

# 物理情報に基づくニューラルネットワークの利用可能性

松岡俊文

深田地質研究所

## Applicability of Physics-informed Neural Networks

MATSUOKA Toshifumi

Fukada Geological Institute

要旨：物理情報に基づくニューラルネットワーク手法（PINN: Physics-Informed Neural Networks）は、近年多くの分野において注目を浴びている。データ駆動型で帰納法的な手法である深層学習に対しては、導き出された推定結果に対して、なぜそのような結論に至ったかという点が常に議論を呼んできた。一方多くの科学技術の分野においては、現象を支配する物理法則から出発する演繹的な手法が一般的である。PINNは、深層学習に物理学的な法則を導入したいという考えを実現できる革新的な数値計算法と見なすことができる。学習の過程で物理情報を付加する方法として、偏微分方程式を組み込む手法が取られている。その結果、ニューラルネットワークを用いて、格子を使うこと無く現象の数値シミュレーションが実現できる。本論文においては地球科学分野への応用を視野に、拡散方程式（放物型偏微分方程式）と波動方程式（双曲型偏微分方程式）へのPINNの適用を試みた。

キーワード：深層学習, PINN, 数値シミュレーション, 拡散方程式, 波動方程式

Abstract: Physics-Informed Neural Networks (PINN) have been attracting attention across many fields in recent years. Deep learning methods, which are data-driven and inductive, have always been controversial in terms of why they reached the conclusions they did. On the other hand, in many fields of science and technology, deductive methods that start from the physical laws governing the phenomena are standard. PINN is an innovative numerical method that can realize the idea of introducing physical laws into deep learning methods. One way to add physical information to the learning process is to incorporate partial differential equations in the learning process. As a result, a neural network can be utilized to simulate phenomena numerically without using grids for computation. In this paper, we attempt to apply PINN to the diffusion equation (parabolic partial differential equation) and the wave equation (hyperbolic partial differential equation), with the application to the field of earth science in perspective.

Keywords: deep learning, PINN, numerical simulation, diffusion equation, wave equation

## 1. はじめに

深層学習（Deep Learning）は、人工知能（AI）と呼ばれる技術分野の一つのサブフィールドであり、近年の技術革新の中心となっている。近年の人工知能の発展は、その歴史を通じて数多くの研究のブームと挫折を経験してきた。発展の過程は、

技術的な進歩と共に、理論的な洞察をもたらし、多くの産業や研究分野における革新を引き起こしている。

初期のブームは、1950年代から1970年代にかけて起こり、この時期はAIの概念と基本的なアルゴリズムが生まれた時代である（岡谷, 2022）。この時代、革新的な技術として、パーセプトロン

という概念が提案された (Rosenblatt, 1958). パーセプトロンは、非常に単純なニューラルネットワーク (NN) で分類問題を解いて見せ、その後の深層学習の発展の基盤となった。しかし、パーセプトロンの限界は、データが線形分離可能でなければ正確な分類ができないことにあった。

次の注目すべき時代は、1980年代に知識ベースの AI とエキスパートシステムがブームを迎えた時期である。エキスパートシステムは、特定の分野の専門家の知識をシステム化し、問題解決に活用するものである。一方この時期、誤差逆伝播法 (Back Propagation) と呼ばれる学習アルゴリズムが提案され (Rumelhart, et. al., 1986), ニューラルネットワークの研究が再び活発化した。誤差逆伝播法は、ネットワークの出力と学習に利用する教師データとの差を効率的に最小化するアルゴリズムで、深層学習の成功の鍵となった。

2010年代から現在にかけては、第3の AI ブームと呼ばれ、ディープラーニングとニューラルネットワークのブームが続いている。2012年のアレックスネットによる ImageNet コンペティションでの成功は、ディープラーニングの可能性を世界に示し、以降、多くの技術が急速に発展している。特に計算能力の向上、インターネットの普及など、大量のデータ利用が可能となり、さらに新しいアルゴリズムの提案などにより、深層学習は急速に進化した。特に、GPU と呼ばれる計算機の画像処理ハードウェアの普及により、大規模なニューラルネットワークの訓練が可能となり、深層学習の研究が著しく加速した。

昨今、大規模言語モデル (生成 AI 技術) は世界で非常に注目を浴びている。もはや現在の AI ブームは後戻りできないと考えられる。深層学習は、一言で表現すると、多層のニューラルネットワークを使用して、大量のデータからデータが

