

古典的領域分割法に対するPINNの適用に関する検討

Study for Applying the Classical Domain Decomposition Methods
to the Physics-Informed Neural Networks荻野正雄¹⁾

Masao Ogino

1) 博(工) 大同大学 情報学部 (〒457-8530 愛知県名古屋市中南区滝春町10-3, E-mail: m-ogino@daido-it.ac.jp)

PINN is a method for training neural networks by constructing a loss function based on the error in the initial-boundary value problem for partial differential equations (PDEs), but its parallel computation method rarely utilizes the results of conventional research on PDE solvers. This study reports the results of an application of PINN to classical domain decomposition methods such as the Dirichlet-Neumann, Neumann-Neumann, and Dirichlet-Dirichlet methods for the two-dimensional magnetostatic problem.

Key Words : PINNs, Domain Decomposition Method, Magnetostatic Field Analysis, Machine Learning

1. はじめに

連続体力学分野で現れる偏微分方程式の初期値境界値問題の数値解析として、Physical-Informed Neural Networks (PINN) [1][2]が注目されている。PINNはニューラルネットワーク学習における損失関数に非線形偏微分方程式で記述された物理法則に対する誤差を組み込むことが最大の特徴である。著者はこれまで、Maxwell方程式から導出される電磁界解析分野へのPINNの適用研究を進めてきている[3][4][5]。また、従来からの数値解析手法である有限要素法と比較し、学習点集合の大きさや点分布のばらつきが誤差収束に与える影響を評価した[6]。それらの結果より、PINNの高精度化には学習点集合を大きくすることがあり、学習時間の増加が問題となることが明らかになった。

本研究は、PINNの並列計算方法として、有限要素法の並列化として長く研究されてきている領域分割法(DDM)を採用する。DDMアルゴリズムに対してPINNを適用し、その数値実験結果について報告する。対象は2次元静磁場問題とし、古典的な2領域DDMアルゴリズムを適用する。

2. 2次元静磁場問題に対するPINN

(1) 2次元静磁場問題

図1に示す十分に長い電線周りの磁束密度を求める2次元静磁場問題を考える[7]。定式化には、磁束密度 $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ に対して $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ を満たす磁気ベクトルポテンシャル $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$ を未知数とするA法(例えば文献[8])を採用する。解析領域全体を Ω 、真空領域の境界面を Γ_{vacuum} とすると、支配方程式は次式となる。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial A_z}{\partial y} \right) = -J_z & \text{in } \Omega \\ A_z = 0 & \text{on } \Gamma_{\text{vacuum}} \end{cases} \quad (1)$$

ただし、 μ は透磁率、 $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ は電流密度であり、 $J_x = J_y = 0$ である。式(1)は A_z に関する2次元ポアソン方程式の

境界値問題となっている。式(1)を解いて得られた A_z を用いて、磁束密度は次式で求める。

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y}, \quad B_y = -\frac{\partial A_z}{\partial x} \quad (2)$$

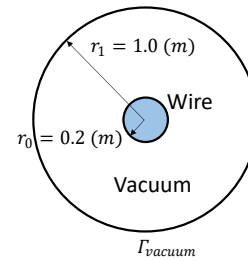


図-1 十分に長い電線周りの静磁場問題

(2) PINN

ある点 (x, y) におけるニューラルネットワークによる磁気ベクトルポテンシャル A_z の予測値を $u(x, y)$ とし、式(1)の第1式に基づく関数 f を考える。

$$f(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \right) + J_z \quad (3)$$

