

地下熱水系のモデリングを対象としたPhysics-informed neural networksの学習の効率化および多種観測データの統合

Improving the training efficiency and integration of various observations using physics-informed neural networks for modeling subsurface hydrothermal systems

石塚 師也 (Kazuya Ishitsuka)¹

¹京都大学 (Kyoto University)

e-mail: ishitsuka.kazuya.4w@kyoto-u.ac.jp

1 概要

Scientific Machine Learning (SciML) の発展によって、モデル駆動型アプローチと機械学習を中心としたデータ駆動型のアプローチが融合し、科学的な知見創出が益々加速することが期待されている。Physics-informed neural networks (PINNs) は、ニューラルネットワークの損失関数に、偏微分方程式で記述される物理法則に関する項を用いることで、物理法則に沿った予測を得ることを可能にする [1]。これにより、柔軟かつメッシュ生成を要しないモデリングが可能であることから、特に観測値とのデータ同化を行うインバースモデリングにおいて数値シミュレーションを用いた既存のアプローチに取って代わり得る手法として注目されている。本研究で扱う地下の熱水循環を扱うインバースモデリングは、火山に関連する熱水系の理解や地熱資源開発において重要な研究トピックであり、PINNs の活用が有効であると考えられる分野の 1 つである。

様々な分野で PINNs の有効性が示される一方、近年は PINNs の学習効率に関する課題も示されつつある。とりわけ、様々な物理法則の考慮が必要な現実的な系で PINNs が活用されるには、学習を効率化する解析戦略の発展が欠かせない。本研究では、地熱地域で得られた坑井データから、地下の温度や流体圧、高透水領域の分布を推定する地下熱水系のインバースモデリングを対象として、PINNs の学習効率を向上させる方法を検討した結果 [2] を報告する。特に、PINNs の学習効率に関する戦略として、自動微分の計算精度の確認および複数の損失関数の項を扱う場合の重みの決定方法について検討した。また、多種観測データを統合した例として、坑井データに加えて、地磁気地電流法で得られた物理探査データを考慮した多種観測データを PINNs で統合することによるモデリングの精緻化の検討結果について述べる。

2 手法

本研究は、質量保存則とエネルギー保存則を物理法則とする熱水系を扱う。また、観測データとして、坑井位置において得られる温度、流体圧、浸透率データを扱う。加えて、地表において地磁気地電流法で観測されたデータも用いた。これらのデータを基に地下の温度および流体圧分布を推定し、地下の流体流動経路とその量を定量化した。損失関数は、データ誤差項と、これらの物理法則からの逸脱項、境界条件の項で構成される。なお、PINNs のアーキテクチャとして全結合型のネットワークを用い、オプティマイザには Adam を使用した。

3 結果および考察

本研究において、物理法則およびノイマン境界条件を記述する偏微分は、自動微分によって計算した。自動微分は、計算グラフを用いることで正確な微分を計算することが可能であるものの、実装方法によっては誤差が生まれることが知られている。本研究では、[3]に従って、有限メッシュによる微分と自動微分で得られた微分の差を用いて、自動微分によって微分の正確性を評価した。その結果、微分対象となる変数に関する要素順序を変更する処理が含まれる場合には自動微分が正確に計算されないことが分かり、微分の正確性を評価する重要性が示された。また、複数の損失関数項の重みを決定する方法として、経験的に決められた定数を用いる方法と損失関数項の微分の絶対値の比を用いて学習中に動的に重みを変化させる方法[4]を比較した。その結果、動的に重みを変化させることによって、一部の損失関数項の勾配消失が防げ、より物理法則に従った予測を得られることが分かった。また、地磁気地電流法で得られたデータを考慮する場合、このデータとの誤差に関する損失関数項が増えるが、動的に変化する重みを用いることによって、データの種類を増やしても効率的に学習できることが分かった。

