

# 敵対的生成ネットワーク(GAN)の工学応用の検討 —pix2pixによる高コストのシミュレーションの物理量分布図生成—

【概要】敵対的生成ネットワーク(Generative Adversarial Networks: GAN)の一種であるpix2pixにより、計算コストが高い場合と低い場合の数値流体力学(CFD)シミュレーションの結果(物理量分布図)を学習した。学習済みのpix2pixモデルに低コスト計算の結果を入力することで、高コスト計算の結果を予測できることを実証した。

【背景】工学設計においてCFDなどのシミュレーションは重要な役割を果たしている。シミュレーションでは、一般的に計算コストと精度はトレードオフの関係にある。より現実に近い解を得るためには、より複雑な物理モデルを組み込んだり、対象とする構造物や空間をより多くの格子点で表現する必要があり、計算時間が増大してしまう。計算コストの抑制は設計の効率化における一つの課題である。一方、近年の人工知能の進展は目覚ましく、様々な分野への適用が検討されている。その際によく課題として挙げられるのが、学習に用いることができるデータ数である。ビッグデータという言葉のとおり、多くのデータを準備できることが望ましい。その観点で、シミュレーションは計算機資源が許す限り、様々な条件のデータを準備することができるため、人工知能との相性が良いと考える。

【目的】シミュレーションデータを人工知能に学習させることによる計算コスト抑制の可能性を検討する。

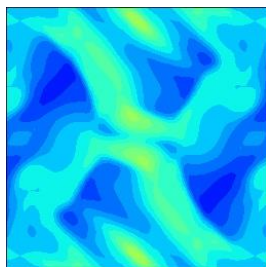
\* 詳細は省略。電磁流体シミュレーションの代表的なテスト問題であるOrszag-Tangの渦問題を解いた

【手法】本検討では、以下のような状況を仮定した。

- ・2次元CFDシミュレーション\*による密度分布の解析
- ・計算コスト—精度のトレードオフのコントロール因子として格子数  
(本検討では、ある物理条件に対して、 $57 \times 57$ の低解像度格子と $257 \times 257$ の高解像度格子の2通りで計算を実施。低解像度の場合の計算時間は、高解像度の場合の $1/72 \sim 1/108$ と非常に短い。)

人工知能により、図1に示すような密度分布(低解像度の場合と高解像度の場合の乖離)を学習する。学習ができたとなると、学習済モデルに低解像度格子の場合の密度分布図を入力すると、同一の物理条件下での高解像度格子の場合の密度分布を得られるのではないかと考えた。使用する人工知能のアーキテクチャは、画像生成が可能なGANの一種であり、画像を入力できるpix2pixとした(図2)。

