

# Physics-Informed Neural Networks による 2次元円柱後流の Reynolds 数の逆解析

中村幸太郎<sup>i</sup>, 山出吉伸<sup>ii</sup>, 水原慎一<sup>iii</sup>, 小泉拓<sup>iv</sup>

## Physics-Informed Neural Networks for Inverse Analysis of the Reynolds Number in 2-dimensional Wakes Behind Cylinders

Kotaro NAKAMURA, Yoshinobu YAMADE, Shinichi MIZUHARA,  
Hiroshi KOIZUMI

Physics-Informed Neural Networks (以下 PINNs) を用いて、2次元非定常・非圧縮の円柱後流の Reynolds 数  $Re$  を逆解析した。PINNs の学習データには OpenFOAM で計算した  $Re = 100$  ( $Re := \rho UD/\mu$ ,  $\rho$  は流体密度,  $U$  は主流速度,  $D$  は円柱直径,  $\mu$  は流体粘度) の速度場を用いた。PINNs の損失関数を評価する点 (以下, サンプルング点) を空間的にランダムに選ぶ場合よりも, 固有直交分解 (Proper Orthogonal Decomposition, 以下 POD) によって速度場から抽出した POD モードの振幅が極大・極小となる点 (以下, 特徴点) から選ぶ場合のほうが高い精度で  $Re$  を推定できることを示した。渦度場の空間モードから検出した特徴点で逆解析すると,  $Re$  の推定精度がより高いことを示した。

(キーワード): OpenFOAM, Inverse Analysis, Physics-Informed Neural Networks, Proper Orthogonal Decomposition

### 1 はじめに

数値シミュレーションの信頼性向上や系の最適制御を実現するために, パラメータをデータから正確に推定することが重要な課題として位置づけられている<sup>1,2)</sup>。例えば熱・流体力学<sup>3)</sup>, 生物・化学<sup>4)</sup>などの分野では, 統計的手法や機械学習モデルを用いたアプローチが図られている。

機械学習モデルのうち PINNs<sup>5)</sup>は, 支配方程式をニューラルネットワーク (以下, NN) の損失関数に組み込むモデルであり, 機械学習モデルを構築する際に物理法則を考慮することができる。流体の運動であれば, 質量・運動量保存則の残差をゼロに近づけるようにペナルティを与えることで, データ (流れ場の速度, 渦度および圧力など) と支配方程式を同時に満足するように学習される<sup>5)</sup>。有限体積法や有限要素法

による数値シミュレーションでは, 空間をメッシュ分割して方程式を離散化するが, PINNs ではこのようなメッシュ分割が不要であり, 誤差逆伝播法による学習に必要な損失関数の勾配を NN の自動微分<sup>6)</sup>を用いることで評価できる。

PINNs の学習における収束性や予測精度は, ネットワーク構造<sup>7)</sup>や最適化手法<sup>8,9)</sup>によって敏感に変化する。PINNs の学習時に関数の局所的な性質や高周波成分を効果的に捉える必要があり, 例えばフーリエ特徴量<sup>10)</sup>および領域分割<sup>11)</sup>が改善手法として提案された。Hou ら<sup>12)</sup>はサンプルング点の配置や数が収束性や予測精度に及ぼす影響を報告しており, 一様乱数や等間隔サンプルングでは解の急峻な変化が見られる特徴的な領域を捉えることが難しいことから, 動的サンプルング手法を新たに提案し, 予測精度が向上することを示した。また, 出口ら<sup>13)</sup>は円柱後流

<sup>i</sup> サイエンスソリューション部 社会インフラチーム

<sup>ii</sup> サイエンスソリューション部 社会インフラチーム

<sup>iii</sup> 情報通信研究部 センサ・メディア情報技術チーム

<sup>iv</sup> 情報通信研究部 センサ・メディア情報技術チーム

シニアコンサルタント 博士 (工学)

次長 博士 (工学)

シニアコンサルタント

課長

において 2 つのパラメータを逆解析しており、空間的にランダムではなく速度場の POD モードに基づいてサンプリング点を選ぶことでパラメータの推定精度が高くなることを示した。

本技報では、PINNs の逆解析の精度を向上させることを目的とする。上記の改善手法<sup>9-11)</sup>については PINNs に組み込まないものとして、サンプリング点の選び方のみに着目する。サンプリング点を空間的にランダムに選ぶ場合と、POD<sup>14)</sup>によって速度場と渦度場から抽出した POD モードの特徴点から選ぶ場合とで  $Re$  の推定精度を比較する。実際、最適センサ配置<sup>15)</sup>や離散的経験補間法<sup>16)</sup>の分野では、この特徴に基づいてセンサ配置や補間点を選定すると、推定や再構成の精度が向上することが示されており、対象とする系の主要なダイナミクスを効率的に捉えることができることと述べられている。

PINNs の適用対象は無数に考えられるが、PINNs<sup>5)</sup>、実験<sup>17)</sup>、数値シミュレーション<sup>18)</sup>および POD での解析<sup>19)</sup>に関する先行研究と同様に、 $Re = 100$  の 2 次元非定常・非圧縮の円柱後流を対象とする。学習用データセットには数値シミュレーションで得られた流れ場を用いる。結果の再現性や追試性を確保すること、多数の実用事例が存在すること、および信頼性の高い数値シミュレーション環境が提供されていることから、数値シミュレーションにはオープンソースの CFD ソルバーである OpenFOAM<sup>20)</sup>を用いる。

## 2 数値シミュレーションの設定とその結果の検証

本節では OpenFOAM による数値シミュレーションの問題設定とその結果の検証について述べる。結果の検証では、流速と渦度の分布および Strouhal 数  $St$  ( $:= fD/U$ ,  $f$  は渦放出周波数,  $D$  は円柱直径,  $U$  は主流速度) の値が妥当であることを確認した。

### 2.1 問題設定

問題設定の模式図を図 1 に示す。原点(0, 0)に直径  $D$  の円柱の中心軸を配置し,  $x$  方向(主流方向)に  $25D$ ,  $y$  方向(横方向)に  $20D$  の矩形領域  $S_1$  を計算領域(格子点数 36,800 点)として,  $Re = 100$  の円柱周囲の流れ場(速度場  $u$ , 渦度場  $\omega_z$  および圧力場  $p$ ) を計算した。主流は左から右向きに主流速度  $U$  で流れ, 入口境界で流速は固定で圧力は勾配ゼロ, 出口境界で流速は勾配ゼロで圧力は固定, 横方向の境界は対称とした。領域  $S_1$  のうち破線部で囲まれた矩形領域  $S_2$  (格

