

物理法則を課した深層学習における砂州波長の高波数化が学習に及ぼす影響

新潟大学大学院自然科学研究科	学生会員	○福岡 凌
新潟大学大学院自然科学研究科	学生会員	大川原 大智
新潟大学大学院自然科学研究科	学生会員	大原 由暉
新潟大学 BDA 研究センター	正会員	茂木 大知
新潟大学災害・復興科学研究所	正会員	安田 浩保

1 はじめに

河川の流れや河床変動を把握することは、治水や環境の観点から重要である。これらを実測により定量化することは難しいため、代替として数値計算が利用されてきた。しかし、物理モデルの妥当性が不十分なことから計算結果が実現象と一致しないことが多い。この問題に対し、観測データをモデルに同化させるデータ同化手法が用いられる。

近年、データ同化の有効な手法として、物理法則を組み込んだ深層学習である Physics-informed neural networks(PINNs)¹⁾ が頻用される。PINNs は、データ損失と物理損失を最小化するようモデルを学習させることで、観測データが不足する場合も物理的に妥当な解を推定できる。しかし、各損失項の重み係数はハイパーパラメータとして試行錯誤で静的に決定されるため、問題依存性が高い。

先行研究では、PINNs による砂州上の流れの推定が試みられている²⁾。しかし、PINNs は高波数成分の学習が難しいことが知られており、砂州波長は流量や河床勾配によって高波数に変化する可能性がある。よって、静的な重み設定では砂州波長が変化した場合に学習が不安定になり、妥当な推定結果が得られなくなることが考えられる。

本研究では、底面形状の縦断方向の波長を高波数化し、砂州波長の変化が学習に及ぼす影響を調べる。さらに、学習過程における各損失項の変化から学習が困難となる要因を明らかにし、改善方法について考察する。

2 方法

ニューラルネットワークと組み込む物理法則については、先行研究²⁾と同一に設定する。

2.1 ニューラルネットワークの構造

入力値は x, y 座標、出力値が z, h, u, v であるニューラルネットワークを独立して定義する。

2.2 深層学習へ組み込む物理法則

本研究で対象とする流れは、平面二次元の定常流れである。ニューラルネットワークへ組み込む支配方程式は、局所項を省略した浅水方程式である。また、浅水方程式

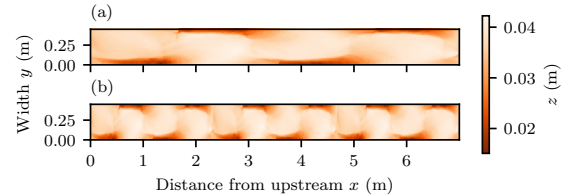


図-1 (a) 実測の底面形状, (b) 縦断方向へ3倍に圧縮した底面形状

の連続式に加えて質量保存則に基づく物理制約を導入する。

2.3 損失関数

学習により最小化する総損失 L は、浅水方程式に基づく損失 L_{PDE} 、質量保存則に基づく損失 L_Q 、学習データに基づく損失 L_{ref} で表される。 L を構成する損失は平均二乗誤差とし、学習の収束を目的として重み係数の設定を行う。

$$L = \lambda_1 L_{PDE} + \lambda_2 L_Q + \lambda_3 L_{ref} \quad (1)$$

ここで、 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ は任意の定数である。

2.4 学習パラメータの設定

隠れ層の数は8層、各層のニューロン数は60とした。各層の結合は全結合で、活性化関数には tanh 関数を適用する。出力層について、水深 h は物理的に正值、 x 方向流速 u も事前に正值が予想されるため、それぞれ Softplus 関数を適用し、 z と v には恒等関数を適用した。学習率は0.0001で固定し、最適化アルゴリズムには Adam を用いた。学習は500,000 イテレーション行った。

3 水理条件

対象とする水路は全長7 m、水路幅 $B=0.45$ m、勾配1/80のものを用い、マンニングの粗度係数は0.014とした。流量1.6 L/sを与え、 $Fr=1.17$ 、下流端水深 $h_0=0.010$ m、等流流速 $u_0=0.36$ m/s の条件下で通水した実測値を用いる。

4 PINNs の設定

4.1 学習データ

図-1に、底面形状 z の学習データを示す。(a) は実測であり、(b) は縦断方向へ3倍に圧縮している。境界の学習データとして、上流端では流量フラックス、下流端では等流水深、側壁では横断方向流速 $v=0$ を与えた。

