

大規模シミュレーションへの AI/データ科学の融合的アプローチ Integrated AI/Data Science Approach to Large-Scale Simulations

本多充¹, 成田絵美², 前山伸也³, 渡邊智彦³

HONDA Mitsuru¹, NARITA Emi², MAEYAMA Shinya³, WATANABE Tomohiko³

京大工¹, 量研那珂², 名大理³

Kyoto Univ.¹, QST Naka², Nagoya Univ.³

日々、言葉を聞かない日はないくらいに人口に膾炙するようになった AI(Artificial Intelligence/人工知能) という語であるが、AI とは本来人間の知性を模倣するための試み全般を内包している。機械学習(Machine Learning) はその AI の範疇に入る言葉であり、機械が人間による明示的な指示あるいはプログラムなしにデータからパターンを学習する方法のことを指している。より高度に自律的な AI の開発を目指し、過去数十年、AI への過度な期待と過剰な失望のサイクルを繰り返しながら、基礎的な研究開発と社会実装への模索が続けられてきた [1]。2000 年代に入り、生体の脳の神経回路を模した人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network/ANN or NN) を用いた深層学習(Deep Learning) の技術開発が大きく進んだ。ビッグデータという言葉も社会に浸透し始めた状況の中、2012 年に画像認識大会 ILSVRC で深層学習モデルを使ったグループが既存の手法から劇的な認識率向上を見せて優勝したこと、深層学習の潜在的な可能性が広く知られるようになり、計算機能力の向上も相まって、諸兄も知る現在の深層学習の興隆^{*1}へとつながることになったのである。

深層学習の特徴は、NN モデルを用いて大規模かつ様々なメディアのデータから学習を行うことができることにある。データの用い方によって、正解ラベルのついたデータを用いる教師あり学習、正解ラベルのないデータを用いる教師なし学習、エージェントの振る舞いによって生じる報酬で行動を強化する強化学習に大別される。また、NN モデルにも様々な種類があり、汎用的な全結合 NN(FCN)、画像認識や自然言語処理に用いられる畳み込み NN(CNN)、時系列データに用いられるリカレント NN(RNN) などがある。これらは広く使用される代表的な類型であるが、NN アーキテクチャの一部に過ぎない。

核融合プラズマ分野は実験や大型計算機を用いたシミュレーションによって、日々大規模なデータが生み

出されるため、深層学習と相性の良い分野であると言える。現在では広く応用が進んでおり、全てを網羅することは到底できないが、NN によって元のモデルの挙動を模擬し高速な評価を可能とする代理モデルの開発 [2, 3, 4, 5, 6, 7]、ディスラプション発生の予測 [8, 9, 10]、安定性の予測 [11, 12]、プラズマ平衡の構成 [13, 14]、閉じ込め状態や不安定な分類 [15, 16]、プラズマ分布の予測 [17, 18]、Fokker-Planck 衝突項の模擬 [19]、プラズマ制御 [20] などが挙げられる。

我々のグループでは、局所ジャイロ運動論コード GKV の非線形シミュレーションによって生み出される膨大なデータに着目し、深層学習によってそのデータの利活用を行うべく、富岳・成果創出加速プログラム「核融合プラズマ閉じ込め物理の開拓」の一環として研究開発を行っている。非線形シミュレーションは、通常、揺動振幅の飽和状態における輸送流束を評価するために実施される。一般に計算終了までに膨大な計算資源を必要とし、設定条件にもよるが、富岳規模のスーパーコンピュータを用いても飽和状態に至るまでに長時間の計算が必要となることもある。そのため、非線形計算の比較的初期の状態、あるいは計算の初期条件から、飽和状態の推定につながる情報を獲得することができれば、非線形シミュレーションの多数回の試行を経ずとも初期条件を最適化することが可能になる。また、飽和状態に至る過程のデータについてはこれまであまり着目されてこなかったが、そこから飽和状態が推定できるのであれば、終状態につながる情報が含まれていることになり、有益な情報を引き出すことが可能になると考えた。

JT-60U プラズマパラメータに対するジャイロ運動論シミュレーションで得られる 5 次元揺動分布関数から、波数空間における分布強度の画像 $|\tilde{f}^2|(k_x, k_y)$ を決まった時間刻みで出力することにした。この画像は各時刻で強度を規格化しているので、画像には強度の絶対値情報は含まれておらず、 (k_x, k_y) 空間における $|\tilde{f}^2|$ の相対的な強度のみが表現されている。また、

*1 第 3 次 AI ブームと呼ばれている。

k_x, k_y の値も画像からは省いている。我々は CNN モデルの中でも、比較的訓練パラメータ数が少ないながらも高性能である EfficientNet-B4[21] を用いて、画像を入力データ、画像が生成された状態（線形成長、非線形成長、飽和の各状態）をラベルデータとする分類器を作成した。その結果、各状態のあわい*2を除く全ての画像を正しく分類することに成功した [22]。さらに、ラベルデータを画像が生成された時刻とする回帰モデルを作成し、画像から時刻を予測させることにした。飽和後は時刻との関連性が失われると想定されることから、飽和までの時刻を予測する事とした。その結果、テストデータに対して決定係数で 0.9949 という高い回帰性能を得ることができた [22]。これは、飽和に至るまでの過程には明確なパターンが存在し、それは画像単体から得られる情報で十分予測可能であることを示している。

