

グラフニューラルネットワークによる固体-流体間の熱伝達を考慮した共役熱伝達解析の予測

Prediction of Conjugate Heat Transfer Analysis Considering Heat Transfer between Solid and Fluid using Graph Neural Network

坂本 陸¹⁾ 谷村 慶則²⁾ 堀 高太郎³⁾ 堀江 正信⁴⁾

Riku Sakamoto, Yoshinori Tanimura, Kotaro Hori, Masanobu Horie

¹⁾株式会社 RICOS (〒 100-0005 東京都千代田区丸の内二丁目 3 番 2 号, E-mail: sakamoto@ricos.co.jp)

²⁾博(数) 株式会社 RICOS (〒 100-0005 東京都千代田区丸の内二丁目 3 番 2 号, E-mail: tanimura@ricos.co.jp)

³⁾博(工) 株式会社 RICOS (〒 100-0005 東京都千代田区丸の内二丁目 3 番 2 号, E-mail: kohtaro.hori@ricos.co.jp)

⁴⁾博(工) 株式会社 RICOS (〒 100-0005 東京都千代田区丸の内二丁目 3 番 2 号, E-mail: horie@ricos.co.jp)

In this study, we propose a method using a Graph Neural Network (GNN) to predict conjugate heat transfer analysis. We construct individual GNNs corresponding to the solid part and the fluid part to consider different governing equations. In addition, we consider the interaction between graphs to represent heat exchanging phenomena between these two regions.

Key Words : Machine learning, Graph neural network, Deep learning, Conjugate heat transfer

1. はじめに

流体の数値シミュレーションは工業製品の設計や性能評価に広く活用されており、重要な役割を担っているといえる。一方で、計算時間として数時間から数日要することも多く、最適化計算や制御システムとの連携を実現するには高速化が求められている。高速化のために数値シミュレーションを代替する方法として、機械学習の利用が注目を集めており現在多くの手法が提案されている。例えば、メッシュフリーな方法として、支配方程式を損失関数の中で評価し、その誤差を最小化するように学習する PINNs (Physics Informed Neural Network) [1] や、メッシュ構造をグラフ構造とみなす GNN (Graph Neural Network) を利用する方法 [2]、大規模言語モデルで活用される Transformer を用いた方法 [3] などが、数値シミュレーションの代理手法として検討されている。

しかし、機械学習による検討結果の多くは、予測対象のシミュレーション規模（節点数やセル数）が現実の問題設定と比較して小さく、現実的な規模のデータセットに対する精度や課題が明らかではない。また、対象とする問題として自動車などを想定した空力解析を想定することが多く、とくに流体と固体が影響するマルチフィジックスな現象に対する検討結果は少ない。

そこで、本研究では、固体と流体の熱伝達を考慮した共役熱伝達解析を対象に、現実的なデータセットとして数百万節点からなるデータセットを用意し、それらを予測する機械学習モデルを構築することを目指す。具体的には、固体部と流体部に対応する個別の GNN を構築し、グラフ間の相互作用を考慮することで、異なる支配方程式の予測を行なながら熱伝達現象を予測する。

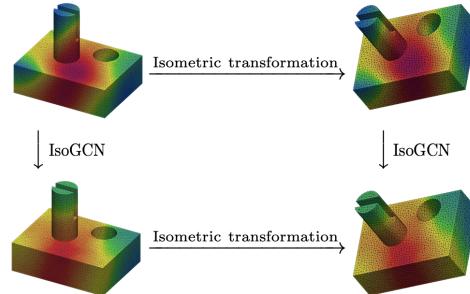


図-1 IsoGCN の概要 (文献 [4] より抜粋)

2. 既存研究

(1) IsoGCN [4]

IsoGCN は、グラフ構造を用いて学習を行う GNN (Graph Neural Network) の一つである。特徴としては、大きく 2 つあげられる。1 つ目がグラフ上のメッセージ関数を数値微分で置き換えることで、空間微分を表現できる点、2 つ目が入力に回転や平行移動を施すと出力も同じ変換を受けるという同変性 (equivariance) を持ったモデルである点である。IsoGCN の概要図を図 1 に示す。

(2) Physics-Embedded Neural Networks [5]

IsoGCN は偏微分方程式で記述される物理現象をひろく学習できるモデルであるが、流体現象への適用は限られたものであった。この理由として、IsoGCN をはじめとする典型的な GNN では予測する点の近傍の小領域のみを考慮して予測を行うことから、流体現象において典型的に見られる大域的な挙動をモデリングすることは困

