③エネルギー $2mc^2[\text{J}]$ の粒子：可能な速度 $d_2=24$ 通り
 $\vec{C}_{ji}=(\pm 2c, 0, 0, 0), (0, \pm 2c, 0, 0), (0, 0, \pm 2c, 0), (0, 0, 0, \pm 2c), (\pm c, \pm c, \pm c, \pm c) [\text{m/sec}]$
- (3) 同一の速度をもつ仮想粒子は、同じ格子点に同時に2つ以上存在できない。
 (4) 仮想粒子どうしの相互作用（衝突散乱）は、格子点上のみで生じ、その前後で、仮想粒子の質量、運動量、エネルギーの総和が保存される衝突規則を確率的に適用する。
 (5) 衝突散乱によって相互に移りかわれる仮想粒子の存在状態間の遷移確率はどちらの向きも等しい。

【格子ガス法54速度モデルを適用した格子点構成の例】

3次元空間中に多数の格子点をXYZの各方向に並べ、直方体形状の格子点配列を作る。各格子点は、その内部に4次元目の座標として $R=0, 1, 2, 3$ の位置を識別できる

自由度をもつとする。これが下図であり、4次元面心超立方体格子を3次元空間へ投影した姿である。数値シミュレーションでは、3次元縮退格子として、例えば、X方向に1,024個、Y方向に192個、Z方向に384個の格子点を配置した。



【過渡変化シミュレーションの条件設定の例】

シミュレーション計算を開始する時刻ステップ0の時点で、各格子点には、そこに存在できる仮想粒子の最大数の20%の数の仮想粒子をランダムな向きに配置する。この結果、疎視化して得られるマクロな流速はゼロであり、流体は、直方体形状の中で静止している。次に、時刻ステップ1の時点から、+X向きの速度をもつ仮想粒子を $X=0$ の位置から注入していく。すると、時刻ステップが進むにつれて、流体全体が+X向きのマクロな速度をもつようになる。このとき、+X側の先にある直方体出口においては、出口直前に存在する格子点上の仮想粒子配置を、出口直後に存在する格子点の仮想粒子配置にコピーして、出口におけるマクロな流速の勾配がゼロになるという境界条件を近似的に実現した。また、 $\pm Y$ 方向と $\pm Z$ 方向には、周期的境界条件を適用した。この流れの中の入り口に近い位置に、“Z方向の中心軸をもつ無限大の長さの円柱”を置き、その後流に生じる流体挙動を計算した。ある断面上の疎視化された運動量分布の過渡変化動画の中からスナップショット画像を抜粋して表示する。

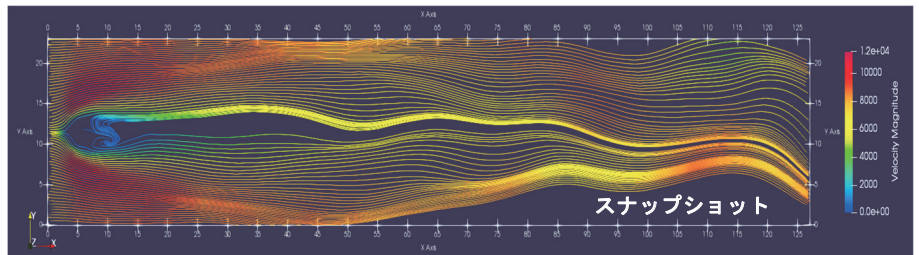
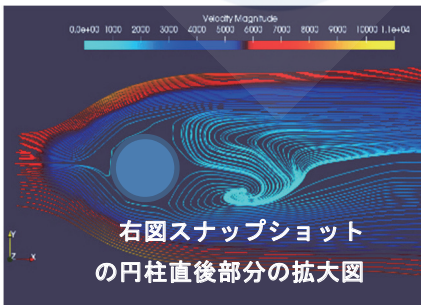


図4 円柱後流の過渡変化シミュレーション¹⁴⁾

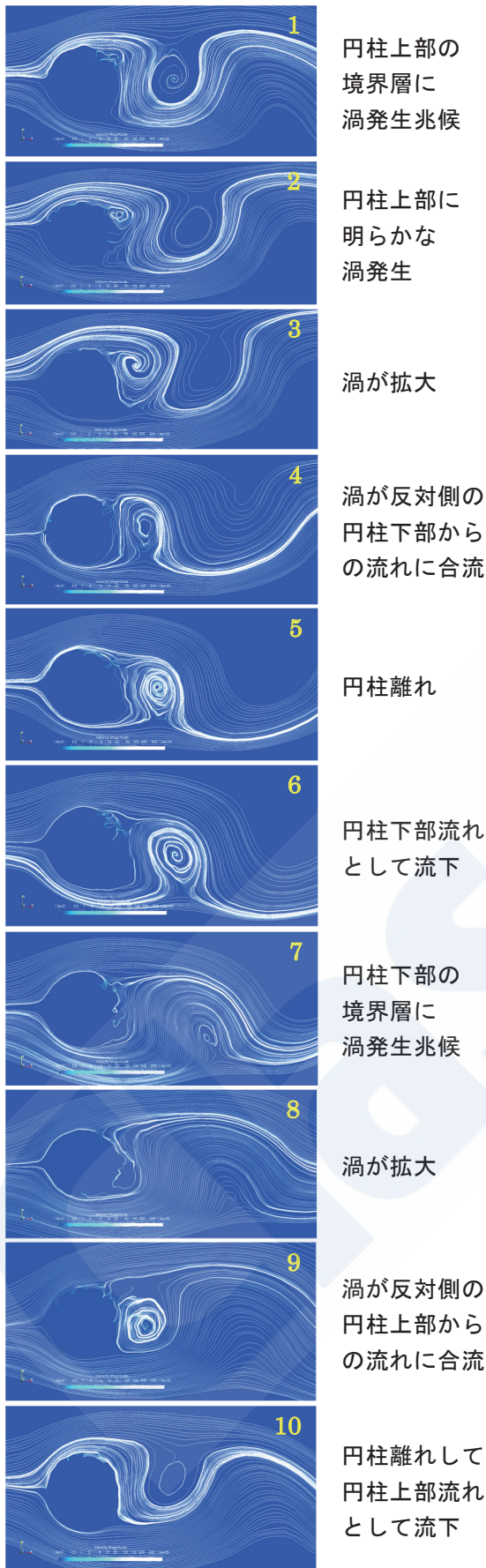
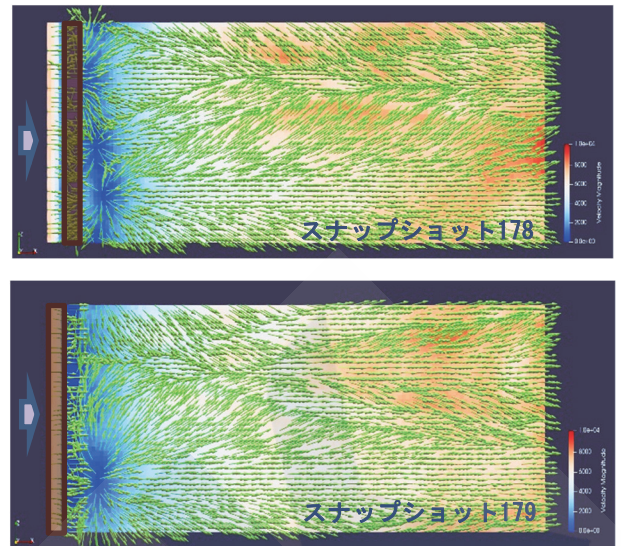


