

機械学習 PINNs による観測結果からの物性値推定のための基礎検討

九州大学 学生会員 ○出口 翔大
九州大学 学生会員 柴田 洋佑
九州大学 正会員 浅井 光輝

1. 緒言

2011年東北地方太平洋沖地震による津波被害を契機に、激甚化する自然災害への関心は急激に高まってきている。近年では多様化・複雑化する災害が頻発し、数値解析による災害の再現や予測技術が求められている。一方で、数値解析を実施する際には、問題によって正しく設定されるべき固有なパラメータが複数存在する。例えば、混相流問題である土砂崩れ等の再現解析を行う際には、これを巨視的に等価な単相流と見なした解析に置き換えることが多い。しかしながら、混相流の等価物性値（混相流を単相流と見なした場合の、等価な密度や粘性等）は膨大な実験データ等から経験的に定めることが多く、これには未だ議論の余地がある。

上記の問題は、観測（出力）からパラメータ（入力）を推定する逆問題であり、本研究は Raissi et al.¹⁾が提案した PINNs (Physics-Informed Neural Networks) の適用を検討した。PINNs は深層学習の一種であり、物理現象の支配方程式を損失関数に組み込むことで、当該現象に対する表現力を特化する。本研究は、PINNs の応用例を複数導入し、幅広い工学問題での有用性を確認した。

2. 適用例題

本研究では、Raissi et al.が実施した PINNs の流体解析への適用に加え、より広範囲の問題への適用を見据え、熱拡散問題への適用を行う。尚、教師データの作成については、解像度の高さと問題設計の柔軟さから、数値解析を用いて作成する。

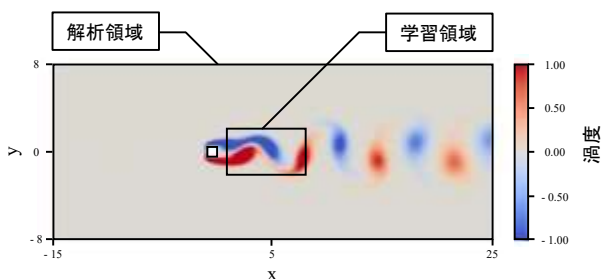


図1 流体解析問題の問題設定

2. 1. 流体解析問題

本節では、先行研究に倣い、障害物背面の非圧縮性流れに着目し、当該流体の密度と動粘性係数を推定する。図1に示すように、縦16×横40の長方形領域内に、1×1の正方形の障害物を設置し、数値計算を実施する。ここで、計算資源を抑えるため、PINNs が学習する領域はカルマン渦の発生が陽に確認できる領域に限定する。

2. 1. 1. 解析条件

まず、非圧縮性2次元流れの支配方程式は以下のよう書かれる。

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \nu \nabla^2 u = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - \nu \nabla^2 v = 0 \quad (3)$$

ここで、 $u \cdot v$ は速度の $x \cdot y$ 成分、 p は圧力、 ρ は密度、 ν は動粘性係数である。本例題では、 $\rho = 1.0$ 、 $\nu = 0.01$ と設定している。また、式(1)の連続の式については、以下の流れ関数 ψ を導入することで自動的に満足する。

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (4)$$

解析条件として、初期条件と境界条件を次のように与える。初期条件として、領域内の全ての点で速度ゼロと圧力ゼロを与える。境界条件については、左端境界から一様流速1で流体が流入し、右端境界から流出する。このとき、右端境界では圧力ゼロのディリクレ条件を、上下境界にはすべり条件を与える。

2. 1. 2. PINNs の学習スキーム

前項より得る数値解を教師データとし、PINNs の学習を行う。まず、PINNs が予測する速度場・圧力場と教師データとの差を以下のように評価し、これらを損失項と呼ぶこととする。

$$f_1 = u - u^* \quad (5)$$

$$f_2 = v - v^* \quad (6)$$

$$f_3 = p - p^* \quad (7)$$

ここで、上付き文字(*)は PINNs が予測する物理量を示す。前述の通り、PINNs は特定の物理現象の支配方程式

キーワード 機械学習, 深層学習, 逆問題

連絡先 〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡 744 九州大学 構造解析学研究室 TEL: 092-802-3370

を損失関数の一部とする。そこで、本例題における支配方程式 (式(2), (3)) を基に、以下の損失項を定義する。

$$f_4 = \frac{\partial u^*}{\partial t} + u^* \frac{\partial u^*}{\partial x} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y} + \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} - v^* \nabla^2 u^* \quad (8)$$

$$f_5 = \frac{\partial v^*}{\partial t} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial x} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial y} + \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} - v^* \nabla^2 v^* \quad (9)$$