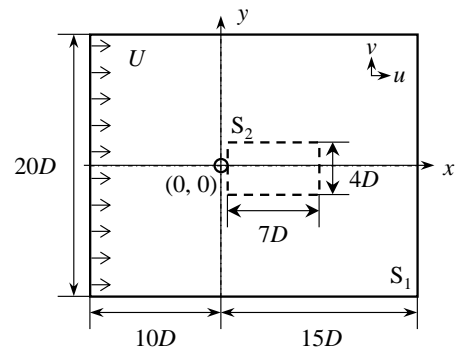


図 1 問題設定の模式図

子点数は  $x$  方向に 100 点,  $y$  方向に 50 点の合計 5,000 点) における流れ場を解析の対象とした。時刻を  $t$ , 速度場を  $\mathbf{u}(x, y)$ , その  $x, y$  方向の成分を  $(u, v)$ , 渦度を  $\omega_z$  ( $:= \partial_x v - \partial_y u$ ), 圧力を  $p$  と表す。流れの典型速度を主流速度  $U$ , 典型長さを円柱直径  $D$ , 典型時間を  $D/U$ , 典型圧力を  $\rho U^2/2$  で測った。「\*」付きの物理量はこれらのスケールで無次元化されたものを表す。流れ場の計算時間は  $240D/U$  とした。

### 2.2 数値シミュレーション結果の検証

#### 2.2.1 流れ場の分布

領域  $S_2$  における円柱後流の主流方向速度  $u^*$ , 横方向速度  $v^*$ , 渦度場  $\omega_z^* := \partial_x v^* - \partial_y u^*$  および圧力場  $p^*$  のスナップショットを図 2(1)-(4) に示す。色はそれぞれの大きさを表す。図 2(3) の渦度場を見ると、円柱後流において正 ( $\omega_z^* > 0$ ) と負 ( $\omega_z^* < 0$ ) の渦度が主流方向には交互に並び、スパン方向には波打つように広がる。上流側 ( $x^* = [1, 4]$  の範囲) と下流側 ( $x^* = [4, 8]$  の範囲) の渦度のカラーマップを比較すると、下流に移流するにつれて渦度が減衰することがわかる。このような渦度分布は円柱後流における Karman 渦列の形成を表しており、他の流れの分布(図 2) を先行研究<sup>5,18)</sup> のものと比較しても定性的に一致する。

#### 2.2.2 渦放出周波数

円柱後流の Karman 渦の渦放出周波数  $f$  [Hz] を典型時間  $D/U$  によって無次元することで  $St$  を求めることができ,  $Re = 100$  では  $St = 0.15 - 0.17$ <sup>17,18)</sup> となる。そこで, 先行研究<sup>17)</sup> と同様に, 揚力係数  $C_L$  の時刻歴(図 3) を求め, この時刻歴から  $St$  を見積もった。 $C_L$  の時刻歴の  $t = 0$  s は計算開始時刻に対応し,  $t \sim 300$  s から  $C_L$  が時間方向に変動し, これは流れが不安定化して周期的な渦放出が開始する時刻に対応する。 $t \sim 400$  s

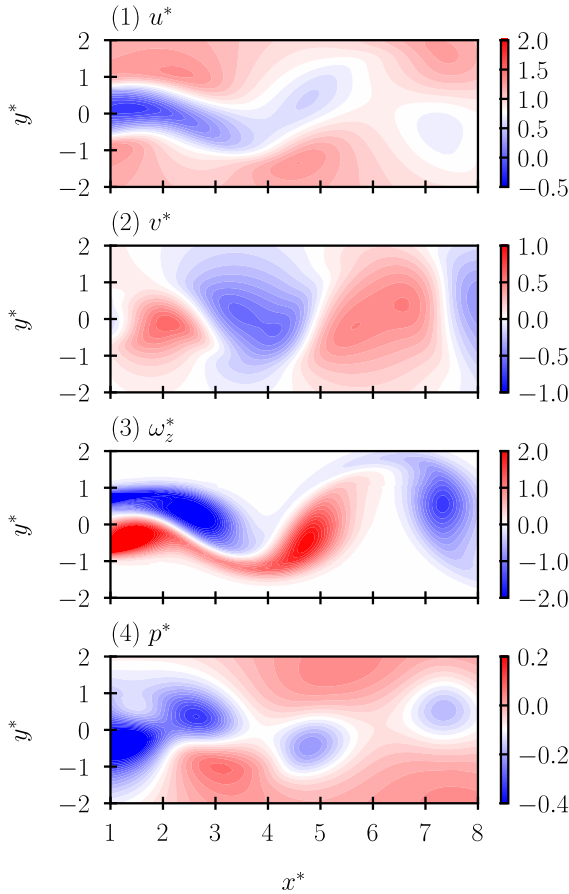


図 2 円柱後流の流れ場のスナップショット

から  $C_L$  の振幅が一定になり、これは周期的な非対称な流れ (カルマン渦列) が安定的に維持されている状態に対応する。

揚力係数  $C_L$  の時刻歴 (図 3) のうち、時刻 400-440 s に対して離散フーリエ変換を実施した。渦放出周波数  $f=0.338$  [Hz] が得られ、これより Karman 渦の放出周期  $T$  は  $T=1/f=2.96$  s ( $T^*=5.92$ ) であり、渦放出周波数  $f$  より  $St$  を求めると  $St=0.169$  であり (図 4)、先行研究<sup>17)</sup>と定量的に一致することが確認できる。

480  $D/U$  のシミュレーション結果のうち、カルマン渦列の形成が安定的に維持されている時刻 400 $D/U$ –424 $D/U$  (無次元時間で  $t^*=200-212$ ) の流れ場を POD および PINNs の解析に用いた。この時刻は Karman 渦の放出周期の 2 周期分に相当する。

