



応用物理学会秋季学術講演会 注目講演プレスリリース

2022年 9月 14日

PINNs (Physics Informed Neural Networks)を用いた 熱対流現象の高速解析
High-speed prediction of thermal convection by using PINNs (Physics Informed Neural Networks)

ニューラルネットワークが生み出す、 現実を制御できるもうひとつの現実「デジタルツイン」

大阪大学大学院基礎工学研究科
竹原悠人,岡野泰則

【発表概要】

- ・ 物理法則の支配方程式を学習したニューラルネットワーク「PINNs (Physics Informed Neural Networks)」を用いて、実際の系における流動・熱伝熱の高速予想を行うデジタルツインを作製。
- ・ PINNsを現実の系に適用し、流動と温度におけるその物理的整合性を確認した世界で最初の研究事例。
- ・ 同研究は、炭化ケイ素 (SiC) 材料の結晶成長プロセスなどへの産業応用に道を拓くものである。

大阪大学大学院基礎工学研究科の竹原悠人、岡野泰則による研究グループは、物理法則の支配方程式を学習したニューラルネットワーク「PINNs (Physics Informed Neural Networks)」を用いて、実際の系における流動・熱伝熱の高速予想を行うデジタルツインを作製。さまざまな条件下において、対象内部のあらゆる流動および温度変化を正確に予測することに成功した。同研究は、デジタルツインをサイエンスに活用すること、および幅広い産業応用への潜在的可能性を示唆するものである。

【詳細】

デジタルツインは、現実を制御する新たなテクノロジー

デジタルツイン—それは、現実の対象から収集したさまざまなデータをもとに、デジタル空間上で再構成されたもうひとつの現実だ。デジタルツインは、第四次産業革命を支える重要な技術とされ、今後、産業界をはじめとしたさまざまな場所で、その有用性がより現実的なものになっていくだろう。デジタルツインは、言ってみればシミュレータの一種だが、“ツイン”であるということ、つまり、もうひとつの現実であるという点が最大の特徴である。デジタルツインは、実際の現実と同様の物理法則のもとに成立しているが、そのパラメータを変化させることができる。つまり、実際の現実では不可能なことを試せたり、物理的な制約から観察できないものを、観察することが可能になる。さらには、デジタルツイン上で得た数値を使って、実際の現実を“制御”し、プロセスを改善したり、新たな発見を行うことも可能になる。

大阪大学大学院基礎工学研究科の竹原悠人氏らによる研究グループは、物理法則の支配方程式を学習したニューラルネットワーク「PINNs (Physics Informed Neural Networks)」を用いて、実際の系における流動・熱伝熱の高速予想を行うデジタルツインを作製した。このニューラルネットワークは、さまざまな条件下で対象内部のあらゆる流動および温度変化を正確に予測することができるという。

デジタルツインの作製は、これまでも行われてきた。「しかし、これまでの現象の再現技術には課題がありました。数値計算には莫大な時間と計算コストがかかり、機械学習では予測された値が実際の物理法則を満たすとは限らないといった欠点があったのです」と竹原氏は話す。今回の研究ではPINNsを用いることでこれらの欠点を克服しながら、実用において重要な高速化を実現できる、物理的整合性を持ったデジタルツインを開発したのだという。

物理法則を学習したニューラルネットワーク

同研究で用いられたPINNsは、通常ニューラルネットワークに、物理法則の支配方程式を解く部分がついたものだ。PINNsは、まず、通常ニューラルネットワークで、計算対象のさまざまな座標、および対象の液面の高さをパラメータとしたときの温度を網羅的に予測する。次に、それらの温度の予測をもとにして、境界条件および支配方程式がゼロになる、全てのパラメータで予測された温度が支配方程式を満たすようにニューラルネットワークを学習する(図1)。現在さまざまな対象で実験を進めているというが、半導体ウェハなどで使われるシリコンバルク単結晶の成長過程(チョクラルスキー〈Cz〉法)を用いた実験では、現実の結晶成長過程の一部の温度を入力すると、シリコン融液内のすべての場所の流動と温度が瞬時に予測できたという。一般的な再現技術に用いられる数値計算では、たとえば反応炉のサイズなどのパラメータを変化させると、計算格子の再構成を行わなければならないため、膨大な計算量が発生し、リアルタイムが実

現しない。同研究では、リアルタイムを実現するために、パラメータが変更された場合のあらゆる値を瞬時に予測できるというPINNsの特徴を利用した。

「従来のPINNsは流体における動きや方向を予測するために使われていました。今回の研究では、温度の指標を入れ、熱伝導を予測可能にしたことに新規性があります。さらに、単純な予測ではなく、PINNsを現実の系に対して適用し、その物理的整合性を確認したのは今回が初めてだと思います（図2）」（竹原）

将来的には同研究を炭化ケイ素（SiC）材料の結晶成長プロセスに適用し、物理的整合性を持つデジタルツインの産業応用に取り組んでいきたいという。

「今後はパワーデバイスなどに使われる炭化ケイ素（SiC）材料の結晶成長プロセスに適用したいと思っています。現在のプロセスでは、結晶成長の最中にある制御をしたときに、内部がどのような温度分布になっているかが全く分かっていません。今回の研究を適用すれば、良い結晶が生まれるとき、内部の温度分布がどうなっているのかがすべて予測できます。これらの温度データから、どのような制御を行えば良い結晶ができるかをすべて定量化することが可能になります」（竹原）

