公開

（事後評価・研究者用）

研 究 報 告 書

「連続型数理モデル構築のための確率的アルゴリズムの整備」

研究期間: 2018 年 10 月～2020 年 3 月
研究者番号: 50188
研 究 者: 宮武 勇登

1. 研究のねらい

現象から数理モデルを構築し，現象に対する理解を深め，さらに予測を行うことは，現代の科学や産業を支える根幹技術の一つである．特に，数理モデルとして微分方程式を扱う場合，観測データなどから微分方程式のパラメータ推定を行う必要が生じる．この際，データと微分方程式の解が何らかの意味でよく当てはまるパラメータを求めることになるが，微分方程式の厳密解は一般に手に入らないため数値解で代用せざるを得ない．しかし，数値解の精度が十分でない場合，数値解の誤差(=数値解と厳密解の差)により推定結果に大きなバイアスが入りうる．これまで，数値解析学の文脈で二世紀近くにわたって様々な数値解法が提案されてきたが，扱う問題の大規模性や計算機環境の制約などから，現代でも，十分な精度の数値解を得られないことも多い．従って，推定の文脈において，微分方程式に対する数値解の誤差を扱う手法や理論の構築が期待される．

そのために本研究では，近年，欧米の統計学や機械学習の分野を中心に研究が進められている確率的数値解法に着目した．そのうえで，数値解の誤差を高速に定量的に評価する手法を開発することで，より精度の高い推定を行い、さらに推定精度自体を評価する枠組みを構築することを目的としていた．

2. 研究成果

（1）概要

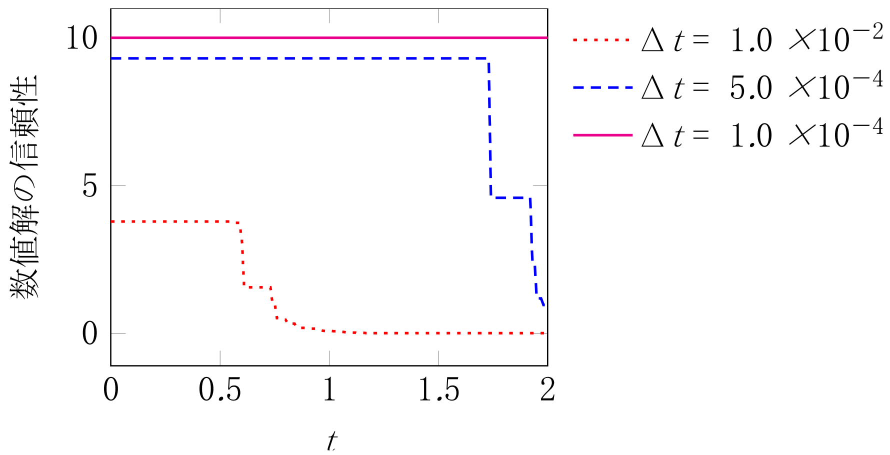
当初のねらいの通り，数値解の誤差を高速に定量的に評価する手法の開発を目指して研究を行った．研究計画に沿って確率的数値解法に着目をして研究を進めていたが，この方法では微分方程式を何度も(場合によっては数百～数万回程度)繰り返し数値計算する必要があった．そもそも，本研究は，現実的な計算時間で十分な精度の数値解が得られない状況を想定したものであり，その誤差を定量化するために追加で多くのコストをかけることは，副次的に得られる知見はあるにせよ，必ずしも好ましくはない．本研究の主な成果は，確率的数値解法の文脈における近年の研究に着想を得つつも，微分方程式を何度も繰り返し数値計算することを必要とせずに，数値解の誤差を定量化する手法を開発したことにある．手法のアイデアは，数値解の誤差を確率変数とみなし，その分散をデータと数値解を用いて推定するというものであり，この分散の推定は非常に高速に行うことができる．この手法をパラメータ推定に組み込むことで，いくつかの問題では推定精度が向上することが確認され，さらに推定精度自体も評価できることが期待される．

（2）詳細

(A) 数値解の誤差を定量的に評価する手法の開発

微分方程式の時間発展を計算する際の各時刻での数値解の誤差を確率変数とみなし，その分散を数値解とデータから推定することで，誤差を定量的に評価する手法を開発した．以下，この手法の特徴を述べる．