次に、Cyclone ケース (CBC) パラメータの GKV シミュレーションデータで学習したモデルを用いて、モデルにとって未知である JT-60U ケースの画像から、そのケースの飽和時刻の予測を試みた。その結果が図

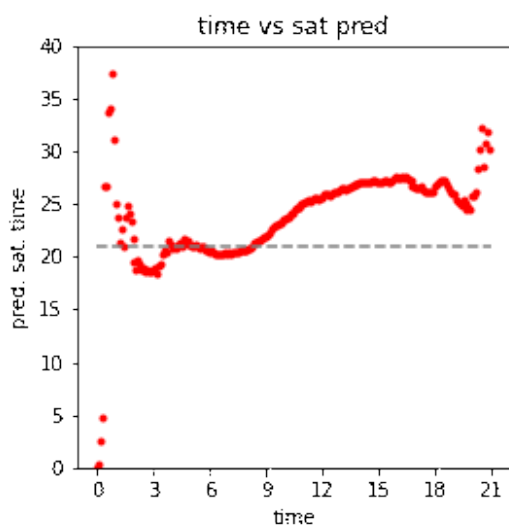


図1 CBC で訓練したモデルを用いて JT-60U ケースの飽和時刻を予想した。横破線は実際の飽和時刻である。

1 であり、シミュレーション初期の段階から、飽和時刻をかなり正確に予測できていることがわかる [22]。ケースが異なっても支配的な不安定性など共通する部分があれば、その発展パターンには類似性があることを示している。

このモデルでは入力に絶対値情報がないため、究極の目標である飽和熱流束値を事前に予測する事は不可能である。熱流束予測に取り組むべく、準線形モデルになぞらえ、画像に加えて静電ポテンシャル揺動の二

乗の数値データも同時に読み込み、時刻と電子・イオンの熱流束値を出力する、マルチモーダルモデルを開発した [23]。テストデータに対して決定係数 0.99 を超える高い性能を出すだけでなく、未知のデータに対しても、主たる不安定性が共通するケースにおいては 0.95 を超える決定係数で熱流束を予測できることを示した。

現在では、圧力揺動と静電ポテンシャル揺動の位相差を入力とするモデルや、CNN と RNN を組み合わせたモデルなどの開発を行い、より安定的かつ高精度に予測できるように取り組んでいる。

講演では、上記の話に加えて、近年急速に広がりを見せている教師なし学習の一つである Physics Informed Neural Network(PINN)[24] を用いた輸送方程式の解法などについても紹介する予定である。

References

- [1] Michael Wooldridge. AI 技術史. インプレス, 2022.
- [2] O. Meneghini, et al. *Phys. Plasmas*, Vol. 21, p. 060702, 2014.
- [3] J. Citrin, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 55, p. 092001, 2015.
- [4] M.D. Boyer, S. Kaye, and K. Erickson. *Nucl. Fusion*, Vol. 59, p. 056008, 2019.
- [5] M. Honda and E. Narita. *Phys. Plasmas*, Vol. 26, p. 102307, 2019.
- [6] S.M. Morocsohk, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 61, p. 106040, 2021.
- [7] M.D. Clement, N.C. Logan, and M.D. Boyer. *Nucl. Fusion*, Vol. 62, p. 026022, 2022.
- [8] J. Kates-Harbeck, A. Svyatkovskiy, and W. Tang. *Nature*, Vol. 568, pp. 526–531, 2019.
- [9] Z. Yang, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 60, p. 016017, 2020.
- [10] E. Aymerich, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 62, p. 066005, 2022.
- [11] Y. Liu, et al. *Plasma Phys. Control. Fusion*, Vol. 62, p. 045001, 2020.
- [12] Y.F. Zhao, et al. *Plasma Phys. Control. Fusion*, Vol. 64, p. 045010, 2022.
- [13] S. Joung, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 60, p. 016034, 2020.
- [14] L.L. Lao, et al. *Plasma Phys. Control. Fusion*, Vol. 64, p. 074001, 2022.
- [15] F. Matos and others. *Nucl. Fusion*, Vol. 60, p. 036022, 2020.
- [16] A. Jalalvand, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 62, p. 026007, 2022.
- [17] M.D. Boyer and J. Chardwick. *Nucl. Fusion*, Vol. 61, p. 046024, 2021.
- [18] J. Abbate, R. Conlin, and E. Kolemen. *Nucl. Fusion*, Vol. 61, p. 046027, 2021.
- [19] M.A. Miller, et al. *J. Plasma Phys.*, Vol. 87, p. 905870211, 2021.
- [20] J. Seo, et al. *Nucl. Fusion*, Vol. 61, p. 106010, 2021.
- [21] M. Tan and Q.V. Le. Efficientnet: Rethinking model scaling for convolutional neural networks. 2019.
- [22] E. Narita, M. Honda, S. Maeyama, and T.-H. Watanabe. *Nucl. Fusion*, Vol. 62, p. 086037, 2022.
- [23] M. Honda, E. Narita, S. Maeyama, and T.-H. Watanabe. *Contrib. Plasma Phys.* submitted.
- [24] M. Raissi, P. Perdikaris, and G.E. Karniadakis. *J. Comput. Phys.*, Vol. 378, pp. 686–707, 2019.

*2 遷移の状態では分類もまた恣意的であるので、この誤判定がモデルの性能を毀損することにはならない。