



## 2. 物理法則を組み込んだニューラルネットワーク

### 2. Physics-Informed Neural Network

今寺 賢志

IMADERA Kenji

京都大学大学院 エネルギー科学研究科

(原稿受付: 2025 年 7 月 20 日)

物理法則をニューラルネットワークの訓練過程に組み込んだ Physics-Informed Neural Network は、数値シミュレーションのように偏微分方程式の解を求める順解析に加え、モデル関数の推論を既知の物理法則を満たす制約付きで行う逆解析にも応用可能な方法論である。本章では、その基本的なアルゴリズムについて順解析と逆解析に分けて概説するとともに、主に磁場閉じ込め核融合プラズマ分野における PINN の適用例について紹介する。

Keywords:

Physics-Informed Neural Network, direct problem, inverse problem, turbulence simulation

#### 2.1 緒言

深層学習は近年、画像認識や自然言語処理といった情報科学の枠を超え、物理学をはじめとする自然科学の幅広い領域に応用されている。これにより、従来の数理モデルでは扱いが難しかった現象に対しても、データ駆動的に予測や近似を行うことが可能となってきている。

一方で、物理学の多くの分野では、対象となる系を支配する偏微分方程式や保存則、対称性などの物理法則が既知であることが一般的である。こうした法則を事前知識としてモデルに組み込むことで、物理的に整合性のある予測を行い易くなるだけでなく、少量の教師データでも高精度な学習が可能となり、さらに未知のデータに対する汎化性能の向上も期待される。

本章の主題である Physics-Informed Neural Network (PINN) は、そのような既知の物理法則をニューラルネットワークの学習過程に組み込むことで、偏微分方程式を満たす解の推論や、データの背後にある物理モデルの構造推定を高効率に実現する機械学習手法の 1 つである。PINN は、2019 年に Raissi [1] らによって提案された比較的新しい手法であるが、既に流体力学 [2,3]、材料工学 [4]、制御工学 [5] など様々な分野への応用が進められている。

従来、偏微分方程式の解は、有限差分法や有限要素法などを用いた数値シミュレーションによって主に求められてきた。これらのシミュレーションは、支配方程式に基づく物理法則に従った数値解を提供する一方で、特に高次元や複雑な幾何に対して計算負荷が高いという課題がある。これに対して PINN は、従来の数値シミュレーションに比べて少ない計算量で解の推論が可能であり、物理シミュレーションの高速化に寄与することが期待されている。加えて、既存の実験データやシミュレーションデータを活用することで推論精度の向上も図ることができるため、異種データを融合したモデル構築にも対応可能である。

一方、データの背後にある物理モデルの構造推定においては、従来の回帰分析に加え、近年では深層学習も用いられている。しかしながら、これらの手法は物理法則を必ずしも満たす保証がないため、実際の現象を忠実に再現できるかどうかには課題が残る。その点で PINN は、既知の物理法則を満たす制約付きのモデル関数を推論できるため、こうした問題を克服する手段として注目されている。

本章では、そのような特性を有した PINN について、まず第 2 節でその基本的なアルゴリズムを順解析と逆解析に分けて概説する。次に第 3 節では、順問題への PINN の適用例として 1 次元熱輸送方程式の解の推論を、逆問題への PINN の適用例としてジャイロ運動論シミュレーションで得られたデータを支配する 1 次元簡約化輸送モデルの構造推定をそれぞれ紹介する。第 4 節では、これらの内容を総括するとともに、現在進められている PINN の拡張方法についても言及する。

本章では、そのような特性を有した PINN について、まず第 2 節でその基本的なアルゴリズムを順解析と逆解析に分けて概説する。次に第 3 節では、順問題への PINN の適用例として 1 次元熱輸送方程式の解の推論を、逆問題への PINN の適用例としてジャイロ運動論シミュレーションで得られたデータを支配する 1 次元簡約化輸送モデルの構造推定をそれぞれ紹介する。第 4 節では、これらの内容を総括するとともに、現在進められている PINN の拡張方法についても言及する。

