

Physics-Informed Neural Network を用いた 交通流の連続体モデル解析

Continuum model analysis of traffic flow using
Physics-Informed Neural Network

相良翼¹⁾，出口翔大²⁾，内田英明³⁾，三目直登⁴⁾

Tsubasa SAGARA, Syota DEGUCHI, Hideaki UCHIDA, and Naoto MITSUME

¹⁾筑波大学システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

²⁾九州大学大学院 工学府土木工学専攻 (〒 819-0023 福岡県福岡市西区元岡 744)

³⁾大阪大学大学院工学研究科 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1)

⁴⁾筑波大学システム情報系 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

Traffic congestion has long been a social problem, but it has become more severe in recent years as the number of automobiles owned has increased. Traffic flow simulation is used for preliminary evaluation of traffic congestion problems. Macro traffic flow models, one of the traffic flow simulation models, are expressed in terms of partial differential equations and are mainly used for online traffic flow simulation. However, the partial differential equations include parameters that are unobservable in reality and have been determined by empirical rules, making it difficult to represent actual traffic flow. Physics-Informed Neural Network(PINN), a machine learning method that can analyze partial differential equations, can perform parameter identification according to the governing equations. The objective of this study is to use PINN to adequately represent real-world traffic flow. In this paper, PINN is applied to the 1D advection-diffusion equation as a preliminary evaluation and its usefulness is demonstrated.

Key Words : Machine Learning, Physics-Informed Neural Network, Inverse Analysis, Traffic Flow Simulation

1. 序論

自動車の保有台数の増加に伴い、交通渋滞の発生が社会問題となっている。国土交通省によると、平成31・令和元年での高速道路、都市高速道路、直轄国道の渋滞による損失時間の合計は17.1億時間にのぼり、平成30年と比較しても同程度となっている[1]。これにより、経済活動の阻害、交通事故の増加、沿道環境の悪化などが引き起こされるため、渋滞問題の解決が求められている[2]。そこで、道路ネットワークを対象として交通流量を最適化する施策が考案される中で、時間的、経済的コストを考慮した事前評価の手段として、交通流シミュレーション[3]が注目されている。交通流シミュレーションを活用することで、様々な条件で交通流システムを再現できる他、渋滞の原因や渋滞が交通流ネットワークをどのように伝播しているのかという事項の特定が可能である。

交通流シミュレーションモデルは緻密性や計算コストの面から、マクロ交通流モデルとミクロ交通流モデルに大別される[3]。ミクロ交通流モデルとは、車両を離散的に扱い、車両別に解析するというものであり、各車両が別々にモデル化され、車両間の相互作用を表現することが可能であり、精緻な結果を得ることができる。しかし、広域の交通流や車両台数が多い交通流を対象とする場合、計算コストが莫大になってしまふため、主にオンライン交通流シミュレーションに活用される。マクロ交通流モデルとは多数の車両の運動から

なる交通流を巨視的に捉え、連続した流体とみなすというものである。マクロ交通流モデルは計算対象が大規模になっても計算量を抑えることが可能であることから、交通流ネットワークのオンラインデータを受け取って行う交通流シミュレーションで活用されることが多い。また偏微分方程式で表されることから、解は微分可能な関数であることが多いため、モデルベースでの交通流量などの推定やOD推定、交通ネットワークの最適化に適用できる。しかし、マクロ交通流モデルは人間の認知や相互作用によって織りなす社会システムの1つであり、ドライバーの運転スタイルのランダム性などを支配原理として定式化するのが困難であるため、定式化する上でパラメータを経験的に定めている。そのため、マクロ交通流モデルは現実では観測不可能なパラメータが含まれ、現実の交通流を適切に表現することが困難である。よって、マクロ交通流モデルを用いて現実の交通流を再現するためには様々な条件に応じたパラメータを適切に知ることが求められる。

