

流れ場の表現のための 混合ガウスモデルに基づいた幾何変換場

衣川 昌孝^{1,a)} 船富 卓哉¹ 藤村 友貴¹ 向川 康博¹ 佐藤 慎太郎²

概要

本稿では、流れ場の局所的な構造の時間発展を効果的に抽出する解析手法の開発を目的とし、画像上で幾何変換が滑らかに変化する幾何変換場によってモデル化する手法を提案する。既存の解析手法では、流れ場を空間的に広がった関数の重ね合わせで表現するため、渦の時間発展をはじめとする局所的で非定常的な現象の抽出には適さない。そこで本稿では、局所的な渦の構造をパラメトリックな GMM によって捉え、これを複雑な変形を表現可能な幾何変換場のモデルとして拡張し、定式化する。シミュレーションデータを用いて、提案した定式化によって渦構造の時空間的ダイナミクスを解釈性の高い形で記述できることを示す。

1. はじめに

流れ場とは、時空間的に定義される変位場の集合である。近年では、数値シミュレーション技術や実験計測の進歩によって、変位場を捉えた画像を大量に取得できるようになった。そこで、複雑に変化する流れの時系列画像から、本質的な特徴を的確に抽出する解析手法が求められている。

流れ場の特徴として、コヒーレントな渦構造が挙げられる。渦構造は乱流のあらゆる物理量輸送を支配する根幹的な物理構造であり、これを解析・抽出することは流れ場の理解において極めて重要である。しかし既存の解析手法である POD[1], [10] や DMD[8], [9] では、流れを大域的な空間構造に分解するため、渦の発展をはじめとする局所的な物理構造をモードとして捉えきれない [2]。また、特異値分解に基づいているため、空間と時間のダイナミクスが本質的に結びついた渦構造の解析には適さない [4], [5]。

そこで本研究では、流れ場を局所的な変位構造が時間発展する要素に分解する新たなアプローチを提案する。我々は [11] において、非剛体位置合わせにおける変形場のモデル化を目的に、局所的な幾何変換の場である「幾何変換場」

を導入し、従来のベクトル場よりも柔軟に変形を表現できることを示した。本研究では、この幾何変換場の枠組みを拡張し、時間とともに変化する複雑な変形場の解釈可能なモデル化を目指す。

本稿ではまず、各時刻における流れ場の空間構造をパラメトリックな表現である混合ガウスモデル (GMM) に基づいた幾何変換場 (GM-GTF) によって表現する。回転方向の流れを生成する構造である渦に着目し、これを 1 つの幾何変換のガウス分布としてモデル化し、複数の渦を持つ空間構造を GMM で捉える。次に、時空間的に渦構造が移動・変形する流れ場の時間的ダイナミクスの表現として、GMM の各パラメータの時間変化をモデル化する。

2. 混合ガウスモデルに基づいた幾何変換場

本研究では、流れ場のように時空間で変化する複雑な変形構造を表現するために、GMM を用いて幾何変換場を定式化する。以下では、まず一般的な GMM の枠組みを示し、その後、相似変換 $\text{Sim}(2)$ の合成に基づく幾何変換場への拡張について述べる。

2.1 GMM の定式化

GMM は K 個のガウス成分を混合した確率モデルとして観測データ $\mathbf{x}$ の分布を表現する。

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k), \quad \pi_k \geq 0, \quad \sum_{k=1}^K \pi_k = 1 \quad (1)$$

ここで、 π_k は各ガウス成分の混合比、 $\boldsymbol{\mu}_k$ は平均ベクトル、 $\boldsymbol{\Sigma}_k$ は共分散行列である。GMM のパラメータ集合 $\{\pi_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}_{k=1}^K$ は、典型的には EM (Expectation-Maximization) アルゴリズムによって推定できる。

2.2 GM-GTF の定式化

幾何変換場とは、時空間中の各点で幾何変換が定義されるような場 $y(\mathbf{x}, t) \in \text{Sim}(2)$ である。 K 個の幾何変換 $\{c_k\}$ を考え、それぞれが $\mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k(t), \boldsymbol{\Sigma}_k(t))$ に従って時空間的に分布していると考え、これらの変換を合成すること