ここで、変数及びパラメータに(*)が付けられているのは、PINNsの予測値が支配方程式に従うよう制約するためである。式(5)~(9)に定義した損失項の二乗和を用いて、PINNsが包括的に最小化する損失関数 L_f を以下のように定義する。

$$L_f = \frac{1}{N_f} \sum_i^{N_f} (|f_1|^2 + |f_2|^2 + |f_3|^2) + \frac{1}{N_f} \sum_i^{N_f} (|f_4|^2 + |f_5|^2) \quad (10)$$

ここで、 N_f は学習に用いるデータ点の総数を表す。この損失関数 L_f を最小化することでPINNsを訓練する。

2. 2. 熱拡散問題

本節では、より広域な問題への適用を考慮し、熱拡散問題への応用を通じてPINNsの汎用性を確認する。本例題では、図3(a)に示すように、 1×1 の正方形領域内の熱拡散問題を対象とする。

2. 2. 1. 解析条件

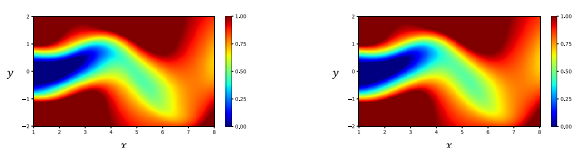
2次元熱拡散問題の支配方程式は、以下の通りである。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (11)$$

ここで、 ϕ は温度を、 α は熱伝導率を示し、本例題では $\alpha = 0.5$ と設定している。初期条件として、解析領域内の各点で0~1の乱数を与えている。境界条件としては、左右境界・上端境界に温度ゼロのディリクレ条件を、下端境界には半サイン波のディリクレ条件を与えている。半サイン波は $x = 0.5$ で最大値1を取るものとする。

2. 2. 2. PINNsの学習スキーム

PINNsの学習スキームは、前節と類似である。PINNsが予測する温度と教師データとの差を以下の損失項に



(a) 教師データ (b) PINNs 予測値
図2 流体解析問題の予測結果 (速度 u の分布)

表1 流体解析問題のパラメータ推定結果

	真値	PINNs推定値	誤差 (%)
密度 (ρ)	1.00	0.9938	0.62
動粘性係数 (ν)	0.01	0.0113	13.09

より評価し、これらを用いて損失関数 L_g を定める。

$$g_1 = \phi - \phi^* \quad (12)$$

$$g_2 = \frac{\partial \phi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad (13)$$

$$L_g = \frac{1}{N_g} \sum_i^{N_g} (|g_1|^2) + \frac{1}{N_g} \sum_i^{N_g} (|g_2|^2) \quad (14)$$

ここで、 N_g は学習に用いるデータ点の総数を表す。

3. 解析結果

3. 1. 流体解析問題

流体解析における、PINNsのパラメータ推定結果は表1にまとめられる。表1より、密度 ρ 、動粘性係数 ν 共に、良い近似を与えていることが確認できる。また、推定結果を用いた速度場・圧力場の予測も可能であり、その結果は図2のようにまとめられる。

3. 2. 熱拡散問題

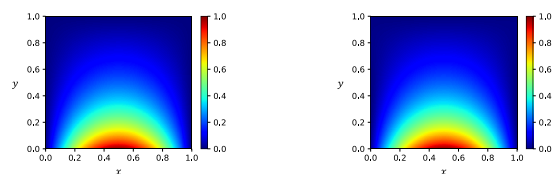
熱拡散問題における、PINNsのパラメータ推定結果は表2のようにまとめられる。表2より、熱拡散問題においても熱伝導率が十分な精度で推定されていることが分かる。PINNsを用いた温度場の予測結果は、図3のようにまとめられる。

4. 結言

深層学習の一種であるPINNsを用いることで、限定した出力値から入力値を精度良く推定することが可能であることを確認した。特に本研究では、先行研究でも応用例に挙げられていた流体解析に加え、熱拡散問題への適用を検討することで、PINNsの幅広い問題への適用可能性を示した。

参考文献

- 1) Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E.: 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.



(a) 教師データ (b) PINNs 予測値
図3 熱拡散問題の予測結果

表2 熱拡散問題のパラメータ推定結果

	真値	PINNs推定値	誤差 (%)
熱伝導率 (α)	0.50	0.5472	9.44