物理情報付きニューラルネットワークによる偏微分方程式の数値解法

前山伸也, 堀久美子

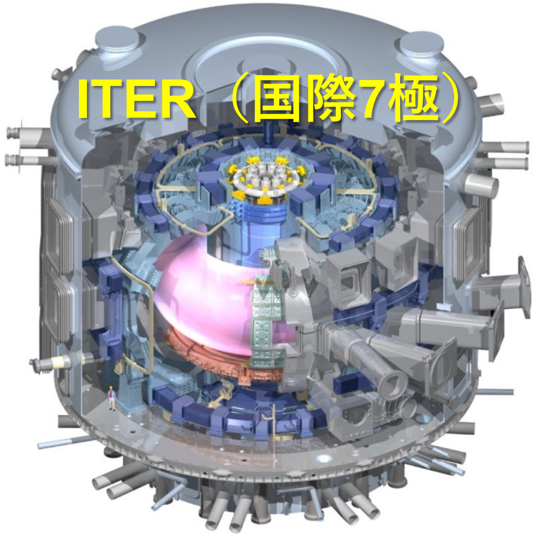
自然科学研究機構 核融合科学研究所
メタ階層ダイナミクスユニット/複合大域シミュレーションユニット

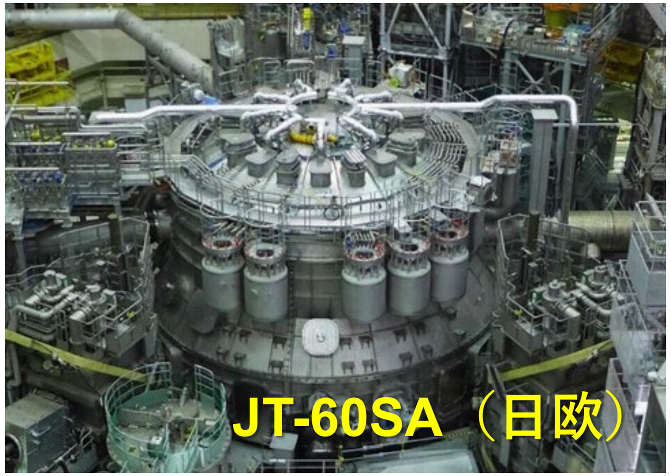
2025年度夏の体験入学, 2025年8月25日 - 29日

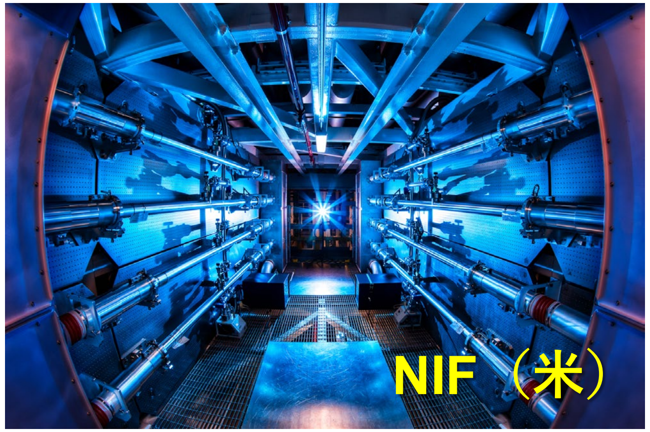
Outline

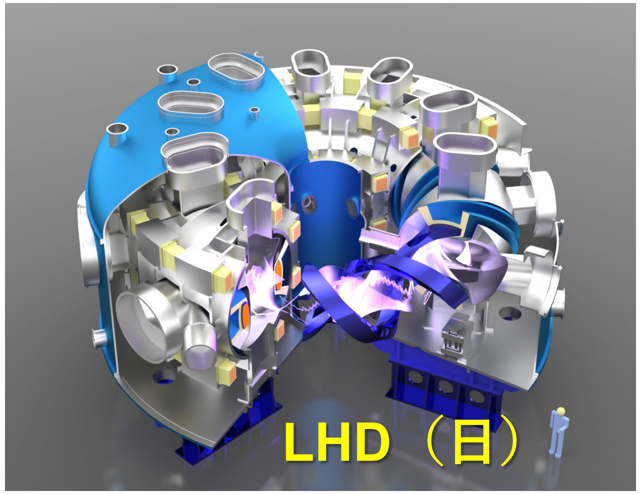
- 核融合・プラズマ物理研究と偏微分方程式
- 物理情報付きニューラルネットワーク(PINN)
- 実習用Pythonコードについて
- 実習の進め方

