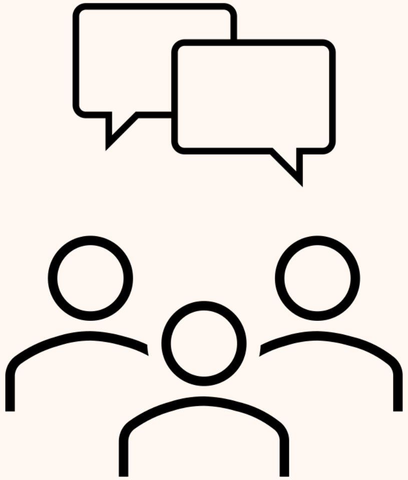
UQと数理流体力学から はじめる学際研究の可能性

竹田航太

京都大学 理学研究科 数学教室,　理研 R-CCS データ同化研究チーム

講演の目的

- ✓ **若手の応用数学者の活発な議論を促進.**
- ✓ **学際研究について考えてもらう.**
- ✓ 私の宣伝.　（研究の**背景**と学際的視点）



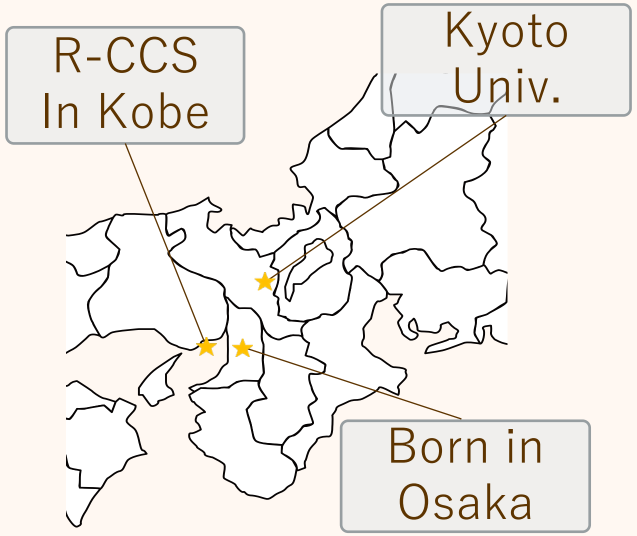
目次

目次

1. 竹田 航太

京都大学 理学研究科 数学教室 **D1**

理研 R-CCS データ同化研究チーム **JRA**



竹田航太の個人サイト

↓

1-1. 竹田 航太｜経歴

- 2016年 3月 大阪府立住吉高等学校 卒業
- 2016年 4月京都大学 理学部 入学
- 2020年 3月 京都大学 理学部 数学系 卒業
- 2022年 3月 京都大学 数学教室 修士課程 修了
- 2022年 4月 京都大学 数学教室 博士後期課程 進学
  理研 R-CCS データ同化研究チーム JRA

現在

1-1. 竹田 航太｜経歴

- 2016年 3月 **大阪府立住吉高等学校** 卒業
- 2016年 4月京都大学 理学部 入学
- 2020年 3月 京都大学 理学部 数学系 卒業
- 2022年 3月 京都大学 数学教室 修士課程 修了
- 2022年 4月 京都大学 数学教室 博士後期課程 進学
  理研 R-CCS データ同化研究チーム JRA

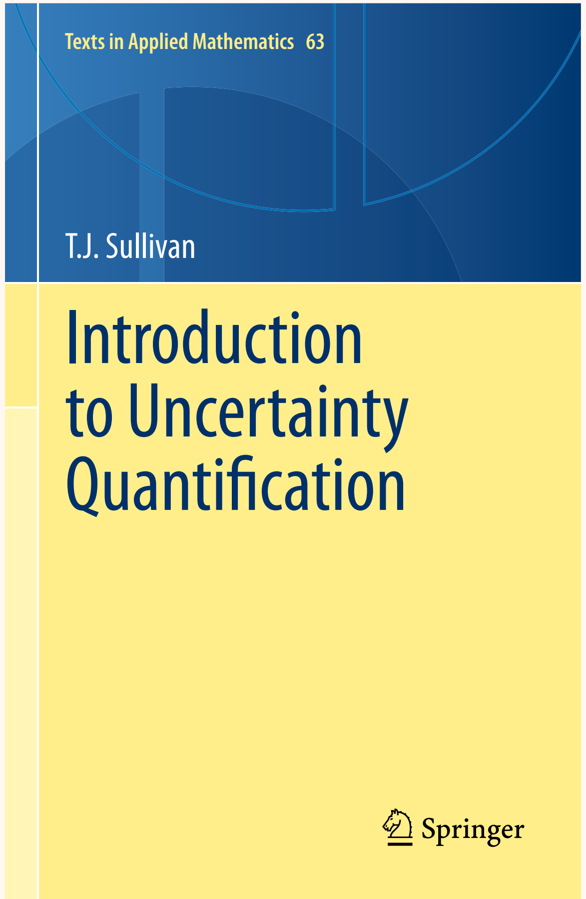
1-1. 竹田 航太 | 学部

- 2016年 3月 大阪府立住吉高等学校 卒業
- 2016年 4月京都大学 理学部 入学

  流体力学に興味.

  4年生でUQの本を読みました.
- 2020年 3月 京都大学 理学部 数学系 卒業
- 2022年 3月 京都大学 数学教室 修士課程 修了
- 2022年 4月 京都大学 数学教室 博士後期課程 進学

  理研 R-CCS データ同化研究チーム JRA



1-1. UQ | Uncertainty Quantification

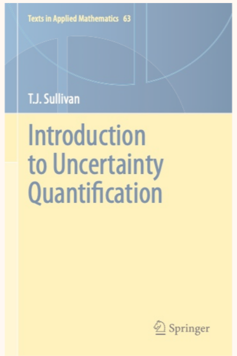
・・・不確実性の定量化

確率・統計理論の応用全般を指す.
数理モデルを伴うものに興味がある.

