# ニュートンの法則に基づく質点運動の軌道推定と逆問題解法へのPINNsの応用

松岡俊文
深田地質研究所

# Application of Physics-Informed Neural Networks to Particle Motion: Trajectory Estimation and Inverse Problem Solving Using Newton's Laws

MATSUOKA Toshifumi
Fukada Geological Institute

要旨：本論文では，PINNs（Physics-Informed Neural Networks）を用いたニュートンの法則に基づく質点運動の軌道推定と逆問題解法について検討した．PINNsは，物理法則を組み込んだニューラルネットワークであり，物理モデルとデータ駆動型アプローチを融合させた手法として知られている．ここでは，重力下での質点の投げ上げ問題を用いて，PINNsの汎化能力と予測精度を評価した．45度で訓練されたPINNsモデルの予測精度は他の角度では低いことが判明した為，転移学習を導入して汎化能力の向上を試みた．転移学習により，わずかな学習回数によって別の角度での投げ上げにも適応できることが示された．またPINNsは，観測データを用いた逆問題解法にも応用可能であり，未知の投げ上げ角度を軌道データから推定できることが確認された．PINNsは，物理シミュレーションのみならず，逆問題解法にも有効であることが明らかになった．
キーワード：深層学習，PINNs，数値シミュレーション，ニュートンの法則，逆問題の解法

Abstract: This paper examines the trajectory estimation and the inverse problem solving of mass point motion based on Newton's laws using PINNs (Physics-Informed Neural Networks). PINNs are a neural network that incorporates the laws of physics and is known as a method that combines a physical model with a data-driven approach. In this study, the generalization ability and prediction accuracy of PINNs were evaluated using a mass point tossing problem under gravity. Since it was found that the prediction accuracy of the model trained at a 45-degree angle was low at other angles, transfer learning was introduced to improve the generalization ability. It was shown that transfer learning can adapt to tossing at different angles with a small number of learning rounds. It was also confirmed that PINNs can be applied to inverse problem solving using observed data, and that unknown tossing angles can be estimated from trajectory data. It was revealed that PINNs is effective not only for physical simulations but also for inverse problem solving.
Keywords: deep learning, PINNs, numerical simulation, Newton's laws, inverse problem

## 1. はじめに

物理情報に基づくニューラルネットワーク（Physics-Informed Neural Networks, PINNs）は，2019年にRaissi他によって提案された手法で，ニューラルネットワークに物理法則を組み込むことで，データ駆動型アプローチと物理法則を融合させた画期的な数値解析手法と言える．従来，常

微分方程式（Ordinary Differential Equation, ODE）や偏微分方程式（Partial Differential Equation, PDE）の解法においては，座標系の離散化を行い，代数方程式に変換して数値的に近似解を求めるのが基本的な方法論である．特に偏微分方程式の解法においては，差分法や有限要素法が中心的な役割を果たしてきた（矢川他，1998）．一方，PINNsは深層学習の手法を利用し，物理法則をネットワークに組み込み，各種微分方程式の数値解を導き出すことができる．明示的な離散化の操作が不必要な為，PINNsの適用例として，バーガース方程式における流速の急変する現象が，精度よく計算された数値解によってよく示されている（Savović et al., 2023）．

本論文では，重力場における質点の投げ上げ問題を題材にして，PINNs手法の概要を述べた後，この手法の適用範囲とその汎化能力（generalization ability）について検討する（岡谷，2022）．汎化能力とは，ある環境で訓練された機械学習システムが，新たな環境に対しても性能を落とすことなく動作する能力のことである．PINNsの場合においては，解こうとする問題の条件が少々変化しても，正しい解を予測する能力と言える．たとえばこの例題においては，投げ上げ角度が多少変化しても，正しい質点の軌道を予測できるかという能力に対応する．

最初に，ニュートンの運動法則を用いてこの問題を定式化し，PINNsを適用して解を求める．PINNsがどの程度の予測能力を持つか，特に学習範囲を超えた場合における予測の精度や，投げ上げ角度を変えた際のモデルの汎化能力を評価する．次に，汎化能力を補う為の手法として，転移学習（transfer learning）（岡谷，2022）の活用について検討する．転移学習は，事前に学習されたモデルの知識を新しい問題に適用することで，少ないデータや計算リソースによって高い精度を実現する手法であり，PINNsの汎化能力を強化する有望な手段である．PINNsの汎化能力が高ければ，学習させたPINNsの汎用的な利用が可能となり，将来的に微分方程式で表現される現象のシミュレーターとして利用できる可能性を秘めている．

さらに工学的な視点から見ると，観測データを利用することで，PINNsは逆問題に対する解法手段としても利用できる．PINNsを利用して逆問題を解くという考え方は，今までの逆問題に対する認識を根本から変革する手法とも言える．本研究では質点を投げ上げる角度について，軌道から推定するという非常に単純な逆問題を例に，その基本的な考え方とアルゴリズムに関して検討を与える．

本研究ではまた，単純に微分方程式の解法手段ではなく，その名前の示す通り，現象の中に含まれている物理的な法則性が既知であれば，その法則をPINNsの内部に容易に取り込めることも示したい．この問題は，PINNsの物理的妥当性を考慮する上で重要な視点であり，従来の数値解析手法と比較した際のPINNsの強みと限界を明らかにする上でも不可欠である．このように，PINNsの汎化能力と転移学習の適用可能性を評価することで，従来の手法では難しいとされてきた問題への適用可能性や，新たな視点から逆問題を考えるなど，数値解析手法としての有用性を検討し，PINNsの発展方向を提案することを本論文の目的とする．

## 2. 質点の投げ上げ問題

### 2.1　ニュートンの運動法則の適用

ここでPINNsの例題として取り上げるのは，

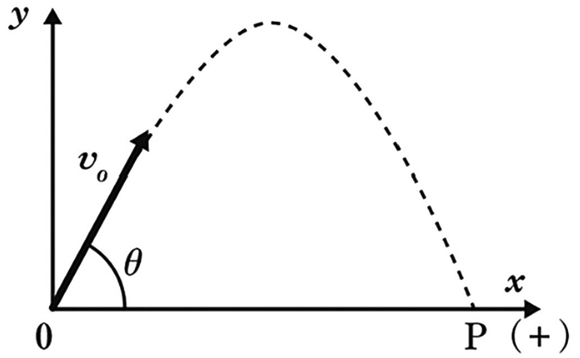


図 1　鉛直方向に重力が作用している場で，質点を水平から 45 度の方向に投げ上げたときに質点が描く軌道.

