1　4 次元変文データ同化

1.1　問題設定

MRI 領域 Ω_m が，$\Delta x_\mathrm{m} \times \Delta y_\mathrm{m} \times \Delta z_\mathrm{m}$ の大きさを持つ M 個のボクセルで分割された状態を考え，各ボクセルが，Δt_m の計測間隔で得た N 個の時系列速度情報を有するとする．これに対し，数値流体力学（CFD）を適用する計算領域 Ω を定義し，CFD 速度を $\mathbf{v}$，CFD 時間刻みを Δt $(\leq \Delta t_m)$ とする．入口境界 Γ_I におけるディリクレ速度を $\mathbf{V}$ と，CFD の初期速度場 $\mathbf{v}^0$ をデータ同化の制御変数とする．

データ同化の定式化にあたり，コスト関数を

$$\mathcal{J}(\mathbf{v}, \mathbf{v}^0, \mathbf{V}) = \mathcal{D}(\mathbf{v}) + \mathcal{R}(\mathbf{v}^0, \mathbf{V}) \tag{1}$$

と定義する．ここで，右辺第 1 項は，計測速度と CFD 速度の誤差を表し

$$\mathcal{D}(\mathbf{v}) = \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \left\| [\mathcal{T}\mathbf{v}]_{i,j} - \mathbf{v}^\mathrm{m}_{i,j} \right\|^2 \Delta x_\mathrm{m} \Delta y_\mathrm{m} \Delta z_\mathrm{m} \Delta t_\mathrm{m} \tag{2}$$

である．ここで，α は誤差関数のハイパーパラメータ，$\mathcal{T}$ は計測オペレータ

$$\mathcal{T} : \mathbf{v} \mapsto \frac{1}{\Delta x_\mathrm{m} \Delta y_\mathrm{m} \Delta z_\mathrm{m}} \int_{\Omega_\mathrm{v}} \mathbf{v} d\Omega \tag{3}$$

であり，MRI の計測原理に基づき，ボクセル領域 Ω_v における速度の空間平滑化効果をモデル化する．また，右辺第 2 項は，正則化項を表し，[1] に基づき，各制御変数に対するノルムを

$$\mathcal{R}(\mathbf{v}^0, \mathbf{V}) = \frac{\beta}{2} \sum_{k=1}^{M} \int_{\Gamma_\mathrm{I}} \left(|\mathbf{V}|^2 + |\partial_s \mathbf{V}|^2 + \left|\dot{\mathbf{V}}\right|^2 + \left|\partial_s \dot{\mathbf{V}}\right|^2 \right) \mathrm{d}\Gamma + \frac{\gamma}{2} \int_{\Omega} \left(\left|\mathbf{v}^0\right|^2 + \left|\partial_s \mathbf{v}^0\right|^2 \right) \mathrm{d}\Omega \tag{4}$$

と与える．ここで，β と γ は正則化項に対するハイパーパラメータである

1.2　最適化手法（Discretise-Then-Optimise Approach）

流体の離散支配方程式を，ナビエ・ストークス方程式と連続の式を用いて

$$\rho \frac{\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{v}^k}{\Delta t} + \rho \left(\frac{3}{2}\mathbf{v}^k - \frac{1}{2}\mathbf{v}^{k-1} \right) \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1/2} + \nabla p^{k+1} - \mu \nabla^2 \mathbf{v}^{k+1/2} + \frac{1}{\rho}\mathbf{K}(\phi)\mathbf{v}^{k+1/2} = \mathbf{0} \tag{5}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{0} \tag{6}$$

と記述する．ここで，移流項に対し 2 次精度 Adams-Bashforth 法，拡散項に対しては Crank-Nicolson 法を用いた．式 (5)，式 (6) に対し，重み付き残差法による弱形式を導き，全 CFD 時間ステップで総和を取ると，拘束条件が

$$\mathcal{F} = \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{F}_k = 0 \tag{7}$$

