J. Plasma Fusion Res. Vol.97, No.2 (2021) 64‐65

小特集

磁場閉じ込め核融合プラズマにおけるデータ駆動アプローチによる物理モデリングの進展

Progress of Physical Modeling by Data-Driven Approach in Magnetically Confined Fusion Plasmas

1．はじめに

1. Introduction

今 寺 賢 志
IMADERA Kenji
京都大学大学院エネルギー科学研究科

（原稿受付：2020年９月30日）

近年，計算機を用いた研究アプローチとして，従来のシミュレーションに加え，データ駆動科学ともいうべき新しい方法が台頭している[1]．本学会誌においても近年，『核融合プラズマにおけるデータマイニングの活用』(2016年５月号)[2]や，『プラズマ・インフォマティクス－データ駆動科学のプラズマへの応用－』(2019年11月号)[3]などの小特集が取り上げられており，ここ数年のプラズマ・核融合学会でも多くの関連講演が行われている．

シミュレーションは,「何らかの数値計算手法を用いて,与えられた支配方程式の近似解を求める」という演繹的方法論と定義できる一方，データ駆動科学は,「何らかの統計数理的手法を用いて，得られたデータの背後にある法則性を抽出・推定する」という帰納的方法論である．また物理学では，要素還元主義に代表されるように，多くの事象を少数の法則で数学的に矛盾なく説明することが可能であるという考えに立脚する場合が多く，シミュレーションも歴史的にこの価値観を共有してきた．一方，データ駆動科学は，そのような汎化性はもちろんめざしながらも，あくまで与えられたデータの内挿を高精度に行うことに主眼をおいており，少なくともモデルの単純さは多くの場合に優先度が低いと考えられてきた．このような点が，データ駆動科学を導入する際に従来の科学的アプローチとの差異を感じる要因ではないかと筆者は考えている．

一方で，そのような異なった特性を有したシミュレーションとデータ駆動科学を併用することで，相乗的な結果を得られる場合がある．その一例が低コストシミュレーションである．磁場閉じ込め核融合プラズマ分野では，第一原理であるジャイロ運動論に準拠した大規模シミュレーションが精力的に行われているが，時間的にも経済的にも高コストである．例えば，筆者が行っている大域的ジャイロ運動論シミュレーションの場合，用いる計算機やプラズマサイズに拠るが，大型計算機を用いて数日から数週間程度の計算時間が必要であることが標準的である．それ故に，物理パラメータの探索についても多くの時間を費やす必要がある．そこで考えられるのが，第一原理シミュレーションや実験で得られた大規模データをデータ駆動科学に基づいて処理することで，簡約化された物理モデルの開発を行い，高精度を維持しつつシミュレーションのコスト削減を行う方法である．この点については，文献[3]のまとめでも「本小特集で紹介できなかった例で，今後重要になると考えられのが，大規模数値シミュレーション（HPC）の低コスト化である」と言及されている．これは，シミュレーションとデータ駆動科学が融合した良い事例である．

また，統計解析の観点からもデータ駆動科学を考察してみよう．古典的な統計解析は,「何らかの統計手法を用いてモデルの特性を理解する」方法論である．例えば線形回帰を行えば，２つの変数の線形応答性を理解することができるであろう．一方でデータ駆動科学では，モデルは（あくまで人間が直感的に理解困難という意味で）ブラックボックス的な関数であって，モデルそれ自体を理解することが必ずしも主目的にはならない場合が多い．いわゆる機械学習はこのケースに該当する．つまり端的には，統計解

Graduated School of Energy Science, Kyoto University, Gokasho, Uji, KYOTO, 611-0011, Japan
author’s e-mail: imadera@energy.kyoto-u.ac.jp

析は近似解をめざすという意味でシミュレーション的なアプローチであり，機械学習はその再現をめざすという意味でエミュレーション的なアプローチに分類される．

しかしながら，そのような説明性の観点からもデータ駆動科学の分野で様々な試みが行われており[4]，その１つが次元縮約手法の一種である主成分分析[5]の応用である．機械学習の分野では，計算コスト削減の観点からしばしば主成分分析が用いられてきたが，本質的に重要な特徴量を抽出して次元を下げることで分析や解釈が容易となり，特に３次元以下に次元削減を行えば，データセットの様子を直接可視化することができるため，説明可能な新たな物理モデルの開発に貢献することも期待される．これは統計解析とデータ駆動科学によって相補的に手法が進展した良い事例である．

本小特集は，磁場閉じ込め核融合プラズマの分野で，そのようなシミュレーション，統計解析，データ駆動科学の融合によって行われた物理モデリングに関する興味深い４編の論文から構成されている．第２章 『機械学習による輸送モデリング -JT-60U における実践例-』では，データ駆動科学的手法により，物理現象の再現性を保ちつつ大幅に計算コストを削減した輸送モデリングとして，第一原理シミュレーションの結果を学習して得られたニューラルネットワーク（NN）モデルと，大域的最適化手法で生成された膨大なデータを学習して得られた NN 代理モデルを紹介する．また，これらのモデルを実装し，JT-60U 実験を対象とした輸送シミュレーションの結果についても言及する．

第３章 『データ同化による輸送モデリング -LHD における実践例-』では，データ駆動科学の一手法であるデータ同化を用いた輸送モデリングに関する研究を紹介する．この手法を用いて，ある輸送モデルに基づいたシミュレーションで得られた計算値と実際の観測値を結びつけ，その関係が統計的に妥当になるように輸送モデルを最適化する方法について言及する．併せて，LHD 実験を対象としたデータ同化システムによる輸送シミュレーションの結果や，熱拡散係数の回帰モデルの妥当性を検証した結果についても言及する．

第４章 『データ駆動アプローチを用いた動的乱流現象の解析』では，データ駆動科学的手法である動的モード分解（Dynamic Model Decomposition; DMD 法）を用いて乱流の時空間構造の抽出を行い，抽出された乱流構造間の因果関係を推定する方法を紹介する．大域的流体シミュレーションによって得られたケルビンヘルムホルツ乱流に DMD 法を適用した結果，乱流場は背景分布の変動，帯状流，コヒーレント揺動，スパイラル構造に分解され，得られた乱流構造の強度を示す指標を導入しその時間発展を見ることで，構造間の因果関係が同定可能であることを本章でまとめる．また，実験データから乱流の時空間発展の予測に応用した試みについても紹介する．

第５章 『データ駆動アプローチを用いた雪崩的乱流輸送現象の解析』では，データ駆動科学的手法である主成分分析を５次元位相空間構造の時系列データに適用することで，ジャイロ運動論シミュレーションにおける突発的輸送現象と関連したモードの位相空間構造を同定する方法を紹介する．多次元データ内の乱雑さを，特異値分解を用いて定量化することで位相空間ダイナミクスを整理した結果，突発的輸送の前に線型モードの形成による乱雑さの減少が起き，突発的輸送の直後に位相混合による乱雑さの増加が起きることを本章でまとめる．また，主成分分析による位相空間構造データの圧縮技術を開発した点についても言及する．

しばしばデータ駆動科学は，データの「補間」，つまり高次元空間におけるデータ点を滑らかに繋ぐ曲線を求める作業に帰結されると言われている．本小特集では更に踏み込んで，シミュレーション，統計解析，データ駆動科学が各々の特性を相互に「補完」することで，物理モデリングの進展に資することに焦点を当てている．データ源としては，シミュレーションを実験に置き換えても場合によっては差し支えないし，今回は磁場閉じ込め核融合プラズマの事例に限定しているが，その方法論自体は超領域性を有しており，広くプラズマ科学の分野にも応用可能であると考えられる．こうした観点を含めて，本小特集に掲載した４編の論文を読んでいただければ幸いである．

参 考 文 献

[１] T. Hey *et al.*, *The Foruth Paradigm Data-Intensive Scientific Discovery,* (Microsoft Research, Redmond, Washington, 2009).
[２] 山本 聡 他：プラズマ・核融合学会誌 **92**, 332 (2016).
[３] 浜口智志 他：プラズマ・核融合学会誌 **95**, 535 (2019).
[４] R. Guidotti, ACM Computing Surveys **51**, 93 (2018).
[５] I.T. Jolliffe, *Principal Component Analysis* (Springer, 2002).

J. Plasma Fusion Res. Vol.97, No.2 (2021) 66‑71

小特集　磁場閉じ込め核融合プラズマにおけるデータ駆動アプローチによる物理モデリングの進展

2．機械学習による輸送モデリング
-JT-60Uにおける実践例-

2. Machine-Learning Assisted Transport Modeling
-Practical Cases in JT-60U-

成田絵美，本多　充
NARITA Emi and HONDA Mitsuru
量子科学技術研究開発機構

（原稿受付：2020年9月30日）

核融合プラズマは幅広い時空間スケールの物理現象に支配されるため，その性能予測や物理解明には，各時空間スケールの物理現象を扱うモジュール群から構成される統合モデルが必要不可欠である．構成要素の一つである輸送モジュールはプラズマの巨視的な時間発展を扱う．ここでは，乱流輸送モデルを用いて乱流流束を予測するが，物理モデルの精緻化により計算コストが増大したため，統合モデル全体の計算速度を低下させていた．そこで，データ駆動科学的手法により，物理現象の再現性を保ちつつ大幅に計算コストを削減した輸送モデルが国内外で開発されている．本章では，第一原理計算とJT-60U実験で得られたデータに基づく人工ニューラルネットワーク（NN）モデル及び，大域的最適化手法の計算途上で生成される膨大な輸送計算データを学習することで構築される，輸送モデルを模擬するNN代理モデルを紹介するとともに，JT-60U実験に対する輸送シミュレーションの結果を示す．

Keywords:
machine learning, neural network, gyrokinetic simulation, stiff transport model, integrated code, global optimization, genetic algorithm, Nelder-Mead method

2.1　はじめに

核融合プラズマの性能予測や物理研究に用いられる統合モデルは，輸送ソルバを核として，MHD平衡，ダイバータ，加熱などの異なる時空間スケールの物理を扱う複数のモジュール（コード）群から成る[1]．核融合出力を決定づけるプラズマのコア領域における密度と温度を予測するという観点からは，粒子と熱が磁気面を横切りプラズマ外部へと運び出される正味の量である粒子束と熱流束を正確かつ高速に求めることが重要となる．プラズマの定常状態における温度と密度の予測には，設定する時間刻み幅にもよるが，輸送方程式を10^3から10^6回繰り返し解き定常状態へとプラズマを緩和させる必要があり，必然的に同じ回数もしくはそれ以上に粒子束と熱流束を算出しなくてはならない．JT-60Uなどのトカマクプラズマでは，乱流が輸送を支配しているため，密度と温度の分布予測精度は乱流に起因する粒子束と熱流束の予測精度に強く依存する．粒子束と熱流束を乱流輸送物理に最も忠実に計算する手段として，ジャイロ運動論コードを用いた第一原理計算が挙げられるが，一般にジャイロ運動論コードの実行はスーパーコンピュータを用いた大規模並列計算が必要である．更に，一度の計算に数日から一週間程度を要するため，これを10^3回以上繰り返すことは現実的ではなく，ましてや統合コードにおける輸送モデルとして用いることはできない．そこで輸送モジュールには理論モデルを数値計算でフィッティングした関数形を用いるCDBM[2]や，ジャイロ運動論モデルを簡約化したTGLF[3]やQuaLiKiz[4]などの高速に計算できる輸送モデルが導入されている．TGLFやQuaLiKizはジャイロ運動論コードと比べて10^6倍程度高速化されているものの，統合コードの計算速度を低下させる主要因となっており，定常状態の予測に並列計算で数日かかる場合がある．限られた放電の実験解析などには有用であるが，多くの試行回数を要するトカマク運転シナリオの開発には不向きであるため，CDBMなどのより簡略化された輸送モデルが用いられることが多く，第一原理計算に基づく乱流輸送物理は統合モデルに十分に取り込まれているとは言い難い状況であった．

統合コードにおける輸送モジュールの高速化のため，2014年頃から機械学習モデルの一種である人工ニューラルネットワーク（NN）モデルの導入が欧米で始まった．輸送モジュールの高速化に用いられるNNは回帰問題を扱っており，乱流輸送物理を特徴付ける複数の物理量を入力変数として，粒子束や熱流束を出力するモデルとなって

National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology, Naka, IBARAKI 319-1112, Japan
corresponding author's e-mail: narita.emi@qst.go.jp

いる．米国の研究グループは，OMFIT[5]と呼ばれる統合モデルフレームワークの中でDIII-Dの実験データから得られた熱流束を再現するNNの開発を皮切りに[6]，現在ではTGLFが予測する熱流束・粒子束・運動量流束を模擬するNN代理モデル（surrogate model）や，ペデスタル安定性を評価するEPED1モデルの挙動を模擬するNN代理モデルを用いるまでに拡張を進めている[7]．欧州の研究グループでは，QuaLiKizの挙動を模擬するNN代理モデルが開発されている．最初に発表されたモデルはQuaLiKizが予測する熱流束のみを再現するNNであったが[8]，米国のグループと同様に粒子束と運動量流束まで予測範囲が拡張され，JETの実験データを基にNNの学習に用いるデータを生成する統合モデリングの枠組みの構築と共に，開発が精力的に進められている[9, 10]．学習に用いられるデータに違いはあるが，いずれのモデルでもTGLFやQuaLiKizと比べて10^5倍程度の高速化に成功している．特に欧州では，従来型の大規模な統合コードよりも簡素化することで高速化された統合コードRAPTOR[11]にNN輸送モデルを導入し，実時間シミュレーションをめざしている[9]．実時間シミュレーションについては，[12]も参考のこと．

本章では国内で開発されている2種のNN輸送モデルを紹介する．これらの特徴を欧米で開発されているモデルと共に**表1**にまとめる．2.2節で紹介するモデルは他のモデルと異なり，第一原理計算と実験データの組み合わせを学習に用いている．2.3節で紹介するモデルは米国の研究グループと同様にTGLFを模擬するNN代理モデルであるが，大域最適化手法に基づく定常輸送コードが実行時に大量に生成するデータを用いて訓練を行った，予測精度に重きを置いた代理モデル開発という点に特徴がある．これらのモデルをJT-60U実験に対する輸送シミュレーションの結果と共に紹介する．

2.2　第一原理計算と実験データに基づくニューラルネットワーク輸送モデリング

既存の輸送モデルは拡散係数もしくは輸送フラックスとして出力するため，そのフラックスを算出した背後にある様々な熱力学的力に対する依存性を個別具体的に知ることはパラメータサーベイでもしない限り困難である．一方で，統合シミュレーションにおいては核融合出力を左右する密度や温度の径方向分布を上手く制御して理想的な状態を得ることが求められるため，フラックスを生み出す背景物理と分布形成の関係を理解することは有益である．そこで，粒子束と熱流束が準線形理論で表現できることを仮定することでフラックスと熱力学的力の関係を陽に書き下した，電子の粒子束と熱流束を予測する輸送モデルDeKANISが構築された[13].

$$\overline{\Gamma}_{\mathrm{e}} = \overline{D}(R/L_{n_{\mathrm{e}}} + C_{\mathrm{T}}R/L_{T_{\mathrm{e}}} + C_{\mathrm{P}}) \tag{1}$$

$$\overline{Q}_{\mathrm{e}} = \overline{\chi}_{\mathrm{e}}(R/L_{T_{\mathrm{e}}} + C_{\mathrm{N}}R/L_{n_{\mathrm{e}}} + C_{\mathrm{HP}}) \tag{2}$$

ここで，$\overline{\Gamma}_{\mathrm{e}}$と$\overline{Q}_{\mathrm{e}}$は規格化された電子の粒子束と熱流束，$\overline{D}$と$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$は規格化された電子の粒子・熱拡散係数，$R/L_{n_{\mathrm{e}}}$と$R/L_{T_{\mathrm{e}}}$は電子の規格化密度・温度勾配である．(1)，(2)式の右辺の括弧内における第一項は対角項，第二・三項は非対角項であり，それぞれ拡散・対流という輸送過程に対応している．非対角項における係数$C_{\mathrm{T,P,N,HP}}$は対流の大きさと向きを表しており，ジャイロ運動論シミュレーションによって求めることができる[14, 15]．ここで，$R/L_{n_{\mathrm{e}}}$と$R/L_{T_{\mathrm{e}}}$は$\overline{\Gamma}_{\mathrm{e}}$と$\overline{Q}_{\mathrm{e}}$を駆動する熱力学的な力であるが，$\overline{\Gamma}_{\mathrm{e}}$と$\overline{Q}_{\mathrm{e}}$の一方の対角項を駆動する熱力学的な力は，他方の非対角項の駆動力となっている．このとき，互いの非対角項は等しくなるというOnsager対称性が成り立つ．この対称性を崩さないよう，$C_{\mathrm{T,P,N,HP}}$，$\overline{D}$，$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$の計6つの係数を求めることで，拡散・ピンチに起因する$\overline{\Gamma}_{\mathrm{e}}$と$\overline{Q}_{\mathrm{e}}$を無矛盾に予測している．電子の粒子束と熱流束に加えて，DeKANISはイオンの熱流束を次のように表現して予測する．

$$\overline{Q}_{\mathrm{i}} = \frac{\overline{\chi}_{\mathrm{i,eff}}}{\overline{\chi}_{\mathrm{e,eff}}}\overline{\chi}_{\mathrm{e,eff}}R/L_{T_{\mathrm{i}}}\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{e}}}\frac{T_{\mathrm{i}}}{T_{\mathrm{e}}} \tag{3}$$

ここで，$\overline{\chi}_{\mathrm{eff}}$は$\overline{Q}$を対角項のみで表現したときの実効熱拡散係数であり，$R/L_{T_{\mathrm{i}}}$はイオンの規格化温度勾配，$n_{\mathrm{i}}/n_{\mathrm{e}}$と$T_{\mathrm{i}}/T_{\mathrm{e}}$はイオンと電子の密度・温度比である．実効熱拡散係数比$\overline{\chi}_{\mathrm{i,eff}}/\overline{\chi}_{\mathrm{e,eff}}$を求めることでイオンの熱流束を予測することができるため，上記と合わせて7つの係数（$C_{\mathrm{T,P,N,HP}}$，$\overline{\chi}_{\mathrm{i,eff}}/\overline{\chi}_{\mathrm{e,eff}}$，$\overline{D}$，$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$）を決定する必要がある．

7つの係数はNNを用いて求められるが，その学習に用いられるデータはジャイロ運動論コードGKW[16]の数値計算結果とJT-60Uの実験データによって構築されている．$C_{\mathrm{T,P,N,HP}}$と$\overline{\chi}_{\mathrm{i,eff}}/\overline{\chi}_{\mathrm{e,eff}}$は，計算コストが低いGKWの線形計算によって得ることができるが，$\overline{D}$や$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$の決定には乱流揺動の飽和レベルを評価するために非線形計算を必要とする．前述のようにその計算には数日以上の時間を要するため，学習データとして十分な回数を実施することは現実的に不可能である．そこで，JT-60Uの実験値から$\overline{D}$を半経験的に求めることで，輸送過程の理解に重要な非対角項の係数はジャイロ運動論コードによる第一原理計算に依拠しつつ，十分な学習データを得ることを可能にしている[15]．残る$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$はOnsager対称性から一意に決まる．

JT-60UのHモード放電の実験データに基づき構成された7千点程度の学習データを訓練・検証用データに分け，

表1　国内外のNNモデルを用いた輸送モデル開発の特徴．

	学習データ	機械学習モデルの結合対象
米国[5-7]	ジャイロ流体モデルTGLF	統合型体系OMFIT ✓ 輸送以外もNNモデル化・無矛盾に計算
欧州[8-10]	ジャイロ運動論準線形モデルQuaLiKiz	高速輸送コードRAPTOR ✓ 実時間計算
日本[13,15,23,24]	2.2節：ジャイロ運動論コードGKW＋JT-60U実験データ ✓ 分布形成機構の解析 2.3節：ジャイロ流体モデルTGLF＋大域的最適化手法 ✓ 予測精度の向上	統合型輸送コードTOPICS, GOTRESS ✓ 輸送以外も無矛盾に計算

NN を構築した（**図 1**）．ここで，NN の出力変数は 6 つの係数（$C_{\mathrm{T,P,N,HP}}$，$\overline{\chi}_{\mathrm{i,eff}}/\overline{\chi}_{\mathrm{e,eff}}$，$\overline{D}$）とし，$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$ は含めていない．$\overline{\chi}_{\mathrm{e}}$ はOnsager対称性を崩さないようにこれらの係数から求めている．一方，入力変数には温度や密度の勾配など，GKW の入力変数群に近い12の物理量としている．NN は全結合型のモデルであり，Python ライブラリである TensorFlow[17]をバックエンドとして，Keras[18]を用いて構築された．NN の表現力（複雑さ）を決める隠れ層の数や，各隠れ層が持つユニットの数などのハイパーパラメータは，ベイズ最適化を利用する Python ライブラリ Hyperopt [19, 20]を Keras のラッパーである Hyperas[21]を介して用いることで調整している．隠れ層の数を 1 から 4 の範囲で，各隠れ層のユニット数は10から300の範囲で最適化を実施した結果，2 層の隠れ層を有し，ユニット数はそれぞれ250と170の NN が得られた．ここでは，ドロップアウト率の最適化も行っており，各隠れ層での平均は約 0.02 である．ドロップアウト率とは，モデルの訓練時にランダムに学習に参加させないユニット数の割合を示しており，推論時には影響を及ぼさないパラメータである．ドロップアウトによって過学習のリスクを軽減している．活性化関数には，出力層に Softsign 関数を，出力層以外に Rectified Linear Unit（ReLU）を用いている．回帰問題を解く NN の出力層の活性化関数は線形関数とする例が多いが，Softsign 関数を用いることで上限・下限値を設けることができる．ここで，上限・下限値は訓練データの各出力変数の平均値から $\pm 3\sigma$ の値で設定している．ここで σ は訓練データを標本としたときの標本標準偏差である．線形関数を用いると，上限・下限値に近くデータ点数の少ない変数領域の訓練データに強く依拠して訓練データの範囲外の値を予測することとなる．十分広い変数領域に訓練データが及んでいない場合は，このような外挿が起こりやすく，特に本例のように NN を輸送モデルとして用いる際は，訓練データの範囲内から大幅に外れた位置における過度な外挿が輸送方程式を安定に解くことを妨げる可能性がある．そこで Softsign 関数の採用によって出力値の幅を制限することにより，安定した輸送計算を実現している．構築した NN を用いて DeKANIS は電子の粒子束及び電子・イオンの熱流束を予測する．学習データの構築に含まれないテスト用の JT-60U の H モード放電に対する DeKANIS と TGLF の予測誤差を**図 2** に示す．JT-60U の H モード放電に対して TGLF よりも精度が良いことが確認できる．