ここで、近年、機械学習は著しい発展を見せており、科学・工学分野へも広く浸透している。特に、Deep Neural Network (DNN) を用いた研究では、物理シミュレーションのサロゲートモデルとしての適用が検討されている[4]。しかし、DNNの特性上、ブラックボックス的な運用は避けられず、DNNの推論解が支配方程式を満たす保障はない。そこで、我々はDNNの学習において教師データとDNNの予測値との誤差を損失関数とする

だけでなく、対象とする物理支配方程式に関する誤差項を損失関数に追加した Physics-Informed Neural Network (PINN) [5] に着目した。PINN は要素離散化を必要としない点や順解析による推論解の出力だけではなく、出力値からパラメータを推定する逆解析によって未知の変数に対して、係数同定が可能であるという特性 [6] から、幅広い応用がなされている [7,8]。

そこで、本研究の目的はマクロ交通流モデルの 1 つである Payne-Whitham model (PWM) [9,10] に含まれる現実の交通流では観測不可能なパラメータの係数同定を PINN の逆解析を用いて行うことで、マクロ交通流モデルの普遍性を担保し、現実の交通流を適切に再現することとなる。本稿では、1 次元移流拡散方程式に PINN の順解析、逆解析を適用することにより、事前検証を行った。

2. Payne-Whitham model (PWM)

マクロ交通流モデルは多数の車両の運動からなる交通流を巨視的に捉えることにより、交通流を連続流体として表現し、交通密度の粗密の変化を波の伝播とみなして表現するモデルである。PWM[9,10] はマクロ交通流モデルの 1 つであり、次の通り表される。式(1)–(4) で表される変数の意味を表-1 に示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p(\rho)}{\partial x} = \frac{1}{\tau} (V(\rho) - v) \quad (2)$$

$$p(\rho) = c_0^2 \rho \quad (3)$$

$$V(\rho) = v_m \left(1 - \frac{\rho}{\rho_m}\right) \quad (4)$$

表-1 PWM の変数

ρ	密度 [台/km]
t	時間 [h]
x	位置 [km]
v	速度 [km/h]
τ	反応時間 [h]
$V(\rho)$	平衡速度 [km/h]
c_0	交通音速 [km/h]
v_m	最大 (制限) 速度 [km/h]
ρ_m	最大密度 [台/km]

ここで、運動方程式(2)の右辺にある反応時間 τ はドライバーの反応と車両の制御にかかる時間を示したものであり、この値が小さければ前方の交通流の変化に車両が早く対応できるということを示す。また、交通音速 c_0 は式(3)において仮想圧力 $p(\rho)$ を定めるために用いる。これらの 2 つの変数は実際の交通流で観測不可能なパラメータとされており、一般的に研究者によって、恣意的に定められる。また、式(4)はマクロ交通流モデルの主要なパラメータである密度-速度の関係について示している。

3. 機械学習手法

本章では PINN[5] およびその基礎である Feed-forward Neural Network (FNN) [11] について議論する。また、PINN において重要な要素である逆解析について議論する。

(1) Feed-forward Neural Network (FNN)

FNN は最も基本的な深層学習モデルであり、高い表現力をを持つことが知られている [11]。FNN はデータを上層から下層に向かい、順伝播させるものであり、入力値 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{f_{in}}$ 、出力値 $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{f_{out}}$ で L 層を持つ FNN では、第 $l (= 1, 2, 3, \dots, L)$ 層における順伝播 $\mathbf{z}^l \in \mathbb{R}^{f_{hid}^l}$ は以下の通りである。

$$\mathbf{z}^l = \sigma^l(\mathbf{z}^{l-1} \mathbf{w}^l + \mathbf{b}^l) \quad (5)$$