図5 円柱境界層から交互に生じる渦放出¹⁵⁾



上図は、流下方向と円柱軸がなす平面上における流速について、流速の大きさを背景の色で、流速の向きを緑の矢印で示している。左端の円柱（茶色の長方形で表示）のすぐ後ろ（上図では円柱右側）に死水域がある。

動画を観察すると、流れがカルマン渦になって十分時間が経った時点では、死水域の後ろに低速流体（青色部分）と中速流体（薄青色部分）の領域が円柱軸方向に交互に出現してかなり激しく円柱軸方向に揺らぐのがわかる。また、さらに下流では、「流下方向の流れが集まり流速が速くなる部分」と「流れが広がり流速が遅くなる部分」が円柱軸方向に交互に並び、流れの方向を揺るがせながら時間的に波打つ状況が観察された。これは、高速ストリーク及び低速ストリークと呼ばれる流れが、“流下方向に回転軸をもつ縦渦”の効果と相まって生じた流体挙動であると考えられる。

図6 円柱後流に発生する縦渦¹⁴⁾

4.2 ベクトルコアで16384格子点一括計算

仮想粒子の状態を表現する状態量のすべてを有限個に離散化し実数表現を全廃することができれば、時間発展計算における実数計算は不要になる。実際の計算機では、ひとつの実数を記憶する場合、浮動小数点表示で、精度に応じ32, 64, 128ビットのメモリーを必要とする。従って、ひとつの実数の時間変化を計算するには、演算回路において、32, 64, 128ビット幅を占有することが必須になる。これに対し、仮想粒子の状態量を有限個に離散化して表現できれば、例えば、その状態量の値が小さい順にA, B, C, …などの符号を割り振り、状態量の値が例えばBであるときには、Bの実数値そのものを記憶するのではなく、B=1という1ビット値を記憶すればよい。状態量の値がBでないときは、B=0を記憶する。

これにより、大幅な記憶容量の節約を実現できる。

また、ある格子点において、速度Dと速度Eをもつ2つの到着粒子が、衝突散乱によって速度Fと速度Gをもつ2つの出発粒子になった場合 ($D+E \Rightarrow F+G$)、速度Dと速度Eをもつ2つの到着粒子は、衝突散乱によって消滅し、その速度をもつことはなくなったので、 $D=1 \Rightarrow D=0$ 、 $E=1 \Rightarrow E=0$ という計算処理を行う。同様に、速度Fと速度Gをもつ2つの出発粒子が衝突散乱によって生成したので、 $F=0 \Rightarrow F=1$ 、 $G=0 \Rightarrow G=1$ という計算処理も行う。いずれの計算処理の場合も、D、E、F、Gという変数は、1か0の値しかとり得ない。従って、演算回路においては、常に1ビット幅しか占有しなくて済む。そこで、演算回路のあるビットでは、常にそのビットに対応したあるひとつの格子点におけるD、E、F、G、…の変化の計算を順番に行うことにする。こうすれば、1回の演算命令で一括して処理できるビットの個数と同じ個数の格子点について、その時間発展演算を一括して並列的に行うことが可能になる。

筆者が利用している東北大学サイバーサイエンスセンターのベクトル計算機AOBA-A (NEC製のSX-Aurora-TSUBASA) の場合、1回のベクトル命令の発行で、1個のベクトルプロセッサコアあたり、
 $64 \text{ビット} / \text{ワード} \times 256 \text{ワード} / \text{命令}$
 $= 16,384 \text{ビット} / \text{命令}$
 のデータ処理ができる。従って、1個のベクトルプロセッサコアだけで16,384個の格子点に関する一括計算を実行できる (1CPUなら8コアでさらに8倍)。

なお、この一括計算方法については、2013年の時点で、地球シミュレータ (ES2=SX-9) の64ノード (512CPU, 主記憶合計約8TB) を用い、1,000億格子点の時間発展計算を進められることを確認している¹⁶⁾。

また、この計算方法で、リアルタイム計算を実現できる場合もある。筆者は、以前、スーパーコンピュータ“京”の運用立ち上げを担当しており、約50m×約60mの広さをもつ計算機室内に配置されたスパコンラックの空気冷却風速場の解析評価を実施した¹⁷⁾。その当時の結論は、「 $1024 \times 1024 \times 256 \approx 2.6$ 億個程度の格子点分割であれば、大規模計算機空気冷却風速場の実時間シミュレーションを10テラフロップス程度 (京コンピュータの1ラック程度) の計算機で実現可能」というものである。ある程度の解像度でよければ、1格子点1ビット幅演算の効果だけでも、実時間シミュレーション可能な事例もある。

4.3 実数全廃計算でどんな乱流も値を算出

乱流のように激しく変化する流れを計算機で安定

的に計算していく観点からは、格子ガス法には重要なメリットがある。前述のとおり、格子ガス法の時間発展計算では、実数表現を全廃できる。この場合、浮動小数点演算に起因する打ち切り誤差の発生はない。従って、どんなに激しい流れについても、途中で計算不能になることはなく、必ず、何かの計算結果を安定的に求め続けることができる。

