

高次元データ同化とその発展

伊藤 伸一

東京大学 地震研究所
東京大学大学院 情報理工学系研究科

自己紹介

学歴・職歴

2015.03 大阪大学 大学院理学研究科 博士（理学）

- ・破壊のパターン形成の数理

2015.04–2018.08 東京大学 地震研究所 特任研究員

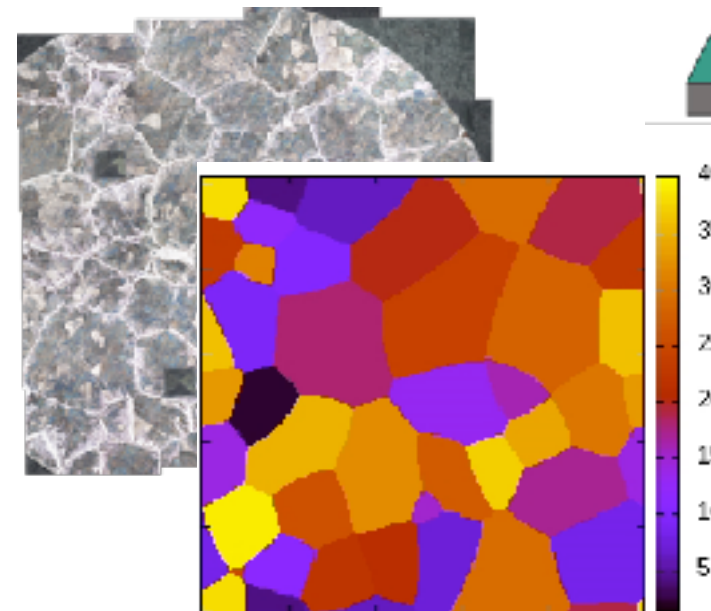
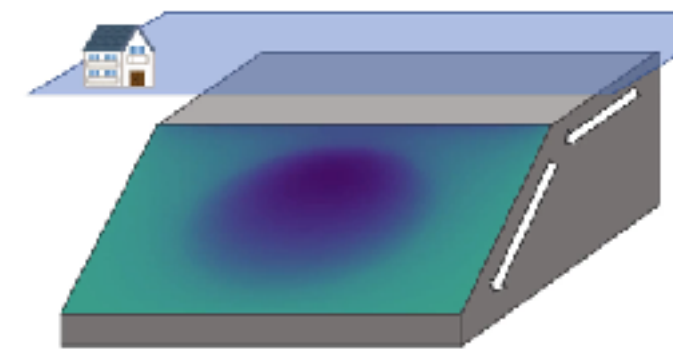
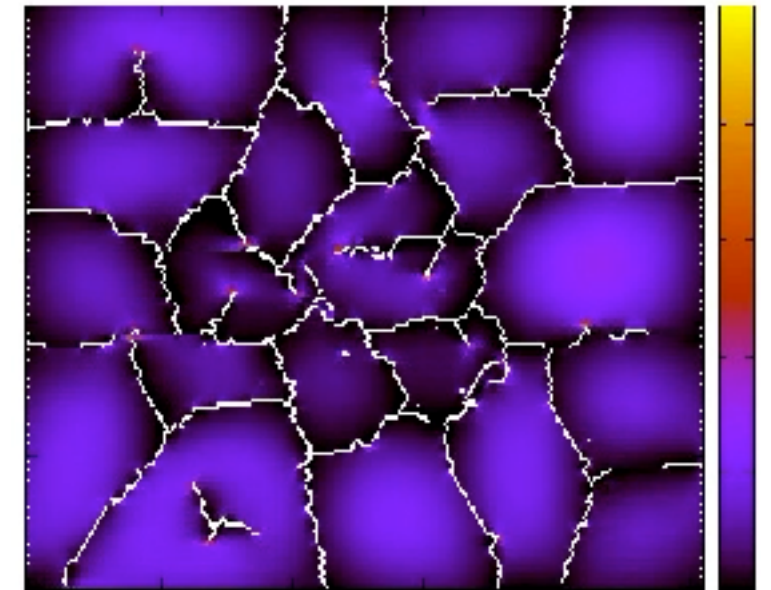
2018.08–現在 東京大学 地震研究所 助教

2018.12–現在 東京大学 大学院情報理工学系研究科 助教（兼務）

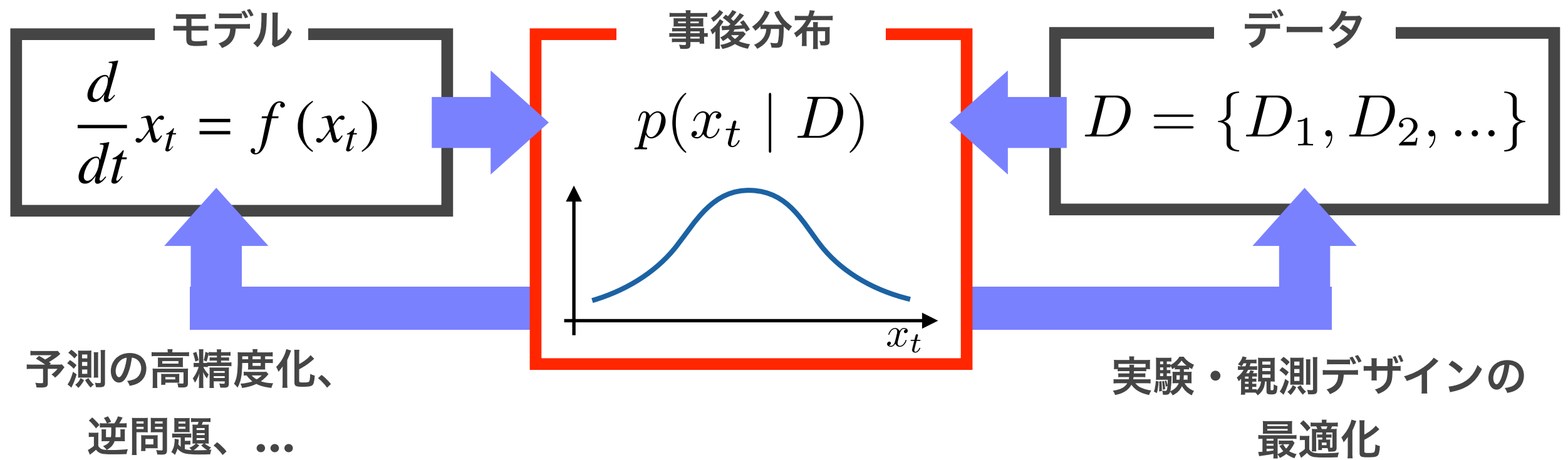
- ・大規模4次元変分法データ同化の数理・応用

- ・金属材料の粒成長パターン

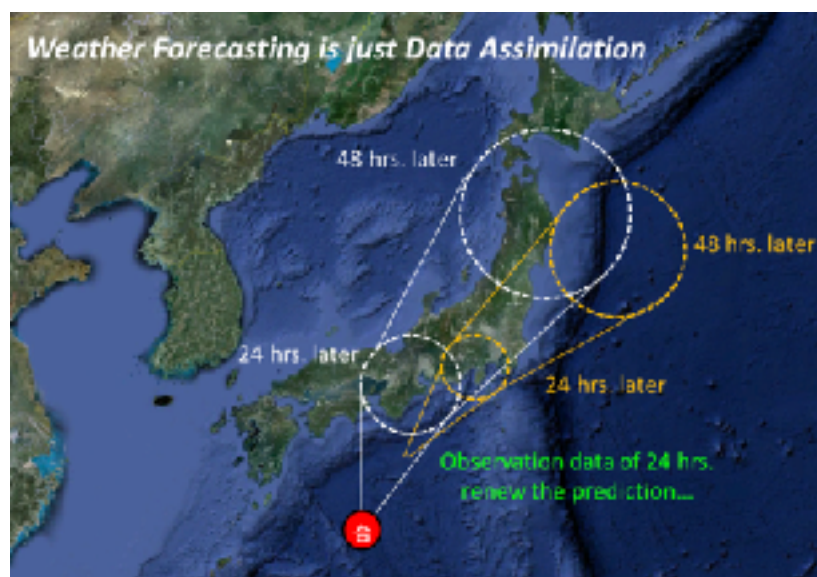
- ・断層摩擦パラメータの空間パターン



データ同化

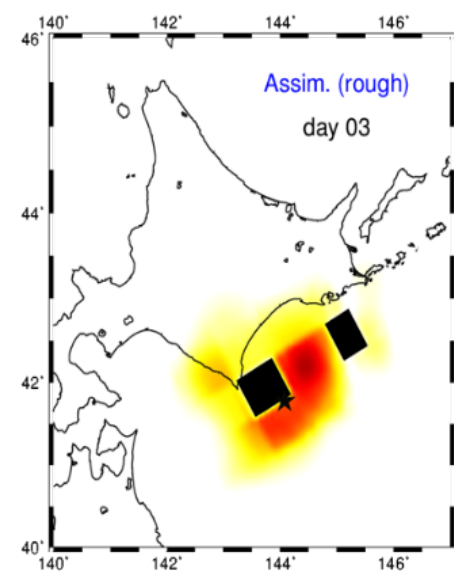


天気予報



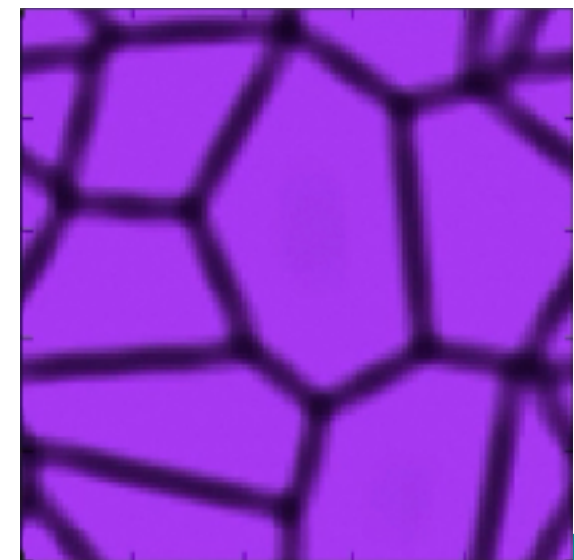
出典：Google Earth

地震学



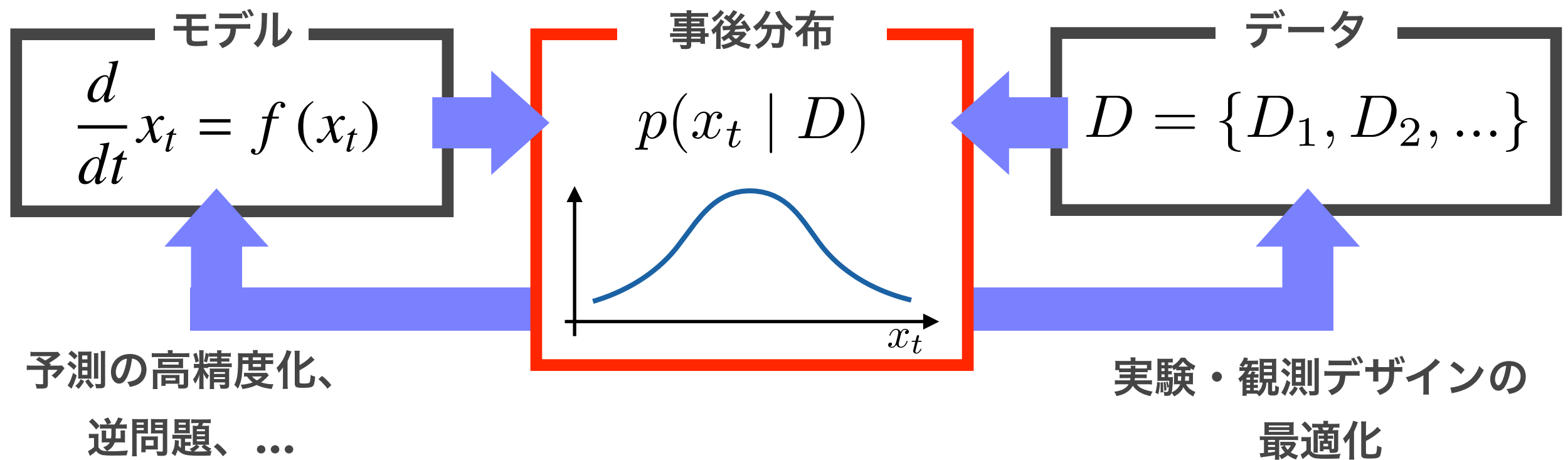
Kano et al. (2015)

材料科学



Ito et al. (2017)

データ同化



事後分布（に比例した量）を1点評価するのに1回のモデルの時間発展計算が必要

- ・ 小さいモデルを使う？ → 表現能力の低下
- ・ 評価回数を極力減らす？ → 事後分布（or その統計量）の精度低下

→ モデルの規模・目的に適したアルゴリズムの選択が大切

現実的な計算資源・時間内で欲しい情報をいかに精度よく抽出するか

本日の話題

アルゴリズムの話題を中心にお話しします。

・ 物理っぽい話はあまり出てきません。。（数学的には面白い）

・ 4次元変分法データ同化アルゴリズム

・ 4次元変分法における不確実性評価アルゴリズム

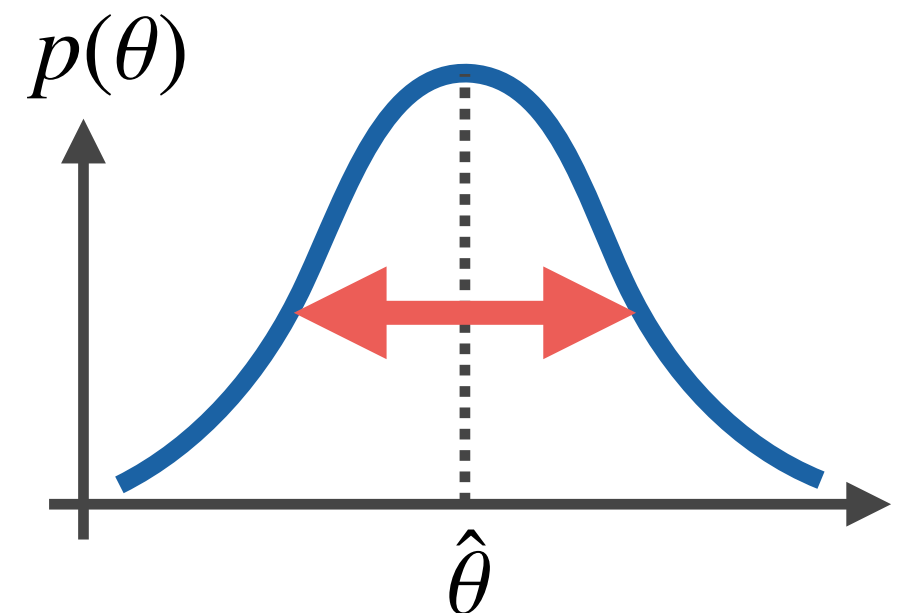
Ito et al., Phys. Rev. E, 94, 043307 (2016)

Ito et al., STAM, 18:1, 857-869 (2017)

・ 不確実性を厳密に評価するアルゴリズム

Ito et al., BIT numerical mathematics (2021)

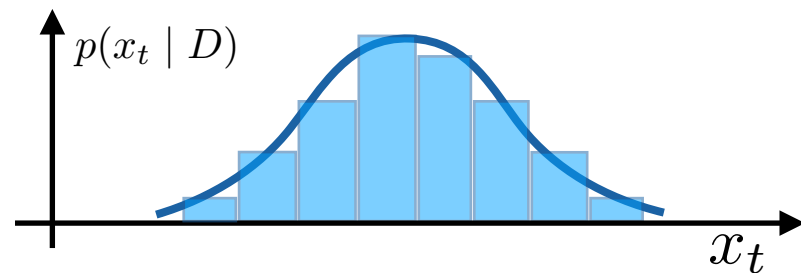
Ito et al., arXiv:2109.13143



4次元変分法データ同化

データ同化アルゴリズムあれこれ

逐次データ同化



- 概形と時間発展を評価

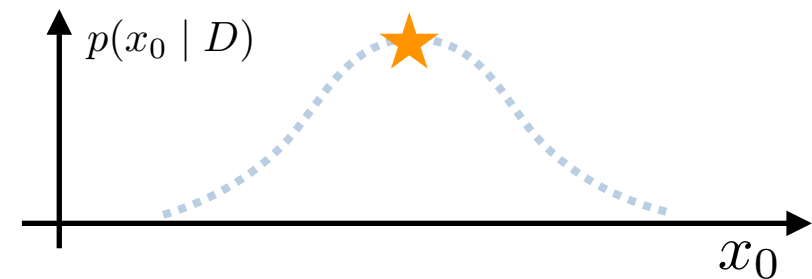
事後分布をサンプル群の時間発展で評価

- 小中規模モデル向き

たくさんのシミュレーションを同時に走らせる必要がある（並列化可）

- EnKF, 粒子フィルタ など

非逐次データ同化



- 概形も時間発展も評価しない

初期値の事後分布のMAP解だけを探索

- 大規模モデル向き

シミュレーション1つに
計算資源を集中できるため

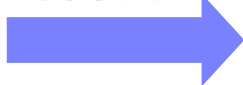
- 4次元変分法

次元の呪い

偏微分方程式

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \nabla (c \nabla y)$$
$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0$$

