



# 物理法則を組み込んだ深層学習技術を用いた 不飽和土中水分移動解析

及川航貴<sup>1,2</sup>, 斎藤広隆<sup>1</sup>

Water flow analysis in unsaturated soils using physics-informed neural networks

Koki OIKAWA<sup>1,2</sup> and Hiroataka SAITO<sup>1</sup>

**Abstract:** Conventional deep learning models do not always follow physical conditions such as governing equations in their predictions. Physics-Informed Neural Networks (PINNs) add physical loss terms to the loss function to evaluate whether the predictions are satisfied with the governing equations and initial and boundary conditions, in addition to a prediction loss term to evaluate the error between the predictions and the training data when learning deep learning models. Conventional numerical inverse analysis to estimate soil hydraulic properties requires appropriate settings for boundary and initial conditions. One novel example that allows more flexible condition setting than process-based models is an inverse analysis method using PINNs. PINNs, given training data on pressure head and/or volumetric water content and the Richards equation as a governing equation, can predict changes in pressure head over time and the soil hydraulic property profiles. This paper describes examples of PINNs used both in forward and inverse analysis of variably saturated water flow in soils. Finally, we summarize some recent studies using PINNs in the field of soil physics and future issues.

**Key Words:** PINNs, Inverse analysis, Soil hydraulic property

## 1. はじめに

ある土中の水分移動において任意の時間と深さにおける土中水圧力または体積含水率を求めることが不飽和水分移動解析の目的である。土中の不飽和水分移動解析に深層学習技術を用いる場合は、時間と深さを入力すると土中水圧力または体積含水率を出力するモデルを構築する。一般的な深層学習では学習データと予測値との誤差が最小となるようにモデルを構築するが、その予測値は解析対象となる物理現象の支配方程式に従うとは限らない。また、深層学習モデルは学習データに含まれない

ような未経験事象を予測することが難しい（木村・桐, 2023）。そこで、深層学習モデルを構築する際に、予測値が学習データとの誤差を評価する予測損失項だけではなく、支配方程式や初期・境界条件と矛盾しないかを評価する物理損失項を損失関数に加えたものが Physics-Informed Neural Networks (PINNs) である (Raissi et al., 2019)。物理条件を与えるため、通常の深層学習と比べて学習データの量がより少なく、ノイズがあるような場合でも学習できることが期待できる (Karnidakis et al., 2021)。

一方、逆解析では、順解析のために必要な土壌の保水性や透水性を表す不飽和水分移動特性を土中水圧力や土の体積含水率の経時変化データから推定する。しかし、従来の物理モデルの逆解析では現場の初期・境界条件や推定値の初期値の適切な設定等が求められる。例えば HYDRUS を用いた畑地圃場の逆解析の研究では、境界条件や初期条件など様々な設定を条件に応じて決定する必要があることが指摘されている (中村ら, 2006)。そこで、物理モデルより柔軟な条件設定が可能な技術の一例として、土壌物理分野でも利用されている PINNs を用いた逆解析手法がある。ここでは、一般的な不飽和水分移動解析のための PINNs について解説し、次に PINNs による不飽和水分移動特性の逆解析の適用例と今後の課題をまとめる。ここで用いた PINNs のソースコードは、本報の論文ダウンロードサイトの電子付録より利用できる。

## 2. 不飽和水分移動解析のための 物理法則を組み込んだ深層学習技術とは

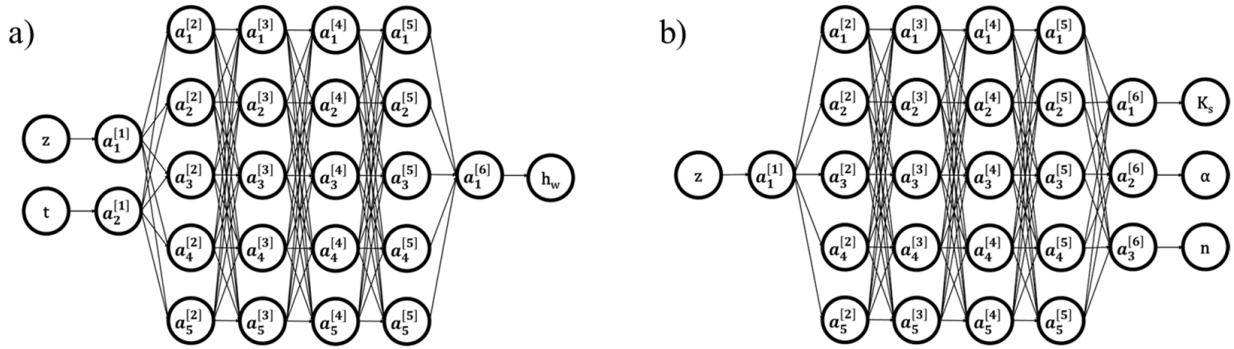
### 2.1 深層学習モデル

本章では一般的な不飽和水分移動解析のための物理法則を組み込んだ深層学習技術について解説する。入力層、中間層、出力層からなるニューラルネットワーク (NN) の中で中間層が 2 層以上のものを用いた機械学習を深層学習と呼ぶ (木村・桐, 2023)。深層学習を土壌中の水分移動の予測に用いる場合は、深さと時間を入力層

<sup>1</sup>United Graduate School of Agricultural, Tokyo University of Agriculture and Technology, 3-5-8, Saiwai-cho, Fuchu City, Tokyo 183-8509, Japan. Corresponding author: 斎藤広隆

<sup>2</sup>Japan Society for the Promotion of Science, 5-3-1, Koji-machi, Chiyoda-ku, Tokyo 102-0083, Japan.

2024年12月25日受稿 2025年2月12日受理



**Fig. 1** (a) 一次元の土中水圧分布の時間変化を予測するニューラルネットワーク構造の例, (b) 一次元の飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ ( $\alpha$ ,  $n$ ) 分布を予測するニューラルネットワーク構造の例.