#### 2.2 PINN の概要

##### 2.2.1 PINN による順問題解析モデル

本項ではまず、1 階の常微分方程式

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(t, x), \quad x(t=0) = \hat{x}_0 \quad (1)$$

において右辺の関数  $f(t, x)$  が既知である場合を例に、その解を求める PINN の基本アルゴリズムについて概説する。

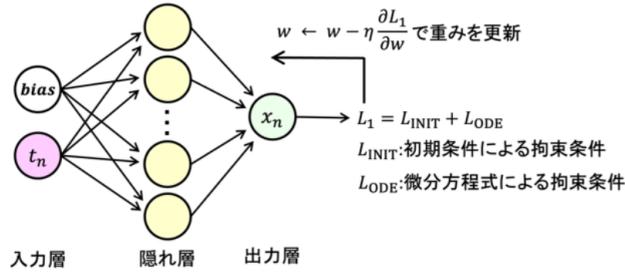


図1 順問題解析における PINN の基本ネットワーク．簡易化のため、隠れ層は1層としている．

$\hat{x}_0$  は定数とする．

まず図1に示すように、入力層に説明変数に相当する時間  $t$  を入力する．ここで  $0 \leq t \leq L_t$  を等間隔に  $N$  分割した際の  $n$  番目の値  $t_n \equiv n\Delta t = L_t/N$  を入力したとしよう．次に、入力値と重み係数との線形和と活性化関数による非線形変換を通じて隠れ層のニューロンを計算する．この処理を複数の隠れ層にわたって繰り返すことで、最終的にネットワークの出力  $x_n = x(t_n)$  が得られる．この計算を全ての  $n$  に対して行うことで、以下の損失関数が求まる．

$$L_1 = L_{\text{INIT}} + L_{\text{ODE}} \quad (2)$$

$$L_{\text{INIT}} = (x_0 - \hat{x}_0)^2 \quad (3)$$

$$L_{\text{ODE}} = \lambda_{\text{ODE}} \sum_{n=1}^N \left( \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=t_n} - f(t_n, x_n) \right)^2 \quad (4)$$

ここで  $L_{\text{INIT}}$  は  $t = 0$  における推論値  $x_0$  とその初期条件  $\hat{x}_0$  との差を、 $L_{\text{ODE}}$  は常微分方程式 (1) に推論値を代入した際の残差を、 $\lambda_{\text{ODE}}$  は  $L_{\text{ODE}}$  の重みを表している．

ニューラルネットワークでは、損失関数  $L$  を最小化するように重み係数  $w$  を最適化する．例えば、基本的な数値最適化法である勾配降下法を用いた場合、重み係数  $w$  は以下のように更新される．

$$w \leftarrow w - \eta \frac{\partial L}{\partial w} \quad (5)$$

ここで  $\eta$  は学習率と呼ばれるパラメータである．この更新を行うためには、重み係数  $w$  に対する損失関数  $L$  の勾配を計算する必要がある．ニューラルネットワークではこれを、逆誤差伝播法と呼ばれるアルゴリズムによって、連鎖律に従って計算することができる．その結果得られた勾配を用いて式 (5) に従い  $w$  の更新を一定回繰り返すことで、損失関数を最小化する重み係数  $w$  が得られる．式 (2) で与えられる損失関数  $L_1$  が最小化されたということは、PINN によって得られた推論値  $x_n$  が、常微分方程式 (1) の解に最近接したことを意味する．つまり、 $x_n$  は近似的に常微分方程式 (1) の解であるとみなすことができる．

このように  $t_n$  を入力して常微分方程式 (1) の近似解  $x_n$  を出力する PINN を構築することができれば、任意の時刻  $t$  を入力してその時刻の解  $x(t)$  を求めることができる．これが順問題における PINN の基本アルゴリズムである．

