

研究報告書

「包括的な数学的手法による気象予測プロセスの確立」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 平成26年11月～平成30年3月

研究者: 中野 直人

1. 研究のねらい

本研究のねらいは、データ解析(高次元系の理解)から数理モデリング(支配原理の抽出)を通じ、最終的にはデータ同化を用いた予測(効率的な未来予測)までの一連のプロセスを数学によってつなぐことで、気象現象のような複雑な現象に対しても応用が可能となるような長期予測の数理科学的手法による予測理論を確立することをめざすものである。

これまで、気象学の深化とスーパーコンピュータの大規模化とが相まって、大気大循環モデル(Global Circulation Model, GCM)による気象予測の精度は年々向上し続けており、実際に2, 3日先程度の天気予報には威力を発揮している。ところが、GCMは予報期間が1週間より先になるとGCMのもつカオス性のために決定論的予報は不安定性が卓越し、長期予報にはアンサンブル予報のような統計的な手段が用いられている。一方、現実大気に対する理解はデータ解析が重要な役割を果たしており、特に過去の大気再解析データから気候の主変動を取り出して統計的に大気長周期変動を理解しようとする方法(Kimoto and Ghil, JAS 1993)は、気候変動を情報量の欠損の少ない低次元相空間上の軌道として解釈するという意味で大なる可能性を秘めていた。過去の大気再解析データは55年超ほどの蓄積があり、これをデータ駆動型の数理研究によって有効に活用しようというのが本研究の主眼である。

本研究では社会的に重要であり、かつこれまで技術的に困難である長期予測のための数理基盤の構築をめざす。ここでは新たに数学的手法を駆使したデータ解析手法を構築することで、高次元の力学によって支配される現象の長期的な予測における現状を打破することを目指す。すなわち、i) 純粋数学的アイデアを用いたデータ解析手法を通じてデータ寡少の欠を補いながら超高次元系の力学を低次元系で解釈する手法を確立する。ii) 同時にデータから力学を抽出する手法や確率微分方程式を構築する手法を駆使して数理モデルを構築し、現在ブラックボックスとなっている大気変動の理解を深める。iii) そして得られた数理モデルからデータ同化によるシミュレーション手法を開発する。この一連のプロセスを数学によってきちんと整備し、気象学者との協働によって複雑混沌の大気変動に対する長期予測の向上をめざす。

2. 研究成果

(1) 概要

本さがけ研究では、

研究テーマA「確率微分方程式モデルによる数理モデル構築とその誤差評価」

研究テーマB「統計的セル・オートマトン構成法による数理モデリングとその数理構造説明」

研究テーマC「遅延座標埋め込みによるデータ駆動型力学系解析手法の構築」

研究テーマ D 「データ駆動型力学系解析とアナログ法による時系列予測手法の構築」
についての研究成果を得ることができた。

テーマ A では、所与のベクトル時系列データを確率微分方程式としてモデルする場合において、方程式の係数を最適に構成する問題である。これにより、高次元力学のデータを低次元に射影した場合に発生する縮約誤差を数理的に見積もることができた。

テーマ B では、粗視化されたデータから力学の骨子を抜き出す統計的手法の構築についてである。これにより、粗視化のスケールに合わせたセル・オートマトンモデルを構成する方法論の確立と、数値解析的見地からの理論解析をおこなうことができた。この研究は、国際会議「Third International Symposium on Computing and Networking」の中のワークショップ AFCA'15 において Best Paper Award を受賞することができた。

テーマ C では、遅延座標埋め込み時系列解析手法の数学的構造を明らかにした。関数解析学の理論によって、同手法を数学的に整備しなおし、データ構造を Sturm-Liouville 型固有値問題として特徴づけすることができた。本成果によって、Takens らの先行研究による位相学的な「埋め込み理論」を発展させ、解析学的な埋め込み理論の提案に至ったといえる。

テーマ D では、遅延座標埋め込みによるデータ表現を用いて、アナログ法を用いた予測手法を開発した。この手法を用いると、部分的な観測変数だけの情報から Lorenz 方程式の時系列予測が、方程式を用いて数値計算した場合と同程度の予測力を持つことがわかった。対象は低次元系であるが、カオス力学系に対しても本手法が有効であることがわかった。さらに、気象庁再解析データセットを用いて同手法による予測可能性について解析をおこなった。また、遅延座標系と導関数座標系との関連を数学的に明らかにし、遅延座標系を用いてモデル方程式の直接推定手法を開発した。

