

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2023年3月23日(23.03.2023)



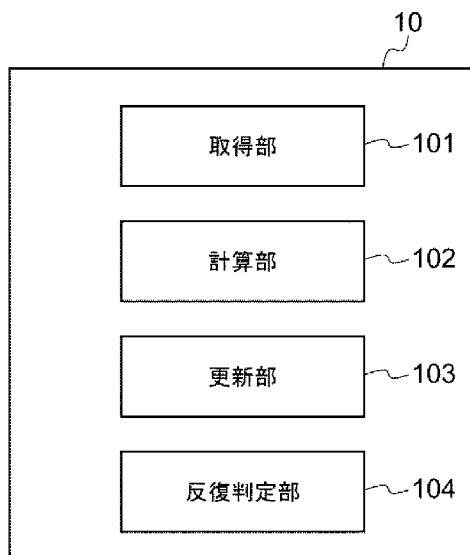
(10) 国際公開番号

WO 2023/042612 A1

- (51) 国際特許分類:
G16Z 99/00 (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2022/031628
- (22) 国際出願日: 2022年8月22日(22.08.2022)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2021-150483 2021年9月15日(15.09.2021) JP
- (71) 出願人: 国立大学法人東京農工大学 (NATIONAL UNIVERSITY CORPORATION TOKYO UNIVERSITY OF AGRICULTURE AND TECHNOLOGY) [JP/JP]; 〒1838538 東京都府中市晴見町3-8-1 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 山中 晃徳 (YAMANAKA, Akinori); 〒1838538 東京都府中市晴見町3-8-1 国立大学法人東京農工大学内 Tokyo (JP). 石井 秋光 (ISHII, Akimitsu); 〒1838538 東京都府中市晴見町3-8-1 国立大学法人東京農工大学内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 弁理士法人太陽国際特許事務所(TAIYO, NAKAJIMA & KATO); 〒1600022 東京都新宿区新宿4丁目3番17号 Tokyo (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,

(54) Title: DATA ASSIMILATION DEVICE, DATA ASSIMILATION METHOD, DATA ASSIMILATION PROGRAM, AND DATA ASSIMILATION SYSTEM

(54) 発明の名称: データ同化装置、データ同化方法、データ同化プログラム、及びデータ同化システム



101 Acquisition unit
102 Calculation unit
103 Update unit
104 Iterative determination unit

(57) Abstract: An acquisition unit (101) acquires an actual measurement value obtained by measuring changes in a data assimilation object in a predetermined environment. A calculation unit (102) uses a provisional initial state and a provisional value of an unknown parameter regarding the data assimilation object to numerically calculate the change in the data assimilation object in the predetermined environment. An update unit (103) calculates the value of an evaluation function representing an error between the actual measurement value and a value obtained from the result of the numerical

WO 2023/042612 A1

CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類 :

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

calculation corresponding to the actual measurement value, and determines an acquisition function from a plurality of combinations of the initial state and unknown parameter values and the value of the evaluation function, and, on the basis of the value of the acquisition function, updates the initial state and the value of the unknown parameter that minimize the value of the evaluation function. An iterative determination unit (104) repeats the processes of the calculating unit (102) and the update unit (103) until a prescribed iteration end condition is satisfied, to thereby estimate the initial state and the value of the unknown parameter regarding the data assimilation object.

(57) 要約 : 取得部 (101) が、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得する。計算部 (102) が、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、データ同化対象の、所定の環境における変化を数値計算する。更新部 (103) が、実測値と、数値計算の結果から得られる実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、初期状態および未知パラメータの値と、評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、評価関数の値を最小化する初期状態と未知パラメータの値を更新する。反復判定部 (104) が、予め定められた反復終了条件を満たすまで、計算部 (102) 及び更新部 (103) の各処理を繰り返すことにより、データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する。

明 細 書

発明の名称：

データ同化装置、データ同化方法、データ同化プログラム、及びデータ同化システム

技術分野

[0001] 開示の技術は、データ同化装置、データ同化方法、データ同化プログラム、及びデータ同化システムに関する。

背景技術

[0002] デジタルトランスフォーメーションやSociety 5.0などを背景に、工業製品の開発設計を効率化するために、複雑な現象を物理に基づき解析・予測する数値シミュレーションの予測精度向上が、ますます必要とされている。数値シミュレーションの予測精度は、数値シミュレーションで使用される物性値や数学モデルに含まれるパラメータを、実験データから如何に正確に同定するか大きく左右される。

[0003] 従来は、様々な実験を多数実施し、得られた実験結果に合うように物性値やパラメータを同定されてきたが、正確さを追求するほど、多くの実験データを必要とし、実験回数の増加を招く。

[0004] ここで、ベイズ統計学に基づき、実験と数値シミュレーションを結びつける数値計算技術であるデータ同化が知られている（樋口知之，上野玄太，中野慎也，中村和幸，吉田亮，「データ同化入門一次世代のシミュレーション技術」，朝倉書店，2011年．、淡路敏之，蒲地政文，池田元美，石川洋一，「データ同化 観測・実験とモデルを融合するイノベーション」，京都大学学術出版会，2009年．）。データ同化を用いることにより、実験結果から効率的に物性値やパラメータを逆推定できる。さらに、測定可能な実験データから、測定不可能な様々なデータを逆推定することもでき、実験では直接測定できない状態を逆推定できる。

[0005] データ同化は、気象予報や台風の進路予報などにおいて、予報精度を向上

させる数値計算技術として、すでに実用されているが（気象庁予報部，「確率的な気象予報のためのアンサンブル予報の課題と展望」，数値予報課報告別冊第62巻，2016年，インターネット検索<URL：https://www.jma.go.jp/jma/kishou/books/nwpreport/62/No62_all.pdf>）、昨今のデータ科学や機械学習のブームを背景に、GPUなどのハードウェアや計算機性能の進歩が後押しし、データ同化の工学分野への応用も活発である。

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] しかしながら、従来のデータ同化の計算アルゴリズムは、数値シミュレーションへの実装が困難である場合が多いのみならず、多くの計算量が必要である、という問題を抱えている。

[0007] 開示の技術は、上記の点に鑑みてなされたものであり、計算コストを抑え、かつ、容易に実装可能なアルゴリズムで、データ同化を行うことができるデータ同化装置、方法、プログラム、及びデータ同化システムを提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0008] 本開示の第1態様は、データ同化装置であって、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得する取得部と、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算する計算部と、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する更新部と、を含み、前記計算部は、前記更新部によって更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、前記計算部による前記数値計算、及び前記更新部による更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知

パラメータの値を推定し、前記所定の環境における変化の予測精度を向上させる初期状態を得る。

[0009] 本開示の第2態様は、データ同化方法であって、取得部が、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得し、計算部が、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算し、更新部が、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新することを含み、前記計算部は、前記更新部によって更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、前記計算部による前記数値計算、及び前記更新部による更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定し、前記所定の環境における変化の予測精度を向上させる初期状態を得る。

[0010] 本開示の第3態様は、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得し、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算し、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新することを実行させるためのデータ同化プログラムであって、前記数値計算では、前記更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、前記数値計算、及び前記更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定し、前記所定の環境における変

化の予測精度を向上させる初期状態を得る。

[0011] 本開示の第4態様は、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値と、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を入力する入力部と、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算する計算部と、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する更新部と、提示部と、を含み、前記計算部は、前記更新部によって更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、前記計算部による前記数値計算、及び前記更新部による更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定し、前記提示部は、前記推定した、初期状態と未知パラメータの値を提示する。

発明の効果

[0012] 開示の技術によれば、計算コストを抑え、かつ、容易に実装可能なアルゴリズムで、データ同化を行うことができる、という効果が得られる。

図面の簡単な説明

[0013] [図1]本実施形態のデータ同化装置として機能するコンピュータの一例の概略ブロック図である。

[図2]本実施形態のデータ同化装置の構成を示すブロック図である。

[図3]本実施形態のデータ同化装置におけるデータ同化処理ルーチンを示すフローチャートである。

[図4]実施例1における粉末の焼結シミュレーションの結果を示す図である。

[図5]実施例1におけるデータ同化処理での焼結体内部の推定結果を示す図である。

[図6]従来手法と比較した、評価関数の最小化計算過程を示す図である。

[図7]実施例2における実験データの例を示す図である。

[図8]実施例2におけるシミュレーション結果の例を示す図である。

[図9]実施例2における実験に用いた金型とブランクの形状と寸法を示す断面図である。

[図10]実施例3における銀微粒子の3次元形状変化のその場観察結果を示す図である。

[図11]実施例3における評価関数の値の変化を示すグラフである。

[図12]実施例3における焼結シミュレーションを実施して得られた焼結中の銀微粒子の3次元形状の時間変化の推定結果の例を示す図である。

[図13]ベイズの定理に基づき事前分布から事後分布を計算する過程の概念図である。

[図14]本実施形態の変形例におけるデータ同化システムの構成を示すブロック図である。

発明を実施するための形態

[0014] 以下、開示の技術の実施形態の一例を、図面を参照しつつ説明する。なお、各図面において同一又は等価な構成要素及び部分には同一の参照符号を付与している。また、図面の寸法比率は、説明の都合上誇張されており、実際の比率とは異なる場合がある。

[0015] <本実施形態の概要>

まず、本実施形態における概要を説明する。

[0016] データ同化では、図13に示すように、時刻 t での実験データ y_t と数値シミュレーション結果 x_t には必ず誤差が含まれると考え、両者を確率密度関数として表現する。そして、以下の式に示す、ベイズの定理に基づき、実験データの誤差が数値シミュレーション結果の誤差よりも小さいと判定されれば、数値シミュレーション結果を実験データに近づくように修正される。

$$p(x_t | y_{1:t}) \propto p(y_t | x_t) p(x_t | y_{1:t-1})$$

ここで、例えば $y_{1:t}$ は初期状態から時刻 t までの全ての実験データを表す。

[0017] 図13では、点線で示される尤度 $p(y_t | x_t)$ と、実線で示される事前分布 $p(x_t | y_{1:t-1})$ とから、破線で示される事後分布 $p(x_t | y_{1:t})$ が得られ、数値シミュレーション結果が修正されることが示されている。

[0018] これは、数学的には、実験データを表す確率密度関数（尤度）の分散共分散行列で表される誤差が、数値シミュレーション結果を表す確率密度関数（事前分布）のそれより小さい場合に、事前分布が実験データに近づくように修正され、事後分布を得ることになることを表している。