ここで、式 (4) に含まれる微分項の計算方法について補足する．一般的な数値シミュレーションでは微分項は差分

近似によって計算されるため、その際のステップサイズに応じた打ち切り誤差は避けられない．一方で PINN では、いわゆる自動微分と呼ばれる手法が用いられている．この自動微分は、先に述べた逆誤差伝播法と同様に連鎖律の考え方に基いており、損失関数  $L$  を出力層の  $x$  に、重み係数  $w$  を入力層の  $t$  に置き換えることで、 $\partial x / \partial t$  を計算することができる．これにより、複雑なネットワーク構造においても高階微分を含む微分演算を丸め誤差レベルの高精度かつ効率的に行うことが可能となる．この自動微分は、PINN を構成する上で不可欠な要素の1つであり、従来の差分法とは異なる形で高精度な微分演算を実現している点で重要な役割を果たしている．

### 2.2.2 PINN による逆問題解析モデル

次に常微分方程式 (1) の解が実験やシミュレーションによって既知であるとし、右辺の  $f(t, x)$  を求める逆問題を考える．ここでは簡易化のため、 $f(t, x) = ax$  としてその係数  $a$  を求める問題に帰着して考える．このとき、以下の損失関数を定義する．

$$L_2 = L_{\text{DATA}} + L_{\text{ODE}} \quad (6)$$

$$L_{\text{DATA}} = \sum_{n=0}^N (x_n - \hat{x}_n)^2 \quad (7)$$

$$L_{\text{ODE}} = \lambda_{\text{ODE}} \sum_{n=1}^N \left( \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=t_n} - ax_n \right)^2 \quad (8)$$

ここで  $L_{\text{DATA}}$  は実験やシミュレーションで得られた教師データ  $\hat{x}_n$  と推論値  $x_n$  との差を表している．

順問題との違いは、一般的なニューラルネットワークと同様に、教師データとの最小二乗誤差が式 (7) のように明示的に組み込まれている点である．その結果、その誤差と推論値を常微分方程式 (1) に代入した際の残差の二乗を表す式 (8) の和が最小となるように、重み係数  $w$  が更新される．このようにして得られた推論値は、教師データと微分方程式の解の双方に漸近する形で収束していくことが期待される．

さらに、図2に示すように、重み係数  $w$  の更新に加えて、式 (8) における係数  $a$  も以下のように勾配降下法により同時に最適化する．

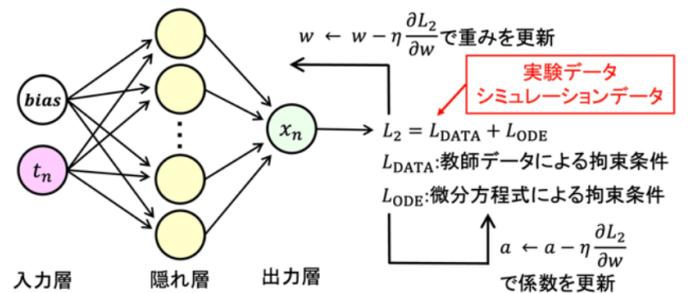


図2 逆問題解析における PINN の基本ネットワーク．教師データと推論値の差  $L_{\text{DATA}}$  が損失関数に組み込まれている点と、重み係数  $w$  の更新の際に常微分方程式の係数  $a$  の更新も行っている点が図1と異なる．

$$a \leftarrow a - \eta \frac{\partial L}{\partial a} \quad (9)$$

その結果、実験データやシミュレーションデータを支配する微分方程式の構造を推論することが可能となる。さらに本手法を拡張することで、未知の初期条件や境界条件、熱源分布などの推論にも応用が可能である。

また PINN は、逆問題解析におけるノイズに対してロバストであり、比較的少ないデータでも学習が可能であることが知られている。一方で、未知パラメータが多いと識別不能に陥ることがあり、その際には統計的な制約や事前知識を導入するなどの工夫が必要となる場合がある。

### 2.2.3 Data-Driven PINN による順問題解析モデル

また 2.2.1 項と 2.2.2 項で述べた PINN のハイブリッドモデルとして、数値シミュレーションや実験などによって得られた「部分的な」近似解を学習に取り込むことで、順問題解析における推論精度を更に向上させる方法が提案されている。

