データ同化の数理 (Ver. 0.1)

竹田航太

2025 年 10 月 9 日

■更新情報

- 2025/10/09: Ver. 0.1

目次

第 I 部

はじめに

第 1 章

データ同化の概要

本書は洋書 [3, 4] などをもとに作成している.

第 2 章

読者のためのガイド

2.1　本書の位置付け

本書に含まれていない内容については洋書を参照せよ．例えば，確率微分方程式のフィルタリング理論については [2] がある．

(WIP)

2.2　記号リスト

$\mathbb{R}$ 実数全体の集合
$\mathbb{R}^n$ n 次元ユークリッド空間
$\mathbb{R}^{m\times n}$ $m \times n$ 行列全体の集合
$\mathbb{N}$ 自然数全体の集合
$\mathbb{Z}$ 整数全体の集合
$\mathbb{E}$ 期待値
Ω 標本空間
$\mathcal{F}$ σ-代数
$\mathbb{P}$ 確率測度
U 確率変数
H 観測作用素
$\boldsymbol{y}$ 観測ベクトル
$\boldsymbol{u}$ 状態ベクトル

第 II 部

データ同化の数学的準備

第 3 章

線形逆問題

3.1 本章の要点

データ同化では，観測データから状態ベクトルを推定することが基本的な目的である．数学的には，観測という操作に対する逆問題として定式化される．本章では，その中でも基本的な線形逆問題を扱う．

3.2 行列

行列 $A \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2}$ について，$\mathrm{rank}(A) = \min(N_1, N_2)$ であるとき，A はフルランクであるといい，そうでない時はランク落ちもしくは退化しているという．行列の計算については，[1] などを参照せよ．

3.3 線形観測

状態ベクトル $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{N_u}$ から観測ベクトル $y \in \mathbb{R}^{N_y}$ を得る過程を観測という．

定義 3.1 (線形観測)**.** 観測行列 $H \in \mathbb{R}^{N_y \times N_u}$ を用いて，観測ベクトル $y \in \mathbb{R}^{N_y}$ が以下のように得られるとき，線形観測という．

$$\boldsymbol{y} = H\boldsymbol{u} + \eta. \tag{3.1}$$

ここで，$\eta \in \mathbb{R}^{N_y}$ は観測ノイズを表すベクトルである．特に，ノイズがない場合（$\eta = \boldsymbol{0}$）の場合はノイズなし線形観測という．

観測行列 H がフルランクであるとき，ノイズがない線形観測値 $\boldsymbol{y}$ に逆行列 H^{-1} をかけることで，状態ベクトル $H^{-1}\boldsymbol{y} = H^{-1}H\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}$ が復元される．このように，線形観測から状態ベクトルを推定することを線形逆問題という．一般に，逆問題は不良設定問題であることが多い．つまり，解が存在しない，一意に定まらない，もしくは解が $\boldsymbol{y}$ の変化に敏感に依存するような場合がある．

例 3.2 (ノイズなし線形観測の不良設定の例)**.** $N_u = 2$，$N_y = 1$ のとき，観測行列 H が以下のような場合を考える．

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.2}$$

このとき，観測ベクトル $\boldsymbol{y}$ は以下のように表される．

$$\boldsymbol{y} = H\boldsymbol{u} = (u_1). \tag{3.3}$$

ここで，u_1 は $\boldsymbol{u}$ の第 1 成分である．このとき，$\boldsymbol{u} = (u_1, u_2)$ と $\boldsymbol{u}' = (u_1, u_2')$ は同じ $\boldsymbol{y}$ を与える．

3.4　最小二乗法

線形逆問題をある種の最適化問題として定式化する際に，最小二乗法がよく用いられる．ここでは，最小二乗法を幾何学的・代数的な視点から説明する．

補題 3.3 (射影定理)**.** 空でない閉凸部分集合 $K \subset \mathbb{R}^{N_u}$ と $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{N_u}$ を考える．このとき，$\boldsymbol{y}$ の K への射影 $\boldsymbol{u}^* = \Pi_K \boldsymbol{y}$ が一意に定まる．つまり，以下の最小二乗解が一意に定まる．

$$\boldsymbol{u}^* = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{u} \in K} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{u}\|^2. \tag{3.4}$$