また、乱流状態は、一般に大きなレイノルズ数条件下で生じる。他方、5.3に後述するが、本手法は、正の流体粘性はもちろんのこと、負の流体粘性も発現できることを確認している。これらの粘性発現機構をうまく調整すれば、値がゼロに極めて近い正の流体粘性を発現させることで、非常に大きなレイノルズ数状態も模擬できるであろう。この点でも、乱流解析への適用上、非常に有利であると思われる。なお、格子ガス法による“負の粘性発現”を乱流解析に利用するアイデアについては、Rothmanの論文¹⁸⁾を参照されたい。

4.4 量子計算機なら多世界確率ビット演算

格子ガス法における衝突散乱計算は、4.2に述べたように、各速度をもつ到着粒子の存否を表すビット列を、出発粒子の存否を表すビット列に変換する計算である。このとき、衝突散乱計算の出力となる出発粒子のビット列は、質量と運動量の合計が衝突散乱の前後で保存する限り、物理的にはどのようなビット列でも生じ得る。従って、一般的には、ひとつの到着粒子ビット列に対して、複数の出発粒子ビット列が出力可能である。個々の計算では、ある確率に従って、複数の可能性のうち、ただひとつの出発粒子ビット列を確定すればよい。このような計算上の特徴は、量子ビットを利用した“ゲート型量子計算機”の計算特性¹⁹⁾そのものである。すなわち、量子力学が適用される世界では、状態変化は、多世界において同時並行的に進行し、観測した瞬間に、確率的にどれかひとつの世界の変化結果を得る。

量子計算機については、現在、世界各地の各種大手企業や大学等で、実用化に向けた開発研究が進められており、公開利用も始まっている。筆者が利用を期待している“ゲート型量子計算機”については、“量子もつれ現象”によって相互連携できる量子ビットの数がまだ小さい。しかし、Googleが2019年に「最速のスーパーコンピュータが1万年かかるある問題を量子コンピュータがわずか200秒で解ける」ことを示して有名になったIBMのQシステム¹⁹⁾では、53量子ビットでもこの性能を出せた。また、「格子ガス法のビット演算は量子ビット計算に直接移行しやすい (cf.図7)」、 「物理量を統計平均的な計算で求める格子ガス法では、量子計算機のエラー率がゼ

ロでなくても、それなりの信頼性を確保できる」など格子ガス法特有の量子ビット計算との相性の良さがある。将来の低消費電力超並列計算の実現に向けた量子計算機利用の可能性が大いに期待できる。

仮想粒子の衝突散乱の計算 (例) $d + e \leftrightarrow f + g$

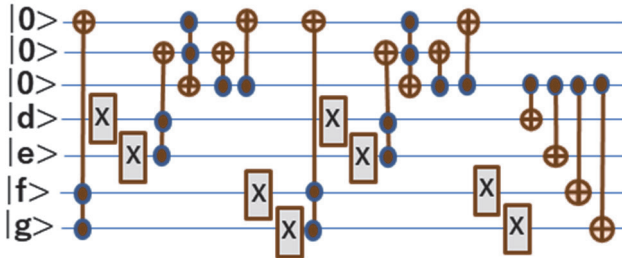


図7 ゲート型量子計算機の計算イメージ

[俯瞰的視点] 脳型コンピューティングに注目

2.1に述べた3つの事例のうち、システム自身が自然環境の影響を受けて最もダイナミックな運動をするのは、“帆走型洋上風力発電船”であろう。このような状況下でも、人間（ヨット等の達人）は、適切な操船をリアルタイムでやってのけてしまう。そこで、人間の脳が行うような“脳型コンピューティング”にヒントを求めることとした。

現在は、人工知能（AI）に関する第3回目のブーム到来時期である。そのきっかけは“深層学習”の成功であったが、AIについては、ずっと以前より、いろいろな角度から様々な研究がなされてきた。しかし、脳の機能の本質的な発現機構の解明にはまだまだ到達してはいない。

他方、実際の脳における機能の発現機構とは異なっていたとしても、その機能に似た特性を発現できるようなシステムが開発され、工学的応用規模まで発展し、さらに社会で広く普及した技術もある。その代表的な事例として、ここでは、「ファジィ推論」と「多層パーセプトロン学習」に注目する。

5. マルチフィジクスな連成の実現を目指して (物理挙動を直感する簡易モデルの提案)

5.1 仮想粒子描像で異なる物理も同じ計算

ファジィ推論の本質は、ファジィ推論規則そのものにあるのではなく、その規則を人間が導くにあたって、その分野の専門家等が、頭の中で大雑把に描く“イメージモデル”にある。この“イメージモデル”は、考察の対象となる現実の複雑なシステムそのものではない。簡単で、多くの場合ビジュアルなイメージモデルである。ただし、その分野の専門家

等であれば、このイメージモデルの挙動を想像することによって、実際のシステム挙動を直感的かつ半定量的に導出することが可能である。すなわち、時間発展計算を駆動する微分方程式等の“代理”の役割を果たす“サロゲートモデル”になり得る。そこで、AIサロゲートモデルの第1条件を「物理挙動の因果関係を半定量的に推測できる簡単なイメージモデルであること」と考えた。

ここでは、「簡単なイメージモデル」の具体例として、“仮想粒子描像”を採用する。格子ガス法に基づく仮想粒子の“衝突散乱”と“並進移動”というイメージモデルは、それ自体、汎用的な“仮想粒子描像”であり、いろいろな物理現象に対応させることができる。例えば、ある領域の格子点群に対して、「どんな向きから到着粒子がやって来ても、その粒子が来た向きに戻るよう反転させる」という衝突散乱規則を適用したとする。この場合、その領域内に存在する仮想粒子は、時間平均で静止するので、マクロ的には、固定された固体領域を表現していると解釈できる。流体の挙動も固体の挙動も同じ計算で模擬できる一番簡単な例である。

5.2 流固体連成解析で連成起因の遅延ゼロ

さて、上記のような固体の特性を発現する衝突散乱規則を適用する格子点の位置を、「周辺から到着する仮想粒子が衝突散乱過程でその格子点に与える“力積”の大きさと向き」に応じて移動させることを考える。うまく調整すれば、弾性体の変形も模擬可能であろう。このように、マルチフィジクスな物理現象を、粒子間の相互作用という統一的な“シングルフィジクス”で解釈し、時間発展計算を流体固体の区別なく同じ計算によって行う。こうすれば、すべてが流体だった場合の計算時間と比べて、本質的な遅延はないはずである。

