

# 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<sup>1,2</sup> 伊藤 伸一<sup>1</sup>

東京大学地震研究所<sup>1</sup>

東京大学大学院情報理工学系研究科<sup>2</sup>

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

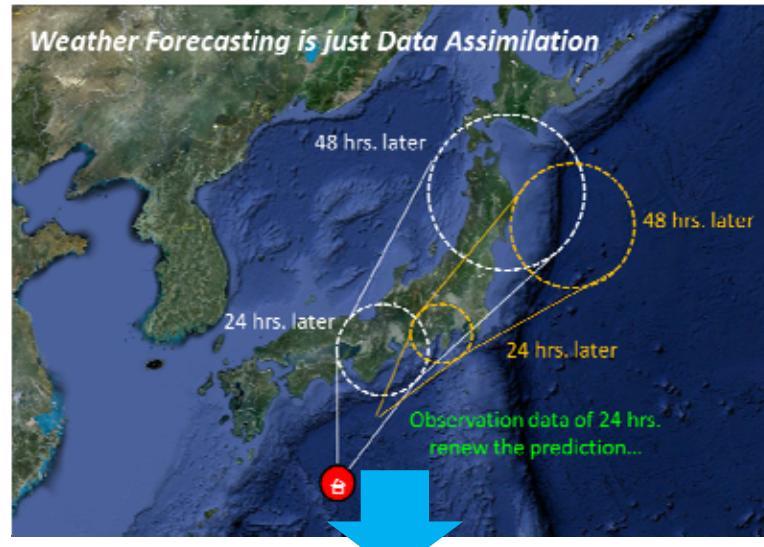
2006年3月 独立行政法人 海洋研究開発機構 地球内部変動研究センター 研究員

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

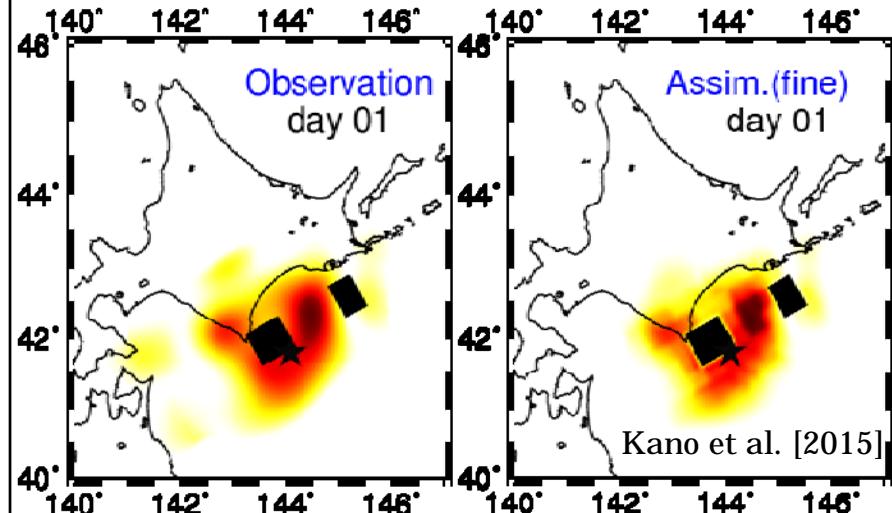
2013年9月 東京大学地震研究所 巨大地震津波災害予測研究センター 准教授  
2013年10月 東京大学大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻 准教授  
2013年11月 統計数理研究所 データ同化研究開発センター 客員准教授

# 固体地球科学データ同化

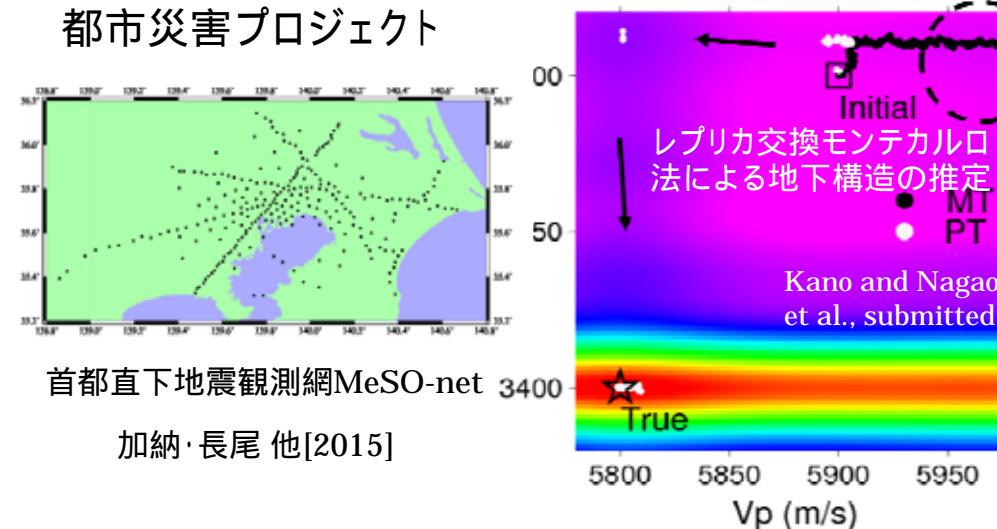
## 気象予報(大気内の4次元状態を予測)



## 地象予報(地殻内の4次元状態を予測)



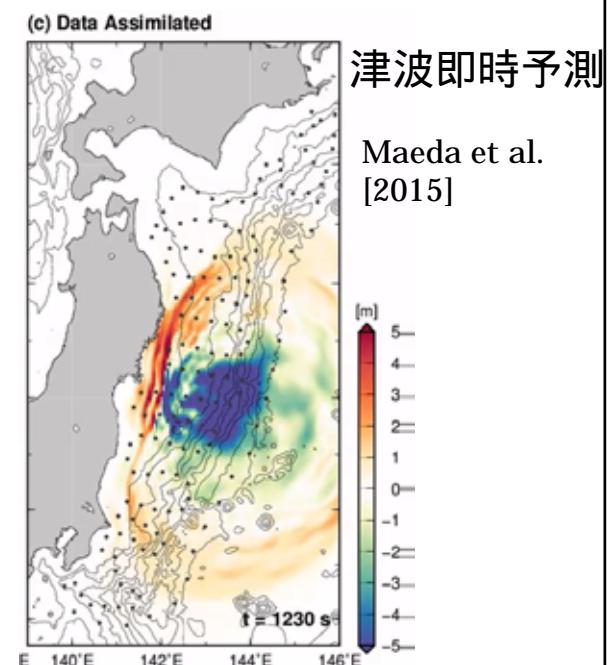
## 都市災害プロジェクト



首都直下地震観測網MeSO-net

加納・長尾 他[2015]

