

気候システムの特性を考慮した深層サロゲートモデルの提案と 海洋大循環シミュレーションに対する一応用

中野 裕太[†] 田中 佑典[‡] 福田 哲也[†] 河田 博昭[†]

NTT 宇宙環境エネルギー研究所[†] NTT コミュニケーション科学基礎研究所[‡]

1. はじめに

気候変動が環境や社会へ与える影響を評価するため、将来気候の予測が行われている。しかし予測には複雑な支配方程式を微細なグリッドで離散化し、数値的に解く必要があるため、計算量が膨大となる。そこで近年、機械学習モデルを用いた高速化技術（サロゲートモデル）が多く提案されている [1]。サロゲートモデルでは、シミュレーション結果を学習データとして用いる。気候分野のシミュレーションデータは、欠損、不規則格子、周期的挙動といった特性を持ち、これらを適切に扱う必要がある。既存手法では3つの特性を個別に扱うため、特に長期予測において精度の悪化が見られる [2]。そこで本研究では、3つの特性を同時に考慮する手法を提案する。また、気候予測において特に重要な要素である海洋に焦点を当て、提案手法を海洋大循環シミュレーションへと適用する実験を行う。

2. 提案手法

シミュレーションデータは、主にグリッドデータとして得られる。そのため、海洋のデータでは、陸地に相当するグリッドが欠損値となる。また、球面上に分布するデータをグリッドデータで表現しているため、位置によりグリッド間の距離が異なるといったグリッドの不規則性を考慮する必要がある。そして、気候システムには季節性といった周期性が存在する。既存手法では、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を改良し、不規則格子を扱う手法などが提案されている [2]。しかし、複数の特性を深層モデルのアーキテクチャの改良により扱うことは難しく、個別に特性を扱う手法がほとんどである。

2-1. 提案手法の概要

本研究では、使用する深層モデルに依存しないアプローチにより同時に特性を扱う手法を提案する。具体的には、気候シミュレーションデータの時空間特性から、2種類の特徴量を設計し、

深層モデルへと組み込む手法である。

空間特徴量 空間特性として、球体に由来する球面上の隣接関係に基づいた、特徴 $\mathcal{S} = \{\text{lat}, \text{lon}, \sin(2\pi\text{lat}), \cos(2\pi\text{lat}), \sin(2\pi\text{lon}), \cos(2\pi\text{lon})\}$ を導入する。ここで、 lat, lon はそれぞれ各グリッドにおける正規化した緯度と経度の値である。

時間特徴量 時間特性として、自転と公転により生じる日周性と年周性に基づいた、特徴 $\mathcal{T}_t = \{h, \sin(2\pi h), \cos(2\pi h), y, \sin(2\pi y), \cos(2\pi y)\}$ を導入する。ここで、 h, y はそれぞれあるシミュレーション時間ステップ t での、正規化された1日の時間の値、および、1年の日数の値である。

3. 実シミュレータによる計算機実験

3-1. 実験設定

MITgcm [3] により、実際の地球を仮定した設定による海洋大循環シミュレーションを実行し、学習データを生成した。実行時間は、CPU (Core-i9 10900K) を用い、約 4.5 時間であった。得られたデータの詳細を表 1 に示す。

本研究では、深層モデルとして、既存研究で一般的な、Feed-forward Neural Networks (FNN), CNN, U-Net を用いた。提案手法の有無による精度を比較した。また、気候分野のベースラインモデルとして一定値モデル (Persistent) を使用し精度を比較した [4]。

前処理として状態変数ごとに標準化を行った。損失関数に平均二乗誤差を用い、タイムステップ t のデータから $t+1$ のデータを予測するように学習を行った。テスト時には、学習済みモデルを使用し自己回帰的に予測を行った。また、CNN と U-Net では、陸地に対応するピクセルを 0 とし、海洋に対応するグリッドのみで誤差を計算し、学習を行った。

表 1: 実験に使用したデータの詳細

空間解像度	水平方向 $4^\circ \times 4^\circ$, 鉛直方向 15 段階, 全球を計 54000 個のグリッドに分割。
時間解像度	1 日 (本実験では季節性の変数のみを使用)
実行期間	100 年間 (シミュレータの既定の設定にならない、計算簡略化のため 1 年を 360 日とした)
出力変数	海水塩分濃度 [g/kg], 海水温度 [°C], 海流速度 [m/s] (x, y, z 成分)

Global Climate System Aware Deep Surrogate Models and Its Application to Ocean General Circulation

Yuta Nakano[†], Yusuke Tanaka[‡], Tetsuya Fukuda[†], Hiroaki Kawata[†], NTT Space Environment and Energy Laboratories[†], NTT Communication Science Laboratories[‡]

表 2:10 年間 (3600 タイムステップ分) 予測の実行時間
(GPU は RTX3090, CPU は Core-i9 10900K を使用.
100 回実行時の平均と標準偏差を記載)

		実行時間 [ms] (GPU)	実行時間 [ms] (CPU)
シミュレータ		898.3889	
提案手法なし	FNN	0.3756 ± 0.0013	9.2777 ± 0.2237
	CNN	6.8212 ± 0.0650	242.5410 ± 7.7251
	U-Net	8.5446 ± 0.0734	310.8649 ± 14.7248
提案手法あり	FNN	0.6808 ± 0.0327	18.0757 ± 0.8599
	CNN	6.9953 ± 0.0687	252.3363 ± 7.5018
	U-Net	8.8317 ± 0.3735	315.0061 ± 12.6892