- 上述の通り，近年欧米の統計学や機械学習の研究者を中心に研究が進められている確率的数値解法は，摂動を加えながら微分方程式を何度も数値計算することで誤差を見積もるものである．場合によっては，数百から数万回程度の数値計算が必要であり，これらは原理的には並列に実行できるとはいえ，計算時間や計算機リソースのコストは大きい．これに対して，提案手法では微分方程式の数値計算は原則一回でよいため，相対的に非常に低コストな手法となっている．
- 数値解の誤差を定量化できることを言い換えれば，データのノイズとの比較で，数値解の信頼性を定量的に評価できるといえる．一般に，微分方程式の数値解の誤差は時間発展とともに蓄積されていくものであるから，数値解の信頼性は時間発展とともに低下する．以下の図は，Lorenz 方程式を異なる刻み幅を用いて数値計算した結果に対して提案手法で求めた信頼性を表したものである（第一成分の結果のみ示す）．相対的に大きな刻み幅（$\Delta t = 1.0\times10^{-2}$）を用いたときは，数値計算も粗く，時間発展とともに信頼性が低下していることが分かる．一方で，より小さい刻み幅（$\Delta t = 1.0\times10^{-4}$）を用いたときは，時間幅全体を通してほぼ一定値であり，これは，データのノイズに対して数値解が十分正確であることを意味する．



- この手法をパラメータ推定に取り込んだときには，「数値解 ＝ 厳密解」とみなす従来の推定と比較して，計算コストの増加がほぼゼロで推定精度を向上させることが期待できる．さらに，小さい刻み幅（$\Delta t = 1.0\times10^{-4}$）のときの結果から，このような場合には，これ以上コストをかけて高解像度な数値計算をしても，推定精度の向上には寄与しないことも分かる．従って，微分方程式の数値解の精度が不十分な場合への貢献のみならず，十分な精度の数値計算が可能な場合においても，推定精度に影響を及ぼさない範囲で粗く数値計算することを可能にし，例えば，電力消費の削減などにも役立つと期待される．

なお，以上の研究は，統計学の専門家である東京大学大学院情報理工学系研究科助教

松田孟留氏と共同で行った.

(B) 目的関数の勾配の計算手法の開発

一般に, 微分方程式のパラメータ推定を行う際には, パラメータに依存する数値解を用いて定義された関数の最小化問題を解くことになる. (A)で開発した手法は, 主にこの目的関数の設定に関わるものである. 提案手法を使う場合でも使わない場合でも, いずれにせよ何らかの最小化問題を解くことになるが, この際, Newton 法のような手法を利用するならば, 目的関数の勾配(微分の情報)を計算する必要が生じる. しかし, 一般に目的関数はパラメータの関数として陽的な表現を持たないため, その計算は自明ではなく, 近似計算されることも多い. これに対して本研究では, 比較的低コストで目的関数の勾配を厳密に計算する手法を開発した. この手法は, データ同化など物理的背景を持つ問題だけでなく, 深層学習の文脈で必須の back propagation をサブクラスとして含んでおり, 今後, 様々な分野への応用が期待できる.

なお, 以上の研究は, 上述の松田氏に加え, データ同化の専門家である東京大学地震研究所助教 伊藤伸一氏と共同で行った.