空間方向
離散化

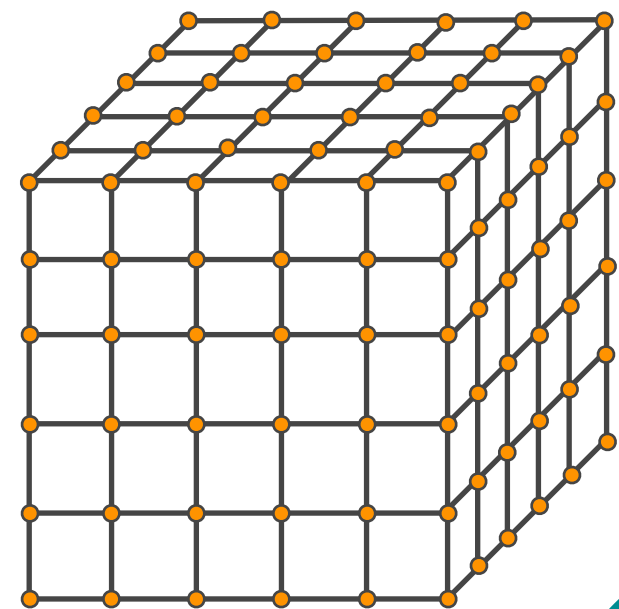
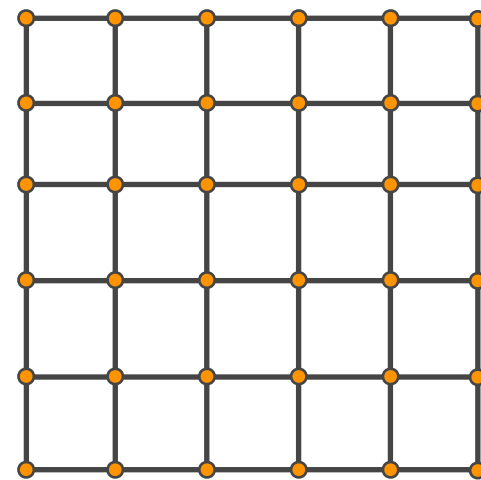


常微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = F(x)$$

$$x = (y_1, y_2, \dots, c_1, c_2, \dots)^\top$$

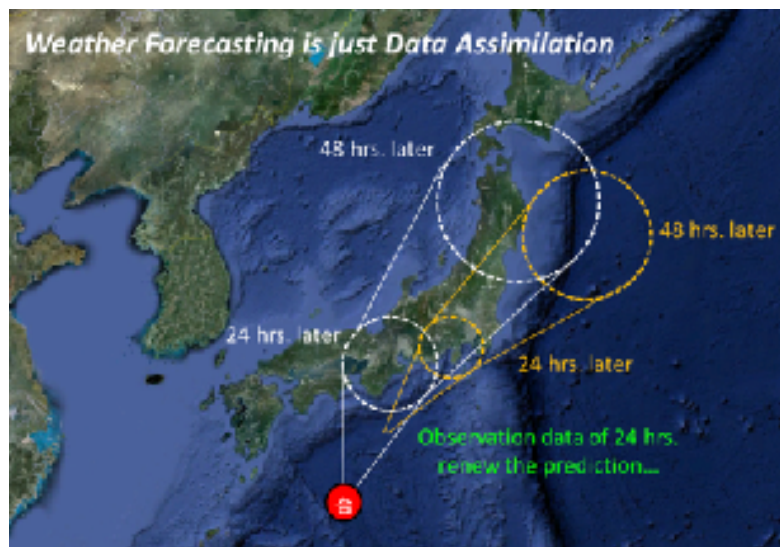
↑ 格子点上の物理量を全て並べたベクトル



空間1方向に100格子点とると,

2次元問題 100x100 格子点 = $O(10,000)$ 変数!

3次元問題 100x100x100 格子点 = $O(1,000,000)$ 変数!!

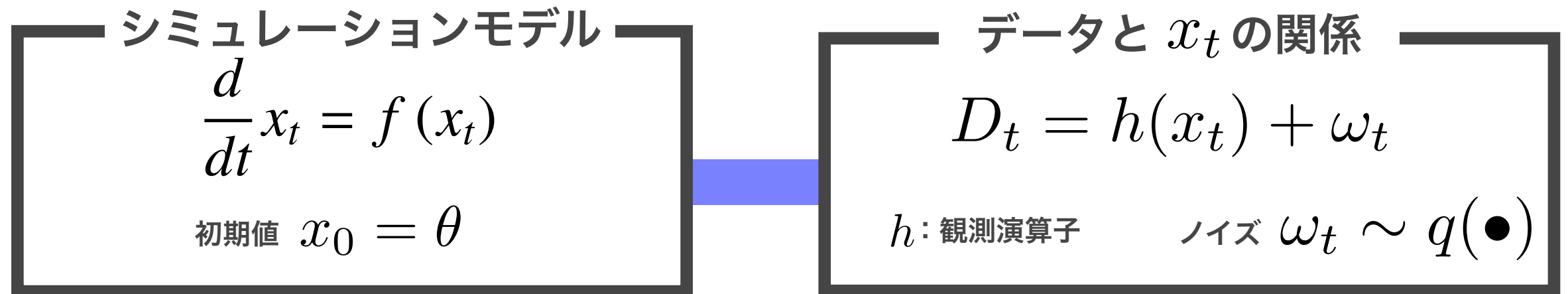


$p(x | D)$ の直接評価は
実質的に不可能

事後分布を欲しい情報を
効率よく評価するアルゴリズム

4次元変分法

モデルの初期値に関する事後分布から事後確率最大解（MAP解）を抽出する手法

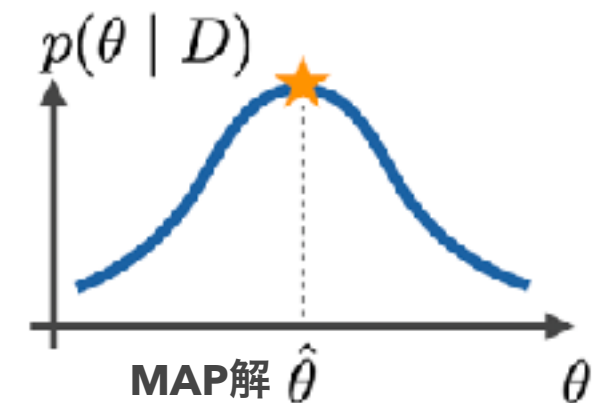


事後分布

$$p(\theta | D) \propto p(\theta) \prod_{t \in T^{\text{obs}}} q(D_t - h(x_t))$$

$p(\theta)$: 事前分布

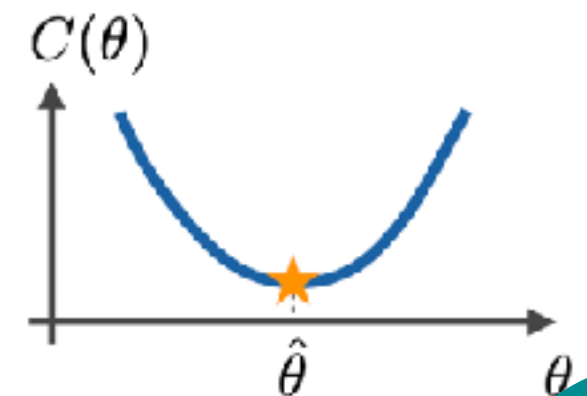
T^{obs} : 観測時刻のセット



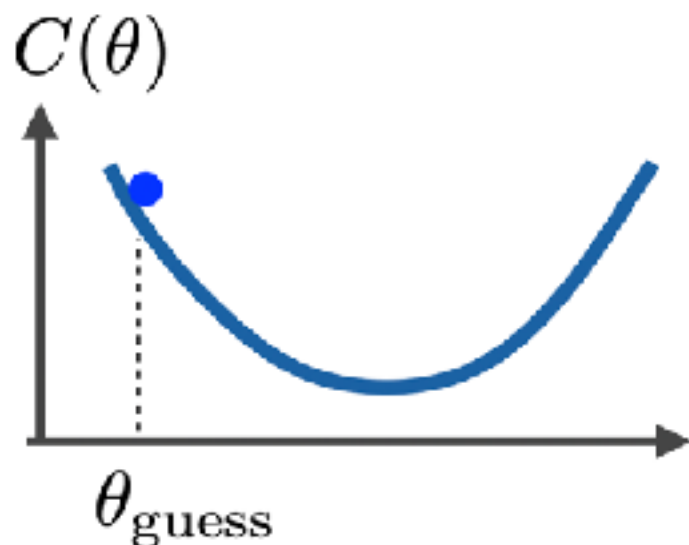
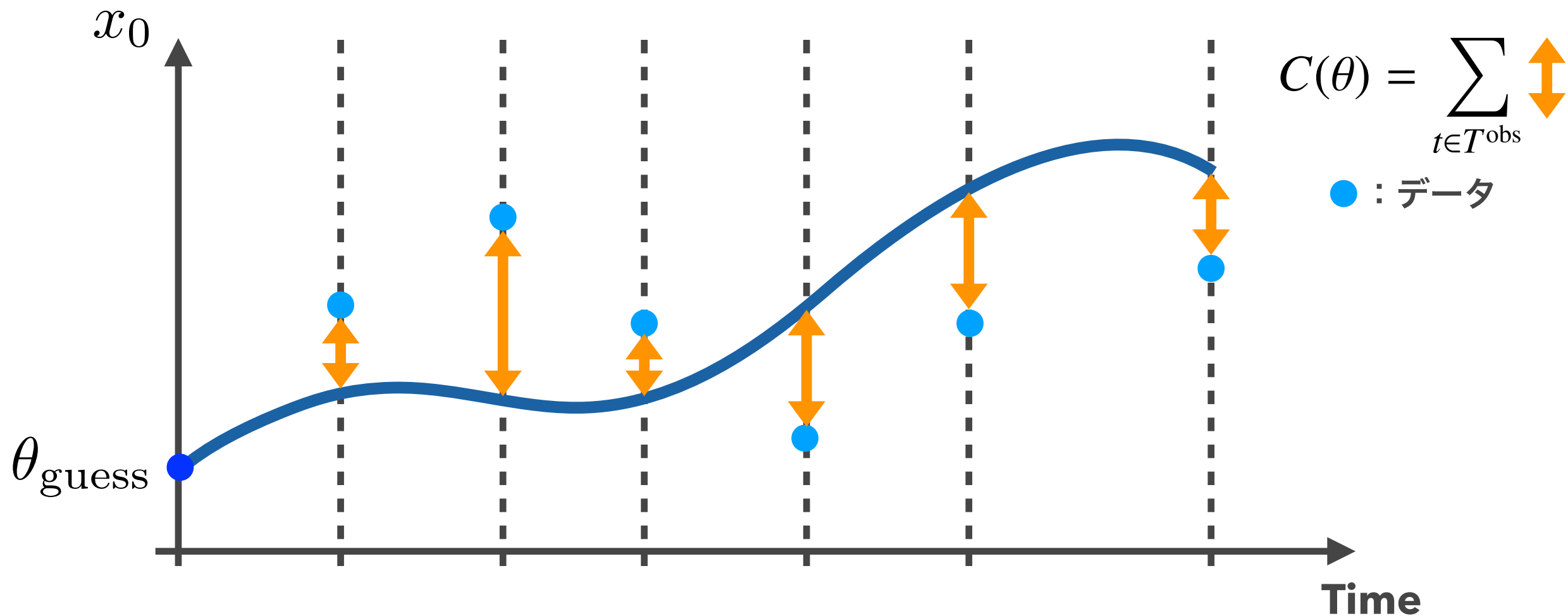
コスト関数

$$C(\theta) = -\log p(\theta) - \sum_{t \in T^{\text{obs}}} \log q(D_t - h(x_t))$$

$$p(\theta | D) \propto e^{-C(\theta)}$$

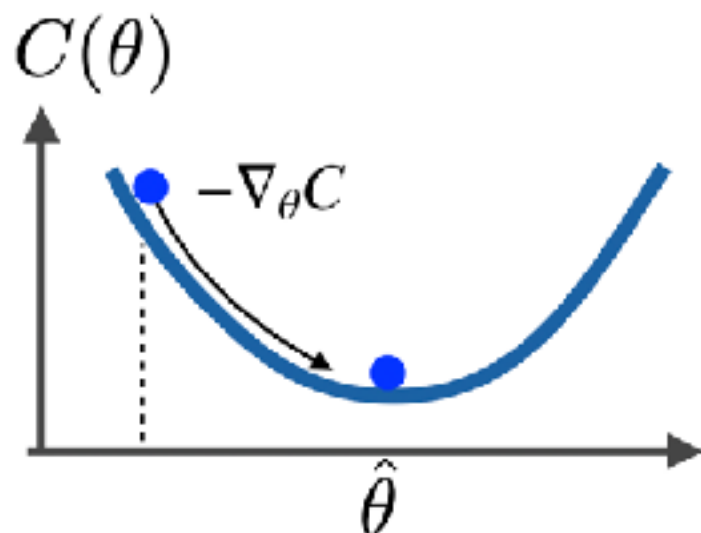
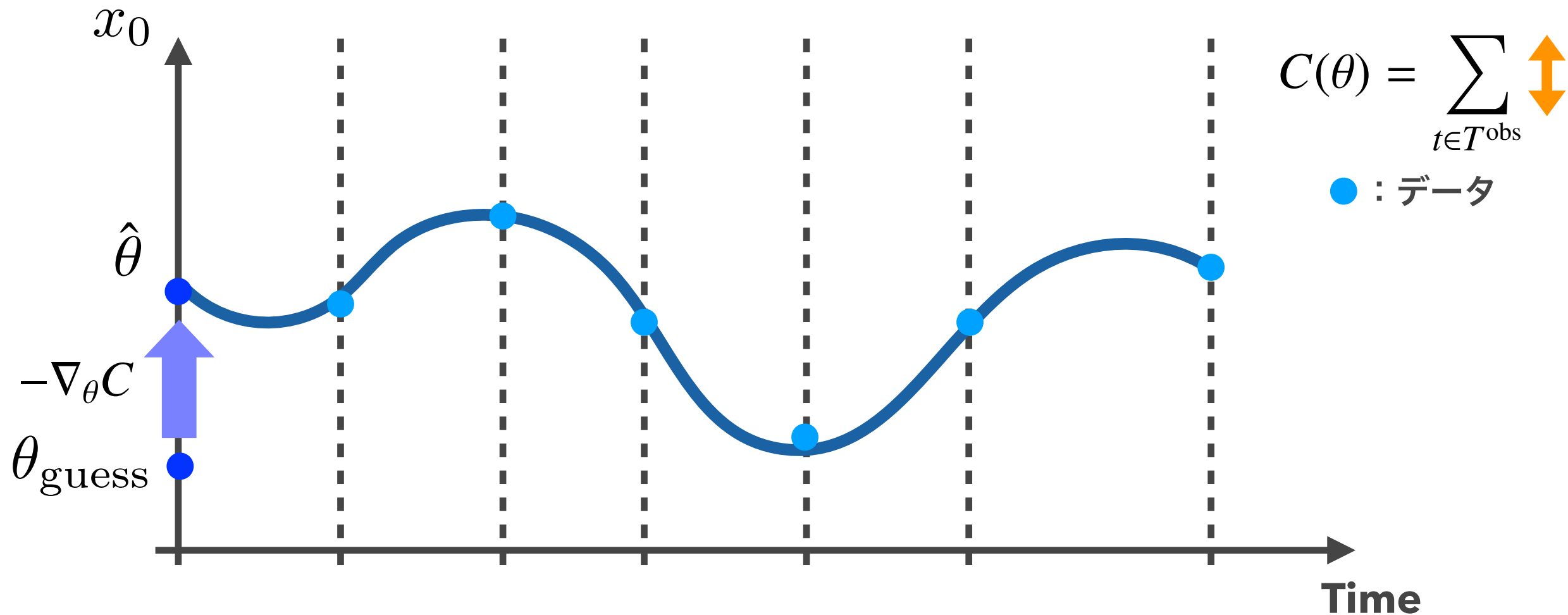


4次元変分法による初期値更新



適当に選んだ $x_0 = \theta_{\text{guess}}$ ではデータと全く合わないが...

