

半教師あり Physics-Informed Neural Network を用いた地下水流モデリング
Abstract Format for the DPRI Annual Meeting (for presentation in Japanese)

○永里 赳義・田中 賢治
○Takeyoshi NAGASATO, Kenji TANAKA

In this study, we evaluated the applicability of Physics-informed Graph Convolutional Neural Networks (PI-GCNs) for groundwater flow modeling. The PI-GCNs was trained to approximate the solutions of groundwater flow equations using a semi-supervised learning approach. A limited number of simulation results obtained from numerical simulation were used as labeled data for the training process. The estimation accuracy of the PI-GCN was evaluated by comparing its results with analytical solutions. The findings demonstrated that the PI-GCN has the potential to predict the solutions of groundwater flow equations accurately. Moreover, the PI-GCN outperformed Feedforward Neural Network-based PINN in terms of prediction accuracy. These results show the high applicability of PI-GCNs for groundwater flow modeling.

1. はじめに

深層学習は解を高精度かつ高速に推論できるため、数値モデルのサロゲートモデルとして様々な分野で適用性の検証が行われている。なかでも Physics-informed Neural Networks (PINNs) は少ない教師データで高精度な解を予測可能であり注目を集めている。地下水流モデリングにおいても、地下水流方程式を対象とした PINNs の適用可能性が検討されてきた [1]。先行研究の多くは Feedforward Neural Network (FNN) を基礎に PINNs を構築している。ここで、多くの深層学習手法は PINNs に拡張可能である。深層学習手法のなかでも、教師あり学習による Graph Convolutional Neural Networks (GCNs) は数値シミュレーションのサロゲートモデルとして高い適用可能性を示している。したがって、GCNs を PINNs に拡張することで、FNN を基礎とした PINNs と比べ高精度に解を推定できる可能性がある（以降、前者を PI-FNN、後者を PI-GCNs と略記する）。したがって、本研究では PI-GCNs の地下水流モデリングにおける適用可能性を評価する。

2. 手法

(1) Graph Convolutional Neural Networks

GCNs とはグラフ構造データの学習に用いられる深層学習の一種である。GCN はグラフ畳み込みを行うことでグラフのノードの特徴量を集約する。ここに、グラフ畳み込みは下式で表される。

$$\mathbf{H}^{(l+1)} = \sigma \left(\hat{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{H}^{(l)} \boldsymbol{\Theta}^{(l)} \right) \quad (1)$$

$$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{I}_N + \mathbf{A} \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{H}^{l+1}$ は $(l+1)$ 層における隠れ状態ベクトル、 σ は活性化関数、 $\hat{\mathbf{D}}$ は次数行列、 $\mathbf{A}$ は隣接行列、 $\mathbf{I}_N$ は N 次元単位ベクトル、 $\boldsymbol{\Theta}$ は GCN の学習によって更新される重みパラメータである。

(2) Physics-informed Neural Networks

PINNs は損失関数に基礎方程式・初期条件・境界条件に関する情報を組み込んだニューラルネットワークである。被圧条件下での地下水流方程式を対象とした PINNs の損失 $L(\theta)$ は下式で表される。

$$L(\theta) = \lambda_{Data} L_{Data}(\theta) + \lambda_{PDE} L_{PDE}(\theta) + \sum_{i=0}^2 \lambda_i L_i(\theta) \quad (3)$$

$$L_{data}(\theta) = \frac{1}{N_{Data}} \sum_{i=1}^{N_{Data}} [h_i(\theta) - h_{Data,i}]^2 \quad (4)$$

$$L_{PDE}(\theta) = \frac{1}{N_{PDE}} \sum_{i=1}^{N_{PDE}} \left[\nabla \cdot (\mathbf{K}_i \nabla h_i(\theta)) - \mu \frac{\partial h_i(\theta)}{\partial t} - f_i \right]^2 \quad (5)$$

$$L_0(\theta) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} [h_i(\theta) - g_0]^2 \quad (6)$$

$$L_1(\theta) = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} [h_i(\theta) - g_1]^2 \quad (7)$$