と表せる．ここで，

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_k = &\int_\Omega \mathbf{w}^{k+1}\cdot\left(\rho\frac{\mathbf{v}^{k+1}-\mathbf{v}^k}{\Delta t}+\rho\left(\frac{3}{2}\mathbf{v}^k-\frac{1}{2}\mathbf{v}^{k-1}\right)\cdot\nabla\mathbf{v}^{k+1/2}+\nabla p^{k+1}-\mu\nabla^2\mathbf{v}^{k+1/2}+\frac{1}{\rho}\mathbf{K}(\phi)\mathbf{v}^{k+1/2}\right)\mathrm{d}\Omega\\ &+\int_\Omega q^{k+1}(\nabla\cdot\mathbf{v}^{k+1})\,\mathrm{d}\Omega-\int_{\Gamma_1}\lambda^{k+1}\cdot(\mathbf{v}^{k+1}-\mathbf{V}^{k+1})\,\mathrm{d}\Gamma-\int_{\Gamma_1}\boldsymbol{\eta}^{k+1}\cdot(\mathbf{w}^{k+1}-\mathbf{0})\,\mathrm{d}\Gamma=\mathbf{0}\end{aligned} \tag{8}$$

であり，右辺第 7 項は入口の速度ディリクレ境界条件，第 8 項は重み関数 $\mathbf{w}$ の境界条件である．数値安定化手法に，SUPG/PSPG 法を用いたが，煩雑を避け，これらの項は省略する．さらに，目的関数・拘束条件を合わせた Lagrange 関数

$$\mathcal{L}=\mathcal{F}+\mathcal{J} \tag{9}$$

より，制約なし最小化問題を

$$\min_{\mathbf{v}^0,\mathbf{V}}\mathcal{L} \tag{10}$$

と定義する．

制御変数のコスト関数に対する感度導出にあたり，随伴変数法を用いる．主問題は，$\mathbf{w}$，q，$\boldsymbol{\lambda}$ に関するガトー微分より，

$$^t\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{w}},\tilde{\mathbf{w}}\right\rangle=\begin{pmatrix}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{w}^1},\tilde{\mathbf{w}}^1\right\rangle\\ \vdots\\ \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{w}^N},\tilde{\mathbf{w}}^N\right\rangle\end{pmatrix}=\mathbf{0},\quad {}^t\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q},\tilde{q}\right\rangle=\begin{pmatrix}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q^1},\tilde{q}^1\right\rangle\\ \vdots\\ \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q^N},\tilde{q}^N\right\rangle\end{pmatrix}=\mathbf{0},\quad {}^t\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\lambda}},\tilde{\boldsymbol{\lambda}}\right\rangle=\begin{pmatrix}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\lambda}^1},\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^1\right\rangle\\ \vdots\\ \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\lambda}^N},\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^N\right\rangle\end{pmatrix}=\mathbf{0} \tag{11}$$

と表され，各時間ステップ k $(1\le k\le N)$ において

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{w}^k},\tilde{\mathbf{w}}^k\right\rangle=&\int_\Omega\left(\tilde{\mathbf{w}}^{k+1}\cdot\rho\frac{\mathbf{v}^{k+1}-\mathbf{v}^k}{\Delta t}+\tilde{\mathbf{w}}^{k+1}\cdot\rho\left(\frac{3}{2}\mathbf{v}^k-\frac{1}{2}\mathbf{v}^{k-1}\right)\cdot\nabla\mathbf{v}^{k+1/2}+p^{k+1}(\nabla\cdot\tilde{\mathbf{w}}^k)\right.\\ &\left.-\mu\nabla\tilde{\mathbf{w}}^{k+1}:\mathbf{v}^{k+1/2}+\tilde{\mathbf{w}}^{k+1}\cdot\frac{1}{\rho}\mathbf{K}(\phi)\mathbf{v}^{k+1/2}\right)\mathrm{d}\Omega-\int_{\Gamma_1}\boldsymbol{\eta}^{k+1}\cdot\tilde{\mathbf{w}}^{k+1}\,\mathrm{d}\Gamma=0\end{aligned} \tag{12}$$

$$\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q^k},\tilde{q}^k\right\rangle=\int_\Omega\tilde{q}^k(\nabla\cdot\mathbf{v}^{k+1})\,\mathrm{d}\Omega=0 \tag{13}$$

$$\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\lambda}^k},\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^k\right\rangle=\int_{\Gamma_1}\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^k\cdot(\mathbf{v}^{k+1}-\mathbf{V}^{k+1})\,\mathrm{d}\Gamma=0 \tag{14}$$