に与えて、出力層から土中水圧を予測するような深層学習モデルを考える (Fig. 1a). Fig. 1a の NN は、入力層が 1 層で 2 ユニット、中間層が 4 層で各 5 ユニット、出力層が 1 層 1 ユニットである。NN では、あるユニットの値は前の層の各ユニットの値を順伝播して決定される ((1) 式)。ユニットの値を次の層に渡すときに活性化関数で非線形変換する。活性化関数には主に sigmoid 関数や tanh 関数が用いられる。

$$a_i^{[j]} = \sum_{k=1}^l \left( w_k^{[j-1]} f(a_k^{[j-1]}) \right) + b_i^{[j]} \quad (1)$$

ここで、 $a$  は出力値、 $l$  は  $(j-1)$  層目におけるユニット数、 $w$  は重み付き係数、 $f$  は活性化関数、 $b$  はバイアスである。誤差逆伝播法では、目的関数を最小化するように重み付き係数とバイアスを決定することで深層学習モデルを構築する。この目的関数として、予測値と学習データの平均二乗誤差で定義される損失関数が用いられる。土中水圧を予測する場合は、以下の (2) 式のようにある深さ、時間での正規化した土中水圧の計測値を学習データとし、その深さ、時間での正規化した土中水圧の予測値との平均二乗誤差になる。

$$\text{MSE}_{\text{obs}} := \frac{1}{N_o} \sum_{i=1}^{N_o} \left( \widehat{h'_w}(z, t) - h'_w(z, t) \right)^2 \quad (2)$$

ここで、MSE は平均二乗誤差、 $N_o$  は学習データ数、 $h'_w$  は正規化された土中水圧、 $z$  は深さ (cm)、 $t$  は時間 (d)、 $\widehat{\cdot}$  は変数が予測値であることを表す。

## 2.2 物理情報を組み込んだ深層学習モデル

物理情報を組み込んだ深層学習モデルでは、支配方程式や初期・境界条件が物理損失項として与えられる。損失関数に予測損失項 (学習データ) の情報が含まれる場合は、数値解析とは異なり、すべての初期・境界条件を与えなくてもよいことが特徴である。まず、初期・境界条件を物理損失として実装する方法を説明する。圧力境界条件のようなディリクレ境界条件や初期条件を損失項として与える場合は、上述の (2) 式で与える。初期条件

であれば  $t = 0$  の土中水圧の深さ分布を、上端の境界条件であれば  $z = 0$  の土中水圧の時間変化を与える。例えば上端が圧力境界条件であれば、 $z = 0$  で  $t$  は任意の時間から選んだ点 (評価点) を学習データとして与える。上端フラックス境界条件の場合は、以下の (3) 式のように、上端の土中水圧の予測値から求まるフラックス値と与えるフラックス値との平均二乗誤差で定義される (Oikawa and Saito, 2024)。

$$\text{MSE}_{\text{BC}} := \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \left[ \widehat{K}(h_w) \left( 1 + \frac{\partial \widehat{h_w}}{\partial z} \right) - q \right]^2 \quad (3)$$

ここで、 $N_p$  は評価点数、 $K$  は不飽和透水係数 ( $\text{cm d}^{-1}$ )、 $q$  はフラックス ( $\text{cm d}^{-1}$ ) である。土中水圧の空間微分および時間微分は、自動微分で高速かつ正確に計算できる (Baydin et al., 2018)。自動微分では NN の各ユニットの勾配と合成関数の微分における連鎖律から、NN の入力値に対する出力値の勾配が求められる。

次に支配方程式に関する物理損失項については、不飽和水分移動を対象とする場合はリチャーズ式を用いて (Richards, 1931)、(4) 式で定義される。体積含水率は順解析の場合は既知な水分保持曲線から、逆解析の場合は逆解析した水分保持曲線から求める。

$$\text{MSE}_{\text{PDE}} := \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \left\{ \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \widehat{K}(h_w) \left( 1 + \frac{\partial \widehat{h_w}}{\partial z} \right) \right] \right\}^2 \quad (4)$$

ここで、 $\theta$  は体積含水率 ( $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ )、 $t$  は時間 (d) である。(4) 式は物理損失項の評価点がリチャーズ式を満たすかを評価するものである。物理損失項の計算に用いる評価点は、解析対象範囲内で偏りがないようにラテン超方格サンプリングで選ばれることが多い。Fig. 2 に PINNs の予測損失、物理損失を評価する点  $(z, t)$  を示した。縦軸は深さ  $z$ 、横軸は時間  $t$  を表している。深さ方向の境界が上端・下端境界条件 (図中の □)、時間 0 が初期条件

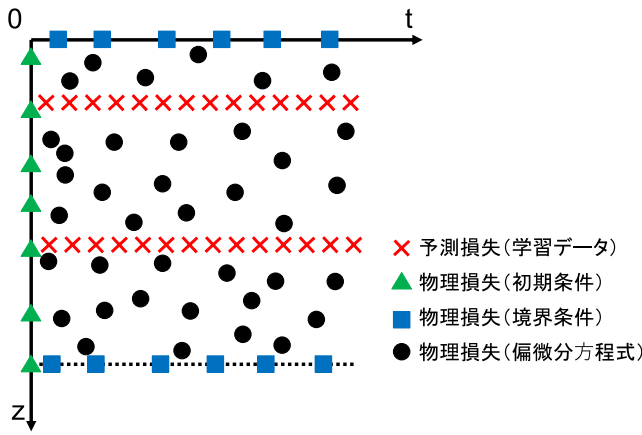


Fig. 2 PINNs の各損失項を評価する点  $(z, t)$ . 予測損失は 2 地点の経時変化データ, 物理損失は対象領域からランダムに選択した点で評価することを仮定した.