4次元変分法による初期値更新



勾配法による最適化により
データに適合する初期値 $x_0 = \hat{\theta}$ を探す

➡ $C(\theta)$ の勾配 $\nabla_{\theta} C$ の計算が必要

Adjoint法による勾配計算

勾配法によって最適化したいが,,,

$$C(\theta) = -\log p(\theta) - \sum_{t \in T^{\text{obs}}} \log q(D_t - h(x_t))$$

θ で直接微分ができない

Adjoint法

$$L = C + \int_0^T dt \lambda_t^\top \left(f(x_t) - \frac{d}{dt} x_t \right)$$

T : 終端時刻
 λ_t : **Adjoint**変数
(ラグランジュの未定乗数)

変分をとって係数比較

Adjoint モデル

$$-\frac{d}{dt} \lambda_t = (\nabla_x f)^\top \lambda_t + \sum_{t' \in T^{\text{obs}}} \delta(t - t') \nabla_{x_{t'}} C$$

$\lambda_0 = \nabla_\theta C$
 $\lambda_T = 0$

t=Tから時間後ろ向きに解くことで、目的の勾配が得られる

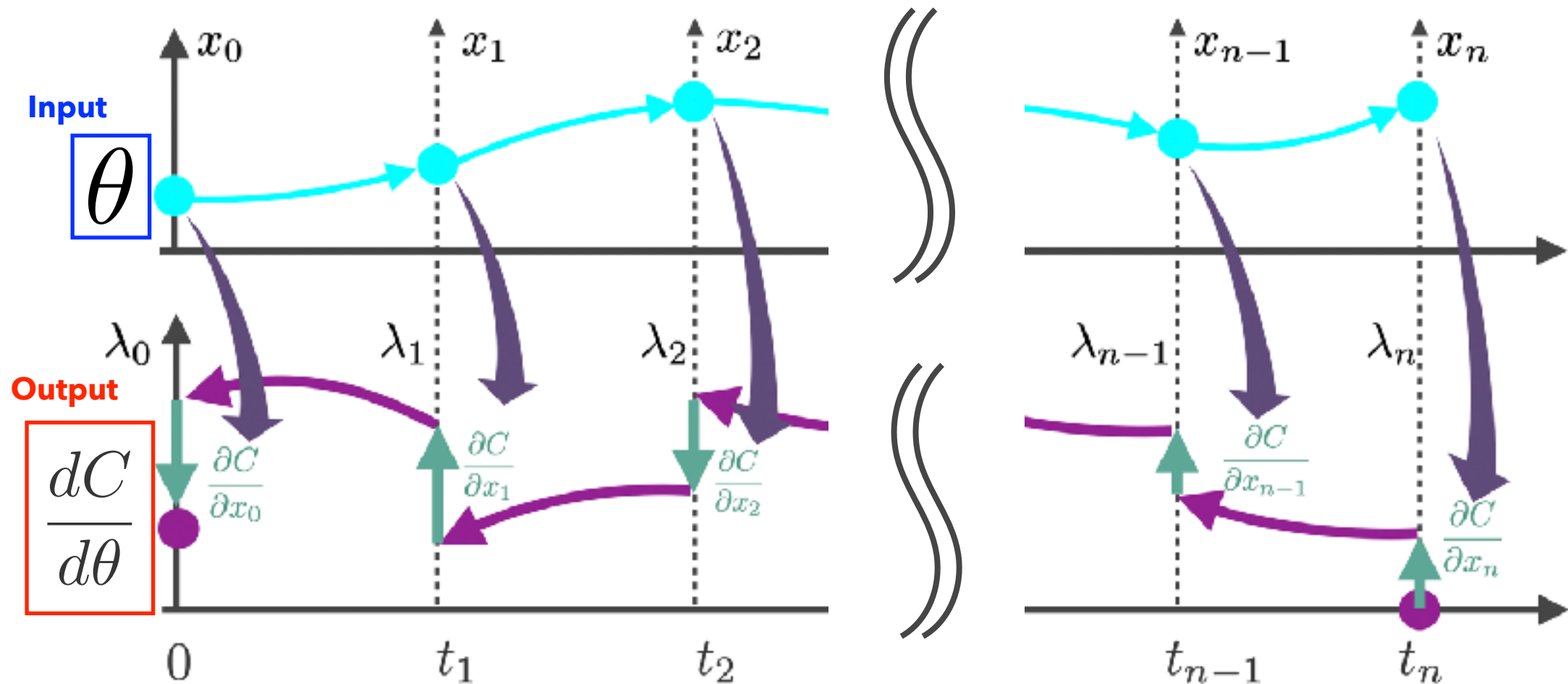
時間後ろ向きに計算する

Adjoint モデル

$$-\frac{d}{dt}\lambda_t = (\nabla_x f)^\top \lambda_t + \sum_{t' \in T^{\text{obs}}} \delta(t - t') \nabla_{x_{t'}} C$$

$$\lambda_0 = \nabla_{\theta} C$$

$$\lambda_T = 0$$



$$T^{\text{obs}} = \{0, t_1, t_2, \dots, t_n = T\}$$

4次元変分法

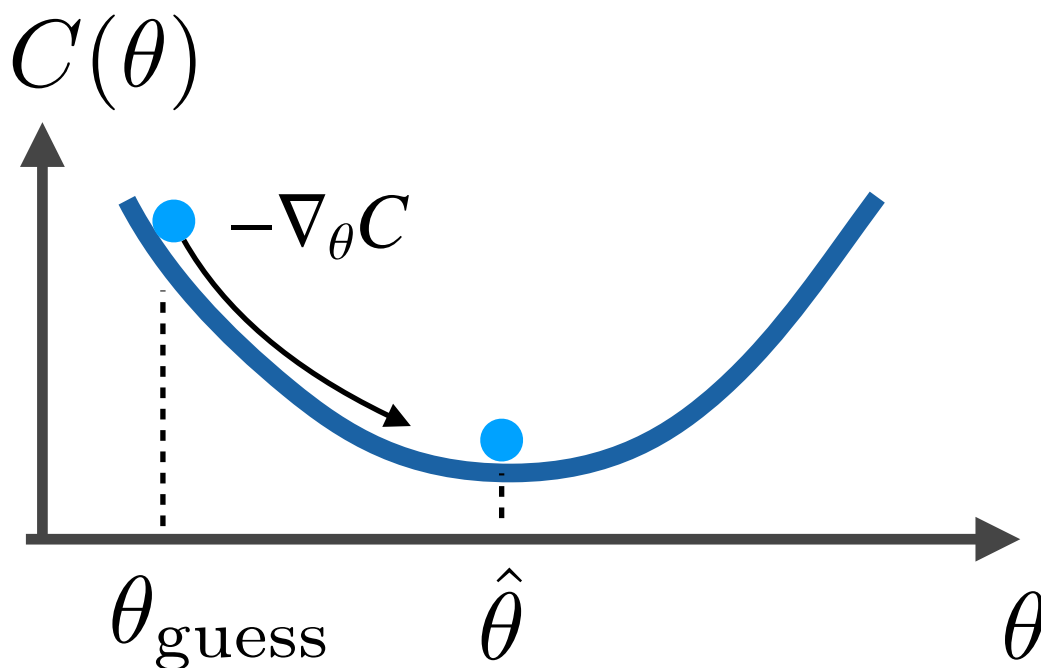
Adjoint モデル

$$-\frac{d}{dt}\lambda_t = (\nabla_x f)^\top \lambda_t + \sum_{t' \in T^{\text{obs}}} \delta(t - t') \nabla_{x_{t'}} C$$

$$\lambda_0 = \nabla_\theta C$$

$$\lambda_T = 0$$

4次元変分法による初期値最適化



- ① 初期推定値を設定
- ② シミュレーションモデルを解く
- ③ Adjoint モデルを時間後る向きに解く
- ④ 勾配に従って少し動かす。①へ戻る。

Adjointモデルの計算コスト ≡ シミュレーションモデルの計算コスト

➡ 全体の計算コスト = (シミュレーション時間) × (反復回数)

c.f. 数値微分 (シミュレーション時間) × (変数の数) × (反復回数)

4次元変分法の適用：反応拡散系

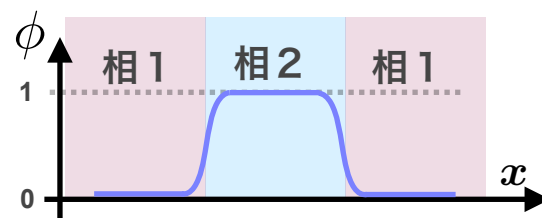
Allen-Cahn モデル (phase-field モデル)

2つの相の時空間発展を記述

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

$$\frac{\partial m}{\partial t} = 0$$

$\phi(x, t)$: Phase-field 変数

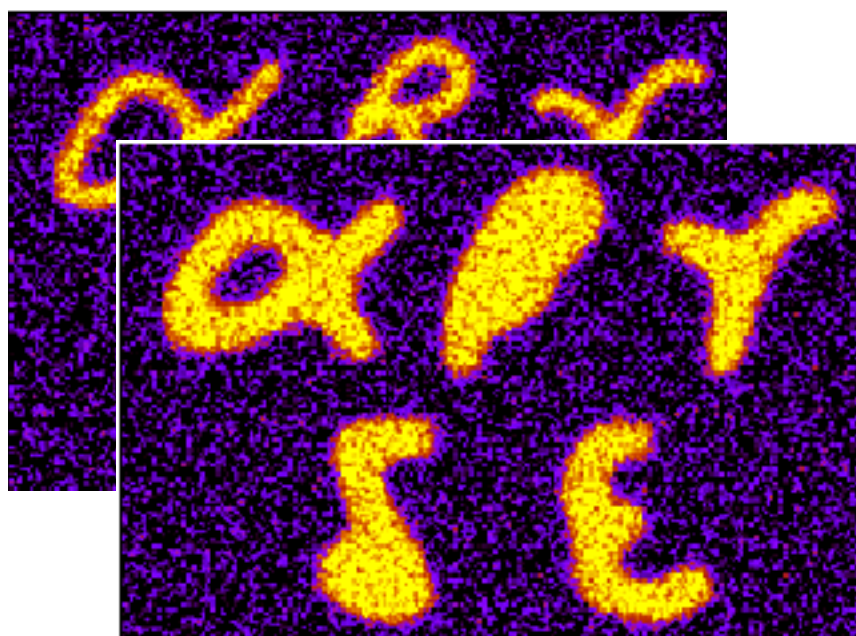


m : 相境界移動方向を決めるパラメータ

TDGL方程式、結晶成長モデル、延焼モデル、...



問題設定



Noisy なスナップショットの時系列データから

- ϕ の初期値 $\phi(x, 0)$
- m の値

を4次元変分法によって推定 (**60,001次元**)

詳細な設定

ノイズ分布: $q(\omega) = N(0, 0.3^2)$ 事前分布: 一様分布

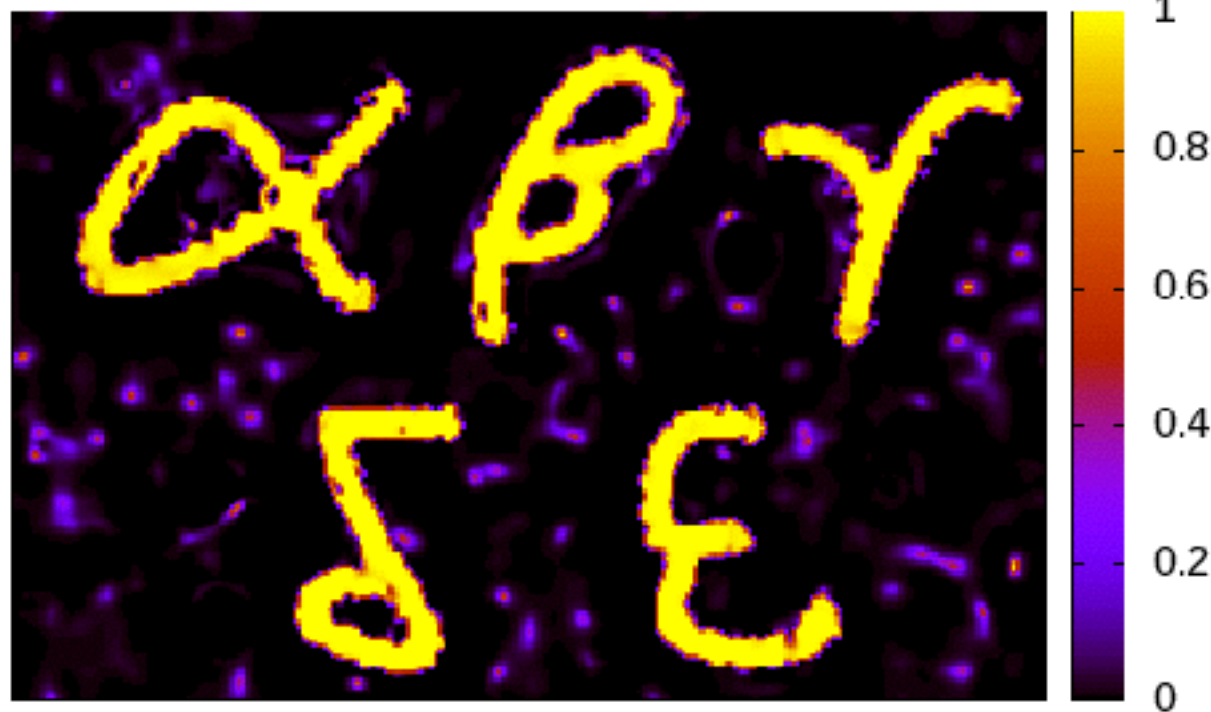
データ取得: 時間窓 $[5\tau, 30\tau]$ を 0.1τ 間隔

最適化法: L-BFGS-B 法

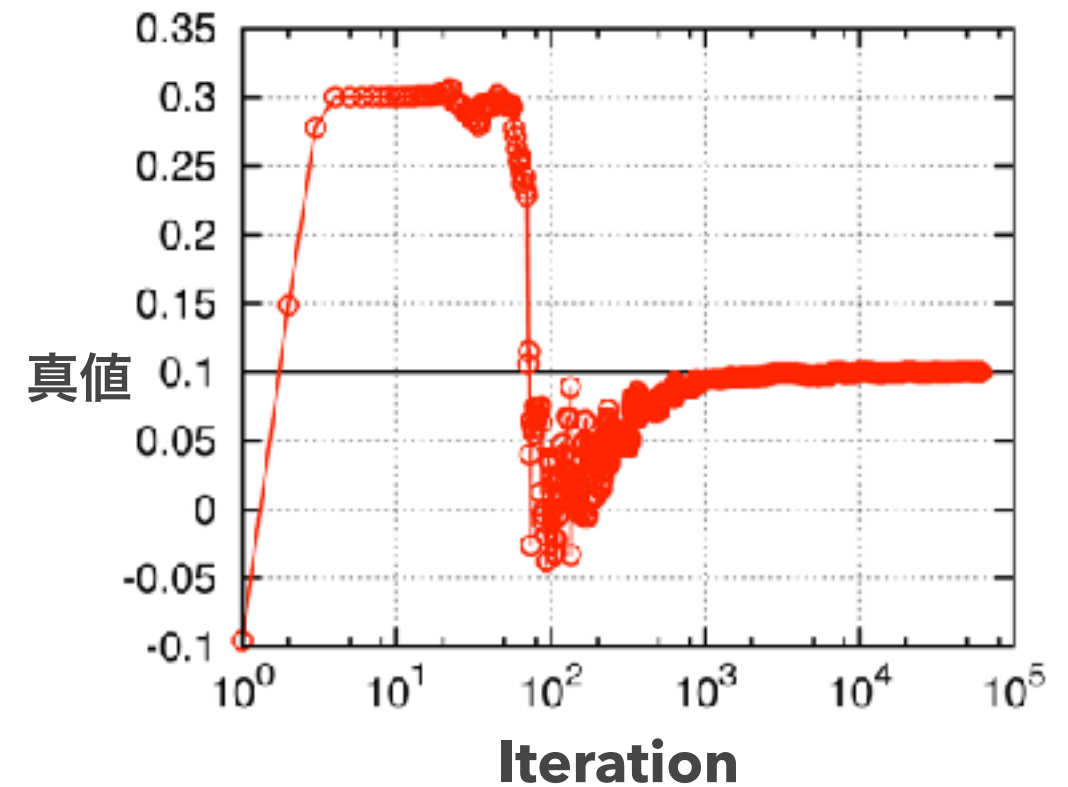
4次元変分法の適用：反応拡散系

Ito et al., Phys. Rev. E, 94, 043307 (2016)

