数理解析研究所講究録
第 850 巻 1993 年 42-49

確率微分方程式上の数値積分の精度問題

詫間電波高専　　中澤　宏

1. まえおき

確率微分方程式(SDE)の解とそれに伴われる諸量が既知の初等関数だけを用いて表される可能性はどんな実際的な意味の確率を用いても0でしょうから，数値解析はSDEにおいても常微分方程式(ODE)と同様重要なものの筈です．しかしSDE上での数値解析の発展段階の現況を見ると，とてもODEには達していないと見えます．

我々はまず何よりも，SDEの数値解析を行う前から精度検証は殆ど念頭になく，それでいて得られる結果は2桁の精度はあるだろう，それで十分と，振り返れば確たる根拠もなく半ば予期し満足しています．ODEなら十分刻みを細かくし，計算時間をかけ結果の精度を時間刻みの変更等で確かめ，4ないし5桁の保証された結果を提出する事は当り前です．より悪い精度の或いは精度確認のない計算など信用されません．言い換えるなら，SDE上の数値計算はODEから見て信用できないと言われてしょうがない状態に未だにとどまっています．それなのに，なぜSDEの上で精度確認しないのかできないのかの考察はあまりないようで，もっと具体的に言えば4桁の精度の計算をなぜ我々はしないのか，それは可能か不可能なのか，の議論，検証さえ精密なものは存在しないと思われるのです．

time homogeneousなSDEの定義する定常過程の相関関数は，遷移確率密度の良い性質を反映して大抵十分大変滑らかな関数と期待してよいでしょう．しかし遷移確率密度をいろんな時間間隔，様々な初期値に対して計算してそれを用いて相関関数を算出する事は，少くとも2変数の関数の算出とそれに基づく積分と考えただけでも大変な手間が予期されます．SDEは多くの場合pathwiseに解を与える事の知られた実在ですから，SDEに基づく時間平均計算は比較して原理的に明快であり，SDE上の数値積分の追及は十分な実際的理由を持ちま

す．百歩下っても，「なぜSDE上での数値積分がうまく行かないのか」自体が追及に値する，大変興味深い理論実際的テーマです．

これらの事柄をできる限り正面から論じ，実際計算で確かめ，どの位の時間刻みがどんな解精度を与えるか，従ってどれ程の計算時間をかければどの程度の結果が期待されるか，についておおよその見当を得る事，これらによってSDE上の数値計算をより通常的一般的な手段の1つにするきっかけを作る事，を目指して研究は始められました．現在の精度問題に沿っての報告は昨年のDeakin大学での研究集会[1]でまず行われ，結果に基づいて得られた相関関数の高精度計算の良好な成果と共に公表を待つ所です．[2] 詳細な数値的記述はそちらに回し，ここでは精密であるよりは端的直感的な説明を行いたいと思います．報告される主な結果は

◆ 時間平均による精度検証の不可能性の議論と，見本に基づく精度検証から得られる代表的なSDEの上での実際精度，問題点についての報告

◆ 乱数の現用計算機上での高精度数値積分のために必要な並列発生方法の確立

◆ 相関関数計算に関して，計算機上の実現問題，得られる計算精度と計算時間の実際

の3点にあります．力点は定性的な概要の明確化と未分明な所や将来展望の提示にあり，実用者への説得にも重心を置いて，通常の数理解析研究所研究会講究録の枠をかなり外れたjournalisticな記述となりましたが御理解下さい．

2. SDEの精度検証は時間平均では困難である

以下，time homogeneousなSDEを考えます．その上での時間刻みhのn次精度数値schemeの実際精度としては，名目的な$O(h^n)$，或いは名目誤差$O(h^{n+1/2})$はあまり役に立ちません．h^nの何倍であるか，例えば1.4倍なのか26倍なのか，SDE上では$n \leqq 3$（大抵$n=2$）の低次schemeしかないのでこの係数は大問題で，精度検証はSDE数値解析の重要な部分です．以下時々「方式」と呼ぶschemeの精度は，勿論「原理的」には過程に伴われる量の期待値で数値がexactに知られているもを長時間平均で求めて調べる事もできます．しかし，