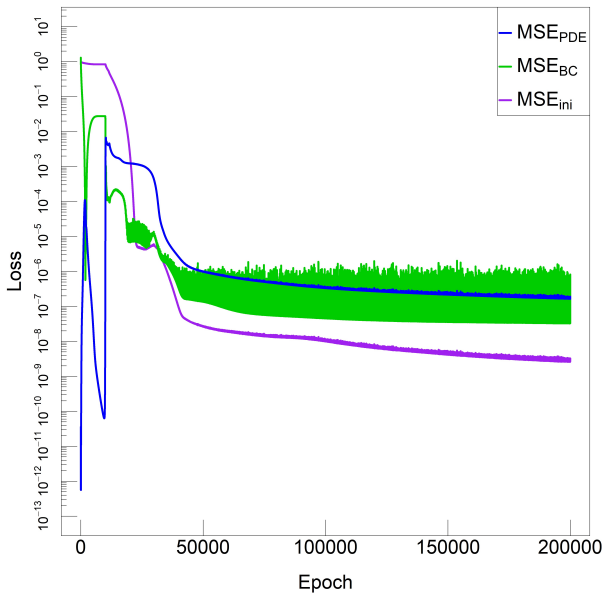


Fig. 3 PINNs による順解析時の各損失項の推移.

Table 1 PINNs の解析条件.

	順解析	逆解析
$\lambda_{OBS}$	0	1
$N_{OBS}$	0	10575
$\lambda_{PDE}$	1	1
$N_{PDE}$	63000	8000
$\lambda_{ini}$	1	0
$N_{ini}$	50	0
$\lambda_{BC}$	1	1
$N_{BC}$	1260	80

(図中の  $\Delta$ ) の範囲となる. 学習データの例として, 2 地点の深さに設置した土壤水分センサーによる経時変化データ (図中の  $\times$ ) を用いる場合を示した. 物理損失については, 解析領域全体 (対象とする  $z$  および  $t$  からできる  $t-z$  空間) から任意に選んだ評価点 (図中の  $\bullet$ ) において

リチャーズ式との誤差が評価される. PINNs の損失関数は, 以上の損失項の重み付きの和で与えられる ((5) 式).

$$\text{Loss} := \lambda_{\text{obs}} \text{MSE}_{\text{obs}} + \lambda_{\text{PDE}} \text{MSE}_{\text{PDE}} + \lambda_{\text{BC}} \text{MSE}_{\text{BC}} + \lambda_{\text{ini}} \text{MSE}_{\text{ini}} \quad (5)$$

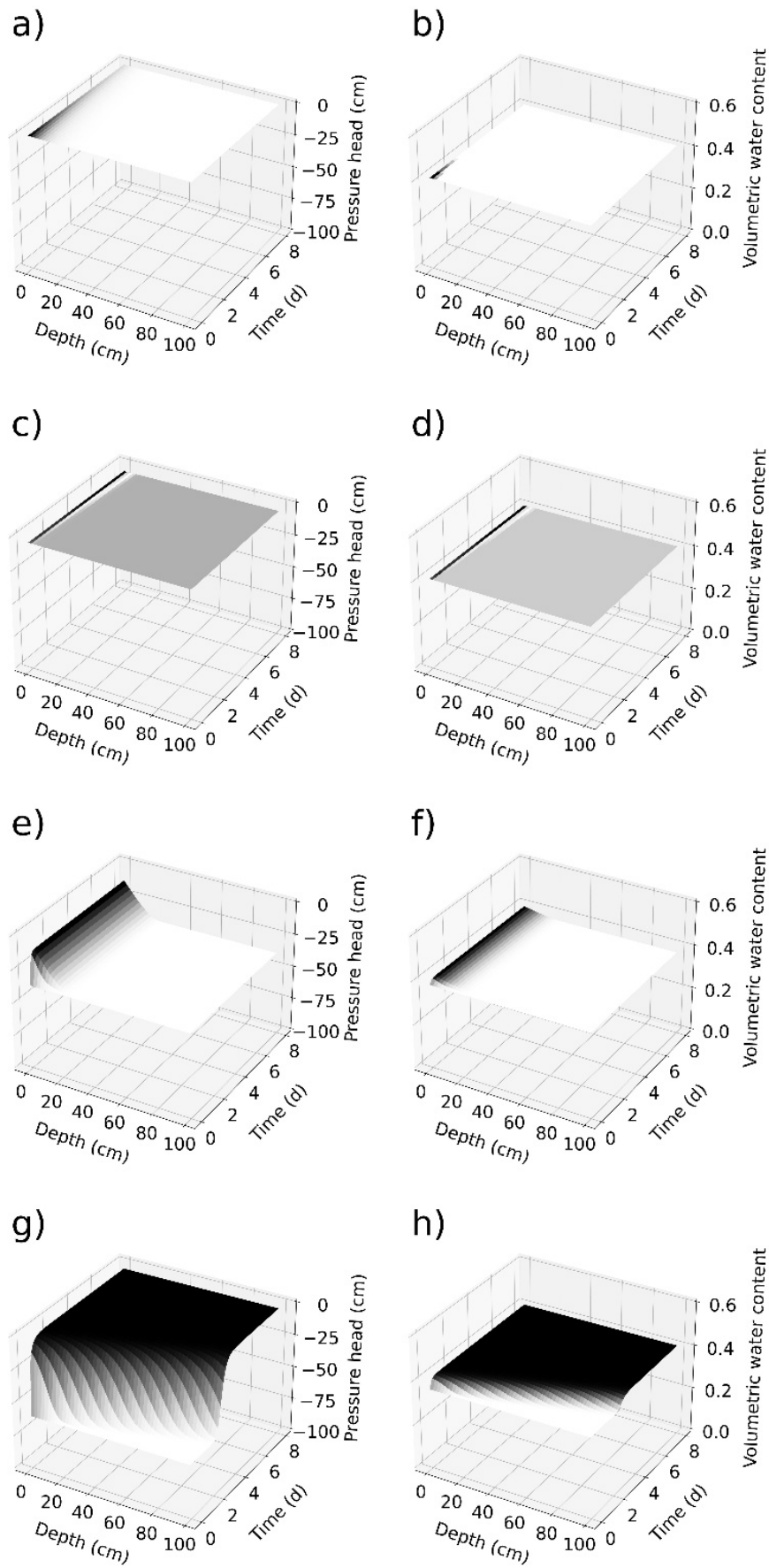
ここで,  $\lambda$  は重みである. PINNs の最適化手法は, 主に確率的勾配降下法的一种である適応的モーメント推定 (Adaptive Moment Estimation または ADAM) (Kingma and Ba, 2014) や準ニュートン法的一种である L-BFGS-B (Byrd et al., 1995; Liu and Nocedal, 1989) が用いられる (出口ら, 2021). 本解説で用いた ADAM は勾配の二乗を移動平均して, パラメータをどれだけ更新するかを制御する学習率を勾配の大きさに応じて調整することができる (横山ら, 2024). PINNs では, 学習を繰り返してモデルパラメータを修正するが, 学習の停止条件は主に反復回数か損失関数の閾値などで指定されるが, いずれも問題ごとに適切な値を設定する必要がある.