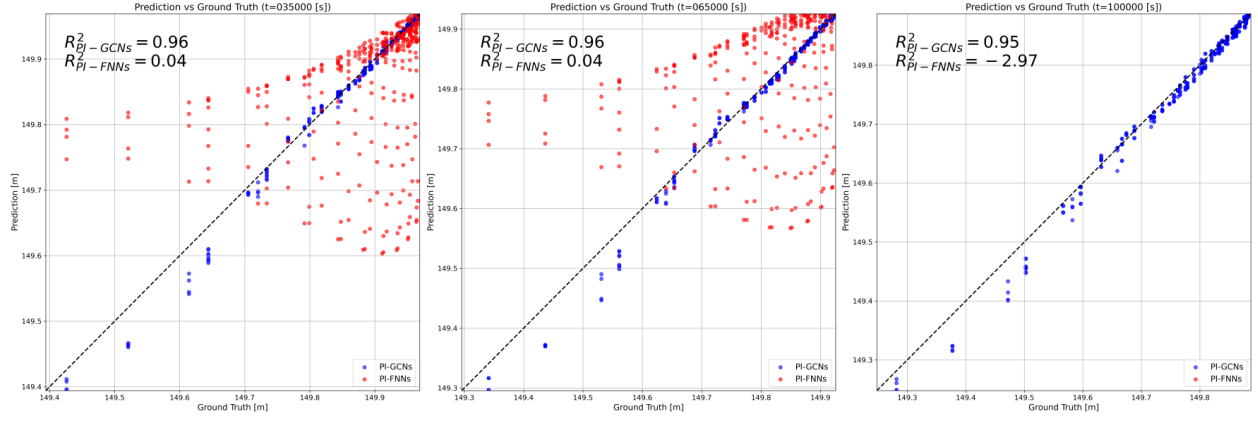


図 1 PINNs と解析解との 1:1 プロット

$$L_2(\theta) = \frac{1}{N_2} \sum_{i=1}^{N_2} [\mathbf{K}_i \nabla h_i(\theta) \cdot \mathbf{n} - g_2]^2 \quad (8)$$

ここで、 $h(\theta)$ は深層学習モデルの出力、 $\mathbf{K}$, μ はそれぞれ、透水係数、比貯留係数である。また、 g_0, g_1, g_2, f_i はそれぞれ、初期条件、定水頭境界、定流量境界条件の値、およびソース項である。 $L_{data}(\theta), L_{PDE}(\theta), L_0(\theta), L_1(\theta), L_2(\theta)$ はそれぞれ、教師データ、偏微分方程式、初期条件、定水頭境界、定流量境界の損失であり、 $\lambda_{Data}, \lambda_{PDE}, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ はそれぞれの損失に対応する重みを示す。

3. 結果・考察

PINNs の検証は Theis の解が得られる条件下で行った。本研究では PINNs を半教師あり学習で実装する。したがって、事前に平面 2 次元数値シミュレーション実行し、これを PINNs の教師データとして扱った。ここで、対象とする時間、空間の範囲はそれぞれ、 $[0, 100000] \text{ s}$, $[-500, 500] \times [-500, 500] \text{ m}$ とした。PINNs の推定精度評価には、学習データに含まれない空間ポイントで Theis の解析解と推定値を比較することで行った (図略)。

ネットワークの構造、ハイパーパラメータの設定について、PI-FNN の層数、および各層におけるニューロン数は先行研究を参考にそれぞれ 4 層、40 に設定した。また、PI-GCNs のグラフ畳み込み層は 4 層とした。また、 $\lambda_{Data}, \lambda_{PDE}, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ は PINNs の学習過程において動的に重みづけを行った。

PINNs の推定結果と解析解との比較を図 1 に示す。図 1 から PI-FNN の推定精度は極めて低く、学習に失敗したことが示唆された。一方で PI-

GCNs は高い精度で解の推定に成功した。したがって、PI-GCNs は PI-FNN と比較して高い精度で解を推定できる可能性が示された。PI-FNN による推定精度が著しく低かった主な原因として Failure mode が挙げられる。Failure mode を防ぐ方策として動的リサンプリングの適用や本手法の Causal PINNs への拡張が挙げられる[2]。また、これらの方策は PI-GCN においても推定精度向上につながる可能性がある。

4. まとめ

本研究では GCNs における損失関数に地下水流方程式、初期条件、境界条件の情報を組み込むことで、PI-GCN を構築した。半教師あり学習に用いる教師データには数値モデルによるシミュレーション結果を用いた。結果から、PI-GCN は Feed Forward Neural Network を基礎とした PINNs と比較して、高い精度で解を推定できることが分かった。本研究の結果から地下水流モデリングにおける PI-GCN の高い適用可能性が示された。

謝辞：本研究は JSPS 科研費 JP23KJ1327 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] Zhang, X., Zhu, Y., Wang, J., Ju, L., Qian, Y., Ye, M., & Yang, J. GW-PINN: A deep learning algorithm for solving groundwater flow equations. *Advances in Water Resources*, 165, 104243, 2022.
- [2] Daw, A., Bu, J., Wang, S., Perdikaris, P., & Karpatne, A. Mitigating propagation failures in physics-informed neural networks using retain-resample-release (r3) sampling. *arXiv preprint arXiv:2207.02338*, 2022.