

研究テーマ 深層学習を活用した偏微分方程式の逆問題における再構成法

島根大学 数理・データサイエンス教育研究センター 古屋貴士

研究の目的

研究対象は、偏微分方程式の逆問題である。これは、非破壊検査の探傷器、医療診断のトモグラフィーなどの非観測物の可視化に関するテクノロジーへの発展が期待されている重要な数学の問題である。

具体例で説明を加えると、非破壊検査では、建物の老朽化の原因となるコンクリート内部の剥離、ひび割れ、空洞などの人間の目では見ることができないものを調べるため、外側の探傷器から超音波を放ち、散乱波を観測してコンクリートの内部状態を可視化する(図1)。

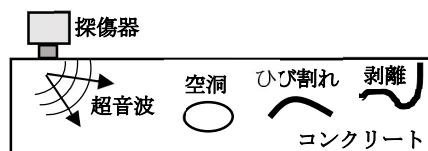


図1: 非破壊検査

数学上では、この超音波が散乱する波の様子を波動方程式で記述し、その解(散乱波)から方程式の係数関数(内部状態)を求める問題として定式化する。

本研究では、波動方程式について焦点を当てる。波動方程式は次のヘルムホルツ方程式によって記述される。

$$-\left(\Delta + \frac{\omega^2}{c(x)}\right)u(x) = -i\omega f(x), \quad x \in \Omega \quad (1)$$

ここで、 Ω は対象領域で、 x はその対象領域内の点、 ω は波の周波数、 $f(x)$ は音源、 $c(x)$ は波の伝播速度、 Δ はラプラシアン(微分作用素)、 i は虚数、 $u(x)$ は波の振幅(波動方程式の解)を表す(参考文献[1])。順問題とは、 c から u を求める問題のことで、より数学的に言えば、 c から u への解作用素(変換のこと) F を求める問題である(図2)。一方で、逆問題は u から c を求める問題のことで、解作用素 F を使って、以下の関数方程式を c について解くことに帰着される。

$$F(c) = u \quad (2)$$

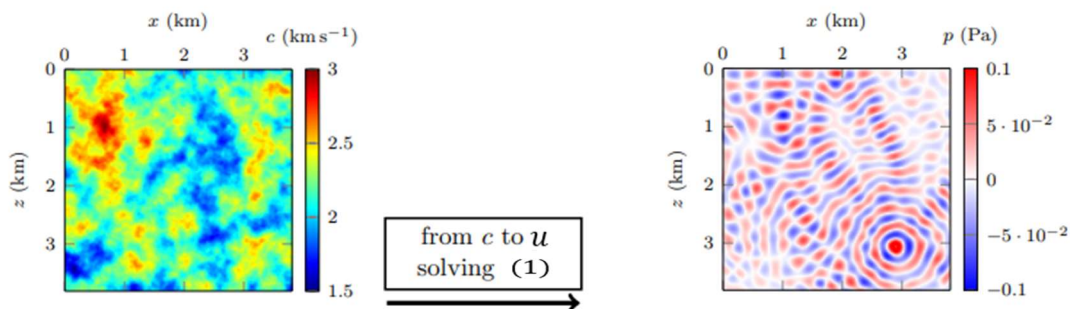


図2: 解作用素 (左: 波の伝播速度 c , 右: 波の振幅 u)

逆問題を解くためには、この作用素 F を明らかにすることが重要である。しかし、現実的に正確な作用素 F を取得することは非常に難しい。もし、この作用素 F が取得することができていれば、ベイズ推論(参考文献[2])を用いて、逆問題(2)を解く、つまり、 u から c を再構成できることはよく知られている。そこで本研究の目的では、深層学習の枠組みで、この作用素 F を近似することである。

研究の方法

偏微分方程式の解作用素 F は無有限次元空間上の作用素であり、有限次元空間上の作用素である通常のニューラルネットワークをそのまま活用するのは不適切である。そこで、近年提案されたニューラル作用素(参考文献[3])に着目する。これは、無有限次元空間上の作用素を近似するためにニューラルネットワークを一般化したものである。