$\phi(x, 0)$ の推定



m の推定



4次元変分法の適用：金属結晶粒成長

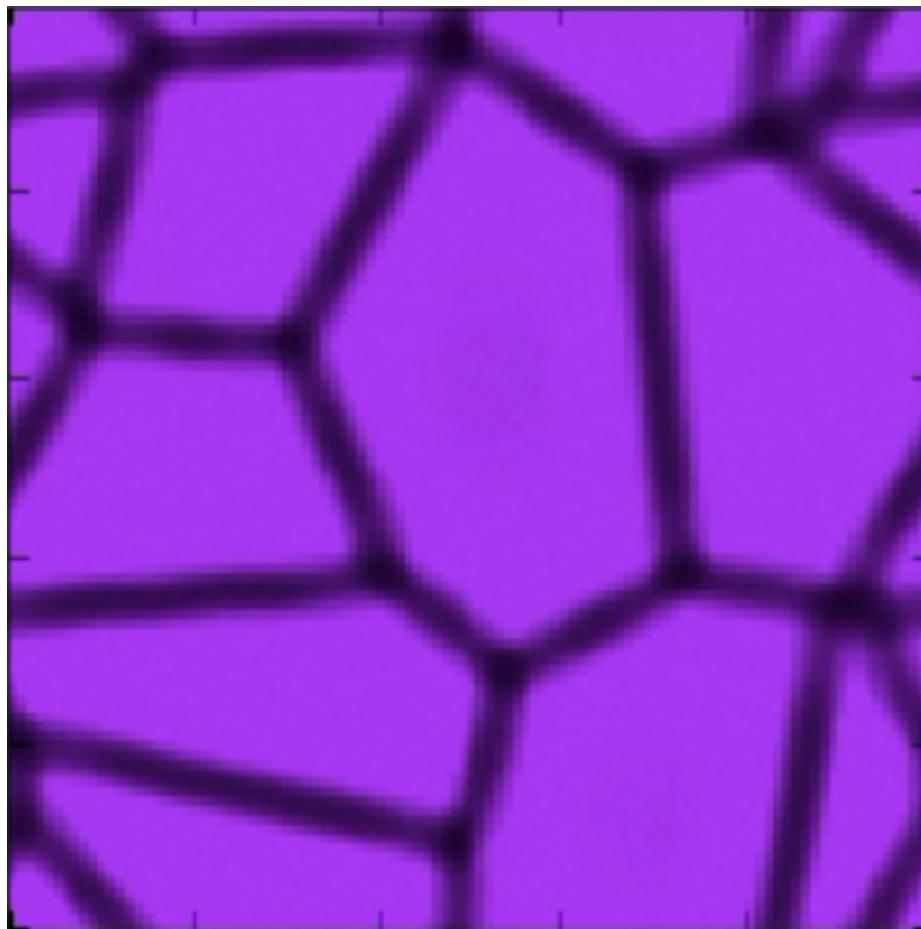
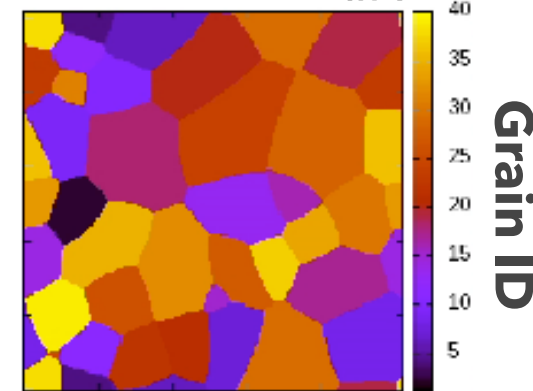
Multi-phase-field モデル

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \gamma \left(\epsilon^2 \Delta \phi_i + 2\phi_i^2 - 2\phi_i \sum_{j=1}^n \phi_j^2 \right)$$

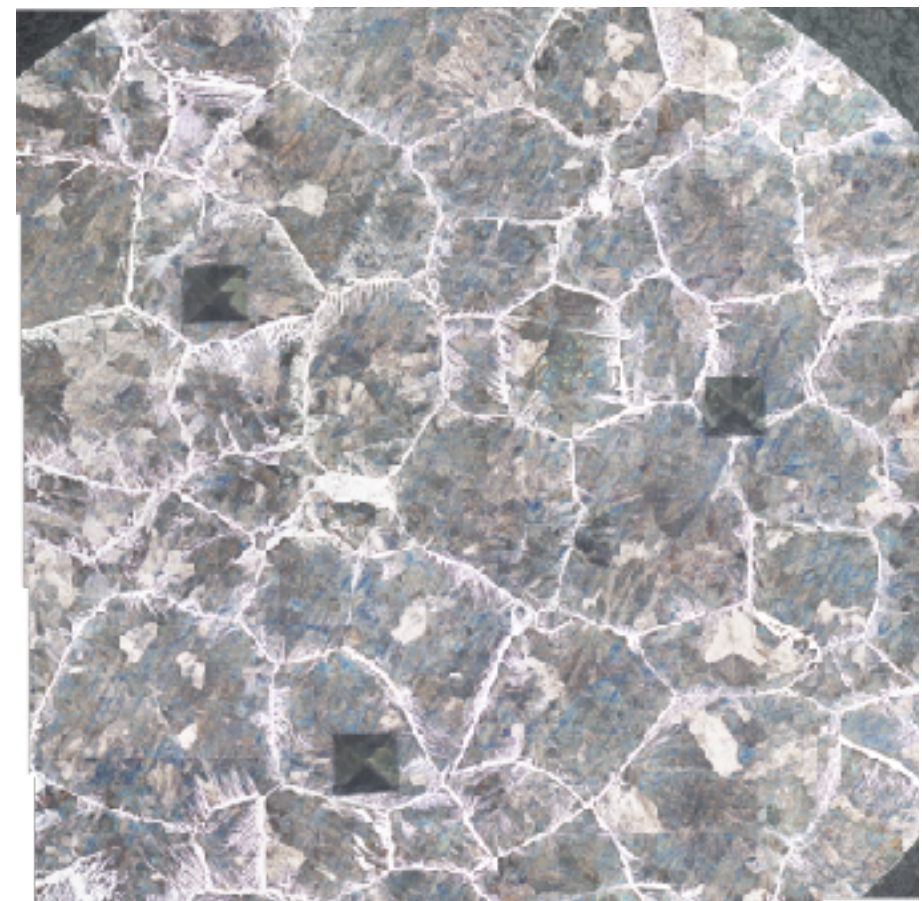
$i=1,\dots,n$: ドメイン (粒) の通し番号

Ito et al., STAM,18:1, 857-869 (2017)

シミュレーション結果



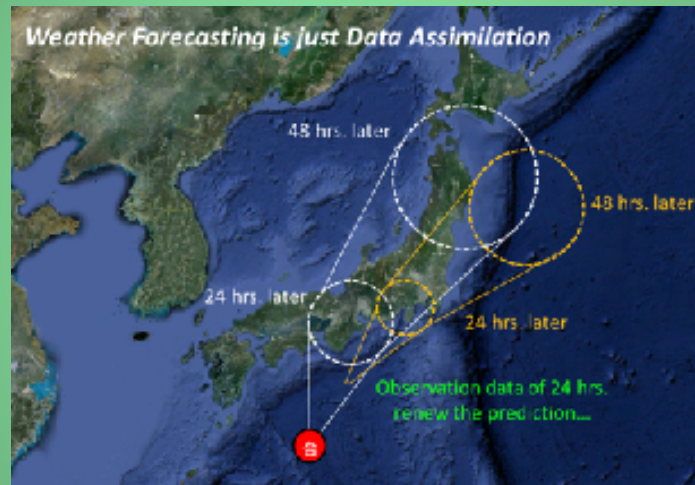
粒構造推定（擬似データによる実験）



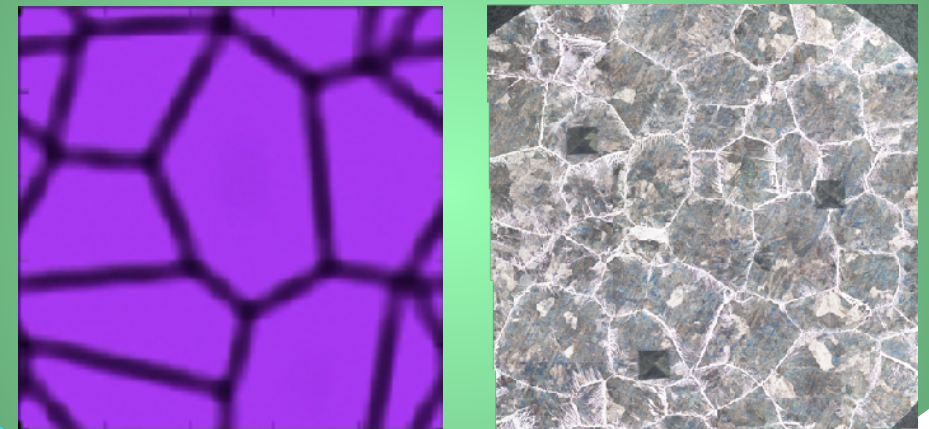
鋼構造材料の表面写真

4次元変分法の広がり

気象・海洋

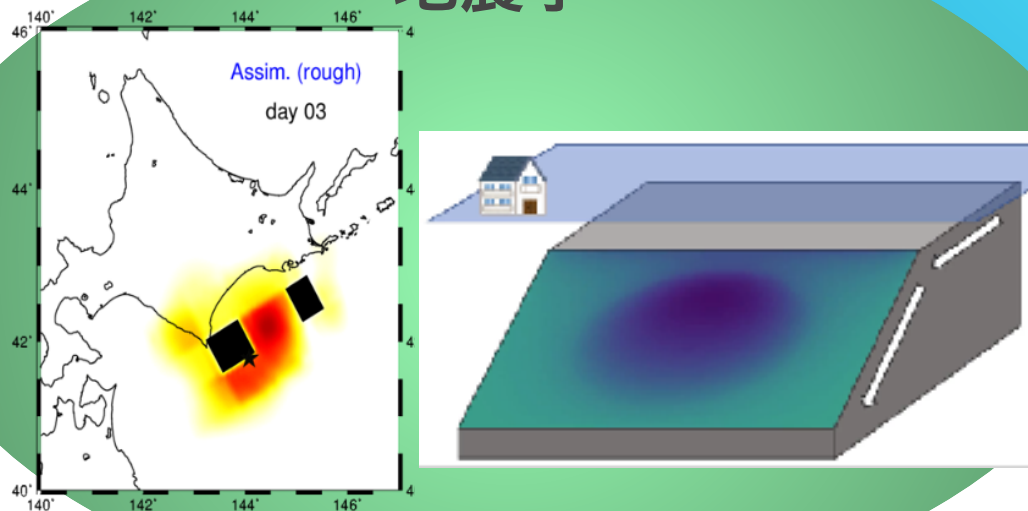


材料科学

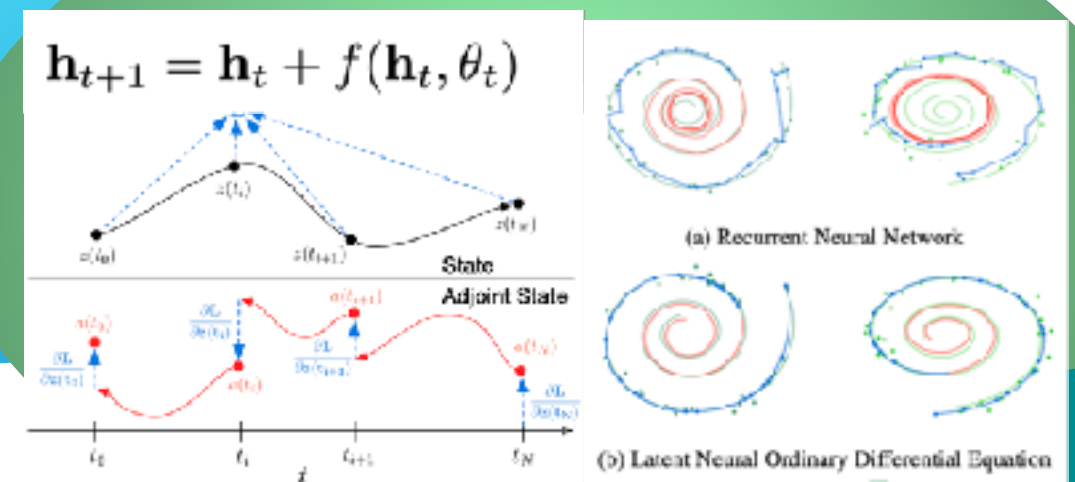


時空間発展するモデルの最適化・逆問題

地震学



ニューラルネットワーク



Chen et al. (2018)

4次元変分法における不確実性評価アルゴリズム

Ito et al., Phys. Rev. E, 94, 043307 (2016)

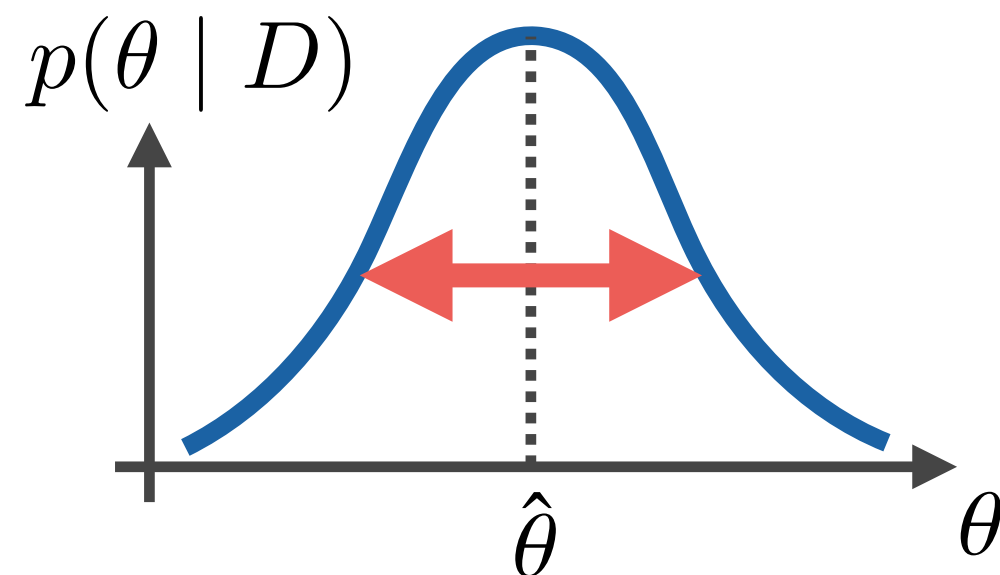
Ito et al., STAM, 18:1, 857-869 (2017)

4次元変分法による不確実性評価

4次元変分法の改善したいところ

- 4次元変分法単体では事後分布の形状評価は**原理的に不可能**
 - 分散くらいは評価できないか？
 - 推定の不確実性・信頼性評価
 - サンプルング法との組み合わせ？
 - 計算回数をなるべく減らしたい

➡ ラプラス近似による不確実性評価

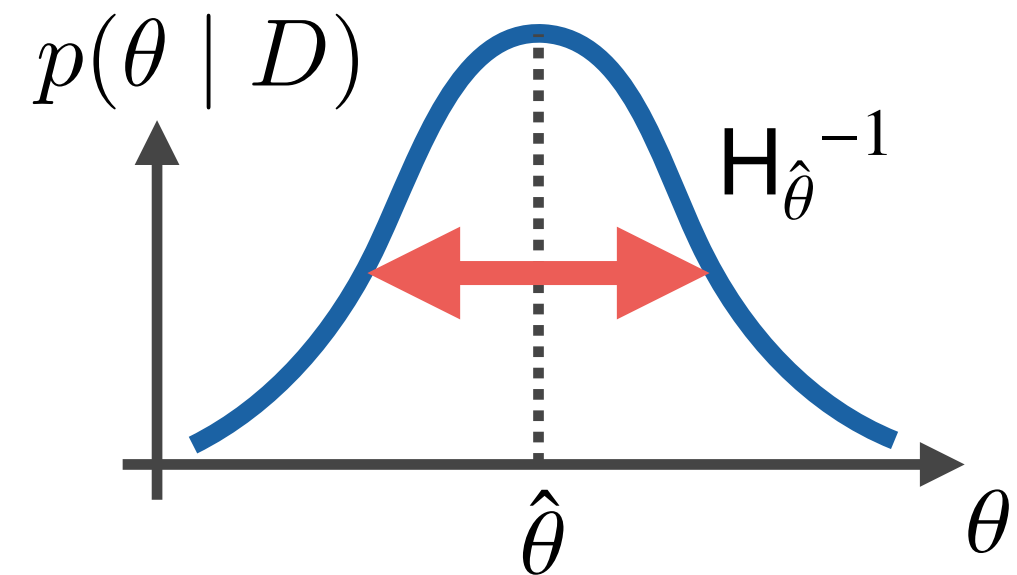


ラプラス近似

$$C(\theta) \sim C(\hat{\theta}) + \frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^\top H_{\hat{\theta}}(\theta - \hat{\theta}) \quad H_{\hat{\theta}} = \nabla_{\hat{\theta}} \nabla_{\hat{\theta}}^\top C : \text{ヘッセ行列}$$

↓

$$p(\theta | D) \sim \sqrt{\frac{\det H_{\hat{\theta}}}{(2\pi)^N}} \exp \left[-\frac{1}{2}(\theta - \hat{\theta})^\top H_{\hat{\theta}}(\theta - \hat{\theta}) \right]$$



→ ヘッセ行列/逆行列の大きさは (変数の数)²

→ 直接法に基づいてヘッセ逆行列を計算しようとする

$$\text{計算コスト} = \underbrace{(\text{シミュレーション時間}) \times (\text{変数の数})^2}_{\text{要素計算}} + \underbrace{(\text{変数の数})^3}_{\text{逆行列計算}}$$

ヘッセ行列/逆行列の直接計算は避けたい

クリロフ部分空間法

ヘッセ逆行列要素を部分的に抽出することを考える

$$Hy = b \quad b = e_i : \text{単位行列の列ベクトル に取れば}$$
$$y_i = (H_\theta^{-1})_{i,i} \text{ は分散、 } y_j = (H_\theta^{-1})_{i,j} \text{ は共分散}$$

クリロフ部分空間法

$$\mathcal{K}_r(H, b) = \text{span}\{b, Hb, H^2b, \dots, H^{r-1}b\}$$

- 共役勾配(CG)法
- 共役残差(CR)法
- 一般化最小残差(GMRES)法,...