¹ 奈良先端科学技術大学院大学

² 東北大学

^{a)} kinugawa.masataka.kq1@naist.ac.jp

で、全体の幾何変換場をモデル化する。

GMM パラメータ $\{\pi_k, \mu_k(t), \Sigma_k(t)\}$ を用いて各変換の重みを以下の形で与える。

$$w_k(\mathbf{x}, t) = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mu_k(t), \Sigma_k(t)) \quad (2)$$

これらの重みで幾何変換を合成して場を記述する。本稿で扱う相似変換 Sim(2) を含め、幾何変換は Lie 群と呼ばれ、加法で閉じていない。そのため、GMM で用いられている線型結合の定式化をそのまま使っては幾何変換の合成を表現できない。そこで、Lie 群がなす積の演算体系で定式化する。

既存研究 [11] では、幾何変換の合成として指数重心 [6] を採用している。これは、比較的類似した幾何変換の重み付き合成には適しているが、多様な幾何変換の合成には適していない。そのため本研究では、従来の指数重心ではなく、乗算による合成を行う。

幾何変換を乗算で合成する場合、Lie 群が持つ非可換性が問題となりうる。乗算する順序によって合成結果が異なるが、モデル化に適切な順序は自明ではなく、全ての順列パターンを考慮すると組み合わせ爆発の問題が生じる。

本研究では、局所的な変換が右から作用するよう、各分布の混合比 π_k に基づいて順序を決定することとした。流れ場のような局所的な構造を扱う場合、各幾何変換の成分は対応する分布の中心 μ_k から十分に離れた領域ではほぼ恒等変換となるため、実際の影響は限定的であると考えられる。厳密には、非可換性に起因する幾何変換の差異は Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) 公式により評価することができるが、これは今後の課題とする。

以上に基つき、幾何変換場 $y(\mathbf{x})$ を以下のように定式化する。

$$y(\mathbf{x}, t) = (c_1(t))^{w_1(\mathbf{x}, t)} \cdot (c_2(t))^{w_2(\mathbf{x}, t)} \cdots (c_K(t))^{w_K(\mathbf{x}, t)} \quad (3)$$

ここで、 $w_k(\mathbf{x}, t) = \frac{w_k(\mathbf{x}, t)}{w_k(\mu_k(t), t)}$ であり、最大値が 1 となるよう正規化したものである。また、幾何変換のべき乗は、Sim(2) の指数写像 Exp と対数写像 Log を用い、以下のよう計算した。

$$c_k^\alpha \equiv \exp(\alpha \text{Log}(c_k))$$

2.3 最適化によるパラメータ推定

GMM は解析的に解けないため、各種パラメータを最適化によって解く。本手法は、時空間的に構造が移動・変形する流れ場の時間的ダイナミクスの表現として、GMM の各パラメータの時間変化をモデル化する。

時刻 $t-1$ の幾何変換場として、パラメータ $\{\mu_k(t-1), \Sigma_k(t-1), c_k(t-1)\}$ が得られているとする。

これらを初期値として、時刻 t の速度場 $\mathbf{u}_{\text{obs}}(\mathbf{x}, t)$ に合

うよう、時刻 t のパラメータ $\{\mu_k(t), \Sigma_k(t), c_k(t)\}$ を最適化する。最適化に用いる誤差関数は、各座標 $(\mathbf{x}, t)$ において、式 (3) で得られる変換 $y(\mathbf{x}, t)$ によって写される座標と、変位による移動先の座標との二乗誤差を損失関数とする。

$$\mathcal{L} = \sum_{\mathbf{x}} \|y(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{x} - (\mathbf{x} + \mathbf{u}_{\text{obs}}(\mathbf{x}, t))\|^2 \quad (4)$$

式 (4) を最小化するように、初期フレーム $t = t_0$ のパラメータ $\{\mu_k(t_0), \Sigma_k(t_0), c_k(t_0)\}$ を反復的に更新し、 $y(\mathbf{x}, t)$ を求める。