図 1 に示すような，重力が作用している場で投げ上げられた質点が，どのような軌道を描くかという問題である．無論この問題は物理学を少しでも学んだ人であれば，最初に遭遇する例題であり学問的な価値は無い．しかしながら PINNs の手法を深く知る上では，問題が簡単であるがゆえに，非常によい例題と言える.

この問題は，物理学における基本法則であるニュートンの運動方程式を用いて定式化される．その為，ニュートンの法則をまず簡単に復習しておく．アイザック・ニュートンによって構築された力学の体系は，以下の 3 つの法則から構成されている.

①第一法則(慣性の法則):外力が働かない限り，静止している物体は静止し続け，運動している物体は等速直線運動を続ける.

②第二法則（運動の法則）: 物体の加速度は，物体に働く力に比例し，物体の質量に反比例する．数式で表すと : $F = ma$（$F$: 力，$m$: 質量，$a$ : 加速度）と表現される.

③第三法則（作用・反作用の法則）: 物体 A が物体 B に力を及ぼすとき，物体 B は物体 A に対して大きさが等しく方向が反対の力を及ぼす.

アイザック･ニュートンはこの法則によって，「運動」という概念と「力」という概念を初めて明確に結び付けた．すなわち，第一法則において，物体が運動を開始したり運動状態が変化したりするには，力（外力）が必要であることを述べた．第二法則では，物体の運動が変化する際に力がどのように作用するかを，方程式の形にまとめた．第三法則は力に関する性質を述べた法則であり，今回の質点の投げ上げ問題には，直接的には関係してこない.

いま座標系において，重力が作用する方向を $y$ 軸の負の方向とし，それに直交する軸を $x$ 軸とする．この質点に作用している力は，重力（$F_{gravity}$）のみと考える．すると，前述のニュートンの第二法則に基づいて，力が作用している質点の運動は次の式で記述される.

$$F_{gravity} = m\frac{d^2r(t)}{dt^2} \tag{1}$$

ここで，$m$ は質点の質量，$r$ は時刻 $t$ における質点の位置ベクトルとする．重力の作用は $y$ 軸方向のみにであり，この力は重力加速度 $g$ を使って以下のように記述される.

$$F_{gravity} = -mgy \tag{2}$$

ここで $y$ は鉛直方向を表す単位ベクトルである．この 2 つの式より，最終的に質点の $y$ 軸方向の運動は，以下のように常微分方程式として定式化することができる.

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} = -g \tag{3}$$

ここで，$y(t)$ は質点の鉛直方向の位置を示す関数である.

一方 $x$ 軸方向の運動に関しては外力が作用していない為，ニュートンの第一法則より，静止している物体は静止し続け，運動している物体は等速直線運動を続ける．我々の例題においては，初め

に質点が投げ上げられたときに与えられた運動によって，$x$ 軸方向の運動は決定される．

### 2.2　初期条件と境界条件

微分方程式の解法において重要になるのは，初期条件と境界条件である．PINNs は微分方程式の解法として強力なツールであるが，これらの条件を正しくニューラルネットワークの中に取り込む必要がある．この例題では，初期条件と境界条件は，質点が投射された瞬間の速度と位置で与えられる．たとえば質点が，$x = 0$，$y = 0$ から，時刻 $t = 0$ において，初速度 $v_0$ で，水平面から角度 $\theta$ の方向に投げ上げられた場合，初期条件は次のように表される．

$$\frac{dy(t)}{dt}\Big|_{t=0} = v_0 \sin(\theta)$$
$$\frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=0} = v_0 \cos(\theta) \quad (4)$$

また境界条件としては，この質点が時刻 $t = 0$ においてこの質点が存在していた場所が

$$x(0) = 0, \qquad y(0) = 0 \quad (5)$$

であるという条件が必要になる．以上をまとめると，PINNs を利用してシミュレーションを行うときには，物理現象を支配している方程式（3），さらに初期条件（4）と境界条件（5）を，正しく PINNs のモデルの中に組み込む必要が有る．

しかしながら，これだけでは PINNs は正しい結果を予測できない．その理由は $x$ 軸方向の運動に関しての方程式が与えられていない為である．具体的には，質点が水平方向（$x$ 軸方向）において等速直線運動を行うという条件を PINNs に組み込まなければ，PINNs モデルはニュートンの法則を満足しない誤った解を導く．この条件は次の式で記述される．

$$\frac{dx(t)}{dt} = v_0 \cos(\theta) = Constants \quad (6)$$

式（6）は，$x$ 軸方向に力が作用しない場合，質点がそのまま等速で運動を続けることを意味している条件式である．これにより，PINNs は $x$ 軸方向の運動を正確にシミュレーションし，$y$ 軸方向の運動（重力による影響）と適切に組み合わせることで，質点の正しい軌道を予測することができる．