CR法の疑似コード

Set an initial guess r_0

Compute $s_0 = b - Hr_0, p_0 = r_0$

For $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\alpha_k = (\underline{Hs_k}, s_k) / (\underline{Hs_k}, \underline{Hs_k})$$

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k p_k$$

$$s_{k+1} = s_k - \alpha_k \underline{Hp_k}$$

$$\beta_k = (\underline{Hs_{k+1}}, s_{k+1}) / (\underline{Hs_k}, s_k)$$

$$p_{k+1} = s_{k+1} + \beta_k p_k$$

$$\underline{Hp_{k+1}} = \underline{Hs_{k+1}} + \beta_k \underline{Hp_k}$$

End For

- ヘッセ行列-ベクトル積が高速に計算できれば
逆行列要素が高速に抽出可能になる

Second-order adjoint (SOA) 法

シミュレーションモデルおよび Adjoint モデルを各変数について線形化する

シミュレーションモデル

$$\frac{d}{dt}x_t = f(x_t) \quad x_0 = \theta$$

Adjoint モデル

$$-\frac{d}{dt}\lambda_t = (\nabla_x f)^\top \lambda_t + \sum_{t' \in T^{\text{obs}}} \delta(t - t') \nabla_{x_{t'}} C$$

$$\lambda_T = 0 \quad \lambda_0 = \nabla_\theta C$$

Second-order adjoint (SOA) 法

シミュレーションモデルおよび Adjoint モデルを各変数について線形化する

Tangent linear (TL) モデル

$$\frac{d}{dt}\delta_t = (\nabla_x f) \delta_t \quad \delta_0 = \underline{r}$$

Second-order adjoint (SOA) モデル

$$-\frac{d}{dt}\xi_t = (\nabla_x f)^\top \xi_t + \{(\nabla_x \nabla_x f) \delta_t\}^\top \lambda_t + \sum_{t' \in T^{\text{obs}}} \delta(t - t') \nabla_{x_t} \nabla_{x_t}^\top C \delta_t$$

$$\xi_T = 0 \quad \xi_0 = H_\theta \delta_0 = \underline{H_\theta r}$$

TLモデルとSOAモデルを組み合わせることで、
ヘッセ行列と任意のベクトルの積をベクトルとして出力することができる！

SOA 法によるヘッセ行列-ベクトル積の計算

TL モデル

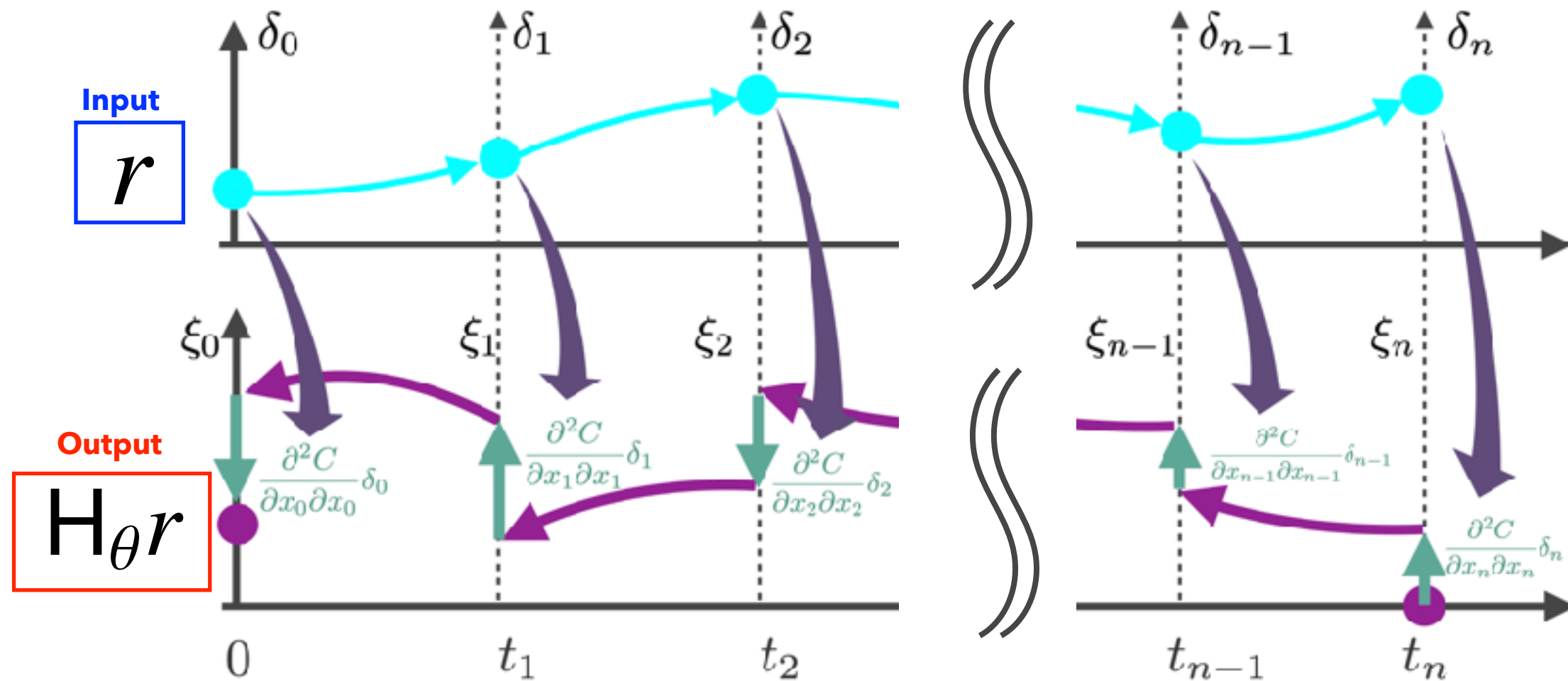
$$\frac{d}{dt}\delta_t = (\nabla_x f) \delta_t$$

$$\delta_0 = r$$

SOAモデル

$$-\frac{d}{dt}\xi_t = (\nabla_x f)^\top \xi_t + \{(\nabla_x \nabla_x f) \delta_t\}^\top \lambda_t + \sum_{t' \in T^{\text{obs}}} \delta(t - t') \nabla_{x_t} \nabla_{x_{t'}}^\top C \delta_{t'}$$

$$\xi_T = 0 \quad \xi_0 = H_\theta \delta_0 = H_\theta r$$



$$T^{\text{obs}} = \{0, t_1, t_2, \dots, t_n = T\}$$

SOA 法を用いた不確実性評価法

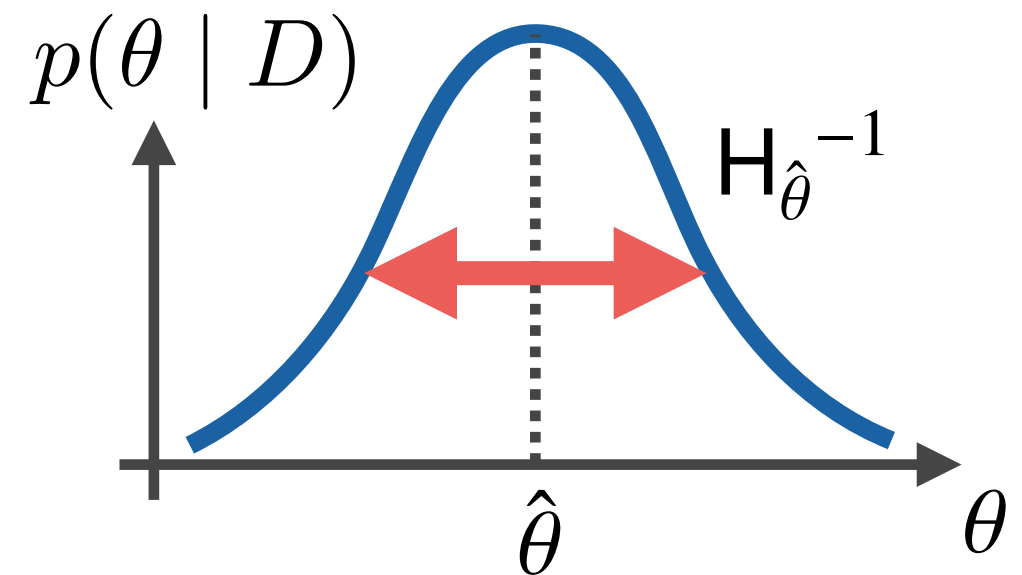
$$Hy = b$$

① y の初期値を設定

② TL モデルを解く

③ SOA モデルを時間後ろ向きに解く

④ クリロフ部分空間法で更新。②へ戻る。



$b = e_i$ に取れば $y_i = (H_{\theta}^{-1})_{i,i}$ は分散、 $y_j = (H_{\theta}^{-1})_{i,j}$ は共分散

TL, SOAモデルの計算コスト $\approx$ シミュレーションモデルの計算コスト

➡ 逆行列の計算コスト = (シミュレーション時間) $\times$ (反復回数) $\times$ (変数の数)

1 列のみの抽出であれば、(シミュレーション時間) $\times$ (反復回数)

c.f. 直接法 (シミュレーション時間) $\times$ (変数の数) 2 + (変数の数) 3

不確実性評価法の適用

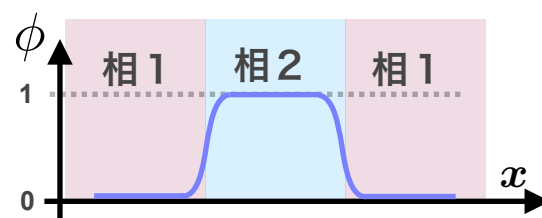
Allen-Cahn モデル (phase-field モデル)

2つの相の時空間発展を記述

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

$$\frac{\partial m}{\partial t} = 0$$

$\phi(x, t)$: Phase-field 変数

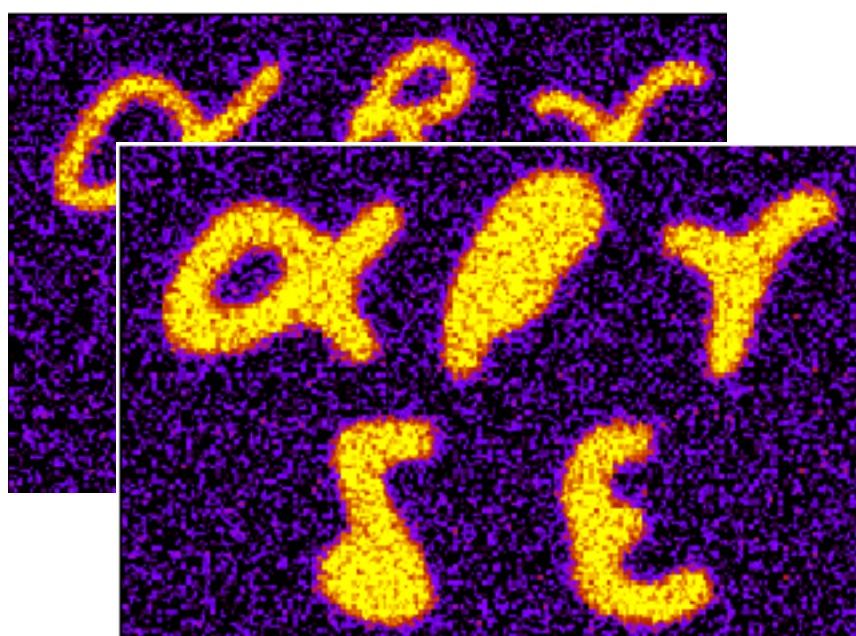


m : 相境界移動方向を決めるパラメータ

TDGL方程式、結晶成長モデル、延焼モデル、...



問題設定



Noisy なスナップショットの時系列データから

- m の不確実性 δm

(60,001次元空間中の事後分布の標準偏差1つだけ)

