

フェーズフィールドモデルのためのデータ同化デザイン

○長尾 大道^{1,2} 伊藤 伸一¹

東京大学地震研究所¹

東京大学大学院情報理工学系研究科²

小山 敏幸 塚田 祐貴

名古屋大学大学院
工学研究科

井上 純哉

東京大学大学院
工学系研究科

山中 晃徳

東京農工大学大学院工学府

自己紹介(長尾大道)

2002年3月 京都大学大学院理学研究科 地球惑星科学専攻 博士後期課程修了
学位: 博士(理学)

2002年4月 特殊法人 核燃料サイクル開発機構 東濃地科学センター 客員研究員
現: 独立行政法人 日本原子力研究開発機構

2006年3月 独立行政法人 海洋研究開発機構 地球内部変動研究センター 研究員

2009年6月 大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所
~ 2010年11月 予測発見戦略研究センター 特任研究員
2010年12月 ~ データ同化研究開発センター 特任准教授

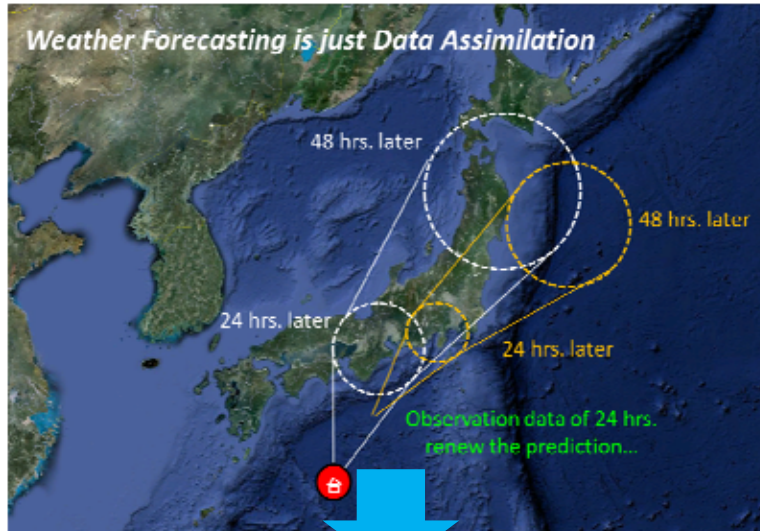
2013年9月 東京大学地震研究所 巨大地震津波災害予測研究センター 准教授

2013年10月 東京大学大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻 准教授

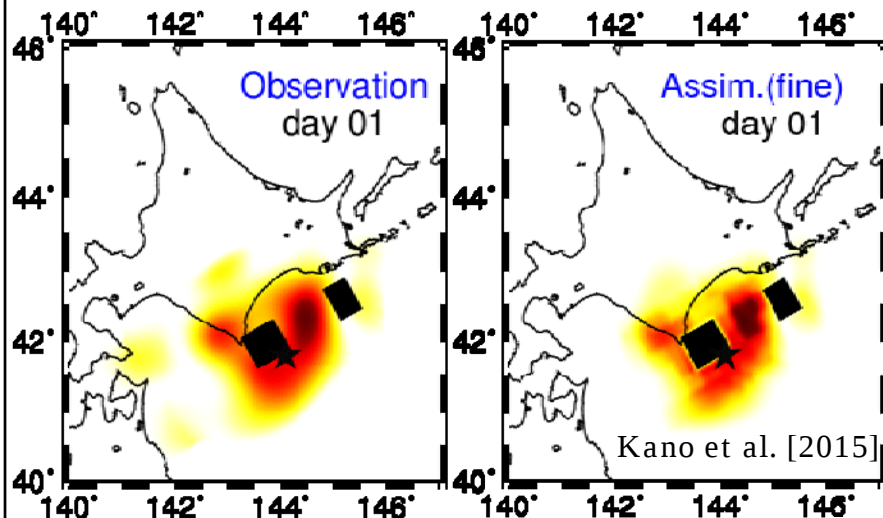
2013年11月 統計数理研究所 データ同化研究開発センター 客員准教授

固体地球科学データ同化

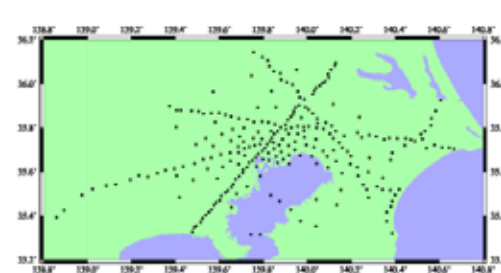
気象予報(大気内の4次元状態を予測)



地象予報(地殻内の4次元状態を予測)

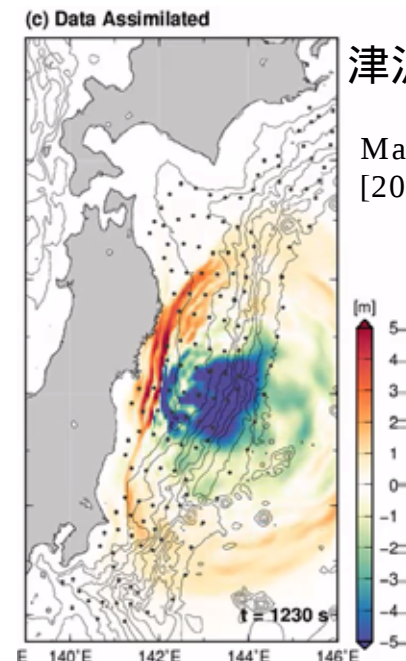
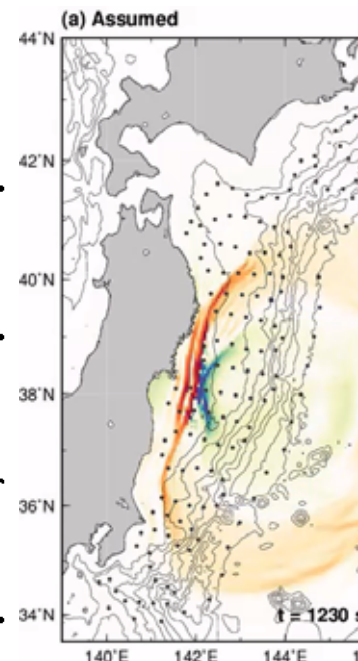
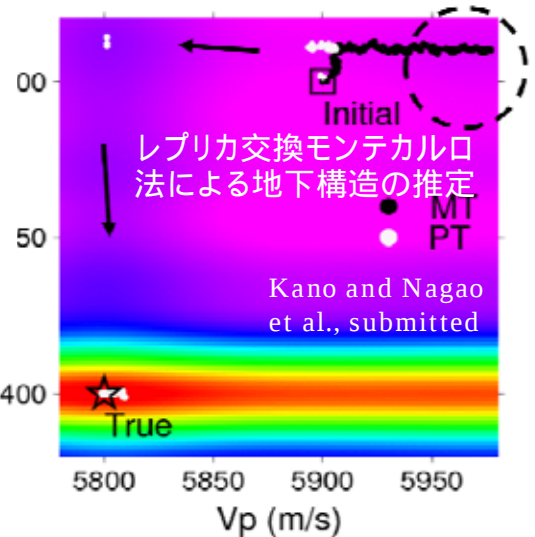


都市災害プロジェクト



首都直下地震観測網MeSO-net

加納・長尾 他[2015]



津波即時予測

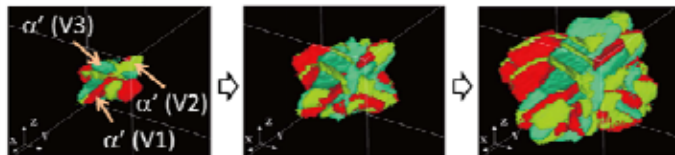
Maeda et al. [2015]