### 3. 物理法則を組み込んだ深層学習技術による不飽和水分移動解析の適用例

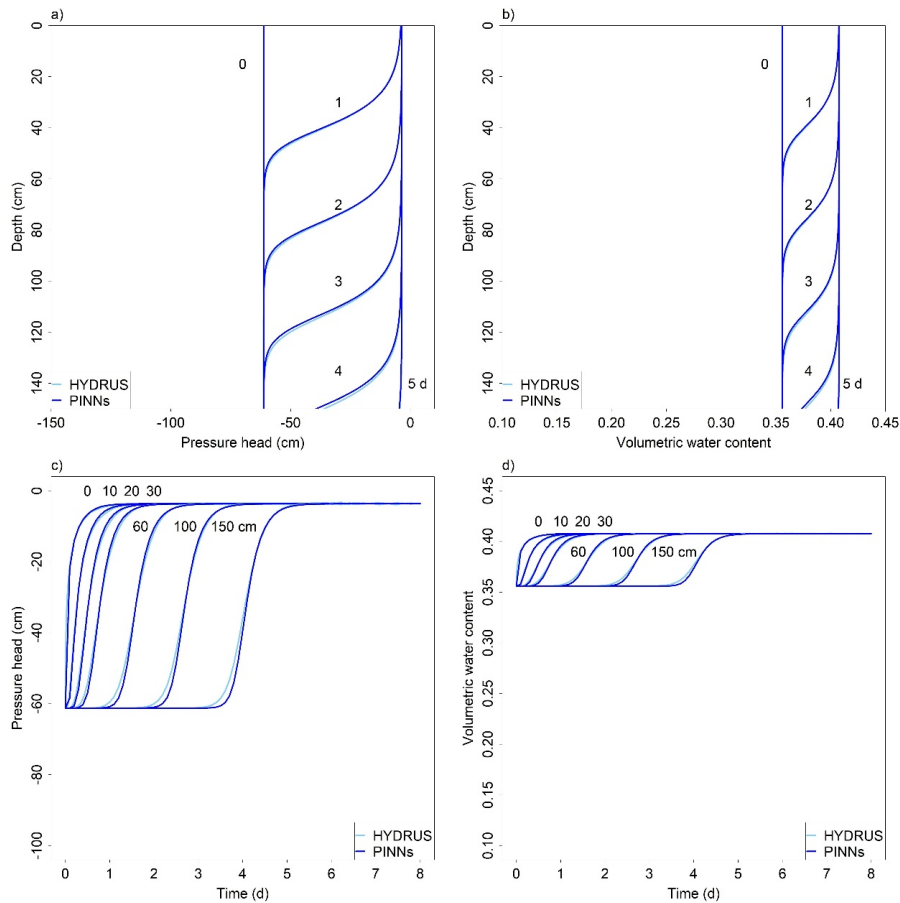
#### 3.1 順解析

PINNs のモデル構築において順解析と逆解析に本質的な違いはないが, ここでは HYDRUS のような不飽和水分移動の数値解析と同様に, 支配方程式および初期・境界条件に関する物理損失項だけで損失関数を定義し, 土壤の不飽和水分移動特性を既知とする場合を順解析とした. 順解析の例 (Supplement 1) として, 地下水位が 500 cm で  $0.1 \text{ cm d}^{-1}$  の基底流フラックス (齋藤・取出, 2023) があるクレイロームの均一な土層に対して, 上端に  $2 \text{ cm d}^{-1}$  の一定フラックス境界条件を与えた場合の浸潤シミュレーションを示す. 活性化関数は sigmoid 関数, 最適化アルゴリズムは ADAM, 反復回数は 20 万回として, Python の機械学習ライブラリである PyTorch (Paszke et al., 2019) で実装した. 物理条件の評価点は深さ  $0 \sim 100 \text{ cm}$  まで, 浸潤開始後  $0 \sim 6$  日間の中からラテン超方格サンプリングで選んだ. NN 構造を Fig. 1a に示した. クレイロームの飽和透水係数  $K_s$  と不飽和水分移動特性モデルである Mualem-van Genuchten (M-vG) モデル (van Genuchten, 1980) のパラメータはソイルカタログの値 (Carsel and Parrish, 1988) を用いた. 損失関数の設定を Table 1 にまとめた.