参考文献[3]で提案されたニューラル作用素について簡単に復習する。ニューラル作用素の構造は、空間点 $x \in \Omega$ での関数値 $c(x)$ 、 $u(x)$ をそれぞれ入力、出力とし、次で定義される層を L 回合成したもので定義される(図 3):

$$v_{l+1}(x) = \sigma(W_l v_l(x) + K_l v_l(x) + b_l(x)) \quad (3)$$

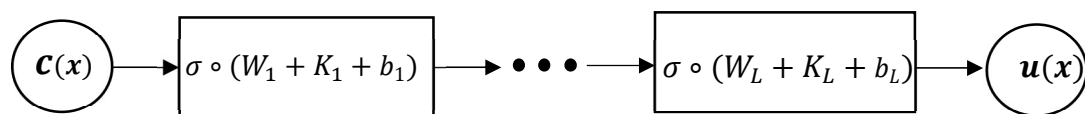


図 3: ニューラル作用素

ここで、 $v_l(x)$ 、 $v_{l+1}(x)$ はそれぞれ、 l 層での入力、出力、 W_l は線形行列変換、 K_l は線形積分作用素、 b_l はバイアス項、 σ は非線形活性化関数を表し、これは、通常の有限次元空間上のニューラルネットワークの一般化である(積分作用 K_l が全てゼロ、かつ、 $v_l(x)$ が関数ではなくベクトルの場合に相当する)。行列変換 W_l 、積分作用 K_l はそれぞれ、局所項、非局所項と呼ばれ、偏微分方程式において重要な非局所作用を学習する項が導入されている。ニューラル作用素に関するバーガス方程式やナビエ・ストークス方程式などの数値実験については参考文献[3]を参照にされたい。

研究の成果

以下で紹介する研究成果は、アメリカ・ライス大学の Maarten de Hoop 教授とその学生の Antonio Lara 氏らとの共同研究で行ったものである。詳細については、参考文献[4]を参照されたい。

[4]では、参考文献[3]で提案されたニューラル作用素を以下のように微調整したもので提案した(図 4).

$$v_{l+1}(x) = W_l \circ \sigma(K_l v_l(x) + b_l(x)) \quad (4)$$

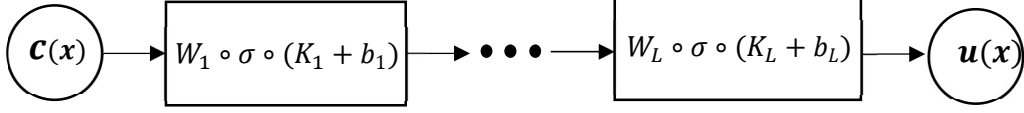


図 4: 逐次ニューラル作用素

通常のニューラル作用素は線形行列変換 W_l と線形積分作用素 K_l との和であるのに対して(式(3)), 提案したニューラル作用素は線形行列変換 W_l と線形積分作用素 K_l との積である(式(4)). この構造は、近年画像分類モデルとして注目されている ConvNeXt(参考文献[5])と呼ばれる逐次構造の考え方を基にして提案した. そこで我々の提案したニューラル作用素を逐次ニューラル作用素と呼ぶことにする.

理論結果

ニューラル作用素の汎化誤差解析を行った(ちなみに、深層学習の目的はこの汎化誤差を小さくすることにある). まず、汎化誤差 $\mathcal{L}(\mathcal{G})$ は以下のように上から押さえられることが知られている(Lemma 4.2 of [4]).

$$\mathcal{L}(\mathcal{G}) \leq \hat{\mathcal{L}}_S(\mathcal{G}) + 2\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_{\mathcal{G}}) + (\rho R + R_u) \sqrt{\frac{2\delta}{n}}$$

第一項は、訓練誤差 $\hat{\mathcal{L}}_S(\mathcal{G})$ であり、これは訓練によって最小化される. 第三項 $\sqrt{\frac{2\delta}{n}}$ は、学習データのサンプル数 n が大きければ十分小さくなる項である(ρ, R, R_u, δ は適当な定数). 第二項は、ラデマッハー複雑度 $\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_{\mathcal{G}})$ と呼ばれるもので、作用素の集合 $\mathcal{F}_{\mathcal{G}}$ (後にニューラル作用素の集合に対応するもの)の複雑具合を定量化した項である.

