

令和 3 年 5 月 25 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2019～2020

課題番号：19K22876

研究課題名（和文）物理モデルに基づくニューラルネットワークの開発と気象物理の探究

研究課題名（英文）Development of neural networks based on physical models and exploration of meteorological physics

研究代表者

福井 健一（Fukui, Ken-ichi）

大阪大学・産業科学研究所・准教授

研究者番号：80418772

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：本課題では次の2つの課題に取り組んだ。1. 既知の物理モデル成分とモデル残差成分を分解して出力可能なディープラーニングアーキテクチャを提案し、下層の大気状態から対流圏上層の風速を推定する課題を題材として提案法の精度検証を行った。提案法による残差成分の風ベクトル空間分布について気象学の知見から妥当性を考察した。次に、2. 偏微分方程式の任意の位置における解の値を自動微分とディープラーニングにより求める方式に関して、マルチタスク学習と敵対的サンプル生成による改善法を提案した。いくつかの基本的な偏微分方程式を対象に推定精度の向上を確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究成果の1. 物理モデル成分とモデル残差成分を分解して出力可能なディープラーニングアーキテクチャと、2. ディープラーニングと自動微分による偏微分方程式の求解の高精度化、の両者を将来的に統合することで、End-to-Endで任意の観測量から偏微分方程式を満足するように任意の物理量を推定することが可能になる。本統合方式により、観測データと既知の方程式を有する自然科学において、両者を活用して予測精度の向上や最適化など広く応用が期待できる。

研究成果の概要（英文）：In this work, we tackled the following two researches. First, we proposed a deep learning architecture that can decompose and output known physical model component and model residual component. Then, we verified the accuracy of the proposed method with the task of estimating the wind velocity in the upper troposphere from the atmospheric conditions in the lower layer. The validity of the wind vector distribution of the residual component by the proposed method was justified from the knowledge of meteorology. Second, we proposed an improvement method by multi-task learning and adversarial example generation for the method of obtaining the value of the solution at an arbitrary position of the partial differential equation, by automatic differentiation and deep learning. We confirmed the improvement of estimation accuracy for some basic PDEs.

研究分野：知能情報学

キーワード：ディープラーニング 偏微分方程式 温度風 マルチタスク学習 敵対的サンプル生成

## 1. 研究開始当初の背景

気象などの物理現象は保存則に基づく時空間に関する微分方程式により演繹的に現象が説明される。しかし、多様な時間・空間スケールで変動する気象現象を精度よくシミュレートするのは困難で、様々な近似誤差、境界条件により時間積分と共に誤差が拡大する。一方、近年のディープラーニングに代表される機械学習技術の発展と膨大な各種気象データの蓄積により、機械学習による気象予測が注目され始めている。しかし、機械学習による予測モデルには物理法則が入っていないため、物理法則を逸脱した予測をする可能性も十分ある。両者には利点・欠点がある。そこで、近年、機械学習の帰納的な予測モデルに、既知の演繹的な物理モデルを融合することで機械学習の予測モデルの精緻化が期待されている。例えば、地球全球で発生する渦潮のデータセットを衛星画像データから生成する研究や、材料科学における新しい化合物の発見、量子化学における密度汎関数の設計、生命科学におけるイメージング技術など、様々な自然科学分野で機械学習モデルと物理モデルを統合する研究が行われている。本件研究課題では、このような背景の下、気象予測を対象として機械学習による予測モデルに既知の物理モデルを考慮する方式に関して研究を行う。

## 2. 研究の目的

本課題では、① 既知の物理モデル成分と物理モデル残差項を分解して出力可能なディープラーニングの学習フレームワークを創出し、気象予測において物理モデルを用いないディープラーニングと比較して予測精度が向上することを検証する。そして、② 時空間に関する偏微分方程式（物理モデル）の任意の位置における解の値を自動微分とディープラーニングにより求める方式に関して、推定精度の向上を図る。①の方式と②の方式を統合することで、気象の観測量から方程式系の物理量を中間変数としてディープラーニングにより出力し、その物理量が偏微分方程式を満足するようにディープラーニングのモデルを学習することが可能になる。本研究課題では、①と②の基盤となる要素に関してそれぞれ新規学習モデルの提案と精度検証を行うことを目的とする。