2.4 実装

最適化において、今回は勾配法を用いた。計算はすべて PyTorch によって実装し、勾配は PyTorch の自動微分機能を利用して求めた。勾配法のアルゴリズムとしては PyTorch に実装されている Adam を用い、幾何変換場を推定するための $w(\mathbf{x}, t)$ における初期値として、後述する渦度場と GMM によって算出される重みを活用する。各時刻において 500 回の繰り返し処理によって各パラメータを最適化した。

3. 実験

本章では、上述したモデルを実際の流れ場データに適用し、混合ガウスモデルに基づいた幾何変換場の有効性について評価を行う。

3.1 流れ場のデータ

本研究では、Heated Cylinder with Boussinesq Approximation[3], [7] のシミュレーションデータを用いた。このデータは、加熱された円柱まわりに形成される 2 次元の非定常な流れ場を対象としており、複数の渦構造が形成され移動していく様子が得られている。この流れ場の時系列変化を図 1(a) に示す。なお本実験では、円柱後方で渦が複雑に絡み合った乱流状態となっている (100,100) の画像領域に限定し、観測された 500 から 599 の 100 ステップで流れ場が変化する様子を対象とした。

3.2 渦度場からの初期値の推定

本研究では渦の形状がガウシアンであるとしてモデル化する。そこで、画像上で観測される速度場から算出される渦度場を用いた。時系列の 2 次元流れ場を

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0) = (u(x, y, t_0), v(x, y, t_0)) \quad (5)$$

とすると、渦度場 $\omega(\mathbf{x}, t_0)$ は

$$\omega(\mathbf{x}, t_0) = \frac{\partial v}{\partial x}(x, y, t_0) - \frac{\partial u}{\partial y}(x, y, t_0), \quad (6)$$

