

プラズマ乱流解析の方法論を通じて 他分野とつながる

前山伸也

 核融合科学研究所 メタ階層ダイナミクスユニット

第9回研究部セミナー，管理・福利棟4階第一会議室，2023年11月24日15:00 - 16:00

Outline

- 自己紹介 - 3 min
- 手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現 - 10 min
- 手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析 - 10 min
- 手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング - 10 min
- まとめと議論 - 7 min

自己紹介

名前：前山伸也

所属：核融合科学研究所 メタ階層ダイナミクスユニット・准教授

経歴：生まれも育ちも青森県 → 東工大（工） → 東工大（原子核） → 原子力機構（核融合） → 原子力機構（システム計算） → 名古屋大（物理） → 核融合研

専門：プラズマ乱流、ジャイロ運動論、高性能コンピューティング

京算百景
いざいんひゃっけい
2018 winter Vol.24
RIST

「ところが、初期の多くの実験で、プラズマを閉じ込め加熱しても、温度が落ちようとして上がらないという現象が現れました。そして、1960年代頃に、これは『乱流によるもの』だという説が提唱されたのです。前山さんはプラズマ乱流の研究のルーツを説明します。

プラズマ乱流とは？

磁場でプラズマを閉じ込められるのはどうしてでしょうか。プラズマ中のイオンと電子は電荷をもっているため、図3のように磁力線の周りを旋回しながら進みます。この原理により、プラズマを閉じ込めるようなトーナ管の磁場の中心に閉じ込めることができるのです。しかし、このプラズマにはほとんど不安定性が伴っていることが、理論研究からわかっています。プラズマの中心（トーナ管の断面の円の中心）は高温・高密度ですが、周囲は低温・低密度です。曲がった磁場に沿ってイオンや電子が動くとき、中心（トーナ管断面の円の中心）から外に向かう力が加わるため、中心部分の温度が上がりにくくなるのです。プラズマ乱流の理論研究はこのような仕組みを明らかにし、実験データの解釈や装置の設計に貢献してきました。特に、1990年代以降は、第一原理的なシミュレーションが本格的に行われるようになり、最近では、実験結果との詳細な比較も可能になってきています。そうした中で、前山さんは2013年、「京」を使って、断片的なシミュレーションを行いました。それは、イオンの乱流と電子の乱流を同時に計算するマルチスケールシミュレーションです。

「スケール分離」の常識を覆す

従来は、イオンと電子の乱流は別々にシミュレーションされてきました。イオンは電子の1000倍以上の質量をもつため、生じる乱流のサイズも大きく異なり、イオンの乱流の典型的な波の半長は数cmであるのに対し、電子は1mm以下となります。100倍もスケールの違う現象は相互作用しないだろうと考えられてきたのです。その背景には、イオンと電子を同時に数えるとしても、

前山伸也
K-computer

For analyzing turbulence in magnetized plasmas
GyroKinetic Vlasov simulation code: GKV
updated 2021-04-28

HOME Document Download Reference Contact

Brighten your ideas!

GKV is an Vlasov simulation code based on delta-f gyrokinetic equations in a local flux-tube geometry. The code has been developed for analyzing plasma turbulence in magnetized plasmas, such as magnetic fusion and magnetosphere. The released version includes several key features: kinetic electrons/ions/impurities, electromagnetic fluctuations, MHD equilibrium interfaces, and a multi-species collision operator. The computational performance has been confirmed to achieve excellent strong scaling up to ~0.6 million cores.

<https://www.p.phys.nagoya-u.ac.jp/gkv/>
<https://www.github.com/GKV-developers/>

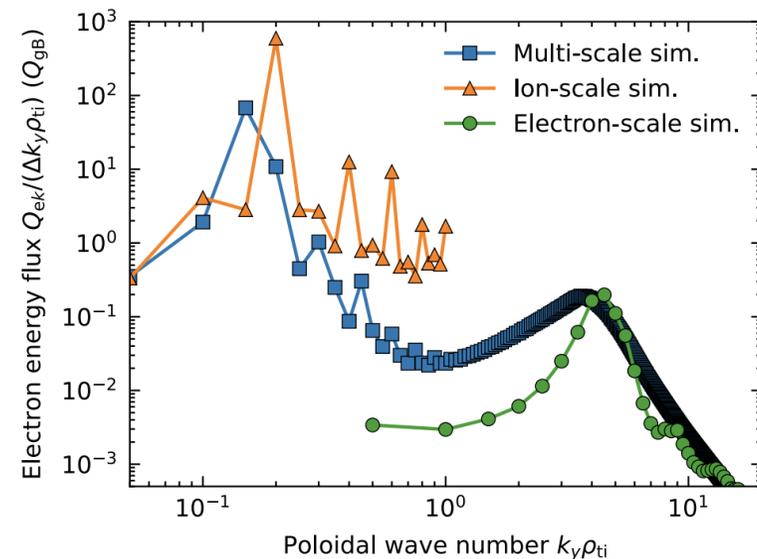
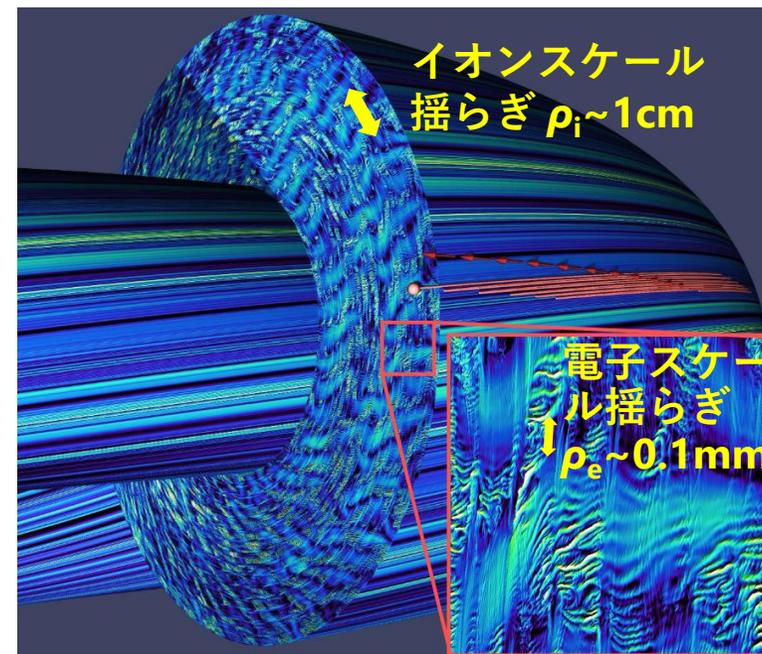
これまでの研究：プラズマ乱流マルチスケール相互作用

問題 従来：スケール分離仮定に基づく単一スケール解析

手法 電子・イオン系マルチスケール乱流シミュレーション
を世界に先駆けて実現 $\sim 4 \times 10^7$ core-hour / simulation

- 成果**
- ✓ **マルチスケール相互作用が存在し、乱流輸送が大きく変化** [Maeyama, PRL (2015), Maeyama, NF (2017)]
 - ✓ 電子スケールが支配的なケースも。 **多様性と普遍性** [Maeyama, PRL (2017)]
 - ✓ 核燃焼プラズマを見据えた高 T_e ・多種プラズマ解析 [Maeyama, Nature Commun. (2022)]
 - ✓ 日欧米共著によるマルチスケール乱流に関するオーバerview [Maeyama, IAEA-FEC 2023]

（米国のAlcator C-Mod, DIII-D実験もマルチスケール相互作用の重要性を支持 [Howard (2016), Holland (2017)]
欧州でも解析が進められる [Mariani (2021), Mantica (2021)]



本日のお話

これまでのマルチスケール乱流研究やそこでの問題意識から開発した、解析手法・モデリング手法についてお話しします。

方法論を軸として、考えたい問題のもつ構造（階層）を俯瞰する（メタ視点）ことで、他分野とも共通点が見つかる期待。

・・・**メタ階層的アプローチ**の一つの形

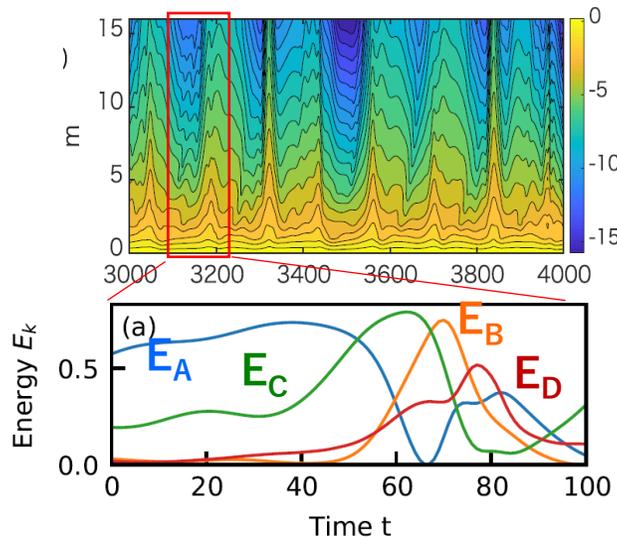
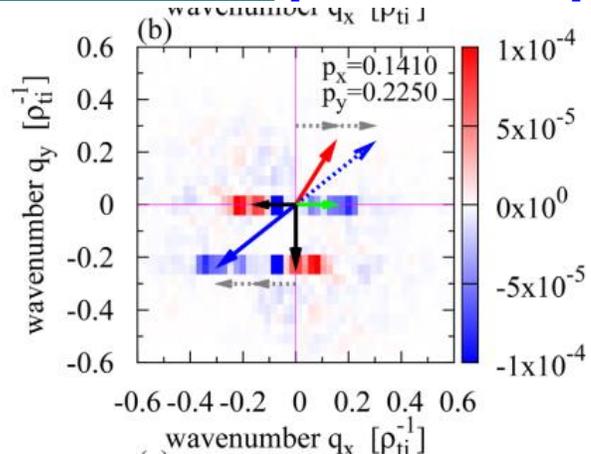
Outline

- 自己紹介 - 3 min
- **手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現 - 10 min**
- 手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析 - 10 min
- 手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング - 10 min
- まとめと議論 - 7 min

研究概要

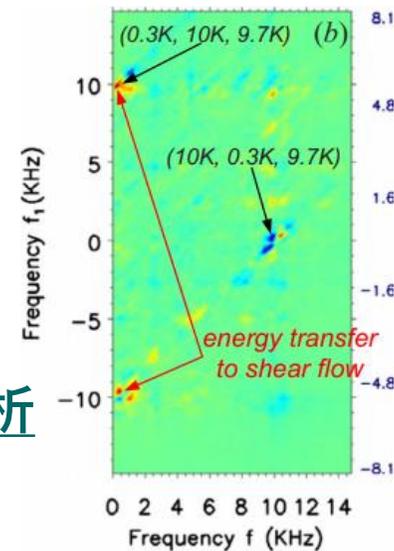
問題 複雑な乱流非線形相互作用を如何にして抽出するか？

Fourier解析 [Nakata'12PoP]



SVD解析 [Sasaki'20PPCF]

周波数解析 [Xu'09PoP]



手法 **2次の非線形性**を介したエネルギー伝達という一般的な問題
→ 任意の直交関数展開に対する**三つ組み相互作用解析**として定式化。

成果

- マルチスケール乱流相互作用の非等方・非局所な集団相互作用を解析 [Maeyama, NF (2017)]
- 特異値分解(SVD)に対するエネルギー伝達解析 [Maeyama, New J. Phys. (2021)]

二次の非線形性による三つ組み相互作用

- 二次の非線形性のモデル方程式 (Cf. 渦度方程式の移流項)

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \{\phi, f\} \quad \left[\text{エネルギー保存則} \quad \frac{d}{dt} \int \frac{f^2}{2} d\mathbf{x} = 0 \quad \left(\because \int f\{\phi, f\} d\mathbf{x} = 0 \right) \right]$$

- 揺動を直交展開によりモードに分ける (Cf. Fourier, SVD, ...)

$$f(t, \mathbf{x}) = \sum_k f_k(t, \mathbf{x}) \quad \text{where} \quad \int f_i f_j d\mathbf{x} = 0 \text{ for } i \neq j$$

- 各モードのエネルギーの時間発展は

$$\frac{dE_k}{dt} = T_k$$

ここで

$$T_k = \sum_p \sum_q A_k^{p,q} \quad (\text{Total transfer to the mode } k)$$

$$A_k^{p,q} = \int f_k\{\phi_p, f_q\} d\mathbf{x} \quad (\text{Transfer via the coupling among } k, p, q)$$

三つ組み伝達関数の対称化

非対称三つ組み伝達関数

$$A_k^{p,q} = \int f_k \{ \phi_p, f_q \} dx$$

- $A_k^{p,q} = -A_q^{p,k}$ の性質から、 $A_k^{p,q}$ を「モード p を介して、 q から k へのエネルギー伝達と解釈」する提案 [Dar(2001)] 以降、プラズマ分野ではMHD・微視的乱流解析に広く用いられてきた [Mininni(2005), Holland(2007), Cerri(2014), Navarro(2014), Teaca(2017), ...]