PINNs の適用を考えたとき，問題によっては物理情報として運動方程式ではなく，より根源的な法則であるエネルギー保存則を考える場合がしばしばある（Van Gastelen, 2024）．無論この問題においてもエネルギー保存則は成立しており，エネルギー保存則を利用すれば，質点の軌道が求まるのではないかと考えられる．しかしながらこの考えは上手くいかない．その理由は，質点は運動エネルギーと重力から受けるポテンシャルエネルギーの，2 つのエネルギーを持っており，その和が保存されるエネルギーの総量であるからだ．その為時刻 $t$ において，この 2 つのエネルギーを，どのように配分するかで質点の軌道は決定される．つまり，このエネルギー配分の方法を指定しない限り，エネルギー保存則のみに基づいた PINNs では，質点の軌道を決定することはできない．

## 3. PINNs の実装

### 3.1　深層ニューラルネットワーク

最も一般的なニューラルネットワークは全結合型と呼ばれるネットワークである．ここでも全結合型のネットワークを利用することにする．模式的には，図 2 のような構造である．ネットワークへの入力は時刻 $t$ のみであり，出力はこの時刻に対応する質点の位置座標（$x$，$y$）の 2 つの数値

となる．このネットワークが正しい軌道を予測するには，ネットワークを構成している重み係数を学習によって最適化させる必要がある．

ニューラルネットワークを学習させる一般的な方法は，教師データと呼ばれるデータを用いて，ネットワークの出力と教師データとの差が最小になるように，ネットワークの重み係数やバイアスの値を修正していく．しかしながら，この例では教師データは存在しない．この PINNs で与えられているのは，ある時刻 $t$ に対応する質点の座標の値（$x$, $y$）が満足しなければならない条件である．これらは前章で議論してきた，$y$ 座標に関する条件式（3），初期条件（4），境界条件（5），そして $x$ 座標に関する条件式（6）である．これらを以下のように変形する．

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} + g = 0$$

$$\frac{dx(t)}{dt} - v_0\cos(\theta) = 0$$

$$\frac{dy(t)}{dt}\Big|_{t=0} - v_0\sin(\theta) = 0$$

$$\frac{dx(t)}{dt}\Big|_{t=0} - v_0\cos(\theta) = 0$$

$$x(0) = 0$$

$$y(0) = 0$$

最初の 2 つの式は，質点の運動に対して，ニュートンの法則に基づいて導いた式であり，3 番目と 4 番目は，$t = 0$ のときの条件式，つまりこの問題の初期条件を与えている．最後の 2 つの式は，境界条件を与える式である．

このように PINNs で利用する条件式とは，上記の左辺がすべてゼロになる式である．その為，左辺の二乗を損失関数として定義すれば，通常のニューラルネットワークにおける二乗誤差を最小とする最適化問題に帰着できる．また学習をミニバッチ処理で行う場合は，その平均値を損失関数と定義すればよい．そしてこの値を使い，勾配法を利用してニューラルネットワークの重み係数の最適化を進めることになる．その結果，十分学習が進んだ場合には，入力した時刻 $t$ に対して，質点の軌道の位置（$x$, $y$）をこのネットワークが出力してくれる．

### 3.2　ニューラルネットワークにおける微分演算

条件式（3），（4），（6）を見てわかるように，PINNs で利用する条件式には，ネットワークの出力値である $x(t)$，$y(t)$ に対して，入力値である $t$ による微分値が必要になるが，実はニューラルネットワークではこれらの微分値がいとも簡単に計算できる．ニューラルネットワークの学習においては，重み係数の勾配（偏微分値）を求めるのに，誤差逆伝播法と呼ばれるアルゴリズムが利用されている．この手法を利用することで，これらの微分値は簡単に求めることができる（Baydin et al., 2018）．PINNs の利用が広く普及しつつある理由も，これらの微分計算のプログラムを簡単にコーディングできることが大きく影響している．具体的な PINNs のネットワーク構造は図 2 に示すように，出力に対して $t$ の 2 階までの微分値を求めることで実現できる．今回利用したネットワークは全結合型の 5 層で，各層は 64 個のノードから構成されており，活性化関数は双

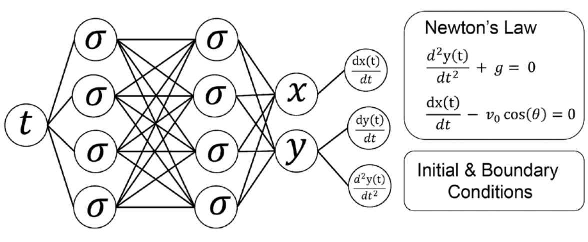


図 2　PINNs のネットワーク構造．入力は時刻 $t$ であり，出力はそのときの質点の座標値（$x$，$y$）とする．この座標値に対してニュートンの法則を適用し，二乗誤差を損失関数として，ネットワークを学習させる．

曲線正接関数を用いた．最適化には Adam 法を採用した（岡谷，2022）．

## 4. 数値実験とその結果

### 4.1 質点の軌道計算

今回の PINNs では 2 つの重要な入力パラメータを事前に決めておく必要がある．まず質点の投げ上げ角度である．今回は水平面から 45 度の角度で投げ上げた場合を考える．次に，解析を実施する時間を決める必要がある．今回は質点を投げ上げたときから，再び地表に戻ってくるまでの所要時間を解析する対象とした．すなわち，$t = 0$ から，$t = 1.442$ の区間とした．

学習の手順は，この時間を 100 に分割し，これらの時刻を PINNs の入力値とする．そして，ニューラルネットワークの出力値である $x$，$y$ の値に対して，前述した微分計算を行い，損失関数を計算する．そして得られた損失関数を基に，誤差逆伝播法によりネットワークの重み係数を Adam 法を使って最適化した．これを 1 回のエポックとし，合計 10000 回繰り返した．