例えば、 $t = t_{n_1}, t_{n_2}, t_{n_3}$  での実験計測データ  $\hat{x}_{n_1}, \hat{x}_{n_2}, \hat{x}_{n_3}$  が既に存在する場合、以下の様に損失関数に教師データと推論値の残差を表す  $L_{EXP}$  を加えた損失関数を考えてみよう。

$$L_3 = L_{INIT} + L_{ODE} + L_{EXP} \quad (10)$$

$$L_{EXP} = \lambda_{EXP} \sum_{n \in \{n_1, n_2, n_3\}} (x_n - \hat{x}_n)^2 \quad (11)$$

ここで、 $\lambda_{EXP}$  は  $L_{EXP}$  の重み係数である。このように計測データを補助的に取り入れることで (図 3)、学習の安定性や収束速度、最終的な推論精度の向上が期待できる。このように異種データを融合したモデル構築にも対応可能である点は、PINN の大きな利点の 1 つであり、このような方法を Data-Driven PINN と呼んでいる。

## 2.3 PINN の核融合プラズマ分野への適用例

### 2.3.1 PINN の順問題解析への適用例

磁場閉じ込め核融合プラズマにおいて、外部からの加熱を増大させても、乱流熱輸送も同時に増大することで、温度分布が急峻化しないいわゆる分布硬直性と呼ばれる現象がしばしば観測されている [6]。この現象は、熱輸送係数が強い非線形性を持つことに起因しており、そのような「硬い」方程式系を解くことは数値シミュレーションにおいて

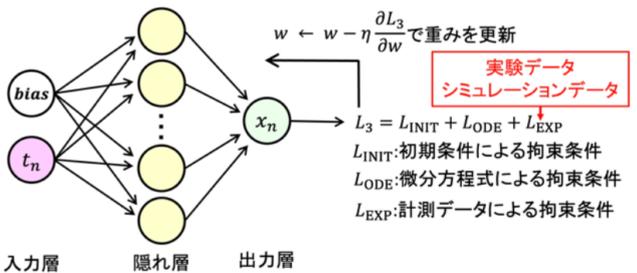


図 3 Data-Driven PINN の基本ネットワーク。計測データと推論値の差  $L_{EXP}$  が損失関数に組み込まれている点が 2.1 と異なる。

重要かつ困難な課題の 1 つとされてきた。

この課題に対して、京都大学大学院工学研究科の本多氏のグループでは、PINN を導入することで、硬い輸送方程式を高精度かつ高速に解くソルバーの開発を行った [7]。まずテストケースとして、円柱座標系における 1 次元熱拡散方程式に相当する

$$\frac{\partial}{\partial t} T = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \chi(T') \frac{\partial T}{\partial r} \right] \quad (12)$$

を PINN を用いて解いた。ここで熱拡散係数  $\chi(T')$  は温度勾配  $T'$  に依存し、次式で与えられる。

$$\chi(T') = \begin{cases} (|T'| - 0.5)^\alpha + 0.1 & (|T'| > 0.5) \\ \chi_0 & (|T'| \leq 0.5) \end{cases} \quad (13)$$

ここで、 $\alpha = 1.5 > 1$  であることから、本モデルは stiff model に分類される。

図 4 は、PINN で得られた温度分布の空間時間発展と、3 次精度有限要素法を用いた 1 次元輸送コード TRESS (TTransport Equation Stable Solver) [8] による対応した空間時間発展を示している。L2 ノルム誤差が  $7.8 \times 10^{-4}$  と非常に小さく、図からも両者の結果がよく一致していることが確認できる。また、stiff model に対して安定な計算を行うために必要とした計算グリッド数は、TRESS の場合と比較して、PINN では約 2400 分の 1 まで削減された。その結果、計算時間も大幅に短縮され、TRESS が 3,432 秒を要したのに対し、PINN ではわずか 190 秒で計算が完了した。