持っている特徴を自動的に抽出できる技術と言える。この技術は、画像認識、音声認識、自然言語処理など、さまざまな応用分野で大きな成功を収めている。

無論このような技術は、地球科学分野においても広く適用され成功を収めつつある。本論文においては、最近注目を浴びている物理情報に基づくニューラルネットワーク (PINN (Physics-Informed Neural Networks)) と呼ばれる手法について、地球科学分野への応用の可能性に関して検討を行ったので、その結果について報告する。この手法の考え方や、物理探査法などへの具体的な応用に関しては、物理探査学会の講演会で一部発表済みである (松岡・磯, 2023 ; 松岡ほか, 2023)。

以下の章においては、最初に PINN の概念と考え方に関して簡単に説明する。次に、深層学習の方法を復習し、ニューラルネットワークは万能な近似関数の生成システムととらえてもよいことを示す。また PINN では物理法則として偏微分方程式が利用されるため、入力変数に対する偏微分の計算が必要となる。これに対しては、誤差逆伝播法を利用することによって、近似された関数の微分計算が自由に、しかも簡単にできることを示す。このようなニューラルネットワークが持っている性質を使って、PINN の実現方法と、簡単な問題に対する適用結果を示す。

## 2. 物理情報に基づくニューラルネットワーク

物理情報に基づくニューラルネットワーク (PINN) は、歴史的に見ると最近のディープラーニングの進展と物理学の統合を目指す研究の結果として登場したと考えてよい。ディープラーニング手法が多くの科学技術分野で成功を収める中、物理学との統合は自然な次のステップとして考え

られた。多くの機械学習モデルは、大量のデータを利用する統計学に立脚した手法であり、データが従っている物理学的な法則性を考慮してこなかった。しかし、ニューラルネットワークの構造に、物理学的な知識を取り入れることで、サンプル数が少ない場合や、標本点が存在しないような新しい状況での予測の精度を向上させることが期待される。具体的には、ニューラルネットワークの構造や学習プロセスに物理学的制約や方程式を直接組み込むことである。これにより、モデルはデータだけでなく、物理学的な法則も考慮して学習を進めると考えられる。

PINNの初期の応用は、偏微分方程式に従う物理的現象のモデリングに焦点が当てられていた。この問題は、伝統的な数値シミュレーションの方法によって解かれてきたが、PINNはこれらの問題を深層学習のフレームワーク内で効率的に解く新しいシミュレーション手法を提供したと言える。現在、PINNは多くの物理的問題や工学的応用に使用されている。また、PINNの概念は、生物学や医学、経済学など、物理学以外の分野にも拡張されつつある。PINNの手法は提案されてから日も浅く、まだまだ研究段階であるが、今後、PINNは一層進化し、多様な問題に対する強力な数値解析ツールとしての地位を確立することが期待される。

### 3. 万能近似器としてのニューラルネットワーク

ニューラルネットワークは、多くの研究者や実務家から「万能な関数近似器」として認識されている(鈴木, 2021)。これは、数学的な理論と実際の応用の成功が組み合わさって、最終的にこのような認識に至っている。

1989年、活性化関数が非定数、有界、かつ単

調増加である場合、隠れ層を1つ持つニューラルネットワークは任意の連続関数を、任意の精度で近似できることが数学的に示された(Hornik et al., 1989)。これは、ニューラルネットワークが非常に強力な関数近似能力を持っていることを示す初の数学的な証明であった。通常連続関数の近似は、多項式やフーリエ級数が利用されている(森ほか, 1993)。ニューラルネットワークの場合はこれらの既定関数として活性化関数が対応する。直観的には、非線形な活性化関数の重ね合わせで任意の関数を近似していると考えてよい。また、近年の深層学習の進展により、深いニューラルネットワークは、浅いネットワークよりもはるかに少ないニューロン数で同じ関数を近似できる。これは、ネットワークの深さが、表現力と効率性の向上に寄与することを意味している。

ニューラルネットワークの「万能な関数近似器」としての性質を確かめるために、ここでは簡単な例題を通して、考察を行う。

#### 3.1 簡単な例題

ある観測データが与えられた時、このデータを元に内挿や外挿を行いたいことが多い。これは観測データを一つの関数と見て、その関数近似を行うことである。ここでは関数近似を深層学習のフレームワークの中でとらえて、考えることにする。