図 3 は，学習回数（エポック回数）によって損失関数がどのように変化したのかを示すグラフである．2000 回後には損失関数は十分小さな値となっていることがわかる．それ以降，損失関数は大きな振動を見せているが，これは勾配法のときの学習率が大きかったと考えられる．学習率に関しては，エポック回数に応じて学習率を減少させていく手法も知られており，その手法の採用が必要であったかも知れない．学習後にこの PINNs が予測した軌道と，解析解の軌道を図 4 に示す．この図からわかるように，学習後のモデルは，正確な軌道をシミュレーションできていることがわかる．

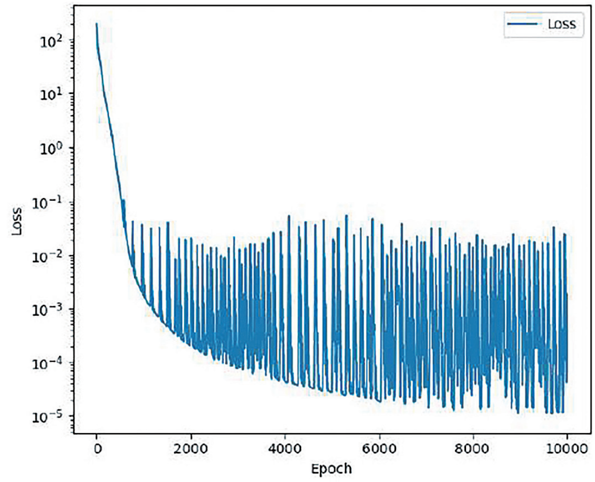


図 3　損失関数の推移．縦軸は対数表記であり，誤差は急速に減衰していることがわかる．

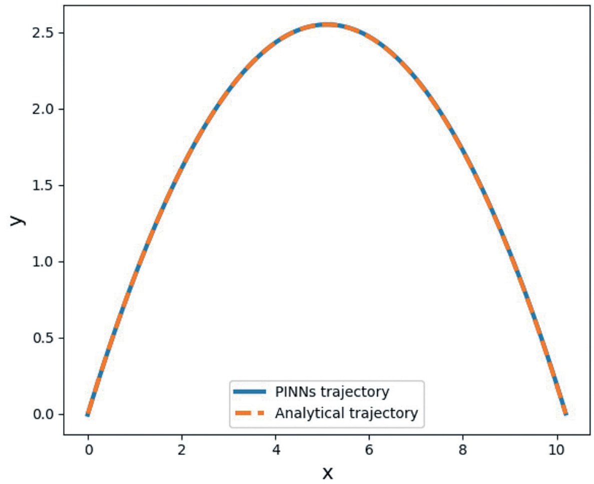


図 4　今回試みた PINNs によって計算された質点の軌道と，解析解を重ね合わせて表示したもの．両者はほぼ完全に重なっており，PINNs は正しい軌道を計算していることがわかる．

何故 PINNs はこのようなことができるのであろうか．ニューラルネットワークは万能な関数近似器として認識されており，普遍近似定理（universal approximation theorem）が成立している．この定理が述べているのは，十分な数のニューロンを持つ単一の隠れ層を持つネットワークは，任意の連続関数を任意の精度で近似できることである（Hornik et al., 1989）．質点の投げ上げ問題で近似される関数とは，角度 $\theta$ と観測区間（0,

$t_0$）が与えられたとき，時刻 $t$ における質点の位置 $x$，$y$ を計算する関数である．高校の物理の教科書では，この関数の形を具体的に時刻 $t$ の 2 次方程式で求める演習を行ったわけである．一方，この PINNs はこの関数をどのように近似したのであろうか．図 4 を見る限り，学習した範囲においては，PINNs はほぼ完全に近似できていると言える．ではこの PINNs はこの関数の形を内部に保持しているのであろうか．それを知るには学習していない領域に対する PINNs の予測値を観察すればよい．

### 4.2　PINNs の汎化能力

観測データが与えられたとき，このデータに対して多項式を使って線形回帰する方法が広く知られている．これは最小二乗法を使って多項式の各係数を推定する統計学的な方法として広く利用されてきた．もしも PINNs が関数形を初等関数の形で内部に持つことができているのであれば，学習していない任意の $t$ に対しても，正しい軌道の位置を予測できるはずである．そこで以下のようなテストを行った．

投げ上げた質点が再び地表に戻ってくるまでの時間を $t_0$ とし，PINNs により，時刻 $t = 0$ から $t_0$ について軌道の予測を行った．このとき，学習を行った時刻を $t = 0$ から $t_0/3$ と 3 分の 1 として，どの範囲まで正確に軌道を予測できるのか，検討した．結果を図 5 に示す．

図 5 の（a）は横軸を距離に取り，PINNs によって予測された軌道と解析解の軌道をグラフで示した．結果は放物線を描く軌道のほぼ頂点までは，予測と解析解の軌道は等しいように見えるが，その後の軌道は大きく外れている．（b）は横軸を時間に取り，$t = t_0$ までの $y$ 座標の変化について，