対称化三つ組み伝達関数

$$S_k^{p,q} = \frac{1}{2} (A_k^{p,q} + A_k^{q,p}) = \frac{1}{2} \int f_k [\{ \phi_p, f_q \} + \{ \phi_q, f_p \}] dx$$

- Energy consistency $T_k = \sum_p \sum_q A_k^{p,q} = \sum_p \sum_q S_k^{p,q}$
- Symmetry $S_k^{p,q} = S_k^{q,p}$
- Detailed balance $S_k^{p,q} + S_p^{q,k} + S_q^{k,p} = 0$
- 正味伝達に寄与しない $A_k^{p,q}$ の p, q 反対称成分を除いた。 $S_k^{p,q}$ は「 k, p, q 三つ組み相互作用によりモード k が受け取る正味エネルギー伝達」
- 中性流体 [Kraichnan(1952), Ohkitani(1992)]、ジャイロ運動論 [Nakata(2012), Maeyama(2017)]

Importance of symmetrization

An apparent example

Consider a no physical interaction case $\tilde{f} = c\tilde{\phi}$, then $\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \{\tilde{\phi}, \tilde{f}\} = c\{\tilde{\phi}, \tilde{\phi}\} = 0$.

Nothing happens physically. Interactions among three modes $\tilde{f} = \tilde{f}_k + \tilde{f}_p + \tilde{f}_q$?

- Non-symmetrized transfer

$$A_k^{p,q} = \int f_k \{\phi_p, f_q\} d\mathbf{x} = c^2 \int \phi_k \{\phi_p, \phi_q\} d\mathbf{x} \neq 0$$

Find new interactions?
No, it's fiction.

- Symmetrized transfer

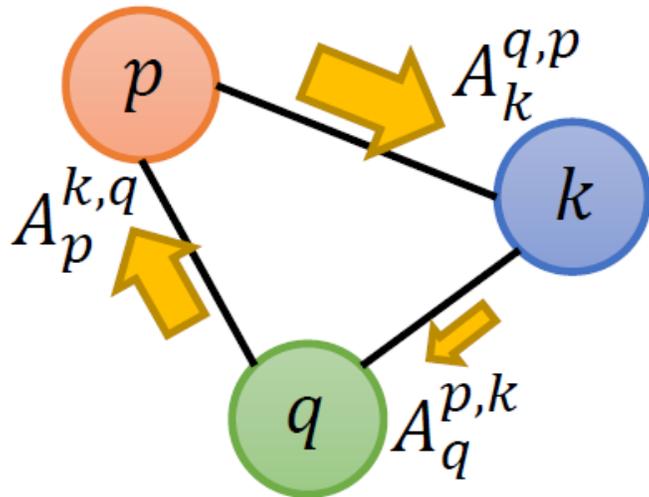
$$S_k^{p,q} = \frac{1}{2} \int f_k [\{\phi_p, f_q\} - \{\phi_p, f_q\}] d\mathbf{x} = \frac{c^2}{2} \int \phi_k [\{\phi_p, \phi_q\} - \{\phi_p, \phi_q\}] d\mathbf{x} = 0$$

No fictitious interactions.

Difference among triad transfer functions

非対称伝達関数

- $A_k^{p,q}$ を $q \rightarrow k$ の1対1伝達として解釈。
- 三つ組み間の循環の任意性があるため、“見かけの伝達”が紛れ込みうる。

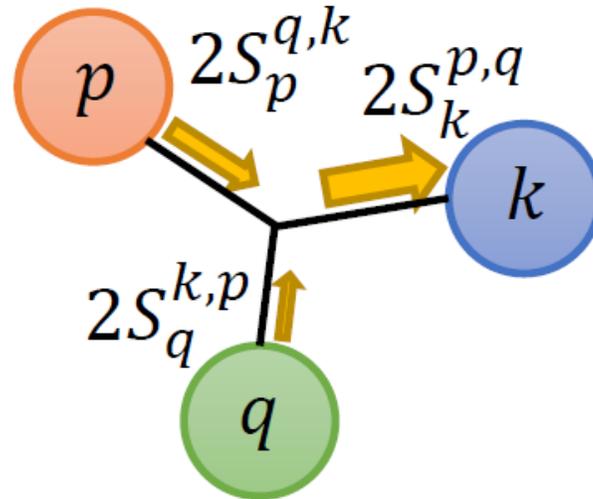


Not recommended.

対称化伝達関数

- 対称化により正味のエネルギー収支を抽出。循環の任意性を除外。
- 詳細つり合いは三つ組み間のエネルギー保存則。

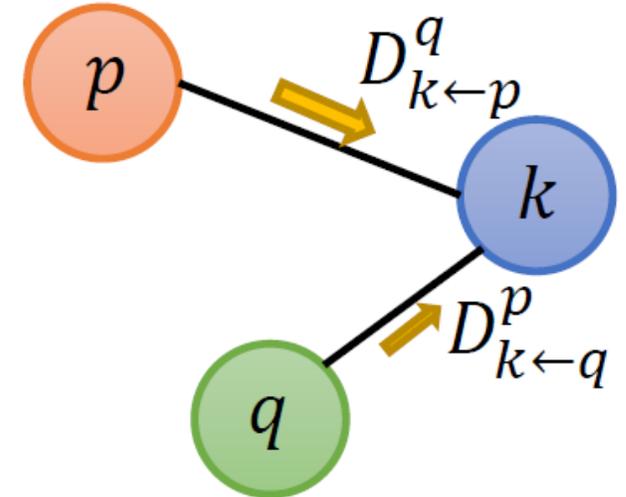
$$S_k^{p,q} + S_p^{q,k} + S_q^{k,p} = 0$$



Recommended!

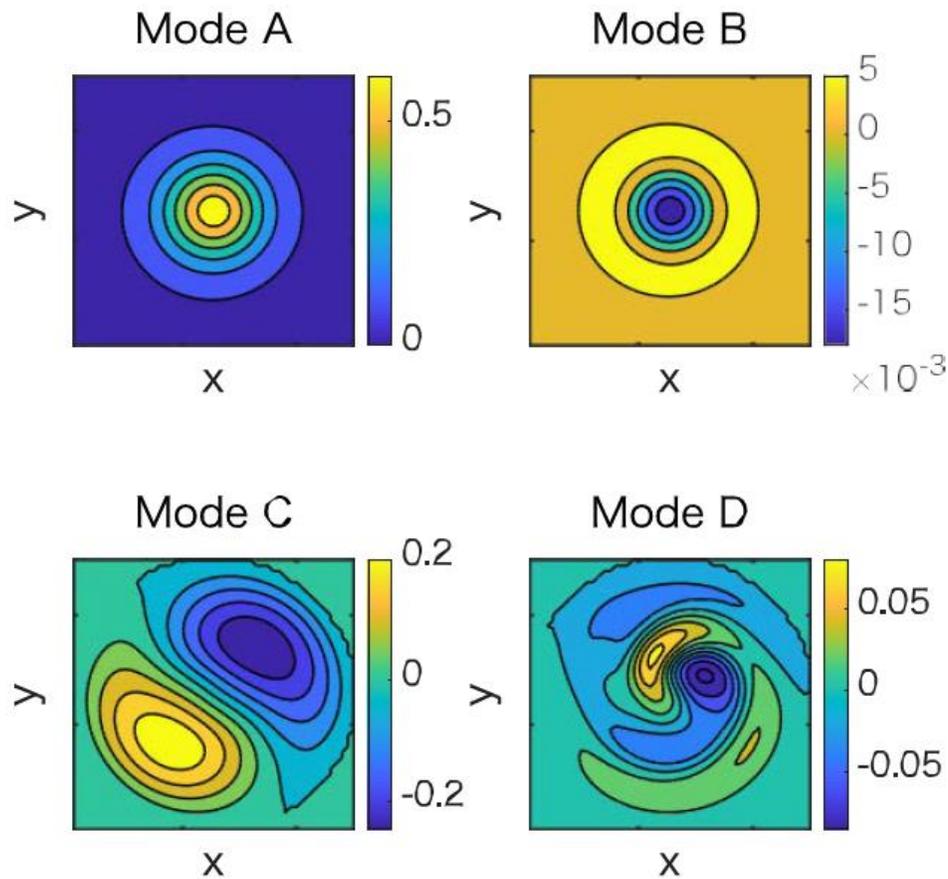
有向表現 (新提案)

- 対称化伝達関数に基づき、「**1つのモードはgainまたはlossのいずれかのみ**」というルールの下で、1対1伝達関数を再構築。
- 循環の任意性を除外しつつ、伝達経路が解析可能。

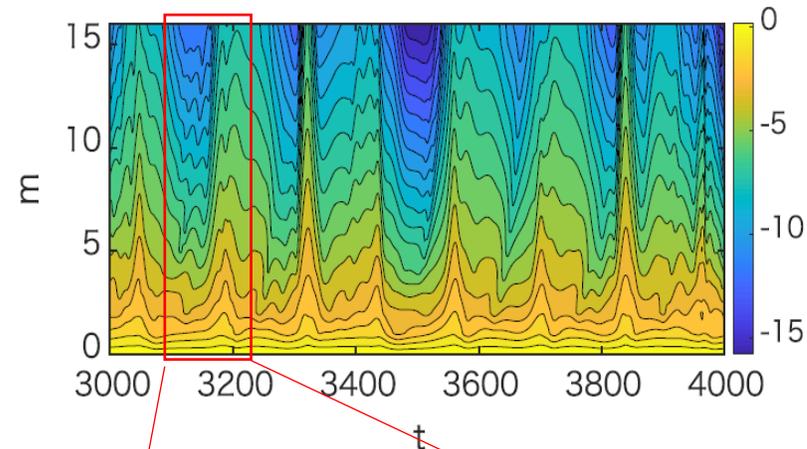


解析の適用例： Sasaki, et al., PPCF (2020).

