研究課題名：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

信頼できるシミュレーションを目指して

大阪大学サイバーメディアセンター 宮武勇登

数値計算の不確実性（研究の背景）

科学技術計算の三要素

データ
- 正確なデータが理想
- **観測ノイズ**

モデル
- 正確なモデルが理想
- **様々な近似**

数値計算
- 正確な数値計算が理想
- **不十分な精度**

様々な分野で，十分な精度の数値計算が**期待できない**状況が増加
数値計算の信頼性（不正確さ）をどのように評価するべきか？
（過大評価も過小評価も避けたい）

研究の目的

十分な精度の数値計算が期待できる場合
- 数学的に保証できることが多い（数値解析学）
- 全くダメな場合も説明可能

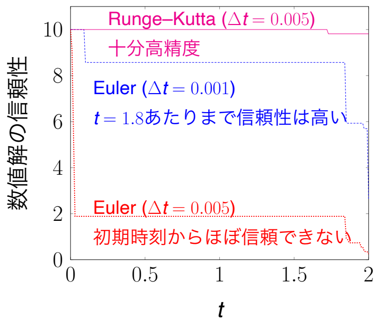
数値計算の精度が十分かどうかよく分からない場合
- 既存の理論で扱うことは難しい
- **信頼性の程度を「定量的」に評価する手法・理論** が期待される

研究目的
数値計算単体での評価ではなく
データやモデルの不確実性との相対的な比較で
数値計算の信頼性を「定量的」に評価する手法や理論の構築

何ができるようになったか？

常微分方程式：$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x(t) = f(x(t)), \quad x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$ の数値計算
→通常，時間発展とともに誤差が蓄積（信頼性が低下）

観測ノイズとの比較で，数値解の信頼性を評価する手法を開発



研究の意義・今後の展望

研究成果
- 観測ノイズとの相対的な比較で数値計算の信頼性を定量的に評価する手法や理論の構築に向けたアイデアの提示
- 時系列データのノイズの情報も同時に推定できる可能性

意義
- 精度の程度が不明な場合に数値計算の信頼性を定量的に評価
- 十分精度がよいときに，必要以上にコストをかけた計算を避けられる（→例えば電力消費量の削減）
- 様々な分野で数値計算の信頼性の過大評価も過小評価も回避
  → 追加で大きなコストを払うことなく，「信頼性」という付加情報が得られる

展望
- 様々な問題に対して，データ・モデル・数値計算の不確実性をまとめて扱う理論へ

詳細

常微分方程式のパラメータ推定

- ODEモデル（θ: 未知パラメータ）
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x(t;\theta) = f(x(t;\theta)), \quad x(0;\theta) = x_0(\theta) \in \mathbb{R}$$
- 観測モデル
$$y_k = x(t_k;\theta) + r_k, \quad r_k \sim \mathrm{N}(0,\gamma^2), \quad k = 1,\dots,K$$
- パラメータ推定：$\hat{\theta} = \hat{\theta}(y_1,\dots,y_K)$

困難：厳密解$x_k(\theta)$の代わりに数値解$\tilde{x}(\theta)$を当てはめて推定を行うとバイアスが生じる

→ 数値解の精度を定量的に見積もることで，より良い推定を行いたい

（注）以下の議論は多次元問題へも拡張可能

研究のアイデア

[1] **数値解の誤差を確率変数**としてモデル化
$$\xi_k := \tilde{x}_k(\theta) - x_k(\theta) \sim \mathrm{N}(0,\sigma_k^2), \quad (\sigma_k^2\text{: 離散化誤差分散})$$

[2] 離散化誤差分散 $\Sigma := \{\sigma_1^2,\dots,\sigma_K^2\}$ の推定
尤度関数：$L(\theta,\Sigma) = p(y_1,\dots,y_K \mid \theta,\Sigma)$
$$= \prod_{k=1}^{K} \frac{1}{\sqrt{2\pi(\gamma^2+\sigma_k^2)}} \exp\left(-\frac{(y_k - \tilde{x}_k(\theta))^2}{2(\gamma^2+\sigma_k^2)}\right)$$

(P) $\displaystyle\max_{\theta,\Sigma} L(\theta,\Sigma), \quad$ s.t. $\quad 0 \le \sigma_1^2 \le \cdots \le \sigma_K^2$
誤差の**単調増大性**を仮定

[3] 数値解 $\tilde{x}_k$ の信頼性の指標：$\dfrac{1}{\gamma^2+\sigma_k^2}$

最適化問題 (P) の解法

二変数についての最適化 → 交互最適化
$$\min_{\theta,\Sigma} \underbrace{-\log L(\theta,\Sigma)}_{=:g(\theta,\Sigma)}, \quad \text{s.t.} \quad 0 \le \sigma_1^2 \le \cdots \le \sigma_K^2$$

Step 1: 本来推定したいパラメータの initial guess: $\theta^{(0)}$

Step 2: 交互最適化

for $l = 1,\dots,L$

$$\Sigma^{(l)} = \operatorname*{argmin}_{\Sigma} g(\theta^{(l-1)},\Sigma) \quad (\text{s.t. } 0 \le \sigma_1^2 \le \cdots \le \sigma_K^2)$$
実は凸最適化になっており
PAVA (pool adjacent violators algorithm) を利用して
$\mathrm{O}(K)$の計算量で最適解を求められる

$$\theta^{(l)} = \operatorname*{argmin}_{\theta} g(\theta,\Sigma^{(l)})$$
Adjoint法とNewton法などの組み合わせで
局所最適解を求める

end

（注 1）Σ の更新のコストは相対的に無視できるほど小さい
（注 2）収束するまで反復しなくても，実用上 $L = 2,3$ 程度で十分

まとめ

研究成果
- 常微分方程式のパラメータ推定の文脈で，数値計算の不確実性の影響を考慮した推定手法
- 最適化問題の解法（特にadjoint法）の改良

課題
- 単調増大性は妥当な仮定か？
- 現状 toy problem のみで検証 → 実用的な問題でも役立つか？
- ベイズ推定の枠組みへも拡張できるか？

発表論文

1. T. Matsuda, Y. Miyatake:
Estimation of ordinary differential equation models with discretization error quantification,
arXiv:1907.10565.
2. S. Ito, T. Matsuda, Y. Miyatake:
Adjoint-based exact Hessian-vector multiplication using symplectic Runge–Kutta methods,
arXiv:1910.06524.