# PINNs(Physics-Informed Neural Networks)を使ったサロゲートモデルについて

NVIDIA Modulusレポート

2024年7月1日

株式会社アストライアーソフトウエア

# 概要

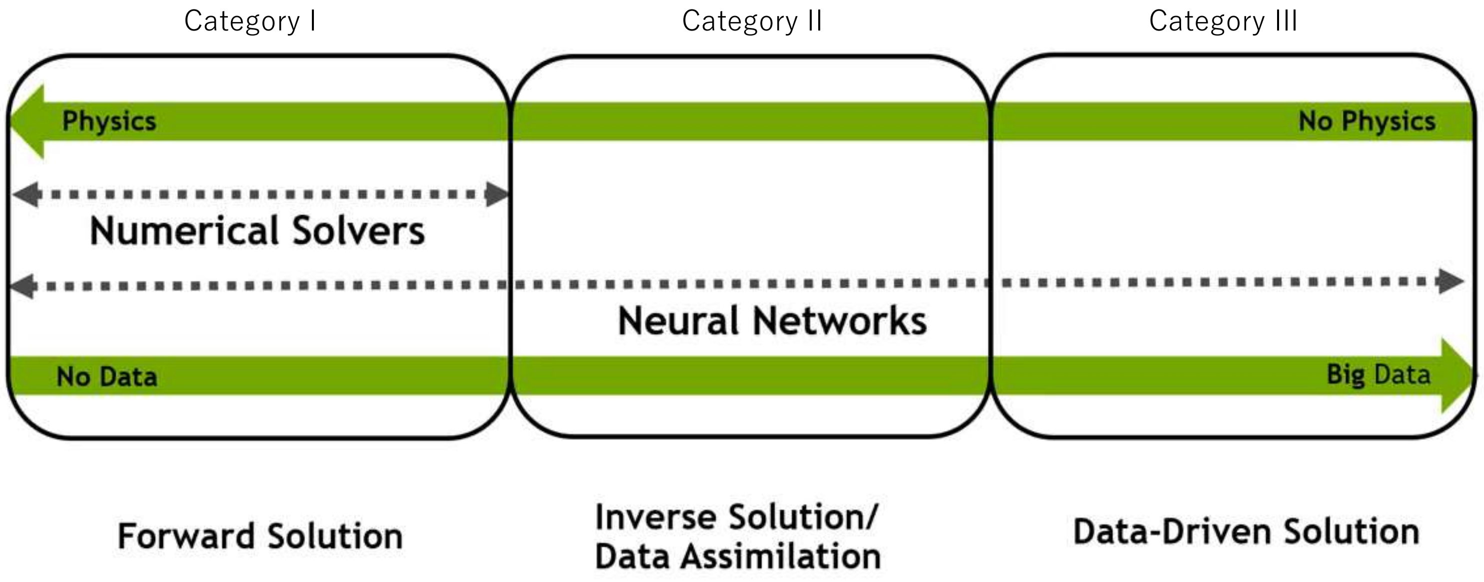
- PINNs(Physics-Informed Neural Networks)は、ニューラルネットワークに物理学的な制約式を組み込むことで、より正確な予測を目指した手法である。最近ではNVIDIAからPINNsモジュールのModulusが提供されるなど、注目を浴びつつある。
- 今回はNVIDIA Modulusを単純な片持ち梁静解析のサロゲートモデルに適用し、性能を評価した。
- PINNsのトレーニングを実施する場合、物理式のみで行う場合とFEM解析結果や理論解などのデータを合わせて参照する場合がある。今回は次ページの手順で検証を進めた。
- さらに本稿の最後に結論をまとめた。

# 検証手順

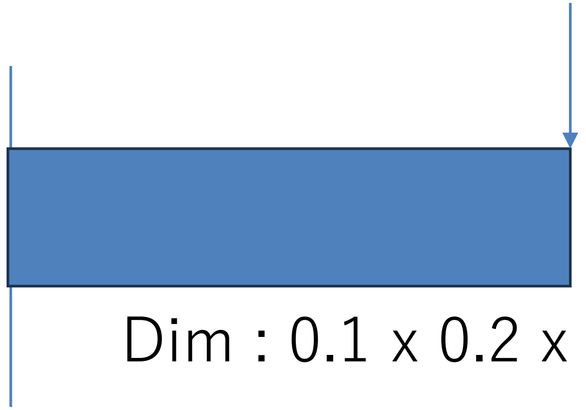
1. 形状を固定した片持ち梁モデルについて、物理式のみを損失関数に使用し、トレーニングを実施した。（5 ページ）
2. 良解が得られたため、トレーニング時間短縮を目指し、理論解参照データを損失関数に追加した。（9 ページ）
3. 理論解参照による時間短縮が確認されたため、形状の長さ方向をパラメータとし、形状変化の追従性を検証した。（10ページ）
4. 良解が得られず、理論解参照を追加した。精度は向上したが、梁の中央部などに精度不足があった。（12ページ）
5. 理論解参照位置を適切に増加し、さらに形状の3方向ともパラメータ化し、さらに高度な形状パラメータモデルを検証した。（15ページ）

# NVIDIA Modulus

- PINNsを活用するために、NVIDIA Modulusを使用し、カテゴリーI（データ参照なし）とカテゴリーII（データ統合/小規模データ参照）を使用して力学問題を解決する。



# 単純梁モデルによる検証



F = 1e5N

Dim : 0.1 x 0.2 x 1 m

Mat = E　: 210e9 Pa

nu : 0.3

理論値:

$$\delta_{\max} = \frac{FL^3}{3EI}$$

変位= 2.38 mm

- この問題は、PINNsを使用し、理論解データ参照なしにトレーニングを試みた。よって物理方程式のみを使用する。

# PINNに使用される方程式

- 使用する方程式はmodulusパッケージにすでに含まれている。"LinearElasticity"

**Equilibrium Equations**

The equilibrium equations in a 3D continuum are derived from the conservation of linear momentum. In the absence of body forces, the equations of equilibrium are given by:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} = 0$$

**Traction Boundary Conditions**

On a boundary surface with normal vector $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, the traction vector $\mathbf{t}$ is given by:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} n_x + \sigma_{xy} n_y + \sigma_{xz} n_z \\ \sigma_{yx} n_x + \sigma_{yy} n_y + \sigma_{yz} n_z \\ \sigma_{zx} n_x + \sigma_{zy} n_y + \sigma_{zz} n_z \end{pmatrix}$$