## 津波即時予測

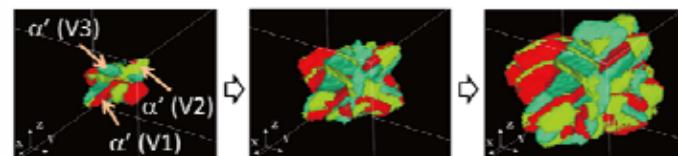


# 構造材料科学データ同化

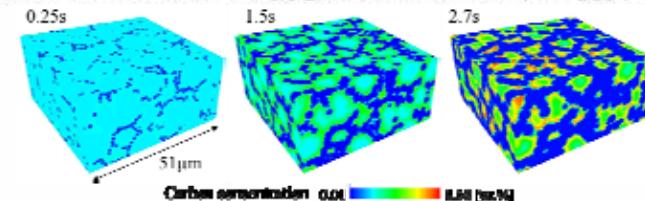
## 内閣府・JST SIP「マテリアルズインテグレーションシステムの開発」

### 材料組織のパラメータの同定・内部状態の推定

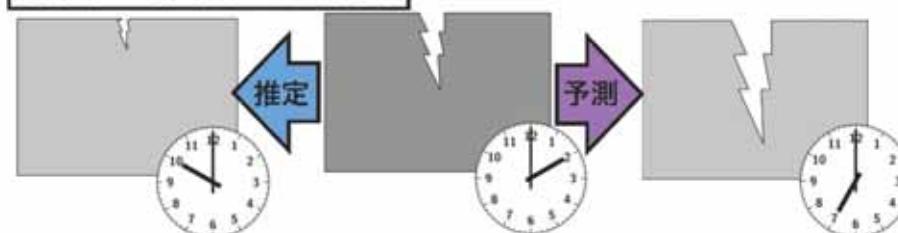
マルテンサイト組織の変態シミュレーション 提供：小山先生 塚田先生



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

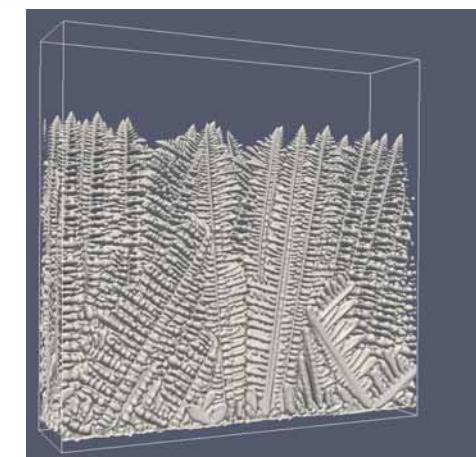
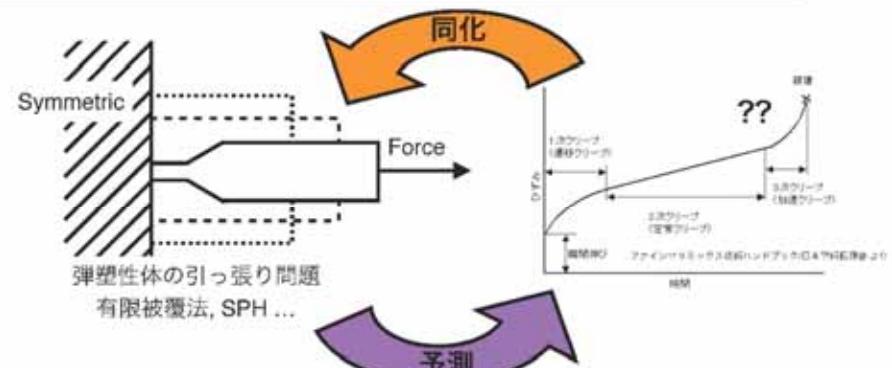


### フェーズフィールド法に資するデータ同化手法の開発

→ 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.

Shimokawabe et al. [2011]

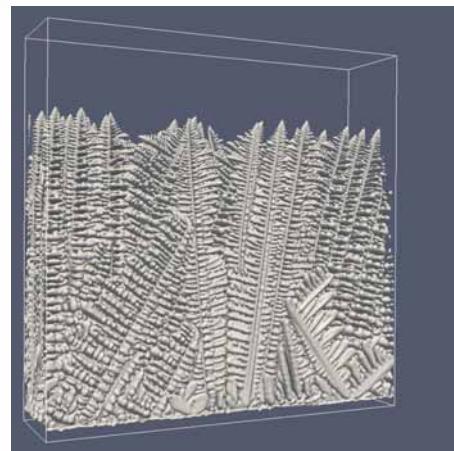
### 弾塑性体の直接計算によるクリープ破壊の予測



# 大規模自由度系に対するデータ同化

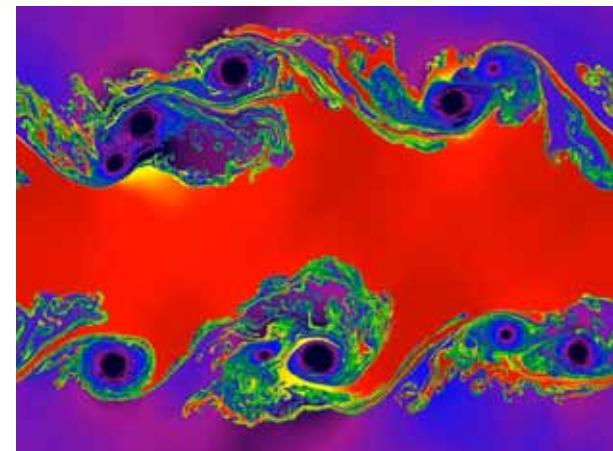
連続場の数値計算

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

必要な記憶領域  $\sim O(N^2)$

$N$  : 自由度

- ・カルマンフィルタ

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

- ・アンサンブルカルマンフィルタ

cf. 京コンピュータ フルノード  $1.26PB$

etc..

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

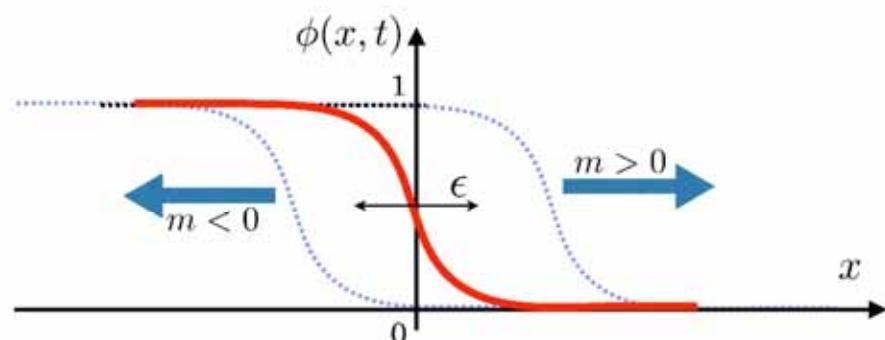
## 単純界面移動フェーズフィールドモデル

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

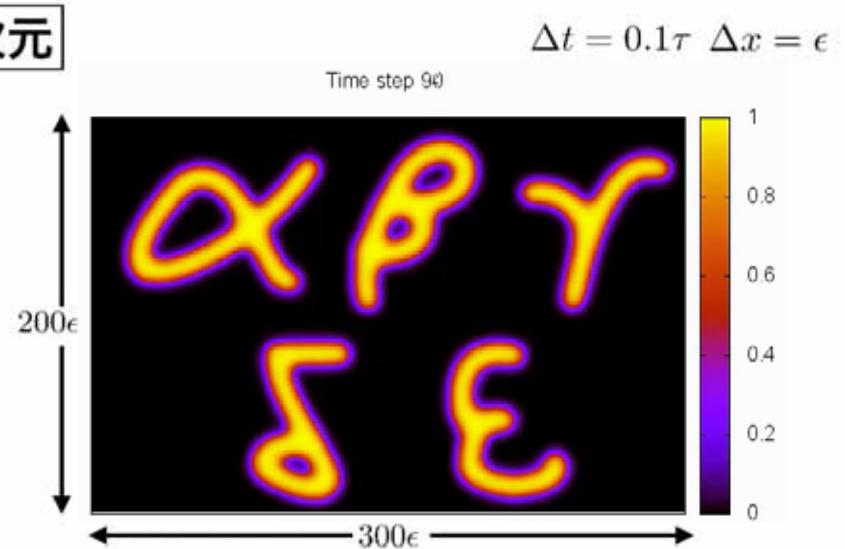
R. Kobayashi (1993)

$\tau, \epsilon, m$  は全時空間で一定値とする.

