

物理情報組み込みニューラルネットを用いた Vlasov-Poisson モデルシミュレーションの性能評価

日大生産工(院) ○和田 光正 日大生産工 佐々木 真 統数研 矢野 恵佑

1. 背景

磁場閉じ込めプラズマの特性は、温度や密度の空間不均一性に駆動される乱流の非線形過程[1]と、高周波波動や中性ビーム入射によるプラズマ加熱[2]によるバランスに支配されている。従来の輸送研究では、粒子のサイクロトロン運動に比べ乱流の周波数は桁違いに小さいという近似のもと、ジャイロ運動論による5次元位相空間におけるシミュレーションが主流となっている[3]。一方で波動加熱は、本質的にサイクロトロン運動を解く必要があり、加熱や輸送を統一的に扱うためには、速度空間3次元を考慮した6次元シミュレーションが必要である。しかしながら従来の空間メッシュを切る手法では、計算時間が膨大となり、プラズマ全域に渡る6次元シミュレーションは困難であり、メッシュフリーの計算手法の開発が求められている。

一方、近年、深層学習を用いた手法である物理情報組み込みニューラルネットワーク(Physics-Informed Neural Networks, PINNs)が注目されている。PINNsは熱伝導[4]や流体現象[5]、水文学[6]、化学[7]、材料[8]、地球システム[9]などの幅広い分野で応用され始めている。6次元計算では、我々の先行研究において拡散方程式への適用が行われ、6次元において有限差分法による数値計算に対し、PINNsが約10倍の高速化に成功している[10]。6次元におけるプラズマ乱流現象へのPINNsの適用を考えることが重要である。そこで、本研究ではプラズマ乱流における理論モデルとして6次元Vlasov-Poissonモデルを対象とし、有限差分法との計算速度の比較を行う。

2. 物理情報組み込みニューラルネットワーク

Figure 1にPINNsの概略図を示す。PINNsは物理情報組み込みニューラルネットワークと呼ばれ、常微分方程式および偏微分方程式の解をニューラルネットワークによって求める手法である[11]。図中の青枠では空間座

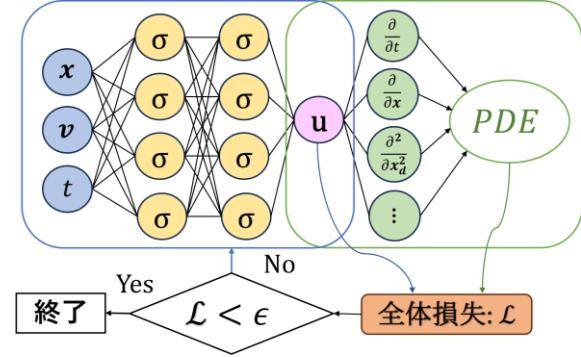


Fig.1 PINNs の概略図

標 \mathbf{x} と時間 t を入力とし、線形結合と活性化関数であるシグモイド関数 σ による計算を経て方程式の予測解 u を出力する。この予測解 u と既知の初期・境界条件の誤差から、学習の指標となる初期条件の損失 \mathcal{L}_{IC} および境界条件の損失 \mathcal{L}_{BC} を得ることができる。さらに、緑枠では予測解 u から、時空間における偏導関数を自動微分により求めることで、偏微分方程式の予測値を得る。偏微分方程式も既知であるため同様に予測値との誤差から、偏微分方程式の損失 \mathcal{L}_{PDE} を得ることができる。このようにして得られた各損失の和から求められる全体損失 \mathcal{L} が許容誤差 ϵ を下回るようパラメタを更新することで学習を行う。このようにPINNsでは初期・境界条件や偏微分方程式などの物理条件を損失に用いるため物理的整合性を保証する解を得ることが可能である。

3. 計算条件

本研究ではPINNsおよび有限差分法(FDM)による数値計算を用い、以下の式で表される d 次元Vlasov-Poisson方程式の求解を行う。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f - \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0 \quad (1)$$

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) = \int_{R^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad (2)$$

Performance Evaluation of Vlasov-Poisson Model Simulation Using Physics-Informed Neural Networks