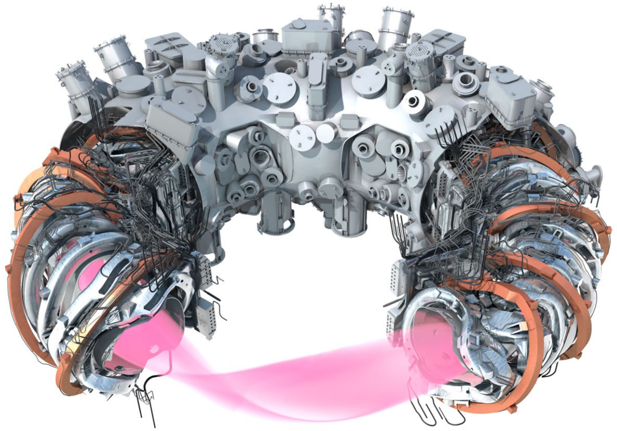
核融合とプラズマ物理





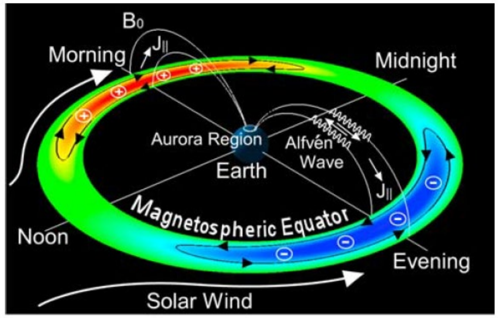






W7-X（独）

地球磁気圏



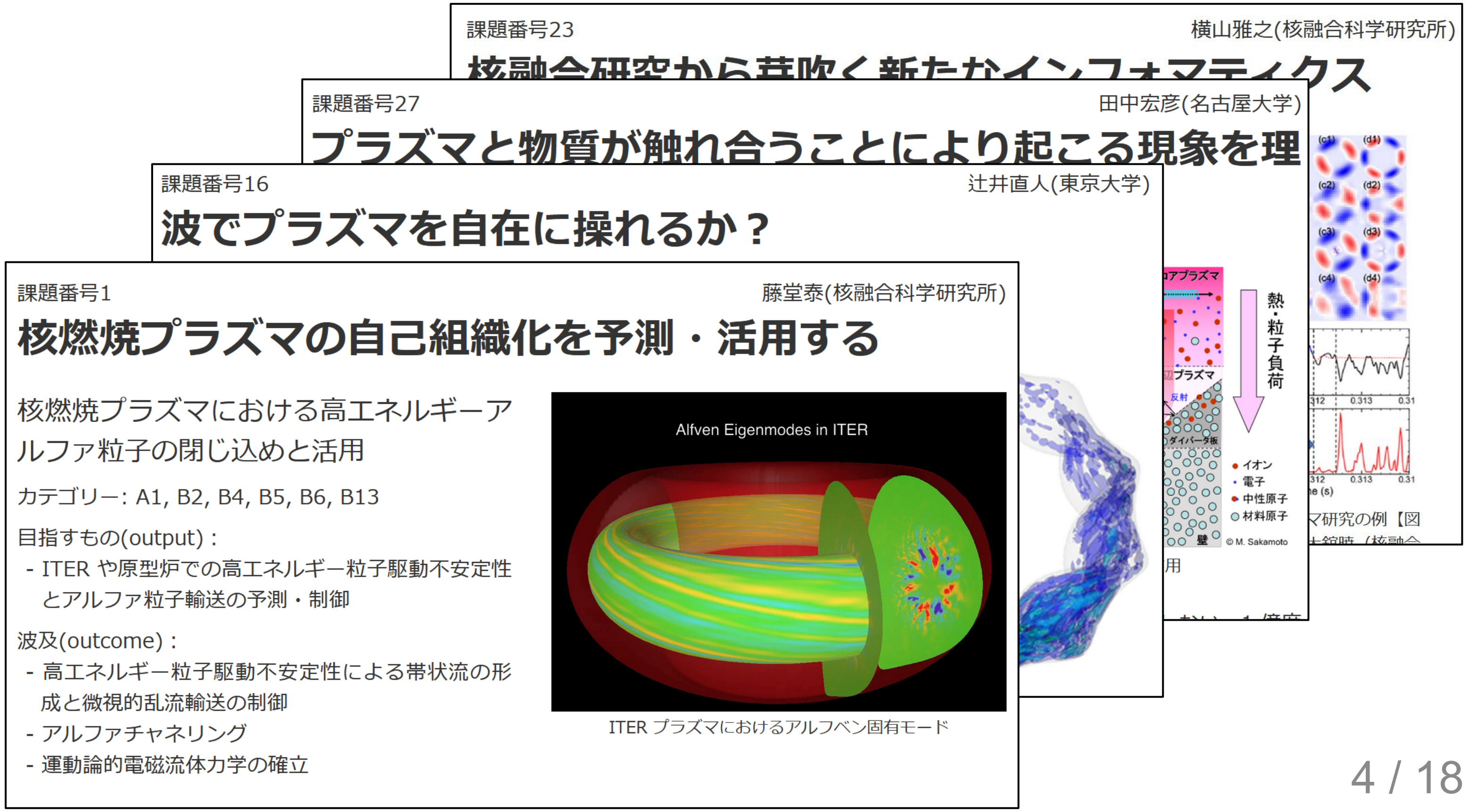
ブラックホール
降着円盤

惑星大気

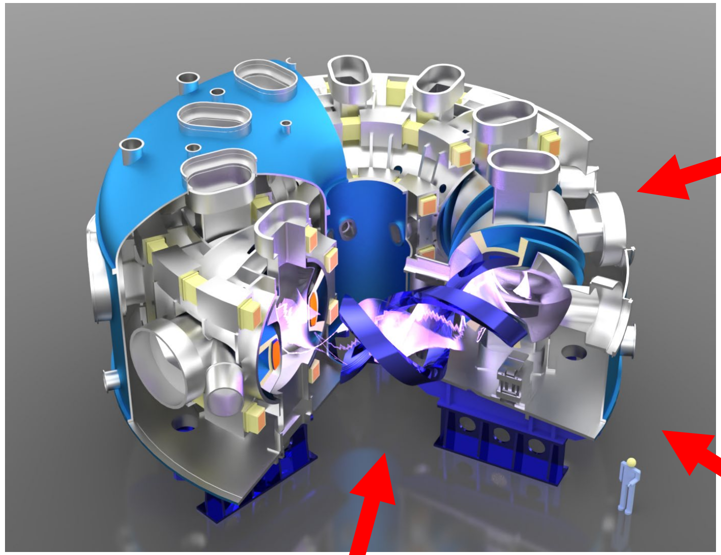
- ✓ 国際協力・競争の下で核融合炉の開発が進められている
- ✓ 学問としてのプラズマ物理の学際的な広がり

核融合プラズマ研究に関する解説記事

- 総説 プラズマ・核融合サイエンスチャート