1次元



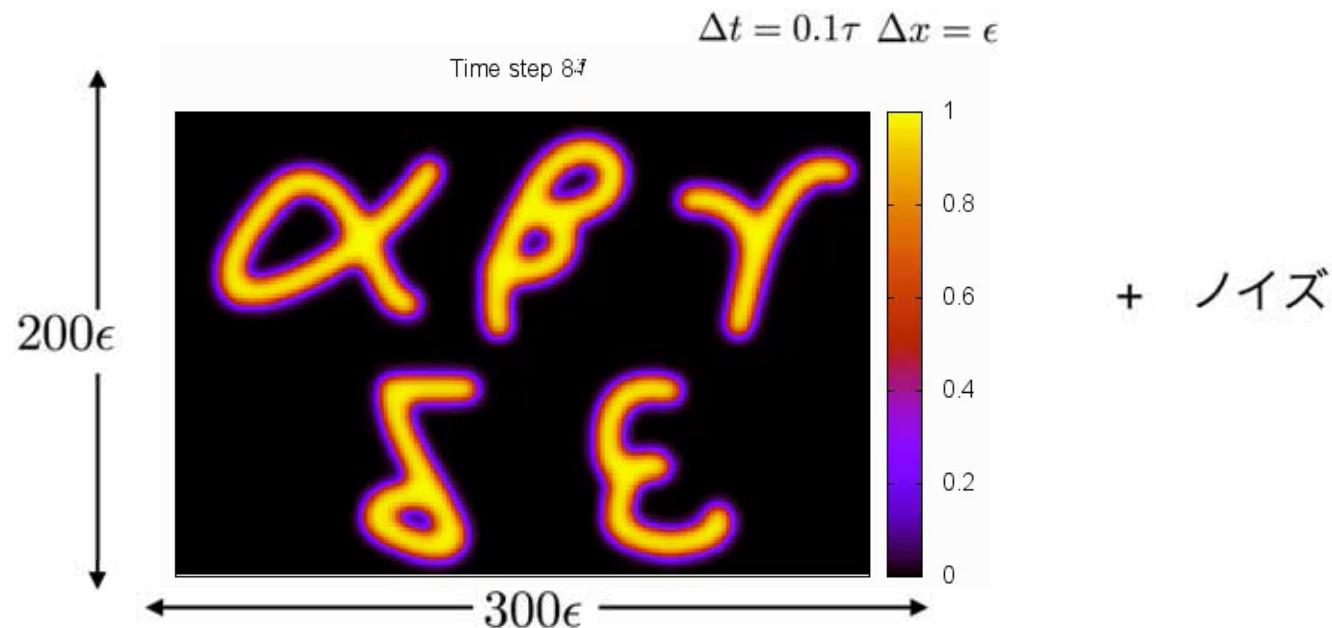
2次元



## 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 $\Phi$ +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？

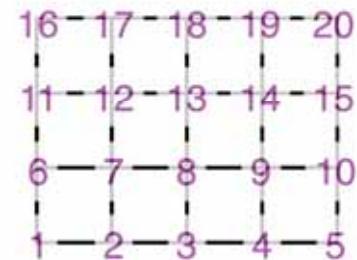
$\tau, \epsilon$ は既知とする(時空間の単位による.)

## 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

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\epsilon^2}{\tau} \Delta \phi + \frac{1}{\tau} \phi (1 - \phi) \left( \phi - \frac{1}{2} + m \right) \\ \frac{\partial m}{\partial t} = 0 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{拘束条件} \\ |m| < \frac{1}{2} \quad 0 < \phi(\mathbf{x}, 0) < 1 \\ \phi \text{は相の存在確率.} \end{array}$$

$$\boldsymbol{\theta}(t) = \left( \boldsymbol{\phi}^\top, m + \frac{1}{2} \right)^\top \quad M \text{ 個の格子点で空間を離散化} \\ \boldsymbol{\phi}(t) = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M)^\top$$



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

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

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

$p(D)$  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  
ミスマッチ

# 事前分布

ベイズの定理

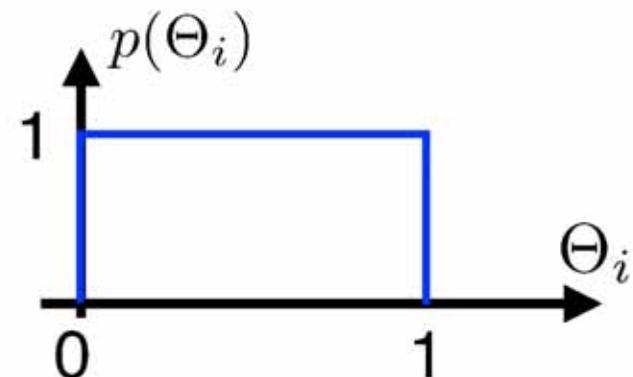
$$p(\Theta|D) = \frac{1}{p(D)} p(\Theta) p(D|\Theta)$$

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

評価関数

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

ただし、 $0 < \Theta_i < 1$

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

○ 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  $\boldsymbol{\Theta}$  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)

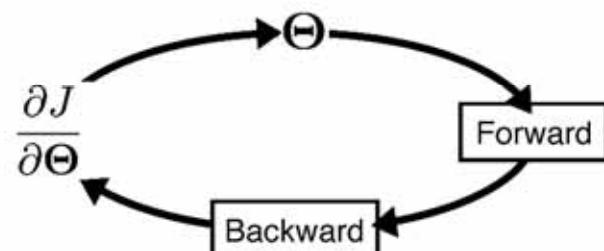
$$J(\boldsymbol{\Theta}) = \int_0^T dt \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}(t)) + \int_0^T dt \boldsymbol{\lambda}^\top \cdot \left( \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} - \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}) \right)$$

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

Forward model

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

Backward: Adjoint model



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

$$\boldsymbol{\lambda}(T) = 0$$

# 拘束条件

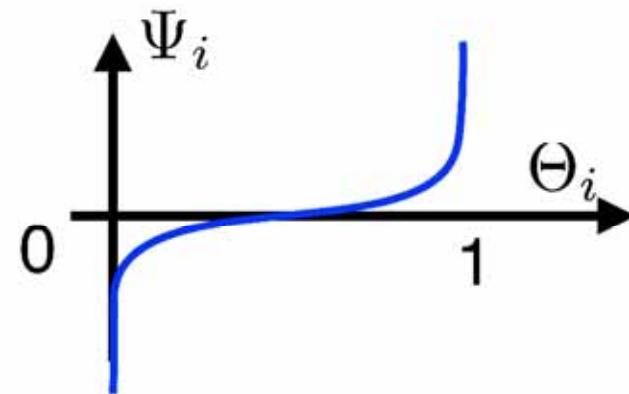
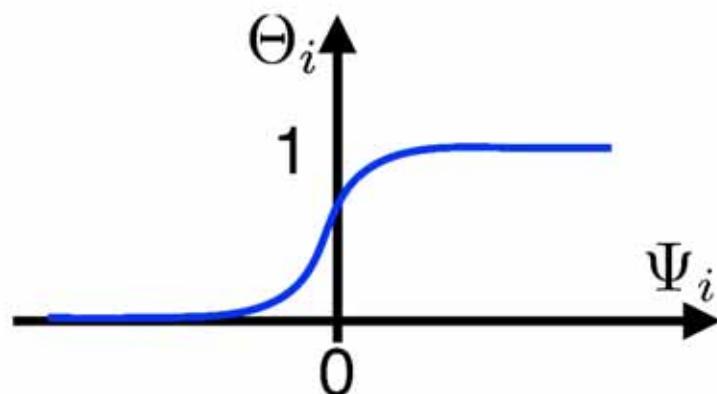
拘束条件を満たすように変数変換、無制約最適化問題へ

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

$$0 < \Theta_i < 1$$

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

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



# Adjoint法まとめ

1. 適当な初期値を設定

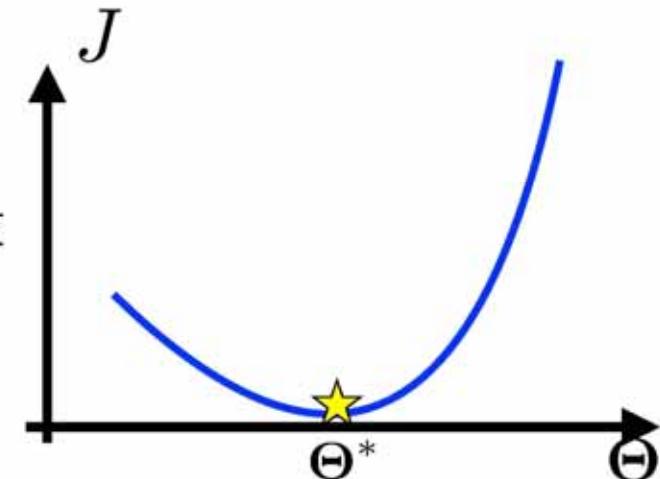
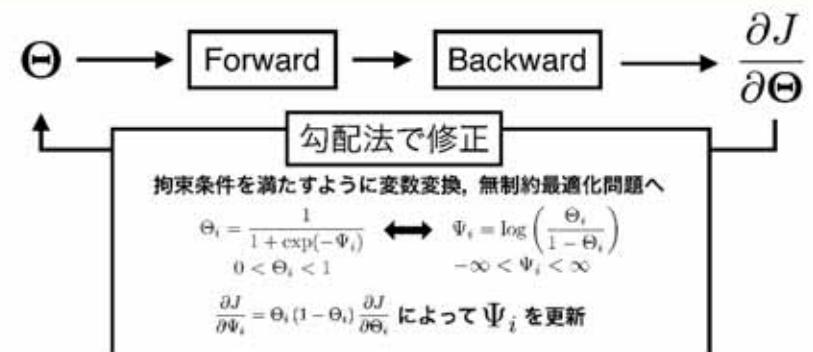
2. Adjoint法により  $\frac{\partial J}{\partial \Theta}$  を計算