Wada KOSEI, Sasaki MAKOTO and Yano KEISUKE

ここで、 f は速度分布関数、 ϕ は静電ポテンシャル、を表す。また、速度分布関数 f 、静電ポテンシャル ϕ の初期条件は以下の通り設定した。

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, 0) = f_0(\mathbf{v})[1 + \Delta \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})] \quad (3)$$

$$f_0(\mathbf{v}) = \exp(-|\mathbf{v}|^2) \quad (4)$$

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = -\frac{\Delta}{|\mathbf{k}|^2} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (5)$$

ここで、 $f_0(\mathbf{v})$ は平衡分布、 Δ は摂動の振幅、 \mathbf{k} は波数スペクトルを表す。また、PINNsの損失関数は以下の通り定義した。

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{VPDE} + \mathcal{L}_{PPDE} + \mathcal{L}_{VIC} + \mathcal{L}_{PIC} \quad (6)$$

ここで、 \mathcal{L}_{VPDE} 、 \mathcal{L}_{PPDE} はそれぞれVlasov項、Poisson項の偏微分方程式の損失を表し、 \mathcal{L}_{VIC} 、 \mathcal{L}_{PIC} も同様にVlasov項、Poisson項における初期条件の損失を表す。また、各損失は以下に示す平均二乗誤差で求められる

$$Loss = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\varepsilon_i|^2 \quad (7)$$

ここで ε は予測値と真値の誤差を表す。なお、PINNsの損失設計においては、境界条件の損失を明示的に設定せず、初期条件および偏微分方程式の損失のみを指標として、学習を行うこととした。FDMにおいても同様の条件で求解を行った。なお、本研究ではPythonのオープンソースライブラリであるPyTorchを用いて、M.Raissiらの手法[11]に倣いモデルを設計した。

4. シミュレーション結果

Figure 2 に空間1次元と速度空間1次元の2次元Vlasov-Poisson方程式の $t=0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ における速度分布関数のシミュレーション結果を示す。PINNsはFDMと比較しても良好なシミュレーション結果を示しており、時間発展とともに位相が伝播していく位相混合の様子が確認できる。このため、PINNsではVlasov-Poissonモデルに対し、物理条件を満たすシミュレーションに成功した。

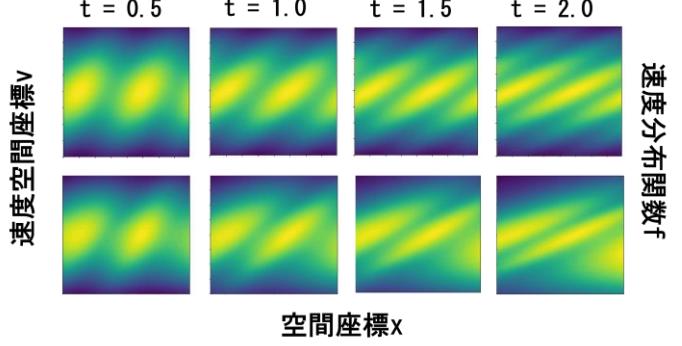


Fig.2 2D Vlasov-Poisson 方程式の速度分布関数
上段：FDM 下段：PINNs

5. まとめ

本研究ではPINNsおよび有限差分法を用いて空間1次元と速度空間1次元のVlasov-Poissonモデルを対象にシミュレーションを行った。その結果、初期条件および偏微分方程式満たすような学習に成功した。講演では、空間3次元と速度空間3次元における速度分布関数のシミュレーションを示し、計算時間と精度の評価を行う。

参考文献

- 1) P. H. Diamond, et al., Plasma Phys. Control. Fusion, R35, 47 (2005).
- 2) T. H. Stix, Waves in Plasmas, American Institute of Physics, 566 (1992).
- 3) G. Dif-pradalier, et al., Commun Phys, 5, 229 (2022).
- 4) SI. Itoh, K. Itoh, Sci. Rep. (2012).
- 5) S. Cai, et al., Adv. Math. Sci., 1727-1738, 37 (2021).
- 6) X. Jia, et al., ACM/IMS Trans. Data Sci. 1-26, 2 (2021).
- 7) K. Schütt, et al., Adv. Neural Inf. Process. Syst. 992-1002, 30 (2017).
- 8) G. R. Schleider, et al., J. Phys.: Mater. 32001, 2 (2019).
- 9) M. Reichstein, et al., Nature. 195-204, 566 (2019).
- 10) K. Wada, et al., PFR, in press (2025).
- 11) M. Raissi, et al., J.Comput.Phys., 686-707, 378 (2019).