

PINN(Physics Informed Neural Network) の 構造解析への応用に関する研究

Research on the application of PINN
(Physics Informed Neural Network) to structural analysis

大平啓貴¹⁾ 乙黒雄斗²⁾ 岡田裕³⁾
Yoshiki Ohira, Yuto Ootoguro and Hiroshi Okada

¹⁾学士 (工) 東京理科大学 大学院 創域理工学研究科機械航空宇宙工学専攻 (〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641, E-mail: 7523514@ed.tus.ac.jp)

²⁾博士 (工) 東京理科大学 創域理工学部 機械航空宇宙工学科 助教 (〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641, E-mail: yuto.otoguro@rs.tus.ac.jp)

³⁾Ph.D. 東京理科大学 創域理工学部 機械航空宇宙工学科 教授 (〒 278-8510 千葉県野田市山崎 2641, E-mail: hiroshi.okada@rs.tus.ac.jp)

In recent years, machine learning techniques have been applied to engineering. In particular, PINN (Physics-informed neural networks) has attracted attention from researchers and engineers, as a new analysis method for solving physical problems by learning the governing equations of physical phenomena. In this study, we performed an analysis of two-dimensional boundary value problem by minimizing the potential energy of the system using the above PINN, and examined the influence of learning parameters on the accuracy of the analysis.

Key Words : *Physics-Informed Neural Networks, Deep Energy Method, Principle of Minimum Potential Energy*

1. はじめに

近年、機械学習アルゴリズムの発展や GPU 性能の向上により、機械学習モデルの様々な科学分野への応用が進んでいる。ニューラルネットワークのような機械学習モデルは、物理量の入力出力関係を学習することができ、画像処理や情報科学分野では優れた性能を発揮している。しかし、工学分野への応用には 2 点の課題があった。まず 1 点目に、ニューラルネットワークは物理法則を考慮していないため、出力解は物理法則を満たすことが保証されていない。そして 2 点目に、ニューラルネットワークの学習には大量の教師データが必要であり、その準備には多大なコストがかかる。これらの欠点を解消するのが Raissi によって提案された Physics-informed neural networks(PINN)[1] である。PINN は損失関数と呼ばれるニューラルネットワークの学習の指標に解析対象の支配方程式を組み込むことにより、出力解は物理法則を満たす。また、支配方程式が学習の指標になるため、大量の教師データを必要としない。固体力学分野においては、損失関数に系のポテンシャルエネルギーを導入し、それを最小化するように学習を行うことにより境界値問題を解く、Deep energy method(DEM)[2] という手法が Samaniego らによって提案されている。本稿では、DEM を様々な 2 次元弾性境界値問題に適用するための基礎研究として、PINN の様々な学習パラメータによる解析精度の検討を行う。

2. Deep energy method[2] の概要

(1) ニューラルネットワーク [3] について

ニューラルネットワークとは、生物学的神経系の構造と挙動に着想を得ている機械学習ツールである。図 1 に 2 層の隠れ層を持つディープニューラルネットワークの概要を示す。ニューラルネットワークは、情報が入力される入力層、情報を処理する隠れ層、情報を出力する出力層から構成される。各層には情報を処理するニューロンがあり、ニューロンは前後の層のニューロンとエッジにより結合されている。各エッジには重みがあり、角ニューロンにはバイアスと活性化関数が割り当てられている。隠れ層の数と各層に含まれるニューロンの数は任意の数で構成されており、図 1 のように、隠れ層が 2 層以上あるニューラルネットワークを一般にディープニューラルネットワークと呼ぶ。

ここで、隠れ層のニューロンでの計算について説明する。隠れ層の 1 層目では、入力層からの各入力と重みをかけたものを足し合わせる。次にバイアスの値 b を加え、得た値を活性化関数 σ に代入する。ここで、活性化関数はニューラルネットワークの各層の出力を非線形に変換する関数であり、また、バイアスは単純な線型変換によるモデルの柔軟性を増やし、どちらもニューラルネットワークが複雑なデータのパターンを学習できるようにする。活性化関数に代入した後の値は、次の層である 2 層目の隠れ層のニューロンへ渡され、2 層目以降の隠れ層でも、同様の計算が行われる。ここで、 L 層目における i 番目のニューロンの値は、次のように