[0019] コンピュータを用いた数値計算において、従来のデータ同化アルゴリズムは、以下のように2種類に大別できる。

[0020] 1つは、確率密度関数のアンサンブル近似を用いるアルゴリズムである。これに分類されるデータ同化アルゴリズムでは、確率密度関数を多数の数値シミュレーション結果の集合体（ヒストグラム）として扱う「確率密度関数のアンサンブル近似」を用いる。代表的なアルゴリズムとしては、アンサンブルカルマンフィルタ（Ensemble Kalman Filter: EnKF）、粒子フィルタ（Particle Filter: PF）、融合粒子フィルタ（Marginal Particle Filter: MPF）がある。

[0021] もう1つは、実測値と数値シミュレーション結果との誤差を表す評価関数の最小化計算に基づくアルゴリズムである。これに分類されるデータ同化アルゴリズムは、アジョイント法または変分法と呼ばれ、実験データと数値シミュレーション結果の誤差を表す評価関数 J を定義し、 J の最小化問題を解くことで、未知パラメータおよび初期状態を推定する。このアルゴリズムでは、上述した、確率密度関数のアンサンブル近似を用いるアルゴリズムとは異なり、確率密度関数のアンサンブル近似は不要である。代表的なアルゴリズムとしては、3次元変分法や4次元変分法（Four-Dimensional Variational method: 4DVar）がある。

- [0022] ここで、確率密度関数のアンサンブル近似を用いるアルゴリズムの問題点について説明する。このアルゴリズムに基づくデータ同化では、確率密度関数のアンサンブル近似を用いるため、多数の数値シミュレーションを実行する必要がある。K. Sasaki, A. Yamanaka, H. Nagao, S. Ito, Data assimilation for phase-field models based on the ensemble Kalman filter, Computational Materials Science, 141 (2018), pp. 141-152.によれば、推定精度の良いデータ同化を行うためには、少なくとも数百通りの数値シミュレーションを実行する必要があることが示されており、膨大な計算量が必要となる。
- [0023] 次に、評価関数の最小化計算に基づくアルゴリズムの問題点について説明する。このアルゴリズムは、確率密度関数のアンサンブル近似は不要であり、上記の確率密度関数のアンサンブル近似を用いるアルゴリズムに比べれば計算量は少ない。
- [0024] しかしながら、評価関数 J の最小化問題を解くには、評価関数 J の勾配の計算が必要となり、その計算過程でアジョイントモデルと呼ばれる演算子を解析的に導出する必要がある。アジョイントモデルの導出は、非線形現象を扱う数値シミュレーションでは、高度な数学的知識が必要で困難であり、実用上はボトルネックである。また、仮にアジョイントモデルの導出に成功し、評価関数 J の勾配の計算が可能となったとしても、多峰性関数である場合が多い評価関数 J の最小化問題を解くことは、一般に容易ではない。なお、上記の確率密度関数のアンサンブル近似を用いるアルゴリズムと、評価関数の最小化計算に基づくアルゴリズムとを融合した、アンサンブル4次元変分法 (Ensemble 4DVar: En4DVar) もあるが、確率密度関数のアンサンブル近似を用いるアルゴリズムであるため、結局は、膨大な計算量が必要となる問題は解決できない。
- [0025] 本実施形態では、最適化理論であるベイズ最適化 (Bayesian Optimization: BO) を組み合わせた、新しいデータ同化アルゴリズムを用いる。本実施形態では評価関数 J の最小化計算にベイズ最適化を

応用することで、計算量を大幅に低減できる。また、ベイズ最適化を応用することで、従来のアジョイント法では必要とされる評価関数Jの勾配の計算を不要にできるため、実装（ソースコードの作成）が簡単となり、様々な分野の数値シミュレーションへデータ同化が応用されることを促進する。

[0026] <本実施形態に係るデータ同化装置の構成>

図1は、本実施形態のデータ同化装置10のハードウェア構成を示すブロック図である。

[0027] 図1に示すように、データ同化装置10は、CPU (Central Processing Unit) 11、ROM (Read Only Memory) 12、RAM (Random Access Memory) 13、ストレージ14、入力部15、表示部16及び通信インタフェース (I/F) 17を有する。各構成は、バス19を介して相互に通信可能に接続されている。

[0028] CPU 11は、中央演算処理ユニットであり、各種プログラムを実行したり、各部を制御したりする。すなわち、CPU 11は、ROM 12又はストレージ14からプログラムを読み出し、RAM 13を作業領域としてプログラムを実行する。CPU 11は、ROM 12又はストレージ14に記憶されているプログラムに従って、上記各構成の制御及び各種の演算処理を行う。本実施形態では、ROM 12又はストレージ14には、データ同化処理を実行するためのデータ同化プログラムが格納されている。データ同化プログラムは、1つのプログラムであっても良いし、複数のプログラム又はモジュールで構成されるプログラム群であっても良い。

[0029] ROM 12は、各種プログラム及び各種データを格納する。RAM 13は、作業領域として一時的にプログラム又はデータを記憶する。ストレージ14は、HDD (Hard Disk Drive) 又はSSD (Solid State Drive) により構成され、オペレーティングシステムを含む各種プログラム、及び各種データを格納する。

[0030] 入力部15は、マウス等のポインティングデバイス、及びキーボードを含

み、各種の入力を行うために使用される。

[0031] 入力部15は、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を受け付ける。

[0032] 表示部16は、例えば、液晶ディスプレイであり、各種の情報を表示する。表示部16は、タッチパネル方式を採用して、入力部15として機能しても良い。

[0033] 通信インタフェース17は、他の機器と通信するためのインタフェースであり、例えば、イーサネット（登録商標）、FDDI、Wi-Fi（登録商標）等の規格が用いられる。

[0034] 次に、データ同化装置10の機能構成について説明する。図2は、データ同化装置10の機能構成の例を示すブロック図である。

[0035] データ同化装置10は、機能的には、図2に示すように、取得部101と、計算部102と、更新部103と、反復判定部104と、を含んで構成されている。

[0036] 取得部101は、入力された、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得する。例えば、データ同化対象の、所定の環境を表す実験条件下における変化を測定した実測値からなる実験データを取得する。

[0037] 計算部102は、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、データ同化対象の、所定の環境における変化を数値計算する。また、計算部102は、更新部103によって更新された初期状態と未知パラメータの値を用いて、再度、数値計算を行う。例えば、データ同化対象の、所定の環境における変化を数値計算するシミュレーションソフト（ソースコードをコンパイルした実行ファイルでもよい）に対して、初期状態や未知パラメータの値、及び実験条件と同じ所定の環境を表すデータとを与えて、データ同化対象の変化を数値計算し、実験データに対応する予測値を求める。

[0038] 更新部103は、取得部101で取得した実測値と、計算部102による

数値計算の結果から得られる実測値に対応する予測値との誤差を表す評価関数の値を計算する。更新部103は、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との組み合わせを複数求める。更新部103は、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との複数の組み合わせから、ガウス過程回帰に基づくベイズ最適化により、評価関数の値を最小化する初期状態と未知パラメータの値を導出し、初期状態と未知パラメータの値を、導出された値に更新する。

[0039] 具体的には、更新部103は、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との複数の組み合わせから、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との関係をガウス過程回帰により回帰分析する。更新部103は、回帰分析により得られる、任意の初期状態と未知パラメータの値に対応する評価関数の値の平均値と分散を求め、評価関数の値の平均値と分散から獲得関数の値を求める。更新部103は、獲得関数の値から評価関数の最小値をもたらすと推定される初期状態と未知パラメータの値を更新する。

[0040] ここで、評価関数の具体例について説明する。初期状態（時刻 $t = 0$ ）から、ある時刻 $t = t_{end}$ までの間に、時系列の実験データ（記号として、ある時刻 t での実験データはベクトル y_t で表す）が得られているとする。一方で、数値計算で得られたある時刻 t での予測値をベクトル x_t で定義する。このとき、実験データと数値シミュレーション結果の誤差を表す評価関数 J は、最尤推定法またはMaximum a Posterior Estimation(MAP)推定に基づき次式のように定義される。

$$J = \frac{1}{2} (x_0 - x_0^b)^T B^{-1} (x_0 - x_0^b) + \sum_{t=0}^{t_{end}} \frac{1}{2} (H_t(M(x_0)) - y_t)^T R_t^{-1} (H_t(M(x_0)) - y_t) \quad (1)$$

[0042] ここで、 x_0 は数値シミュレーションの入力データとなる未知パラメータ及び初期状態からなるベクトルである。 x_0^b は、数値シミュレーション結果が実験データを再現するときの x_0 の初期推定値を表す。B は背景誤差共分散行

列、 R_t は観測誤差共分散行列と呼ばれ、それぞれ x_0^b と y_t の誤差の大きさを表す。 $M(x_0)$ はシミュレーションモデルを表す。 H_t は、実験データ y_t と比較可能な量を、数値シミュレーションの結果（つまり x_t ）から抽出するために用いる演算子であり、観測演算子と呼ばれる。式（1）の評価関数 J を最小化する x_0^a が、データ同化で求めたい最適なパラメータ及び初期状態からなるベクトルとなるはずであり、これを x_0^a と表す。

[0043] なお、従来のデータ同化アルゴリズムであるアジョイント法または変分法では、式（1）を最小化する x_0^a を求めるために、式（1）の勾配である次式を計算する。

$$[0044] \quad \nabla J = B^{-1} (x_0 - x_0^b) + \sum_{t=0}^{t_{\text{end}}} (H_t M_{t-1} M_{t-2} \dots M_0)^T R_t^{-1} (H_t (M(x_0)) - y_t) \quad (2)$$

[0045] ここで、 H_t と M_t はそれぞれ次式で表される。

$$[0046] \quad H_t = \frac{\partial H_t(x_t)}{\partial x_t}, \quad (3)$$

$$M_t = \frac{\partial M(x_t)}{\partial x_t}. \quad (4)$$

[0047] 実用上問題となるのは、式（2）を計算するために、式（4）を計算しなければならないことである。つまり、多くのシミュレーションモデルは非線形性の強い偏微分方程式で記述されるため、 M_t を解析的に求めることが困難であり、これがデータ同化の実装を困難とする原因である。また、仮に式（4）を得たとしても、式（2）を計算し、式（1）の評価関数 J を最小化する計算は計算コストが大きい。