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

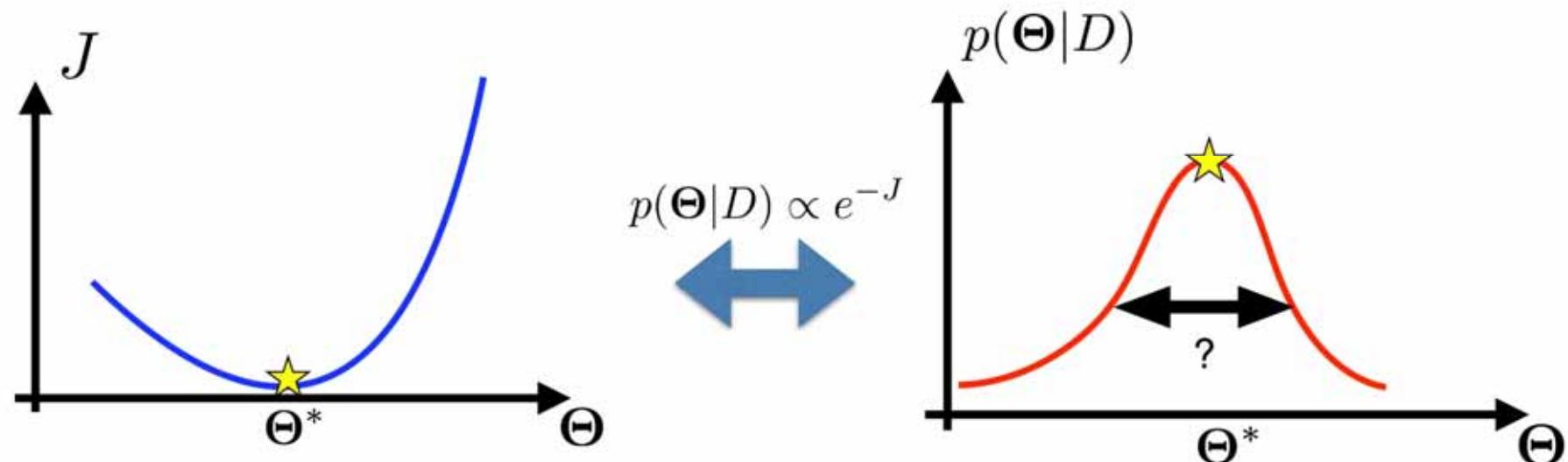
$$\frac{\partial J}{\partial \Psi_i} = \Theta_i (1 - \Theta_i) \frac{\partial J}{\partial \Theta_i} \text{ を計算}$$

4. 勾配法により、 $\Psi_i$  を更新

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

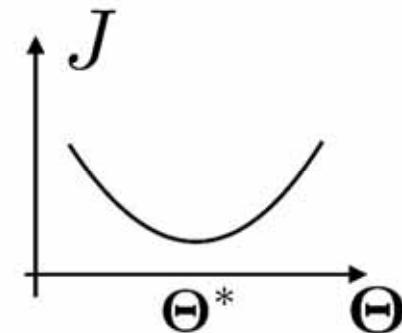
# 誤差推定

## Gaussian 近似

$\Theta^*$ 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。

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



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

$H^{-1}$ : ヘッセ行列  $H = \left. \frac{\partial^2 J}{\partial \Theta^2} \right|_{\Theta=\Theta^*}$  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  $Fr = b$  を解けばいい.

$Fr = b$  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  $Fr$  が計算できればいい

### 2nd-order adjoint 法

#### Forward: Tangent linear model

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

入力

$Fr$

#### Backward: 2nd-order adjoint model

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \left( \frac{\partial F}{\partial \theta} \right)^T \cdot \zeta = \left( \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} \cdot \xi \right)^T \cdot \lambda - \frac{\partial^2 J}{\partial \theta^2} \cdot \xi$$

$$\zeta(0) = \underline{\frac{\partial^2 J}{\partial \Theta^2} \cdot r} \quad \text{出力}$$
$$\zeta(T) = 0$$

# 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  $\Theta^*$  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べる.  
→  $O(K)$ 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

Ito and Nagao *et al.*, submitted

観測データ:

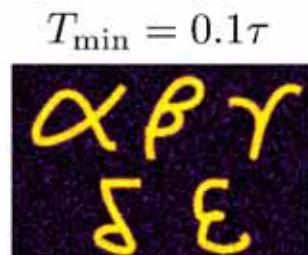
時間区間  $[T_{\min} : T_{\max}]$   
データ間隔  $\Delta T$  での各状態  
+ 標準偏差  $\sigma$  の白色ガウスノイズ

初期状態の真値

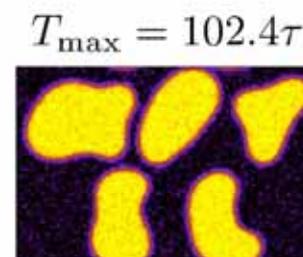


$m$  の真値  $m_{\text{true}} = 0.1$

観測データ例



$$T_{\min} = 0.1\tau$$

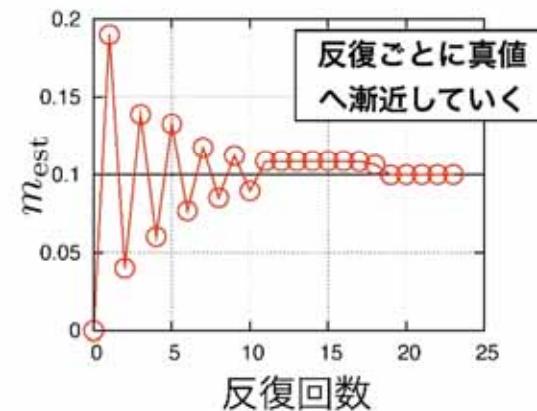
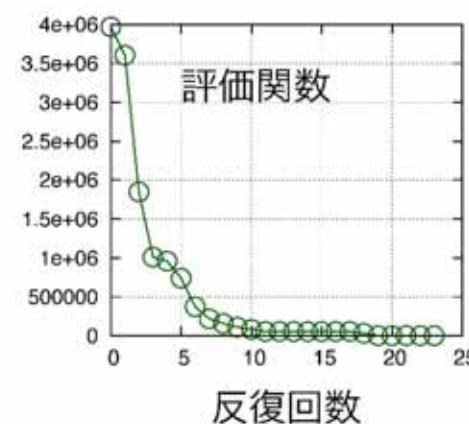