**3. Constitutive Relations (Hooke's Law for Linear Elasticity)**

For an isotropic material, the stress-strain relations (Hooke's law) in three dimensions are:

$$\sigma_{xx} = \lambda(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + 2\mu\epsilon_{xx}$$

$$\sigma_{yy} = \lambda(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + 2\mu\epsilon_{yy}$$

$$\sigma_{zz} = \lambda(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + 2\mu\epsilon_{zz}$$

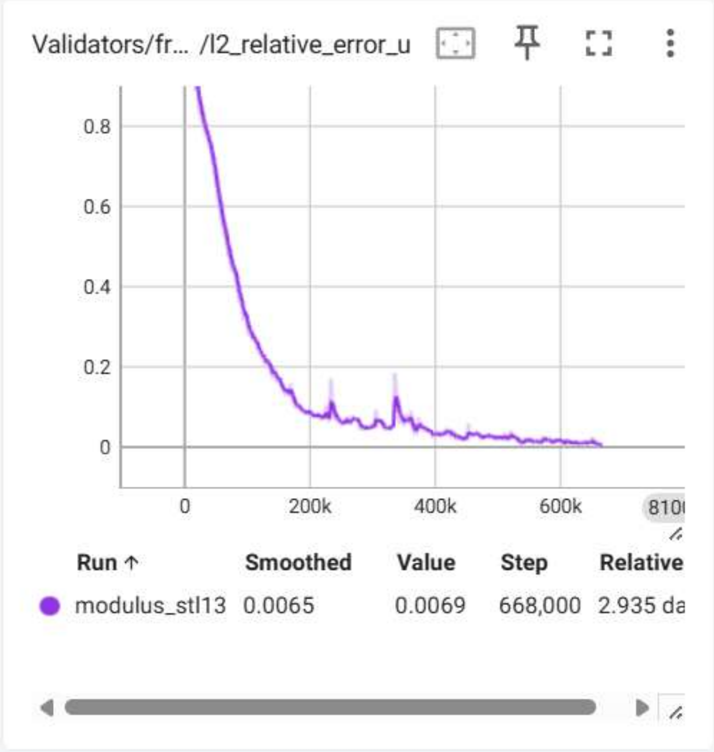
