

固有直交分解による特徴抽出を介した PINNs による流れ場の学習と逆解析

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

100年確率の豪雨に相当する日降水量200mm以上の年間日数が過去50年間で急増し、豪雨の頻発化・激甚化に歯止めが効かない状況にある。豪雨に伴う土砂災害も増加し、数値解析による災害の被害予測、規模推定が求められている。解析時には物性値を同定しておく必要があるが、これには人的反復や経験則が導入されることが多く、未だ議論の余地が残されている。ここで、近年、深層学習技術が急速に発展し¹⁾、工学問題への適用が進みつつある。深層学習では学習するパラメータ数が膨大となり（数千から数億オーダー^{1),2)}、適切な学習、予測のためには相当量の学習データが必要となる。一方、工学分野では取得できるデータに限界があり、深層学習技術の先進的研究を工学問題へ直接応用することは非現実的である。

本研究では、上記の物性値同定を、観測データ（出力値）からパラメータ（入力値）を推定する逆問題と読み替え、深層学習を用いた逆解析に取り組む。特に非圧縮性流体を対象とし、学習に物理条件（支配方程式、境界条件など）を課す PINNs²⁾（Physics-Informed Neural Networks）を用いて動粘性係数の推定を行う。また、学習データを固有直交分解（POD: Proper Orthogonal Decomposition）を介して分解・特徴抽出し³⁾、より有用なデータを選択することで、学習データが少量の場合でのパラメータ推定の高精度化・効率化を検討した。

2. 問題設定

本研究では、問題設定の柔軟さから数値解を教師データとした。先行研究²⁾に類似の問題として、カルマン渦の流れ場から当該流体の動粘性係数を推定する問題を取り上げた。図1に示す矩形領域を対象に、OpenFOAMによる数値解析を実施することで教師データを作成した。矩形領域(16(m) × 40(m))内部に1(m) × 1(m)の四角柱を配置し、左端境界に一樣流速1(m/s)、右端境界に0(Pa)、上下境界にすべり条件を与えた。時

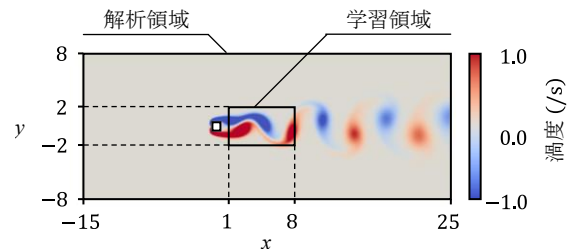


図1 問題設定の概略図

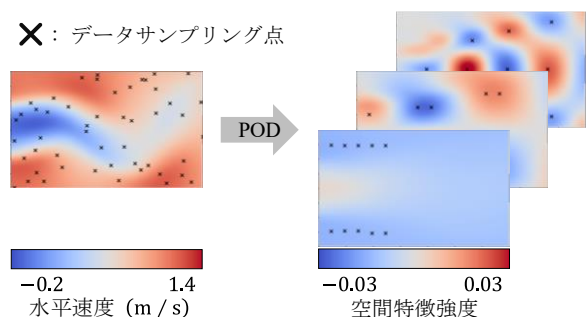


図2 水平速度と対応する主要空間モード

間増分は0.1(s)とし、実時間20(s)の解析を行った。流体の密度と動粘性係数は $\rho = 1.0(\text{kg}/\text{m}^3)$ 、 $\nu = 0.01(\text{m}^2/\text{s})$ とし、教師データは四角柱背面の小領域（図1内「学習領域」）から取得するものとした²⁾。

3. 解析手法

3. 1. PODによるモード分解

N 個の時空間データが、各時刻において M 個の節点情報を有するとする。時刻 n におけるデータベクトルを \mathbf{d}_n とし、時空間データをデータ行列 $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ に格納すると、 \mathbf{D} はPODにより以下のように分解できる³⁾。

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} | & & | & & | \\ \mathbf{d}_1 & \cdots & \mathbf{d}_n & \cdots & \mathbf{d}_N \\ | & & | & & | \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{A} \mathbf{\Gamma} \mathbf{B}^T \\ &= \sum_r^R \gamma_r \boldsymbol{\alpha}_r \boldsymbol{\beta}_r^T \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{A} は \mathbf{D} の左特異ベクトル $\boldsymbol{\alpha}_r$ を成分とする空間モード、 \mathbf{B} は右特異ベクトル $\boldsymbol{\beta}_r$ を成分とする時間モード、 $\mathbf{\Gamma}$ は特異値($\gamma_{r+1} \geq \gamma_r > 0$)を要素に持つ対角行列である。また、 R は \mathbf{D} のランク、上付き文字 $(\cdot)^T$ は転置を表す。

表1 速度場の学習結果 (相対 ℓ^2 誤差)

u (m/s)	ランダム	POD
水平速度 u	0.0266	0.0238
鉛直速度 v	0.2012	0.1358

本研究では流体の水平速度 u を \mathbf{D} とし、これを分解することで水平速度の空間モード、時間モードを抽出した。図2には、学習領域内の水平速度分布とその主要な空間モードを示す。

