

計算科学技術部会セッション

人工知能技術の活用と将来展望

Application of Artificial Intelligence Technologies and its Future Prospects

(2) 計算力学シミュレーションを機械学習に置き換える技術の基礎的検討

(2) Preliminary Study of Technology for Replacing Computational Mechanics Simulation with Machine Learning

*中林 靖¹, 増田 正人², 田村 善昭¹¹東洋大学, ²東京大学

1. 緒言

近年の第3次人工知能ブームもしくは深層学習(Deep Learning)ブームにおいては様々な先端的な手法が提案されているが、中でも画像認識コンペティション[1]や Google の猫[2]などに代表される畳み込みニューラルネットワーク(CNN: Convolutional Neural Network)[1][2]を用いた画像認識技術、また、再帰型ニューラルネットワーク(RNN: Recurrent Neural Network)[3]およびそれを拡張した長期短期記憶(LSTM: Long Short-Term Memory)[4]を用いた時系列データの学習技術は大きな成功を収めている。

一方、数値解析分野では超大規模解析や連成解析、マルチスケール解析などの計算機パワーを活かした高精度解析や複雑形状の解析などが盛んに行われている[5][6]。しかし、超大規模解析や複雑な解析には多くの時間を要し、1ケース数日から数週間も計算に時間がかかる場合もある。そこで、予めある程度の解析結果を知ることができれば、得たい情報の詳細な解析への手がかりを得ることができ、解析の試行回数削減により、トータルの解析時間の短縮につながると考えられる。

本研究では、深層学習を用いた解析結果予測を最終目標として、ある解析時刻の状態から次の時刻の状態を予測するネットワークを構築する。数値解析では、解析結果は物理量を節点上に持つため、空間的な意味合いが非常に重要である。そのため、従来の LSTM では取り扱えていなかった空間情報を考慮した学習モデルである Convolutional LSTM(ConvLSTM)[7]を用いる。ConvLSTM は動画像から未来の画像を予測するために開発されたネットワークであるが、ここでは空間情報を節点情報とし、物理量は Convolutional 層の入力チャンネルとして対応させることで解析結果の予測を行うことが可能であると考えられる。本稿では、数値解析結果予測のために ConvLSTM を用いることを提案する。今回は解析結果予測することが可能であるかを検討するため、解析結果の渦度と圧力場を可視化した画像を用いて学習を行った。可視化画像を用いることで解析結果の物理量の一部を表現することができ、コーディングの単純化と学習の高速化が図れる。学習済みモデルを用いて解析結果を予測し、正しい画像と比較し、提案方法の有用性を示す。

2. Convolutional LSTM [5]

時間的な状態情報をもとに未来の状態を推定する方法の一種に LSTM がある。LSTM は従来 1 次元の特徴量情報を再帰的に呼び出し、予測時の入力情報として入力データとマージして扱う。Convolutional LSTM(以下 ConvLSTM) では従来 1 次元の特徴量情報を 2 次元の Convolutional 層に拡張し、空間情報として過去の入力情報を記憶することができる。つまり、シーケンシャルに空間情報を追跡することが可能となる。ConvLSTM の各ゲート及び活性化関数を以下に示す。

ここで、 X は入力群、 H は隠れ層状態、 C は cell の出力を表し、 i, f, o はそれぞれ input, forget, output のゲートを表す。これらの変数は 3 次元のテンソルであり、時刻 t と 2 次元の空間情報(row, column)を有する。計算記号である "*" は畳み込み積、"!*" はアダマール積を表す。

$$\begin{aligned}
 i_t &= \sigma(W_{xi} * X_t + W_{hi} * H_{t-1} + W_{ci} ! C_{t-1} + b_i) \\
 f_t &= \sigma(W_{xf} * X_t + W_{hf} * H_{t-1} + W_{cf} ! C_{t-1} + b_f) \\
 C_t &= f_t ! C_{t-1} + i_t ! \tanh(W_{xc} * X_t + W_{hc} * H_{t-1} + b_c)
 \end{aligned}$$

$$o_t = \sigma(W_{x0} * X_t + W_{ho} * H_{t-1} + W_{co} * C_t + b_o)$$

$$H_t = o_t * \tanh(C_t)$$

3. 検証実験

3.1 学習用数値解析データ

深層学習やニューラルネットワークの学習には大量の学習データが必要となる。一般的に ConvLSTM は画像データを入力し、画像データを出力する。本研究で用いる入力データも同様に解析結果を可視化した画像とし、出力データも解析結果を可視化した画像を用いる。この画像データを解析結果の物理量に置き換えることで、解析結果の物理量を予測することが可能であるが、簡単のため、今回は可視化画像データとする。解析モデルは2次元円柱周りの流体解析であり、計算領域を 1250×800 の直交等間隔格子を用いて解析を行った。解析手法は疑似圧縮性法を用い、離散化に3次精度風上差分を用いた。

学習データは解析結果の速度分布と圧力分布を可視化した画像データであり、100ステップ毎に1枚の画像を生成し、300枚の画像を収集した。画像サイズは 512×476 ピクセルで、256階調のグレースケールで表現することで、Convolutional 層のチャンネルを渦度と圧力場の2チャンネルとしている。画像は円柱と円柱後流の流れ場が捉えられるように 200×100 のサイズでトリミングを行った。本稿では過去4フレーム分の入力を与え、1フレーム後の未来の渦度ベクトル場と圧力場の2つの画像を予測するように学習データを生成した。