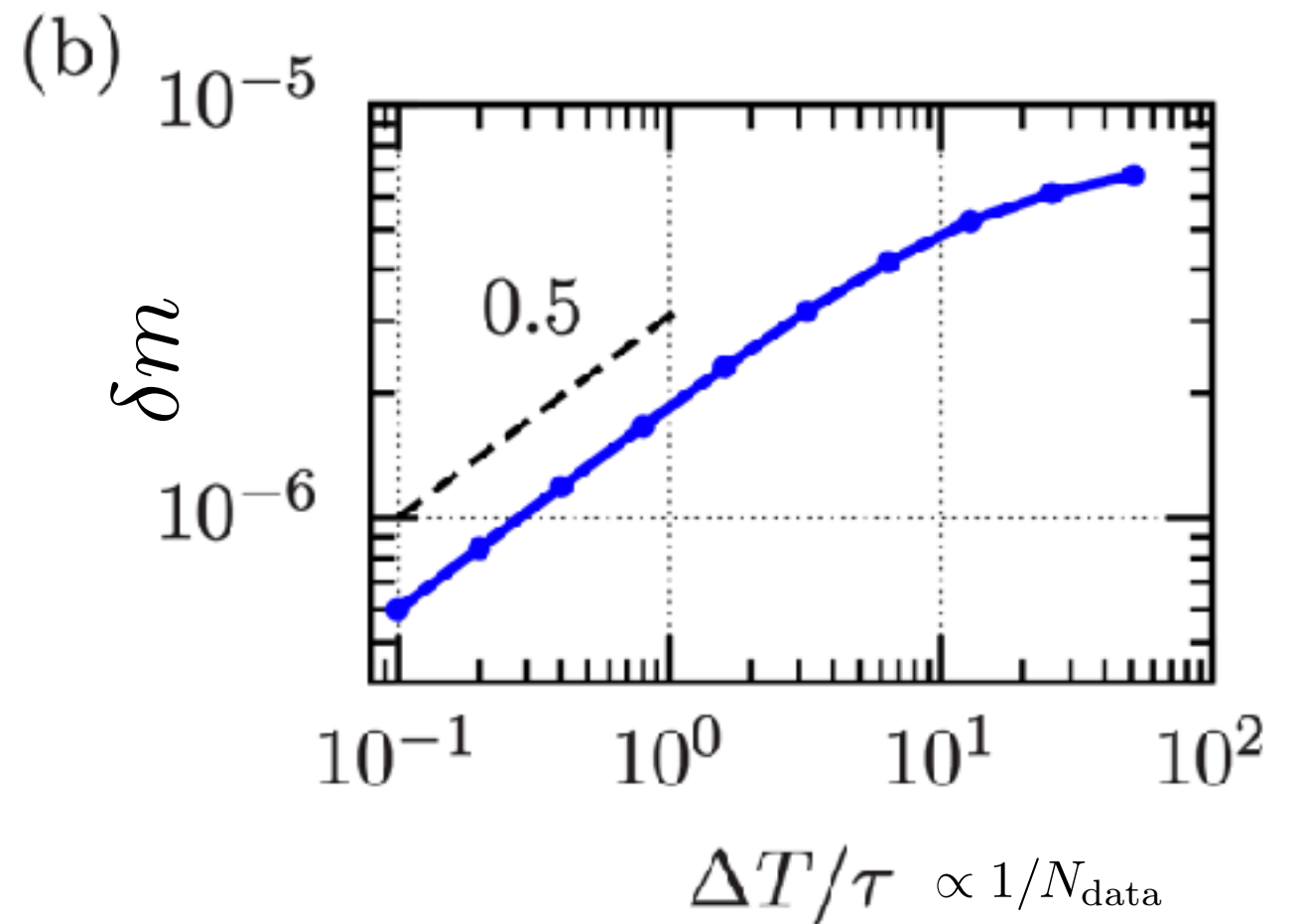
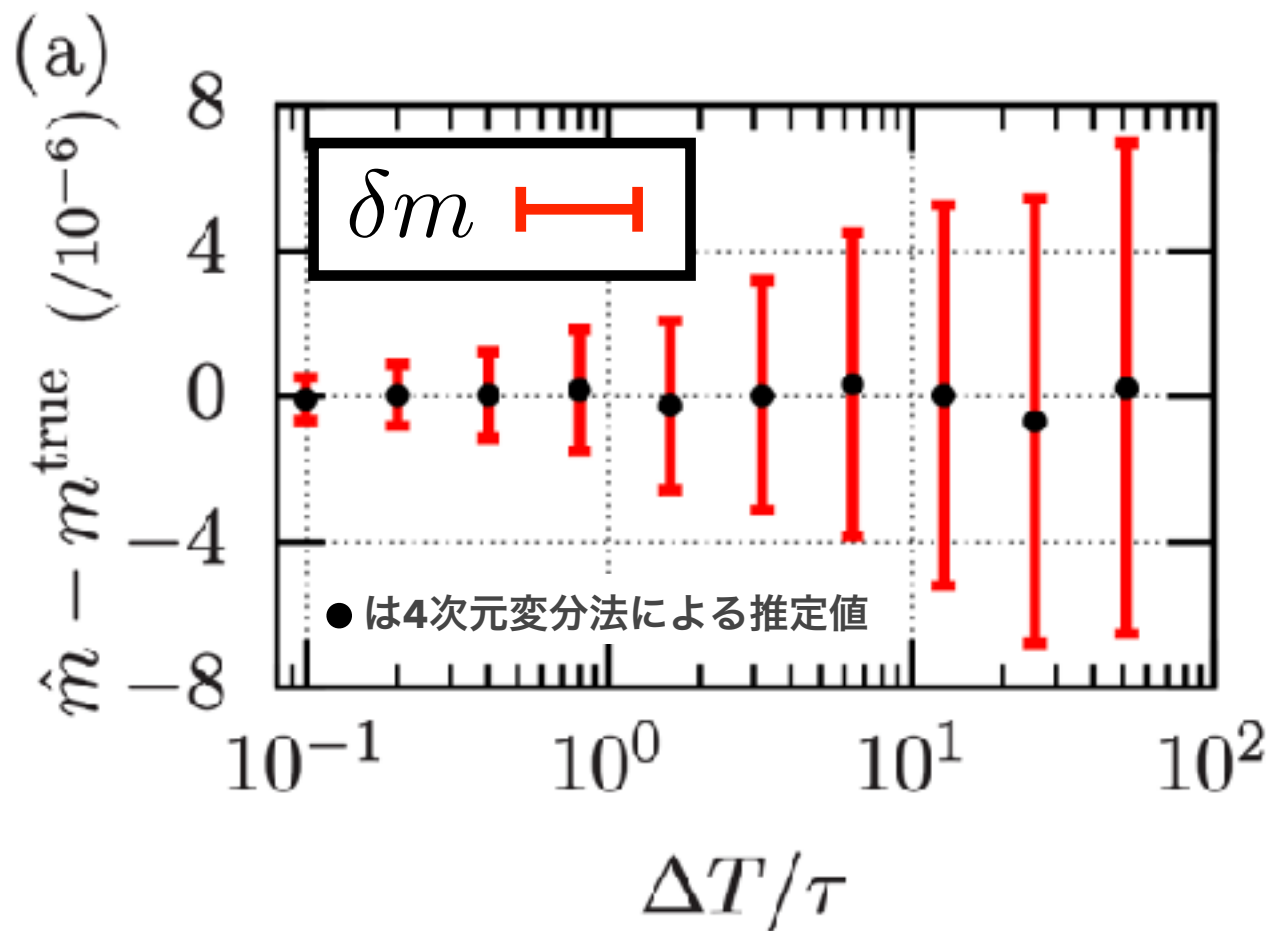
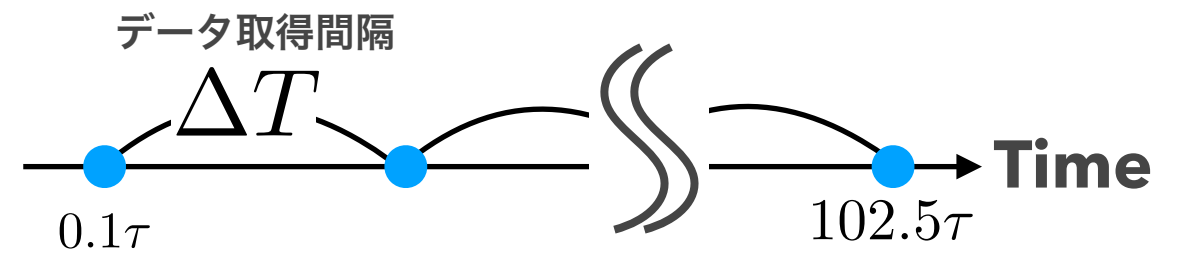
のみをSOA法によって選択的に評価

詳細な設定

事前分布: 一様分布 ノイズ分布: $q(\omega) = N(0, 0.01^2)$

データ取得: 時間窓 $[0.1\tau, 102.5\tau]$ クリロフ部分空間法: 共役残差法

不確実性評価法の適用



高次元の事後分布からの選択的な不確実性抽出が可能に

Ito et al., Phys. Rev. E, 94, 043307 (2016)

不確実性を厳密に評価するアルゴリズム

Ito et al., BIT numerical mathematics (2021)

Ito et al., arXiv:2109.13143

Question

Adjoint モデルや SOA モデルを解いて得られる $\nabla_{\theta} C$ や $H_{\theta} \gamma$ の解析解は
コスト関数を直接微分して得られるものと**厳密**に一致する。

しかし実際は、Runge–Kutta 法などの数値積分法を使って
時間方向に数値積分する必要がある → 離散化誤差や丸め誤差により**厳密でなくなる**。

Forward モデルは研究者自身が数理的・物理的背景から積分法を決める。

Q. 他のモデルはどうすべきか？誤差を抑える最適な積分法は存在するか？

Forward model

$$\frac{d}{dt} x_t = f(x_t)$$

Adjoint model

$$-\frac{d}{dt} \lambda_t = (\nabla_x f)^{\top} \lambda_t$$

Tangent linear (TL) model

$$\frac{d}{dt} \delta_t = (\nabla_x f) \delta_t$$

SOA model

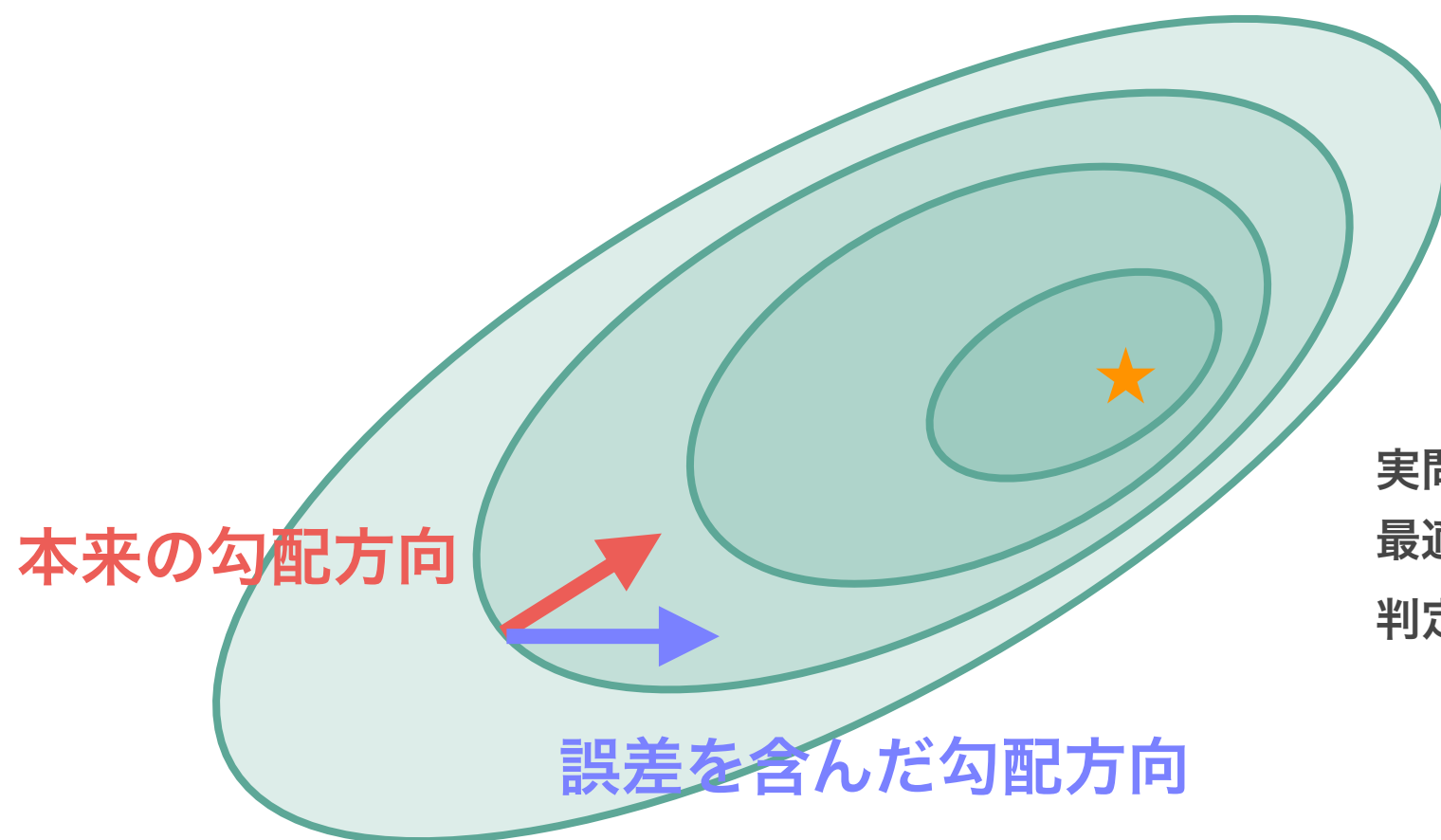
$$-\frac{d}{dt} \xi_t = (\nabla_x f)^{\top} \xi_t + \{(\nabla_x \nabla_x f) \delta_t\}^{\top} \lambda_t$$

A. 離散化誤差を厳密にゼロにする最適な積分法のセットを構築できる。

Ito et al., BIT numerical mathematics (2021)

厳密な勾配計算の重要性

勾配に誤差があると...



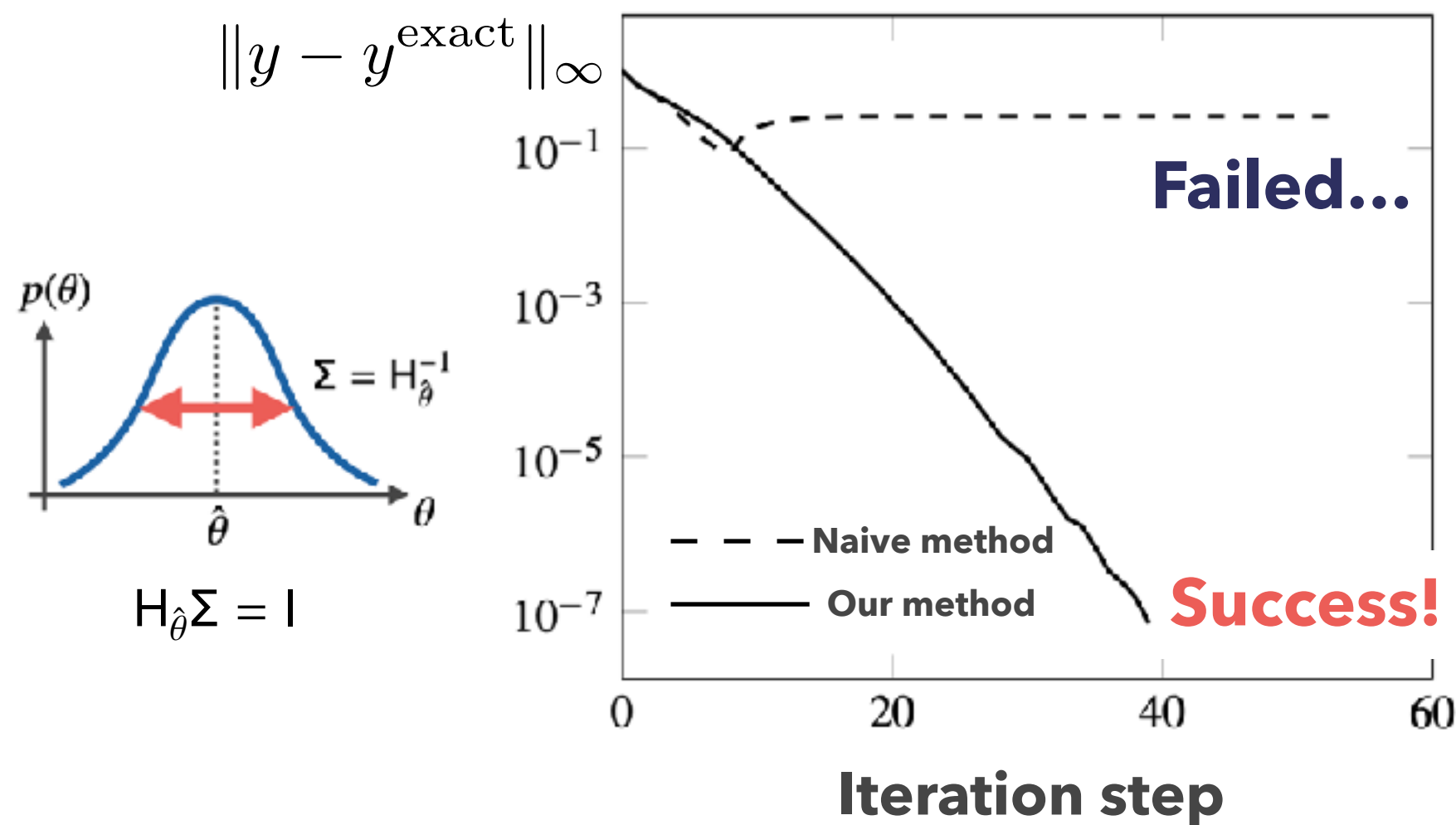
実問題では答えを知らないので、
最適化に成功/失敗しているかどうか
判定する術がない...

確率的には収束するかもしれないが、
無駄な勾配計算が発生し、
採用した最適化法本来のパフォーマンスが発揮できない

厳密なヘシアン計算の重要性

ヘシアン-ベクトル積に誤差があると...

$Hy = b$ をクリロフ部分空間法で解いた際の収束履歴



実問題では答えを知らないので、
求解に成功/失敗しているかどうか
判定する術がない...

推定値の信頼性を与える不確実性
それ自体の信頼性がなくなってしまう

正確な H の計算により
正しい不確実性の求解を
保証できる!

