

# 物理モデリングとデータ駆動モデリングを繋ぐ Physics-informed machine learning

宮本 崇<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 国立大学法人山梨大学

e-mail : tmiyamoto@yamanashi.ac.jp

## 1 はじめに

機械学習を用いた現象のデータ駆動モデリングは、想定する条件の下で結果を予測する順解析、観測等から得られる結果から条件を推測する逆解析、現象が従う支配方程式を推測する知識発見などの様々な場面において成功を収めている。一方で、データ駆動モデルの予測した解がエネルギー保存則などの物理的要請を満たすかどうかという物理的整合性の問題や、モデルの学習の際に大量のデータの準備を必要とするデータ量の問題、モデルの学習に用いられる教師データと全く異なる場面における推論性能を確保できるかどうかという外挿性の問題は、複雑な物理的事象を扱う分野領域での機械学習の応用に際して解決が望まれる重要な課題である。

このような基礎科学における機械学習応用上の課題に対して、物理的な知見を機械学習に組み込むハイブリッド的なアプローチの有効性が近年に提唱され、具体的な手法の提案や応用が進んでいる [1, 2]。本発表では、このような物理モデリングとデータ駆動モデリングを組み合わせた手法である Physics-Informed Machine Learning (PIML) について、その概要や具体的な事例、現在の研究課題などを議論する。

## 2 PIML の概要

PIML は、データ駆動モデルの高速性や柔軟性と、物理モデルの解釈性や外挿性を相補的に利用する意図に基づいたアプローチであり、順解析・逆解析・知識発見などの場面における機械学習の利用に際して、データ駆動モデルの解釈性・物理的整合性の向上、学習データの補完、外挿性能の向上などの目的のために用いられている [3, 4]。

PIML の方法では、データ駆動モデリングのプロセスにおける数値モデルの設計や最適化に際して、物理的な知見を援用することでモデルの性能を向上させている。Neural Network の損失関数に支配方程式の情報を採り入れることで、最適化モデルの出力結果が支配方程式を満たすようにする Physics-Informed Neural Networks(PINNs) は PIML の具体的な手法の 1 つであり、順解析問題のメッシュフリーな求解や ill-posed な逆解析問題の求解、部分的なデータからの内挿・外挿などに用いられている [5]。また、非線形力学系を線形モードの無限級数として表現できるという作用素論の成果を背景理論として、観測データの有する線形モードに基づいて非線形現象の物理をデータ駆動的に分析する Koopman 作用素論の方法論は、流体場の解析や制御などに利用されている [6]。これらの方法は、前述のようにデータ駆動モデルに解釈性や外挿性能を与えるだけでなく、求解・解析の可能な問題領域を拡張しているという点においても大きな科学的意義を有している。

## 3 PIML の課題

PIML は様々な理学的・工学的応用が進む一方で、その数値手法には理論的に未解明な点や課題も多く有している。PINNs による微分方程式の順解析を例にとると、簡単な形式の微分方程式であっ

ても求解できないケースがあり，その原因は支配方程式に起因する項が損失関数の凸性を低下させるために勾配降下法による最適化が機能しないためであることが知られている [7]．また，Koopman 作用素論に基づく非線形現象の解析においては，その背景理論を良い近似で成立させるための一般的な手続きが確立されておらず，形式的に適用してしまうと現象本来の物理からは離れた結果が得られることに注意しなければならない [8]．

このように，PIML の方法論は実データへの適用に際してはいまだ大きな課題を有しており，その解決に向けた研究が盛んに行われている [例えば 9, 10, 11]．具体的な手法の開発・改良とともに，数理手法としての本質的な理解に向けた理論的検討も今後期待される．