3. 2. PINNsによる流れ場の学習と逆解析

PINNs²⁾は、一般的な二乗誤差に加え、自動微分を介して算出される物理条件との整合性を考慮した学習を行う。本研究では、損失関数 \mathcal{L} を以下のように定義した。

$$\mathcal{L} = w_{\text{Data}}\mathcal{L}_{\text{Data}} + w_{\text{PDE}}\mathcal{L}_{\text{PDE}} \quad (2)$$

$$\mathcal{L}_{\text{Data}} = \frac{1}{N_{\text{Data}}} \sum_i^{N_{\text{Data}}} (u_i - \hat{u}_i)^2 \quad (3)$$

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \frac{1}{N_{\text{PDE}}} \sum_j^{N_{\text{PDE}}} (\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2 + \frac{1}{N_{\text{PDE}}} \sum_j^{N_{\text{PDE}}} \left(\frac{D\hat{u}_j}{Dt} + \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}_j - \hat{\nu} \nabla^2 \hat{\mathbf{u}}_j \right)^2 \quad (4)$$

ここで、 $\mathcal{L}_{\text{Data}}$ は教師データとの二乗誤差を、 \mathcal{L}_{PDE} は支配方程式との残差を示す。また、 w_{Data} 、 w_{PDE} は各項に与える重みであり $w_{\text{Data}} = w_{\text{PDE}} = 1$ とした。 N_{Data} 、 N_{PDE} は $\mathcal{L}_{\text{Data}}$ 、 \mathcal{L}_{PDE} の評価点数であり本研究では $N_{\text{Data}} = 1,000$ 、 $N_{\text{PDE}} = 10,000$ とした。 u_k は水平速度の教師データ、 $\hat{\mathbf{u}}_k$ 、 \hat{p}_k は速度ベクトル、圧力に関するPINNsの予測値、 $\hat{\nu}$ は動粘性係数の推定値である。PINNsの中間層は7層とし、1層あたり20ニューロン、活性化関数には $\tanh(\cdot)$ を採用し、Adamによる学習を100,000エポック行った。教師データのサンプリングにおいては、広く用いられるランダムサンプリング²⁾に対し、PODにより抽出される空間モードに基づくサンプリングを行った。前者では、図2左側に示すように、空間内からランダムにデータを抽出し、後者では、同図右側に示すように、空間特徴が極大となる領域から重点的に抽出した。

4. 解析結果

ランダムサンプリング、およびPODサンプリングを用いた場合の流れ場の学習結果、および動粘性係数の推定結果を表1、表2に示す。表1には、100ステップ目における水平速度、鉛直速度のPINNs予測値と数値解との相対 ℓ^2 誤差を記している。同表より、PODサンプリングを用いた学習により速度場の正確な学習が可能となることが確認できる。また、表2には学習終了時

表2 動粘性係数推定結果 (括弧内: 真値との誤差)

$\hat{\nu}$ (m ² /s)	ランダム	POD
最終推定値	0.0153 (+53.2%)	0.0124 (+23.8%)
平均推定値	0.0154 (+53.8%)	0.0125 (+24.7%)

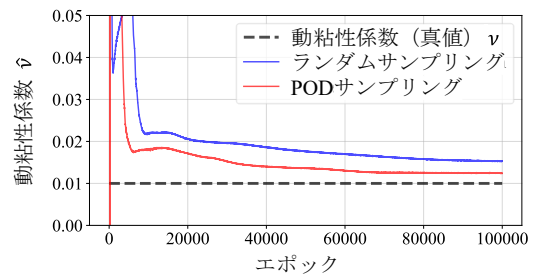


図3 動粘性係数推定値の推移

の $\hat{\nu}$ の値と、学習終了直前1,000エポックにおける $\hat{\nu}$ の平均値を示す。同表から、PODサンプリングでの推定誤差はランダムサンプリングの半分以下であることが確認できる。これは空間特徴を重視することで速度の主要な情報を学習に取り込むことができ、速度場の学習の高精度化に伴いパラメータ推定が容易になったためと考えられる。なお、図3には学習中の $\hat{\nu}$ の推移を示しており、PODサンプリングはパラメータ推定において真値への高速な収束に寄与していることが確認できる。

5. 結言

本研究では、PINNsを用いた流れ場の学習と逆解析においてPODによる特徴抽出を介することで両者の高精度化を確認した。特に逆解析では、PODサンプリングは広く用いられるランダムサンプリングと比較して25~30%程度高精度なパラメータ推定を実現し、数値実験を通して、学習データ少量時には空間特徴を重視した学習が有効であることを示した。

参考文献

- 1) He, K., Zhang, X., Ren, S., Sun, J.: Deep Residual Learning for Image Recognition, *Computer Vision and Pattern Recognition*, 2016.
- 2) 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.
- 3) 出口翔大, 浅井光輝, 植木裕人, 竹内友紀, 川崎浩司: 数値解析のサロゲートモデリングによる確率論的災害リスク評価手法の開発, *土木学会論文集 A2 (応用力学)*, Vol. 76, No. 2, 2020.