4 まとめ

本研究では、熱水系のインバースモデリングを対象として、PINNs の学習を効率化する手法を検討し、それらの有効性を検証した。本研究で検討した手法以外にも、ネットワークアーキテクチャの高度化や学習の高速化等の改良により、PINNs の有効性は益々高まると考えられる。このような課題はあるものの、本研究の結果は、現実の課題および系に対して、PINNs の有効性を示しており、今後様々な実課題に PINNs が応用されることが期待できる。

謝辞 本研究の成果の一部は、NEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構）の委託業務（JPNP21001）および JSPS 科研費（JP23K26601）を通じて得られたものです。

参考文献

- [1] Raissi, M., Perdikaris, P., and 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 (2019), 686-707.
- [2] Ishitsuka, K., Ishizu, K., Watanabe, N., Yamaya, Y., Suzuki, A., Bandai, T., Ohta, Y., Mogi, T., Asanuma, H., Kajiwar, T., and Sugimoto, T., Reliable and practical inverse modeling of natural-state geothermal systems using physics-informed neural networks: Three-dimensional model construction and assimilation with magnetotelluric data, *Journal of Geophysical Research: Machine Learning and Computation*, Vol.2 (2025), e2025JH000683.
- [3] Hückelheim, J., Menon, H., Moses, W., Christianson, B., Havland, P., and Hascoët, L., Understanding automatic differentiation pitfalls, *arXiv.2305.07546*, 2023.
- [4] Wang, S., Teng, Y., and Perdikaris, P., Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol.43 (2021), A3055-A3081.

Modeling Coupled Systems Using Deep Learning with Poisson-Dirac Structures

Razmik Arman Khosrovian¹, Takaharu Yaguchi², Hiroaki Yoshimura³, Takashi Matsubara⁴,
¹Osaka University, ²Kobe University, ³Waseda University, ⁴Hokkaido University
 e-mail : u113287d@ecs.osaka-u.ac.jp

1 背景

深層学習は、支配方程式が未知の力学系のモデリングにおいて大きな成功を取めてきた。近年では、解析力学の知見を取り入れることで力学系の事前知識を保証したモデル化が実現されている。たとえば Hamiltonian Neural Networks (HNNs) は、ハミルトン方程式のハミルトニアン H を深層学習で近似することで、エネルギー保存則を保証する [1]。しかし、HNNs などの既存手法の適用は主に機械系に限られており、力学系を一体的に扱うため連成系をそのままモデル化できない。そこで、ディラック構造を用い、機械系や電気回路など複数の領域にまたがる力学系や各要素の相互作用と制約を統一的に表現できる深層学習モデルを提案する。

2 提案手法

提案手法では、ポアソン＝ディラック構造の特殊な形式として、以下のような定式化を行う [2]。

$$\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}} \\ \mathbf{f}^R \\ \mathbf{f}^I \end{bmatrix} = B_{\mathbf{u}}^{\sharp} \begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}} H(\mathbf{u}) \\ \mathbf{e}^R \\ \mathbf{e}^I \end{bmatrix}, \quad (1)$$

左辺の変数 $(\dot{\mathbf{u}}, \mathbf{f}^R, \mathbf{f}^I)$ は flow と呼ばれ、右辺の変数 $(\nabla_{\mathbf{u}} H(\mathbf{u}), \mathbf{e}^R, \mathbf{e}^I)$ は effort と呼ばれる。flow は力学系の各構成要素への入力を、effort は要素からの出力を表す。本研究で扱う要素及びその分類を表 1 に示す。

\mathbf{u} はばねや質点などの energy-storing elements の状態（伸びや運動量）であり、これらのエネルギーは $H(\mathbf{u})$ で表される。たとえば質点バネ系では、バネへの入力はその状態 \mathbf{u} の変化率である速度 $\dot{\mathbf{u}}$ である。バネからの出力は $\nabla_{\mathbf{u}} H(\mathbf{u})$ で表され、これは力に相当する。同様に、質点は力を受け取って速度を出力する。質点とバネは相互に接続され、速度と力を交換する。このような要素間の結合のパターンは行列 $B_{\mathbf{u}}^{\sharp}$ によって表される。