$$\sigma_{xy} = 2\mu\epsilon_{xy}$$

$$\sigma_{xz} = 2\mu\epsilon_{xz}$$

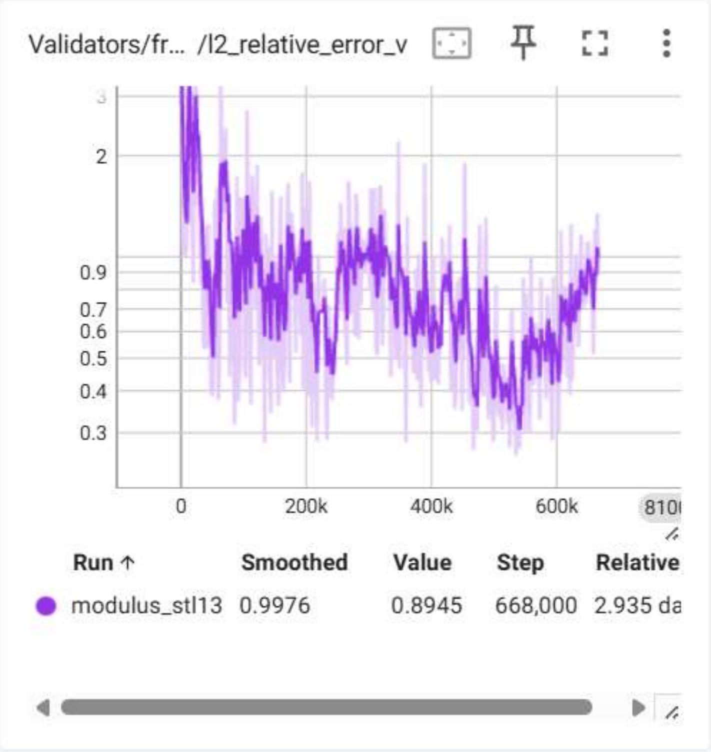
$$\sigma_{yz} = 2\mu\epsilon_{yz}$$

# トレーニングの進捗グラフ

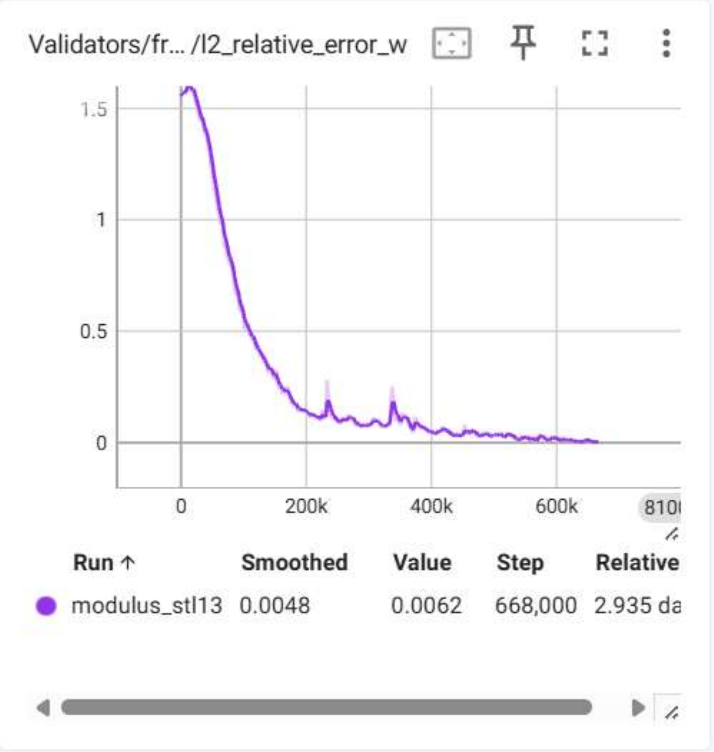
変位U（X方向）




変位V（Y方向）

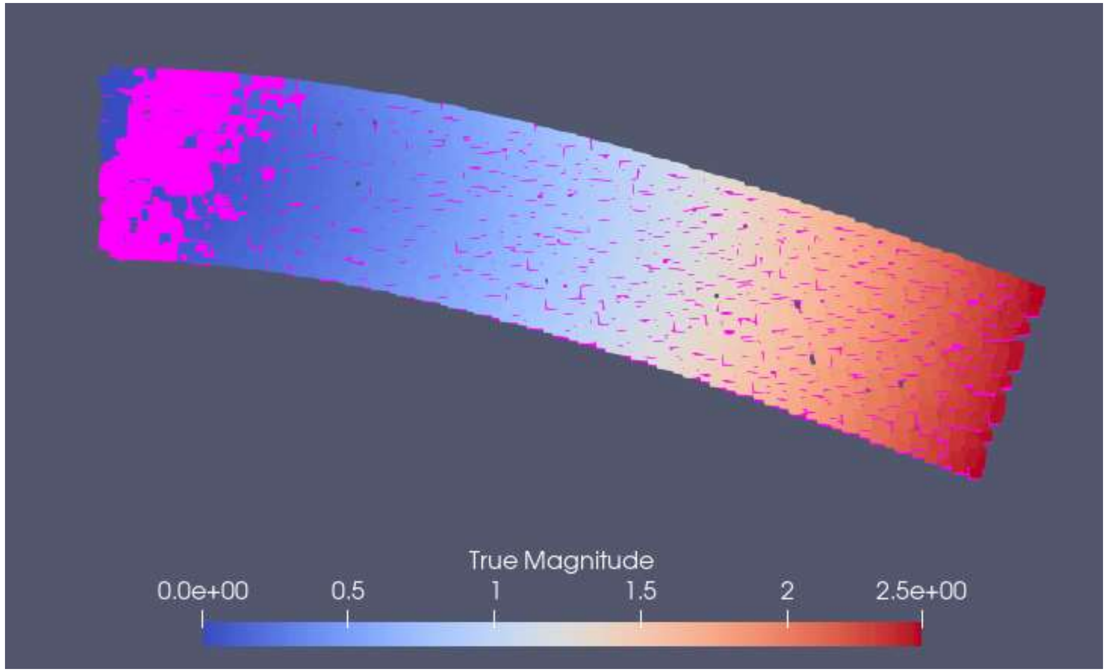


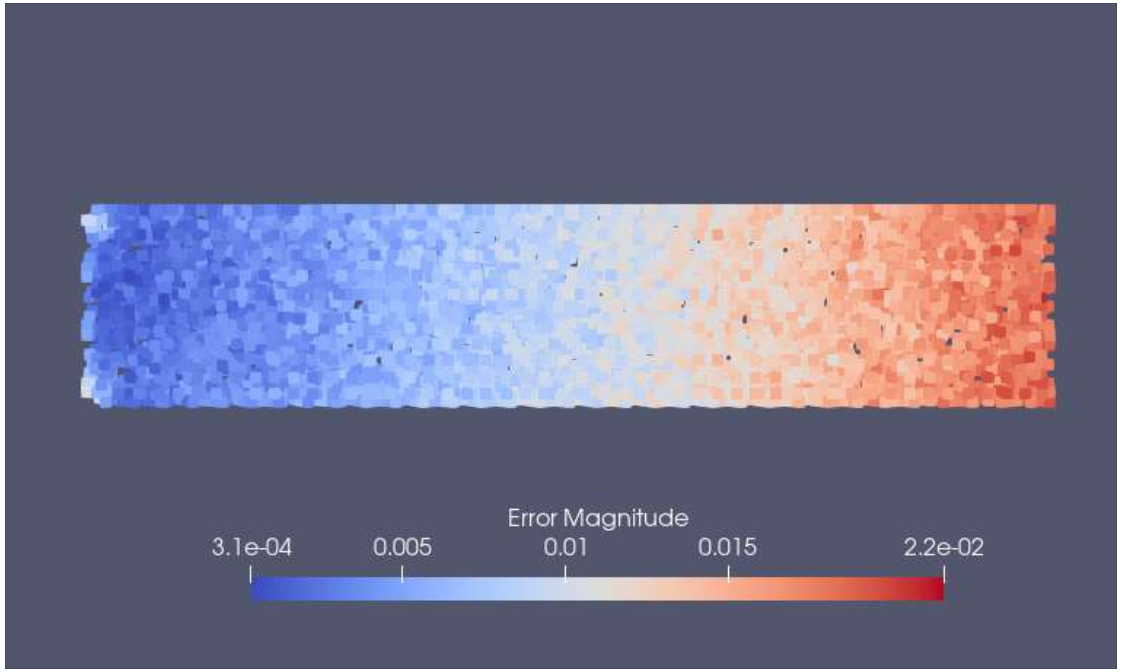

変位W（Z方向）




良い結果を出すためのトレーニング回数は500-600Kステップ必要

# 変位予測結果比較



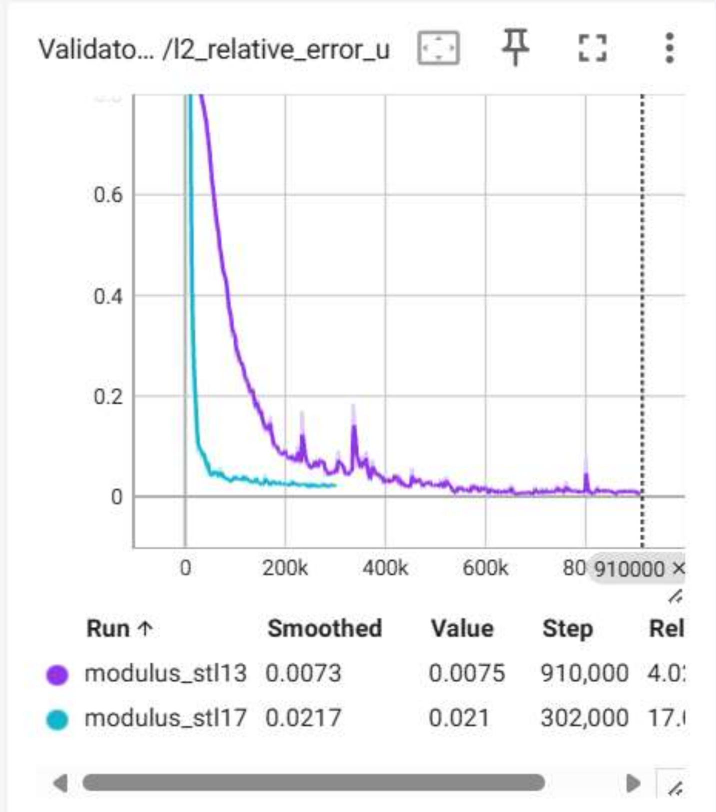

変位マグニチュード

誤差比較(FEA – PINNs)
Error < 1%