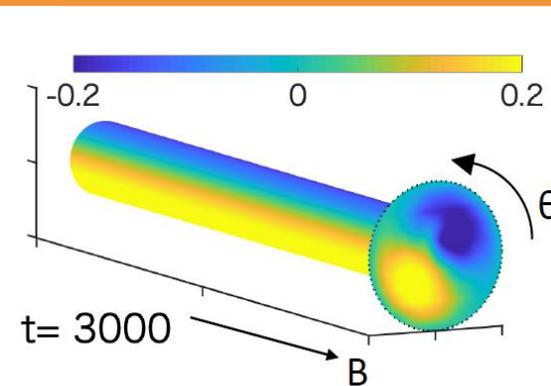
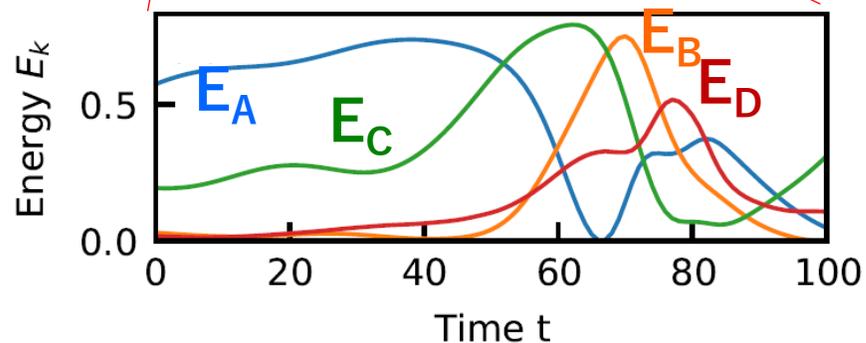
Flow patterns in Kelvin-Helmholtz turbulence (extracted by SVD)



Time evolution of azimuthal energy spectrum



Time evolution of each energy

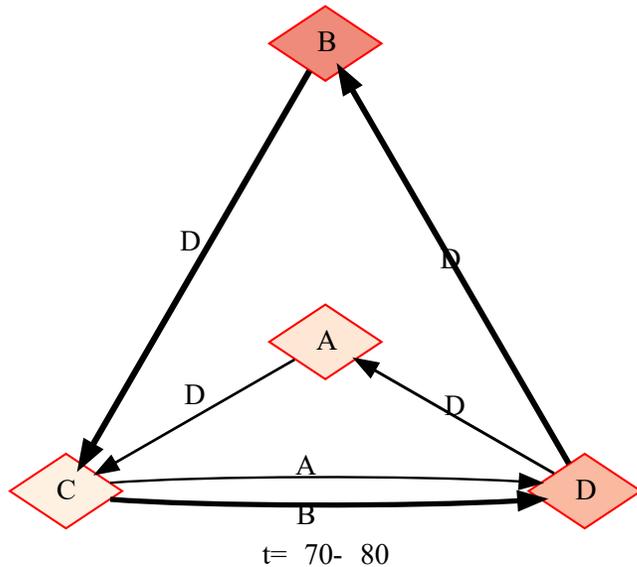


モードABCD間
相互作用を三
つ組み伝達関
数により定量
評価。

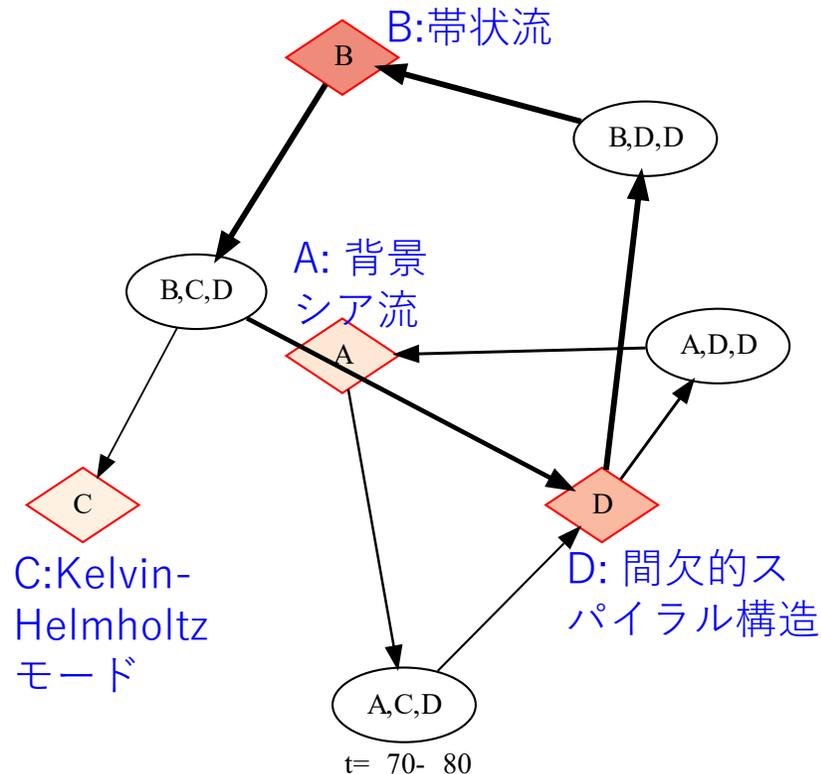
Consistency with its directional representation

- 新提案の有向表現と対称化伝達との整合性を確認。
- 一方、従来の非対称伝達関数は、他とは異なる。また循環の任意性に起因して、評価式によりグラフが変わり得る。→ 物理過程の誤解釈の危険性。

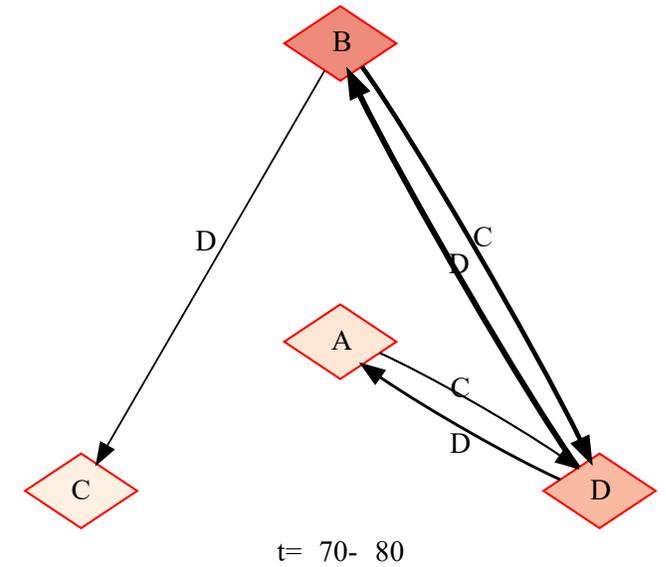
非対称伝達関数（従来手法）



対称化伝達関数

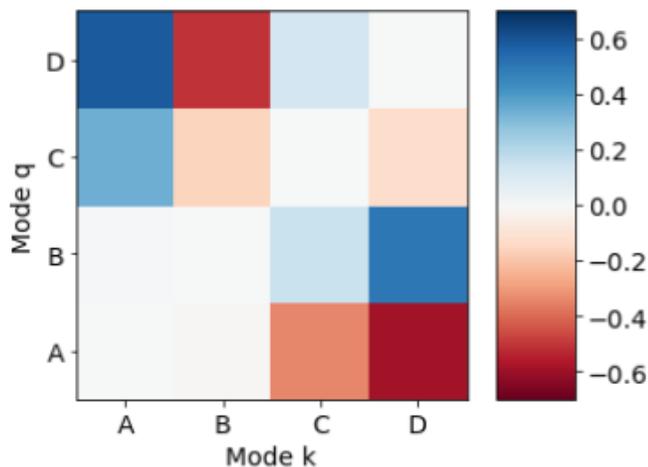


有向表現（新提案手法）

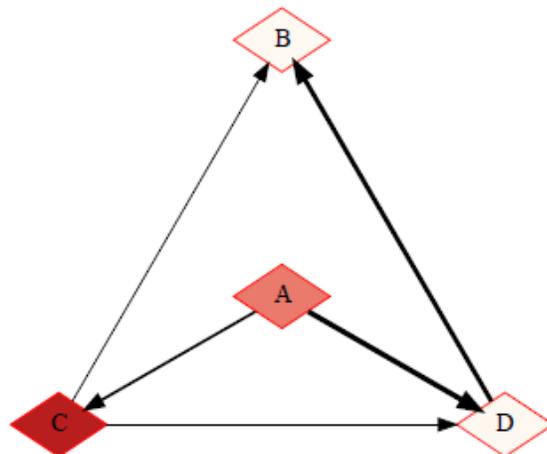


Contracted mode-to-mode transfer

(a) $D_{k \leftarrow q} = \sum_p D_{k \leftarrow q}^p$ ($50 < t < 60$)



(c) $D_{k \leftarrow q} = \sum_p D_{k \leftarrow q}^p$ ($50 < t < 60$)

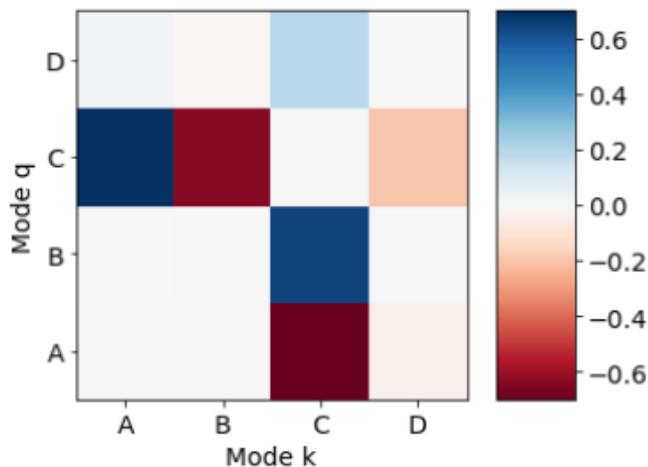


有向表現は、対称化伝達では行えない伝達経路や縮約伝達解析などの利点。

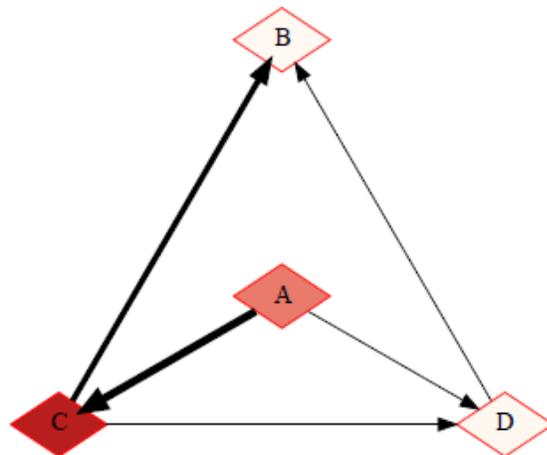
$$D_{k \leftarrow q} = \sum_p D_{k \leftarrow q}^p$$

非対称伝達とは異なり、見かけの伝達を除外。

(b) $A_{k \leftarrow q} = \sum_p A_k^{q,p}$ ($50 < t < 60$)



(d) $A_{k \leftarrow q} = \sum_p A_k^{q,p}$ ($50 < t < 60$)



オープンソースPythonパッケージ *triadgraph*

三つ組み相互作用の対称化・有向表現・ネットワーク可視化用Pythonパッケージ *triadgraph* として公開

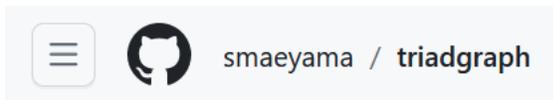
<https://github.com/smaeyama/triadgraph/>
[S. Maeyama, M. Sasaki, et al., New J. Phys. (2022)]