ここで、 $\mathbf{z}^0 = \mathbf{X}$ 、 $\mathbf{z}^L = \hat{\mathbf{y}}$ であり、 $\sigma^l(\cdot)$ は活性化関数であり、各要素に作用する非線形写像 (出力層では恒等写像) である。また、 \mathbf{w}^l 、 \mathbf{b}^l はそれぞれ第 l 層における重み、バイアスであり、これらを最適化したとき学習終了となる。学習では問題に応じた損失関数を定義し、最小化することでパラメータ (重み、バイアス) が最適化される。本研究で用いる二乗誤差では、以下の損失関数を最小化する。

$$\mathcal{L} = \sum_i |\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{X}_i; \boldsymbol{\theta}) - \mathbf{y}_i|^2 \quad (6)$$

ここで、 $\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{w}^l, \mathbf{b}^l\}_{l=1}^L$ はパラメータベクトルであり、 \mathbf{y}_i は \mathbf{X}_i に対する教師データであり、 $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{X}_i; \boldsymbol{\theta})$ は推論解である。また、損失関数を最小化し、パラメータを最適化するのは勾配降下法が用いられ、以下のように表される。

$$\boldsymbol{\theta}^{(n+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(n)} - \eta^{(n)} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}^{(n)}) \quad (7)$$

ここで、 $\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ 、 $\eta^{(n)}$ はそれぞれ n エポック目でのパラメータベクトル、学習率である。

(2) Physics-Informed Neural Network (PINN)

PINN[5] は図-1 の概略図に示すように、FNN で定義した損失関数に加え、物理現象の支配方程式の情報を損失関数に組み込むことで機械学習のブラックボックス性を克服するというものである。以下のように記述される初期値境界問題について考える。

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, \mathbf{x}) = \mathcal{F}[u(t, \mathbf{x}); \boldsymbol{\mu}] \quad (8)$$

$$u(0, \mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad (9)$$

$$u(t, \mathbf{x}) = h(t, \mathbf{x}) \quad (10)$$

ここで、式(8) は支配原理である偏微分方程式、式(9)、式(10) はそれぞれ初期条件、境界条件である。また、式(8) の $\mathcal{F}[\cdot; \boldsymbol{\mu}]$ は $\boldsymbol{\mu}$ をパラメータに持つ偏微分作用素である。PINN では、まず FNN により支配方程式の解 u の推論解 \hat{u} を出力する。その後、推論解 \hat{u} に対し、自動

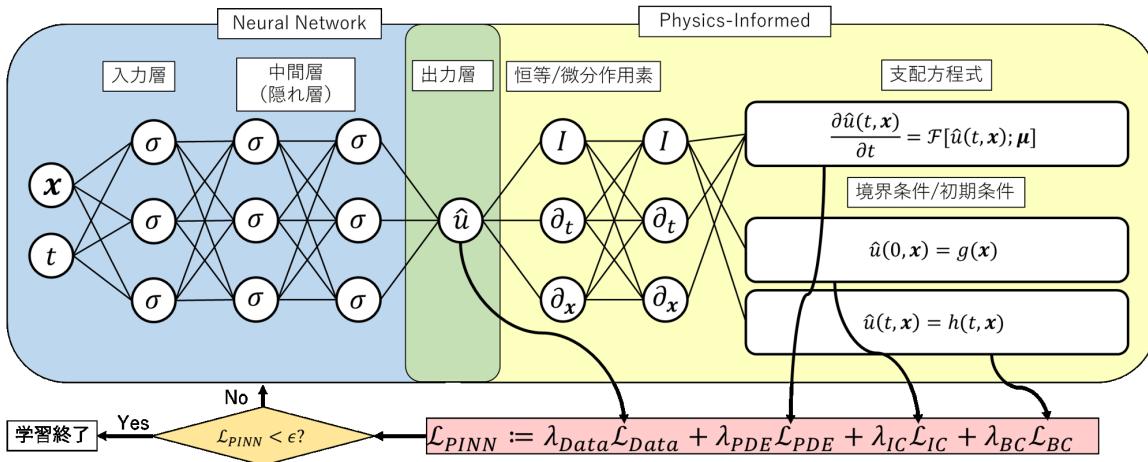


図-1 PINN の概要図

微分 [6,12] を用いることにより、式(7)に含まれる物理量の微分の算出および式(8)–(10)を計算し、損失関数として取り込むことで学習がなされる。ここで、自動微分を用いる上で重要な活性化関数の設定は、先行研究 [6] に倣い、 $\tanh(\cdot)$ を採用した。それに伴い、重みの初期化に Glorot の初期化 [13] を採用する。以上より、PINN が最小化する損失関数 $\mathcal{L}_{\text{PINN}}$ は以下の通り定義される。