### 3 POD と特徴点の検出

#### 3.1 POD の原理

POD<sup>14)</sup> はデータセットから特徴的な固有モードを抽出する分析手法の 1 つであり、 $N$  次元の状態空間に

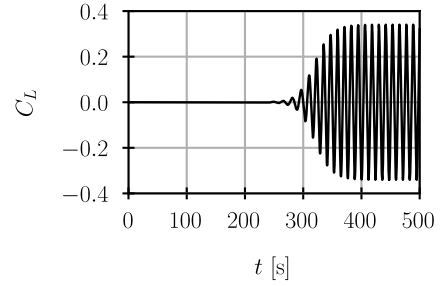


図 3 揚力係数  $C_L$  の時刻歴

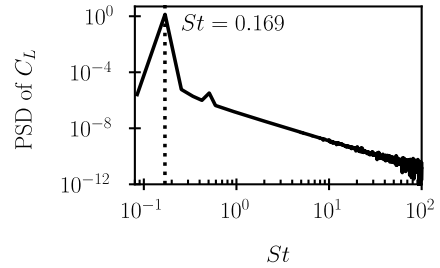


図 4  $C_L$  のパワースペクトル密度

おける多次元データを  $r$  次元の状態空間 ( $r \leq N$ ) に射影する。この多次元データを最も効率よく展開できるように  $r$  次元空間を構成する基底  $\{\boldsymbol{\varphi}_k\}_{k=1}^r$  が決定され、流れ場に POD を適用することで流れ場に潜在的な支配的な構造を抽出することができる。

各座標での物理量を縦に並べた瞬時場 (スナップショット) を  $\mathbf{X}(t_j)$  とし (ただし  $t_j$  は  $j$  番目の時間ステップで  $j=1, \dots, M$ )、 $\mathbf{X}(t_j)$  のアンサンブル平均  $\bar{\mathbf{u}}$  を  $\mathbf{X}(t_j)$  から除いたもの  $\mathbf{X}'$  に対して POD を適用する。

$$\mathbf{X}' = [\mathbf{X}(t_1) - \bar{\mathbf{X}}, \dots, \mathbf{X}(t_M) - \bar{\mathbf{X}}] \quad (1)$$

ここでアンサンブル平均  $\bar{\mathbf{X}}$  は以下の式で定義され、 $\mathbf{X}(t_j)$  の時間平均場に対応する。

$$\bar{\mathbf{u}} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \mathbf{u}(t_j) \quad (2)$$

求める POD モード  $\{\boldsymbol{\varphi}_k\}_{k=1}^r$  は以下の共分散行列の固有値問題の固有ベクトル  $\boldsymbol{\varphi}_k$  として決定される (同時に固有値  $\lambda_k$  も決定される)。

$$\mathbf{R} = \sum_{j=1}^M \mathbf{X}'(t_j) \mathbf{X}'^T(t_j) \quad (3)$$

固有ベクトルは互いに直交するため、正規化することで次式を満たす。

$$\langle \boldsymbol{\varphi}_i, \boldsymbol{\varphi}_j \rangle = \delta_{ij}, (i, j = 1, \dots, N) \quad (4)$$

$i$  番目の POD モードの固有値  $\lambda_i$  の寄与率  $E_i$  と、 $i$  番目の POD モードまでの固有値の累積寄与率  $E_i^{\text{cum}}$  はそれぞれ以下のように定義される。

$$E_i = \frac{\lambda_i}{\sum_{j=1}^M \lambda_j} \quad (5)$$

$$E_i^{\text{cum}} = \sum_{k=1}^i E_k \quad (6)$$

固有ベクトル  $\boldsymbol{\varphi}_k$  を固有値  $\lambda_k$  の大きい方から  $r$  個集めた基底を POD 基底とよび、それぞれの固有ベクトルを POD モードとよぶ。POD のモード係数  $c_j$  は、データセット  $\mathbf{X}'(t_j)$  と POD モード  $\boldsymbol{\varphi}_j$  との内積から求められ、各モードの時間変動を表す。

$$c_j = \langle \mathbf{X}'(t_j), \boldsymbol{\varphi}_j \rangle \quad (7)$$

多次元データ  $\mathbf{X}(t_j)$  が速度場であればモードの固有値はエネルギーに、渦度場であればエンストロフィに対応する。本技報では速度場  $\mathbf{u}^*$  および渦度場  $\boldsymbol{\omega}_z^*$  に POD を適用した。ここで、これらの場の空間座標は 5,000 点、時間ステップ数は 118 点の合計  $5,000 \times 118 = 590,000$  とした。POD によって得られる POD モードおよび対応する固有値の数はそれぞれ 118 個、各 POD モードは 5,000 次元のベクトル、各モード係数  $c_j$  は 118 個である。速度場に対する POD を「velocity-POD」、渦度場に対する POD を「vorticity-POD」と順によぶことにする。

### 3.2 POD で得られたモードの固有値と形状

時間方向に周期的な物理現象を POD で解析すると、抽出されるモードの固有値は 2 個ずつほぼ同じ値を持つペアとなり、対応するペアで POD モードを比べると、空間的に位相が  $\pi/2$  ずれることが知られている<sup>19,21)</sup>。velocity-POD で得られたモードのエネルギー分布 (図 5) と vorticity-POD で得たエンストロフィ分布 (図 6) を見ると、固有値に関して上述の傾向を確認することができる。velocity-POD のエネルギーの累積値は第 4 モードまで考慮すると 99% に到達し、vorticity-POD のエンストロフィの累積値は第 6 モードまで考慮すると 99% に到達する。図 7 に velocity-POD の平均場と第 1-4 モードを示す。図 7(a1) は  $\mathbf{u}^*$  の時間平均場、図 7(a2-5) は順に  $\mathbf{u}^*$  の POD の第 1-4 モードを

それぞれ表し、図 7(b1) および図 7(b2-5) は  $\mathbf{v}^*$  に関するものを表す。3.3 節に述べる方法によって検出したモードの特徴点を「+」と「×」で示す。図 8 は vorticity-POD の平均場と第 1-6 モードであり、図 8(1) は  $\boldsymbol{\omega}_z^*$  の時間平均場、図 8(2-7) は POD の第 1-6 モードを表し、3.3 節に述べる方法によって検出したモードの特徴点を「・」で示す。図 7 および図 8 に示す通り、モードの形状は空間的に位相が  $\pi/2$  ずれる。

以上より、POD によって速度場および渦度場から適切にモードが抽出されていると考えられる。特徴点の検出の際には、velocity-POD では第 1-4 モードまで、vorticity-POD では第 1-6 モードまでを考慮した。

### 3.3 特徴点の検出

モードから検出した特徴点を、図 7 および図 8 にそれぞれ重ねて表示した。特徴点の検出方法については下記に示す通りであり、画像処理分野で一般的な極値検出の方法<sup>例えば 22)</sup> にならった。