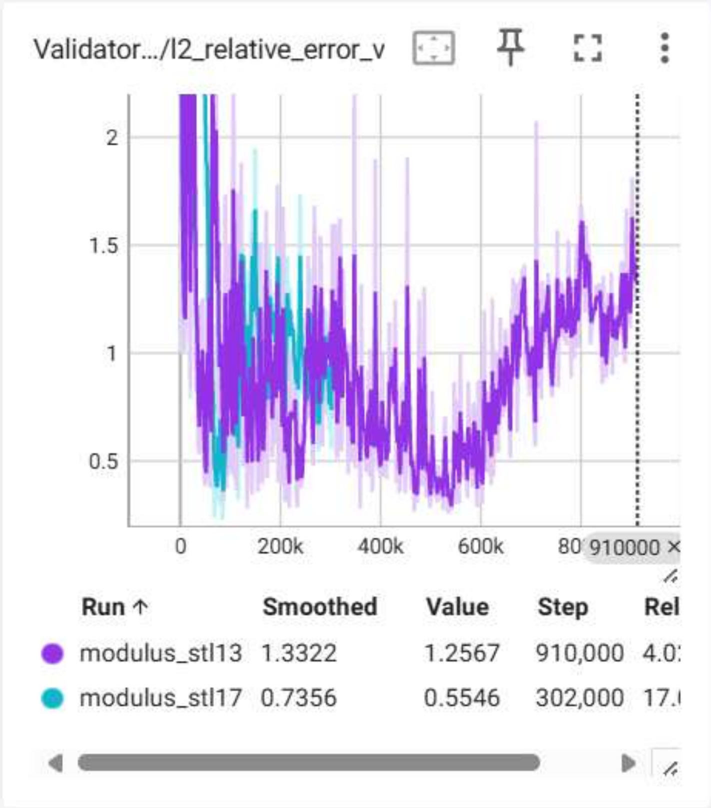
カラーコンター表示: FEA result
マゼンタ点表示: PINNs result

# 自由端に理論値を参照させ、トレーニング時間を削減する検証

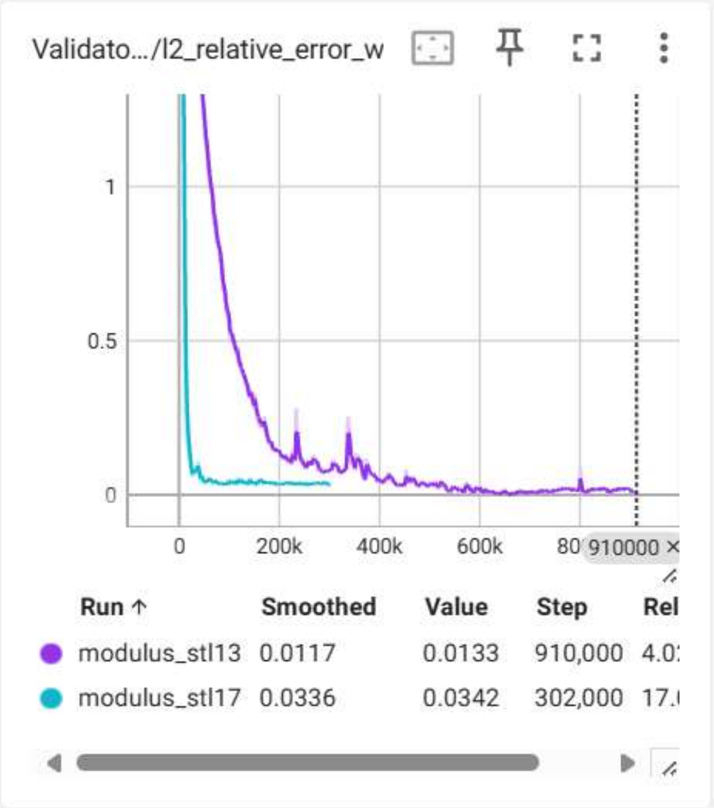
変位U（X方向）




変位V（Y方向）

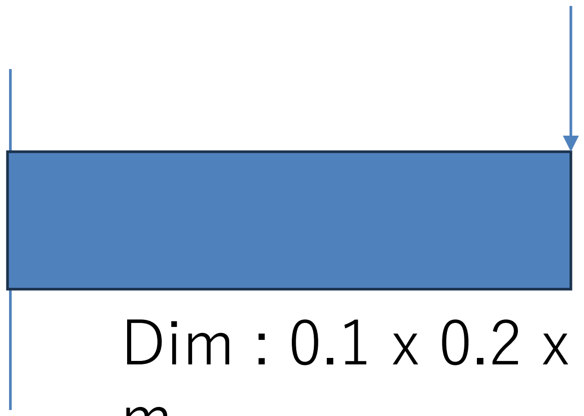



変位W（Z方向）




水色（理論解参照）紫（物理式のみ）
変位wの参照情報しか与えなくても、変位uも収束速度が向上する。

# 単純なパラメトリック形状による検証



F = 1e5N

Dim : 0.1 x 0.2 x **L** m

Mat = E　: 210e9 Pa

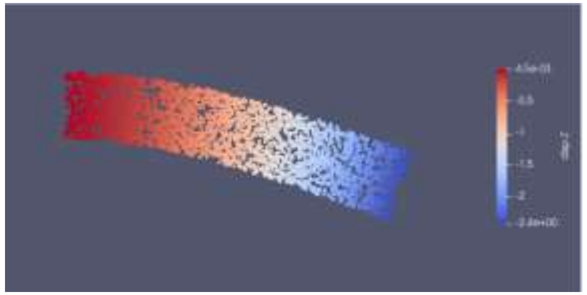
nu : 0.3

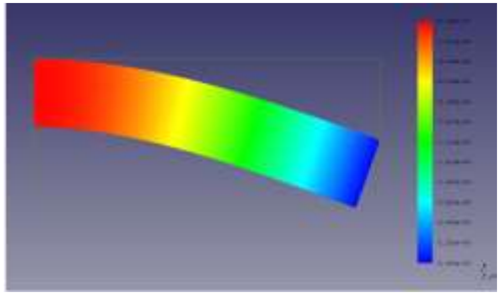
Lはパラメトリックな長さ:
トレーニングに使用するL : 1, 2, 3, 4, 5 m.