なお、現在、このような“仮想粒子描像”で、一番成果を挙げているのは“粒子法”⁸⁾であろう。粒子法では、ひとつひとつの流体塊について運動方程式を解き、時間の経過に従って個々の流体塊がどのように移動するか？を求める。このため、「流体の大きな変形」や「衝突による流体の分裂」なども模擬できる。すなわち、物質を小さい塊の集合体としてモデル化するので、物質の運動や形状の大きな変化を自由に扱える。このため、流体解析のみならず、構造解析、固体解析などへ広く応用されている。

“粒子法”において流体塊（仮想粒子）が自由に動ける本質的な理由は、仮想粒子が存在できる位置を拘束する格子がない“メッシュレス解法”であるからである。他方、“格子ガス法”の場合、仮想粒子が存在できる位置は、規則正しく配置された格子

点上に限られる。しかしながら、仮想粒子の移動が格子軸の方向に限定されるわけではない。例えば、前述した“テシャラのFCHC54速度モデル”の場合、各格子点から48個の異なる向きに仮想粒子が飛び出すことができ、かなり自由な動きが可能である。従って、“粒子法”によるマルチフィジクスシミュレーションの成功事例があれば、その工夫をそのまま準用して恩恵を得ることができるはずだと考える。

5.3 出発粒子群への連行確率で粘性を制御

さて、仮想粒子は、実際には、極めて多数の実在分子を代表している。衝突散乱前後の“到着粒子”や“出発粒子”も、実は、多数の実在分子が集団行動している粒子群である。また、液体の場合、その密度は固体の密度とさほど違いはない。気体の場合でも、マッハ数が小さければ、非圧縮性流体のように振る舞う。すなわち、実在分子は、多くの場合、非常に密集しながら移動しており、どこかに空きスペースができればそこを埋める動きが生じる。このイメージを膨らませると、例えば「前回の衝突散乱である向きへ出発した仮想粒子が存在すれば、今回の衝突散乱で別の向きに向かって飛び出そうとした仮想粒子があっても、前回の出発粒子群の流れに引き込まれて、その向きに強制連行される実在分子が増えるであろう。」という“ファジィ推論”も可能である。これは、今回の出発粒子が前回の出発粒子の向きに同期して連行される確率が増すことを意味している。筆者は、多数のケーススタディにより、この“同期連行確率”を変化させることによって流体粘性を広範囲に制御できることを確認している²⁰⁾(cf.図8)。なお、この制御では、時間平均で運動量保存が成立するように注意する。また、負の粘性の発現(静止流体からの自発的な渦発生)も可能である。

ものづくりのための流体力学では、実験・試作スケールのレイノルズ数から、実機スケールのレイノルズ数までを連続的にシミュレーションできると、予測の信頼性が向上し、自信をもった工学設計が可能になる。この意味で、簡単な方法で幅広い範囲の流体粘性を実現できるメリットは大きい。

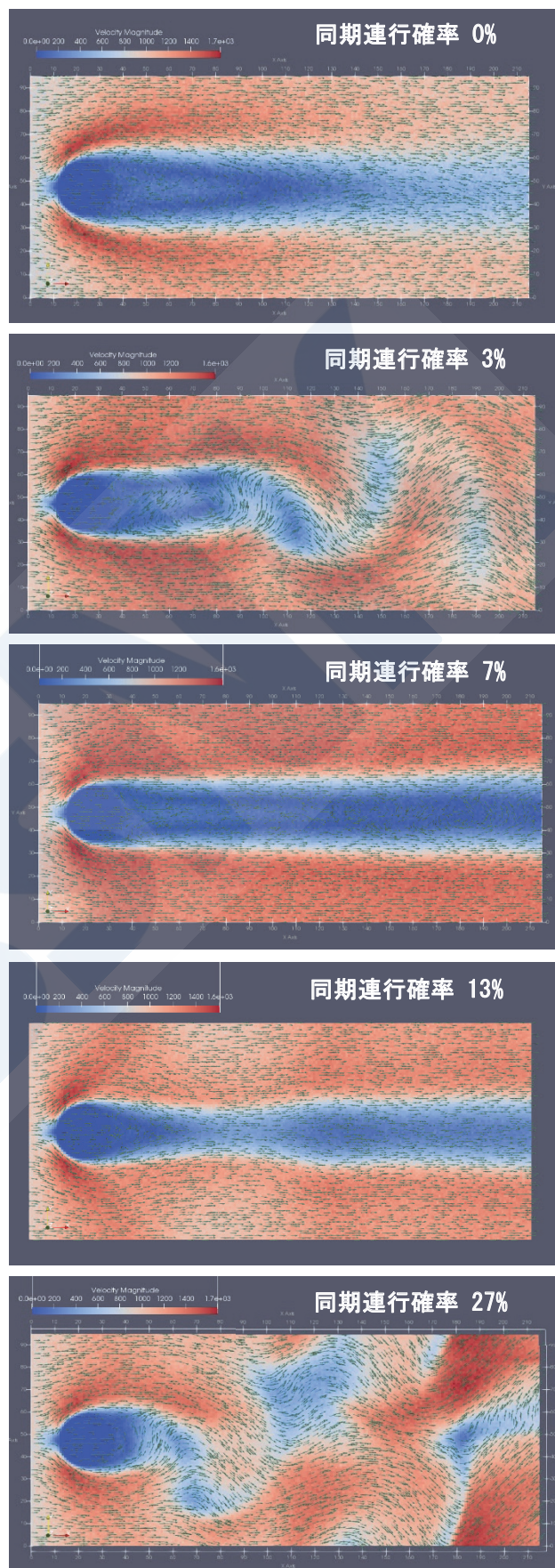


図8 同期連行操作の確率変化による粘性制御²⁰⁾

5.4 粒子法の成果で亀裂の発生進展を予測

粒子法の応用では、動的弾性解析やクラック進展解析のシミュレーションも実施されている⁸⁾。物質を構成する小さな物質塊が分離することで、クラックの成長を模擬できる。粒子法の例では、応力が集中して、物質粒子のミーゼス応力（あるいは歪）が、その材料物性値である破壊応力（あるいは破壊歪）に達するとその粒子が破壊すると考える。そして、破壊した粒子は、応力のやりとりができなくなってクラック面を形成する粒子になる。この計算法を、格子ガス法の仮想粒子で実現する工夫をすればよい。現実の風車等の構造物では、亀裂の発生によるトラブルがしばしば発生している。流固体連成解析において、亀裂の発生進展の予測までを可能にすることは、実用上大きなメリットがある。

