微分方程式の離散化に関する不確実性定量化の近年の動向

大阪大学サイバーメディアセンター　宮武勇登[1]

Yuto Miyatake

Cybermedia Center, Osaka University

1　概要

微分方程式の数値解析では，近似解の性質を調べることが重要な研究トピックの一つである．特に誤差の振る舞いに強い関心があることが多く，通常，仮に刻み幅などの離散化パラメータを h と表すと「誤差 $\leq Ch^p$」のような不等式評価を目指す．このような評価から，例えば離散化パラメータを小さく（あるいは大きく）したとき，現在の計算から相対的にどの程度誤差が小さく（あるいは大きく）なるかといったことが読み取れる．

一方，近年，機械学習，データ同化，逆問題などの応用諸分野からの要請もあり，近似解の誤差について定量的に評価する試みが注目されている．このような文脈では「計算の不確実性定量化」や「確率的数値解法」がキーワードとなる．このような研究は，誤差について必ずしも厳密な評価を目指すというよりは，標語的に言えば「おおよそこのくらい」という評価を目指すものである．通常の数値解析では「近似計算前に主に解析的な手法を用いて定性的な評価を行う」のに対して，このような文脈では「近似計算後に主に確率・統計的な手法も用いて定量的な評価を行う」．本講演では，特に微分方程式の初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t) = f(u(t)), \quad u(0) = u_0 \in \mathbb{R}^d$$

を離散化によって近似計算した際の誤差を定量化する手法について，近年の研究の動向を概観したい．

なお，評価手法を確立するためには，おおよその評価を想定しているとは言え，何らかの意味での適切性の議論が欠かせない．現時点で提案されている評価手法の多くは,「アイデアの提示」が主眼であることが多い．適切性について何らかの数学的議論が行われていることも少なくはないが，どのような意味での適切性を議論すべきかという観点すら現状確立されていない現時点では，提案されている評価手法に対する批判の声も小さくなく，黎明期である研究トピックであることを注意しておく．

[1]e-mail: yuto.miyatake.cmc@osaka-u.ac.jp

2　誤差を定量的に評価する動機

数値計算を行った際に誤差を定量的に評価することは様々な場面で重要である．例えば，何らかの方程式を反復法で計算するとき，残差ではなく誤差で収束判定を行うことがしばしば好ましい．また，空間高次元の時間発展偏微分方程式の数値計算では，空間の解像度を十分高めることは現実的に困難であることが多く，実際に行った数値計算が何らかの意味で十分なのか不十分なのかを理解するためにも，実際に誤差の大きさを議論することは重要であろう．また，画像処理や機械学習においても，微分方程式を数値計算することがあるが，そのような文脈ではそもそも 10 桁以上もの精度の数値計算は必要とされない（このような事情を反映して近年では単精度さらには半精度のような演算アーキテクチャの研究も盛んに行われている）．しかし，だからといってラフな計算が許容されるかというとそうでもなく，最低限必要な精度が達成されていることくらいは保証したいという需要もある．

極論を言えば，高精度と言われる解法を用いて多倍長計算を行い，それを厳密解の十分よい近似とみなして比較すれば，十分に誤差を定量的に評価することはできる．しかしながら，上述のような文脈ではそのような計算コストは許容できず，そもそも，厳密な評価を目指す必要性も大きくはない．このようなことから,（文脈によって許容できる計算コストは異なるが）比較的小さい計算コストで，微分方程式を数値計算した際の誤差をだいたいでもよいので定量的に評価できることが望ましく，近年，そのような目的に対して様々な手法が提案されている．

3　誤差を定量的に評価する手法の分類

常微分方程式の初期値問題の数値計算に関して，近年，誤差を定量的に評価する様々な手法が提案されているが，それらのほとんどは何らかの意味で確率的あるいは統計的な考え方に立脚している．それらを大きく 2 つのグループに分類するならば，例えば誤差を評価するためのアルゴリズム自体が確率的かそうでないかで分類できる（もちろん他の観点に基づいた分類も可能である）．確率的な手法として，ODE フィルタ（・スムーザー）や摂動型解法などが知られており，非確率的な手法として，単調回帰理論を用いた手法などが知られている．以下では，これらについての概略を述べる．

ODE フィルタ（確率的）

制御理論やデータ同化では，現象の予測や推定にカルマンフィルタおよびその拡張版（例えばアンサンブルカルマンフィルタや粒子フィルタ）がしばしば用いられる．これらは，離散的な状態空間モデル（システムモデルと観測モデルの組み合わ

せ）と実際の観測をもとに，システムモデルを用いた一期先の状態の予測と，観測モデルと実際の物理的な観測をもとに予測を修正するフィルタリングを繰り返すものである．予測もフィルタもどちらも出力は確率分布であり，分布の広がりの情報から，予測や推定の信頼度を測ることができる．

ODE フィルタはこのような考え方を常微分方程式の数値解析の文脈に活用したものである [5]（ [4] の 38 章に詳細なサーベイがある）．すなわち，各時刻で近似解の情報は確率分布として得ることとし，特に標準的な ODE フィルタでは，そのような確率分布として正規分布を仮定し，その平均と分散共分散行列を更新していく．平均をまさに近似解として扱い，分散共分散行列が誤差の定量化を与えると考える．正規分布を考える限りにおいては，平均と分散共分散行列の更新アルゴリズムは決定論的である．しかし，そのためには非線形作用素を強引に線形化するといった手続きが必要となる．非線形作用素をそのまま扱うためには，粒子フィルタなどの考え方が必要となり，自ずと更新アルゴリズムも確率的なものとなる．なお，平均自体の更新が決定論的である場合，分散共分散行列の情報を無視すれば，発展方程式に対する通常の意味での離散化とみなすことができる．しかし，よく知られている Runge–Kutta 法などと対応することは（現時点では）稀であり，Nordsieck 法などとの関連が指摘されている程度である．したがって，ODE フィルタを理解するうえで，既存の数値解法に対して誤差の定量化手法を与えたというよりは，誤差の定量化も付随した新しい離散化手法だとみなす方が自然と思われる．

