

パターン形成を記述する PDE のベイズ推定

はこだて未来大学・複雑系知能学科 義永 那津人

Natsuhiko Yoshinaga

Department of Complex Intelligent Systems,
Future University Hakodate*

1 背景

自然界では様々な秩序構造が見られる。例えば、流体を下から加熱すると縞模様の対流パターンが生じたり、液体を入れた容器を加振して激しく上下に揺らすと液体の表面に三角格子状の水玉模様が生じたりする。これらの秩序構造は、人間が一つ一つ順番に描いて作っているのではなく自発的に発生する [1]。これは自己組織化などと呼ばれている。様々な物理システムにおいて、これらのパターンがどのようなメカニズムで形成されるのかを理解するために様々な数理モデルがこれまで研究されてきた。その中でも、非線形偏微分方程式を用いた Swift-Hohenberg 方程式は、スカラー場 $\psi(\mathbf{x}, t)$ に対する偏微分方程式 (PDE) であり

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \epsilon \psi - (q_0^2 + \Delta)^2 \psi - \psi^3 \quad (1)$$

と書かれる。元々は熱対流を記述するための単純化したモデルとして提案された [2]。このモデルでは、長さスケールの二乗の逆数の次元を持つラプラシアン作用素と、特徴的な波数に対応する q_0^2 がバランスすることによって、 $2\pi/q_0$ 程度の長さスケールを持った構造が定常解として現れる。分岐パラメーターである ϵ が $\epsilon \leq 0$ の時、一様定常解が線形安定であるが、 $\epsilon > 0$ の時、一次元での (1) の適当な境界条件の下での定常解は空間的に振動する周期解となることが知られている。一方、高次元（二次元や三次元）では、縞模様

yoshinaga@fun.ac.jp

(ストライプ状) や層状のパターン、三角格子上にピークが出る水玉模様^{*1}などが得られる。(1) は $\psi \rightarrow -\psi$ の対称性を持つため、水玉模様を再現するには、 ψ^2 の項を右辺に入れる必要がある。空間スケールを $2\pi/q_0$ に選ぶことで、 $q_0 = 1$ と規格化することができるので、(1) の定常解は、 ϵ と ψ^2 の係数の二つのパラメーターによって特徴づけられる。これらのパラメーターを適当に選ぶと、三次元では double gyroid 構造 (図 1(C)) と呼ばれる三分岐で空間的に連結したネットワーク状の二つのドメインが重なりを持たずに存在している複雑な構造を作ることでもできる [3, 4]。double gyroid 構造は、高分子ブロック共重合体と呼ばれる高分子材料の自己組織化で実験的にも観測されている^{*2}。

Swift-Hohenberg 方程式では $\psi(\mathbf{x})$ は非保存場であるが、 $\psi(\mathbf{x})$ が物質の数密度や質量密度に対応する場合には ψ の積分が保存量となる。この場合、Swift-Hohenberg 方程式と同様に周期構造を再現するためのモデルとして、Phase-Field Crystal 方程式が知られている。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \Delta \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \quad (2)$$

$$\mathcal{F} = -\frac{\epsilon}{2}\psi^2 + \frac{1}{4}\psi^4 + \psi(q_0^2 + \Delta)\psi \quad (3)$$

このモデルは Swift-Hohenberg 方程式と同じエネルギー汎関数 (3) を持つ勾配系となっている。これらのモデルの関係は、Allen-Cahn 方程式 (非保存系) と Cahn-Hilliard 方程式 (保存系) との関係と同様である。

Phase-Field Crystal モデルでは、エネルギー汎関数の中に含まれる ϵ と q_0 がパラメーターとなる。しかし、長さスケールの 1 つは空間スケールの無次元化に使うことができるため、通常は $q_0 = 1$ に選ぶ。このモデルにはもう 1 つのパラメーターが含まれている。 ψ は保存量であるため、その空間平均値

$$\bar{\psi} = \frac{1}{V} \int \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (4)$$

は時間的に変化しない量である。この $\bar{\psi}$ はパラメーターになっていて、それを見るには (3) において $\psi \rightarrow \psi + \bar{\psi}$ という変換をすると、 ψ の平均値は 0 になる代わりに ψ^3 の項がエネルギー汎関数の中に現れる^{*3}。これは、(1) や (2) に ψ^2 ($\Delta\psi^2$) の項を加えることを

^{*1} hexagonal パターンと呼ばれることもある。

^{*2} Swift-Hohenberg 方程式は高分子ブロック共重合体の文脈では Landau-Brazovskii モデルと呼ばれることもある。また、高分子の分子論的から出発して (1) と少し異なるモデルを近似的に導出したものとして Ohta-Kawasaki-Oono モデルも知られており定性的には類似した定常解を持つと考えられている [5]。

^{*3} ψ^2 の項は少し修正される。 ψ の項は定数の寄与しかしないので無視できる。

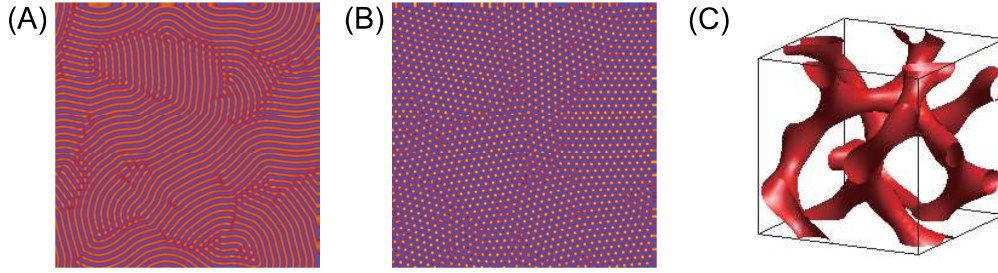


図 1 Phase-Field Crystal モデルを用いて作った (A) ストライプパターン、(B)hexagonal パターン、(C)double gyroid パターン。(A) と (B) は空間サイズの大きなドメイン (512×512 のメッシュ点) で数値計算を行っているため、局所的には二重回転対称性と六重回転対称性を持っているが、粒界が存在して局所構造の方向が空間的に非一様になっている。4 節で議論する本研究の手法では、小さい空間ドメイン (二次元の場合 128×128 のメッシュ点) を用いることで、一様な (準) 周期構造のみを扱っている。