同研究で用いられたPINNsは、あらゆるものに適用できるのだという。デジタルツインを介することで、これまで現実では発見できなかった現象を捉えることができ、制御できなかったものにより良い制御ができるようになる未来がこの研究の先にはあるのだろう。

【図】

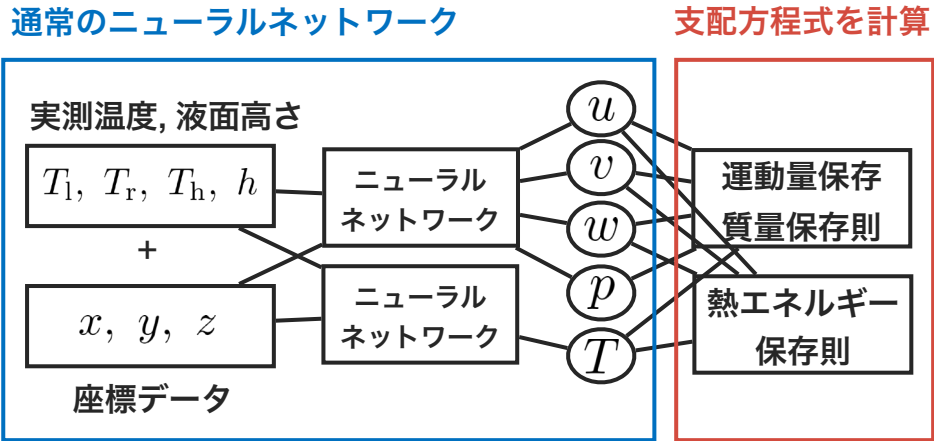


図1. PINNsの構造。通常ニューラルネットワーク（左）で、座標(x, y, z)、パラメータ(T_1, T_2, T_3, l)における温度を予測。予測された温度から、支配方程式を計算（右）。境界条件、支配方程式を満たすように学習を行う。

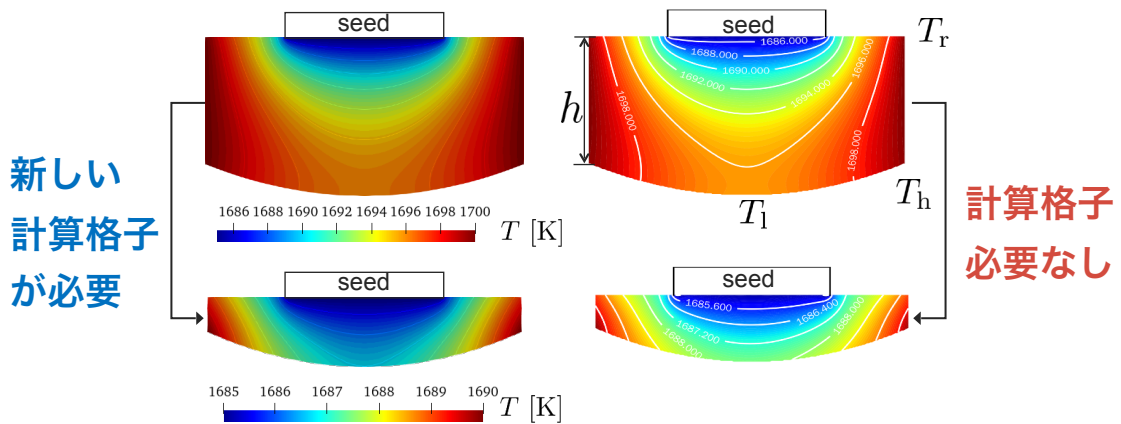
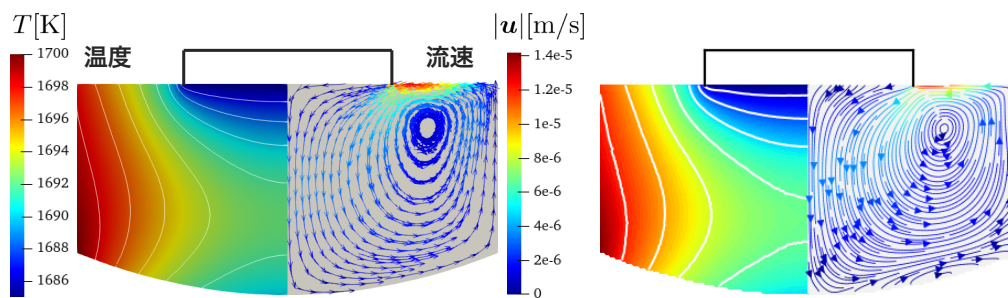


図2. 各種パラメータは T_r (るつば上端温度)、 T_h (るつば底端温度)、 T_l (るつば底中心温度)、 l (液面高さ)。(T_r, T_h, T_l, l) = (1700 K, 1700 K, 1696 K, 0.3 m) (上)、(1691 K, 1687 K, 1690 K, 0.12 m) (下)の、異なる液面高さの数値計算による温度予測 (左)および、PINNs(右)を用いた際の予測結果。この図は、PINNs を用いることによって、

数値計算のような計算格子の再構成を行うことなく、異なる形状においても正確に温度分布を予測できていることを示している。この結果から、リアルタイムで温度制御が可能であることが示される。



(Tr, Th, Tl, l) = (1698 K, 1700 K, 1690 K, 0.3 m)における数値計算(左)、PINNs(右)を用いた際の予測結果。(左)、(右)ともに左 f 温度分布、右が流線の予測。