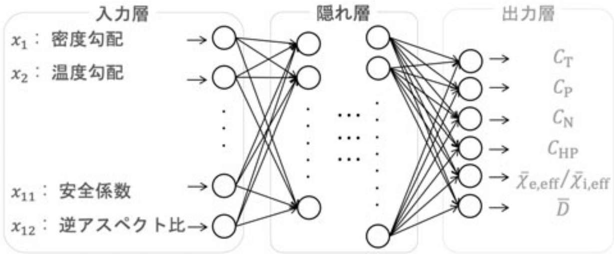

図 1　DeKANIS が用いる NN モデルの構造．出力された変数から電子粒子束及び電子・イオン熱流束が得られる．

DeKANIS は TOPICS[22]と GOTRESS[23, 24]に導入され，密度や温度の分布予測に用いられている．これらのコードは Fortran で書かれているため，Python を用いて構築された NN を高速化のために Fortran で書き換えて輸送モデルとして利用している．**図 3** はテスト用の JT-60U の H モード放電39061に対して密度及び温度の定常分布予測を行なった例である．TOPICS では密度と温度を同時に解いており，ここで得られた密度を用いて，GOTRESS では温度のみを解いている．TOPICS の輸送ソルバは輸送方程式を時空間に離散化して解く従来型の輸送コードである一方，GOTRESS は遺伝的アルゴリズムとネルダー・ミード法による大域最適化手法を用いて輸送方程式の解を求めている．このように異なる解法でも，両輸送コードで一致する分布が得られることが確認できる．分布予測に要する時間は，TOPICS を用いた場合，1 コアで計算して 3 時間程度であり，従来の TGLF や QuaLiKiz などを用いた予測よりも十分早い．一方，GOTRESS を用いた場合，**図 3** のケースでは26コアを利用し 1 分以下で収束解が得られている．DeKANIS は乱流フラックスが密度や温度の空間勾配に強く依存するジャイロ運動論シミュレーションの結果を基に構築されているため，硬い輸送モデルに分類される．硬い輸送モデルを用いて TOPICS のような従来型の輸送コードで分布予測を安定して行うには，時間刻み幅を非常に細かく取る必要があり，計算時間が増大する傾向にあるが，GOTRESS では分布の勾配値を大域的最適化手法で直接求めるために数値振動が起きづらく，より高速な分布予測が可能となっている．次節では，この GOTRESS の枠組みの中で構築する NN 代理モデルを紹介する．

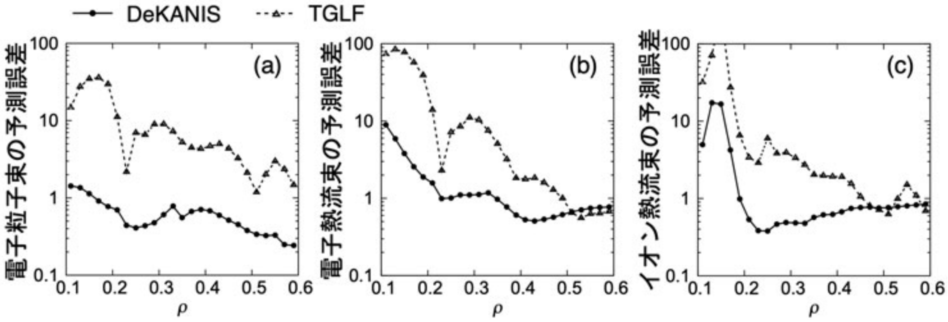

図 2　テスト用の14の JT-60U H モードプラズマに対して DeKANIS と TGLF を用いて(a)電子粒子束及び(b)電子・(c)イオン熱流束を予測したときの予測誤差（二乗平均平方根誤差 σ）の径方向分布．

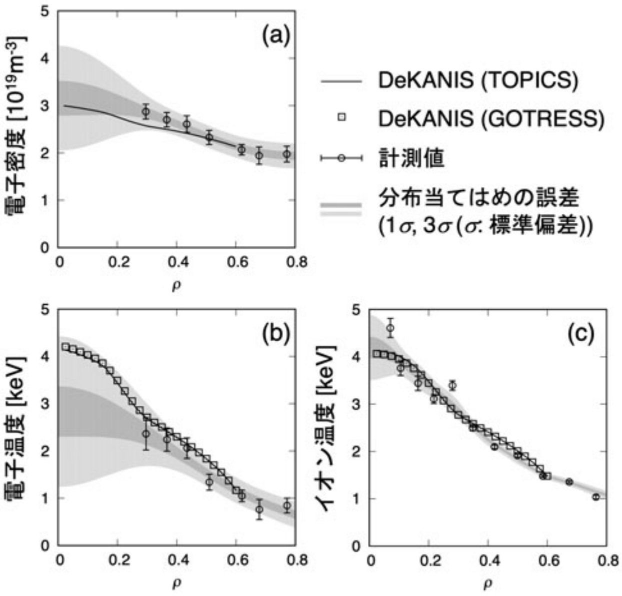

図3　テスト用の JT-60U H モードプラズマに対する(a)電子密度及び(b)電子・(c)イオン温度の DeKANIS による予測と計測値の比較．温度の予測には統合コード TOPICS と GOTRESS を用いた2種の結果を示す．

2.3　遺伝的アルゴリズムを利用したニューラルネットワーク代理モデルの構築

輸送モデルは統合コードの中で定常解を得るまでに何万回，時には何百万回以上も呼び出されることを考えれば，ジャイロ運動論シミュレーションからは大幅に簡約化されたとは言え，TGLF モデルをそのまま統合コードの中で運用するには時間的な制約が大きい．その数値コストから TGLF は内部で波数ごとに MPI 並列化されているが，標準的な23並列（1波数1コア）として JFRS-1 上で計算しても，評価1回当たり約 0.15－0.2 秒掛かる．統合シミュレーション終了まで TGLF を百万回呼ぶ必要があると仮定すると，TGLF の評価だけで約50時間以上も掛かってしまうことになり，他のモジュールに必要な計算時間と照らし合わせても改善の余地は大きい．

GOTRESS は他の輸送コードと大きく異なり，遺伝的アルゴリズムなどの大域的最適化手法を用いて定常輸送方程式を解いている．GOTRESS の数値アルゴリズムの詳細は[23, 24]に譲るが，端的に言えば，各径方向位置における温度と温度勾配を1つの組として輸送方程式を満たす解の組をパラメータ空間内で直接探索している．GOTRESS で採用している大域的最適化手法はニュートン法といった局所最適化手法と異なり内部で微分計算を必要としないため，勾配値に敏感な硬い輸送モデルを扱う上で有利な点を有している一方で，解に到達するためには多くの試行（この場合は TGLF の計算）を積み重ねなくてはいけない欠点もある*．しかし，この欠点はデータ駆動科学の観点からは有利と取れる面もあり，広いパラメータ空間において TGLF の多くの試行がなされたということは，NN モデルで TGLF の振る舞いを模擬するに足る多数のデータが収集できたということに他ならない．さらに，ランダムや一様なサンプリングと異なり，GOTRESS はあくまで解を求めようとしており解の周辺に多くのデータを生成させるため，そのデータから NN モデルを作れば，現在扱っているケースにおける正しい解の近くの TGLF の振る舞いをよく知っていると期待できる．そのため，TGLF の NN 代理モデルの構築によるシミュレーションの高速化を試みる．**図4**に NN 代理モデルの構築から定常解を得るまでの過程を示す．データ収集のための GOTRESS シミュレーションにおいて，遺伝的アルゴリズムにおける個体数を100，世代数上限を通常シミュレーション時の上限の10分の1である1,000世代とし，異種粒子種間の等温化過程計算のための繰り返し計算を3回で終了させることとした．径方向位置を空間8点とすると，$100\times1{,}000\times8\times3=2.4\times10^6$のデータが取得できる．前処理として，有効数字5桁で四捨五入した数値データが全て一致したデータセットは同じであるとして捨てることで，データ量を百万程度にまで減らせる．このシミュレーションでは温度や温度勾配の可動域をかなり広く取っているため，現実にはあり得ない値も評価してしまう（例えば電子温度 $T_e=0.1$ keV，イオン温度 $T_i=20$ keV という組み合わせも数値的に作り得るため，温度比は核融合プラズマでは非現実的な $T_e/T_i=0.005$ となってしまう）ことが起こりうる．このような外れ値は前提条件が非物理的であるだけでなく，そもそもの輸送モデルの適用範囲外である可能性が高いため，得られる輸送フラックスも意味をなさないおそれがある．これらは NN モデルの訓練においても有害であるため，NN モデルを訓練するために用いるデータは，各入力変数の分布の$\pm2\sigma$に入ったものだけに限定する．刈り込んだ後のデータ数はおよそ80万となる．なお，TGLF の NN 代理モデルの入力変数は23，出力変数は12である．出力変数は TGLF に倣い，電子，主イオン，不純物それぞれに対する粒子束，熱流束，低波数からの寄与のみの熱流束，運動量流束となっているが，以下では熱流束の情報しか用いない．入出力変数の詳細は[7, 23]参照のこと．NN モデルは3層の隠れ層を有する全結合 NN であり，各層に200ユニットを配しており，ドロップアウト率は 0.25 とした．

このようにして訓練された TGLF の NN 代理モデルが予測した電子とイオンの熱流束で決定係数 R^2 を算出すると

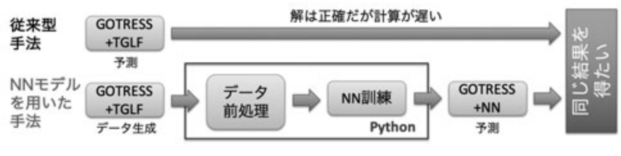

図4　GOTRESS によって NN 代理モデルを構築し，温度の定常分布を予測する流れ図．NN 代理モデルは図1に示すモデルと同様の構造である．

＊：但し，GOTRESSが安定に求解できる点を考慮すれば，数値安定性のために時間刻み幅を大幅に細かくしなければいけない従来型の輸送コードと比べて結果的に計算時間に遜色ないかむしろ高速である可能性がある点には留意が必要である．前述の DeKANIS を使用した例では1桁程度高速である．

それぞれ0.962，0.897となり，かなり良い再現性を示していることがわかる．NN代理モデルを１回評価するのに必要な計算時間は１コアで0.1ミリ秒であり，１コアで計算したTGLFと比較すると3×10^4倍程度高速であることが分かった．NN代理モデルを作成するまでに必要な時間は，データ生成に約３時間，前処理に215秒，NVIDIA GeForce GTX 1080 Tiを用いたNNモデルの訓練に181秒となっている．学習済みのNN代理モデルを用いたGOTRESSシミュレーションで定常分布が得られるまでに掛かった時間は64秒であり，TGLFをそのまま用いた状況と比べて500倍ほど高速である．

次に，前述のHyperasを用いてモデルの決定係数を向上させるべくNNモデルの構造とハイパーパラメータの最適化を行った．先程のモデルでは隠れ層は３層で固定であったが，必要に応じて４層目を付け加えて良いとし，さらに各層のユニット数（離散的に変化）とドロップアウト率（連続的）を可変とした．また，バッチサイズも可変とした．最適化の結果，４層目は不要と判定され，各層のユニット数の平均はおよそ400，ドロップアウト率は平均で約0.09，バッチサイズは４倍の8,192となった．この結果はベイズ最適化の結果として得られたものであるが，この選択の意味を解釈することができる．ユニット数の増加は，用いられた訓練データに比して元のモデルの表現力（複雑さ）が足りていなかったことを意味している．ドロップアウト率の減少は，訓練データが十分な量でかつ多様性に富んでいるため，ドロップアウトによって未知のデータに対する汎化性能を上昇させる必要があまり無いと判断したと思われる．また，バッチサイズの増加は，訓練データ内に含まれる相対的外れ値に対する耐性を獲得するためと推定される．NNモデルはバッチサイズでまとめられたサブセットデータを入力として流し込んでからネットワークの重みを更新する．もしバッチサイズが小さいと，サブセットデータに含まれた外れ値によってネットワークが影響を受ける割合が高まり，その結果最適でない重み値でモデルが更新されてしまう可能性が高まる．そうなるとなかなか最適なモデルに収束しなくなるため，小さなバッチサイズは好ましくない**．構築されたモデルの性能を測る指標として損失関数があるが，それによるとモデルは倍以上性能が向上していることがわかる．実際に熱流束に対する決定係数を算出すると，それぞれ0.987，0.943となり，大幅に性能が向上していることがわかる．なお，最適化には約８時間を要したが，２時間を経過した段階でほぼ最適に近い性能が得られていたため，そこで打ち切っても実用上問題はない．また，最適化によって得られたハイパーパラメータ情報は，同種のデータセットに対しても同様の性能向上が見込めることが経験的にわかっているため，これらの情報を初めから他のケースのハイパーパラメータとして設定しておけば，最適化の手間無く良好な性能を持つNNモデルを構築することができる．

最適化されたNN代理モデルの再現性をGOTRESSシミュレーションによって明らかにする．**図5**はGOTRESSによる定常時の(a)温度と(b)拡散係数の予測であり，TGLFを用いた場合と最適化NN代理モデルを用いた場合の結果を比較している．同じ初期条件から始め，収束に至るまでを計算している．平衡や加熱のデータには，JT-60UのＨモード放電39117の解析結果を用いた．最適化NN代理モデルは拡散係数の分布をほぼ完全に再現し，その帰結として温度分布も極めて良好に再現していることがわかる．

このようにしてGOTRESSデータを元に作られたNN代理モデルは，他の輸送コードでも利用可能である．実際，TOPICSにNN代理モデルの重みデータを渡すことで同様のシミュレーションが可能であることが明らかになっている．すなわち，データ生成が得意なGOTRESSによってモデルの訓練を行い，TOPICSでそのモデルを用いて時間発展シミュレーションを行う，という運用も可能となってくる．そのためにはモデルの汎化性能を向上させるなど工夫すべき点が残っているが，原理的にはNN代理モデルを用いた高速シミュレーションは実証されたと言える．

2.4 おわりに

NN輸送モデルは欧米で数年先行して導入されたが，国内でも欧米のモデルとは異なる特徴を生かした開発が進ん

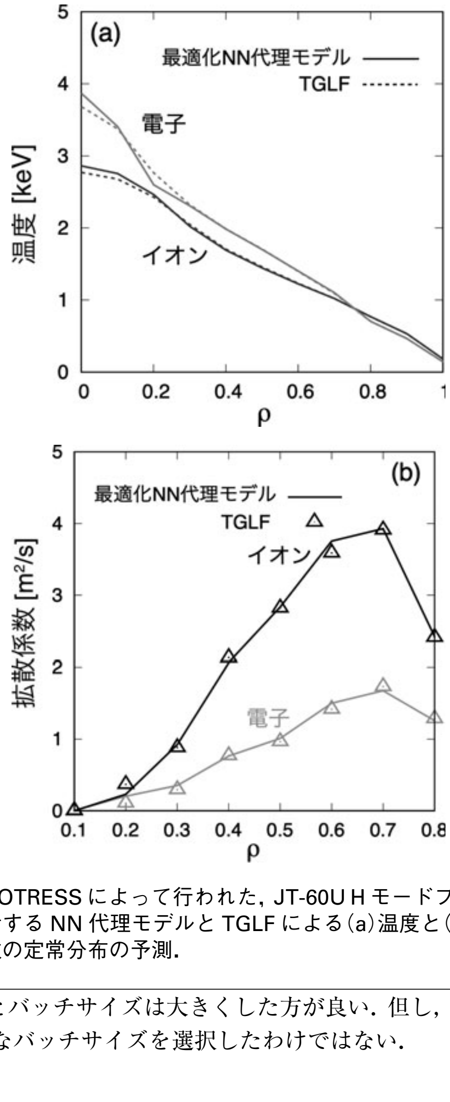

図５ GOTRESSによって行われた，JT-60U Ｈモードプラズマに対するNN代理モデルとTGLFによる(a)温度と(b)拡散係数の定常分布の予測．

＊＊：訓練に掛かる計算時間の観点からも，一般に訓練データが大きくなるとバッチサイズは大きくした方が良い．但し，今回の最適化では計算時間を指標としていないため，計算時間を短くするために大きなバッチサイズを選択したわけではない．

でいる．機械学習の分野は日進月歩であるため，国際会議を始めとした分野横断の活動で最新の技術・知見を取り入れながら，NN 輸送モデルの改良に留まらずプラズマ分野において広範な応用が進んでいる．本章では NN 輸送モデルの開発に重点を置いた解説を行ったが，実験解析や運転シナリオ開発などでの活用は実用に近いレベルに達している．その成果は国際トカマク物理活動（ITPA: International Tokamak Physics Activity）における輸送と閉じ込めトピカルグループ及び統合運転シナリオトピカルグループにおいて継続的に報告されており，ITER 等の将来装置に適用可能なモデルとして位置付けられている．

今後の進展のために不可欠な点として，機械学習に用いるデータの点数と変数領域の拡充が挙げられる．これにより，対象とする実験装置に依らない安定した輸送シミュレーションが実現することが期待される．既述のように，欧米では DIII-D や JET の実験データを取り込んだ統合フレームワークの中で NN 輸送モデルを構築する環境が整っており[7, 10]，より強力に開発が進むと考えられる．国内でも，独自の特徴を生かしつつ，例えば ITER プラズマ実験のモデリングと実験解析に向けた統合フレームワーク IMAS（Integrated Modelling and Analysis Suite）[1, 25]などを利用しながら開発環境を整え，NN 輸送モデルの開発を加速させる必要があるだろう．

参 考 文 献

[1] 林 伸彦 他：プラズマ・核融合学会誌 **95**, 423 (2019).
[2] A. Fukuyama *et al.,* Plasma Phys. Control. Fusion **37**, 611 (1995).
[3] G.M. Staebler *et al.,* Phys. Plasmas **12**, 102508 (2005).
[4] C. Bourdelle *et al.,* Plasma Phys. Control. Fusion **58**, 014036 (2016).
[5] O. Meneghini *et al.,* Nucl. Fusion **55**, 083008 (2015).
[6] O. Meneghini *et al.,* Phys. Plasmas **21**, 060702 (2014).
[7] O. Meneghini *et al.,* Nucl. Fusion **57**, 086034 (2017).
[8] J. Citrin *et al.,* Nucl. Fusion **55**, 092001 (2015).
[9] K. L. van de Plassche *et al.,* Phys. Plasmas **27**, 022310 (2020).
[10] A. Ho *et al.,* Nucl. Fusion **59**, 056007 (2019).
[11] F. Felici *et al.,* Nucl. Fusion **58**, 096006 (2018).
[12] 本多 充 他：プラズマ・核融合学会誌 **95**, 453 (2019).
[13] E. Narita *et al.,* Nucl. Fusion **59**, 106018 (2019).
[14] E. Fable *et al.,* Plasma Phys. Control. Fusion **52**, 015007 (2010).
[15] E. Narita *et al.,* Plasma Phys. Control. Fusion **60**, 025027 (2018).
[16] A.G. Peeters *et al.,* Comput. Phys. Commun. **180**, 2650 (2009).
[17] M. Abadi *et al.,* "TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems", (2015) http://tensorflow.org/
[18] https://keras.io
[19] J. Bergstra *et al.,* in Proc. 30th International Conference on Machine Learning, Atlanta, Georgia, USA (2013), Vol. 28.
[20] http://jaberg.github.io/hyperopt/
[21] http://maxpumperla.com/hyperas/
[22] N. Hayashi and JT-60 Team, Phys. Plasmas **17**, 056112 (2010).
[23] M. Honda and E. Narita, Phys. Plasmas, **26**, 102307 (2019).
[24] 佐竹真介，菅野龍太郎，本多 充：プラズマ・核融合学会誌 **96**, 405 (2020).
[25] F. Imbeaux *et al.,* Nucl. Fusion **55**, 123006 (2015).