## 参考文献

- [1] T. Miyamoto, Paradigm Shift Through the Integration of Physical Methodology and Data Science, arXiv preprint arXiv:2110.01408, 2021.
- [2] J. Willard, X. Jia, S. Xu, M. Steinbach, and V. Kumar, Integrating Scientific Knowledge with Machine Learning for Engineering and Environmental Systems, *ACM Comput. Surv.*, 2022.
- [3] R. Rai and C. K. Sahu, Driven by Data or Derived Through Physics? A Review of Hybrid Physics Guided Machine Learning Techniques With Cyber-Physical System (CPS) Focus, *IEEE Access*, vol. 8, 2020.
- [4] L. von Rueden et al., Informed Machine Learning – A Taxonomy and Survey of Integrating Prior Knowledge into Learning Systems, *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, vol. 35, no. 1, 2023.
- [5] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, Physics-informed machine learning, *Nature Reviews Physics*, vol. 3, no. 6, 2021.
- [6] S. L. Brunton and J. Nathan Kutz, Data-Driven Science and Engineering: Machine Learning, Dynamical Systems, and Control. Cambridge University Press, 2022.
- [7] A. Krishnapriyan, A. Gholami, S. Zhe, R. M. Kirby, and M. W. Mahoney, Characterizing possible failure modes in physics-informed neural networks, *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, 2021.
- [8] S. L. Brunton, B. W. Brunton, J. L. Proctor, and J. N. Kutz, Koopman Invariant Subspaces and Finite Linear Representations of Nonlinear Dynamical Systems for Control, *PLoS One*, vol. 11, no. 2, 2016.
- [9] J. Müller and M. Zeinhofer, Achieving high accuracy with PINNs via energy natural gradients, *ICML*, 2023.
- [10] N. Takeishi, Y. Kawahara, and T. Yairi, Learning Koopman invariant subspaces for dynamic mode decomposition, *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, 2017.
- [11] S. Zheng, T. Miyamoto, S. Shimizu, R. Kato, and K. Iwanami, Coordinate-Transformed Dynamic Mode Decomposition for Short-Term Rainfall Forecasting, *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 62, 2024.

# 変分エネルギー型物理情報深層学習に基づく収縮破壊パターン形成計算

伊藤 伸一<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 東京大学地震研究所

e-mail : ito@eri.u-tokyo.ac.jp

## 1 概要

収縮によって誘起される破壊は、泥の乾燥亀裂・ガラスの熱収縮によるひび割れ・塗料のひび割れ・海岸線で見られる溶岩節理など日常的に観測される現象でありながら、工学的・地球科学的にも興味の対象となる現象である (図 1)。これらのパターン形成のダイナミクスを理解することは破壊の予測・制御へ向けた重要な知見となるため、数値計算によるパターン形成の再現は必須なタスクとなるが、亀裂幅の空間スケールと系全体の空間スケールとの間に大きなギャップが存在するために定量的な数値計算を行うことは計算量的な困難さを伴う。本研究ではこの計算量的困難さを緩和する可能性のある 1 つの方法として、変分エネルギー型物理情報深層学習に基づいた破壊パターン形成の数値計算方法を提案する。



図 1. 収縮破壊パターンの例 (炭酸水酸化マグネシウム粉末と蒸留水の混合ペーストの乾燥亀裂)。

## 2 フェーズフィールド法による準 2 次元収縮破壊パターン形成のモデリング

水平な基盤に吸着した均一な厚さの薄い準 2 次元線形弾性体の収縮破壊を考える。この弾性体は十分に薄く、鉛直方向の変位は水平方向の変位に比べ無視できるほど小さいとする。この系を真上から見下ろした時の弾性体の存在領域を  $\Omega$  とし、場所  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ 、時刻  $t \in \mathbb{R}_+$  の関数として定義される水平方向の変位場を  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^2$  とする。さらに領域  $\Omega$  における非破壊/破壊箇所をフェーズフィールドと呼ばれる場の量  $\phi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}$  で表現し、非破壊箇所では  $\phi = 0$ 、破壊箇所では  $\phi = 1$  をとるように設計する。これら場の量を用いて、系全体のエネルギー  $\mathcal{E}(t)$  を以下の 3 つの項の和で書く。

$$\mathcal{E}(t) = \int_{\Omega} d\mathbf{x} [(1 - \phi)^2 E_+ + E_-] + \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{G}{2s} (\phi^2 + s^2 \|\nabla \phi\|^2) + \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{\eta}{2} \|\mathbf{u}\|^2. \quad (1)$$