構造材料科学データ同化

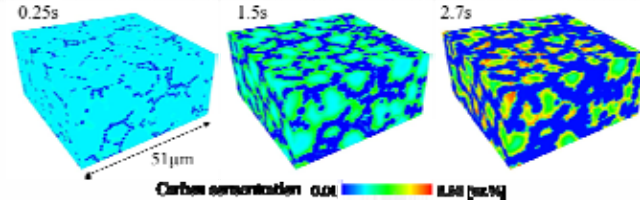
内閣府・JST SIP「マテリアルズインテグレーションシステムの開発」

材料組織のパラメータの同定・内部状態の推定

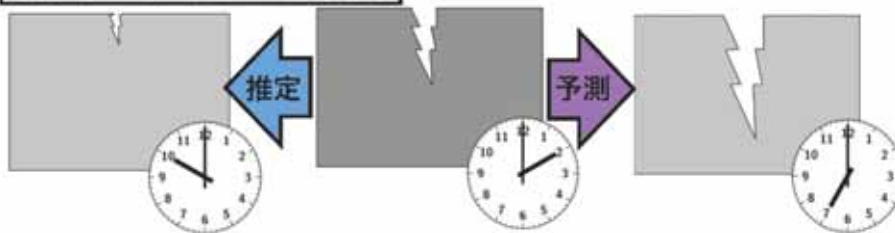
マルテンサイト組織の変態シミュレーション 提供：小山先生 塚田先生



オーステナイト→フェライト変態のシミュレーション 提供：山中先生



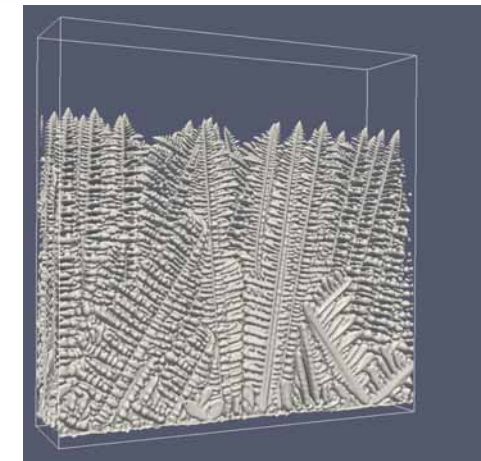
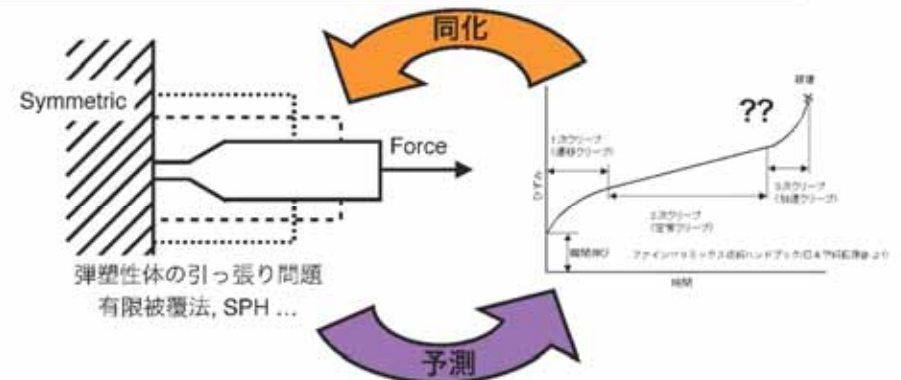
亀裂の順問題・逆問題



フェーズフィールド法に資するデータ同化手法の開発

➡ パラメータ推定, 実験デザイン, 冷却スケジュール最適化, etc.

弾塑性体の直接計算によるクリープ破壊の予測

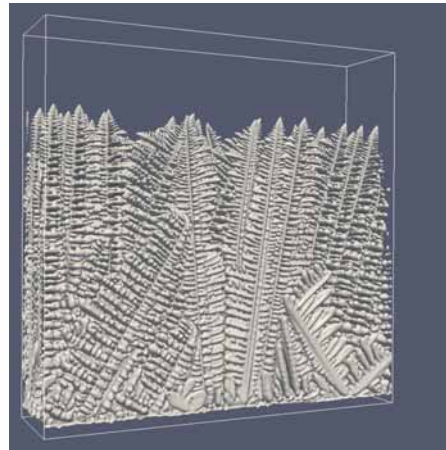


Shimokawabe et al. [2011]

大規模自由度系に対するデータ同化

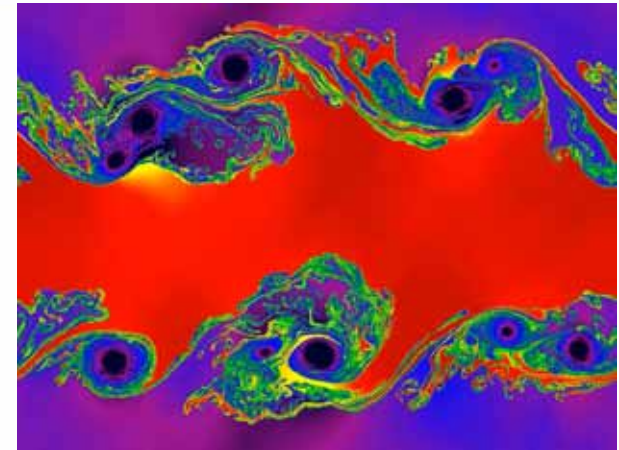
連続場の数値計算

計算が大規模化



Phase-fieldモデル: Dendrite growth

T. Shimokawabe *et al.* (2011)



Navier-Stokes方程式: KH不安定性

V. Springel (2009)

逐次ベイズフィルタによるデータ同化

- ・カルマンフィルタ
- ・アンサンブルカルマンフィルタ
- etc..

必要な記憶領域 $\sim O(N^2)$ N : 自由度

$N \sim 10^9$ 倍実数で $\sim 10\text{EB} = 10^4\text{PB}$

cf. 京コンピュータ フルノード 1.26PB

現実的に不可能

大自由度系に対するデータ同化手法の開発が必須

テストモデル

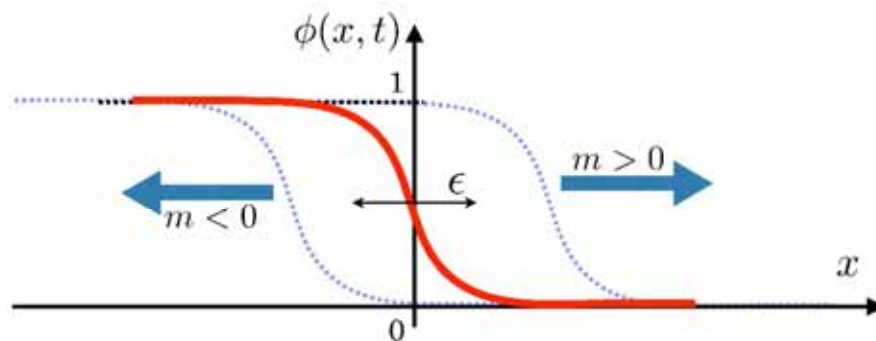
単純界面移動フェーズフィールドモデル

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \Delta \phi + \phi(1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + m \right) \quad |m| < \frac{1}{2}$$

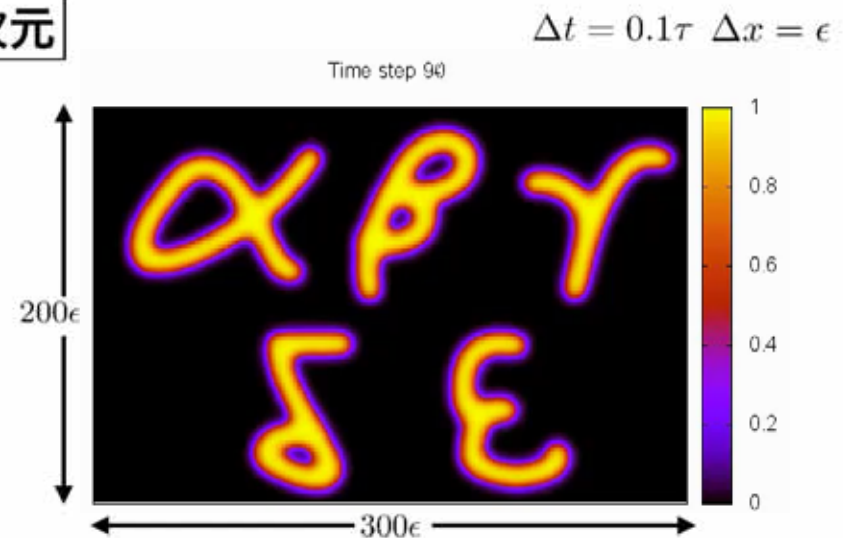
τ, ϵ, m は全時空間で一定値とする.

R. Kobayashi (1993)

1次元



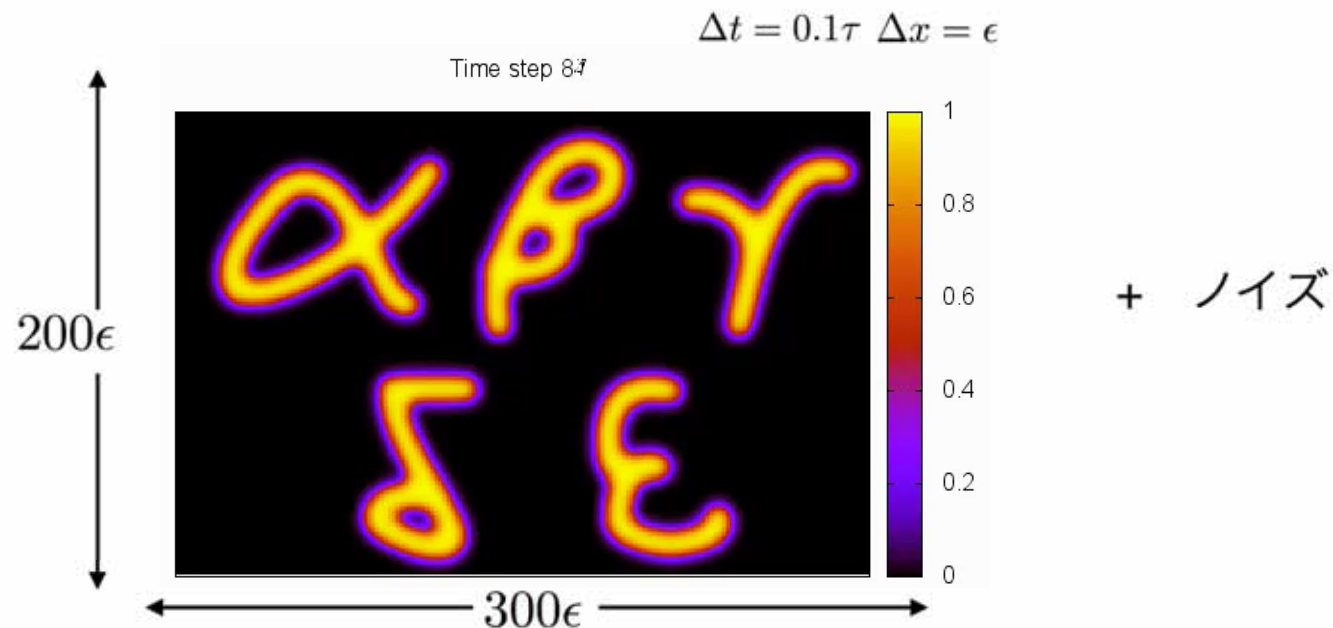
2次元



問題設定

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \Delta \phi + \phi(1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + m \right) \quad |m| < \frac{1}{2}$$

で発展することがわかっている ϕ +ノイズの時系列データが得られているとする。



を満たす初期状態 $\phi(x,0)$ と m はどのようなものか？

τ, ϵ は既知とする(時空間の単位にとる.)