低解像度格子



高解像度格子

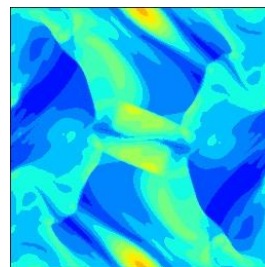


図1. 密度分布の1例

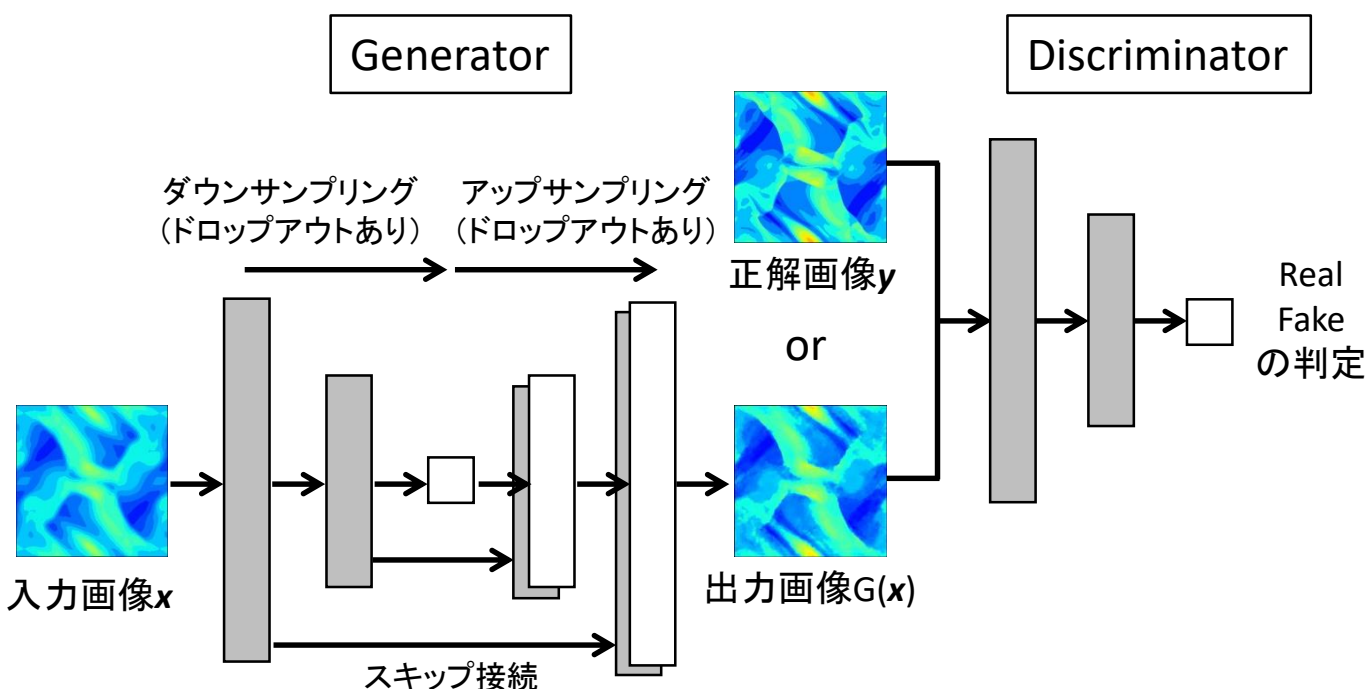


図2. pix2pixの概略

最適化アルゴリズムはAdamで、5000エポックの学習を行った。

**【データ】**学習データとして、15通りの物理条件 × 4通りの物理時間での密度分布図 120枚 (合計60通り、低解像度と高解像度あわせて120枚)、テストデータとして学習データとは異なる8通りの物理条件 × 7通りの物理時間での密度分布図 56枚を用いた。

