

# 機械学習に基づく流体変数の未来予測と数学的背景

齊木 吉隆（一橋大学 大学院経営管理研究科）

## 概要

近年、機械学習の一種で、リカーレントネットワークをもったリザーバーコンピューティングが決定論的構造を背後にもつ時系列やそのリヤブノフ指数などの予測に有効であることが報告されている。我々はこの機械学習手法を用いて比較的平穏な流体のエネルギー変数のモデルを構成し、予想を成功させている (Nakai and Saiki, Physical Review E, 2018)。この学習では入力データから中間層のベクトルを得るために用いるニューラルネットワーク構造を学習しないため、フィッティングにかかる計算コストが抑えられている。間欠的なふるまいを示すより発達した流体運動に対してモデルを構成をするためには、更に計算コストを落とす工夫が必要であるため、入力、出力変数としてあるひとつの変数の時間遅れ座標を用いるアイディアを深化させた。そして、計算量を抑えながらモデルの精度を上げるための処方箋として時間相関関数の減衰オーダーが活用出来ることを明らかにした。これは観測可能な時系列の次元がその背後に存する力学系の次元よりも少ない場合にも用いることが出来るため、実用上強力な知見となる。

## 1 共同研究に関する情報

### 1.1 共同研究を実施した拠点名

京都大学、東京大学

### 1.2 共同研究分野

■超大規模数値計算系応用分野

■超大規模データ処理系応用分野

### 1.3 参加研究者の役割分担

本共同研究は 4 人体制でおこなわれた。

- 研究代表者 齊木吉隆（一橋大学 経営管理研究科）：背後にある数学的構造の解明、リザーバーコンピューティングによる数理モデル構築
- 副代表者 小林幹（立正大学 経済学部）：背後にある数学的構造の解明
- その他の共同研究者 中井拳吾（東京大学 数理科学研究科（現 東京海洋大学 学術研

究院）：トレーニングデータの作成、リザーバーコンピューティングによる数理モデル構築

- その他の共同研究者 武藤誠（一橋大学 経営管理研究科）：トレーニングデータの作成

## 2 研究の目的と意義

流体や気象などの複雑現象のミクロダイナミクスは力学系（微分方程式）で記述される。しかし、そのマクロダイナミクスを描写する方程式を解析的に導出することは困難である。その困難さは非線形、高次元、非局所結合、時空における多重スケール構造の存在などに由来する。本研究ではリザーバーコンピューティングとよばれる機械学習手法を用いて流体のマクロダイナミクスを描写する方程式を導出した。

力学系は大きく双曲力学系と非双曲力学系に分類される。Palis 予想やそれに関連した近年の力学系研究によれば、二つの性質: (i) 安定多様体と不安定多様体が接する構造 (Tangency) (ii) 不安定次元が異なる周期軌道の安定/不安定多様体の交差 (ヘテロ次元サイクル) が非双曲力学系にあらわれる典型的な構造であると考えられている。特にヘテロ次元サイクルの構造が顕著にあらわれると思われる乱れた流体運動などに対しても従来の機械学習手法がそのまま適用できるかどうか未知数である。本研究は問題点を解決することによって、その適用に取り組んだ。

力学系研究と絡めて機械学習、特にリザーバーコンピューティングを用いる研究はこの数年で爆発的に増えることが見込まれるが、現時点では Brian Hunt 教授 (メリーランド大学) による 2017,2018 年のローレンツ方程式や Kuramoto-Sivashinsky 方程式といった“おもちゃ”モデルを用いた研究の他、実際の物理現象を取り扱ったものは研究代表者と共同研究者の中井拳吾 (東京大学 数理科学研究科 (現 東京海洋大学 学術研究院)) による「リザーバーコンピューティングを用いた流体運動のモデリングと予測」(Nakai and Saiki, 2018) がある。より乱れたヘテロ次元サイクル構造が顕著にあらわれる流体を取り扱う当該研究は、世界をリードする研究となることは間違いない。

### 3 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究課題では流体の時系列データの機械学習によるモデリングを行った。流体という高次元の力学系の時系列データを学習するために、大量の時系列データを大規模な計算資源を使うことが必要不可欠である。

