

2次元ブロック後流を対象とした PINNsによる内挿手法の検討

Investigation on Interpolation Method with PINNs
for a Two-dimensional Block Wake

辻将吉¹⁾, 道岡武信²⁾

Masayoshi Tsuji and Takenobu Michioka

1) 近畿大学大学院 総合理工学研究科 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: 2333330337n@kindai.ac.jp)

2) 博(工) 近畿大学理工学部 教授 (〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1, E-mail: michioka@mech.kindai.ac.jp)

Recently, a machine learning model called Physics-Informed Neural Networks (PINNs) was proposed to address the black box problem of machine learning. This study applies PINNs to the flow field behind a simple two-dimensional block and the model outputs the flow velocities in the block wake. The PINNs can interpolate the flow velocities in the block wake with reasonable accuracy from a relatively small amount of training data obtained by numerical simulations.

Key Words : Two-dimensional block wake, Interpolation, Physics-Informed Neural Networks

1. はじめに

近年, 機械学習の適用は流体力学分野にも広がりつつあり, 乱流解析などを対象に機械学習の技術を応用する手法が検討されている[1,2]. このように物理現象に対するアプローチとして適用されるデータ駆動型の一般的な機械学習モデルでは, 最適な学習アルゴリズムを構築することで任意の学習結果を出力することができる. その一方で, こうした機械学習モデルは学習プロセスを通して得られた膨大な数のパラメータにより, モデル入出力の関係性がブラックボックス化され, 最終的に得られるモデル出力に関して物理的整合性および解釈性が低下する問題が懸念される. これに対し, Raissi et al. (2019) [3]は対象とする物理現象の支配方程式を損失関数に導入したPINNs (Physics-Informed Neural Networks) と呼ばれる機械学習モデルを提案した. PINNs では出力がその支配方程式を満足するように学習が進行するため, 一般的な機械学習モデルに比べて物理的整合性の向上した出力を得ることができる. PINNs は, 損失関数にあらゆる事象の支配方程式を扱うことができる性質から幅広い分野においてその研究例が示されている[3-5].

本研究ではPINNsの基礎的な検討として, 簡易な2次元ブロック周りの流れ場を対象に扱う. 2次元ブロック周りの流れ場を数値シミュレーションで再現し, 数値シミュレーション結果とPINNsの出力結果を比較することでPINNsによる内挿手法の適用性について検討する.

2. 数値シミュレーション

本研究の数値シミュレーションには, オープンソースソフトウェアであるOpenFOAMを使用した. 2次元ブロック周りの流れ場は出口ら(2022) [4]に倣い, 図-1に示すよ

うな計算領域を対象とした. 計算領域の大きさは2.5 m (x) \times 1.5 m (y) とし, $x = 0.50$ m, $y = 0.0$ mの座標に1辺の長さ0.1 mの2次元ブロックを設置した. 境界条件について, 計算領域の左端境界に一様流速5 m/sの流入風を与え, 上下境界にはスリップ条件を設定した. これらの条件で数値シミュレーションを行ったところ, 2次元ブロックの後流で強い渦と弱い渦が相互的に生成されることを確認した(図-1). PINNsに用いる学習データの取得は図-1内の学習領域 ($1.0 \text{ m} \leq x \leq 2.0 \text{ m}$, $-0.50 \text{ m} \leq y \leq 0.50 \text{ m}$) に限定し, 時間 $t = 1.0 \text{ s}$ から 2.0 s における主流方向速度 u , および主流直角方向速度 v のデータを0.1 s刻みに取得した. 取得した各学習データは総数 $N = 112200$ の座標点から構成される.