J. Plasma Fusion Res. Vol.97, No.2 (2021) 72‐78

小特集 磁場閉じ込め核融合プラズマにおけるデータ駆動アプローチによる物理モデリングの進展

3．データ同化による輸送モデリング
‐LHD における実践例‐

3. Transport Modeling Applying Data Assimilation Techniques ‒Practical Cases in LHD‒

森下侑哉，村上定義，横山雅之[1,3)]，上野玄太[2,3,4)]
MORISHITA Yuya, MURAKAMI Sadayoshi, YOKOYAMA Masayuki[1,3)] and UENO Genta[2,3,4)]
京都大学大学院工学研究科，[1)]自然科学研究機構 核融合科学研究所，[2)]情報・システム研究機構 統計数理研究所，
[3)]総合研究大学院大学，[4)]情報・システム研究機構 データサイエンス共同利用基盤施設

（原稿受付：2020年９月30日）

核融合プラズマの挙動を高速かつ高精度に予測・制御できるシステムを実現するため，統合輸送シミュレーションコードをベースとしたデータ同化システムを構築している．データ同化とは，シミュレーションと観測を結びつけ，観測によるシミュレーションモデルの最適化を実現する技術である．データ同化は，核融合の分野においても重要な役割を果たすことが期待される．本章では，データ同化の概要と大型ヘリカル装置（LHD）における実践例を紹介するとともに，現状のデータ同化システムの課題と今後の展望について述べる．

Keywords:
data assimilation, ASTI, EnKF, integrated transport simulation, turbulent transport model, LHD

3.1 はじめに

複雑な現象が混在する核融合プラズマの挙動を予測，解析する有効な手法の一つとして，統合シミュレーションコードの開発が世界的に進められている[1]．統合シミュレーションでは，各物理現象をモジュールに分けて記述し，それらを統合することで核融合プラズマ全体の挙動を計算する．しかしながら，核融合プラズマの挙動を完全に再現できるようなモデルは，事実上存在しないと言わざるを得ず，時間発展を追うごとに計算結果の持つ不確実性は増大する．また，大きな不確実性をもつモジュールがあると，モジュール間で相互作用し，計算結果全体が大きな不確実性を持つことになる．京都大学と核融合科学研究所（NIFS）で開発を進めている統合輸送シミュレーションコード TASK3D[2]においても，乱流輸送モデルが大きな不確実性を持ち，計算結果に大きく影響する．このような不確実性の問題に対して，従来では，シミュレーションモデルの精緻化が行われてきたが，近年では，観測とシミュレーションを結びつけ，最適な状態を推定するデータ同化と呼ばれる統計的手法が注目を集めている．データ同化を用いることで，逐次的に得られる観測情報をもとにシミュレーションモデルを最適な状態に更新することができ，より高精度な予測を実現することができる．また，時系列観測データからシミュレーションモデルを用いて情報を抽出するような場合には，モデルが持つ複数の不確実性を同時に考慮に入れた解析が可能となる．

データ同化とは，観測を用いてシミュレーションモデルを最適化する統計的手法であり，大規模な統合シミュレーションを必要とする気象予報や海洋解析の分野で発達してきた．データ同化は，主に以下のような目的で用いられる．
・予測のための初期値，モデルパラメータ推定
・非観測量を含む状態の推定
・観測値の補正，時空間補間
・観測システムの効率化，感度解析
地球磁気圏のプラズマ密度分布および電場分布の推定[3]や，台風の予測・解析[4]，ゲリラ豪雨予測[5]などさまざまな分野でデータ同化が活用され，成果を挙げている．核融合の分野でも，欧州で開発が進められている統合輸送コード RAPTOR に比較的簡易なデータ同化手法である拡張カルマンフィルタが導入されており，安全係数分布の推定などに用いられている[6]．

筆者らは，核融合プラズマのリアルタイム高精度予測・制御を目標として，統合輸送コード TASK3D に基づくデータ同化システム ASTI（Assimilation System for Toroidal plasma Integrated simulation）の構築を行っている[7]．ASTI は，乱流輸送モデルの推定をはじめとする様々な物理現象の強力な解析ツールとしての利用も期待される．本章では，データ同化手法の概要を説明するとともに，構築中の ASTI とその実ショットへの適用例を紹介する．最後に今後の展望について述べる．なお，本章での「輸送モデリング」は，輸送係数のモデルに限らず，統合輸送シミュ

Kyoto University, KYOTO 615-8530, Japan

corresponding author's e-mail: morishita.yuya.47r@st.kyoto-u.ac.jp

レーションモデル全体の構築や最適化を指すことに注意されたい．

3.2 データ同化

3.2.1 データ同化の手法

データ同化の手法は，大きく二つに分けられる．一つは，カルマンフィルタ（KF）[8]に代表される，逐次ベイズフィルタに基づく手法[9]である．本研究で用いているアンサンブルカルマンフィルタ（EnKF）[10]もこちらの手法に属する．逐次ベイズフィルタは，シミュレーションモデルによる予測とベイズの定理に基づく最適化（フィルタ）を繰り返して，逐次的に観測データをシミュレーションに同化させていく手法である．近年のデータ同化の広がりは，逐次ベイズフィルタに基づく手法の導入の簡便さと推定の強力さ，計算機性能の向上によるところが大きいと考えられる．本章では，3.2.2，3.2.3節において，その計算を簡単に説明する．

もう一方のデータ同化手法は，４次元変分法（アジョイント法）と呼ばれる手法[11]である．４次元変分法は，ある時間区間（同化ウィンドウ）に含まれる観測データに基づき，状態の同時確率を最大化する初期値セット（事後確率最大解）を反復計算によって求める手法である．大規模なシミュレーションに強く，多くの気象予報システムで採用されている手法である．本章では詳細な説明は行わない．詳細は，[11,12]等を参照されたい．

3.2.2 状態空間モデルと逐次ベイズフィルタ

データ同化では，シミュレーションと観測を結びつけ，シミュレーションモデルの最適化ができるようにするため，状態空間モデルを考える．状態空間モデルでは，状態を表す変数を成分とするベクトル（状態ベクトル）により，系のある時刻における状態を表現する．状態空間モデルは，以下のシステムモデル(1)と観測モデル(2)によって構成される．

$$\boldsymbol{x}_t = f_t(\boldsymbol{x}_{t-1}, \boldsymbol{v}_t) \quad (1)$$
$$\boldsymbol{y}_t = h_t(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{w}_t) \quad (2)$$

ここで，$\boldsymbol{x}_t$ は時刻 t における状態ベクトルであり，$\boldsymbol{y}_t$ は時刻 t における観測ベクトルである．システムモデル（1）は，f_t によって状態ベクトルを時間発展させるとともに，時間発展に伴うノイズ（システムノイズ）$\boldsymbol{v}_t$ の付与を行う．すなわち，f_t はシミュレーションモデルに相当する．観測モデル(2)は，h_t によって状態空間と観測空間の間の変換を行い，観測ノイズ $\boldsymbol{w}_t$ を付与する．この観測ノイズには，観測機器に起因する測定誤差の他にシミュレーションモデルで表現しきれない（興味のない）誤差分も含まれる．この二つのモデルを連立することで，観測データからの情報をシミュレーションモデルに取り込むことができ，状態ベクトルを最適化する土台ができる．

図１は逐次ベイズフィルタの概略図である．一般的なシミュレーションが一つの状態ベクトルの時間発展を追うのに対して，データ同化では，状態空間における確率分布の時間発展を追う．ある時刻 t_1 の状態ベクトルの確率分布

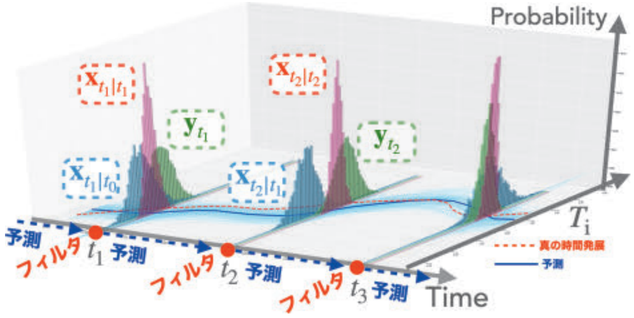

図１　逐次ベイズフィルタの概略図（イオン温度 T_i での例）．

（**図１**中の $\boldsymbol{x}_{t_1|t_1}$）が所与であるとすると，式（１）のシステムモデルによって次の観測時点 t_2 の予測分布（一期先予測分布 $\boldsymbol{x}_{t_2|t_1}$）を得ることができる．観測時点 t_2 において，一期先予測分布を事前分布とし，式（２）の観測モデルを用いて計算される尤度分布を用いると，ベイズの定理が適用できる．こうして状態ベクトルの確率分布は，観測の情報（$\boldsymbol{y}_{t_2}$）を取り込んだ事後分布（フィルタ分布 $\boldsymbol{x}_{t_2|t_2}$）へと更新される．この最適化操作がフィルタであり，この事後分布を用いてさらに予測とフィルタを繰り返す（逐次ベイズフィルタ）．この操作によって，シミュレーションモデルが真の時間発展へと近づくことが期待される．次節では，逐次ベイズフィルタに基づくデータ同化手法の一つであるアンサンブルカルマンフィルタについて説明する．

3.2.3 アンサンブルカルマンフィルタ

システムモデルの f_t と観測モデルの h_t がともに線形で，確率分布としてガウス分布を仮定すると，状態空間モデルは以下のようになる．

$$\boldsymbol{x}_t = F_t \boldsymbol{x}_{t-1} + \boldsymbol{v}_t,\ \boldsymbol{v}_t \sim N(\boldsymbol{0}, Q_t) \quad (3)$$
$$\boldsymbol{y}_t = H_t \boldsymbol{x}_t + \boldsymbol{w}_t,\ \boldsymbol{w}_t \sim N(\boldsymbol{0}, R_t) \quad (4)$$

システムモデルと観測モデルが線形であることから，式（１），（２）における f_t，h_t を行列 F_t，H_t で書いている．また，$A \sim N(\mu, \Sigma)$ は A が平均 μ，分散共分散行列 Σ のガウス分布に従うことを意味する．この状態空間モデルの仮定における逐次ベイズフィルタはカルマンフィルタ（KF）と呼ばれる．この仮定の下では，予測分布とフィルタ分布は共にガウス分布に保たれる．よって，確率分布の時間発展やフィルタは，平均と分散共分散行列のみで議論することができる．

カルマンフィルタは線形なシステムに対するデータ同化手法であるが，一般にデータ同化を必要とするような複雑なシステムは，非線形なシステムである．非線形なシステムでも実行できるデータ同化手法として，アンサンブルカルマンフィルタ（EnKF）[10]や粒子フィルタ（PF）[9,13]がある．これらの手法では，確率分布をアンサンブル近似し，各アンサンブルメンバーを以下の様に個々に時間発展させることで，確率分布の時間発展を追う．

$$\boldsymbol{x}^{(i)}_{t|t-1} = f\left(\boldsymbol{x}^{(i)}_{t-1|t-1}, \boldsymbol{v}^{(i)}_t\right) \quad (5)$$

ここで，$\boldsymbol{x}_{t|t-1}$ は，時刻 $t-1$ までの観測情報を同化した，時刻 t の状態ベクトルを表す．また，(i) はインデックス i

のアンサンブルメンバーであることを表す．式(5)は $\boldsymbol{x}_{t-1|t-1}^{(i)}$ で決まる初期値を物理モデルで時間発展させればよいことを示しており，手を加えることなく EnKF や PF の枠組みに物理モデルを取り込むことができる．

EnKF のフィルタ操作は，KF に基づいて，

$$\boldsymbol{x}_{t|t}^{(i)}=\boldsymbol{x}_{t|t-1}^{(i)}+\hat{K}_t(\boldsymbol{y}_t+\boldsymbol{w}_t^{(i)}-H_t\boldsymbol{x}_{t|t-1}^{(i)}) \quad (6)$$

$$\hat{K}_t=\hat{V}_{t|t-1}H_t^{\mathrm{T}}(H_t\hat{V}_{t|t-1}H_t^{\mathrm{T}}+\hat{R}_t)^{-1} \quad (7)$$

で表される[9,10]．ここで，$\hat{V}$ はアンサンブルから計算される分散共分散行列である．**図2**に，EnKF（ASTI）の計算の流れの概略図を示す．EnKF は，KF のアルゴリズムを非線形なシステムに対応させた手法であるため，システムの非線形性が強く変数間の関係を線形の範囲で捉えきれない場合（分布がガウス分布で近似できない場合）や観測モデルが非線形な場合には，必ずしも推定がうまくいくとは限らない．こうした状況には，より一般的（非線形・非ガウス）なデータ同化手法である PF が用いられる．PF は，尤度関数によるアンサンブルメンバーの重み付けによって，フィルタ分布のアンサンブルを推定する．どんなモデルにも対応できる柔軟性を持つ反面，分布の情報としてアンサンブルの2次のモーメントまでしか用いない EnKF に対して，より大きなアンサンブルメンバー数を必要とする．本章で紹介する適用例では，リアルタイムでの予測を念頭において，より計算コストの低い EnKF を用いている．

データ同化の大きな利点として，観測のない状態変数をも最適化できる点が挙げられる．EnKF において，この能力を担うのは，変数間の相関関係である．個々のアンサンブルメンバーをシステムモデルを用いて時間発展させることにより，変数間の相関関係が自動的に予測アンサンブルの共分散に現れる．観測量がある変数とない変数は，この共分散による相関関係でつながれており，観測のある状態変数の最適化による修正が観測のない変数まで伝搬する．この仕組みによって，シミュレーションモデルの内部まで最適化が行き届く．

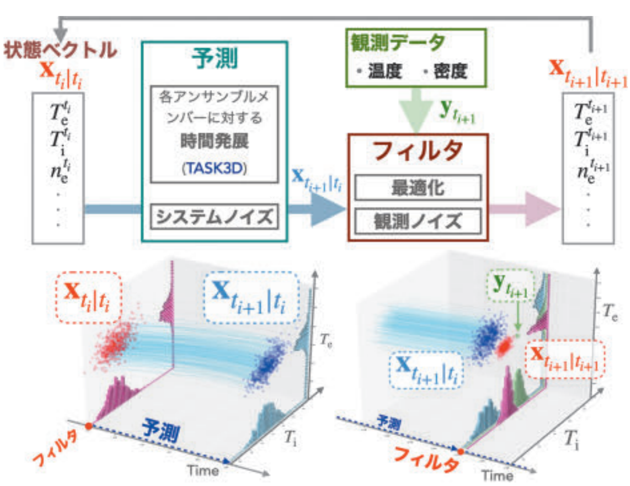

図2 ASTI の概略図．

3.2.4 アンサンブルカルマンスムーザ

フィルタによる推定は，過去の観測のみに基づいているため，フィルタ時点よりも未来に観測された情報は，当然ながら，その推定には影響しない．予測を行う場面では，過去の情報しか用いることはできないが，解析的な場面でフィルタ時点よりも未来の観測情報も含めた時空間的に一貫性のある推定を行いたい場合には，ある時点の観測情報をそれよりも過去のフィルタ推定に反映させる必要がある．この時間を遡る最適化操作は平滑化（スムーザ）と呼ばれる．EnKF の場合には，フィルタの際にアンサンブルを再構成する行列 Z を保存しておくことで，平滑化を容易に実現できる（アンサンブルカルマンスムーザ，EnKS）．EnKF におけるフィルタ分布のアンサブルメンバーは，一期先予測分布のアンサンブルメンバーの線形結合で表現できる．すなわち，各アンサンブルメンバーを列に持つ行列 X を用いると，フィルタ操作は，行列 Z を用いて，

$$X_{t|t}=X_{t|t-1}Z_t \quad (8)$$

と書ける．ある時点 s のフィルタアンサンブルに，次時刻 $s+1$ の観測を反映させた分布，すなわち，時刻 s における時刻 $s+1$ までの観測に基づく平滑化アンサンブルは，時刻 $s+1$ の行列 Z を用いて以下のように表せる[9,10]．

$$X_{s|s+1}=X_{s|s}Z_{s+1} \quad (9)$$

この式から平滑化アンサンブルに関する漸化式，

$$X_{s|t+1}=X_{s|t}Z_{t+1} \quad (10)$$

を導くことができる．ただし，$t>s$ である．つまり，フィルタ毎に得られる行列 Z さえ保持していれば，任意の時刻までの観測を用いた平滑化分布の推定が可能である．

3.3 統合輸送コード TASK3D を用いたデータ同化システム

本節では，統合輸送シミュレーションコード TASK3D に基づくデータ同化システム ASTI[7]について説明する．ASTI は EnKF による核融合プラズマの予測・解析を目的としたコードであり，Fortran で実装されている．Fortran によるシミュレーションコード（TASK3D）の時間発展計算を ASTI から呼び出せるようにモジュール化することで，既存のシミュレーションコードをシステムモデルとしてデータ同化（状態空間モデル）の枠組みに取り込むことができる．本節では，状態ベクトルに温度，密度，乱流モデル係数，中性粒子ビーム入射（NBI）加熱分布をとった場合の EnKF による推定の例を示す．**図2**は ASTI の概略図である．

3.3.1 状態空間モデルと観測データ

EnKF のシステムモデルとして用いている TASK3D は，熱と粒子の一次元輸送方程式をベースとする統合輸送シミュレーションコードである[2]．現在，乱流熱拡散係数を与えるモデルとして，電子に gyro-Bohm モデル，イオンに gyro-Bohm gradT モデルを用いている．

$$\chi_{\rm e}^{\rm TB} = C_{\rm e}\left(\frac{\rho_{\rm i}}{a}\right)\left(\frac{T_{\rm e}}{eB}\right) \tag{11}$$

$$\chi_{\rm i}^{\rm TB} = C_{\rm i}\left(\frac{\rho_{\rm i}}{a}\right)\left(\frac{T_{\rm i}}{eB}\right)\left(\frac{\nabla T_{\rm i}}{T_{\rm i}}a\right) \tag{12}$$

ここで，B は磁場強度，$\rho_{\rm i}$ はイオンのLarmor半径，a はプラズマ小半径である．$C_{\rm e}$，$C_{\rm i}$ は実験結果に基づいて調整される係数である[14]．乱流モデルの係数を実験に合わせて調整することで，温度分布の再現が比較的よくできている[15]．NBI加熱による加熱分布はGNET-TDコード[16]によって予め計算されたものを用いている．

状態ベクトルを以下のTASK3D内の変数で構成する．

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{T}_{\rm e}^{\rm T}, \boldsymbol{T}_{\rm i}^{\rm T}, \boldsymbol{n}_{\rm e}^{\rm T}, \boldsymbol{n}_{\rm i}^{\rm T}, \boldsymbol{C}_{\rm e}^{\rm T}, \boldsymbol{C}_{\rm i}^{\rm T}, \boldsymbol{k}_{\rm e}^{\rm T}, \boldsymbol{k}_{\rm i}^{\rm T})^{\rm T} \tag{13}$$

添字 e は電子，i はイオンを表す．それぞれの変数は，小半径方向1次元の空間グリッド点上で定義される．本研究では，空間を60グリッドで分割しているため，各々の変数は，以下のような構造を持つ．

$$\boldsymbol{T}_{\rm e} = (T_{\rm e}^1, T_{\rm e}^2, \cdots, T_{\rm e}^{60})^{\rm T} \tag{14}$$

上付きの数字は，対応するグリッド点を表す．ここで，$\boldsymbol{T}$ は状態ベクトルの温度部分，$\boldsymbol{n}$ は密度部分である．$\boldsymbol{C}$ は乱流モデル係数の部分であり，状態ベクトルに含めるにあたり，空間分布を持たせている．また，$\boldsymbol{k}$ は，GNET-TDによるNBI加熱分布の計算結果に不確実性を導入するための因子であり，これにも空間分布を許す．GNET-TDにより計算された加熱分布 $P_{\rm NBI}$ は

$$P_{\rm NBI}^{*i} = k^i P_{\rm NBI}^i \tag{15}$$

として，TASK3Dに読み込まれる．これらの状態変数の初期値は，温度と密度に関しては初期観測値を用い，C，k に関しては，従来のシミュレーションで仮定していた値を用いる．今回の場合では，$C_{\rm e} = 23.0$，$C_{\rm i} = 9.07$，$k_{\rm e} = k_{\rm i} = 1.0$ である．

ここに，温度と密度の観測データを同化する．本研究では，空間的に補間したデータを用いるため，径方向60グリッド上に対応する観測値をそのまま同化することができる．状態ベクトルは480次元（60グリッド×8変数），観測ベクトルは240次元（60グリッド×4変数）である．

観測モデルに関しては，本研究における状態ベクトルの観測有り部分と観測ベクトルとが一対一に対応するため，以下の観測行列を導入する．

$$H_t = (I_{240\times240} \;\; O_{240\times240}) \tag{16}$$

I は単位行列，O は零行列である．

3.3.2 ノイズ

EnKFの性能を左右するハイパーパラメータとして，システムノイズと観測ノイズの分散共分散行列がある．これらの推定には，観測との誤差から統計的に推定する方法[17]やベイズ推定に基づく方法[18]など，状況に応じた色々な方法が提案されている．本研究では，以下に述べるようにノイズの分散共分散行列を調整していくことで，EnKFがうまく機能することを確認した．

まず，システムノイズは，標準偏差（Q_t の対角成分の平方根）をその時点の状態変数の平均値に比例する形で推定した．この比例定数の組み合わせは対数尤度に基づいて決定した[7]．観測列 $\boldsymbol{y}_{t_1:t_M}$ に対するEnKFのパラメータ θ の対数尤度 $l(\theta|\boldsymbol{y}_{t_1:t_M})$ は，以下の式で近似することができる[19]．

$$\begin{aligned} l(\theta|\boldsymbol{y}_{t_1:t_M}) &= \sum_{t_k=t_1}^{t_M} \log p(\boldsymbol{y}_{t_k}|\theta, \boldsymbol{y}_{t_1:t_{k-1}}) \\ &\simeq \sum_{t_k=t_1}^{t_M} \log\left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_{t_k}^{(i)}\right) - M \log N \end{aligned} \tag{17}$$

$$\alpha_{t_k}^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |R_{t_k}|}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y}_{t_k} - H\boldsymbol{x}_{t_k|t_{k-1}}^{(i)})^{\rm T} R_{t_k}^{-1} (\boldsymbol{y}_{t_k} - H\boldsymbol{x}_{t_k|t_{k-1}}^{(i)})\right\} \tag{18}$$

ここで，N はアンサンブルメンバー数，d は観測ベクトル $\boldsymbol{y}$ の次元（本設定では240）である．Q_t を対角行列（分散のみ，共分散0）で仮定した場合，ノイズを加えた後のアンサンブルメンバーは，空間的に不連続になる．大きな不連続があると，TASK3Dで計算ができなくなる．そのため，システムノイズは空間的に滑らかになるように加え方を工夫する必要がある．本研究では，グリッドにおけるノイズが近隣のグリッドに指数関数的に減衰するように，分散共分散行列の共分散成分を決定した[9]．

一方の観測ノイズは，フィルタ毎に，標準偏差（R_t の対角成分の平方根）を予測誤差（観測値－予測値）に比例する形で推定した．比例定数は，尤度を最大にする値（0.8）を採用した．この仮定は観測値に応じた適切な観測ノイズRを設定していることに相当する．予測誤差が大きいときには観測ノイズを大きくし，過適合にならないように働く．予測誤差が大きい場面でフィルターによる最適化が緩和され，結果としてフィルタ後の背景誤差 $V_{t|t}$ が大きく評価される．これによってより柔軟な空間分布形状が調べられる．また，予測がうまく行っている状態では，背景誤差を広げないように働き，最適な状態に保つ．