6. リアルワールドへの即応の実現を目指して (学習計算を装備する簡易モデルの提案)

6.1 再帰ニューラルネットで遅延ゼロ学習

“多層パーセプトロン（階層型ニューラルネットワーク）”は、社会利用が最も進んでいる人工ニューラルネットワークである。“深層学習（Deep Learning）”を実行できるタイプのニューラルネットワークもこれに含まれる。多層パーセプトロンの学習機能は、第2回目のAIブーム到来のきっかけになった“誤差逆伝搬法”である。その一般論と工学的応用は、このとき既に確立している。

格子ガス法では、マクロな物性値は、その近傍に存在する仮想粒子がもつ質量や運動量などの合計または統計平均から得られる。この合計または平均の計算も、多層パーセプトロンの計算構造で表現できる。従って、時間発展を計算するニューラルネットワークの階層構造の中には、「マクロな物性値を出力する多層パーセプトロン」も存在する。

また、その計算出力値を実測データに整合させた場合は、計算出力値と実測目標値の差が出た原因を逆にさかのぼって、そのさかのぼりパス上に位置するニューロンの重みを上述の“誤差逆伝搬法”の手順に従って修正する。この繰り返しで、計算出力値を教師データである実測目標値に近づけていくことができる。すなわち、多層パーセプトロンの後段から前段にデータをリカレントさせる計算構造（リカレントニューラルネットワーク：再帰ニューラルネットワーク：RNN）を構築できれば、“データ同化”の手段を自動的に獲得できたことになる。そこで、AIサロゲートモデルの第2条件を「学習機能をもつ再帰ニューラルネットワークの計算構造に置換で

きるモデルであること」と考えた。

ここで、時刻 t における計算出力値と実測目標値の差から導出した新しい重みは、時刻 $t + \Delta t$ 以降の時刻における計算に反映される。過去にさかのぼって計算しなおすわけではない。従って、この方法では、「計測データをシミュレーションにフィードバックすることが原因で、もとの時間発展計算を遅延させることはない。」という点が重要である。

6.2 時間発展計算を停止せずにデータ同化

前節で述べた方法を、格子ガス法の計算を行う多層パーセプトロンに適用すれば、時間発展計算を停止せずにデータ同化を実現できる。この場合、多層パーセプトロン構造のすべての計算は、実数を使わずに微小整数の範囲で実行できることを次に示す。

まず、物理空間中に規則正しく格子点を配置し、“各格子点が多層パーセプトロンを内蔵している”と考える（cf.図9, 10）。格子ガス法54速度モデルの場合は、6個は静止粒子なので動くことができない。従って、近傍に位置する最大48個（ $=54-6$ ）の格子点からやってくる“到着粒子”が存在し得る。このときの存否情報が、例えば、到着粒子が存在する場合「1」、存在しない場合「-1」、不明の場合「0」として、“多層パーセプトロン”の入力層に入力される。そして、ニューラルネットの“積和しきい値計算”によって算出された値（1, -1）が出力層に現れる。この情報が「1」のとき、当該格子点からの出発粒子が存在し、「-1」のときは出発粒子が存在しない。

なお、空間中のある場所で観測されるべきマクロな物理量は、その場所を中心とした適切な近傍に存在する仮想粒子がもつ質量・運動量・エネルギーの総和から算出する。従って、この計算を行うニューラルネットにおいても、微小整数しか現れてこない。

さらに、仮想粒子が移動する可能性のある格子点どうしをすべて結べば“流れ場全体”もニューラルネットワークで表現でき、その時間発展計算を実行できる。すなわち、“流れ場”の変化は、“ニューラルネットワーク（多層パーセプトロン）を内蔵した空間格子”とその格子点（ニューロン）間を移動する“仮想粒子”の集団挙動として理解できる（cf.図11）。

また、前節で述べたとおり、現実世界のいくつかの空間位置で計測データが得られる場合、それぞれの位置の近傍格子点に内蔵された“多層パーセプトロン”において誤差逆伝搬法を実行し、計算出力値を実測データに整合させることができる。このとき、多層パーセプトロンの入力データに乗じる“重み”の値も、（1, 0, -1）のいずれかの値しかとらない

と仮定する。学習によって調整するものは、それらの重みの適用確率である。要するに、1回1回の重み調整は、(1, 0, -1) の選択で大雑把に行い、微調整は、これらの重みの適用確率を調整することで実現する。このような重みの調整を継続すれば、実測データの変動状況にもよるが、シミュレーションデータが実測データにそれなりに整合してくると期待できる。

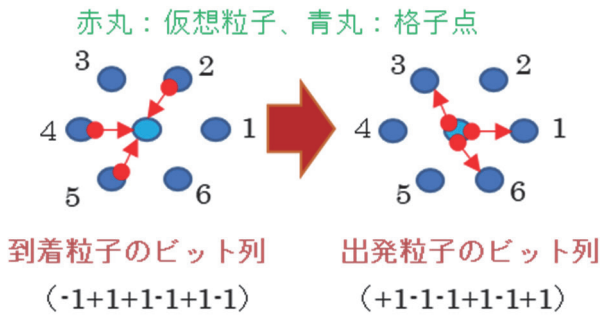


図9 衝突散乱による存否情報の変化²⁰⁾
(2次元格子ガス法FHPモデルの場合)