Proof. (WIP) □

補題 3.4 (残差の直交性)**.** 閉部分空間 $W \subset \mathbb{R}^{N_u}$ と $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{N_u}$ に対して，以下は同値.

$$\boldsymbol{u}^* = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{u} \in W} \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{b}\|^2 \Leftrightarrow (\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{b}) \perp W. \tag{3.5}$$

Proof. (WIP) □

補題 3.5 (正規方程式)**.** 観測行列 $H : \mathbb{R}^{N_y \times N_u}$ と観測ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{N_y}$ に対し，以下は同値.

$$\boldsymbol{u}^* \in \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{N_u}} \|\boldsymbol{y} - H\boldsymbol{u}\|^2 \Leftrightarrow H^\top H \boldsymbol{u}^* = H^\top \boldsymbol{y}. \tag{3.6}$$

Proof. (WIP) □

観測行列 H がフルランクでない場合は正規方程式 (3.6) の解は一意でないことに注意が必要である．

補題 3.6 (Tikhonov 正則化)**.**

Proof. (WIP) □

より一般に状態空間，観測空間での内積を取り換えることで，重みつきの最小二乗法を考えることができる．

補題 3.7 (重みつき Tikhonov 正則化)**.**

Proof. (WIP) □

第 4 章

確率的定式化とベイズ逆問題

4.1　本章の要点

3 章で扱った観測値から状態を逆推定する問題を確率的に定式化するために必要な確率論の基礎を導入する．

4.2　確率論

学部生までの確率論の知識は前提とする．必要に応じて確率論の教科書を参照せよ．標本空間 Ω, σ-代数 $\mathscr{F}$，および確率測度 $\mathbb{P}$ に対し，$(\Omega, \mathscr{F}, \mathbb{P})$ を完備確率空間とする．確率変数 $U : \Omega \to \mathbb{R}^l$ は $\mathbb{R}^l$ 上の確率測度 μ_X を以下のように誘導する．

$$\mu_U(A) = \mathbb{P}(U^{-1}(A)). \tag{4.1}$$

この μ_U を U の分布と呼ぶ．ある関数 $p_U : \mathbb{R}^l \to [0, \infty)$ が存在して，任意のボレル集合 $A \subset \mathbb{R}^l$ に対し

$$\mu_U(A) = \int_A p_U(u) du, \tag{4.2}$$

が成り立つ時，p_U を U の確率密度関数 (Probability Density Function: PDF) と呼ぶ．確率変数 U と確率測度 μ について，$\mu_U = \mu$ が成り立つ時，U は μ に従うといい，$U \sim \mu$ と表記する．確率密度関数 p についても，同様の表記 $U \sim p$ を用いる．

定義 4.1 ($\mathbb{R}^l$ 上のガウス分布)**.** ベクトル $\varpi \in \mathbb{R}^l$ および行列 $C \in \mathcal{L}_{sa}(\mathbb{R}^l)$ で $C \succ 0$ を満たすものに対し，平均 ϖ および共分散 C を持つガウス分布は，以下の確率密度関数を持つ確率分布である．

$$p(u) = \frac{1}{\sqrt{\det C(2\pi)^l}} \exp\left(-\frac{1}{2}|u - \varpi|_C^2\right). \tag{4.3}$$

これを $\mathcal{N}(\varpi, C) \in \mathcal{M}_1(\mathbb{R}^l)$ と表記する．さらに，$\mathbb{R}^l$-値確率変数 U がガウス確率変数であるとは，ある $\varpi \in \mathbb{R}^l$ および $C \in \mathcal{L}_{sa}(\mathbb{R}^l)$ で $C \succ 0$ を満たすものが存在して，$U \sim \mathcal{N}(\varpi, C)$ を満たすことをいう．

4.3 確率的線形逆問題

線形逆問題に対する最小二乗法を確率・統計的視点から正当化する．(WIP)

4.4 ベイズ逆問題

(WIP)

第 5 章

微分方程式と力学系

5.1 本章の要点

データ同化における典型的な力学モデルとしての微分方程式や力学系の基礎を導入する.

