物理過程に基づくニューラルネットワークを用いた モデル残差項の学習

Learning Model Discrepancy in Physics-guided Neural Networks

田中潤也*1	冨田 智彦 * ²	沼尾 正行 * ³	福井 健一* ³
Junya Tanaka	Tomohiko Tomita	Masayuki Numao	Ken-ichi Fukui

*¹大阪大学大学院情報科学研究科 Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University

*²熊本大学大学院先端科学研究部 Faculty of Advanced Science and Technology,Kumamoto University

*³大阪大学産業科学研究所 The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University

Recent machine learning models such as deep learning become complicated and difficult to understand the meaning of learned weights. And also, there is a possibility of obtaining output ignoring the prior knowledge because machine learning model is learned from the observed data including the noise outlier. Especially in the natural science field exploring the principle, non interpretable model cannot be a useful model unless the model has descriptiveness even if model could perform well with high accuracy. On the other hand, numerical simulation using physical model is difficult to predict long-term due to the model discrepancy. In order to solve such disadvantages, we focused on the method that integrate machine learning model and physical model. This paper proposes the algorithm that can predict two components, namely outputs based on the law of physics and their model discrepancy. As an example, we used on predicting winds in the upper troposphere from thermal wind equations.

1. はじめに

近年,観測データからパターンを取得し,未知のデータに対 して予測・分類を行う機械学習が数多くの分野で使用されてい る.しかし,機械学習システムでは、ノイズ外れ値を含む観測 データから学習しているため既知の法則性を無視した出力を得 る可能性がある [1]. また, ニューラルネットワークに基づく 深層学習では、予測・分類は高精度で行える一方で、学習モデ ルが複雑になり人間がモデルを解釈することが困難になると いう欠点があった [2]. 特に原理を探求する自然科学分野では, 予測や分類において高い精度が得られたとしても、原理を理解 できなければ有用なモデルを獲得できたとは言えない. 一方 で、物理モデルによる数値シュミレーションでは、自然科学の 法則性を満たす微分方程式を近似的に解くことで予測を行う. 数値シュミレーションでは短期的な予測は高精度で行えるが, 長期的な予測は高精度に行えないという欠点がある.これは数 値解析で用いた近似値に含まれる誤差が時間発展とともに増幅 するためである.

本研究では、自然科学分野で使用される物理モデルを機械 学習モデルに統合することにより、このような問題点を解決す る手法に着目した [3].本稿では、予測したい変数のみを教師 データとして与え、機械学習モデルからの予測値の中で物理モ デルで表すことのできる支配的な要素と、物理モデルのモデル 残差を表すことのできるアルゴリズムを提案する。例として、 対流圏上層の風を温度風方程式から予測する例に着目した.対 流圏上層の風ベクトルのみを教師データとして与え、温度風 方程式に基づく地衡風成分とそれ以外の非地衡風成分の特徴

 連絡先:田中 潤也,大阪大学,産業科学研究所沼尾研究室, 〒 567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘 8-1, Tel: 06-6879-8426,Fax: 06-6879-8428, E-mail: (surname)@ai.sanken.osaka-u.ac.jp





を捉え,かつ高精度に予測できるアルゴリズムを提案する.本 手法は,学習済みモデルの解釈を与える手法 [2] などとは異な り,損失関数に既知のモデルに基づく制約を導入し学習器の出 力を制御することで,学習器に対してある種の透明性を与えて いる.

2. 問題設定

2.1 通常の教師あり学習(回帰問題)の枠組み

ー般的な教師あり学習は図 1(a) で示すように, n 個の 入力 $x_i \in X$ と出力 $y_i \in Y$ の組みを学習データ $D = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$ として,この学習データから写像関 数 $f: X \mapsto Y$ を得ることである、以下に示すように損失関数 $\ell: Y \times Y \mapsto \mathbb{R}$ を最小化する関数 f^* を学習データを用いて求 める、

$$f^* = \underset{f \in \mathcal{F}}{\operatorname{arg\,min}} \sum_{i=1}^n \ell(f(x_i), y_i) \tag{1}$$

2.2 物理モデルによる制約を導入した枠組み

図 1(b) で示すように、物理モデルを制約として損失関数に 加えることにより、教師データなしで写像関数 $f_1: X \mapsto Y$ を 得る先行研究がある [4]. 物理法則に従う制約を加えた損失関 数 $g: X \times Y \mapsto \mathbb{R}$ を使用することによって、出力 y_i の構造