[1] 期待値がanalyticに得られる事は例外的，

[2] 得られた場合でも大きな計算（例えば確率偏微分方程式）ではこれは計算時間がかかり過ぎて実際的ではない，

[3] さらに絶望的な事に，時間平均

$$E\{A\} = \lim_{T\to\infty} E_T\{A\}, \qquad E_T\{A\} = (1/T)\int_0^T A(t)\,dt, \tag{1}$$

は当然有限のT(Tは方程式上の実時間)までの$E_T\{A\}$しか近似計算できず，A(t)の相関関数は可積分と仮定すると，それはroot mean squareで大きさ$O(T^{-1/2})$の揺らぎを含む事はすぐ分り，[2] この計算の収束は大変遅く，用い得る計算時間Tが検出可能な精度あるいは誤差に低い上限を与える，

といった困難があって，この方法は精度検証には向きません．要点[3]について具体的に言うと，4桁の精度の検証でも$T=O(10^{10})$(次節参照)，5桁以上のための長時間平均精度検証計算は一般に，少なくとも現在は，計算機上実行不可能です．将来的な多少の事態改善は見込むとしても，精度検証方式としてこの様な制限は本質的な欠陥です．

この意味で見本過程が算出できるというSDEの特性を利用した，任意量の見本値の時間刻みの変更による「原理的に桁数に上限のない」精度(収束)検証[3]はより強力な手段です．残念な事にこの方法は陽解法にしか用いられません．陰解法はnoiseと解の見本の間の関係が複雑で，時間刻みを変更すると異なった見本を扱う事になり，比較が意味をなさないのです．しかし最も能率，安定性[4]の悪い陽解法について得られた精度検証は陰解法の精度の下限としての意味は十分にありましょう．

実際この様な見本比較を工夫して幾つかのSDEに対する陽解法に行って見ると，すべての加法的noiseの問題での3次精度のschemeは大変優れた性能を見せます．問題は乗法的noiseを含むSDEでの3次精度方式です．乗法的でも3次精度方式が優秀である場合もあります．[3] しかし簡単な非線形SDEであるStratonovich model，即ち伊藤型SDEとしての

$$dx(t)=[(3/2)x(t)-x^3(t)]dt+x(t)dB(t), \tag{2}$$

についてはそうでありません．どの様に刻みhを変えても3次精度の方式は2次精度方式で刻みh/2のものを凌駕できないのです．drift項の非線形性を考慮して，それが大きい所では時間刻みを小さく，と可変刻みにしても本質的な改良は見られません．最後に変換

$$y(t)=\log[x(t)],\qquad dy(t)=\{1-\exp[2y(t)]\}dt+dB(t) \tag{3}$$

を用い，計算プログラムを(2)と全く同じものとして，その上にnoise項drift項の異なる形の代入だけを行って計算させて見ると，漸く大進歩があって，3次精度陽方式は2次精度のそれに対して格段の力を発揮する様になります．

現在私はこれは加法的ノイズの問題と乗法的なそれとは大幅に性質が違う事を示すと受け取っております．陽方式しか検証していない(できない)事は留意すべきで，陰方式での結果と比較できれば，と待たれます．状況は方程式の形にも強く依るでしょう．さらに(随分時間をかけ検査しましたが)原理主義的には，計算機による証明の常として，どこまで

行ってもプログラムミスの可能性は0と断言は出来ない事も確かです．諸家の御批判，御検討を強く望みます．しかしこの仕事を通じて加法的ノイズに対する3次高精度方式の高性能，2次精度方式のすべての形の方程式に対する有用性はpositiveな結論として確認されています．時間的に局所的にでも変数変換を行って加法的ノイズ問題に変換できるなら，その様に変換して解く方式は試みる十分な価値があります．乗法的ノイズで一般の場合3次精度方式が殆ど不可能であ事はむしろ光明でしょうか．狭い経験から言うと，3次以上の高精度方式が一般的な乗法イズ問題に対して成功する可能性興味は余りない，と感じます．むしろ2次精度の方式をいかに計算機上速く走らせるか，が今後の発展方向として重要，中心的ではないでしょうか．