添字 R は、ダンパーなどの energy-dissipating elements に対応する。これらの要素は受け取った入力 \mathbf{f}^R から出力 \mathbf{e}^R への変換 $\mathbf{e}^R = R_{\mathbf{u}}(\mathbf{f}^R)$ を行う。例えば、ダンパーにおける入力 \mathbf{f}^R は速度、出力 \mathbf{e}^R は力であり、線形ダンパーにおいては $\mathbf{e}^R = -d\mathbf{f}^R$ という関係を持つ。抵抗器の場合は、回路内での結合のパターン次第で、電流から電圧、電圧から電流の 2 種類の変換が考えられる。

添字 I は、外力や電流源などの external inputs に対応する。 \mathbf{e}^I は時間 t にのみ依存し、 \mathbf{f}^I は力学系の時間発展を求めるのには不要であるが、力学系から外部入力への応答として解釈される。

$H, R_{\mathbf{u}}, B_{\mathbf{u}}^{\sharp}$ は深層学習を用いてモデル化する。従来の手法では、ハミルトニアン H などの関数が要素間の相互作用を内包していたが、提案手法は相互作用をエネルギーや散逸の関数から分離し行列 $B_{\mathbf{u}}^{\sharp}$ として明示的に学習するため、連成系のより自然なモデル化を可能とし、解釈性と汎化性能を向上させる。

表 1: 各領域における要素の分類

Domain	Mechanical		Electro-Magnetic		Hydraulic
	Potential	Kinetic	Electric	Magnetic	Potential
flow (入力)	速度	力	電流	電圧	流量
effort (出力)	力	速度	電圧	電流	圧力
state (状態)	変位	運動量	電荷	磁束	体積
energy-storing	バネ	質点	キャパシタ	インダクタ	貯水槽
energy-dissipating	ダンパー	—	抵抗	抵抗	—
external input	外力	移動境界	電圧源	電流源	流入する流体

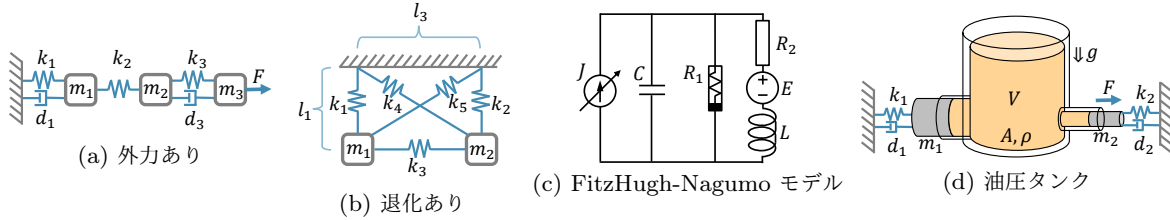


図 1: データセットとして用いたシステムの模式図.

3 実験内容

提案手法と既存手法のモデル化性能を評価するために用いたデータセットの一部を図 1 に示す. (a) および (b) は質点-バネ (-ダンパー) 系である. (a) には外部入力として外力 F を加えた. (b) では各要素は $x-y$ 平面を動くため状態が 2 次元であり, バネが質点よりも多いため退化が生じている. (c) は神経信号の伝播を電気回路としてモデル化した FitzHugh-Nagumo モデルである. (d) はマルチフィジックス系であり, 機械系と油圧系での相互作用が生じる. バネおよびダンパー (抵抗器) は伸びや入力に非線形に応答する. 各データセットにおいて, それぞれの特徴に応じて適用可能な既存手法とモデル化性能の比較を行った. energy-storing elements の状態 \mathbf{u} と external inputs の effort \mathbf{e}^I を観測値としてモデルに入力した. また, energy-dissipating elements の数と, その flow の単位 (電流または電圧等) は既知であると仮定した.