本研究の理論的な主結果は、ニューラル作用素に対するラデマッハー複雑度の上界を評価したことであり、適切な仮定のもので、以下のように与えられる(Theorems 4.4 and 4.6 of [4]).

$$\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_{\mathcal{N}}) \leq \gamma L^{\frac{\hat{d}+2}{\hat{d}+1}} \{(C_w + C_k)C_\sigma\}^L \left(\frac{1}{n}\right)^{\frac{1}{\hat{d}+1}}$$

$$\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_{\tilde{\mathcal{N}}}) \leq \tilde{\gamma} L^{\frac{\hat{d}+2}{\hat{d}+1}} (C_w C_\sigma C_k)^L \left(\frac{1}{n}\right)^{\frac{1}{\hat{d}+1}}$$

$\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_N)$ はニューラル作用素, $\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_{\tilde{N}})$ は逐次ニューラル作用素に対するラデマッハー複雑度をそれぞれ表す. L は層数, C_w, C_k はそれぞれ線形行列変換 W_l , 線形積分作用素 K_l に対するあるノルムの上界定数, C_σ は非線形活性化関数 σ のリブシッツ定数を表す($\gamma, \tilde{\gamma}, \hat{d}$ は適当な定数).

理論結果の考察を以下で行う. 上界は両方とも, データのサンプル数 n に関して $\mathcal{O}(1/n^{\hat{d}+1})$ のオーダーで減少する. しかし, もし, 行列変換 W_l の上界定数 C_w が1より小さければ, $(C_w + C_k)C_\sigma < C_w C_k C_\sigma$ が成立する. これは, 逐次ニューラル作用素に対するラデマッハー複雑度 $\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_{\tilde{N}})$ は, ニューラル作用素に対するラデマッハー複雑度 $\mathfrak{R}_S(\mathcal{F}_N)$ よりも小さくなることを意味する. $C_w < 1$ という仮定は, 提案手法に含まれる drop-out や normalization によって満たされることが期待される. 従って, 我々の提案した逐次ニューラル作用素に対する汎化誤差の方が通常のニューラル作用素に対するものより小さくなることが予想される.

実験結果

波動方程式における c から u への解作用素 F の近似において, 標準的なニューラル作用素と我々の逐次ニューラル作用素との比較を行った. 図5は汎化誤差の数値計算結果, 図6は波の振幅 u の可視化結果を表す. FNOは通常のニューラル作用素, sFNOは我々の逐次ニューラル作用素, sFNO+eps_v1, sFNO+eps_v2は逐次ニューラル作用素をさらに実験的に改良したニューラル作用素を意味する. 図5において, 理論結果と同様に, 我々の逐次ニューラル作用素の汎化誤差は標準的なニューラル作用素のものよりも小さくなっていることが数値実験的にも確認できる. 図6において, 我々の逐次ニューラル作用素による波の振幅 u の可視化は, 通常のニューラル作用素のものよりも真の波の振幅のものに近いことが確認できる(図6の右上: 真の可視化, 真ん中: 波の振幅の可視化, 下: 真との相対誤差). 実験の詳細については, [4]のSection 3を参照されたい.

今後の展望

我々の手法は汎用的なニューラル作用素の微調整であり, 波動方程式に限ったものではない. そこで, 波動方程式以外の偏微分方程式において, 同様に良い実験結果が得ることができかを確認する. それとは反対に, 波動方程式の性質をうまく組み込んで, 波動方程式に特化した新しいニューラル作用素を提案する. さらに, 提案したニューラル作用素によって近似した解作用素を使い, ベイズ推論を用いて, 逆問題(2)の再構成を行う.