3.3.3 実ショットへの適用例

ここでは，LHDにおけるNBIショット（114053）を実際にTASK3Dのシミュレーションに同化した例[7]を示す．密度変化は緩やかであるため，TASK3Dでは熱輸送のみを解くこととし，密度はフィルタによる最適化のみで時間変化を追った．**図3**は，データ同化を行わないTASK3Dによる従来型のシミュレーションの結果とデータ同化を80 msおきに行った場合の電子温度とイオン温度の結果である．なお，アンサンブルメンバー数は $N = 2000$ とした．データ同化を行わない単純なシミュレーションの結果に対して，データ同化による予測値（塗りつぶし点）の方が，観測値の時空間分布を高精度で再現しているのがわかる．今回は同化周期80 msの結果のみを示すが，同化周期を240 ms程度まで大きくしても，予測精度は大きく下がらないことを確認している．温度の時間発展を主に乱流モデル

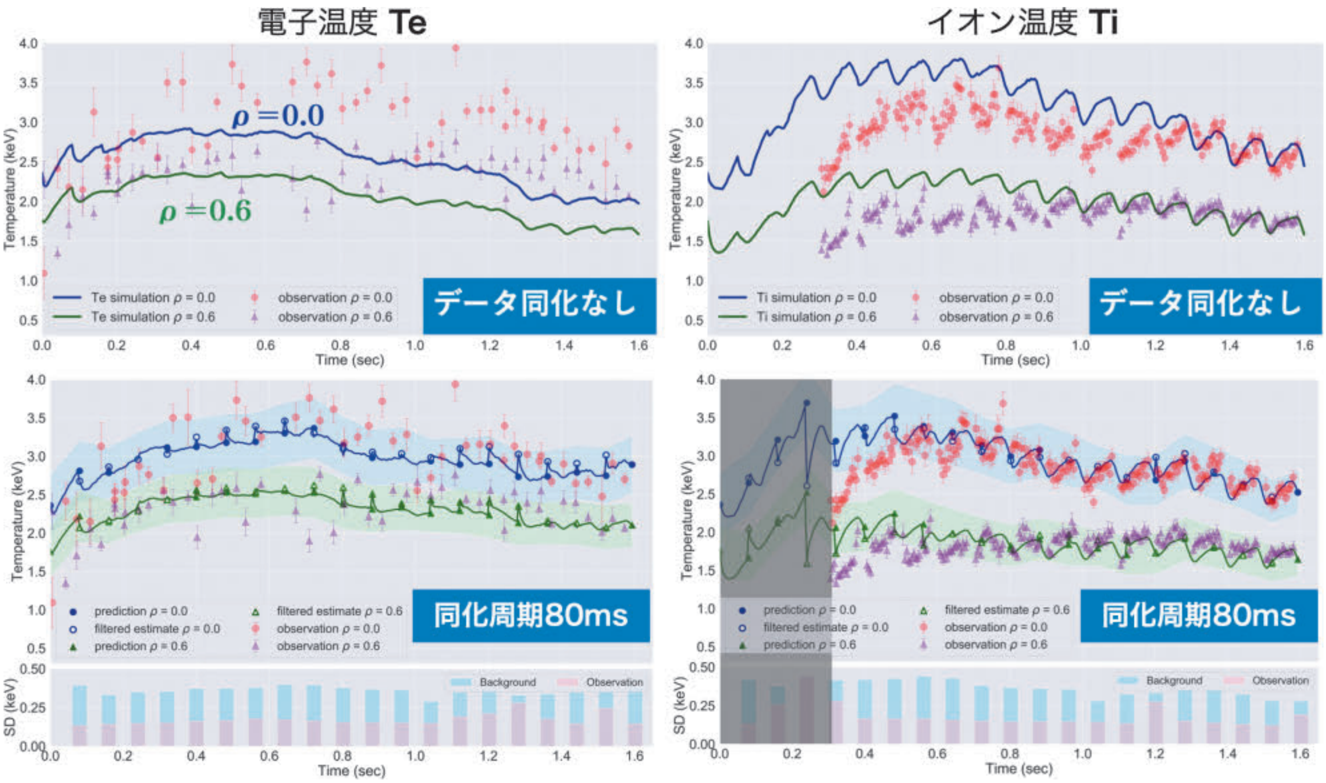

図3 EnKFによる温度の予測結果（上段：TASK3Dのみ，下段：80 msおきにデータ同化）．規格化小半径$\rho=0.0$と0.6について示す．下の棒グラフは，$\rho=0.0$における背景誤差と観測ノイズの標準偏差を表す．また，イオン温度の灰色のハッチは，観測データが無いため，代わりに電子温度を同化させた部分である．

係数で調整していることを考えると，本ショットにおいて，Cは240 ms程度，あるいは，それよりも遅い時間スケールで変化していると考えられる．

図4は，EnKFによって推定された乱流モデル係数Cの時空間分布（上段）とEnKSによって推定された時空間分布（下段）である．グラフの値は，推定値を従来仮定していた係数の値で割った比であり，1が従来仮定していた値に相当する．**図4**のEnKFによる結果を見ると，C_e，C_iともに，空間的には大きく変化しているが，時間的には緩やかに変化しているのがわかる．これが，EnKFで同化周期をある程度大きくとっても予測がうまくいった理由である．また，**図4**のEnKSによる結果を見ると，C_eの$\rho=0.5$，1.2 s付近におけるピークや，C_iの$\rho=0.2$，1.4 s付近におけるピークが少し過去方向に伸びており，未来の情報が過去のフィルタ分布を修正しているのがわかる．Cとkの平滑化時空間分布を乱流熱拡散係数のモデルに取り込んだTASK3Dによるシミュレーション（データ同化を行わない）結果を**図5**に示す．シミュレーション結果と観測値が良い一致を示していることから，このEnKSによる推定は妥当であると言える．

3.4 まとめと今後の課題及び展望

本章では，LHDにおけるデータ同化の取り組みを紹介した．核融合プラズマの高精度な予測・解析を実現するため，データ同化システムASTIを構築中である[7]．その適用例として，温度，密度，乱流モデル係数，加熱分布を状態ベクトルにとり，TASK3Dのシミュレーションに温度，密度の観測データを同化した結果を紹介した．これにより，温度の時間発展の高精度な再現とそれを実現する乱流モデル定数が得られた．

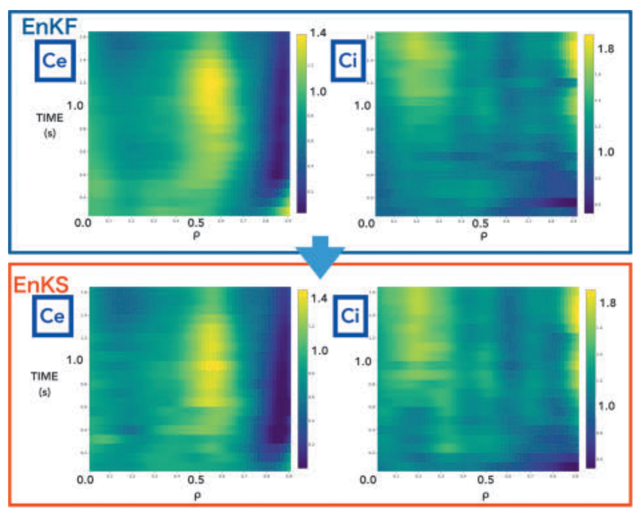

図4 乱流熱拡散モデル係数の推定分布．

リアルタイム予測に向けて，現在のASTIが持つ大きな課題は，計算時間である．EnKFの計算自体は，B-spline補間等を利用して，同化する径方向のグリッド点数を5～10に絞ることで，状態ベクトルの次元を節約することができるため（多くとも50次元程度），現在の計算では問題にならない．計算時間のほとんどは，TASK3D自体によるものであり，タイムステップ1 ms，径方向60グリッドで計算する場合，1 s分の時間発展を計算するのに約10分かか

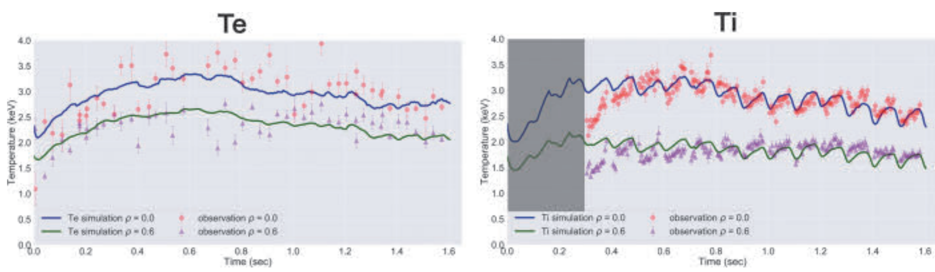

図５　EnKS による推定結果を用いた TASK3D によるシミュレーション結果．

る．そのため，TASK3D 自体に効率的な並列化を施すとともに，データ同化によるサポートを前提とした，モジュール（モデル）の簡約化を行う必要がある．こうしたモデルの簡約化の過程にもデータ同化を用いることができる．データ同化によって推定されたモデルのパラメータ等は，現状のモデルに欠けている部分の情報を持っている．そのため，データ同化によって推定された値を上手くモデルに取り込むことができれば，より高精度なモデルを作り出すことができる．モデルの簡約化とモデルの構築を繰り返すことで，目的の精度，速度に向けてモデルを鍛錬することができる．また，時間刻みや空間グリッドを粗くすることに伴う不確実性の増大（精度の悪化）もデータ同化によって補うことができる．現在，こうした簡約化（粗視化）の方針に従って，ASTI の高速化を進めている．

本章で紹介した例の様に，１ショットに関してデータ同化を行った場合は，その推定結果は，そのショット専用のものとなる．そのため，普遍的な物理や構造を１ショットだけから抽出することはデータ同化では難しい．しかし，状態ベクトルを複数ショットについて拡張する（１つの状態ベクトルが，複数のショットの情報を持つ様にする）と複数のショットに共通する性質や構造を抽出できるようになる．また，シミュレーションモデルを複数のショットに同時に当てはめたり，複数のショットで同時に評価することができる．こうした多ショットに対する同時解析もデータ同化に期待されることの一つであり，早期実現のためにASTI の開発を進めている．

上記の他に，データ同化はモデルの能力，妥当性の詳細な検証に用いることができる．**図６**は，LHD における熱拡散係数の回帰モデル[20]を用いて，データ同化した場合の

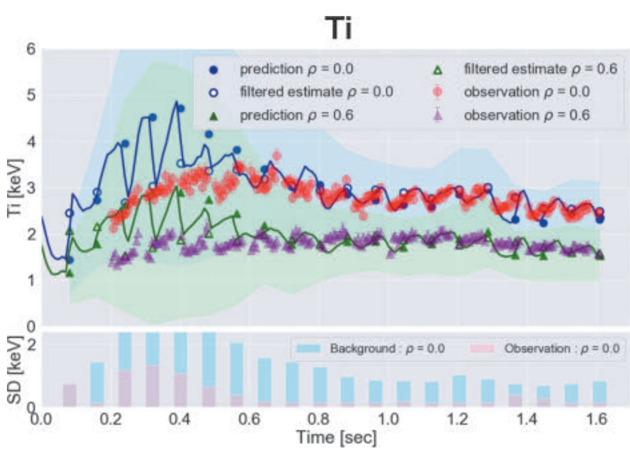

図６　回帰モデルを用いたイオン温度のデータ同化結果．

イオン温度の結果である．式（15）の加熱分布と同様に，因子 $\boldsymbol{F}$（空間分布を持つことを仮定）によって，回帰モデルによる熱拡散係数に不確実性を導入し，この $\boldsymbol{F}$ を式（13）の乱流モデル係数 $\boldsymbol{C}$ の代わりに状態ベクトルに含めた．$\boldsymbol{F}$ の空間分布が一様に１の場合が回帰モデルそのものに対応する．ショットは3.3.3節と同様に114053を用いている．このグラフを見ると，最初から 0.4 s にかけて予測誤差が大きくなっており，それと同時に背景誤差の標準偏差も大きくなっているのがわかる．一方で 0.4 s を超えたあたりから誤差は減少し始め，0.8 s 以降はかなり精度が良くなっている．0.8 s 以降から $\boldsymbol{F}$ の空間分布が１でほぼ一様であったことから，このモデルは，温度上昇部（0.0 s − 0.4 s）では，モデルの予測能力は低いが，安定部（0.6 s）以降では，予測能力が高いことがわかる．こうした性質は，回帰モデルが対象としたデータセットに依存すると考えられる．一般的なシミュレーションによる検証では，序盤の予測に引っ張られて，こうした性質を把握することは難しい．データ同化を用いることで，モデルの能力や妥当性の検証を時空間的に区切って行うことができる．この点もモデルの精度向上に有用である．

ASTI を実用的なものにするためには，計算の高速化と多ショット解析への拡張が必要であり，まだまだ課題が多い状況である．しかしながら，統合コードは，データ同化によってより一層，強力な予測・制御システムかつ解析ツールになり得る．データ同化は，核融合炉の実現において要となる技術であると考えている．

謝　辞

本章に記載した研究進展について，データサイエンス共同利用基盤施設データ同化研究支援センターにおける技術指導，統計数理研究所共同研究 2019-ISMCRP-2027，2020-ISMCRP-2026，核融合科学研究所共同研究 NIFS20KLPT007，および，原型炉研究開発共同研究「核融合の大規模データを活用するデータ駆動型モデリング手法の研究」による支援に感謝いたします．

参 考 文 献

[１] 林 伸彦 他：プラズマ・核融合学会誌 **95**, 423 (2019).
[２] S. Murakami *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **57**, 119601 (2015).
[３] S. Nakano *et al.*, J. Geophysical Res. : Space Phys. **113**, 11 (2008).
[４] T. Honda *et al.*, Mon. Wea. Rev. **146**, 213 (2018).

[5] T. Miyoshi *et al.*, Bull. Amer. Meteor. Soc. **97**, 1347 (2016).
[6] M.C.C. Messmer *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **61**, 035011 (2019).
[7] Y. Morishita *et al.*, Nucl. Fusion **60**, 056001 (2020).
[8] R.E. Kalman, J. Basic Engineering **82**, 1 (1960).
[9] 樋口知之 他：データ同化入門－次世代のシミュレーション技術－（朝倉書店，2011）.
[10] G. Evensen, Ocean Dyn. **53**, 343 (2003).
[11] O. Talagrand and P. Courtier, Q.J.R. Meteorol. Soc. **113**, 478 (1987).
[12] 淡路敏之 他：データ同化 観測・実験とモデルを融合するイノベーション（京都大学学術出版会，2009）.
[13] 上野玄太：統計数理 **67**, 241 (2019).
[14] A. Wakasa *et al.*, Proc. 39th EPS Conf. and 16th Int. Conf. Plasma Physics P2.028 (2012)
[15] H. Yamaguchi *et al.*, JPS Conf. Proc. **1**, 015045 (2014).
[16] H. Yamaguchi *et al.*, Plasma Fusion Res. **8**, 2403099 (2013).
[17] G. Desroziers *et al.*, Q.J.R. Meteorol. Soc. **131**, 3385 (2005).
[18] G. Ueno and N. Nakamura, Q.J.R. Meteorol. Soc. **142**, 2055 (2016).
[19] 北川源四郎：時系列解析入門（岩波書店，2005）.
[20] M. Yokoyama and H. Yamaguchi, Nucl. Fusion **60**, 106024 (2020).

J. Plasma Fusion Res. Vol.97, No.2 (2021) 79‐85

小特集 磁場閉じ込め核融合プラズマにおけるデータ駆動アプローチによる物理モデリングの進展

4．データ駆動アプローチを用いた動的乱流現象の解析

4. Data-Driven Analyses of Dynamical Turbulence Phenomena

佐々木 真[1,2)]，河原吉伸[3,4)]，草場 彰[1)]
SASAKI Makoto[1,2)], KAWAHARA Yoshinobu[3,4)] and KUSABA Akira[1)]
[1)]九州大学応用力学研究所，[2)]九州大学極限プラズマ連携研究センター，
[3)]九州大学マス・フォア・インダストリ研究所，[4)]理化学研究所 革新知能統合研究センター

（原稿受付：2020年10月14日）

本章ではデータ駆動科学的手法として近年注目されている動的モード分解について，その理論的背景からプラズマ乱流への応用例まで紹介する．動的モード分解は流体現象の時空間構造を観測／計測データから抽出するための数値解析手法の一つとして提案されたものであり，現在では様々なシステムへの応用がなされている．動的モード分解を用いると，時空間発展データから統計的に重要な空間構造とその構造に対応する複素周波数を得ることができ，より少数の自由度でシステムを理解することが可能となる．ここでは，(1)物理機構の理解をめざす例として，動的モード分解をリミットサイクル振動を伴う乱流に適用し，構造間の因果関係を抽出する試みについて紹介する．また，(2)乱流の時空間発展の予測に応用する試みについても紹介する．

Keywords:
plasma turbulence, abrupt phenomena, mode decomposition, DMD, causality, prediction

4.1 背景

磁場閉じ込めプラズマや宇宙のプラズマ現象はエネルギーの流入出がある非平衡開放系であり，自律的なリズムや自己組織的な空間パターンの形成が起こるため，システムが本質的に動的である．特に，極限的に空間不均一な系である磁場閉じ込めプラズマでは，プラズマ装置に対して，ミクロスケールの乱流が発達し，その非線形ダイナミクスによってプラズマ閉じ込めが規定されている．ミクロスケール乱流が駆動する装置スケールのマクロ構造や中間スケールのメゾスケール構造の重要性が認識されている[1]．そのため，プラズマの動的挙動を理解するためには，乱流とその非線形性によって駆動される構造間の相互作用を理解することが必要である．

磁場閉じ込めプラズマにおける重要な動的挙動には周辺局在モード（edge localized mode，ELM）[2]や閉じ込め遷移[3]等の自発的なものから，燃料供給時の外部摂動に対する応答[4]などがある．これらの挙動の物理機構の理解やその予測は重要な問題である．これらの物理機構の解明をめざした研究が理論・シミュレーション・実験の側面から精力的に進められており，理解が大きく進んできているものの，これらの現象の定量的な予測や制御には至っていないのが現状である．近年，データ駆動科学的手法が急速に発達してきており，この新たな手法を第4の科学的手法として利用する方向性の研究も必要となっている．

本章で焦点を当てる動的モード分解は，データ駆動的に観測データに基づき，システムの時空間発展を特徴付けることができる新たな方法である[5]．システムの時間発展を考慮したモード分解であるため，系の動的挙動の理解や予測に適している．近年，流体力学分野をはじめとして，様々な分野における時空間ダイナミクスに適用され，その有用性が認識されてきている．プラズマ研究への適用も始まっており，例えば[6-10]などがある．ここでは，動的モード分解の基礎を概観し，プラズマ乱流研究への応用例を紹介し，物理的理解に向けた試みと定量的予測の試みについて紹介する．

4.2 動的モード分解

動的モード分解は，当初，流体現象の時空間構造を観測／計測データから抽出するための数値解析手法の一つとして提案されたものである[11,12]．しかしその後，応用数学分野などで議論される力学系のクープマン解析との関連も知られるようになり，流体分野に限らず広く科学・工学分野へ応用されるようになっている．

流体分野における類似したモード分解としては，固有直交分解（POD）も古くからよく用いられている[13]．固有直交分解では，空間方向を一つの列としてまとめた行列（つまり行方向は時間に対応）に対して特異値分解を計算することで，時間発展に寄与する特徴的な空間構造の抽出を行う．統計的にはこの計算は，時間方向の相関を無視すればいわゆる主成分分析と同様であり，変動の大きな空間

Research Institute for Applied Mechanics Kyushu University, Kasuga, FUKUOKA 816-8580,Japan
corresponding author's e-mail: sasaki@riam.kyushu-u.ac.jp

構造，つまり物理的な解釈としてはエネルギーが大きい空間構造を取り出していることになる．そのように，固有直交分解は時間方向の周期性を陽に抽出している訳ではなく，多くの場合に特徴的な周期性を持つ空間構造の抽出が困難であることが知られていた．しかし後に見るように，動的モード分解は，時間方向の関係を陽に用いたモード分解を計算する方法であり対応する周波数（とその減衰・発展）も同時に得られる．

ここでは，まず動的モード分解の理論的背景について概説し，そしてその代表的な具体的手順を示しつつ，動的モード分解の解釈について説明する．

4.2.1 クープマン解析

ここでは動的モード分解の背景として，力学系のクープマン解析について概説する．動的モード分解は，クープマン解析へのデータを用いた数値解析手法の一つとしても位置付けられる．

まず，状態空間$\mathcal{S}$（一般には実ベクトル空間の部分集合）における（決定的な）力学系 $\dot{x}(t)=f(x(t))$ $(x\in\mathcal{S})$ を考える[1]．$f:\mathcal{S}\to\mathcal{S}$は，系の軌跡を定める写像である．ここではデータを用いた解析を考えるため，次の離散時間での表現も適宜用いる．

$$x_{k+1}=\varphi_{\Delta t}(x_k):=x_k+\int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t}f(x(\tau))\,\mathrm{d}\tau$$

ただし，$x_k=x(k\Delta t)$ であり，$\varphi_{\Delta t}:\mathcal{S}\to\mathcal{S}$は対応するフローである．これらの表現は状態の軌跡を記述することでダイナミクスを表している．