これを用いて、PINNを学習するための損失関数 \mathcal{L} を、

$$\mathcal{L} = w_u \mathcal{L}_u + w_f \mathcal{L}_f \quad (4)$$

とする。ただし、 \mathcal{L}_u と \mathcal{L}_f はそれぞれ境界条件(BC)と偏微分方程式(PDE)に対する平均2乗誤差関数、 w_u と w_f は非負の重みパラメータである。 \mathcal{L}_u と \mathcal{L}_f は次式で表せる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_u &= \frac{1}{N_{BC}} \sum_{i=1}^{N_{BC}} |u(x_u^i, y_u^i) - u^i|^2, \\ \mathcal{L}_f &= \frac{1}{N_{PDE}} \sum_{i=1}^{N_{PDE}} |f(x_u^i, y_u^i)|^2 \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、 N_{BC} と N_{PDE} はそれぞれ境界面と領域内の点集合の

大きさである。

3. 2領域DDM

(1) 2領域問題

並列計算に向けてDDMアルゴリズムへPINNを適用する。図2に示すように、解析領域 Ω を領域間に重なりのない2つの部分領域 $\Omega^{(1)}$ と $\Omega^{(2)}$ に分割し、領域分割によって生じる部分領域間境界を Γ とする。 $\Gamma_D^{(i)}$ と $\Gamma_N^{(i)}$ は元の問題におけるDirichlet境界とNeumann境界の部分領域 $\Omega^{(i)}$ に関する部分を表す。また、 $\mathbf{n}^{(i)}$ は Γ 上での外向き単位法線である。DDMは、部分領域それぞれでの近似関数 $u^{(i)}$ を求めることで、解析領域全体の解を得る方法である。

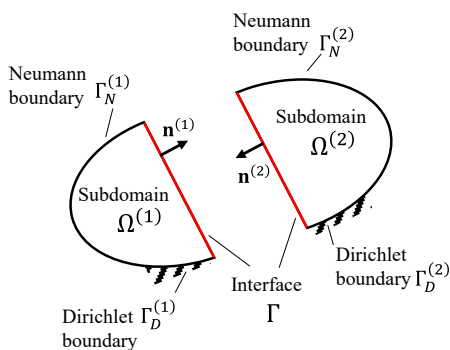


図-2 2領域問題

(2) 古典的DDMアルゴリズム

DDMアルゴリズムは広く研究されており、大規模解析や並列計算の実績も多い。しかし、それらの多くは有限要素法などで離散化された方程式に対するものとして整備されている。一方、PINNを適用するためにはその解法が偏微分方程式で記述されている必要がある。そこで今回は偏微分方程式で記述して説明されることが多い古典的DDMアルゴリズム(例えば文献[9])で検討する。

Neumann-Neumann(N-N)アルゴリズムへPINNを適用したアルゴリズムStep 0~3を示す。このアルゴリズムにおいて、Step 1と2におけるPINN学習は部分領域それぞれで実行可能であり、部分領域単位の並列性を持つ。

Step 0:

Γ 上の未知関数を u^Γ とし、 $u_0^\Gamma = 0$ と初期化する。以降、 $n = 0, 1, 2, \dots$ としながらStep 1から3を繰り返す。

Step 1:

Γ にDirichlet境界条件を与えた部分領域ごとのサブ問題を考え、 $u_{n+1/2}^{(1)}$ と $u_{n+1/2}^{(2)}$ をそれぞれPINN学習する。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial u_{n+1/2}^{(i)}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial u_{n+1/2}^{(i)}}{\partial y} \right) = -J_z^{(i)} & \text{in } \Omega^{(i)} \\ u_{n+1/2}^{(i)} = 0 & \text{on } \Gamma_{\text{vacuum}} \\ u_{n+1/2}^{(i)} = u_n^\Gamma & \text{on } \Gamma \end{cases} \quad (6)$$

Step 2:

Γ にNeumann境界条件を与えた部分領域ごとのサブ問

題を考え、 Γ 上の関数 $\psi_{n+1}^{(1)}$ と $\psi_{n+1}^{(2)}$ をそれぞれPINN学習する。ただし、 Γ に与えるNeumann境界条件値はStep 1で学習させたPINNを用いた推論にて求める。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial \psi_{n+1}^{(i)}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial \psi_{n+1}^{(i)}}{\partial y} \right) = 0 & \text{in } \Omega^{(i)} \\ \psi_{n+1}^{(i)} = 0 & \text{on } \Gamma_{\text{vacuum}} \\ \frac{\partial \psi_{n+1}^{(i)}}{\partial \mathbf{n}^{(i)}} = \frac{\partial u_{n+1/2}^{(1)}}{\partial \mathbf{n}^{(1)}} + \frac{\partial u_{n+1/2}^{(2)}}{\partial \mathbf{n}^{(2)}} & \text{on } \Gamma \end{cases} \quad (7)$$

Step 3:

Γ 上の未知関数 u^Γ を更新する。

$$u_{n+1}^\Gamma = u_n^\Gamma - \theta \left(\psi_{n+1}^{(1)} + \psi_{n+1}^{(2)} \right) \quad \text{on } \Gamma \quad (8)$$

ただし、 Γ 上の $\psi_{n+1}^{(1)}$ の値はStep 2で学習させたPINNを用いた推論にて求める。また、 θ は非負のパラメータである。

また、今回は同様の手順でDirichlet-Neumann (D-N) アルゴリズムとDirichlet-Dirichlet (D-D) アルゴリズムにもPINNを適用した。ただし、D-Nは2つの領域を逐次的に解く必要があるため、部分領域単位の並列性は持たない。

4. 数値実験

(1) 問題設定

物性値である透磁率 μ は真空領域と電線の両方において、 4π とする。また、電流密度 J_z は真空領域では $J_z = 0$ 、電線内では $J_z = 1$ とする。ニューラルネットワークは全結合3層とし、入力は座標 (x, y) 、出力は磁気ベクトルポテンシャル A_z の予測値である。隠れ層のユニット数20、活性化関数は \tanh 、重みの初期値はGlorotらの方法、バイアスの初期値はゼロとした。また、OptimizerにはL-BFGS法を用いた。

領域分割は、図1における円の中心を通る直線を Γ とし、領域 Ω を2等分した。また、 $\theta = 0.1$ とした。

(2) 実験結果

PINNで構築した磁気ベクトルポテンシャル \mathbf{A} の近似器の自動微分により磁束密度 \mathbf{B} の近似器を定義し、推論で求めた磁束密度の大きさ $\|\mathbf{B}\|$ の分布を理論解と比較する。

D-N, N-N, D-Dのアルゴリズムによる $n = 1, 5, 10$ それぞれでの推論結果を図3から5に示す。各図は、電線の中心に原点を置いた場合のある軸上における磁束密度の大きさの分布であり、点線は理論解、 $x > 0$ と $x < 0$ がそれぞれ部分領域 $\Omega^{(1)}$ と $\Omega^{(2)}$ である。図より、繰り返しが進むごとに2つの部分領域の推論結果が理論解に近付いていることが分かる。