問題設定

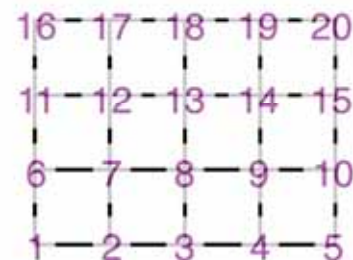
m を推定したいので、 m の時間発展方程式を導入

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\epsilon^2}{\tau} \Delta \phi + \frac{1}{\tau} \phi (1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + m \right) \\ \frac{\partial m}{\partial t} = 0 \end{cases} \quad \boxed{\text{拘束条件}} \quad |m| < \frac{1}{2} \quad 0 < \phi(\mathbf{x}, 0) < 1$$

ϕ は相の存在確率.

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \left(\boldsymbol{\phi}^\top, m + \frac{1}{2} \right)^\top \quad M \text{ 個の格子点で空間を離散化}$$

$$\boldsymbol{\phi}(t) = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M)^\top$$



$$\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}) \quad 0 < \theta_i(0) < 1 \quad \text{に対して、}$$

データに最も適合する $\boldsymbol{\theta}(0) = \boldsymbol{\Theta}$ を探す問題

ベイズの定理

$$p(\Theta|D) = \frac{1}{p(D)} p(\Theta) p(D|\Theta)$$

$p(D)$ は定数

事後分布 $\propto$ 事前分布 $\times$ 尤度関数

事前情報

理論値とデータの
ミスフィット

事前分布

ベイズの定理

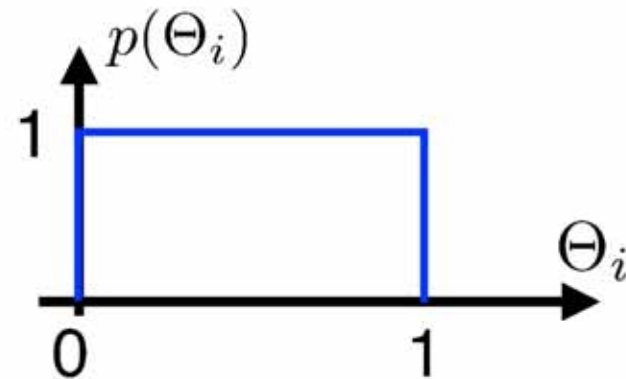
$$p(\Theta|D) = \frac{1}{p(D)} p(\Theta) p(D|\Theta)$$

事前分布

拘束条件

$$0 < \Theta_i < 1$$

のみが事前情報



$$p(\Theta_i) = \begin{cases} 1 & 0 < \Theta_i < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

尤度関数

ベイズの定理

$$p(\Theta|D) = \frac{1}{p(D)} p(\Theta) p(D|\Theta)$$

尤度関数

$$D = h(\theta) + \omega \quad \omega \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

観測値 ↑ 観測演算子

$$p(D|\Theta) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp \left[- \sum_{t \in \mathcal{T}_{\text{obs}}} \frac{(h(\theta) - D)^2}{2\sigma^2} \right]$$

最適化

$p(\Theta|D)$ の最大化問題 $\longleftrightarrow$ $J(\Theta) = -\log p(\Theta|D)$ の最小化問題

評価関数

$$J = \text{const.} + \frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2) + \frac{1}{2\sigma^2} \int dt \sum_{t_s \in \mathcal{T}_{\text{obs}}} \delta(t - t_s) \underbrace{[h(\theta(t_s)) - D]^2}_{\text{観測とのズレ}}$$

ただし、 $0 < \Theta_i < 1$

$$\Theta^* = \arg \min_{\Theta} J \quad \text{s.t.} \quad 0 < \Theta_i < 1$$

○ 勾配法によって J を最小化

✕ モンテカルロ法
シンプレックス法

※ J は Θ の関数として陽に書く事ができない。

➡ 単純な微分で $\frac{\partial J}{\partial \Theta}$ は計算できない。

Adjoint 法 (4 次元変分法・高速自動微分法)

$$J(\Theta) = \int_0^T dt \mathcal{J}(\theta(t)) + \int_0^T dt \lambda^\top \cdot \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} - F(\theta) \right)$$

$$\text{ここで、} \mathcal{J}(\theta(t)) = \sum_{t_s \in \mathcal{T}_{\text{obs}}} \delta(t - t_s) [h(\theta(t)) - D]^2$$

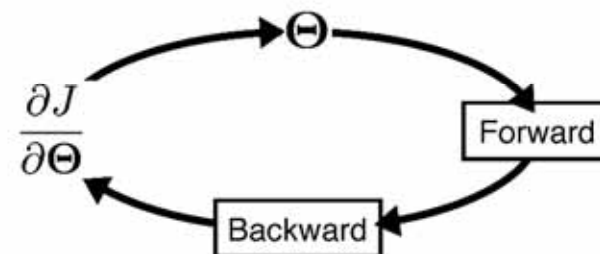
Forward model

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = F(\theta) \quad \theta(0) = \Theta$$

Backward: Adjoint model

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} + \left(\frac{\partial F}{\partial \theta} \right)^\top \cdot \lambda = \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \theta} \quad \lambda(0) = -\frac{\partial J}{\partial \Theta}$$

$$\lambda(T) = 0$$



拘束条件

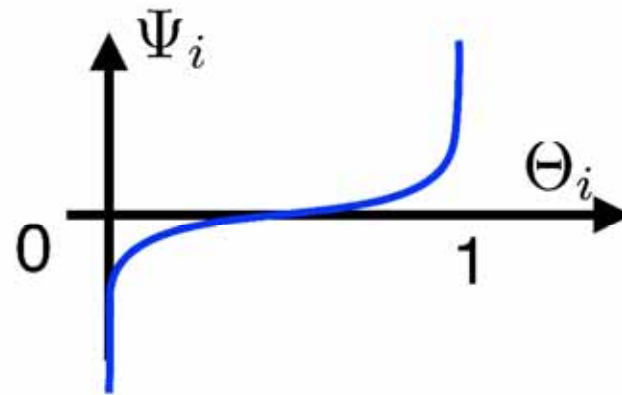
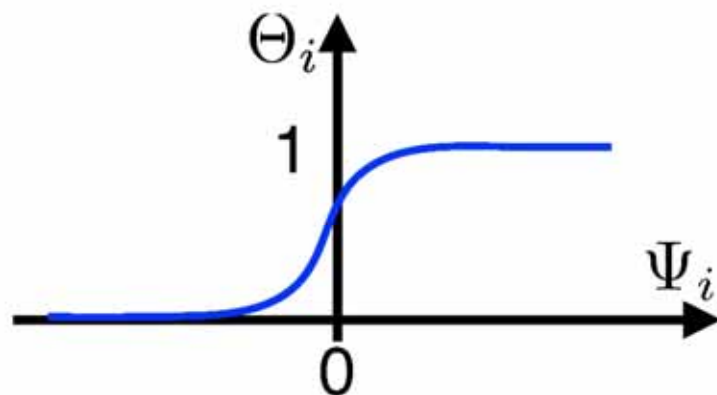
拘束条件を満たすように変数変換, 無制約最適化問題へ

$$\Theta_i = \frac{1}{1 + \exp(-\Psi_i)} \quad \longleftrightarrow \quad \Psi_i = \log \left(\frac{\Theta_i}{1 - \Theta_i} \right)$$

$$0 < \Theta_i < 1$$

$$-\infty < \Psi_i < \infty$$

$$\frac{\partial J}{\partial \Psi_i} = \Theta_i (1 - \Theta_i) \frac{\partial J}{\partial \Theta_i}$$