図 2: 物理モデルとモデル残差項成分を導入した枠組み

に関する事前知識をモデル化する.この枠組みでは,事前知識 が関数の中で固有の性質を持っているという前提のもと,直接 y_i を与えず関数 f_1^* を求める.

$$f_1^* = \operatorname*{arg\,min}_{f_1 \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^n g(f(x_i), x_i)$$
 (2)

2.3 物理モデルとモデル残差項成分を導入した枠組み 2.2 節では予測する現象が既知の物理法則によく従っている と仮定している.しかし,実際の物理現象では物理法則を満た す部分だけでなく,法則に従わない物理モデルのモデル残差が 存在する.本研究では,入力 x_i と対応する出力 y_i ,物理モデ ルで使用され計算により導くことができる変数 p_i を用いて物 理法則に従う損失関数 $h: Y \times Y \times P \mapsto \mathbb{R}$ を使用する.図 2 で示すように,法則に従う出力 y_i を得ることができる関数 $f_{n1}: X \mapsto Y$ と,その物理モデルのモデル残差の出力 $y_{\delta_i} \in Y$ を得られる関数 $f_{n2}: X \mapsto Y$ を同時に取得できるアルゴリズ ムを提案する.このモデル残差項は,教師データの正解出力値 と物理モデルの出力値の差とする.二つの関数はそれぞれ以下 に示す損失関数から取得される.

$$(f_{n1}^*, f_{n2}^*) = \arg\min_{f_{n1}, f_{n2} \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^n h(f_{n1}(x_i) + f_{n2}(x_i), y_i, p_i) \quad (3)$$

3. 関連研究

本章では,自然科学分野で使用されている物理モデルと機 械学習を統合させることによって,双方の様々な課題を解決し ている先行研究について述べる.

3.1 ドメイン知識に基づく教師あり学習

Stewart らは、単純な運動方程式や既知のルールなどのドメ イン知識を畳み込みニューラルネットワークの損失関数に制約 条件として統合させることによって、教師データなしの観測 データから教師あり学習を行う枠組みを提案した [4]. 深層学 習などのニューラルネットワークを用いた機械学習モデルは、 高い精度で予測・分類を行える一方で、大量の教師データが必 要であるという問題があった.事前に観測データに潜むパター ンがある程度把握できている場合に、ドメイン知識から制約を 作り教師データなしで学習できる枠組みを提案している.一例 として、運動方程式を制約として損失関数に加えることによっ て物体の放物線運動をラベル無しで推定しているものがある.

この先行研究では、教師あり学習の問題点である教師デー タを使用せずに学習する方法に焦点が置かれ、高精度な予測が 行えている訳ではない.また,扱っている例も単純な運動方程 式やルールなど,シンプルなものが多い.本研究では放物運動 より複雑な風予測を対象とすしており,また学習データも大規 模なものを使用している.

3.2 科学的な事前知識による学習の設計

Bzenac らは、海面の温度予測という例を用いて、物理モデ ルから得られた事前知識により効率的なモデルを設計する手 法について提案した [5].外乱のない理想的な海面の温度変化 は、移流拡散方程式で近似できると仮定できる、学習モデルの 出力を直接温度変化とするのではなく、移流拡散方程式の変化 量を予測することにより、精度の良い学習モデルを構築する手 法を提案している.物理モデルに基づく数値シュミレーション での予測は、直近の時間の予測値は精度よく予測を行える一 方で、時間発展とともに誤差が拡大するという問題があった. Bzenac らの提案した手法では、一般的な機械学習の予測値だ けでなく、数値シュミレーションでの予測値と比較してもこの ような問題に対して有用であることが示されている.

この先行研究では,移流拡散方程式が支配的となる領域に なるように季節性等を消去する前処理が行われている.また, 移流拡散方程式のモデル残差項は考慮されていない.

3.3 機械学習による RANS モデルのモデル残差項の 推定

物理モデルによる数値シュミレーションは様々な工業分野でも 応用されている. レイノルズ平均モデル (Reynolds Averaged Navier-Stokes: RANS) シミュレーションは, 航空宇宙船や ガスタービンの設計,最適化,評価に広く使用されてる.しか し、RANS モデルは近似モデルであり、モデルの信頼性は変 数の値に依存し,使用するドメインによって大きなばらつきが ある. Wu らは,機械学習モデルによりこのような物理モデル の法則性に従わないモデル残差項を推定する手法を提案した [6]. データからモデル残差項を推定することにより RANS モ デルによる高精度な予測を行った.この先行研究では,機械学 習モデルは全体の予測値ではなくモデル残差項のみを推定して いる.一方本研究では不一致成分のみではなく,同時に物理法 則に従う成分の出力も得ることができるアルゴリズムを提案し ている.両方を同時に機械学習で扱うことで,直接観測可能な 変数と,方程式で扱う物理量(運動量など)を結び付けること ができ,設計や最適化にフィードバックをかけやすくなるとい う利点がある.