## 3. 研究の方法

### 3-1. 物理モデルと残差項を分解して学習可能なディープラーニングモデルの開発

本課題では、対流圏上層の風速予測を題材として物理モデルと残差項を分解して学習可能なディープラーニングモデルの研究開発に取り組んだ。対流圏上層では、地衡風とよばれる安定した風が流れており、温度風方程式によって表現されることが知られている。温度風は高度差による圧力勾配と鉛直方向の積層温度による微分方程式として表現される。上層では、この地衡風と実際の風の間には10パーセント程度の相違がある。この相違分が大気に収束・発散を生み、さらに鉛直流を生み、この鉛直流により雲ができ雨が降るとされている。下層の大気状態を観測量として上層の風ベクトルを推定する問題を設定し、温度風方程式に基づく成分、および教師データの風ベクトルとの残差成分（+ 推定誤差）を同時に学習するディープラーニングアーキテクチャを考案した（図1）。

そして、再解析データ（数値モデルと観測データをデータ同化によって統合・精緻化されたデータ）ERA-Interimを学習データとして使用し、提案手法の検証を行った。下層の気流、ジオポテンシャル、渦位、湿度、渦度を入力として、上層の風ベクトルを逐次的に予測を行っ

た. 提案手法とベースの予測モデルであるCNN (畳み込みニューラルネットワーク), そして温度風方程式による予測精度の比較を行った. また, 提案手法による風ベクトル残差成分に関して気象現象としての妥当性について定性的な考察を行った.

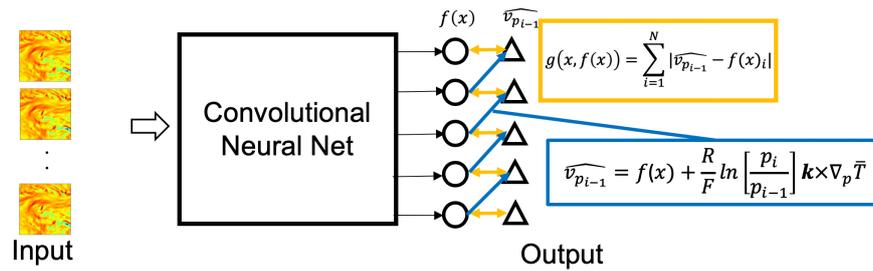


図 1 提案法の全体構造. 空間観測量を入力として, 風ベクトルの系列を出力する. その時, 2 高度間の風ベクトルは温度風方程式に従うよう制約を課す.

### 3-2. ディープラーニングと自動微分による偏微分方程式の求解の高精度化

本課題では, Physics-Informed Neural Network (PINN) [Raissi, et al., 2019] をベースとして, その解推定精度向上に取り組んだ. PINN は時空間上の変数値を出力するディープラーニングモデルであるが, 出力変数値は与えられた偏微分方程式に基づいて自動微分を行い, その方程式を満足するように出力を学習する (図2). 変数値の時空間上の振る舞いは偏微分方程式によって制約される. PINN

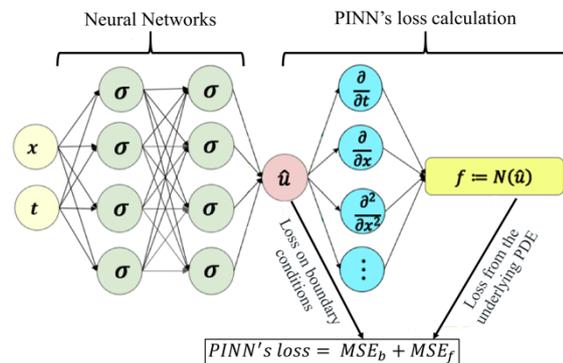


図 2 PINN の全体構造

で考慮されていない情報を検討し, 下記のふたつの改良を考案した.