表 3:テストデータに対する MAE・RMSE・ACC

		MAE	RMSE	ACC
Persistent		0.856	2.362	0.897
提案手法なし	FNN	1.986	3.726	0.888
	CNN	9.062	14.079	0.093
	U-Net	12.077	18.043	-0.215
提案手法あり	FNN	0.317	0.503	0.998
	CNN	8.818	14.652	-0.175
	U-Net	13.007	18.763	-0.207

3-2. 実験結果

速度性能 比較指標として、シミュレータ出力の 1 タイムステップに対応する、1 日後の状態変数の計算に要した時間を用いる。表 2 に結果を示す。GPU, CPU どちらで実行した場合においても、提案手法の有無に関わらずサロゲートモデルにより、シミュレータとの実行時間比で、約 100 倍以上の高速化を達成できている。

予測性能 比較指標として、類似する大気予測ベンチマークデータセット [4] で用いられている、平均絶対誤差 (MAE), 平均二乗誤差 (RMSE), および異常相関係数 (ACC) を用いる。結果を表 3 に示す。提案手法を FNN へ適用した場合、他の手法と比較しより小さい誤差となる。

時空間面での誤差解析 図 1 に、海面に対応する 2 次元平面において、各グリッド点において、テストデータに対する予測値と真値の MAE を時間平均したものをプロットした図を示す。提案手法の適用により、全球を通してより誤差が小さくなるのがわかる。また図 2 に、x 軸方向流速に関して、ある点に対する、テストデータに対する予測値と真値を示す。提案手法は、長期的にシミュレータ出力値と同様の予測結果が得られるなど、出力結果が安定しており、季節性をうまく捉えられている。

4. おわりに

実際の海洋大循環シミュレーションにおいて提案手法を検証した結果、数値シミュレータと比較し実行時間で 100 倍以上の高速化を達成した上で、既存手法と比べより良い精度で、安定した長期予測結果が得られた。

今回、元シミュレータ値と予測値の誤差をもと

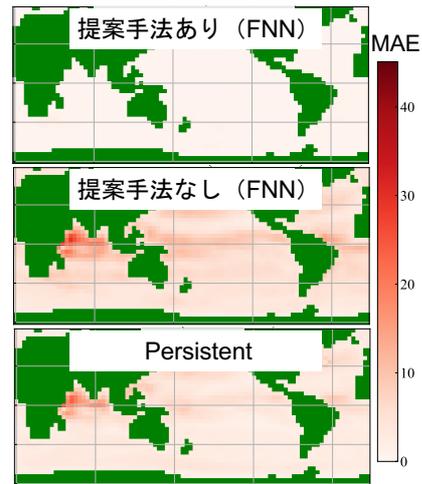


図 1:テストデータに対する誤差の空間的分布

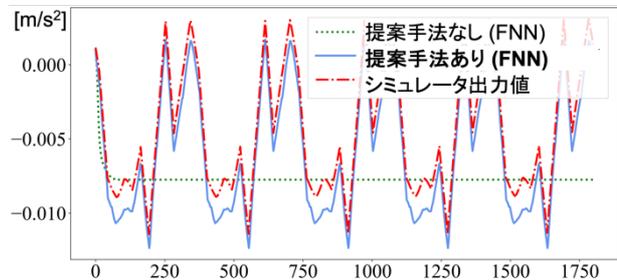


図 2:テストデータにおける真値・予測値の推移

にサロゲートモデルの予測性能を検証した。しかし、気候変動による影響を評価する際には、予測結果の統計的傾向や、予測結果を集約し計算される定量的指標を用いることが多い。提案手法の評価は、これら実応用と同様のプロセスを経て得られる結果と比較する必要がある。

また、複数のシミュレーション設定に対する検証を行っていない。そのため、提案手法が有効であるかどうか、また、複数の設定に対応可能なモデルや学習方法を検討していく必要がある。

最後に、提案手法の課題として、入力データの解像度に対するスケール性がある。解決に向け、入力データの低次元潜在表現を用いる、もしくは、座標や時間を入力として取るようなアーキテクチャを検討する必要がある。

参考文献

[1] S. Scher, G. Messori, "Weather and climate forecasting with neural networks: using general circulation models (GCMs) with different complexity as a study ground," *Geosci. Model Dev.*, 2019.
 [2] S. Scher, G. Messori, "Spherical convolution and other forms of informed machine learning for deep neural network based weather forecasts," *arXiv:2008.13524*, 2020.
 [3] J. Marshall, A. Adcroft, C. Hill, L. Perelman, C. Heisey, "A finite-volume, incompressible Navier Stokes model for studies of the ocean on parallel computers," *J. Geophys. Res.*, 1997.
 [4] S. Rasp, P. D. Dueben, S. Scher, J. A. Weyn, S. Mouatadid, N. Thuerey, "WeatherBench: A benchmark data set for data-driven weather forecasting," *J. Adv. Model. Earth Syst.*, 2020.