物理的損失のみを使ってトレーニングするため、
トレーニングデータは参照しない。

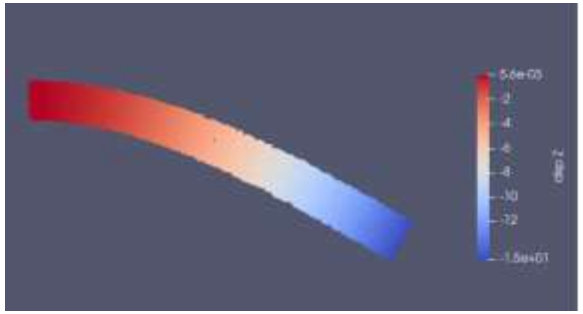
# トレーニング結果
# 左：PINNs　右：FEM

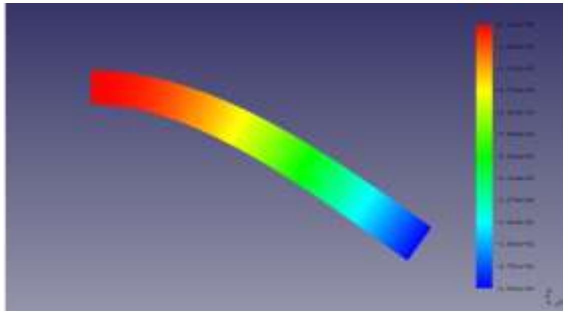
| Length | PINNs | FEM | Error |
| --- | --- | --- | --- |
| 1 m | -2.4 mm | -2.4 mm | 0.012 |
| 2 m | -15 mm | -19 mm | 0.2 |
| 3 m | -17 mm | -64 mm | 0.73 |
| 4 m | -16 mm | -152 mm | 0.89 |
| 5 m | -15 mm | -297 mm | 0.94 |