損失関数の推移 (Fig. 3) と学習過程の土中水圧力分布と体積含水率分布の経時変化の予測結果 (Fig. 4) を示した. 学習過程の初期 (Fig. 4a, b) は全てが湿潤状態で, リチャーズ式に関する物理損失項も小さかった (Fig. 3). その後, 初期条件を満たすがリチャーズ式を満たさない状態となった (Fig. 4e, f). 反復回数が 10 万回を超えると損失関数の合計値の変化が小さくなった (Fig. 3). 最終的に得られた土中水圧力および体積含水率の予



**Fig. 4** PINNs による順解析の学習過程の (a, c, e, g) 土中水圧力分布と (b, d, f, h) 体積含水率分布の経時変化の予測値。それぞれ反復回数が (a, b) 0 回, (c, d) 1 万回, (e, f) 2 万回, (g, h) 20 万回。



**Fig. 5** PINNs による順解析時の予測結果と HYDRUS の計算結果の比較. (a) 土中水圧力分布, (b) 体積含水率分布, (c) 各深さの土中水圧力の経時変化, (d) 体積含水率の経時変化.

測値は、同じ解析条件の HYDRUS の順解析と同様の結果であった (Fig. 5). 物理条件を与えていない 100 cm 以深および 6 日以降も HYDRUS と大きな誤差はみられず、いわゆる「外挿」に相当する解析にも適用できる可能性が示唆された。

既往研究では、PINN による順解析は少なくない。Yang and Mei (2022) は体積含水率表記のリチャーズ式を組み込んだ PINNs を用いて、上端・下端ともに一定体積含水率条件の一次元の鉛直浸潤現象を順解析した。均一なローム質土壌を対象として、支配方程式および初期・境界条件といった物理損失項のみを損失関数として深層学習モデルを構築して、従来の数値解析および実測値と矛盾しない体積含水率の予測値が得られた。伊藤・酒匂 (2022) では、土柱法の保水性試験における不飽和浸透挙動の順解析に PINNs を用いた。学習データを与えずに支配方程式および初期・境界条件だけを損失関数としたモデルは、2 つの位置の体積含水率の経時変化データを予測損失項として与えたモデルと比べて、物理損失の評価点を多く設定しなければ高精度の予測結果が得られなかった。しかし、物理損失の評価点を多くすることは深層学習モデルの学習過程の計算コストが増大することにつながる。したがって、順解析の場合は一般的に計算効率の点で従来の物理モデルに対して PINNs の優位

性はあまりない。ただし、構築された深層学習モデルは、従来の数値解析とは異なり、任意の深さ、時間の入力値に対して高速に出力値 (予測値) を求めることができる。また、後述する逆解析では従来の物理モデルに対して柔軟な条件設定が可能といった優位性がある。Wang et al. (2023) は、一次元の水・熱移動を解析するために、物理損失としてリチャーズ式と熱移流拡散方程式の複数の物理条件を与えた Multiphysics-Informed Neural Networks (マルチ PINNs) を提案した。土中の水分移動のみならず溶質やガス移動を考慮する場合、それらの同時移動解析にはマルチ PINNs の構築が必要となる。

### 3.2 逆解析

次に土中水圧力や体積含水率の経時変化データから、飽和透水係数  $K_s$  と不飽和水分移動特性モデルである M-vG モデルのパラメータを推定する PINNs について解説する。この過程は、いわゆる逆解析に相当するものである。逆解析の例 (Supplement 1) として、上述した順解析と同様の浸潤シミュレーションを対象として、HYDRUS の計算結果の中から土壤水分センサーでの測定を模して 6 点 (深さ 10, 20, 40, 60, 80, 100 cm) の土中水圧力の経時変化データと 3 点 (深さ 0, 30, 70 cm) の体積含水率の経時変化データ (Supplement 1) を予測損失項の評価に用いた (Table 1)。順解析と同様に、地下水水位が