$$\mathcal{L}_{\text{PINN}} := \lambda_{\text{Data}} \mathcal{L}_{\text{Data}} + \lambda_{\text{PDE}} \mathcal{L}_{\text{PDE}} + \lambda_{\text{IC}} \mathcal{L}_{\text{IC}} + \lambda_{\text{BC}} \mathcal{L}_{\text{BC}} \quad (11)$$

$$\mathcal{L}_{\text{Data}} = \sum_i |\hat{u}_i - u(t_i, \mathbf{x}_i)|^2 \quad (12)$$

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \sum_i \left| \frac{\partial}{\partial t} \hat{u}_i - \mathcal{F}[\hat{u}_i; \boldsymbol{\mu}] \right|^2 \quad (13)$$

$$\mathcal{L}_{\text{IC}} = \sum_i |\hat{u}_i - g(\mathbf{x}_i)|^2 \quad (14)$$

$$\mathcal{L}_{\text{BC}} = \sum_i |\hat{u}_i - h(t_i, \mathbf{x}_i)|^2 \quad (15)$$

ここで、 $\hat{u}_i = \hat{u}(t_i, \mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta})$ である。 $\mathcal{L}_{\text{Data}}$ は教師データと推論解の差異として定義される損失項であり、 \mathcal{L}_{PDE} 、 \mathcal{L}_{IC} 、 \mathcal{L}_{BC} はそれぞれ、偏微分方程式、初期条件、境界条件との整合性を評価する損失項である。また、 λ_{Data} 、 λ_{PDE} 、 λ_{IC} 、 λ_{BC} は各項に与える重みであり、それぞれの相対的な重要度を示す。

a) 逆解析

本稿における逆解析では、 $\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{w}^l, \mathbf{b}^l\}_{l=1}^L$ に加えて推定するパラメータを学習パラメータとして FNN に追加し、損失関数の最小化を行うことにより、逆解析を実施する。PWM を例に挙げると、反応時間 τ と交通音速 c_0 を推定する際には、対応する学習パラメータ $\boldsymbol{\mu} = \{\hat{\tau}, \hat{c}_0\}$ を定め、式(13)の $\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \mathcal{L}_{\text{PDE}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\mu})$ を最小化することで逆解析を実施する。したがって、式(7)で示した勾配降下法を $\boldsymbol{\theta}$ 、 $\boldsymbol{\mu}$ の両者に対して適用する。

$$\boldsymbol{\theta}^{(n+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(n)} - \eta^{(n)} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}_{\text{PINN}}(\boldsymbol{\theta}^{(n)}, \boldsymbol{\mu}^{(n)}) \quad (16)$$

$$\boldsymbol{\mu}^{(n+1)} = \boldsymbol{\mu}^{(n)} - \eta^{(n)} \nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_{\text{PINN}}(\boldsymbol{\theta}^{(n)}, \boldsymbol{\mu}^{(n)}) \quad (17)$$

ここで、 $\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ 、 $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ はそれぞれ n エポック目でのパラメータベクトル、 $\eta^{(n)}$ は学習率である。

4. 数値実験

(1) 1 次元移流拡散方程式の順解析・逆解析

1 次元移流拡散方程式に対し、PINN による順解析、逆解析を行った数値実験を示す。1 次元移流拡散方程式の支配方程式、初期条件、境界条件は以下のように与えられる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (18)$$

$$u(0, x) = \sin(\pi x) \quad (19)$$

$$u(t, -1) = u(t, 1) = 0 \quad (20)$$

ここで、 $t \in [0, 1]$ 、 $x \in [-1, 1]$ である。 a は移流速度、 k は拡散係数であり、 $a = 0.8$ 、 $k = 0.03$ とした。