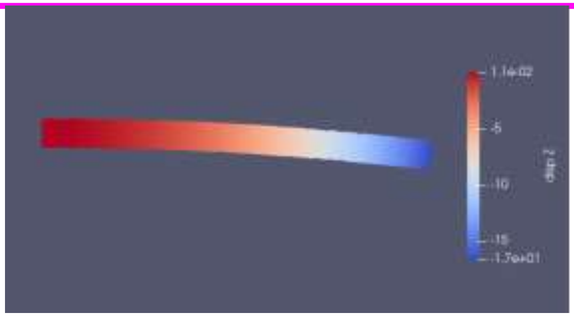


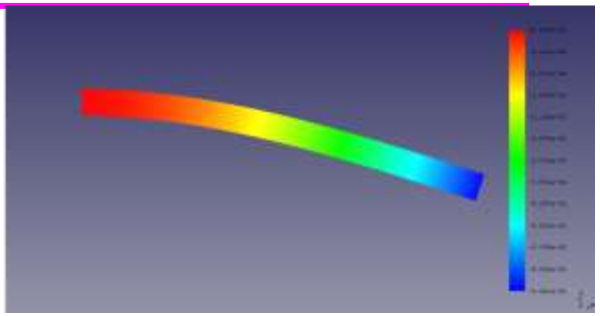


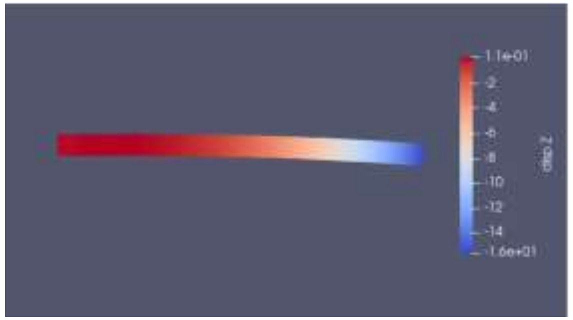
1m以外のPINNsの結果は、FEA結果に一致しない。

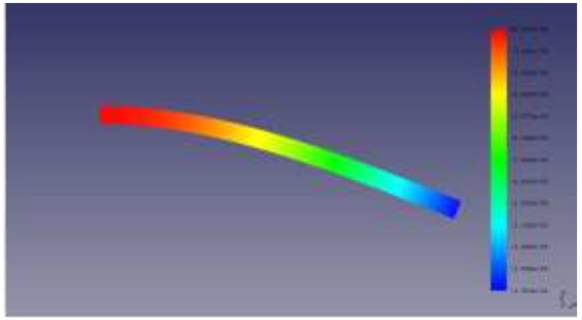


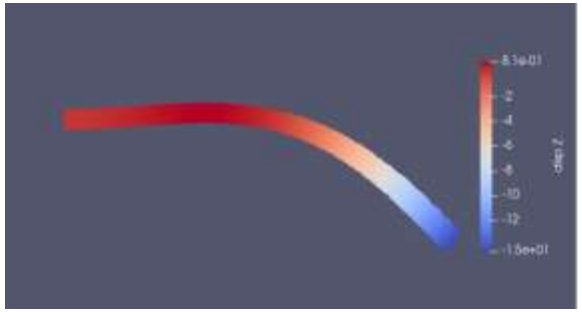


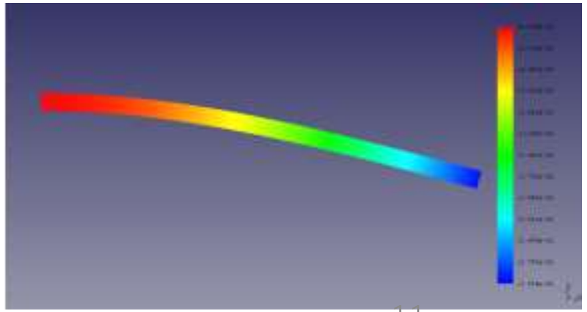




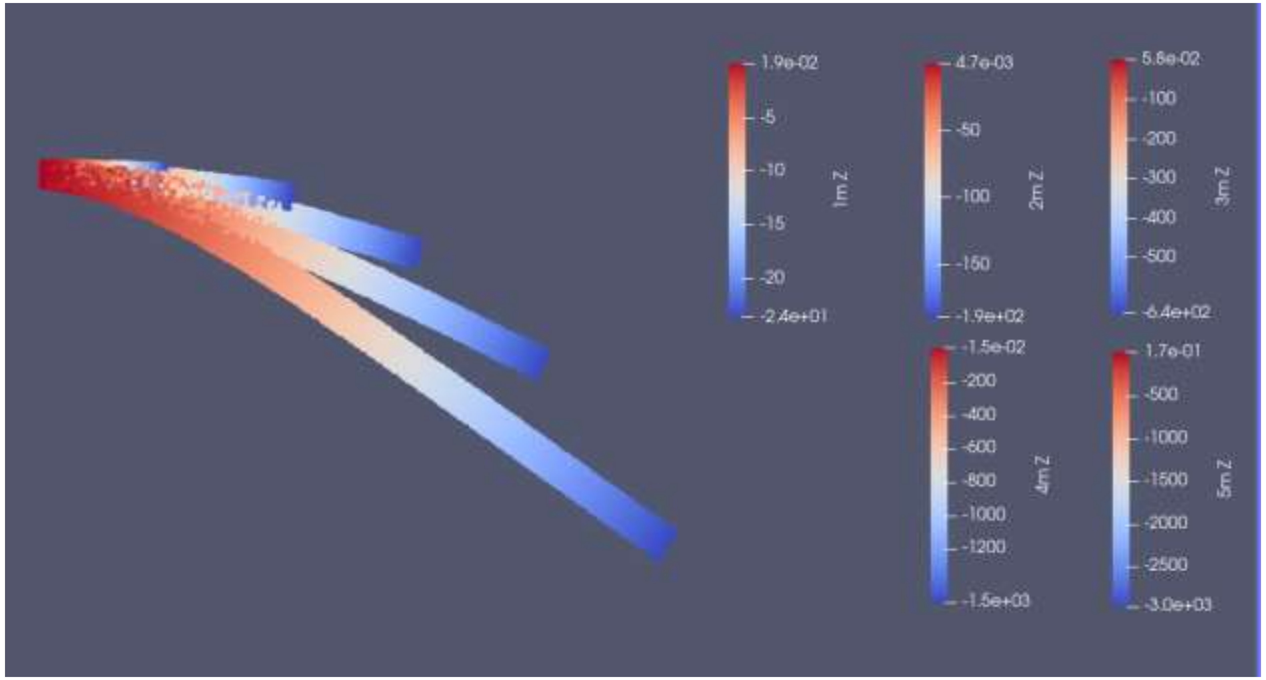








# パラメトリックモデルの自由端に理論値参照を追加した結果

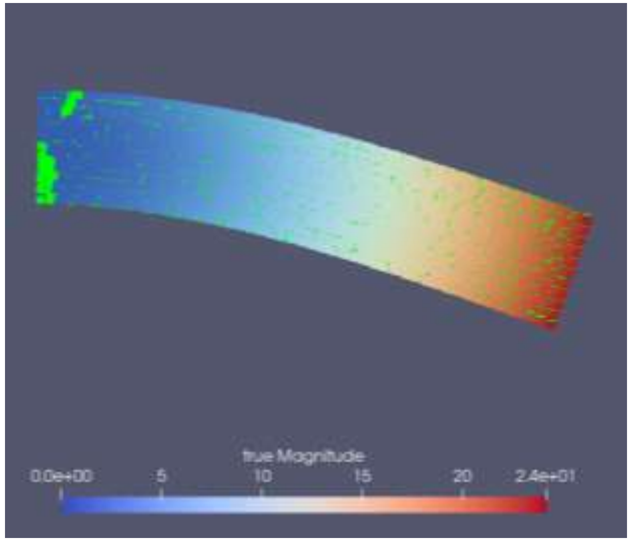



| Length | PINNs | FEM |
|---|---|---|
| 1 m | -2.4 mm | -2.4 mm |
| 2 m | -19 mm | -19 mm |
| 3 m | -64 mm | -64 mm |
| 4 m | -150 mm | -152 mm |
| 5 m | -300 mm | -297 mm |

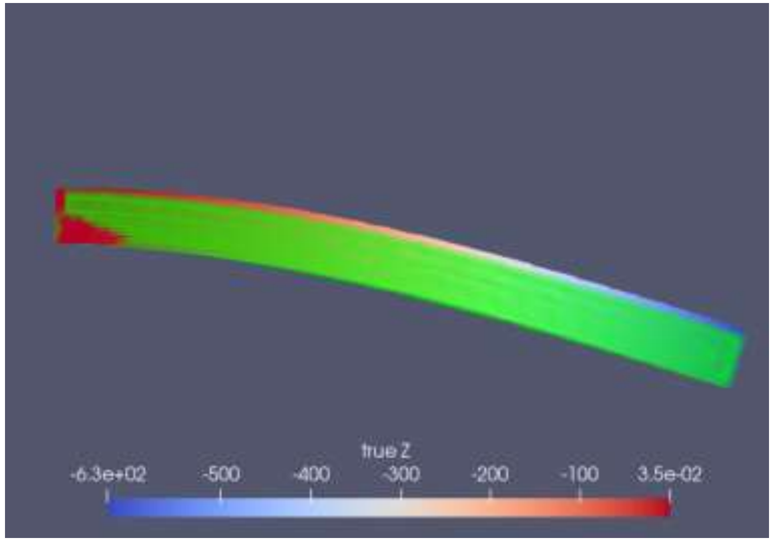
自由端で理論値を参照すると、PINNsの変位結果はわずか200kステップ未満で大きく改善している。

# 変位予測結果

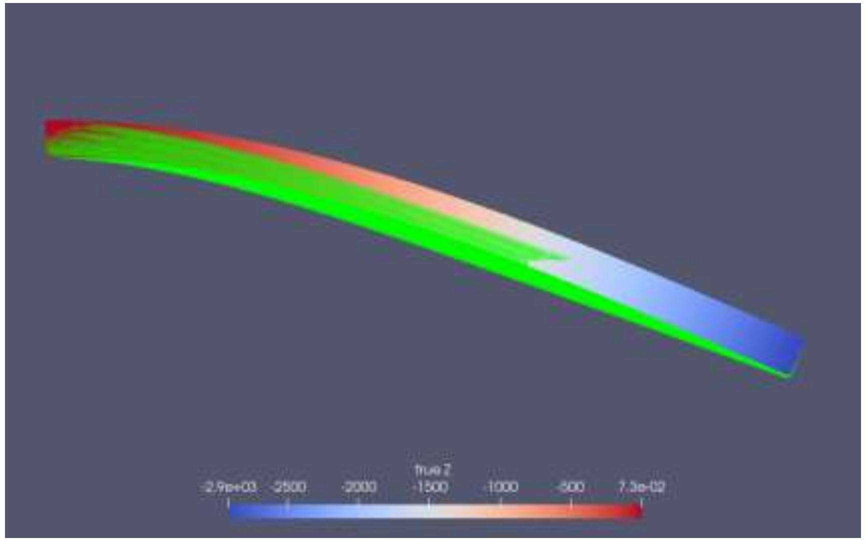
- 自由端の最大変位は良いが、少ないステップ数のトレーニングではまだモデル上の他の箇所に変位結果の乖離がある。