3. 今後の展開

今後もしばらくはパラメータ推定に焦点を当てて研究を行う予定だが, 多くの応用では, 推定の先には予測を行うフェーズがある. そこで, 予測結果に対しても, 数値解の誤差の影響を定量化することで適切な信頼性評価を行い, また, 予測精度向上に繋げることを目指したい. 予測のフェーズでは, パラメータ推定のフェーズと比較して「データを使えない」という本質的な違いがある. これを解決するためには新たなブレークスルーが必要であるが, 上述の確率的数値解法の研究者の中には, データを用いない定量化手法の開発を目指しているものもおり, 意見交換や共同研究を進めていきたい. そのうえで, 将来的には, 気象学や地震学など微分方程式を用いるほぼ全ての数理モデリング分野(深層学習など情報学分野も含む)への貢献を狙いたい. 現時点では理論的研究が中心であり, 直ちに応用諸分野の未解決問題を解決するようなインパクトはないかもしれないが, 予測に関してより適切な信頼性評価ができれば, 現象をよく理解し, さらに社会的な課題に対しては適切な意思決定を行うことにも繋がると期待する. また, 本研究は, 十分な精度の数値解が得られない局面を想定したものだが, 十分な離散化の精度が期待できる状況においても, 精度が十分であることを高速に確認できるうえ, さらに全体の不確実性が増大しない範囲で適切な離散化手法を選択できれば, むやみに高精度な離散化を行う必要がなくなり, 計算コストの削減が期待できる. これは, 特に大型計算機などを利用する際の電力消費量の大幅な削減にも繋がる可能性が高い. さらに見方を変えれば, データの取得も高コストであることが多く, 限られた計算機環境や予算の中でどのようなデータを取れば最も有用に活用することができるか, という問いへの答にも繋がると期待している.

4. 自己評価

研究目的の達成状況:

当初は，可能ならば予測のフェーズまでも視野にいれて研究を行う予定であったが，ACT-I の研究期間では主にパラメータ推定のフェーズに特化して研究を行った．しかし，新しいアイデアに基づいた研究成果が得られ，それだけでなく，派生して広く応用可能な研究成果も得られていることから，概ね順調に研究が進められたと考えている．

研究の進め方:

理論的研究が中心であり，上述の松田氏・伊藤氏（東大）と頻繁に議論しながら研究を進めた．また，将来的な波及効果を見据え，国内外の様々な分野の研究集会などで講演を行ったり，自らがオーガナイザーとなり国際会議でミニシンポジウムの開催を行ったりした．研究費の多くを旅費に使用したが，このような事情から使途は妥当であったと考える．

一方で，課題としては小規模な問題でしか提案手法を検証できていないことが挙げられる．加速フェーズでは，理論的研究に加えて，大規模な問題に対しても提案手法を実装して検証していきたい．

研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果:

本研究は，数値解析学と統計学の融合によって，パラメータ推定における不確実性を定量化するための第一歩であり，現時点では，多くの数理モデリング分野への新しい貢献の形が見え始めた段階である．今後も理論・応用両面からの研究をすすめることによって一層の発展が期待される．また，直接の共同研究にはつながっていないものの，ACT-I の研究を通して様々な分野の研究者と交流することができ，上述の研究成果(B)はこのような交流が大きなきっかけとなっている．こうした交流を継続することは，新しい応用先を見つけるなど大きな波及効果を得るきっかけになりうると考えており，今後も継続していきたい．

研究課題の独創性・創造性:

問題設定そのものが新しいため，具体的に何を研究すべきかを（様々な批判を真摯に受け止めながら）明確にすることから研究をスタートさせた．その中で，新しいアイデアで研究を進めることができ，研究課題・手法どちらも独創的・創造的であると考えている．

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. T. Matsuda, Y. Miyatake, Estimation of ordinary differential equation models with discretization error quantification, arXiv:1907.10565, 2019.
2. S. Ito, T. Matsuda, Y. Miyatake, Adjoint-based exact Hessian-vector multiplication using symplectic Runge-Kutta methods, arXiv: 1910.06524, 2019.
3. Y. Miyatake, Structure-preserving model reduction for dynamical systems with a first integral, Japan J. Indust. Appl. Math. 36 (2019) 1021-1037.
4. K. Nakano, T. Kemmochi, Y. Miyatake, T. Sogabe, S.-L. Zhang, Modified Strang splitting for semilinear parabolic problems, JSIAM Lett. 11 (2019) 77-80.
5. Y. Miyatake, T. Nakagawa, T. Sogabe, S.-L. Zhang, A structure-preserving Fourier pseudo-spectral linearly implicit scheme for the space-fractional nonlinear Schrödinger equation, J. Comput. Dyn. 6 (2019) 361-383.

（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. T. Matsuda, Y.Miyatake, Quantifying discretisation errors by isotonic regression and its application to estimating ODE models, Geometric Numerical Integration of Differential Equations, Beijing (China), September 9-13, 2019.