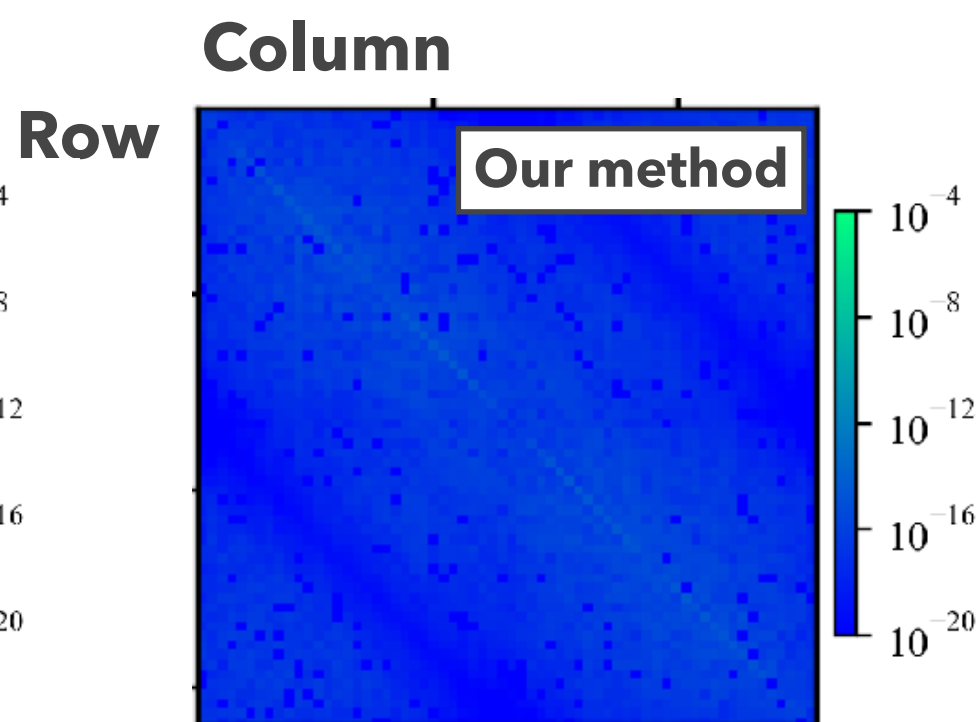
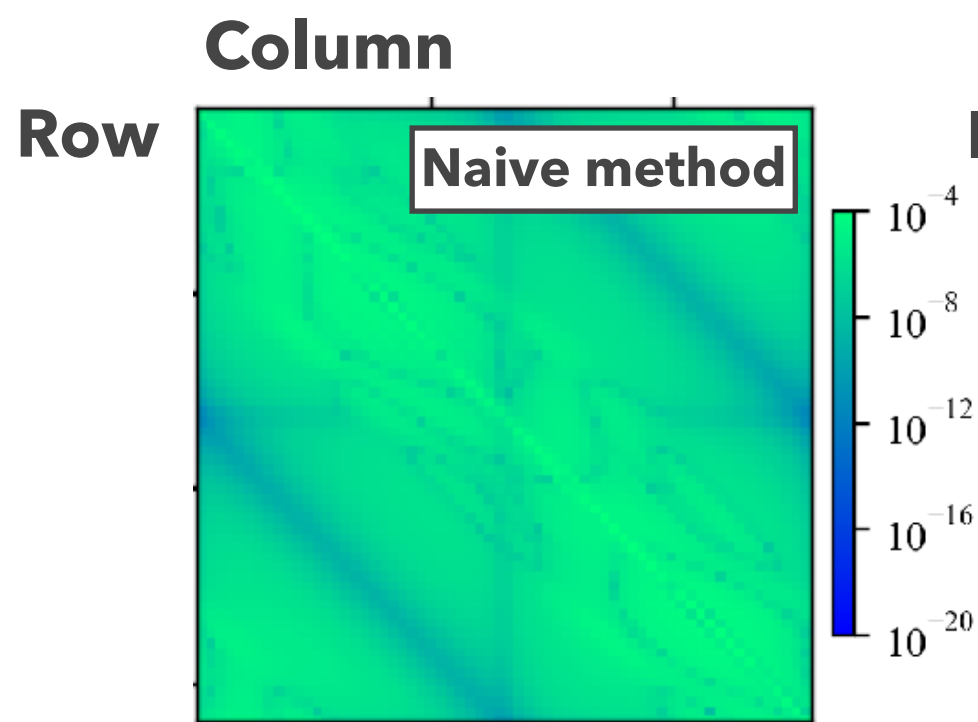
勾配&ヘシアンの厳密計算

4つの方程式に内在するシンプレクティック性を考慮した数値積分法を提案

Forward, adjoint,
TL, SOA

背後にある保存量を
数値的に厳密に保存

ヘシアンに含まれる誤差



計算コスト
&必要メモリ

Naive method $\geq$ Our method

不変量

Q. そもそもなぜ Adjointモデルは厳密な勾配を計算できるのか？

A. TL モデルと adjoint モデルの間に時間不変量が存在する

$$\frac{d}{dt} (\delta_t^\top \lambda_t) = \left(\frac{d}{dt} \delta_t \right)^\top \lambda_t + \delta_t^\top \frac{d}{dt} \lambda_t = 0 \quad \rightarrow$$

$$\delta_t^\top \lambda_t = \delta_0^\top \lambda_0$$

$\lambda_t = \nabla_{x_t} C(x_t(\theta))$ と選べば、

$$\delta_t^\top \nabla_{x_t} C(x_t) = ((\nabla_\theta x_t) \delta_0)^\top \nabla_{x_t} C(x_t)$$

$$= \delta_0^\top \left[(\nabla_\theta x_t)^\top \nabla_{x_t} C(x_t) \right] = \delta_0^\top \nabla_\theta C(x_t) \quad \because x_t(\theta + \epsilon \delta_0) = x_t(\theta) + \epsilon \delta_t + O(\epsilon^2)$$

$$\rightarrow \lambda_0 = \nabla_\theta C(x_t(\theta))$$

$$\rightarrow \delta_t = (\nabla_\theta x_t) \delta_0$$

→ Adjointモデルへは、不変量を保存する数値積分法を採用すべき

e.g., Symplectic partitioned Runge–Kutta (SPRK) method
(Sanz-Serna, 2016)

TL model

$$\frac{d}{dt} \delta_t = (\nabla_x f) \delta_t$$

Adjoint model

$$-\frac{d}{dt} \lambda_t = (\nabla_x f)^\top \lambda_t$$

ヘシアンの厳密計算に向けて

不変量を保存する数値積分法をadjointモデルに適用することによって
厳密な勾配を計算できる (Sanz-Serna, 2016)

では、ヘシアン-ベクトル積では??

Forward model

$$\frac{d}{dt}x_t = f(x_t)$$

User-defined scheme

Tangent linear (TL) model

$$\frac{d}{dt}\delta_t = (\nabla_x f) \delta_t$$

Adjoint model

$$-\frac{d}{dt}\lambda_t = (\nabla_x f)^\top \lambda_t$$

**Invariant-preserving
scheme**

SOA model

$$-\frac{d}{dt}\xi_t = (\nabla_x f)^\top \xi_t + \{(\nabla_x \nabla_x f) \delta_t\}^\top \lambda_t$$

ヘシアンの厳密計算に向けて

アイデア：Adjoint モデルと SOA モデルの数学的等価性

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x_t &= f(x_t) & \frac{d}{dt}\delta_t &= (\nabla_x f) \delta_t \\ -\frac{d}{dt}\lambda_t &= (\nabla_x f)^\top \lambda_t & -\frac{d}{dt}\xi_t &= (\nabla_x f)^\top \xi_t + \{(\nabla_x \nabla_x f) \delta_t\}^\top \lambda_t\end{aligned}$$

拡大ベクトル $q_t = \begin{bmatrix} x_t \\ \delta_t \end{bmatrix}$ 、 $p_t = \begin{bmatrix} \xi_t \\ \lambda_t \end{bmatrix}$ を定義すると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}q_t &= \begin{bmatrix} f(x_t) \\ (\nabla_x f) \delta_t \end{bmatrix} = G(q_t) \\ -\frac{d}{dt}p_t &= \begin{bmatrix} (\nabla_x f)^\top \xi_t + \{(\nabla_x \nabla_x f) \delta_t\}^\top \lambda_t \\ (\nabla_x f)^\top \lambda_t \end{bmatrix} = (\nabla_q G)^\top p_t\end{aligned}$$

4つのモデルは 1つの大きなForward-adjoint 系を成す

→ 勾配と同様、invariant-preserving scheme により

厳密なヘシアン-ベクトル積が計算可能

Inhomogeneous wave equation

検証：1次元不均質媒質波動方程式を用いた速度構造の推定問題

$$\frac{\partial^2 U(z, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial z} \left[E(z) \frac{\partial U(z, t)}{\partial z} \right]$$

(空間方向には有限体積法で離散化)

時間積分法：

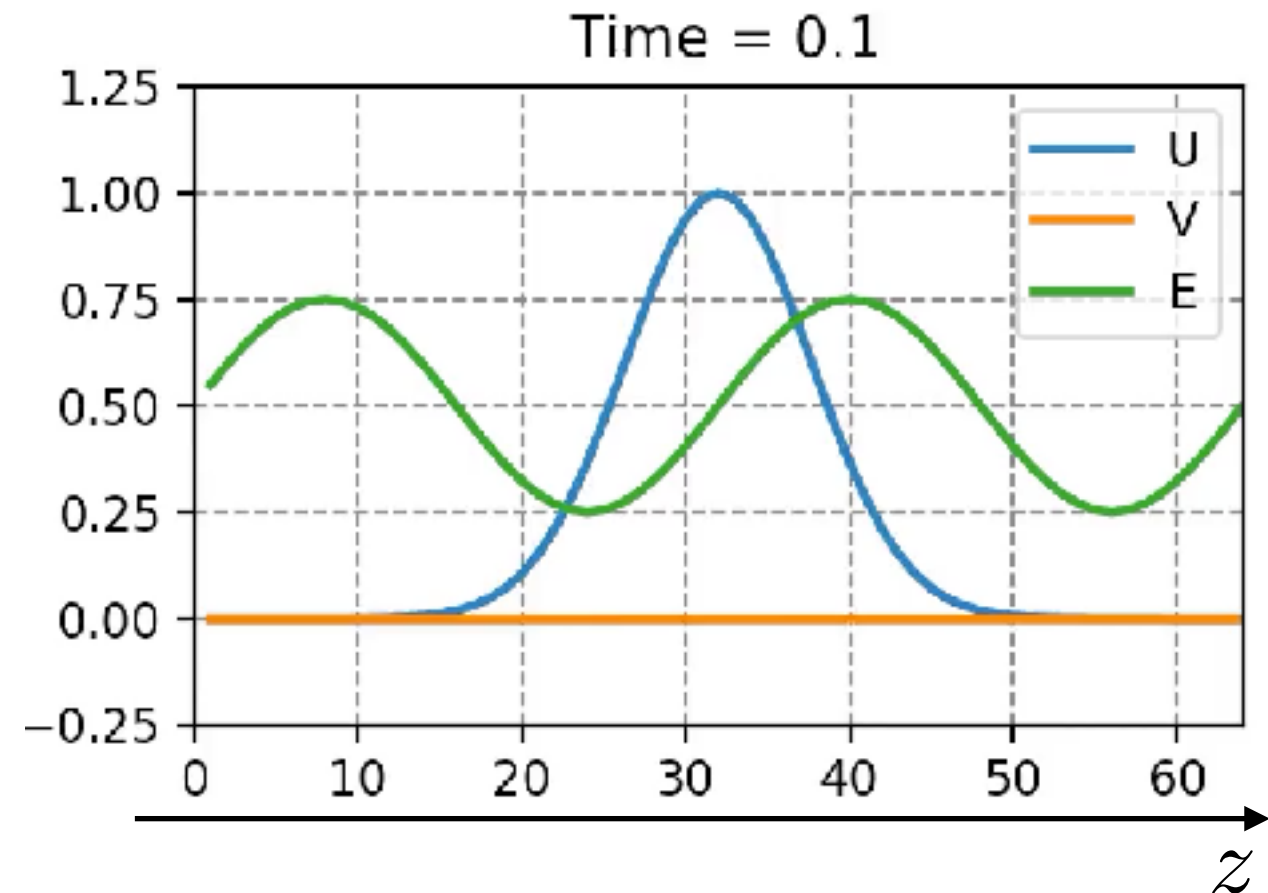
Heun method
(2-stage 2nd-order Runge-Kutta)

U と $\dot{U}$ の初期状態は既知と仮定

速度構造 E は未知 (推定対象)

コスト関数：

$$C(E) = \sum_{t_n \in T^{\text{obs}}} \|U_n(E) - U_n^{\text{obs}}\|_2^2, \quad \text{where } U^{\text{obs}} : U \text{ in the above movie}$$



Time integrator

Augmented forward model

$$\frac{d}{dt}q_t = G(q_t)$$

discretize

Heun method

$$\begin{aligned}q_{n+1} &= q_n + \frac{h}{2} (k_{n,1} + k_{n,2}), \\k_{n,1} &= G(Q_{n,1}), \\k_{n,2} &= G(Q_{n,2}), \\Q_{n,1} &= q_n, \\Q_{n,2} &= q_n + hk_{n,1}.\end{aligned}$$

Augmented adjoint model

$$-\frac{d}{dt}p_t = (\nabla_q G)^\top p_t$$

Naive
discretization

Heun method

$$\begin{aligned}p_n &= p_{n+1} + \frac{h}{2} (\bar{l}_{n,1} + \bar{l}_{n,2}), \\ \bar{l}_{n,2} &= \nabla_q G(q_{n+1})^\top P_{n,2}, \\ \bar{l}_{n,1} &= \nabla_q G(q_n)^\top P_{n,1}, \\ P_{n,2} &= p_{n+1}, \\ P_{n,1} &= p_{n+1} + h\bar{l}_{n,2}.\end{aligned}$$

Our discretization

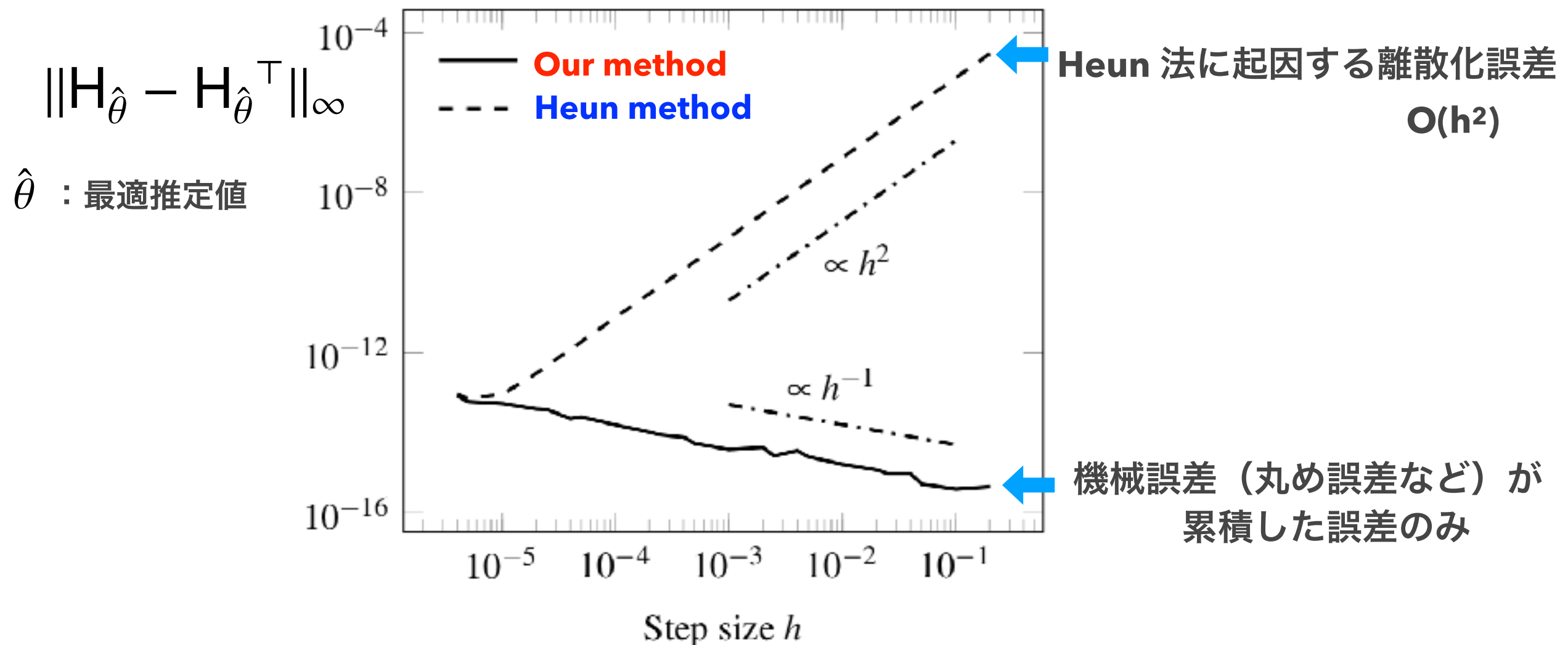
Our method

$$\begin{aligned}p_n &= p_{n+1} + \frac{h}{2} (\bar{l}_{n,1} + \bar{l}_{n,2}), \\ \bar{l}_{n,2} &= \nabla_q G(Q_{n,2})^\top P_{n,2}, \\ \bar{l}_{n,1} &= \nabla_q G(q_n)^\top P_{n,1}, \\ P_{n,2} &= p_{n+1}, \\ P_{n,1} &= p_{n+1} + h\bar{l}_{n,2}.\end{aligned}$$