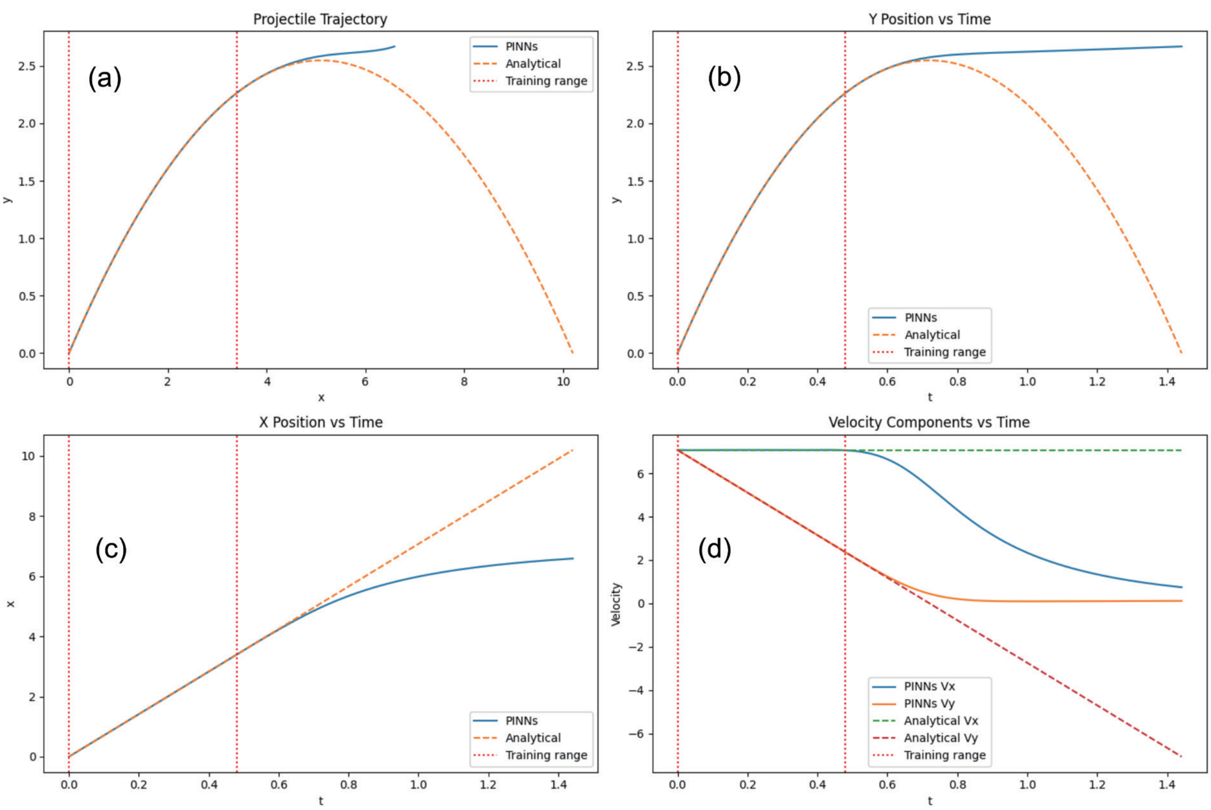


図 5　PINNs の学習区間を 3 分の 1 とし，学習されて PINNs を使って，時刻 $t = t_0$ まで軌道を予測した結果．

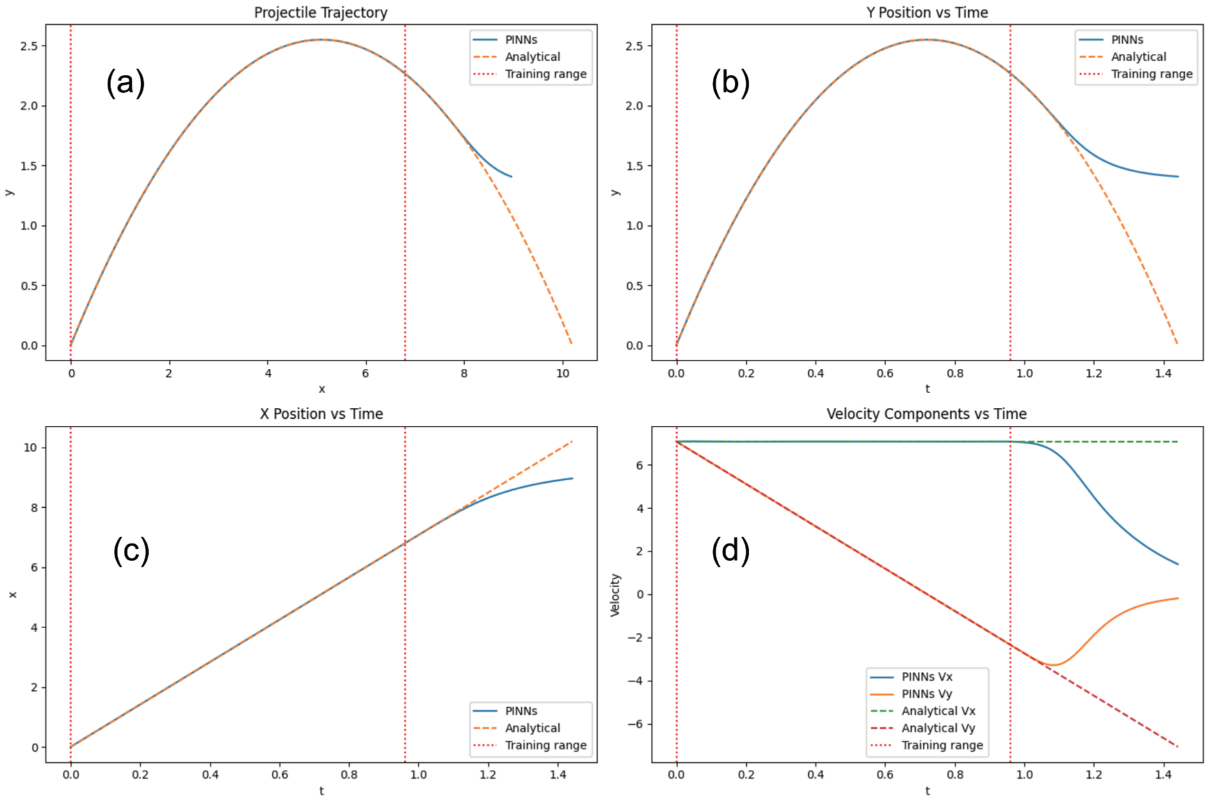


図 6　PINNs の学習区間を 3 分の 2 とした場合の結果.

