

疎な解析解を用いた Physics-Informed Neural Networks の学習収束性の向上

山梨大学 正会員 宮本 崇
山梨大学 学生会員 佐々木 勇人

1. はじめに

Physics-Informed Neural Networks (PINNs) ¹⁾ は現象の従う支配方程式を損失関数に導入したニューラルネットワーク (NN) であり、物理法則に反しない推論を行う機械学習モデルの設計法の 1 つとして近年に研究が進んでいる。PINNs の利用法の 1 つに微分方程式系を解く際のソルバーとして用いる、すなわち順問題の求解に利用するものがあり、このような利用法では次式に示す損失関数 L を最適化することによって支配方程式 $F[u] = 0$ を満たす推論解 $\hat{u}$ を出力する NN を得る。

$$L = F[\hat{u}] + \|\hat{u} - u^{\text{b.c. \& i.c.}}\| + \|\hat{u} - u^{\text{train}}\| \quad (1)$$

ここで、右辺第 1 項は NN の推論解 $\hat{u}$ が支配方程式を満足するための拘束を、第 2 項は境界条件や初期条件を満足するための拘束を意味している。また第 3 項は、観測データなどの形で部分的に解が得られている場合に教師データ u^{train} として利用することを意味しているが、順問題の求解の際には必ずしも必要としない付加的な項である。

PINNs を順問題の求解に利用する場合は、他のソルバーと比較して計算の高速性や要素離散化を必要としない等の有意性が得られることが期待されている^{2),3)}。一方で、式 (1) に示す損失関数の最小化においては勾配降下法が機能せず十分に解が収束しないケースがあるなど、PINNs の学習収束性の問題が主要な研究課題の 1 つとなっている。そこで本研究では、順問題の求解に PINNs を利用する際の学習収束性の向上を目的として、疎な離散化の下で高速に計算される解析解を援用した PINNs の学習法を提案し、その有効性に関する基礎検討を行った結果を報告する。

2. 提案手法

ある微分方程式 $F[u] = 0$ のソルバーとして PINNs を用いる場合、一般に (1) 式における第 1 項のみが用いられる。これに対して、本研究では疎な離散化の下で有限要素法などのソルバーを用いて $F[u] = 0$ を解くことで得られる解 u^{coarse} を教師データに用いながら、より高精細な解 $\hat{u}^{\text{fine}}$ を出力する PINNs を以下の損失関数を最適化することによって得る。

$$L = F[\hat{u}^{\text{fine}}] + \|\hat{u}^{\text{fine}} - u^{\text{b.c. \& i.c.}}\| + \|\hat{u}^{\text{fine}} - u^{\text{coarse}}\| \quad (2)$$

PINNs の学習が収束しない原因の 1 つは、(1) 式における第 1 項が最適化問題の性質を悪化させており勾配降下法が機能しないためであることが解析的に示されている⁴⁾。そこで、本研究では (2) 式における第 3 項を付加することにより、NN の出力を誘導し最適化を容易にすることを狙いとしている。また提案手法は、疎に求解された u^{coarse} を NN によって高精細化する、超解像としてのタスクに PINNs を利用したものともみなすこともできる。

3. 有効性の検証

(1) 問題設定

提案手法の有効性を検討するために、本稿では時刻 t と空間座標 x の関数 $u(t, x)$ に関する以下の偏微分方程式を解く問題を考える。

$$\ddot{u} = c^2 u'' \quad (3)$$

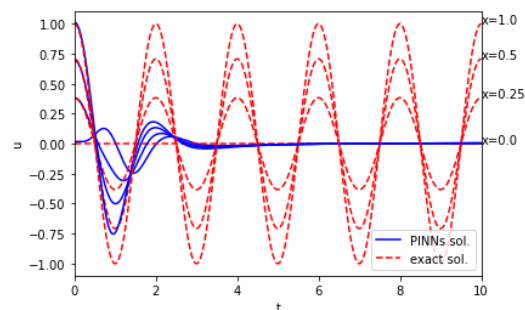


図-1 偏微分方程式の理論解と PINNs 解の比較

Key Words: Physics-Informed Neural Networks, 動的問題, 収束性

〒400-8511 山梨県甲府市武田 4-3-11

この偏微分方程式は、境界条件 $u(t, 0) = 0$, $u'(t, L) = 0$ および初期条件 $u(0, x) = \sin \frac{\pi}{2L}x$, $\dot{u}(0, x) = 0$ の下で振動解 $u^{\text{exact}}(t, x) = \cos \frac{c\pi}{2L}t \cdot \sin \frac{\pi}{2L}x$ を有する。

上記の問題に対して著者らの既報⁵⁾ に示す設定で PINNs を学習させたとき、 $c = 1$ では解が収束する一方で $c = 2$ とした場合には同じ計算条件であっても図-1 に示すように解が収束しない。そこで、提案のように疎な解を教師データとして与えることによる PINNs の学習収束性の向上度合いを以下のように検証した。