このためには、JHPCN の枠組みを最大限に

活用し、長時間の連続計算が可能な京都大学の system A での流体の計算による学習データの生成と、非常に高い並列計算を得意とする東京大学の Oakforest-PACS を使い分けて計算することによって研究目標の達成が実現できた。また、並列化計算の実績や指導経験豊富な情報基盤センターと連携することでより効率よく研究を進めることができた。

### 4 前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため該当しない。

### 5 今年度の研究成果の詳細

研究代表者が中井拳吾と実施している研究では流体は“比較的静穏な状態 (ラミナー)”と“暴れた状態 (バースト)”を時間・空間間欠的に繰り返す。その状態間遷移がヘテロ次元サイクル構造の存在に由来すると考えられる。実際そこで得られた知見を利用して、状態間遷移を予測することに成功した。その一部の結果は論文 (学術論文 [1]) として発表した。また、数学的背景に関する研究については論文 (その他 [1]) としてまとめて査読付き国際誌に投稿した。主にスーパーコンピュータを活用した結果である学術論文 [1] の詳細を以下に述べる。

**リザーバーコンピューティング、力学系**

$$\frac{d\phi}{dt} = \mathbf{f}(\phi)$$

に関し、その変数  $\mathbf{u} = \mathbf{h}_1(\phi) \in \mathbb{R}^M$  と  $\mathbf{s} = \mathbf{h}_2(\phi) \in \mathbb{R}^P$  について考える。ただし、時系列データ  $\mathbf{u}$  は  $\mathbf{s}$  の時系列を予測する時刻にデータはないとする。リザーバーベクトル  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^N$  ( $N \gg M$ ) は次の式で支配されている。

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = (1 - \alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\mathbf{u}(t)), \quad (1)$$

ただし、 $\Delta t$  は時間幅を表す。また、行列  $\mathbf{A}$ ,

$\mathbf{W}_{\text{in}}$  は  $N \times N$ ,  $N \times M$  行列である。パラメータ  $\alpha$  ( $0 < \alpha \leq 1$ ) は  $\mathbf{r}$  の力学系の非線形性を表し、式 (1) の  $\Delta t$  に依存して決める。リザーバーベクトルは  $(0, 1]$  の一様乱数から定めた  $\mathbf{r}(-\tau)$  を初期値とする。ただし、 $\tau/\Delta t (\gg 1)$  はトランジエント時間に相当する。

行列  $\mathbf{W}_{\text{in}}$  の各列はただ一つのみに  $[-\sigma, \sigma]$  の一様乱数から値を与える、それ以外は 0 とする。行列  $\mathbf{A}$  は  $D \times N$  個の非零成分を持つ疎行列とする。 $D \times N$  個の非零成分は  $[-1, 1]$  の一様乱数から値を与える。さらに、行列  $\mathbf{A}$  については最大固有値が  $\rho$  になるように行列のすべての要素を調整する。

リザーバーベクトル  $\mathbf{r}$  は次のようにして得たいベクトルに変換する。

$$\hat{\mathbf{s}}(t) = \mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{r}(t) + \mathbf{c}.$$

これにより  $L = T/\Delta t$  ステップのリザーバーベクトル  $\{\mathbf{r}(l\Delta t)\}_{l=1}^L$  を得る。

$0 < t \leq T$  (学習時間と呼ぶ) での時系列  $\hat{\mathbf{s}}$  が既知の時系列  $\mathbf{s}$  の近似になるように  $\mathbf{W}_{\text{out}}$  と  $\mathbf{c}$  を決定する。この決定がリザーバーコンピューティングの学習に相当する。これは次の二次形式が最小化するように  $\mathbf{W}_{\text{out}}$  と  $\mathbf{c}$  を決定することに対応する。

$$\sum_{l=1}^L \|(\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{r}(l\Delta t) + \mathbf{c}) - \mathbf{s}(l\Delta t)\|^2 + \beta[Tr(\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{W}_{\text{out}}^T)], \quad (2)$$