### 【学習結果】

#### ①生成画像

低解像度格子の  
場合の密度分布

pix2pixが  
生成した画像

高解像度格子の  
場合の密度分布

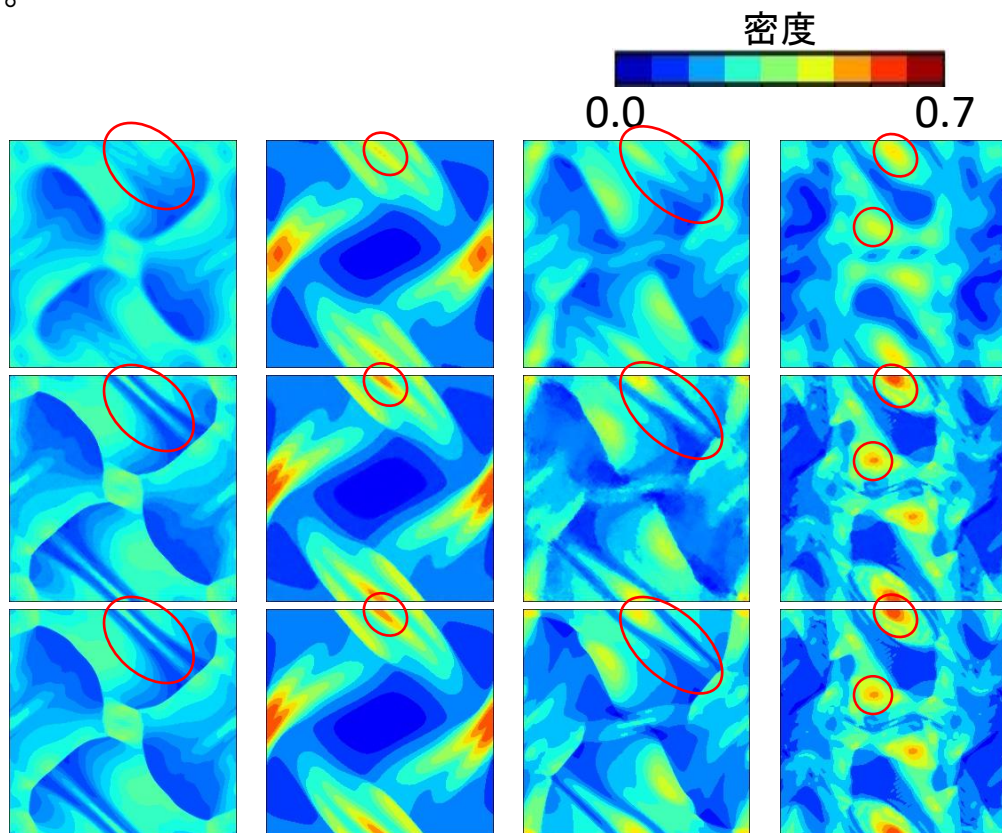


図3. シミュレーション結果とpix2pixにより生成された画像の比較

図3に、シミュレーションで得られた密度分布とpix2pixが低解像度格子の場合の密度分布をもとにして生成した画像を示した。低解像度格子の場合、格子数が少ないために、密度分布の細かい構造を捉えきれしていない。これは、数値粘性の影響で流体が拡散し、より一様分布に近い解が得られているためである。pix2pixは高解像度の場合と低解像度の場合の密度分布の乖離を学習し、低解像度格子の場合の密度分布に補正を加えて、画像を生成できている。

②定量評価(工夫した点の1つ目)

pix2pixにより、定性的には高解像度格子の場合の密度分布を再現した画像を生成できることが分かった。より良い画像の生成に向けて、生成画像の質を定量的に評価するための指標として、密度の不均質度を考える。不均質度は以下の式で定義した。

$$\alpha = \frac{\sigma_{\rho}}{\bar{\rho}}$$