本研究では、数学的理論を基礎にして、データ解析から予測モデル構成までのプロセスを構築する研究に従事し、諸分野の問題への応用可能性を追求した。本研究での成果は萌芽的要素を含んでおり、さらなる研究による予測プロセスの精緻化と発展的応用が期待される。

(2) 詳細

研究テーマ A 「確率微分方程式モデルによる数理モデル構築とその誤差評価」

確率微分方程式モデリングは、所与のベクトル時系列データを確率微分方程式の解の実現値と仮定したとき、それを最適に再現する方程式の係数を逆問題的に構成する手法である。具体的には、相空間上のデータの変動の一次のモーメントと二次のモーメントから拡散過程のドリフトと拡散係数を離散的に構成する。この手法からは一次、二次モーメントをベースとする確率モデルを導出できるため、解析結果の理論づけがしやすく、気象データ解析として成層圏北半球中高緯度冬季の予測スプレッドの事後評価を与えた[5]。

また、データ解析としての直感的な解釈だけでなく、理論的な考察も進めた。(1) この手法は、確率微分方程式の数値解に対して適用することも(この場合は確率微分方程式の逆問題に相当する)、(2) 決定論的なデータに対して適用することもできる(この場合は射影演算子法による一般化ランジュバン方程式の導出に相当する)。確率微分方程式モデリング自体は、方法論的には良く知られた計算手法であるが、たとえば上記の(1)に対しては、本手法はモンテカルロ的に逆問題の近似解を得る方法となっているものの、誤差評価は良く知られていなかった。また、(2)では決定論的データを確率論的に扱うための適切な時間スケールの設定が必要であるが、その議論はこれまで発見論的にされており、確率論的な視点でおこなわれているものではなかった。

これに対して(1)、(2)ともに数学的に解決を与え、査読付き論文を投稿した[1]。ここでは、射影演算子法との関連も数理的に見出すことができ、既存の次元縮約手法との関連性を数値実験によって提示することができた。

研究テーマB「統計的セル・オートマトン構成法による数理モデリングとその数理構造解明」

離散的な数理モデルを統計的に構築する場合、セル・オートマトン(CA)の枠組みを応用することができる。特に気象データのように複雑でかつデータが限られている場合は、上記の確率微分方程式モデルのように相空間を離散セルに分割するとき、精細なサイズのセルを取る方策が採用できるとは限らない(各セルに含まれるデータ数が足りないと得られる結果の統計的有意性が疑われるため)。

このような場合は、時間発展パターンの詳細の再現を狙うのではなく、その骨子の再現をねらうことは理にかなっており、CAとの相性が良い。CAを統計的に構成するには、実数値のデータを何らかの粗視化を用いて離散値にする必要がある。この粗視化は着目する現象のスケールの設定と関係するため、気象データのようなマルチスケールのデータセットに対して応用できるように整備することは非常に有益である。

この統計的構成法を精緻化し、さらにその数理構造を理解するため、数値解析とCAの研究である明治大学の宮路智行特任講師と京都教育大学の川原田茜講師と共同研究を遂行し、以下のような成果を得た。統計的CA構成法による局所規則の決定は、微分方程式の数値計算における区間演算と関連があり、CAの状態数無限大の極限がその精度の無限大極限と対応することがわかった。また、流体方程式を1次元化して得られる粘性バーガス方程式の時空間データに対しては、適切なスケールリングによって、元の方程式が持つ波の多様な伝搬速度をCAモデルによって再現することが可能となった。両名とは、国際学会の査読付きプロシーディングスを2本[4]、査読付き学術雑誌論文を1本[2]発表した。特に、本研究者が責任著者を務めた[4]は国際会議「Third International Symposium on Computing and Networking」の中のワークショップAFCA'15においてBest Paper Awardを受賞することができた。本研究者はセル・オートマトンの専門家ではないが、本手法が新しい数理モデリング手法としてセル・オートマトンの分野から認められたことは極めて有意義であると思っている。

研究テーマC「遅延座標埋め込みによるデータ駆動型力学系解析手法の構築」

遅延座標埋め込みは、時系列データの履歴をユークリッド空間に埋め込むことによって、そ

の時系列の変化パターンの構造を取り出す手法である。この手法は、時系列データ(として得られる現象)の従う方程式が未知であっても、それをデータ駆動的に推定することができるメリットを持つ。