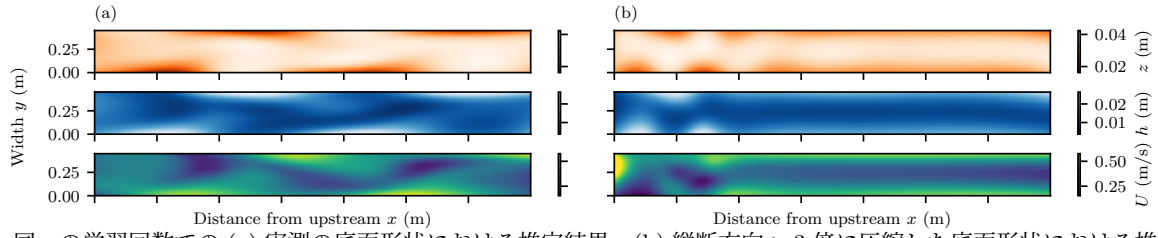


図-2 同一の学習回数での (a) 実測の底面形状における推定結果, (b) 縦断方向へ3倍に圧縮した底面形状における推定結果

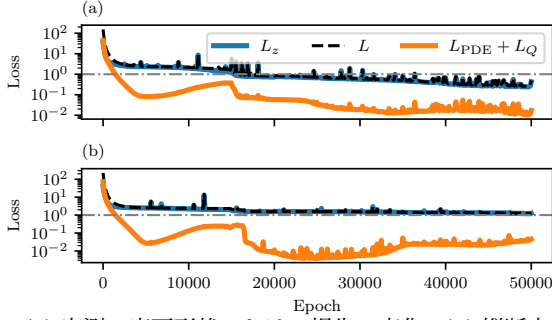


図-3 (a) 実測の底面形状における損失の変化, (b) 縦断方向へ3倍に圧縮した底面形状における損失の変化

4.2 物理法則の学習

浅水流方程式の学習は、図-1において残差点を5000点サンプリングして行った。残差点は一定のイテレーションごとに再サンプリングすることにより、範囲全体で学習が進行するようにした。質量保存則の学習には定常の流量 Q_c が必要となるが、上流端から供給される流量を与えた。

4.3 損失関数の重み

式(1)で定義される損失関数 L は先行研究²⁾と同一とし、以下の重みを設定した。

$$L = 10^5 L_z + 10^4 L_M + 10^4 L_h + 10^2 L_v + 10^2 L_{BC} + 10^5 L_{PDE} + 10^6 L_Q \quad (2)$$

ここで、 L_z は底面形状、 L_M は上流端の流量フラックス、 L_h は下流端の水深、 L_v は側壁の横断方向流速、 L_{PDE} は浅水流方程式、 L_Q は質量保存則の損失である。

5 結果

5.1 底面形状の違いによる推定結果の比較

図-2は、(a)実測の底面形状における推定結果、(b)縦断方向へ圧縮し高波数化した底面形状における推定結果を示している。横軸は上流端からの距離 x 、縦軸は右岸からの距離 y 、上から底面高 z 、水深 h 、合成流速 U である。

(a)では領域全体で学習がある程度進行していることが確認できる。しかし、(b)では上流端から2m程度までは底面と流れを妥当に推定しているが、それより下流側では学習が進行しておらず推定ができていない。順解析では底面形状に基づいて流れを推定するため、底面形状の学習が不十分であれば流れの推定が困難となる。この問題を解決

するため、損失の観点から改善方法を考察する。

5.2 損失関数に基づく改善方法の提案

図-3は、(a)実測の底面形状における損失の変化、(b)縦断方向へ3倍に圧縮した底面形状における損失の変化を示している。横軸はイテレーションの回数、縦軸は損失、黒の破線で総損失 L 、青の実線で底面高の学習データの損失 L_z 、橙の実線で浅水流方程式の損失 L_{PDE} と質量保存則の L_Q の損失を合計した物理法則の損失である。

(a)と(b)のいずれにおいても、 L と L_z はほぼ同じ挙動を示しており、物理法則の損失と比較して L を L_z が支配している。また、妥当な推定結果が得られていた(a)に対して(b)の L_z は大きい、 L_{PDE} と L_Q の和は1オーダー小さく同程度といえる。よって、底面高の学習が不十分な場合、物理法則を満たしていても妥当な推定結果が得られないことを損失の観点からも示している。

以上より、学習初期に L_z を優先的に低下させ、その後物理法則の学習を進めることが効率的と考えられる。具体的には、重みの事前スケジューリングや、学習の進行に応じて重みを動的に更新する手法³⁾が有効である。

6 終わりに

本研究では、静的な重み設定において砂州波長が高波数化した場合の学習への影響と損失の変化を調べた。その結果、高波数の場合は底面形状の学習の進行が遅く、流れの推定も困難となることが分かった。よって、この場合は、底面形状から物理法則へと重み付けを段階的に変化させることで、効率的な学習が実現できることが示唆された。

参考文献

- 1) M. Raissi, P. Perdikaris and G.E. Karniadakis: Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.*, 378, 686–707, (2019).
- 2) Ohara, Y., Moteki, D., Muramatsu, S., Hayasaka, K. and Yasuda, H.: Physics-informed neural networks for inversion of river flow and geometry with shallow water model, *Phys. Fluids*, 36 (10), 106633, (2024).
- 3) S. Wang, Y. Teng, and P. Perdikaris: Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks, *SIAM J. Sci. Comput.* 43, A3055–A3081 (2021).