Adjoint法まとめ

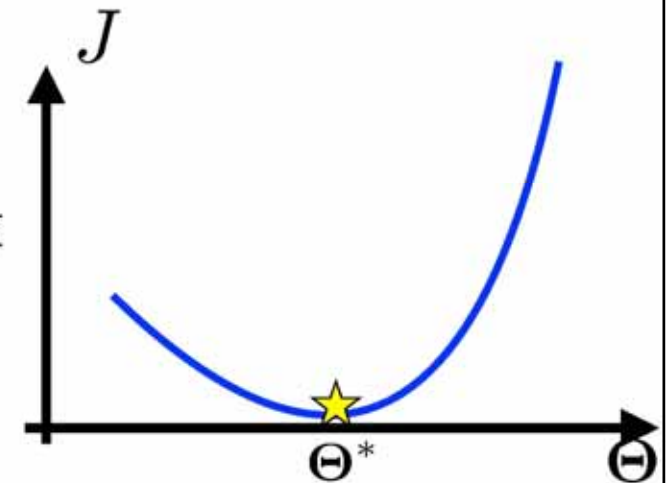
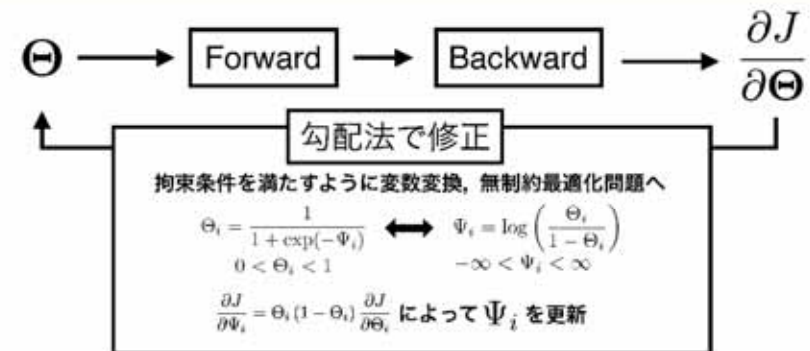
1. 適当な初期値を設定

2. Adjoint法により $\frac{\partial J}{\partial \Theta}$ を計算

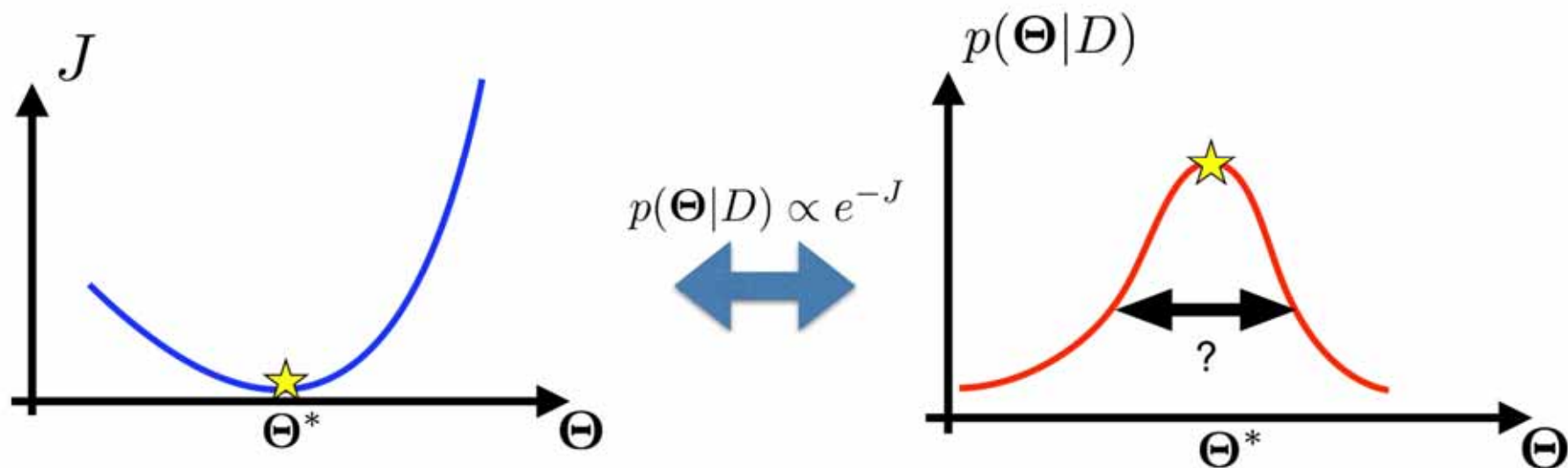
3. 変数変換により、 $\Psi_i = \log \left(\frac{\Theta_i}{1 - \Theta_i} \right)$
 $\frac{\partial J}{\partial \Psi_i} = \Theta_i (1 - \Theta_i) \frac{\partial J}{\partial \Theta_i}$ を計算

4. 勾配法により、 Ψ_i を更新

5. 逆変換 $\Theta_i = \frac{1}{1 + \exp(-\Psi_i)}$ により更新された Θ_i を得る. 2へ戻る.



Adjoint法の問題点



Adjoint法単体では、最適値まわりの揺らぎを知ることができない

誤差推定

Gaussian 近似

Θ^* の近傍では、

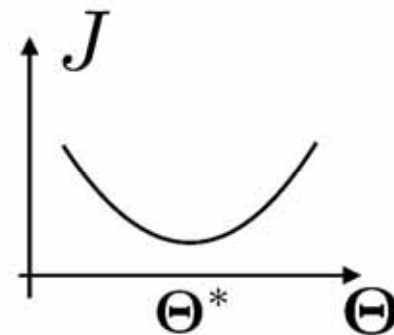
評価関数が2次関数で十分に近似できると考える。

$$J(\Theta) \sim J(\Theta^*) + \frac{1}{2} (\Theta - \Theta^*)^\top H (\Theta - \Theta^*)$$



$$p(\Theta|D) \sim N(\Theta^*, H^{-1})$$

$$H^{-1}: \text{ヘッセ行列 } H = \left. \frac{\partial^2 J}{\partial \Theta^2} \right|_{\Theta=\Theta^*} \text{の逆行列}$$



k 番目の要素の周辺分布

$$p(\Theta_k|D) = \int d\Theta_{-k} p(\Theta|D) = N(\Theta_k^*, (H^{-1})_{k,k})$$

k 番目の要素の分散 = H^{-1} の k 番目の対角成分

2nd-order adjoint 法

H^{-1} を陽に求めずに, k 番目の対角成分を抽出したい. $\rightarrow b_i = \delta_{i,k}$ として $H\mathbf{r} = \mathbf{b}$ を解けばいい.

$H\mathbf{r} = \mathbf{b}$ を反復法で解く

- ・ 共役勾配法
- ・ 共役残差法
- etc...



ヘシアン-ベクトル積 $H\mathbf{r}$ が計算できればいい

2nd-order adjoint 法

Forward: Tangent linear model

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right) \cdot \xi \quad \xi(0) = \underline{\mathbf{r}}_{\text{入力}}$$

Backward: 2nd-order adjoint model

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right)^\top \cdot \zeta = \left(\frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \cdot \xi \right)^\top \cdot \boldsymbol{\lambda} - \frac{\partial^2 \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \cdot \xi \quad \zeta(0) = \frac{\partial^2 J}{\partial \boldsymbol{\Theta}^2} \cdot \mathbf{r} \quad \zeta(T) = 0$$

出力

Adjoint法による誤差評価アルゴリズム

1. Adjoint 法 + 勾配法により J を最小化し,
最適推定値 Θ^* を求める.

本研究では勾配法として、LBFGS法を採用.

2. 2nd-order adjoint 法+反復法で 推定値誤差を求める.

本研究では反復法として、CR法を採用.

Ito and Nagao *et al.*, submitted

Remark !

1. $O(N^2)$ の配列を一切用いていない.
2. 問題の質によって勾配法や反復法を選ぶ.
→ $O(K)$ の計算量で誤差評価まで実行可. K : 時系列の計算量

大規模自由度系に対する, 現状唯一無二の状態誤差推定法

双子実験

与えた初期状態・パラメータから生成した時
系列+ 観測ノイズを擬似データと見做して、
逆にパラメータ m を推定

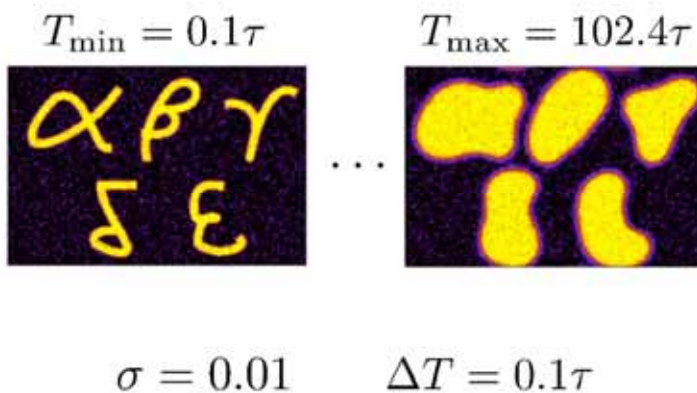
観測データ:

時間区間 $[T_{\min} : T_{\max}]$

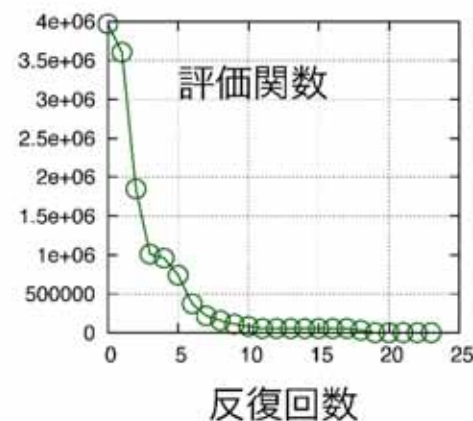
データ間隔 ΔT での各状態

+ 標準偏差 σ の白色ガウスノイズ

観測データ例



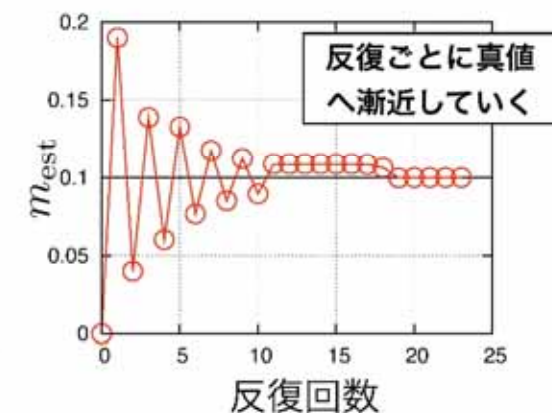
推定の計算例



初期状態の真値



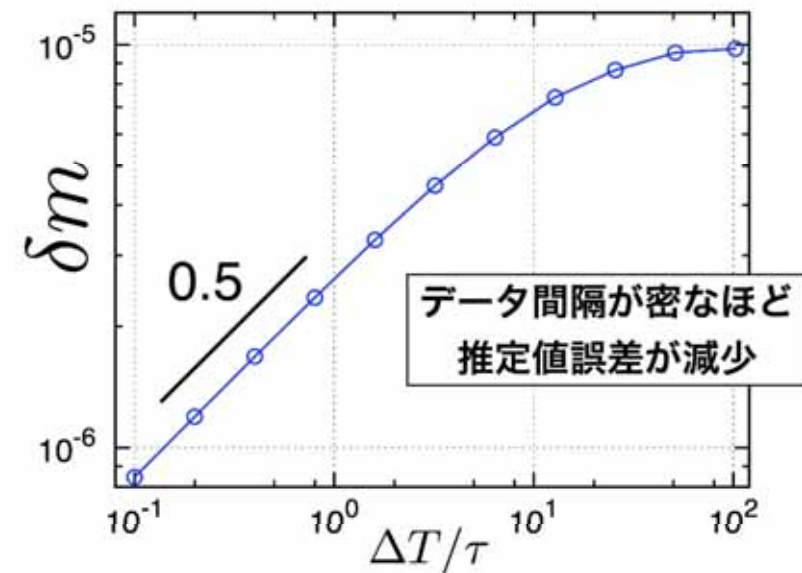
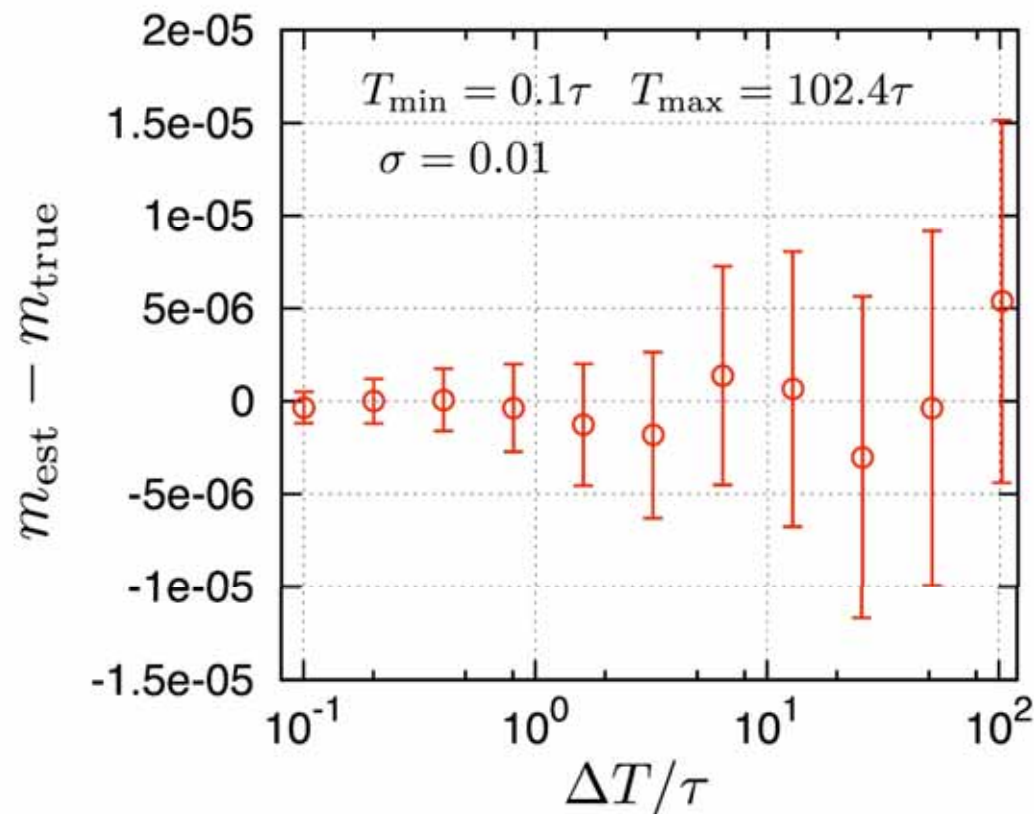
m の真値 $m_{\text{true}} = 0.1$



双子実験：パラメータ推定

推定値と推定値誤差のデータ間隔依存性

データの取得時間の下限・上限を固定して、
データ取得間隔を変える。
“どれくらい密にデータを取るか”



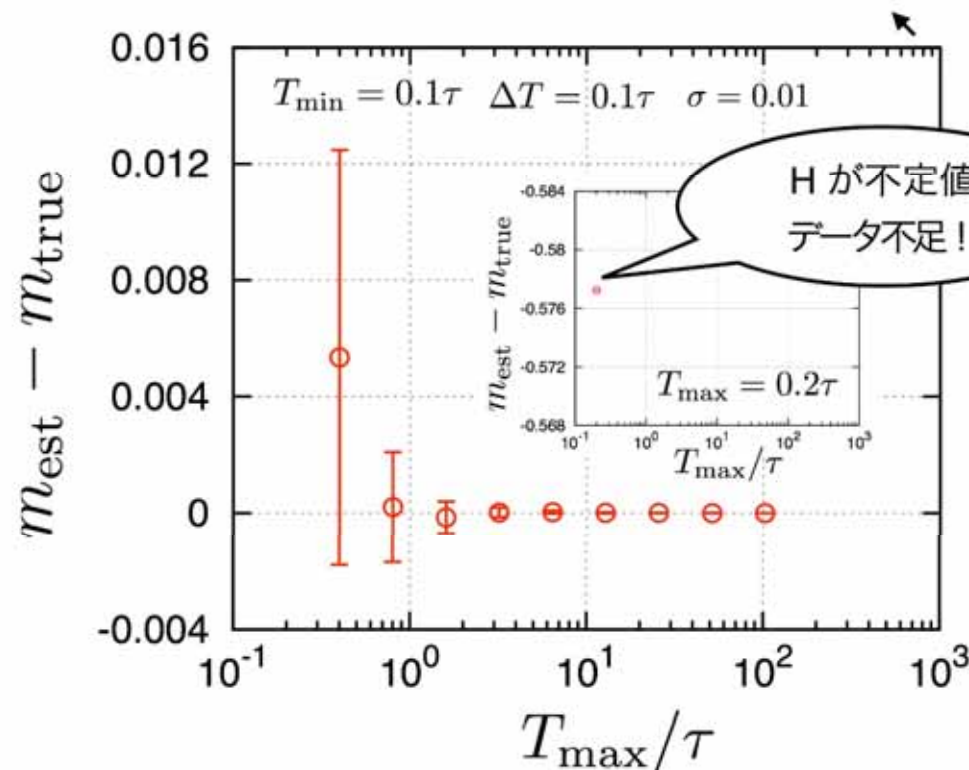
大数の法則が成立している。

双子実験：パラメータ推定

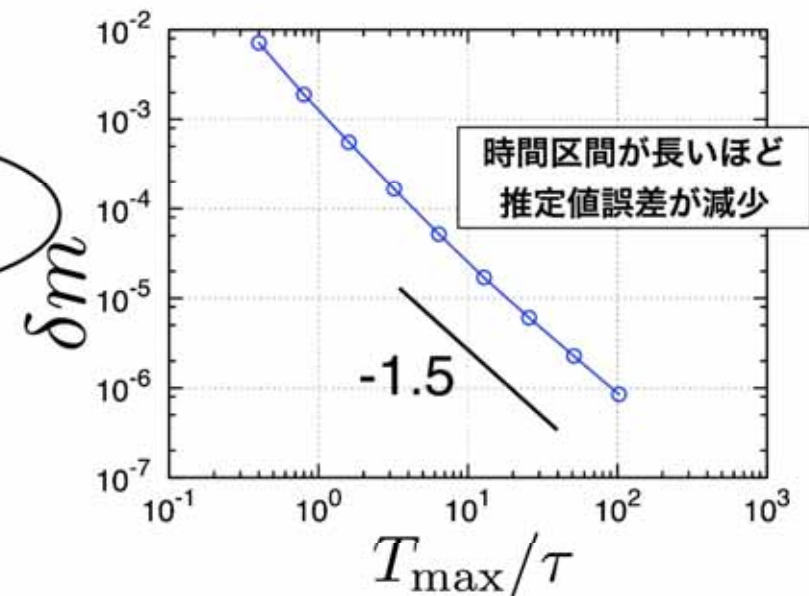
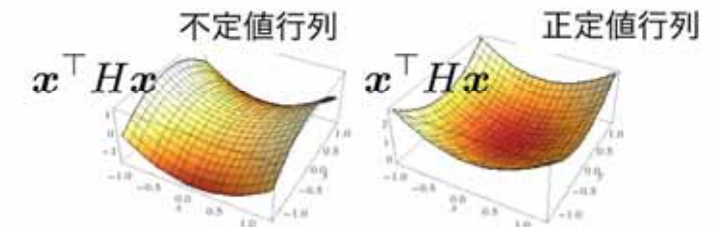
推定値と推定値誤差のデータの上限依存性