保存的な2次の非線形性による三つ組み相互作用を解析したい方、非対称伝達 $A_k^{p,q}$ のデータがあれば関数呼び出しで試せます



t, A_kpq, A_qkp, A_pqk, ...

```
1 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.449418773346012751
2 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.421809148018789821
3 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.385402877261049531
4 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.341344671931957185
5 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.291520747784365191
6 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.23818744479965381
7 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.183926419816981613
8 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.131519186705493385
9 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.081792581861579962
10 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.043445523112465887
11 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.012893648196771311
12 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -1.984137356919314165
13 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -1.988652178312356181
14 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -1.997316790145847665
15 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.020376133561137194
16 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.057436148624851494
17 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.10748772843222231
18 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.168847352427827337
19 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.23971824016179986
20 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.3172651222873314
21 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.398574823455534844
22 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 0.0000000000000000e+00 -2.488398176384157554
```



Usage

triadgraph requires external packages: numpy, matplotlib, pygraphviz.

```
from triadgraph import symmetrize_triadtransfer, directional_triadtransfer, \
    triadgraph_symmetric_all, triadgraph_directional_all
```

- `symmetrize_triadtransfer` returns the symmetrized triad transfer function $S_k^{p,q}$ from the non-symmetric triad transfer function $A_k^{p,q}$.

```
S_kpq = symmetrize_triadtransfer(A_kpq, time_axis=0)
```

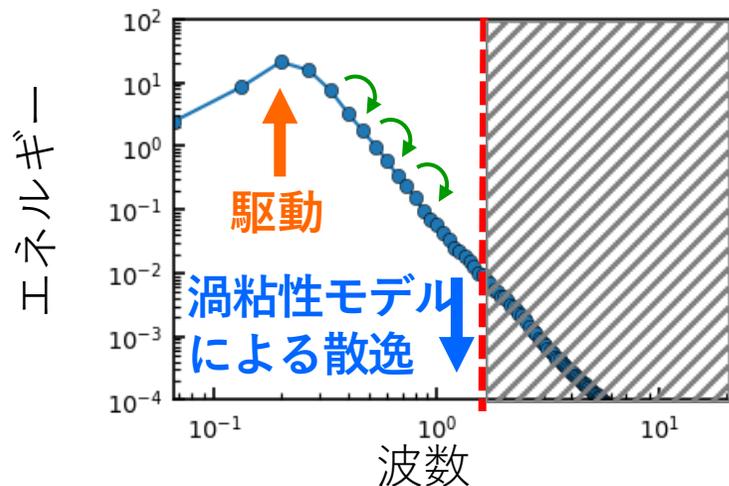
Outline

- 自己紹介 - 3 min
- 手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現 - 10 min
- **手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析 - 10 min**
- 手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング - 10 min
- まとめと議論 - 7 min

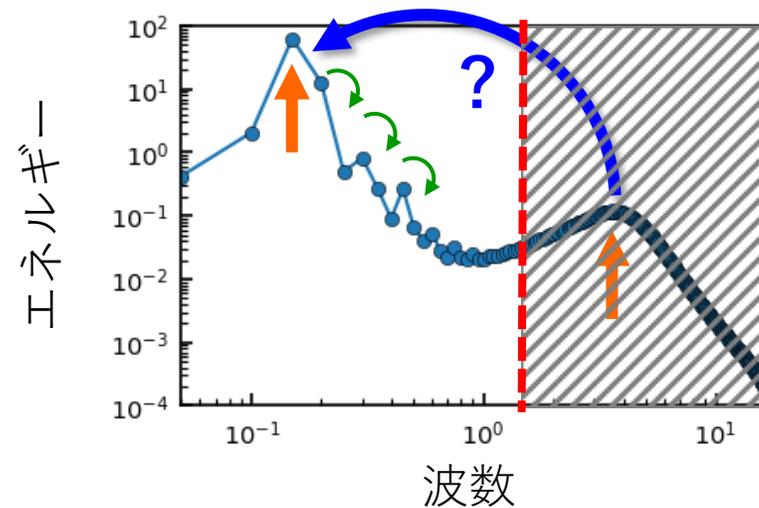
研究概要

問題 渦粘性モデルでは、自発励起する小スケール揺らぎの効果を表せない。

既存手法：渦粘性モデル



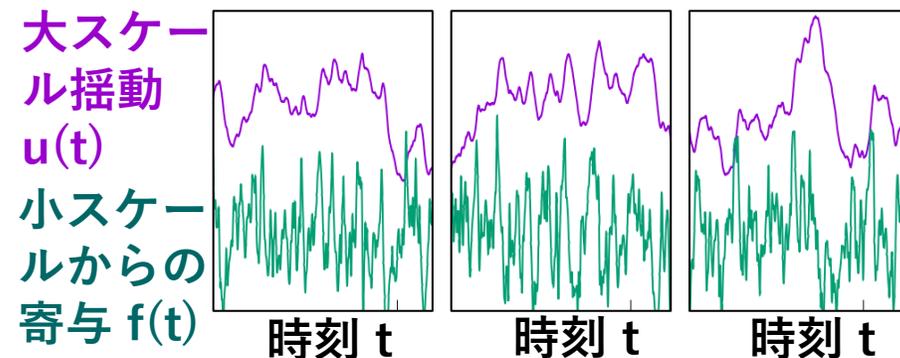
マルチスケール乱流相互作用



手法 マルチスケール相互作用を、異なるスケールの揺らぎ間の統計相関として捉えなおす。

成果 **射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析**を開発。物理解釈とモデリングに応用 [Maeyama, JPSJ (2020); 前山&三分一, 統計数理 (2023)]

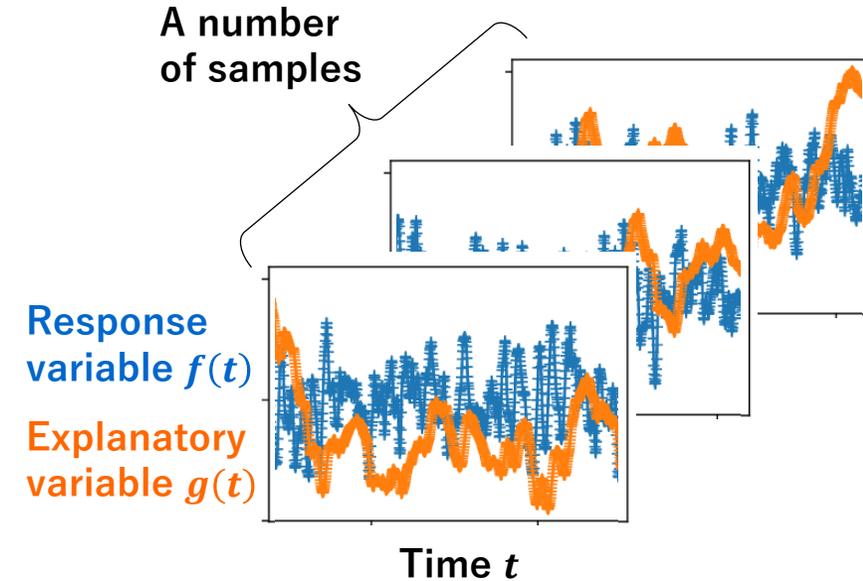
時系列データアンサンブル



Statistical analysis of time-series data

Set up of time-series data

- A response variable $f^{(l)}(t)$, which has dimensions of the number of samples l and time t .
- Explanatory variables $g^{(l)}(t)$ can be a vector $g = \{g_0, g_1, \dots, g_{n-1}\}$.
- We want to extract how $f^{(l)}(t)$ correlates with $g^{(l)}(t)$.



森-Zwanzig の射影演算子法

H. Mori, "Transport, Collective Motion, and Brownian Motion", Prog. Theor. Phys. 33, 423 (1965).

- 非平衡統計物理で開発された、遅い集団運動とミクロな揺動力を分離する数理手法
- 決定論的な運動方程式から確率的な一般化Langevin方程式を得る方法論

Formulation of Mori-Zwanzig projection operator method (1)

- Physical quantities $\mathbf{u}(t)$ is governed by $d\mathbf{u}/dt = \mathbf{N}(\mathbf{u}(t))$, with initial $u_i(t = 0) = u_i$.
- Response and explanatory variables are represented by some functionals of $\mathbf{u}(t)$, i.e., $f(t) = F(\mathbf{u}(t))$, $g(t) = G(\mathbf{u}(t))$.
- Assume statistically steady state ($t = 0$ has no special meaning).

We introduce three operators P, Q, Λ :

- Projection operator P and its complementary projection $Q = 1 - P$
 $PP = P$ (so that $QQ = Q$, $PQ = QP = 0$). Not specified here.

- Liouville operator $\Lambda = \frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} = \sum_i N_i(\mathbf{u}(t)) \frac{\partial}{\partial u_i}$

Time evolution of arbitrary functions $f_i(t) = F_i(\mathbf{u}(t))$ can be rewritten as

$$\frac{df_i(t)}{dt} = \Lambda f_i(t), \quad f_i(t) = e^{t\Lambda} f_i$$

Time evolution operator $e^{t\Lambda}$ is also called as the Koopman operator.

Formulation of Mori-Zwanzig projection operator method (2)

$$\begin{aligned} f_i(t) &= e^{t\Lambda} f_i \\ &= e^{t\Lambda} P f_i + e^{t\Lambda} Q f_i \quad \cdot \cdot \cdot \text{Divide initial } f_i \text{ into projection and complement.} \\ &= e^{t\Lambda} P f_i + \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} P \Lambda e^{sQ\Lambda} Q f_i ds + e^{tQ\Lambda} Q f_i \end{aligned}$$

where the Dyson formulae $e^{t\Lambda} = e^{tQ\Lambda} + \int_0^t ds e^{(t-s)\Lambda} P \Lambda e^{sQ\Lambda}$ is used.

Defining

$$r_i(t) = e^{tQ\Lambda} Q f_i, \quad \left(\Leftrightarrow \frac{dr_i(t)}{dt} = Q \Lambda r_i(t), \quad r_i(0) = Q f_i \right)$$

one yields the M-Z formalism

$$f_i(t) = e^{t\Lambda} P f_i + \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} P \Lambda r_i(s) ds + r_i(t)$$

(Term from projection of initial f_i) + (Memory term) + (Uncorrelated term)

Projection of the uncorrelated term is always zero, $P r_i(t) = 0$ for any $t \geq 0$.