次に、PINN と TRESS を用いて、イオンと電子の 2 粒子種に対する 1 次元輸送方程式を対象に、同様の比較を行った。その結果、イオン温度および電子温度の L2 ノルム誤差はそれぞれ  $2.5 \times 10^{-3}$ ,  $3.3 \times 10^{-3}$  と小さく、両者の結果が十分に一致することが確認された。また計算時間については、TRESS が 1,009 秒を要したのに対し、PINN では 572 秒で計算が完了し、減少率は低下したものの依然として PINN による計算の高速化が確認された。

以上の結果から、PINN は数値計算が困難とされる stiff

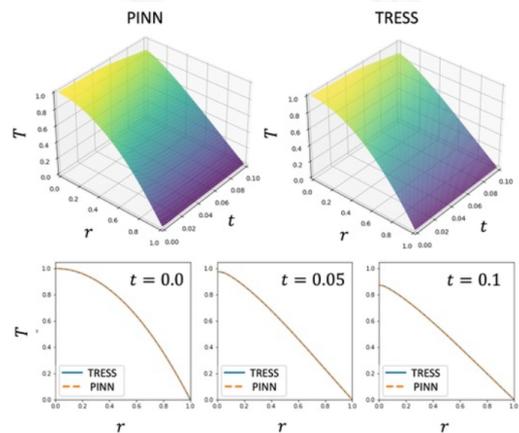


図 4 PINN および 1 次元輸送コード TRESS で得られた温度分布の空間時間発展 (上図) と  $t = 0, 0.05, 0.1$  におけるそのスナップショット (下図)。

model に対しても、十分な精度と高い計算効率を両立できる有望な方法であると考えられ、実際に他の論文でも、stiff transport model に対する PINN の有効性が報告されている [9].

### 2.3.2 PINN の逆問題解析への適用例

磁場閉じ込め核融合プラズマにおける乱流輸送を解析する有効な手段として、位相空間 5 次元ジャイロ運動論シミュレーション [10] が広く用いられている。しかし、計算コストが非常に高くシミュレーションに時間を要すること、また現象が複雑であるため結果の解釈が困難であることが主な問題点として挙げられる。

これらの課題に対処するため、京都大学大学院エネルギー科学研究科の我々のグループでは、位相空間 5 次元大域的ジャイロ運動論コード GKNET [11] によって得られたデータを教師データとして活用し、1 次元簡約化輸送モデルを仮定した上で、そのモデルに含まれる係数を PINN によって推論する手法を提案した [12]。具体的には、イオン温度  $T$  の時間発展を記述する式 (14) と、乱流強度  $I$  の時間発展を記述する式 (15) で構成される 1 次元簡約化乱流輸送モデルを対象とした。ここで  $Q_{in}(r)$  は既知の熱源分布を表す。

$$\frac{\partial T}{\partial t} - a_1 I \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = Q_{in}(r) \quad (14)$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} - b_1 I \left| \frac{d(\ln T)}{dr} \right| + b_2 I^2 - I \frac{\partial^2 I}{\partial r^2} = 0 \quad (15)$$

本モデルを用いて、まず線形フェイズにおける乱流強度  $I$  の時間発展から  $b_1 = 14.5$  を推論した後、非線形フェイズのデータを用いて  $a_1, b_2$  の推論を行った。

図 5(a) は非線形フェイズにおいて GKNET シミュレーションから得られたイオン温度  $T$  および乱流強度  $I$  の半径分布と、PINN によって推論された同様の分布を比較して示している。両者は統計的に良く一致しており、PINN によるモデルの再現性の高さが確認できる。また図 5(b) は、エポック数に対する係数  $a_1, b_3$  の推移を示している。いずれの係数も十分に収束しており、モデル方程式の係数推論に成功していることがわかる。

さらに本研究では、入力パワーを 0.5 MW から 2 MW に変えた場合と同じ係数が推論されるかを検証した。その結果、2.0 MW の条件では、0.5 MW の場合と比較して、 $a_1$