ここで取り上げる例題は、ランダムなサンプリング点においてデータが測定されているとする。但し議論を簡単にするために、観測誤差や付加的なノイズは存在しないと仮定する。今、元の関数は1次元のガウス関数とする。すると、任意の有限個の点で観測されたガウス関数が、観測データを基に復元できるかという問題になる。通常このような問題に対しては、多項式展開法(Lagrange補間法)や、3次スプライン補間法、フーリエ級

数を利用した方法などが利用される。しかしながら実はこの問題は、深層学習の枠組みでは、教師付きニューラルネットワークの問題ととらえることができる。

この問題を解くために、深層学習の代表的な手法である教師付きニューラルネットワークを考える。このニューラルネットワークは、与えられた訓練データ（ラベル）を使って、入力と出力（ラベル）の関係を学習し、未知のデータに対しても適切な予測や分類を行うことができる。ここで考える関数近似の問題では、教師データとなるのが観測されたデータである。またニューラルネットワークに対する入力は、観測された座標データで、出力はその点での観測データとする。

観測データが充分存在する場合、このネットワークは学習を繰り返すことで、座標値が与えられれば、その点の観測データを再現することが可能になる。さらに観測点が存在しない任意の場所の座標データを入力とすると、その点でのデータを予測してくれる。これは、このニューラルネットワークが関数近似をしていると考えられ、データの内挿と外挿を行っていると考えてよい。

これを示すために、ニューラルネットワークモデルを用意する。ここでは全結合型のネットワークを考える（岡谷, 2022）。活性化関数としては、ReLU (Rectified Linear Unit) 関数がある名であり、よく知られている。しかしながら ReLU 関数は、負の値の入力に対して、出力をしないという性質を持っており、後ほど検討を加える関数の微分の計算にはあまり適していない。そのため、この例においては双曲線正接関数（ハイパボリックタンジェント関数）を使うことにする。通常 PINN においては双曲線正接関数が活性化関数として利用されることが多い。

教師付きニューラルネットワークに対する学

習過程は、以下のような手順に従って進められる。

- ① 観測された場所の座標値をネットワークに入力として与え、その点での観測データを予測する。
- ② 予測値と観測された正解データ（教師データ）の間の最小二乗誤差を損失関数と定義して、この値を求める。そしてこの損失関数を最小化するように学習を進める。
- ③ ネットワークの重みの値を更新するため、損失関数に対する勾配（誤差の微分）を計算する。この時、誤差逆伝播アルゴリズムを利用し、計算時間の軽減を図る。
- ④ 上記の操作を繰り返し、損失関数がゼロに近づくまで重みとバイアスを更新し続ける。

以上の操作によって学習が終わったニューラルネットワークは、観測データを推定できる関数近似器と見なしてもよい。

### 3.2 関数の微分計算

前述した多くの関数近似法（例えば、3次スプライン補間法）は、近似された関数の微分も計算することができる。これと同様に、深層学習を使った関数近似においても、近似された関数に対して、座標軸に対する微分計算が非常に簡単に行える。具体的には、深層学習で使用されている誤差逆伝播法を、入力変数に対して適用すればよい。

現在深層学習用のライブラリーとして、Keras (Chollet, 2022) や PyTorch (赤石, 2022) などが提供されているが、これらのライブラリーを利用すれば、ニューラルネットワークの入力変数に対する微分計算をいとも簡単に行うことができる。

今回用意した全結合型の深層ニューラルネットワークは、入力が1個（サンプリング点の  $x$  座標）で出力が1個（観測データ）、3層の構造で、各層では24個のノードを有する。結果を以下に

示す。

関数近似の対象として、1次元のガウス関数を取り上げる。ガウス関数に対して、観測データとして、 $(-1, 1)$  区間で31個のランダムな点をサンプリング点とし、この場所での関数値を、観測データとする。サンプル点と観測値を、図1の点で示す。また実線は、上記の手順によって学習が終わった後のニューラルネットワークによって、サンプル点よりも稠密な点において推定された関数値を結んだものである。推定された曲線は、ほぼ完全に元のガウス関数と一致している。さらに図2の点は、観測点の場所において、ニューラルネットワークによって、誤差逆伝播法を使って計算された関数値に対する1次の微分値である。実線は、ガウス関数の理論微分値である。図3は、2次の推定微分値と、理論値の比較を示す。