(2) 教師データの疎度と PINNs の収束性の関係

PINNs を用いて上記の偏微分方程式を $t \in [0, 10]$, $x \in [0, 1]$ の範囲で求解し、 $\Delta t^{\text{fine}} = 0.01$, $\Delta x^{\text{fine}} = 0.001$ の間隔で解の値を評価するものとする。このとき、(2) 式において疎な教師データとして与える u^{coarse} の疎度 Δt^{coarse} および Δx^{coarse} を、パラメタ α を用いて $\Delta t^{\text{coarse}} = \alpha \cdot \Delta t^{\text{fine}}$, $\Delta x^{\text{coarse}} = \alpha \cdot \Delta x^{\text{fine}}$ として調整しながら、PINNs によって最終的に得られる解 $\hat{u}^{\text{fine}}$ の有する誤差 $E = \sqrt{\sum_{t,x} (u^{\text{exact}}(t, x) - \hat{u}^{\text{fine}}(t, x))^2}$ と α の関係性を評価した。なお、 $\bullet$ は変数 $\bullet$ の平均を意味するものとする。

(3) 結果と考察

教師データの疎度パラメタを $1 \leq \alpha \leq 33$ まで変化させたときの、PINNs による解の誤差 E の推移を図-2 に示す。同図には、教師データを用いず (2) 式第 1 項のみで最適化を行った場合、すなわち図-1 の場合の誤差も併せて示している。 $\alpha = 1$ とは、PINNs による解の全評価点で予め正解値を教師データとして与えることを意味しており、この時の誤差は 10^{-3} のオーダーとなっている。これに対して α を徐々に大きくした場合、誤差に変動はあるものの教師データが疎になるほど収束性が悪化するという傾向はみられず、 $\alpha = 33$, すなわち本来の評価点に比較して約 1000 分 1 の評価点でしか教師データが与えられない場合も PINNs は教師データが無い場合と比較して高い収束性能を示し、得られた解も図-3 に示すように一定の精度を保持している。

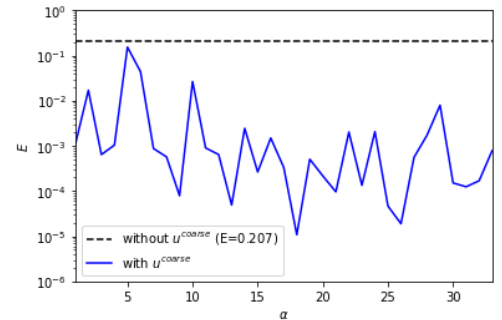


図-2 教師データの疎度 α と誤差 E の関係

この結果は、疎な離散化の下で求められる偏微分方程式の解析解が、PINNs によって高精細な求解を行う際に有用な教師データとなり得ることを示唆しており、PINNs の学習収束性の向上を目的とする提案手法の有効性を示している。

4. おわりに

本稿では、PINNs を偏微分方程式の求解に用いる際の学習収束性を向上させる手法を提案し、その有効性に関する基礎検討を行った。離散化が十分に疎であり u^{coarse} の計算時間が NN の学習時間に比するものであれば、提案手法は NN の学習における前処理の一種として活用できることが期待できる。今後はそのような計算時間の観点からの検討や、より多様な問題設定の下での有効性の検証を行う。

参考文献

- 1) Raissi, M., 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) Sahli Costabal, Francisco, Yibo Yang, Paris Perdikaris, Daniel E. Hurtado, and Ellen Kuhl: Physics-Informed Neural Networks for Cardiac Activation Mapping, *Frontiers in Physics* 8, Vol.42, 2020.
- 3) Fang, Zhiwei, and Justin Zhan: A Physics-Informed Neural Network Framework for PDEs on 3D Surfaces: Time Independent Problems, *IEEE Access*, Vol.8, pp.26328–26335, 2020.
- 4) Krishnapriyan, Aditi S., Amir Gholami, Shandian Zhe, Robert M. Kirby, and Michael W. Mahoney: Characterizing Possible Failure Modes in Physics-Informed Neural Networks, *Advances in Neural Information Processing Systems*, pp.26548–26560, 2021.
- 5) 宮本崇, 西尾真由子, 全邦釘: Physics-Informed Neural Networks による 1 次元連続体の動的解析, *AI・データサイエンス論文集*, Vol.2, No.J2, pp.152–156, 2021.

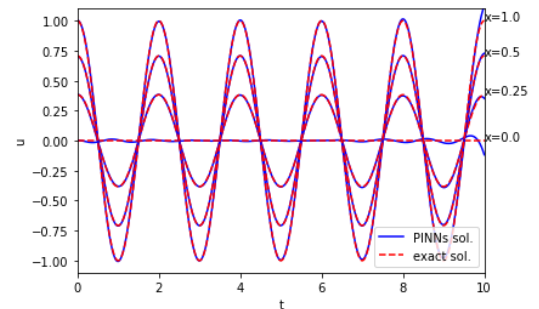


図-3 $\alpha = 33$ の場合の PINNs 解