確率微分方程式	モンテカルロ近似	ベイズ推定
最適化理論	データ同化	機械学習

1-1. 竹田 航太｜修士

- 2016年 3月 大阪府立住吉高等学校 卒業
- 2016年 4月京都大学 理学部 入学

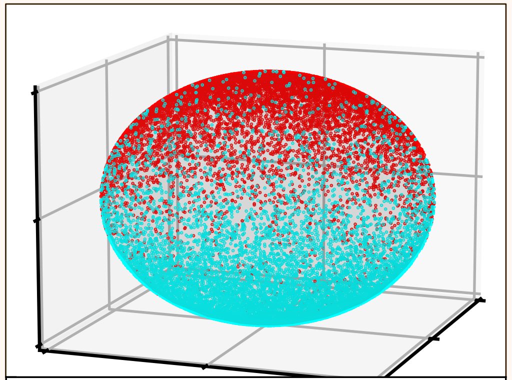


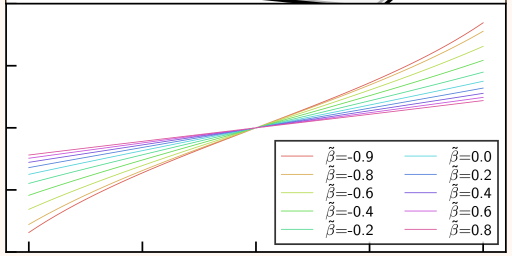
← 4年生でUQの本を読みました.

- 2020年 3月 京都大学 理学部 数学系 卒業

テーマ｜HMCによる球面上*N*点渦系の不変測度の計算（後述）

- 2022年 3月 京都大学 数学教室 修士課程 修了
- 2022年 4月 京都大学 数学教室 博士後期課程 進学
  理研 R-CCS データ同化研究チーム JRA

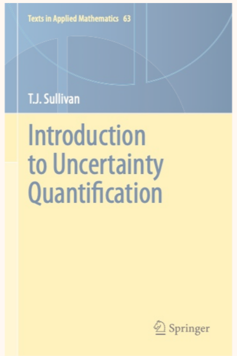




1-1. 竹田 航太｜博士

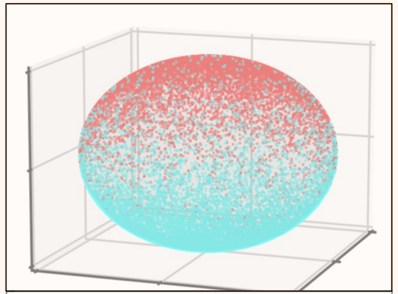
- 2016年 3月 大阪府立住吉高等学校 卒業
- 2016年 4月京都大学 理学部 入学

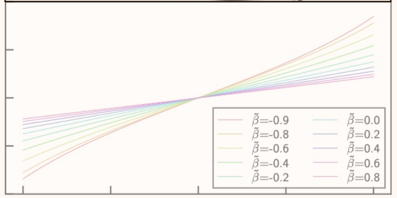
←------------------------ 4年生でUQの本を読みました.



- 2020年 3月 京都大学 理学部 数学系 卒業

←------------------------ テーマ｜球面上N点渦系の不変測度のモンテカルロ近似





- 2022年 3月 京都大学 数学教室 修士課程 修了
- 2022年 4月 京都大学 数学教室 博士後期課程 進学
  理研 R-CCS データ同化研究チーム JRA

テーマ｜”トポロジカルフロー”データ同化(後述)

1-2. 竹田 航太｜その他の活動

2019年 9月～2022年3月	株式会社 activo｜webエンジニア
2021年6月～現在	NPO法人 clack｜プログラミング教育支援ボランティア
2022年～現在	大阪府立住吉高校｜SSH課題研究支援

1-2. 竹田 航太｜その他の活動

2019年 9月 ～2022年3月 **株式会社 activo｜webエンジニア**

2021年6月～現在 NPO法人 clack｜プログラミング教育支援ボランティア

2022年～現在 大阪府立住吉高校｜SSH課題研究支援

Web開発.

使用言語(わかる人向け)

JavaScript, Ruby on Rails, …

ボランティア募集サイト

https://activo.jp/

1-2. 竹田 航太｜その他の活動

2019年 9月～2022年3月	株式会社 activo｜webエンジニア
2021年6月～現在	**NPO法人 clack｜プログラミング教育支援ボランティア**
2022年～現在	大阪府立住吉高校｜SSH課題研究支援

新大阪や堺，五反田で教室展開中.
私は**オンライン**で支援...

clack

貧困家庭の高校生に、
プログラミング学習支援 と キャリア支援 で
自走の力を。

https://clack.ne.jp/

1-2. 竹田 航太｜その他の活動

2019年 9月～ 2022年3月	株式会社 activo｜webエンジニア
2021年6月～ 現在	NPO法人 clack｜プログラミング教育支援ボランティア
2022年～ 現在	**大阪府立住吉高校｜SSH課題研究支援**

課題研究や**プログラミング教育**

の支援をしています.

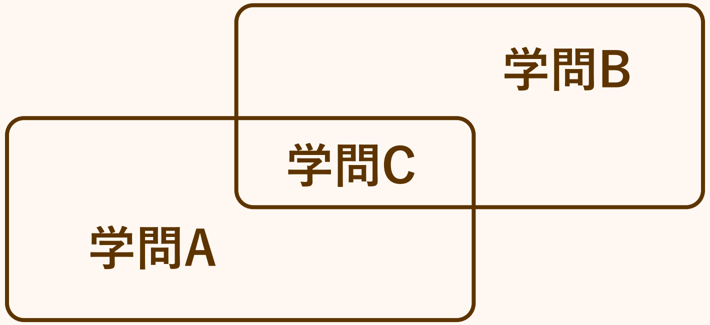
https://www.osaka-c.ed.jp/sumiyoshi/

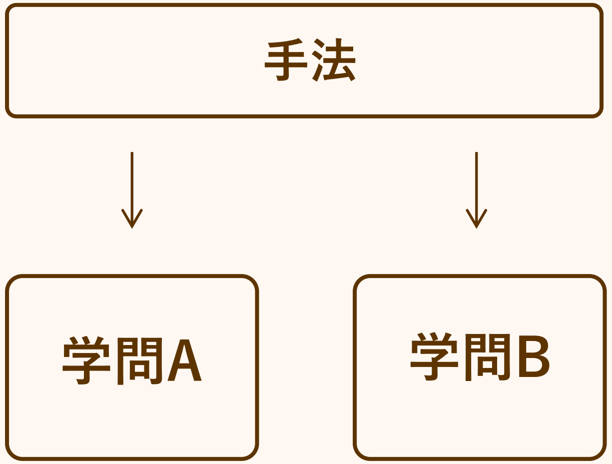
目次

私見を述べさせていただきます…

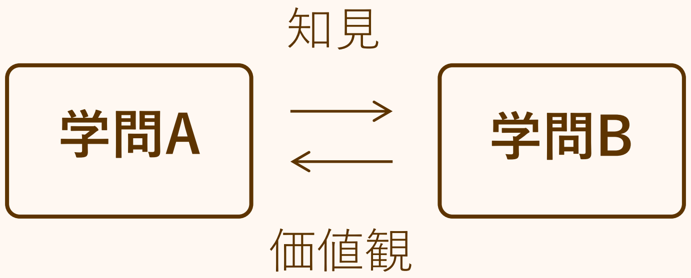
2-1. 学際研究のいろいろな形

今回は以下のパターンに注目.





