

(続紙 1)

京都大学	博士 (人間・環境学)	氏名	HAN ZHONGJIANG
論文題目	Modeling of complex spatial structures using physics-informed neural network (物理情報に基づくニューラルネットワークを用いた複雑な内部構造をもつ物体のモデリング)		
(論文内容の要旨)			
<p>本論文は, PINN(物理情報に基づくニューラルネットワーク)を複雑な空間的構造をもつさまざまな対象の解析に応用することを目的として, 具体的に二つの問題を設定して, 実際にPINNによる解析を行った結果を主としてまとめたものである.</p> <p>本研究において重要な役割を担っているPINNとは, 深層ニューラルネットワーク(DNN)に物理法則に基づく制約を組み込むことで, DNNの性能向上を図るモデルである. 本研究で扱っている問題は, 第一には古文書の非侵襲的解析であり, 保存状態に問題があつて, 開くことのできない古文書からページの情報を読み取ることが目的としている. 本研究で扱っている第二の問題は孔の空いた板の応力解析である. さまざまな工業部品の設計などにおいて, そのような問題は重要であり, PINNを用いることで従来のCAEツールによる解析を高速かつ高精度に実現することを目的としている.</p> <p>本論文の第一章では, 全体の導入として, まず自然科学や工学の分野で扱うさまざまな実世界の問題を解析するには精密なモデルを構築することが重要であることを述べ, 従来はモデルが単純であったり, 計算資源が不足していたりしたことから, 十分な解析が行えなかったことを説明している. つづいて, それらの問題を解消するために, PINNが有用と考えられていることを説明している. その後, 本研究で扱った上述の二つの問題の概要とその重要性を説明した上で, それらに対する従来のアプローチが不十分であったことを述べ, 本研究で解決すべき問題を明らかにしている.</p> <p>本論文の第二章では, 古文書の非侵襲的解析を目的として, 閉じた冊子の三次元CTデータからページの情報を読み取る手法を提案し, 実際のデータによる実験とその結果およびそれに対する評価を示している. 従来の手法では三次元CTデータの二次元スライスをもとに解析していたのに対して, 本研究の提案手法では, 三次元データから直接ページを抽出するようにしている. 具体的には冊子の各ページをコンデンサ内の静電場における電位の等値面と見立てて, ラプラス方程式に基づいて, 等値面を算出するようにしている. そのために必要なデータとして, 提案手法では, 三次元CTデータ内に現れる各ページについて, そのページの多数の点(実験では合計で3500点ほど)に手動でページ番号をアノテーションとして付加して(点にページ番号をラベルとして割り当てて)利用する. アノテーション用のツールは独自開発したものを利用するようにしている. 実験では7ページの冊子を用意し, 提案手法によってページを画像として抽出した上で, 画像においてOCRによって文字を認識した結果を示し, 良好な結果を得たことを述べている.</p>			

第三章では、第二章と同様の目的で、より複雑な構造の文書を解析できるようにするためにPINNを用いる手法を提案している。PINNは三次元CT画像内でアノテーションした点の座標とページ番号(電位に相当するスカラー値)を利用して、解析対象とする三次元空間内のスカラー値を推定するように学習する。このときPINNにはラプラス方程式を組み込むことで、学習においてはDNNから出力されるアノテーションされた点での訓練誤差と、ラプラス方程式から導かれる誤差とを重み付きで組み合わせて、損失を計算するようになっている。実験として、まず7ページの冊子の二つのデータセットについて、第二章の手法とPINNを用いた手法を比較して、ページの情報を抽出した結果、PINNを用いたモデルの方が高い精度をもつことを示した。また半分に折り曲げられた20ページの実験用の冊子、50ページの書籍の実物、19世紀の書籍(6ページ、見開き可能)についての実験とその結果を示し、提案手法の適用可能性を評価している。さらにアノテーションの量、PINNでの損失の重み付けのパラメータの設定について結果への影響を評価している。本章ではあわせてアノテーションの半自動化手法も提案している。CTデータ内のページのアノテーションは重要ではあるものの、すべてのページについて十分な数の点を正確に選択していくことは、とくに不明瞭なイメージしか得られていない部分があることも考慮すれば、困難である。そこで提案手法では、CTの値を利用して、テキストを含むであろうスライスにユーザに提示することで、その問題を緩和するようにしている。

第四章では、材料工学において重要となる、孔の空いたプレートにおける応力解析の問題にPINNを応用する方法を提案している。このような問題に対してはFEM(有限要素法)を適用するのが一般的である。しかしFEMによる計算はコストが高い。そこで本研究では、FEMと同様の解析が可能で、しかも高速に計算を行えるサロゲートモデル(代理モデル)をPINNによって構築することを試みている。実験ではプレートに孔が一つ空いたものを対象としている。PINNの学習には、孔の位置やサイズを変えたプレートのメッシュデータに関するFEMの解析結果を用いる。テストにおいては、訓練データには存在しないパターンの孔について、学習済みのPINNで予測を行って、FEMの結果と比較している。その結果、孔が板の中央にあるときに孔の半径を変化させた場合にはPINNモデルによる結果の精度は十分であったのに対して、孔の位置をプレート上で移動させたときのPINNの精度は不十分であった。