[0048] 一方、本実施形態では、式（2）の計算を不要とすることで、データ同化

の実装を容易にするとともに、計算コストの大幅低減を可能とする。

[0049] 反復判定部104は、予め定められた反復終了条件を満たすか否かを判定する。反復判定部104は、反復終了条件を満たすまで、計算部102による数値計算、及び更新部103による更新を繰り返させる。最終的に得られた最適な未知パラメータと初期状態の値を、データ同定の結果として得る。ここで、反復終了条件としては、反復回数が上限値に到達したことや、評価関数の値が収束したこと、データ同定の結果を見たユーザにより反復終了指示が入力されたことなどを用いることができる。

[0050] <本実施形態に係るデータ同化装置の作用>

次に、本実施形態に係るデータ同化装置10の作用について説明する。

[0051] 図3は、データ同化装置10によるデータ同化処理の流れを示すフローチャートである。CPU11がROM12又はストレージ14からデータ同化プログラムを読み出して、RAM13に展開して実行することにより、データ同化処理が行なわれる。また、データ同化装置10に、データ同化対象の、所定の環境を表す実験条件下における変化を測定した実測値からなる実験データが入力される。また、数値計算で使用する初期状態及び未知パラメータの初期値や、未知パラメータの取りうる値の範囲が定義されているものとする。

[0052] まず、ステップS100において、CPU11が、取得部101として、データ同化対象の、所定の環境を表す実験条件下における変化を測定した実測値からなる実験データを取得する。

[0053] 次のステップS102では、CPU11が、計算部102として、初期状態及び未知パラメータに初期値を設定する。具体的には x_0 を設定する。

[0054] ステップS104では、CPU11が、計算部102として、データ同化対象の、所定の環境における変化を数値計算するシミュレーションソフト（ソースコードをコンパイルした実行ファイルでもよい）に対して、初期状態及び未知パラメータの値と、実験条件と同じ所定の環境を表すデータとを与えて、データ同化対象の変化を数値計算し、実験データに対応する値を求め

る。具体的には、 $x_0(i)$ を未知パラメータ及び初期状態の値とする数値シミュレーションを実施する。初期状態及び未知パラメータの値を n 個用意し、 n 回、数値シミュレーションを実施し、実験データに対応する値を n 個求める。

[0055] ステップS106では、CPU11が、更新部103として、上記ステップS100で取得した実測値と、上記ステップS104又はS114による数値計算の結果から得られる実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算する。

[0056] 具体的には、上記式(1)に従い評価関数 J を計算する。このとき、ベイズ最適化の計算に用いる事前情報 $D(1:n)$ が作成される。このために、上記ステップS102では、予め設定した範囲内で、 n 通りの未知パラメータおよび初期状態の値を、 $x_0(i)$ (ここで、 $i=1, 2, \dots, n$)として用意する。ここで、 n は1以上の任意の整数である。また、 $x_0(i)$ (ここで、 $i=1, 2, \dots, n$)を用いて実施した数値シミュレーション結果に対する評価関数を $J(x_0(i))$ (ここで、 $i=1, 2, \dots, n$)と記す。

[0057] 後述するステップS114で $n+1$ 回目の数値シミュレーションが実行された場合には、 $x_0(n+1)$ と $J(x_0(n+1))$ の組み合わせを新たに加えた事前情報 $D(1:n+1)$ が作成される。

[0058] ステップS108では、CPU11が、更新部103として、事前情報 $D(1:m)$ ($m \geq n$)を用いて、初期状態および未知パラメータの値と、評価関数 J の値との複数の組み合わせから、ベイズ最適化により、評価関数 J の値を最小化するように、初期状態及び未知パラメータを計算する。

[0059] 具体的には、ベイズ最適化のアルゴリズムに従い、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との複数の組み合わせから、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との関係をガウス過程回帰により回帰分析し、回帰分析により得られる、任意の初期状態と未知パラメータの値に対応する評価関数の値の平均値と分散を求め、評価関数の値の平均値と分散から獲得関数の値 $a(x_0)$ を求め、式(1)の評価関数 J を最小化するための獲得関

数 $a(x_0)$ を計算する。このとき、獲得関数の種類に制限はないが、例えば Expected Improvement (EI) 関数などを使用できる。この獲得関数を最大とする x_0 を $x_0(n+1)$ と記す。

[0060] ステップS110では、CPU11が、反復判定部104として、予め定められた反復終了条件を満たすか否かを判定する。反復終了条件を満たさない場合には、上記ステップS112へ進む。一方、反復終了条件を満たす場合には、ステップS116へ進む。

[0061] ステップS112では、CPU11が、更新部103として、シミュレーションソフト（ソースコードをコンパイルした実行ファイルでもよい）に対して与える、初期状態及び未知パラメータの値を、上記ステップS108で計算された初期状態及び未知パラメータの値に変更する。

[0062] ステップS114では、CPU11が、計算部102として、シミュレーションソフト（ソースコードをコンパイルした実行ファイルでもよい）に対して、上記ステップS112で変更された初期状態及び未知パラメータの値と、実験条件と同じ所定の環境を表すデータとを与えて、データ同化対象の変化を数値計算し、実験データに対応する値を求める。そして、上記ステップS106へ戻る。

[0063] ステップS116では、CPU11が、評価関数を最小化する、最適な初期状態及び未知パラメータの値を、同定結果として表示部16に表示し、ROM12またはストレージ14に保存し、データ同化処理を終了する。

[0064] <実施例1>

次に、上記実施形態のデータ同化処理を、粉体の焼結プロセスに適用した実施例について説明する。

[0065] 焼結は、粉末を加熱して緻密な固体を作成する材料作製技術の一つであり、粉末冶金やセラミックス産業において根幹となる技術である。特に最近では、レーザー焼結法を用いた3Dプリンタの研究開発の観点からも重要視される技術である。よって、焼結で製造される材料の諸特性を制御することを目的として、焼結で生じる固体中の結晶変化などを予測する焼結の数値シミ

ュレーション（以後、焼結シミュレーションと略記する）の研究が活発である。しかしながら、焼結シミュレーションに使用する物性値や、焼結シミュレーションで計算する数学モデルに含まれるパラメータを実験的に正確に同定することは、多数の実験データの蓄積が必要となる。

[0066] 本実施例1では、フェーズフィールド法を用いた焼結シミュレーションに、上記実施形態を適用し、焼結中の結晶変化や物性値・パラメータの推定が可能であることを数値実験により実証する。

[0067] ここで、この数値実験は、実際の実験データを用いてデータ同化（状態推定やパラメータ推定）を行うのではなく、推定対象となるパラメータ等の仮の真値を設定し、その真値を用いて得たシミュレーション結果を擬似的な実験データとみなし、データ同化を行うことで、データ同化のアルゴリズムの検証を行う方法である。データ同化の分野では、双子実験と呼ばれる。

[0068] 本実施例1において対象とする材料は、銀粒子（粉末）とする。また、上記実施形態と、従来のデータ同化アルゴリズムであるEn4DVarとの計算量を比較し、計算量が1/2以下に低減できることを示す。

[0069] 表1に、擬似実験データを得るために行った焼結シミュレーションで用いた物性値・パラメータ（数値実験における真値）を示す。

[0070] [表1]

	値
銀粒子表面での銀原子の拡散係数 D_{surf}	$1.47 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$
結晶粒界での銀原子の拡散係数 D_{gb}	$1.28 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$
銀粒子の凝集速度に関するパラメータ, m_{tr}	$1.00 \times 10^{-10} \text{ m}^5/(\text{J} \cdot \text{s})$
結晶粒界の移動速度に関するパラメータ, M_{ij}	$2.00 \times 10^{-7} \text{ m}^3/(\text{J} \cdot \text{s})$

[0071] また、図4に、表1に示す物性値・パラメータを用いて実施した焼結シミュレーションの結果を示す。

[0072] 図4（a）は焼結体の表面形状変化を表し、焼結により銀微粒子が融合（凝集）することを表す。図4（b）は焼結体のz軸中心断面を示しており、どの位置にどの結晶や粒界が存在するかを表す。数値実験では、図4（a）に示す結果のみ擬似観測データとする。

[0073] 最近では、電子顕微鏡を用いて、焼結過程をその場で観察することも可能であることから、図4（a）に示す焼結体の表面形状変化を擬似観測データ（実際に実験で取得できる実験データとして想定）とした。一方、図4（b）のデータは、実験では直接測定困難な未知の状態と想定して、数値実験における推定対象とした。つまり、本数値実験においては、焼結体の表面形状変化の情報だけから、表1に示す物性値およびパラメータの値や図4（b）に示す状態変化を推定できれば、上記実施形態の妥当性検証を行うこととなる。

[0074] 表2に、数値実験における、物性値およびパラメータの初期推定値を示す。すなわち、本実施形態またはEn4DVarで推定する物性値およびパラメータの初期値である。

[0075] [表2]

D_{surf} [m^2/s]	D_{gb} [m^2/s]	m_{tr} [$m^5/(J \cdot s)$]	M_{η} [$m^3/(J \cdot s)$]
0.70×10^{-12}	0.60×10^{-10}	0.50×10^{-10}	1.00×10^{-7}

[0076] 上記表2に示すように、初期値は、表1に示す真値の1/2に設定した。表3に示すように、上記実施形態を用いることで、物性値・パラメータを精度よく推定できる。

[0077] [表3]

	$D_{surf} (\times 10^{-12})$ [m^2/s]	$D_{gb} (\times 10^{-10})$ [m^2/s]	$m_{tr} (\times 10^{-10})$ [$m^5/(J \cdot s)$]	$M_{\eta} (\times 10^{-7})$ [$m^3/(J \cdot s)$]
真値	1.47	1.28	1.00	2.00
推定結果 (n = 20)	1.51 ± 0.67	1.37 ± 0.11	1.06 ± 0.08	1.94 ± 0.44

[0078] 図5に、上記実施形態を用いた焼結体の推定結果を示す。図4と比べて、ほとんど差がなく、焼結体内部も含め精度よく推定できる。

[0079] 図5の上段は、図4（a）に示した擬似実験データと上記実施形態での推定結果との誤差を表し、図5（a）から図5（c）へと評価関数が最小化されることで、誤差が減少し、状態推定精度が向上することがわかる。下段は、焼結体内部の推定結果であり、図4（b）と比べて、ほとんど差がなく、焼結体内部を精度よく推定できる。