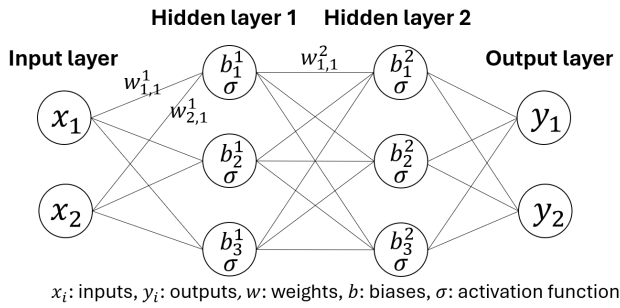


図-1 2層の隠れ層を持つニューラルネットワーク

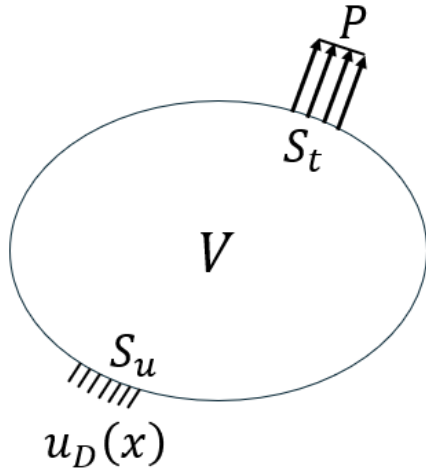


図-2 境界値問題

なる。

$$x_i^L = \sigma_{L-1} \left\{ \sum_{j=1}^{m_{L-1}} w_{i,j}^L x_j^{L-1} + b_i^L \right\} \quad (1)$$

ここで、 m_{L-1} は第 $L-1$ 層目のニューロンの数である。

各々のニューロンでの処理を1つの関数とみなすと、ニューラルネットワークは多くの関数(ニューロン)を合成した合成関数と見ることができ、入力 \mathbf{x} 、出力 \mathbf{y} のニューラルネットワーク全体は次のように表される。

$$\mathbf{y} = \mathcal{N}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \quad (2)$$

ここで、 $\boldsymbol{\theta}$ はニューラルネットワークパラメタ $\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{w}, \mathbf{b})$ であり、 \mathbf{w} は重み、 \mathbf{b} はバイアスである。

(2) PINN について

今、図2に示すような境界値問題を解くことを考える。2次元弾性体に対し、境界 S_t 上でトラクション P が、境界 S_u 上で変位 \mathbf{u}_D が規定されている物体の領域を V で表す。この系のポテンシャルエネルギー $\pi(\mathbf{u})$ は内部エネルギー Φ_{int} と外力仕事 Φ_{ext} の差をとり、

$$\pi(\mathbf{u}) = \Phi_{int} - \Phi_{ext} = \int_V U^e dV - \int_{S_t} \mathbf{u} P dS_t \quad (3)$$