  https://www.jspf.or.jp/Journal/PDF_JSPF/jspf2024_01/10001PRall.pdf
- 学術課題集　核融合プラズマのサイエンスとその拡がり
  https://www.nifs.ac.jp/research/Fusion2030/FPWG/fpwg_SciChallenges.html

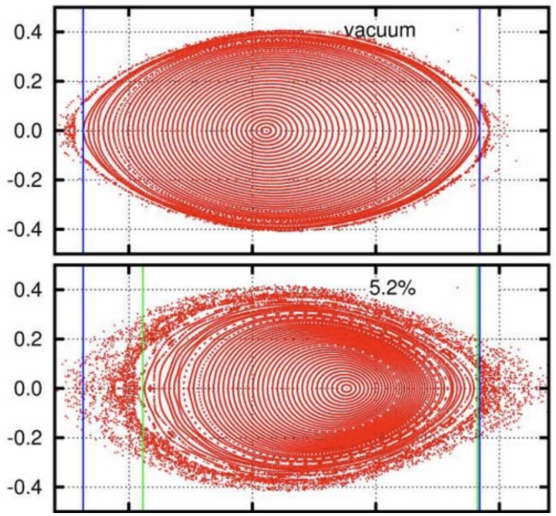


プラズマ物理を記述する様々な偏微分方程式



<u>MHD平衡方程式</u>

$$\nabla P = \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{B}, \qquad \nabla\times\boldsymbol{B} = \mu_0\boldsymbol{J}$$