ここで  $\bar{\rho}$  は密度の平均値、 $\sigma_{\rho}$  は標準偏差である。シミュレーションデータから不均質度を求めることは、全格子点での密度の値が分かるので可能である。しかし、pix2pixが出力するのはあくまで画像であるので、そのままでは不均質度を計算できない。そこで、密度分布の画像を入力して不均質度を予測する4層ニューラルネットワークを構築した。高解像度格子の場合の密度分布図を入力にして、全格子点での密度から計算した不均質度を予測するように学習した結果を図4に示す。決定係数( $R^2$ )は0.998であり、密度分布図から十分な精度で不均質度を予測できると判断した。この予測モデルに低解像度格子の場合の密度分布図を入力して得られた不均質度を図5に示す。横軸の値は、同一の物理条件を高解像度格子で計算した場合の不均質度である。先述した数値粘性の影響により、高解像度格子の場合よりも不均質度が小さい(均質に近い)傾向が見られる。

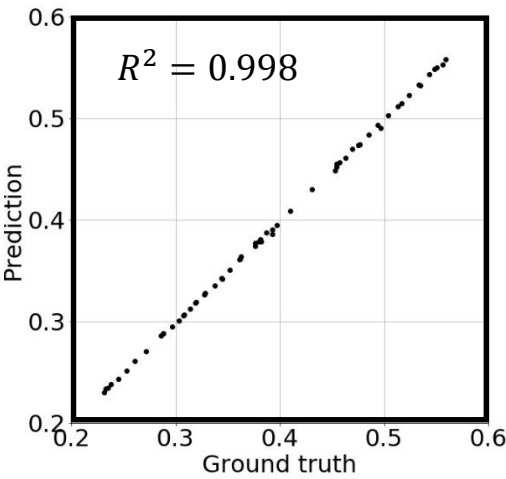


図4. 密度分布図からの不均質度の予測結果

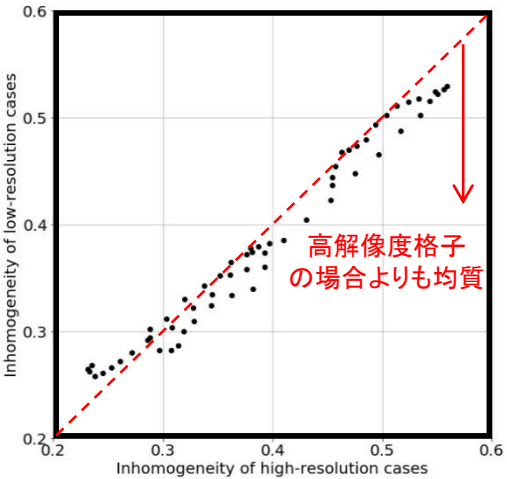


図5. 低解像度格子の場合の不均質度

低解像度格子の場合の密度分布図をpix2pixに入力して生成された画像を、不均質度の予測モデルに入力して得た結果を図6に示す。図5と同様に、横軸は高解像度格子で計算した場合の不均質度である。pix2pixにより生成された画像は、密度の不均質度を評価するにも十分な質であると考ええる。