本研究者は、遅延座標埋め込みが L^2 空間上の完全連続作用素の固有函数展開によって特徴付けられることを明らかにした。これは、高次元遅延座標空間において主成分分析をおこなう「遅延座標主成分展開」によって時間発展パターンの抽出が、函数解析的に特徴付けできたということである。また、その完全連続作用素と対をなす Sturm–Liouville 作用素を考察することにより、対応する固有函数の選択性(Legendre 多項式系 vs 三角函数系)や時系列データの決定論性・非決定論性の特徴付けに成功した。

さらに Sturm–Liouville 型固有値問題という視点から逆算することで、データの自己相関が重み函数として特徴付けられる枠組みをも見出すことができた。さらには、データ解析時におこなう L^2 正則化も Sturm–Liouville 型問題の係数として現れることも示すことができた。これらの成果は L^2 空間を基とする函数解析的枠組みにおける結果ではあるが、「データ構造」+「自己相関」+「正則化」というデータ解析に重要となる情報が全て Sturm–Liouville 理論によって記述されることが明らかになったのである。Takens らが導き出した位相力学系の理論としての「埋め込み定理」と対比すると、本成果は函数解析学による「埋め込み定理」と言える。

本研究による函数解析的な埋め込み理論の解釈は、従来非線形時系列解析で用いられてきたいわゆる「埋め込み時系列解析」で展開されている理論とは大きく異なる。しかし、本手法で得られる固有函数系が周知である Sturm–Liouville 型固有値問題の固有函数に対応するという数値的傍証から考えても、遅延座標を用いる手法全般の本質的な理解に達したと考えている。この函数解析的な遅延座標埋め込みの解釈方法は、対象を気象データに限ることなく、あらゆるデータ解析においても同様に展開することができる。他分野で用いられている遅延座標埋め込み手法の考察や改善において重要な役割を果たすと考えている。

研究テーマD「アナログ法による時系列予測手法の構築とデータ駆動型力学系解析」

遅延座標埋め込みによる時系列解析手法の数学的な構造が本研究者によって明らかになったため、本手法をフルに活用して数理モデルを構築する方法を開発した。

遅延座標はある時間幅の変動パターンを表す点であるため、同様に未来への時間発展の予測に用いることができる。すなわち、未来を予測したい現在の状態の過去の履歴を遅延座標で表し、所与のデータセットの中で似た遷移をしたデータ(アナログ)を抽出し、抽出されたデータの時間発展から適当な重み付き平均で持って未来の状態予測とするのである。

このアナログ法と呼ばれる手法は、E. N. Lorenz がカオスを提示した論文において言及している手法であるが、彼は元の状態空間においてアナログ点を探していた。本手法では遅延座標の空間でアナログ点を探すため、時間変化パターンの再現度がより高くできる。これは、アトラクタを密に埋める理想的なデータセットに対して適用すると非常に良い予測手法を与えていることがわかった。

さらに、函数解析的な見地から遅延座標主成分展開によって抽出される基底について考察することで、遅延座標埋め込み手法と導函数座標埋め込み手法との関係性を数学的に明らかにすることができた。特に、時系列の時間解像度が十分小さい場合には、導函数埋め込み

手法は微分方程式の満たす曲面をデータから構成する手法となっている。したがって、導函数座標埋め込みを用いると直接微分方程式を推定が可能である。

これまで、遅延座標空間における距離の近い点どうしは短期的に似た時間発展挙動を示すことから、未来の状態予測をしたい点の近傍からアナログ点を取り出していた。これは空間局所的な解析である。一方で、導函数座標埋め込みでは、微分方程式から定まる曲面をデータから推定することができるため、大域的なデータ構造の情報が状態予測や数理モデル構築に利用できることがわかった。さらに、遅延座標埋め込み手法は、時系列の時間解像度が十分小さく、決定論的である場合、データ駆動的に導函数座標に埋め込む基底を取り出す手法であることもわかった。そのため、ここでの導函数座標という観点は、微分幾何学的な「埋め込み理論」構成の端緒となり得る。