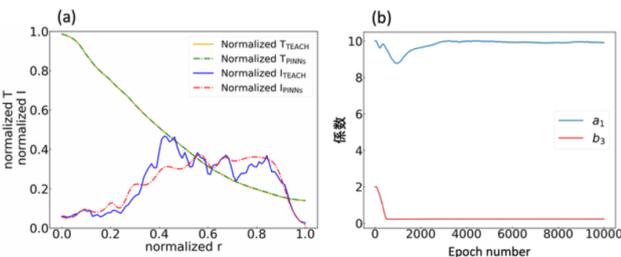


図 5 (a) 非線形フェイズにおいて GKNET シミュレーションから得られたイオン温度  $T$  および乱流強度  $I$  の半径分布と、PINN によって推論された同様の分布。(b) エポック数に対する係数  $a_1, b_3$  の推移。

の値がおよそ 1.4 倍に増加することが確認された。この結果は、熱源駆動の乱流輸送を考える上で、イオン温度  $T$  の拡散係数を従来のように乱流強度  $I$  に対して線形に依存する形 ( $\chi_{\text{turb}} \propto a_1 I$ ) で表現することが適切でない可能性を示唆している。より一般性が高い輸送モデルとして、 $a_1 I^\alpha$  ( $\alpha > 1$ ) のような非線形的な乱流強度依存性を導入することで、入力パワーに依存しない汎用的な物理モデルの構築が可能であると考えられる。

また近年では、計測データを用いた逆問題解析への PINN の応用も進展している。例えば、JET 実験において、磁気プローブや干渉計などの実測データからプラズマ内部の磁束分布と電流分布を推論する逆問題に対して、Grad-Shafranov 方程式を組み込んだ PINN を適用することで、内部構造を高精度に再構成することに成功したことが報告されている [13]。また、トモグラフィ物理モデルを組み込んだ PINN を適用することで、ポロメータ逆問題を解決する試み [14] や、Hasegawa-Wakatani モデルを組み込んだ PINN を活用して乱流計測の補完・改善をめざす研究 [15] も行われている。PINN は不完全あるいはノイズを含む計測データに対しても安定に学習が収束することが確認されており、今後の実験計測に対する PINN の応用展開が期待される。

## 2.4 今後の展望とまとめ

本章では、PINN の概要とその適用例について、順解析と逆解析に分けて紹介してきた。これまでは主に PINN の利点に焦点を当てて述べてきたが、一方で学習の安定性や汎化性能の限界といった問題点も指摘されており、現在もそれらの課題を克服するための試みが進められている。以下では、近年提案された PINN の拡張手法について紹介する。

### (1) Conditional PINN

#### 従来の問題点

従来の PINN では、1 つの問題設定（例えば特定の境界条件や初期条件）ごとに 1 つのネットワークを訓練する必要がある。しかし実際には、複数のパラメータや条件に対して解を求めたい場合が多い。

#### 提案された解決策

ネットワークへの入力として、物理的なパラメータや条件を明示的に与えることで、異なる設定下での解の一つのネットワークで学習できるようにする [16]。

#### 主な適用例

物理現象に対する境界条件やパラメータ依存性の連続的な応答解析への適用が期待される。

### (2) Adaptive PINN

#### 従来の問題点

損失関数に初期条件と境界条件、微分方程式の残差などを同時に含むため、それぞれの残差のスケールが大きく異

なると学習が不安定となる問題があった。

#### 解決策

学習途中でニューラルネットワークの訓練点や損失関数の重みを自動的に調整することで、効率的な学習と精度向上を実現する [17].

#### 適用例

残差のスケールが重要となる問題や、マルチスケール問題への適用が期待される。

### (3) Bayesian PINN

#### 従来の問題点

出力は1つの関数解のみであり、予測に対する信頼度や誤差のばらつき（不確実性）を評価できない。

#### 解決策

ベイズ的アプローチを導入することで、解や未知パラメータを確率分布として扱い、不確実性を定量化する [18].