また、本研究で用いるネットワーク構造は、 $\{f_{\text{hid}}^l\}_{l=1}^{L-1} = f_{\text{hid}} = 50$ 、 $L = 5$ とし、活性化関数には、 $\{\sigma^l(\cdot)\}_{l=1}^{L-1} = \sigma(\cdot) = \tanh(\cdot)$ を用い、重みの初期化には Glorot の初期化 [13] を採用している。最適化手法には Adam[14] を採用し、学習率 η は $\eta = 0.001$ 、1 次・2 次モーメント推定の指數減衰率 β_1 、 β_2 はそれぞれ $\beta_1 = 0.9$ 、 $\beta_2 = 0.999$ とした。なお、本研究における PINN の開発には TensorFlow[14] を用いた。

a) 順解析

順解析では、学習データを用いない教師なし学習により数値実験を行った。よって、損失関数は式(13)–(15)から構成され、損失項の各項の重みはすべて 1 とした。また、入力値の選点方法はランダムサンプリングを採用し、ネットワークに与え、50000 エポックのフルバッチ学習

を行った。順解析の結果と有限差分法 (Finite Difference Method (FDM)) の解析による比較を図-2 に示す。

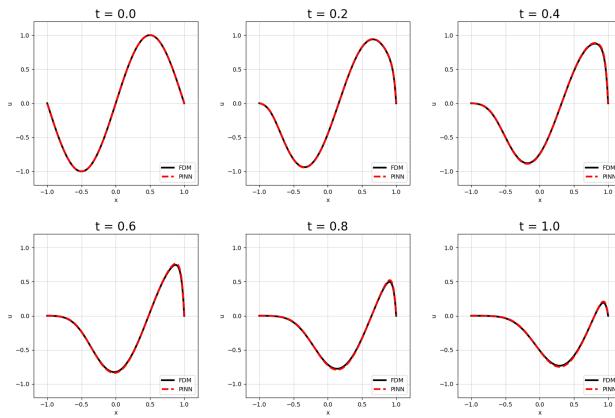


図-2 順解析の学習結果

図-2 はそれぞれ、 $t = \{0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0\}$ についての PINN の推論解と FDM での解析解の比較を行っており、良い一致を示していることが分かる。

b) 逆解析

逆解析では、FDM で学習データを作成し、教師あり学習により数値実験を行った。このときの損失関数は式(11)のように表される。また、損失項の各項の重みの設定は、PINN の学習過程にネットワーク中を逆伝播する損失関数のパラメータ勾配を用いた動的重み付け法 (Dynamic Normalization (DN)) [16,17] を用いた。DN では、新たなハイパラメータが必要となるが、順解析、逆解析において、高精度化を可能にする。本研究では、DN でのハイパラメータである動的重みの指指数減衰率 β 、更新間隔 τ はそれぞれ、 $\beta = 0.99$ 、 $\tau = 10$ とした。また、入力値の選点方法は規則配置を用いることで、誤差の収束性が向上する [18] ことから、規則配置を採用し、50000 エポックのフルバッチ学習を行った。学習データは図-3 の FDM の解析解より、 x は $x = 0.1$ から 0.9 まで、0.1 刻み、 t は $t = 0.0$ から 1.0 まで、0.1 刻みごとに与え、計 190 点の情報から移流速度 a と拡散係数 k を逆解析する。ここで、逆解析の推定値は学習データに与える FDM の精度が影響することが確認できたため、FDM ではクーラン数と拡散数に則り、人口粘性が十分に小さくなる時間刻み幅を設定し、解析した。