1. 直径  $D_0$ 、中心  $(x_0, y_0)$  の円  $C_0$  をテンプレートとして用意し、これを入力データ  $z = f(x, y)$  上をスライドさせた。ここでの  $z = f(x, y)$  は速度と渦度から抽出した POD モードであり、直径  $D_0$  の大きさについては円柱直径  $D$  と同じ値とした。
2. 円  $C_0$  の中心における値  $z_0 = f_0(x_0, y_0)$  と円  $C_0$  の内部に含まれる点での値  $z_i (i = 1, 2, \dots, n)$  とを比較し、 $z_0 > z_i$  であれば  $z_0$  を  $(x_0, y_0)$  における極大値とし、 $z_0 < z_i$  であれば極小値とした。
3. 1. および 2. を領域  $S_2$  にわたって実施し、極大値と極大点および極小値と極小点を検出した。

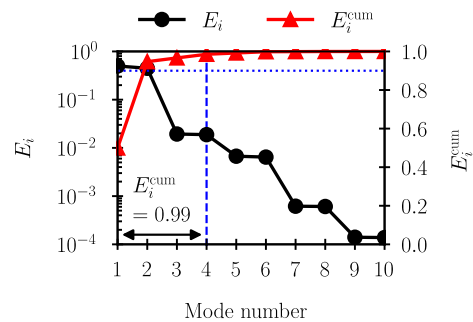


図 5 エネルギー (式(5)) とその累積値 (式(6))

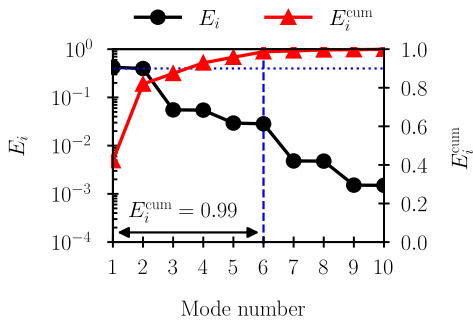


図 6 エンストロフィ (式(5)) とその累積値 (式(6))