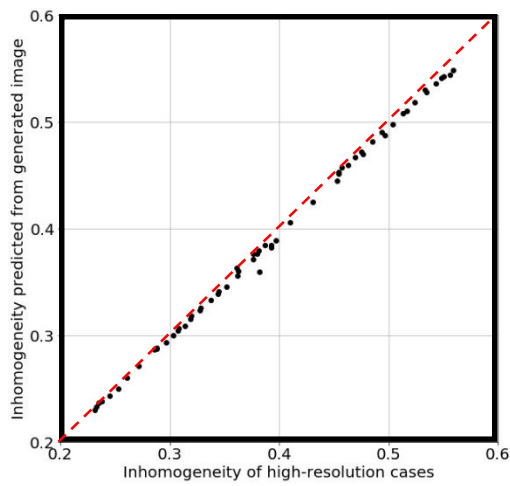


図6. pix2pixの生成画像から求めた不均質度

③生成画像の質向上検討(工夫した点の2つ目)

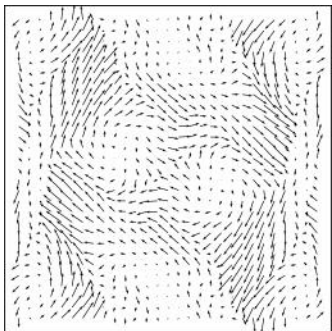
pix2pixにより生成される画像の質向上に向けて、下記2項目を検討した。

- ・Generatorにおけるドロップアウトの比率の調整  
(これまでの検討では、pix2pixの元論文と同じ0.5を採用)
- ・Generatorへの補助情報の入力

後者に関しては、図7に示す速度場の矢印プロット、もしくは発散( $\nabla \cdot \vec{v}$ )のコンターを入力画像の4チャンネル目に付加することを検討した。速度場に着目したのは、密度の支配方程式が下記のように、速度場と直接的に関連しているためである。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \vec{v}) \quad \text{or} \quad \frac{D\rho}{Dt} = \rho \nabla \cdot \vec{v}$$

速度場の矢印プロット



速度場の発散のコンター

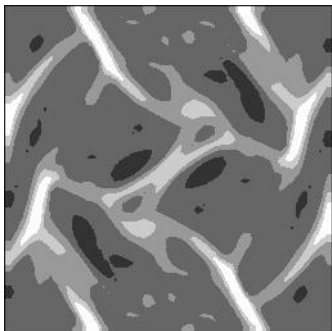


図7. 入力画像の4チャンネル目に付加した補助情報



図8, 9にドロップアウトの比率変更の影響を、図10, 11に補助情報入力の影響を示す。ドロップアウトの比率を小さくする、もしくは速度場の矢印プロットを補助情報として追加することで、不均質度の誤差のバリエーションを低減できることを確認した。ただし、今回検討した限りでは、生成される画像や不均質度の誤差に大きな改善は見られず、引き続き検討が必要である。

### 【テスト結果】

学習に使用しなかったテストデータを使って、pix2pixによる画像生成を行った結果を図12に、生成画像と正解画像（高解像度格子でのシミュレーション結果の密度分布図）のそれぞれから求めた不均質度を比較した結果を図13に示す。なお、ドロップアウトの比率は0.5、Generatorへの補助情報の入力はないとした。テストデータに対しても、定性的には高解像度格子の場合の密度分布を再現した画像を生成できている。しかし、不均質度の誤差が大きいケースが見られるため、更なる検討が必要と考える。

【まとめ】人工知能とシミュレーションを融合させることで、工学設計における計算コストを大幅に低減できる可能性を実証した。

【今後】生成画像の質の向上に向けて、

- ・学習に用いるデータ数を増やす。
- ・ドロップアウトの比率を変更したり、Generatorへの補助情報入力をありとしてテストデータに対する画像生成を行い、その質（不均質度の誤差）の変化を調査する
- ・学習のエポック数を5000で固定していたので、エポック数の影響やEarly Stoppingの効果を調査する。
- ・pix2pixHDなど、他のアーキテクチャを検討する。