により算出される。 $t_0 = 500$ での速度場と絶対値をとった渦度場をそれぞれ図 2(a)(b) に示す。

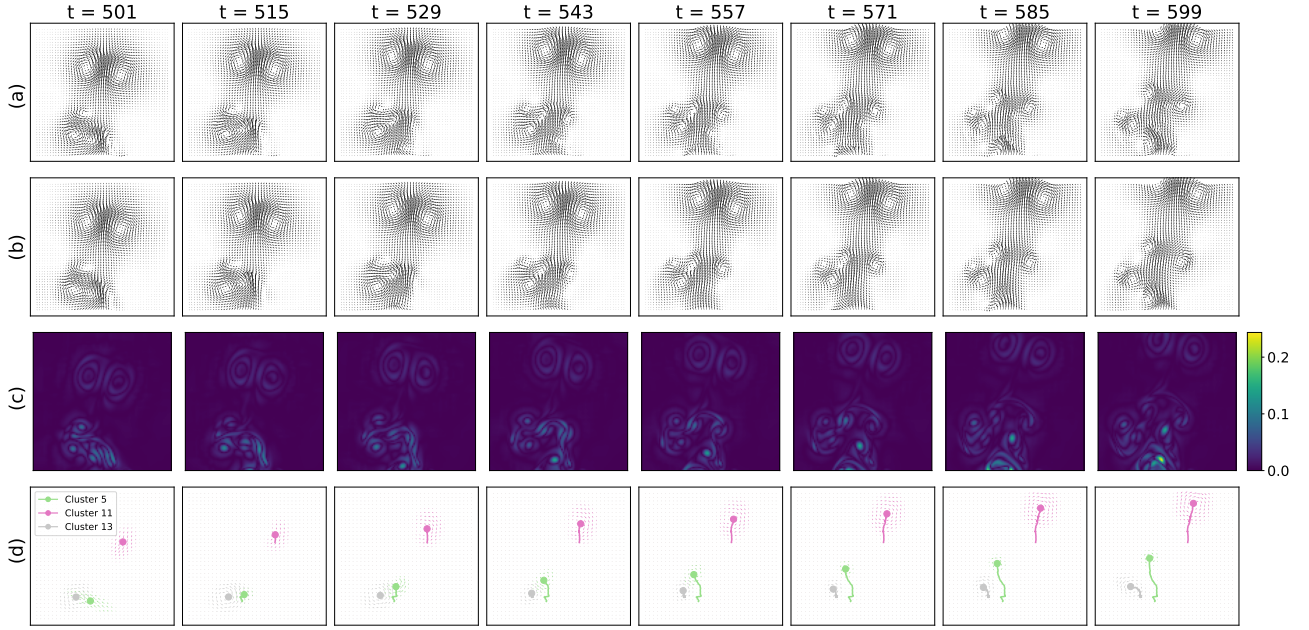


図 1 解析対象とした流れ場の時間変化と提案手法による解析結果. (a) 速度場の時間変化, (b)GM-GTF によって再構成した速度場の時間変化, (c) 差分ベクトル場から計算した渦度場, (d) いくつかのガウス成分に対応する幾何変換場.

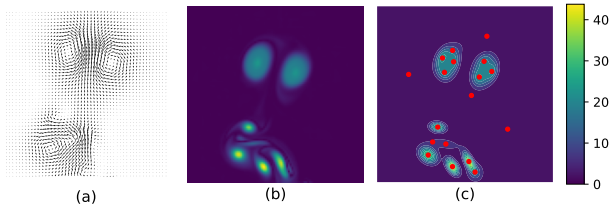


図 2 (a) $t_0 = 500$ での速度場と, (b) 絶対値をとった渦度場. (c) GMM をフィッティングした結果.

渦度 $\omega(\mathbf{x}, t_0)$ の絶対値を正規化することで確率質量とみなし, その確率分布に従って取得したサンプル点群 $\{\mathbf{x}_i\}$ を入力として, 式 (1) で表された GMM をフィッティングした. 各画素における渦度の確率質量に従うように, 100,000 点のランダムサンプリングを実行した. GMM のフィッティング結果を図 2(c) に示す. 各ガウス成分が渦の中心や広がりをつまえていることがわかる. なお, クラスタ数の決定においては, 全てのクラスタ数における BIC の値が最も低かった $K = 18$ を採用した.

3.3 POD による解析結果

提案手法との比較として, 流れ場の一般的な解析手法である POD を適用し, 分解されたモードの時間変化の結果を図 3 に示す. ここで, 時間係数が正の場合は赤色, 負の場合は青色にして表示している. POD のモードによる流れの表現では, 空間的に固定されたベクトルのスカラー係数が時間的に変化するのみであることが図からも確認できる. この分解手法では渦の空間構造が時間的に変化してい

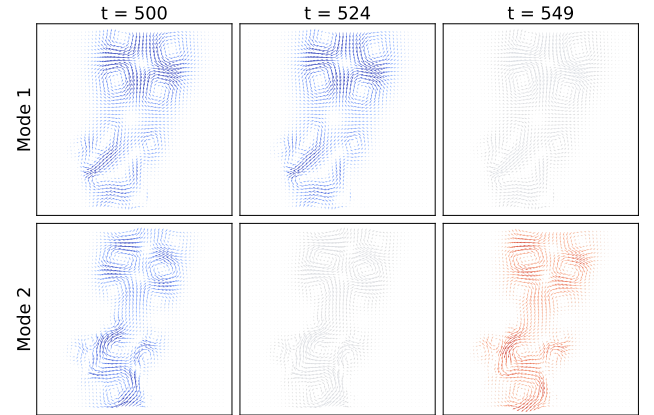


図 3 各 POD モードの時間変化

く様子を捉えることが難しいことがわかる.

3.4 GM-GTF による解析結果

幾何変換場による速度場の再構成

式 (3),(4) に基づいて, パラメータ $\{\mu_k(t), \Sigma_k(t), c_k(t)\}$ を最適化し, 幾何変換場を再構成した. 図 1(a) に示した速度場 $\mathbf{u}_{\text{obs}}(\mathbf{x}, t)$ に対し, 再構成した幾何変換場をベクトル場に変換したもの $(y(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{x})$ を (b) に示す.