研究交流

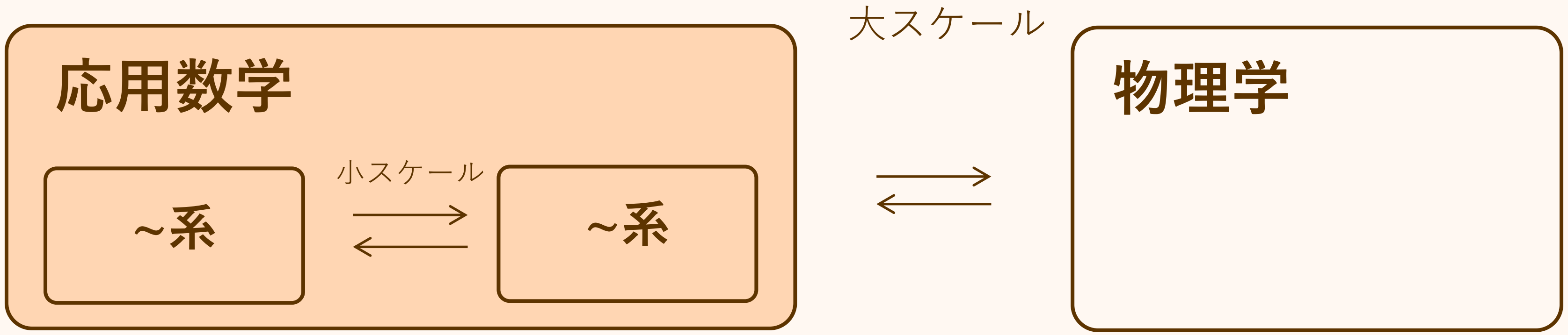


2-1. 研究交流

さまざまな研究交流の「**スケール**」がある.

今回は応用数学周辺に注目する.

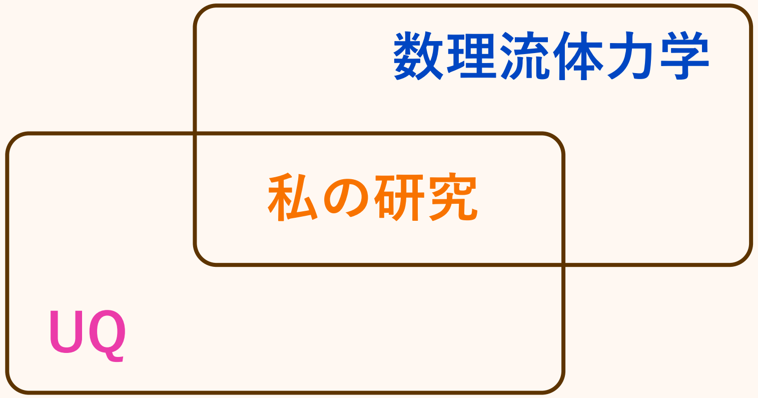
今回はここの議論が活発になればgood!



2-2. 私の研究テーマ

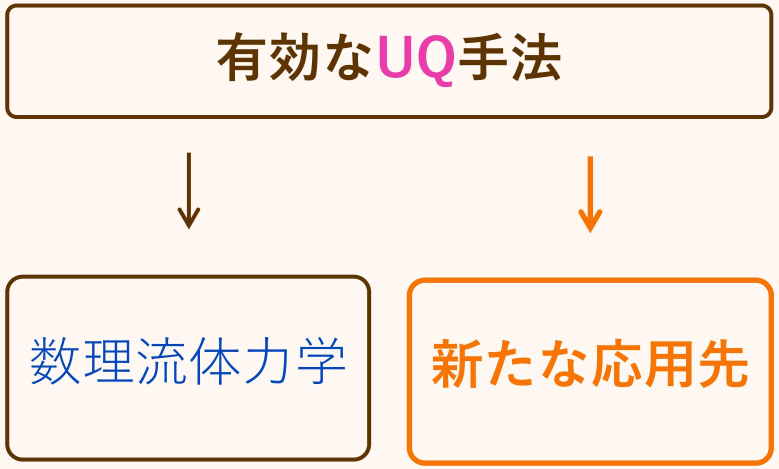
数理流体力学上の課題に対するUQ的アプローチ

学際研究1



発展

学際研究2



流体という複雑な現象に有効なUQ手法を研究.

流体力学以外の分野でも有効かも.