$$T_{\max} = 102.4\tau$$

$$\sigma = 0.01$$

$$\Delta T = 0.1\tau$$

推定の計算例

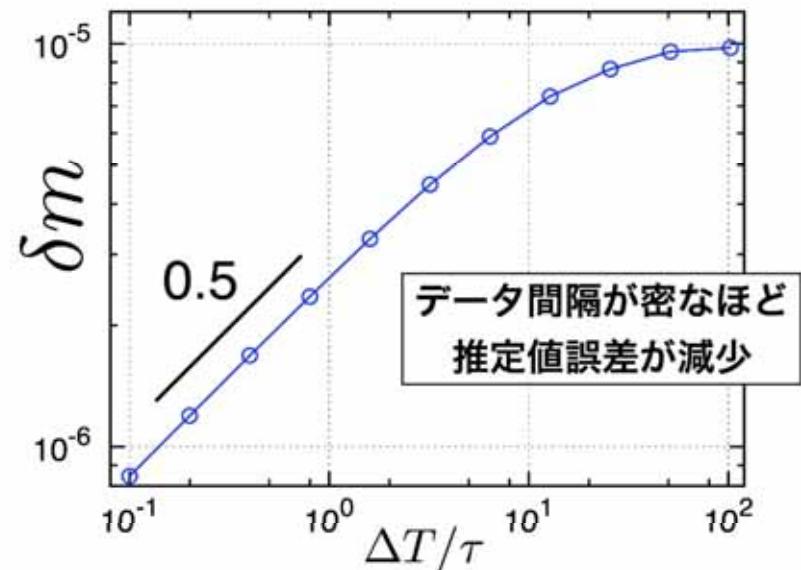
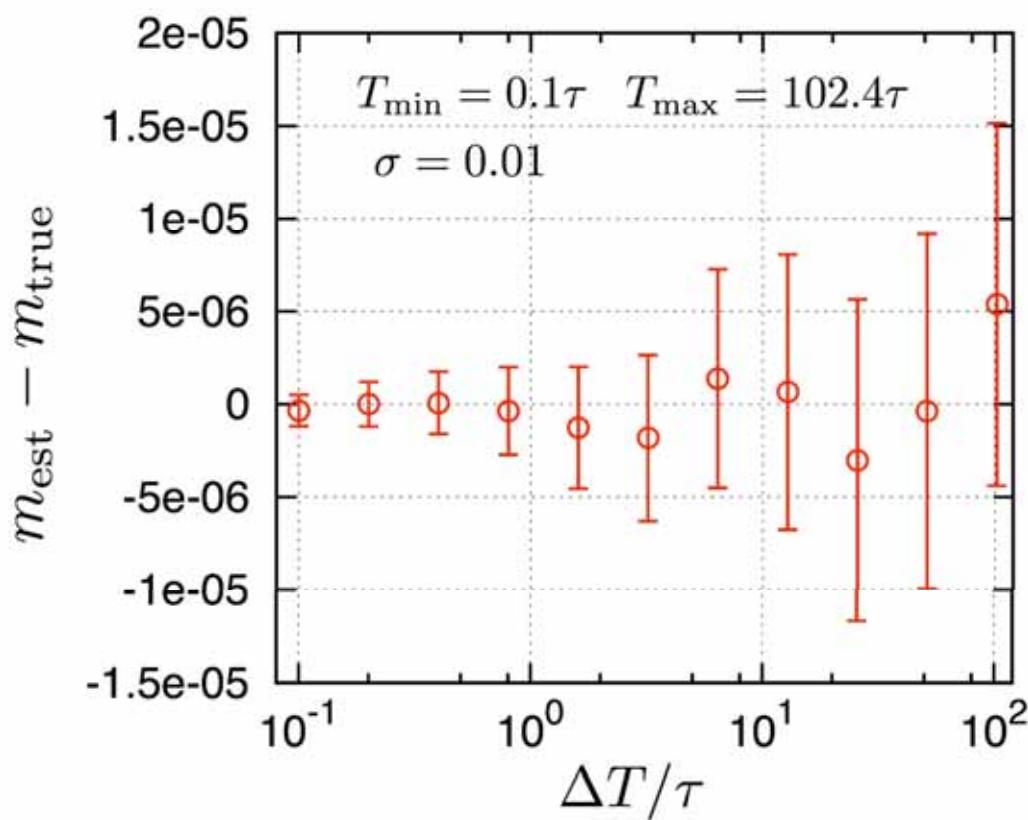


# 双子実験：パラメータ推定

## 推定値と推定値誤差のデータ間隔依存性

Ito and Nagao *et al.*, submitted

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”



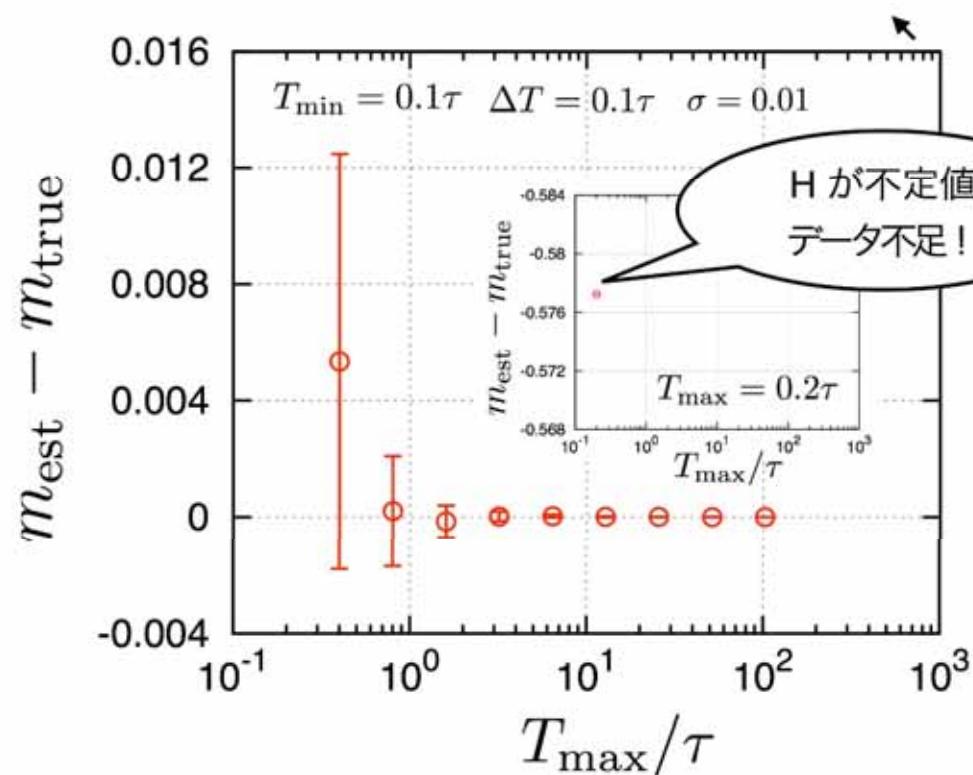
大数の法則が成立している。

# 双子実験：パラメータ推定

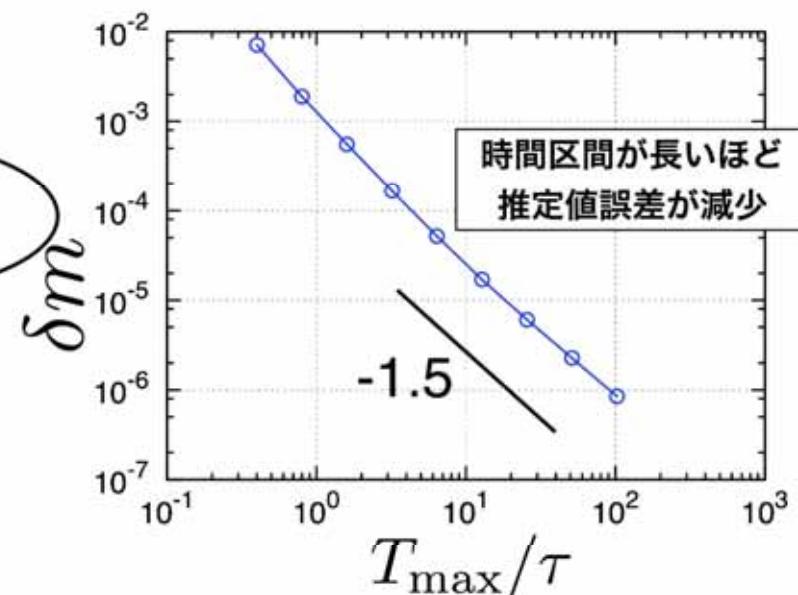
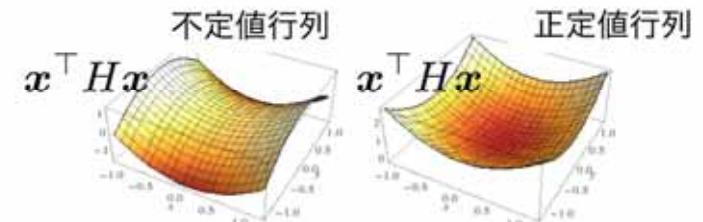
## 推定値と推定値誤差のデータの上限依存性