この研究により、データ駆動的な力学の再構成の方法論の提示ができたと言える。この微分方程式の推定手法とこれまで進めてきたアナログ法による予測手法と混成させ、Lorenz 96 モデルや JRA55 再解析データに対しての適用可能性を検討することは有意義であると言える。これらのデータの場合は、データの次元が本質的に高次元となることと、データのノイズの存在のために解析の困難が予想されるが、多様体学習等の次元縮約の適用を検討し、現状を打破したいと考えている。本テーマにおける成果は、理論とデータ解析のどちらの部分も、論文として発表する準備を着実に進めている。

3. 今後の展開

本さがけ研究では、遅延座標主成分展開によって時系列データの構造を取り出す研究方針の有意義さを見出すことができた。そのため、数学理論に基づくデータ解析研究は今後も発展させる必要がある。日本数学会における応用数学分科会での特別講演を拝命するなど本研究はデータ駆動科学のための数学という新しい研究の方向性を提示できたと考えているが、本研究は萌芽的な要素を多分に含んでおり、このさがけ研究を土台にして、さらなるデータ駆動科学のための数学研究を本研究者は展開していく。これには数学内の分野横断や統計科学や機械学習の専門家との共同、さらには産学連携も含んでいる。

・分野横断人的ネットワークの構築

本さがけ研究が嚆矢となり、京都大学数理解析研究所の共同利用事業「RIMS 共同研究（グループ型）」を利用して「統計的モデリングと予測理論のための統合的数理研究」を2度開催し、数学の各分野と統計科学の分野横断研究をおこなった。また、情報・システム研究機構データサイエンス共同利用基盤施設公募型共同研究「ROIS-DS-JOINT2017」に応募し、採択された。これは本さがけ研究でも深く関連するデータ同化の専門家との共同研究である。「RIMS 共同研究」では継続して H30 年度も共同研究提案が採択されており、「ROIS-DS-JOINT」も 2018 年度募集分に応募予定である。これらによって、数学を基盤とするデータ駆動科学研究のための人的ネットワークの構築を進める。これは本さがけ研究のような課題解決型の研究を行う上で、研究者単体で取り組むには限界があることと、発展的な研究に昇華させるためにはチームを組んで問題に当たる必要を感じたため、今後の展開としてネットワーク作りにも注力する。

・さきがけ領域横断研究

「分子技術と新機能創出」領域出身の内田幸明研究者(大阪大学大学院基礎工学研究科准教授)との Feasibility Study 研究をきっかけに、本研究者の所属する「社会的課題の解決に向けた数学と諸分野の協働」領域の横山知郎研究者(京都教育大学数学科准教授)と鍛冶静雄研究者(山口大学大学院創成科学研究科准教授)と数理＝化学融合研究を開始した。横山・鍛冶両研究者は、同領域のトポロジーアクティビティグループ PresTop を推進しており、解析とトポロジーの両輪から液晶の研究を進めている。さらに、「分子技術と新機能創出」領域出身の大野工司研究者(京都大学化学研究所准教授)と「ナノシステムと機能創発」領域の吉田浩之研究者(大阪大学大学院工学研究科助教)も交え、6 人体制で次世代材料開発のための融合研究を進めようとしている。

・京都大学国際高等教育院附属データ科学センターにおける活動

2017 年 9 月より、現職の京都大学国際高等教育院附属データ科学センターに着任した。ここでは本さきがけ研究における成果と経験を活かし、地球物理学をはじめとする理学研究に対して、データ駆動型数理科学研究の推進を模索する。また、当センターでは産学連携研究も推進していく。

4. 評価

(1) 自己評価

(研究者)

本さきがけ研究では、確率微分方程式モデリングと遅延座標時系列埋め込み手法を軸に長期予測への方法論を開発してきた。それぞれの手法については、データ解析的な側面だけでなく、数学理論としての問題を切り出すことができ、着実な理論研究を実施したと言える。気象データの長期予測までの実装までにはいたらなかったが、それにつながる数学的方法論の開発とそのために必要な根本的な数学的問題を洗い出すことができたため、AFCA Best Paper Award 等の評価につながったと言える。

さきがけ研究費執行としては、高負荷なデータ解析を効率的におこなうための計算機の導入や、研究成果発表や共同研究における国際的活動のための旅費として使用することができ、極めて効果的であった。また、本研究者は 2017 年 8 月までさきがけ専任研究者であり、さきがけ研究に集中することができる環境整備ができたことは、本研究計画に極めて重要であった。専任研究者であったことや適任者が見つけられなかったこともあって研究補助者の雇用は行わなかったが、個人研究者として出来ることを十二分におこなった。

