

空間特徴量抽出を援用した PINNs によるパラメータ逆解析の効率化 Efficiency improvement of PINNs inverse analysis by extracting spatial features of data

出口 翔大 (九州大・工) 柴田 洋佑 (九州大・工) 浅井 光輝 (九州大・工)

Shota DEGUCHI, Kyushu University
Yosuke SHIBATA, Kyushu University
Mitsuteru ASAI, Kyushu University
E-mail: deguchi@doc.kyushu-u.ac.jp

Increasing frequency of heavy rainfalls have been drawing attention to expected flood and sediment disasters, which are often modeled as single-phase flow for simplicity; however, it is challenging to estimate the equivalent material parameters as empirical laws and man-powered iterations are introduced. In this context, we focus on PINNs (Physics-Informed Neural Networks) applicability to inverse problems and investigate the improvement by data sampling measures. We present its accuracy is improved with the use of POD (Proper Orthogonal Decomposition) to extract spatial features, instead of the conventional random sampling.

1. 緒言

過去 50 年間で、「猛烈な雨」とされる 1 時間降水量 80mm 以上の年間発生回数は急増しており、同傾向は今後も継続すると予想される。近年では、豪雨災害に誘発される土砂災害の頻発化により、数値解析による災害の再現・予測が要求されている。土砂災害は一般に水と土砂が混ざり合う混相流問題であるが、計算資源の低減・広域解析の実現のため巨視的に等価な単相流へ置き換えられることが多い。こうした等価物性値の同定には、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。

本研究では上記を、観測値から物理パラメータを推定する逆問題と読み替え、対象となる物理現象の支配方程式を損失関数に組み込んだ PINNs (Physics-Informed Neural Networks) を用いて当該流体の密度と動粘性係数を推定する。従来の PINNs 逆解析では、観測量を時空間的にランダムサンプリングすることが主流であったが、本研究では固有直交分解 (POD: Proper Orthogonal Decomposition) による特徴抽出を行い、逆解析の効率化・高精度化を検討した。

2. 問題設定

先行研究^{1),2)}に倣い、障害物背面で発生するカルマン渦の流れ場から流体の密度と動粘性係数を推定する問題を取り上げ、OpenFOAM を用いて教師データを作成した。Fig. 1 に示す 16(m) × 40(m) の矩形領域 (Fig. 1 内 Computational Region) 内に 1(m) × 1(m) の不透水性四角柱を設置し、左端境界に一樣流速 1(m/s)、右端境界には圧力 0(Pa)、上下境界にはすべり条件を与えた。時間増分は 0.1(s) とし、実時間 20(s) の解析を実施した。また、密度と動粘性係数は $\rho = 1.0(\text{kg/m}^3)$ 、 $\nu = 0.01(\text{m}^2/\text{s})$ とし、教師データは四角柱背面の小領域 (Fig. 1 内 Learning Region) から取得した^{1),2)}。

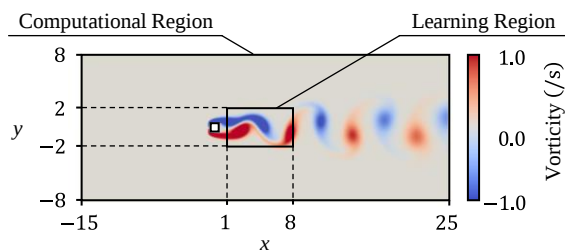


Fig. 1 Problem setup

3. POD によるモード分解

従来、PINNs による逆解析ではランダムなデータサンプリングが行われてきたが、時空間的に分布するデータには時間的・空間的特徴が存在し、これらは POD により切り分けることができる^{3),4)}。時空間分布するデータ行列を $\mathbf{D}$ とすると、POD により以下のように分解することができる。

$$\mathbf{D} = \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}\mathbf{B}^T = \sum_m^M \gamma_m \boldsymbol{\alpha}_m \boldsymbol{\beta}_m^T \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{D}$ は列方向にデータの空間分布を、行方向に時間分布を保持するものとする。また、 $\mathbf{A}$ は $\mathbf{D}$ の空間モードを、 $\mathbf{B}^T$ は時間モードを表し、 $\mathbf{\Gamma}$ は特異値を要素とする対角行列である ($\gamma_{m+1} \geq \gamma_m$)。なお、 $\boldsymbol{\alpha}_m$ 、 $\boldsymbol{\beta}_m^T$ は第 m 次空間・時間モード成分を、上付き文字 $(\cdot)^T$ はベクトル・行列の転置を示す。Fig. 2 には、Learning Region 内の水平速度分布とその主要な空間モードを示す。