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

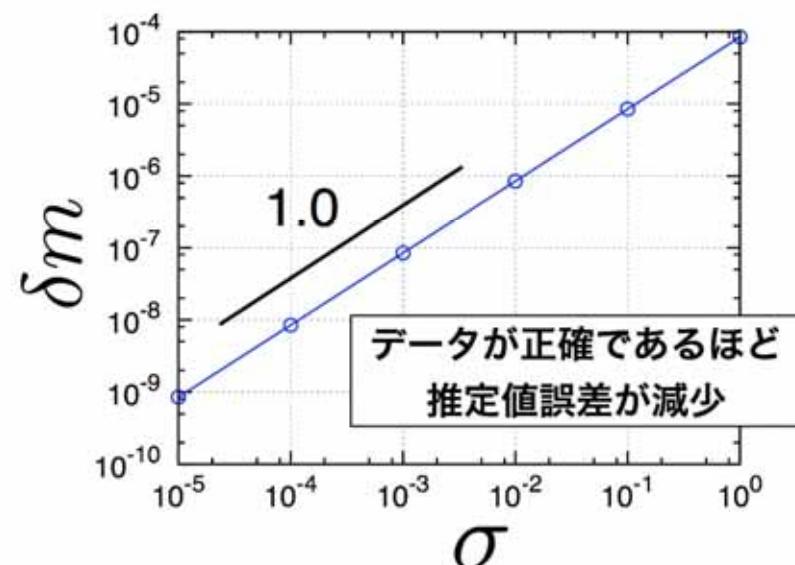
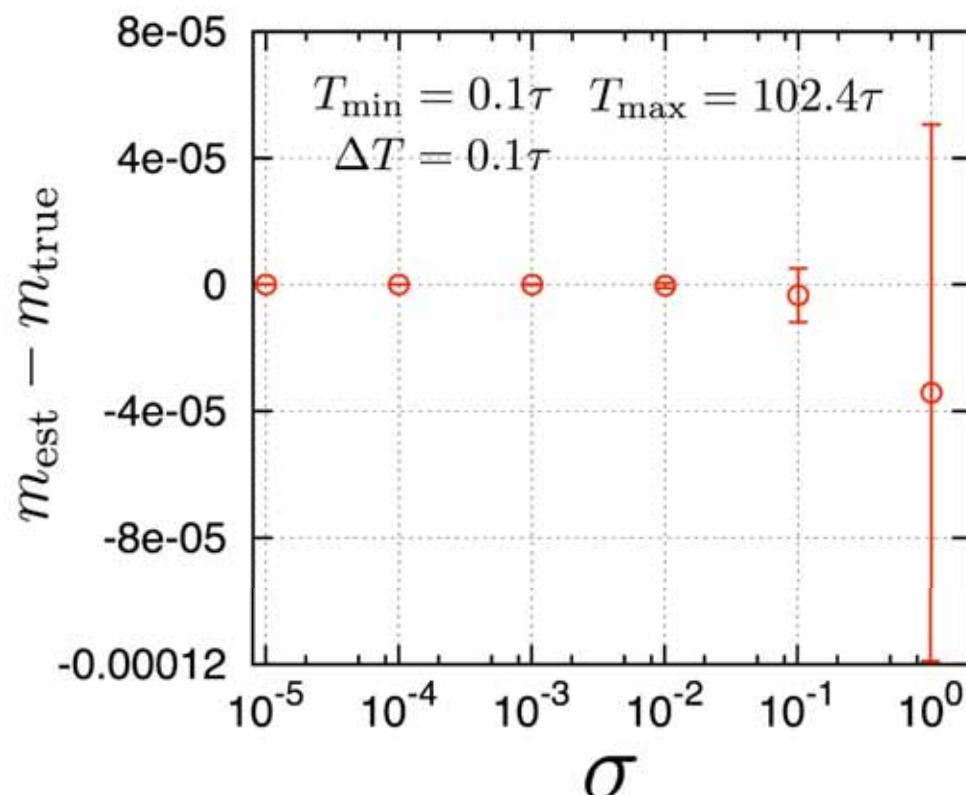


# 双子実験：パラメータ推定

## 推定値と推定値誤差の観測ノイズ依存性

Ito and Nagao *et al.*, submitted

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”



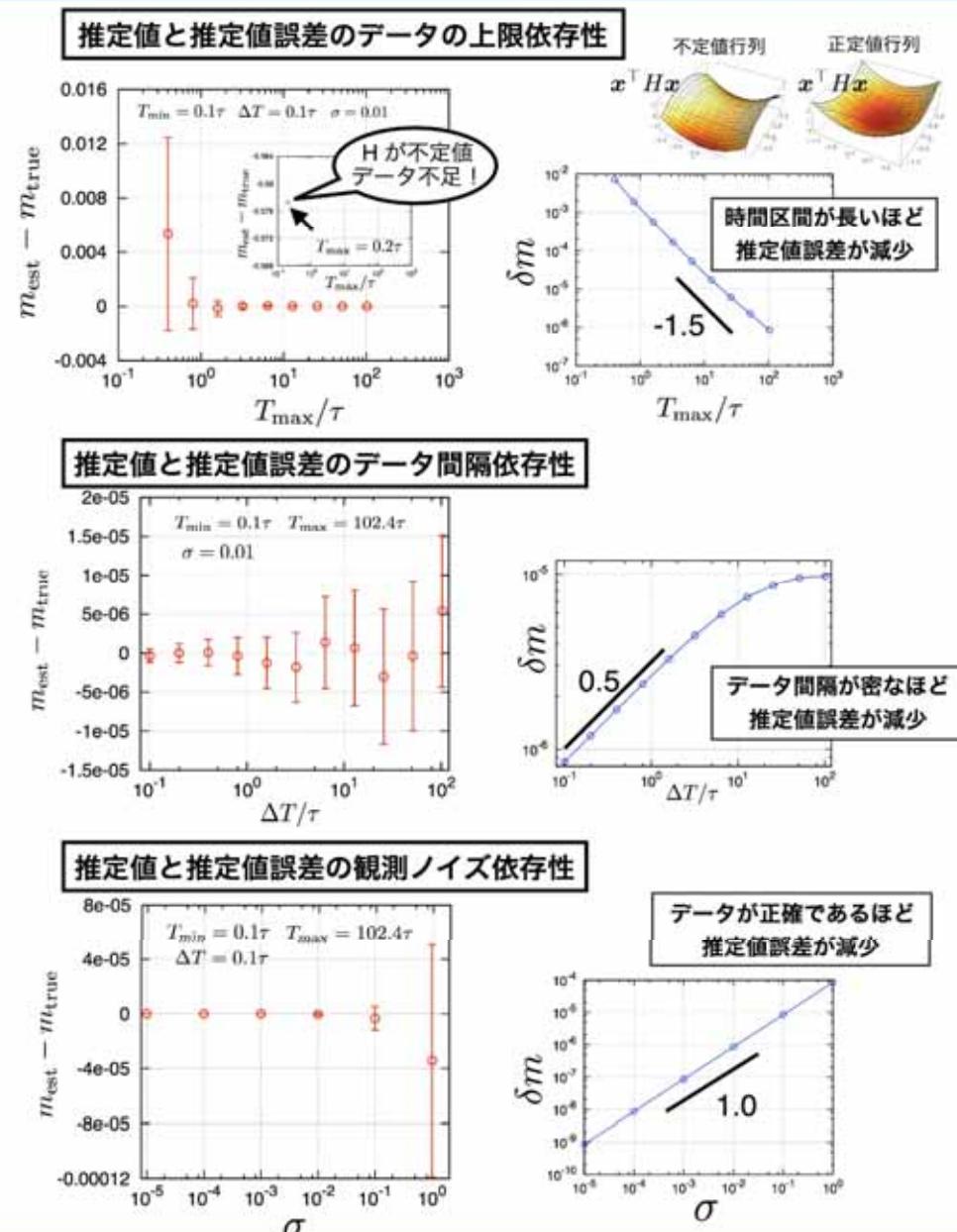
推定誤差は  
観測にかかるノイズに比例する。

# 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



# 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

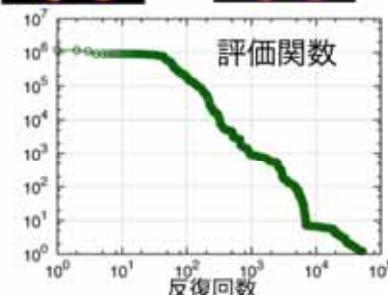
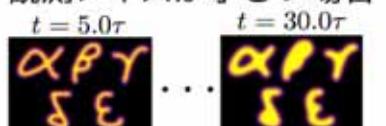
観測データ: 時間区間  $[5.0\tau : 30.0\tau]$