解析解と PINNs の出力値をグラフ化している．興味深いのは，PINNs の出力における $y$ 座標の値は放物線の頂点を過ぎると，ほとんど変化していない．さらに（c）は，$x$ の座標値を描いたグラフであるが，（b）同様に一定時間経過後は，その変化が緩やかである．また今回は，$x, y$ 方向の速度変化を（d）にプロットした．質点は，$x$ 軸方向には等速直線運動を行っている為，$x$ 方向の速度は一定であるが，学習の区間を過ぎると，$x$ 軸方向の速度が低下し始めるのが認識できる．同様に $y$ 軸方向では，学習区間が終わってもしばらくの間は一定に減少するが，その後は等速度運動をしているように見える．

（a）の軌道の結果によれば，学習区間を外れても PINNs の汎化能力によって，しばらくは正しい軌跡が得られているように見える．しかしながら，時刻に対する質点の座標を考えるならば，これは正しい判断とは言えない．（d）に示されているように，$x$ 軸方向の速度は，学習区間を外れた途端，正しい値を示していない．つまり，時刻と質点の座標の関係を考えると，PINNs は正しく予測をしていない．これから導かれる結論は，今回の PINNs のモデルは，学習時間外の質点の位置を推定（この場合は外挿）することに関する汎化能力は，ほとんどないと考えてよい．図 6 に，学習の区間を $t_0$ の 3 分の 2 にした例を示す．

次に投げ上げ角度に関する汎化能力に対して検討しよう．PINNs を学習させるときは，投げ上げ角度を与える必要が有った．たとえば 45 度の角度で投げ上げた場合を学習した PINNs は，それ以外の角度に対してどれくらいの許容範囲を持っているのか，つまり汎化能力を持っているのか検討する．

結果を図 7 に示す．これは投げ上げ角度を 45

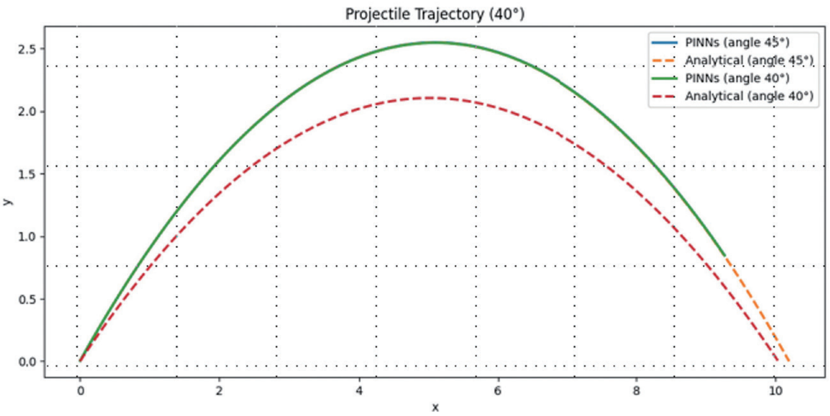


**図 7　投げ上げ角度を 45 度として学習した PINNs が，投げ上げ角度を 40 度とした場合の予測値を計算した結果．理論解と比較すればわかるように，両者は大きく隔たっている．**

度として学習させた PINNs に対して，40 度の場合の質点の軌道を描いたグラフである．PINNs が計算した軌道は 45 度の場合と全く同じであり，40 度の場合とは大きくずれている．

これらの 2 つの場合の検討からわかることは，この問題の PINNs による予測問題を考える際には，初期条件や境界条件さらに学習する区間を事前に決定する必要があった．ここで得られた結論は，これらの条件から外れた場合，この PINNs は何ら学習を行っておらず，そのような状況に対応する能力（汎化能力）を，PINNs は有していないことがわかる．

## 5．転移学習を利用した汎化能力の向上

汎化能力を向上させる手法の一つとして，転移学習が知られている．転移学習は，既に学習済みのモデルから得られた知識を，新たなタスクに適用する方法論である．一般的には，このアプローチはラベル付きデータが少ない場合や，新しいタスクが元のタスクと類似している場合に有効になることが知られている．元のタスクで獲得された特徴や表現を再利用することで，新しいタスクに必要なデータや計算資源を大幅に削減することができる．

転移学習は，自然言語処理（NLP）やコンピュータビジョンなどの分野で成功を収めてきたが，PINNs のような科学技術の分野においても，その有用性が徐々に明らかになりつつある．PINNs の文脈では，全く別の微分方程式を解く為に必要な計算負荷は大きい為，類似した微分方程式に対して，学習済みの PINNs に転移学習を用いることで計算効率を向上させることが可能になると考えられる．

転移学習の手法には，いくつかのアプローチがあるが，PINNs に対する適用としては以下のようなアプローチが知られている（Pan and Yan, 2010）．

1. 特徴抽出型の転移学習：既存のモデルで学習された特徴抽出層をそのまま使用し，最後の数層のみ新しいタスクに適応させる方法．
2. ファインチューニング：既存のモデルの全層に対して新しいタスクに適応するように学習を再開し，元のタスクから新しいタスクへの移行がスムーズである場合は，この手法が効果的である．
3. ドメイン適応：元のタスクと新しいタスクのデータ分布が異なる場合に適用される手法で，PINNs においては，物理パラメータの変化に対応する為の手法として利用できる．

本研究では，特徴抽出型の転移学習を利用することにした．具体的には，質点の投げ上げ角度を 45 度にして学習させた PINNs に対して，最後の 1 層の重み係数を修正できる転移学習を行った．