射影演算子 P の選択

ここまでは射影と補射影の分解と記憶の獲得という一般的な形式論。
実用的な計算を進めるには、射影演算子 P を具体的に定義する必要がある。
ここでは、目的変数 f をある説明変数 g に射影するクラスの演算子を考えることにする。

- 最適推定を与える射影演算子は、
条件付き期待値関数 E である。

[Zwanzig(1980), Chorin(2002)]

$$\mathcal{P}^{(\text{nonlinear})} f_i = E[f_i | g]$$

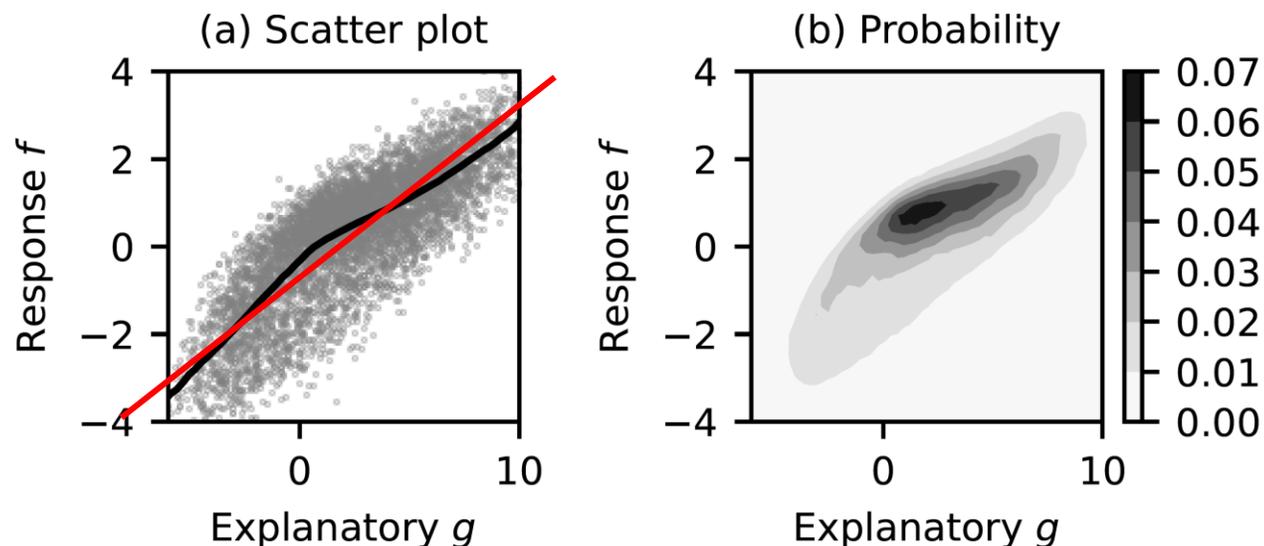
理想的には最適な射影だが、有限のデータセットから構築するのは困難。

- 森の線形射影 [Mori(1965)]

$$\mathcal{P}^{(\text{linear})} f_i = \langle f_i g^* \rangle \cdot \langle g g^* \rangle^{-1} \cdot g$$

は、条件付き期待値に対する線形回帰と解釈できる。

(左) f, g のデータサンプルの散布図と条件付き期待値関数 E (実線)、および、(右) f, g の同時確率密度分布



Formulation of Mori-Zwanzig projection operator method (3)

Now we employ the Mori's linear projection to the initial values of the explanatory variables \mathbf{g} [Mori'65Prog. Theor. Phys.],

$$P f_i(t) = \langle f_i(t) \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} \cdot \mathbf{g} = \sum_j \sum_k \langle f_i(t) g_j^* \rangle \cdot [\langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}]_{jk} \cdot u_k$$

where $\langle \dots \rangle$ is the ensemble average. Then, $P r_i(t) = 0$ means $\langle r_i(t) \mathbf{g}^* \rangle = 0$.

Calculate the terms in the M-Z formalism.

$$e^{t\Lambda} P f_i = e^{t\Lambda} \langle f_i \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} \cdot \mathbf{g} = \langle f_i \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} \cdot \mathbf{g}(t) \equiv \sum_j \Omega_{ij} g_j(t)$$

Markov
correlation Ω

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} P \Lambda r_i(s) ds &= \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} \langle \Lambda r_i(s) \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} \cdot \mathbf{u} ds \\ &= - \int_0^t \langle r_i(s) \frac{d\mathbf{g}^*}{dt} \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} \cdot \mathbf{g}(t-s) ds \\ &\equiv - \int_0^t \sum_j \Gamma_{ij}(s) g_j(t-s) ds \end{aligned}$$

Memory function Γ

Formulation of Mori-Zwanzig projection operator method (4)

Finally, the (extended) generalized Langevin form of $\mathbf{f}(t)$ is

$$\mathbf{f}(t) = \Omega \cdot \mathbf{g}(t) - \int_0^t \Gamma(s) \cdot \mathbf{g}(t-s) ds + \mathbf{r}(t)$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{Markov coefficient: } \Omega = \langle \mathbf{f} \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}, \\ \text{Memory function: } \Gamma(t) = \langle \mathbf{r}(t) \frac{d\mathbf{g}^*}{dt} \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}, \\ \text{Uncorrelated term: } \mathbf{r}(t) = e^{tQ\Lambda} Q \mathbf{f} \end{array} \right)$$

which has the following properties:

$$\langle \mathbf{r}(t) \frac{d\mathbf{g}^*}{dt} \rangle = \Gamma(t) \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle \quad \cdot \cdot \cdot \text{ (Extended) generalized fluctuation-dissipation theorem of the 2nd kind}$$
$$\langle \mathbf{r}(t) \mathbf{g}^* \rangle = 0 \quad \cdot \cdot \cdot \text{ Uncorrelated term } \mathbf{r}(t) \text{ has no corr. with } \mathbf{g}.$$

† This is NOT a theoretical approximation. MZ projection operator method splits a time-series data $\mathbf{f}(t)$ into correlated terms and an uncorrelated term $\mathbf{r}(t)$ with regard to the explanatory variables $\mathbf{g}(t)$.

Computation of Ω and $\Gamma(t)$ from data set

- Markov correlation Ω

The ensemble average is calculated by average over samples,

$$\langle \mathbf{f} \mathbf{g}^* \rangle = \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_{i=0}^{N_{\text{sample}}-1} \mathbf{f}^{(i)}(0) \mathbf{g}^{(i)*}(0), \text{ and then } \Omega = \langle \mathbf{f} \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}$$

- Memory function $\Gamma(t)$

Multiply $\frac{d\mathbf{g}^*}{dt} \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}$ on generalized Langevin eq. and taking ensemble average, one yields the memory equation

$$\Gamma(t) = E(t) + \int_0^t \Gamma(s) \cdot H(t-s) ds$$

where $E(t) = \left\langle [\mathbf{f}(t) - \Omega \cdot \mathbf{g}(t)] \frac{d\mathbf{g}^*}{dt} \right\rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}$ and $H(t-s) = \left\langle \mathbf{g}(t-s) \frac{d\mathbf{g}^*}{dt} \right\rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}$ are evaluated from data. One can construct $\Gamma(t)$ successively from $\Gamma(0) = E(0)$.

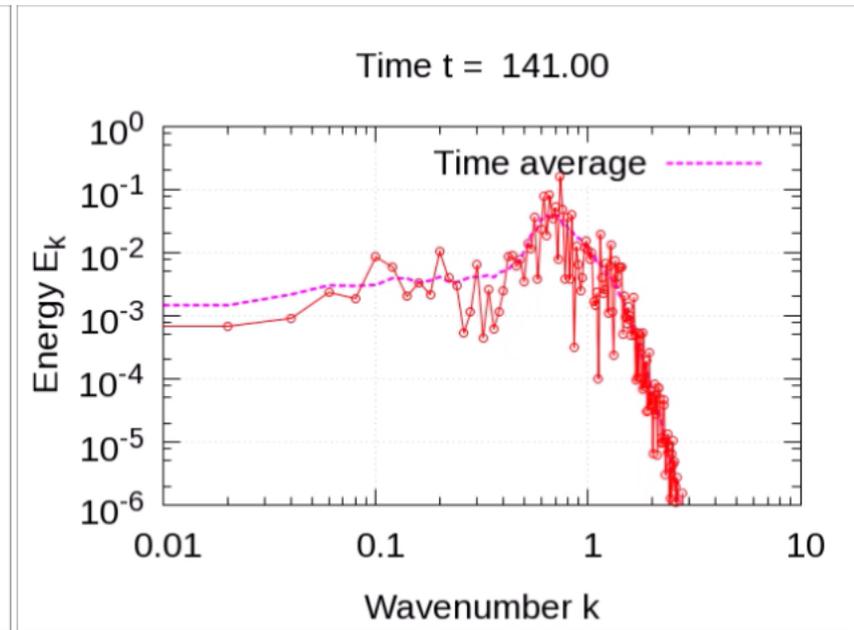
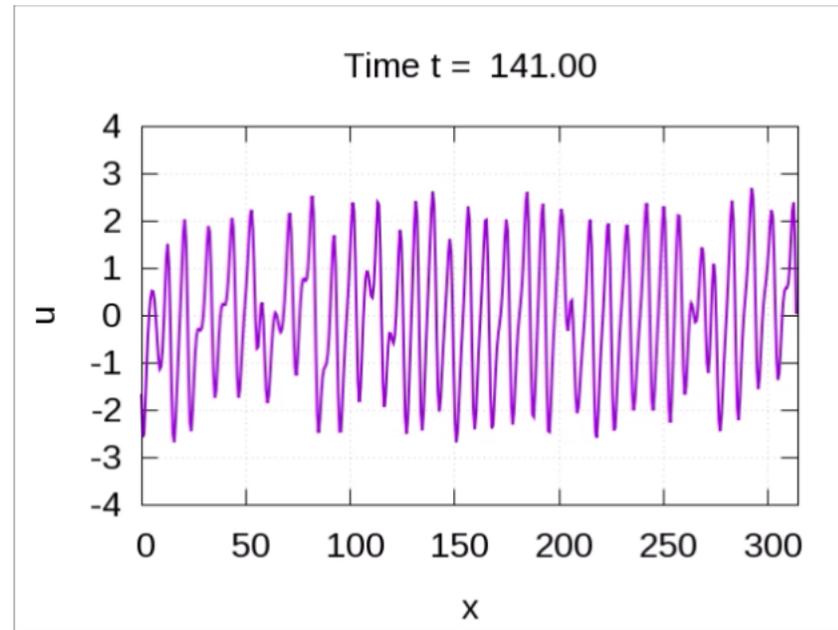
- Uncorrelated term $r(t)$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{f}(t) - \Omega \cdot \mathbf{g}(t) + \int_0^t \Gamma(s) \cdot \mathbf{g}(t-s) ds$$

Example: Kuramoto-Sivashinsky turbulence [Maeyama'20JPSJ]

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} = 0$$

A simple 1D turbulence model with small-scale instability



Procedure for the analysis

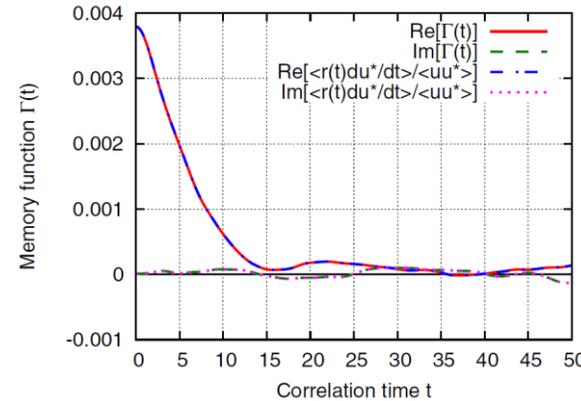
1. From K-S turbulence simulation data, evaluate time evolution of low-k fluctuation $g(t) = \bar{u}_k$ and high-k contribution term $f(t) = -\overline{[(u\partial_x u) - (\bar{u}\partial_x \bar{u})]}_k$.
2. Applying M-Z projection of high-k contribution term to low-k, $f_k(t) = \Omega_k g_k(t) - \int_0^t \Gamma_k(s) g_k(t-s) ds + r_k(t)$, extract physical information from evaluated Ω_k , $\Gamma_k(s)$ and $r_k(t)$.
3. If possible, model high-k contribution term and test reproducibility.

Example: Kuramoto-Sivashinsky turbulence [Maeyama'20JPSJ]

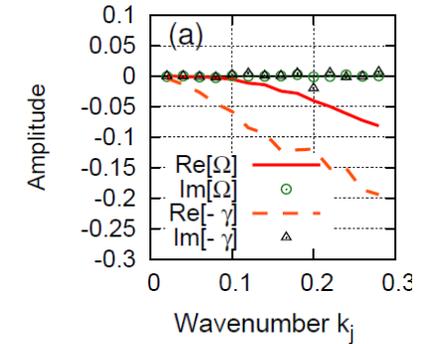
Results

- ✓ The memory term of high-k contribution has damping effects on low-k in K-S turbulence.
- ✓ Low-resolution simulation with the M-Z-based sub-grid scale (SGS) model qualitatively reproduces DNS result. The uncorrelated term is crucial for stochastic forcing of low-k fluctuation.