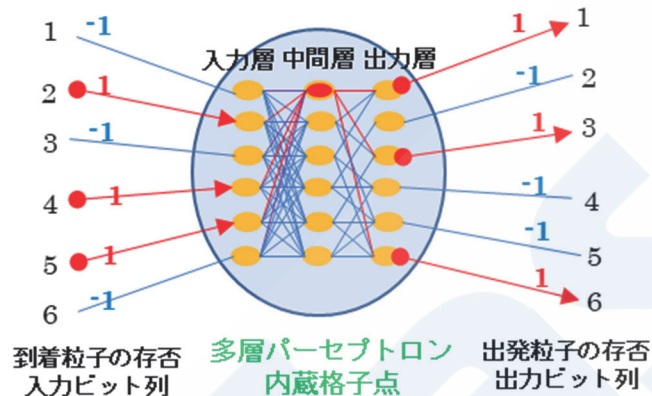


図10 衝突散乱を計算する多層パーセプトロン²⁰⁾

図10で、入力層は入力値±1をそのまま中間層に伝える。中間層は入力ビット列を識別する。例えば、中間層の一番上の赤色ニューロンにおいて、赤線入力に+1、紫線入力に-1の重みを設定すれば、上から紫(-1)→赤(+1)→紫(-1)→赤(+1)→赤(+1)→紫(-1)の重み列になる。このとき、入力層への入力ビット列がこの重み列と一致するときのみ積和が最大値(6)になる。これを中間層ニューロンの活性化関数をしきい値=6の階段関数にして識別する。このニューロンの出力は、出力層のうち活性化すべきニューロン1, 3, 6にだけ接続しておく。出力層のニューロンは、接続されているシナプスの入力重みをすべて+1に設定し、活性化関数をしきい値=-1の階段関数にする。このことで、いずれかひとつでも入力が+1になれば活性化(出力=+1)する。実際の適用時には、このような階層を多段に重ねて適用する。なお、衝突規則を確率的に

適用する場合は、入力層のニューロンを増やし、±1の入力をランダムに与える。

RNNの時間展開 (2次元の場合のイメージ)

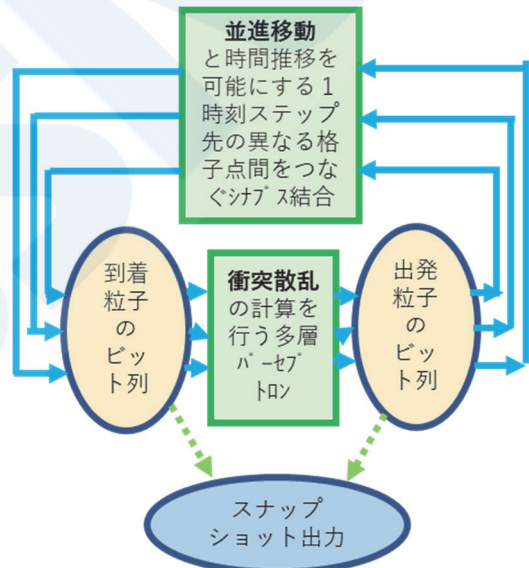
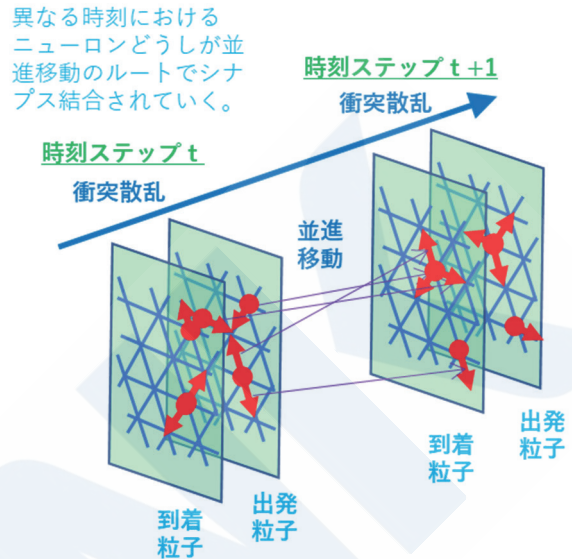


図11 流れ場全体のニューラルネットワーク²⁰⁾

6.3 不完全な実世界計測データも頑健学習

現実世界から得られる実測情報は、計測システム設置上の制約や故障の発生などにより、すべての境界における完全なデータ取得は通常不可能であり、かつ、誤ったデータを含み得る。

ニューラルネットワークは、一般的に、多数の入力値の重み付き加算とそのしきい値演算の繰り返しである。従って、あるニューロンのひとつの入力値となるべきデータが欠損したり誤った情報入力になったりした場合でも、途中で、その影響が排除される可能性が高い。このような計算過程における“頑健性(頑強性, ロバストネス)”は、実測情報の不

完全さが時空間的に分散して生じる場合は、それなりの効果を期待でき、リアルワールドのデータ処理に好都合である。

【俯瞰的視点】微分方程式解法を離れてみること

現実世界（リアルワールド）における流体力学解析を考える際に最も重要なことは、「将来における境界条件の変化を事前に予測できないこと」であろう。境界条件は、境界の外側（外界）の状態変化の影響を受ける。従って、外界も含めたすべての環境が正確にシミュレーションされていない限り、事前に予測できないのは当然である。このため、どんなに精度よく現実に一致する初期条件で計算を開始できたとしても、外界の情報をフィードバックすることなく、現実世界における未来の状態をいつまでも精度よく予測し続けることはできない。このような大前提に立つと、リアルワールドへの対応を重視する場合、「微分方程式をできるだけ精度よく解く」という従来のアプローチを離れ、「人間の脳が行うような機能を模擬し、大雑把な高速推論と外界計測情報に基づく迅速なフィードバック補正」という

AI的なアプローチで時間発展計算を代替できないだろうか？と考えるのは、自然な発想であろう。

6.4 次元圧縮した状態量分布間で高速計算

AIと言えば、現在は、最初に思いつくキーワードは“深層学習”である。そこで、はじめに、格子ガス法ではなく、通常の数値流体力学（CFD）をベースにして、“深層学習”を応用した“AIサロゲートモデル”の概念を考えてみる（cf.図12）。

マルチスケール解析を克服するため、まずは、非常に大規模な計算ができるというスーパーコンピュータのcapability性能を活かし、ナビエ・ストークス方程式（NS方程式）等に基づく高解像度な時間発展計算を行う。これにより、1回の計算でも、「時刻 t における詳細な流速空間分布」と「時刻 $t + \Delta t$ における詳細な流速空間分布」のセットを非常に多数得ることができる。次に、中規模な計算であれば非常に多数の計算を並列実行できるというスーパーコンピュータのcapacity性能を活かして、上記の計算で得られた各時刻の流速空間分布（速度ベクトルの各成分を表す3つの数値の巨大な3次元配列）を深層学習により次元圧縮する。次元圧縮によ