#### ① マルチタスク学習の枠組みにより類似方程式を活用

多くの偏微分方程式は係数によって特徴付けられることに着目し, 同じ方程式系の異なる係数の方程式を複数用いることを考案した. マルチタスク学習の枠組みで類似方程式も含めて同時に学習することで, 推定の際に互いに助け合うことを狙いとした.

#### ② 敵対的サンプル生成により求解の難しい領域のデータを重点的に生成

出力値の振る舞いは方程式によっては空間上で一様ではなく, 変動が大きく推定の難しい領域と, 変動が小さく比較的推定の容易な領域が存在する. そのため空間上の一様に値を推定するのは得策ではない. 本方式では敵対的サンプル生成により, 推定精度の低い領域を重点的に求めることを狙いとした.

検証実験としては, 流体现象や経済のモデル化に使用されるいくつかの基本的な偏微分方程式を対象として, ベースのPINNと比較して解推定精度の向上を確認した.

[Raissi, et al., 2019] Raissi, Maziar, Paris Perdikaris, and George E. Karniadakis. "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations." *Journal of Computational Physics* 378 (2019): 686-707.

## 4. 研究成果

### 4-1. 物理モデルと残差項を分解して学習可能なディープラーニングモデルの研究成果

入力特徴量から所与の方程式との誤差を最小化するネットワーク、および教師データとの誤差を最小化するネットワークを持つアーキテクチャを提案した（図3）．共有ネットワーク（図3 Shared NN）を設けることで両者に関する特徴抽出を行い、Non-shared NNで個別の出力に関する特徴を学習する．学習過程はNon-shared NNについて交互最適化を行うことで安定して学習可能なことを実験的に確認した．

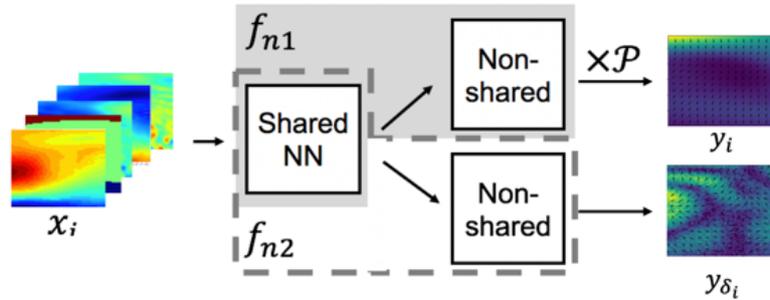


図 3 物理モデル成分 ( $y_i$ ) と残差成分 ( $y_{\delta_i}$ ) を分解して出力可能なディープラーニングアーキテクチャ． $P$ は所与の方程式を表している．

ERA-Interimを用いた検証実験では、安定した海域上空を対象領域として、一ヶ月の平均値を使用した．1979年1月から2010年12月までを使用し、テストデータとして2009年1月から2016年12月までを使用した．解像度は経度・緯度共に0.75度であり、空間格子数は60 × 60点とした．高さ方向は850hPa～150hPaまでの16点を使用した．また、特徴量として気流、ジオポテンシャル、渦位、湿度、渦度を使用した．

提案法は、物理モデルを用いない通常のACNN、および温度風方程式を用いた予測と比較してRSMEの観点で改善することを確認した．また、出力の一例を図4に示す．ACNNは物理モデル成分（図4 Physical Model-based）と残差成分（Model Discrepancy）を区別せず出力し、温度風方程式による予測（TWE）は物理モデル成分のみを表現している．提案法による出力の空間分布は、物理モデル成分は滑らかであり、一方残差成分は起伏がありベクトルは連続的に渦を巻くように変化している（図4 Proposed Method）．風ベクトルの絶対値（ノルム）で比較すると、残差成分は物理モデル成分のおよそ10%程度であり、気象学の知見とおおよそ一致している．これらの事から、提案法はACNNに比べて予測精度の向上が確認でき、かつ残差成分はノイズではなく何かしらの物理現象を捉えている可能性が示唆された．