で表される。ここで、 U^e はひずみエネルギー密度、 \mathbf{u} は変位である。このポテンシャルエネルギーが最小に

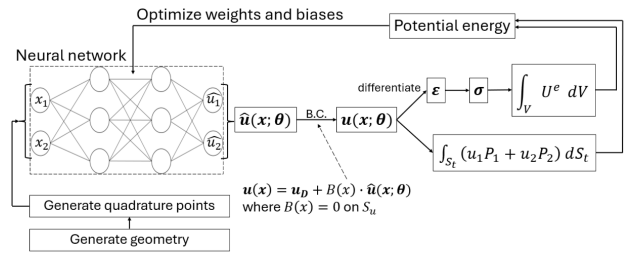


図-3 Deep energy method

なるとき、力の釣合が満たされ、DEM ではこれを学習の指標とする。

DEM を用いる PINN の概要を図3に示す。境界値問題を解くにあたって、まず最初に解析対象の形状を生成し、その内部に積分点を生成する。次に、予め重みとバイアスをランダムに初期化したニューラルネットワークの入力層に、生成した積分点の座標を入力する。入力された値はニューラルネットワークを順に伝播していき、出力層での値は入力された座標での変位として扱う。次に、Goswami ら [5] に倣い、ニューラルネットワークの出力を変位境界条件を満たすように更新する。更新の式は以下のように表される。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_D + \mathbf{B}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ は更新された変位、 \mathbf{u}_D は境界 S_u で規定されている変位、 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ は境界 S_u 上で $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = 0$ となる関数、 $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ はニューラルネットワークの出力した変位である。この操作により、学習の指標となる損失関数の境界条件に関する項とそのペナルティパラメータが不要になり、最適化問題が単純化される。

次に、得られた変位を微分することによりひずみを求め、応力-ひずみの関係から応力を求める。求められた応力とひずみを系の領域全体に対して積分することにより、系のひずみエネルギーを求める。また、得られた変位と規定したトラクションを掛け合わせ、それを境界 S_t に対して積分することにより、外力仕事を求める。以上の求めたひずみエネルギーと外力仕事の差を取ることで、以下のポテンシャルエネルギーを得る。

$$\pi(\mathbf{u}) = \int_V \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\epsilon} dV - \int_{S_t} \mathbf{u} P dS_t \quad (5)$$

このポテンシャルエネルギーを最小化するように、ニューラルネットワークの重みとバイアス(ニューラルネットワークパラメタ)を更新する。

そして、ニューラルネットワークパラメタが更新されたニューラルネットワークの入力層に再度積分点の座標を入力し、その座標での変位を求める。さらにその変位から系のポテンシャルエネルギーを求め、このポテンシャルエネルギーを最小化するようにニューラルネットワークパラメタを再度更新する。この過程を繰り返して、ポテンシャルエネルギーが最小になるようにニューラルネットワークパラメタを更新していくことを学習と呼ぶ。

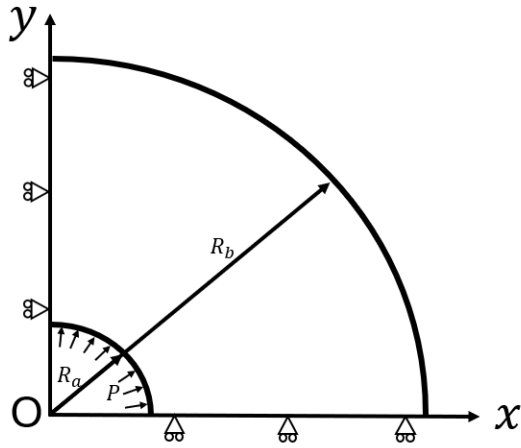


図-4 内圧を受ける厚肉円筒

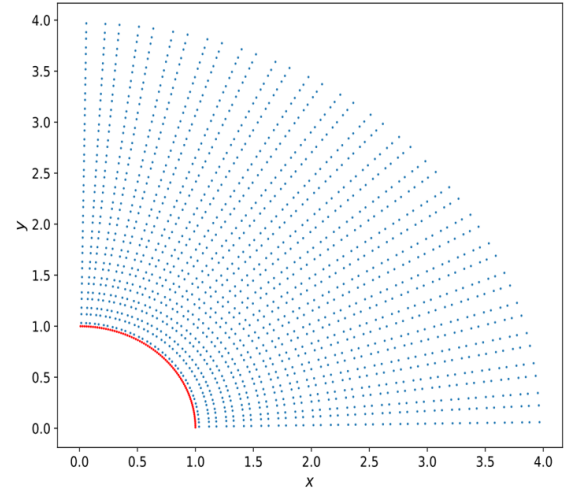


図-5 生成した積分点

ニューラルネットワークは領域全体の積分点に対してポテンシャルエネルギーが最小になるように学習され、ニューラルネットワークは物体上の変位を表すグローバルな形状関数の働きをする。