最後に本論文の第五章では論文で示された成果を概括し、論文で取りあげた二つの問題について、実験では必ずしも十分な精度の結果が得られなかった場合も見られたものの、機械学習に物理情報を採り入れているPINNの有用性と多用性が示唆され、さらに今後の研究によりモデルの可能性を引き出せる余地があることを述べている。

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、複雑な空間的構造をもつさまざまな対象の解析にPINN(物理情報に基づくニューラルネットワーク)を応用することを目的として、実際に二つの問題について、主としてPINNによる解析を行い、その結果から得られた知見をまとめたものである。

近年、自然言語処理、マルチメディア情報処理などの分野において、大量のデータと計算リソースを用いることで、高い表現能力を備えたさまざまな深層ニューラルネットワーク(DNN)学習モデルにより、めざましい成果が得られるようになってきている。しかし利用できるデータが十分ではない場合、DNNによる学習は必ずしも成功するとは限らない。実際、DNNのモデルが大規模になるほど、その潜在的な性能も高まるものの、その一方で必要となるデータ、計算リソースも膨大なものとなる傾向がある。PINNとは、DNNに物理法則に基づく制約を組み込むことで、データが限られている状況でDNNの性能向上を図るモデルである。

本研究では具体的に「古文書の非侵襲的解析」と「孔の空いた板の応力解析」という二つの問題を取りあげている。第一の古文書の非侵襲的解析では、開くと破損してしまうような文書について、それを閉じたままにして、情報を読みとることを目的としている。情報を読み取るためには、文書を閉じたままCTスキャンにかけて得られる三次元CT画像を用いる。第二の孔の空いた板の応力解析とは、工業部品などに力をかけたときの影響を調べることを目的としており、設計などにおいて重要な課題である。この解析については、CAEツールによってシミュレーションは可能とはなっているものの、計算コストが高いという問題が知られている。本論文では、これら2つの問題のそれぞれについてPINNモデルを構築して実験を行った結果から得られた成果について説明している。

古文書の非侵襲的解析の問題について、本研究では、まず7ページの簡易的な冊子を用意して、それを対象として実際に三次元CT画像を取得して解析を行っている。本研究では、冊子をコンデンサになぞらえて、各ページをコンデンサ内の静電場における電位の等値面であると見立てるというモデルを提案している。そのようなアナロジーのもとで、本研究では、PINNのモデルを構築して用いる前に、まず静電場の電位の数理モデルを仮定した上で、ラプラス方程式に従ってそのモデルのパラメータを導出するという方法によって、閉じた冊子からページの情報を抽出する実験を行っている。その実験ではCT画像において、各ページの上にあると判断できる箇所を合計で3500点ほど手動のアノテーションに基づいて選択してページ抽出に利用している。抽出結果の精度の評価にはOCRを用いている。具体的には抽出したページデータから、元のページに書かれていた文字がOCRで読み取れたかどうかを確認している。

古文書の非侵襲的解析の問題について、さらに本研究では、PINNのモデルを構築して実験を行っている。PINNでは、DNNで三次元CT画像内の点の座標から、その点での電位を予測する。このときアノテーションされた点とそのページ番号を訓練データとして用いる。

またPINNにはラプラス方程式を組み込んでいる。学習では、DNNでの訓練誤差とラプラス方程式の誤差の重み付け和を損失関数としている。本論文では、ラプラス方程式のみを用いるモデルとPINNモデルの比較実験を示し、画質の観点でPINNモデルから、より優れた結果が得られたとしている。またU字型に折り曲げられた20ページの実験用冊子、50ページの両面印刷の書籍、19世紀の書籍(6ページ、見開き可能)にPINNモデルを適用した結果も示している。さらにアノテーションの点の個数、およびDNNでの訓練誤差とラプラス方程式の誤差の重み付けの値の影響についても説明している。また提案手法ではアノテーションの質と量が重要であることから、作業の負担軽減のために、本論文ではアノテーションの半自動化手法を提案し、実験によりその有用性を示している。

次に、孔の空いた板の応力解析の問題について、本論文では、一般的に用いられるFEM(有限要素法)では計算コストが高いことを述べた上で、FEMと同様の解析が可能で、しかも高速に計算を行えるサロゲートモデル(代理モデル)をPINNによって構築したと説明している。PINNでは、DNNが予測する応力の値の誤差と、応力の平衡方程式についての誤差から損失を計算するようになっている。実験としては、孔が一つ空いた板を対象として、孔の位置やサイズを変えた板を学習とテストに用いて、PINNで予測を行って、FEMの結果と比較している。その結果、孔の位置を移動させたときのPINNの精度は不十分であったものの、孔が板の中央にあるときに孔の半径を変化させた場合に、PINNモデルによる結果の精度は十分であったと述べている。

以上を総括して、本論文は博士(人間・環境学)の学位論文として価値あるものと認める。また令和6年1月17日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。なお本論文は、京都大学学位規程第14条第2項に該当するものと判断し、公表に際しては、当該論文の全文に代えてその内容を要約したものとすることを認める。

要旨公表可能日： 令和 年 月 日以降