物理法則を含んだニューラルネットワーク PINNs の逆問題解法への適用可能性

九州大学　学生会員　○柴田　洋佑
九州大学　学生会員　　出口　翔大
九州大学　正 会 員　　浅井　光輝

1.　緒言

街区への津波溯上シミュレーションを広域で実施するには，防潮林などの防災設備や，建物などの物体すべての解像可能な高分解能なモデルを用いた解析は計算コストが高く，等価な透水性を持つ多孔質体として解析することが有効な手段である．この際，多孔質体の物性値を決定するには，ある領域ごとの等価な物性値を人的反復より設定する，もしくは，経験則で数値を入れていくなど非常に時間がかかる作業が必要となる．そこで，実測データをニューラルネットワークに学習させることで，物体群と等価な多孔質体の物性値を決定することを検討している．等価な物性値を持つ多孔質体を定義できれば，低解像度の計算モデルのまま物理的な齟齬が生じることなく問題を簡略化し，低コストで実現象に近いシミュレーションを実行することができる．本研究は， M.Raissi ら [1]が紹介している PINNs（Physics-Informed Neural Networks）を用いた物性値の推定を行うことを目的とした基礎検討を行った．

2.　解析手法

2.1.　流体実測データの取得

本研究では，既存の研究 [1]に倣い，不透水性の四角柱の後方にできるカルマン渦を対象に粘性項・移流項の係数を学習している．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 に作成したモデルの概略図を示す．赤，もしくは緑の実線で囲まれた領域はそれぞれのケースにおける不透水性の四角柱，黄色い領域は学習に用いる領域を表している．

縦 16×横 40 の長方形領域内に，1×1 もしくは6×4の四角形の障害物を設置し，数値計算を実施する．左境界から速度 1 の一様な自由流速分布，右境界はゼロ圧力流出，不透水性の四角柱との境界は滑りなし条件であり，動粘性係数は1.0×10^{-2}とし，実際に学習させる範囲は黄色の領域のみとする．

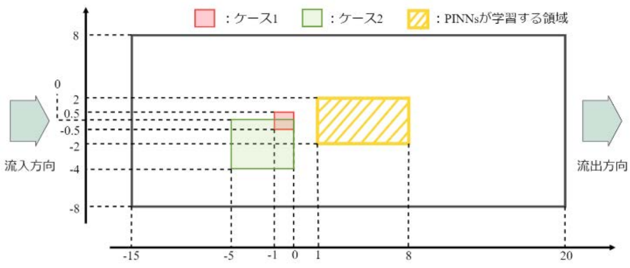

図- 1 モデルの概略図

2.2.　PINNs の学習スキーム

取得したデータを教師データとし，それらを PINNs に学習させていく．PINNs の特徴の一つとして，物理法則の支配方程式から損失関数を作成することができる点が挙げられる．今回の実測データにおける支配方程式は，以下のような Navier-Stokes 式である．

$$
\begin{aligned}
&u_t + 1.0(uu_x + vu_y) + p_x - 0.01\,(u_{xx} + u_{yy}) = 0 \\
&v_t + 1.0(uv_x + vv_y) + p_y - 0.01\,(v_{xx} + v_{yy}) = 0
\end{aligned} \tag{1}
$$

ここでu，vはそれぞれx方向，y方向における速度，添字t，x，xx，y，yyはそれぞれ時間微分，xの 1 階微分，2 階微分，yの 1 階微分，2 階微分である．

この時，移流項の係数をλ_1，粘性項の係数をλ_2と置き換えた式を以下のように定義する．

$$
\begin{aligned}
f &:= u_t + \lambda_1(uu_x + vu_y) + p_x - \lambda_2(u_{xx} + u_{yy}) \\
g &:= v_t + \lambda_1(uv_x + vv_y) + p_y - \lambda_2(v_{xx} + v_{yy})
\end{aligned} \tag{2}
$$

置き換えたλ_1，λ_2が今回学習して逆推定する物性値である．また，このときに定義したf，gを用いて損失関数は以下のように定義する．

$$
\begin{aligned}
Loss &:= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\left|u(t^i,x^i,y^i) - u^i\right|^2 + \left|v(t^i,x^i,y^i) - v^i\right|^2\right) \\
&+ \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\left|f(t^i,\,x^i,y^i)\right|^2 + \left|g(t^i,\,x^i,y^i)\right|^2\right)
\end{aligned} \tag{3}
$$

ここでNは全要素数．$u(t^i,x^i,y^i)$，$v(t^i,x^i,y^i)$は予測値．u^i，v^iは実測データである．（3）式のように，PINNs が予測する物理量と真値の値との差と，偏微分方程式である物理的支配方程式の和を損失関数とする