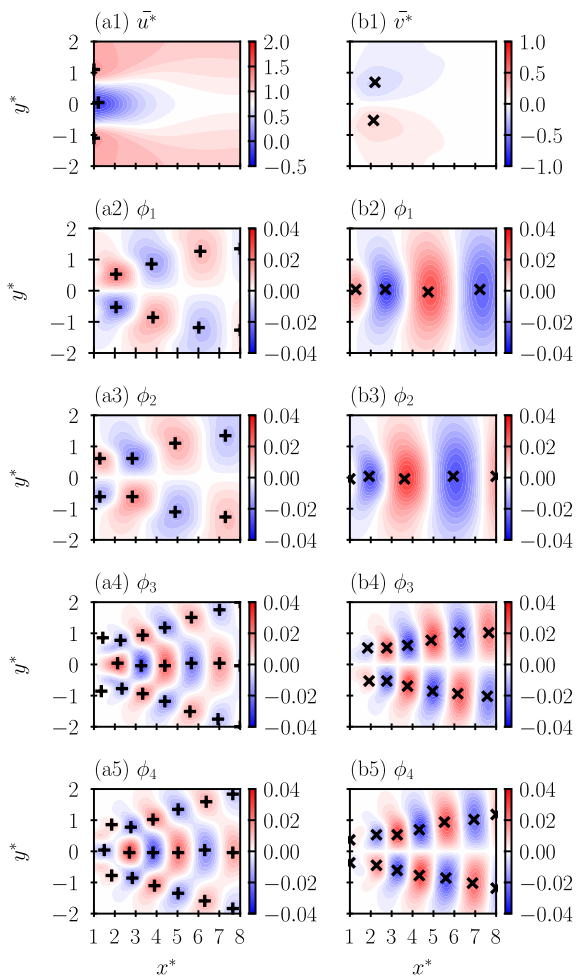


図 7 速度場  $u^*$  に対する POD で得られた POD モード

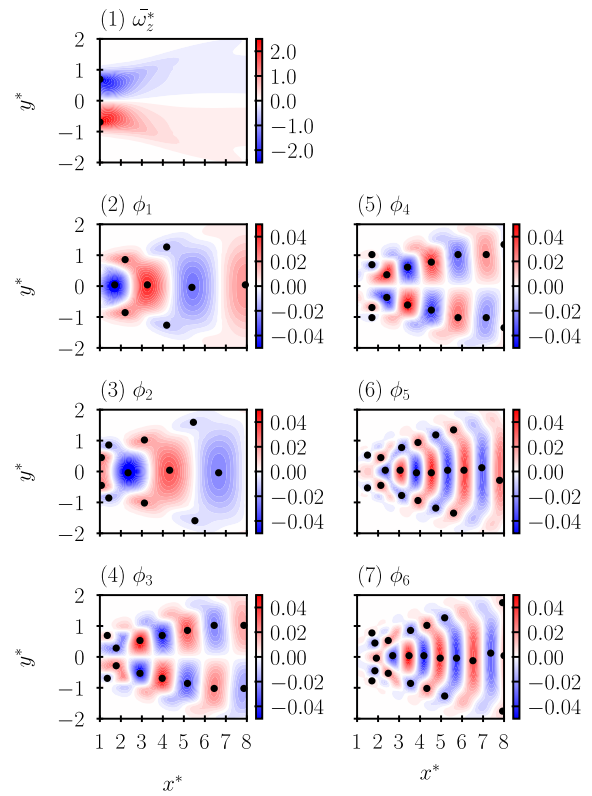


図 8 渦度場  $\omega_z^*$  に対する POD で得られた POD モード

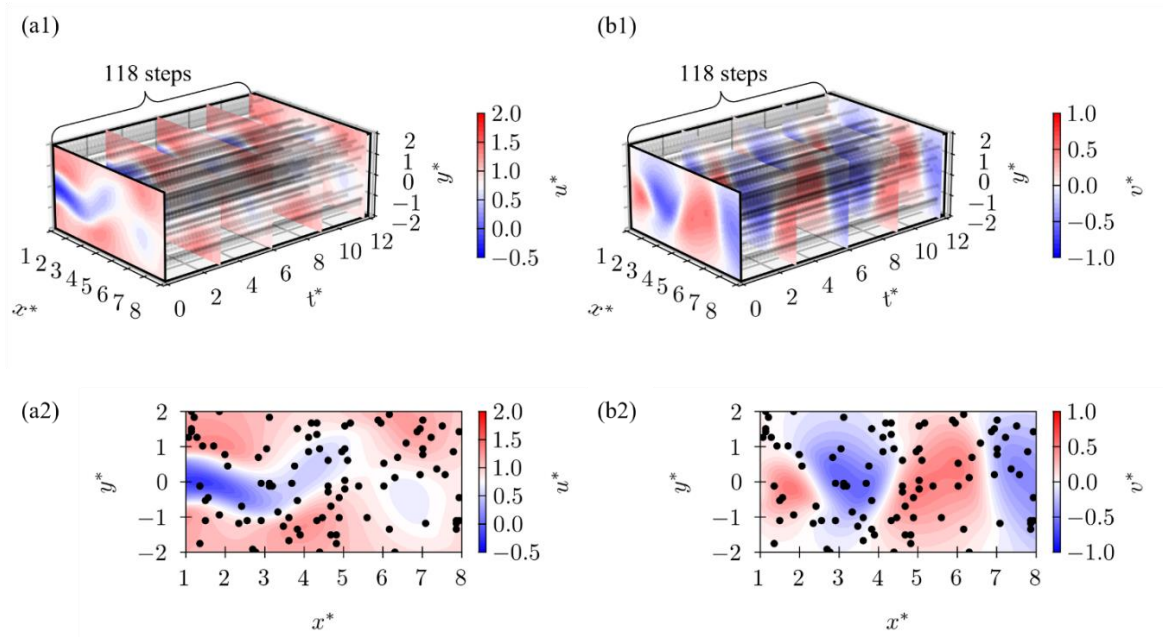


図 9 ランダムサンプリング点の分布 : (a,b1)鳥観図, (a,b2)xy 平面図

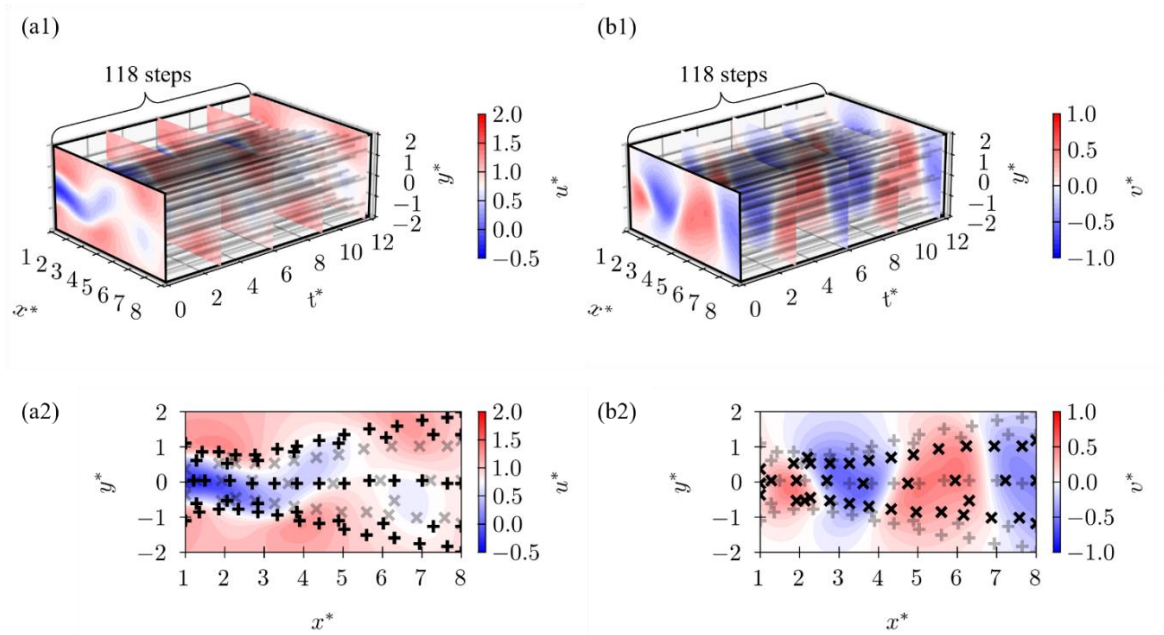


図 10 velocity-POD の特徴点の分布 : (a,b1)鳥観図, (a,b2)xy 平面図

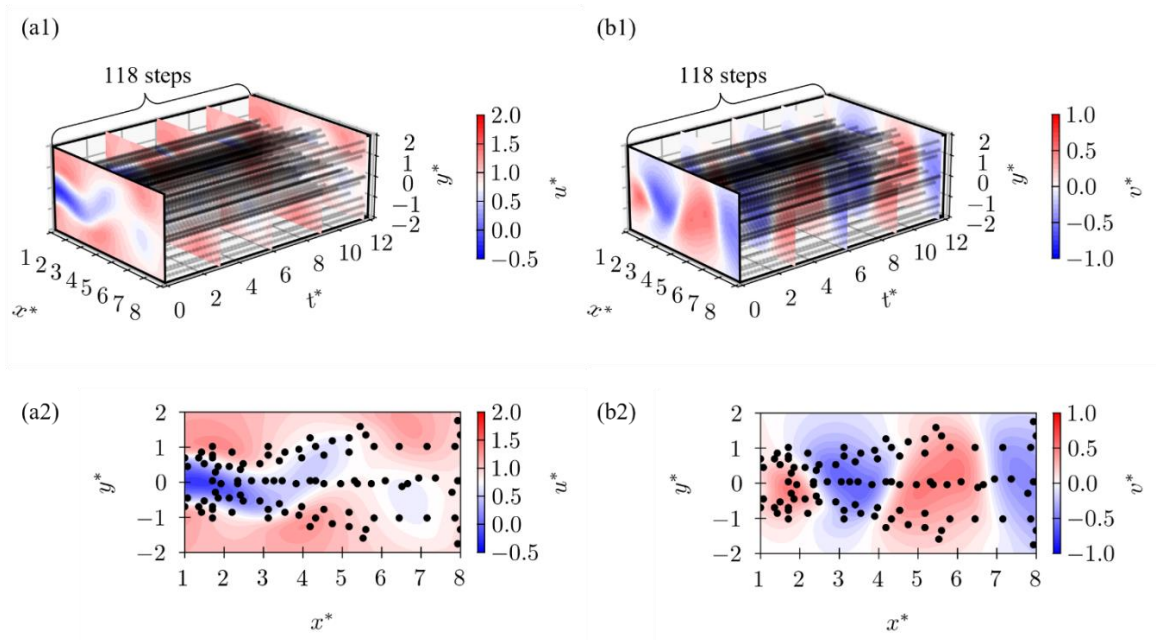


図 11 vorticity-POD の特徴点の分布 : (a,b1)鳥観図, (a,b2)xy 平面図

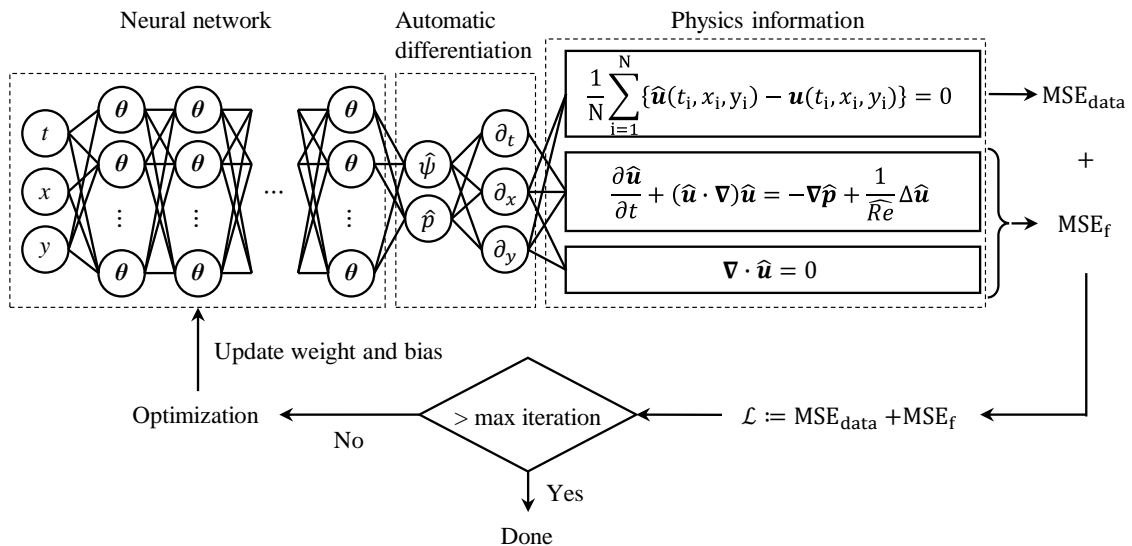


図 12 PINNs のネットワーク構造の概念図

#### 4 PINNs

以下の Navier-Stokes 方程式(8)の逆問題を PINNs で解き,  $Re$  を推定した.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} \quad (8)$$

学習データには数値シミュレーションで得られた速度場を用いた.

入力層, 隠れ層および出力層からなる Feed-Forward

Neural Networks<sup>23)</sup>を考える. 入力変数を  $\mathbf{x}_{in}$ , 出力変数を  $\mathbf{x}_{out}$  と表す. ここで, 第  $l$  層 ( $l = 1, 2, \dots, L-1$ ) は  $N_l$  個のニューロンを持ち, 2つの層間は線形変換  $\mathcal{F}_l$  と非線形活性化関数  $\sigma(\cdot)$  により接続される. この場合, 第  $l$  層における順伝播  $\mathbf{z}^{[l]}$  は, 第  $l$  層における重み  $\mathbf{w}^{[l]}$  とバイアス  $\mathbf{b}^{[l]}$  を用いて次のように表される

$$\mathbf{z}^{[l]} = \sigma^{[l]} \mathcal{F}_l = \sigma^{[l]} (\mathbf{z}^{[l-1]} \mathbf{w}^{[l]} + \mathbf{b}^{[l]}). \quad (9)$$

ここで  $\mathbf{z}^{[0]} = \mathbf{x}_{in}$ ,  $\mathbf{z}^{[L]} = \mathbf{x}_{out}$  に対応する. PINNs のネットワーク構造の概念図を図 12 に示す. PINNs のモ

デリリングは Raissi ら<sup>5)</sup>と同様にした。入力変数は時間  $t$  と空間座標  $(x, y)$  の 3 つ、出力変数は流れ関数  $\psi(t, x)$  (ただし,  $u = \partial\psi/\partial y$ ,  $v = -\partial\psi/\partial x$ ) と圧力  $p(t, x)$  の 2 つとした。学習過程において入出力変数と学習データは典型スケールにより無次元化されており、入力変数については NN に入力する前に min-max 正規化により正規化した。中間層の数を 8 層、それぞれの層におけるニューロンの数を 20 個とした。学習イタレーション回数を 40,000 回として、このうち 20,000 回を Adam, 残りの 20,000 回を L-BFGS 法によって学習パラメータを更新した。