目次

HMCによるN点渦系**不変測度**の計算

3-1. 球面上N点渦系不変測度のHMC近似

数理流体力学

点渦統計理論

乱流を点渦で近似し
統計力学的に扱う．

本研究

HMC

Hamiltonian **M**onte **C**arlo

ハミルトン力学を使って
効率よくサンプリング．

UQ

3-1. 球面上N点渦系不変測度のHMC近似

ある力学系 → **不変測度が知りたい！** → ~~長時間数値積分を実行.~~

保存量の情報

やってられない！！

モンテカルロ近似

3-1. 球面上N点渦系不変測度のHMC近似

キーワード（分野）

ハミルトン系
（物理）

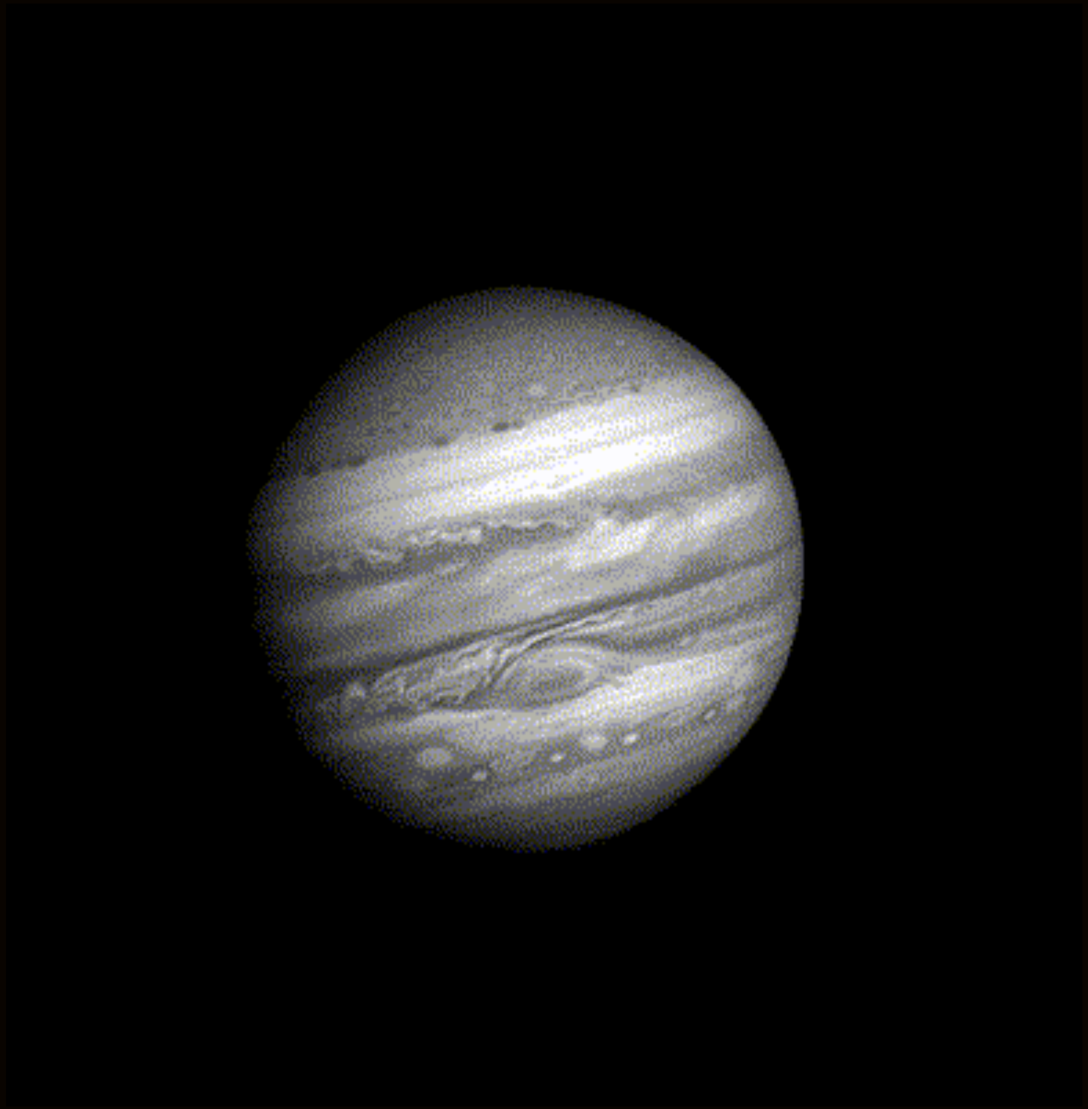
構造保存型スキーム
（数値解析）

統計力学
（物理，確率論）

MCMC/マルコフ連鎖
（UQ）

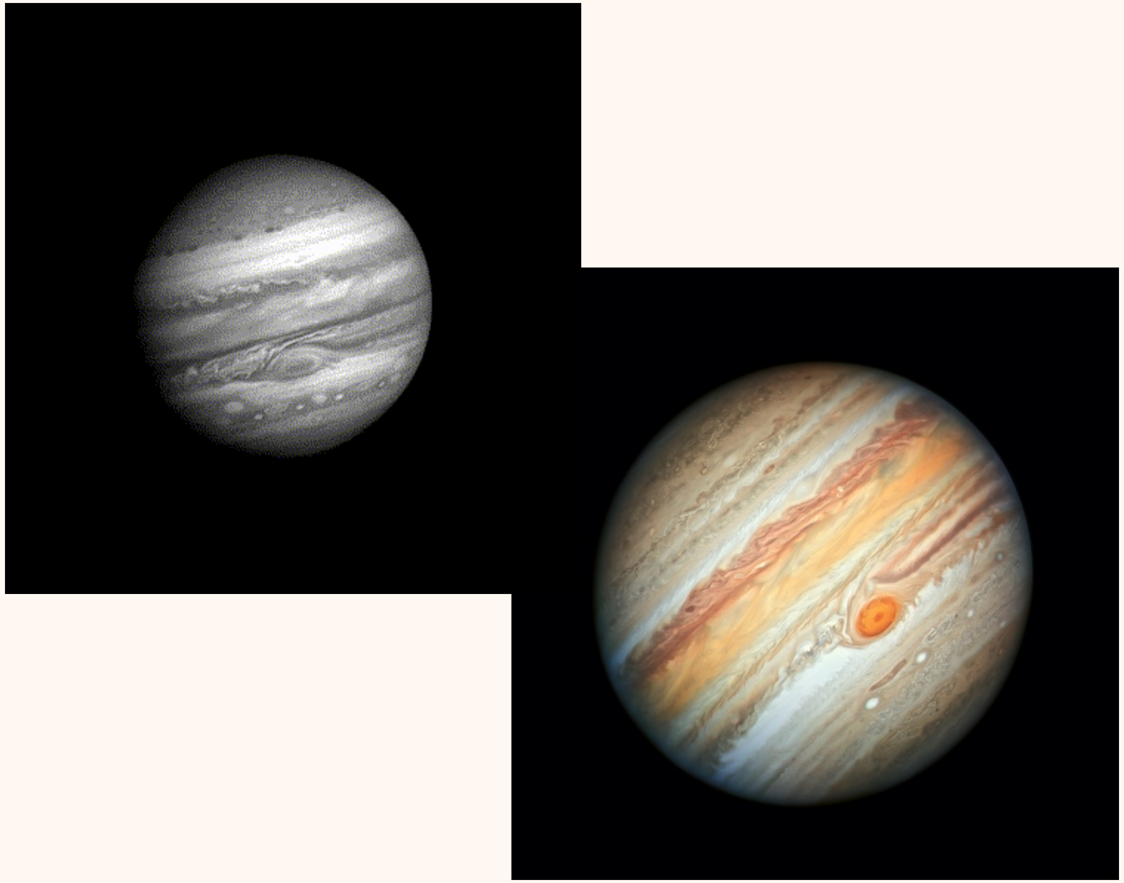
N点渦系
（流体力学）

平均場近似
（統計物理，確率論）



https://en.wikipedia.org/wiki/Great_Red_Spot

3-2. Great Red Spot of Jupiter



木星の大赤斑

持続的な巨大な渦

↓

乱流における

渦の凝集

https://en.wikipedia.org/wiki/Great_Red_Spot
https://hubblesite.org/contents/media/images/2019/36/4560-Image?news=true

3-2. 点渦統計理論

乱流における**渦の凝集**

近似

N点渦系

非粘性流れの近似モデル.