ここで、 $\nabla$  は空間微分演算子を表す。第 1 項は系の変形に伴う弾性エネルギーであり、 $\nabla \mathbf{u}$  の関数として与えられる  $E_+$  と  $E_-$  はそれぞれ弾性エネルギー密度の膨張部分と圧縮部分を表す。破壊箇所では  $(1 - \phi)^2$  の寄与により弾性エネルギーが消失することを表している。第 2 項は亀裂界面の存在に起因する表面エネルギーを表し、亀裂界面幅  $s$  を導入して亀裂界面上での表面張力係数  $G(\mathbf{x})$  の面積分を体積積分に正則化することで得られる。第 3 項は基盤吸着に起因する弾性エネルギーであり、 $\eta$  は抵抗係数である。この系に対して自発的に増大する体積収縮効果を適切に導入すると、第 1 項を緩和しようと系は収縮し始めるが、第 3 項の影響で自由に収縮できず、第 1 項 2 項の競合と  $G(\mathbf{x})$  の不均一性により応力集中が発生し亀裂が発生する。この系を数値計算するためには領域  $\Omega$  を亀裂界面幅  $s$  より十分稠密なメッシュで離散化した上で、変分停留値問題  $\delta \mathcal{E} = 0$  を解く必要がある。しかしながら、変分問題の解として得られる偏微分方程式 (PDE) は非常に硬い方程式となっており、稠密なメッシュの必要性和相まって安定的な計算には高い計算コストを要する問題となっている。

### 3 変分エネルギー型物理情報深層学習による破壊パターン形成の計算

前述の問題の解消を目的として、本研究ではこの問題を物理情報ニューラルネットワーク (Physics-informed neural networks : PINNs) [1] で解くことを考える。PINNs は PDE の汎用解法であり、解をニューラルネットワーク (NN) で表現し、PDE のノルムを損失関数とした NN のパラメータの最適化により近似解を得る方法である。PINNs は離散化のためのメッシュを必要とせず、計算領域内の適当な評価点群上で損失関数を小さくすることで効率的な解の近似を可能にする。本研究ではさらなる計算効率化のために、変分問題を経由せずに系のエネルギー  $\mathcal{E}$  を NN パラメータの関数として直接最適化する変分エネルギー型 PINNs (Variational energy based PINNs : VE-PINNs) [2] を採用する。VE-PINNs は通常の PINNs に比べ NN の微分階数を少なく抑えることができ、微分階数の増加と共に NN が表現する関数が複雑化し最適化が困難になる PINNs 特有の問題を緩和できるという特徴を持つ。また各場の量を表現する NN の設計として、各場の量は非破壊/破壊箇所をまたぐところで急峻に変化しうるため、高波数モードを効率的に表現できるよう、NN の第 1 層目で乱択フーリエ特徴 [3] によるエンコード処理をした上で、Feed-forward NN に結合する。さらにフェーズフィールド  $\phi$  を表現する NN は、 $\phi$  が 0 から 1 の間の値を取りつつ、一度破壊された箇所は修復しないことを考慮するため、適切な出力変換と時間単調増加性を強制する設計をした。

### 4 結果と今後の課題

本手法で計算されたフェーズフィールド  $\phi$  のスナップショットを図 2 に示す。ここでは、時間に関して線形で増大する等方的な体積収縮効果を導入し、ランダム場を模擬した NN を表面張力係数  $G(\mathbf{x})$  として与えた。実際の収縮破壊実験で観測される亀裂パターンによく類似した等方的なパターンが得られている。表面張力係数  $G(\mathbf{x})$  は亀裂の発生・進展の運命を決定づける重要な量であるが、実際の実験においてこれを場の量として直接計測することは困難を極める。本手法は、亀裂パターン・変位場やその他の直接観測可能量のデータを最適化問題へ組み込むことによりデータ同化法としての拡張が容易であり、既存方法に比べ実装コスト・計算量を抑えることが可能であるため、 $G(\mathbf{x})$  など直接観測が困難な量の推定を効率的に実行する逆問題解法としての発展が期待される。

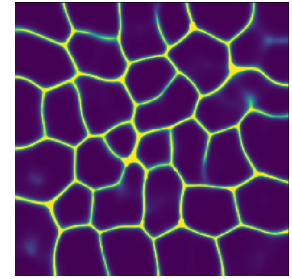


図 2. VE-PINNs で計算された収縮破壊パターン。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP22K03542, JP23H00466, JP24K02951 の助成を受けたものです。

### 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*, 378 (2019), 686–707.
- [2] A. Chakraborty, *et al.*, Variational energy based XPINNs for phase field analysis in brittle fracture, arXiv:2207.02307, (2022).
- [3] M. Tancik, *et al.*, Fourier features let networks learn high frequency functions in low dimensional domains, *Advances in neural information processing systems*, 33 (2020), 7537–7547.