Invariant-
preserving

ヘシアンに含まれる誤差

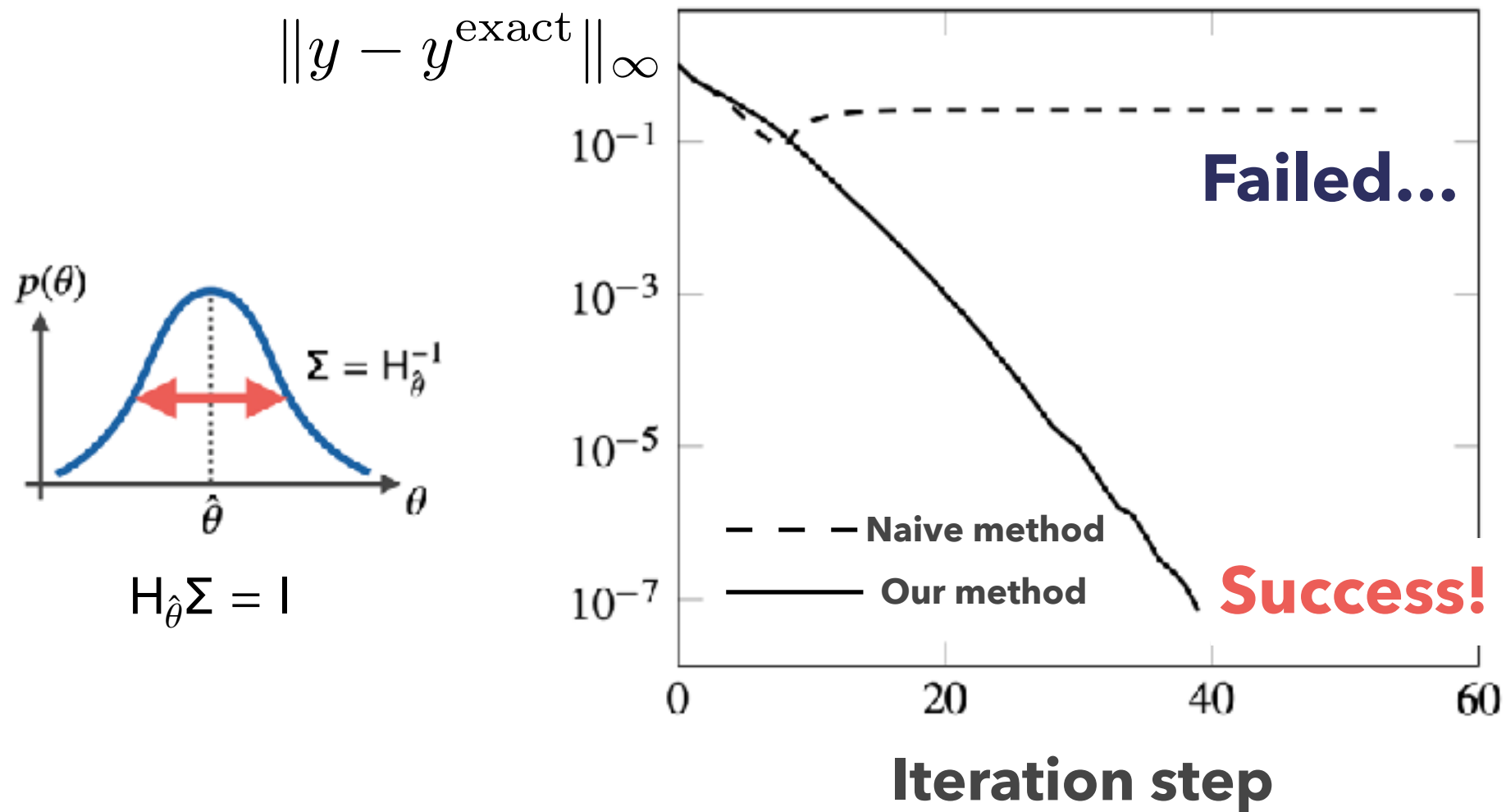
$\|H_\theta - H_\theta^\top\|_\infty$: 非対称度 (H_θ が正確に計算できていればゼロになる量)



提案手法は離散化誤差を一切含まない形でヘシアンを計算可能

Importance of exact Hessian computation

Convergence behavior when solving $Hy = b$
by a Krylov subspace method



実問題では答えを知らないので、
求解に成功/失敗しているかどうか
判定する術がない...

正確な H の計算により
正しい不確実性の求解を
保証できる!

信頼性のある不確実性評価が可能になった。
任意の大規模シミュレーションモデルへ適用が可能。

Model

Bungo Channel LSSE model

Hirahara and Nishikiori (2019)

Rate-and-state dependent friction

$$\tau(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}) \log v(\mathbf{x}, t) + B(\mathbf{x}) \log \theta(\mathbf{x}, t)$$

Aging law

$$\dot{\theta}(\mathbf{x}, t) = 1 - \frac{v(\mathbf{x}, t) \theta(\mathbf{x}, t)}{L(\mathbf{x})}$$

Balance equation

$$\dot{\tau}(\mathbf{x}, t) = -\eta v(\mathbf{x}, t) + \int d\mathbf{x}' [K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \{v(\mathbf{x}', t) - v_{pl}\} + k(\mathbf{x}') (v_{lock} - v_{pl})]$$

Parameters of interest

$A(\mathbf{x}), B(\mathbf{x}), L(\mathbf{x})$: Spatially dependent frictional parameters

Notation

$\mathbf{x} = (X, Y)^\top$

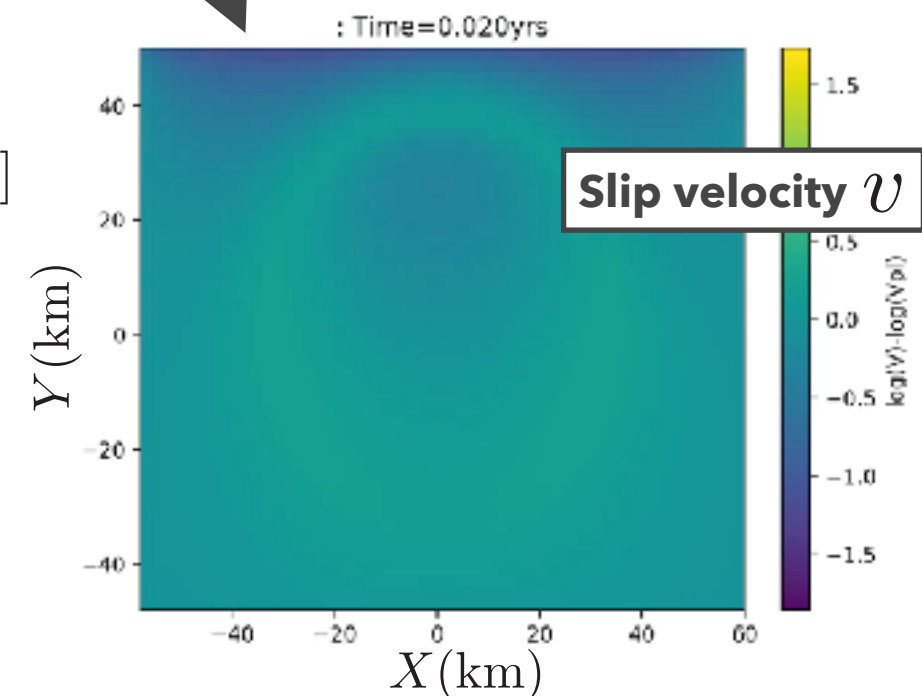
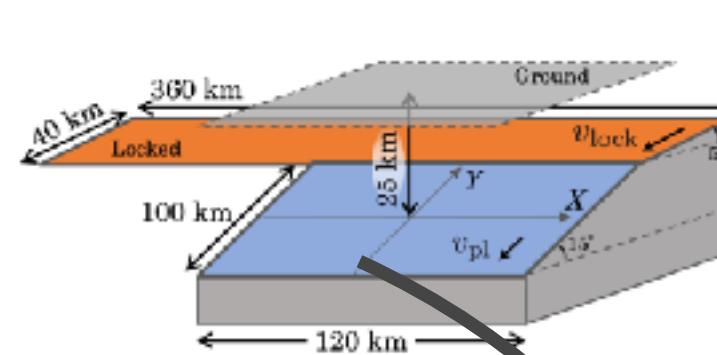
v : Slip velocity

θ : State variable

K, k : Green's functions

η : Damping parameter

v_{pl}, v_{lock} : Speeds of plates



Previous study assumed patch-like-constrained fields.

→ Fields in high-resolution need to be investigated to understand the physics.

Aim

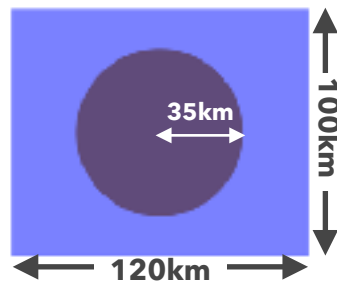
- * Obtain hi-res uncertainty fields of frictional parameters
- * Uncover the relation between the uncertainty fields and slip motion

Result

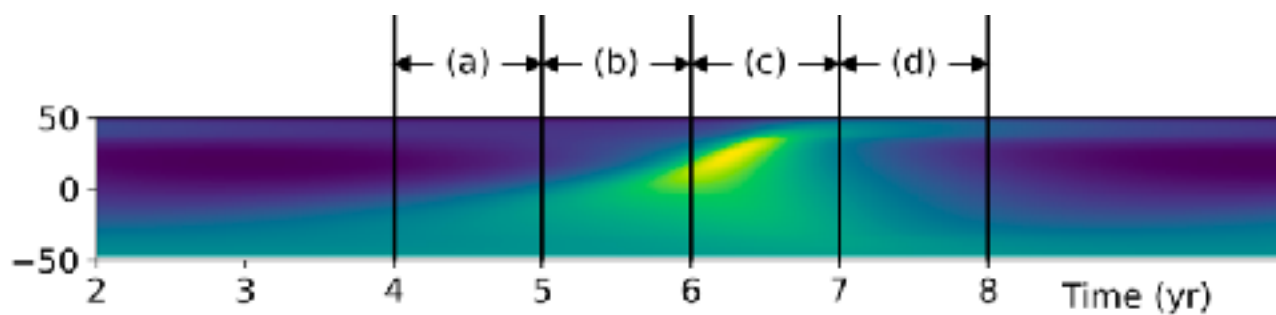
Problem setting

True parameters:

Parameters
 $A_1 = 100[\text{kPa}]$
 $B_1 = 135[\text{kPa}]$ ●
 $B_2 = 30[\text{kPa}]$ ■
 $L_2 = 22[\text{mm}]$



Data : Time evolution of field v
time window (a)–(d)

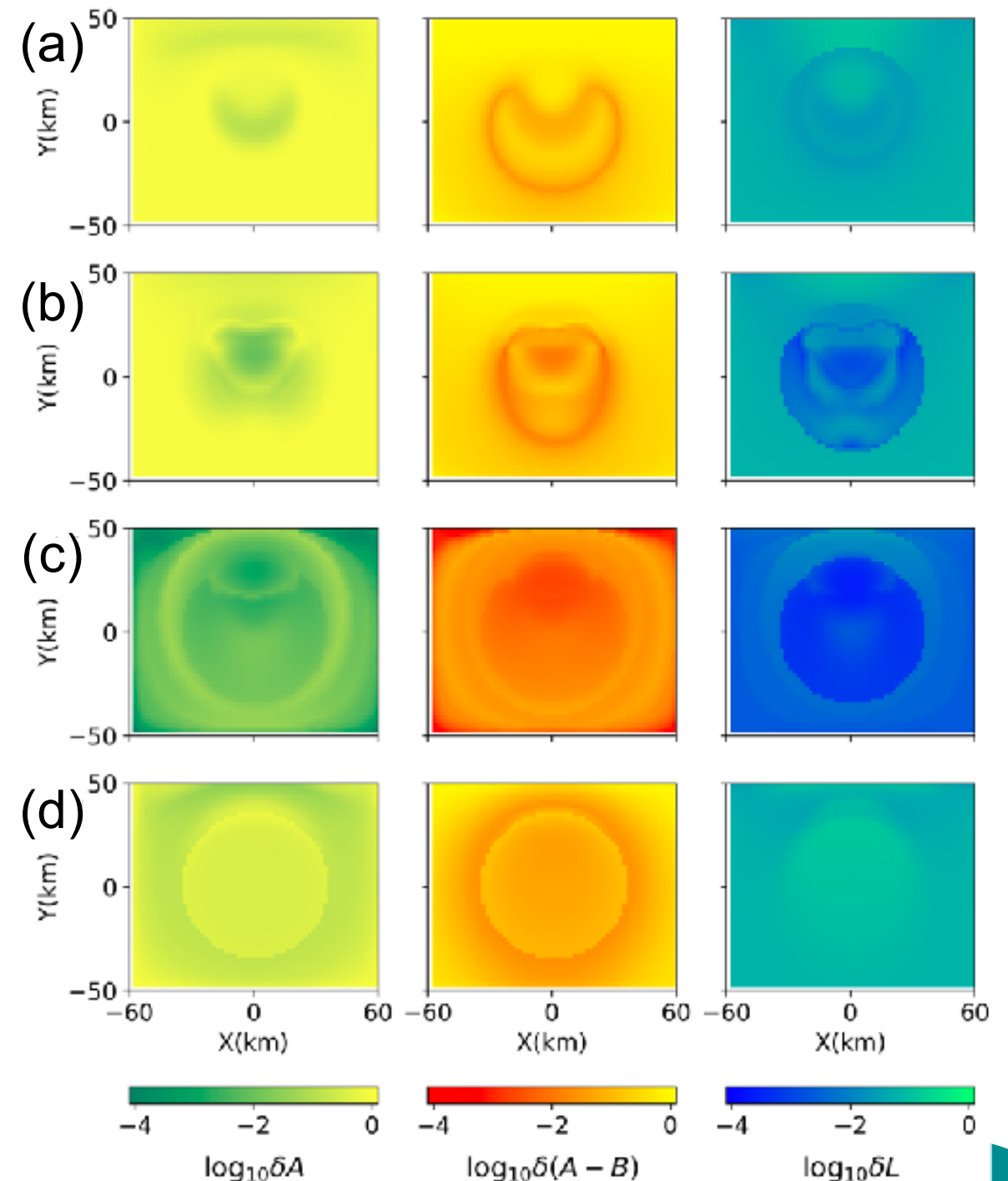


Cross-section view on $X=0$ line

The results say

- * Underlying uncertainty fields show very complex patterns despite simple parameter fields.
- * Seismic activity reduces the magnitude of uncertainty field.
→ Feedback to observational design

Obtained uncertainty fields

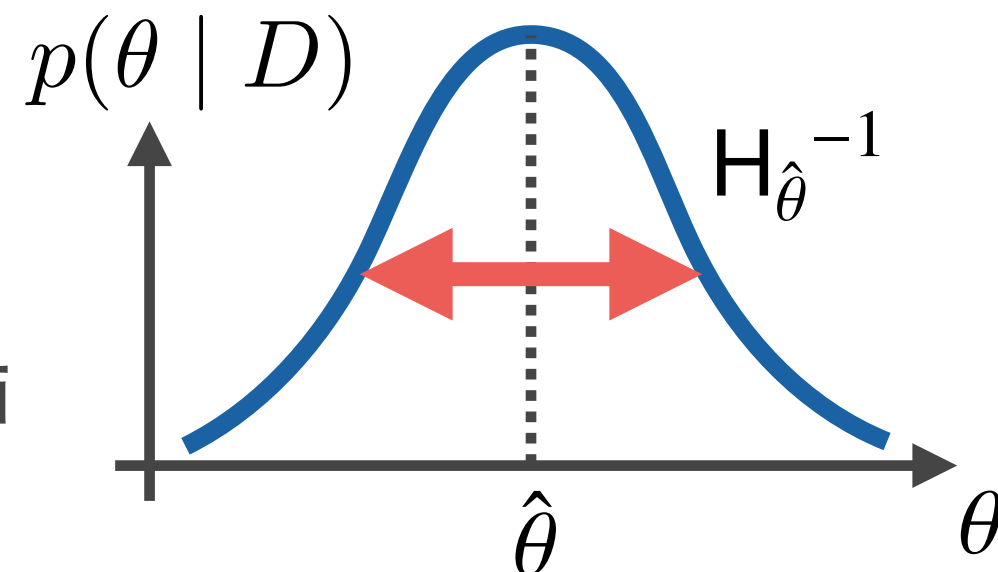


Ito et al., arXiv:2109.13143

まとめと展望

まとめ

- 4次元変分法データ同化
- Second-order adjoint 法に基づく不確実性評価
- Symplectic 性を考慮した高精度不確実性評価



今後の展望

- 高次元の事後分布から意味のある情報を如何に高速に精度良く取ってこれるか
- 今日紹介したアルゴリズムはすべて deterministic.
→ Randomization による高速化？

ありがとうございました。