学習過程での移流速度 a の推定値、拡散係数 k の推定値の推移を図-4、図-5 にそれぞれ示しており、移流速度は約 3000 エポック程度、拡散係数は約 5000 エポック程度で収束している。また、学習終了時点でのそれぞれの推定値を表-2 に示す。移流速度は図-4、表-2 より、真値と比較して誤差は 0.004125% となっており、高精度に推定が実行できている。拡散係数は図-5、表-2 より、真値との誤差は 1.8% であり、先行研究 [17] と同程度の良好な推定が実行できている。

(2) PWM の順解析・逆解析 (省略)

PWM に対する順解析および、逆解析の数値実験についての議論は、本稿では省略し、口頭発表にて行う。

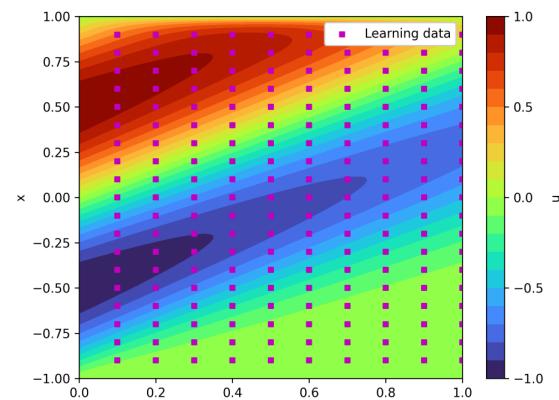


図-3 FDM による解析解と学習データ点

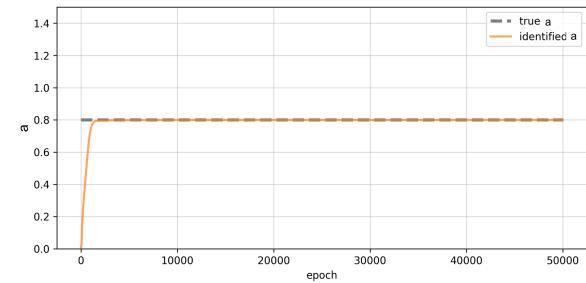


図-4 移流速度の推定の推移

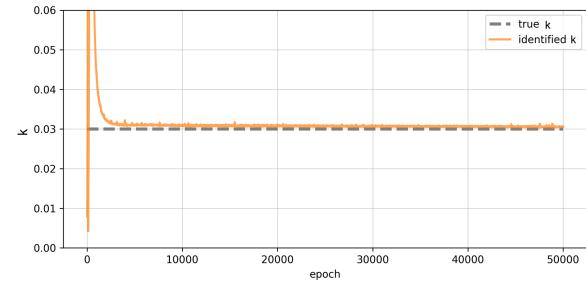


図-5 拡散係数の推定の推移

表-2 移流速度・拡散係数の推定結果

	移流速度 a (error[%])	拡散係数 k (error[%])
True	0.8	0.03
Identified	7.99967 (0.04125%)	0.03054 (1.8%)

5. 結論

本稿では、PINN を PWM に適用し、逆解析を行う前の性能評価として、比較的容易に表現することが可能な1次元移流拡散方程式を対象として、PINN の順解析、逆解析を行った。順解析では、教師なし学習で解析を行い、FDM の結果とよく一致することから、支配方程式に基づく学習が十分にできていると考えられる。また、逆解析では、学習データを与えることにより、パラ

メータの推定を行い、移流速度 a では高精度に、拡散係数 k は先行研究 [17] と同程度の結果を得ることができた。よって、1 次元移流拡散方程式に関して順解析、逆解析を行い、十分な有用性を得ることができたため、今後の研究では PWM に PINN を適用することが念頭に置かれる。PWM では、実際には観測不可能な未知パラメータである反応時間 τ 、交通音速 c_0 を支配方程式に基づき、学習データから適切に逆解析することが目的となる。これらの反応時間 τ 、交通音速 c_0 の分布は解析領域全体で一定ではなく、時間や座標に依存することから、逆解析では時間や座標に依存する分布の推定を行う必要がある。これらについての議論は、口頭発表にて行う予定である。