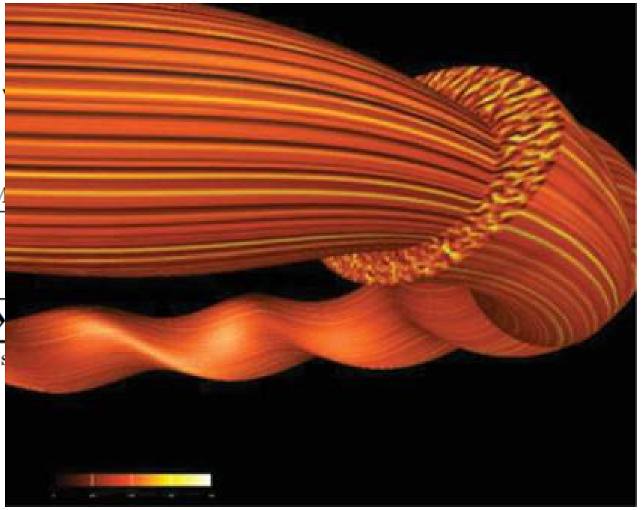
<u>ジャイロ運動論方程式</u>

$$\frac{\partial \tilde f_s}{\partial t} + \left(v_\parallel \frac{\boldsymbol{B}+\tilde{\boldsymbol{B}}_\perp}{B} + \tilde{\boldsymbol{v}}_E + \boldsymbol{v}_{sG} + \boldsymbol{v}_{sC}\right)\cdot$$

$$-\frac{\mu\nabla_\parallel B}{m_s}\frac{\partial}{\partial v_\parallel}\left(\tilde f_s + \frac{e_s F_{sM}}{T_s} J_{0s}\tilde\phi\right) + \frac{e_s F_{sM}}{T_s}$$

$$\left[\nabla_\perp^2 - \frac{1}{\varepsilon_0}\sum_s \frac{e_s^2 n_s}{T_s}(1-\Gamma_{0s})\right]\tilde\phi = -\frac{1}{\varepsilon_0}\sum$$

$$\nabla_\perp^2 \tilde A_\parallel = -\mu_0 \sum_s e_s \int dv^3 J_{0s} v_\parallel \tilde f_s,$$



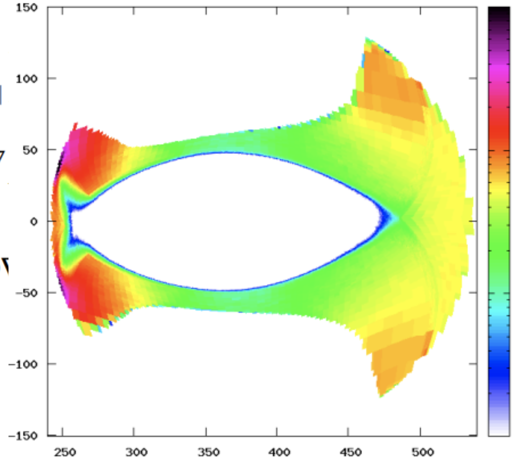
<u>流体・中性粒子輸送方程式</u>

$$\nabla_\parallel\cdot(n\mathbf{v}_\parallel)+\nabla_\perp\cdot(-D\nabla_\perp n)=S_p$$

$$\nabla_\parallel\cdot(m_i n\mathbf{v}_\parallel\mathbf{v}_\parallel - \eta_\parallel\nabla_\parallel\mathbf{v}_\parallel)+\nabla_\perp\cdot(-m_i\mathbf{v}_\parallel D\nabla_\perp n - \eta_\perp\nabla_\perp\mathbf{v}_\parallel$$

$$\nabla_\parallel\cdot\left(-\kappa_i\nabla_\parallel T_i + \frac{5}{2}nT_i\mathbf{v}_\parallel\right)+\nabla_\perp\cdot\left(-\chi_i n\nabla_\perp T_i - \frac{5}{2}T_i D\nabla\right.$$

$$\nabla_\parallel\cdot\left(-\kappa_e\nabla_\parallel T_e + \frac{5}{2}nT_e\mathbf{v}_\parallel\right)+\nabla_\perp\cdot\left(-\chi_e n\nabla_\perp T_e - \frac{5}{2}T_e D\nabla\right.$$



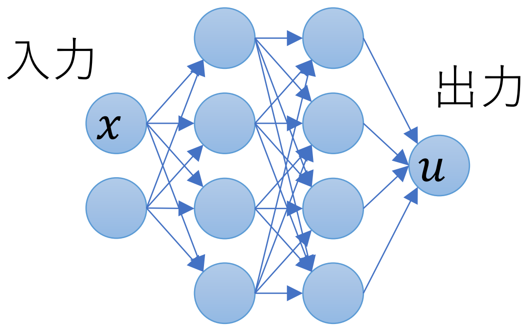
Outline

- 核融合・プラズマ物理研究と偏微分方程式
- **物理情報付きニューラルネットワーク(PINN)**
- 実習用Pythonコードについて
- 実習の進め方

物理情報付きニューラルネットワーク

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)
・・・①**ニューラルネットワークを用いて連続関数を表現**し、
②データと物理法則を満たすように学習を行うこと。