4. 温度風方程式を用いた地衡風予測

本研究では温度風方程式を用いた対流圏上層の風を予測す るタスクに着目した.本研究では風ベクトルのみを教師データ として与え、温度風方程式に基づく地衡風成分とそれ以外のモ デル残差項、すなわち非地衡風成分の特徴を捉え、かつ高精度 に予測できる手法を提案した.微分方程式で近似することがで きること、またデータセットが容易に入手できるという観点か ら、温度風方程式を使用した.以下に地衡風と温度風・温度風 方程式の関係性について述べる.

4.1 地衡風

地衡風とは、気圧傾度力とコリオリ力の釣り合いの状態で吹 いている風である.気圧差がある平面において、気圧傾度力に 比例する強さの地衡風が発生する.気圧傾度力は気圧の高い方 から低い方へ向かって等圧線に直角に働き、コリオリの力は北 半球では風の進行方向右向きに(南半球では左向きに)働く. それゆえ地衡風は等圧線に沿って北半球では気圧の高い方を右 手に(南半球では左手に)見る向きに吹く.中緯度上空では, この地衡風と実際の風の間に10パーセント程度の相違がある. この相違分,すなわち非地衡風成分が大気に収束・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.

4.2 温度風

温度風とは大気内の温度差が原因として生じる,高度の異 なる2点での地衡風の差分ベクトルのことである[7].あくま で差のことであり,実際にそのような風が吹いているわけでは ない.気圧が一様であるが気温は一様ではない平面を考えたと き,気圧が一様であるから気圧傾度力は働かず,この平面上で は風は吹かない.一方で静水圧平衡の関係式から気温が低い ところほど高度が上がった時の気圧の下がり方は大きい.その ため,その平面の上空では気温の高いところの上空が高気圧, 気温が低いところの上空が低気圧となり,地衡風の関係より北 半球では気温の高いところを右手(南半球では左手)に見るよ うに風が吹く.

4.3 温度風方程式を用いた地衡風予測

温度風方程式を用いた対流圏上層の風を予測するタスクに 着目した.二点間の気圧 p_{i-1} , p_i ($p_{i-1} < p_i$ 上の風ベクトル を $\mathbf{V}_{\mathbf{P}_{i-1}}$, $\mathbf{V}_{\mathbf{P}_i}$ とし,温度風方程式を用いた対流圏上層の風 の予測式は以下のようになる.

$$\mathbf{V}_{\mathbf{p_{i-1}}} = \mathbf{V}_{\mathbf{p_i}} + \frac{R}{F} \ln \left[\frac{p_i}{p_{i-1}}\right] \mathbf{k} \times \nabla_p \bar{T} + \Delta \mathbf{V}_{\mathbf{p_{i-1}}} \qquad (4)$$

 \bar{T} は二気圧間の積算平均気温, Rは乾燥空気の比気体定数, Fはコリオリパラメータ, \mathbf{k} は単位ベクトルを表す. 温度風方 程式での支配的な法則性を持つ要素は温度勾配 $\nabla_p \bar{T}$ であり, $\Delta \mathbf{V}_{\mathbf{p}_{i-1}}$ が温度風方程式によるモデル残差項である.

5. 提案手法

提案手法の全体のアーキテクチャを図3に示す.図で示すように、 f_{n1} , f_{n2} はそれぞれ二つのネットワーク SharedNN, NonSharedNN からなる.それぞれのネットワーク Cld共通 した特徴を学習する SharedNN をもつ.一般的に、物理モ デルで表すことができないモデル残差の成分は物理モデルの 支配的な成分と関係し合っていることが多い.提案手法では、 SharedNN を用いることによって、この関係性を学習できる ようにしている. f_{n1} と f_{n2} を交互に学習させパラメータを更 新するが、SharedNN のパラメータのみ両方の学習で更新す る.これにより、支配的な要素と物理モデルで表すことのでき ないそれ以外の要素の共通した特徴を学習できるようにした. SharedNN は五層の畳み込み層、NonSharedNN はそれぞ れともに五層の逆畳み込み層からなる.また、フィルタサイズ は全て 3 × 3 とした.各層の出力の値には活性化関数である LeakyRelu 関数を加えている.