データ間隔  $\Delta T = 0.1\tau$  の状態

+ 標準偏差  $\sigma$  の白色ガウスノイズ

## 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

真の初期状態



$m$  の真値

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

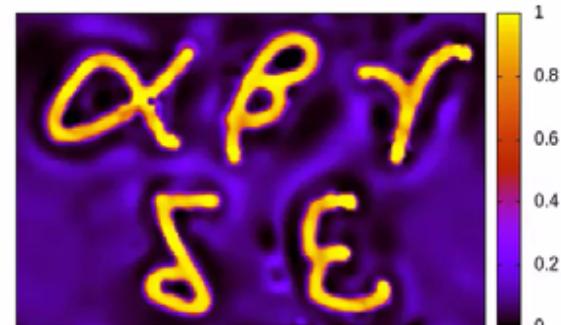
パラメータ・状態の同時推定が可能。

データが正確であるほど、収束が早い。

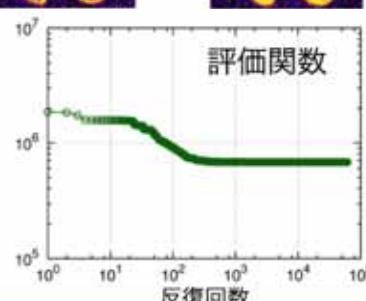
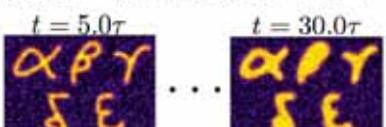
## 初期状態推定

Ito and Nagao et al., submitted

$J = 0.13127 \times 10^3$ , Iteration = 3801



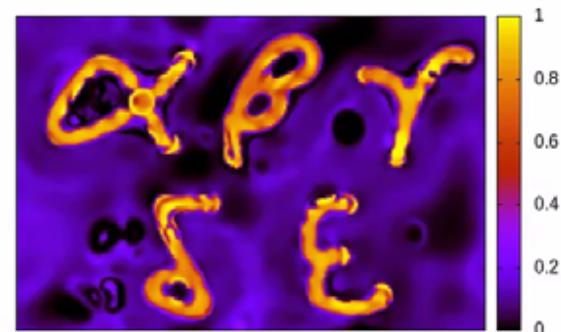
観測ノイズが大きい場合  $\sigma = 0.3$



## パラメータ推定

## 初期状態推定

$J = 0.67807 \times 10^6$ , Iteration = 3801

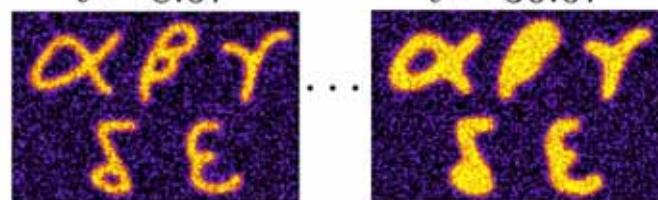


# 双子実験：初期状態推定

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  $\Delta T = 0.1\tau$  での状態

+ 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

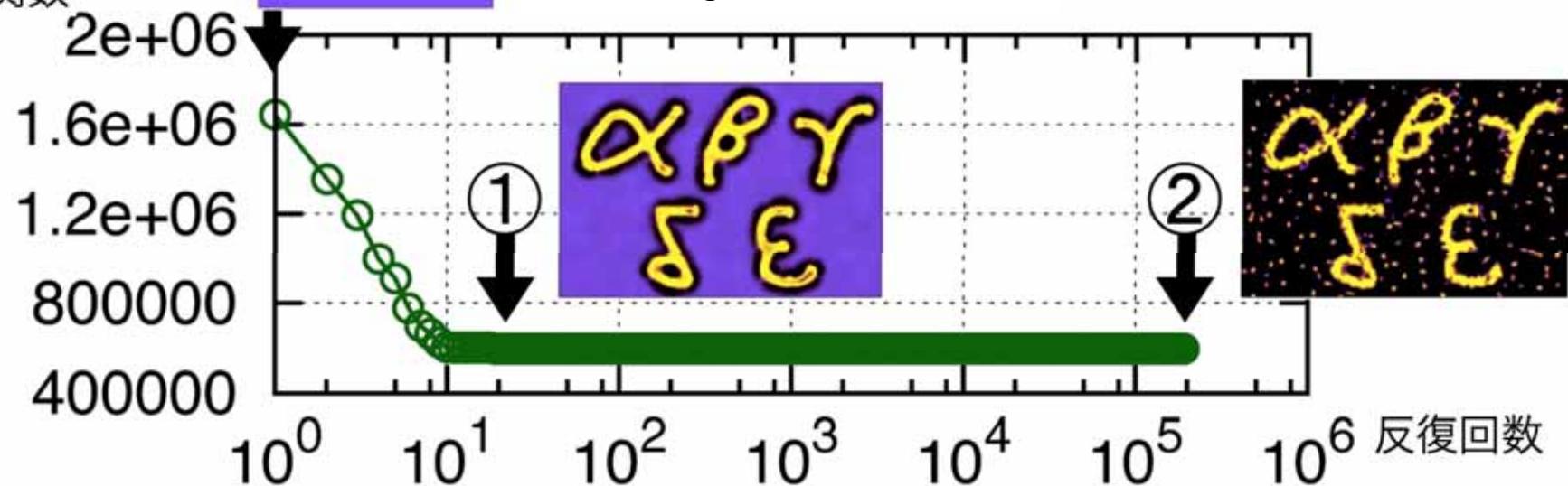


0 0.2 0.4 0.6 0.8 1

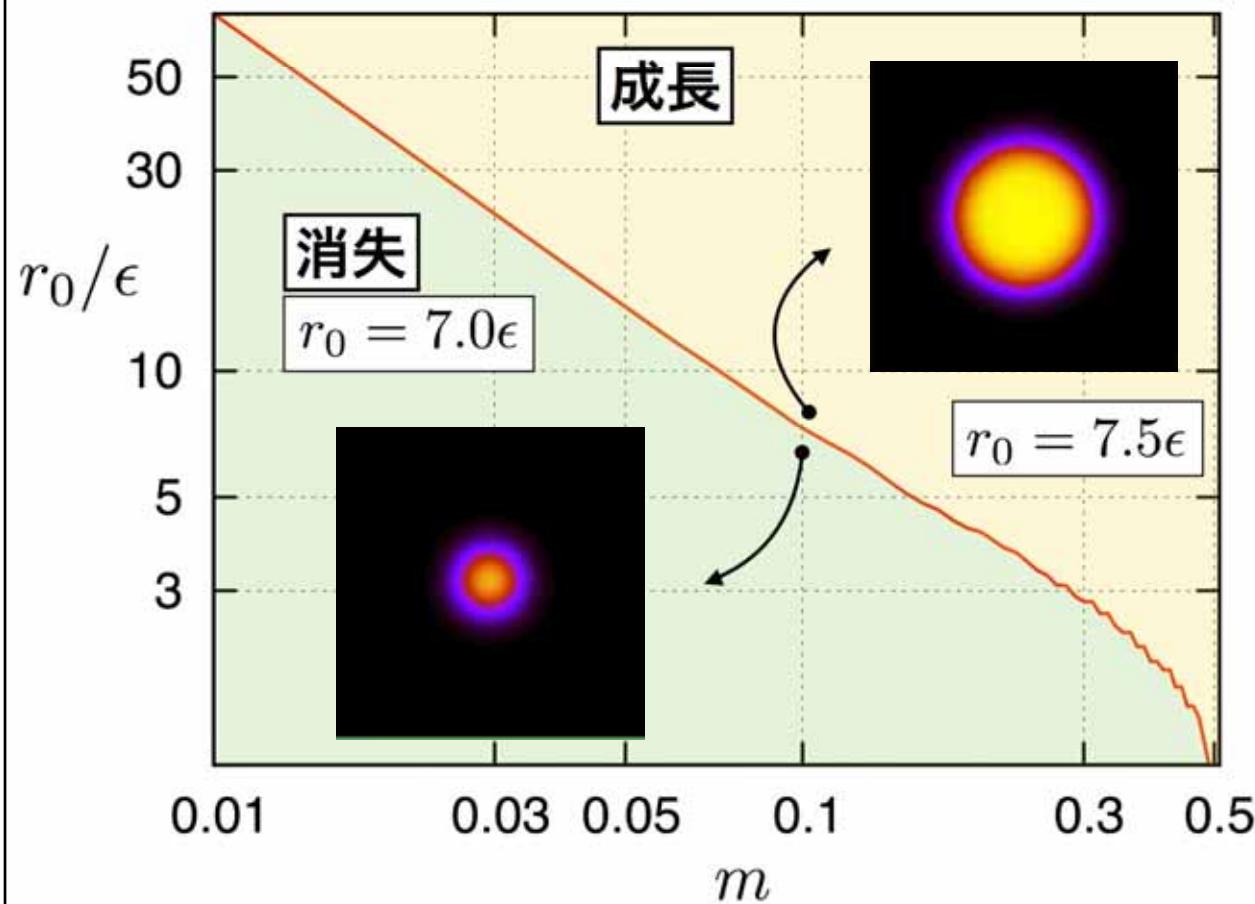
ノイズ誘起による  
状態推定の不定性が発生.