➢ ニューラルネットワーク(NN)



多層パーセプトロンMLPを例に

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{\phi}(W_i \cdot \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b}_i)$$

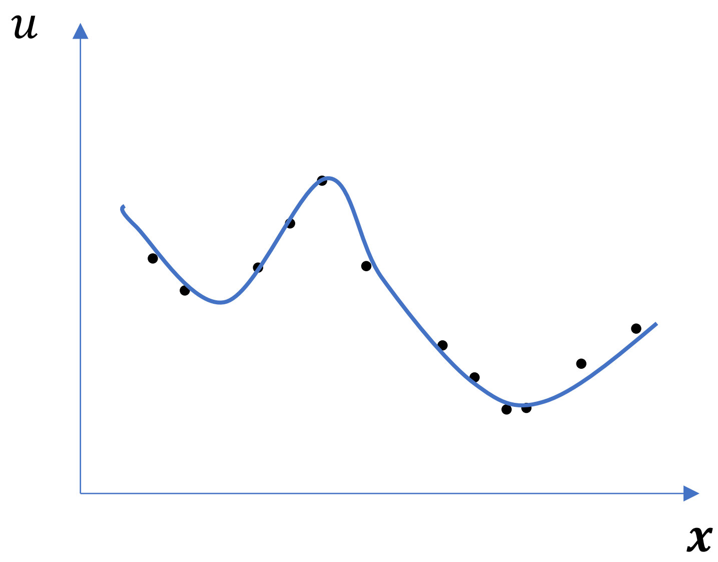
非線形変換
(活性化関数)

線形変換
(重み+バイアス)

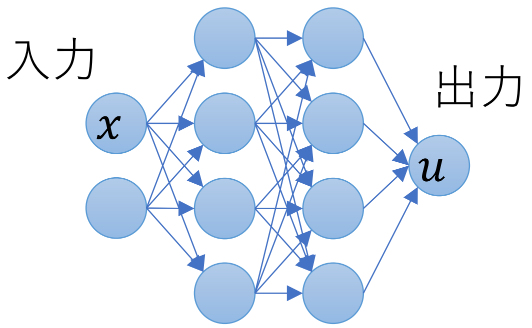
- NNは、入力層・(多段の)中間層・出力層を線形・非線形変換により結合した数理モデル
- 普遍近似定理(universal approximation theorem)・・・ある条件下で、連続関数をニューラルネットワークによって所望の精度で近似できる

物理情報付きニューラルネットワーク

Physics-Informed Neural Networks (PINNs)
・・・①ニューラルネットワークを用いて連続関数を表現し、
②**データと物理法則を満たすように学習を行う**こと。



➢ ニューラルネットワークの学習



$$u_{\mathrm{model}}(x) = NN(\boldsymbol{x} \mid \underline{W, \boldsymbol{b}})$$

パラメータ(Wや$\boldsymbol{b}$)を調整
することで関数形が変わる

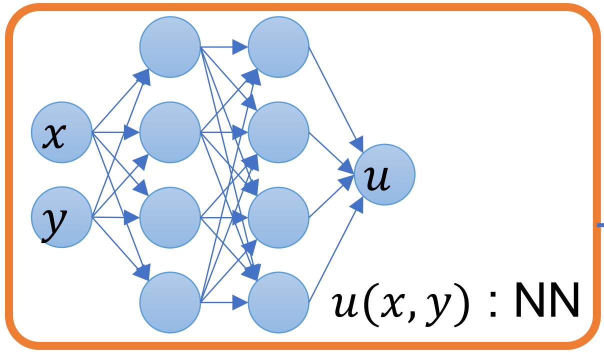
- データに基づく学習・・・表現したい連続関数の観測データが複数$(\boldsymbol{x}_0, u_0)$, $(\boldsymbol{x}_1, u_1), \cdots$ あって、それを満たすようにパラメータを調整する

- 物理法則（偏微分方程式）に基づく学習・・・モデル$u_{\mathrm{model}}(x)$が満たすべき偏微分方程式$\mathcal{N}(u) = 0$の解となるようにパラメータを調整する