# Physics-informed 深層学習による地震時地殻変動解析

岡崎 智久<sup>1</sup>, 平原 和朗<sup>1</sup>, 上田 修功<sup>1</sup>

<sup>1</sup>理化学研究所革新知能統合研究センター

e-mail: tomohisa.okazaki@riken.jp

## 1 Introduction

深層学習の手法である neural network (NN) を用いて偏微分方程式(PDE)を解く physics-informed neural network (PINN) [1] は、機械学習により物理現象を解析する scientific machine learning (SciML) の代表例として活発に研究されている。PINN では微分方程式や初期・境界条件を損失関数として表現することで、観測データや数値シミュレーションなどの教師データを用いずに NN を訓練できる。当初は線形ソルバーと同等の解析をより簡単に実現できる手法として注目されたが、依然として精度や計算時間に課題があり、PINN の有効な活用方法が模索されている。

本講演では地震に伴う地殻変動を扱う。地震は地下の断層がずれ動くことで発生し、地表に揺れ（地震動）をもたらすと同時に、永続的な変形である地殻変動を引き起こす。地殻変動は、結晶内の格子欠陥（変位不連続）を記述する dislocation model を地殻内の断層運動に応用することで、弾性体の境界値問題として定式化される。これまで数値モデリングにより震源過程や将来の地震発生ポテンシャルが推定・評価されてきた。以下では地殻変動解析を通じて PINN の特徴・課題およびその解決について議論する。

## 2 Forward Modeling

PINN の基本的な適用対象は、方程式系が完全に与えられたもとで求解する順解析(forward modeling)である。本講演では 2 次元構造における横ずれ断層のモデルとして用いられる反平面問題(antiplane problem)を対象とする[2]。

地震時地殻変動においては、次の 4 つを構成要素として順問題が指定される：(a) 地形 (PDE 領域)，(b) 弾性特性 (PDE 係数)，(c) 断層 (dislocation の形状)，(d) すべり分布 (dislocation の境界条件)。与えられた条件下で、以下の PDE と境界条件からなる方程式系を解く：(1) 弾性体の平衡，(2) 断層の変位不連続，(3) 断層の法線応力連続，(4) 自由表面（地表の法線応力 0）。以上のうち(1)が PDE であり、(2)～(4)は断層および地表における境界条件である。PINN では各式の残差二乗和を損失関数に定め最小化することで、方程式系の近似解が得られる。損失関数は形式的には残差二乗和の領域・境界上での積分として定義されるが、実装においては collocation point と呼ばれる有限個の評価点における和で近似される。

実際の解析では、有限断層を記述する dislocation model に特有の注意が必要である。反平面問題において dislocation は線上の欠陥として与えられるが、一般に端点に特異性を持つ（変位の不定性・応力の発散）ため、連続関数を近似する NN では直接表現できない。そこで dislocation に沿って branch cut を持つ極座標系を用いて変位不連続を境界条件に変換することで、断層近傍を含め変位場を精確に表現できる。また、弾性特性が不連続に変化する場合は、各領域を別の NN で近似し接触面に整合性条件を課す領域分割により対応できる。本講演では、不均質な媒質特性や曲がった地形や断層をもつ地下構造における解析事例を通して PINN の適用可能性を実証する。

### 3 Surrogate Modeling

前節の forward modeling により、与えられた地下構造・断層運動による地殻変動を解析できる。しかし一般に PINN の訓練は時間が掛かるため、設定条件を変更して多数解析しようとすると計算量が大きくなり実現が困難である。そこで、流体力学などの応用分野において、条件を指定するパラメータ（源泉位置・粘性率など）を NN の入力変数とすることで無数の条件下における解を一度に求める方法が考案された。入力条件に対する補間を行っているので PINN による代理モデル(surrogate modeling)と呼ばれる。NN により連続的な依存性を学習できる点は、既存の離散化手法にはない PINN の特長である。

ただし PINN による代理モデルは有限次元パラメータに限られ、関数や幾何形状などの無限次元の対象を NN の入力変数とはできない。本講演では、反平面地殻変動の理論的性質から断層形状（幾何）とすべり分布（関数）への依存性を有限次元に帰着させることで PINN による解析を実現する[3]。具体的には、一様な断層運動に対し断層形状不変性が成立することを提示し、線形媒質における重ね合わせの原理と組み合わせることで、dislocation potential と名付ける断層端部の位置のみに依存する物理量を定義する。この dislocation potential を PINN で解くことにより、任意の断層運動に対する変位場を効率的に計算できることを示す。