意味している。この項は $\psi \rightarrow -\psi$ の対称性を破り、例えば Swift-Hohenberg 方程式では $\bar{\psi} = 0$ の時にストライプパターンが現れるのに対して、 $\bar{\psi} \neq 0$ の時には水玉模様が現れるのと同様に、Phase-Field Crystal モデルでもパターンの選択に重要な役割を果たすパラメーターとなる。

2 Phase-field crystal モデルと準結晶パターン

Swift-Hohenberg や Phase-Field Crystal 方程式を、さらに複雑なパターンを記述するために拡張したモデルも知られている。Ron Lifshitz らは、タンクに入れた水を加振した時に現れる表面の波 (ファラデー波と呼ばれる) を再現するためのモデルとして以下のようなものを提案した [6]。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \epsilon \psi + \alpha \psi^2 - \psi^3 - (q_0^2 + \Delta)(q_1^2 + \Delta)\psi \quad (5)$$

このモデルのポイントは、Swift-Hohenberg 方程式に出てきた長さスケール $1/q_0$ に加えて、もう一つの長さスケール $1/q_1$ が含まれているということである。これらの比を適切な無理数比にすることによって、準結晶構造を再現することができる。例えば、二次元で $q_0/q_1 = 2 \cos(\pi/12)$ とすると、図 2(A) のような十二重回転対称性を持つ準結晶が得られる。

準結晶は、元々は固体金属材料における原子配置が通常の意味での周期性を持たないということで見つかったものである [7]。最近では、高分子や液晶、界面活性剤など、原子よ

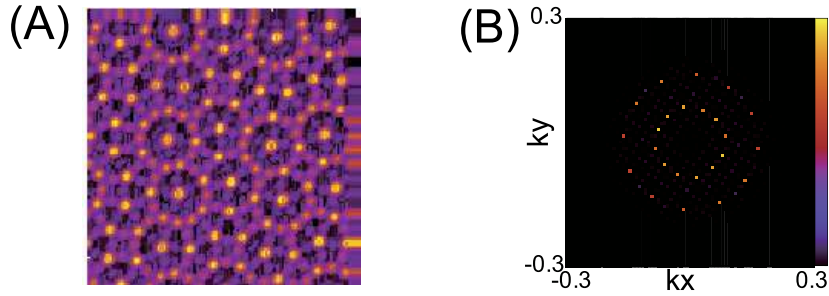


図2 Phase-Field Crystal モデル (2) を用いて、(3) の代わりに、(5) のモデルに対応するエネルギー汎関数を用いたものを数値計算して得られた定常解 $\psi_s(\mathbf{x})$ (A) とそのフーリエ変換 $\hat{\psi}_s(\mathbf{k})$ (B)。フーリエ変換後の図より 12 個のスポットが二つの同心円状に並んでいることから十二回回転対称性 (dodecagonal) を持ち二つの長さスケールを持っていることが分かる。

りも大きなスケールで分子が凝集して自己組織化することで準結晶ができるという実験結果が報告されている [8, 9]。従って、準結晶も普遍的なパターンとして原子や分子の詳細によらない形成条件やメカニズムがあると期待されるわけだが、(5) のようなモデルで三次元の準結晶が再現できるかや、どのような対称性を持つ準結晶が存在するのか、また、準結晶がどのような形成ダイナミクスに従うのか、などの研究はまだまだ発展途上である。三次元の準結晶は、5 回回転対称性、8 回回転対称性、10 回回転対称性、12 回回転対称性を持ったものが存在することが、固体金属材料の実験 [10] や分子動力学シミュレーション [11] などに分かってきているが、PDE を用いて三次元の準結晶を再現した例は、5 回回転対称性（正二十面体準結晶）[12] や 12 回回転対称性 [13] に限られている。

このような背景の下で、本研究では、目的となる構造からそれを再現する PDE をベイズ推定の立場で推定する。このような推定が体系的に行うことができるようになれば、構造（対称性）としては既知であるが、まだ実際に作成することに成功していないような構造について、どのような条件が必要なのか、例えば、準結晶の場合には複数の長さスケールの比が何個必要なのか、あるいは、どのような構造形成過程を経て目的の構造が得られるのか、さらには、目的の構造に対して外場を加えた時にどのような構造変化が予想できるか、などの知見が得られると期待される。

3 機械学習による PDE の推定

データから支配方程式を推定するというのは自然科学の研究の歴史で常に行われてきた。本研究で議論する、データから微分方程式を推定することに限定しても system

identification の文脈で、例えば Lorenz 方程式の数値計算結果から常微分方程式を推定する様々な手法が提案されてきた [14, 15]。ここで注意したいのは、微分方程式を推定するという問題には二通りのものが存在するということである*⁴。一つ目はパラメーター推定で、微分方程式の形、つまりどのような項が入るのかはあらかじめ決められて、それらの係数を推定するという問題である。二つ目は方程式推定で、どのような項が入るのかも分からない状態で推定を行う。当然、二つ目の方程式推定の方がずっと難しい問題となる。前述のデータから微分方程式を推定する手法が提案されてきたというのもパラメーター推定についての研究が多かった。方程式推定については、Schmidt らの、データから二重振り子の微分方程式（ニュートンの運動方程式）を推定した研究が契機になって最近研究が進んでいる [18]。微分方程式として記述する変数は知っているものとして*⁵、変数の和や積の組み合わせを低次のものから探索するという手法を用いている。この手法は、実際に二重振り子でうまくいっているとはいえ、変数が増えれば微分方程式に現れる項の候補は指数関数的に増えるので探索が不能になることが予想される。そこで、Brunton や Kutz らは、スパース回帰を用いることで少数の主要な項だけを推定する手法を提案し Lorenz 方程式などの数値データに適用した [19]。さらに、偏微分方程式の推定にもこの手法は使われており、Kuramoto–Sivashinsky 方程式のような時空カオスを示す偏微分方程式を数値計算結果のデータから推定することに成功している [20]。

データから微分方程式を推定するというと突飛なことをしているように感じる人もいるかもしれないが、基本的なアイデアは非常にシンプルである。変数 $u(x, t)$ に関する偏微分方程式

$$\partial_t u(x, t) = F[u(x, t)] \quad (6)$$

を考える。データは、 i 番目のデータ点 (x_i, t_i) についての $u(x_i, t_i)$ の観測値である。偏微分方程式の右辺を μ でパラメトライズして

$$F_\mu[u(x, t)] = \mu_0 + \mu_{1,0}u + \mu_{2,0}u^2 + \cdots + \mu_{1,1}\partial_x u + \mu_{1,2}\partial_{xx}u + \cdots + \mu_{2,2}(\partial_x u)^2 + \cdots \quad (7)$$