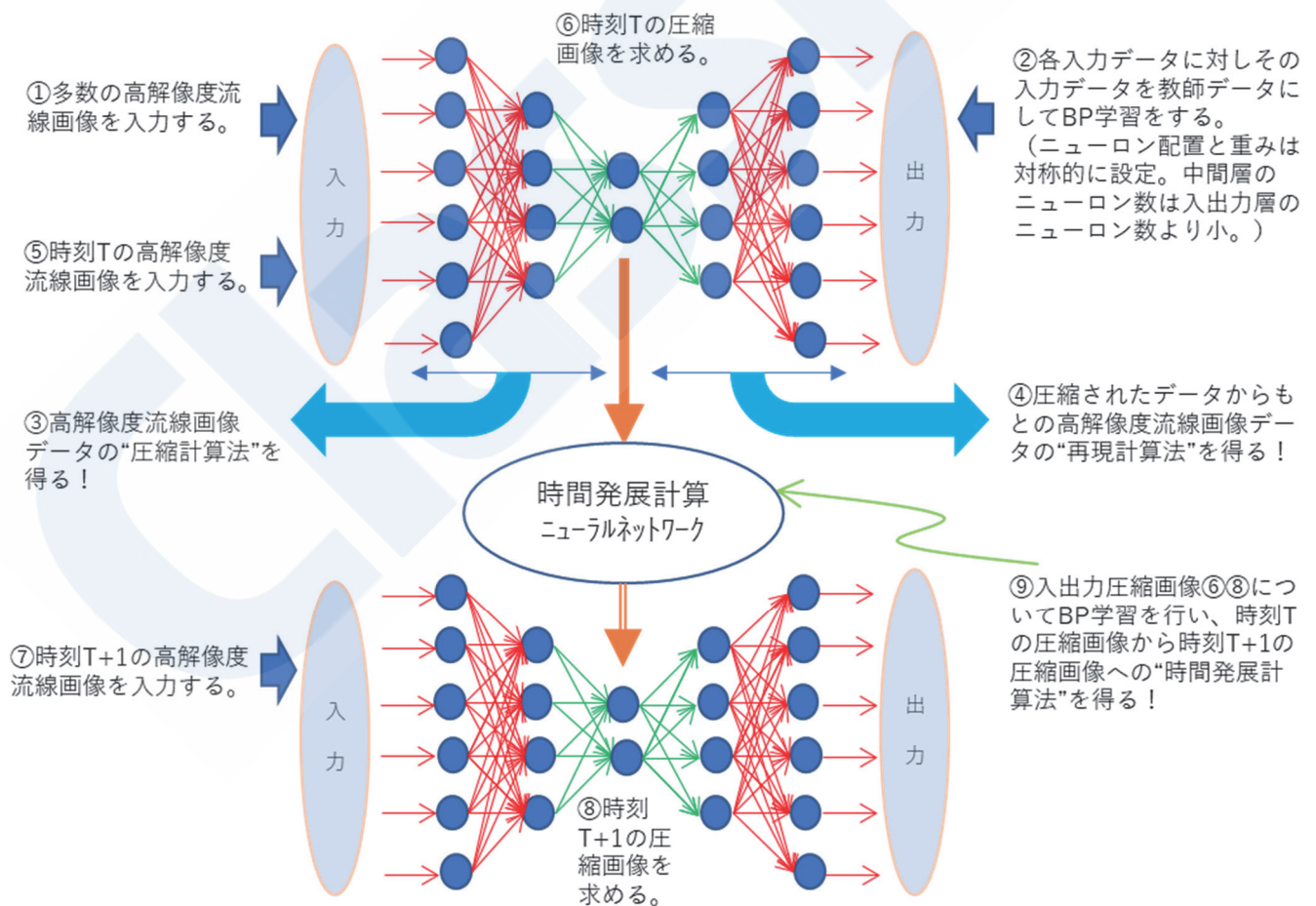


図12 情報圧縮型時間発展計算

って、必要な記憶容量を大きく削減できる。

ただし、次元圧縮で得られた数値配列は、ニューラルネットワークの計算によって機械的に学習されたものであるため、その数値分布を見ても人間の直感でその物理的な意味を理解することはできない。最後に、次元圧縮した時刻 t と時刻 $t + \Delta t$ における流速空間分布のセットを入出力データとしてニューラルネットワークに学習させる。このときの入出力データセットは非常に多数あるが、次元圧縮されているので、ひとつひとつの学習に要する計算規模は中規模で済む。

以上の結果、次元圧縮された流速空間分布についての時間発展計算法が、ニューラルネットワークの計算法として学習されたことになる。これが、NS方程式による時間発展計算を代替する“AIサロゲートモデル”のひとつの概念である。

なお、この“AIサロゲートモデル”を用いて時間発展計算を行えば、各時刻で直接得られるデータは、やはり意味のわからない次元圧縮されたデータである。しかし、時間発展計算の過程で、我々がそのスナップショットを知りたいときはいつでも、次元圧縮の逆計算によってもとの高解像度レベルで物理的な意味のわかる流速空間分布を復元できる。

以上のような“情報圧縮型時間発展計算”は、格子ガス法によって得られたデータにもそのまま適用できる。これを、1ピクセルが54ビット情報で表現された多次元画像の画像認識や情報圧縮の問題だと考えてもよい。このような情報圧縮された画像間の時間発展計算法は、より高解像度の流体挙動をより高速に実行する可能性を拓く。このとき、計算法の直感的な意味を理解できなくなったとしても、リアルタイム制御の段階では、試行錯誤の検討が必要な設計段階とは違って、特に困らないとも言える。

リアルワールドへの即応というニーズは、システムの運用時に生じる。この場合は、スーパーコンピュータなどに頼らず、計測データを取得できる現地で、システム内部に組み込めるようなコンパクトな独立したコンピュータ、あるいは、インターネット接続可能なIoTエッジコンピュータのような形態の方が理想であろう。今後のAI研究によって、深層学習を超えるような工学的にも社会的にも大きなインパクトを与える革新的なアルゴリズムが発見されるかもしれない。また、AIアルゴリズムを高速に実行できるプロセッサの開発もなされるかもしれない。いずれにしても、流体計算をニューラルネットワークの計算構造に置換できることは、今後のAI研究の成果を直ちに適用できる点で楽しみである。