物理情報付きニューラルネットワーク

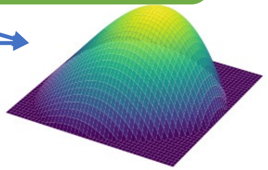
Physics-Informed Neural Networks (PINNs)

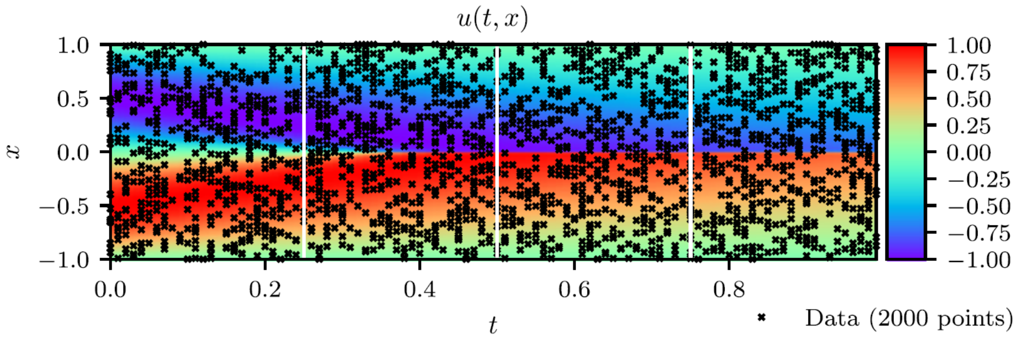
・・・①ニューラルネットワークを用いて連続関数を表現し、
②データと物理法則を満たすように学習を行うこと。

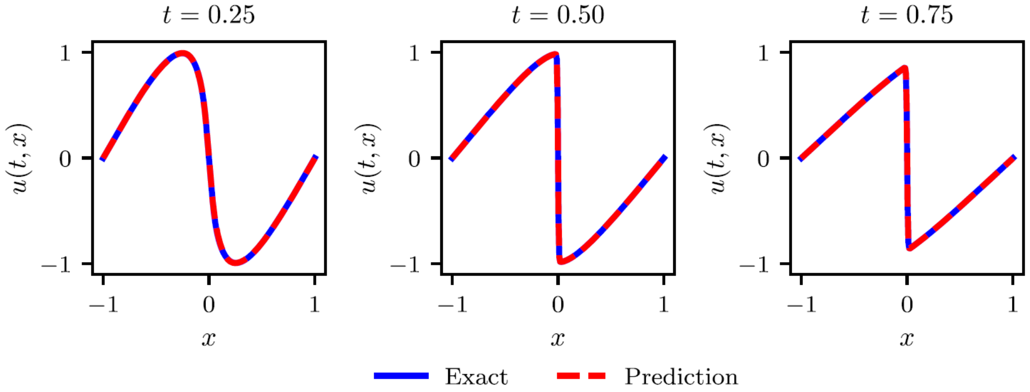


$\mathcal{N}(u) = 0$: PDE
$u_0, u_1, \cdots$: Data

$L_{\mathrm{PDE}} + L_{\mathrm{Data}}$







ある境界条件（＝データ）の下で、偏微分方程式（＝物理法則）の解をPINNで近似的に求めることができる。

$$u_t + \lambda_1 u u_x - \lambda_2 u_{xx} = 0.$$

$$f := u_t + \lambda_1 u u_x - \lambda_2 u_{xx},$$

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

$$MSE_u = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} |u(t_u^i, x_u^i) - u^i|^2,$$

$$MSE_f = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} |f(t_u^i, x_u^i)|^2.$$

[M. Raissi, et al., J. Comput. Phys. 378, 686 (2019)]