ここで示した簡単な例は、ニューラルネットワークは観測データが与えられると、そのデータを作り出した元の関数を十分な精度で近似できることがわかった。さらに近似された関数の微分値が、誤差逆伝播法によって簡単に計算できることもわかった。次章以降において、ニューラルネットワークが有するこれらの特性を利用して、拡散方程式(熱伝導方程式)と波動方程式の解法を試みる。

#### 4. PINN を利用した拡散方程式の解法

拡散とは、物質が高濃度の領域から低濃度の領域へ自然に移動する現象である。この自然な移動は、物質の濃度勾配、すなわち濃度の空間的な変化に起因している。この方程式は地球科学の分野においても重要な役割を果たしている。地下における熱伝導現象は、拡散現象で記述される。また地下水流のモデリングにおいても、拡散方程式

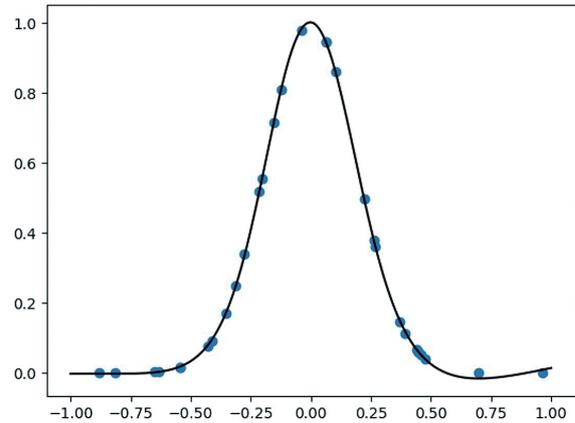


図1 31個のランダムな場所でガウス関数からサンプリングしたデータ(点)と、ニューラルネットワークを用いて推定された関数値(実線)。

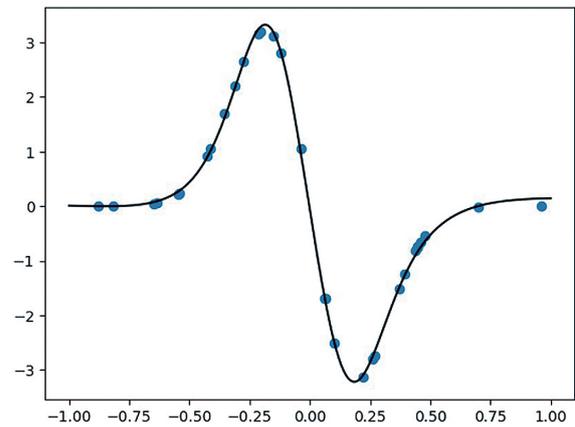


図2 学習後のニューラルネットワークを利用して推定した1回の微分値(点)と、ガウス関数に対する1回微分の理論値(実線)。

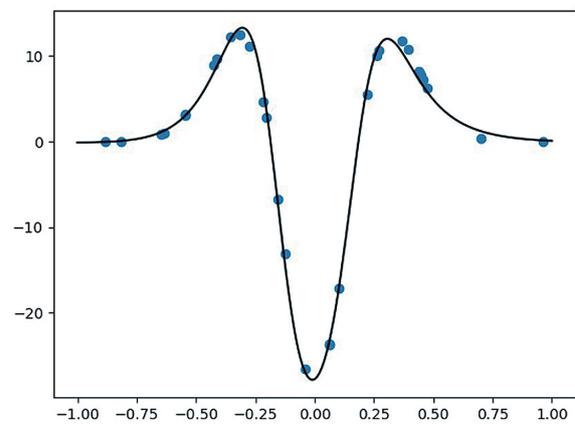


図3 学習後のニューラルネットワークを利用して推定した2回の微分値(点)と、ガウス関数に対する2回微分の理論値(実線)。

は中心的な役割を果たしている。一方、電磁探査法の一つである MT 法 (Magnetotelluric 法) も拡散方程式が支配方程式になっている。このように拡散現象は、自然界や工学分野において広く観察され、その理解と記述は多くの科学的、技術的課題において中心的な役割を果たしている。これから議論する拡散方程式は、この拡散現象を数学的にモデル化したものであり、物質の濃度が時間と空間にわたってどのように変化するかを記述する方程式である。