1 m length



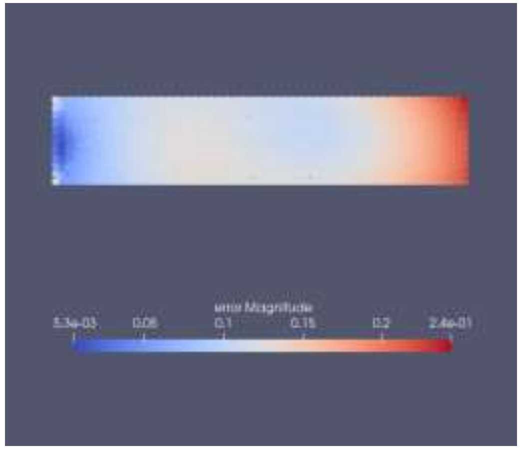

3 m length



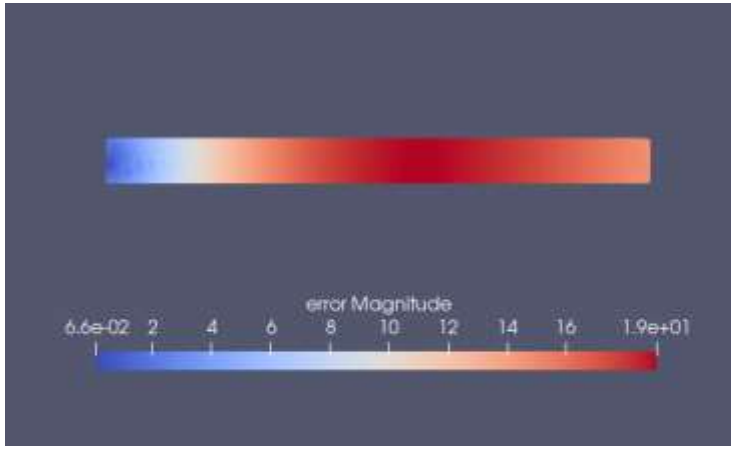

5 m length

カラーコンター表示: FEA result
緑点表示: PINNs result

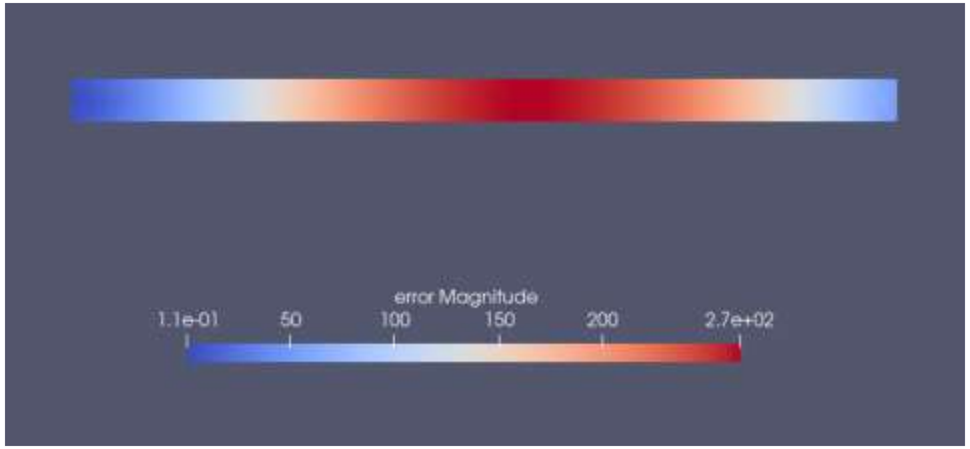
# 相対誤差分布



1 m length



3 m length



5 m length

結果は、長い時間トレーニングした方がより誤差が減少する。上記は200kステップの結果。
両端よりも中心位置に誤差が多いため、精度が端部から改善されている。

梁の曲げ挙動をニューラルネットワークに学習させるために、長さ方向中間位置の変位も参照すると効果があると考えられる。次のケーススタディで反映させる。

# 理論解データ参照パラメトリック形状検証　その２

F = 1e5N

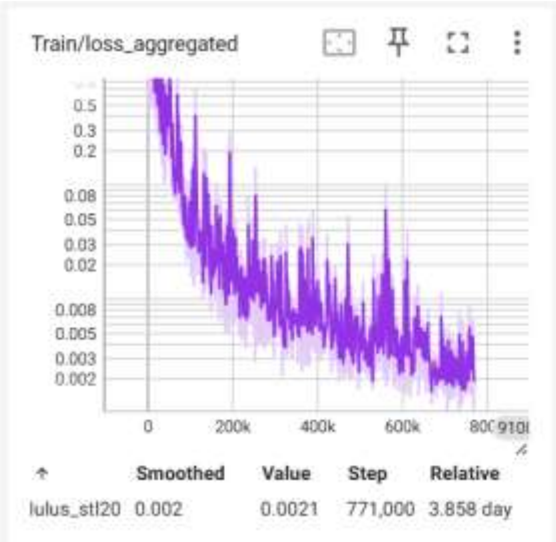
Dim : **w** x **h** x **L** m

Mat = E　: 210e9 Pa

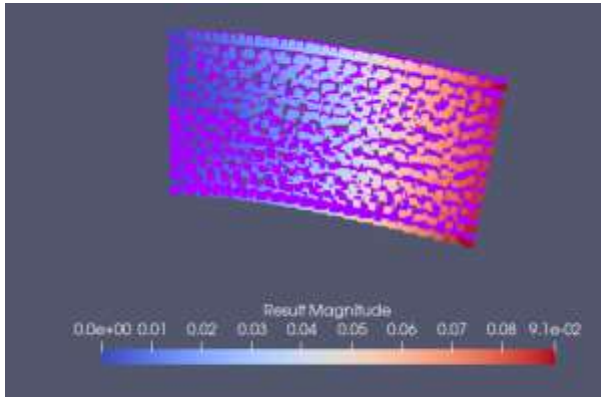
nu : 0.3

L,w,hはパラメトリックな長さ：
トレーニングに使用したL : 0.5, 1, 2 m.
トレーニングに使用したw: 0.1, 0.2, 0.3 m.
トレーニングに使用したh : 0.15, 0.25, 0.35 m.

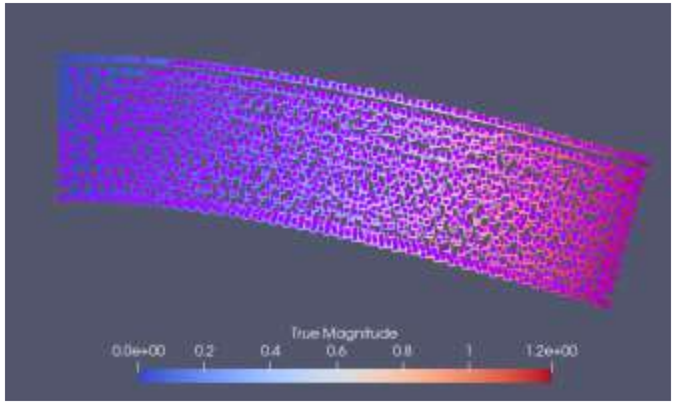
この学習の損失関数は、物理方程式、自由端の変位、中間の長さの変位から最適化されている。



