

Deep Learning による Boltzmann 方程式の新規直接数値解法

A Novel Direct Numerical Solution of the Boltzmann Equation by Deep Learning

室蘭工大 ^{○(PC)} 川口 悟, 高橋 一弘, 大鎌 広, 佐藤 孝紀

Muroran I.T. ^{○(PC)} S. Kawaguchi, K. Takahashi, H. Ohkama, and K. Satoh

E-mail: s2124049@mmm.muroran-it.ac.jp



1. はじめに

電子輸送係数や反応レート係数といった放電基礎パラメータは電子速度分布関数(EVDF)を用いて定義され、EVDFは Boltzmann 方程式を解くことで得られる。よって、様々な放電条件における EVDF を正確に計算することが求められており、Boltzmann 方程式に対する種々の数値解法が提案されてきた。

従来の Boltzmann 方程式の数値解法は、次の2つに大別される：(1)EVDF を球面調和関数や Legendre 多項式によって級数展開して解く方法^[1,2]、(2)級数展開に依らず、直接数値的に解く方法^[3]。本研究では、人工ニューラルネットワーク(ANN)の関数近似能力に着目し、ANNを用いた Boltzmann 方程式の新規直接数値解法を提案する。本手法は、上述の方法(2)に分類されるが、微分方程式の離散化と計算格子が不要という、これまで無い特長を有する。また、並列計算が容易であり、GPGPUによって正確な EVDF を数十分程度で計算できる。ここでは、流動平衡状態の電子スオームに関する Boltzmann 方程式を提案手法によって解析する方法を概説するとともに、Reid の Ramp model gas^[4]を用いて、提案手法のベンチマークテストを行った結果を報告する。

2. 計算理論

2.1 Boltzmann 方程式

直流かつ一様な電界 $E = (0, 0, -E)$ が印加された空間における流動平衡状態の EVDF $f(v_x, v_z, t)$ が $f(v_x, v_z, t) = f(v_x, v_z) \exp(R_i t)$ と表されると仮定すると、 $f(v_x, v_z)$ は次の Boltzmann 方程式を満たす。

$$\bar{R}_i f(v_x, v_z) + \frac{eE}{m} \frac{\partial f(v_x, v_z)}{\partial v_z} - \left[\frac{\partial f(v_x, v_z)}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = 0 \quad (1)$$

ただし、 e は電気素量、 E は電界、 m は電子質量、 \bar{R}_i は実効電離衝突周波数、左辺の第3項は気体分子と電子の衝突による単位時間あたりの $f(v_x, v_z)$ の変化量(衝突項)を表す。衝突項の具体的な表式については、文献5を参照されたい。ここで、ANNによる(1)式の数値解析を容易にするため、次のような関数変換を行う。

$$f(v_x, v_z) = \exp(-u(v_x, v_z))/C \quad (2)$$

ただし、 C は規格化定数である。(2)式を(1)式に代入すると、(3)式が得られる。

$$\bar{R}_i \exp(-u) - \frac{eE}{m} \exp(-u) \frac{\partial u}{\partial v_z} - \left[\frac{\partial \exp(-u)}{\partial t} \right]_{\text{coll}} = 0 \quad (3)$$

2.2 人工ニューラルネットワークの構築と学習

関数 $u(v_x, v_z)$ を入力層(2 ニューロン)、3 層の中間層(350 ニューロン/層)、出力層(1 ニューロン)で構成される順伝播型ニューラルネットワーク(FNN)で近似する。Fig.1 は FNN の概略図を示す。図中の○はニューロン、矢印はデータの流れを表す。入力層(第0層)に入力されたデータ (v_x, v_z) は、1 つ下の層(第1層)のすべてのニューロンにそのまま伝達される。データを受け取った第1層の i 番目のニューロンは、(4)式に示す演算を行い、演算結果 $y_1^{(1)}$ を下層(第2層)のすべてのニューロンに伝達する。このような演算と伝達を、出力層(第4層)のニューロンに到達するまで次々に行い、出力層のニューロンの演算結果 $y_1^{(4)}$ を FNN の出力値とする。

$$y_i^{(k)} = f(x_i^{(k)}), \quad x_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{N^{(k-1)}} y_j^{(k-1)} w_{ij}^{(k)} + b_i^{(k)} \quad (k=1-4) \quad (4)$$

$$y_1^{(0)} = v_x, \quad y_2^{(0)} = v_z$$

ここで、 $y_i^{(k)}$ は、第 k 層の i 番目のニューロンの出力値、 $N^{(k-1)}$ は第 $k-1$ 層のニューロンの総数、 $w_{ij}^{(k)}$ は重み係数、 $b_i^{(k)}$ はバイアスを表す。関数 $f(x)$ は活性化関数と呼ばれ、中間層において $f(x) = \tanh(x)$ 、出力層において $f(x) = x$ とする。損失関数を(5)式のように定義し、この関数値が最小と