のように変数の多項式とその空間微分で記述されるような辞書項 (dictionary term) を用意する。そして、データが偏微分方程式を満たすように最適なパラメーター μ^* を探索

*⁴ 微分方程式の推定という文脈ではデータ同化もよく議論される [16, 17]。ただ、データ同化は、通常はデータから初期値を推定することが問題の中心となる。もちろんモデル（微分方程式）のパラメーターを推定することも可能であるが、その場合は本研究で議論することと同様であり、データ同化の本筋ではないと考えているので本研究では触れないことにする。

*⁵ 二重振り子の場合、二つの質点の位置（角度）と（角）運動量によってシステムが記述できることは既知としている。

する

$$\mu^* = \operatorname{argmin}_{\mu} \|\partial_t u(x_i, t_i) - F_{\mu}[u(x_i, t_i)]\| + \lambda(\mu). \quad (8)$$

ここで単純に二乗ノルムをとって線形回帰をするとすべての項の係数が非ゼロの値になってしまうので、 $\lambda(w)$ によって正則化を加えることで不必要な項が推定結果に出てこないようにしている。[19, 20] の論文では、 L^1 正則化を用いて推定することで、パラメーターがスパースになるように、つまり、一部のパラメーター以外は 0 になるように推定することを提案している。ただし、実際上は、Ridge 回帰を繰り返し行い、閾値より小さなパラメーターをゼロに置き換えるという sequential thresholded least-squares という手法を用いているようである。

4 PDE のベイズ推定

これまで見てきたように、比較的単純な PDE で複雑なパターンが再現できるようになってきている。しかし、歴史的には実験的に新しいパターンや構造が見つかり、それを再現するためのモデルが長い時間をかけて考え出されてきているというのが実情である。では、何か新しいパターンが得られた、あるいは欲しくなった時に、そのパターンを再現するモデルを推定する方法はないだろうかというのが当然の疑問として生じる。これまで研究者が時間をかけて見つけてきたモデルを、機械学習の力を借りて自動的に見つけられないかというのが究極的な目標である。

3 節で見たように、微分方程式の推定にはデータから方程式の左辺となる時間微分の情報を得る必要がある。典型的には、短い時間間隔で観測することで微分を差分で近似して評価する。しかし、実際上は短い時間間隔で観測を行うことは困難であることが多い。さらに、本研究で考えたいのは、前述のように、目標となる定常状態のパターンがあってそれを再現するための偏微分方程式を推定することである。この場合、定常状態の情報しかないため時間微分をデータから評価することはできない。むしろ、モデル推定を行うことによって、実験的にアクセスするのが困難な、定常状態に至るまでの時間変化の情報を得たいというのが本研究の動機であった。では、定常状態であることを使って $F_w[u(x, t)] = 0$ となるように推定すればいいのではないかということになる。しかし、パターン形成を記述する偏微分方程式はたくさんの定常解や準安定な解、さらには不安定な解を持つことが多いため、このような戦略もよくなさそうだ。我々が推定したいのは、データが安定な定常状態として再現できるような偏微分方程式である。そこで、初期値に対する周辺化という操作を考える。多くの初期値に対して、目的のパターンを再現するモ

デルを「よい」モデルだと考えて、適当に生成した初期値から定常解を数値的に計算し、その定常解を目的のパターンと比較することで微分方程式を推定する。ここでは、初期値を空間的に無相関なランダムな値によってサンプルすることにする。これは、パターン形成の研究で初期値としてよく用いられるものである。本節では、我々が提案するベイズ推定の手法について解説する。

4.1 モデルの作成と推定パラメーター

2 節を踏まえて、本研究では異なる長さスケールを持つ複数のモデルを用意し、各モデルの中のパラメーターを推定する。後述するように、最終的にどのモデルが一番尤もらしいかを推定することによってモデル推定（選択）を行う。ここでは、どのようにモデルを準備するのかについて説明する。

まず、保存量である $\psi(\mathbf{x}, t)$ ^{*6} を変数として以下の偏微分方程式を考える。

$$\partial_t \psi = \mathcal{L}\psi + \Delta\psi^3. \quad (9)$$

ここで、 $\mathcal{L}$ は線形作用素で、(1) の $\epsilon - (q_0^2 + \Delta)^2$ に対応する。二項目は三次の非線形項で、保存場を考えているのでラプラシアンが作用している。これは、(2) の Swift-Hohenberg エネルギー汎関数の四次の項や、(5) の三次の項に対応する。(9) をフーリエ変換すると、フーリエ変換した密度場 $\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}[\psi(x, t)](\mathbf{k})$ に対して

$$\partial_t \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{L}_k \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) + \mathcal{F}[\Delta\psi^3](\mathbf{k}) \quad (10)$$

となる。長さスケールが m 個のモデルは、

$$\mathcal{L}_k^{(m)} = k^2(q_0^2 - k^2)^2(q_1^2 - k^2)^2 \cdots (q_{m-1}^2 - k^2)^2 + \sum_{i=0}^{m-1} a_i S_i^{(m)}(k) \quad (11)$$

とすることができる。ここで、 $S_i^{(m)}(k)$ は波数の大きさ $k = |\mathbf{k}|$ の関数で、例えば、 $m = 1$ の時には、 $S_0^{(1)} = -(a_0/q_0^4)k^2(k^2 - 2q_0^2)$ というように選ぶ。そうすると、 $k = q_0$ の時に (11) の最初の項はゼロになり、 $\mathcal{L}_{k=q_0}^{(m)} = a_0$ となる。 $m \geq 2$ の場合も同様に適切に $S_i^{(m)}(k)$ を選ぶことで、 $\mathcal{L}_k^{(m)}$ を k の関数として見た時のピークの位置 q_i と高さ a_i をパラメーターとして調整することができる（図 3）。従って、長さスケール m のモデルに対して、 $2m$ 個のパラメーターが必要となるが、空間スケールの 1 つは微分方程式を無次元化することによって 1 に選ぶことができるので、ここでは $q_0 = 1$ と選び、 $2m - 1$ 個のパラメーターを考えることにする。