とそれぞれ記述できる．

次に，随伴問題は，$\mathbf{v}$，p，$\boldsymbol{\eta}$ に関するガトー微分より，

$$^t\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{v}},\tilde{\mathbf{v}}\right\rangle=\begin{pmatrix}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{v}^1},\tilde{\mathbf{v}}^1\right\rangle\\ \vdots\\ \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{v}^N},\tilde{\mathbf{v}}^N\right\rangle\end{pmatrix}=\mathbf{0},\quad {}^t\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial p},\tilde{p}\right\rangle=\begin{pmatrix}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial p^1},\tilde{p}^1\right\rangle\\ \vdots\\ \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial p^N},\tilde{p}^N\right\rangle\end{pmatrix}=\mathbf{0},\quad {}^t\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\eta}},\tilde{\boldsymbol{\eta}}\right\rangle=\begin{pmatrix}\left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\eta}^1},\tilde{\boldsymbol{\eta}}^1\right\rangle\\ \vdots\\ \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\eta}^N},\tilde{\boldsymbol{\eta}}^N\right\rangle\end{pmatrix}=\mathbf{0} \tag{15}$$

と表され，各時間ステップ k $(1 \le k \le N)$ において

$$
\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle = &\int_\Omega \Bigg(\rho \frac{\mathbf{w}^k - \mathbf{w}^{k+1}}{\Delta t} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k + \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^k \cdot \left(3\mathbf{v}^{k-1} - \mathbf{v}^{k-2} \right) \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k + \frac{3\rho}{4} \mathbf{w}^{k+1} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1} \\
&+ \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^{k+1} \cdot \left(3\mathbf{v}^k - \mathbf{v}^{k-1} \right) \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k - \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^{k+2} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1} - \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^{k+2} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^k \\
&+ q^{k+1} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}^{k+1}) - \frac{\mu}{2} \left(\nabla \mathbf{w}^k + \nabla \mathbf{w}^{k+1} \right) : \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k + \frac{1}{2\rho} \left(\mathbf{w}^k + \mathbf{w}^{k+1} \right) \cdot \mathbf{K}(\phi) \tilde{\mathbf{v}}^k \Bigg) \mathrm{d}\Omega \\
&+ \int_{\Gamma_1} \lambda^{k+1} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \, \mathrm{d}\Gamma + \alpha \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \left([\mathcal{T} \mathbf{v}]_{i,j} - \mathbf{v}^{\mathrm{m}}_{i,j} \right) \tilde{\mathbf{v}}^k \Delta x_{\mathrm{m}} \Delta y_{\mathrm{m}} \Delta z_{\mathrm{m}} \Delta t_{\mathrm{m}} = 0
\end{aligned}
\tag{16}
$$

$$
\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p^k}, \tilde{p}^k \right\rangle = \int_\Omega \tilde{p}^k (\nabla \cdot \mathbf{w}^k) \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{17}
$$

$$
\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\eta}^k}, \tilde{\boldsymbol{\eta}}^k \right\rangle = \int_{\Gamma_1} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^k \cdot \mathbf{w}^k \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{18}
$$

とそれぞれ記述できる（Appendix A）．ここで，式（16）に関して

$$
\begin{cases}
\mathbf{v}^{k-2} = \mathbf{v}^0 & \text{for } k = 1 \\
\mathbf{w}^{k+2} = \mathbf{0} & \text{for } k = N-1 \\
\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{w}^{k+2} = \mathbf{0} & \text{for } k = N
\end{cases}
\tag{19}
$$

であり，時間逆発展させ解を求める．

最後に，主問題，随伴問題より得た変数から，初期条件と，各時間ステップ k $(1 \le k \le N)$ における入口速度境界条件の感度

$$
\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}^0}, \tilde{\mathbf{v}}^0 \right\rangle = &\gamma \int_\Omega \left(\mathbf{v}^0 \cdot \tilde{\mathbf{v}}^0 + \partial_s \mathbf{v}^0 \cdot \tilde{\mathbf{v}}^0 \right) \mathrm{d}\Omega + \int_\Omega \Bigg(\rho \frac{\mathbf{w}^1}{\Delta t} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^0 - \frac{3\rho}{4} \mathbf{w}^1 \cdot \tilde{\mathbf{v}}^0 \cdot \nabla \mathbf{v}^1 - \frac{\rho}{2} \mathbf{w}^1 \cdot \mathbf{v}^0 \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k \\
&+ \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^2 \cdot \tilde{\mathbf{v}}^0 \cdot \nabla \mathbf{v}^1 + \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^2 \cdot \tilde{\mathbf{v}}^0 \cdot \nabla \mathbf{v}^0 + \frac{\mu}{2} \nabla \mathbf{w}^1 : \nabla \tilde{\mathbf{v}}^0 - \frac{1}{2\rho} \mathbf{w}^1 \cdot \mathbf{K}(\phi) \tilde{\mathbf{v}}^0 \Bigg) \mathrm{d}\Omega
\end{aligned}
\tag{20}
$$

