

PINNs による空隙率推定の基礎検討

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. はじめに

街区への津波遡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

既存の研究¹⁾では、不透水性の円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。本研究では、OpenFOAM という計算ソフトを使用して実測データを取得した。

図-1 に作成したモデルの概略図を示す。赤い領域は不透水性の四角柱、黄色い領域を学習に用いる領域を表している。

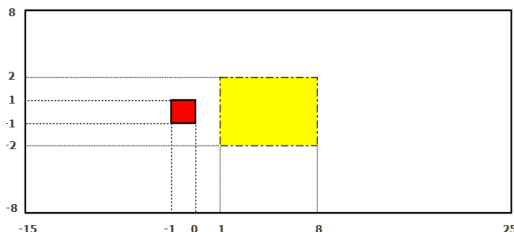


図-1 モデルの概略図

今回データの取得に使用したモデルは、M.Raissi ら¹⁾と同様に、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。

2.2. PINNs による学習

取得したデータを実測データとみなし、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。

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

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。

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

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。

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

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。今回は、M.Raissi ら¹⁾に則り中間層は 8 層とし、それぞれの層のニューロンの数は 20 とする。

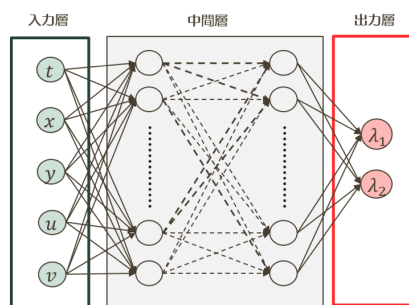


図-2 ニューラルネットの構造

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. 学習結果

3.1. 学習の推移

以下にそれぞれの値の学習推移を示す。 x 軸はそれぞれの値、 y 軸は学習回数を表している。ただし、図-5の x 軸は $1/10^4$ スケールとしている。

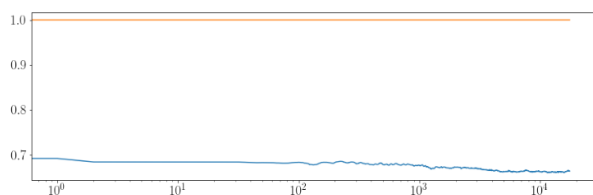
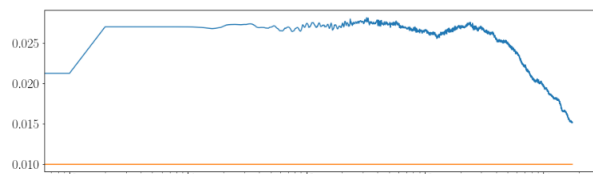
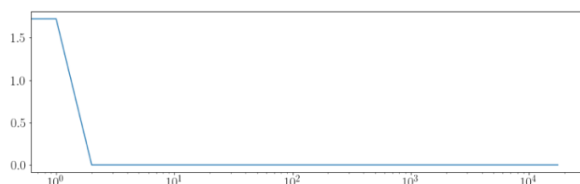
図-3 λ_1 の学習推移図-4 λ_2 の学習推移

図-5 損失関数の学習推移

また表-1に、学習した予測結果を示す。

表-1 予測結果

	真値	予測値
λ_1	1.00	0.66295
λ_2	0.01	0.01517
損失関数	0	454

表-1から損失関数は0に十分に近づくことはできていないものの、 λ_1 , λ_2 共に、真値に比較的近い値が得られた。しかし、 λ_1 の変化が損失関数に与える影響があまりみられないことから、現状の学習では真値の予測には不十分であり、さらなる調査が必要である。

3.2. 予測分布

図-6に表-1で予測された λ_1 , λ_2 を用いた支配方程式から求められる速度場の予測分布を示す。上段は x 軸方向の速度場、下段は y 軸方向の速度場、左列は予測分布、中央列は真値と予測値との差の分布、右列は真値の分布を表している。

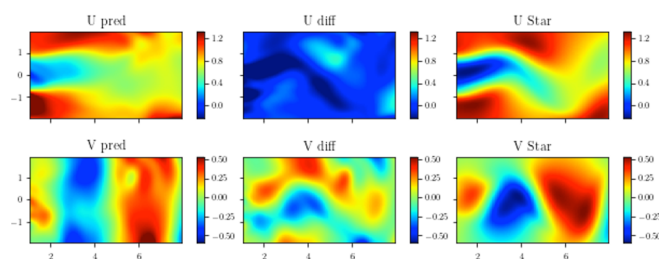


図-6 速度場の予測分布

図-6から速度分布は大まかな特徴を捉え切れている事がわかる。特に、 x 軸方向の速度場は真値との差が比較的小さく、PINNsによる学習が正しく行えていると判断した。

4. 結論

PINNsを用い、まずは流体の実測データの特徴を再現可能なパラメータ推定を実施した。計算精度には、教師データ数の設定方法、その他ハイパーパラメータの設定が精度に大きく影響を与え、まだ継続した議論が必要である。本研究による数値テストによると、図-4に示すように、 λ_2 は学習の途中で今後も低下し続ける傾向にある。このことから、学習するデータ数を増やす、もしくは学習回数を増やすことで計算精度の改善は可能と考えている。

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