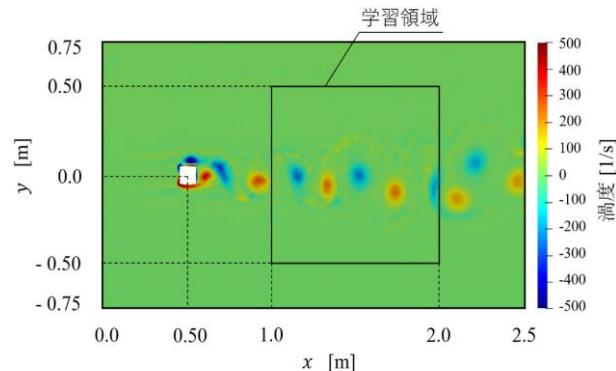


図-1 2次元ブロック周りの流れ場

3. PINNsの構築

前章で示した流れ場を対象に, 2次元ブロック後流の流速を出力するPINNsを構築した. PINNsの損失関数には流体の質量保存則を記述した連続の式を導入した. 本研究

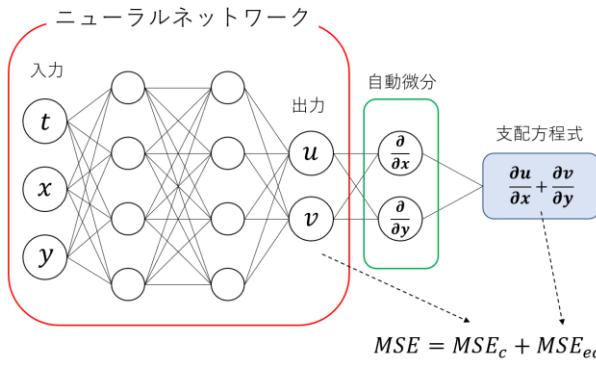


図-2 PINNsの概略図

で構築したPINNsの概略図を図-2に示す。PINNsの入力は時間 t と直交座標 x, y から構成される3次元ベクトル (t, x, y) とし、2次元ブロック後流の主流方向速度 u および主流直角方向速度 v を出力する。図-2左側のニューラルネットワークでは、学習データとPINNsの出力との平均二乗誤差 MSE_c が最小となるように学習が進行する。一方で図-2右側では、PINNsの出力を自動微分することで連続の式を算出し、連続の式の残差 MSE_{eq} が最小となるように学習が進行する。したがって、PINNsの損失関数は式(1)のように定義される。以上より、PINNsの学習はニューラルネットワークの平均二乗誤差 MSE_c と連続の式の残差 MSE_{eq} を包括的に最小化する最適化問題とみなすことができる。

$$MSE = MSE_c + MSE_{eq} \quad (1)$$

次に損失関数 MSE_c について、支配方程式の拘束条件(初期条件、境界条件)を導入することで以下のように定義した。

$$MSE_c = MSE_{ini} + MSE_{bc} + MSE_{data} \quad (2)$$

$$MSE_{ini} = \frac{1}{N_{ini}} \sum_{i=1}^{N_{ini}} (\mathbf{u}_{ini}^i - \mathbf{u}^i)^2 \quad (3)$$

$$MSE_{bc} = \frac{1}{N_{bc}} \sum_{i=1}^{N_{bc}} (\mathbf{u}_{bc}^i - \mathbf{u}^i)^2 \quad (4)$$

$$MSE_{data} = \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} (\mathbf{u}_{data}^i - \mathbf{u}^i)^2 \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{u}_{ini}^i 、 \mathbf{u}_{bc}^i 、 \mathbf{u}_{data}^i はそれぞれ初期条件、境界条件、全学習領域からランダムサンプリングした流速の学

習データ、 \mathbf{u}^i はそれらに対するPINNsの出力を表す。 N_{ini} 、 N_{bc} 、 N_{data} は各条件における評価点数であり、 $N_{ini} = 5100$ 、 $N_{bc} = 2200$ 、 $N_{data} = 15140$ とした。よって、PINNsに使用する学習データの総数は22440点となり、これは取得した学習データ総数 N の20 %に相当する。

続いて、連続の式の評価点数を N_{eq} として損失関数 MSE_{eq} を次式のように定義した。

$$MSE_{eq} = \frac{1}{N_{eq}} \sum_{i=1}^{N_{eq}} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x} + \frac{\partial v^i}{\partial y} \right)^2 \quad (6)$$

上式から確認できるように、損失関数 MSE_{eq} は連続の式の残差から直接的に算出されるものであり、数値シミュレーションの学習データを必要としない。そのため、評価点数 N_{eq} を増大させることによる資源的負担は生じないことから、評価点数 N_{eq} は学習データ総数 N に相当する112200点とした。