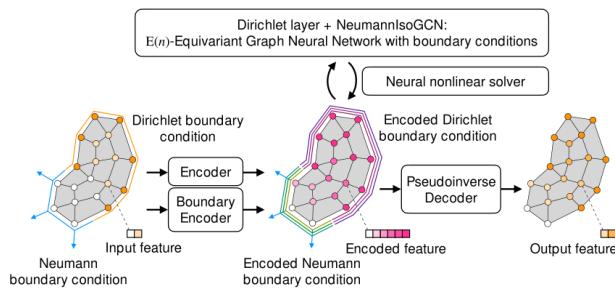


図-2 PENN の概要図 (文献 [5] より抜粋)

難である点と、境界条件を厳密に反映できないという点が挙げられる。PENN はこれらの問題を解決するために、IsoGCN に 2 つの改良を加えたモデルである。1 つ目が陰解法とのアナロジーを用いて学習器の中で収束計算を行うことで大域的な情報を考慮するような工夫を施した点である。2 つ目が流速などの物理量に対するエンコーダに対して逆関数となるようなデコーダを設けることで、境界条件を厳密に満たすことができるようとした点である。PENN の概要図を図 2 に示す。

(3) GNN の問題点

GNN を利用する際には以下の問題があることが知られている。[6]

- **Over-smoothing:** GNN の出力が全ての頂点で同じような値になること
- **Over-squashing:** ノード間の情報がうまく伝わらず失われること
- **Under-reaching:** 長距離の影響を考慮できないこと

この中でも、under-reaching が、規模が大きなシミュレーションデータを扱う場合に問題となる。例えば非圧縮性流れの数理モデルでは音速が無限大であるとみなせ、ある地点での流れ場の変化が領域全体に影響を及ぼす。すなわち、ある点の情報を予測する際に遠方の影響を考慮する必要があるが、GNN は近傍の情報をのみを考慮するため、このような遠方の影響を考慮することは難しい。PENN は under-reaching の問題を解決するために陰解法のアナロジーを用いた手法を提案しているものの、近似が強いため十分な精度を得られないことがある。

(4) 共役熱伝達解析

共役熱伝達解析 [7] とは、固体と流体の熱伝達を同時に解析する手法である。式 1 に質量輸送、式 2 に運動量輸送、式 3 にエネルギー輸送、式 4 に理想気体の状態方程式を示した。今回想定する流速は音速より十分小さいため、熱エネルギーと運動エネルギーを交換しない低マッハ数近似を仮定した。ここで、 t は時間 [sec]、 \mathbf{u} は流速ベクトル [m/sec]、 ρ は密度 [kg/m³]、 p は圧力 [Pa]、 μ は粘性係数 [Pa sec]、 C_p は定圧比熱 [J/kg · K]、 κ は熱伝導率 [W/m · K]、 T は絶対温度 [K]、 R は気体定数 [J/mol · K] を表す。なお、第 2 式肩付の T は行列の転置を表す。また気体定数は気体の（平均）分子量で除

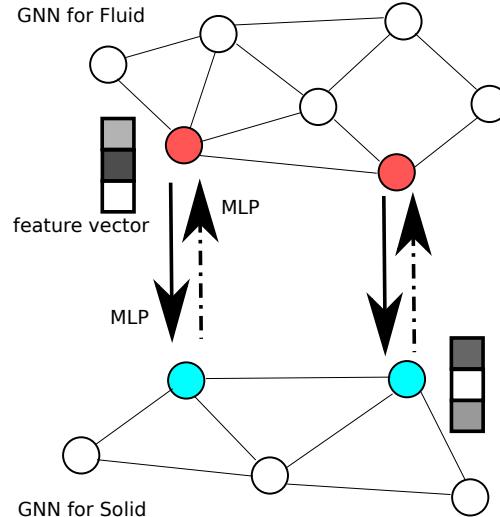


図-3 固体と流体の情報伝達方法の概要図

されたのものであり、一般気体定数ではないことに注意する。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{p} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \quad (3)$$

$$p = \rho R T \quad (4)$$

3. 提案手法

共役熱伝達解析を扱うためのモデル構成方法と、大規模データセットを扱う際に遠方の距離を近似的に考慮する方法について示す。

(1) 固体と流体の情報伝達

図 3 に本手法の概要を示す。まず、固体部と流体部にそれぞれ異なるグラフ構造を用意し、PENN を用いて異なる支配方程式を扱えるよう構成する。次に、境界条件の情報を固体と流体の界面に相当する節点を事前に認識しておく、それらの節点について温度に相当する特徴量を互いに受け渡す層 (MLP: Multi Layered Perceptron) を用意した。以上より、固体部と流体部でそれぞれ異なる支配方程式を解きつつ、両者間の熱のやり取りをモデル化することができる。