Adam と L-BFGS の学習率をそれぞれ  $10^{-3}$  と 1.0 とし、L-BFGS のハイパーパラメータの設定に関して、max\_iter を 20,000, history\_size を 50 とし、tolerance\_grad と tolerance\_change による early-stopping を課さず、line\_search\_fn を strong-wolfe とした。推定パラメータ  $\bar{Re}$  については、PINNs の学習可能なパラメータとして設定されており、その初期値をゼロとした。重み  $\mathbf{w}$  とバイアス  $\mathbf{b}$  を Xavier<sup>24)</sup>によって初期化し、自動微分を用いて  $\psi(t, \mathbf{x})$  および  $p(t, \mathbf{x})$  の時刻  $t$  と空間座標  $\mathbf{x}$  に関する導関数を求めた。損失関数  $\mathcal{L}$  は平均二乗誤差とした。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L} &= \text{MSE}_{\text{data}} + \text{MSE}_f \\
 \text{MSE}_{\text{data}} &= \frac{1}{N_{\text{train}}} \sum_{i=0}^{N_{\text{train}}} (|\hat{u}(t_i, x_i, y_i) - u(t_i, x_i, y_i)|^2 \\
 &\quad + |\hat{v}(t_i, x_i, y_i) - v(t_i, x_i, y_i)|^2) \\
 \text{MSE}_f &= \frac{1}{N_{\text{train}}} \sum_{i=0}^{N_{\text{train}}} (|f(t_i, x_i, y_i)|^2 \\
 &\quad + |g(t_i, x_i, y_i)|^2 \\
 &\quad + |h(t_i, x_i, y_i)|^2) \\
 f &= \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + \hat{u} \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \hat{v} \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial x} \\
 &\quad - \frac{1}{\bar{Re}} \left( \frac{\partial \hat{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial \hat{u}}{\partial y^2} \right) \\
 g &= \frac{\partial \hat{v}}{\partial t} + \hat{u} \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} + \hat{v} \frac{\partial \hat{v}}{\partial y} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} \\
 &\quad - \frac{1}{\bar{Re}} \left( \frac{\partial \hat{v}}{\partial x^2} + \frac{\partial \hat{v}}{\partial y^2} \right) \\
 h &= \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{v}}{\partial y}
 \end{aligned} \tag{10}$$