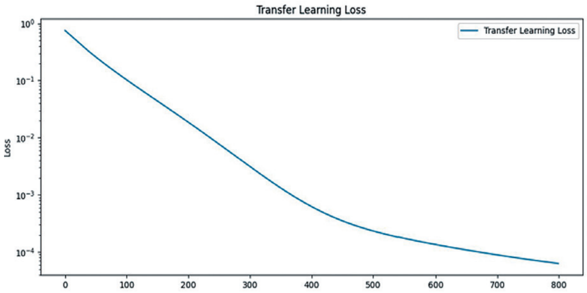


図 8　投げ上げ角度 45 度で学習した PINNs モデルに対して，最後の層のみ重み係数の修正が可能な状態に設定し，投げ上げ角度を 40 度にして 800 回のエポックで学習を行ったときの，損失関数の推移．損失関数は十分小さな値に収束していることがわかる．

転移学習では，投げ上げ角度を 40 度として合計で 800 回のエポックで学習を実施した．そのときの損失関数の推移を図 8 に示す．

転移学習させた結果を図 9 に示す．また 200 回のエポックで学習を実施した転移学習の結果を図 10 に示す．

転移学習は深層学習において広く利用されている手法であり，多くの手法が提案されつつある（松井・熊谷，2024）．今回の例では，図 8 に示した損失関数の推移をみると，初期の学習回数に比べて 5%以下の学習回数で，新しい状態に対応できることが示唆された．これは PINNs の広い利用を考える際には重要な点である．

## 6. PINNs を用いた逆解析の解法

PINNs を用いた逆問題解析において，ニューラルネットワークのパラメータだけでなく，物理系のパラメータ（この場合，投げ上げの角度 $\theta$）も同時に最適化することができる．これは物理パラメータがこのシステムの構造を決めている場合には，逆問題の解法を行っていることに対応する．この点が，現在 PINNs が広い分野において適用されようとしている大変大きな理由である．

今まで我々は，PINNs は物理法則を解いてシミュレーションを行うものと考えてきた．一方，この物理現象に対する観測データが取得されていたとする．PINNs から見るとデータを利用できることになり，境界条件が増えたことに対応すると考えてよい．通常の境界条件は問題を規定する為の基本的な条件と考えられているが，この場合も同様に，観測データがこの問題を規定するこ

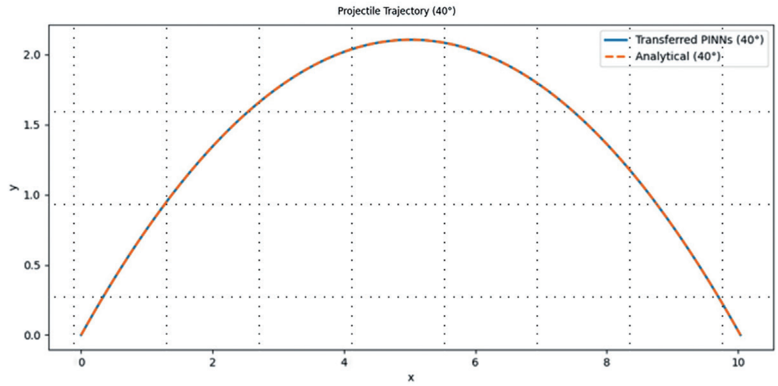


図 9　転移学習後の PINNs が計算した質点の軌道．解析解と一致していることがわかる．

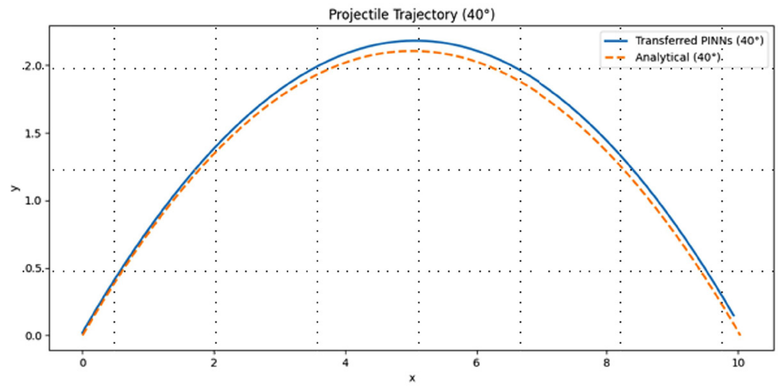


図 10　投げ上げ角度 40 度に対して 200 回学習した後の PINNs が計算した質点の軌道．解析解の軌道との間には，乖離があることがわかる．

とになる．この例題だと，投げ上げの角度が未知の質点の軌道が観測されていたとする．このデータを PINNs の中に組み込むことを考える．$\theta$ は未知であるが，任意の $t$ に対して $x$ がわかっている問題となる．これを境界条件とし，加える．もしも $t$ がある有限の期間でしか観測されていないときは，そのデータを入力すればよい．そして PINNs の最適化を行う際に，同時に投げ上げ角度も未知変数をして最適化できれば，たとえ部分的な $t$ の観測区間であっても，角度の推定は可能となる．

