

弱形式化した支配方程式を学習する Variational PINN による熱伝導方程式の逆解析 (シンポジウム講演概要)

Inverse Analysis of Heat Equation using Variational PINN (Proceedings of Symposium on Applied Mechanics)

出口 翔大 (九州大・工) 浅井 光輝 (九州大・工)
Shota DEGUCHI, Kyushu University
Mitsuteru ASAI, Kyushu University
E-mail: deguchi@doc.kyushu-u.ac.jp

PINN (Physics-Informed Neural Network) has been one of the most promising scientific machine learning models to evaluate physical phenomena. It has been applied to a wide range of partial differential equations (PDEs) thanks to its flexibility (one only needs to impose specific governing equations depending on problems). However, several scenarios and problems have been found, where PINN fails to capture the solutions. One of the potential reasons is that, as is characterized to be a collocation method to evaluate the governing PDEs, it struggles to recover the entire solution when the solution includes a steep change such as shock wave. In this context, hp-VPINN is a powerful candidate to mitigate this issue since it can refine the mesh / polynomials progressively and locally. We investigate its effectiveness with particular focus on the inverse analysis application.

1. 緒言

データ駆動型科学の技術が台頭してから、その実用性が幅広い分野で示され、工学分野にも浸透してきた。近年では、機械学習・深層学習の応用が増加しており、これらの技術を用いて物理問題に取り組む研究が盛んである。特に、物理現象の支配方程式の情報を学習に用いる PINN (Physics-Informed Neural Network) ¹⁾は、順解析、および逆解析の両者に柔軟に対応可能であるという特性を持ち、工学分野から医療分野まで、応用例が広く展開されている²⁾。順解析においては、歴史的に成熟しつつある数値解析技術と比較して、その優位性を示すことは未だ困難な状況にある。一方、逆解析に関しては、限定的に入手可能な観測データ柔軟に取り込むことができるという長所があり、数値解析では実現困難な問題への適用可能性が期待できる。

著者らは、上記の機械学習モデル PINN を用い、非圧縮性流体の流れ場・パラメータ逆解析技術を開発してきた。著者らの先行研究では、逆解析において、データ観測点の配置を検討することで一定の高精度化を達成したものの、数%ポイントの改善に留まっていた³⁾。本稿では、PINN が支配方程式の情報を強形式で学習するのに対し、Petrov-Galerkin 法により弱形式化した支配方程式を学習に取り込む VPINN (Variational PINN) ⁴⁾を導入し、逆解析の高精度化の可能性を検討する。

2. 機械学習手法

2. 1. PINN: Physics-Informed Neural Network

まず、入力を $\mathbf{x}(\in \mathbb{R}^{f_{in}})$ 、出力を $\hat{\mathbf{y}}(\in \mathbb{R}^{f_{out}})$ とする L 層のニューラルネットワークにおいて、第 $l(= 1, 2, \dots, L)$ 層での順伝播 $\mathbf{z}^{(l)}(\in \mathbb{R}^{f_{hidden}})$ は以下の通りである。

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

ここで、 $\mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{x}$ 、 $\mathbf{z}^{(L)} = \hat{\mathbf{y}}$ であり、 $\sigma^{(l)}(\cdot)$ は要素ごとに作用する非線形写像 (出力層でのみ恒等写像) である。また、 $\mathbf{W}^{(l)}$ 、 $\mathbf{b}^{(l)}$ は第 l 層における重み、バイアスである。本稿では、以下に示す無次元化した非定常熱伝導方程式を考える。

$$\frac{\partial}{\partial t} u + \nabla \cdot (\kappa \nabla u) = f \quad (2)$$

$$u(0, x) = g \quad (3)$$

$$u(t, x_r) = h \quad (4)$$

ここで、 $u = u(t, x)$ 、 $0 \leq t \leq T$ 、 $0 \leq x \leq L$ であり、 u は物体の温度、 κ は熱伝導率、 f は熱源である。本稿では、伝導率は定数 ($\nabla \cdot (\kappa \nabla u) \rightarrow \kappa \nabla^2 u$)、熱源はゼロとして ($f = 0$)、式(2)を簡略化した。また、式(4)、(5)より Dirichlet 型の境界条件のみ考える。ここで、各物理量がニューラルネットワークによって近似されるとき、以下の関係が満足されるべきである。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{u} + \kappa \nabla^2 \hat{u} \approx 0 \quad (5)$$