ただし  $\mathbf{q}$  に対して  $\|\mathbf{q}\|^2 = \mathbf{q}^T \mathbf{q}$  とし、 $\beta (\geq 0)$  を含む項は  $\mathbf{W}_{\text{out}}$  の過剰適合を避けるために導入している。この決定が妥当であれば、 $t > T$  (予測時間と呼ぶ) での  $\hat{\mathbf{s}}(t)$  は  $\mathbf{s}(t)$  を再現できるはずである。二次形式 (2) を最小化する解を  $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$  と  $c^*$  とすると予測時間では

$$\hat{\mathbf{s}}(t) = \mathbf{W}_{\text{out}}^*\mathbf{r}(t) + c^*, \quad (3)$$

として時系列  $\hat{\mathbf{s}}$  を得る。 $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$  と  $c^*$  は次のように書くことができることが知られている:

$$\mathbf{W}_{\text{out}}^* = \delta \mathbf{S} \delta \mathbf{R}^T (\delta \mathbf{R} \delta \mathbf{R}^T + \beta \mathbf{I})^{-1}, \quad (4)$$

$$c^* = -[\mathbf{W}_{\text{out}}^* \bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{s}}], \quad (5)$$

ただし、 $\bar{\mathbf{r}} = \sum_{l=1}^L \mathbf{r}(l\Delta t)/L$ ,  $\bar{\mathbf{s}} = \sum_{l=1}^L \mathbf{s}(l\Delta t)/L$  とし、 $\mathbf{I}$  は  $N \times N$  の単位行列、 $\delta \mathbf{R}$  (resp.  $\delta \mathbf{S}$ ) は  $l$  行が  $\mathbf{r}(l\Delta t) - \bar{\mathbf{r}}$  (resp.  $\mathbf{s}(l\Delta t) - \bar{\mathbf{s}}$ ) となるような行列とする。

ただし、予測時間  $t > T$  での時系列データ  $\mathbf{u}$  は利用できないため、 $\mathbf{u}(t)$  として式 (1) で得た  $\hat{\mathbf{s}}(t) = \hat{E}(\cdot, t)$  を用いる:

$$\mathbf{r}(t+\Delta t) = (1-\alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\hat{\mathbf{s}}(t)).$$

学習に用いる変数  $X(t)$  を対等に扱うために正規化した  $\tilde{X}(t)$  を使うこととする:

$$\tilde{X}(t) = [X(t) - X_1]/X_2.$$

ただし、 $X_1$  は平均値、 $X_2$  は標準偏差を表す。予測時間の時系列データ  $X(t)$  を  $\tilde{X}(t)$  から再現するときは、学習時間の正規化に用いた  $X_1$  と  $X_2$  を用いる。この正規化より  $\sigma$  の調整を避けることができる。

**学習時系列流体データの生成。** 周期境界条件の下で 3 次元非圧縮 Navier–Stokes 方程式の直接数値計算によって得られた時系列データをリザーバーコンピューティングの学習データとして用いる:

$$\begin{cases} \partial_t v - \nu \Delta v + (v \cdot \nabla) v + \nabla \pi = f, & \nabla \cdot v = 0, \\ v|_{t=0} = v_0 \quad \text{with } \nabla \cdot v_0 = 0, \end{cases}$$

ただし、 $\mathbb{T} = [0, 2\pi]$ ,  $\nu > 0$  は動粘性、 $\pi(x, t)$  は圧力、 $v(x, t) = (v_1(x, t), v_2(x, t), v_3(x, t))$  は速度とする。フーリエスペクトル法を用いる。また、4 次のルンゲクッタ法により時間積分をする。また、低周波成分のエネルギーが一定に

なるように毎時刻外力を加える。さらに低周波成分にのみエネルギーを持つように初期値を定める。

**レイノルズ数**  $R_\lambda$ . ここでは、流れの複雑さを表すテーラーマイクロスケールレイノルズ数に注目する。まず、エネルギー  $E(t)$  を以下で定義する、

$$E(t) = \sum_{\kappa \in D} \sum_{\zeta=1}^3 (\mathcal{F}_{[v_\zeta]}(\kappa, t))^2.$$

ただし、

$$\mathcal{F}_{[v_\zeta]}(\kappa, t) := \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{T}^3} v_\zeta(x, t) e^{-i(\kappa \cdot x)} dx \quad (\zeta = 1, 2, 3),$$

$$D = \{(\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) \in \mathbb{Z}^3 \mid \kappa_1, \kappa_2, \kappa_3 \in [-\kappa_0, \kappa_0], \kappa_0 > 0\}$$