次に, f_{n1} , f_{n2} の損失関数について説明する. f_{n1} は物理 法則に従う成分を表す. 温度風方程式を用いた上層の風予測の タスクでは,物理法則に従う支配的な成分は地衡風成分であ る. 地衡風成分の中で最も支配的な成分は温度成分である. そ こで, f_{n1} からの出力は温度成分とし, R, f, p_{i-1} , p_i (p_{i-1} $< p_i$) は計算により与えられるものとする. f_{n1} からの出力を $\hat{f_{n1}}(x_j)$ とし,損失関数を式 (5) のように定義した.



図 3: 全体のアーキテクチャ

$$\mathbf{L}_{\mathbf{f_{n1}}} = \sum_{i=1}^{k} |\mathbf{V}_{\mathbf{P_{i-1}}} - \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{P_{i-1}}}| = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} |\mathbf{V}_{\mathbf{P_{i-1}}} - \{\mathbf{V}_{\mathbf{P_{i}}} + \frac{R}{F} \ln(\frac{p_{i}}{p_{i-1}}) \nabla \hat{f_{n1}}(x_{j})\}|.$$
(5)

 f_{n1} の学習では,式 (5) で示すようにモデル残差項成分を考 慮せずに学習を行う.次に, f_{n2} はモデル残差項成分を表す. 温度風方程式を用いた上層の風予測のタスクでは,モデル残 差項成分は非地衡風成分である. f_{n2} からの出力を $\hat{f_{n2}}(x_j)$ と し,損失関数を式 (6) のように定義した.

$$\mathbf{L_{f_{n2}}} = \sum_{i=1}^{k} |\mathbf{V_{P_{i-1}}} - \hat{\mathbf{V}}'_{\mathbf{p_{i-1}}}|$$

= $\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} |\mathbf{V_{P_{i-1}}} - \{\mathbf{V_{P_i}} + \frac{R}{F} \ln(\frac{p_i}{p_{i-1}}) \nabla f_{n1}(x_j) + \hat{f_{n2}}(x_j)\}|$
(6)

 f_{n2} の学習では、式(6)で示すように f_{n1} で計算した残差を 計算する.また、この時 $\nabla f_{n1}(x_j)$ の値を使用するが、 f_{n1} に 関しては誤差逆伝播を行わず、 f_{n2} のみ誤差逆伝搬を行いパラ メータを更新する.この二つの損失関数により、式(5)により まず物理法則に従う部分(地衡風成分)を学習し、式(6)によ り残りのモデル残差項成分(非地衡風成分)を学習する.

6. 実験

6.1 データセット

データセットには、ERA-Interim を使用した. ERA-Interim は全世界の気象に関する様々な変数からなるデータセットであ り、データ同化を用いて取得されている [8]. ERA-Interim は 完全な観測データではないが、現在手に入る最も詳細なデータ であるため使用した. ーカ月の月平均データを使用しており、 学習データとして 1979 年 1 月から 2009 年 12 月までを使用 し、テストデータとして 2010 年 1 月から 2016 年 12 月までを 使用した. また、本実験では中緯度で表面が比較的均一な領域 に着目するため太平洋上の北緯 30 度~北緯 75 度、西経 150 度~東経 150 度の範囲のみ使用した. 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、湿度を使用した.

6.2 比較手法

提案手法との比較手法として, ERA-Interim の風の速度を 教師データとして与え, 直接観測値を予測するモデルを用い



図 4: 各出力値と観測値の定性的評価. (a) 観測値 (正解) (b) 提案手法による出力 (f_{n1}+f_{n2}) (c) 物理モデル成分の出力 f_{n1} (d) モデル残差項の出力 f_{n2}

た.また,学習率や学習回数は同一とし,同じネットワークと なるように五層の逆畳み込み層・畳み込み層からなる CNN を 使用した (ACNN).この他に,温度風方程式のみを用いて予 測したもの (TWE)も比較手法として使用した.

6.3 実験内容

提案手法の有用性を検討するため、以下の実験を行った. ERA-Interimの上層と下層の風の強さの差分と、提案手法によ る地衡風成分と非地衡風成分(式(7),(8))の差分、ERA-Interim の上層と下層の風の強さの差分を教師データとして学習させた 比較手法 (ACNN)と、温度風方程式のみで導かれた値につい て、Root Mean Squared Error による定量的評価および定性 的評価を行った.