5.2 常微分方程式

Gronwall の不等式や半群の理論について, [3] や https://kotatakeda.github.io/math/pdf/dynamical_model.pdf も参照せよ. (WIP)

第 6 章

数値積分法

6.1　本章の要点

応用上に現れる微分方程式から時間発展を計算するための数値積分法について紹介する．
(WIP)

第 III 部

データ同化問題

第 7 章

データ同化問題の定式化

7.1　本章の要点

ある一定の時間間隔ごとに観測値が得られる状況を考える．対象の系が連続時間のモデル化をしていても，観測時刻間の状態の時間発展を一つの写像として扱うことで，離散時間状態空間モデルの定式化を考えることができる．状態空間モデルに対して，ベイズ的な枠組みで一般的にデータ同化問題を条件付き確率分布を計算する問題として定式化する．条件付けのために，過去の観測値のみ用いるか，未来の観測値も用いるかという点が問題を分ける要素となる．各データ同化問題に対応する状態推定分布の一般的な性質や関係について述べる．

7.2　状態空間

離散時間の定式化を扱う．

7.3　ベイズデータ同化問題

第 8 章

連続時間フィルタリング問題

8.1　本章の要点

確率微分方程式と連続時間観測を用いたフィルタリング問題の定式化を紹介する．一般的な有限次元系を想定した定式化が基本である．線形ガウス系に対しては，最適なフィルタとして連続時間のカルマンフィルタが得られる．一般の系に対しては，非線形フィルタリング問題を解くための確率微分方程式が得られるが，解析的には解けないため近似アルゴリズムを用いる．離散時間の定式化と比べて解析的に取り扱いやすい．

第 9 章

連続データ同化

9.1　本章の要点

偏微分方程式などの発展方程式に対して，ノイズのない連続時間観測を用いたデータ同化問題の定式化を紹介する．Navier-Stokes 方程式に代表されるように，エネルギー散逸構造を持ち，有限次元のコンパクトアトラクタを持つ系を想定した定式化が基本である．そのような系の自由度の有限次元性に由来する有限次元観測による軌道の追跡可能性を議論する．

第 IV 部

データ同化アルゴリズム

第 10 章

フィルタリングアルゴリズム

10.1　本章の要点

本章では，フィルタリング問題に対するアルゴリズムについて紹介する．まず理論的に取り扱い易い線形ガウス系という状態空間モデルの特別な場合を考える．この場合，状態推定分布がガウス分布に閉じ,「最適な」フィルタリングアルゴリズムとしてカルマンフィルタが得られる．線形ガウス系以外にも適用できるように，カルマンフィルタを拡張したアルゴリズムがいくつか提案されているがいずれも最適ではなく，フィルタリング分布を近似できない．一方で，モンテカルロ法に基づく粒子フィルタは，粒子数無限大でフィルタリング分布を再現できるが計算コストが高い．さらに，これらのアルゴリズムに対して限られた計算リソースや観測値からより良い推定を行うための改良技術についても紹介する．

10.2　カルマンフィルタとその拡張

10.3　粒子フィルタ

10.4　改良技術

第 11 章

スムージングアルゴリズム

11.1 本章の要点

解析時刻より未来の観測値を用いるスムージング問題を解くためのアルゴリズムを紹介する．変分的な手法とベイズ的な手法の 2 つを扱う．

11.2 変分法

11.3 MCMC

第 V 部

数学解析

第 VI 部

応用例と実装

参考文献

[1] R. A. Horn and C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, New York, NY, second edition, corrected reprint ed., 2017.

[2] A. H. Jazwinski, *Stochastic Processes and Filtering Theory*, Dover publications, Inc., Mineola, New York, dover edition ed., 2007.

[3] K. J. H. Law, A. M. Stuart, and K. C. Zygalakis, *Data Assimilation: A Mathematical Introduction*, Springer, 2015.

[4] S. Reich and C. Cotter, *Probabilistic Forecasting and Bayesian Data Assimilation*, Cambridge University Press, Cambridge, 2015.