とする。テーラーマイクロスケールレイノルズ数  $\check{R}_\lambda(t)$  を次で定義する：

$$\check{R}_\lambda(t) := \frac{\sqrt{(2/3)E(t)}\lambda}{\nu} = \sqrt{\frac{20E(t)^2}{3\nu\epsilon(t)}},$$

ただし、 $\epsilon$  は次で定義されるもので、単位体積あたりの時間平均エネルギー損失量を表す。

$$\epsilon(t) = 2\nu \sum_{\kappa \in D} \sum_{\zeta=1}^3 |\kappa|^2 (\mathcal{F}_{[v_\zeta]}(\kappa, t))^2.$$

**マクロ変数のモデルの構成。** リザーバーコンピューティングによりレイノルズ数  $R_\lambda$  のモデルを構成する。 $M$  次元の  $\Delta\tau$  時間遅れ座標系を入力変数  $\mathbf{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_M(t))^\top$ 、出力変数  $\mathbf{s}(t) = (s_1(t), s_2(t), \dots, s_M(t))^\top$  として導入する：

$$\mathbf{u}(t) = (\tilde{R}_\lambda(t), \tilde{R}_\lambda(t - \Delta\tau), \dots, \tilde{R}_\lambda(t - (M-1)\Delta\tau))^\top,$$

$$\mathbf{s}(t) = (\tilde{R}_\lambda(t), \tilde{R}_\lambda(t - \Delta\tau), \dots, \tilde{R}_\lambda(t - (M-1)\Delta\tau))^\top.$$

**モデルの構成。** 適当なパラメータにより定めたランダムな行列  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{W}_{\text{in}}$  に対して行列  $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  を定める。これらの行列を用いて予想した

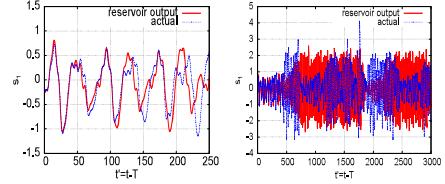


図 1 テーラーマイクロスケールレイノルズ数  $\check{R}_\lambda$  の時間発展予測がしばらく成功していることを示す図

時系列がある許容範囲に入っていた場合、それらの行列によって構成されたものをモデルとして用いる。ただし、予想時間において  $t$  が  $t - (M-1)\Delta\tau < T$  を満たすとき、入力変数として既知のデータを使うことができるが、ここでは使わないことにする。これ以降、あるひとつの行列の組  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{W}_{\text{in}}$ ,  $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  からなるモデルを考える。

**モデルの妥当性。** 構成したモデルについて、いくつかの観点から評価する。

(i) 時系列短時間予測。学習時間直後におけるレイノルズ数  $s_1 = \tilde{R}_\lambda$  の時系列データの予想がうまく行っていることを確認した。図 1 の左図に、予測した変数  $\hat{s}_1 = \hat{\tilde{R}}_\lambda(t)$  ( $t > T$ ) の時系列データを Navier-Stokes 方程式の直接数値計算から得られた‘正解’の時系列  $s_1 = \tilde{R}_\lambda(t)$  とあわせて書きだした。更に、図 1 の右図に、 $\hat{\tilde{R}}_\lambda(t)$  の振る舞いを長時間書きだした。実際の直接数値計算結果に現れるような、速度場が穏やかな流れ(ラミナー)から複雑な流れ(バースト)に時間間欠的に移り変わる様子も確認できた。

(ii) 時間遅れ成分の再現。時間遅れ座標系の各成分について学習時間では任意の  $m$  ( $m = 2, \dots, M$ ) に対して  $s_1(t) = s_m(t + (m-1)\Delta\tau)$  という関係が成立している。予想時間でも対応