[0080] 図6に、上記実施形態とEn4DVarで計算した評価関数の最小化計算過程を示す。横軸は、評価関数の最小化のために実施した焼結シミュレーションの回数を表す。En4DVarでは、データ同化の精度を担保するためアンサンブル数を50とした。すなわち、En4DVarでは、評価関数の最小化計算を行う前に50回の焼結シミュレーションを実施しておく必要がある。このため、 $n=50$ から評価関数が減少する。

[0081] 一方、上記実施形態では、事前に複数の焼結シミュレーションを行う必要がなく、En4DVarに比べて1/2以下の計算量（焼結シミュレーションの回数）で、状態推定や物性値・パラメータ推定が可能である。

[0082] <実施例2>

次に、上記実施形態のデータ同化処理を、金属板材のプレス成形加工シミュレーションに適用した実施例について説明する。

[0083] 金属板材のプレス成形加工は、自動車産業を代表例として、製造業では重要な生産プロセスである。金属板材のプレス成形加工時の歩留まりや開発効率の向上を目的として、有限要素法を用いたプレス成形加工の数値シミュレーション（以下、成形シミュレーションと略記する）が行われており、その予測精度の向上が求められている。成形シミュレーションの予測精度向上のためには、成形シミュレーションに使用する材料モデル（材料の変形挙動を記述する数学モデル）のパラメータを、実験データから逆同定できる技術が求められている。

[0084] 上記実施形態を用いれば、プレス成形加工試験で得られる各種実験データ（例えば、プレス加工時に金型に加わる荷重や圧力、金型内部に仕込まれたセンサーで測定した金属板材の厚み変化）を、成形シミュレーションに取り込むことで、成形シミュレーション結果を修正しつつ、高精度に金属板材の物性値や材料モデルのパラメータを同定することができる。なお従来は、材料に様々な変形を与える実験（多軸応力試験）を行い、その実験結果に合うように材料の物性値や材料モデルのパラメータを同定するため、複数の実験を実施する必要があった。例えば、金属板材を対象とした場合に、二軸引張

試験を用いることを考えれば、通常18回（応力状態を変更した9条件×信頼性確保のための2回）の多軸応力試験が必要とされる。しかし、上記実施形態のデータ同化処理を用いれば、少ない計算量でデータ同化が可能となり、実験回数を1回に低減することができる。

[0085] 図7に示すように、プレス成形加工時の金属板材の変形をデジタルカメラで連続撮影し、撮影した画像をデジタル画像相関法で処理することにより算出される、材料表面の変位分布・ひずみ分布を、データ同化により成形シミュレーションに取り込む。そして、図8に示す成形シミュレーション結果を修正しつつ、高精度に金属板材の物性値や材料モデルのパラメータを同定することができることを、数値実験により実証する。

[0086] 上記実施形態のデータ同化処理を検証するため、数値実験は次の手順A～手順Dで実施した。

[0087] （手順A）本実施形態のデータ同化処理方法を用いて逆同定する対象となる材料モデルのパラメータの真値を定義し、そのパラメータ値を用いた成形シミュレーションを行う。この実施例2では、アルミ合金板の変形挙動を解析するために広く使用されているYld2000-2d（参考文献1参照）と呼ばれる材料モデルを用い、そのパラメータの真値を表4に示す値に仮定した。また、成形シミュレーションの例として、穴広げ加工（薄板試験片に円孔を開け、その円孔を円筒状のパンチで押し広げる加工）の数値シミュレーションを実施した。

[参考文献1] F. Barlat, J. C. Brem, J. W. Yoon, K. Chung, R. E. Dick, D. J. Lege, F. Pourboghrat, S. H. Choi and E. Chu, Plane stress yield function for aluminum alloy sheets - part 1: theory, International Journal of Plasticity, Vol. 19 (2003), No. 9, pp. 1297-1319.

[0088] [表4]

α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	M
0.966	1	0.892	1.01	0.994	0.916	0.984	1.157	8.86

[0089] （手順B）手順Aで実施した穴広げ加工シミュレーションの結果として得ら

れる、試験片表面の変位とひずみの時系列変化を擬似実験データとして保存する。なお、実際のプレス加工実験に対して上記実施形態のデータ同化処理を適用した場合においては、デジタル画像相関法で測定した試験片表面の変位とひずみの時系列変化の実験データを用いることになる。

[0090] (手順C) 手順Aで定義したパラメータの真値が未知であると仮定し、上記実施形態のデータ同化処理方法で逆同定するパラメータの初期推定値を表5に示す値として設定する。

[0091] (手順D) 表5に示した値のパラメータを用いて、穴広げ加工シミュレーションを行いつつ、上記実施形態のデータ同化処理方法により手順Bで保存した擬似実験データを取り込む、すなわち、擬似実験データに基づき穴広げ加工シミュレーション結果の修正を行う過程で、パラメータの推定値を修正し、最終的にパラメータの同定を行う。

[0092] [表5]

α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	M
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	8.0

[0093] 最終的に同定されたパラメータ値を表6に示す。

[0094] [表6]

α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	M
0.979	0.915	0.898	1.037	0.989	0.885	0.994	1.170	8.813

[0095] 表4のパラメータ値(真値)と比べると、誤差は存在するものの、1つの実験データのみで同定されたパラメータ値としては、精度が良い。なお、本実施例2では、材料モデルのパラメータのみを推定対象としたが、金型と板材の摩擦係数、金型内部の板材の温度など、金型内部のため直接測定できない板材の状態を推定することができる。

[0096] また、本実施例2の実験条件は、下記の通りである。

[0097] まず、金属板材を直径195mmになるように円形に切り出し、中央に直径30mmの円形状の穴を開ける(図9参照)。以後、これをブランク(Blank)と呼ぶ。図9は、実験に用いた金型とブランクの形状と寸法を表

す断面図である。

- [0098] 次に、ブランクにスプレーでランダムなパターンを塗布する。
- [0099] そして、ブランクとパンチ金型の間にワセリン（潤滑剤）を塗布したテフロン（登録商標）シートを挟み込む。
- [0100] ブランクを金型内に設置し、上金型（Upper die）と下金型（Lower die）で挟み込む。
- [0101] そして、パンチ金型をz方向に上昇させる。この間にパンチ金型にかかる荷重をロードセルで測定する。また、ブランク表面の連続画像を2台のデジタルカメラで撮影する。
- [0102] 次に、パンチ金型が所定のz座標に到達したら、パンチ金型を停止する。デジタルカメラによる撮影も停止する。
- [0103] パンチ金型を降下させ、金型を順次外して試験を終了する。
- [0104] そして、デジタルカメラで撮影した画像を、デジタル画像相関法で処理し、ブランクに生じた変形（変位とひずみ）をコンピュータで計算する。計算した結果は、上記実施形態のデータ同化処理の実験データとなる。
- [0105] <実施例3>
- 次に、上記実施形態のデータ同化処理を、粉体の焼結プロセスに適用し、実際の実験データを使って実証した実施例について説明する。
- [0106] 本実施例3の目的は、走査型透過電子顕微鏡（STEM）を用いて、銀微粒子の焼結過程をその場観察し、そこで得られた銀微粒子の3次元形状変化の実験データを、データ同化の観測データとして、焼結シミュレーションで用いる物性値・パラメータ（上記表1に示した4つの値と剛性定数k）を推定すること、である。
- [0107] 上記実施形態のデータ同化処理を検証するため、実験は次の手順1～手順3で実施した。
- [0108] （手順1）電子顕微鏡を用いて銀微粒子の焼結過程をその場観察する。
- 走査型透過電子顕微鏡（STEM）のチャンバー内部に、その場加熱ステージを挿入し、そのステージ上に銀微粒子を配置する。その場加熱ステージ

は、焼結を進行させる際にのみ350℃に温度を上昇させる。また、トモグラフィ法で銀微粒子の3次元形状を計測する際には、焼結が進行しない温度である200℃に低下させてから、その場加熱ステージを傾斜させる。本実施例3では、焼結は温度を350℃とし、5秒間隔で進行させ、その都度、銀微粒子の3次元形状を計測した。図10は、その場観察で取得した実験データから、銀微粒子の3次元形状を再構築した結果である。

[0109] (手順2) 本発明のデータ同化手法を用いて物性値・パラメータを推定する。

手順1で得られた、焼結中の銀微粒子の3次元形状の時間変化を観測データとして、焼結シミュレーションで用いる物性値・パラメータ(上記表1に示した4つの値と剛性定数 k)を推定した。ここで用いたデータ同化手法は、Tree-structured Parzan Estimator (TPE)に基づくベイズ最適化を用いた手法である。

[0110] 推定対象とする物性値・パラメータの探索範囲、初期推定値、初期推定値の標準偏差を表7に示す。

[0111] TPEに基づくベイズ最適化を用いたデータ同化手法により、物性値・パラメータを推定する際の、評価関数 $J(x_0)$ の変化を図11に示す。評価関数の最小化計算の繰り返し数が73回目の時点で、評価関数の最小値が得られた。このときに得られた物性値・パラメータの値が最適推定値であり、これらを表8に示す。

[0112]

[表7]

種類	探索範囲	初期推定値	初期推定値の標準偏差
銀粒子表面での銀原子の拡散係数 $D_{\text{surf}} [\text{m}^2/\text{s}]$	$0 \leq D_{\text{surf}} \leq 2 \times 10^{-16}$	1.0×10^{-16}	5.0×10^{-17}
結晶粒界での銀原子の拡散係数 $D_{\text{gb}} [\text{m}^2/\text{s}]$	$0 \leq D_{\text{gb}} \leq 2 \times 10^{-17}$	1.0×10^{-17}	1.0×10^{-18}
銀粒子の凝集速度に関する パラメータ $m_{\text{r}} [\text{m}^5/(\text{Js})]$	$0 \leq m_{\text{r}} \leq 10^{-20}$	1.0×10^{-21}	1.0×10^{-22}
結晶粒界の移動速度に関する パラメータ $M_{\text{g}} [\text{m}^3/(\text{Js})]$	$0 \leq M_{\text{g}} \leq 10^{-9}$	5.0×10^{-10}	1.0×10^{-10}
剛性定数 $k [\text{N}/\text{m}^2]$	$10^6 \leq k \leq 10^8$	1.0×10^7	$1.0 \times 10^{6.2}$

[0113] [表8]