上式に関して、 $f=0$  としたものは運動量保存則の  $x$  成分、 $g=0$  はその  $y$  成分、 $h=0$  は質量保存則に対応する。最適化手法に Adam<sup>25)</sup> および L-BFGS<sup>26)</sup> を用いて PINNs のパラメータを更新した。上式の総和における  $N_{\text{train}}$  はサンプリング点の総数を表し、式中の「 $\hat{\quad}$ 」付きの文字は PINNs によって推論するものを表す。PINNs による逆問題を解く手順は下記の通りとした。

1. 学習データセットを指定する。学習データはランダムサンプリング点 (図 9), velocity-POD の特徴点 (図 10) と vorticity-POD の特徴点 (図 11) における速度場  $\mathbf{u}(t_i, x_i, y_i)$  であり、各図に示す通り時間方向に関してサンプリング点の座標は一定とする。
2. 重み  $\mathbf{w}^{[l]}$  とバイアス  $\mathbf{b}^{[l]}$  をランダムに初期化<sup>22)</sup> し、NN を構築する。
3. 自動微分によって出力変数  $\psi(t, \mathbf{x})$  と  $p(t, \mathbf{x})$  の  $t$  と  $\mathbf{x}$  に関する導関数を求め、損失関数  $\mathcal{L}$  を求める。
4. Adam によって損失関数  $\mathcal{L}$  を最小化するように PINNs のパラメータを更新する。
5. Adam による最適化後、L-BFGS によって同様に最適化する。

図 7 および図 8 に示す通り、velocity-POD の POD モードから検出された特徴点の数は  $xy$  平面において 95 点であり、vorticity-POD では 94 点であった。ランダムサンプリングでは velocity-POD と同じ点の数である 95 点を  $xy$  平面でサンプリングした。時間方向のサンプリング点の数について、時間ステップ数は 118 ステップ (Karman 渦の放出周期の 2 周期分) である。空間方向と時間方向のサンプリング点の数を合計すると、ランダムに選ぶ場合と velocity-POD の特徴点から選ぶ場合では  $N_{\text{train}} = 95 \times 118 = 11,210$  個であり、vorticity-POD では  $N_{\text{train}} = 94 \times 118 = 11,092$  個である。

## 5 結果

学習データをランダムに選ぶ場合、velocity-POD の特徴点および vorticity-POD の特徴点から選ぶ場合とで PINNs による  $Re$  の推定精度を比較した。

学習過程における損失関数  $\mathcal{L}$  の推移 (図 13(1)) より、40,000 イタレーションの範囲内ではランダムサンプリング点を用いる場合が最も収束が早い (最終イタレーションにおける  $\mathcal{L}$  が最も小さい)。図 13(2) に学習イタレーションごと  $\bar{Re}$  の推移を示す。Adam によ

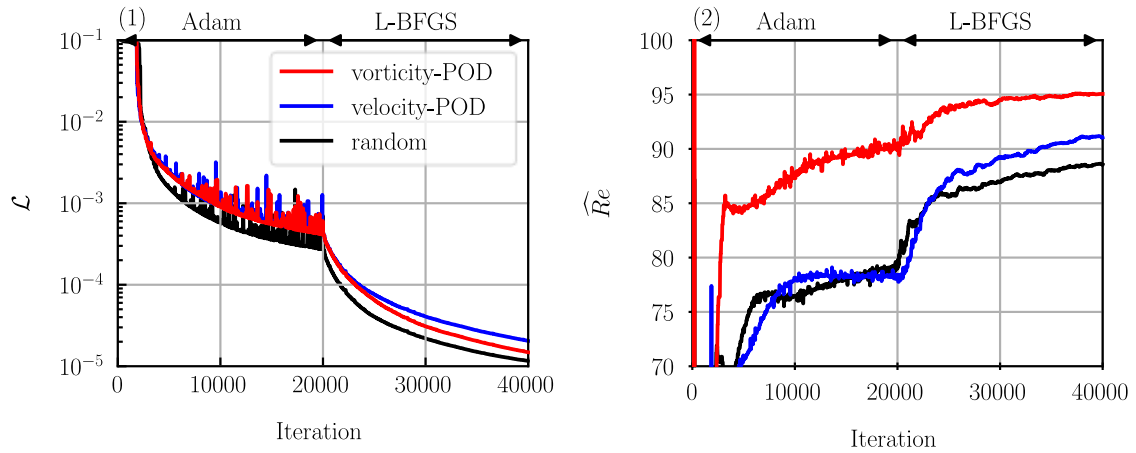


図 13 学習イタレーションごとの(1) $Re$  (真値は  $Re = 100$ ) の推定値 $\widehat{Re}$ と(2)損失関数 $\mathcal{L}$  (式(10))

表 1 各ケースでの条件および  $Re$  (真値は  $Re = 100$ ) の推定値 $\widehat{Re}$ をまとめたもの

	ランダムサンプリング	velocity-POD	vorticity-POD
考慮した POD モード	—	平均場+第 1-4 モード	平均場+第 1-6 モード
$E_i^{cum}$	—	0.985	0.986
$N_{train}$	$95 \times 118 = 11,210$	$95 \times 118 = 11,210$	$94 \times 118 = 11,092$
$\widehat{Re}$ のアンサンブル平均と標準偏差 1 シグマ	$88.59 \pm 0.043$	$91.13 \pm 0.028$	$95.04 \pm 0.018$
真値との相対誤差	11.4%	8.9%	4.9%

最適化終了時点での値を比較すると、ランダムサンプリング点と velocity-POD の特徴点を用いる場合では約 78 であり、vorticity-POD の特徴点を用いる場合では約 90 である。最適化手法を L-BFGS に切り替えると、Adam での最適化時に比べて学習イタレーションごとの $\widehat{Re}$ の変動幅が小さくなる。30,000 イタレーション以降において vorticity-POD の特徴点を用いる場合では $\widehat{Re}$ はほぼ一定で推移するが、残りの 2 ケースではわずかに増加傾向にある。3つのケースにおける条件と推定値を表 1 にまとめた。図 13(2)に示す通り、 $\widehat{Re}$ は学習イタレーションごとに変動することから、学習終了直前の 1,000 イタレーションにおけるアンサンブル平均を最終的な推定値とし、同時に標準偏差 1 シグマの値を求めた。サンプリング点の選び方によって真値  $Re = 100$  に対する相対誤差を比較すると、「vorticity-POD の特徴点」 > 「velocity-POD の特徴点」 > 「ランダムサンプリング点」の順で推定精度が高く、標準偏差の値からも有意な差があるといえる。