#### 適用例

物理モデルが不完全な場合や、観測データが不足している、またはノイズが多い場合でも、不確実性を考慮した解やモデル推論が可能となる。

### (4) Multi-fidelity PINN

#### 従来の問題点

従来のPINNでは、高精度のデータと物理モデルを同時に満たすことを前提として学習が行われていた。しかし、使用可能な高精度データに限られる場合には、学習が不安定になる、偏った推定結果が得られる可能性があった。

#### 解決策

少量の高精度データと大量の低精度データを効果的に融合することで、学習の安定性を向上させるとともに、精度と計算コストを両立させる [19].

#### 適用例

近似モデルによるシミュレーションデータと第一原理モデルによるシミュレーションデータの併用、低精度の計測データと高精度の計測データの併用など、多忠実度データの統合的活用が期待される。

PINNは、深層学習の1種であるニューラルネットワークに物理法則を組み込むというこれまでにない斬新なアプローチである。また、順解析および逆解析のいずれにおいても、シミュレーションや実験から得られたデータを活用できることに加え、異種データの融合に対する柔軟性も高い。このような観点からPINNは、現代の科学的方法論である「理論」、「実験」、「シミュレーション」、「AI」を網羅的かつ統合的に取り込む新たな方法論であると言える。

今後は、この特性を相補的に活かしていくことで、より複雑な物理現象への適用や、大規模システムへの展開、さらには不確実性の定量化を含めた高信頼な予測モデルの構築などが、PINNによって推進されることを強く期待する。

## 謝 辞

本記事の執筆にあたって、有益なコメントを頂いた京都大学大学院工学研究科の本多充教授に深く感謝いたします。また、2.3.2節の解析を行った京都大学大学院エネルギー科学研究科（当時）の高須亮磨氏と古仲達貴氏に謝意を申し上げます。本章の作成は、科学研究費〔基盤研究(C)：24K06992〕の援助を得て行われました。

## 参 考 文 献

- [1] M. Raissi *et al.*, *J. Comput. Phys.* **378**, 686 (2019).
- [2] S. Cai *et al.*, *J. Fluid Mech.* **915**, A102 (2021).
- [3] X. Jin *et al.*, *J. Comput. Phys.* **426**, 109951 (2021).
- [4] E. Haghghat *et al.*, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **379**, 113741 (2021).
- [5] Y. Zhu *et al.*, *J. Comput. Phys.* **394**, 56 (2019).
- [6] P. Mantica *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 175002 (2009).
- [7] M. Honda, *Confinement and Transport workshop* (2022).
- [8] M. Honda and M. Nakata, *32th JSPF annual meeting*, 24aE06P (2015).
- [9] J. Seo *et al.*, *Nucl. Eng. Technol.* **56**, 5396 (2024).
- [10] X. Garbet *et al.*, *Nucl. Fusion* **50**, 043002 (2010).
- [11] K. Imadera and Y. Kishimoto, *Plasma Phys. Control. Fusion* **65**, 024003 (2023).
- [12] 古仲達貴：京都大学大学院エネルギー科学研究科 修士論文 (2024).
- [13] R. Rossi *et al.*, *Nucl. Fusion* **63**, 126059 (2023).
- [14] R. Rossi *et al.*, *Nucl. Fusion* **65**, 036030 (2025).
- [15] M. J. Choi, *Rev. Mod. Plasma Phys.* **9**, 22 (2025).
- [16] A. Kovacs *et al.*, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **104**, 106041 (2022).
- [17] L. D. McClenny *et al.*, *J. Comput. Phys.* **474**, 111722 (2023).
- [18] L. Yang *et al.*, *J. Comput. Phys.* **425**, 109913 (2021).
- [19] X. Meng and G. E. Karniadakis, *J. Comput. Phys.* **401**, 109020 (2020).



いまでら けんじ  
今寺 賢志

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 プラズマ・核融合基礎学分野 准教授（エネルギー博士）。専門はグローバルジャイロ運動論シミュレーション。最近、20年来のペーパードライバーを卒業して、少しずつ車の運転を始めました。私が入並みに運転できるようになるのが先か、自動運転が社会に定着するのが先か。静かに先端技術と競争しています。