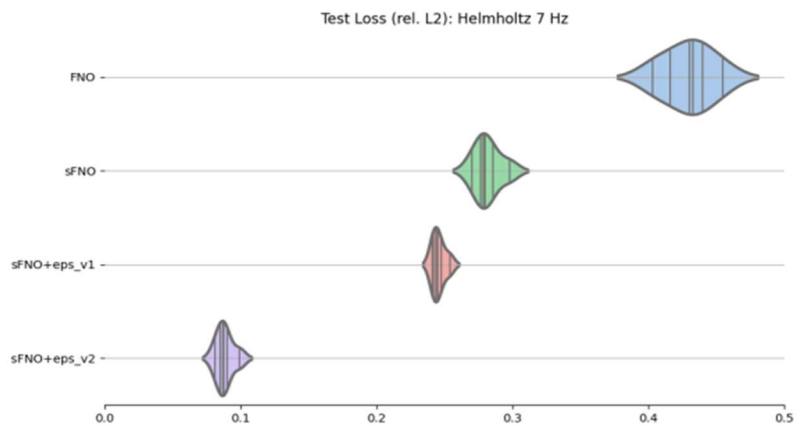


図 5: 汎化誤差の数値計算結果

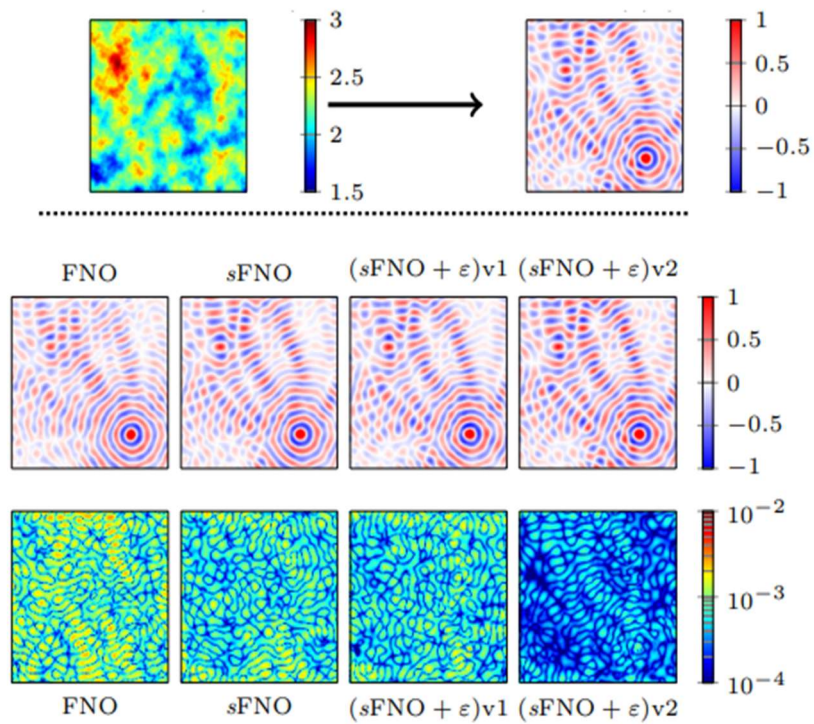


図 6: 波の振幅 u の可視化結果

参考文献

1. Florian Faucher. "hawen: time-harmonic wave modeling and inversion using hybridizable discontinuous galerkin discretization." *Journal of Open Source Software*, 6(57):2699, 2021.
2. Lanthaler, Samuel, Siddhartha Mishra, and Franziska Weber. "On Bayesian data assimilation for PDEs with ill-posed forward problems." *Inverse Problems* 38.8 (2022): 085012.
3. N. Kovachki, Z. Li, B. Liu, K. Azizzadenesheli, K. Bhattacharya, A. Stuart, A. Anandkumar, "Neural Operator: Learning Maps Between Function Spaces", arXiv:2108.08481 (2021).
4. L. B. J. Antonio, T. Furuya, F. Faucher, X. Tricoche, M. de Hoop, "Fine-tuning neural-operator architectures for training and generalization", arXiv:2301.11509, (2023).
5. Liu, Zhuang, et al. "A convnet for the 2020s." *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. 2022.