^{*6} 密度場などを想像していただければよい。

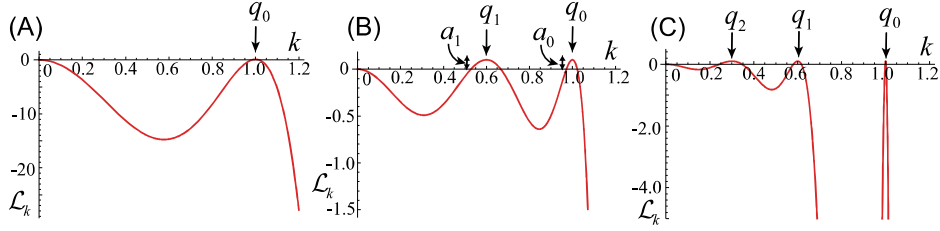


図3 本研究で取り扱うモデル族を $\psi = \bar{\psi}$ の周りで線形化した時のスペクトルの様子。
(A) $m = 1$ 、(B) $m = 2$ 、(C) $m = 3$ の三つのモデルの例を示しており、ピークの数に対応している。

1 節で議論したように保存量 $\bar{\psi}$ も推定パラメーターとなる。さらに、実際の数値計算は有限サイズの周期境界条件を持つドメインで行うため、ドメインのサイズ（二次元空間を考えているので x と y 方向）もパラメーターとなる。ここでは、ドメインのサイズの代わりに空間メッシュのサイズ dx と dy を推定パラメーターとする。空間メッシュの数 N は固定しているので Ndx, Ndy がドメインのサイズになる。ある程度大きいドメインを考える限りドメインサイズがパターンに大きな影響を及ぼすことはないのだが、準結晶パターンの場合は、有限サイズの周期境界条件のドメインで数値計算を行う限りドメインサイズでの周期構造になってしまうため、無理数の有理数近似として近いドメインサイズにする必要があるためこれらの推定パラメーターを用いている。また、三次元の場合には計算コストが大きいため、一、二周期のドメインサイズでしか計算できない。そこでドメインサイズをパラメーターとして調整する必要となる。

4.2 目的とするパターン

目的とするパターンは、図 2(A) のように PDE の数値解を使用してもいいが、そうするとモデルがすでに分かっていることになってしまう。一方で、パターンの対称性が分かればパターンを人工的に作ることはできる。例えば、図 1(B) のストライプパターンは $\psi(\mathbf{x}) \sim \cos x$ とすれば再現することができる。これは、 $\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + c.c.$ で $\mathbf{k} = (\pm 1, 0)$ だけを適当な振幅 $a_{\mathbf{k}}$ で足し合わせたものになっており、フーリエ変換すると図 2(B) のように離散的な点でスポットを持つ。ストライプパターンの場合は二点のスポットを持つ。

実際の物質材料の自己組織化の実験では構造情報は散乱実験によって得られる。典型的には、波数の大きさに対する散乱強度が得られ、そこから、系の事前情報を加えてフーリエ変換後のスポットの位置を決める（図 4）。例えば、二次元の十二回回転対称性を持つ準

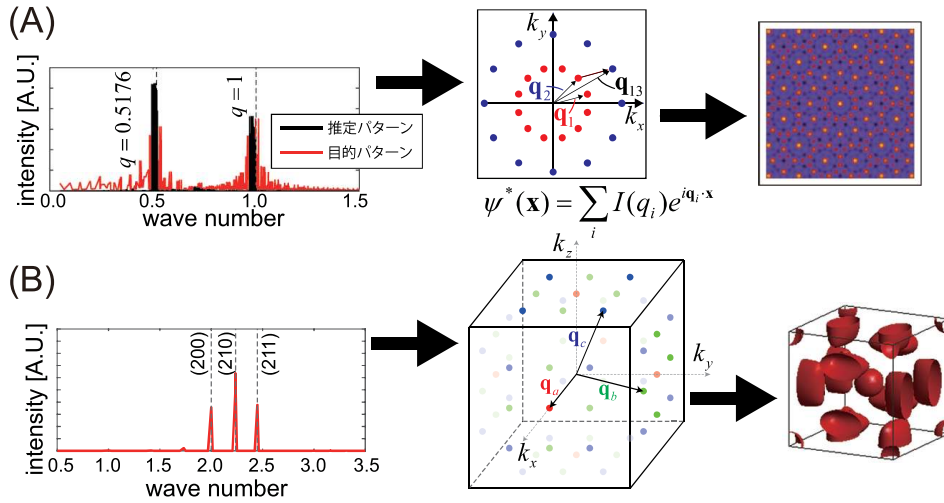


図4 (右図) 関数を与えて人工的に作った目的パターン。(A) 二次元の十二回回転対称性を持つ準結晶と (B) 三次元の Frank-Kasper 構造について示している。(中図) 二次元あるいは三次元のフーリエ空間でのスポットの位置。(左図) 実験では、波数の大きさ、つまり、中図のスポットの動径方向の距離と散乱強度（フーリエ係数の絶対値）が得られることが多い。(A) では本研究の手法で推定したモデルで得られた構造の結果も示している。

結晶の場合は、回転対称性を反映して 12 個のスポットがフーリエ変換後に出る。波数の大きさ $k = |\mathbf{k}|$ が無理数比になるように同心円状に 12 個のスポットを二か所並べると準結晶パターンを作ることができる。

三次元では複雑になるが、 $\mathbf{k} = (\pm 2, 0, 0), (\pm 2, \pm 1, 0), (\pm 2, \pm 1, \pm 1)$ の合計 54 個の点*7にスポットができるように足し合わせると図 4(B) のように Frank-Kasper 構造というものを作ることができる。図 1(C) の double gyroid パターンについても、 $\mathbf{k} = (\pm 2, \pm 1, \pm 1), (\pm 2, \pm 2, 0)$ の合計 36 点のスポットを使って作ることができる [21]。

4.3 特徴量

各モデルのパラメーター空間でサンプリングを行う時に、サンプリング点でのパターンと前節で議論した目的となるパターンとの距離を適切に定義する必要がある。単純にはパターンを画像だとみなして各ピクセルの輝度をベクトル化して二乗ノルムなどで距離を測ることができる。しかし、今興味があるのは同じパターンを得ることなので、並進や回転に対して不変でなければいけない。また、ストライプの幅のような大きさもパターンの定