4. Physics-Informed Neural Networks による逆解析

PINNs は、二乗誤差に加え自動微分⁵⁾により算出される支配方程式との整合性を考慮した学習を行う。非圧縮性流れを対象とする本研究では、その損失関数 $\mathcal{L}$ を以下のように定義した。

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

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

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

ここで、 $\mathcal{L}_{\text{Data}}$ は教師データとの二乗誤差、 $\mathcal{L}_{\text{PDE}}$ は支配方程式との整合度を評価する損失項であり、本研究ではそれぞれ「データ損失」、「物理損失」と呼ぶこととする。 w_{Data} 、

✕ : Data sampling point

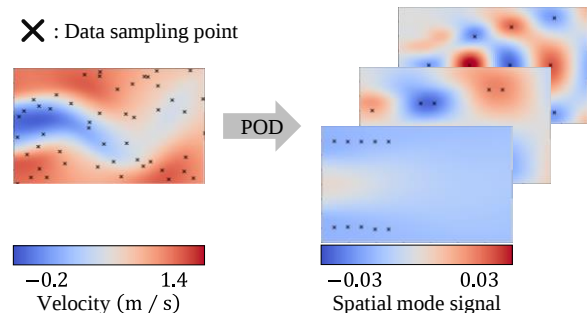


Fig. 2 Schematic of proper orthogonal decomposition

w_{PDE} は各損失項に与える重みである²⁾(本研究では $w_{Data} = w_{PDE} = 1.0$). $\mathbf{u}_k, p_k$ は速度, 圧力に関する教師データであり, $\hat{\mathbf{u}}_k = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_k, t_k), \hat{p}_k = \hat{p}(\mathbf{x}_k, t_k)$ は対応する PINNs 予測値, $\hat{\rho}, \hat{\nu}$ は各パラメータの推定値を示す. また, N_{Data} はデータ損失評価点数(教師データ数), N_{PDE} は物理損失評価点数であり, 本研究では 10 タイムステップ毎に $N_{Data} = 50$, $N_{PDE} = 250$ だけ取得した. なお, $\hat{\mathbf{u}}, \hat{p}$ は入力値 $\mathbf{x} := (\mathbf{x}, t)$ に対するネットワーク出力値 $\hat{\mathbf{y}} := (\hat{\mathbf{u}}, \hat{p})$ として得られる. 層数 L のネットワークにおける第 $l(= 1, 2, \dots, L)$ 層の出力値は, 以下により与えられる.

$$\mathbf{z}^l = \sigma^l(\mathbf{W}^l \cdot \mathbf{z}^{l-1} + \mathbf{b}^l)$$

(5)

ここで, $\mathbf{z}^0 = \mathbf{x}$, $\mathbf{z}^L = \hat{\mathbf{y}}$ であり, $\mathbf{W}^l, \mathbf{b}^l, \sigma^l(\cdot)$ は第 l 層における重み, バイアス, 活性化関数である. 本研究では, ネットワーク構造は中間層を 9 層, 1 層当たりのニューロン数を 64 として活性化関数には $\tanh(\cdot)$ を採用し^{1), 2)}, L-LAAF⁶⁾を加えた Adam⁷⁾による 100,000 エポックのフルバッチ学習を行った.

4. 1. ランダムサンプリング

式(3)に示す通り, PINNs による逆解析では教師データのサンプリングが必要となる. 従来の PINNs 逆解析に用いられてきたランダムサンプリング^{1), 2)}では, Learning Region 内から一様抽出を行う (Fig. 2 左側参照). Fig. 2 内では, データのサンプリング点を $\times$ 印で示している. しかしながら, 同手法は時空間上に存在するデータの特徴を反映したものではなく, 非効率的なデータサンプリングである.