#### 4.1 熱伝導方程式

ここでは簡単にするため、拡散方程式の代表的なものとして、1次元熱伝導方程式を例として PINN の適用を考える。熱伝導の方程式は、物体内部の熱エネルギーの伝播を記述する物理法則である。この方程式は、熱伝導、対流、および放射といった熱伝達のメカニズムを通じてエネルギーがどのように移動するかをモデル化する。1次元の熱伝導の方程式は、時間に関して1階、空間に関して2階の偏微分方程式で表される。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

この方程式は、温度  $T$  (K または  $^{\circ}\text{C}$ ) が、時間  $t$  (sec) と1次元空間座標  $x$  (m) に対してどのように変化するかを記述する偏微分方程式である。ここで  $\alpha$  は熱拡散係数 ( $\text{m}^2/\text{sec}$ ) を表す。

この熱拡散係数は、物質の熱伝導率、密度、および比熱容量に依存し、次のように定義される。

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (2)$$

ここで、 $k$  は熱伝導率 ( $\text{W/mK}$ ) であり、 $\rho$  は密度 ( $\text{kg/m}^3$ )、 $c_p$  は比熱容量 ( $\text{J/kgK}$ ) である。

偏微分方程式を解くには、初期条件と境界条件が必要になる。初期条件は、時間に依存する偏微

分方程式の解を一意に定めるため、これは、時間  $t=0$  での関数の値に関する情報である。境界条件は、対象としている空間領域の境界での関数の挙動に関する情報を提供する。今回は1次元問題なので、 $x=0$  と  $x=L$  の2つの境界があるため、2つの境界条件を考える必要がある。また境界条件には以下の3つのタイプが知られている。

##### ① ディリクレ境界条件

関数が境界上で特定の値を取ることを指定する。熱移動の場合には温度が境界でどのような値を取るかを定めることができる。

##### ② ノイマン境界条件

関数の空間微分 (通常は法線方向の微分) が境界上で特定の値を取ることを指定する。熱移動の場合には、この境界を通して、熱流の注入量や排出量を指定していることを意味する。

##### ③ ロビン境界条件

ディリクレ境界条件とノイマン境界条件が合わさった形で、関数と空間微分の線形結合が境界上で特定の値を取ることを指定する。

#### 4.2 利用するニューラルネットワーク

我々の目的は、与えられた初期条件と境界条件の下で、この熱伝導方程式を解くことである。解くということは、具体的には時間が進むにしたがって、1次元物質内での温度分布がどうなるかを予測することであり、これはシミュレーションを行っていることと同じである。これをニューラルネットワークを使ってどのように実現するかが、課題である。一般的に今までのシミュレーションでは格子を設定して、差分法や有限要素法が用いられてきた。これから検討するニューラルネットワークを利用したシミュレーションは、格子を設定する必要は無い。このため空間、時間軸にお

いて格子を設定することによって生じてくる精度に関する議論が必要無くなる。

さて、この課題を3章で説明したニューラルネットワークが持っている特性である微分計算が簡単にできることと、内挿・外挿を行うことができることを利用して実現していくことにする。今、1次元問題のため、シミュレーションを行う空間を図4のように設定する。時刻  $t=0$  において、初期条件が与えられ、さらに  $x=0$ 、と  $x=L$  において境界条件が与えられるとする。すると解くべき課題は、この空間と時間の場合  $(x, t)$  において温度  $T$  の値を推定することになる。この時の条件は、 $(x, t)$  における温度  $T$  は熱伝導方程式(式1)を満足していることである。

これを実現できるニューラルネットワークを考えることにする。つまり、時刻  $t$  と、座標値  $x$  を入力して、出力がその点での温度  $T$  となるようなニューラルネットワークを考える。これは教師付き学習の文脈で考えると、 $t=0$  においては境界条件との最小二乗誤差がゼロになるように損失関数を設定し、2つの境界では境界条件を満足