$$
\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{V}^k}, \widetilde{\mathbf{V}}^k \right\rangle = \beta \int_{\Gamma_\mathrm{I}} \left(\mathbf{V}^k \cdot \widetilde{\mathbf{V}}^k + \partial_s \mathbf{V}^k \cdot \widetilde{\mathbf{V}}^k + \dot{\mathbf{V}}^k \cdot \widetilde{\mathbf{V}}^k + \partial_s \dot{\mathbf{V}} \cdot \widetilde{\mathbf{V}}^k \right) \mathrm{d}\Gamma - \int_{\Gamma_\mathrm{I}} \lambda \cdot \widetilde{\mathbf{V}}^k \mathrm{d}\Gamma \tag{21}
$$

を導出し，これらを用いて，制御変数を

$$
\mathbf{v}^0_{n+1} = \mathbf{v}^0_n - \tau_1 \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}^0}, \tilde{\mathbf{v}}^0 \right\rangle \tag{22}
$$

$$
\mathbf{V}^k_{n+1} = \mathbf{V}^k_n - \tau_2 \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{V}^k}, \tilde{\mathbf{V}}^k \right\rangle \tag{23}
$$

と最急降下法に基づき逐次更新する．n は最適化ステップ数を表し，τ_1 と τ_2 は Armijo 条件より決定したそれぞれの更新幅である．

Appendix A　v に対するガトー微分

ラグランジュ関数の $\mathbf{v}$ でのガトー微分について，式 (15) のベクトル k 成分は,

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle = \begin{cases} \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{k-1}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_k}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{k+1}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle & \text{for } 1 \leq k < N-1 \\ \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{k-1}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_k}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle & \text{for } k = N-1 \\ \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{k-1}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle & \text{for } k = N \end{cases} \tag{24}$$

であり，右辺はそれぞれ

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle = \alpha \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \left([\mathcal{T}\mathbf{v}]_{i,j} - \mathbf{v}^{\mathrm{m}}_{i,j} \right) \tilde{\mathbf{v}}^k \Delta x_{\mathrm{m}} \Delta y_{\mathrm{m}} \Delta z_{\mathrm{m}} \Delta t_{\mathrm{m}} \tag{25}$$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{k-1}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle = \int_\Omega \left(\mathbf{w}^k \cdot \rho \frac{\tilde{\mathbf{v}}^k}{\Delta t} + \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^k \cdot \left(3\mathbf{v}^{k-1} - \mathbf{v}^{k-2} \right) \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k - \frac{\mu}{2} \nabla \mathbf{w}^k : \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k + \frac{1}{2\rho} \mathbf{w}^k \cdot \mathbf{K}(\phi) \tilde{\mathbf{v}}^k \right) \mathrm{d}\Omega \tag{26}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_k}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle = \int_\Omega \Bigg(& - \mathbf{w}^{k+1} \cdot \rho \frac{\tilde{\mathbf{v}}^k}{\Delta t_{\mathrm{CFD}}} + \frac{3\rho}{4} \mathbf{w}^{k+1} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1} + \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^{k+1} \cdot \left(3\mathbf{v}^k - \mathbf{v}^{k-1} \right) \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k \\ & - \frac{\mu}{2} \nabla \mathbf{w}^{k+1} : \nabla \tilde{\mathbf{v}}^k + \frac{1}{2\rho} \mathbf{w}^{k+1} \cdot \mathbf{K}(\phi) \tilde{\mathbf{v}}^k \Bigg) \mathrm{d}\Omega \end{aligned} \tag{27}$$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{k+1}}{\partial \mathbf{v}^k}, \tilde{\mathbf{v}}^k \right\rangle = \int_\Omega \left(- \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^{k+2} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^{k+1} - \frac{\rho}{4} \mathbf{w}^{k+2} \cdot \tilde{\mathbf{v}}^k \cdot \nabla \mathbf{v}^k \right) \mathrm{d}\Omega \tag{28}$$

と表せる.