種類	最適推定値
銀粒子表面での銀原子の拡散係数 $D_{\text{surf}} [\text{m}^2/\text{s}]$	0.988×10^{-16}
結晶粒界での銀原子の拡散係数 $D_{\text{gb}} [\text{m}^2/\text{s}]$	1.090×10^{-17}
銀粒子の凝集速度に関するパラメータ $m_{\text{r}} [\text{m}^5/(\text{Js})]$	0.948×10^{-20}
結晶粒界の移動速度に関するパラメータ $M_{\text{g}} [\text{m}^3/(\text{Js})]$	0.654×10^{-9}
剛性定数 $k [\text{N}/\text{m}^2]$	1.219×10^6

[0114] (手順3) 推定した物性値・パラメータを用いて、焼結シミュレーションによる焼結体形状を推定する。

上記表8に示した物性値・パラメータの最適推定値を用いて、焼結シミュ

レーションを実施して得られた焼結中の銀微粒子の3次元形状の時間変化の推定結果を図12に示す。図10に示した、その場観察結果と比べて、銀微粒子の3次元形状変化を精度よく推定できることが分かった。

- [0115] 以上説明したように、本実施形態のデータ同化装置は、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、データ同化対象の、所定の環境における変化を数値計算すること、及びベイズ最適化により、評価関数の値を最小化する初期状態と未知パラメータの値を更新することを繰り返す。これにより、データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する。従って、計算コストを抑え、かつ、容易に実装可能なアルゴリズムで、データ同化を行うことができる。
- [0116] また、従来のデータ同化アルゴリズムは、膨大な計算量を必要とするか、高度な数学的知識を必要として実装が困難であり、産業界を含む社会に広く普及しているとは言い難い。これに対して、本実施形態では上記問題点を克服し、数値シミュレーションのソースコードまたはシミュレーションソフトウェアがあれば、容易に本実施形態のデータ同化アルゴリズムを実装できる。よって、様々な分野の数値シミュレーションにおいて、実験データを活用した数値シミュレーション（データ駆動型シミュレーション）が普及する。
- [0117] また、ベイズ最適化の従来の使用方法としては、数学的に定式できない関数（ブラックボックス関数）の最小値探索である。一方で、4次元変分法では、数学的には明確に定式された評価関数 J の最小化計算をする。評価関数 J の最小化計算は、従来の技術（最急降下法、Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shananno（BFGS）法など）で計算できるが、評価関数 J の勾配を計算する必要がある。数値シミュレーションで扱う現象が複雑（非線形性が強い）であるほど、つまり、実用を想定するほど、評価関数 J の勾配計算は困難である。そこで、あえて評価関数 J を数学的に定式できない関数（ブラックボックス関数）であるとみなし、ベイズ最適化を応用した方が工学的には有効である。よって、ベイズ最適化を応用し、評価関数 J の勾配の計算を必要とせず評価関数 J の最小化計算を実現する。評価関数 J の勾配の計算が不要となる

ため、計算量も低減でき、実装も簡単となる。このように、本実施形態においては、ベイズ最適化の利点をあえて使わず、従来のアジョイント法（または変分法）の弱点を克服することに着目し、データ同化に、ベイズ最適化を用いる。これにより、計算コストを抑え、かつ、容易に実装可能なアルゴリズムで、データ同化を行うことができる。

[0118] また、本実施形態のデータ同化装置は、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との関係をガウス過程回帰により回帰分析する。データ同化装置は、回帰分析により得られる、任意の初期状態と未知パラメータの値に対応する評価関数の予測値の平均値と分散を求め、評価関数の予測値の平均値と分散から獲得関数の値を求める。データ同化装置は、獲得関数の値から評価関数の最小値をもたらすと推定される初期状態と未知パラメータの値を求める。これらのことを繰り返す。これにより、評価関数の勾配の計算をすることなく、評価関数の値を最小化することができる。

[0119] <変形例>

なお、本発明は、上述した実施形態に限定されるものではなく、この発明の要旨を逸脱しない範囲内で様々な変形や応用が可能である。

[0120] 例えば、データ同化装置が一つ又は複数のサーバで実現され、ネットワークを介して接続された情報処理端末で、ユーザが、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値と、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を入力するようにしてもよい。この場合には、図14に示すように、データ同化システム100は、サーバであるデータ同化装置10と、情報処理端末50とを備え、データ同化装置10と、情報処理端末50とは、インターネットなどのネットワークNを介して接続されている。情報処理端末50は、上記図1に示すように、データ同化装置10と同様に、CPU11、ROM12、RAM13、ストレージ14、入力部15、表示部16及び通信インタフェース17を有する。情報処理端末50の入力部15は、ユーザが入力した、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値と、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パ

ラメータの仮の値を受け付ける。情報処理端末50は、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値と、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を、データ同化装置10へ送信する。データ同化装置10の取得部101は、受信した、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値と、データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を取得する。データ同化装置10は、推定結果を情報処理端末50へ送信する。情報処理端末50の表示部16は、推定した、初期状態と未知パラメータの値をユーザに対して提示する。

[0121] また、上記実施例では、データ同化対象は、物質又は材料であり、未知パラメータは、物質又は材料の物性値である場合を例に説明したが、これに限定されるものではない。本発明は、実験と数値シミュレーションを結びつける数値計算技術であるデータ同化に関する発明であるため、数値シミュレーションが用いられる広範な分野で利用可能である。

[0122] 例えば、データ同化対象を熱又は流体とし、熱又は流体に関するシミュレーションを用いて、熱又は流体に関するパラメータを未知パラメータとしてもよい。

[0123] また、データ同化対象を電磁波とし、電磁波に関するシミュレーションを用いて、電磁波に関するパラメータを未知パラメータとしてもよい。

[0124] また、データ同化対象を、気象とし、気象衛星などで測定される気温、気圧の時系列データを実測値とし、気象シミュレーションを用いて、気象シミュレーションモデルのパラメータ等を推定するようにしてもよい。

[0125] また、データ同化対象を、感染症の感染現象とし、日々の感染者数データを実測値とし、感染症の患者数変動シミュレーションを用いて、シミュレーションに必要な感染率パラメータなどを推定するようにしてもよい。

[0126] また、データ同化対象を、株価とし、毎日の株価データを実測値とし、金融工学に関する株価変動シミュレーションを用いて、株価変動シミュレーションのパラメータを推定するようにしてもよい。例えば、日々の株価の変動は、ブラック・ショールズモデルなどを用いて数値シミュレーションで予測

できる。

[0127] 上記実施形態では、ベイズ最適化の具体的な方法として、ガウス過程回帰に基づくベイズ最適化を用いる場合を例に説明したが、これに限定されるものではない。例えば、Tree-structured Parzan Estimator(TPE)に基づくベイズ最適化を用いてもよい。この場合、TPEを使うことでも、評価関数の勾配を計算することなく、データ同化を行うことができる。

具体的には、更新部103は、取得部101で取得した実測値と、計算部102による数値計算の結果から得られる実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算する。更新部103は、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との複数の組み合わせを、初期状態と未知パラメータの値と、評価関数の値との組み合わせからなる上位群と下位群とに分類する。更新部103は、上位群についての確率密度関数、及び下位群についての確率密度関数を推定し、上位群についての確率密度関数、及び下位群についての確率密度関数の比から、獲得関数の値を求める。データ同化装置は、獲得関数の値から評価関数の最小値をもたらすと推定される初期状態と未知パラメータの値を更新する。

[0128] より具体的には、TPEに基づくベイズ最適化では、ガウス過程回帰に基づくベイズ最適化と同様に、評価関数を計算する。その後、それまでに得られているデータ（入力となる初期状態やパラメータと、出力となる評価関数の組み合わせ）を、評価関数の大小と設定した閾値に基づき、上位群と下位群の2つのグループに分類する。そして、上位群と下位群の各グループのデータに対してそれぞれカーネル密度推定を行い、2つの確率密度関数を計算する。そして、この2つの確率密度関数の比から獲得関数の大小関係を計算する。これ以降の操作は、ガウス過程回帰に基づくベイズ最適化と同様であり、獲得関数の最大値を参照して初期状態とパラメータを更新し、更新の繰り返しにより評価関数を最小化することで最適推定値を求める。

[0129] また、上記各実施形態でCPUがソフトウェア（プログラム）を読み込んで実行した各種処理を、CPU以外の各種のプロセッサが実行してもよい。

この場合のプロセッサとしては、FPGA (Field-Programmable Gate Array) 等の製造後に回路構成を変更可能なPLD (Programmable Logic Device)、及びASIC (Application Specific Integrated Circuit) 等の特定の処理を実行させるために専用に設計された回路構成を有するプロセッサである専用電気回路等が例示される。また、データ同化処理を、これらの各種のプロセッサのうちの1つで実行してもよいし、同種又は異種の2つ以上のプロセッサの組み合わせ (例えば、複数のFPGA、及びCPUとFPGAとの組み合わせ等) で実行してもよい。また、これらの各種のプロセッサのハードウェア的な構造は、より具体的には、半導体素子等の回路素子を組み合わせた電気回路である。

[0130] また、上記各実施形態では、データ同化プログラムがストレージ14に予め記憶 (インストール) されている態様を説明したが、これに限定されない。プログラムは、CD-ROM (Compact Disk Read Only Memory)、DVD-ROM (Digital Versatile Disk Read Only Memory)、及びUSB (Universal Serial Bus) メモリ等の非一時的 (non-transitory) 記憶媒体に記憶された形態で提供されてもよい。また、プログラムは、ネットワークを介して外部装置からダウンロードされる形態としてもよい。

[0131] 以上の実施形態に関し、更に以下の付記を開示する。

[0132] (付記項1)

メモリと、

前記メモリに接続された少なくとも1つのプロセッサと、

を含み、

前記プロセッサは、

データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得し、

前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用

いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算し、
前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する

ように構成されるデータ同化装置であって、

前記数値計算では、前記更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、

前記数値計算、及び前記更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する

データ同化装置。

[0133] (付記項2)

データ同化処理を実行するようにコンピュータによって実行可能なプログラムを記憶した非一時的記憶媒体であって、

前記データ同化処理は、

データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得し、
前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算し、

前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新することを含み、

前記数値計算では、前記更新された前記初期条件と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、

前記数値計算、及び前記更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する

非一時的記憶媒体。

[0134] 日本出願2021-150483の開示はその全体が参照により本明細書に取り込まれる。

[0135] 本明細書に記載された全ての文献、特許出願、及び技術規格は、個々の文献、特許出願、及び技術規格が参照により取り込まれることが具体的かつ個々に記載された場合と同程度に、本明細書中に参照により取り込まれる。

