

令和 6 年 4 月 10 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03714

研究課題名（和文）ニューラルネットワークに基づくマントルダイナミクスの物理モデリング

研究課題名（英文）Modeling of mantle dynamics based on neural networks

研究代表者

森重 学（Morishige, Manabu）

東京大学・地震研究所・助教

研究者番号：70746544

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、ニューラルネットワークを用いた新たな手法 Physics-Informed Neural Networks（以後PINNと呼ぶ）によって地球内部における温度や岩石流動の時空間変化を予測できるかを調べた。解くべき式の形や境界条件の入れ方などを変えて試行錯誤したが、現段階では比較的単純な問題に対してもPINNにより精度良く結果を予測することが困難であることが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年発表された偏微分方程式を解くための新たな手法 Physics-Informed Neural Networks（以後PINNと呼ぶ）は、従来の数値計算手法と比較して、解が不連続になる問題や時間逆行問題に対しても適用が容易であるなどの理由で注目されてきた。しかし本研究では、PINNを用いて地球内部における温度や岩石流動の時空間変化を精度良く予測することはまだ現段階では難しいということを示した。

研究成果の概要（英文）：This study investigates the applicability of Physics-Informed Neural Networks (PINN), a recently proposed method which is based on neural networks, to the prediction of spatiotemporal variations in temperature and rock velocity inside the Earth. I have tested various formulations and ways to incorporate boundary conditions, and found it difficult to predict the results even for relatively simple problems using PINN at this stage.

研究分野：地球ダイナミクス

キーワード：ニューラルネットワーク マントルダイナミクス 熱対流 熱伝導

1. 研究開始当初の背景

マントル内部の岩石流動や流体移動は、プレート運動や地球内部の物質循環を支配する最も基本的な現象である。それらは物理モデリング、つまり物理法則を記述する偏微分方程式を解くことで予測することができる。従来偏微分方程式を解く際には、本来連続的に変化する値を不連続な値に置き換える有限差分法や有限要素法などの離散化手法が用いられてきた。しかしこれらの数値計算手法では、解が不連続となる場合や、過去のマントルの状態を復元するための時間逆行問題を解くことが困難であることが知られている。

近年、連続的な値を用いたままニューラルネットワークに基づき偏微分方程式を解く新たな手法Physics-Informed Neural Networks (以後PINNと呼ぶ) (Raissi et al., 2019, J. Comput. Phys.) が発表された。これは簡単に言えば、方程式の解として未知のパラメータを含む関数をニューラルネットワークで表現し、そのパラメータを与えられた初期条件、境界条件、偏微分方程式を満たすように決定するものである。この手法を用いることで、上述したような既存の数値計算手法が不得意とするような問題を容易に解くことが可能となると期待される。しかしPINNがマントル内部の岩石流動や流体移動に関する問題にどの程度適用可能かはまだ検証されていない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、PINNのマントルダイナミクスの物理モデリングに対する実用性を検証することである。具体的には、マントル内部における岩石流動と流体移動の時間進行問題、時間逆行問題に対してPINNを適用し計算精度や計算速度を確認する。そしてそれらの結果を用いて従来の離散化手法との比較を行う。またどのような条件下でPINNによる計算精度が向上するのかも解明する。

3. 研究の方法

PINNの実装には、SciANNというPythonで書かれたインターフェースを用いる (Haghighat and Juanes, 2021, Comput. Methods Appl. Mech. Eng.)。境界条件として値を直接与える場合は、仮定する解の関数の中にあらかじめその情報を埋め込む手法も取り入れる (Sun et al., 2020, Comput. Methods Appl. Mech. Eng.)。中間層やノードの数、学習率、バッチサイズなどPINNの入力パラメータを系統的に変化させながら、それらが計算精度や計算時間に及ぼす影響を評価する。熱対流問題の解は、質量保存と運動量保存の式を解くことで温度を求める、エネルギー保存の式を解くことで岩石の流れを求める、という作業を温度が十分に収束するまで繰り返すことで得た。