ハミルトン系.

!? →

!? → **統計力学**的に扱う

説明

点渦統計理論 (Onsager 1949)

有界領域上で，統計的に達成されやすい

定常状態(不変測度)を調べる.

https://en.wikipedia.org/wiki/Lars_Onsager

3-2. ハミルトン系

定義

正準変数の組 (q,p) とある関数 $H(q,p)$ に対して，以下の方程式で表される系

ハミルトニアンと呼ばれる

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \qquad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

性質

体積保存，時間反転対称，ハミルトニアン保存

例

調和振動子 $H(q,p) = \frac{1}{2}kq^2 + \frac{1}{2m}p^2$ ，　N点渦系

3-2. 統計力学

ハミルトン系の保存量から不変測度が構成できる.

保存量 $\longrightarrow$ 不変測度 (**Gibbs測度**と呼ばれる.)

$$\mathcal{H}(X) \qquad \varpi(dX) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}(X)} dX$$

$\beta \in \mathbb{R}$はパラメータ．統計力学的には温度の逆数に対応.

Zは正規化定数.

3-2. 球面上$\boldsymbol{N}$点渦系不変測度のHMC近似

ある力学系 ⟶ **不変測度が知りたい！**

||

球面上N点渦系

惑星大気を意識

(∵ 渦凝集への興味)

↓

モンテカルロ近似

特に，高次元でも効率の良い **MCMC** である **HMC** を使う．

↑

!?

3-3. MCMC(Markov Chain Monte Carlo)

サンプリング問題｜測度 $e^{-U(q)}dq$ with $U\colon Q \to \mathbb{R}$ をサンプルで近似.

$$q_1, \dots, q_n \sim e^{-U(q)}dq$$

MCMC｜マルコフ連鎖で連鎖的にサンプルを生成．サンプリング手法の1種.

$$q_1, \dots, q_{n-1}, q_n \xrightarrow{P} q_{n+1}$$

初期測度 μ_0 に P を繰り返し作用させ，測度列 $\mu_0, \mu_0 P, \mu_0 P^2, \cdots$ が得られる.

Uに対してPをうまく構成し，収束させる.

$$\mu_0 P^n(dq) \to e^{-U(q)}dq \qquad (n \to \infty)$$

状態空間： $Q \subset \mathbb{R}^m$

マルコフ遷移核：

$P\colon Q \times \mathcal{B}(Q) \to [0,1]$

3-3. HMCマルコフ遷移 $P(q_n, dq_{n+1})$

Hamiltonian **M**onte **C**arlo

Require: $s \in \mathbb{N}, h > 0$

Ensure: $H(q,p) = U(q) + \frac{1}{2}\|p\|^2$ on T^*Q

For n do

  Draw $p_n \sim N(0, I)$, draw $u \leftarrow \mathrm{Uni}[0,1]$

  Set $\boldsymbol{q}', \boldsymbol{p}' \leftarrow \boldsymbol{F} \circ \boldsymbol{\varphi}_{s,h}(\boldsymbol{q}_n, \boldsymbol{p}_n)$

  Set $\delta \leftarrow H(q_n, p_n) - H(q', p')$

  if $\log u < \delta$ then

    Set $q_{n+1} \leftarrow q'$

  else

    Set $q_{n+1} \leftarrow q_n$

(1) 運動量サンプリング｜相空間へ拡張

$$(\boldsymbol{q}_n, \boldsymbol{p}_n) \in \boldsymbol{T}^*\boldsymbol{Q}$$

正規分布で運動量 $p_n \in T^*_{q_n}Q$を取る.

(2) ハミルトン写像による提案

$$\boldsymbol{q}', \boldsymbol{p}' = \boldsymbol{F} \circ \boldsymbol{\varphi}_{s,h}(\boldsymbol{q}_n, \boldsymbol{p}_n)$$

Hから誘導されるハミルトン方程式の構造保存型スキームによる離散化.

時間刻み幅 h, 反復回数 s.

(3) 採択ステップ

$$\boldsymbol{q}_{n+1} = \boldsymbol{q}'$$

採択確率でサンプル候補を採択.

3-3. 注意｜2つのハミルトン系

N点渦系

ハミルトン系

← **異なる** →

HMC

ハミルトン系

$$\mathcal{H} \xrightarrow[\text{不変測度}]{} e^{-\mathcal{H}} \text{ —— } \textbf{適用} \longrightarrow H = \mathcal{H} + \frac{1}{2}\|p\|^2$$

(U=$\mathcal{H}$とする.)

3-4. 主な結果｜収束定理とサンプリング

多様体上HMC

（Brubaker+ 2012 ）多様体上のHMC収束定理　$\left\|\delta_q P^n - \varpi\right\|_{TV} \to 0, n \to \infty$

精密化 ↓

（NEW）コンパクト多様体上の一様指数収束定理　$\sup_{q \in Q} \left\|\delta_q P^n - \varpi\right\|_{TV} \leq (1-\eta)^n$

応用

球面上N点渦系

保存量 $\mathcal{H}$, $\boldsymbol{M}$ → 不変測度 $\varpi(dX_N)$ — **HMCサンプリング** → サンプル $X_N^{(1)}, \dots, X_N^{(n)} \sim \varpi(dX_N)$

計算困難！

モンテカルロ積分 ↓

統計量の計算

理論　　数値

3-5. 今後の展開｜学際的視点

HMCによる球面上N点渦系不変測度の計算

一般化 ↓

HMCによるmfd上ハミルトン系不変測度の計算

済み

球面上
N点渦系

ハミルトン系

トーラス上
N点渦系

新たな応用先

新たな応用先候補．．．

量子多体問題

その他 …

良さそうなものを知っていたら
ぜひ教えてください．

目次

4-1.トポロジカルフローデータ同化

数理流体力学

TFDA

流線から
「トポロジー」を抽出.

本研究

データ同化

観測値をベイズ推定により
シミュレーションに反映.