データの取得時間の下限・データ取得間隔を固定して、
データ取得の上限を変える。

“どれくらい長くデータを取るか”



Ito and Nagao *et al.*, submitted



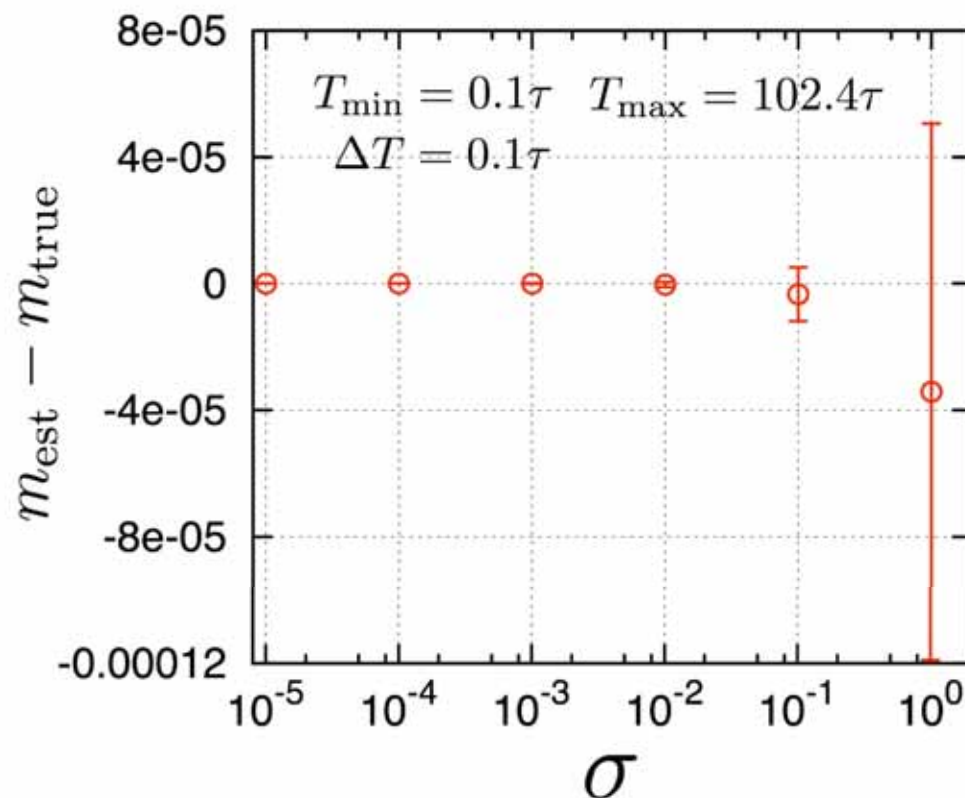
大数の法則より早い。
ダイナミクスを反映？

双子実験：パラメータ推定

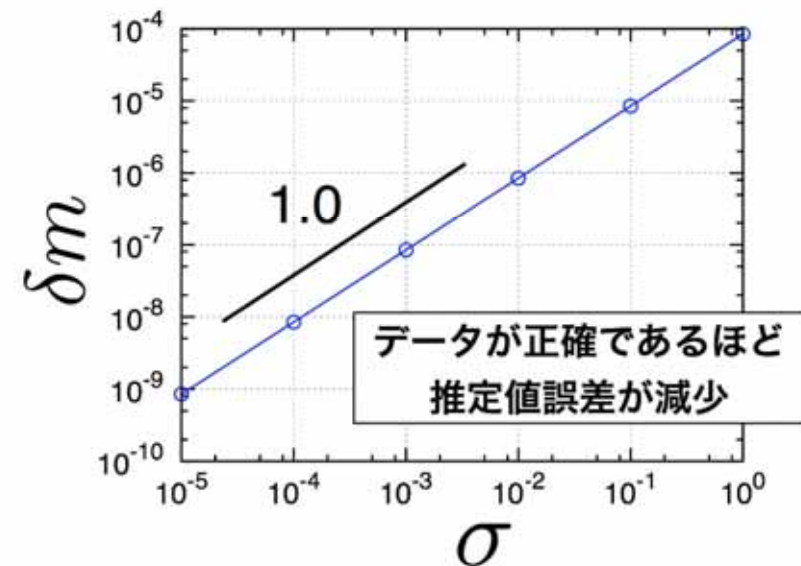
推定値と推定値誤差の観測ノイズ依存性

データの取得時間・取得間隔を固定して、
観測にかかるノイズの大きさを変える。

“どれくらい正確なデータを取るか”



Ito and Nagao *et al.*, submitted



推定誤差は
観測にかかるノイズに比例する。

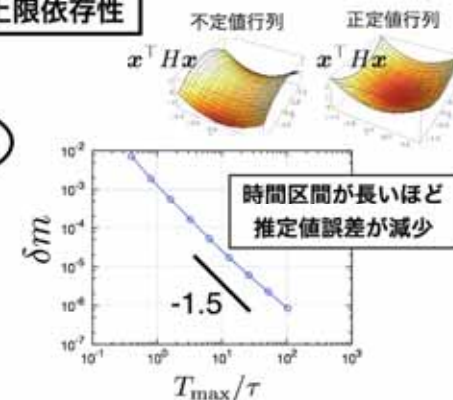
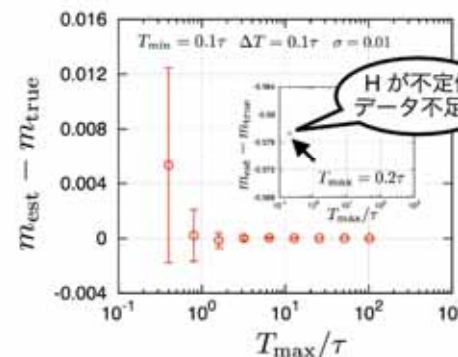
双子実験：パラメータ推定

データの量・質に応じた
推定値と推定値誤差が得られる。
→ パラメータ推定器として
優秀な性質.

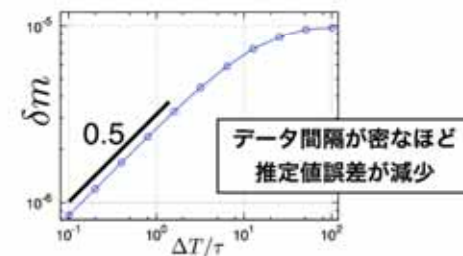
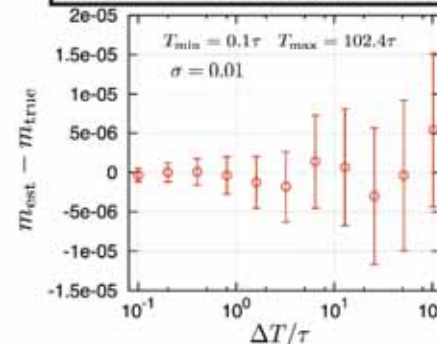
➡ 実験計画のデザイン

Ito and Nagao *et al.*, submitted

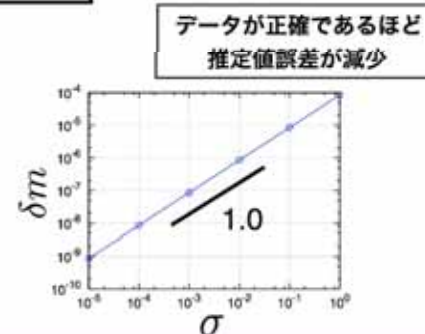
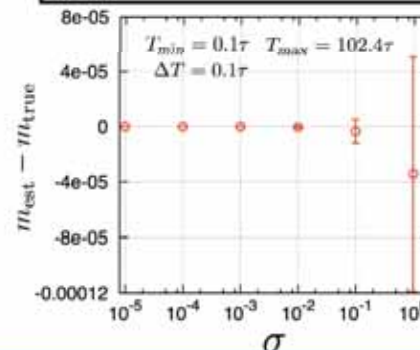
推定値と推定値誤差のデータの上限依存性