3.2 学習器の構成

本研究では、画像サイズ(200, 100)であり、入力画像は渦度ベクトルと圧力分布の可視化グレースケール画像で、チャンネル数は(2)となる。すなわち、入力ベクトルは(200, 100, 2)となる。本ネットワークは入力層から ConvLSTM を4層積層させ、最上層では3次元の Convolutional 層を配置した6層のネットワークを構築した。Fig.1 に1チャンネル分のネットワーク構造を示す。ConvLSTM のカーネルサイズはすべての層で (3×3) とし、3次元 Convolutional 層の入力は(20, 4, 200, 100)となり、カーネルサイズは $(3 \times 3 \times 3)$ とした。ストライドはすべての層で(1, 1)と(1, 1, 1)とした。損失関数はクロスエントリー、最適化には Adadelata を用い、誤差逆伝搬法に従って学習を行った。

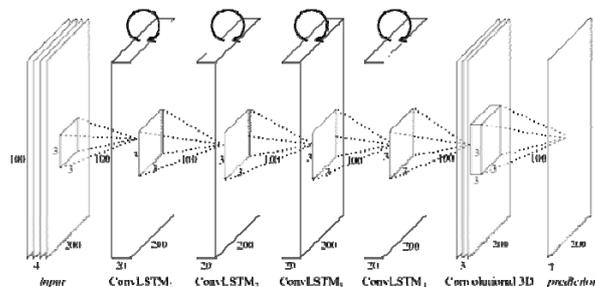


Fig.1 Convolutional LSTM Network Structure

3.3 学習結果

予測画像を Fig.2 に示す。Actual は正しい画像であり、Predicted は Actual に示されるような画像を前4フレーム分入力に与えて予測画像を生成している。本稿では学習済みデータの予測結果を示したが、未学習の学習データでも同様の結果が得られた。また、出力画像を MES(mean square error)と SSIM(Structural Similarity Index Measure)で評価した(Table 1)。MES は画像にどれだけ差が生じているかの指標であり、値が大きいほど差が大きい。

4. 結言

本研究では ConvLSTM を数値解析結果の予測に用いる手法について提案し、予備的な実証実験を行った。以下に、得られた結果をまとめる。

- (1) 過去4フレームの解析結果の可視化画像を入力に与え、次フレームの可視化画像を生成することに成功した。
- (2) MES と SSIM で評価を行った。SSIM で70%以上の類似度を示す結果が得られた。また、MES では1

ピクセルあたりの誤差が比較的小さいことがわかった。

(3) 当然、このままでは予測精度が低すぎて、数値解析の代替手法とはなり得ないが、数値解析の次のタイムステップの近似値の予測に用いて、ソルバーの初期値に使い収束を早めるなどの応用方法が考えられる。

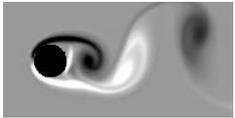
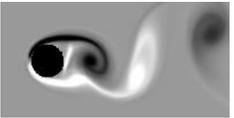
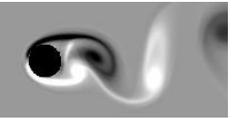
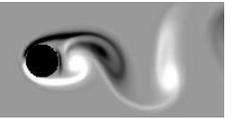
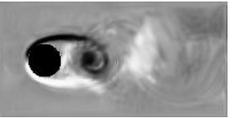
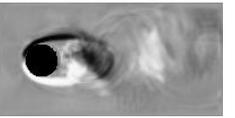
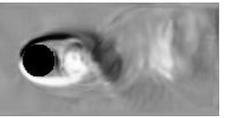
	t-1	t	t+1	t+2
Actual (Vorticity)				
Predicted (Vorticity)				

Fig.2 Prediction of Analysis Result using Convolutional LSTM

Table 1 Result of MES and SSIM

	t	t+1	t+2
MES (Vorticity)	357.922	361.254	322.959
SSIM (Vorticity)	0.728	0.722	0.723

参考文献

- [1] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, Geoffrey E. Hinton, ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks, NIPS2012, 2012.
- [2] Quoc V. Le, Marc'Aurelio Ranzato, Rajat Monga, Matthieu Devin, Kai Chen, Greg S. Corrado, Jeff Dean, Andrew Y. Ng, Building High-level Features Using Large Scale Unsupervised Learning, International Conference on Machine Learning, 2012.
- [3] Alex Graves, Abdel-rahman Mohamed, Geoffrey Hinton, Speech recognition with deep recurrent neural networks, IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, pp.6645-6649, 2013.
- [4] Klaus Greff, Rupesh Kumar Srivastava, Jan Koutník, Bas R. Steunebrink, Jürgen Schmidhuber, LSTM: A Space Odyssey, arXiv:1503.04069, 2015.
- [5] Xingjian Shi, Zhoung Chen, Hao Wang, Dit-Yan Yeung, Wai-kin Wong, Wang-chun Woo, Convolutional LSTM Network: A Machine Learning Approach for Precipitation Nowcasting, arXiv:1506.04214v2, 2015.

*Yasushi Nakabayashi¹, Masato Masuda² and Yoshiaki Tamura¹

¹Toyo University, ²The University of Tokyo