UQ

4-1.トポロジカルフローデータ同化

キーワード（分野）

グラフの微分・変分
（幾何，解析）

一般化勾配法
（数値解析）

トポロジカルデータ解析
（数値計算，幾何）

データ同化・ベイズ推定
（確率論，UQ）

機械学習
（UQ）

地衡風・地衡流
（気象，海洋）

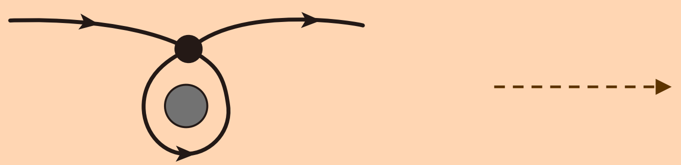
4-2. TFDA

流線トポロジー解析｜TFDA

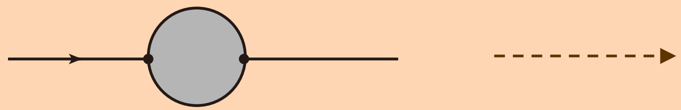
流線軌道から「流れのパターン」をグラフ構造で抽出.

流れ構造を**文字列**で表現.

(宇田・他 2019)

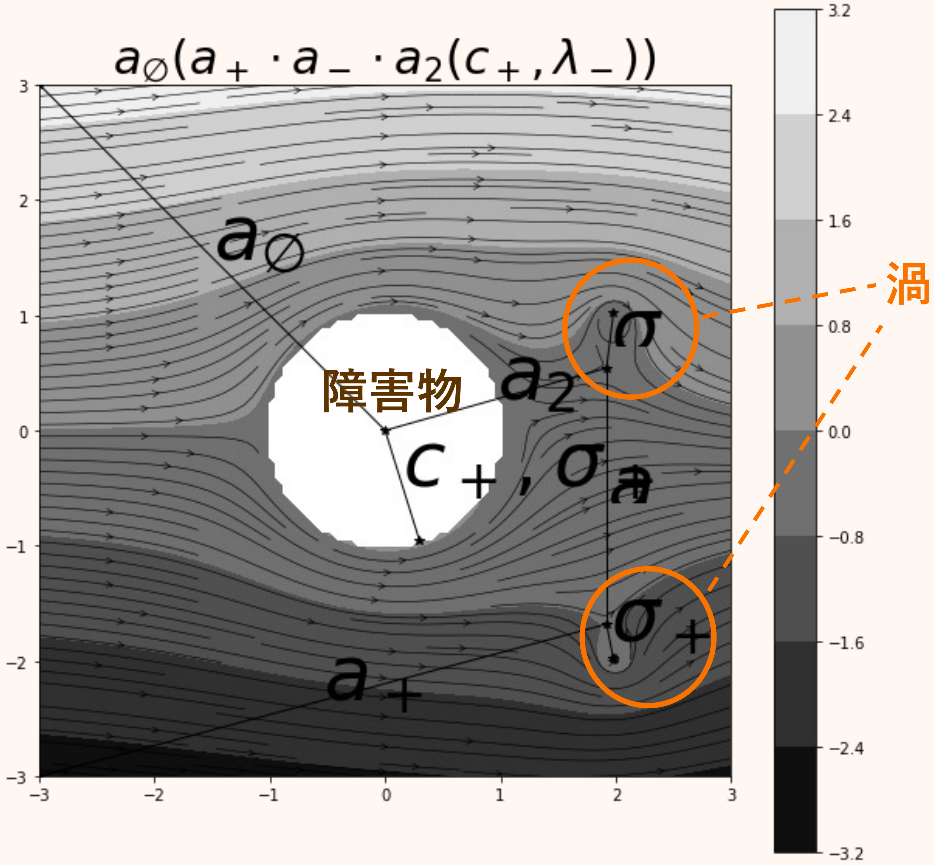


a_+



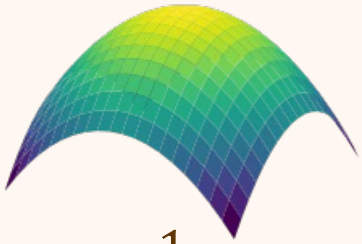
a_2

一様流中の障害物と渦



4-2. TFDA

2次元 高さ関数

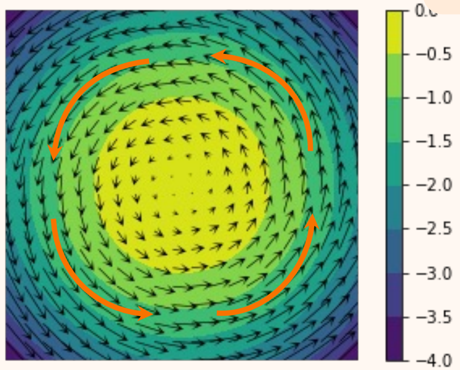


$$H(x,y) = -\frac{1}{2}(x^2 + y^2)$$

$$u = \frac{\partial H}{\partial y}, v = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

2次元 非圧縮流れ

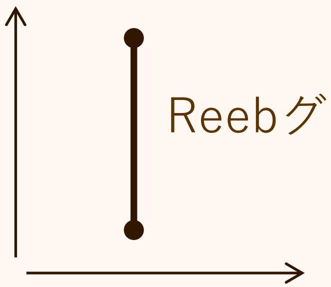
(u, v)
$= (y, -x)$



この写像が重要！

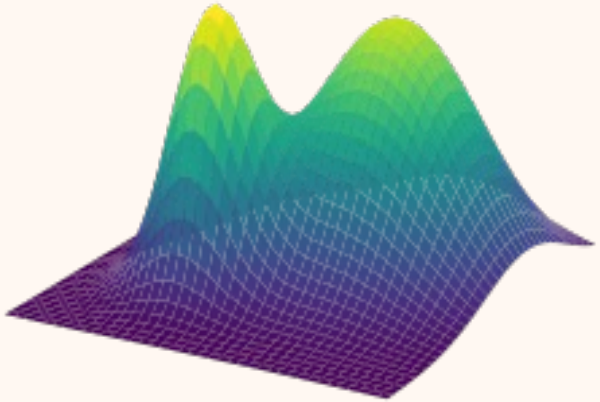
→ **Reebグラフ** → **(再帰的)文字列**

水平方向に切った断面の各連結成分を1点に縮約.
高さを変えて繋ぐ.