推定値と推定値誤差のデータ間隔依存性



推定値と推定値誤差の観測ノイズ依存性



双子実験：パラメータ・状態同時推定

初期状態とパラメータ m を同時推定

観測データ: 時間区間 $[5.0\tau : 30.0\tau]$

データ間隔 $\Delta T = 0.1\tau$ の状態

+ 標準偏差 σ の白色ガウスノイズ

真の初期状態



m の真値

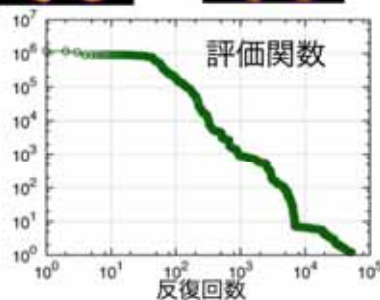
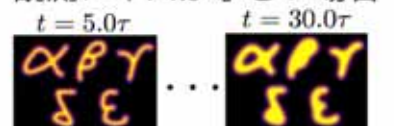
$$m_{\text{true}} = 0.1$$

パラメータ・状態の同時推定が可能。

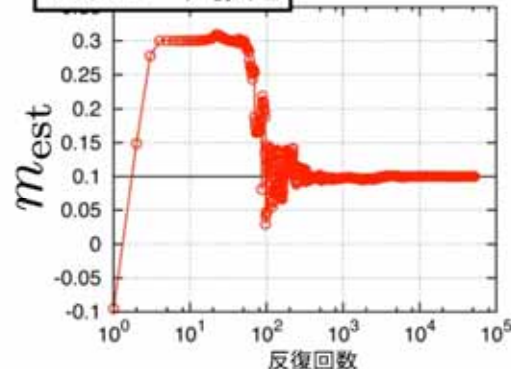
データが正確であるほど、収束が早い。

観測ノイズ依存性

観測ノイズが小さい場合 $\sigma = 10^{-4}$



パラメータ推定



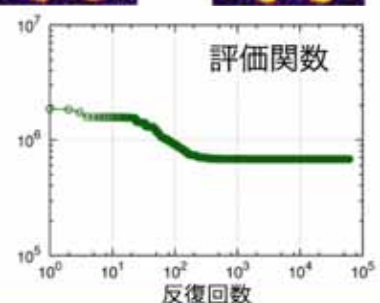
初期状態推定

Ito and Nagao *et al.*, submitted

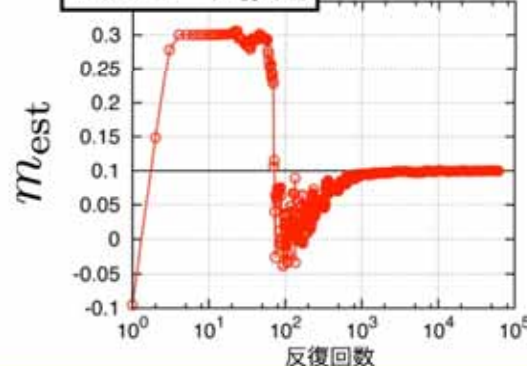
$J = 0.13127\text{E}+03$, Iteration = 3801



観測ノイズが大きい場合 $\sigma = 0.3$

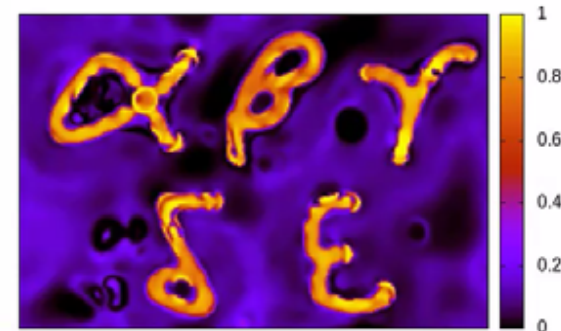


パラメータ推定



初期状態推定

$J = 0.67807\text{E}+06$, Iteration = 3801



双子実験：初期状態推定

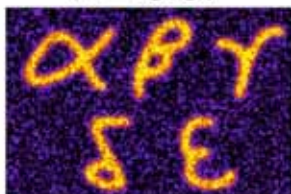
双子実験 状態のみの推定 $m = 0.1$

観測データ：時間区間 $[8.0\tau : 30.0\tau]$

データ間隔 $\Delta T = 0.1\tau$ の状態

+ 標準偏差 $\sigma = 0.3$ の白色ガウスノイズ

$t = 8.0\tau$



$t = 30.0\tau$



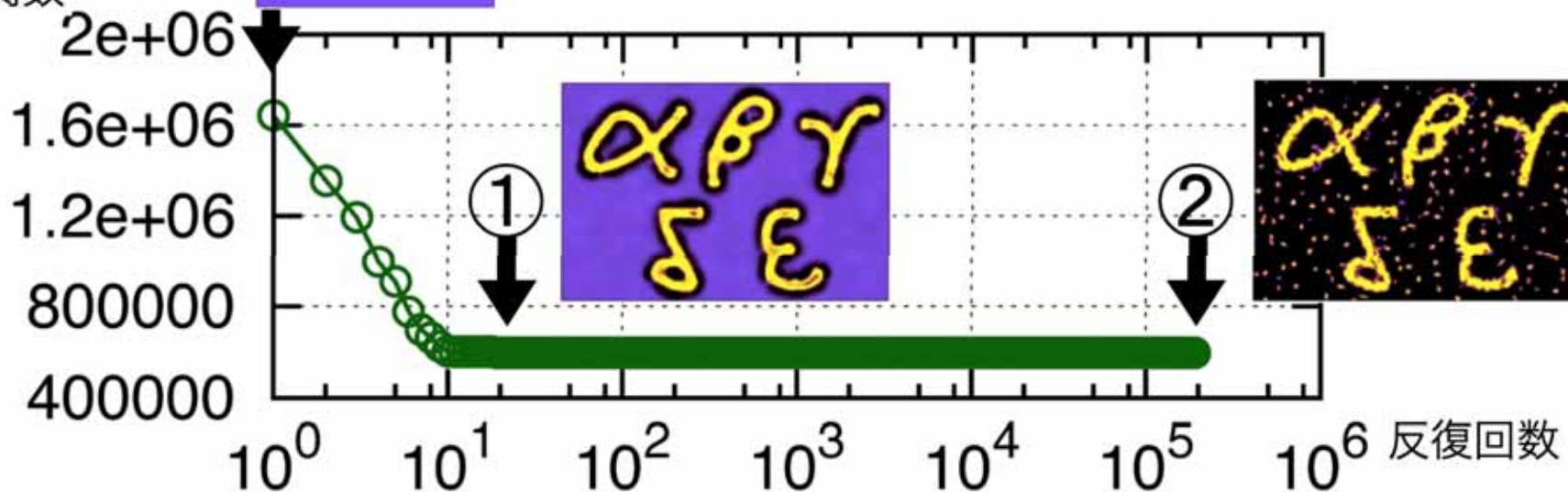
真の初期状態



$J = 0.59684E+06$, Iteration = 331



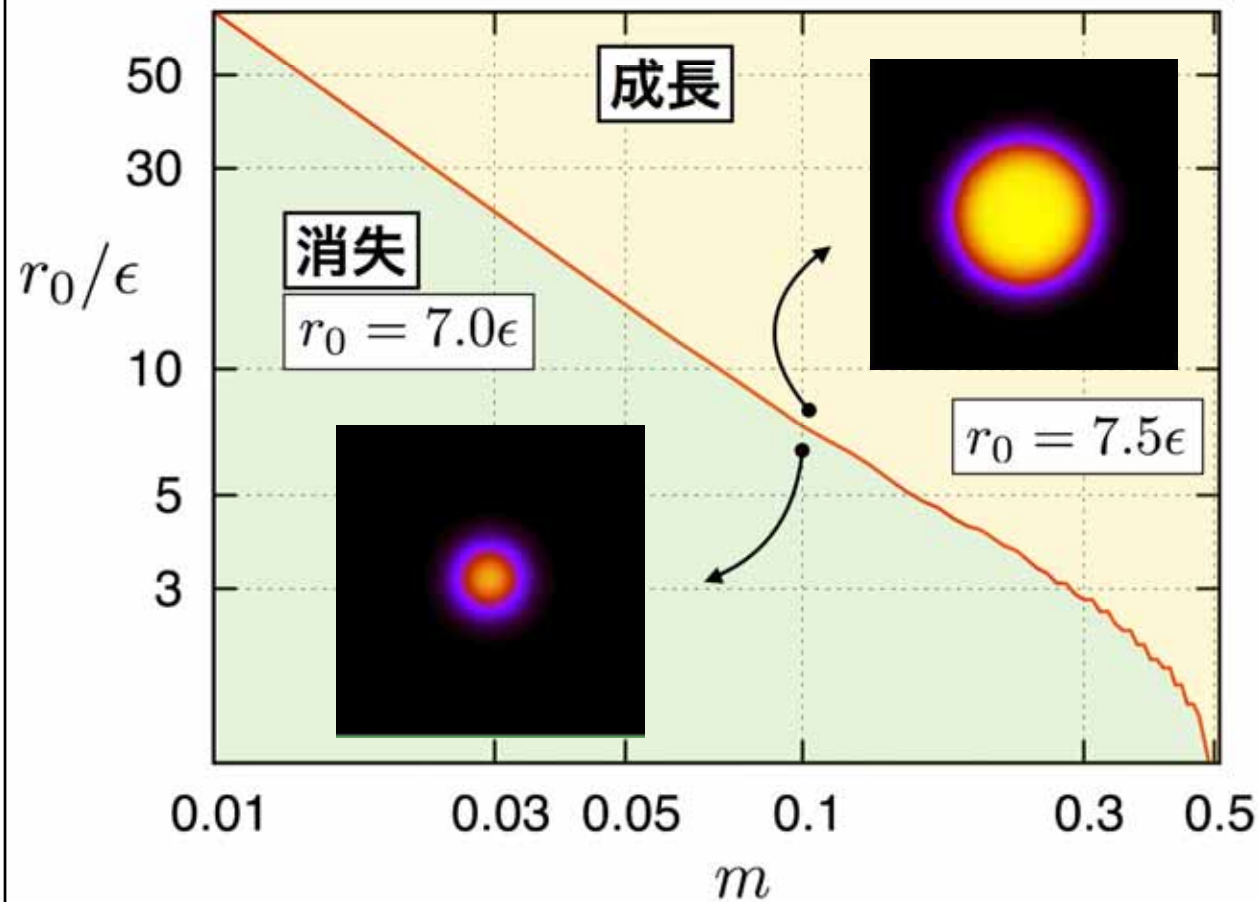
評価関数



ノイズ誘起による
状態推定の不定性が発生.