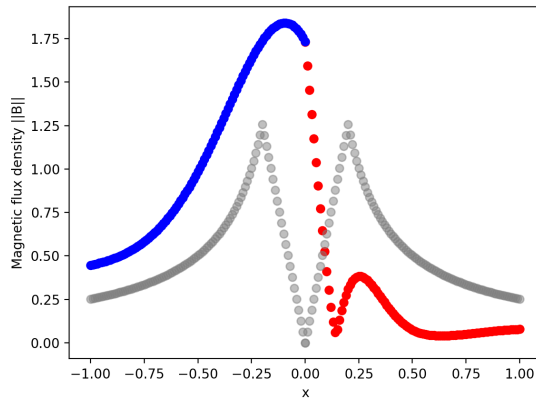
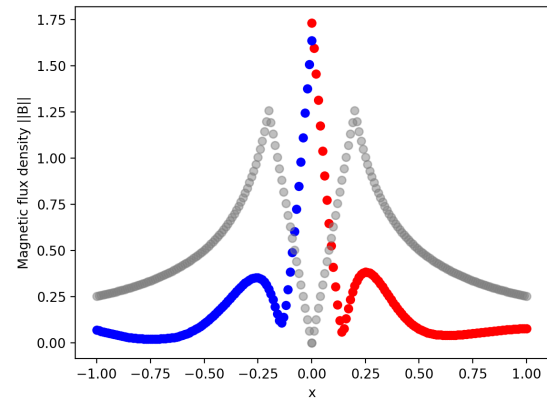
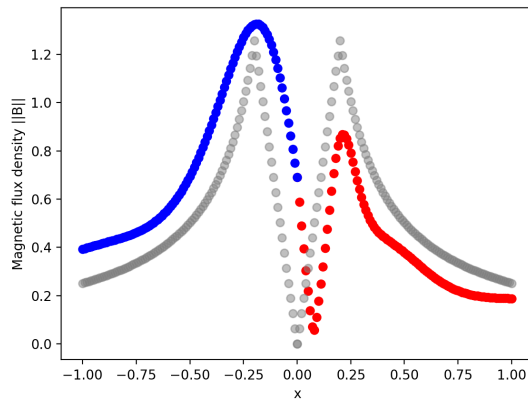
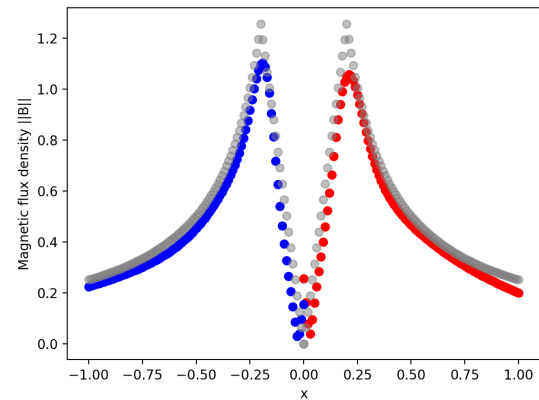
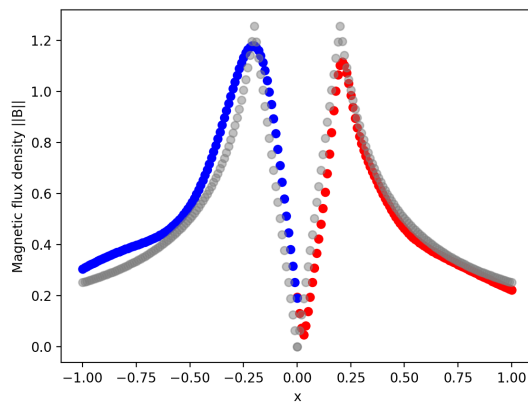
(a) D-N $n = 1$ (a) N-N $n = 1$ (a) D-N $n = 5$ (a) N-N $n = 5$ (a) D-N $n = 10$