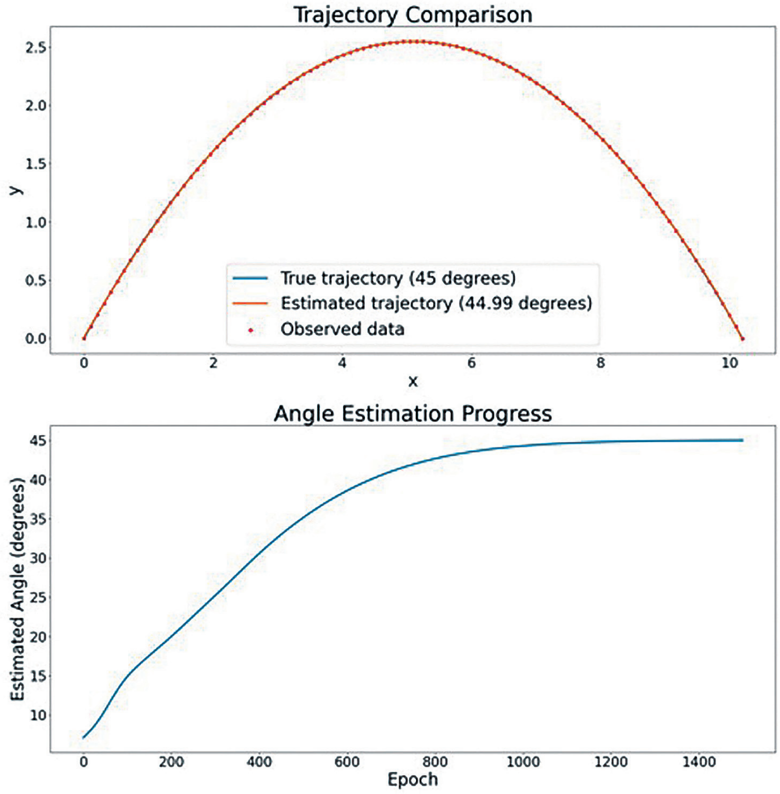


図 11　PINNs を利用した逆問題の解法．上図は，質点の解析解と PINNs でも予測した軌跡，および観測データを重ね書きした図．下図は，投げ上げ角度の学習回数による推移を示す．初めは約 7 度程度であった角度はその後，学習が増えるにつれて 45 度に漸近していくことがわかる．

このアルゴリズムを具体的に PyTorch を使って説明する（赤石，2021）．まず，最適化したい変数（この場合，角度 $\theta$）を PyTorch のテンソルとして定義し，勾配計算を可能にする．

```
theta = torch.tensor([np.random.uniform(0, np.pi / 2)], requires_grad=True)
```

ここで `requires_grad=True` を指定することで，この変数に対する勾配計算が可能になる．theta は 0 から 90 度の間でランダムに選ばれ，この値が初期値に対応する．次に，PyTorch の最適化アルゴリズム（例：Adam）が，最適化すべきパラメータのリストを受け取るが，ここで，ネットワークのパラメータとネットワーク外の変数（$\theta$）を両方ともに最適化対象として指定する．

```
optimizer =
torch.optim.Adam(list(model.parameters()) + [theta], lr=1e-3)
```

つまり，ネットワークの重みなどのパラメータと角度を結合して単一のリストとし，最適化関数に渡す手順になる．

損失関数内では，この角度パラメータ `theta` 変数を直接自由に利用できる．たとえば

```
def improved_loss_fn(model, t, g, v0, theta, observed_data):
    # ...（前略）
    vx0 = v0 * torch.cos(theta)
    vy0 = v0 * torch.sin(theta)
    # ...（後略）
```

という形でコード化すればよい．また観測データに関し得は境界条件として損失関数内に書き込む．その後は，通常の PyTorch の最適化のプロセスを利用することで，最適化関数は，ネットワー

クのパラメータと，角度に対して同時に勾配を計算し，両方を更新する．

結果を図 11 に示す．角度の最適化は，この場合初期値は約 7 度程度であったが，学習回数が増すにしたがって真値である 45 度に漸近していく様子がわかる．このアルゴリズムを採用することで，ネットワークパラメータと物理パラメータ（$\theta$）を同時に最適化できることがわかった．特に勾配ベースの最適化手法を物理パラメータにも適用できることが示され，今後逆問題の解法を考える上で重要であることが示唆される．すなわち，PINNs の強力な特徴の一つとして，観測データが取得されている場合には，従来の手法では困難だった複雑な逆問題を効率的に解くことの可能性が示唆された．

## 7. まとめ

本研究では，PINNs を用いた質点運動の軌道推定および逆問題解法の有効性を示したが，PINNs の適用には幾つかの課題が残されている．まず，汎化能力のさらなる向上が求められる．現状の PINNs は学習範囲外の条件に対する予測精度がほぼ無いことが確認されたが，この問題は今後, 転移学習の高度化や, より効率的なネットワークの設計によって改善が期待される．

PINNs を用いた逆問題解法においては，より複雑な物理システムに対する適用や，観測データの不確実性に対する耐性が課題として挙げられる．将来的には，これらの点を改善し，汎用的な物理シミュレーションツールとしての PINNs の利用可能性を拡大することが重要である．さらに，計算コストの低減や大規模データへの対応といった課題も存在し，これらに対する解決策として，分散計算やハードウェアの最適化も考慮されるべきである．

今後の研究の方向性として，これらの技術的課題を克服し，PINNs をより広範な物理現象のモデリングや解析に適用することで，物理シミュレーションの新しい可能性を探ることが期待される．

## 文献

赤石雅典（2021）：最短コースでわかる PyTorch & 深層学習プログラミング．日経 BP, 584p.

Baydin, A. G., Pearlmutter, B. A., Radul, A. A. and Siskind, J. M. (2018): Automatic differentiation in machine learning: a survey. *Journal of Machine Learning Research*, **18**, 1−43.

Hornik, K., Stinchcombe, M. and White, H. (1989): Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural networks*, **2**(5), 359−366.

松井孝太・熊谷 亘（2024）：転移学習．講談社, 416p.

岡谷貴之（2022）:深層学習 改訂第 2 版．講談社, 384p.

Pan, S. J. and Yang, Q. (2009): A Survey on Transfer Learning. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, **22**(10), 1345−1359.

Savović, S., Ivanović, M. and Min, R. (2023): A Comparative Study of the Explicit Finite Difference Method and Physics-Informed Neural Networks for Solving the Burgers' Equation. *Axioms*, **12**, 982.

Van Gastelen, T., Edeling, W. and Sanderse, B. (2024): Energy-conserving neural network for turbulence closure modeling. *Journal of Computational Physics*, **508**, 113003.

矢川元基・奥田洋司・中林 靖（1998）：有限要素法流れの解析．朝倉書店，118p.