Ito and Nagao *et al.*, submitted

臨界核半径



古典臨界核半径

バルクのエネルギー
vs.
表面エネルギー

$$r^* \propto \frac{1}{m}$$

M. Castro (2003)

臨界核半径以下の核は
 $m > 0$ でも消失する

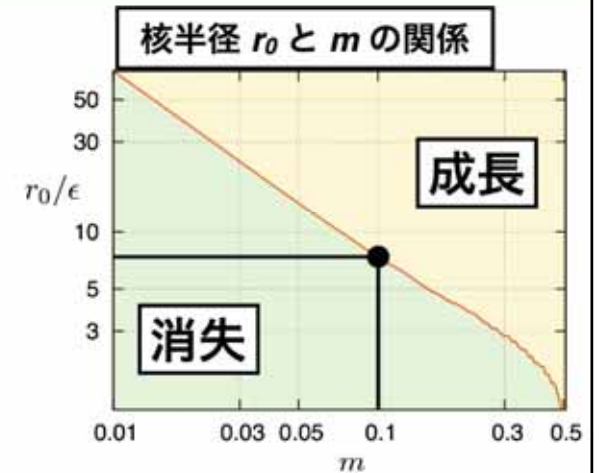
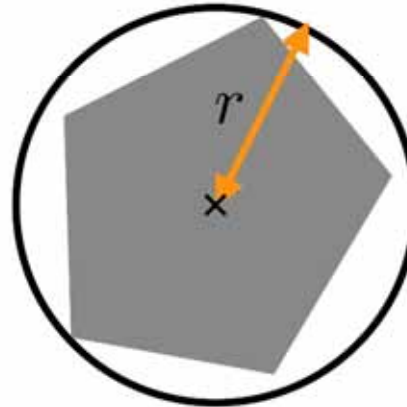
Ito and Nagao *et al.*, submitted

スポットサイズの評価

最小包含円を用いて
スポットサイズを大まかに評価

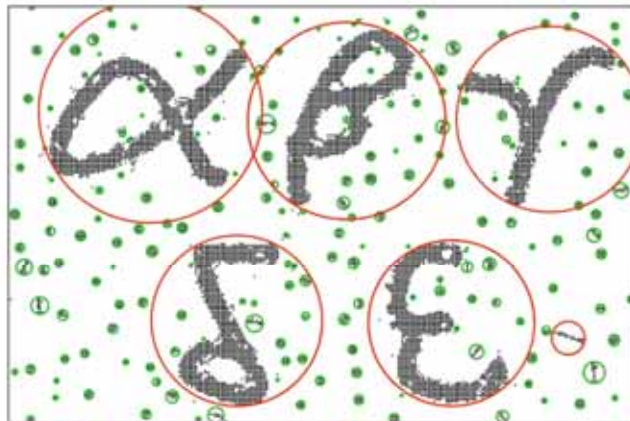


最小包含円

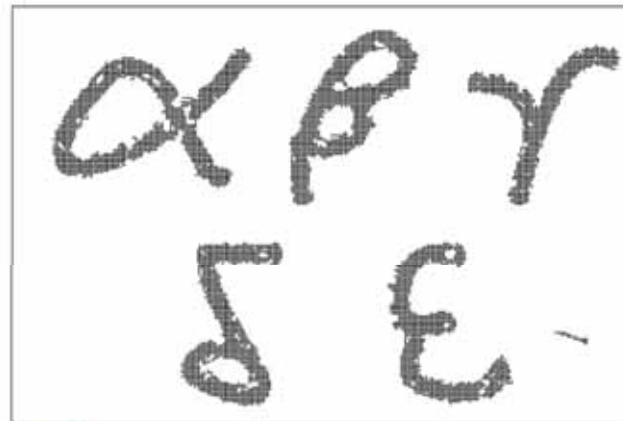


$m = 0.1$ のとき、
 $r^* = 7.3\epsilon$ くらい

↓ $\phi > 0.5$ のクラスターを抽出



○ $r < 7.3\epsilon$ ○ $r \geq 7.3\epsilon$



スポットサイズは
臨界核半径以下

推定結果のforward計算

① 反復 31回目

$t = 0.0\tau \sim 8.0\tau$

$t = 0.0 \text{ tau}$



② 反復 187621回目

$t = 0.0\tau \sim 8.0\tau$

$t = 0.0 \text{ tau}$



Ito and Nagao *et al.*, submitted

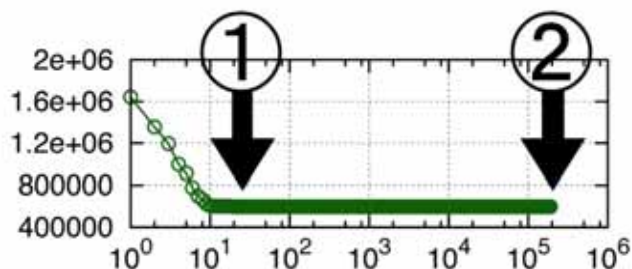
真値 $t = 8.0\tau$



最初の観測時刻までに両者はほぼ同じになる.

= 評価関数の値がほとんど同じである理由

データを再現するという意味では、どちらも確からしい



モデルの持つ性質により,
推定結果の不定性が生じうる.

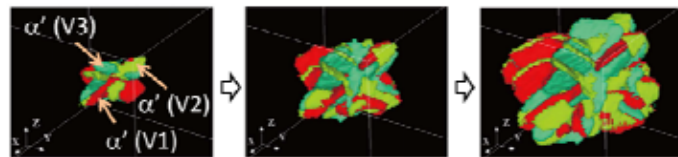
まとめ・展望

- ☑ 大規模自由度系に対する, adjoint 法を用いた状態推定&誤差評価の方法を確立. 現在論文作成中.
- ☑ データの質・量に応じた推定誤差を得る事ができる. → パラメータ推定器として極めて優秀.
- ☑ ヘッセ行列の性質を調べる事で, 推定結果が尤もらしいかを調べる事が可能.
 - データの量・質が十分かどうかの判定に使える.
- ☑ モデルに起因する状態推定の不定性が存在しうる. → 推定の前にモデルの性質を詳しく知る必要がある.

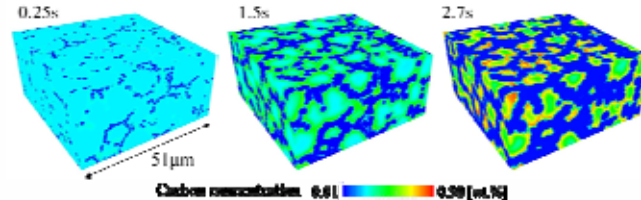
□ 実在材料への適用・発展

材料組織のパラメータの同定・内部状態の推定

マルテンサイト組織の変態シミュレーション 提供：小山先生 塚田先生



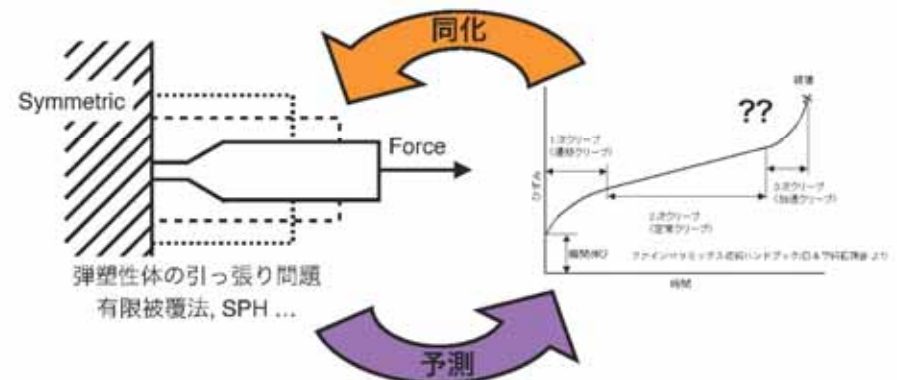
オーステナイト→フェライト変態のシミュレーション 提供：山中先生



亀裂の順問題・逆問題



弾塑性体の直接計算によるクリープ破壊の予測



Adjoint法の実装には専門的なノウハウが必要。
データ同化による数値モデルと実験データの融合に向けて
是非、共同研究を！