Outline

- 核融合・プラズマ物理研究と偏微分方程式
- 物理情報付きニューラルネットワーク(PINN)
- **実習用Pythonコードについて**
- 実習の進め方

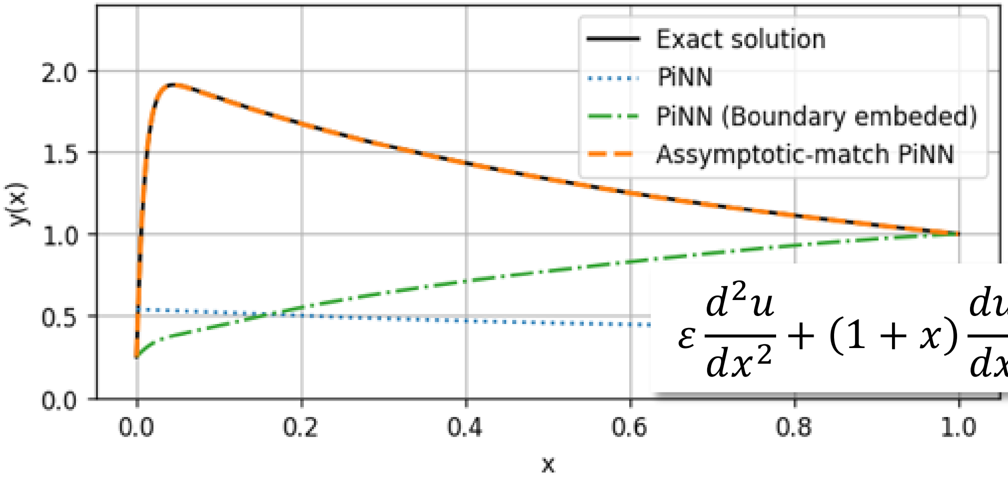
Google ColaboratoryでのPython実行

https://github.com/smaeyama/lec_Summer_Student_Program/tree/main/ssp2025

上記GitHub上にソースコードが公開されています。

Open in Colab ボタンのリンクから、クラウド環境であるGoogle Colaboratory上で実行できます。

PINNによる境界層問題の数値解の例



$$\varepsilon \frac{d^2u}{dx^2} + (1+x)\frac{du}{dx} + u = 0$$

PythonによるPINNのプログラミングとGoogle Colaboratoryによるクラウド実行

Pythonプログラムによる PINNの計算①

https://github.com/smaeyama/lec_Summer_Student_Program/tree/main/ssp2025

`01_pinn` :
物理情報付きニューラルネットワーク（Physics-Informed Neural Networks; PINNs）による楕円型偏微分方程式の数値解法
Numerical solution of an elliptic partial differential equation by using PINN
Open in Colab

PINN: Physics-Informed Neural Network

Solve

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = f(x)$$

$f(x)$: Given function
$u(0) = u_0$, $u(1) = u_1$: Given boundary condition

PINNの戦略

- ニューラルネットワークを用いて関数 $u(x)$ を表す。有限個の数値（ニューラルネットワークのハイパーパラメータ θ ）を用いて表せる連続関数（連続関数全体の一部分）で $u(x)$ を近似的に表現した。
- 様々な位置 (collocation points x_{col}) で $d^2u(x)/dx^2$ を評価し、与えられた $f(x)$ と一致するか確認。ずれの大きさを $\mathrm{L}(\theta)$ として定義。
- このずれ $\mathrm{L}(\theta)$ が最小（理想的には完全に0。とはいえ、用意したニューラルネットワークで表現できる関数は限られているので、その限られた関数表現の中でなるべく方程式を満たすよう努力）となる θ が得られれば、その θ で表されるニューラルネットワークが解 $u(x)$ の良い近似。

Pythonプログラムによる PINNの計算②

https://github.com/smaeyama/lec_Summer_Student_Program/tree/main/ssp2025

`02_pinn_boundary_layer` :
漸近接続理論を組み込んだPINNによる境界層問題の数値解法
Numerical solution of a boundary layer problem by using assymptically-matched PINN
Open in Colab

PINN: Physics-Informed Neural Network

Solve

$$\epsilon \frac{d^2u(x)}{dx^2} + (1+x)\frac{du(x)}{dx} + u(x) = 0$$

$f(x)$: Given function
$u(0) = u(1) = 1$: Given boundary condition
$\epsilon = 0.01$: Given small constant parameter

PINNにおけるニューラルネットワーク構造の工夫

- ニューラルネットワークは、適切な条件の下で任意の連続関数を近似可能な表現力を持つ（普遍近似定理）。しかしあくまでこれは近似可能性を保証しているだけで、最適なニューラルネットワークが実現できるか、学習が効率的に進むかは別問題。
- このノートブックでは、解に異なる長さスケールが現れる境界層問題を例に、ニューラルネットワーク構造の工夫により、学習効率が劇的に変わり得ることを示す。

Pythonプログラムによる PINNの計算③

https://github.com/smaeyama/lec_Summer_Student_Program/tree/main/ssp2025

`03_pino` :
物理情報付き作用素学習 (Physics-informed Neural Operators; PINOs) による楕円型偏微分方程式のの汎用数値解法
Numerical solution of a boundary layer problem by using PINO
Open in Colab