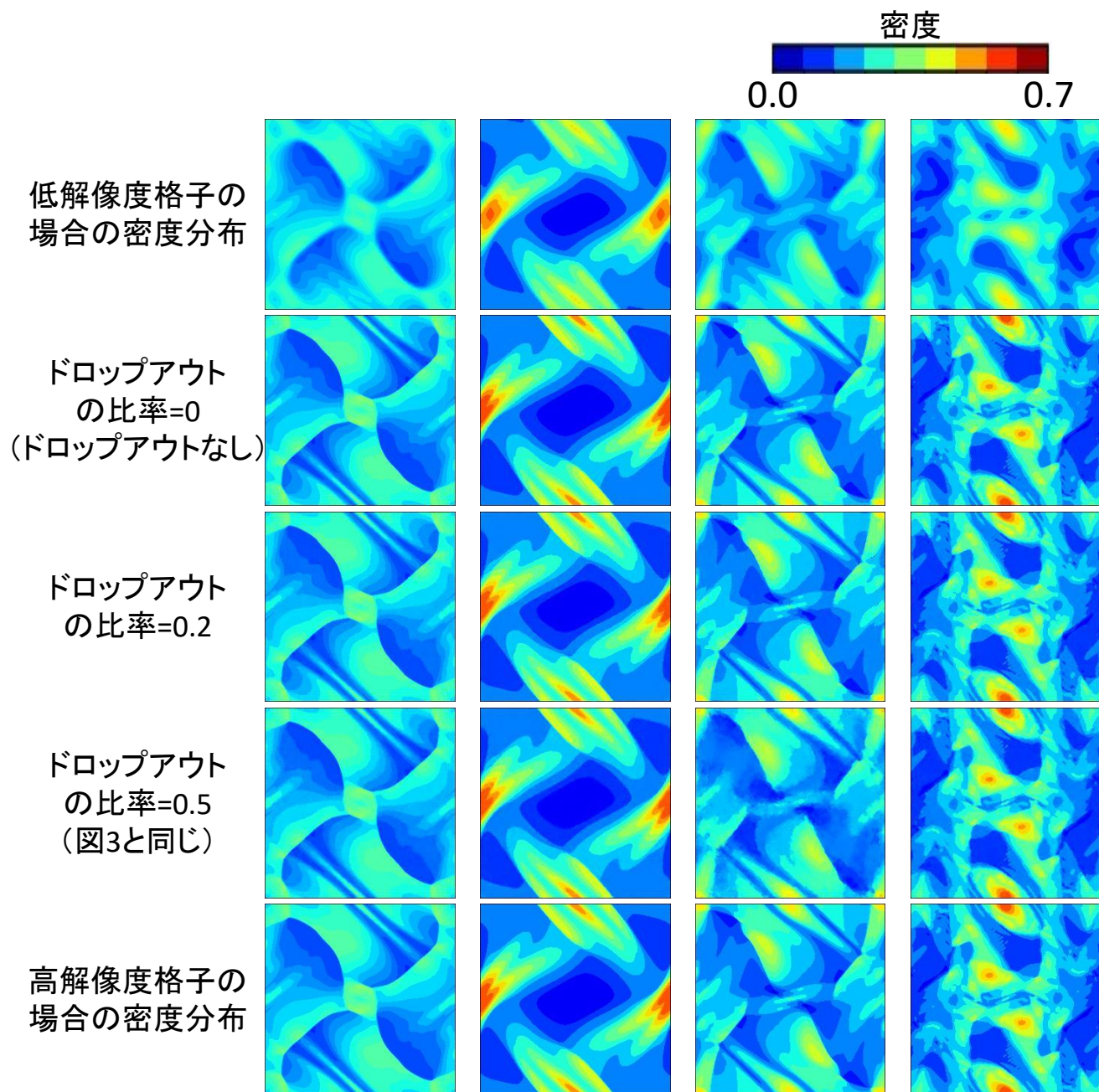


図8. ドロップアウトの比率の変更と生成画像の変化

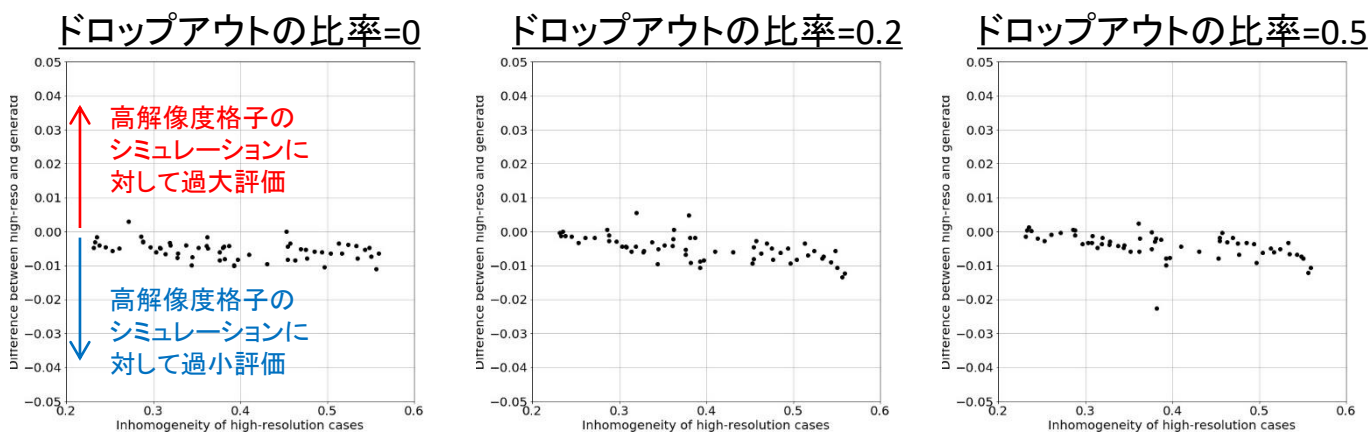


図9. ドロップアウトの比率の変更と不均質度の誤差