一方で，ダイナミクスのもう一つの表現として観測量の時間発展を表す方法として，クープマン作用素を用いた記述が知られている[15]．状態空間$\mathcal{S}$上に定義されたなんらかの観測空間$\mathcal{G}$内の関数 $g:\mathcal{S}\to\mathbb{R}$ $(\in\mathcal{G})$（観測量）を考えたとき，クープマン作用素は次式により定義される[16]（**図1**も参照）．

$$\mathcal{K}g=g\circ\varphi_{\Delta t}\Rightarrow\mathcal{K}g(x_k)=g(x_{k+1})$$

ただし$\circ$は関数の合成である．定義から$\mathcal{K}$の線形性は容易に示される．今，作用素$\mathcal{K}$が点スペクトルのみを持ち固有値分解可能であるとし，さらに観測量 g は作用素$\mathcal{K}$の固有関数 $\phi_i:\mathcal{S}\to\mathbb{C}$を用いて一次展開できる，つまり $g=\sum_{i=1}^{\infty}v_i\phi_i$ のように表すことができると仮定する（$v_i\in\mathbb{C}$は展開係数）．このとき，観測量 g の時間発展は次式のように展開することができる（クープマン・モード分解とも呼ばれる）．

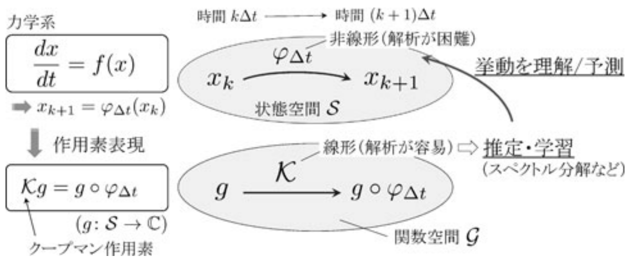

図1 クープマン作用素を用いた力学系の解析．

$$g\circ\varphi_{k\Delta t}=g\circ\underbrace{\varphi_{\Delta t}\circ\cdots\circ\varphi_{\Delta t}}_{k\ 個}=\sum_{i=1}^{\infty}\lambda_i^k v_i\phi_i \quad (1)$$

ただし，λ_i $(\in\mathbb{C})$ は固有関数 ϕ_i に対応する固有値を表す．式(1)中の各コンポーネント中で時間発展に寄与する部分はλ_iのみであるため，観測量の時間発展がλ_iで決まる固有の周期性（λ_i の位相）と減衰率（λ_i の絶対値）を持つダイナミクスに分解されていることがわかる．

クープマン作用素のスペクトル分解を用いた非線形力学系の解析に関する応用として重要なものの一つに，縮約理論との関係があげられる．特に，リミットサイクル振動子などの周期的な運動に近い挙動を示す系で用いられる位相縮約は，クープマン作用素の固有関数と直接的な関係を持つ[17]．またもう一つの重要な応用としては，力学系から得られる観測が流体現象のように空間的に広がりを持つ場合には，分解(1)は，時空間的なコヒーレンス構造の抽出として有用であることが知られている．つまり，式(1)の各コンポーネント中の固有値以外の部分，つまり $v_i\phi_i$ にあたる部分は，各固有値で表される時間的変動に関する g への寄与として解釈できる．各観測量が各空間上の点におけるなんらかの量（例えば，流体現象であれば流体速度や渦度など）に対応している場合には，この寄与の相対的な違いを見ることで，各時間変動に対応する空間的な同調性を知ることができる．流体現象の解析においては，このような空間的なコヒーレンス構造（組織構造）を知ることは重要な課題として従来から盛んに研究されており，これが動的モード分解への注目のきっかけにもなっている．

4.2.2 基本的な手順とその意味

ここでは，一般によく用いられる動的モード分解（厳密DMD[18]）を取り上げ，その手順を説明しつつ，動的モード分解の性質について述べる．

動的モード分解は，未知の系に関するクープマン分解(1)を，その系から得られたデータから近似的に推定する手順である．この際に，データは，状態変数を入力とする m 個の観測関数 $g_i:\mathcal{S}\to\mathbb{C}$ $(i=1,\ldots,m)$ を通して得られて

1 決定的でない場合は，例えば，$g\in L^{\infty}(\mathcal{S})$を観測量としてとれば，それは確率的な力学系を扱うことに相当して，任意の $x_k\in\mathcal{S}$に対して次のようにクープマン作用素を定義することができる[14]．

$$\mathcal{K}g(x_k)=\int p_{\Delta t}(x_{k+1}|x_k)g(x_k)\,\mathrm{d}x_{k+1}=E[g(X_{k+1})|X_k=x_k]$$

ただし，$p_{\Delta t}(x_{k+1}|x_k)$ は遷移状態確率である．つまり，ある時刻 $k\Delta t$ における状態 x_k が与えられた際の時刻 $(k+1)\Delta t$ における状態の期待値を与える．

いると仮定する．そのように，まずデータとしては，解析したい未知の系 $\varphi_{\Delta t}$ に関して $x_2 = \varphi_{\Delta t}(x_1)$，$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}(x)$ として生成された時系列データが与えられたとする（$\boldsymbol{g} := [g_1, \ldots, g_m]^{\mathsf{T}}$）．例えば，この系から生成したと想定される有限長$T$ の時系列データ $\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_T$ が与えられる場合には，$(\boldsymbol{y}_{t-1}, \boldsymbol{y}_t)$ $(t = 1, \ldots, T)$ のようにペアを構成して用いる．このとき，厳密 DMD の手順は次のようになる．

1．2つの行列$Y_1 := [\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_{T-1}]$と$Y_2 := [\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_T]$を構成する．
2．Y_1 の（打ち切り）特異値分解 $Y_1 \approx USV^{\mathsf{H}}$を計算する（$\bullet^{\mathsf{H}}$ はエルミート転置，採用ランクを r とする）．
3．行列 $\tilde{A} := U^{\mathsf{H}} Y_2 V S^{-1}$ の固有値 $\hat{\lambda}_j$ と固有ベクトル $\tilde{\boldsymbol{v}}_j$ を計算する（$j = 1, 2, \ldots, r$）．
4．$\hat{\boldsymbol{v}}_j = Y_2 V S^{-1} \tilde{\boldsymbol{v}}_j$（動的モード）と対応する固有値 $\hat{\lambda}_j$ を得る．

この手順からわかるように，動的モード分解は比較的容易に実装が可能である．なおこの手順は，$\min_{A \in \mathbb{R}^{m \times m}} \| Y_2 - AY_1 \|_F$ の最小二乗解 $\hat{A}$ の固有値と固有ベクトルを計算していることに相当するが，主要な固有値のみが得られれば十分であるので，直接 $\hat{A}$ の固有値分解を計算する代わりに，これをU を用いて射影した行列 $\tilde{A} = U^{\mathsf{H}} A U$ の固有値分解を計算している．なお，U は直交行列であるので，これらの固有値分解で得られる最初のr 個の固有値は同じものである．一般に，DMD は高次元なデータに対して適用する必要があり[2]，そのため行列 $\hat{A}$ も高次元になり固有値計算などが困難になるため，上記のような計算がよく用いられる訳である．

そして計算された動的モードとその固有値を用いて，例えば時系列データの場合には，各サンプルは次のように分解される．

$$\boldsymbol{y}_t \approx \sum_{j=1}^{r} \hat{\lambda}_j^{t-1} z_j \hat{\boldsymbol{v}}_j \tag{2}$$

ただし，$\boldsymbol{z} := [z_1, z_2, \ldots, z_r]^{\mathsf{T}}$ は $\boldsymbol{y}_0 = \hat{V}\boldsymbol{z}$（$\hat{V} := [\hat{\boldsymbol{v}}_1, \hat{\boldsymbol{v}}_2, \ldots, \hat{\boldsymbol{v}}_r]$）を満たす定数である．$m$ 個の観測関数 g_i $(i = 1, \ldots, m)$ が，4.2.1節で述べた関数空間$\mathcal{G}$内の要素であると仮定すると，この分解(2)は，分解(1)の有限データによる近似を与えていることが確認できる．実際，ある数学的仮定の下で，上記の動的モード分解により推定される固有値が，内在する真のクープマン作用素のスペクトルの情報を捉えることも示されている[23]．

なお，動的モード分解で得られる分解(2)の各コンポーネントは，推定した固有値$\hat{\lambda}_j$で決まる固有の周期性と減衰率を持つ要素に分解されていることは，クープマン・モード分解(1)と同様である．そして，分解(2)における動的モード$\boldsymbol{v}_j$が，これらのダイナミクスがどのように各観測量 g_i へ相対的な重みで寄与するか，つまりある種の空間的なコヒーレンス構造の情報を与えている．流体現象における適用では，こういった情報は，データから空間的な組織構造を抽出する目的などに利用できる[13,15,24]．この動的モードに関するコヒーレンスという視点は応用的にも重要であり，流体のみでなく，脳科学や感染症伝播，経済学など，多くの分野でこの特徴を用いた解析が研究されている[25-28]．また，このコヒーレンス構造をデータの特徴として予測（教師あり／教師なし学習）に用いるための枠組みも提案されており[29,30]，いくつかの応用場面においても有用であることが確認されている[31,32]．

4.3 プラズマ乱流の時空間ダイナミクス解析への応用

4.3.1 乱流構造間の因果関係同定への応用

乱流と背景場との動的な相互作用の理解に向けた試みとして，動的モードを利用した構造間因果関係抽出方法の紹介をする．動的な相互作用の例として，大域的乱流シミュレーションで得られたリミットサイクル振動に動的モード分解を適用した成果について述べる[6]．

直線磁化プラズマにおける長谷川・若谷方程式の大域的乱流シミュレーションで得られた時系列データを解析に使用した．本ミュレーションでは，密度・静電ポテンシャル・平行速度場の空間3次元的分布の時間発展が出力され，乱流データは1ケースおおよそ数十ギガバイト程度となる．基礎プラズマ実験でしばしば観測されてる強い周方向流れ[33]を渦度ソースを導入することで模擬し，周方向流れの空間不均一性によって駆動されるケルビンヘルムホルツ不安定性の非線形発展を得た．渦度ソースの強度を増加させると，定常的な非線形飽和状態からリミットサイクル振動を伴うダイナミックな状態へ変化した[34]．ここでは，リミットサイクル振動を伴うケースに動的モード分解を適用した結果に焦点を当てる．**図2**に乱流シミュレーションで得られた非線形飽和状態でのフーリエモード(m, n)の時間発展（m，n はそれぞれ周方向・軸方向モード数）を示す．ここで背景場は$(0, 0)$に対応している．軸方向に均一で周方向に有限の波数を持つ揺動が発達している．これはケルビンヘルムホルツ揺動の特徴である．揺動エネルギーが大きく変動し，それと同期して背景場も変動している様子がわかる．また，**図2**下段で示しているスナップショットを見ると，揺動の空間パターンも時間的に変動していることがわかる．リミットサイクルの周期は$T_{\mathrm{LCO}} \sim 100$ 程度であり，これは乱流の周期 $T_{\mathrm{turb}} \sim 10$ に比べ格段に長い（時間はイオンジャイロ周波数で規格化）．

このような動的乱流状態に動的モード分解を適用する．時刻t における観測ベクトル $\boldsymbol{y}_t$ を，その時刻における各空間点における密度$N_t(\boldsymbol{r}_j)$から作成し，$\boldsymbol{y}_t = [N_t(\boldsymbol{r}_1), N_t(\boldsymbol{r}_2), \cdots, N_t(\boldsymbol{r}_m)]$ を用意する．そして，時空間情報マトリックス $Y_1 = [\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_{T-1}]$ と，観測時刻

2　厳密 DMD において用いるデータの次元は，本質的には観測量 g_i の数に相当する．分解(2)（または分解(1)）では，g_i の張る空間が十分大きいことを仮定しており（例えば[18]），低次元なデータに対して適用する場合には，数理的に空間を広げる必要がある．具体的な手法もいくつか提案されており，例えば，基底関数を事前に準備する方法[19]や，再生カーネルを用いた方法[20]，ニューラルネットをデータから学習して用いる方法[21,22]などが提案されている．

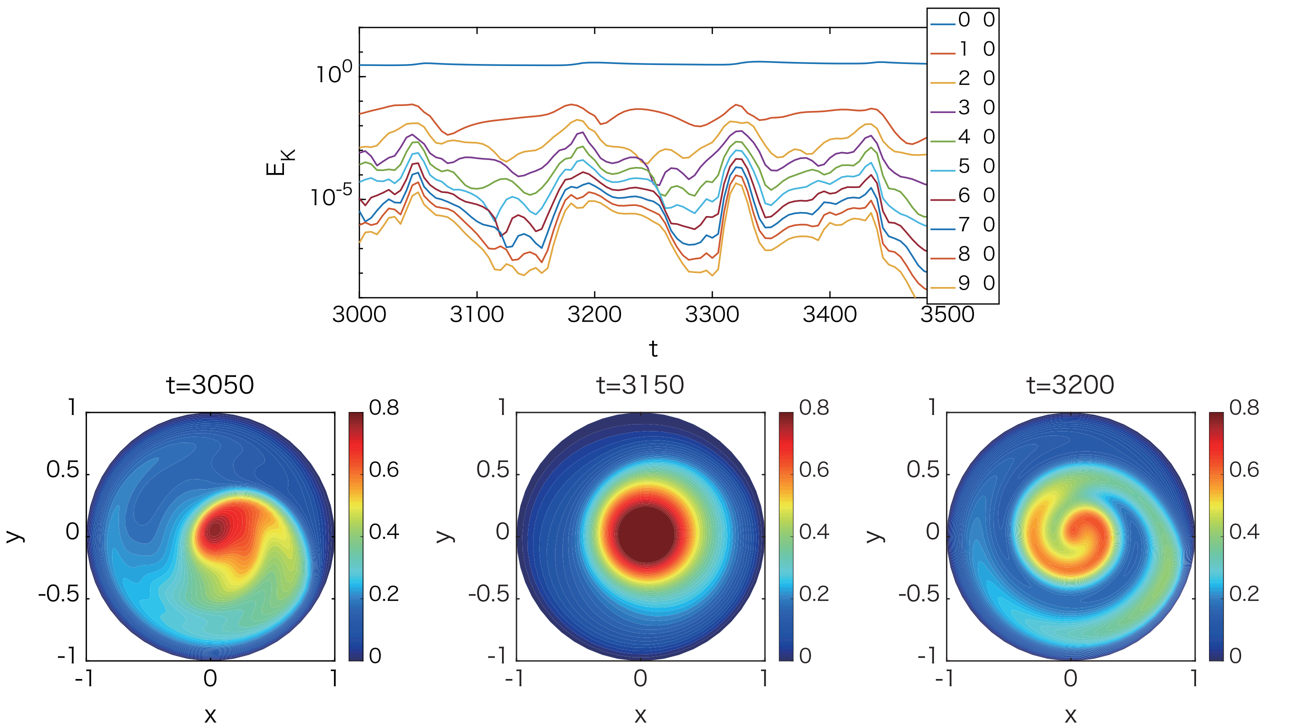

図 2　上段：乱流シミュレーションで得られた非線形飽和状態でのフーリエモード(m, n)の時間発展（m, n はそれぞれ周方向・軸方向モード数）．背景流れ場は$(0, 0)$に対応している．下段：$t = 3050$，3150，3200 における密度揺動のスナップショット[6]．

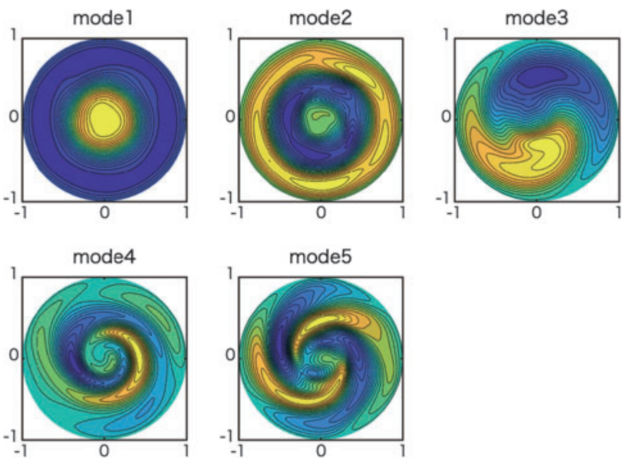

図 3　支配的固有関数の空間パターン（Mode1~5）[6]．

を 1 ステップずらした $Y_2 = [\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_T]$ とを準備し，前節で述べた特異値分解による低次元化した動的モード分解を行なった．ここで低次元化に用いたランクは $r = 9$ とした．こうして，系の特徴量である固有値 λ_j とそれに対応する固有関数 $\Psi_j(\boldsymbol{r})$ を得ることができる．以下では，リミットサイクル振動とリミットサイクル周期に比べ高周波の乱流の挙動について，動的モード分解より得られた固有関数（特徴的空間構造）間の因果関係を抽出する試みを紹介する．

図 3 に得られた固有関数（寄与率の大きな上位 5 つ）を示す．ここでは，寄与率の最も大きなモードから順番に Mode1 から Mode5 と呼ぶことにする．Mode 1 は背景密度分布，Mode2 は径方向に有限の波数を持ち周方向に一様な帯状流成分，Mode 3 はコヒーレントなケルビンヘルムホルツ揺動，Mode4, 5 はスパイラル構造に対応している．上述のように，解析している乱流状態は，プラズマの背景分布，乱流揺動が乱流スケールに比べ長い時間でリミットサイクル振動しており，乱流の空間パターンも大きく変化する．この場合，各 DMD モードの時間発展を決める複素周波数は指数関数的増加・減少しか記述することができないため，各モードの増減を表現するには工夫が必要である．

そこで，畳み込み積分を用いた固有関数の強度を評価する方法を提案する．この方法では，各時間ステップにおいて，得られた固有関数とオリジナルの乱流データとの間で畳み込み積分を行い，その空間最大値を固有関数（特徴的構造）の“強度”とする．すなわち，Mode-j の“強度”の瞬時値 $C_j(t)$ は，次のように計算される．

$$F_j(\boldsymbol{r}, t) = \left[\int N_t(\boldsymbol{r}')\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right]^{-1} \int N_t(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\,\Psi_j(\boldsymbol{r}')\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}', \tag{3}$$

$$C_j(t) = \max_{r}[F_j(\boldsymbol{r}, t)]. \tag{4}$$

得られた $C_j(t)$ を**図 4** に示す．C_j はうまく DMD モードの増減を表現しており，プラズマ背景分布の変形とスパイラル構造の出現・消失まで含めた乱流パターンの変化を明確に捉えることができている．

DMD モードの“強度”C_j を用いて，プラズマ分布や乱流構造間の因果関係を評価することができる．一例として，コヒーレント揺動（Mode3）とスパイラル構造（Mode4）について，**図 4** 下段に示すように C_3，C_4 の時間発展からリサージュを書くことができる．コヒーレント揺動の振幅が小さな時はコヒーレント揺動とスパイラル構造の強度は共に増加していくが，ある程度コヒーレント揺動

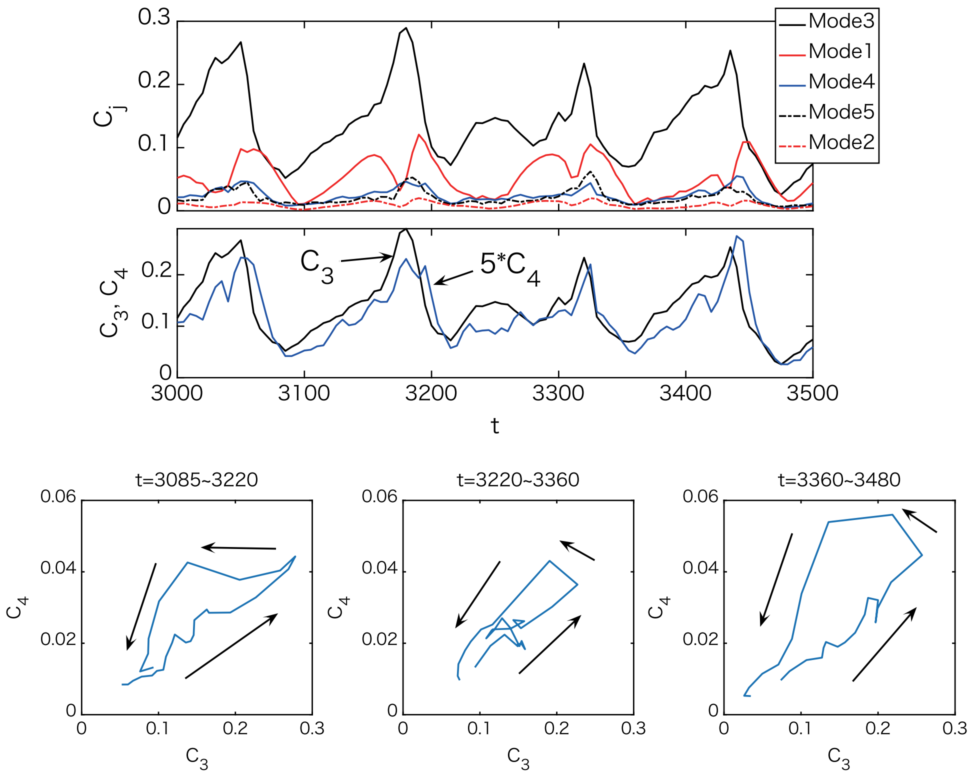

図 4　上段：各DMDモードの相関係数C_jの時間発展．下段：各リミットサイクル周期で描いた(C_3, C_4)間のリサージュ．ここでC_3はコヒーレントな KH 揺動，C_4 はスパイラル構造に対応[6]．

が大きくなると，スパイラル揺動の強度が急増し，コヒーレント揺動の強度が大きく減少することがわかる．この増減を繰り返し，リミットサイクル振動が実現していることがわかる．また，スパイラル構造は，コヒーレント揺動の非線形飽和振幅を規定していることを示唆している．

以上のように，DMD モードを用いて乱流構造間の因果関係を同定する方法を紹介した．リミットサイクル振動を伴うケルビンヘルムホルツ乱流に適用した結果を示した．リミットサイクルのように乱流の増減を繰り返す場合は，畳み込み積分による構造“強度”の評価が有効である．得られた構造強度について，モード間のリサージュを描くことで因果関係を抽出できることを示した．コヒーレント揺動の強度がスパイラル構造の出現に規定されていることを示唆する結果を得た．この方法は，他の様々な揺動観測に適用することが容易であり，幅広い波及効果を持つと期待している．また，さらに拡張された発展的な動的モード分解手法もあり（例えば recursive DMD [35]），今回の解析では使用していない複素周波数の時間変化や位相ダイナミクスを抽出することで，乱流ダイナミクスの理解から輸送への理解への展開も期待される．また，ニューラルネットワークを応用した構造間相互作用への発展も開発が進められている．