各モデルにおいて, 次の時刻での状態を予測するように学習を行った. 実験の結果, 提案手法は全てのデータセットにおいて既存手法以上の長期予測性能を示した. また, 構成要素間の結合関係などの力学系の内部構造の同定にも成功し, 優れた解釈性を示した.

謝辞 本研究は, JST PRESTO (JPMJPR24TB, JPMJPR21C7), CREST(JPMJCR1914, JPMJCR24Q5), ASPIRE (JPMJAP2329), ムーンショット型研究開発事業 (JPMJMS2033-14), JSPS KAKENHI (24K15105) の支援と大阪大学 D3 センターの大規模計算機システムの利用によって実施された.

参考文献

- [1] Sam Greydanus, Misko Dzamba, and Jason Yosinski. Hamiltonian Neural Networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, pages 1–16, 2019.
- [2] Theodore James Courant. Dirac Manifolds. *Transactions of the American Mathematical Society*, 319(2):631, 1990.

収縮破壊の確率過程と物理情報深層学習による破片サイズ分布推定

Fragment size density estimation for shrinkage-induced fracture based on physics-informed deep learning

伊藤 伸一 (Shin-ichi Ito)¹¹ 東京大学地震研究所 (Earthquake Research Institute, The University of Tokyo)

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、その破壊過程の複雑さは工学的・地球科学的な興味の対象となる (図 1)。亀裂はランダムに見えるため、破壊パターンには一見ルールがないように見える。しかし破片の大きさ (以下「サイズ」と呼ぶ) などの統計量を調べると、破壊過程を特徴づける美しい秩序が現れることがある。その 1 つに収縮破壊の破片サイズ分布の動的スケールリング則 [e.g.,1] がある。破壊が進むにつれ平均破片サイズは時間とともに減少し、破片サイズ分布も刻々と変化する。ところが、破片サイズをその時々平均サイズで正規化すると、得られる分布は時間に依らない不変分布となる – これが動的スケールリング則の核心である。このスケールリング則を収縮破壊の物理的描像から説明する 1 つの理論として、破片の壊れやすさの破片サイズ依存性を考慮した確率過程モデルがある [2]。後述のように、このモデルは破片サイズの確率密度の積分微分方程式で表現されるが、数理的な構造と離散化の観点から求解しづらいモデルであり、実データを同化した分布評価へ向けた効率的な数値解法が模索されている。これを踏まえて、本研究では物理情報深層学習を利用する新しい数値解法を提案する。

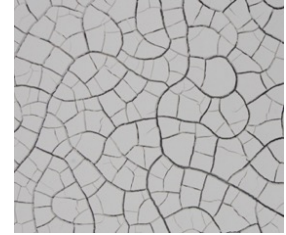


図 1. 収縮破壊パターンの例 (炭酸水酸化マグネシウム粉末と蒸留水の混合ペーストの乾燥亀裂)。

2 収縮破壊の確率過程を表現する積分微分方程式

確率過程モデル [2] では、破片が時間経過とともにランダムな比率 $r \in (0, 1)$ によって 2 分割され続ける過程をモデル化する。ここで比率 r は所与の確率密度 $q(r) \in \mathbb{R}_+$ から生成される。平均サイズで正規化された破片サイズを $x \in \mathbb{R}_+$ とすると、その確率密度 $p(x) \in \mathbb{R}_+$ は積分微分方程式

$$-\frac{1}{\gamma} \frac{d}{dx} (xp(x)) - \left(\frac{x}{a}\right)^\gamma p(x) + \int_x^\infty \frac{dz}{z} q\left(\frac{x}{z}\right) \left(\frac{z}{a}\right)^\gamma p(z) = 0 \quad (1)$$