また, これらの差分ベクトル場から計算した渦度場を (c) に示す. なお, 図 2(b) に示した t_0 における渦度場と比較できるように, 渦度に対するスケールは揃えてある. 画像下部の流れが比較的複雑な領域では差分が少し大きくなっているものの, 元々の渦度場に比べると精度よく再構成でき

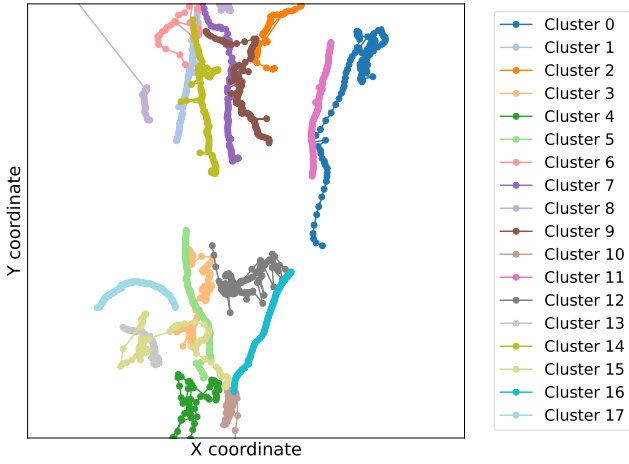


図 4 抽出されたガウシアン中心の軌跡

ていることがわかる。

18 個のガウス成分を用いた幾何変換場によって再構成した流れ場の定量的な評価として、時間全体での MSE を算出したところ、 4.97×10^{-4} であった。この値は、POD で 4 つのモードを用いた場合の再構成精度と比べても悪く、表現の効率性という観点からは劣ることが分かる。

抽出された個々の幾何変換の可視化

次に、提案手法による解析結果として、GMM を構成する各ガウシアンと、それに対応付けられた幾何変換について、可視化を行う。

まず、流れ場の時間変化として、GM-GTF を構成するパラメータのうち、各ガウシアン中心点に相当する $\{\mu_k(t)\}$ の軌跡を図 4 に示す。解析対象とした速度場 (図 1(a)) から、図の下部から上部への流れが見て取れるが、この流れを表すように、各ガウシアンが上方へと移動している軌跡が見て取れる。なお、 t_0 におけるガウシアンのパラメータ $\{\mu_k, \Sigma_k\}$ は、渦度場に対して GMM で求めた初期値とは異なるものであった。これは、渦度場と幾何変換場が等価なものではなく、少し異なるものを表現していることを示唆している。

次に、個々のガウシアンに対応付けられた幾何変換の可視化として、式 (3) の $(c_k(t))^{w_k(\mathbf{x}, t)}$ の可視化を行った。 $k = 5, 11, 13$ に対応する幾何変換場の時系列での変化を図 1(d) に示す。図示した 3 つのガウシアンはそれぞれ、図 4 における各ガウシアン移動と一致する。時刻が進むにつれて局所的な回転を表す幾何変換場が移動していくことが見て取れる。

これらの結果と、図 1(d) における特徴的な渦の移動を見比べると、最適化されたガウシアンと幾何変換がそれぞれ渦形状と渦から発生する変位場と対応関係があることがわかる。これらの結果は、最適化によって渦度場の形状を幾何変換場の重みであるガウス成分で捉え、渦を形成する流れを幾何変換場で表現できていると解釈できる。

以上をまとめると、再構成精度を定量評価した結果から、

表現の効率性という観点では提案手法は POD に劣る。一方、提案手法は局所的な変位構造が時間発展する要素に分解することができ、POD による流れの分解 (図 3) よりも移流という時空間的ダイナミクスを良く反映できている。そのため、複雑な渦構造の解析に向けた直感的解釈性という観点においては、提案手法に優位性があると考えられる。