以上のように、系のポテンシャルエネルギーを最小化するように PINN の学習を行い、境界値問題を解く手法を Deep energy method(DEM)[2] と呼ぶ。

3. 数値解析例

本章では、前章で述べた解析手法に基づいて実施した DEM による固体力学解析について述べる。内圧を受ける厚肉円筒について解析を行い、理論解との誤差について議論する。

(1) 問題の設定

今回は平面応力下における内圧を受ける厚肉円筒についての解析を行う。円筒においては形状と境界条件は断面の中心に対して対称であるため、図 4 に示す円筒の 1/4 モデルを用いて解析を行った。円筒の材料定数は、ヤング率 $E = 100\text{GPa}$ 、ポアソン比 $\nu = 0.3$ とした。また、 $R_a = 4\text{mm}$ と $R_b = 1\text{mm}$ はそれぞれ円筒の外径と内径であり、内圧は $P = 1\text{MPa}$ とした。

ここで、極座標系における応力の理論解は以下の通りである。

$$\sigma_{rr} = \frac{R_a^2 P}{R_a^2 - R_b^2} \left(1 - \frac{R_a^2}{r^2} \right) \quad (6)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{R_a^2 P}{R_a^2 - R_b^2} \left(1 + \frac{R_a^2}{r^2} \right) \quad (7)$$

$$\sigma_{r\theta} = 0 \quad (8)$$

また、 x 方向と y 方向の変位場の理論解はそれぞれ、

$$u_{ex} = \frac{R_a^2 P r}{E (R_b^2 - R_a^2)} \left(1 - \nu + \left(\frac{R_b}{r} \right)^2 (1 + \nu) \right) \cos \theta \quad (9)$$

$$v_{ex} = \frac{R_a^2 P r}{E (R_b^2 - R_a^2)} \left(1 - \nu + \left(\frac{R_b}{r} \right)^2 (1 + \nu) \right) \sin \theta \quad (10)$$

である。これと DEM による解を比較する。

ディリクレ境界条件は、

$$u(0, y) = v(x, 0) = 0 \quad (11)$$

である。ここで、 u と v はそれぞれ x と y 方向における変位場である。

(2) PINN の設定

式 (4) で示したように、ディリクレ境界条件を満たすように PINN の出力を更新する。式 (11) の境界条件を満たすように、ニューラルネットワークの出力は次のように更新される。

$$u = x\hat{u}(x, \theta) \quad (12)$$

$$v = y\hat{v}(x, \theta) \quad (13)$$

ここで、 \hat{u} と \hat{v} はニューラルネットワークの出力であり、それぞれ式 (4) における $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, \theta)$ の x 方向成分と y 方向成分である。また、式 (4) における $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ の x 方向成分、 y 方向成分はそれぞれ、 x 、 y である。

変位場の解を得るために、Goswami ら [5] に倣い、1 層あたり 30 個のニューロン、また 3 層の隠れ層を持つニューラルネットワークを設計した。最初の 2 層の中間層では ReLU²、3 層目の中間層には線形の活性化関数を採用した。また、図 5 に示すように、円環の内部に 1600 個、トラクション境界には 80 個の積分点を生成した。ニューラルネットワークパラメタの最適化法は Adam を用いた。

(3) 解析結果

図 6 に、Adam の学習率を変更して学習を行った結果を示す。グラフの横軸は学習の繰り返し回数であり、縦軸は以下の式で表されるひずみエネルギーの誤差ノルムである。

$$\frac{\sqrt{\int_V (f(x) - f_{ex}(x))^2 dV}}{\sqrt{\int_V (f_{ex}(x))^2 dV}} \quad (14)$$