4. 研究成果

(1) 2次元の箱型モデル形状、物性一定、定常状態という最も単純な熱対流の問題に対してPINNの適用可能性を検討した。その結果、熱の移動に関する無次元量であるレーリー数が 10^4 と比較的低い場合(対流が弱い場合)ではPINNによる解と従来の数値計算手法による解がほぼ一致した(図1a)。しかしレーリー数が 10^5 と大きくなる(対流が激しくなる)とこれら2つの解のずれが大きくなる、計算が収束しない、という問題が生じた(図1b)。また計算時間の点で比較すると、有限差分法や有限要素法など従来の数値計算手法と比較してPINNは非常に時間がかかる。岩石の流れ場を求めるための定式化としては流れ関数のみを用いたもの(4階の偏微分方程式1つ)よりも流れ関数と渦度を用いたもの(2階の偏微分方程式2つ)の方が計算が収束しやすいことが明らかになった。さらにこれまでは境界上の点で値を指定する場合には(ディリクレ境界条件)、その条件を解として仮定する関数形に組み込むことで厳密に境界条件が満たされるようにしていたが(Sun et al., 2020, Comput. Methods Appl. Mech. Eng.)、この手法ではニューラルネットワークで最小化するべき損失関数の形が複雑になるため計算の収束が難しくなるということも分かってきた。先行研究を見ても、レーリー数が高い場合の熱対流問題に対してPINNによって高い計算精度を出すのは難しいようである。

(2) 熱対流問題に対してPINNを適用することは困難であったため、より単純な問題である熱拡散率一定、1次元非定常熱伝導方程式に対してPINNの適用を試みた。具体的には、海洋プレートの冷却に対応する、最初一様に高温であった物質がある時間から地表で急速に冷却されるという問題に取り組んだ。その結果、温度の時空間変化をPINNにより高精度で予測することはできなかった。これは主に地表付近の急激な温度変化をニューラルネットワークで表現する際の困難さが原因であると思われる。その証拠に、初期条件として一様な高温ではなく地表付近で滑らかに変化するような温度を仮定するとPINNによる予測精度は大きく上昇した。

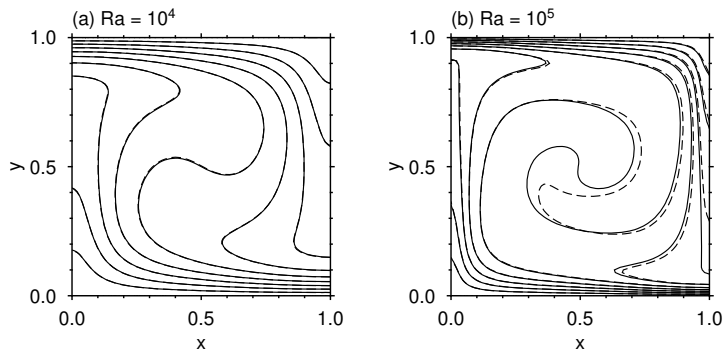


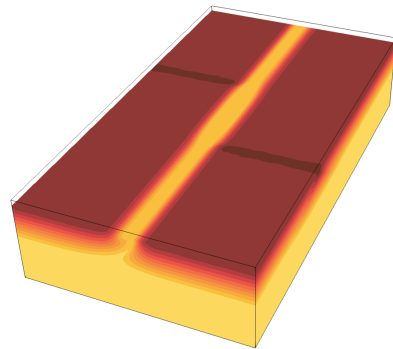
図1：熱対流問題
 実線が有限要素法によって得られた、破線がPINNによって得られた等温線。(a)レーリー数が 10^4 、(b) 10^5 の場合。