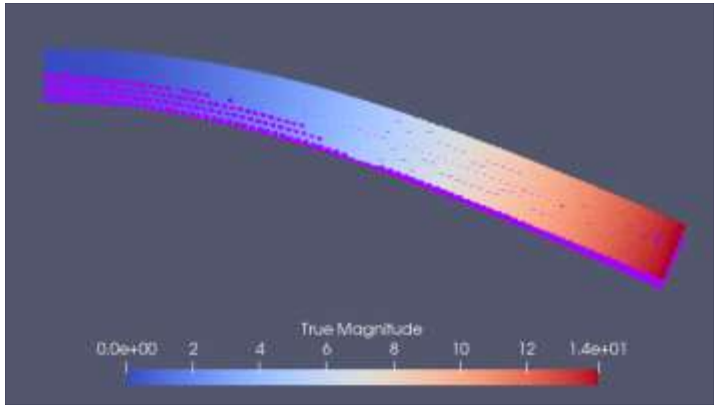
# トレーニングに使用した形状サイズの予測結果




0.2, 0.25, 0.5




0.1, 0.25, 1

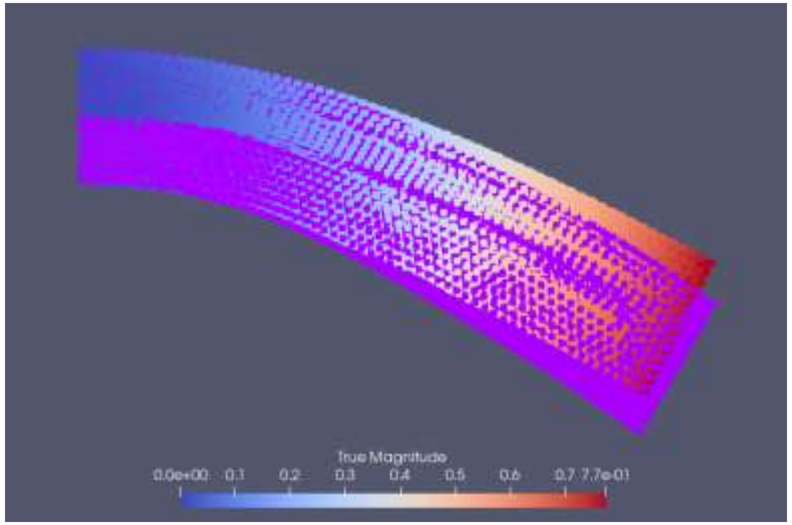



0.3, 0.15, 2

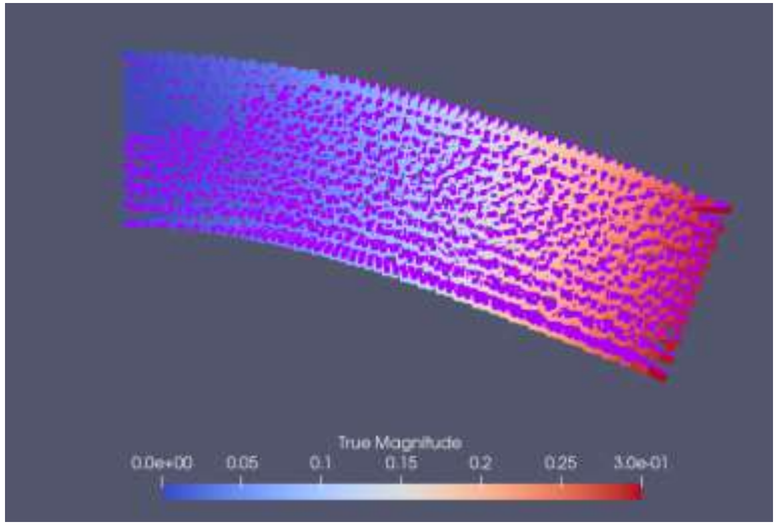
カラーコンター表示: FEA result
マゼンタ点表示: PINNs result

基本的にはPINNsの結果は FEA に近いが、いくつかの結果に違いが見られる。
ただし、FEAの結果とPINNsの結果を比較すると、理論値と比較してPINNsの結果の方が優れている。（FEM解でなく、理論値参照のため）

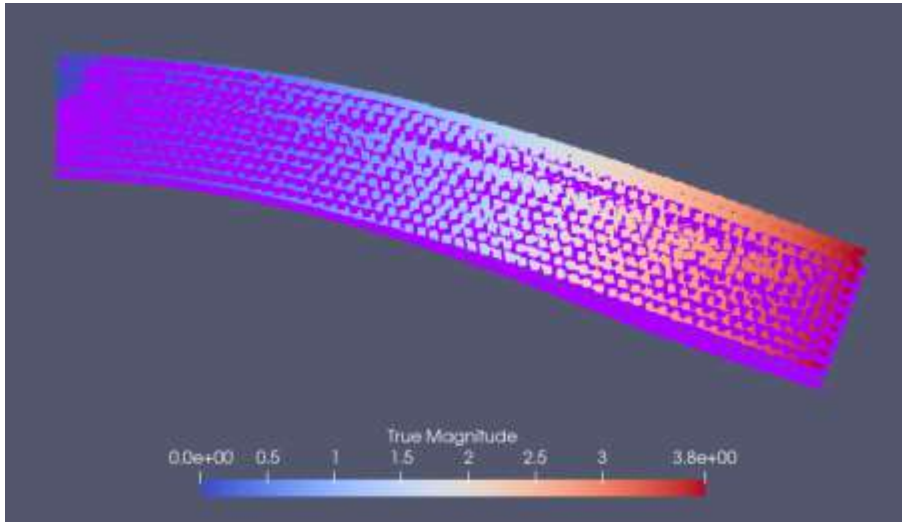
# ランダムな形状サイズの予測結果




(0.255, 0.322, 1.5)




(0.255, 0.222, 0.75)




(0.155, 0.222, 1.5)

カラーコンター表示: FEA result
マゼンタ点表示: PINNs result

トレーニングで使用したウェイトとパラメータを使用して、ランダムに未知の形状寸法を予測した結果。長さ0.75mでは良好な予測ができるが、長さ1.5mでは誤差が生じる。

# 結論

- NVIDIA Modulusは、単純な力学的問題に対するPINNsに使用することができた。
- いくつかの形状パラメータを含む形状でネットワークをトレーニングすれば、未知の形状の解を瞬時に予測できる可能性がある。
- トレーニングにかかる時間は長くかかりますが、トレーニングに何らかのデータ（FEA/実験）を参照すればトレーニング時間削減できる。

以上