の解として与えられる。ここで、 $\gamma \in \mathbb{R}_+$ は破片の壊れやすさの破片サイズ依存性を表現するパラメータであり、 γ が大きいほど小さい破片が壊れにくくなる効果が考慮される。定数 $a \in \mathbb{R}_+$ は平均サイズによる正規化条件 $\int_0^\infty dz zp(z) = 1$ を満たすように決定される。さらに確率密度の正規化条件として $\int_0^\infty dz p(z) = 1$ を満たす必要がある。この積分微分方程式の構造を観察すると、左辺第 3 項の積分は無限遠方までの $p(x)$ の値を参照しており、その精度は x が小さいところの $p(x)$ の精度に大きく影響していることがわかる。一般的な離散化による解法では x の実質的な上限を先に決めておく必要があり、 γ や $q(r)$ の分布パラメータに依存しうる実質的な上限を決めるための慎重な試行錯誤が必要となる。また、左辺第 1 項と第 2 項においては、適切な移流項・減衰項の離散化と x の離散点配置を行わないと容易に不安定化するが、事前に a の値が分からないため、それにも慎重な試行

錯誤が必要となる。このような試行錯誤は先にパラメータを決めた上での1回の求解においては問題にならないが、実データを使ってパラメータを最尤/ベイズ推定する際には求解の安定性と堅牢性が求められるため、不安定化回避のための試行錯誤は実データを使った際の分布評価において大きな障壁となる。

3 物理情報深層学習による求解の安定化・堅牢化

前述の課題の解消を目的として、本研究では問題を Physics-informed neural networks (PINNs) [3] で解くことを考える。PINNs は微分方程式の汎用解法であり、解をニューラルネットワーク (NN) で表現し、方程式のノルムを損失関数とした NN の最適化により近似解を得る方法である。PINNs では微分演算を NN の自動微分で求めるため離散化起因の不安定性の回避が可能で、計算領域内の適当な評価点群上で損失関数を減少させることで効率的な解の近似を可能にする。本研究では積分微分方程式 (1) のノルムと2つの正規化条件の重み付け和を損失関数として採用し、 $p(x)$ と定数 a を表現する NN の同時最適化を行う。また、積分項は2重指数型積分変換に基づく評価により精度を担保する。さらに、確率密度の非負性の担保と積分発散の回避のために、NN の関数空間を非負に制限した上で $x \rightarrow \infty$ で速やかに減衰する関数をクロージャとして付与する設計をした。

4 結果と今後の課題

分割比率確率密度 $q(r)$ としてベータ分布 $\text{Beta}(2, 2)$ 、 $\gamma = 1$ を採用して PINNs によって計算された $p(x)$ をその厳密解とともに図2に結果の一例として示す。両者はよく一致し、本数値解法が正しく動作していることが確認できる。講演では本手法の結果の詳細に加え、破片データとの同化による分布パラメータ推定結果についても述べる。本手法は自己相似的な破壊過程だけでなく、凝集過程 (Cluster-Cluster aggregation など) のような破壊とは逆の物理現象への応用も可能である。さらなる精度の安定化を実現する方策として、NN の構造を工夫することで現在の多目的最適化問題を単目的最適化問題化することが今後の課題である。

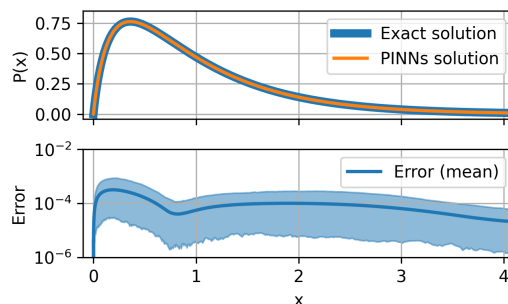


図2. PINNs で計算された積分微分方程式 (1) の数値解と厳密解の比較。Error は数値解と厳密解の差を表す。バンドの幅は Error の 5-95 パーセンタイルを示す。

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] S. Ito and S. Yukawa, Dynamical scaling of fragment distribution in drying paste, *Physical Review E* 90, 04909 (2014).
- [2] S. Ito and S. Yukawa, Stochastic modeling on fragmentation process over lifetime and its dynamical scaling law of fragment distribution, *Journal of the Physical Society of Japan*, 83, 124005 (2014).
- [3] 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.