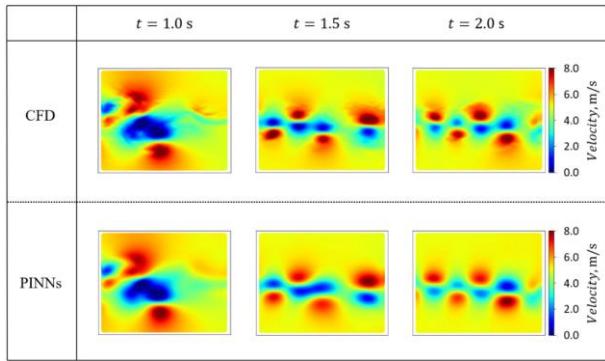
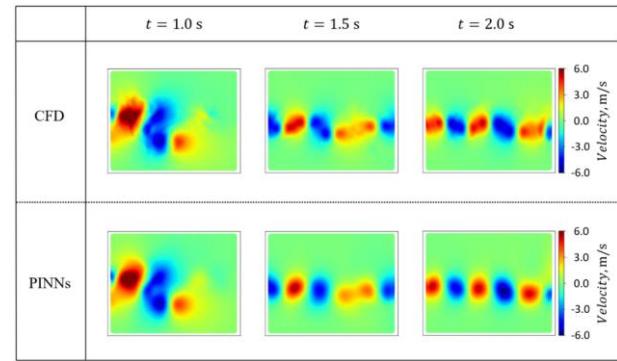
本研究のネットワーク構造について、中間層8層、ノード数20からなるニューラルネットワークを構築した。活性化関数にはTanh関数、最適化アルゴリズムにはL-BFGSを適用し、損失関数が十分に収束することを確認できるまで反復学習を実施した[5]。

4. 結果

前章で示した各条件に基づいてPINNsの学習を実行した後、座標点112200点に対して主流方向速度 u 、および主流直角方向速度 v の出力を実行した。図-3、図-4はそれぞれ時間 $t = 1.0, 1.5, 2.0$ s における主流方向速度 u 、および主流直角方向速度 v の出力であり、各図の上段には学習データとして用いた数値シミュレーション結果を示している。また、座標点112200点におけるPINNsの出力と数値シミュレーション結果との二乗平均平方根誤差 (RMSE) を算出したところ、主流方向速度 u は 3.86×10^{-1} m/s、主流直角方向速度 v は 4.69×10^{-1} m/s であった。本研究では、PINNsの学習には取得した学習データ総数 N の20 %しか使用しておらず、その他の80 %の部分における流速については連続の式を満足するようPINNsにより内挿されている。図-3および図-4より、部分的にPINNsの予測精度が低い箇所が見受けられるが、全体としてPINNsは数値シミュレーション結果の流速分布を的確に捉えている様子が確認できる。

5. 結言

本研究では2次元ブロック周りの流れ場を例題として、PINNsによる内挿手法の適用性について検討した。損失関数に連続の式を導入したモデルを構築し、数値シミュレーションで取得した20 %の学習データから、2次元ブロック後流の流速を恒常的に程良い精度で予測できることを示した。

図-3 主流方向速度 u の出力結果図-4 主流直角方向速度 v の出力結果

謝辞: 本研究の一部は科研費 (22K04440) の助成を受けたものである。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] Fukami et al.: Super-resolution reconstruction of turbulent flows with machine learning, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.870, pp.106-120, 2019.
- [2] 道岡武信, 小坂渓太, 潤本浩史, 佐藤歩: 機械学習による複雑地形上の地上風予測, 計算工学講演会論文集, Vol.27, 2022.
- [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*, Vol.378, pp.686-707, 2019.

- [4] 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝: 空間特徴抽出を援用した実践的PINNsによるパラメータ逆推定, 計算工学講演会論文集, Vol.27, 2022.
- [5] 宮本崇, 西尾真由子, 全邦釤: Physics-Informed Neural Networksによる1次元連続体の動的解析, AI・データサイエンス論文集, 2巻J2号, pp.152-156, 2021.