4. 3. 2　乱流現象の定量的予測への応用

動的モード分解をプラズマ乱流の観測データに適用することで，乱流挙動を予測する試みについて紹介する．ここでは，ハンケル行列とスパース動的モード分解を用いた方法について述べる．

一般に，実験から時系列データを取得する場合，データの次元m は時間ステップ数T よりも極端に小さくなることが多い．これは設置できるセンサー数に限りがあるためであり，数値シミュレーションとの大きな違いである．固有値分解に基づく標準的動的モード分解アルゴリズムでは，モード数は最大でも m しか得られない．仮に，モード数が$T(> m)$ 以上あれば，観測ノイズまで含めてデータを正確に再構成できる．換言すると，回帰モデル $Y_2 = AY_1$ は，縦長のデータ行列には厳密にフィットし得るのに対し，極端に横長のデータ行列には表現力が十分でない．別の見方をすると，動的システムを構成する本質的なモードの数よりも少ないモード数でフィッティングすると，挙動の近しい複数の本質的なモードが近似的に１つのモードでまとめて表現される．さらに観測ノイズがあれば，ノイズに対応して付加されるモードもまとめて表現される．こうして得られたモードの重ね合わせでは，十分正確にデータを再構成することができない．

このような問題を解決するために，動的システムが有するモード（本質的なモードとノイズ由来のモード）の数以上のモードを用いてフィッティングすることで必要なモードを正確に推定したのちに，不要なモードを取り除くというアプローチを提案する．それぞれ，ハンケル行列作成とスパース動的モード分解によって実装することができる．ハンケル行列は，元の時系列データから窓幅w とスライド幅s で切り出したデータをh 回積み上げて，次のように定義される．

$$Y_H := \begin{bmatrix} Y(0, T-sh) \\ Y(s, T-sh+s) \\ Y(2s, T-sh+2s) \\ \vdots \\ Y(sh, T) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+hm)\times(T-sh+1)}, \tag{5}$$

$$Y(i, i+j) := [\boldsymbol{y}_i, \boldsymbol{y}_{i+1}, \boldsymbol{y}_{i+2}, \cdots \boldsymbol{y}_{i+j}]. \tag{6}$$

このハンケル行列に対して動的モード分解を適用することで，モード数は hm だけ増加する．標準的動的モード分解では，時刻 t における観測ベクトル $\boldsymbol{y}_t$ は行列 A の固有値分解から，式(2)のように展開された．スパース動的モード分解では以下の手続きにより寄与率 z_j を決め直す．まず，観測した時空間行列と再構成した時空間行列の差の Frobenius ノルムを最小化するための目的関数を $J(\boldsymbol{z})$ とし，L1 正則化項を加えた次の最適化問題を解く．

$$minimize_{\boldsymbol{z}} \quad J(\boldsymbol{z}) + \gamma \sum_j |z_j|. \tag{7}$$

最適化でゼロとなった寄与率 z_j を拘束した条件下で，再び正則化項を外した $J(\boldsymbol{z})$ のみ最小化して，最終的な寄与率 z_j を決定する．以上の手続きで，重要度の低いモードが取り除かれる．アルゴリズムの詳細は，文献[36]を参照されたい．

我々は，動的モード分解による乱流データの解析を進めてきた[7]．解析に使用した乱流データは，九州大学にある直線磁化プラズマPANTA装置で観測されたイオン飽和電流を用いた．周方向に64チャンネル設置されているラングミュアプローブアレイによって1マイクロ秒ステップで計測された時空間発展を使用した．PANTA 装置では，放電条件によって帯状流やストリーマ，孤立波状態等の様々な乱流状態が存在するが[37]，ストリーマ構造が支配的な条件で解析を行った[38]．この放電では，5 kHz 程度のドリフト波乱流と 1 kHz 程度のストリーマ構造が共存している．このデータからハンケル行列を作成することは，上流側にプローブアレイを擬似的に増設していることに相当する．ここでは，$s = 100$ と $h = 5$ の設定で，時間区間 $T = 3$ ms のデータで学習し，その先の予測を試みた．

この計測データにおいて，スパース動的モード分解の適用は，時空間データからのノイズ除去に相当する．ノイズ除去の様子を，DMD モードの複素周波数の観点から**図 5** に示す．ここで，複素平面における単位円付近の成分（赤丸）は動的システムの本質的なモードであり，単位円から離れた成分（青丸）はノイズ由来のモードと考えられる．実際，青丸で示した DMD モードは減衰が大きく，周波数が高く，寄与率が小さい．ただし，ここで述べるノイズ除去の方法は高周波なランダムノイズに対するもののみに適用可能なものであるため，計測器の基本的なノイズ対策は必要である[39]．以降の結果は，赤丸で示した DMD モードのみから得られるものである．

図 6 は計測データ（訓練データと検証データ），提案アプローチおよび標準的動的モード分解における再構成と予測である[40]．L1 正則化のパラメータ γ は，DMD モードの数が計測点数64以下となるように調節した．標準的動的モード分解では，時空間パターンは時間とともに減衰して，細部も正確に再構成できていないのに対し，提案アプローチではこの問題が大幅に改善されている．このように精度良く再構成する動的モード分解を用いると，乱流の空間構造を含めた時間発展をより正確に予測できる．予測性能を定量的に議論するため，以下の誤差指標 $E(t)$ を導入する．

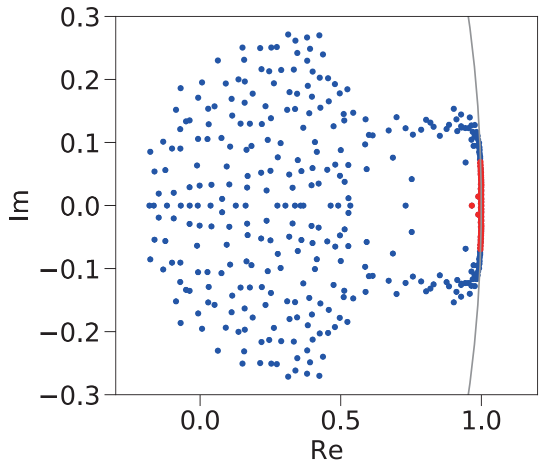

図 5 DMD モードの複素周波数．青がスパース DMD で除去された DMD モード，赤の DMD モードのみを解析に使用した．

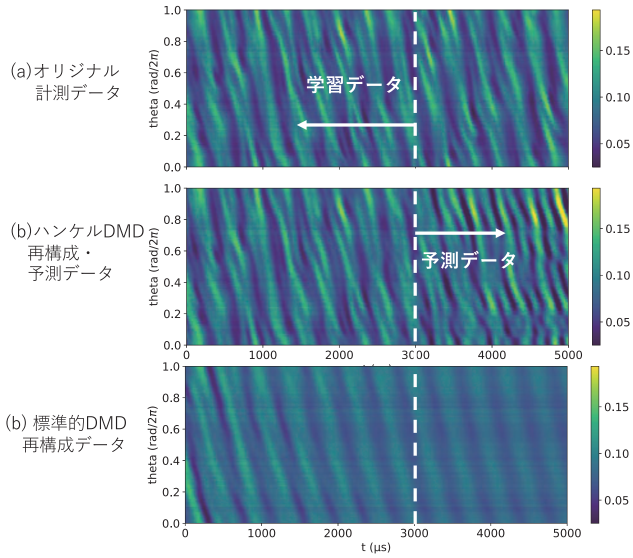

図 6 乱流時空間発展の学習と予測：上段から順にオリジナル計測データ，ハンケル・スパース DMD を用いた再構成と予測，標準的 DMD を用いた再構成と予測[40]．$t < 3000$[μs] は学習領域，$t > 3000$[μs] は予測領域．

$$E(t) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{64} \{\hat{y}_i(t) - y_i(t)\}^2}{\sum_{i=1}^{64} y_i(t)^2}} \tag{8}$$

ここで，$\hat{y}_i(t)$ と $y_i(t)$ は，それぞれ，時刻 $t(> T\Delta t)$，計測点 i における予測データと検証データである．誤差指標に対して，

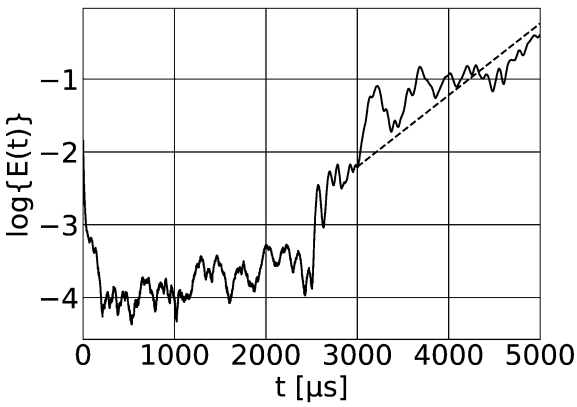

図7 予測誤差指標 $E(t)$ の時間発展．$t>3000$[μs]が予測領域．

$$E(t)=E(0)\exp(t/\tau) \quad (9)$$

というフィッティングを行うことで，予測可能時間τを評価する．図7は$E(t)$の対数プロットであり，$\tau\approx1000$マイクロ秒程度であると評価できる．

現状では支配的乱流揺動（周期200マイクロ秒程度）の数周期程度の予測が空間構造を含めてできている．解析に用いたショットでは，ストリーマに起因するミリ秒スケールの空間局在した輸送が起こっている[41]．今後，より長時間の予測が可能となれば，このような突発的・間欠的な輸送現象の空間構造を含めた予測にも応用できる可能性がある．

4.4 まとめ

本章ではデータ駆動科学的手法として近年注目されている動的モード分解について，理論的基礎から応用例まで紹介した．動的モード分解は流体現象の時空間構造を観測／計測データから抽出するための数値解析手法の一つとして提案されたものであり，ここではプラズマ乱流への応用について紹介した．動的モード分解を用いると，時空間発展データから統計的に重要な空間構造とその構造に対応する複素周波数を得ることができ，より少数の自由度でシステムを理解することが可能となる．物理機構の理解をめざした応用例として，大域的乱流シミュレーションで得られた乱流場に適用した例を紹介した．ここでは動的モード分解によって抽出された特徴的空間構造を元データとの畳み込み積分を行うことで構造間の動的因果関係を抽出する方法を提案した．また，時空間発展予測へ向けた応用例として，実験で観測された乱流の時空間発展について，ハンケル行列とスパース動的モード分解を適用し，空間構造を含む乱流の発展を予測した試みを紹介した．今後，突発的輸送等の空間発展予測を可能にすると期待される．

謝 辞

本研究は九州大学若手研究者グローバルリーダー育成型Progress 100（NB80645028）および九州大学数理・データサイエンスに関する教育・研究支援プログラムの支援を受けました．またJSPS科研費JP18H03287，16K18335，17H06089，16H02442，15H02155，15H02335，18K03578，19J00871，九州大学応用力学研究所共同利用研究およびJST CREST JPMJCR1913の助成をいただきました．R.O. Dendy教授，稲垣滋教授との有益な議論に感謝いたします．

参 考 文 献

[1] P.H. Diamond *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **47**, R35 (2005).
[2] J.W. Connor *et al.*, Phys. Plasmas **5**, 2687 (1998).
[3] F. Wagner, Plasma Phys. Control. Fusion **49**, B1 (2007).
[4] J.D. Callen and M.W. Kissick, Plasma Phys. Control. Fusion **39**, B173 (1997).
[5] P.J. Schmid, J. Fluid Mech. **656**, 5 (2010).
[6] M. Sasaki *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **61**, 112001 (2019).
[7] A. Kusaba *et al.*, Plasma Fusion Res. **15**, 1301001 (2020).
[8] A.A Kaptanoglu *et al.*, Phys. Plasmas **27**, 032108 (2020).
[9] R. Taylor *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **89**, 053501 (2018).
[10] H. Natsume *et al.*, Phys. Plasmas **27**, 042301 (2020).
[11] C.W. Rowley *et al.*, J. Fluid Mech. **641**, 115 (2009).
[12] P.J. Schmid, J. Fluid Mech. **656**, 5 (2010).
[13] K. Taira *et al.*, Aiaa Journal **55**, 4013 (2017).
[14] S. Klus *et al.*, J. Nonlinear Sci. **30**, 283 (2020).
[15] I. Mezić, Annu. Rev. Fluid Mech. **45**, 357 (2013).
[16] B. Koopman, Proc. National Academy of Sciences of the United States of America **17**, 315 (1931).
[17] A. Mauroy *et al.*, Physica D **261**, 19 (2013).
[18] J.H. Tu *et al.*, J. Comput. Dyn. **1**, 391 (2014).
[19] M.O. Williams *et al.*, J. Nonlinear Sci. **25**, 1307 (2015).
[20] Y. Kawahara, Neural Inf. Process. Syst. **29**, 911 (2016).
[21] N. Takeishi *et al.*, Adv. Neural Inf. Process. Syst. **30**, 1130 (2017).
[22] B. Lusch *et al.*, Nat. Commun **9**, 4950 (2018).
[23] M. Korda and I. Mezic, J. Nonlinear Sci. **28**, 687 (2018).
[24] B.J. Cantwell, Annu. Rev. Fluid Mech. **13**, 457 (1981).
[25] B.W. Brunton *et al.*, J. Neurosci. Methods **258**, 1 (2016).
[26] J.L. Proctor and P.A. Eckhoff, Int. Health **7**, 139 (2015).
[27] J. Mann and J.N. Kutz, Finance **16**, 643 (2016).
[28] K. Fujii *et al.*, Sci. Rep. **9**, 16755 (2019).
[29] K. Fujii *et al.*, Proc. 2017 European Conf. on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML-PKDD'17), pages 127 (2017).
[30] T. Bito *et al.*, Proc. 2019 Int'l Joint Conf. on Neural Networks (IJCNN'19), number 19278 (2019).
[31] K. Fujii *et al.*, Sci. Rep. **10**, 3005 (2020).
[32] H. Shiraishi *et al.*, J. Neural Eng. **17**, 036009 (2020).
[33] B.M. Annaratone *et al.*, Phys. Plasmas **18**, 032108 (2011).
[34] M. Sasaki *et al.*, Phys. Plasmas **26**, 042305 (2019).
[35] B.R. Noack *et al.*, J. Fluid Mech. **809**, 843 (2016).
[36] M. R. Jovanović *et al.*, Phys. Fluids **26**, 024103 (2014).
[37] T. Kobayashi *et al.*, Plasma Fusion Res. 12:1401019 (2017).
[38] T. Yamada *et al.*, Nat. Phys. **4**, 721 (2008).
[39] 永島芳彦，稲垣 滋：プラズマ・核融合学会誌 **96**, 2 (2020).
[40] A. Kusaba *et al.*, *submitted to* Plasma Fusion Res. (2020).
[41] F. Kin *et al.*, Phys. Plasmas **26**, 042306 (2019).

J. Plasma Fusion Res. Vol.97, No.2 (2021) 86‐92

小特集 磁場閉じ込め核融合プラズマにおけるデータ駆動アプローチによる物理モデリングの進展

5．データ駆動アプローチを用いた雪崩的乱流輸送現象の解析

5. Data-Driven Analyses of Avalanche Like Turbulent Transport Phenomena

朝 比 祐 一，藤 井 恵 介[1)]
ASAHI Yuuichi and FUJII Keisuke[1)]
日本原子力研究所，[1)]京都大学

（原稿受付：2020年10月12日）

本研究では，第一原理的ジャイロ運動論的シミュレーションによる大規模データを，データ駆動科学的手法により解析した．まず，少数の波が支配的なコヒーレントな状態と様々な波が入り乱れる乱雑な状態の判別を，特異値分解を用いて行った．これにより突発的に起こる熱輸送現象のあとプラズマは乱雑な状態になること，乱雑さはその後自発的に減少すること，次の突発現象はそのような自己組織化の後に起きることが明らかになった．この過程はLandau 減衰を始めとする速度空間構造の変化と密接に変化していると考えられる．しかし，従来手法では5次元位相空間構造の時系列解析は不可能であった．そこでさらに主成分分析による位相空間構造データの圧縮技術を開発した．圧縮されたデータを利用しても突発的輸送が表現できることや，どのような位相空間構造が突発的輸送と関連しているかを論じる．

Keywords:
gyrokinetic simulation, plasma turbulence, singular value decomposition, dimensionality reduction, avalanche like transport

5.1 はじめに

磁場閉じ込め核融合装置の炉心プラズマの閉じ込め性能は乱流輸送によって支配される．ジャイロ運動論的シミュレーション[1]は理論，実験解析問わず，プラズマ乱流輸送解析に幅広く利用される第一原理的解析手法である．計算は空間3次元，速度2次元，時間1次元の合計6次元空間内で行われ，膨大なシミュレーションデータが生成される．このデータを解析する上では，大きく分けて三つの困難が存在する：

1．非線形相互作用による乱流自体の解釈困難さ
2．データの高次元性による可視化の困難さ
3．データの大規模性によるデータ処理の困難さ

本研究ではこのような大規模，高次元データから物理的知見を抽出することをめざし，データ駆動科学的手法により上記のジャイロ運動論的シミュレーションで得られたデータの解析を行った．

本研究で用いるfull-F ジャイロ運動論的シミュレーションでは，分布と揺動の時間発展を自己無頓着に解くため，自発的に励起される突発的な輸送現象を扱うことができる．この突発的熱輸送現象は空間的に伝播すること，また熱流束の大きさの周波数スペクトルが$1/f$分布に近くなることから，自己組織化臨界現象（self-organized criticality, SOC）[2]との関連が議論されてきた．従来研究では，この突発的熱輸送現象に関して流体モーメントの3次元空間パターン形成と輸送の関連性が調べられてきた．例えば，文献[3]では突発的熱輸送が起きているときに，静電ポテンシャル内のコヒーレントなモード構造が見られることが指摘されている．一方で高速粒子輸送研究などからは位相空間内で形成されるパターンと突発的な輸送現象との関連性が示唆されている[4]．本研究ではこの突発的熱輸送現象に着目する．特に，この現象がプラズマ内のどのような波のダイナミクスによって起こっているかを調べる．

まずはじめに大規模シミュレーションデータが，少数の波が支配的に励起されているコヒーレントな状態と，様々な波が入り乱れている状態のどちらに位置するかを定量化することを考えた．具体的には，特異値分解を用いてプラズマの空間分布から空間的な乱雑さ，つまり擬似的なエントロピーを定義した．これにより突発的輸送現象によりプラズマの乱雑さが増大すること，プラズマの乱雑さはその後自発的に減少すること，次の突発現象はそのような自己組織化の後に起きることが明らかになった．この過程はLandau 減衰を始めとする速度空間構造の変化と密接に関連していると考えられるが，従来手法では5次元位相空間構造の時系列解析は不可能である．そこで主成分分析による位相空間構造データの圧縮技術を開発した．圧縮されたデータを利用しても突発的輸送が表現できることや，どのような位相空間構造が突発的輸送と関連しているかを論じる．これらの解析と関連する先行研究については5.3節と5.4節で別途論じる．

Japan Atomic Energy Agency, CCSE, 178-4-4 Wakashiba, Kashiwa, CHIBA, Japan
corresponding author's e-mail: asahi.yuichi@jaea.go.jp

5.2 特異値分解とデータセット

本節では5.3節および5.4節における共通の手法である特異値分解（Singular Value Decomposition，SVD）とデータセットについて説明する．

5.2.1 特異値分解（SVD）

本研究では，ある物理量に関する時系列データを解析対象とし，これを m 行，n 列の行列 A で表現する（ここでは $m \leq n$ と仮定する）．行列 A の特異値分解は以下で表される．

$$A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}, \tag{1}$$

ここで U を左特異値行列（m 行，m 列），V を右特異値行列（n 行，n 列）と呼ぶ．どちらも正規直交行列である．また，Σ は m 行 n 列の非負値対角行列であり，特異値行列と呼ばれている．Σ の対角成分 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_m (\geq 0)$ を特異値と呼ぶ．

特異値の大きさはAに対するFrobenius normの意味での寄与の大きさと対応する．そのため，寄与の小さな特異値に対応する成分は無視しても A を近似的に表現できる．より正確に書くと，

$$\sum_{i,j} (a_{ij} - \overline{a}_{ij})^2 \tag{2}$$

を最小化するランク $r < m$ の行列 $\overline{\mathrm{A}}$ は，寄与の小さな特異値（$k > r$）を無視した

$$\overline{a}_{ij} = \sum_{k=0}^{r} u_{ik} \sigma_k v_{jk} \tag{3}$$

に一致するということである．なお，ここで x_{ij} は行列 X の i，j 成分を表す．

例として，行列 A として時系列シミュレーションデータを使うことを考えよう．時間方向を A の行方向，空間方向を A の列方向に並べるとする．つまり，ある時間スライス i，ある空間点 j でのデータを a_{ij} とする．特異値分解は，この行列を時間に依存しない正規直交の基底 V^{T} と空間に依存しない係数 UΣ に分解する．これは正規直交基底展開の一つであるフーリエ変換とよく似ている．フーリエ変換の場合は固定されたフーリエ基底に対応する係数を求めるが，特異値分解は式（2）を最小化するように基底も同時に求めていることになる．このように特異値分解はフーリエ変換と共通する性質がある．そのため例えばプラズマ中である波が卓越しているときの主な主成分は，その波の sin，cos 成分として現れることが多い．

一方で，フーリエ基底は一様空間でのラプラシアン固有関数である．そのため一様乱流データを表現するには，フーリエ基底がもっとも性能がよいと期待される．しかしトーラス形状をしているプラズマのデータを最もよく表す基底がどんなものかは自明ではない．