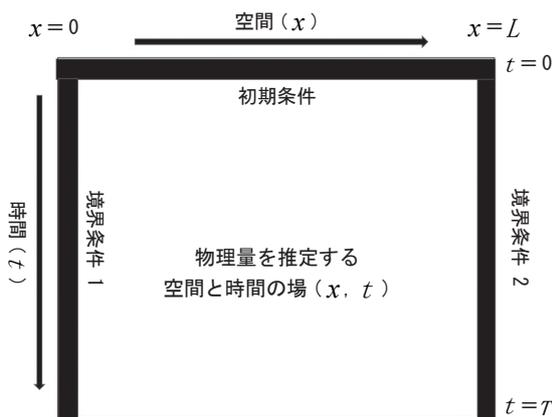


図4 偏微分方程式を解いて推定する空間と時間の場合。初期条件と境界条件を指定し、偏微分方程式をニューラルネットワークに組み込むことで、対象となる物理量の空間と時間分布が推定可能となる。これは今までのシミュレーションに対応しているが、偏微分方程式の条件が満たされた内挿計算と見なしてよく、格子の概念は必要としない。

するように損失関数を定義する。ディリクレ境界条件の時は、ニューラルネットワークの出力  $T$  が与えた関数との最小二乗誤差がゼロになるようにし、ノイマン条件の時には、ニューラルネットワークの微分計算を使って、同様に与えた条件との差が最小になるように、損失関数を定義する。さらにそれ以外の  $(x, t)$  に対しては、 $T$  に対して、時間  $t$  の1回微分、空間  $x$  に対しては2回微分を計算し、(式1)がゼロになるように損失関数を定義する。

以上で損失関数が定義できたので、ニューラルネットワークの構造を決めることができる。この場合もネットワーク構造は全結合型とし、活性化関数は双曲線正接関数を用いた。入力は  $(x, t)$  の2つの変数で、出力はこの点に対応する温度  $T$  である。

後は通常の教師付き学習と同様の方法で、学習を行えば、最終的にこのニューラルネットワークは、与えた初期条件と境界条件を満足し、さらに任意の時間  $t$  と座標  $x$  に対して熱伝導方程式を満足している温度  $T$  の推定値を出力できるはずである。その結果について以下で見ていく。

### 4.3 熱伝導方程式の例1

最初に鉄の棒の中央で温度が高く、両端は氷水に接しているような状況を考え、この鉄の棒の温度分布が時間の関数としてどのように変化するか、PINNの手法で予測してみる。この場合の境界条件は、左右の端点共にディリクレ境界条件で表現できる。

$$T(0, t) = T(L, t) = 0.0 \quad (3)$$

初期条件として、熱は鉄の棒の中心に頂点を持つ正弦関数状に分布しているとする。すると温度分布は勾配を持つため、熱は高温部わから、低温部分へと拡散移動して行く。しかし左右の端点で温

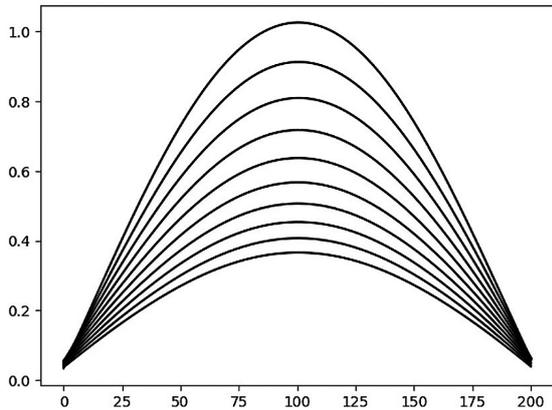


図5 初期条件として正弦関数状に温度を持った鉄の棒の両端を氷水につけた時の、媒質内の温度の推移を示す。ピークの位置は変化しないが、時間が経過するにしたがって、全体的に温度が低下しているのがわかる。

度  $T$  は常に  $0^{\circ}\text{C}$  となっているため、熱は鉄棒外に流れ出すことになる。つまり時間がたつにしたがって、鉄の棒の温度分布は減少していき、最後は全ての場所で  $0^{\circ}\text{C}$  になることが予測される。この場合の PINN の結果を図 5 に示す。

時間が経過するにしたがい、温度分布は減少していく結果となっており、予想通りの結果が得られた。

#### 4.4 熱伝導方程式の例 2

次の例は、鉄の棒の左端に熱源があり常に熱は供給されるが、右端は熱の出入りが無い状況を考えることにする。まず初期条件として鉄の棒の温度分布は、左端から指数関数的に減少しているとする。次に、左端は常に熱の供給があり、温度は  $1^{\circ}\text{C}$  する。これはディリクレ境界条件で次のように与えることができる。