### 4 Conclusions

本講演では地殻変動を対象に PINN による順解析を議論した。PINN は複雑な幾何形状・係数変化を示す PDE を比較的単純な実装で解析できる利点を有するが、精度や計算時間に課題がある。そこで PDE 係数などのパラメータを NN の入力変数とすることで、異なるパラメータ値に対し一括解法する代理モデル(surrogate modeling)が注目されている。離散化に基づく数値ソルバーと異なり、NN による連続表現を用いるため無限個の解を一度に学習することができる点が PINN の優位性である。

代理モデルは有限次元パラメータ（位置・強度など）を扱えるが、無限次元の対象（幾何・関数など）は NN で直接表現できない。本講演では、地殻変動の理論的性質を用いて断層形状（幾何）・すべり分布（関数）を有限次元の断層端位置に帰着させることで、PINN により任意の断層運動に対する地殻変動を高速に推論できることを示した。このように PINN の一般理論と応用分野の領域知識を組み合わせることで、従来手法にはない効率的な解法を実現できると期待される。

### 参考文献

- [1] Raissi, Maziar, Paris Perdikaris and George 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*, 378 (2019), 686–707.
- [2] Okazaki, Tomohisa, Takeo Ito, Kazuro Hirahara and Naonori Ueda, Physics-informed deep learning approach for modeling crustal deformation, *Nature Communications*, 13 (2022), 7092.
- [3] Okazaki, Tomohisa, Kazuro Hirahara and Naonori Ueda, Fault geometry invariance for physics-informed crustal deformation learning (2023). Preprint at: <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-3689706/v1>

# アイコナル方程式に基づく地震波到達時間計算の物理情報深層学習におけるスペクトルバイアス

縣 亮一郎<sup>1</sup>, 馬場 慧<sup>1</sup>, 仲西 理子<sup>1</sup>, 中村 恭之<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 海洋研究開発機構

e-mail : agatar@jamstec.go.jp

## 1 はじめに

地震計に記録された地震波の到達時刻から震源位置の推定を行う震源決定問題は、地震学において重要な解析である。震源決定は、地下の地震波速度を既知として、地震波の波面の伝播を記述するアイコナル方程式を基礎方程式とした非線形逆問題として取り扱われることが多い。この場合、震源から観測点までの地震波到達時間（走時）の繰り返し計算が必要となる。アイコナル方程式の数値解法として Fast marching 法 [1] などが用いられることが多い。一方、震源決定時の計算コスト軽減のため、機械学習手法、特に深層学習を用い、興味のある範囲内での任意の震源・観測点間の走時を出力する代理モデルを作成するという手段も考えられる。特に、支配方程式からの拘束を学習に取り込める Physics-informed neural network (PINN、物理情報深層学習) [2] は、数値計算の結果などに基づくラベル付き学習データの準備なしに代理モデルを作成できる点で有効である。しかし、原著論文にて提案される全結合ニューラルネットワーク (NN) を使用した PINN には、解を表す関数のうち短波長成分の学習が困難となるスペクトルバイアス (Spectral bias) [3] という問題が内在する。本稿では、走時計算に対する PINN 学習の概要、スペクトルバイアスの概要と、その対処のための検討内容について紹介する。

## 2 アイコナル方程式に基づく走時計算の PINN による代理モデル

アイコナル方程式は波面の伝播を表現する方程式であり、発振点と受振点位置により決まる走時の空間勾配と速度構造を結び付ける：

$$|\nabla T(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)|^2 = \frac{1}{v^2(\mathbf{x})}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (1)$$

$$T(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_s) = 0, \quad (2)$$

ここで、 $\Omega$  は  $\mathbb{R}^d$  領域、 $d$  は空間次元数、 $T(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)$  は発振位置  $\mathbf{x}_s$  から  $\mathbf{x}$  までの走時、 $v(\mathbf{x})$  は  $\Omega$  で定義される速度構造、 $\nabla$  は勾配である。2 番目の式は点震源の満たすべき条件を表す。発振点での特異性を避けるため、 $T(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s) = T_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)$  (ただし  $T_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s) = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_s|$ ) と分解する。これにより (2) 式は自動的に満たされる。