また特異値分解では，Frobenius norm の意味で最も元の情報をよく表した低ランク行列が得られる．特異値の分布がデルタ関数的であるとき，つまり少数の特異値が大きくてそれ以外の特異値が小さい場合，大きな特異値に対応する右特異値行列・左特異値行列を使うことで元データを効率よく圧縮できることになる．

5.2.2 シミュレーションデータ

本研究で用いるジャイロ運動論コードGT5D[5,6]は，5次元分布関数 f の時間発展を計算する．分布と揺動の時間発展を自己無矛盾に解くfull-Fモデルである．**図1**は，磁気面平均された物理量の時空間発展を示す[7]．**図1**(a)は，$E \times B$ ドリフトに起因するイオン乱流エネルギーフラックス Q_i^E を示しており，径方向へ伝搬する突発的な輸送が起こっていることがわかる．

図2(a)と(b)に示すように雪崩フェイズと静的フェイズの静電ポテンシャルや密度の揺動成分の構造を見比べると，雪崩フェイズにおいてはコヒーレントなバルーニング構造が見られるのに対し，静的フェイズでは明瞭なモード構造が見られない．また，**図2**(e)と(f)を比較するとわかるように，密度と温度では構造が異なる．これは速度空間においても構造形成が起こっていることを示唆している．

5.3 乱流シミュレーションデータにおける乱雑さの定量化と突発的現象の関連

図2(a)と(d)を見比べると雪崩フェイズにおいてはコヒーレントなモード構造が存在するのに対し，静的フェイ

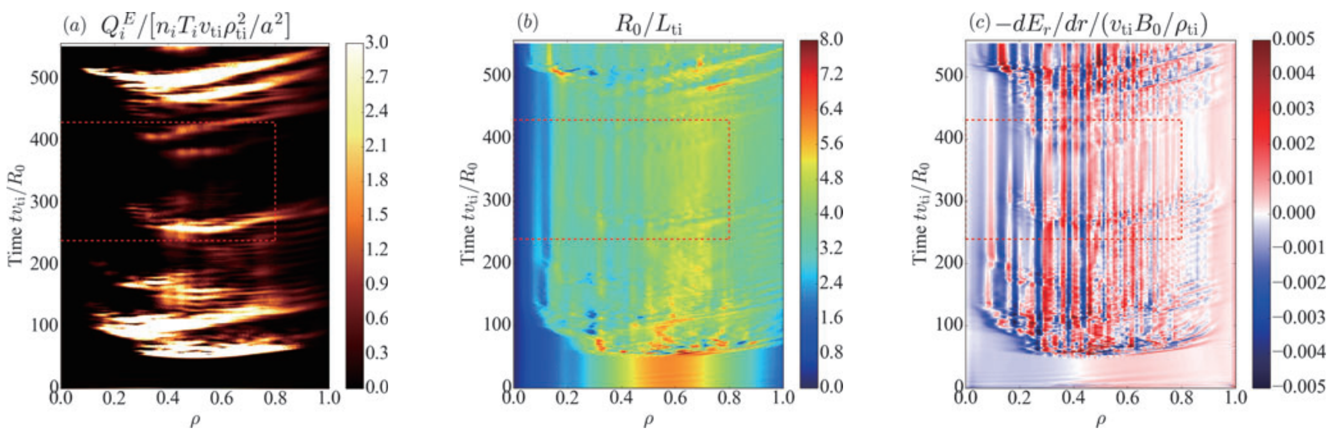

図1 (a)乱流エネルギーフラックス Q_i^E，(b)規格化イオン温度勾配 R_0/L_{ti}，(c)径電場シア $\mathrm{d}E_r/\mathrm{d}r$ の時系列データ．5.4節では赤い点線に囲まれた部分について解析を行った[7]．

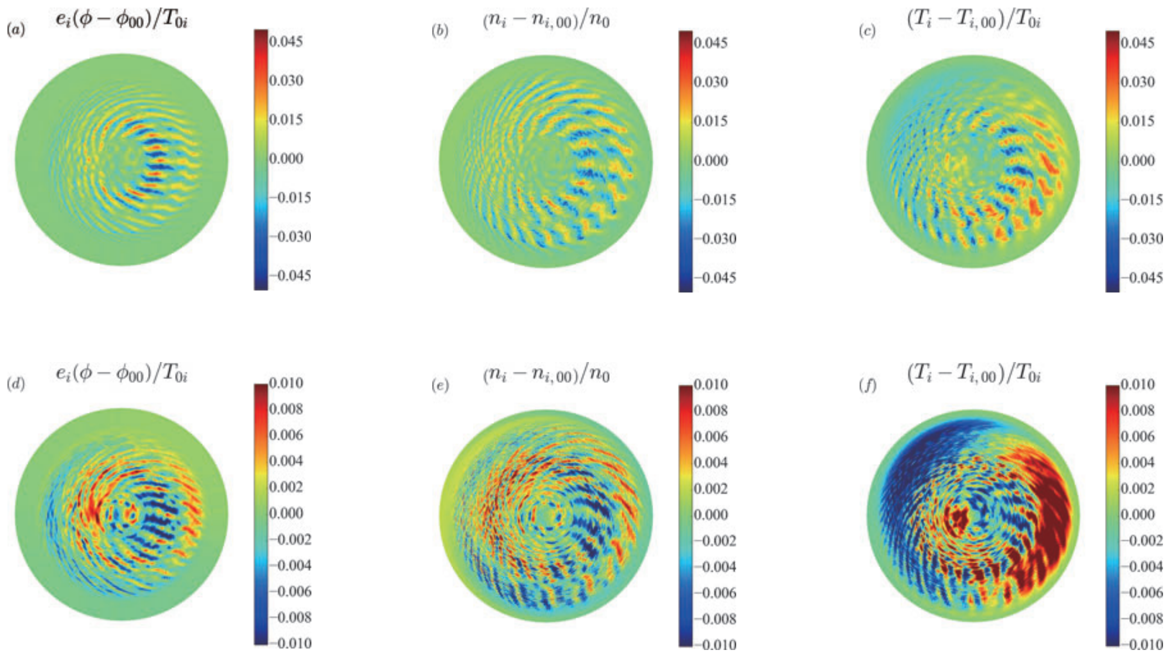

図 2　雪崩フェイズ（$tR_0/v_{ti}=250$）における(a)静電ポテンシャルϕ，(b)イオン密度δn_i，(c)イオン温度δT_iと静的フェイズ（$tR_0/v_{ti}=320$）における(d)静電ポテンシャルϕ，(e)イオン密度δn_i，(f)イオン温度δT_iのポロイダル断面図[7].

ズでは構造が乱雑化していることが定性的に理解できる．少数の波が卓越しているか，多くの波が乱立しているかの違いを擬エントロピーで表すことを考える．つまり，単一の波しか存在しないようなコヒーレントな状態は擬エントロピーが小さく，様々な波が入り乱れている状況は擬エントロピーが大きいと表すわけである．これまで，トーラス形状など任意の形状のプラズマに対して，そのエントロピーの議論はあまりされてこなかった．これは，トーラスプラズマでは1つのモードを単一のフーリエモードで記述できないことに関連すると考えられる．

トーラスプラズマに対してこの擬エントロピーを定量的に評価することを考える．まず，**図3**(a)に示すように，各時刻において小さな窓空間における揺動のイオン密度$\delta n = n - n_{m=0,n=0}$の空間データを様々な窓位置に対して取得し，それを行列$\mathrm{A}=\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \cdots, \mathbf{a}_N\}$で表現する．ただし，$N$は窓の総数であり，$\mathbf{a}_i$はそれぞれの窓内部のデータと対応する．式(1)で定義される特異値分解の結果から以下の式で示される擬エントロピーS^{SVD}を評価した．

$$S^{\mathrm{SVD}} = -\sum_{i}^{N} \overline{\sigma}_i \log_2 \overline{\sigma_i}, \tag{4}$$

ここで，$\overline{\sigma_i} = \sigma_i / \sum_j^N \sigma_j$は規格化された特異値である．擬エントロピー$S^{\mathrm{SVD}}$は，入力データAを記述するのに実効的に必要な基底の数を求めることに対応する．例えば，単一の不安定モードだけが存在するときは小さい値が得られ，多数のモードがほぼランダムに分布するときは大きな値が得られる．実際，**図3**(b)を見ると，雪崩フェイズでは少数の基底でデータが表現できているのに対し，静的フェイズではデータを表現するのに多数の基底が必要となっている．これは雪崩フェイズにおいてはコヒーレントなモード構造が存在し，静的フェイズでは構造が乱雑化しているという観察結果と一致する．

このようにして求めた擬エントロピーの時間変化を**図4**(c)に，熱流束の時間変化**図4**(a)とともに示す．図中縦の点線で，半径位置0.4にて熱流束が極大値をとった時刻を示す．擬エントロピーは，熱流束が極大となる付近で最も上昇し，熱流束が小さくなった時刻付近で減少に転じていることがわかる．

不安定バルーニングモードの一つ（トロイダルモード$n=12$）の振幅の時間変化を**図4**(b)に示す．この不安定モードの振幅は熱流束の大きさとほとんど同じ変化をしている．このことから，熱流束はこの不安定モードが成長することで誘起されていることがわかる．また，この不安定モードが成長するに従って擬エントロピーも大きくなっていく．擬エントロピーがある程度大きくなると，この不安定モードは急激に減衰する．擬エントロピーは，どの程度様々な波が系に存在するかを示すものであることから，大きくなった不安定モードが非線形相互作用により他の波を励起していること，また励起した他の波へのエネルギー輸送により不安定モードの振幅が小さくなっているのだと推察される．

このように，特異値の分布を用いることでデータの乱雑さを定量化することができた．二次元プラズマ乱流に対して固有直交分解（Proper Orthogonal Decomposition, POD）を適用した例でも同様のエントロピーが定義され，時系列データ全体の乱雑さとの関連が述べられている[8]．本研究はこれと異なり，各時刻の乱雑さを定量化することで，系の乱雑さの変化と雪崩的輸送を関連づけることができた．この手法の特徴は，データの次元数に制限がないことである．今回はプラズマ密度の3次元分布を用い

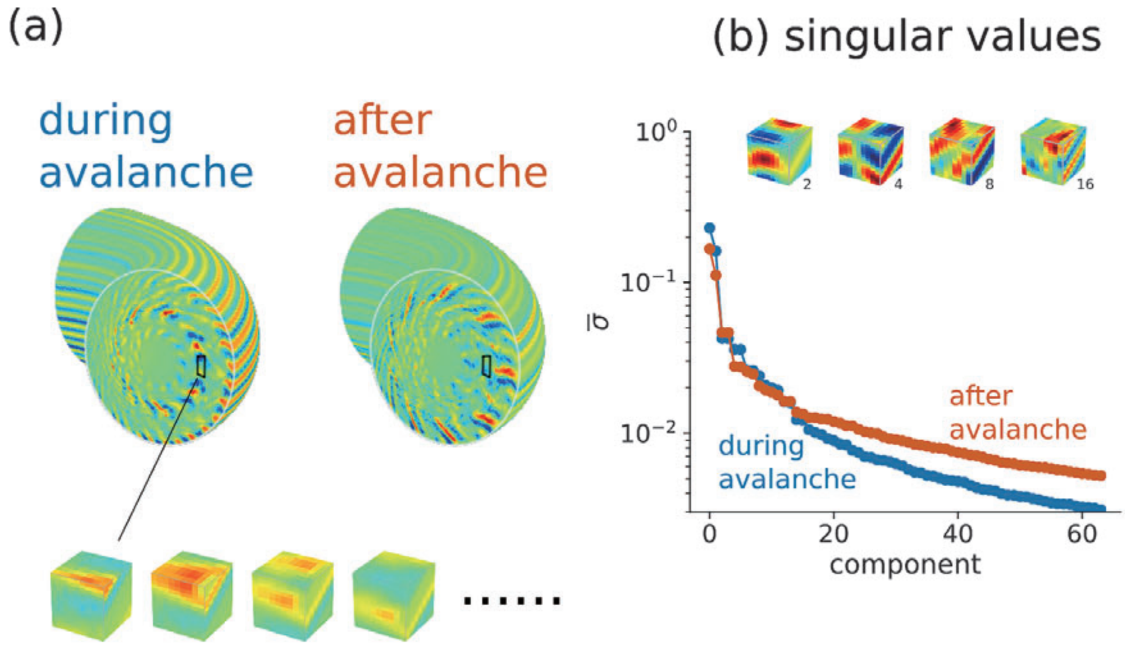

図 3　(a)突発的輸送現象がおこっている時およびその直後におけるプラズマ密度ゆらぎの分布．この 3 次元データから複数の小さな窓領域を取得したのち，特異値分解を適用する．(b)突発的輸送現象の最中およびその直後のデータから得た特異値の分布．輸送現象の最中では特異値の分布がより尖っている（よりコヒーレント）であるのに対し，直後では特異値の分布がより平坦（より乱雑）である．挿入図で，SVD で得られた基底の典型的なものを示す．

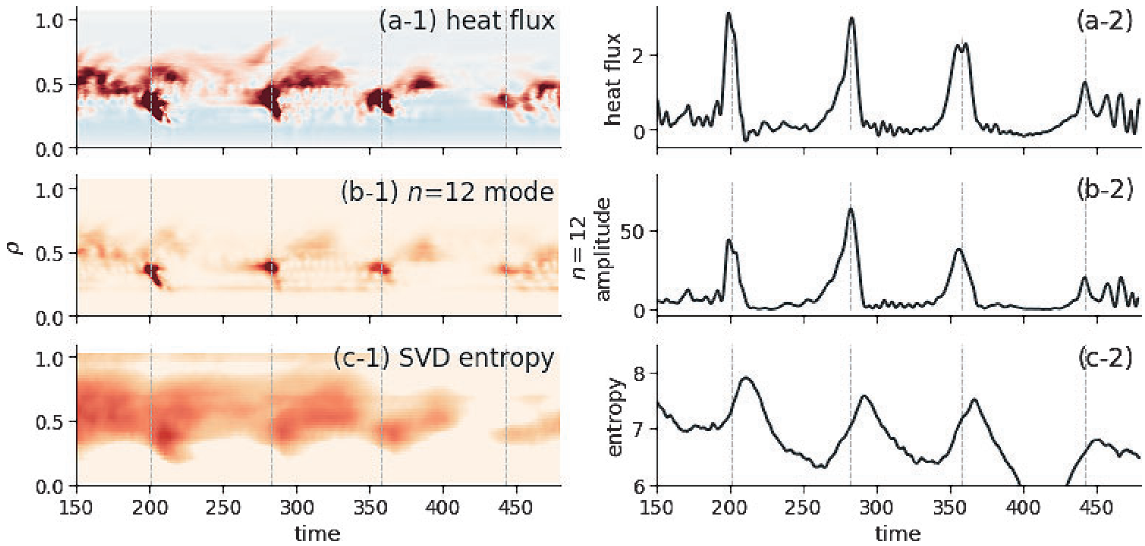

図 4　(a-1)熱流束の時空間分布，(b-1)$n=12$ モード強度の時空間分布，(c-1)SVD を元にした擬エントロピーの時空間分布．(a-2)，(b-2)，(c-2)にはそれぞれ，$\rho=0.4$ の位置での時間発展を示す．

たが，速度空間を含めることもできる．これまで特に速度空間でのエントロピーが精力的に調べられてきた[9, 10]．それらの研究との比較が今後の課題である．

5.4　主成分分析による 5 次元時系列データの分解とその解釈

本節ではデータ解析において幅広く使われる主成分分析（PCA）を用いて分布関数時系列データの解析を行う．関連研究としては，ジャイロ運動論の時系列データを Tucker 分解によって圧縮した例[11]が知られる．この研究では，比較的小規模（〜10 GB）の局所的乱流のデータ圧縮性に関する議論が行われているのに対し，本研究では，より大規模（〜10 TB）の大域的乱流のデータ圧縮およびデータ可視化手法に関して論じる．分布関数の揺動部分の時間発展 $\delta f=f-f_{m=0,n=0}$ に対して主成分分析を適用すると，

$$\begin{aligned} \mathrm{F} &\sim \mathrm{U\Sigma V^T} \\ &= \sum_{k=1}^{r} u_k' \mathrm{V}_k^{\mathrm{T}} \end{aligned}$$

と近似できる．ここで r は用いた主成分の数であり，$u_k'=[\mathrm{U\Sigma}]_k$ を主成分 k の係数（UΣ の k 列目），V_k を主成

分 k の基底（V の k 列目）と呼ぶこととする．$\mathrm{F}=\delta f-\delta\bar{f}$，$\delta\bar{f}$ は δf の平均であり，主成分分析ではデータから平均を引いた上で特異値分解を行う．主成分分析を行うためには，5 次元分布関数の時系列データ δf を行列の形状へ変換する必要がある．この変換には自由度が存在し δf は例えば，$(N_t, N_r, N_\theta, N_\varphi)\times(N_{v_\parallel} N_w)$，　$(N_t, N_r, N_\theta)\times(N_\varphi, N_{v_\parallel} N_w)$，$(N_t)\times(N_r, N_\theta, N_\varphi, N_{v_\parallel} N_w)$ などと表せるとわかる．ここで $(m)\times(n)$ は m 行，n 列の行列を意味し括弧内の次元については一次元データとして平坦化することとする．**図 5** は，$(N_t, N_r, N_\theta, N_\varphi, N_{v_\parallel}, N_w)=(800, 107, 256, 32, 96, 20)$ の時系列データを異なる形状の行列として行列化し，主成分分析した際の累積寄与率とデータ圧縮率の関係を示す．なお，電子とイオンの分布関数に関しては独立の行列として処理した．ただし，主成分 r（ここでは $r=64$）までの累積寄与率は以下で定義した．

$$\frac{\sum_{k=1}^{r}\sigma_k^2}{\sum_{k=1}^{n}\sigma_k^2}.$$

データ圧縮率は，係数と基底のバイト数を全データのバイト数で規格化したものである．

図 5 (a) より，電子に関しては分解方法によらずデータを表現できていることがわかる．一方**図 5** (b) に示すようにイオンに関しては，速度空間を基底とする行列の方がデータの表現力が高いとわかる．Tucker 分解により 5 次元分布関数時系列データの圧縮を行った先行研究[11]においても，速度空間に関しては少数の成分でデータを表現できると指摘されている．

以下ではこれらの特性を加味し，3 桁のデータ圧縮率と高い累積寄与率を両立している $(N_t, N_r, N_\theta)\times(N_\varphi, N_{v_\parallel}, N_w)$ の分解でデータ解析を行う．

図 6 は，$(N_t, N_r, N_\theta)\times(N_\varphi, N_{v_\parallel}, N_w)$ の行列を主成分分析した結果の右特異値ベクトル（以下基底と呼ぶ）を示し，**図 7** は，左特異値ベクトル（厳密には左特異値ベクトルと特異値行列の積で，以下係数と呼ぶ）の雪崩フェイズと静的フェイズの空間構造を示す．ここで，**図 6** と**図 7** を見比べることで可視化困難であった 5 次元データを 3 次元以下の画像の組み合わせとして表現できていることに注意されたい．プラズマの実験解析においては，同様の手法によりデータの時間情報と空間情報を分解して解析することがしばしば行われる[12-14]．本解析では同様の考えを進め，同様の解析を高次元性に起因する可視化の困難さを克服するために利用している．

図 7 において，第 0 主成分は磁場強度分布，第 3 主成分は対流セルと呼ばれる構造であることがわかる．第 1，第 2 主成分は，$n=12$ のバルーニングモードと対応している．**図 7** の (a) に示す雪崩フェイズと (b) に示す静的フェイズを比較すると，第 0 主成分と第 3 主成分は定常的でありほぼ変化しないのに対し，第 1，第 2 主成分は雪崩フェイズで卓越していることがわかる．これは流体モーメントにおいてコヒーレント構造が卓越していることと対応している．各主成分が雪崩的熱輸送とどのように関連しているかを調べるため，以下の分布関数再構成の式を用いて各主成分のエネルギー輸送に対する寄与を調べた．f 自体の再構成結果については文献[7]を参照されたい．

$$\hat{Q}_i^E=\int \mathrm{d}v_\parallel \mathrm{d}\mu J_v\,(\mathbf{v}_{E\times B}\cdot\nabla r)\left(\frac{m_i v_\parallel^2}{2}+\mu B\right)\hat{f}$$
$$=\hat{Q}_{00}+\hat{Q}_{\mathrm{mean}}+\sum_k \hat{Q}_k, \qquad (5)$$