$$T(0, t) = 1.0 \quad (4)$$

また右端は、熱の出入りが無いという要件は、ノイマン境界条件で

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

のように書くことができる。これでニューラル

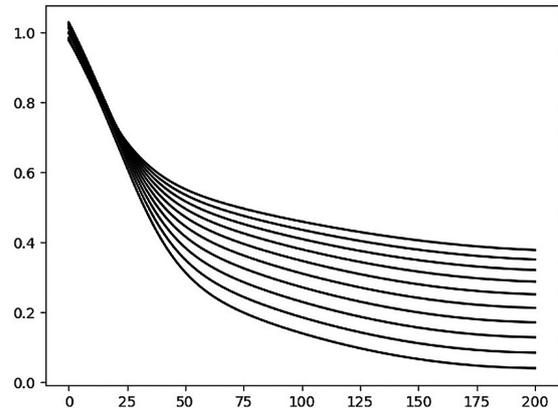


図6 左端は熱源に接しているディリクレ境界条件として、右端は熱の出入りが無いノイマン境界条件として解いた場合。初期条件として指数関数の温度分布とした。時間経過にしたがって、全体的に温度分布の上昇が見られる。

ネットワークの構築に必要となる、①初期条件、②境界条件、③熱伝導方程式が明示的に表現できたので、損失関数を定義することができる。

さてこの場合、時間が経過するにしたがって、どのような温度分布を示すことが予測できるであろうか。左端は熱源に接しており常に熱が供給されてくる。一方右端では熱の出入りが無いノイマン境界条件なので、時間が経過するにしたがって熱は鉄の棒に徐々にたまって、最終的には棒全体が  $T = 1.0$  になる。この場合の PINN の結果を図 6 に示す。この場合も PINN が推定した鉄の棒の温度分布は、予測したものと同様の振る舞いを示した。

#### 5. PINN を利用した波動方程式の解法

4章で検討した拡散方程式と同様の取り扱いを、波動方程式においても進めることができる。ここでは1次元媒質内を伝播する音響波動場に対して PINN 手法の適用を検討する。

1次元の波動方程式は時間に対して2階、空間に関しても2階の偏微分方程式であり、以下のように書くことができる。ここで  $c$  はこの波動の伝

播速度とする.

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (6)$$

この場合も拡散方程式と同様に、初期条件と境界条件が必要となる。これは図4と同様である。ニューラルネットワークの構築も拡散方程式とほとんど同様に進めることができる。

### 5.1 波動方程式の例

ここでは例としてコイル状のスプリングを考えることにする。このコイルの端に変位を加えると、コイルスプリングを伝播する波動を観測することができる。この現象を模倣するシミュレーションをPINNを利用して実現する。

このコイルは摩擦の無いテーブルに置かれているとすると、初期条件としては、コイルのすべての場所において変位はゼロである。次に、このコイルの左端の時刻  $t_0$  に、ガウス関数状の変位を与える。これはディリクレ境界条件として与えることができる。与えられた変位はコイルを伝播し、右端に到達する。今、右端は自由端にしておく。これは波動による変位はコイルの外部には伝播されないので、ノイマン境界条件で書くことができる。

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (7)$$

これで初期条件と境界条件、さらに現象が従うべき偏微分方程式の形が与えられたので、対応するニューラルネットワークを構成することが可能になった。この方法によってシミュレーションされた結果を図7と図8に示す。

図7は波動現象の全体を表現した図である。横軸は時間軸 ( $t$  軸)、縦軸は空間軸 ( $x$  軸) に対応し、カラーは変位量に対応している。コイルスプリングはほとんどの場所と時間において変位量

はゼロであるが、波動が伝播する時刻に対応して、座標  $x=0$  から  $x=1$  に対して約 1.0 の変位量が伝搬している。そして  $x=1$  に設定された自由境界において、変位は反射して、伝播方向を逆転させて  $x=0$  の方向に伝搬していることがわかる。また  $x=1$  では、自由境界のために、変位量は2倍になっていることもわかる。図8はこれを時間を追って図示している。波動現象は媒質の左端から右端に向かって伝播するが、図8は横軸に座標