3．乱数の並列発生

SDEの使用目的の大部分は長時間平均による期待値(1)の算出ですから，n桁精度の結果を望むなら少なくとも$T^{-1/2}=10^{-n-1}$，或いは$T=10^{2n+2}$もの計算時間が必要になります．簡単な方程式でもこれは楽な計算ではない，相関関数の様な計算負荷の大きいものであれば，スーパーコンピューター上の長大計算になる，ましてn≧5ならそんな大きなTの計算は，たとえ簡単なSDEについてもスーパーコンピューターでも殆ど不可能です．出来ない事，n≧5等はきれいにあきらめてn=4としても(その場合でも勿論精度検証は遙かに大きい桁数まで行ってこの様な長大計算に乗り出さなければなりません)並列計算は必須戦略で，従って乱数の並列生成が欠かせません．

研究会では仕事[2)]の報告として2つの乱数発生方式を用いる方法と結果を紹介しました．数理原理的には新しい事はありませんが，実用手段としては方法は多くの技術的な問題の解決に役立つと思います．それはまた，例えばSDE上の2次精度方式では普通の大きさである時間刻み$h=10^{-3}$の場合必要になる乱数の膨大な総数$T/h=O(10^{2n+5})=O(2^{6n+15})$を賄う事を可能にする長周期の乱数の生成問題の，しかも長周期乱数で非常に困難になる検定問題をうまく逃れる，解決法でもあります．概ねを以下に述べます．

2つの一様乱数発生ルーチン{j(n), k(n)}を用意します．系列jは乱数出力用のもの，系列kは系列jをshuffleするためのものです．これらは実際はどの様な方法で作っても構いませんが，jは出力用であるため性質の良さ，従って検定の容易さが望まれ，周期としては$O(2^{32})$位が丁度よく，それ位に取る事によって多くの存在する検定済のルーチン(例えばRef. 5))が自由に選べるようになります．kはshuffle用で，1〜128程度の小さい整数乱

数ルーチンでよく，その代り長周期性を受け持つべきなので，例えばMitchelとMoore[6)]の加算生成法などが適します．shufflingは通常の通りで，jを出力して定まった番地に記憶格納し，kの出力に対応する番地のjを出力乱数として抽出し新乱数jをその番地に入れればよいのです．なんの変哲もありませんが，並列発生のための味噌は，系列jが全周期で取る値の中から，simulationに先立って「異なる」M個のものj_1〜j_Mを選出しておいて，M個のj乱数ルーチンにそれぞれの初期値として与えて乱数を並列発生させ，これらの出力を同一のk出力のsingle instructionによってshuffleする所にあります．直ちに分る様に結果はすべて異なるM個の乱数系列で，周期は加算生成法の基礎となるZ_2上の原始多項式[6)]の次数を大きくすればいくらでも長く取る事が可能です．

明きらかにこの方式は乱数の並列長周期生成に計算として大変よく適合しています．擬似乱数については，どんな方式であっても，必ずその乱数的な仮面を剥がす「暗号解読法」が存在します．[6)] また研究会で報告された様な[7)]高次lattice構造と，ある種の応用によってはそれが齎す致命的な結果も避けられない様です．しかし上の方式では，shuffleする側の乱数の高次構造の一様独立乱数列からの乖離[7)]は2つの乱数の高次構造に相関がなければ出力乱数列には反映しませんし，shufflingは通常期待される様に，j乱数系列にあり得る様々な非一様非独立な構造を大幅に改善します．勿論SDEで必要なのは正規乱数ですから，一様乱数である出力jをさらに変換しなければなりません．例えば逆誤差関数で変換するとして，計算機上の最小数から得られる正規乱数の絶対値最大は$O(10^1)$程度とまるで大きくない値になり得ますが，SDEはノイズの詳細には余り敏感ではない，ノイズがピンクであるかどうかに関し不感である事も指摘されています．[8)] 実際には倍精度逆誤差関数で上の7〜8桁程の一様乱数jを変換して倍精度擬似正規乱数として用いて十分な結果を得ました．上の乱数並列生成法と併せて考えると，SDEは並列数値計算に誠にうまく適合していると言えましょう．