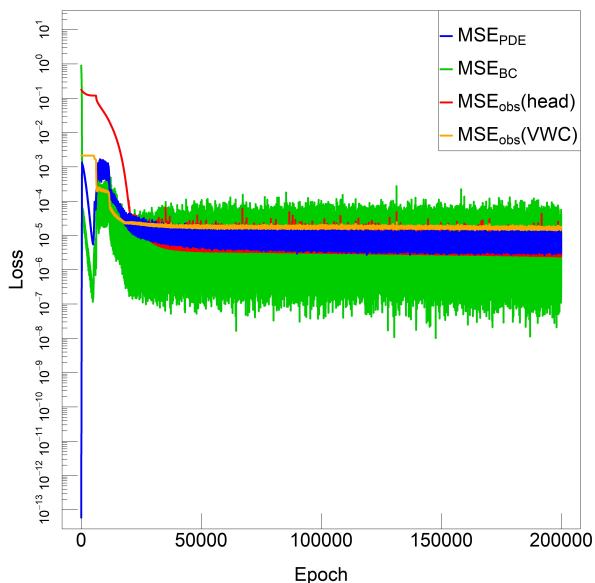


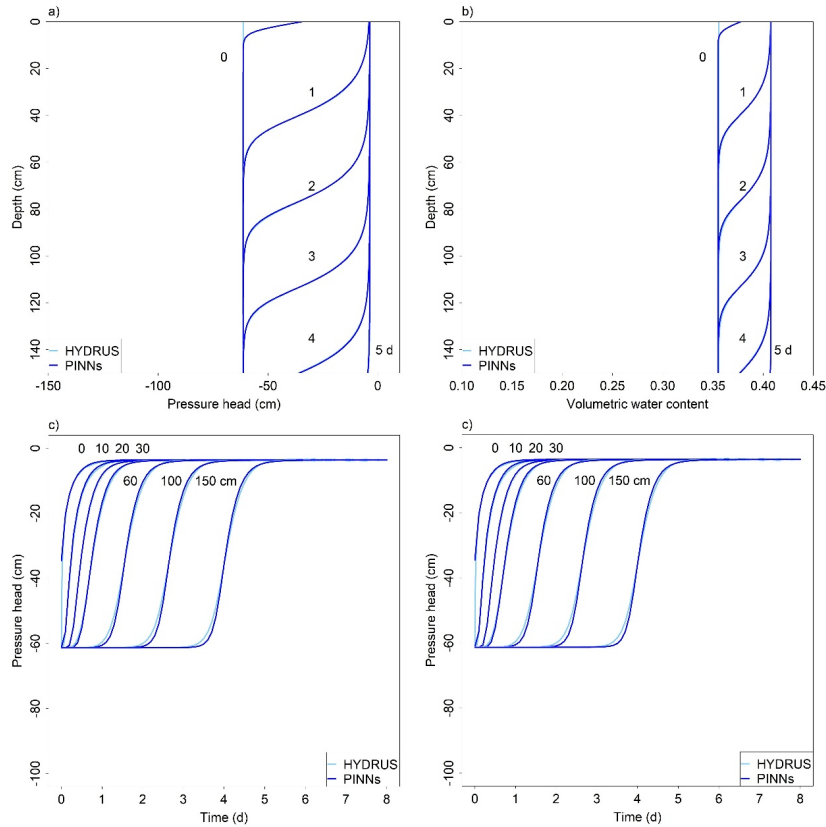
Fig. 6 PINNsによる逆解析時の各損失項の推移.

500 cm で  $0.1 \text{ cm d}^{-1}$  の基底流フラックスがあるクレイロームの土層に対して、上端に  $2 \text{ cm d}^{-1}$  の一定フラックス境界条件を与えた場合の浸潤シミュレーションを解析対象とした。逆解析の対象となるクレイロームの深さ方向の飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  分布および一般には求められない高密度の初期値の深さ分布（初期条件）は未知とした。NN は、時間と深さを入力値として土中水圧力を予測する NN (Fig. 1a) と、深さを入力値として飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  を予測する NN (Fig. 1b) の 2 つを用いた。Fig. 1 の例では飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  を均一としたが、NN ではこれらのパラメータを深さ方向の分布として予測するモデルとした。また活性化関数は sigmoid 関数、最適化アルゴリズムは ADAM、反復回数は 20 万回として、PyTorch で実装した。物理条件の評価点は深さ 0 ~ 100 cm まで、浸潤開始後 0 ~ 8 日間の中からラテン超方格サンプリングで選んだ。学習過程での損失関数の推移をみると、最初は予測損失項が支配的で、一時的に物理損失項が大きい状態となり、最終的に全ての損失項が収束する (Fig. 6)。土中水圧力および体積含水率の予測値は、同じ解析条件の HYDRUS と同様の結果であった (Fig. 7)。ただし、初期値の深さ分布を与えていないため、初期の上端付近の土中水圧力を過大評価してしまっている。これは、少し濡れている状態からの浸潤現象の方がリチャーズ式に関する物理損失項が小さくなるためと考えられる。深さごとに得られた飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  分布の予測値は深さ方向に均一とした真値と同様の結果であった (Fig. 8)。このように、PINNs を使って、浸潤過程の土中水圧力の変化から、飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルの

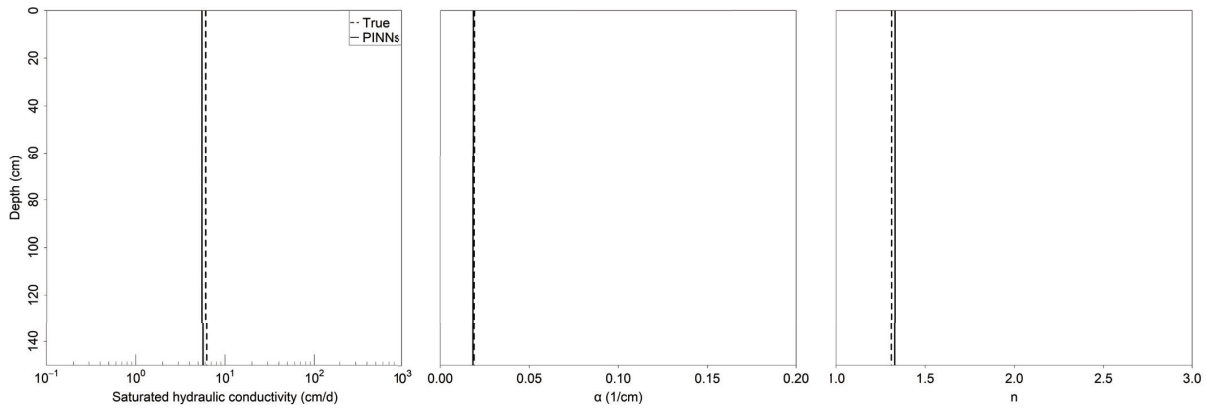
パラメータ  $(\alpha, n)$  を逆解析より推定することができる。

次に PINNs モデルを用いた土の水分移動パラメータの逆解析について、既往研究をいくつか紹介する。福永ら (2023) は土柱法による保水性試験において、土柱内 2 点の位置の体積含水率の経時変化データを予測損失項として、PINNs モデルの構築と同時に均一な豊浦砂または東俣シラス土層の  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  を逆解析より推定した。同様に Depina et al. (2022) は均一なノルウェーのモレーン土を模した混合土のカラムの浸潤試験の 6 点の位置の体積含水率の経時変化を学習データとして、 $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  を逆解析より推定した。