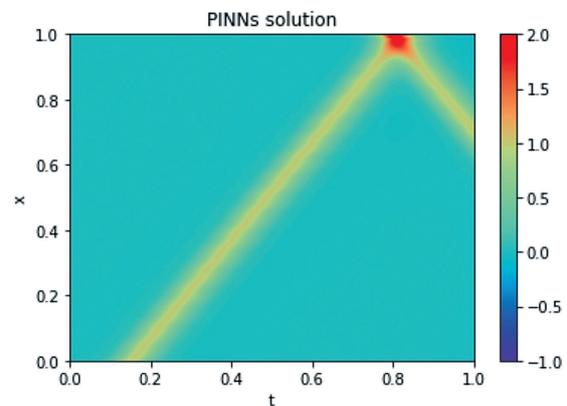


図7 PINNの手法を用いて推定された1次元媒質内での波動伝播の様子。媒質の  $x=0$  において加えられた衝撃は、波動を作り出し、 $x=1$  に向かって伝播する。 $x=1$  では自由端の境界のため、波動は反射して、逆方向に向かって伝播する。その際  $x=1$  では振幅値は2倍となる。

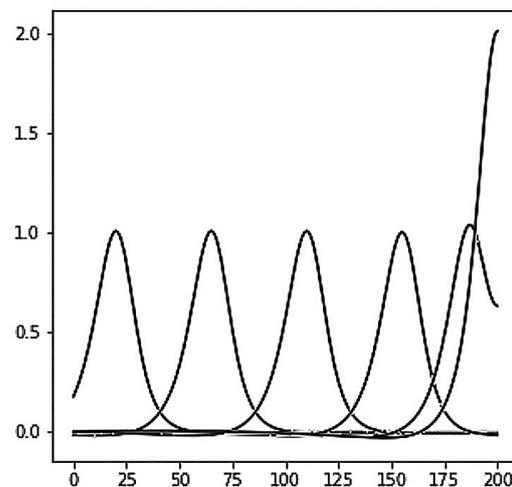


図8 媒質を伝播する波動の時間推移を図示する。左端で作られた波動が右端まで伝播し、自由境界のために振幅値が約2倍まで増加することがわかる。

軸を取り、ある時間間隔で媒質の変位分布を重ね書きしている。ガウス状の波形は時間が経過するにしたがって、その場所を左から右に移動していることがわかる。

図7と図8は、波動方程式に対して差分法などを利用して計算されたシミュレーション結果と同一の結果を示していることがわかる。我々はPINNが波動方程式に対しても解の変動を予測することができることを示した。

## 6. まとめ

本論文で論じた物理情報に基づくニューラルネットワーク (PINN) の手法も、現在の AI ブームの中で提案された手法である。本論文ではその基本的な考え方と、簡単な例を示した。基本となる考えは、ニューラルネットワークが有している万能近似器という性質と、微分演算が一瞬にして行える点と言える。著者は今後この手法がより洗練されて、多くのデータ処理技術分野で、将来は日常的に利用されると確信している。

ニューラルネットワークの持つ革新性は、データ処理分野においても革命を起こしつつある。現在 PINN に関する論文は指数関数的に増大している。今後はこの手法をより具体的な応用問題に適用していきたい。

## 文献

赤石雅典 (2022) : 最短コースでわかる Python プログラミングとデータ分析. 日経 BP, 408p.  
 Chollet, F. (2022) : Python によるディープラーニング. 巢籠悠輔訳, マイナビ出版, 496p.  
 Hornik, K., Stinchcombe, M. and White, H. (1989): Multilayer feedforward networks are universal

approximators. *Neural Networks*, **2**(5), 359–366.

松岡俊文・磯 真一郎 (2023) : 物理情報に基づくニューラルネットワーク (PINN) の物理探査への応用可能性について. 物理探査学会学術講演会講演論文集, **148**, 116–119.

松岡俊文・東 宏幸・小鹿浩太・野崎京三 (2023) : 物理情報に基づくニューラルネットワーク (PINN) による重力データの解析. 物理探査学会学術講演会講演論文集, **149**, 122–123.

森 正武・室田一雄・杉原正顕 (1993) : 数値計算の基礎, 岩波講座 応用数学 [方法 1]. 岩波書店, 134p.

Nair, V. and Hinton, G. E. (2010): Rectified linear units improve restricted boltzmann machines. *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML'10)*, 807–814.

岡谷貴之 (2022) : 深層学習 改訂第2版. 講談社, 384p.

Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G. E. (2019): Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, **378**, 686–707.

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

Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., and Williams, R. J. (1986): Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, **323**, 533–536.

鈴木大慈 (2021) : 深層学習の統計理論. 日本統計学会誌, **50**(2), 229–256.