*7 等方性から軸の入れ替え、例えば $(0, \pm 2, 0), (0, 0, \pm 2)$ も含む。

性的な性質を変えない。図5のように、ストライプパターンがどの方向を向いていて、並進方向にずれていてもストライプパターンだとみなせるはずである。実際に、図5は同じモデル同じパラメーターで、異なる初期条件を用いて得られた定常状態である。

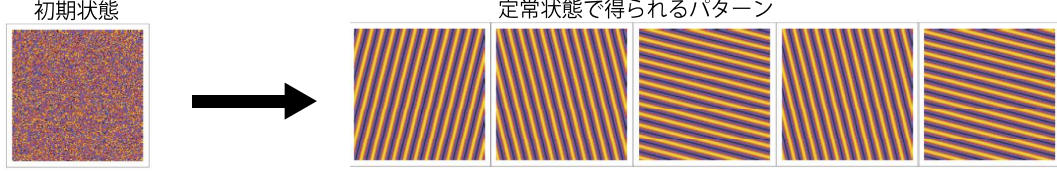


図5 (左図) $\bar{\psi}$ に正規分布に従うノイズを加えた初期構造の一例と (右図) 同一のモデル・パラメーターで異なるノイズの下で得られたストライプパターンの定常状態の数値解。

このような性質を満たすために、パターンをフーリエ変換した $\psi(\mathbf{k})$ を用いて次のような特徴量 Ψ_l を用いた。

$$\Psi_l(\psi) = \sqrt{A_{l,+1}^2 + A_{l,-1}^2} \quad (12)$$

$$A_{l,\pm 1}(\psi) = \int |\psi(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} \cos l\theta_k \\ \sin l\theta_k \end{pmatrix} d\mathbf{k}^2 \quad (13)$$

ここで、 $A_{l,+1}(A_{l,-1})$ は $\cos \theta_k(\sin \theta_k)$ に対応し、 $\theta_k = \tan^{-1} k_y/k_x$ である。 $|\psi(\mathbf{k})|$ はフーリエ変換後のスポットの強度を表し、それを l 回回転対称性を持つときに A_l のノルムが大きくなるように定義することで回転不変になるようにしている。また、フーリエ空間での $k = |\mathbf{k}|$ に依存しないようにすることで相似変換について不変になるようにしている。三次元の場合はやや複雑であるが、球面調和関数を用いて

$$A_{l,m} = \int |\psi(\mathbf{k})| Y_l^m(\theta_k, \varphi_k) d\mathbf{k}^3 \quad (14)$$

として、この回転不変量を

$$\Psi_l = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \sqrt{\sum_{m=-l}^l (-1)^m A_{l,m} A_{l,-m}} \quad (15)$$

と書いてかればよい。ただし、三次元の場合は回転不変量が一つではないので、これ以外にも特徴量が存在する。その場合、どの不変量を重視するのかなどのハイパーパラメーターの調整が必要になるが、まずは (15) のみを考えることにする。

4.4 サンプリング

4.1 節で議論した各モデルに対して、パラメーター空間で事後分布からサンプリングを行いパラメーター推定を行う。同時に、周辺化尤度を計算することでモデル選択を行い、最適なモデルを選ぶことで目的の構造に対する最適な PDE の推定を行う。統計モデルとして、4.3 節で議論した特徴量を用いて

$$\Psi_l^* := \Psi_l(\psi^*) = \Psi_l(\psi_s; \psi_0, \mu) + \xi_l \quad (16)$$

を考える。ここで、 ψ_0 は初期値、 ξ_l は平均 0、分散 β^{-1} のノイズである^{*8}。従って、尤度として

$$p(\Psi_l^* | \psi_0, \mu, \beta) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \exp \left[-\frac{\beta}{2} (\Psi_l^* - \Psi_l(\psi; \psi_0, \mu))^2 \right] \quad (17)$$

を考える。各モデル m の事後分布は

$$p(\mu | \Psi^*, \psi_0, \mu, \beta, m) \propto \exp \left[-\frac{\beta}{2} E \right] p(\mu | m) \quad (18)$$

となる。パラメーターの事前分布 $p(\mu | m)$ としては一様分布を考える。

サンプリングは、マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いて行う。特に、レプリカ交換モンテカルロ法 (REMC) を用いることで、パラメーター空間で準安定な構造から抜け出して大域的にサンプリングできるようにしている。REMC では、異なる値の β で独立にモンテカルロサンプリングを行い、一定の間隔で隣接する大きさの β のパラメーター集合二つを入れ替える。そうすることによって、ノイズが小さく (β が大きく) て準安定な状態にトラップされた場合でも、ノイズが大きい (β が小さい) 状態に遷移することによって準安定な状態から抜け出してパラメーター空間の他の領域を探索することができる [22]。準結晶の場合には、長さスケールの比 q_2/q_1 を適切な無理数比に近い値にしないといけない一方で、hexagonal 状態が共存状態として広いパラメーターで存在するために REMC を用いて効率的なサンプリングを行う必要があった。

具体的なサンプリングは以下のように行う。まず、各モデルのパラメーターに対して範囲を設定し、その中で一様分布を用いて初期化する。 $\psi(\mathbf{x})$ を $\bar{\psi}$ の周りに正規分布に従うノイズを加えたものを初期値として、サンプリングするパラメーターで PDE を数値的に解いて定常解 ψ_s を求める。目的となるパターンの特徴量と比較して損失関数

^{*8} β は逆温度などとも呼ばれる。

$E[\Psi^*, \Psi(\psi_s)] = |\Psi^* - \Psi(\psi_s)|^2$ を評価し、そこからメトロポリスアルゴリズムでパラメーターを更新する。これを log スケールで分割した β の各値に対して行い、一定のステップごとにレプリカ交換を行うことでサンプリングを行った。1000 モンテカルロステップ行った後に、パラメーターを損失関数が最も低いもので初期化し、さらに 1000-2000 ステップ計算を進めた後に事後分布が定常状態に達していることを確認してサンプリングを行った。