図-3 Dirichlet-Neumannアルゴリズムの結果

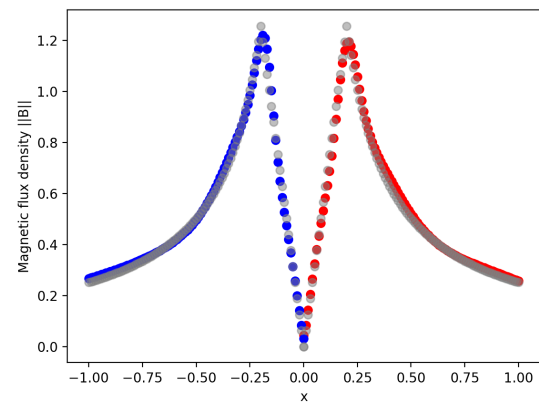
(a) N-N $n = 10$

図-4 Neumann-Neumannアルゴリズムの結果

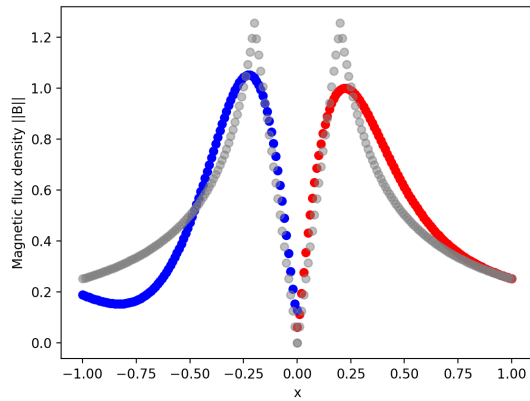
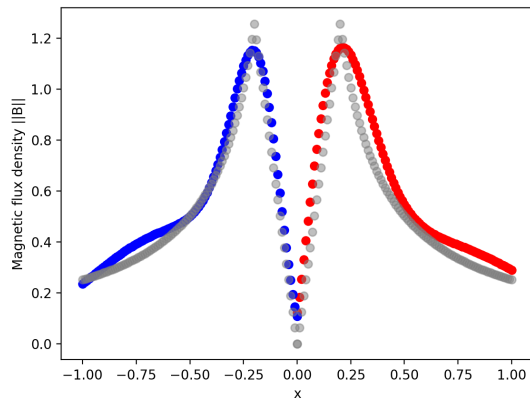
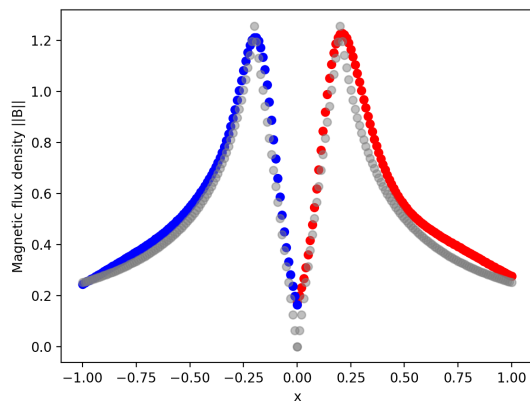
(a) D-D $n = 1$ (a) D-D $n = 5$ (a) D-D $n = 10$

図-5 Dirichlet-Dirichletアルゴリズムの結果

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, *J. Comput. Phys.*, Vol. 378, pp. 686-707, 2019.
- [2] Cuomo, S., Di Cola, V.S., Giampaolo, F., Rozza, G., Raissi, M., and Piccialli, F.: Scientific machine learning through physics-informed neural networks: where we are and what's next, *arXiv*, arXiv:2201.05624v4, 2022.
- [3] 荻野: PINNsによる2次元静磁場問題解析の基礎的検討, 第28回計算工学講演会, 2023.
- [4] Ogino, M.: Large-scale magnetostatic field analysis using physics-informed neural networks, *ICCM2023*, 2023.
- [5] 荻野: 線形静磁場解析におけるPINNsの並列計算, 第36回計算力学講演会, 2023.
- [6] 荻野: 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.
- [7] Backstrom, B. and Backstrom, G.: Simple Fields of Physics by Finite Element Analysis, *GB Publishing*, 2005.
- [8] 菊地文雄: 有限要素法の数理, 培風館, 1994.
- [9] Tosselli, A. and Widlund, O.: Domain Decomposition Methods-Algorithms and Theory, *Springer*, 2005.

5. おわりに

PINNの並列計算に向けて、偏微分方程式で記述された古典的領域分割アルゴリズムに対するPINNの適用を行った。また、2次元静磁場問題を対象に推論結果と理論解の比較を行い、十分な精度の解が得られることを示した。今後は、複数領域問題や3次元問題への適用を進めていく。

謝辞: 本研究はJSPS科研費No. 22H03605の助成を受けたものである。