評価関数

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

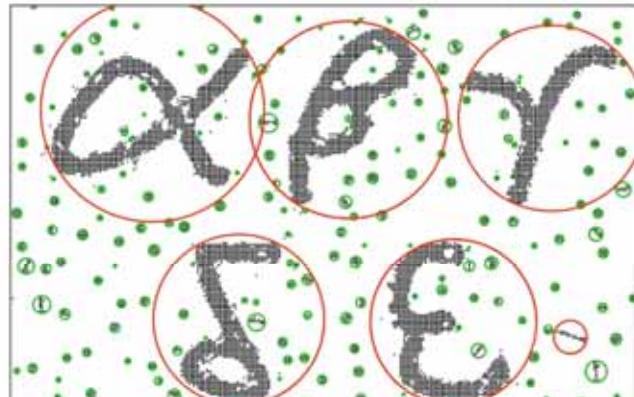
Ito and Nagao *et al.*, submitted

# 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

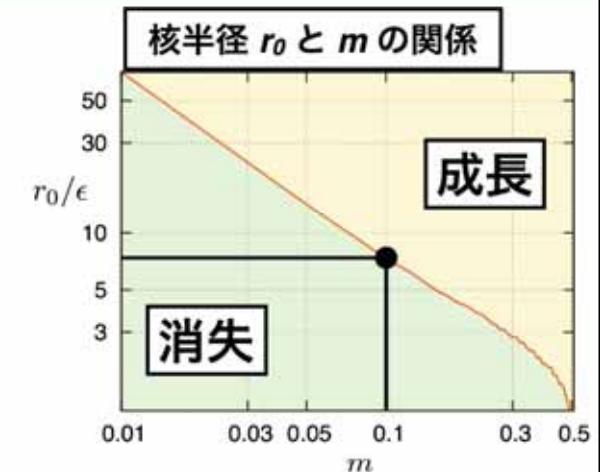
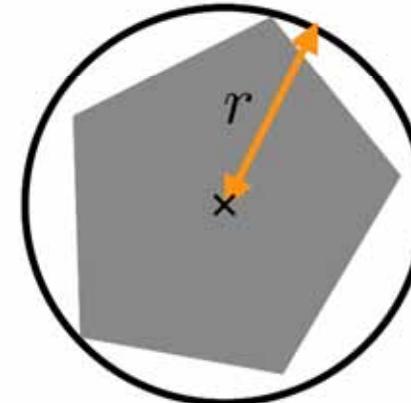


↓  $\phi > 0.5$  のクラスターを抽出

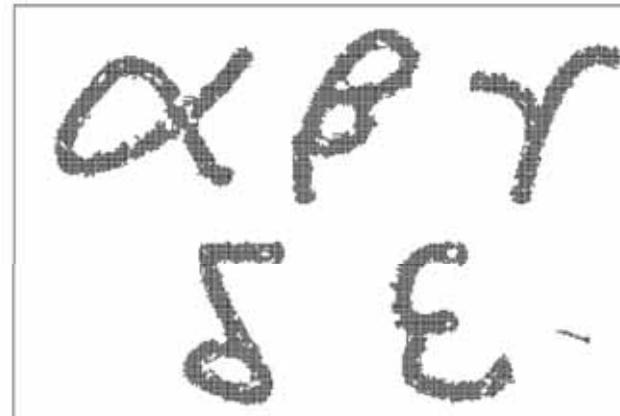


○  $r < 7.3\epsilon$    ○  $r \geq 7.3\epsilon$

最小包含円



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



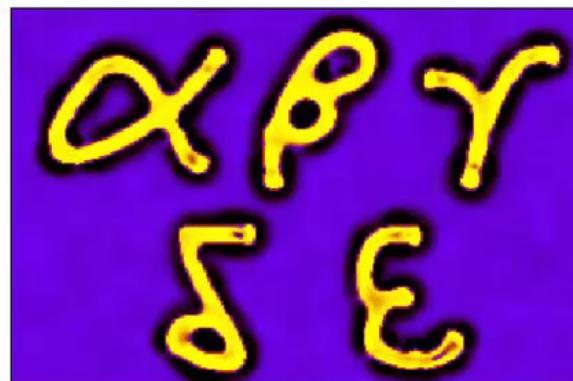
スポットサイズは  
臨界核半径以下

# 推定結果のforward計算

① 反復 31回目

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

$t = 0.0\tau$



② 反復 187621回目

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

$t = 0.0\tau$



Ito and Nagao *et al.*, submitted

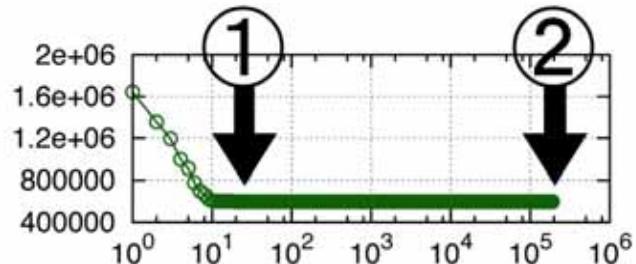
真値  $t = 8.0\tau$



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。

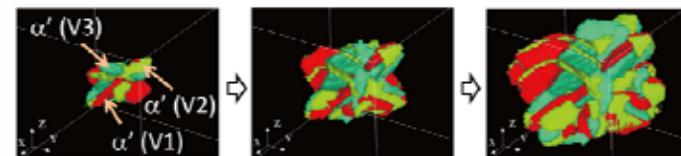
# まとめ・展望

- ☑ 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.

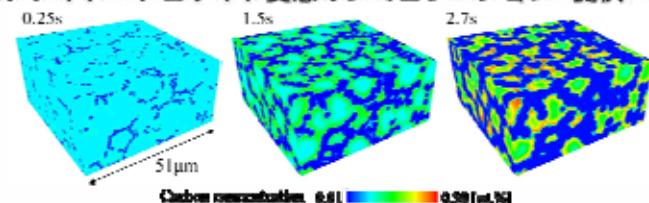
## □ 実在材料への適用・発展

### 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



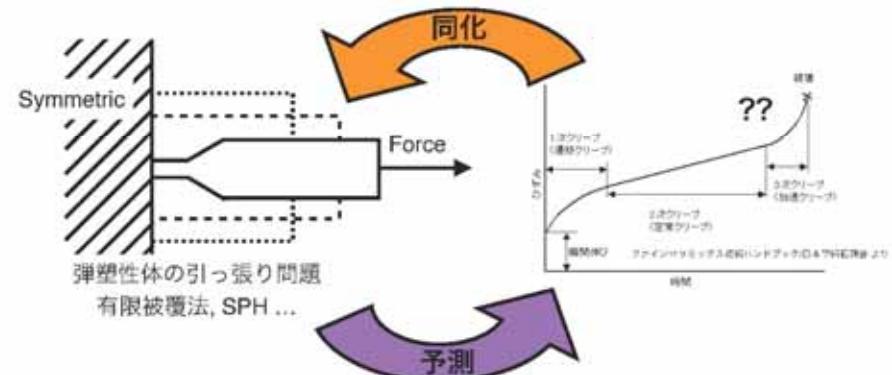
オーステナイト→フェライト変態のシミュレーション 提供: 山中先生



### 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!