4. 2. POD サンプリング

本研究では POD サンプリングを提案する. POD サンプリングでは, 式(1)に示すように時空間分布するデータを POD 解析し, 特に空間特徴が強く発現する領域から重点的にサンプリングを行うことで空間特徴量を考慮したデータの抽出が可能である (Fig. 2 右側参照). 本研究では水平速度を POD 解析し, 第 1~5 次モードで空間特徴が極大化する領域から 10 点ずつサンプリングすることで, 10 ステップ当たり $N_{Data} = 50$ が満足されるよう調整した.

5. 解析結果

ランダムサンプリングと POD サンプリングによる逆解析結果として, 学習終了直前の 1,000 エポック間における $\hat{\rho}, \hat{\nu}$ の平均値と標準誤差を Table 1, および Table 2 に示す. Table 1, Table 2 より, ランダムサンプリングと POD サンプリングの両者で $\hat{\rho}, \hat{\nu}$ が真値 ($\rho = 1.0(\text{kg/m}^3)$, $\nu = 0.01(\text{m}^2/\text{s})$)を推定できているが, それぞれを比較すれば, 後者によるパラメータ推定値が前者より高精度であることが確認できる. 両者で同一のネットワーク構造, 学習アルゴリズムを用いたことから, 以上の逆解析の高精度化は POD サンプリングによる空間特徴を抽出した学習によるものと結論付けることができ, 提案法である POD サンプリングの優位性が確認できる.

Table 1 Summary of density ($\hat{\rho}$) estimate
(Mean $\pm$ standard error $\times 10^{-6}$)

$\hat{\rho}$	Random	POD (Ours)
Estimate (kg/m ³)	1.0128 $\pm$ 1.37	1.0117 $\pm$ 1.14
Error (%)	1.28	1.17

Table 2 Summary of kinematic viscosity ($\hat{\nu}$) estimate
(Mean $\pm$ standard error $\times 10^{-8}$)

$\hat{\nu}$	Random	POD (Ours)
Estimate (m ² /s)	0.01128 $\pm$ 7.62	0.01106 $\pm$ 8.58
Error (%)	12.79	10.62

6. 結言

本研究では PINNs の逆解析への適用性に着目し, 時空間に分布するデータを POD により時間・空間依存性を分離して, 空間特徴が集中する領域からサンプリングすることで逆解析精度が向上することを確認した. 本研究では特に水平速度を POD 解析し, その上位 5 つの空間モードに基づいたサンプリングを行ったが, 鉛直速度・圧力を POD 解析することも可能である. 今後は POD 解析する物理量による解析精度の変動を検討する計画である. また, 各モードには特異値 γ_k が存在し, これは全モード中における第 k 次モードの重要度と見ることができる. 本研究では各モードから 10 点ずつのデータ抽出としたが, モード毎にサンプリング点数を変化させるべきかについても検討する.

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.

2) 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝: 予測に物理的意味を付与した機械学習 PINNs による誤差を含む教師データからのパラメータ推定, *土木学会論文集 A2 (応用力学)*, Vol. 77, No. 2, pp. I_35-I_45, 2021.

3) My Ha, D., Pavel, T., Eng Soon C.: Tsunami forecasting using proper orthogonal decomposition method, *Journal of Geophysical Research: Oceans*, Vol. 113, No. C6, 2008.

4) 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.

5) Baydin, A.G., Pearlmutter, B.A., Radul, A.A., Siskind, J.M.: Automatic differentiation in machine learning: A survey, *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 18, pp. 1-43, 2018.

6) Jagtap A.D., Kawaguchi K., Karniadakis G.E.: Locally adaptive activation functions with slope recovery for deep and physics-informed neural networks, *Proceedings of Royal Society A*, pp. 4762020033420200334, 2020.

7) Kingma, D., Ba, J.: Adam: A Method for Stochastic Optimization, *International Conference on Learning Representations*, 2014.