7. 結果

7.1 定量的評価

RMSE を比較した結果を表1に示す.提案手法の精度がもっとも高く,次いで ERA-Interim を教師データとした CNN,温度風方程式を用いた計算結果の順となった.

表 1: Average RMSE

Method	RMSE	SD
Proposed	0.652	0.039
ACNN	0.679	0.038
TWE	1.682	0.182

7.2 定性的評価

図 4(a) および図 4(b) より, 定量的評価だけでなく定性的評価でも特徴を捉えた予測が行えていることがわかる.提案手法による物理モデルに基ずく出力と,物理モデルに基づかない出力値の一例を図 4(c) と図 4(d) に示す.図 4(c) では法則に従う安定した地衡風成分が得られており,図 4(d) では,法則性に従わないカオス的な成分が抽出できていることがわかる.気象学における知見では,温度風方程式の残差は本実験の対象領域においては 10 パーセント程度であり,そのベクトルは収束・発散の方向であることが知られており,図 4(d) の提案法によるモデル残差項の出力分布と一致する.定量的評価・定性的評価の結果から,提案手法は精度を保ったまま,物理法則に従う成分と従わない成分 2 つを分解して出力可能であることがわかる.

8. まとめ・今後の展望

本研究では,自然科学分野で使用される物理モデルを機械学 習モデルに統合することにより,機械学習の問題点を解決する 手法に着目した.本稿では,機械学習モデルからの予測値の中 で物理モデルで表すことのできる支配的な要素と,物理モデル で表すことのできないそれ以外の要素を得られるアルゴリズム を提案した.例として,対流圏上層の風を温度風方程式から予 測する例を使用し,実験の結果,他の手法と比較し精度を保っ たまま,予測値の中で物理モデルで表すことのできる支配的な 要素と,物理モデルで表すことのできないモデル残差項を獲得 できていることがわかる.

今後は物理モデルの支配的な要素と、物理モデルで表すこ とのできないモデル残差項の共通した特徴を含む SharedNN の解析を行っていく.また、本稿ではモデル残差項の定性的な 評価のみ行っており、定量的な評価は行っていない.データ駆 動科学では今後モデル残差項を支配する原理の究明が求めら れる.今後はモデル残差項成分の定量的な評価も行っていく. 現在本研究では上層の風の強さを推定する問題を扱っている. 今後は時間と空間に関する偏微分方程式(エネルギー保存則) など数多くの現象を扱えるよう拡張していく.

謝辞

本研究は物質・デバイス領域共同研究拠点の支援により実施 された.

参考文献

- Lazer, David and Kennedy, Ryan and King, Gary and Vespignani, Alessandro: The Parable of Google Flu: Traps in Big Data Analysis, pp.1203-1205, *Science* (2014).
- [2] Marco Tlio Ribeiro, Sameer Singh and Carlos Guestrin: "Why Should I Trust You?": Explaining the Predictions of Any Classifier, pp.1135-1144, KDD (2016).
- [3] A. Karpatne, G. Atluri, J. H. Faghmous, M. Steinbach, A. Banerjee, A. Ganguly, S. Shekhar, N. Samatova and V. Kumar : Theory-Guided Data Science: A New Paradigm for Scientific Discovery from Data, pp.2318-2331, *IEEE TKDE (2017)*.
- [4] Russell Stewart and Stefano Ermon: Label-Free Supervision of Neural Networks with Physics and Domain Knowledge, pp.2576-2582, AAAI(2017).
- [5] de Bezenac E Pajot A Gallinari P: Deep Learning for Physical Processes: Incorporating Prior Scientific Knowledge, pp.2576-2582, *ICLR*(2018).
- [6] Jian-Xun Wang, Jin-Long Wu, and Heng Xiao: Physics-informed machine learning approach for reconstructing Reynolds stress modeling discrepancies based on DNS data, pp.2576-2582, PHYSICAL REVIEW FLUIDS (2017).
- [7] John Marshall, Alan Plumb and Lodovica Illari: Thermal wind, *MIT PAOC(2003)*.
- [8] Paul Berrisford, Dick Dee, Paul Poli, Shinya Kobayashi, Sakari Uppala and Adrian Simmons: The ERA-Interim archive, ECMWF. (2011).