(2) 平均化法

GNN の問題点の一つである under-reaching の問題を緩和するために、訓練時のデータセットから平均的な流れ場を事前に計算しておく方法を検証した。具体的には以下のステップからなる。

1. 入力データ形状を包含する最小の直方体を訓練データから抽出し、格子点を作成する。
2. 作成した格子点に対して、訓練データから平均的な流れ場を計算する。
3. 計算した平均的な流れ場を、入力データ形状にマッピングして、GNNへの入力データとする。

ここで、平均的な流れ場を計算するために用いるデータセットは training dataset のみであることに注意する。機械学習では、機械学習モデルが特定のサンプルの予測にのみ特化し汎用性を失うこと（これを「過学習」という）を避けるために、学習データを training dataset、validation dataset、test dataset に分けることが通常行われ、それぞれ以下のような役割がある。

- Training dataset: これらに対する誤差を最小化するようにパラメータの最適化を行うためのデータ
- Validation dataset: 学習時に誤差を評価し、training dataset への過学習を防ぐためのデータ
- Test dataset: training および validation dataset への過学習をモニタリングし、最終的な性能を評価するためのデータ

Validation dataset や test dataset のデータを用いて平均的な流れ場を計算することは本来入手し得ないデータを事前に入手できていること (data leakage) に相当するため、training dataset のみを用いて平均的な流れ場を計算した。

本手法を導入することで、予測データは学習データと十分近い形状であるといった仮定が入り、形状に対する外挿性が低くなるというデメリットがあるものの、大域的な情報を取り込める点では有効であると考えられる。

4. 数値実験

(1) 問題設定

共役熱伝達問題として、熱交換器として広く利用されているコルゲートフィンを計算例として採用した。学習データはベースとなるコルゲートフィンをもとに形状処理ソフトウェア truck [8] を用いて形状を変化させ、CFD ソフトウェア OpenFOAM [9] を用いて CFD 解析を実施した。形状はコルゲートフィンの数、角度、厚さを変化させた。表 1 にコルゲートフィンのパラメータを、図 4 にコルゲートフィンの形状とパラメータの関係を示す。

また、表 2 に数値計算条件を示し、図 5 に解析領域と境界条件の概要を示す。境界条件としては、 $z = 0$ に発熱として温度のディリクレ境界条件を与え、 $x = 0$ の位置に流入境界条件を与え、流速を 5 m/s と 10 m/s の 2 パターンを用意した。

以上の条件で全 100 ケースのデータを用意し、training dataset に 70 サンプル、validation dataset の 18 サンプル、test dataset に 12 サンプルを用いた。

(2) 機械学習による学習結果

提案手法にはまだチューニングの余地があるため、test dataset での評価は実施していない。機械学習を行うライブラリとしては Pytorch ベースに GNN 用のインター

表-1 コルゲートフィンの寸法

記号	意味	取りうる値
F_w	フィン幅	160.0 [mm]
F_t	フィン厚さ	0.4, 0.6, 0.8 [mm]
F_h	フィン高さ	50 [mm]
F_p	フィンピッチ	10 [mm]
L_h	ルーバー高さ	45 [mm]
L_l	ルーバー長さ	6 [mm]
L_p	ルーバーピッチ	6 [mm]
L_a	ルーバー角度	20, 30, 40 [deg]
L_n	ルーバー枚数	10, 14, 18, 22, 26, 28 [枚]

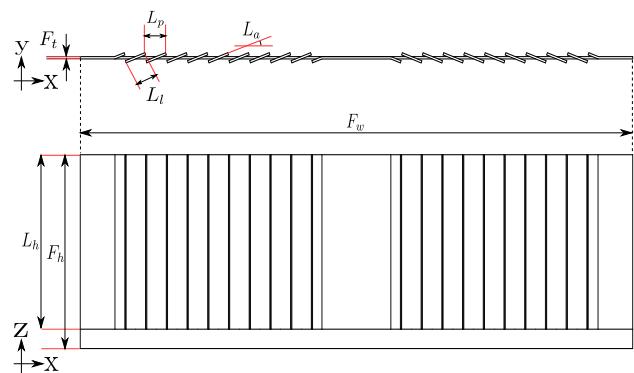


図-4 コルゲートフィンの形状とパラメータの関係

表-2 数値計算条件

解析条件	値
解析時間	0 秒から 0.5 秒
ソルバー	chtMultiRegionFoam ソルバー (OpenFOAM)
乱流モデル	なし (層流)
節点数 (流体部)	約 200 万
節点数 (固体部)	約 100 万