後述する web ページとも関連するが，ODE フィルタに関しては，Python や Julia 言語でライブラリが公開されている[2] [3]．

摂動型解法（確率的）

例えば，発展方程式を Runge–Kutta 法などの特定の数値解法で数値計算し，その際の誤差を定量化する状況を考えよう．摂動型解法とは，一ステップ計算するごとに近似解に摂動を加えながら計算を進める解法である [3]（摂動を加える代わりに，ステップサイズをランダムに選ぶことで同様の効果を得る手法も提案されている [1]）．初期値から始めてランダムに摂動を加えながらの数値計算を繰り返すと，毎回のパスは異なるため，十分多くのサンプルをとれば各時刻でヒストグラムが生成される．このヒストグラムの情報を誤差の定量化（より一般的に言えば，数値計算の信頼度の定量化）とみなすことが基本的な考え方である．

このような手法は，十分なサンプル数を必要とするため，それなりに高コストな

---

[2]Python: ProbNum `https://probnum.readthedocs.io/en/latest/`
[3]Julia: ProbNumDiffEq.jl `https://nathanaelbosch.github.io/ProbNumDiffEq.jl/stable/`

定量化手法であり，また，適切な摂動の大きさについて特に情報がなければそれも推定せなばならず，さらにコストは大きくなる．しかしながら，このような手法を活用することで，ベイズ推定などの文脈で数値計算の誤差を無視したために事後分布が極端にデルタ関数的になってしまうような状況を回避できることが報告されている [3].

単調回帰理論を用いた手法（非確率的）

上述の 2 つの手法は，原理的にはどのような文脈でも利用可能な手法である．一方で，逆問題のような文脈では，実際の観測データを活用することで，より低コストな定量化手法を構築することができる．鍵となるアイデアは，各時刻での誤差を確率変数でモデル化することにある（実は上述の 2 手法もこの考え方自体は共通している）．他方，何かしらの観測モデルを仮定し，観測ノイズの分散などの情報を既知とすれば，数値解と観測を比較するモデルが立てられる．ここで，数値解と観測がどちらも得られているならば，誤差を記述する確率変数の分散などを何らかの方法で推定でき，その情報から誤差の定量化が得られる．

以上が考え方の大枠だが，誤差を記述する確率変数の分散などの推定については様々な方法による実現が考えられる．本稿著者らの研究では，発展方程式を数値計算すると，多くの場合，時間発展に伴い誤差が蓄積していくという観察に基づき，推定すべき分散について時系列方向に（区分的）単調増大性を仮定した手法を提案している [6,7]．この手法は統計学における単調回帰理論と密接な関係がある．

このような方法は，逆問題の文脈でしか用いることができないが，一方で，上述の摂動型解法と比べて遥かに高速な定量化が可能である．どの程度の事前知識を仮定するかにも依存するが，[6] で提案されている最もシンプルなものでは，常微分方程式を 1 回数値計算するコストに比べれば，その後に誤差を定量化するコストはほぼ無視できるほど小さい．また，[6] では，誤差の定量化により必ずしも逆問題の文脈で本来推定したいパラメータの推定精度が向上するわけではないが，推定結果に対してより適切な信頼性評価を行える可能性が指摘されている．

ここまで，代表的な手法について概略を述べてきたが，いずれも想定しているアプリケーションが少しずつ違っており，現時点ではどの考え方や手法や最も優れているかといった議論をする段階ではなく，今後も互いに対立するような手法にはならないだろうと思われる．むしろ，それぞれに長所短所があり，お互いに補完的になる可能性を秘めているようにも感じられる．

4　サーベイなどの紹介

微分方程式に限らず，数値計算の誤差の定量化に関する研究について，近年いくつかのサーベイ論文が出版されている [2,8]．加えて，昨年，教科書も出版され [4]，各トピックについて簡潔にまとめられている．一方で，web の情報も有用であり，有志の研究者が「Probabilistic Numerics」という web ページを運営し（`https://www.probabilistic-numerics.org/`），研究の動機や関連研究がまとめられているだけでなく，Python や Julia 言語でライブラリの開発も進められ公開されている．

参考文献

[1] A. Abdulle and G. Garegnani, Random time step probabilistic methods for uncertainty quantification in chaotic and geometric numerical integration, Stat. Comput., **30** (2020), 907–932.

[2] J. Cockayne, C. J. Oates, T. J. Sullivan and M. Girolami, Bayesian probabilistic numerical methods, SIAM Rev., **61** (2019), 756–789.

[3] P. R. Conrad, M. Girolami, S. Särkkä, A. Stuart and K. Zygalakis, Statistical analysis of differential equations: introducing probability measures on numerical solutions, Stat. Comput., **27** (2017), 1065–1082.

[4] P. Hennig, M. A. Osborne and H. P, Kersting, Probabilistic Numerics, Cambridge University Press, Cambridge, 2022.

[5] H. Kersting and P. Hennig, Active uncertainty calibration in Bayesian ODE solvers, arXiv:1605.03364, 2016.

[6] T. Matsuda and Y. Miyatake, Estimation of ordinary differential equation models with discretization error quantification, SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif., **9** (2021), 302–331.

[7] T. Matsuda and Y. Miyatake, Generalized nearly isotonic regression, arXiv:2108.13010, 2021.

[8] C. J. Oates and T. J. Sullivan, A modern retrospective on probabilistic numerics, Stat. Comput., **29** (2019), 1335–1351.