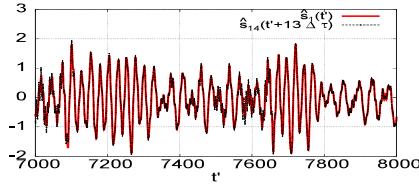


図 2 リザーバーモデルから得られた  $\hat{s}_1(t')$  ならびに  $\hat{s}_{14}(t' + 13\Delta\tau)$  が理論通りにはほぼ一致することを確認する図 ( $7000 \leq t' \leq 8000$ )

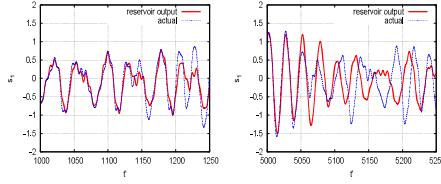


図 3 単一のリザーバーモデルで初期値を変えた場合に時間発展予測力の確認  $T_{\text{out}} < t' < T_{\text{out}} + 250$  ( $T_{\text{out}} = 1000, 5000$ )

する関係が成り立つべきである。そこで、図 2 に  $\hat{s}_1(t)$  と  $\hat{s}_{14}(t+13\Delta\tau)$  を書きだした。この図より  $\hat{s}_1(t) \approx \hat{s}_{14}(t + 13\Delta\tau)$  となっていることが見て取れる。また、別の時刻  $t$  やその他の  $m$  についても同様に  $\hat{s}_1(t) \approx \hat{s}_m(t + (m-1)\Delta\tau)$  の関係を満たしていることを確認した。これらの結果から、我々の構成したリザーバーモデルは時系列データのみから時間遅れ関係の学習に成功したことがわかる。

(iii) 異なる時間に対する予測。ある学習時間から得られたリザーバーモデルを使って一定時間の時系列データの振る舞いを予想できることを確認した。ここではそのモデルが異なる時間の時系列データも予想できることを確認する。図 3 では、いくつかの時間から予測をスタートさせた時の予想した時系列と比較のため‘正解’の時系列とともに書きだした。ある程度は予測

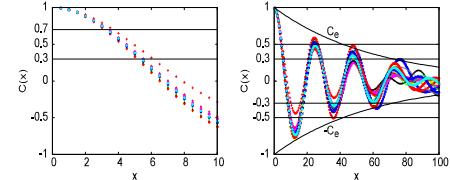


図 4  $\{R_\lambda(t)\}$  の自己相関関数  $C(x)$

が成功していることが見て取れる。ただし、この予想には図 1 で用いたものと同じリザーバーモデルを用いている。これらの結果から構成したモデルはレイノルズ数の挙動をうまく表現できていることがわかる。

**時間遅れ座標と遅れ時間の決め方。** リザーバーモデルを構成する際に入力変数  $\mathbf{u}$ 、出力変数  $\mathbf{s}$  として遅れ時間  $\Delta\tau$  で  $M$  次元の遅れ時間座標系を用いている。この章では、遅れ時間  $\Delta\tau$  と次元  $M$  の決め方について述べる。

**相関係数。** レイノルズ数  $\{R_\lambda(t)\}$  の自己相関関数  $C(x)$  を次のように定義する;

$$C(x) = \frac{\frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} (R_\lambda(A_j) - \bar{R}_\lambda)(R_\lambda(B_j) - \bar{R}_\lambda)}{\sqrt{\frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} (R_\lambda(A_j) - \bar{R}_\lambda)^2} \sqrt{\frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} (R_\lambda(B_j) - \bar{R}_\lambda)^2}},$$

ただし、 $\bar{R}_\lambda$  は  $R_\lambda(t)$  の時間平均値、 $(A_j, B_j) = (t_0 + j\Delta t^*, t_0 + j\Delta t^* + x)$  として、 $\Delta t^*$  を軌道の時間ステップとする。また、時刻  $t_0$  を軌道の初期時刻とする。図 4 に、自己相関関数  $C(x)$  を書きだした。図 4 (左図) より、 $C(x) = 0.7$  から 0.3 の値をとるのは、 $x \approx 3.0$  から 5.0 の時である。

$\Delta\tau < 3.0$ 、ならば、 $R_\lambda(t)$  と  $R_\lambda(t - \Delta\tau)$  が似た動きをすることになり、一方で、 $\Delta\tau > 5.0$  ならば、両者の相関が小さくなる。このことから、遅れ時間  $\Delta\tau$  は 3.0-5.0 から選ぶと良いと推測される。