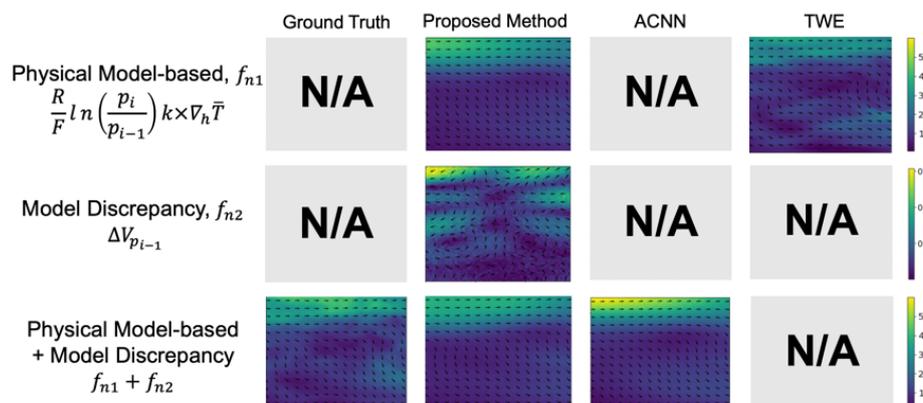


図 4 提案法と畳み込みニューラルネットワーク（ACNN）および温度風方程式（TWE）による対流圏上層の風ベクトル予測の出力例．

#### 4-2. 偏微分方程式の解を求めるディープラーニングモデルの高精度化の研究成果

PINN [Raissi, et al., 2019]をベースとして、偏微分方程式を満たす値を出力するディープラーニングの高精度に取り組んだ。まず、同じ方程式系の係数が異なる方程式の解を **cross-stitch module**により重みを共有して同時学習する方式を提案した。また、入力変数の空間を一様にサンプリングするのは非効率であるため、敵対的サンプル生成により、解の値の変動が大きい領域を重点的にサンプリングすることで、少ないサンプル数でも効率的に学習する方式を提案した。図5は時間 $t$ -変数 $x$ の空間上のサンプリング点群の変化の様子を示している。背景の色は方程式を満たす値を示している。図5の**Transformed**のサンプル点群は敵対的サンプル生成により動的に生成した点群であり、学習初期段階 (A) に比べて、学習終了時 (B) は方程式の解の変動が大きい領域に集中している様子が分かる。

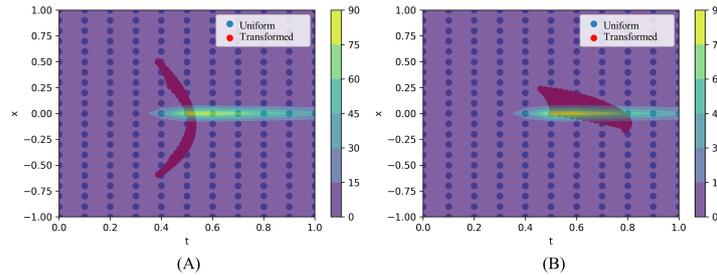


図5 敵対的サンプル生成によるサンプリング点の動的生成過程。(A) 学習初期段階のサンプリング点群。(B) 学習終了時のサンプリング点群。

提案手法の精度検証には、基本的な偏微分方程式 (Burger's方程式, Poisson方程式, 1次元 Fokker-Plank方程式) および、高次元の方程式系として100次元Black-Scholes-Barenblatt方程式, 20次元Allen-Cahn方程式を対象として、比較実験を行った。結果の一部を表1に示す。元論文のPINN, ResNet (Residual Network)を用いた推定法と比較を行った。PCGradとUcertはマルチタスク学習において複数の勾配情報の活用方法が異なる。表より提案手法が最も精度良く推定できており、マルチタスク学習および敵対的サンプル生成の両者の効果が確認できた。他の方程式系についても同様の傾向が確認された。

表1 Poisson方程式の推定精度比較。PCGrad以下は提案法のバリエーションを表している。CSはCross-stitch module, Adv.は敵対的サンプル生成を表している。