## 6 おわりに

PINNs を用いて 2 次元非定常・非圧縮の  $Re = 100$  の円柱後流の Reynolds 数を逆解析した。学習データには OpenFOAM で計算した速度場を用いた。

サンプリング点を空間的にランダムに選ぶ場合よりも、POD の特徴点から選ぶ場合のほうが高い精度で  $Re$  を推定できることを示した。渦度場の空間モードから検出した特徴点で逆解析すると、 $Re$  の推定精度がより高いことを示した。サンプリング点を空間的にランダムに選ぶ場合では  $Re$  の推定値は約 89 であり、速度場の POD モードの特徴点から選ぶと約 91 であった。一方で渦度場の POD モードの特徴点から選ぶと約 95 であった。

今後は以下の項目に取り組む予定であり、これらは PINNs を実用化する上での課題とも考えている：採用モード数の増減に対する収束および推定値の履歴の変化を確認する。系を支配するパラメータを変化させ、非線形性が強いパラメータ範囲(本技報でいえば、流れが層流-乱流の遷移域あるいは乱流とな

る  $Re = O(10^3)$ 以上の範囲を指す)における PINNs の有用性を検討する. 学習データに CFD の結果ではなく実測値を使うことを想定する場合, データにノイズが含まれることから, データノイズに対する影響を検討する. 本技報ではサンプリング点の選び方のみに注目したが, PINNs の改善手法<sup>9-11)</sup>を組み込むことで推定精度がどの程度変化するかを検討する. また, 産業応用を考えると, 複雑な物理現象 (例えば混相流), 複雑な形状や大規模なデータを扱う問題もあり, このような問題を PINNs で解くためにさらなる研究・工夫が求められている(例えば<sup>27)</sup>.

本技報では, 流体现象を対象として PINNs を適用した事例を紹介したが, 一般に対象が常微分方程式や偏微分方程式で記述できる場合, 理論上 PINNs を適用可能である. 今後は流体现象にとどまらず, 産業界で見られる様々な現象へ PINNs の適用範囲を広げることで, お客様の課題解決に貢献したいと考えている.

#### 引用文献

- 1) Chen, Z., Liu, Y., & Sun, H.: Physics-informed learning of governing equations from scarce data, *Nature Communications*, 12 (2021) 6136
- 2) Kumar, K, & Kostina, E.: Optimal Parameter Estimation Techniques for Complex Nonlinear Systems, *Differential Equations and Dynamical Systems*, (2024) 1-20
- 3) Mendez, M. A., *et al.*: *Data-driven fluid mechanics: combining first principles and machine learning* (Cambridge University Press, 2023)
- 4) Chou, I. C., & Voit, E. O.: Recent developments in parameter estimation and structure identification of biochemical and genomic systems, *Mathematical Biosciences*, 219 (2009) 57-83
- 5) Raissi, M., *et al.*: Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, 378 (2009) 686-707
- 6) Baydin, A. G., *et al.*: Automatic differentiation in machine learning: A survey, *Journal of Machine Learning Research* 18 (2018) 1-43
- 7) Karniadakis, G. E., *et al.* Physics-informed machine learning, *Nature Reviews Physics*, 3 (2021) 422-440
- 8) Rathore, P., *et al.*: Challenges in training PINNs: a loss landscape perspective, *Proceedings of the 41st International Conference on Machine Learning*, 1715 (2024) 33
- 9) Wang, S., *et al.*: When and why PINNs fail to train: A neural tangent kernel perspective, *Journal of Computational Physics*, 449 (2022) 110768
- 10) Tancik, M., *et al.*: Fourier features let networks learn high frequency functions in low dimensional domains, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 33 (2020) 7537-7547
- 11) Moseley, B., *et al.*: Finite basis physics-informed neural networks (FBPINNs): a scalable domain decomposition approach for solving differential equations, *Advances in Computational Mathematics*, 49 (2023) 62
- 12) Hou, J., *et al.*: Enhancing PINNs for solving PDEs via adaptive collocation point movement and adaptive loss weighting, *Nonlinear Dynamics*, 111 (2023) 15233-15261
- 13) Deguchi, S., *et al.*, Efficiency improvement of PINNs inverse analysis by extracting spatial feature of data, *Journal of the Japan Society of Civil Engineers*, 79 (2023) 22-15011 in Japanese
- 14) Sirovich, L.: Turbulence and the dynamics of coherent structures. I. Coherent structures, *Quarterly of Applied Mathematics*, 45 (1987), 561-571
- 15) Inoue, T., *et al.*: Data-driven optimal sensor placement for high-dimensional system using annealing machine, *Mechanical Systems and Signal Processing*, 188 (2023) 109957
- 16) Chaturantabut, S., & Sorensen, D. C.: Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32 (2010) 2737-2764
- 17) Lienhard, J. H. Synopsis of lift, drag, and vortex frequency data for rigid circular cylinders, *Washington State University*, 300 (1966)
- 18) Jiang, H., & Cheng, L.: Strouhal-Reynolds number relationship for flow past a circular cylinder, *Journal of Fluid Mechanics*, 832 (2017) 170-188
- 19) Noack, B. R., *et al.*: A hierarchy of low-dimensional models for the transient and post-transient cylinder wake, *Journal of Fluid Mechanics*, 497 (2003) 335-363
- 20) The OpenFOAM Foundation Ltd.: OpenFOAM Us

- er Guide, Version v2212, 2022, <https://openfoam.org>
- 21)Taira, K., *et al.*: Modal analysis of fluid flows: An overview, *AIAA journal*, 55 (2017) 4013-4041
- 22)Szeliski, R.: *Computer vision: Algorithms and Applications* (Springer Nature, 2022)
- 23)Hornik, K., *et al.*: Multilayer feedforward networks are universal approximators, *Neural Networks*, 2 (1989) 359-366
- 24)Glorot, X., & Bengio, Y.: Understanding the difficulty of training deep feedforward neural network, *Proceedings of the 13th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, (2010) 249-256
- 25)Kingma, D. P.: Adam: A method for stochastic optimization, *Proceedings of the International Conference on Learning Representations 2015*, (2015) 1-13
- 26)Byrd, R. H., *et al.*: A limited memory algorithm for bound constrained optimization, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16 (1995) 1190-1208
- 27)Cuomo, S., *et al.*: Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what's next. *Journal of Scientific Computing*, 92, (2022) 88