キーワード　機械学習，深層学習，逆問題，アルゴリズム
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

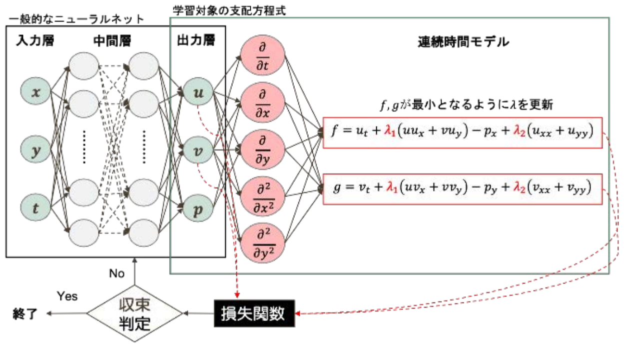

図- 2　PINNs の構造

ことで，物理法則に忠実な損失関数を実現できる．

また，ニューラルネットの構造は，図-2 のように構築する．

以上のような手法を用いて，真値に近似できるλ_1，λ_2を逆推定する．このλ_1，λ_2から成る支配方程式は実測データの支配方程式と近似できるため，実測データとして学習させていない物理量の分布も逆推定することができる．

3.　解析結果

図-1 の各ケースにおけるデータを PINNs で学習したところ，図-3 及び図-4 の分布図が得られた．

図-3，図-4の上段はx軸方向の，中央段はy軸方向の速度場，下段は圧力場，左列は予測分布，中央列は時速データと予測値との差の分布，右列は教師データの分布を表している．　ケース1は上下対称な条件の現象が，またケース2では上下非対称な条件の現象がそれぞれ正しく再現できている．また本手法では流速のみをデータとして与えているが，PINNsの損失関数は支配方程式に関する誤差を含んでいることから，教師データとして入力していない圧力勾配の分布まで正確に再現できていることも確認できた．また，λ_1，λ_2に関する逆問題の推定誤差は，表-1に示す通りとなった．

表- 1　各ケースの推定誤差，計算時間

	ケース1	ケース2
$E(u)$	1.35×10^{-2}	7.33×10^{-3}
$E(v)$	2.55×10^{-2}	7.94×10^{-3}
$E(p)$	8.38×10^{0}	1.13×10^{0}
$E(\lambda_1)$	0.383%	1.128%
$E(\lambda_2)$	11.803%	5.629%
学習時間	143分	112分

ここで，推定誤差とは教師データと予測データの差のL2ノルムを示す．

4.　結言

PINNsによる逆問題の推定精度を確認するために，まずはM.Raissiら[1]が取り上げていた流体と同様の流体の実測データにおける物理量及び，物性値の推定を実施した．図-3，図-4に注目すると，速度場においては中央列の全域が0となる分布図が得られ，圧力場においては勾配が実測データとほとんど同じにみなせる分布図が得られる結果となった．これらの点からPINNsが算出した分布が実測データの分布を十分に再現しており，また逆問題として評価すべき値を正確に評価できることを確認した．しかし，現在の手法を大規模モデルに適応すると，長大な学習時間を要することが予想されるため，計算時間を削減する手法の開発が必要である．また，本来の目的である多孔質体の等価な空隙率推定に本手法を応用すること等が今後の課題として挙げられる．

参考文献

(1)　M. Raissi et al: Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics, 686-707, 2019

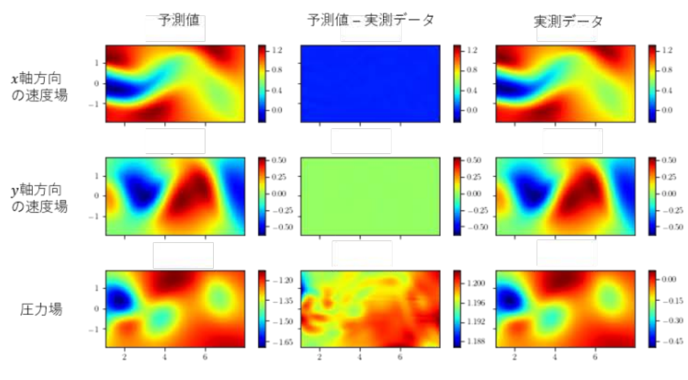

図- 3　ケース 1 の分布

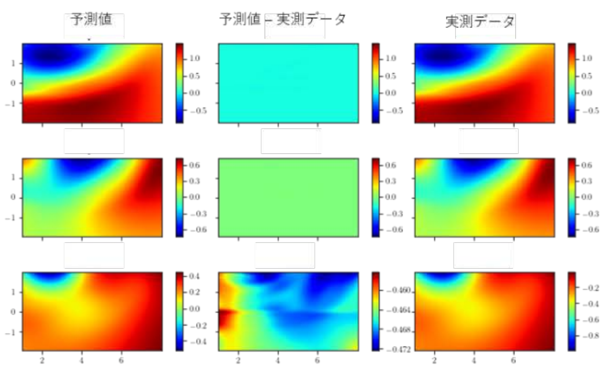

図- 4　ケース 2 の分布