謝辞： 本研究は、JSPS 科研費 23K24857, 23K13513 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] 国土交通省ホームページ：過去の高速道路・直轄国道の渋滞損失時間 (<https://www1.mlit.go.jp/road/ir/ir-data/congestion-loss-time/>), 2024/03/24 閲覧。
- [2] 国土交通省ホームページ：2 地域交通の現状と課題 (<https://www.mlit.go.jp/hakusyo/mlit/h20/hakusho/h21/html/k1132000.html>). 2024/04/02 閲覧。
- [3] Dorokhin, S., Artemov, A., Likhachev, D., Novikov, A. and Starkov, E.: Traffic simulation: an analytical review, IOP Conference Series Materials Science and Engineering, Vol. 918, 2020.
- [4] Guo, X., Li, W. and Iorio, F.: Convolutional Neural Networks for Steady Flow Approximation, Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, pp. 481-490, 2016.
- [5] 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, pp. 686-707, 2019.
- [6] 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝：空間特徴量を援用した 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, 22-15011, 2023.
- [7] Sahli F.S., Yang, Y., Perdikaris, P., Hurtado, D.E., Kuhl, E.: Physics-informed neural networks for cardiac activation mapping, Frontiers in Physics, Vol. 8, pp. 42, 2020.
- [8] Cai, S., Wang, Z., Fuest, F., Jeon, Y.J., Gray, C. and Karniadakis, G.E.: Flow over an espresso cup: inferring 3-D velocity and pressure fields from tomographic background oriented Schlieren via physics-informed neural networks, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 915, pp. A102, 2021.
- [9] Payne, H.J.: Model of freeway traffic and control, Mathematical Model of Public System, pp. 51-61, 1971.
- [10] Whitham, G.B. : Linear and nonlinear waves, John Wiley & Sons, 2011.
- [11] Hornik, K., Stinchcombe, M. and White, H.: Multilayer feed-forward networks are universal approximators, Neural Networks, Vol. 2, No. 5, pp. 359-366, 1989.
- [12] Baydin, A.G., Pearlmutter, B.A., Radul, A.A. and Siskind, J.M.: Automatic differentiation in machine learning: A survey, Journal of Machine Learning Research, Vol. 18, pp. 1-43, 2018.
- [13] Glorot, X. and Bengio, Y.: Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks, Proceedings of Machine Learning Research, pp. 249-256, Vol. 9, 2010.
- [14] Kingma, D. and Ba, J.: Adam: A Method for Stochastic Optimization, International Conference on Learning Representations (ICLR), 2014.
- [15] Abadi, M., Agarwal, A., Barham, P., Brevdo, E., Chen, Z., Citro, C., Corrado, G.S., Davis, A., Dean, J., Devin, M., Ghemawat, S., Goodfellow, I., Harp, A., Irving, G., Isard, M., Jia, Y., Jozefowicz, R., Kaiser, L., Kudlur, M., Leven-berg, J., Mane, D., Monga, R., Moore, S., Murray D., Olah, C., Schuster, M., Shlens, J., Steiner, B., Sutskever, I., Tal-war, K., Tucker, P., Vanhoucke, V., Vasudevan, V., Viegas, F., Vinyals, O., Warden, P., Wattenberg, M., Wicke, M., Yu, Y. and Zheng, X.: TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems, arXiv: 1603.04467, 2016.
- [16] Deguchi, S. and Asai, M.: Dynamic & norm-based weights to normalize imbalance in back-propagated gradients of physics-informed neural networks, Journal of Physics Communications, Vol. 7., No. 7, 2023.
- [17] 出口翔大, 浅井光輝：支配方程式による制約を加えた機械学習 PINN に対する動的重み付け法, 計算工学講演会論文集, Vol. 28, pp. 176-181, 2023.
- [18] 萩野正雄：非一様度が低い点集合を用いた PINN によるポアソン方程式の予測モデル性能評価, Transaction of JSCES, Paper No.20240003, 2024.