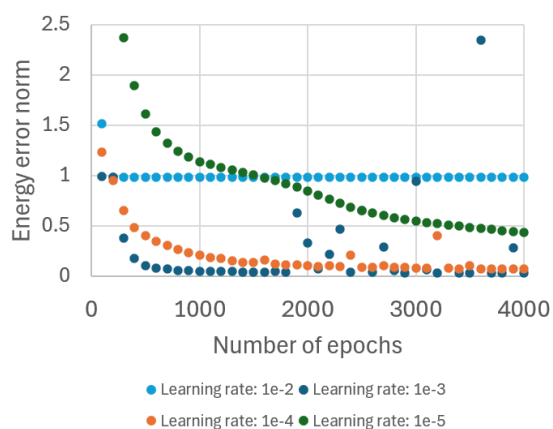
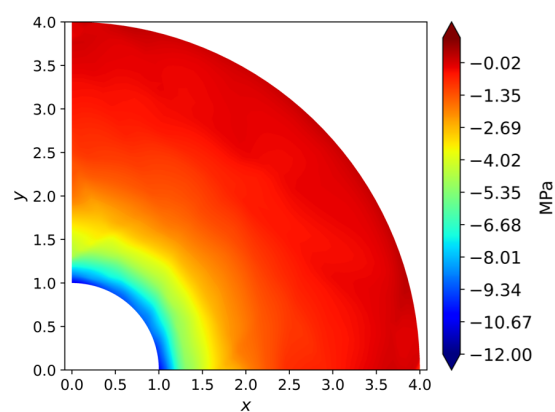
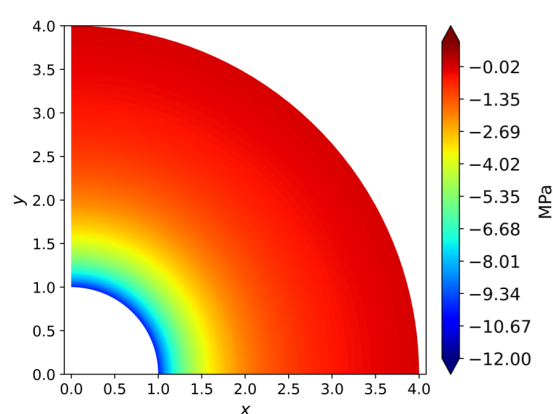
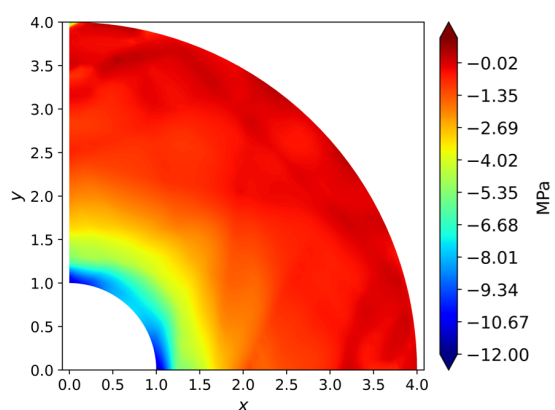
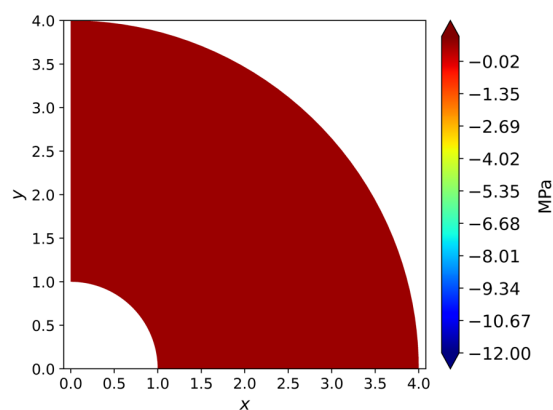
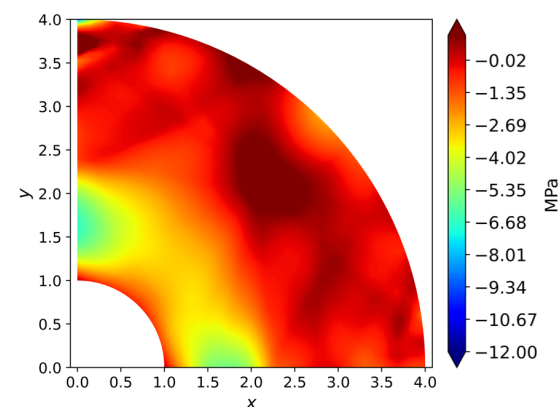