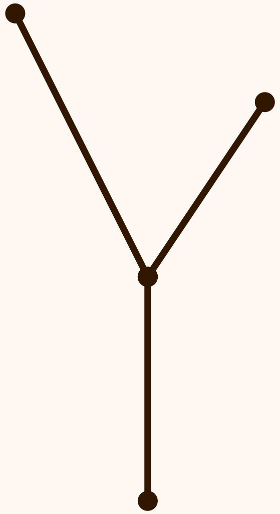


a_+

4-2. Reebグラフ例



この写像が重要！



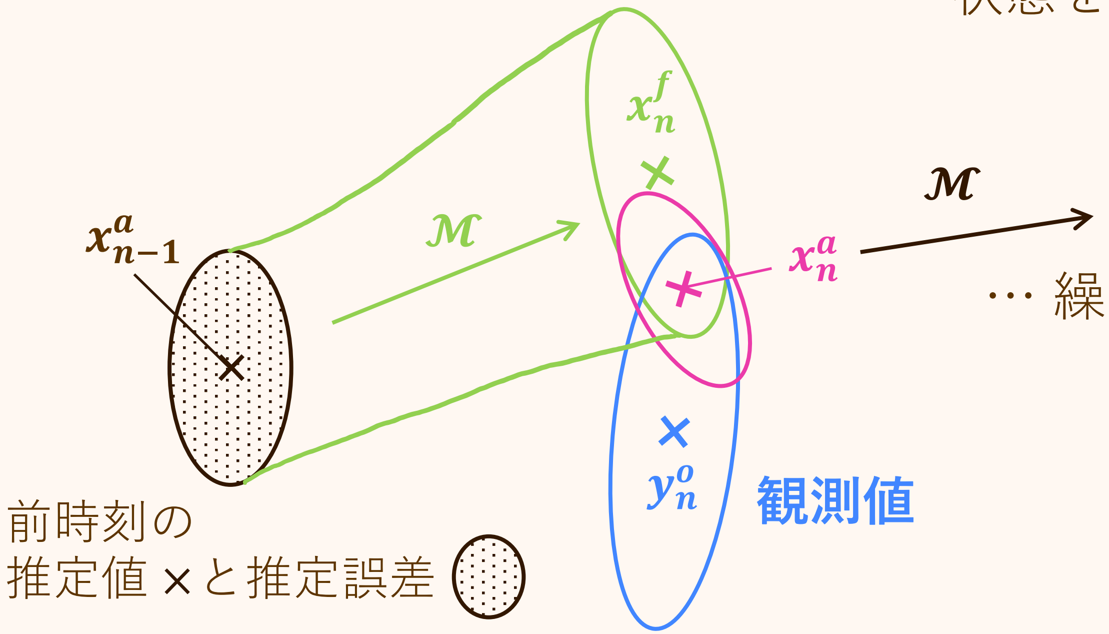
水平方向に切った
断面の各連結成分を
1点に縮約.
高さを変えて繋ぐ.

4-3. データ同化

観測値をシミュレーションに反映させる統計手法.

1. 予測(Forecast)
モデル $\mathcal{M}$ の時間発展で次の時刻を予測.

2. 解析(Analysis)
予測値 x_n^f と観測値 y_n^o から状態を推定 x_n^a (解析値と呼ぶ).



… 繰り返す …

特に，2. 解析ステップを行うことを**同化する**という.
ベイズ推定に基づき観測値で予測値を修正.

4-3. データ同化｜解析ステップのベイズ推定

真の状態 x についての推定問題

事前分布

事後分布

$p(x) \longrightarrow$

$$p(x|y) = \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)}$$

観測値 y

ベイズの定理

真の状態に対する情報は観測 $\mathcal{H}$ を通してのみ得られる.

$$y = \mathcal{H}(x) + \eta$$

(ηは観測誤差)

(仮定)正規分布 $x \sim N(x_f, P_f)$, $y_{obs} \sim N(\mathcal{H}(x), P_o)$

$$p(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|x - x_f\|_{P_f^{-1}}{}^2\right)$$

$$p(y_{obs}|x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|y_{obs} - \mathcal{H}(x)\|_{P_o^{-1}}{}^2\right)$$

(仮定) $\mathcal{H}$が線形のとき，事後分布も正規分布.

x_a, P_aは x_f, P_f, y_{obs}, P_o から解析的に求まる.

$p(x|y_{obs}) \propto p(y_{obs}|x)p(x)$ ← **ベイズの定理**

$$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|x - x_f\|_{P_f^{-1}}{}^2 - \frac{1}{2}\|y_{obs} - \mathcal{H}(x)\|_{P_o^{-1}}{}^2\right)$$

$\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|x - x_a\|_{P_a^{-1}}{}^2\right)$ ← **平方完成**

4-3. データ同化

正規分布，線形観測の仮定の下では解析値 x_a は以下の同値な捉え方ができる．

(1) $x_a = \mathbb{E}_x\left[C^{-1}x\exp\left(-\frac{1}{2}\|x-x_f\|_{P_f^{-1}}{}^2-\frac{1}{2}\|y_{obs}-\mathcal{H}(x)\|_{P_o^{-1}}{}^2\right)\right]$　　正規分布の平均

(2) $x_a = argmax_x\left[\exp\left(-\frac{1}{2}\|x-x_f\|_{P_f^{-1}}{}^2-\frac{1}{2}\|y_{obs}-\mathcal{H}(x)\|_{P_o^{-1}}{}^2\right)\right]$　　正規分布の最頻値

↓最適化問題として考える．

$J(x)$の最小化問題を勾配法で解く．このタイプのデータ同化手法は「**~変分法**」と呼ばれる．

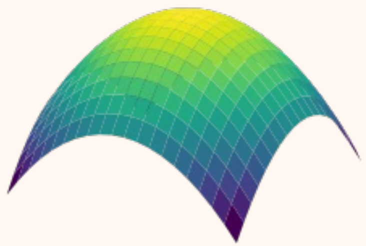
(2’) $x_a = argmin_x J(x)$,　$J(x) = \frac{1}{2}\|x-x_f\|_{P_f^{-1}}{}^2+\frac{1}{2}\|y_{obs}-\mathcal{H}(x)\|_{P_o^{-1}}{}^2$

Point｜~変分法

目的関数 $J(x)$の中身は**自由度**がある．（正規分布，線形観測の仮定を外して一般化できる）

4-4. トポロジカルフローデータ同化｜観測$\mathcal{H}_R$

TFDAによるReebグラフ計算を観測関数とする.