Memory function $\Gamma(t)$

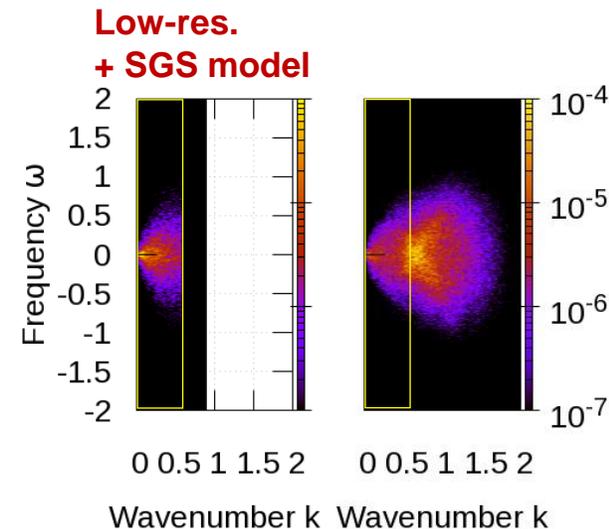
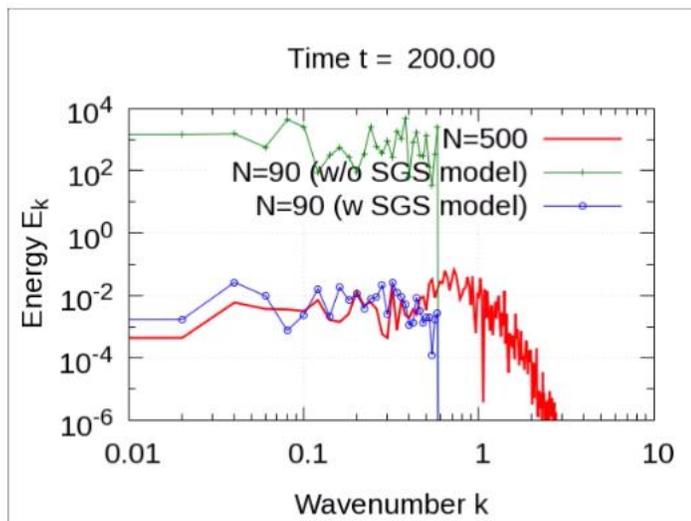


Evaluated coefficients of correlated part $\Omega_k, -\gamma_k$



Since $\frac{du_k}{dt} \approx (\Omega_k - \gamma_k)u_k + r_k$,
 $\text{Re}[\Omega_k - \gamma_k] < 0$ means damping.

Test of reproducibility by M-Z-based modeling k - ω space energy spectrum $E(k, \omega)$



オープンソースPythonパッケージ *mzprojection*

1. Download *mzprojection.py* from GitHub:

<https://github.com/smaeyama/mzprojection>

† `pip install mzprojection` or `conda install -c smaeyama mzprojection` may also work.

2. Prepare data set.

```
f[nsample,nperiod,nf] # Response variables  
g[nsample,nperiod,ng] # Explanatory variables
```

3. Import *mzprojection* module and call function.

```
from mzprojection import mzprojection_multivariate_discrete_time  
omega, memoryf = mzprojection_multivariate_discrete_time(g, f)
```

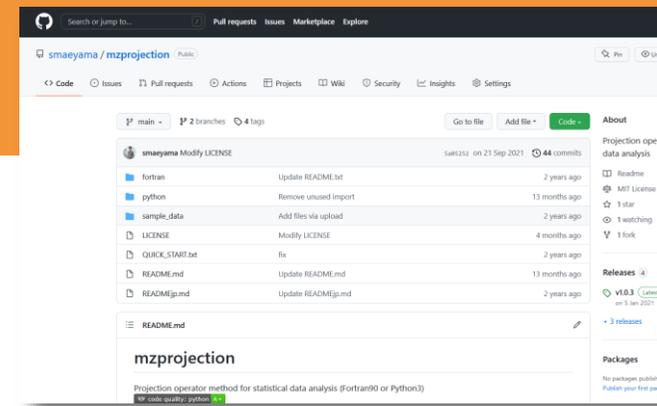
4. That's all! You get,

Markov coefficient Ω :

```
omega[nf,ng]
```

Memory function $\Gamma(t)$:

```
memoryf[nperiod,nf,ng]
```



Outline

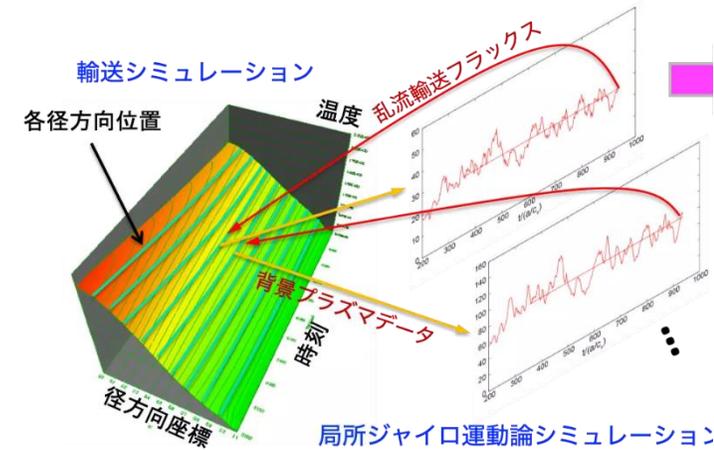
- 自己紹介 - 3 min
- 手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現 - 10 min
- 手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析 - 10 min
- **手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング - 10 min**
- まとめと議論 - 7 min

研究概要

問題

核融合炉開発では、乱流について粗視化した統合輸送コードが用いられ、その信頼性は輸送モデルに依存。
(局所プラズマパラメータ→輸送フラックスの関係が知りたい)

しかし、マルチスケール乱流シミュレーションは大規模すぎてパラメータ調査できず、ニューラルネットワークなどの代替モデル構築も難しい。



手法

着想：マルチフィデリティデータ融合手法の乱流輸送モデリングへの適用

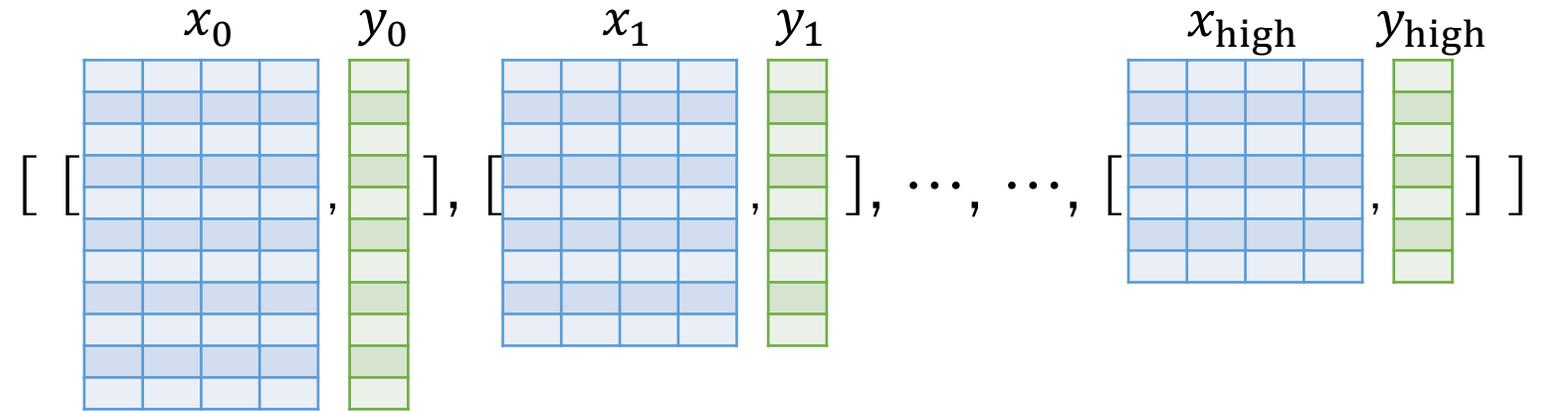
- Low-fidelity data: 低精度・多数のデータ
- High-fidelity data: 高精度・少数の限られたデータ

→ Low-high fidelityデータ間の相関を取り入れることで予測精度を改善する。

非線形自己回帰Gauss過程回帰 (NARGP) [Perdikaris (2017)]

入力 x_l と出力 y_l のデータセットが、異なるフィデリティ
($l = 0, 1, \dots$)毎にあるとする。

$$y_l = f_l(x_l)$$



- 最低次フィデリティ ($l=0$) \dots 平均0, 共分散カーネル関数 k_0 のガウス過程として表す。
- 高次フィデリティ ($l>0$) \dots $l-1$ 次の事後分布 f_{*l-1} を取り入れたガウス過程として表す。

$$f_0 \sim \text{GP}(f_0 | 0, k_0(x, x'; \theta_0))$$

$$f_l(x) = g_l(x, f_{*l-1}(x))$$

$$g_l \sim \text{GP}(f_l | 0, k_{lg}((x, f_{*l-1}(x)), (x', f_{*l-1}(x')); \theta))$$

$$k_{lg} = k_{l\rho}(x, x'; \theta_{l\rho}) k_{lf}(f_{*l-1}(x), f_{*l-1}(x'); \theta_{lf}) + k_{l\delta}(x, x'; \theta_{l\delta})$$

NARGPは、**多段のガウス過程回帰により Low-to-high fidelity データ間の非線形相関と入力 x に対する非一様性を表現**しつつ、計算コストは通常のガウス過程回帰と同オーダー。

ケース1: 1次元関数

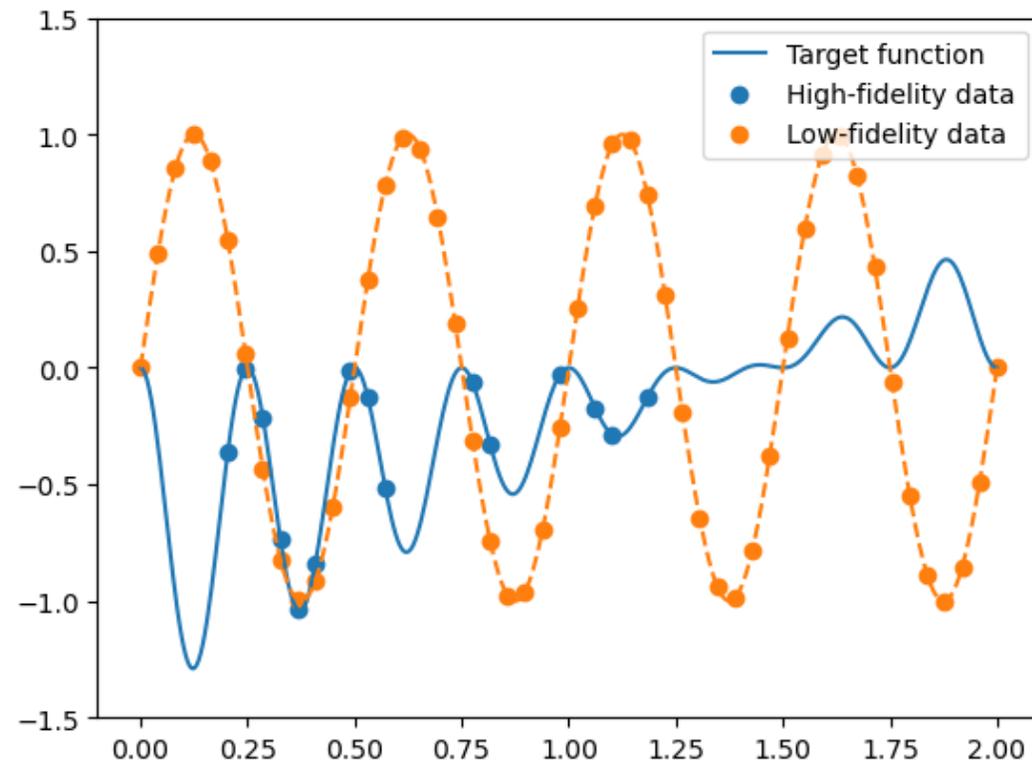
- Low-fidelity データ
正弦波, データ点数50点

$$f_l(x) = \sin(8\pi x) \quad (3.1)$$

- High-fidelity データ
Low-fidelity関数 f_l を非一様(x依存)かつ非線形(2乗)に変換。データ点数15点 (low-fidelityの50か所の評価位置xの内から15か所)