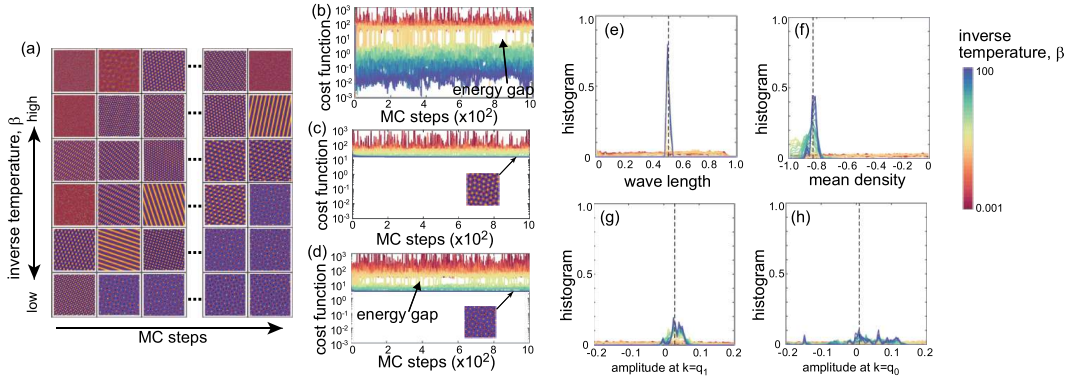


図 6 (a) $m = 2$ の場合の β ごとのサンプリング結果。(b-d) サンプリング中での損失関数と対応するパターン ((b) $m = 1$, (c) $m = 2$, (d) $m = 3$)。 (e-h) $m = 2$ の場合のパラメーターの事後分布、(e) 二番目の長さスケールに対応する波数 q_1 、(f) 平均密度 $\bar{\psi}$ 、(g) 線形化方程式の二番目の長さスケールでの固有値、(h) 線形化方程式の一番目の長さスケールでの固有値。

5 推定結果

5.1 例 1：十二回回転対称性を持つ二次元準結晶の数値計算結果のデータ

これまで議論してきた手法を用いて実際に PDE の推定を行った結果を見ていく。まず、図 2 で示しているように、(2) で (3) の代わりに (5) に対するエネルギー汎関数を用いたモデル^{*9}を適当なパラメーター、 $a_0 = 0.00794$, $a_1 = 0.0306$, $\bar{\psi} = -0.826$, $q_0 = 1$, $q_1 = 1/(2 \cos(\pi/12)) \approx 0.517$ を用いて得られた定常解を目的のパターンとする。この時、長さスケールは二つなので正解のモデルは $m^* = 2$ である。

長さスケールが二つ $m = 2$ のモデルで事後分布からサンプリングを行っていくと、サンプリングの初期では準結晶構造は見られないが、サンプルを続けていくと β が大きい場

^{*9} パラメーターは (11) を参照。

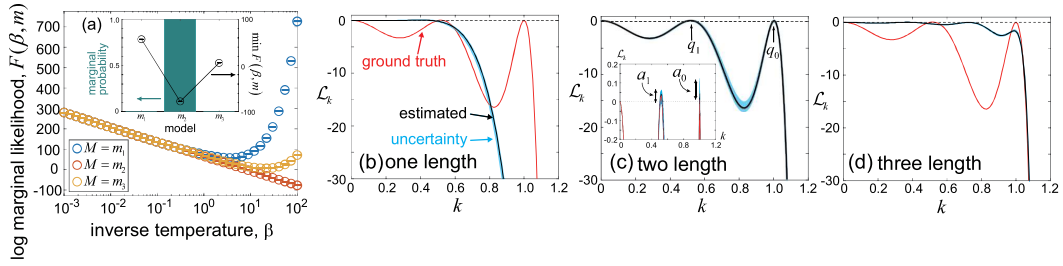


図7 (a) モデルごとの周辺化尤度の β 依存性。(b-d) モデルごとに推定したパラメーターから線形化スペクトルを計算し、正解と比較したもの。パラメーターの事後分布から計算した分布の標準偏差で不確かさを示している。

合に準結晶構造が見られるようになる (図 6(a))。 β が小さい場合には、パラメーター空間をランダムに動くので適切な無理数比に q_1/q_0 になることはほぼなく、ほとんどのサンプルが準結晶ではない構造になっている (図 6)。今の例では、モデルの中のパラメーターに正解が存在するので、損失関数は $E \approx 10^{-3}$ 程度の小さい値になる。特筆すべきは、損失関数が大きい領域と小さい領域の間にギャップが存在することである (図 6(b))。損失関数が小さい領域は正解に近い準結晶構造になっているが、大きい領域は hexagonal 構造になっている。このように準安定な構造が存在するために通常のモンテカルロ法ではそこにトラップされてサンプリングが困難になるが、REMC を用いるとうまくサンプリングを行い準結晶構造を見つけることができる。二つ目の長さスケールに対応する波数 q_1 を見てみると、事後分布のピークは $q_1 \approx 0.518$ あたりにあり、十二回回転対称性を持つ準結晶を作るために適切な長さスケールを見つけていることが分かる。この事後分布は非常にシャープなピークを持っており、少しでも q_1 がずれると準結晶構造が得られなくなってしまうことも分かる (図 6(e))。他のパラメーター、例えば $\bar{\psi}$ も正解の周りに分布している。こちらは、 q_1 ほど特定の値を取らないといけなくはなく、ある範囲にあれば準結晶構造を作ることができるので事後分布が広がっていることもモデルの性質と整合している。

次に、長さスケールが一つ $m = 1$ の場合のサンプリング結果を見てみよう。この場合には、そもそもモデルの中で準結晶構造を得ることは不可能なので、損失関数は大きな値のみで分布を持っている。長さスケールが三つある場合 $m = 3$ では、長さスケールをうまく選べば準結晶を作ることができる。そのため、損失関数の分布を見ると準結晶構造に対応する小さい領域と、hexagonal 構造に対応する大きい領域が出てくる。しかし、正解は $m^* = 2$ で作っているので、 $m = 2$ の時ほどは損失関数は小さくならない。

周辺化尤度の β 依存性をモデルごとに計算したものが図 7(a) である。今の場合正解が

あるので、 $\beta \rightarrow \infty$ で周辺化尤度は最も小さくなる。数値計算上は $\beta \in [10^{-3}, 10^2]$ で行っており、 $\beta = 100$ の上限で周辺化尤度が最小になっているのが分かる。一方、 $m = 1$ の場合は準結晶構造が作れないため β が大きいときにも周辺化尤度が下がらずに最小値をとっている。また、 $m = 3$ の場合は、準結晶構造は再現できるが正解の構造とは少し異なるので $m = 1$ の時よりも大きな β で最小値をとりそれよりも小さくはならない。従って、モデル選択としては $m = 2$ が選ばれ、無事正解のモデルを推定することができる。