不飽和水分移動特性の一つである水分保持曲線そのものを予測する研究も行われている。Bandai and Ghezzehei (2021) は、均一な 1 次元のローム質土壌内の浸潤を解析対象として、深さと時間から土中水圧力を予測する NN に加えて、この NN で予測された土中水圧力の絶対値の対数値を入力値として不飽和透水係数と体積含水率（すなわち不飽和透水係数と水分保持曲線そのもの）を予測する NN を用いた。損失関数は等間隔の 10 点の体積含水率の経時変化データとの予測損失項とリチャーズ式の物理損失項から定義された。そして、20 cm の均一な土層の不飽和水分移動モデルを構築した。Bandai and Ghezzehei (2022) は、2 層の成層土壌内の浸潤を対象として、同様に均一土壌からなる上層と下層をそれぞれ NN で体積含水率、不飽和透水係数モデルおよび水分保持曲線を予測した。これらの PINNs では既存の不飽和水分移動特性モデルを使うことなく、不飽和透水係数と水分保持曲線そのものを求めている。また、上端の時間変化するフラックス境界条件を与えることなく、予測損失項とリチャーズ式に基づく物理損失項から損失関数を定義している。一方、Oikawa and Saito (2024) は、深さを入力値として  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  分布を出力（予測）する NN (Fig. 1b) と、深さと時間から土中水圧力を予測する NN (Fig. 1a) からなる PINNs を用いて、上層・下層ともに 50 cm の成層土壌の浸潤シミュレーションを解析した。学習データは 6 点の深さ (10, 20, 40, 60, 80, 100 cm) の土中水圧力と 3 点の深さ (0, 30, 70 cm) の体積含水率の経時変化データを与えた。6 種類の成層土に対して、 $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  分布を最適化した。構築された深層学習モデルは、任意の深さと時間から土中水圧力および任意の深さから  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ  $(\alpha, n)$  分布を予測できる。したがって、PINNs モデルを構築することは、学習データや物理条件と矛盾しない不飽和土壌水分移動特性を逆解析より推定することと解釈できる。また逆解析に PINNs を利用する利点として、二次元非圧縮性流れを対象として、強いノイズを含む速度と圧力のデータから流体の密度や動粘性係数を逆解析した例において、物理損失項の重みを予測損失より等倍から 9 倍程度まで大きくした場合は高精度な逆解析



**Fig. 7** PINNs による逆解析時の予測結果と HYDRUS の計算結果の比較. (a) 土中水圧力分布, (b) 体積含水率分布, (c) 各深さの土中水圧力の経時変化, (d) 体積含水率の経時変化.



**Fig. 8** PINNs による飽和透水係数  $K_s$  および M-vG モデルのパラメータ ( $\alpha, n$ ) の予測結果と真値の比較.

が可能であることが報告されている (出口ら, 2021).

#### 4. 物理法則を組み込んだ深層学習技術の課題

PINNs は物理情報を物理損失項として損失関数に与えるが, 学習過程で必ずしも予測損失項と物理損失項がともに最小化するとは限らない. 学習の成否に大きな影響を与える損失関数の重み付けや NN の構造, 学習の停止条件などのハイパーパラメータは経験的に決定されている研究が多い. 特に学習結果に大きな影響を与える損失関数の重み付けの決定方法は活発に研究が進められてい

るが (Kendall et al., 2018; Misra et al., 2016), あらゆる損失関数に適用できる一般的な方法はまだ確立されていない.

現場データへの応用のためには, PINNs を 2 次元や 3 次元に拡張する必要がある. ニューラルネットワークの構造としては, たとえば 2 次元であれば入力値にもう 1 つ空間座標が加えられるだけで容易に作成できる. しかし, 精度の良いモデルを構築するためには, 高密度で土中水圧力や体積含水率の空間データを与え, 多くの評価点で物理損失を評価することが必要となり, 計測や計算コストの大幅な増大が課題となる.

## 5. おわりに

土中水圧力や体積含水率を学習データとして与えた従来の深層学習モデルは予測値が支配方程式などの物理条件に従うとは限らない。そこで、深層学習モデルに物理情報を組み込んだ PINNs は学習データと予測値との誤差である予測損失項と、予測値が支配方程式や初期・境界条件を満たすか評価する物理損失項からなる損失関数を最小化するようにモデルを構築する。そのため、本質的に順解析と逆解析の違いがなく、学習されたモデルは深さと時間から土中水圧力または体積含水率を、深さから不飽和土壌水分移動特性を予測することができる。そのため、従来の数値解析による逆解析とは異なり、初期・境界条件の適切な設定などが必須ではない。本論文では、クレイロームの浸潤現象を対象として順解析と逆解析の例から、PINNs の構造や実装方法について解説した。そして、既往研究から土壌物理分野における PINNs の課題をまとめた。