実際、 $\Delta\tau = 3.0-5.0$  について、最適な遅れ時間  $\Delta\tau$  と遅れ次元  $M$  の組み合わせにつ

$\Delta\tau \setminus M$	12	13	14	15	16	17	18
3.0	0	0	0	1	19	24	<b>43</b>
3.5	0	11	20	28	<b>57</b>	48	21
4.0	18	43	<b>107</b>	59	21	14	2
4.5	43	<b>54</b>	21	15	8	1	1
5.0	<b>26</b>	19	9	1	1	1	0

表 1 用いる時間遅れ座標における遅れ時間  $\Delta\tau$  と次元  $M$  を決める毎に妥当なリザーバー モデルが得られる回数（各  $\Delta\tau$  每に最適な  $M$  を太文字で表し、その中で最適な組み合わせ  $(\Delta\tau, M)$  を下線付き太文字（赤）で表している。

いて調査した (Table 1). 各  $(\Delta\tau, M)$  について、各々 8160 個の行列  $\mathbf{A}$  と  $\mathbf{W}_{in}$  について学習を行い、予想した変数  $\hat{s}_1(t)$  と  $s_1(t)$  の時刻  $t \in [0, 60]$  ( $t \in [0, 90]$ ) の差の最大値が  $e_{60} = 0.14$  ( $e_{90} = 0.30$ ) 以下になるものの個数を数えた。

$\Delta\tau \approx 4.0$  かつ  $M\Delta\tau \approx 55-60$  となるよう  $(\Delta\tau, M)$  を定めると、予想のエラーがしきい値以下になる個数が最も多くなることが見て取れる。これらの値はそれぞれ、 $C(\Delta\tau) \approx 0.45-0.55$  と包絡線  $C_e(M\Delta\tau) \approx 0.35-0.40$  に相当する (図 4 (右図))。

**まとめ.** 流体のマクロ変数として一変数時系列データであるレイノルズ数の挙動を表現するリザーバーモデルを時間遅れ座標系を使うことで構成した。また、この時間遅れ座標系の遅れ時間  $\Delta\tau$  と遅れ次元  $M$  について、自己相関係数  $C(\Delta\tau)$  が 0.45-0.55 かつ、包絡線  $C_e(M\Delta\tau)$  が 0.35-0.40 を満たすように  $(\Delta\tau, M)$  を決めることがわかった。また、このようにして決めた遅れ時間座標系を元に学習したモデルは、時系列データの予想ができ、速度場が穏やかな流れから複雑な流れに時間間欠的に遷移する様子も再現することが確認できた。

## 6 今年度の進捗状況と今後の展望

実施計画において次の 2 つの項目

I. ヘテロ次元サイクルをもつ具体的な力学系の研究 (擬軌道追跡性、ネットワーク解析の観点)

(ア) ヘテロ次元サイクル構造をもつ写像を研究

(イ) (ア) で用いた写像で不安定次元の異なる不变集合 (周期点) の間の多様体の交差が生じやすい領域でのリザーバーコンピューティングに基づく予測

II. 機械学習 (リザーバーコンピューティング) の手法を用いた流体のマクロダイナミクスのモデリング

(ウ) 流体力学の乱流現象のリザーバーコンピューティングに基づくモデリングと予測

(エ) 入手可能な経済指標に基づくマクロ経済指標のリザーバーコンピューティングに基づく推定

を予定していた。項目 I (ア) については、学術雑誌に投稿して、プレプリント (項目 7 研究業績一覧 査読有り学術論文その他 [1]) として公開した。項目 I (イ) については、計算を実行して部分的な結果は得たものの、論文執筆までには追加的な計算が必要となる。また、本研究課題の主要項目である項目 II (ウ) については、上で詳しく述べたように、十分な結果が得られ、研究業績一覧 査読有り学術論文 [1] として結果が出版された。項目 II (エ) については、計算を試みたものの、経済指標から決定論的な構造を抜き出すことが困難であるため、更なる検討が必要となっている。したがって、主要項目を含めた二編の論文がまとまっており、概ね計画通り進めることができたと言える。また本研究で用いる時系列データの機械学習プログラムは自作の fortran プログラムを用いているが、講習会などを通して並列化効率を改善すること