請求の範囲

- [請求項1] データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得する取得部と、
- 前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算する計算部と、
- 前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する更新部と、
- を含み、
- 前記計算部は、前記更新部によって更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、
- 前記計算部による前記数値計算、及び前記更新部による更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する
- データ同化装置。
- [請求項2] 前記更新部は、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との関係をガウス過程回帰により回帰分析し、前記回帰分析により得られる、任意の初期状態と未知パラメータの値に対応する前記評価関数の値の平均値と分散を求め、前記平均値と前記分散から前記獲得関数の値を求め、前記獲得関数の値から前記評価関数の最小値をもたらすと推定される前記初期状態と前記未知パラメータの値を更

新する請求項 1 記載のデータ同化装置。

[請求項3] 前記更新部は、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせを、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との組み合わせからなる上位群と下位群とに分類し、前記上位群についての確率密度関数、及び前記下位群についての確率密度関数を推定し、前記上位群についての確率密度関数、及び前記下位群についての確率密度関数の比から、前記獲得関数の値を求め、前記獲得関数の値から前記評価関数の最小値をもたらすと推定される前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する請求項 1 記載のデータ同化装置。

[請求項4] 前記データ同化対象は、物質又は材料であり、
前記未知パラメータは、前記物質又は材料の物性値である請求項 1 記載のデータ同化装置。

[請求項5] 前記実測値は、デジタル画像相関法で得られた実測値、又は表面形状変化を観測して得られた実測値である請求項 4 記載のデータ同化装置。

[請求項6] 前記所定の環境における変化は、材料のプレス加工による変化である請求項 4 記載のデータ同化装置。

[請求項7] 前記所定の環境における変化は、材料の焼結加工による変化である請求項 4 記載のデータ同化装置。

[請求項8] 取得部が、データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得し、

計算部が、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算し、

更新部が、前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実

測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する

ことを含み、

前記計算部は、前記更新部によって更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、

前記計算部による前記数値計算、及び前記更新部による更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する

データ同化方法。

[請求項9]

データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値を取得し、

前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算し、

前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する

ことを実行させるためのデータ同化プログラムであって、

前記数値計算では、前記更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、

前記数値計算、及び前記更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定する

データ同化プログラム。

[請求項10]

データ同化対象の、所定の環境における変化を測定した実測値と、前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を入力する入力部と、

前記データ同化対象に関する仮の初期状態と未知パラメータの仮の値を用いて、前記データ同化対象の、前記所定の環境における変化を数値計算する計算部と、

前記実測値と、前記数値計算の結果から得られる前記実測値に対応する値との誤差を表す評価関数の値を計算し、前記初期状態と前記未知パラメータの値と、前記評価関数の値との複数の組み合わせから、獲得関数を求め、前記獲得関数の値に基づいて、前記評価関数の値を最小化する前記初期状態と前記未知パラメータの値を更新する更新部と、

提示部と、

を含み、

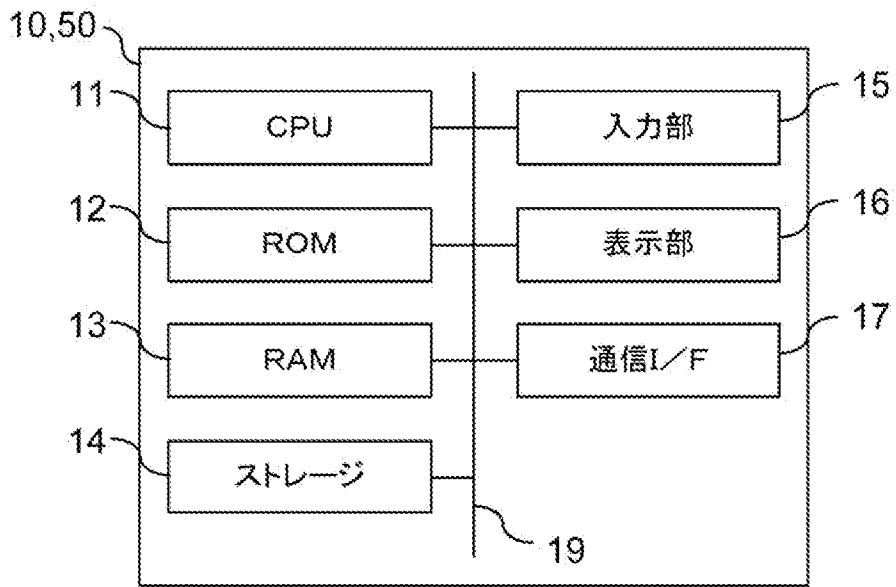
前記計算部は、前記更新部によって更新された前記初期状態と前記未知パラメータの値を用いて、再度、前記数値計算を行い、

前記計算部による前記数値計算、及び前記更新部による更新を繰り返すことにより、前記データ同化対象に関する初期状態と未知パラメータの値を推定し、

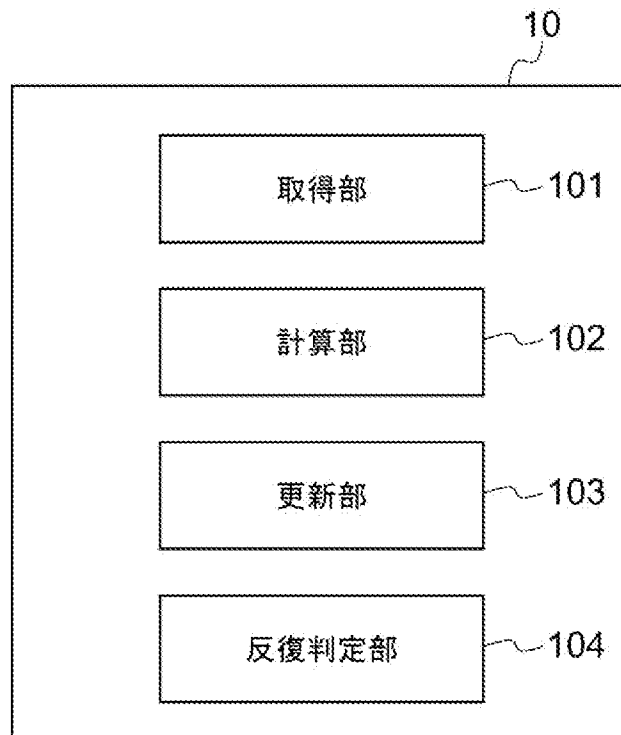
前記提示部は、前記推定した、初期状態と未知パラメータの値を提示する

データ同化システム。

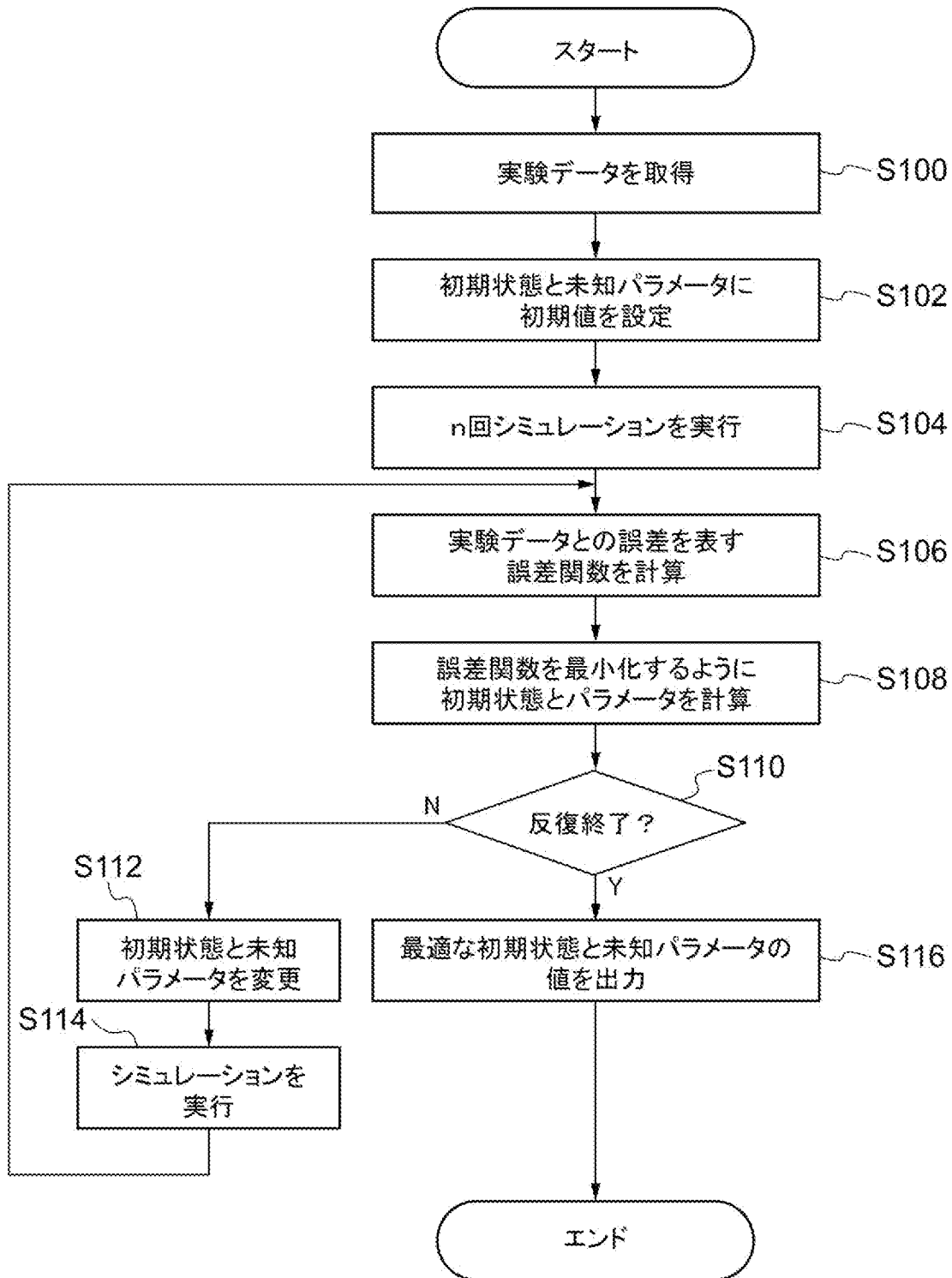
[図1]



