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不確実性定量化手法」

研究期間： 2020 年 4 月～2022 年 3 月
研究者番号： 50251
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，波の伝搬のように時間連続的に変化する現象を扱う場合，数理モデルとして微分方程式を考えることが多く，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推定することになるが，一般に微分方程式の厳密解は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(また，画像処理のように，例えば倍精度浮動小数点数で十分高精度な計算は必要ではないが，一方で計算精度は粗すぎてもいけないといったシチュエーションも多い)．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．ACT-I の機関では，数値計算の信頼度は時間発展とともに低下するという仮定のもとで，数値解の誤差を定量化する手法を提案したが，その仮定は理論的にも強すぎると思われ，また，実用性も未知数であったため，加速フェーズにおいてはより多角的な観点で定量化手法を発展させることを目的としていた．

2. 研究成果

(1)概要

ACT-I 期間中に開発した微分方程式の数値計算の不確実性定量化手法を理論・応用の様々な観点から検討・発展させるべく研究を行った．

第一に，ACT-I 期間中に開発していた手法が，本来の微分方程式のパラメータ・初期値推定の観点でどのような利点があるかを詳細に検討した．この観点に関して，パラメータ・初期値推定の精度が向上するか否かは問題依存だが，多くの場合，推定精度の評価を既存手法よりも適切に行えることが分かった．

第二に，ACT-I 期間中に開発していた手法では不確実性は時間発展とともに増大するという強い仮定を課していたが，制約条件からこの仮定を外し，代わりに不確実性を求める際に解く最適化問題の目的関数に正則化項を加える定式化を提案した．この定式化は，統計学の観点でも，単調回帰理論を二段階に拡張した一般化近単調回帰として理解することが

でき，一般化近単調回帰理論そのものの整備も行った．この考察を通し，適切な正則化パラメータの指定方法も提案した．

その他，微分方程式のパラメータ推定を行う際，パラメータに依存する数値解を用いて定義された目的関数の最小化問題を解くことになるものの，目的関数の勾配計算が必ずしも自明ではないという問題に対して，ACT-I 期間から継続しいくつかのアルゴリズムを提案した．

（2）詳細

(A) 離散化誤差定量化手法がパラメータ推定に与える効果の検討

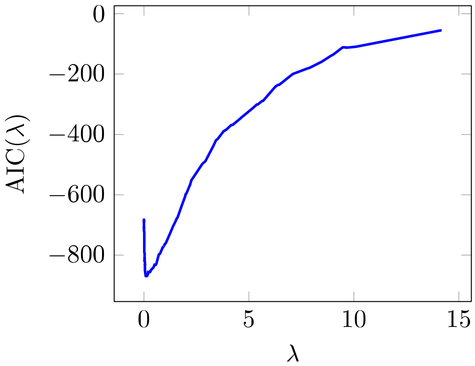
ACT-I 期間中に開発した離散化誤差定量化手法が，本来の関心であるパラメータや初期値の推定にどのような効果を与えるのか検討を行った．まず，推定精度の向上が期待されるが，これについては問題依存の傾向が非常に強いことが分かった．特に，パラメータの性質によって，全く異なるパラメータでも解軌道が似ることがある場合には，フェアな比較自体が困難であり，個別の問題に対してより詳細に検討する余地はあるものの，全体的な傾向としてどのような場合でも推定精度の向上が強く期待できるとは言い難い．一方で，推定結果に対して適切な信頼性評価を得る手法の開発も行った．以下の表は，5-(1)-1 からの抜粋だが，ある問題に対して，初期値とパラメータを推定したとき，95%になることを狙って構築した信頼区間の中に実際に真値が含まれた確率を表したものである．実際には 80%台の値にはなったが，離散化誤差を無視して（数値計算を過度に信頼して）同様の信頼区間構築を行おうとすると，そもそもその過程の計算が破綻したり，求めた区間が小さすぎて 10%程度になったりすることもあり，それと比較すると，十分に適切な信頼性の評価が得られているといえる．

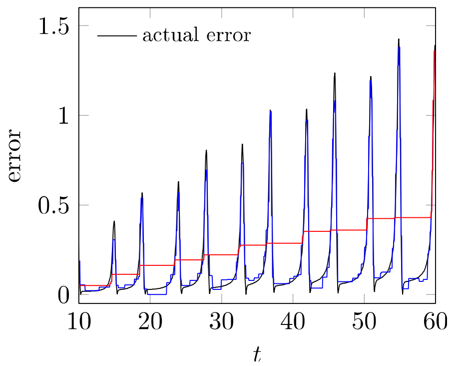
Estimand	Coverage probability (%)	Average length
$x_1(0)$	83	0.5976
$x_2(0)$	88	0.3291
$x_3(0)$	86	0.1799
σ	84	0.1891
ρ	82	0.0636
β	87	0.0149

(B) 離散化誤差定量化の際の単調性の仮定を外した手法の提案

ACT-I 期間中に開発した離散化誤差定量化手法は，離散化誤差は時間発展とともに単調に増大する（すなわち，数値計算の不確実性は時間発展とともに単調に増大する）という仮定を制約条件として定式化を行っていた．しかし，勾配系や周期的な振る舞いをする微分方程式系に対しては，あまりに強すぎる（あるいは不自然な）仮定のようにも感じられる．そこで，制約条件から単調性を外し，代わりに，それを緩めた形で正則化項として組み込んだ定式化を提案した．ここでは，正則化パラメータの選択が重要であり，これが十分大きければ単調性を課す定式化に帰着される一方，（0 以上かつ）ある値よりも小さければ，単調性の破れが許される．この定式化そのものは，統計学における単