$$f_h(x) = (x - \sqrt{2}) f_l^2(x). \quad (3.2)$$

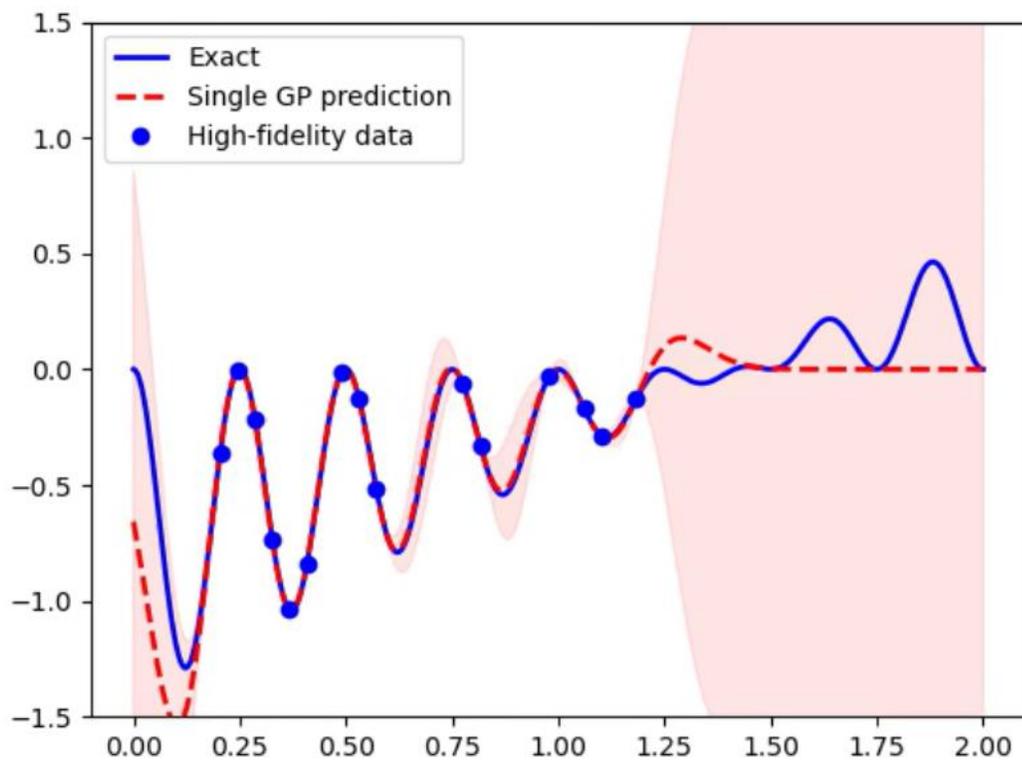
→目標は、これらのデータからなるべく正確に **High-fidelity関数** (右図青線) を推定したい。



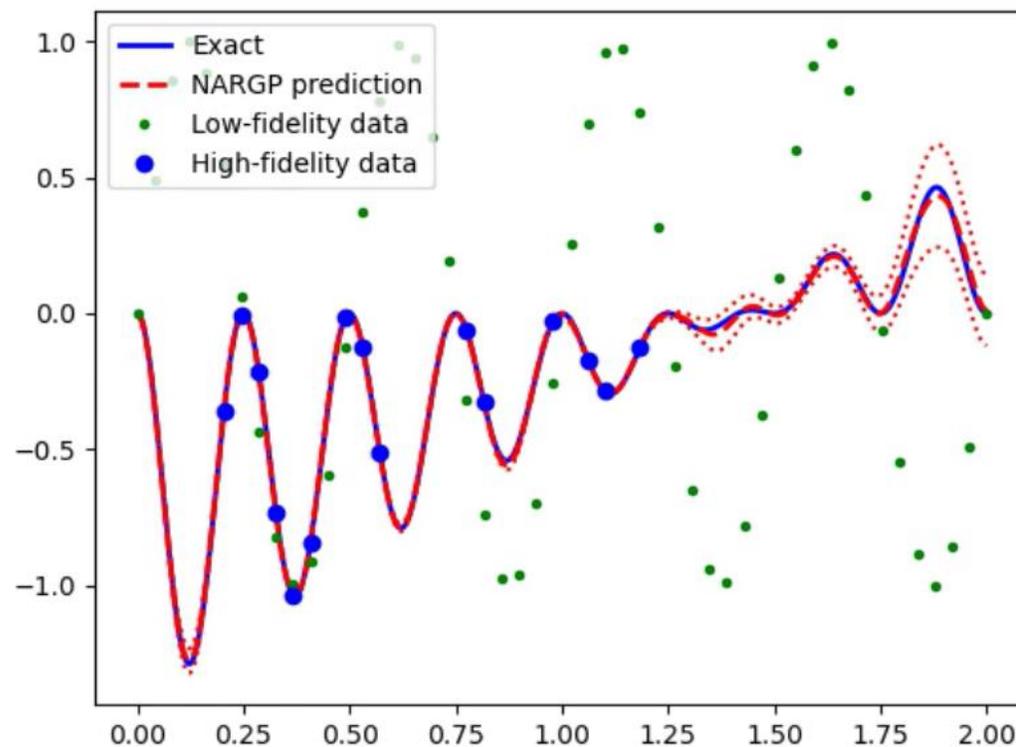
ケース1: 1次元関数

- ✓ NARGPでは低フィデリティデータと高フィデリティデータ間の相関を学習することで、通常のGauss過程回帰に比べて少ないデータ点数でも良い予測を構築。
- ✓ 加えて、分散により予測精度の指標を与える。

Single GP (通常のGauss過程回帰)



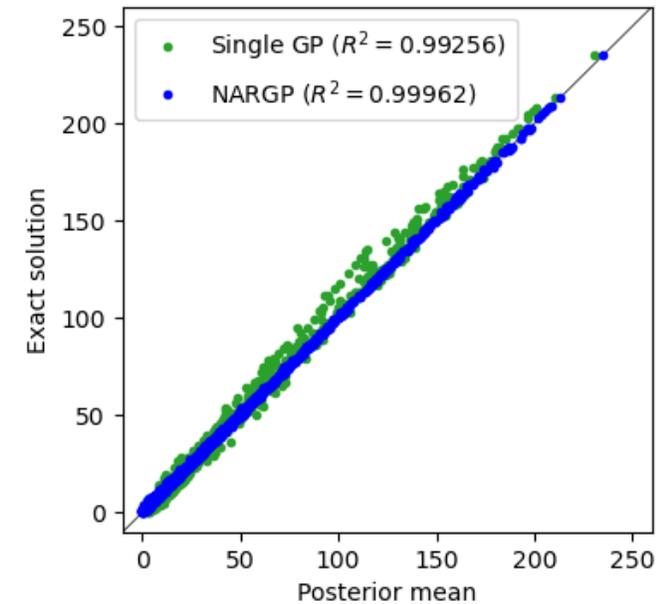
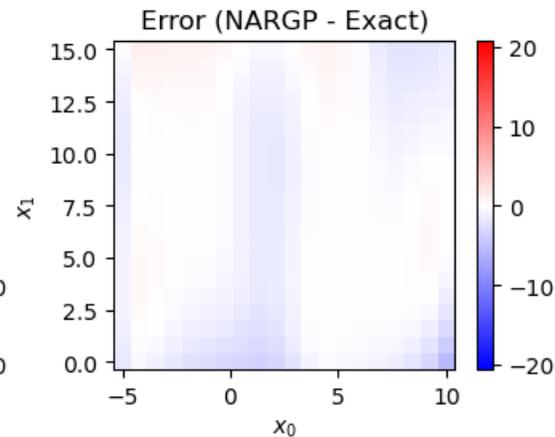
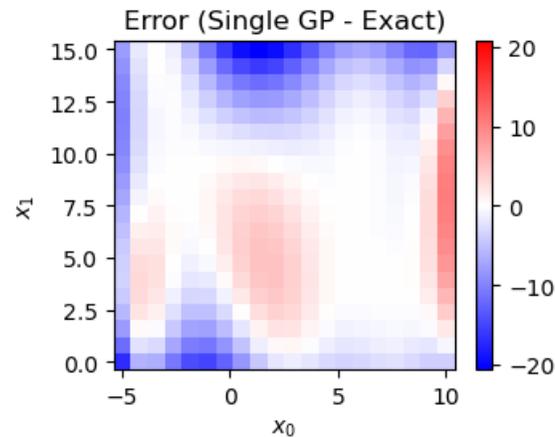
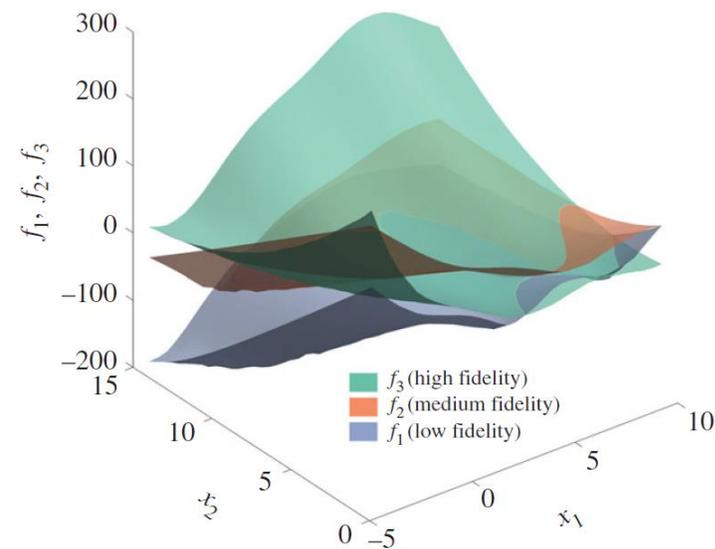
NARGPによるマルチフィデリティ回帰