5.2 例2：人工的に作った十二回回転対称性を持つ二次元準結晶のデータ

次に、4.2 で議論した人工的に作った準結晶のパターンを目的として推定を行った結果を議論する。この目的パターンは PDE の定常解ではない。従ってこの場合には正解は存在しない。それでも人工的に作ったパターンに近いものを再現できる PDE を推定しようということである。実際に使用した目的パターンを図 8(a) に示す。

サンプリング結果は 5.1 節と類似しており、 $m = 1$ の場合は準結晶構造は作れないので損失関数は高い領域で分布し、 $m = 2, m = 3$ の場合には、準結晶構造に対応する損失関数が $E \approx 1$ 程度の分布が出てくる（図 8(c-e)）。5.1 節と異なるのは、正解がないために損失関数が非常に小さくなるようなサンプリングが得られないということである。周辺化尤度を計算すると、この場合は、すべてのモデルで β に対する最小値が存在する図 8(f)。これは、まさに正解がないために有限の大きさのノイズがデータに入っていることを意味している。 $m = 2$ と $m = 3$ の場合は、 $\beta \approx 10$ 程度の所がノイズの大きさの推定値になっている。 $m = 2$ と $m = 3$ を比較すると、モデル選択としては $m = 2$ の方がやや尤もらしいという結果になる。これは、 $m = 3$ の場合にはパラメーターの数が多くなるためモデルとして冗長になり周辺化尤度が大きくなってしまうためであると考えられる。

6 まとめと今後

本研究では、目的となる構造・パターンが与えられたときにそのパターンを再現する PDE を推定する手法をベイズ推定の枠組みで議論した。二次元の準結晶構造を例にした結果を示し、数値計算で得られた目的パターンだけではなく、人工的に作ったパターンを目的としても推定することができることを示した。本手法の詳細や他の目的パターンについての結果は [13] を参照していただきたい。現状では、二次元のストライプパターン、hexagonal パターン、十二回回転対称性を持つ準結晶、そして、三次元の double gyroid パターン、Frank-Kasper パターンで推定が成功している。また、目的となるパターンに

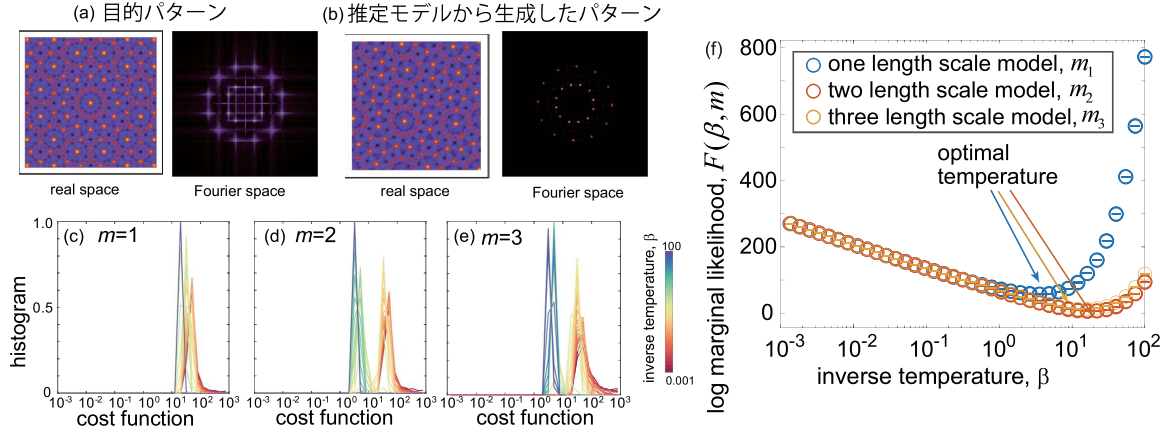


図8 人工的に作った目的パターン (a) を用いて推定を行った結果。長さスケールの異なるモデル (c) $m=1$, (d) $m=2$, (e) $m=3$ でサンプリングを行った時の損失関数の分布を示す。(b) 推定したモデル $m=2$ とパラメータを用いて数値的に定常解を求めて得られたパターン。(f) 周辺化尤度の β 依存性。

ノイズを加えた場合や欠損値がある場合でも、ノイズの強度が大き過ぎなければ推定はうまくいく。このような結果がどれくらい非自明かというのは意見が分かれる所であろう。我々の印象では、二次元のストライプパターン、hexagonal パターン、十二回回転対称性を持つ準結晶は、今回用いたモデル族を用いれば再現することは過去の研究で分かっていたことではあるのでそこまで驚くべき結果であるとは言えない。三次元の double gyroid 構造も、今回用いたモデルで作れることは分かっていたが、過去の研究では類似しているがやや異なるモデルが中心ではあったのと、三次元のここまで複雑な構造が推定できるというのは少し驚きであった。一方、Frank-Kasper 構造については、少なくとも研究を始めた時には PDE で再現できることは知られていなかったのが驚くべき結果なのではないかと考えている。また、4.2 でも議論したが、必ずしも PDE の解ではない人工的に作った目的パターンを用いても推定が可能であるということは強調しておきたい。これは、応用や實際上重要というだけでなく、多くの機械学習を用いたモデル推定の研究が、既知の PDE の数値計算結果やそれにノイズを加えたものを対象にしているのとは対照的である。このような正解が存在しないような状況でも推定が機能するような手法が今後重要になってくるのではないかと考えている。

本研究の手法はある程度モジュール化されているので、それぞれのモジュールを拡張すればより広い対象を扱えるのではないかと考えている。例えば、異なる数の長さスケールを持つモデルを考えたが、他のモデル族を考えることも可能である。例えば、(11) を Hermite 多項式の係数でパラメトライズして推定を行うことにも成功している [13]。