により Weak scaling で並列化効率を 99.4% まで上げることができた。

本研究で確立した時間遅れ座標系を使ったリザーバーコンピューティングの学習方法は、見たい現象の背後に存する力学系の次元よりも観測可能な変数が少數にとどまる場合にも適切な時間遅れ座標を導入することで効率よく学習できることを示唆している。本研究の結果を活用して、高次元ダイナミクスに関する実データの学習を今後試みる。現実世界の現象の力学系構造は高次元であることも多くあるため、学習の計算コストは膨大になる。しかし、本研究で用いる機械学習のメインの計算である式(4)の部分について、GPU の利用により高速化できる可能性がある。ただし、本研究で用いる学習手法では数百万ステップ分のデータを逐次的に読み込み計算に利用しているため、式(4)の部分の並列化だけでは十分な高速化が実現出来ず、むしろ GPU-CPU 間のデータ転送時間がかかる分、総計算時間は増えると予想される。そこでデータの通信のスケジュールを工夫しつつ GPU の計算プログラムの実装を試みたい。

## 7 研究業績一覧（発表予定も含む）

### 学術論文（査読あり）

1. K. Nakai, Y. Saiki, ‘Machine-learning construction of a model for a macroscopic fluid variable using the delay-coordinate of a scalar observable’, *Discrete and Continuous Dynamical Systems S*, May, 2020, Online first. doi: 10.3934/dcdss.2020352

### 国際会議プロシーディングス（査読あり）

該当なし。

### 国際会議発表（査読なし）

1. K. Nakai, Y. Saiki, Machine-learning inference of variables of a chaotic fluid flow from data using reservoir computing, NOLTA 2019 (Malaysia), Dec. 2019.
2. K. Nakai, Machine-learning construction of a model for a macroscopic fluid variable by using reservoir computing, RIMS Seminar, Hokkaido Niseko, Sep. 2019.
3. K. Nakai, Machine-learning construction of a model for a macroscopic fluid variable, Recent topics on well-posedness and stability of incompressible fluid and related topics, Berkeley, California, (U.S.), July 2019.

### 国内会議発表（査読なし）

1. K. Nakai, 機械学習に基づいた流体変数のモデル構築, 現象と数理, Feb. 2020.
2. K. Nakai, 機械学習に基づいた流体変数のモデル構築, 若手による流体力学の基礎方程式の研究集会, Jan. 2020.
3. Y. Saiki, ヘテロカオスと間欠性, 現象と数理モデル 2019, Dec. 2019.
4. Y. Saiki, ヘテロカオス, Advancing Interaction among mathematical concepts and methods towards practical problems 2019, Dec. 2019.
5. Y. Saiki, 流体マクロ変数に関する数理モデルの機械学習に基づく構築, Prometech Simulation Conference (PSC2019), Dec. 2019.
6. K. Nakai, 機械学習を用いた流体マクロ変数のモデルの構成, 大阪大学 MMDS 主催「工学と数学の接点を求めて」, Nov. 2019.
7. K. Nakai, Y. Saiki, 時間遅れ座標系を用いた機械学習による流体マクロ変数のモ

リング, 日本流体力学会 年会 2019, 電気通信大学, Sep. 2019.

8. K. Nakai, リザーバーコンピューティングの学習方法と時間発展モデリング, 現象と数理, Sep. 2019.
9. K. Nakai, 流体マクロ変数のモデリング, 流体若手夏の学校 2019, Aug. 2019.
10. Y. Saiki, K. Nakai, 機械学習に基づいた流体マクロ変数に関する数理モデル構築ならびに時間発展予測, 理論応用力学講演会OS「流体力学の新手法と運動の深層: 計算科学・機械学習・力学系・トポロジー」, June 2019.
11. K. Nakai, Numerical study of Energy Functions for a 3D fluid flow, 京都大学NLPDE セミナー, June 2019.

その他 (特許, プレス発表, 著書等)

1. Y. Saiki, H. Takahasi and J. A. Yorke, ‘Heterogeneous chaos’, 投稿中.