ここで，

$$\hat{f}=f_{00}+\delta\bar{f}+\sum_k u_k' \mathrm{V}_k^{\mathrm{T}}$$

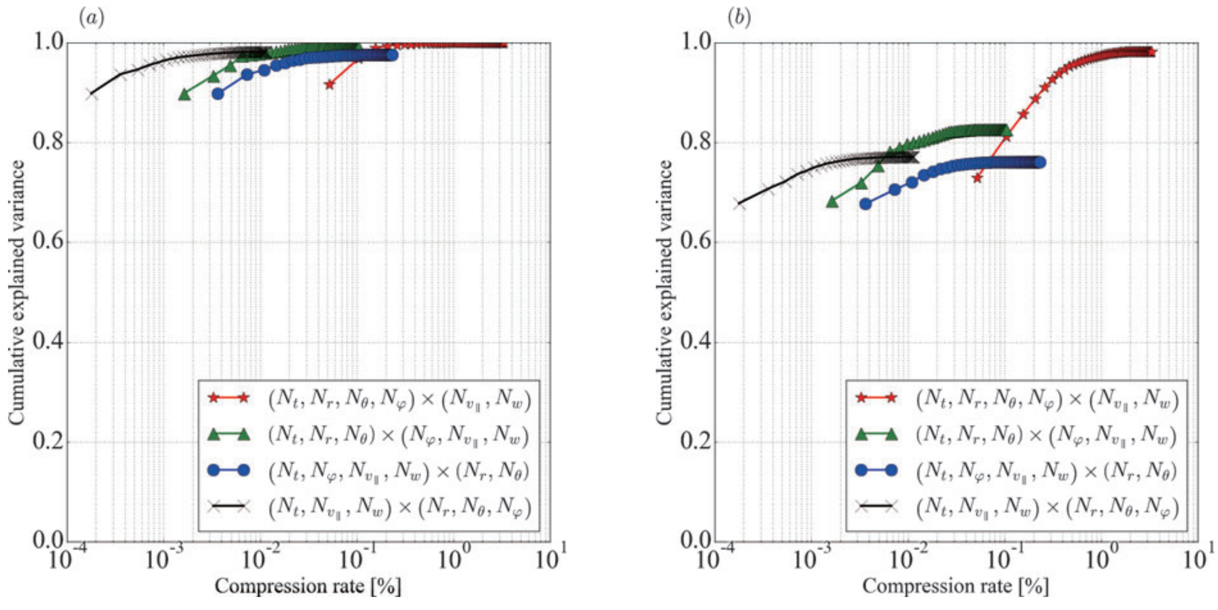

図 5　異なる行列形状に対する (a) 電子分布関数と (b) イオン分布関数の累積寄与率の圧縮率依存性．

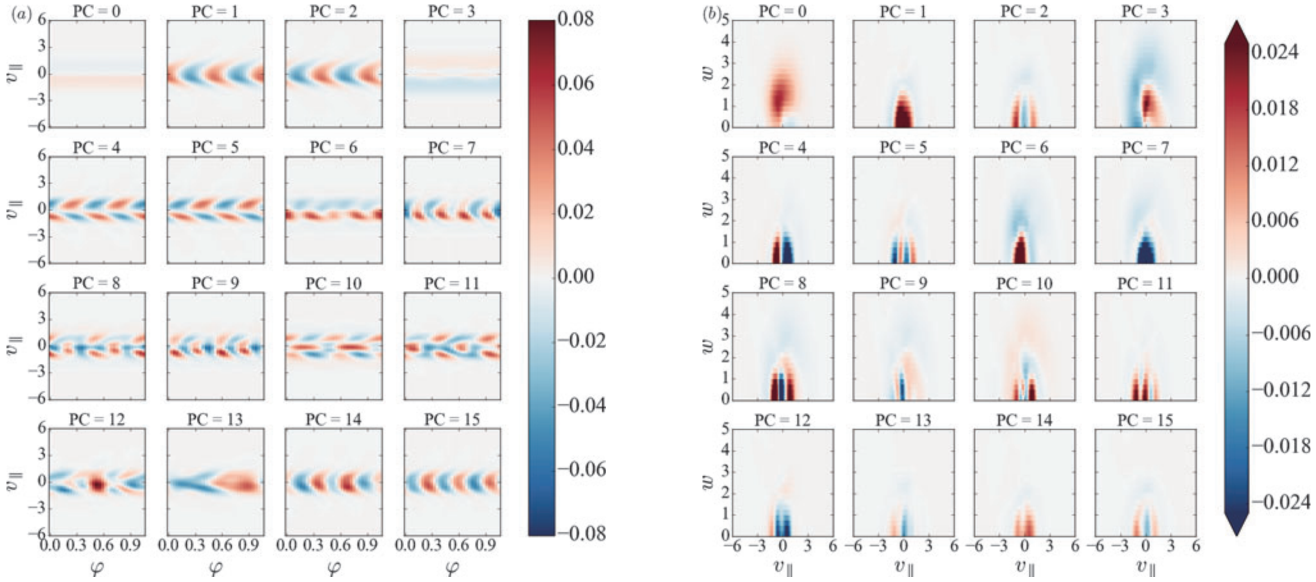

図6　第16主成分までの位相空間基底 $V_k^T(\varphi, v_\parallel, w)$ の(a) w = 0.12 断面と(b) φ = 0 断面[7].

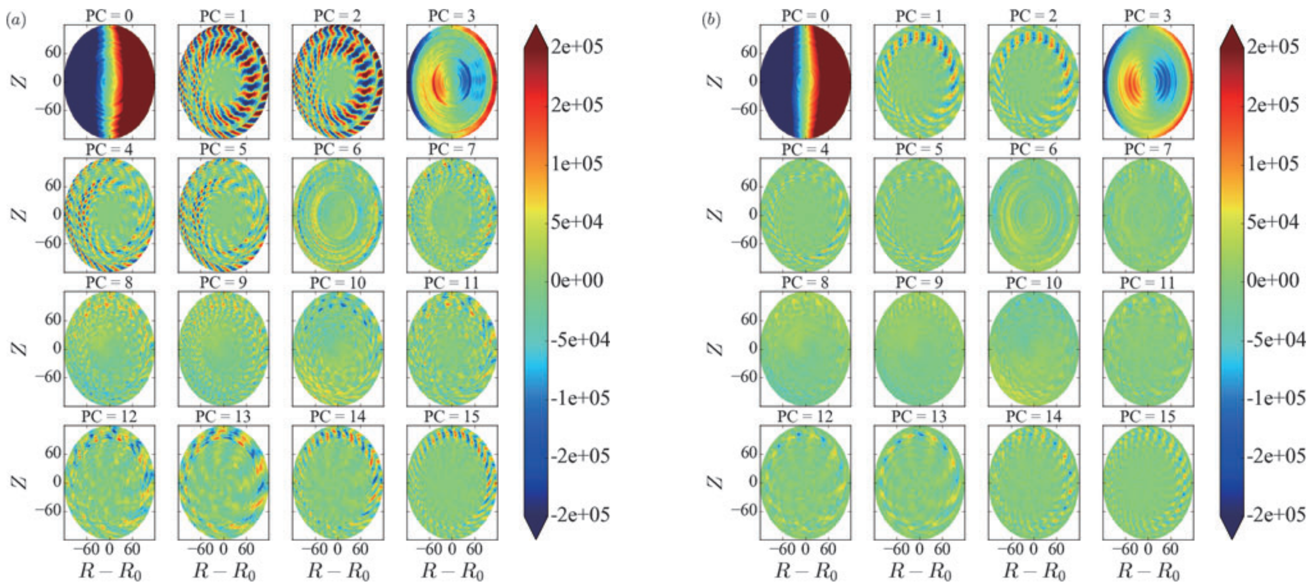

図7　第16主成分までの(a)雪崩フェイズおよび(b)静的フェイズの空間係数 $u_k'(r, \theta)$ (ポロイダル断面)[7].

$$\hat{Q}_{00} = \int \mathrm{d}v_\parallel \mathrm{d}\mu J_v \left(\mathbf{v}_{E\times B} \cdot \nabla r\right) \left(\frac{m_i v_\parallel^2}{2} + \mu B\right) f_{00}$$

$$\hat{Q}_{\mathrm{mean}} = \int \mathrm{d}v_\parallel \mathrm{d}\mu J_v \left(\mathbf{v}_{E\times B} \cdot \nabla r\right) \left(\frac{m_i v_\parallel^2}{2} + \mu B\right) \delta \bar{f}$$

$$\hat{Q}_k = \int \mathrm{d}v_\parallel \mathrm{d}\mu J_v \left(\mathbf{v}_{E\times B} \cdot \nabla r\right) \left(\frac{m_i v_\parallel^2}{2} + \mu B\right) u_k' \mathrm{V}_k^{\mathrm{T}},$$

である．**図8**は，式(5)の右辺最終項に現れる各主成分のエネルギーフラックスへの寄与である．図から熱輸送を担っているのは主成分1と2であることがわかる．**図6**と**7**からこれらは $n = 12$ のバルーニングモードと対応し，その速度空間構造は雪崩フェイズにおいて $\theta \sim 0$ の悪い曲率側で形成される速度空間構造と対応していることが明らかとなった．つまり，主成分分析によって雪崩的輸送を引き起こす空間，速度空間構造が物理的な知見を利用せず抽出できたと言える．

5.5　まとめ

本章では，特異値分解を利用したジャイロ運動論的シミュレーションの時系列データの解析手法について示した．このシミュレーションでは，突発的な輸送現象を扱うことができる．シミュレーションデータは，乱流の非線形性，データの高次元性，大規模性などの要素を有するため解析が困難となっており，従来は平均操作などを用いた上で解析が行われてきた．本章では，データ駆動科学的手法により，シミュレーションデータの乱雑さの定量化と高次元データの次元圧縮による可視化および解析を行った．これらはともに特異値分解を利用しており，複雑な現象からより重要な要素を抽出することを目的としている．

まず，プラズマ乱流ではコヒーレントな状態と様々な波が入り乱れている状態が繰り返されていることに着目し，その乱雑さを定量的に評価することを試みた．密度の時空間データを様々な窓に対して取得し，それを行列で表し

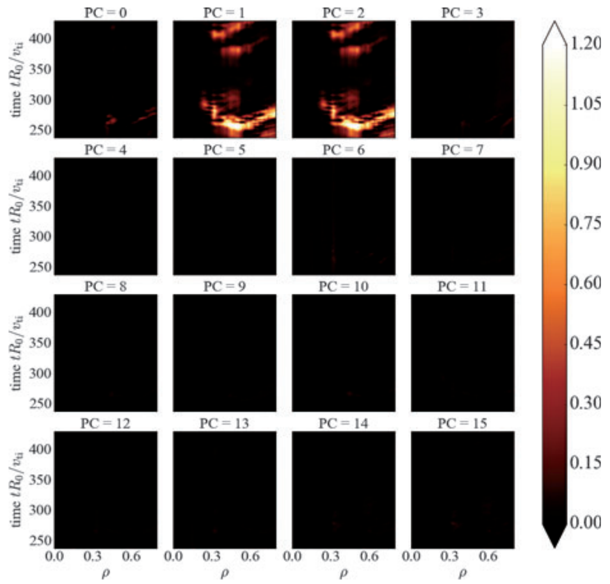

図8 各主成分のイオンエネルギーフラックスへの寄与[7].

た．この行列を特異値分解し，その特異値から擬エントロピーを定義した．この擬エントロピーは先ほどの時空間データを表現するのに必要な基底の数を求めることに対応し，単一の不安定モードだけが存在するときは小さい値が得られ，多数のモードがほぼランダムに分布するときは大きな値が得られる．この手法によりデータの乱雑さを定量化し，雪崩的輸送の前後での不安定モードの挙動を抽出することができたと言える．

次に，主成分分析による5次元時系列データの解析を行った．5次元時系列データを位相空間基底と空間係数へと分解することで，3桁に及ぶデータ圧縮を実現しつつ，83%の累積寄与率を保持できた．これは，データを3次元の位相空間基底と2次元の空間係数の時系列データとして表現したことに対応する．位相空間基底と係数を用いて，各主成分のエネルギーフラックスへの寄与を調べ，$n = 12$のバルーニングモードのみが雪崩的輸送を駆動していることを特定した．対応する位相空間基底を調べることで，これらの速度空間構造は悪い曲率側で形成される速度空間構造と対応していることが明らかとなった．主成分分析によって雪崩的輸送を引き起こす空間，速度空間構造が物理的な知見を利用せず抽出できたと言える．

参考文献

[1] X. Garbet, Y. Idomura, Nucl. Fusion **50**, 043002 (2010).
[2] P. Bak, C. Tang and K. Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987).
[3] W. Wang *et al.*, Nucl. Fusion **60**, 066010 (2020).
[4] H.L. Berk *et al.*, Phys. Plasmas **6**, 3102 (1999), https://doi.org/10.1063/1.873550.
[5] Y. Idomura *et al.*, Comput Phys. Commun. **179**, 391 (2008).
[6] Y. Idomura, J. Comput. Phys. **313**, 511 (2016).
[7] Y. Asahi *et al.*, Phys. Plasmas **28**, 012304 (2021).
[8] S. Futatani *et al.*, Phys. Plasmas **16**, 042506 (2009), https://doi.org/10.1063/1.3095865.
[9] T.-H. Watanabe *et al.*, J. Comput. Phys.: Conference Series **510**, 012045 (2014).
[10] T. Tatsuno *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 015003 (2009).
[11] D.R. Hatch *et al.*, J. Comput. Phys. 231 4234 (2012).
[12] T.D. deWitt, Plasma Phys. Control. Fusion **37**, 117 (1995).
[13] J. Levesque *et al.*, Nucl. Fusion **53**, 073037 (2013).
[14] B.S. Victor *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **57**, 045010 (2015).

J. Plasma Fusion Res. Vol.97, No.2 (2021) 93‐94

小特集　磁場閉じ込め核融合プラズマにおけるデータ駆動アプローチによる物理モデリングの進展

6．まとめ

6. Summary

今寺賢志
IMADERA Kenji
京都大学大学院エネルギー科学研究科

（原稿受付：2020年９月30日）

本小特集では，磁場閉じ込め核融合プラズマの分野で，シミュレーション，統計解析，データ駆動科学の融合によって行われた４編の論文を紹介したが，大別すると統合シミュレーションで用いる輸送モデリングの高速化と高精度化を行った前半（２章，３章）と，主成分分析によって説明可能な物理モデリングの検討を行った後半（４章，５章）に分かれる．更に前半を分類すると，２章ではジャイロ運動論／流体シミュレーションから得られたデータをニューラルネットワークで学習し，計算コストが高い元のモデルに取って代わる「新たな輸送モデルを開発」したのに対して，３章では実験が再現されるように，統合シミュレーションを行っていく中で「既存の輸送モデルを最適化」していったという点でアプローチが異なっているが，共に実験を高精度に再現している点は興味深い．また今回得られた輸送モデルが高精度であることは，経験則から求めた単純なモデルで輸送現象を表現することが難しいことを示唆しており，多次元パラメータ空間で非滑らかな関数を表現可能なデータ駆動科学の特徴が発揮された結果であるとも言える．そのようなモデリングの柔軟性は，逆説的には人間が現象を理解する上で障壁となる可能性があるが，高い再現性は背景にある物理を推論する上での保障となるという意味で，輸送モデリングが一歩進展したことは間違いないであろう．

一方，後半では，４章で動的モード分解によって抽出されたケルビンヘルムホルツ揺動とスパイラル構造の動的因果関係を同定しており，５章で雪崩的突発輸送を引き起こす主モードを実空間・速度空間双方から同定している．いずれも従来の統計解析では困難であった物理現象を明らかにしており，説明性の観点から物理モデリングの進展に大きく資するものである．また４章では実験データから乱流の時空間発展を予測する試みが，５章では位相空間構造データの圧縮技術開発がそれぞれ紹介されており，適切な次元削減を行うことで，少数モードで主要な物理現象が表現できる主成分分析が持つ様々な可能性を提示している．

今後の展望としては，大型計算機の発展と連動した更なる融合研究の進展が挙げられるであろう．理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」は，2020年６月期と11月期にTOP500で世界第１位を獲得したが，人工知能（AI）で主に用いられる単精度や半精度演算処理に関する性能ベンチマークHPL-AIにおいても世界第１位を獲得している[1]．また研究テーマとしても，様々なシミュレーション研究に加え，シミュレーションとAIの融合研究が重要テーマとして位置付けられている[2]．海外においても，例えばアメリカのオークリッジ国立研究所の「SUMMIT」（TOP500で世界第２位）は，アーキテクチャ的にもAIに特化したシステムであり，その点を重要視していることは間違いないであろう[3]．これらのハードウェアを有効利用することによって，今後も深層学習等の計算の高速化と高精度化が相補的に進展し，新たな物理モデリングの開発に応用されることが期待される．

多階層複雑系であるプラズマを研究する際，扱う物理現象やその時空間スケールに応じてある特定の要素に還元して問題の解明に取り組む方法が王道であるが，近年ではその要素を全体として統合した試みが多く行われている[4,5]．一方で，それが進むにつれて，現象の非線形性，非局所性，多階層性，複合性は増していき，より柔軟なモデリングが求められるであろう．そのような問題に取り組むためにも，シミュレーション（実験），統計解析，データ駆動科学の相互補完が重要であり，演繹（deduction）と帰納（induction）を併用する必要性は高まっていくと考えられる．現在，データ駆動科学と核融合・プラズマ科学の融合研究を促進させる機会創出の試みも進んでおり[6]，これからの計算機性能の向上と並行する形で，このような融合研究は進展するであろう．ただし，論理的推論のもう１つの方法である仮説形成（abductive reasoning）を含め，プラズマ科学の知識（ドメイン知識）が研究の根幹であることは明白であり，プラズマ科学者が主となってこのような研究が進展することを期待したい．

Graduated School of Energy Science, Kyoto University, Gokasho, Uji, KYOTO, 611-0011, Japan

author's e-mail: imadera@energy.kyoto-u.ac.jp

参考文献

［1］https://www.top500.org/

［2］https://www.r-ccs.riken.jp/jp/

［3］https://www.olcf.ornl.gov/summit/

［4］岸本泰明 他：プラズマ・核融合学会誌 **79**, 460 (2003).

［5］プラズマ・核融合学会　編：プラズマシミュレーション―多階層複雑現象の解明へ―（京都大学学術出版会，2018）.

［6］統計数理研究所　共同研究集会「諸科学における大規模データと統計数理モデリング」(2020).

小特集執筆者紹介

今寺賢志

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 プラズマ・核融合基礎学分野 准教授（エネルギー博士）．専門は大域的ジャイロ運動論シミュレーション研究ですが，最近はその「大域性」をデータ駆動科学で解析できないか模索しています．Zoomに映った自分の顔を見て，6歳の可愛い息子に似ていると思いAIで診断したら，ほぼ他人でした．AIのことが少し嫌いになりました．

成田絵美

量子科学技術研究開発機構 那珂核融合研究所 先進プラズマ研究部 研究員．2015年大阪大学大学院・博士（工学）．トカマクプラズマにおける乱流輸送を対象とした実験解析やモデル開発，統合コードの開発に従事している．根っからのインドア派のため，コロナ禍になって以来，後ろめたさもなく，休日は堂々と家に引きこもれています．

本多　充

量子科学技術研究開発機構 那珂核融合研究所 先進プラズマ研究部 上席研究員．トカマク中の輸送現象や輸送シミュレーションを研究対象としていたような気もしますが，機械学習や最適化問題にも手を出すなど，自分が何をしているのか自分でもよく把握していません．ご多分に漏れず，子どもたち（男3人）が鬼滅の刃にどっぷりで，日々日輪刀で斬られています．人を斬るのは隊律違反ではないかと指摘しても一向に止まないところを見ると，私は鬼なのかもしれません．

森下侑哉

京都大学大学院工学研究科原子核工学専攻，博士課程1年．統合輸送シミュレーションに基づくデータ同化システムASTIの研究・開発を行っています．ASTIの実用化を目指して，日夜PCに向かっています．理論が理解できないときやプログラムが言うことを聞かないとき，結果が思い通りにならないときは，鴨川で現実逃避をしています．

村上定義

京都大学大学院工学研究科 教授，理学博士（広島大学）．非軸対称トカマクを含む広い3次元系トーラスにおける加熱や新古典輸送など運動論的物理現象について研究を行っている．また最近は，核融合プラズマの実時間制御を目指して，データ同化を用いた統合輸送シミュレーションコードの開発なども進めている．春頃のコロナ騒ぎでオンライン授業の開始や何やらと多忙な日々が続いた一方で，運動不足による体重増．これは何とかせねばと最新計測機器を導入し，倍返しに成功，これもデータ駆動？

横山雅之

自然科学研究機構 核融合科学研究所 ヘリカル研究部 核融合理論シミュレーション研究系教授．工学博士（京都大学大学院原子核工学専攻）LHD実験解析型統合輸送解析スイートTASK3D-aの運用で蓄積した熱輸送データベースを用いて，統計手法やデータ駆動手法との連携を実践，模索しています．さらに，プラズマ・核融合をはじめとする諸科学における大規模データと統計数理分野との連携機会の創出に楽しく取り組んでいます．お声がけさせていただいた際には，楽しく巻き込まれてください！

上野玄太

情報・システム研究機構統計数理研究所モデリング研究系教授，同機構データサイエンス共同利用基盤施設教授．京都大学博士（理学，地球惑星科学専攻）．学生のころはプラズマ不安定性の研究をしていましたが，修了後は統計科学，特にデータ同化の方法の研究に移りました．速度分布関数の代わりに状態ベクトルの確率分布が現れます．MHDの代わりにカルマンフィルタ，PICに代わりに粒子フィルタ，…….手計算と近似計算とスパコンで戦っています．

佐々木　真

九州大学応用力学研究所助教．2009年東京大学大学院理学系研究科・博士（理学）．日本電気株式会社中央研究所を経て2010年1月より現職．プラズマ乱流の非線形過程に関する理論・シミュレーション研究に従事．最近はデータ駆動科学的手法を用いた研究を通じて，プラズマ研究が幅広い非平衡システムの時空間ダイナミクスの研究にも有益だと認識してきた．

河原吉伸

2008年3月東京大学大学院工学系研究科博士課程修了．博士（工学）．2019年4月より九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 教授．また，2016年9月より理化学研究所革新知能統合研究センターにおいてチームリーダーを兼任．令和2年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞などを受賞．統計的機械学習の基礎・応用に関する研究や，大学・大学院における教育に従事．

草場　彰

2019年九州大学大学院工学府航空宇宙工学専攻博士後期課程修了．博士（工学）．現在，九州大学応用力学研究所助教．専門は半導体結晶成長の理論解析．最近は材料プロセス設計への機械学習応用を研究しております．また，異分野連携としてプラズマ乱流のデータ解析を行っておりますので，どうぞよろしくお願いいたします．

朝比祐一

日本原子力研究開発機構　システム計算科学センター　高度計算機技術開発室　研究員．2015年東京工業大学博士後期課程修了．博士（工学）．専門は，プラズマ乱流シミュレーションと High performance computing（HPC）．最近は主にHPC関連の仕事（https://github.com/yasahi-hpc など）をしています．

藤井恵介

京都大学工学研究科 助教．2012年 同研究科大学院・博士（工学）．確率的な描像で様々な現象を理解・説明することをめざして，プラズマ物理・原子物理・量子物理の間をさまよっています．統計的な機械学習も好きですが，（残念ながら）まだうまく使いこなせていない気がします．最近は色々なところに出てくるべき則まわりの物理を好んで調べています．