$$\hat{u}(0, x) \approx g \quad (6)$$

$$\hat{u}(t, x_r) \approx h \quad (7)$$

ここで、ハット付きの文字 $\hat{\cdot}$ は、対応する物理量がニューラルネットワークによる近似解であることを示す。以上より、PINN が最小化する損失関数 $\mathcal{L}_{\text{PINN}}$ は以下のように定義される。

$$\mathcal{L}_{\text{PINN}}(\boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\mu}}) := w_{\text{PDE}}^{\text{Str}} \mathcal{L}_{\text{PDE}}^{\text{Str}} + w_{\text{IC}} \mathcal{L}_{\text{IC}} + w_{\text{BC}} \mathcal{L}_{\text{BC}} + w_{\text{Data}} \mathcal{L}_{\text{Data}} \quad (8)$$

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}}^{\text{Str}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{PDE}}} \left| \frac{\partial}{\partial t} \hat{u}_i + \kappa \nabla^2 \hat{u}_i \right|^2 \quad (9)$$

$$\mathcal{L}_{\text{IC}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{IC}}} |\hat{u}_i - g(x_i)|^2 \quad (10)$$

$$\mathcal{L}_{\text{BC}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{BC}}} |\hat{u}_i - h(t_i, x_i)|^2 \quad (11)$$

$$\mathcal{L}_{\text{Data}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{Data}}} |\hat{u}_i - u(t_i, x_i)|^2 \quad (12)$$

ここで、 $\hat{u}_i = \hat{u}(t_i, x_i)$ である。 $\mathcal{L}_{\text{PDE}}^{\text{Str}}$ は支配方程式との整合性を評価する損失項であり、 $\mathcal{L}_{\text{IC}}$ 、 $\mathcal{L}_{\text{BC}}$ はそれぞれ初期条件、境界条件の誤差を、 $\mathcal{L}_{\text{Data}}$ は観測データとの差異を評価する。なお、式(8)では $\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{W}^{(l)}, \mathbf{b}^{(l)}\}_{l=1}^L$ 、 $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \{\kappa\}$ とした。また、 $w_{\text{PDE}}^{\text{Str}}$ 、 w_{IC} 、 w_{BC} 、 w_{Data} は各項に与える重みである。重みの定め方については未だ議論が展開されているが、本稿では全て1.0とした。

2. 2. VPINN: Variational PINN

PINN は、式(2)に示す支配方程式の情報を直接取り込む(式(9))ことで学習を行う。ここで、元の支配方程式に対する弱形式を考え、弱形式化された支配方程式の情報を学習に用いることを考える。まず、式(2)に対して Dirichlet 境界でゼロとなる試験関数 u^* を乗じ、領域積分を行う。

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} u + \kappa \nabla^2 u \right) u^* d\Omega = 0 \quad (13)$$

拡散項を以下のように書き換える。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla^2 u u^* d\Omega &= \int_{\Omega} \nabla \cdot (\nabla u u^*) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla u^* d\Omega \\ &= \int_{\Gamma} \nabla u u^* d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla u^* d\Omega \\ &= - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla u^* d\Omega \end{aligned} \quad (14)$$

ここで、 Γ 上での積分に関して Dirichlet 境界上で $u^* = 0$ なる条件を用いた。よって、式(13)は以下のように改められる。

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u u^* d\Omega - \kappa \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla u^* d\Omega = 0 \quad (15)$$

弱形式である式(15)において、各物理量をニューラルネットワークにより近似し、VPINN が最小化する損失関数 $\mathcal{L}_{VPINN}$ を以下のように定義する。

$$\mathcal{L}_{VPINN}(\theta, \hat{\mu}) := w_{PDE} \mathcal{L}_{PDE}^{Var} + w_{IC} \mathcal{L}_{IC} + w_{BC} \mathcal{L}_{BC} + w_{Data} \mathcal{L}_{Data} \quad (16)$$

$$\mathcal{L}_{PDE}^{Var} = \left\| \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \hat{u} u^* d\Omega - \kappa \int_{\Omega} \nabla \hat{u} \cdot \nabla u^* d\Omega \right\|^2 \quad (17)$$

ここで、 $\mathcal{L}_{PDE}^{Var}$ は弱形式化された支配方程式との整合性を評価する損失項である。式(8)と(16)は類似しているが、支配方程式の情報の組み込み方が強形式・弱形式のいずれに基づくかによって異なる。なお、各項に与える重みについては PINN と同様に全て1.0とした。