今後の課題

本提案手法は、最初のタイムステップで算出した渦構造を基に逐次最適化を行う。そのためタイムステップが進行するにつれて領域外から新たに現れた渦構造に対しては、適切な重みによる構造の追跡ができないことが課題である。今後は時系列全体で最適化することが望まれる。

また、いくつかのガウシアンに対応する幾何変換 c_k は、回転成分を持たずほぼ並進成分となり、対応する幾何変換場 $(c_k(t))^{w_k(\mathbf{x}, t)}$ も局所的で直線的な動きのみを表現しているものもあった。流れは渦から発生する回転方向の流れと、並進方向の定常的な流れの 2 つに分解されるが、これは定常的な流れの成分を表していると考えられる。現在は、回転を表す渦度場に対する GMM のフィッティング結果を基に初期値を推定しており、この手法は回転方向の流れに対応する成分の推定には適しているが、並進方向の定常的な流れは渦度場には現れず、この成分を抽出することができない。これはモデル自体の表現能力の問題であり、定常的な流れ自体をガウシアンで表現すること自体の是非についても議論が必要である。

4. まとめ

本研究では、流れ場の時空間的な変化を解析するために、幾何変換場を用いた新たな手法を提案した。従来の変位ベクトル場を用いた手法では、流れ場の大域的な構造と局所的な変位パターンを統一的に扱うことが難しかったのに対し、本手法では幾何変換場を導入することで、流れ場をより直感的に解釈可能な形式で表現し、流れ場の時間的ダイナミクスを効果的に記述できることを示した。

また、Lie 群の演算体系を考慮した定式化を導入することで、流れ場の幾何学的な性質をより忠実に表現する枠組みを構築した。渦をはじめとする流れ場の特徴的な構造をガウス成分の組み合わせとしてモデル化し、時系列変化の解析を可能とした。本手法を流体シミュレーションデータに適用した結果、従来の POD などの線形分解法では捉えにくい流れ場の局所的な変位構造を、高い精度で再現できることが確認された。

謝辞

本研究の一部は JST さきがけ JPMJPR2025, JST ムーンショット型研究開発事業 JPMJMS2389 の支援を受けた。

参考文献

- [1] Chatterjee, A.: An introduction to the proper orthogonal decomposition, *Current science*, pp. 808–817 (2000).
- [2] Farge, M.: The evolution of turbulence theories and the need for continuous wavelets (2024).
- [3] Günther, T., Gross, M. and Theisel, H.: Generic Objective Vortices for Flow Visualization, *ACM Transactions on Graphics (Proc. SIGGRAPH)*, Vol. 36, No. 4, pp. 141:1–141:11 (2017).
- [4] Lu, H. and Tartakovsky, D. M.: Lagrangian dynamic mode decomposition for construction of reduced-order models of advection-dominated phenomena, *Journal of Computational Physics*, Vol. 407, p. 109229 (2020).
- [5] Mendible, A., Brunton, S. L., Aravkin, A. Y., Lowrie, W. and Kutz, J. N.: Dimensionality reduction and reduced-order modeling for traveling wave physics, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, Vol. 34, No. 4, p. 385–400 (2020).
- [6] Pennek, X. and Arsigny, V.: *Exponential Barycenters of the Canonical Cartan Connection and Invariant Means on Lie Groups*, pp. 123–166, Springer Berlin Heidelberg (2013).
- [7] Popinet, S.: Free Computational Fluid Dynamics, *ClusterWorld*, Vol. 2, No. 6 (2004).
- [8] Schmid, P. J.: Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, *Journal of fluid mechanics*, Vol. 656, pp. 5–28 (2010).
- [9] Tu, J. H.: Dynamic mode decomposition: Theory and applications, PhD Thesis, Princeton University (2013).
- [10] Weiss, J.: A tutorial on the proper orthogonal decomposition, *AIAA aviation 2019 forum*, p. 3333 (2019).
- [11] 船富卓哉, 山田重人, 藤村友貴, 櫛田貴弘, 向川康博: 幾何変換の合成に基づく変形場のスパースモデリング, 第 25 回画像の認識・理解シンポジウム (MIRU2022) (2022).