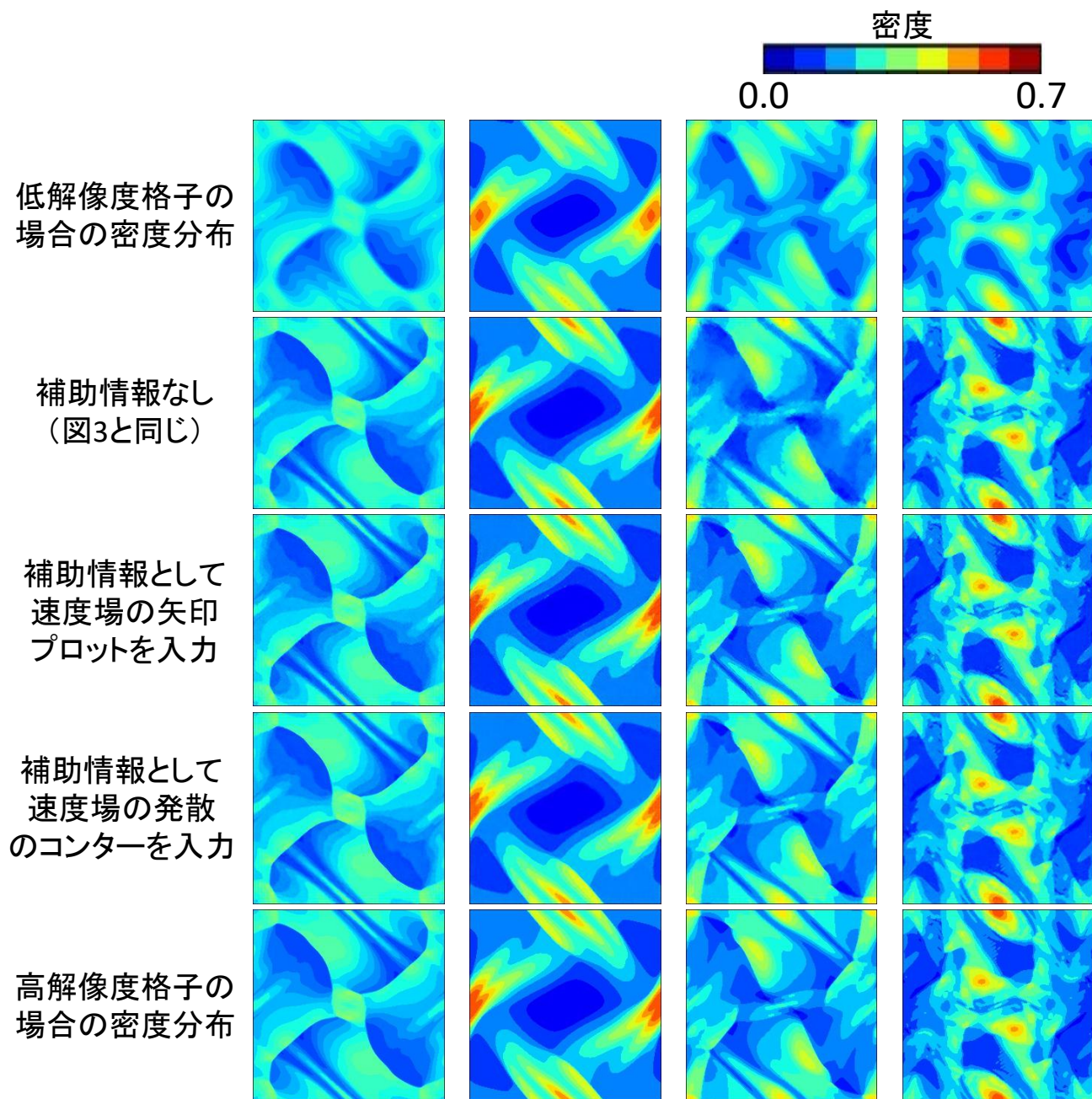
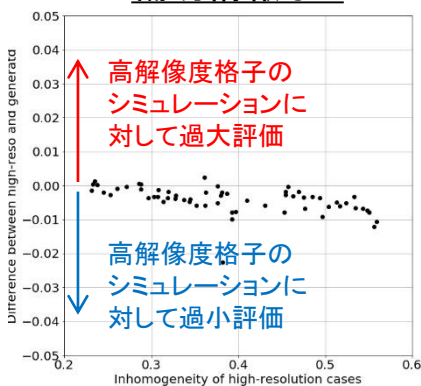
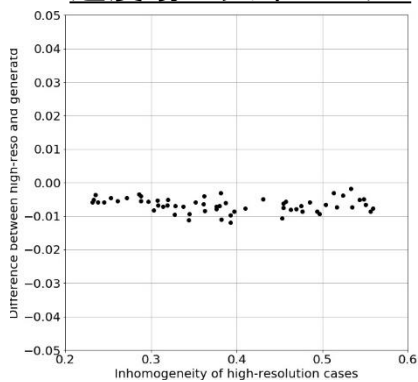