2系列乱数として互いに性質の全く違うものを用いるのが本質的である事は明きらかです．問題は乱数系列の相互独立性の検証です．指摘されている[7)]一見非常に異なる乱数方式の間の同一性は驚くべき事で，我々が「違う」と思う乱数方式が強く相関している困った事態に遭遇する確率が低くない恐れを示唆しています．厳格な意味ではsimulation計算は常に乱数検定から始めるべきです．しかしこれは大変困難，現実には不可能な事で，是非とも専門家に「安全で好性質」と保証された並列乱数発生ルーチンを計算機上に実装して頂かなくては実用が進みません．実際家の立場としては最終判定基準として実地計算での成功に

置いて進むしかありませんが，上でsuggestされた組合わせ[5),6),2)]は指摘された困難をうまく逃れている様です．

まとめて言うと，擬似乱数発生ルーチンの性質の異なる他のルーチンによるshufflingは，並列長周期発生に高度に適合し，原理的に高次構造などの問題を逃れる方法を与えています．現実に上に述べた特定の乱数並列発生法に基づく相関関数計算からは全般の収束に関しては大変よい結果[2)]を与え，問題となるべき点は見出されておりません．乱数の高次相関はそれを用いたSDE上の計算で2つの離れた時刻の量の相関への重要な影響を与えるであろう事と，大抵のSDEについて解過程の同時刻相関以外は厳密値が分らないという事情とは，結果の良否の判定に際して強く心に留めなければならず，この相関関数の結果は本当に正しいかは現在未知にとどまっていると認識すべきですが，それはさらに別の方式によって計算比較し，次々に検証を受け継いで行ける事柄です．次節に述べる要点や注意と共に，その様な作業，興味ある方々からの寄与によってさらに新しい知見を得られればと思われます．

4. その他の事

SDEではODEに比べて計算方式の精度の次数が小さいので，目標精度を設定した場合必要なhはODEの視点からは常識外れに小さい値になります．上で2次精度方式で$h=O(10^{-3})$も普通である事に触れました．さらに時間平均の収束の遅さを表す$O(T^{-1/2})$の残存誤差が非常に大きなT迄のこの小さい時間刻みhによる積分とそれを扱うための並列計算とを要求します．上の乱数並列発生はベクトルあるいは並列計算機上でそれを可能にはするのですが，相関計算ではさらに異なる時刻での見本値のデータが必要となるため，小さいhは記憶すべき過去のデータの増大を意味し，その意味で相関を取る最大時間間隔あるいは並列性の多重度に計算機記憶容量からの上限が生じ得ます．あらゆる意味で計算の刻みhは大きい方が良いのですが，残念な事にそれ可能にする3次精度方式は一般には使えません．具体的に簡単なStratonovich model(2)で相関計算を時間間隔$\Delta t=4$まで行うとして，3000並列2次精度陽方式で4桁の精度を目指し$h=2^{-10}$を採用すると，[2)] 計算機上我々が現在使用できる約500メガバイトのmemoryの限界に近付くのです．より大きな問題を扱い，計算スピードを上げるためにはずっと大きな上限が望まれます．これらのデータは相関関数の4桁程度の「高精度計算」に対する標準計算コストです．相関計算などSDE数値解析の理想を言えば，完全な並列計算機でメモリ―が膨大なものが望まれます．他の可能性，全く違う