本さきがけ研究はハードルが高い研究課題ではあったが、それなりの達成度と達成感を持っている。データ駆動科学は、昨今地球物理の各分野でも運用する機運が高まっており、既存の理論の深化は今後の課題としても、データ科学的手法をとにかく試してみるというフェーズに今まさにあることがわかった。本研究者の気象データ解析の研究を礎にいくつかのニーズの掘り出しができたと考えており、まさに「さきがけ」的な研究をおこなえたと思っている。

また、数学振興のためのアウトリーチ活動は本領域の重要なミッションであるが、特に JST 数学キャラバンは幹事として水戸で 3 回開催、講演者として札幌で 1 回担当するなど、積極的に従事した。これにより、高大接続の架け橋として、また数学研究の社会還元をおこなうこ

とができ、研究での達成事項と合わせ、さきがけ「数学協働」領域の研究者として使命を果たせたと思っている。

(2) 研究総括評価(本研究課題について、研究期間中に実施された、年2回の領域会議での評価フィードバックを踏まえつつ、以下の通り、事後評価を行った)。

(研究総括)

気象の長期(季節)予報の精度向上を目指して、確率微分方程式モデリングや時系列埋め込み、セルオートマトンなどの様々な数学的手法に基づく包括的な予測手法の研究を行い、一定の興味深い成果を挙げた。特に統計的セルオートマトンモデリングによるデータ予測手法の構築は新規性の高いものであり、気象予測だけでなく様々なデータ予測に適用できる可能性があるとして期待される。

当初の目的であった気象の季節予測におけるブレークスルーには残念ながら至らなかったが、その過程で新しいデータ解析手法やその基礎となる数学的結果を得ており、日本数学会の特別講演者に選ばれるなどの対外的評価も受けたことは喜ばしい。今後さらに研究を継続することで、数理に基づく新たなデータ駆動型科学の方法論の開拓を目指してほしい。

領域内外の多くの研究者と積極的に連携し、企業との共同研究も含めて、多彩な研究活動を行ったことは高く評価される。またアウトリーチ活動においても数学キャラバンの推進などで大きな貢献を行った。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

- | |
|--|
| 1. Naoto Nakano, Masaru Inatsu, Seiichiro Kusuoka and Yoshitaka Saiki, "Empirical evaluated SDE modelling for dimensionality-reduced systems and its predictability estimates", Jpn. J. Ind. Appl. Math., in print (2018), 査読付き論文 |
| 2. Akane Kawaharada, Tomoyuki Miyaji and Naoto Nakano. "Analysis of a method for constructing a cellular automaton from a continuous system". Int. J. Networking and Computing. (2016), 6, pp 230 - 242, 査読付き論文 |
| 3. Yuta Tamaki, Masaru Inatsu, Ryusuke Kuno and Naoto Nakano. "Sampling downscaling in summertime precipitation over Hokkaido". J. Meteor. Soc. Japan. (2016), 94A, pp 17 - 29, 査読付き論文 |
| 4. Akane Kawaharada, Tomoyuki Miyaji and Naoto Nakano. "Proper choice of spatio-temporal scale and dataset subsampling for empirical CA construction". Proceedings of 2015 Third International Symposium on Computing and Networking. (2015), pp 424 - 429, 査読付きプロシーディングス (AFCA Best Paper Award 受賞) |
| 5. Masaru Inatsu, Naoto Nakano, Seiichiro Kusuoka and Hitoshi Mukougawa. "Predictability of wintertime stratospheric circulation examined using a nonstationary relation". J. Atmos. Sci. (2015), 72, pp 774 - 786, 査読付き論文. |

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- | |
|--|
| 1. AFCA Best Paper Award: 3rd International Workshop on Applications and fundamentals of Cellular Automata, Sapporo, Japan (2015 年 12 月 15 日)
川原田茜(京都教育大学数学科講師)と宮路智行(明治大学研究・知財戦略機構特任講師との共同受賞。(応募者が受賞論文の corresponding author を務めた。) |
| 2. 日本数学会 2017 年度秋季総合分科会 応用数学分科会特別講演(2017 年 9 月 14 日) |
| 3. AIMaP 公開シンポジウム「数学と産業の協働ケーススタディ」において招待講演とパネルディスカッションでのパネリスト登壇。(2018 年 1 月 20 日) |
| 4. 日本数学会応用数学研究奨励賞(2018 年 3 月 21 日) |