フェースが整備され、物理現象の予測に適した関数が用意された Phlower [10] を用いた。また、学習の最適化手法は Adam [11] を用いている。

学習時における損失関数の値の推移を図 6 に示す。本手法によって共役熱伝達解析の学習が適切に進んでいることがわかる。

5. 結論

本研究では、共役熱伝達解析を扱う機械学習モデルを GNN を用いて構築した。既存の IsoGCN および PENN をベースに、固体部と流体部に対応する GNN を構築し、それらの間の熱のやり取りをモデル化することで、共役熱伝達解析を予測することができるることを示した。また、GNN の問題点である under-reaching の問題を緩和するために、平均化法を導入することで、遠方の影響を考慮することができるることを示した。今後は、提案手法の精度向上を目指し、他手法との比較や計算速

参考文献

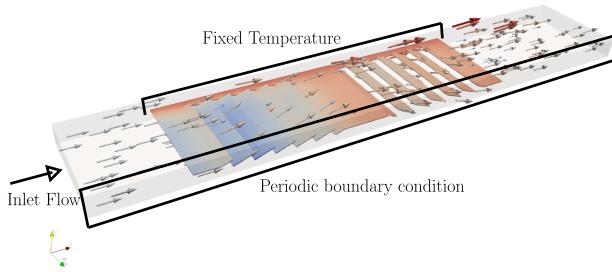


図-5 解析領域と境界条件の概要

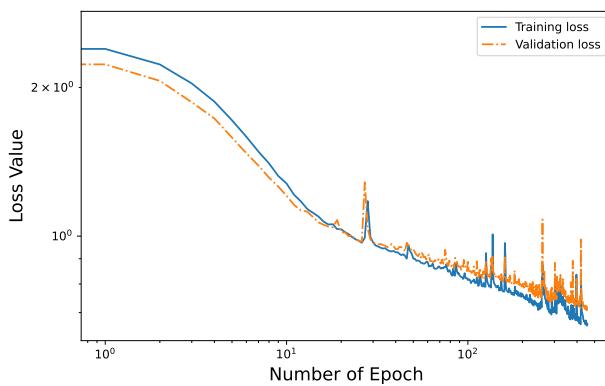


図-6 損失関数値の推移

度の評価を行っていく予定である。

謝辞: 本研究は、JST さきがけ JPMJPR21O9、NEDO ディープテック・スタートアップ支援事業 JPNP23019、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度 JPJ004596、JSPS 科研費 23H04532、23KK0182、24K22300 の支援を受けたものである。

- [1] 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*, Vol. 378, pp. 686–707, 2019.
- [2] Alvaro Sanchez-Gonzalez, Jonathan Godwin, Tobias Pfaff, Rex Ying, Jure Leskovec, and Peter W Battaglia. Learning to simulate complex physics with graph networks. *arXiv preprint arXiv:2002.09405*, 2020.
- [3] Fabian Fuchs, Daniel Worrall, Volker Fischer, and Max Welling. Se (3)-transformers: 3d roto-translation equivariant attention networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 33, , 2020.
- [4] Masanobu Horie, Naoki Morita, Toshiaki Hishinuma, Yu Ihara, and Naoto Mitsume. Isometric transformation invariant and equivariant graph convolutional networks. In *International Conference on Learning Representations*, 2021.
- [5] Masanobu Horie and Naoto Mitsume. Physics-embedded neural networks: Graph neural pde solvers with mixed boundary conditions. 2023.
- [6] Uri Alon and Eran Yahav. On the bottleneck of graph neural networks and its practical implications. 2021.
- [7] Thierry Poinsot and Denis Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, Philadelphia, PA, 2001.
- [8] Ricosjp. Truck. <https://github.com/ricosjp/truck>, 2021. Accessed: 2025-03-31.
- [9] Henry G Weller, Gavin Tabor, Hrvoje Jasak, and Christer Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in physics*, Vol. 12, No. 6, pp. 620–631, 1998.
- [10] Ricosjp. Phlower. <https://github.com/ricosjp/phlower>, 2025. Accessed: 2025-03-31.
- [11] Diederik P Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, 2014.