なるように、RMSProp^[6] (learning rate: 5.0×10^{-6})を用いて FNN の学習、つまり $w_{ij}^{(k)}$ と $b_i^{(k)}$ の最適化を行う。

$$\text{loss} = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |F(v_{x,f}^i, v_{z,f}^i)| + \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |e^{-u(v_{x,b}^i, v_{z,b}^i)}| + \lambda \left(\sum_{i=1}^{N_b} |e^{-u(v_{x,f}^i, v_{z,f}^i)}| \right)^{-1} \quad (5)$$

$$(v_{x,f}^i, v_{z,f}^i) \in \Omega = \{(v_x, v_z) | v_x, v_z \in [-v_m, v_m]\}$$

$$(v_{x,b}^i, v_{z,b}^i) \in \partial\Omega$$

関数 F は(3)式の左辺を表し、 $(v_{x,f}^i, v_{z,f}^i)$ と $(v_{x,b}^i, v_{z,b}^i)$ をそれぞれ領域 Ω およびその境界 $\partial\Omega$ より一様乱数を用いてサンプリングする。(5)式の右辺第1項は関数 u が(3)式を満たすこと、右辺第2項は EVDF が十分遠方で0となること、右辺第3項は物理的に無意味な解($f=0$)とならないことをそれぞれ要請している。 λ は定数であり、 $\lambda = 10^{-8}$ とする。 $v_m = 4.0 \times 10^6$ m/s、 $N_f = 5000$ 、 $N_b = 400$ とし、関数 F 内に現れる偏導関数値については、リバースモード自動微分によって正確に計算する。

3. 計算結果および考察

Fig.2 は、学習後の FNN より得られた換算電界 12 Td における Ramp model gas 中の EVDF を示す。FNN を用いて、滑らかな EVDF を計算できることがわかる。この EVDF を Legendre 多項式で展開した際の展開係数 $f_k(v)$ ($k=0-5$) をエネルギー分布 $f_k(\epsilon)$ に変換した結果を Fig.3 に示す。Fig.3 には Monte Carlo simulation (MCS) による計算結果も併せて示している。FNN と MCS による計算値が一致しており、本手法の妥当性が確認できる。MCS によって、同程度の精度の電子エネルギー分布を得るには、通常、数時間程度かかる。提案手法による計算は、NVIDIA GeForce GTX 1060 6GB (単精度 4.375 TFLOPS) を利用した場合、約 20 分程度で完了した。今後、高速かつ正確に EVDF を計算できる本手法が普及することを期待する。

参考文献

- [1] R. D. White et al.: J. Phys. D: Appl. Phys. **42**, 194001 (2009).
- [2] S. Yachi et al.: J. Phys. D: Appl. Phys. **24**, 573 (1991).
- [3] K. Maeda and T. Makabe: Jpn. J. Appl. Phys. **33**, 4173 (1994).
- [4] I. D. Reid: Aust. J. Phys. **32**, 321 (1979).
- [5] T. Holstein: Phys. Rev. **70**, 367 (1946).
- [6] G. Hinton et al.: [http://www.cs.toronto.edu/~tijmen/csc321/slides/lecture_slides_lec6.pdf].

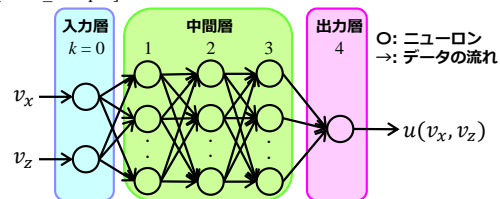


Fig. 1. 順伝播型ニューラルネットワーク(FNN)

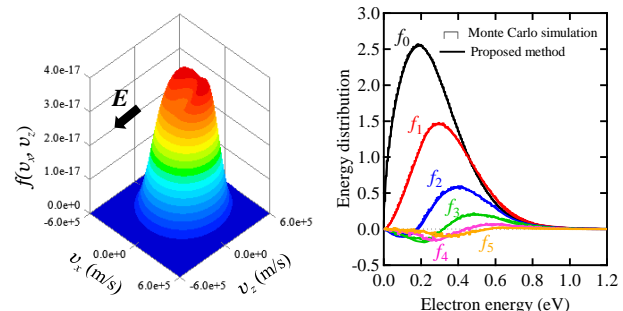


Fig.2 電子速度分布関数

Fig.3 電子エネルギー分布