図-6 エネルギー誤差ノルム

図-9 σ_{rr} の分布 (学習率: 10^{-3})図-7 σ_{rr} の分布 (厳密解)図-10 σ_{rr} の分布 (学習率: 10^{-4})図-8 σ_{rr} の分布 (学習率: 10^{-2})図-11 σ_{rr} の分布 (学習率: 10^{-5})

ここで、 $f(x)$ はDEMにより得られたひずみエネルギー、 $f_{ex}(x)$ はひずみエネルギーの厳密解である。また、図7に式(6)で表される σ_{rr} の分布、図8, 9, 10, 11に、それぞれAdamの学習率を 10^{-2} 、 10^{-3} 、 10^{-4} 、 10^{-5} として、学習を4000回繰り返した後の σ_{rr} の分布を示す。さらに、各学習率の解析での最も小さい誤差ノルムの値を表1に示す。

図6から、学習パラメータによる解析精度の不安定性があることがわかる。また、図7, 8, 9, 10, 11から、学習率を 10^{-3} に設定した場合は厳密解の σ_{rr} 分布を概ね再現できているが、他の学習率を設定した場合には精度が低下していることがわかる。図6に示すエネルギー誤差ノルムが小さいほど、応力分布の再現度が高くなっていた。表1から、エネルギーの誤差ノルムが最も小さくなったのは学習率が 10^{-3} の場合であったが、

表-1 各学習率での最小誤差ノルム

Learning rate	Minimum energy error norm
10^{-2}	0.98359
10^{-3}	0.03087
10^{-4}	0.06848
10^{-5}	0.43257

学習繰り返し回数が 1800 以降は過学習により，精度が不安定に転じていることが図 6 から確認できる．

4. おわりに

本稿では，PINN，その中でも系のポテンシャルエネルギー最小化を考える DEM を用いて，二次元境界値問題を解く例を示した．内圧を受ける厚肉円筒の問題に対して，DEM は教師データなしに，物理法則を満たす解を求めることができたが，学習パラメータによる精度不安定性が確認された．今後 DEM を様々な 2 次元弾性境界値問題に適用させるにあたっては，最適な学習パラメータの検討，最適な積分点の配置及び積分スキームの検討が必要であると考ええる．

参考文献

[1] Raissi, M. and Karniadakis, G. E.: Hidden physics models: Machine learning of nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, Vol.357, pp.125-141, 2018.

[2] Samaniego, E., Anitescu, C., Goswami, S., Nguyen-Thanh, V.M., Guo, H., Hamdia, K., Zhuang, X. and Rabczuk, T.: An energy approach to the solution of partial differential equations in computational mechanics via machine learning: Concepts, implementation and applications, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 362, 2020.

[3] Rosenblatt, F.: The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain, *Psychological Review*, 65(6), pp.386–408, 1958.

[4] Goswami, S., Anitescu, C., Chakraborty, S. and Rabczuk, T.: Transfer learning enhanced physics informed neural network for phase-field modeling of fracture, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, Vol. 106, 2020.

[5] Goswami, S., Anitescu, C. and Rabczuk, T., Adaptive fourth-order phase field analysis for brittle fracture, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 361, 2020.