また、準結晶を作るには、複数の長さスケールを持つモデルだけではなくて、複数の場 $\psi_1(\mathbf{x}, t)$ と $\psi_2(\mathbf{x}, t)$ の非線形相互作用を含むモデルを使うということも可能である [23]。この場合、候補となる非線形項を用意してその係数を推定することになる。パラメーターの事前分布を一様分布から指数分布にすることで、スパース性を入れて少数の項のみが有限の係数を持つように推定することができる。

また、本研究では周期的なパターンに注目したので 4.3 節で議論した特徴量を用いて、目的パターンとサンプリング点におけるパターンとの距離を評価した。この部分は目的となるパターンの特徴によって他の特徴量を使うことも考えられる。例えば、不規則構造の場合には今回のような特徴量ではなく別の量を考える必要がある。一方、図 1(A,B) のように粒界を含むようなパターンの場合には、大域的には等方的な構造になっているため、パターン全体をフーリエ変換しても明確なスポットは現れず、本研究のような特徴量は機能しない。しかし、適当な大きさの領域を指示関数で局所的に取り出しフーリエ変換したもから 4.3 節の特徴量を計算して、異なる空間位置での平均値を目的パターンの特徴量とすれば本研究の手法で推定することは可能である [13]。実際上は、目的となるパターンに応じてこのような工夫が必要になると考えられる。

本研究の手法の大きな欠点はやはり計算コストであろう。何度も PDE を数値的に解く必要があるため、特に三次元の場合には計算コストが高い。それでも今回紹介したような構造ではなんとかうまくいったというのが現状である。一方、REMC は非常に強力で、計算コストの高い PDE の数値計算を単純に β ごとに並列化すればよいだけなので、現代のマルチコア CPU を用いれば用意に 40 点程度の β のメッシュ点を用意することが可能である。そうは言ってもやはり何らかの近似手法を考える必要はあるだろう。

背景でも述べたように、パターン形成の研究では実験的に得られたパターンを簡単な数理モデルで再現することで、そのパターンの形成メカニズムやダイナミックスを理解する助けになっていた。単純なパターンの場合は、基礎的なモデルやどのようにパラメーターを選べばよいのかの知見は十分あるが、複雑なパターン、特に三次元のパターンの場合にはまだ十分であるとは言えない。本研究のような手法がもっと発展すれば、実験的に測定が困難な部分、例えばパターン形成のダイナミックスを推定した数理モデルで予測するなど、様々な応用にも役立つのではないかと期待している。

謝辞

本研究は、九州大学の徳田悟先生と共同で行いました。また本研究に関わる計算の一部は、産業技術総合研究所 ABCI 及び北海道大学情報基盤センターのスーパーコンピュー

タを用いて得られたものです。

参考文献

- [1] M.C. Cross and P.C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 65(3):851–1112, 1993.
- [2] J. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15(1):319–328, 1977.
- [3] Frank S. Bates and Glenn H. Fredrickson. Block copolymer thermodynamics: Theory and experiment. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 41:525–557, 1990.
- [4] Maik Rudolf Johann Scherer. *Gyroid and Gyroid-Like Surfaces*, pages 7–19. Springer International Publishing, Heidelberg, 2013.
- [5] T. Ohta and K. Kawasaki. Equilibrium morphology of block copolymer melts. *Macromolecules*, 19(10):2621–2632, 1986.
- [6] Ron Lifshitz and Dean M. Petrich. Theoretical model for faraday waves with multiple-frequency forcing. *Phys. Rev. Lett.*, 79:1261–1264, Aug 1997.
- [7] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1951–1953, Nov 1984.
- [8] Sangwoo Lee, Chris Leighton, and Frank S. Bates. Sphericity and symmetry breaking in the formation of frank–kasper phases from one component materials. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 111(50):17723–17731, 2014.
- [9] Morgan W. Bates, Joshua Lequieu, Stephanie M. Barbon, Ronald M. Lewis, Kris T. Delaney, Athina Anastasaki, Craig J. Hawker, Glenn H. Fredrickson, and Christopher M. Bates. Stability of the a15 phase in diblock copolymer melts. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 116(27):13194–13199, 2019.
- [10] Tsutomu Ishimasa. Dodecagonal quasicrystals still in progress. *Israel Journal of Chemistry*, 51(11-12):1216–1225, 2011.
- [11] Pablo F Damasceno, Sharon C Glotzer, and Michael Engel. Non-close-packed three-dimensional quasicrystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(23):234005, 2017.
- [12] P. Subramanian, A. J. Archer, E. Knobloch, and A. M. Rucklidge. Three-dimensional icosahedral phase field quasicrystal. *Phys. Rev. Lett.*, 117:075501,

Aug 2016.

- [13] Natsuhiko Yoshinaga and Satoru Tokuda. Bayesian modeling of pattern formation from one snapshot of pattern. *Phys. Rev. E*, 106:065301, 2022.
- [14] Henning U. Voss, Jens Timmer, and Jürgen Kurths. Nonlinear dynamical system identification from uncertain and indirect measurements. *Int. J. Bifurcat. Chaos*, 14(06):1905–1933, 2004.
- [15] S. A. Billings. *Nonlinear system identification : NARMAX methods in the time, frequency, and spatio-temporal domains*. Wiley, 2013.
- [16] Geir Evensen. *Data assimilation: the ensemble Kalman filter*. Springer, 2009.
- [17] Kody Law, Andrew Stuart, and Kostas Zygalakis. *Data assimilation*. Springer, 2015.
- [18] Michael Schmidt and Hod Lipson. Distilling free-form natural laws from experimental data. *Science*, 324(5923):81–85, 2009.
- [19] Steven L. Brunton, Joshua L. Proctor, and J. Nathan Kutz. Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 113(15):3932–3937, 2016.
- [20] Samuel H Rudy, Steven L Brunton, Joshua L Proctor, and J Nathan Kutz. Data-driven discovery of partial differential equations. *Sci. Adv.*, 3(4):e1602614, 2017.
- [21] Kohtaro Yamada, Makiko Nonomura, and Takao Ohta. Kinetics of morphological transitions in microphase-separated diblock copolymers. *Macromolecules*, 37(15):5762–5777, 2004.
- [22] Koji Hukushima and Koji Nemoto. Exchange monte carlo method and application to spin glass simulations. *J. Phys. Soc. Japan*, 65(6):1604–1608, 1996.
- [23] ND Mermin and Sandra M Troian. Mean-field theory of quasicrystalline order. *Phys. Rev. Lett.*, 54(14):1524, 1985.