Method	MAE	MSE	Rel. $l_2$ error
PINN [3]	$7.9 \times 10^{-4}$	$8.8 \times 10^{-7}$	$2.9 \times 10^{-2}$
ResNet [17]	$4.7 \times 10^{-4}$	$2.7 \times 10^{-7}$	$1.7 \times 10^{-2}$
PCGrad w/ CS	$1.1 \times 10^{-4}$	$2.0 \times 10^{-8}$	$4.8 \times 10^{-3}$
Uncert w/o CS	$3.9 \times 10^{-4}$	$2.1 \times 10^{-7}$	$1.5 \times 10^{-2}$
Uncert w/ CS	$1.2 \times 10^{-4}$	$2.0 \times 10^{-8}$	$4.7 \times 10^{-3}$
PCGrad w/ CS + Adv.	$1.4 \times 10^{-4}$	$2.6 \times 10^{-8}$	$4.7 \times 10^{-3}$
Uncert w/ CS + Adv.	$9.5 \times 10^{-5}$	$1.6 \times 10^{-8}$	$4.1 \times 10^{-3}$

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Ken-ichi Fukui, Junya Tanaka, Tomohiko Tomita, and Masayuki Numao	4. 巻 n/a
2. 論文標題 Physics-Guided Neural Network with Model Discrepancy Based on Upper Troposphere Wind Prediction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proc. 2019 18th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA)	6. 最初と最後の頁 414-419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ICMLA.2019.00078	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Pongpisit Thanasutives, Masayuki Numao, and Ken-ichi Fukui	4. 巻 n/a
2. 論文標題 Adversarial Multi-task Learning Enhanced Physics-informed Neural Networks for Solving Partial Differential Equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proc. 2021 The International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN2021)	6. 最初と最後の頁 n/a
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Ken-ichi Fukui, Junya Tanaka, Tomohiko Tomita, and Masayuki Numao
2. 発表標題 Physics-Guided Neural Network with Model Discrepancy Based on Upper Troposphere Wind Prediction
3. 学会等名 2019 18th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福井健一
2. 発表標題 データ駆動とモデル駆動の融合によるディープラーニングと気象予測
3. 学会等名 IT連携フォーラムOACIS第36回シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ekasit Phermphoonphiphat, Tomohiko Tomita, Masayuki Numao, and Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 Study of Upper Tropospheric Circulations over the Northern Hemisphere Prediction Using Multivariate Features by ConvLSTM
3. 学会等名 The 23rd Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems (IES2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ekasit Phermphoonphiphat, Tomohiko Tomita, Masayuki Numao, and Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 A Prediction of Upper Tropospheric Circulations over the Northern Hemisphere Using ConvLSTM
3. 学会等名 電子情報通信学会人工知能と知識処理研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ekasit Phermphoonphiphat, Tomohiko Tomita, Masayuki Numao, and Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 Spatiotemporal Climate Forecasting with ConvLSTM
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2019年大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ekasit Phermphoonphiphat, Tomohiko Tomita, Masayuki Numao, Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 A Periodic Convolutional Recurrent Network Model for Climate Prediction
3. 学会等名 2020年度人工知能学会全国大会 (第34回)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Pongpisit Thanasutives, Masayuki Numao, Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 Adversarial Multi-task Learning Algorithm for Solving Partial Differential Equations
3. 学会等名 Japan Geoscience Union Meeting 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Pongpisit Thanasutives, Masayuki Numao, Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 Learning to Solve Multiple Partial Differential Equations Using Physics-informed Neural Networks
3. 学会等名 2021年度人工知能学会全国大会（第35回）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Pongpisit Thanasutives, Masayuki Numao and Ken-ichi Fukui
2. 発表標題 Adversarial Multi-task Learning Enhanced Physics-informed Neural Networks for Solving Partial Differential Equations
3. 学会等名 2021 The International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	富田 智彦  (Tomita Tomohiko)  (20344301)	熊本大学・大学院先端科学研究部(理)・准教授    (17401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------