$\tau^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)$  を近似する NN を  $f_{\tau^{-1}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s; \boldsymbol{\theta})$  を導入する ([4] など)。 $\boldsymbol{\theta}$  は重みパラメータである。PINN では、この NN を訓練するのに、 $\Omega$  を十分にカバーする点群 (Collocation points, CP) における (1) 式の残差からなる損失関数を用いる。 $\mathbf{x}_s$  を固定する場合には、

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \left( v(\mathbf{x}_c^{(i)}) - \frac{1}{|\nabla f_{\tau^{-1}}(\mathbf{x}_c^{(i)}, \mathbf{x}_s; \boldsymbol{\theta})|} \right)^2, \quad (3)$$

ここで  $\mathbf{x}_c$ 、 $N_c$ 、 $i$  はそれぞれ、CP の座標、個数、インデックスである。さらに、学習時に  $\mathbf{x}_s$  も発振点の候補範囲からランダムサンプルすることで、範囲内の任意の発振位置に対する走時を学習する。

損失関数の最小化により得られた  $\theta^* = \arg \min_{\theta} L(\theta)$  による  $T_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s)/f_{\tau-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_s, \theta^*)$  は、候補範囲内での発振点から  $\Omega$  における任意の受振点までの走時計算の代理モデルとして機能する。

### 3 スペクトルバイアスと対処方法

原著論文である [2] をはじめ、PINN の多くの例では全結合 NN が扱われる。しかし全結合 NN については、学習対象の関数における長波長成分に比べ、短波長成分の学習が遅く、しばしば学習自体に失敗するスペクトルバイアスが知られている。スペクトルバイアスは、無限に幅広い NN の挙動がカーネル法に近似できるという考えに基づいた Neural tangent kernel (NTK) の解析から、NTK のグラム行列の固有値の急激な減衰という形で示される。震源決定においては、ある程度の地震は観測点をカバーする広い領域の地震波速度構造を対象し、その地震波速度は浅部で局所的に急激に遅くなる領域を含む場合があるため、PINN 代理モデルの作成の際にスペクトルバイアスへの対策を講じる必要がしばしば生じる。

本研究では、スペクトルバイアスの対策として、Fourier feature embedding[3] を導入した。この方法では、入力座標  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{x}_s$  を全結合 NN に渡す前に、三角関数を用いて高次元の Fourier 空間へとマッピングする。これにより、元の入力空間での高周波数（短波長）成分が強調された学習が可能となる。さらに、モデル化対象領域を分割し、それぞれの小領域に個別の PINN 学習を行うことによるスペクトルバイアスの軽減も試みた。これは、各 NN の対象とするモデル領域を小さくすることで、局所的な地震波速度の変動のスケールを相対的に大きくし、問題をより直接的に解決しようとするアプローチである。これら二つの対策の組み合わせにより、スペクトルバイアスの影響が、PINN 代理モデルに基づく震源決定の精度に致命的な影響を与えない程度まで小さくなったことを、数値実験を通じて確認した。

### 4 おわりに

Fourier feature embedding と領域分割により、アイコナル方程式に基づく地震波到達時間計算の PINN 代理モデル作成におけるスペクトルバイアスへの対処を試みた例について紹介した。ただ、NN を多数（著者らが取り組んだ南西日本での例では 36 個）導入する必要がある領域分割は、学習・推論ともに効率が悪くなるため、一時的な対処方法とみなすべきである。今後、より優れた特徴量埋め込み手法を取り入れ、単一の NN だけを用いたより効率的な対処法を模索する。

**謝辞** この研究は JSPS 科研費（課題番号 24H01042）の助成を受けました。また、JAMSTEC の地球シミュレータおよび東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME4.0 を用いて実施されました。

### 参考文献

- [1] Sethian, A fast marching level set method for monotonically advancing fronts, Proceedings of the National Academy of Sciences, 93(4) (1996), 1591–1595.
- [2] Raissi, M., 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, 378 (2019), 686–707.
- [3] Tancik, M., et al., Fourier features let networks learn high frequency functions in low dimensional domains, Advances in Neural Information Processing Systems, 33 (2020), 7537–7547.
- [4] Smith, J. D., et al., Eikonet: Solving the eikonal equation with deep neural networks, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 59(12) (2021), 10685–10696.