Solve

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = f(x)$$

$f(x)$: Given function
$u(0) = u_0$, $u(1) = u_1$: Given boundary condition

PINOの戦略

- PINNの場合は、与えられた$f(x)$, u_0, u_1などの条件に従うように、その都度関数 $u(x)$ を表すニューラルネットワークのハイパーパラメータ θ を学習（方程式を満たすように調整）していた。→ 条件が変わると学習し直し。
- 通常のニューラルネットワークは、入力として与えられた数値の組（例えば $f(x) = \sin(x)$, $u_0 = 0$, $u_1 = 1$）に対しする出力の数値の組 $u(x) = \ldots$ を与える、いわゆる関数：数 → 数を学習するのに対し、作用素学習の考え方では、具体的な数値ではなく、入力関数 f と出力関数 u の間に関数同士の変換関係、いわゆる作用素：関数 → 関数の関係があるとして、その作用素を表現するようなネットワークをニューラルオペレータという構造で表す（表そうと頑張っている）
- PINOは作用素学習を用いたPINNの拡張として提案されている。
- このノートブックでは、(i) PINNの中で用いていたニューラルネットワークをDeepONetと呼ばれるニューラルオペレータ構造で代替し、(ii) 特定のfの値に依らない作用素構造を抽出したいので、PINOでは、複数の問題条件設定[$f_0(x)$, $f_1(x)$, $f_2(x)$, ...]を同時に満たすようにDeepONetのハイパーパラメータを学習する、という2つの修正でPINOを実装している。（※PINOの原著論文ではさらに個別問題推定の際のファインチューニングも議論されているがここでは割愛。）
- こうして学習した作用素：$f \to u$によって、未知の問題条件 f_{unknown} に対しても、解 $u(x)$ を精度よく推定できると期待される。

Outline

- 核融合・プラズマ物理研究と偏微分方程式
- 物理情報付きニューラルネットワーク(PINN)
- 実習用Pythonコードについて
- **実習の進め方**

実習の進め方１

- まずはPythonコードを実行し、PINNによる偏微分方程式の数値解法を体験してみる。

以降は皆さんの知識や興味によって相談。

(i) もう少しPINNに慣れる（そもそもPythonやプログラミング自身が不慣れ、まだPINNによる解法があまりイメージできていない場合）
  - PINNの問題設定やアプローチを説明できるように勉強。
  - 式の形を少し変えてPINNで解いてみたり、NNのモデルを変えて比較してみたり。
  - 境界条件埋め込みを実装してみる。

できれば次のいずれかの発展的課題まで取り組みたい。

実習の進め方 2

(ii) 発展の方向性1: 漸近接続PINN（PINNで解きにくいマルチスケール性を含む偏微分方程式の例として、境界層問題を取り上げる）

- 境界層理論について勉強（前山が説明します）
- 境界層の急峻な変化を効率的に捉えるために漸近接続理論を援用した接合型NNによる漸近接続PINN
- 通常のPINNと比べて学習性能が高くなるか、接続位置や幅に対する敏感性はどうかなどを調べる。

(iii) 発展の方向性2: PINO (物理情報付きニューラルオペ―レータ; 作用素学習)

- PINNでは偏微分方程式の解そのものをNNで表したが、PINOでは偏微分方程式の入出力関数関係である解作用素を近似的にNNで表すことを試みる。PINOの勉強（論文を紹介しつつ、概略を説明します。）
- PINOの理解を深めるため、学習に用いる問題セットの数を増やすと、どの程度予測精度が改善するかスキャン。

実習の進め方３

- 金曜の発表会（発表10分質疑応答3分）に向けて、「何を調べて、どういうことが分かったか」というアウトプットを意識して実習に取り組みましょう。
- 実習は毎日17:15に終了です。正味2日半ですので短期集中！
- ヘリコンクラブに帰ってからの自習、発表資料作成等は自主性にお任せします。
- 操作などわからない点は、①教員に聞く、②Google検索（公式マニュアルは割と信頼できる）、③ChatGPTに尋ねる（ただし、鵜呑みにしすぎない）
- 実習に不要なインターネットアクセスはしないこと。
- 何かあったら、前山伸也（maeyama.shinya@nifs.ac.jp, 内線2234, 居室832）または堀久美子（hori.kumiko@nifs.ac.jp）まで連絡ください。
- それでは、がんばりましょう！