(3) 研究期間全体を通して、現段階ではPINNは比較的単純な熱対流や熱伝導の問題に適用することさえ難しいということが明らかになった。特に、これはニューラルネットワーク一般に対して言われることではあるが、入力パラメータの数が膨大で、かつそれらを決定するための明確な指針が存在しないということが1番の問題であると考えられる。現状では多くの場合解く問題ごとに試行錯誤でそれらのパラメータを決定している。したがってこの問題を解決しない限りPINNを幅広い問題に対して適用することは難しい。しかしPINNとその関連手法は近年急速に発展しつつあり(たとえばEscapil-Inchauspé and Ruz, 2023, Neurocomputing)、将来的にはマントルダイナミクスの問題にも適用できるようになるのではないかと期待している。

(4) 本研究の主要目的であるPINNとは少し外れるが、以下の2つの研究も行った。まず1つ目は、他のデータ科学的手法であるベイズ推定がマントルダイナミクスを制約する上でどの程度有用かの検討である。ベイズ推定を用いることで、熱伝導率、比熱、熱膨張率といったパラメータが海洋プレートや東北地方沈み込み帯の温度構造に及ぼす影響を、その不確かさまで含めて定量的に予測可能であることを示した。この内容についてまとめた論文1編を国際誌で発表した(Morishige, 2022, GJI)。2つ目として、将来的にPINNを適用することを見据えて、有限要素法を用いた中央海嶺-トランスフォーム断層系におけるマントル枯渇度の3次元分布の予測を行った。ここでマントル枯渇度とは、マントル岩石からメルトにどの程度元素が移動したかを意味する。プレート拡大速度やトランスフォーム断層の長さなどを系統的に変化させ、それらが枯渇度に対する影響を調べた。この内容についてまとめた論文1編を国際誌で発表した(図2、Morishige, 2024, G-Cubed)。

図2：枯渇度の空間分布

赤色ほど枯渇度が高いことを示す。モデル中央の黄色部分がトランスフォーム断層とその延長である断裂帯に対応する。



<引用文献>

- ① M. Raissi, P. Perdikaris, G. Karniadakis, Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.* 378, 2019, 686-707.
- ② E. Haghighat, R. Juanes, SciANN: A Keras/TensorFlow wrapper for scientific computations and physics-informed deep learning using artificial neural networks, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 373, 2021, 113552.
- ③ L. Sun, H. Gao, S. Pan, J-X. Wang, Surrogate modeling for fluid flows based on physics-constrained deep learning without simulation data, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 361, 2020, 112732.
- ④ P. Escapil-Inchauspé, G. Ruz, Hyper-parameter tuning of physics-informed neural networks: Application to Helmholtz problems, *Neurocomputing*, 561, 2023, 126826.
- ⑤ Morishige, M., The thermal structure of subduction zones predicted by plate cooling models with variable thermal properties, *Geophysical Journal International*, 229, 2022, 1490-1502.
- ⑥ Morishige, M., Spatial variations in the degree of upper-mantle depletion in a mid-ocean ridge-transform fault system, *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 25, 2024, e2023GC011227.

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 2件）

1. 著者名 Morishige M	4. 巻 229
2. 論文標題 The thermal structure of subduction zones predicted by plate cooling models with variable thermal properties	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Geophysical Journal International	6. 最初と最後の頁 1490 ~ 1502
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1093/gji/ggac008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Morishige M.	4. 巻 25
2. 論文標題 Spatial Variations in the Degree of Upper Mantle Depletion in a Mid Ocean Ridge?Transform Fault System	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Geochemistry, Geophysics, Geosystems	6. 最初と最後の頁 e2023GC011227
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1029/2023GC011227	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 Manabu Morishige
2. 発表標題 Thermal structure of the Tohoku subduction zone: effects of plate cooling models
3. 学会等名 Japan Geoscience Union Meeting 2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森重学
2. 発表標題 海洋プレート冷却モデルが東北地方沈み込み帯の温度構造に与える影響
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2021年大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森重学
2. 発表標題 中央海嶺-トランスフォーム断層系における溶け残りマントルの不均質性
3. 学会等名 日本地震学会2023年度秋季大会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

森重学のページ https://sites.google.com/site/manabumorishige/
--

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

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
---------	---------