ケース2: 2次元問題(Branin関数) 結果のみ

入力 x が2次元かつ、フィデリティも3段階としたテスト問題。

- ✓ 多次元・多段についてもNARGPの実装が正しく動作していることを確認。
- ✓ この例についても、通常の高ス過程回帰よりもNARGPの優位性を確認。



ケース3: プラズマ乱流輸送データ

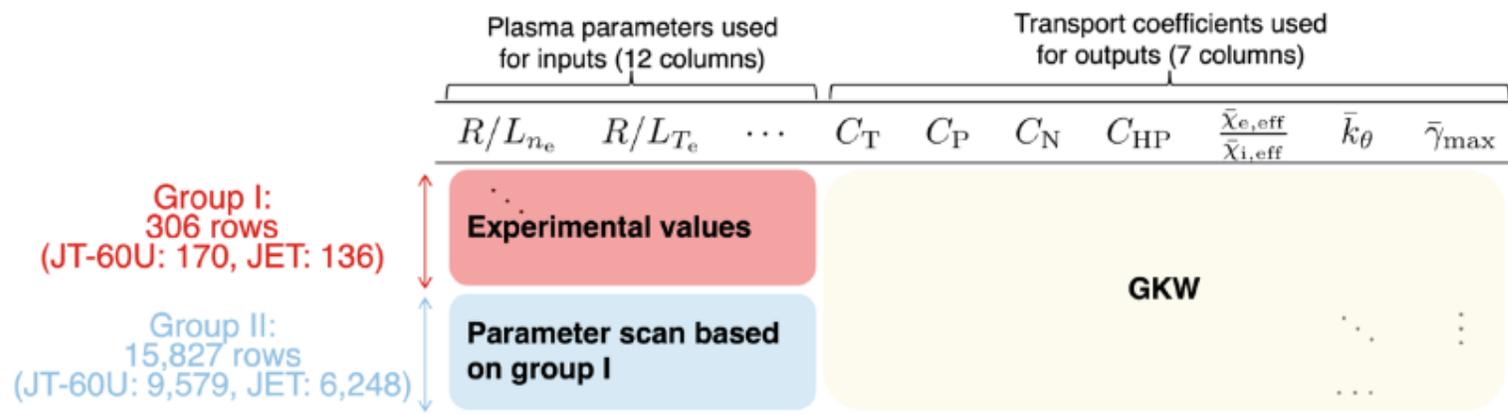
E. Narita, et al., Contrib. Plasma Phys., e202200152 (2023) のJT-60Uデータ

- 入力とする局所プラズマパラメータ(12個):
'R/Ln', 'R/LTe', 'R/LTi', 'ni/ne', 'Te/Ti', 'beta', 'nu_ee', 'q', 's', 'epsilon', 'kappa', 'delta'

- **低フィデリティデータ** (最大9749点) : 半経験的準線形拡散係数 D_{QL}

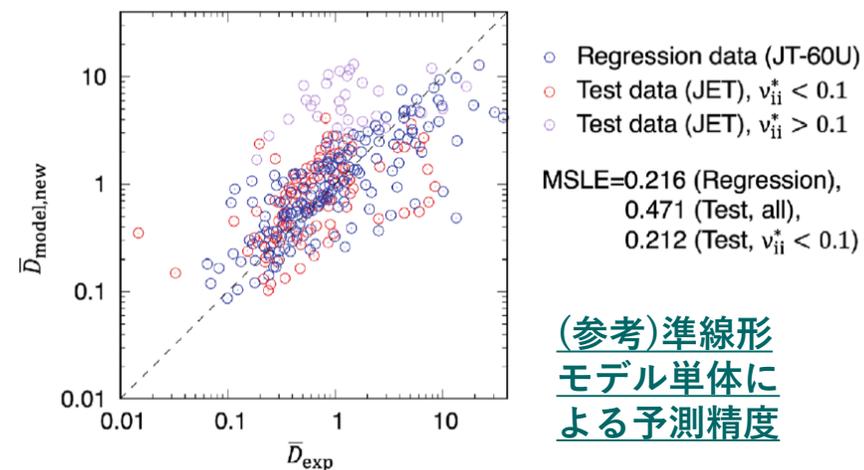
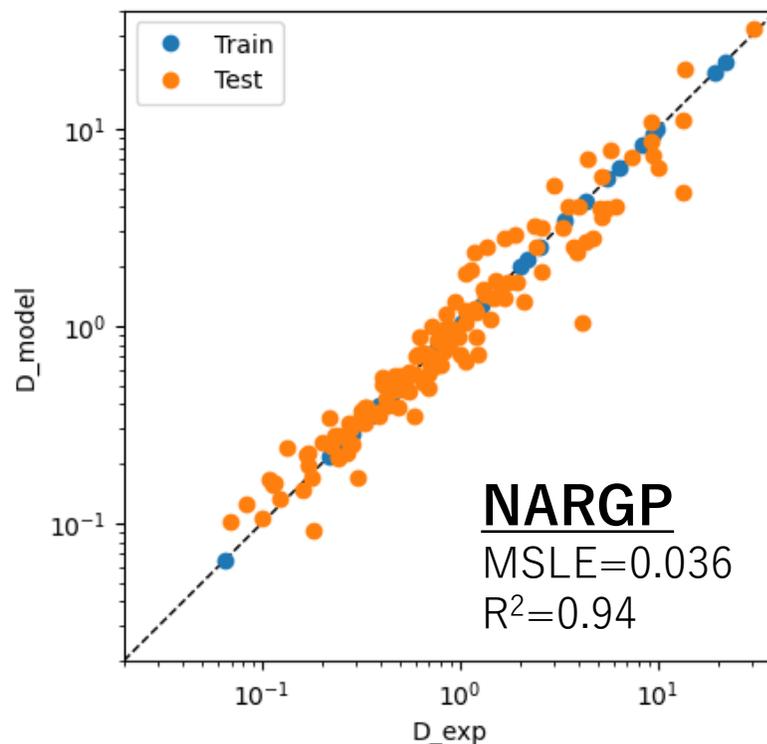
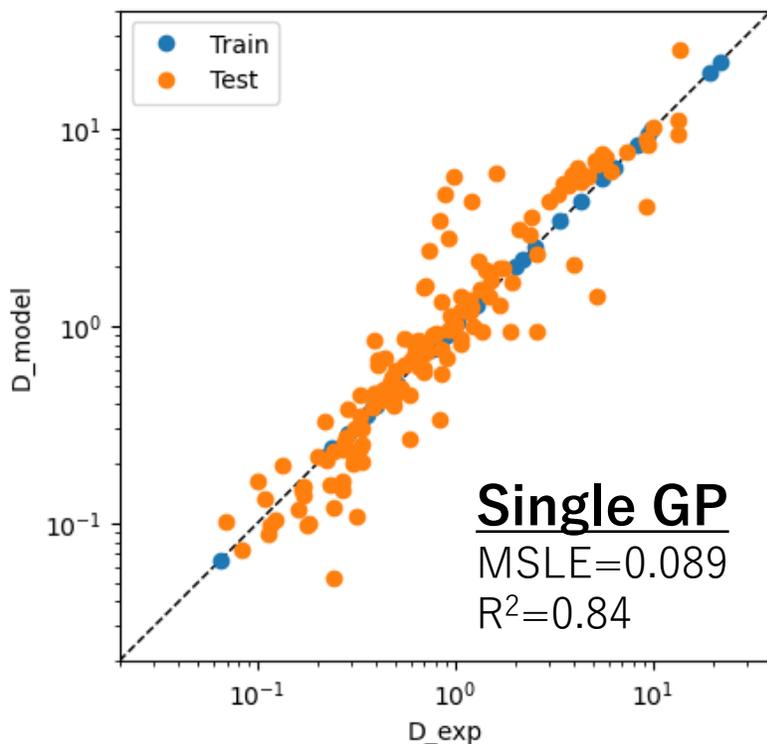
$$\bar{D}_{\text{model,new}} = 1.2261 \left(\bar{\gamma}_{\text{max}} / \bar{k}_{\theta}^2 \right)^{0.75480} \left[0.1 \bar{\tau}_r \left(\bar{\gamma}_{\text{max}} / \bar{k}_{\theta}^2 \right)^{0.5} \right]^{-1.2032} \quad (6)$$

- **高フィデリティデータ** (最大170点) : 実験値に基づく拡散係数 D_{exp}
→ 半分は学習用データとして利用し、残り半分は検証用データとして未参照で残す



ケース3: プラズマ乱流輸送データ

- ✓ **Single GP**に比べて、**NARGP**により予測精度改善。(1)プラズマパラメータと準線形拡散係数（線形成長率や揺動波数を反映）の関係を広いパラメータで学習し、(2)少数のTrainデータの範囲ながら準線形拡散係数と実験値との相関を学習しておくことで、未知のTestデータに対しても予測性が向上。



Outline

- 自己紹介 - 3 min
- 手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現 - 10 min
- 手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析 - 10 min
- 手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング - 10 min
- **まとめと議論 - 7 min**

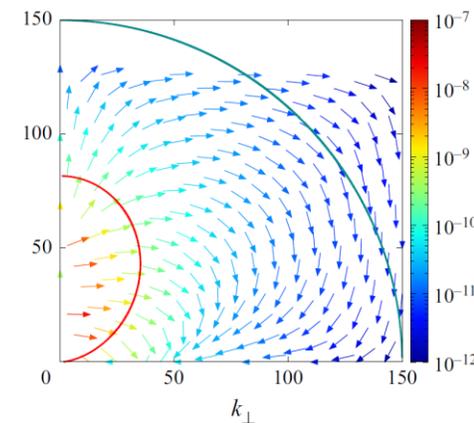
まとめと議論

手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現

- 二次の非線形性と揺らぎの直交関数展開 → 三つ組み相互作用
- 対称化の重要性。有向表現を提案。ネットワーク可視化。

他の研究とのつながり

- プラズマに限らず三つ組み相互作用の有向表現は適用可能
- **中性流体**でも1対1伝達解析の提案[Obuse, JPSJ (2020)]があるが、比較・議論を進めて手法を標準化したい[前山,流体力学学会予稿(2021)]
- **回転乱流**における局所伝達に基づく解析[Yokoyama, JFM(2021)]に対し、本手法では非等方・非局所伝達も表現可能。
- マルチフィールドSVD[Yatomi, PPCF (2023)]に対しても、対称化伝達関数の部分和をとるよりも、ネットワーク可視化や有向表現に基づいて解析することをお勧め



まとめと議論

手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析

- 時系列データ間の相関を記憶と無相関揺らぎに分離するデータ展開手法
- 解析：一般化Langevin描像としての物理的解釈を与える
- モデリング：データに基づく統計的モデリングにも応用できる

他の研究とのつながり

- **統計数理**分野で用いる自己回帰分析との類似と相違 [前山&三分一, 統計数理(2023)]
- 射影演算子法の非線形拡張[Lin (2023)]。一般化第二種揺動散逸定理の定式化や連続時間系アルゴリズムなど、**情報科学**的な理論拡張の余地。
- 射影演算子法は**分子動力学**計算のモデリングにも用いられる [Kasahara, J. Chem. Phys. (2016)]。さきがけ“複雑流動”の枠組みで、理論 \leftrightarrow データ解析の連携研究。
- プラズマ乱流のみならず、**中性流体乱流**へも適用性。



まとめと議論

手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング

- 低精度だが多数の低フィデリティデータと高精度だが少数の高フィデリティデータの相関を利用することで、全体としての予測精度の向上を図る方法論。

他の研究とのつながり

- **輸送モデリング**を行っている研究者らとデータ提供を通じて議論中。
- マルチフィデリティデータ融合は、低精度の予測を高精度の実測で較正する手法の一般化。**実験計測の較正**などのデータにも適用してみたい。
- 将来装置の性能を理論・シミュレーションで予測（低フィデリティ）する際に、既存実験（高フィデリティだが将来装置パラメータの情報を持たない）の情報を活用することで、将来性能予測を高精度化し原型炉開発に貢献。

全体のまとめ

これまでのマルチスケール乱流研究やそこでの問題意識から開発した、解析手法・モデリング手法について説明した。

手法1. 三つ組み相互作用の対称化と有向表現 [Maeyama, New J Phys. (2021)]

手法2. 射影演算子法に基づく統計的時系列データ解析 [前山&三分一, 統計数理(2023)]

手法3. マルチフィデリティデータ融合モデリング

方法論を軸として、考えたい問題のもつ（階層）構造を（メタ視点で）俯瞰することで、他分野とも共通した議論ができると期待。

オープンソースコードとして整備し公開 <https://github.com/smaeyama/>

共同研究の提案は大歓迎。