計算方式，異なる計算機の性能や進歩についても諸家の御検討を頂ければと思います．

具体的に相関計算の収束の程度を示す数値データを1つ例示する事は無駄ではないでしょう．Stratonovich model (2) において，時間刻みを$h=2^{-7}$と大きく取るために加法型への変換(3)を用い，3次精度方式で行った結果を表に示します．過程$x(t)>0$の定常確率密度はFokker-Planck-Kolmogorov方程式から容易に算出されて，期待値$E\{x(t)\}=\pi^{1/2}/2$，$E\{x^2(t)\}=1$が得られますから，これらの時間平均の収束は厳密に評価でき，下の表の様になります．他の量についてはそれ自体の揺らぎの減少から推論する他はありません．より

T	$E\{x(t)\}$ error	$E\{x^2(t)\}$error
3320592	-.0001080	-.0003550
6641184	.0000861	.0000108
9961776	.0000440	-.0000017
13282368	-.0001155	-.0002513
16602960	-.0001257	-.0002822
19923552	-.0000137	-.0000594
23244144	-.0000007	-.0000319
26564736	.0000591	.0000922
29885328	.0000473	.0000790

詳しい事は論文2)を御参照下さい．ここには同時刻の量の相関しか示してありませんが，他の時間間隔での相関関数も同程度の揺らぎ，即ち$T\geqq 3\times10^7$で大体4桁の精度，を示しています．詳細なデータ，方法等については著者宛ご連絡下さい．ここまでの計算に必要なmachine timeはFACOM VP2600上での約3000重並列なベクトル計算で約20時間でした．

より高速な陰解法[9)]ではこの計算時間は大幅に短縮されましょう．相関計算での1つの問題は，数値計算で2つの近似量の積の誤差はもとの誤差の和になる事から生じる，相関関数時間平均の収束に単一量の時間平均の約4倍時間がかかる事です．この克服には，

$$A(t)=\int_0^t x(u)\,x(u+s)\,du,$$

即ち$dA(t)=x(t)\,x(t+s)\,dt$もSDEの1成分として積分して行く事[10)]が陽2次精度方式では可能で，有力な可能性ではないかとも考えられています．この他様々な問題も共に，多くの

方々の御批判や寄与を頂ければと思います.

1) The Instructional Workshop on Numerical Methods for Stochastic Differential Equations, Deakin University, July 1992.

2) "Precision problems in the numerical simulation of processes and time averages on stochastic differential equations," submitted to J. Comp. Phys.

3) H. Nakazawa, J. Math. Phys. **31**, 1978 (1990).

4) 斉藤善弘, 三井斌友, 「確率微分方程式の数値スキームの安定性」, 研究集会報告; Nagoya Univ. Tech. Res. Rep. No. 9202 (1992)/ D. B. Hernandez and R. Spigler, BIT **32**, 620 (1992)/ P. E. Kloeden and E. Platen, J. Stat. Phys. **66**, 283 (1992).

5) G. F. Fishman and L. R. Moore, SIAM J. Scientific Stat. Computing **7**, 24 (1986).

6) D. E. Knuth, "The Art of Computer Programming" (Addison and Wesley 1981), Vol. II 参照.

7) 手塚集, 「Marsaglia-Zaman乱数列のラティス構造について」, 研究集会報告; 「Twisted GFSR乱数のラティス構造について」, 情報処理学会研究報告93-HPC-47, 1993年6月.

8) G. N. Mil'stein, SIAM Theory Prob. Appl. **19**, 557 (1974)/金川秀也, 「独立確率変数列を用いて構成された確率微分方程式の近似解について」, 研究集会報告.

9) G. N. Mil'stein, SIAM Theory Prob. Appl. **23**, 396 (1978)/ E. Helfand, Bell Systems Tech. J. **58**, 2289 (1979)/ H. S. Greenside and E. Helfand, Bell Systems Tech. J. **60**, 1927 (1981)/ W. Rumelin, SIAM J. Numer. Anal. **19**, 604 (1982)/ J. R. Klauder and W. P. Petersen, SIAM J. Numer. Anal. **22**, 1153 (1985).

10) H. Nakazawa, Bulletin of Takuma Natl. Col. Tech. No. 20 (1992), p. 31.