調回帰理論を二段階に拡張した一般化近単調回帰として理解することができ，この一般化近単調回帰理論そのものの整備も行った（一般化単調回帰と近単調回帰という二種類の拡張は知られていたが，それらを組み合わせた議論は本研究が初である）．この整備を通し，適切な正則化パラメータを見つけるための情報量規準 AIC を提案した．例えば，以下の図は FitzHugh–Nagumo 方程式を数値計算したときの（第一変数に関する）離散化誤差を提案手法で定量化した結果である．左図は正則化パラメータに応じて AIC がどのように変化するかを表したもので，AIC を最小にする正則化パラメータを用いたときの離散化誤差定量化が右図の青線である．黒線で実際の誤差を示しており，単調性を課したときの結果（赤）と比較して，実際の誤差の振る舞いに近い定量化が行えている様子が確認できる．





このように，新しい定式化では，より実際の誤差の振る舞いに近い定量化が期待できるが，一方で，本来の関心である微分方程式のパラメータや初期値推定に利用したときの利点についてはケースバイケースであり，今後，問題を限定して詳細な考察を行う必要がある．

(C)勾配計算

微分方程式のパラメータ推定を行う際，パラメータに依存する数値解を用いて定義された目的関数の最小化問題を解く必要がある．このためには，目的関数の勾配計算が通常必要だが，その計算は必ずしも自明ではない．原理的には，自動微分を用いて厳密に計算することが可能だが，単純に既存のソルバを利用すると，計算コストやメモリの観点で大きな障害がある．また，近似計算を行うと，想定以上の誤差が混入することが多い．そこで，数値解析学的観点に立ち，効率よく厳密に勾配計算を行えるアルゴリズムを導出するフレームワークの研究を行った．ACT-I 期間に引き続き，2 階微分を計算する状況や，微分方程式を分離型 Runge–Kutta 法で離散化する状況について研究を行い，さらに，データ同化だけではなく，深層学習の文脈における研究も行った．

以上の研究は，理化学研究所 ユニットリーダー 松田孟留氏，東京大学 助教 伊藤伸一氏，大阪大学 准教授 松原崇氏，神戸大学 准教授 谷口隆晴氏との共同研究に基づく．

3. 今後の展開

数値計算の不確実性定量化に関する研究は，研究基盤が全く整備されておらず，自らの研究を進めるのみならず，研究コミュニティの強化を行い，研究分野として成熟させていく必要がある．現在，ACT-I の研究を通していくつかの論文を発表し，少しずつ分野としての基礎が見え始めた段階であり，今後は，特に理論の観点では，これまでの手法を発展させていくと同時に，それに縛られず自由な発想で，様々な視点で研究を推進していく必要がある．また，このような理論研究を行う際には，より実用的な問題に対する検証が必要不可欠である．ACT-I の活動を通し，固体地球科学（特に地震学）の研究者と積極的に交流してきており，将来的に我が国において非常に重要なトピックである地震予測などにおける波及効果を狙っていきたい．

また，数値計算の不確実性定量化は，応用数学における数値解析理論と組み合わせることで，安全を期して必要以上に高精度な計算を行っている場合に，「あとどのくらいラフに計算しても大丈夫か」という観点でサポートできる可能性が高い．スーパーコンピュータなどを用いた数値計算は電力使用量も大きな問題であり，省エネの観点でも波及効果を狙っていきたい．

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

当初は，ACT-I 期間で提案した手法の実問題での検証も強く念頭においていたが，上述の通り，数値計算の信頼度の単調性を緩めた研究により注力した．そこから派生して，数値計算の信頼度の定量化以外へも応用可能な手法として整理することができた．また，研究活動を通して例えば地震学の研究者との交流も深めており，今後，より実用的な問題で検証する地盤も整いつつある．従って，当初の計画から注力するテーマはやや変更があったが，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（研究実施体制及び研究費執行状況）

理論的研究が中心であり，特に上述の松田氏・伊藤氏と頻繁に議論しながら研究を進め，さらに地震学の研究者との交流も深めている．当初は，国際交流を積極的に行う予定であり，旅費を多く計上していたが，コロナ禍において，当初の計画の実行は困難であったため，代わりに高性能計算機を購入し効率よく研究を進めることができた．実際，人工的な例題であっても，想定していた以上に計算リソースが必要であることが多く，高性能なワークステーション・サーバーは非常に役立った．

・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（今後の見込みも重視してください。）

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数値計算の不確実性を定量化するための第一歩であり，少しずつではあるが，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，特に地震学の研究者との交流を行っており，今後数年のスパンで，地震学への応用・協働を行っていきたい．

・研究課題の独創性・挑戦性

ACT-I から継続しているテーマではあるが，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行ってきた．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, SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif. 9 (2021) 302–331.
2. S. Ito, T. Matsuda, Y. Miyatake, Adjoint-based exact Hessian computation, BIT Numer. Math. 61 (2021) 503–522.
3. T. Matsuda, Y. Miyatake, Generalization of partitioned Runge--Kutta methods for adjoint systems, J. Comput. Appl. Math. 388 (2021) 113308.
4. T. Matsuda, Y. Miyatake, Genaralized nearly isotonic regression, arXiv:2108.13010
5. T. Matsubara, Y. Miyatake, T. Yaguchi, Symplectic adjoint method for exact gradient of neural ODE with minimal memory, NeurIPS, 2021.

（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）