3. PINN および VPINN による逆解析

式(2)-(4)に示す非定常熱伝導問題において、いくつかの点で観測される物体の温度から、伝導率の逆解析を行った。初期条件に $g = \sin(\pi x/L)$ を、境界条件に $h = 0$ を与えれば、温度分布 u には以下の解析解が存在する。

$$u(t, x) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\kappa \pi^2 t}{L^2}\right) \quad (18)$$

本稿では $T = 5$, $L = 1$, $\kappa = 0.1$ として Figure 1 に示す解を得た。Figure 1 にマゼンタ色の四角形で示す点が観測点であり、式(12)における $u(t_i, x_i)$ に相当する。ここでは、 $x = \{0.25, 0.5, 0.75\}$ の3点において、 $t = 1, 2, 3, 4$ に観測される温度の情報から伝導率を逆解析した。適用したニューラルネットワーク構造は PINN と VPINN で共有であり、 $f_{hidden} = 5$, $L = 4$, $\sigma^{(l)}(\cdot) = \tanh(\cdot)$ とした。VPINN においては、空間を部分領域へ分割しない場合と、3要素・5要素へ等分割する場合を考慮した。また、式(17)の積分には Gauss-Lobatto 求積法を用い、求積点は t, x 方向にそれぞれ10点ずつ配置した。また、試験関数には5次までの Legendre 多項式を用いた。VPINN の求積点を100点としたことから、PINN では $N_{PDE} = 100$ とした。なお、 $N_{IC} = 50$, $N_{BC} = 100$, $N_{Data} = 12$ は両者で共通である。

30,000エポックの学習を行った結果、最終1,000エポック間での平均値、標準誤差、および真値との誤差を Table 1 に示す。PINN が最も高精度であり、次いで分割なし、5要素、3要素の順に精度が良い結果であった。

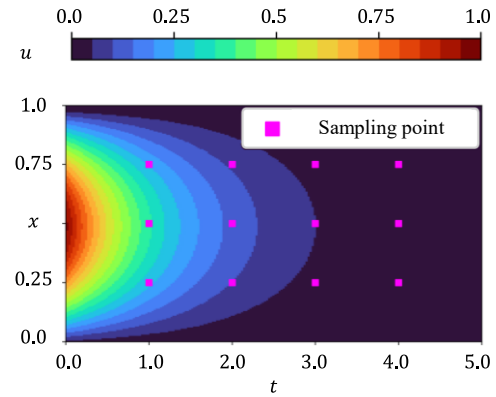


Figure 1 Problem setup and geometry

Table 1 Inverse analysis of diffusion rate $\kappa (= 0.1)$

	Estimate	Relative Error [%]
PINN	0.1001 ($\pm 8.8 \times 10^{-7}$)	0.116
VPINN (1 element)	0.1004 ($\pm 7.0 \times 10^{-8}$)	0.377
VPINN (3 elements)	0.1009 ($\pm 9.2 \times 10^{-7}$)	0.929
VPINN (5 elements)	0.1008 ($\pm 9.2 \times 10^{-7}$)	0.783

4. 結言

本稿では、主に順解析への適用に向けて議論が進められてきた VPINN に関して、その逆解析への適用性に注目し、PINN と VPINN での逆解析精度の比較を行った。基礎検討として熱伝導方程式を考え、観測データから物体の熱伝導率を逆解析した結果、PINN が要素分割を行った VPINN より高精度な結果を得た。現状では、VPINN の学習に用いる試験関数の次数や隠れ層の自由度 f_{hidden} の定め方に関する指針が不明瞭であり、議論の余地が残されている。さらに、活性化関数の選択や求積点の数など、これまで PINN の文脈で知られてきた経験が適用できない領域にある可能性がある。また、VPINN の空間分割に関しては、今回の問題は解が急激に変化する問題でなかったため、空間分割の有効性が希薄であった。解が局所的かつ急激に変動する問題への応用を通し、VPINN がどのような問題で有用となるか検討する必要がある。以上の検討に関しては、講演会で発表したい。

参考文献

- 1) M. Raissi, P. Perdikaris, 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) A. Arzani, J.X. Wang, R.M. D'Souza: Uncovering near-wall blood flow from sparse data with physics-informed neural networks, *Physics of Fluids*, Vol. 33, No. 7, pp. 071905, 2021.
- 3) 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝: 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, 土木学会論文集, Vol. 79, No. 15, 2022.
- 4) E. Kharazmi, Z. Zhang, G.E.M. Karniadakis: hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 374, pp. 113547, 2021.