## 謝辞

本解説での取り組みは JSPS 科研費 (24KJ1015) の助成を受けた。ここに記して謝意を表す。

## 電子付録

**Supplement 1** リチャーズ式を組み込んだ PINNs による一次元の鉛直浸潤現象モデルのサンプル Python コード。

## 引用文献

- Bandai, T. and Ghezzehei, T.A. (2021): Physics-informed neural networks with monotonicity constraints for Richardson-Richards equation: Estimation of constitutive relationships and soil water flux density from volumetric water content measurements. *Water Resources Research*, 57: e2020WR027642, doi:10.1029/2020WR027642.
- Bandai, T. and Ghezzehei, T.A. (2022): Forward and inverse modeling of water flow in unsaturated soils with discontinuous hydraulic conductivities using physics-informed neural networks with domain decomposition. *Hydrology and Earth System Sciences*, 26(16): 4469–4495, doi:10.5194/hess-26-4469-2022.
- Baydin, A.G., Pearlmutter, B.A., Radul, A.A. and Siskind, J.M. (2018): Automatic differentiation in machine learning: A survey. *The Journal of Machine Learning Research*, 18: 1–43, doi:10.48550/arXiv.1502.05767.
- Byrd, R.H., Lu, P., Nocedal, J. and Zhu, C. (1995): A Limited Memory Algorithm for Bound Constrained Optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(5): 1190–1208, doi:10.1137/0916069.
- Carsel, R.F. and Parrish, R.S. (1988): Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. *Water Resources Research*, 24: 755–769, doi:10.1029/WR024i005p00755.
- Depina, I., Jain, S., Mar Valsson, S. and Gotovac, H. (2022): Application of physics-informed neural networks to inverse problems in unsaturated groundwater flow. *Georisk: Assessment and Management of Risk for Engineered Systems and Geohazards*, 16(1), 21–36, doi:10.1080/17499518.2021.1971251.
- 出口翔大, 柴田洋佑, 浅井光輝 (2021): 予測に物理的意味を付与した機械学習 PINNs による誤差を含む教師データからのパラメータ推定. *土木学会論文集 A2 (応用力学)*, 77(2): I.35–I.45, doi:10.2208/jscejam.77.2.I.35.
- 福永竜世, 伊藤真一, 酒匂一成 (2023): Physics-Informed Neural Networks による不飽和浸透特性パラメータの逆解析. *AI・データサイエンス論文集*, 4(3): 100–108, doi:10.11532/jsceiii.4.3.100.
- 伊藤真一, 酒匂一成 (2022): Physics-Informed Neural Networks による不飽和浸透シミュレーションに関する基礎研究. *AI・データサイエンス論文集*, 3(J2), 56–64, doi:10.11532/jsceiii.3.J2.56.
- Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S. and Yang, L. (2021): Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3: 422–440, doi:10.1038/s42254-021-00314-5.
- Kendall, A., Gal, Y. and Cipolla, R. (2018): Multi-task learning using uncertainty to weigh losses for scene geometry and semantics. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, 7482–7491, doi:10.48550/arXiv.1705.07115.
- 木村延明, 桐博英 (2023): ニューラルネットワークの技術開発の変遷と今後の展望 — 日本の水文・水工学分野研究への適用事例を通して —. *農業農村工学会論文集*, 91(2): III.1–III.7, doi:10.11408/jsidre.91.III.1.
- Kingma, D.P. and Ba, J. (2014): Adam: A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, doi:10.48550/arXiv.1412.6980.
- Liu, D.C., Nocedal, J. (1989): On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Mathematical Programming*, 45: 503–528, doi:10.1007/BF01589116.
- Misra, I., Shrivastava, A., Gupta, A. and Hebert, M. (2016): Cross-stitch networks for multi-task learning. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, 3994–4003, doi:10.48550/arXiv.1604.03539.
- 中村公人, 大串祥子, 池浦康広, 田中宣多 (2016): 畑地用水計画のための HYDRUS-1D を用いた土壌水分移動解析における土壌水分特性パラメータの推定例. *土壌の物理性*, 134: 25–40, doi:10.34467/jssoilphysics.134.0.25.
- Oikawa, K. and Saito, H. (2024): Inverse analysis of soil hydraulic parameters of layered soil profiles using physics-informed neural networks with unsaturated water flow models. *Vadose Zone Journal*, e20375,



- doi:10.1002/vzj2.20375.
- Paszke, A., Gross, S., Massa, F., Lerer, A., Bradbury, J., Chanan, G., Killeen, T., Lin, Z., Gimelshein, N., Antiga, L., Demaison, A., Köpf, A., Yang, E., De Vito, Z., Rai-son, M., Tejani, A., Chilamkurthy, S., Steiner, B., Fang, L., Bai, J. and Chintala, S. (2019): Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. *Advances in neural information processing systems*, 32, doi:10.48550/arXiv.1912.01703.
- Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis G.E. (2019): Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378: 686-707, doi:10.1016/j.jcp.2018.10.045.
- Richards, L.A. (1931): Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, 1: 318-333, doi:10.1063/1.1745010.
- 齋藤広隆, 取出伸夫 (2023): 地下水涵養過程の数値解析再訪. *土壌の物理性*, 153: 13-24, doi:10.34467/jssoilphysics.153.0\_13.
- van Genuchten, M.Th. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5): 892-898, doi:10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x.
- Yang, Y. and Mei, G. (2022): A deep learning-based approach for a numerical investigation of soil-water vertical infiltration with physics-informed neural networks. *Mathematics*, 10: 2945, doi:10.3390/math10162945.
- 横山友杜, 岡野浩三, 小形真平, 中島 震 (2024): CNN モデルにおける最適化アルゴリズムの学習率の違いによるロバスト性能比較. *人工知能学会全国大会論文集 第 38 回* (pp. 2L5OS19a04-2L5OS19a04), 一般社団法人人工知能学会, doi:10.11517/pjsai.JSAI2024.0\_2L5OS19a04.
- Wang, Y., Shi, L., Hu, X., Song, W. and Wang, L. (2023): Multiphysics-informed neural networks for coupled soil hydrothermal modeling. *Water Resources Research*, 59(1), e2022WR031960, doi:10.1029/2022WR031960.



This article is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

## 要 旨

従来の深層学習モデルを用いた物質移動現象の解析では、予測値が支配方程式などの物理条件に従うとは限らない。そこで、深層学習モデルを構築する際に、予測値と学習データとの誤差を評価する予測損失項だけでなく、支配方程式や初期・境界条件と矛盾しないかを評価する物理損失項を損失関数に加えたものが Physics-Informed Neural Networks (PINNs) である。従来の数値解析による不飽和土壌水分特性の逆解析は、境界条件や初期条件などの適切な設定が求められる。そこで、柔軟な条件設定が可能な技術の一例として、PINNs を用いた逆解析手法がある。土壌水分に関する学習データとリチャーズ式を物理損失項で与えた PINNs は、土壌水分分布の経時変化や不飽和土壌水分移動特性の分布を予測できる。本解説では、PINNs による不飽和水分移動の順解析および逆解析の例を示した。最後に PINNs を用いた土壌物理分野の既往研究の成果と今後の課題をまとめる。

キーワード：PINNs, 逆解析, 不飽和水分移動特性