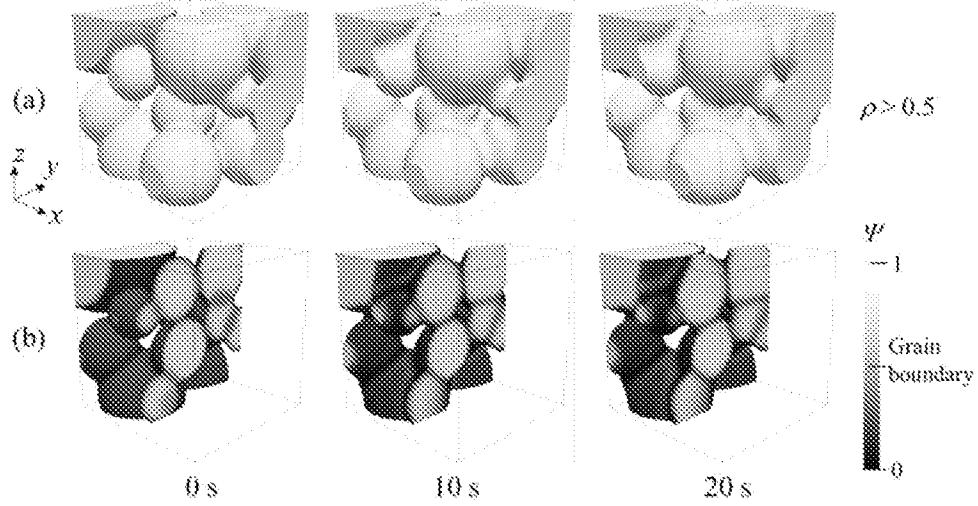
[図2]



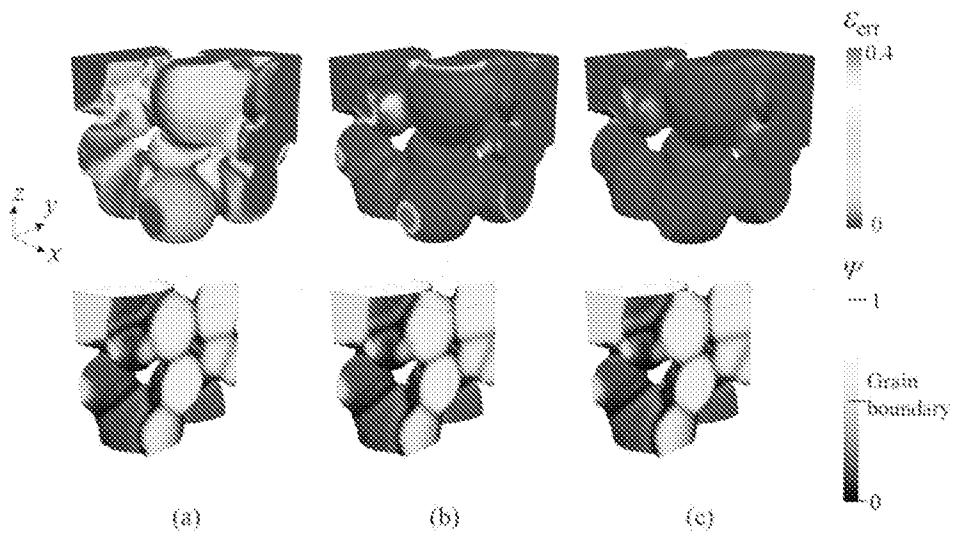
[図3]



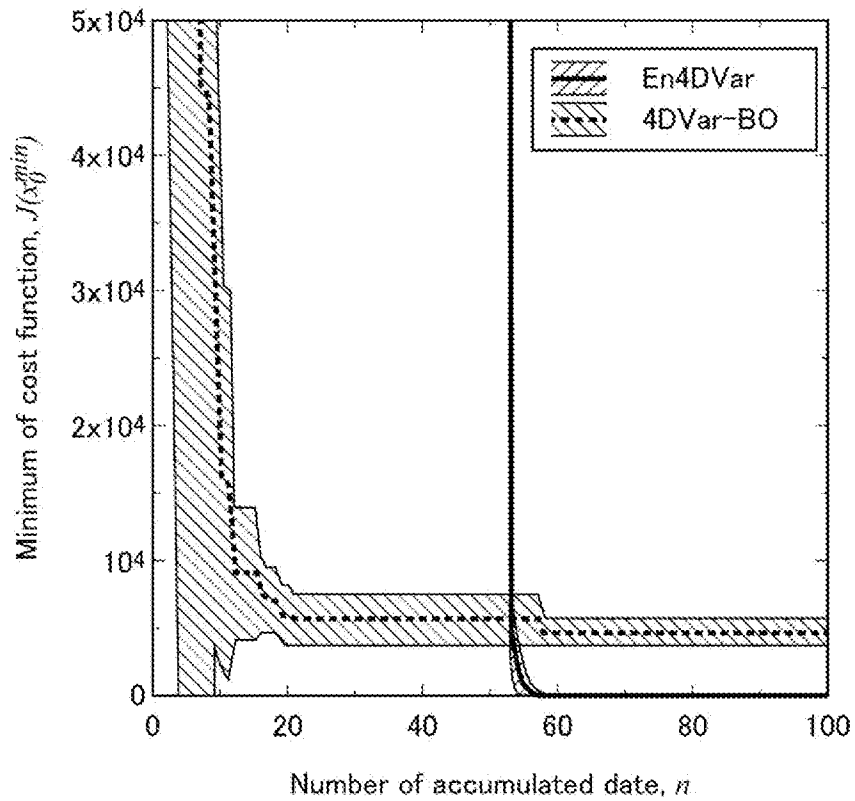
[図4]



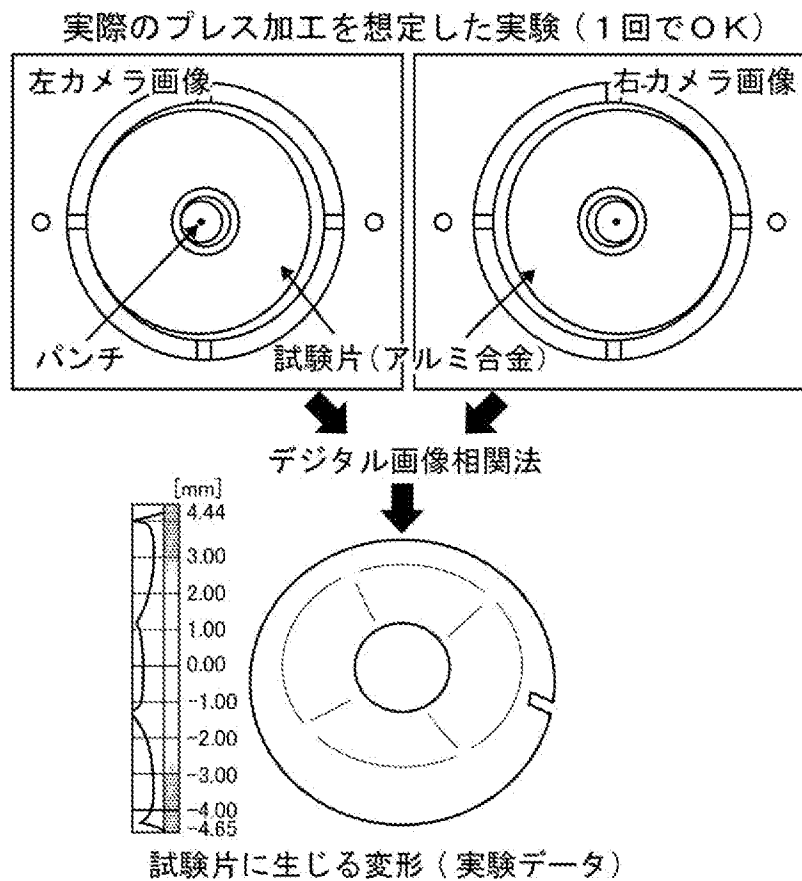
[図5]



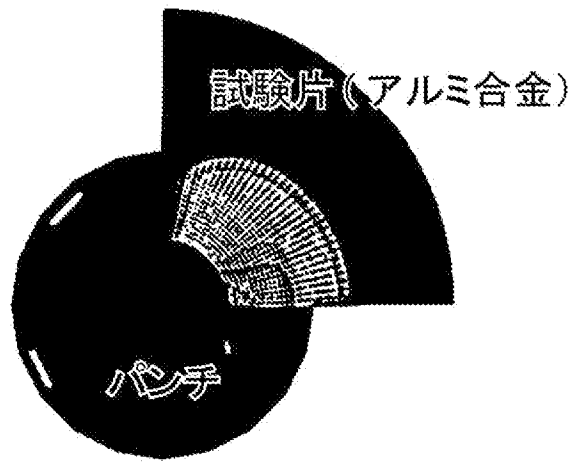
[図6]



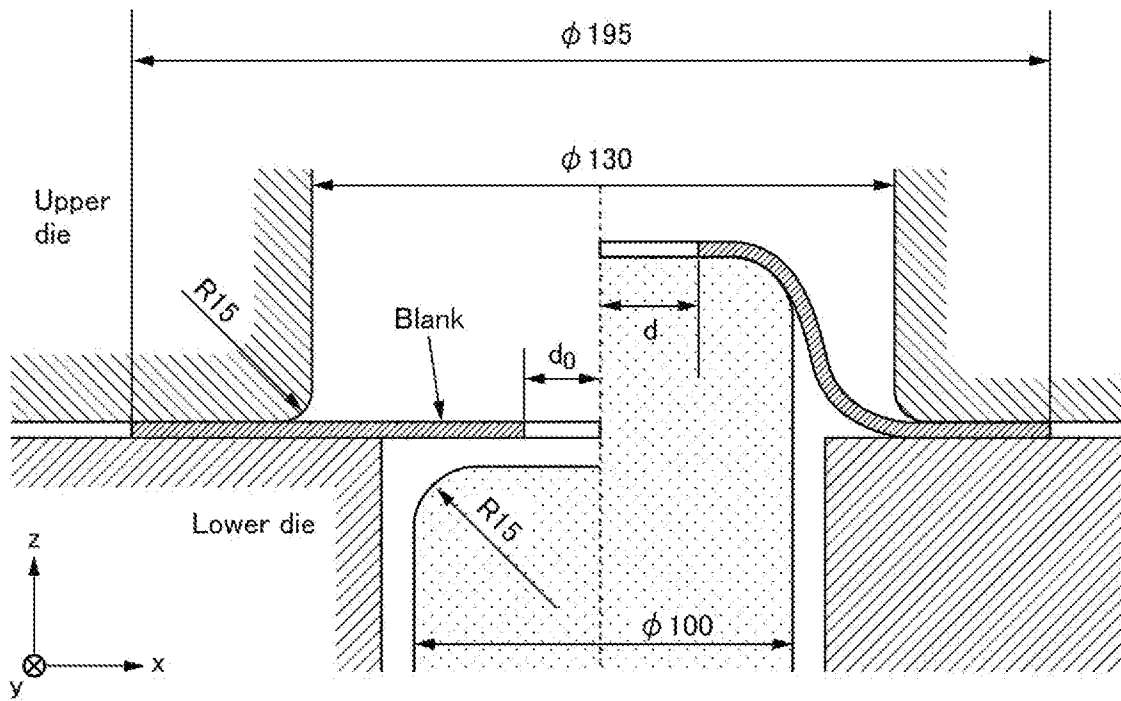
[図7]