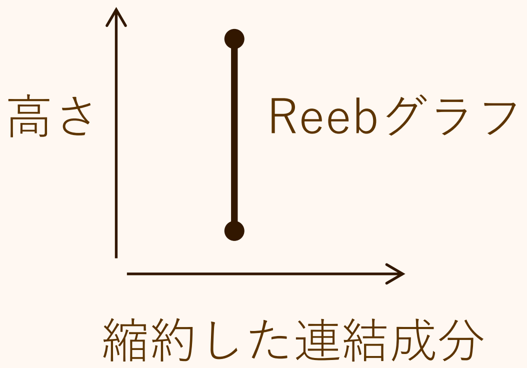


2次元高さ関数

$\xrightarrow{\mathcal{H}_R}$

水平方向に切った
断面の各連結成分を
1点に縮約.
高さを変えて繋ぐ.

Reebグラフ



4-4.トポロジカルフローデータ同化｜案

状態空間 X={2次元高さ関数の空間}, 観測関数 $\mathcal{H}_R: X \to R$={Reebグラフの"空間"}

Rに「距離」 $d_R(y, y')$ を導入. $J(x)$ を勾配法で最小化.

$$x_a = argmin_x J(x), \qquad J(x) = \frac{1}{2}\left\|x - x_f\right\|_{P_f^{-1}}^2 + \frac{\lambda}{2} d_R\left(y_{obs}, \mathcal{H}_R(x)\right)^2$$

$x_f \in X, y_{obs} \in R$. $\lambda > 0$は正則化パラメータのようなもの.

課題

どのように距離 d_Rを入れるか？可微分か？

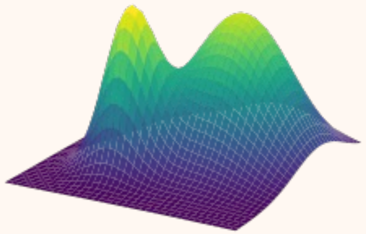
$J(x)$の勾配はどのように定義できるか？

X上の摂動をどう定義するか？...

現在検討中

4-4.トポロジカルフローデータ同化｜課題

X={2次元高さ関数の空間}, 観測関数 $\mathcal{H}_R: X \to R$={Reebグラフの"空間"}

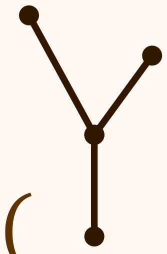
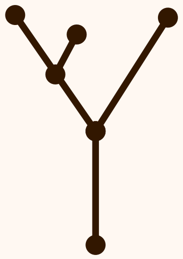


2次元高さ関数

x

$\xrightarrow{\mathcal{H}_R}$

$\mathcal{H}_R(x)$ y_{obs}

$d_R($  ,  $)$ ？

$\nabla_x d_R(H_R(x), y_{obs})$ ？

4-5. PH

参考になるトポロジカルデータ解析の手法

インプットは点群や画像(2次元高さ関数)など

k次**ホモロジー**の情報を可微分に取り出す.

可微分ないくつかの距離がある.

いろいろな実装がある.

4-6. 学際的視点

2次元非圧縮流れのトポロジカルデータ同化

一般化 ↓

高さ関数のトポロジカルベイズ推定・逆問題

検討中

2次元
非圧縮流れ

…

…

**流体以外で面白い問題があれば
そちらから始めても良い**

目次

ディスカッション!

5-1. UQと数理流体力学

球面上N点渦系
不変測度のHMC近似

ハミルトン系不変測度をモンテカルロ近似.
高計算コストな球面上点渦統計理論に応用.

結果
コンパクトmfd上HMCの指数収束定理
球面上N点渦系Gibbs測度をHMC近似

発展
トーラス上N点渦系に適用.
量子多体問題も可能性あり？

トポロジカルフロー
データ同化理論の構築

流れの”トポロジー”を用いたベイズ推定.
ノイズやデータ欠損への強さに期待.

課題
Reebグラフの微分の定式化.
(PHのノウハウが参考になる)

発展
2次元の場が発展する問題に応用可能.

5-1. 球面上N点渦系不変測度のHMC近似

キーワード（分野）

ハミルトン系
（物理）

MCMC/マルコフ連鎖
（UQ）

構造保存型スキーム
（数値解析）

N点渦系
（流体力学）

統計力学
（物理，確率論）

平均場近似
（統計物理，確率論）

5-1.トポロジカルフローデータ同化

キーワード（分野）

グラフの微分・変分
（幾何，解析）

一般化勾配法
（数値解析）

トポロジカルデータ解析
（数値解析，幾何）

データ同化・ベイズ推定
（確率論，UQ）

機械学習
（UQ）

地衡風・地衡流
（気象，海洋）

5-2. 応用数学と学際研究

学際研究1

学際研究2

数学以外の**ある分野A**における
難しい問題を応用数学で解決する.

分野A以外でも有効かも.

5-3. ディスカッション

コメント・質問・感想などお願いします

量子多体問題のようなハミルトン系
乱流
統計物理
モンテカルロ・MCMC
ベイズ推定・逆問題
一般化勾配法・変分問題
気象・海洋
TDA

学際研究について
UQや流体に興味のある方
キーワードに引っかかった方
理研のこと
教育関連．．．
その他なんでも

参考文献

- (Betancourt et al. 2018) On the geometric ergodicity of hamiltonian monte carlo.
- (Brubaker et al. 2012) A Family of MCMC Methods on Implicitly Defined Manifolds.
- (Hairer et al. 2006) Geometric Numerical Integration.
- (G. Roberts et al. 2004) General state space markov chains and mcmc algorithms.
- (J. Fan et al. 2021) Hoeffding's inequality for general markov chains and its applications to statistical learning.
- (Newton 2001) The N-vortex Problem.
- (Marchioro et al. 1994) Mathematical Theory of Incompressible Non-viscous Fluids.
- (Lions et al. 1992) A special class of stationary flows for two-dimensional euler equations: a statistical mechanics description.
- (Gotoda et al. 2018) Universality of the Anomalous Enstrophy Dissipation at the Collapse of Three Point Vortices on Euler--Poincaré Models.

参考文献

- (Long Li et al. 2019) Topological Data Assimilation with Wasserstein distance
- (Xiaoling Hu et al. 2019) Topology Preserving Deep Image Segmentation
- **(宇田・他 2019)** パーシステントホモロジーとレーブグラフを用いた **2** 次元ハミルトンベクトル場の流線位相構造の自動 抽出アルゴリズム
- (Sakajo et al. 2022) Identification of Kuroshio meanderings south of Japan via a topological data analysis for sea surface height