図10. 補助情報の入力による生成画像の変化

補助情報なし



速度場の矢印プロット



速度場の発散

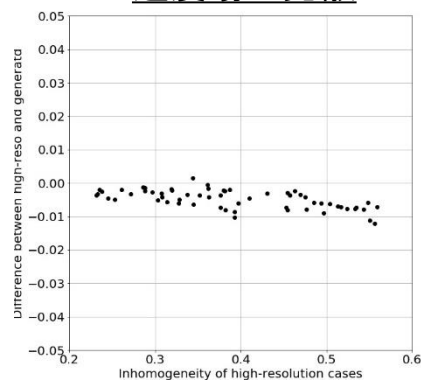


図11. 補助情報の入力有無と不均質度の誤差



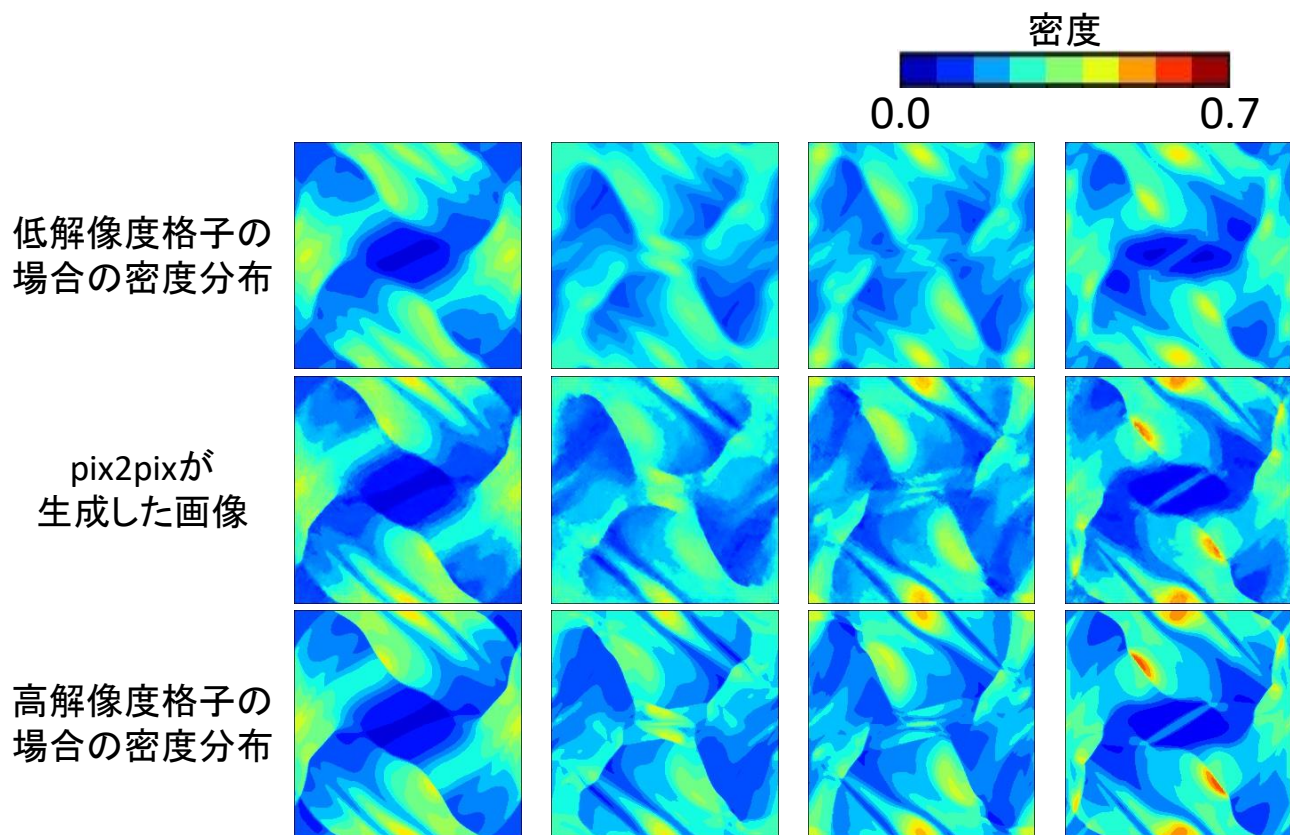


図12. テストデータに対する生成画像

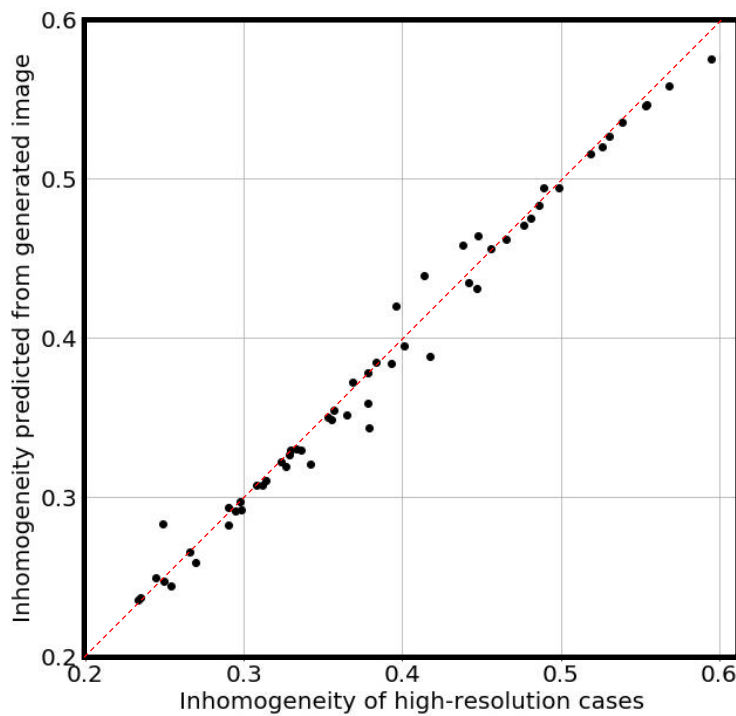


図13. テストデータに対する生成画像から求めた不均質度