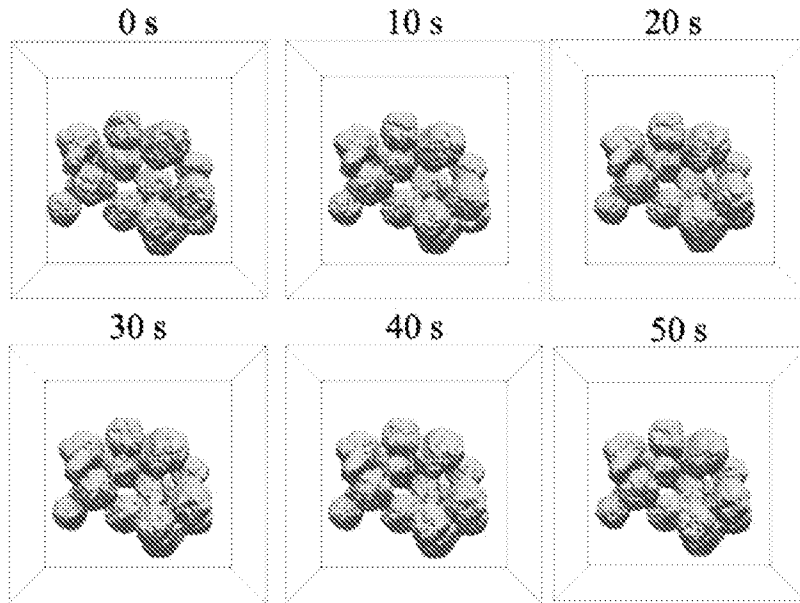
[図8]



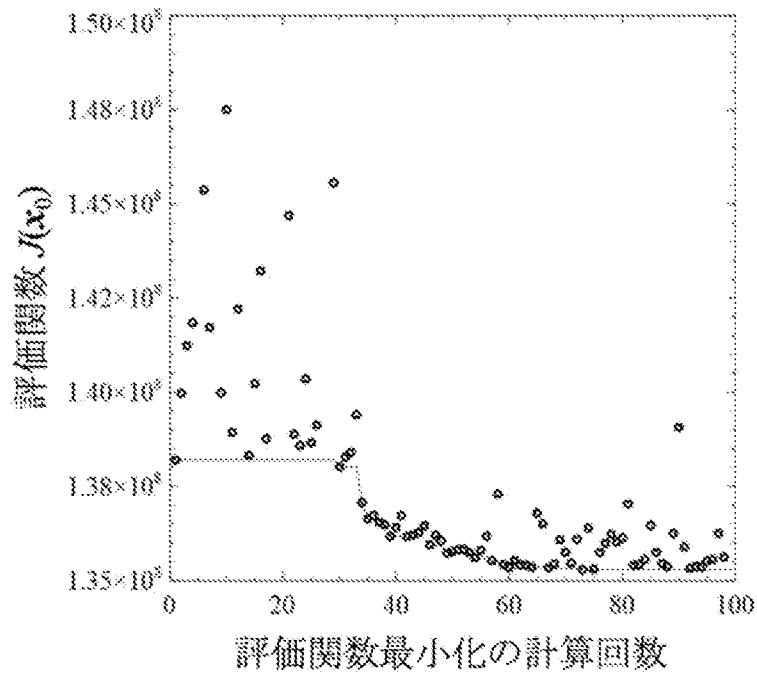
[図9]



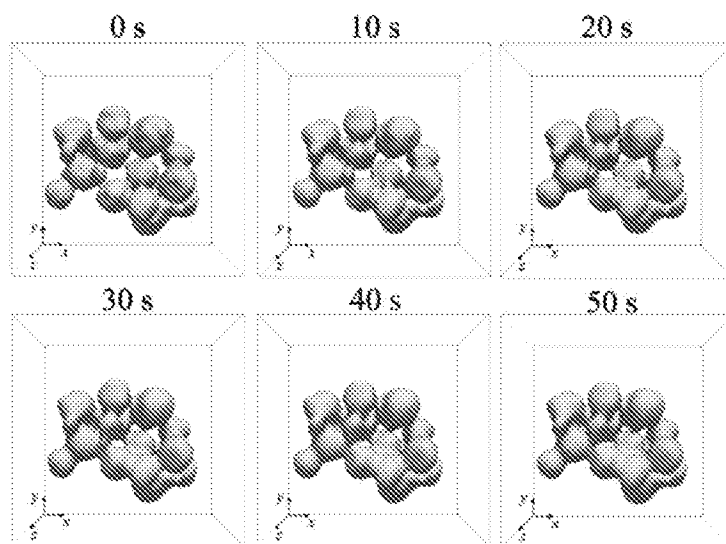
[図10]



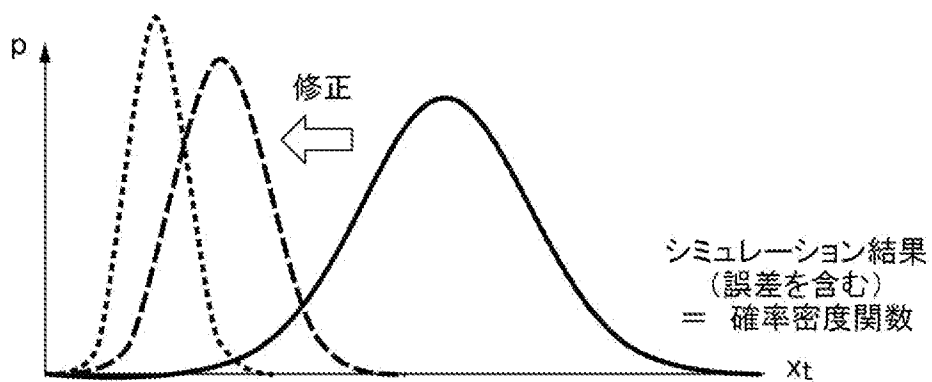
[図11]



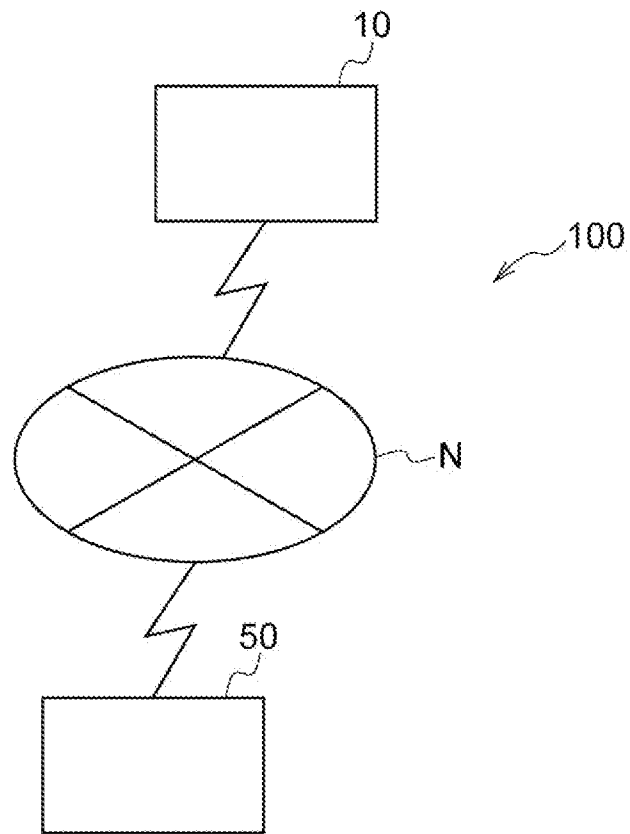
[図12]



[図13]



[図14]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/031628

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
G16Z 99/00(2019.01)j FI: G16Z99/00		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G16Z99/00		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022 Registered utility model specifications of Japan 1996-2022 Published registered utility model applications of Japan 1994-2022		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2014-26440 A (FUJITSU LTD.) 06 February 2014 (2014-02-06) entire text, all drawings	1-10
A	JP 2008-241433 A (NEC CORP.) 09 October 2008 (2008-10-09) entire text, all drawings	1-10
A	JP 2014-119351 A (MITSUBISHI HEAVY INDUSTRIES, LTD.) 30 June 2014 (2014-06-30) entire text, all drawings	1-10
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 18 October 2022		Date of mailing of the international search report 01 November 2022
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No. PCT/JP2022/031628

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2014-26440 A	06 February 2014	(Family: none)	
JP 2008-241433 A	09 October 2008	(Family: none)	
JP 2014-119351 A	30 June 2014	US 2015/0301117 A1 the whole document	
		WO 2014/097868 A1	
		EP 2933648 A1	
		CN 104813181 A	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G16Z 99/00(2019.01)i FI: G16Z99/00		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G16Z99/00 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2022年 日本国実用新案登録公報 1996-2022年 日本国登録実用新案公報 1994-2022年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2014-26440 A（富士通株式会社）06.02.2014（2014-02-06） 全文、全図	1-10
A	JP 2008-241433 A（日本電気株式会社）09.10.2008（2008-10-09） 全文、全図	1-10
A	JP 2014-119351 A（三菱重工業株式会社）30.06.2014（2014-06-30） 全文、全図	1-10
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日	18.10.2022	国際調査報告の発送日 01.11.2022
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 山内 裕史 5L 4064 電話番号 03-3581-1101 内線 3562	

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
 PCT/JP2022/031628

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2014-26440 A	06.02.2014	(ファミリーなし)	
JP 2008-241433 A	09.10.2008	(ファミリーなし)	
JP 2014-119351 A	30.06.2014	US 2015/0301117 A1 the whole document	
		WO 2014/097868 A1	
		EP 2933648 A1	
		CN 104813181 A	