7. まとめ

ものづくりをめぐる流体力学解析の数値シミュレーションについては、はじめにその物理現象を支配する微分方程式を設定し、次に、その時間発展を計算するという方法が通常採用されている。これは、最も合理的で信頼できる方法であるが、現実世界の応用では、はるかに高性能なシミュレーション性能が求められつつある。本稿では、この飛躍的な性能向上を実現するため、従来からの“微分方程式の解法”という王道を離れ、微分方程式の代役をなす“AIサロゲートモデル”について検討し、ひとつの可能性を紹介した。散文的な記述スタイルをとったため論旨を明快に表現できていない部分もあるので、最後に、その骨子をまとめておく。

ものづくり流体力学のための“AIサロゲートモデル”

(1) 今後の風力エネルギー利用拡大と流体解析

【現在の状況】 風力等の流体力学で高解像予測が必要

(2) 夢の目標設定とバックキャスト思考の試み

【野心的目標】 1次元あたり5~6桁幅が理想の解像度

(3) マルチスケール高速計算の実現を目指して (実数表現を全廃する簡易モデルの提案)

【挑戦的行動】 疎密格子に1格子点1ビット幅の演算



【直接的結果】 ベクトルコアで16384格子点一括計算

【付加的結果】 実数全廃計算でどんな乱流も値を算出

【近未来結果】 量子計算機なら多世界確率ビット演算

(4) マルチフィジクスな連成の実現を目指して (物理挙動を直感する簡易モデルの提案)

【挑戦的行動】 仮想粒子描像で異なる物理も同じ計算



【直接的結果】 流固体連成解析で連成起因の遅延ゼロ

【付加的結果】 出発粒子群への連行確率で粘性を制御

【近未来結果】 粒子法の成果で亀裂の発生進展を予測

(5) リアルワールドへの即応の実現を目指して (学習計算を装備する簡易モデルの提案)

【挑戦的行動】 再帰ニューラルネットワークで遅延ゼロ学習



【直接的結果】 時間発展計算を停止せずにデータ同化

【付加的結果】 不完全な実世界計測データも頑健学習

【近未来結果】 次元圧縮した状態量分布間で高速計算

謝辞

本稿で述べた研究の実施にあたっては、“AIサロゲートモデル”の候補となるモデルを考案するたびに、東北大学サイバーサイエンスセンターのベクトル型スーパーコンピュータ（SX-9, AOBA-A(SX-Aurora-TSUBASA)等）を利用して多数のパラメータスタディを行った。同コンピュータは、1格子点1ビット幅演算による超並列計算の性能を発揮しやすく非常に使いやすい。このような最先端のベクトル型コンピュータの利用環境を長年にわたり整備維持されるとともに、その利用時には、いつも親切なご指導とご協力をいただいたことについて、同センターの関係各位に心から感謝申し上げる次第である。

参考文献

※本稿は学会論文ではなく解説なので、参考文献としては、原著論文よりも解説的な文献を優先して挙げている。

- 1) 商船三井：“商船三井グループ 環境ビジョン 2.1”，商船三井のHP。
(<https://www.mol.co.jp>)
- 2) Kanda, Y. & Ishihara, T. “High-resolution direct simulation of turbulence”, *J. of Turbulence*, 7, pp.1-17, 2006
- 3) 松尾：“チャンネル流”，*ながれ* 22, pp. 35-40, 2003
- 4) 坪倉：“「京」が変える車の開発プロセス”，*計算科学の世界* No.6, 理化学研究所計算科学研究機構, 2013
- 5) 西川：“「京」の中で船を走らす”，Vol. 14, 京算百景, RIST, (hp150005：乱流の直接シミュレーションによる曳航水槽代替技術の実用化), 2015
- 6) 吉村ら：“スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用”，*クリーンエネルギー「富岳」プロジェクト*, 「富岳」成果創出加速プログラム
- 7) 徳田, 松岡：“実時間・超高速計算—計算機の新しい利用技術の開拓に向けて—”, *RIST News* No.52, pp.13-21, 2012
- 8) 矢川, 酒井：“粒子法 基礎と応用”, 2016, 岩波書店 (ISBN 978-4-00-006150-6)
- 9) B. Haaslachner, U. Frisch, Y. Pomeau: “Lattice Gas Automata for the Navier-Stokes Equation”, *Physical Review Letters* Vol.56, No.14, pp.1505-1508, 1986
- 10) Uriel Frisch, Dominique d’Humières, Brosl Hasslachner, Pierre Lallemand, Yves Pomeau, Jean-Pierre Rivet: “Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions”, *Complex Systems*, 1 (1987), pp.649-707, 1987
- 11) Robert P. Bosch, Jr.: “A Multigrid Algorithm for Lattice Gases”, MIT, 1993
- 12) Christopher M. Teixeira: “Continuum Limit of Lattice Gas Fluid Dynamics”, MIT, 1993
- 13) 松岡：“ビット演算によるCFDと等価な高精度流体解析手法”，*RIST News* No.64, pp.17-28, 2018
- 14) 松岡：“リカレント型ビット演算による縦渦挙動のマルチスケール創発解析”，*萌芽課題研究 EX21204*, 第13回JHPCNシンポジウム, 2021
- 15) 松岡：“流体解析における時間発展計算のAIサロゲートモデルの追求”，*SENAC* Vol.55 No.1, pp.15-28, 2022
- 16) 大木, 菊池, 松岡, 菊池, 板倉, 廣川, 西川, 岩沢, 浅野, 斎藤, 緒方：“人工的な仮定を極力排除した物理モデルに基づく非熱流体シミュレーションコードの開発”，*地球シミュレータ産業戦略利用プログラム*, pp.89-99, 平成26年度利用成果報告書, 2014
- 17) 松岡, 峯尾, 横川, 瀧塚, 伊賀崎, 渡辺, 板倉, 福田, 菊池, 小林, 江川, 竹村, 菊池, 東田, 青柳, 高見, 小林：“計測融合オペレーション実現のための大規模計算機空気冷却風速場の実時間解析”，11-MD05, *JHPCN最終報告書*, 2012年5月
- 18) Daniel H. Rothman: “Negative-Viscosity Lattice Gases”, *Journal of Statistical Physics*, Vol.56, Nos. 3/4, 1989
- 19) Rudy Raymond, 今道：“最先端の量子コンピュータ「IBM-Q」”，pp.50-59, *ProVision* No.92, 2017
- 20) 松岡：“格子ガス法流体解析モデルとニューラルネットワークの融合”，*SENAC* Vol.54 No.1, pp.39-49, 2021