微分方程式の数値計算における不確実性定量化
—摂動型数値解法の観点から—

宮武勇登 *
大阪大学サイバーメディアセンター

1　概要

近年，常微分方程式の初期値問題を数値計算した際の誤差を定量化する試みが注目されている．従来，数値解析学においては離散化による誤差を刻み幅などの離散化パラメータを用いて不等式評価することが標準的な課題であった．このような評価により，異なる数値解法を相対的に比較することができ，さらに実用上の観点でも，離散化パラメータを変更すると「いまの計算」より相対的にどの程度誤差が変化するかを議論できるが，十分に定量的な評価となっているとは言い難い．

ところが，近年，常微分方程式に限らず，数値計算を取り巻く事情は大きく変化している．例えば，計算機の性能が大きく向上した現代においても，方程式そのものの性質や計算機の性能の向上を遥かに凌ぐ大規模計算の需要の高まりなどにより，十分に高精度な数値解を得ることが現実に困難であることも少なくはなく，むしろそのような事例は年々増加傾向にある．一方で，画像処理や機械学習など情報系分野においては（そのような分野でも微分方程式の重要性は高まっている），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とも多い．しかし，このような数値計算に対しても何らかの保証は必要であり，特に定量的な評価への期待が大きい．

素朴に考えると，数値解析における従来的な不等式評価の活用が考えられる．しかし，実際の誤差と評価の間には大きな（ときに数百〜数万倍の）ギャップがあることも少なくはない．例えば，実際には 12 桁程度の精度がある計算に対して少なくとも 10 桁以上の精度があるという定量的な評価をすることには大きな意味があるかもしれないが，上述のような文脈では，実際には 3∼4 桁の精度の計算に対して少なくとも 1 桁以上の精度があるという評価では不十分なことも多い．また，そのようなギャップがなくても，不等式評価には定量的評価が非常に困難な定数が含まれることが多く，直ちには定量的評価に活用することは難しい．このような事情を反映し，近年，誤差について数学的に厳密な不等式評価を目指すのではなく，新しい観点で定量的な評価を行う試みが注目されている．

近年提案されている定量化手法の多くは，何らかの意味で「確率・統計的」であるものが多い．決定論的な微分方程式を決定論的な数値解法で離散化した場合の数値解の誤差が対象であっても，少なくとも何らかの意味で確率的あるいは統計的な議論が現れる．そのような定量化手法は，誤差を定量化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さらに二分することができる．確率的なものには，カルマンフィルタの考えを応用した ODE フィルタ [5] といった定量化手法や摂動型数値解法 [1,3] が知られている．確率的でないものには，本稿著者らによる単調回帰理論を用いた定量化手法などが知られている [7]（定量化のためのアルゴリズムは決定論的だが，背後の理論に確率・統計的な考察を行っている）．

本稿では，研究集会の趣旨を鑑み，摂動型数値解法について概観したい．本題に入る前に，「定量化手法」と言わずに「数値解法」と表現していることについて注意を述べておきたい．この摂動型数値解法は，それ自体，常微分方程式に対する数値解法とみなすことができ，この摂動型数値解法を用いて実際に数値計算することで，関連する（通常の）決定論的な数値解法で計算したときの誤差を定量化することができる（実は，言い切ってしまえるほどの議論が存在しているわけではなく，実用上はケースバイケースであり，研究の発展の余地が多分に残されている）．ここで，摂動型数値解法をどのように定量化に結びつけるかよりも，摂動型数値解法そのものの性質の方がまずは重要と思われることから，本稿では，摂動型数値解法とその性質について述べることとしたい．

*yuto.miyatake.cmc@osaka-u.ac.jp

2　摂動型数値解法の定義

常微分方程式の初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t) = f(u(t)), \quad u(0) = u_0 \in \mathbb{R}^d \tag{1}$$

を考えよう．ただし，$f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ は十分滑らかであるとする．

常微分方程式 (1) を近似計算することを考える．簡単のため，刻み幅を h として，目標時刻 $t = T$ まで K ステップ計算する状況を考えよう（すなわち，$K = T/h$）．ここで，$t_k = kh$ と表すことにし，$t = t_k$ における厳密解を $u_k(= u(t_k))$, 近似解を $\tilde{u}_k$ と表すこととする．また，近似解は Euler 法や Runge–Kutta 法などの一段解法（すなわち，u_k から u_{k+1} が定まる数値解法）により生成されると仮定し[1]，その離散的な時間発展写像を $\Psi_h : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ で表す．すなわち，$u_{k+1} = \Psi_h(u_k)$ である．

決定論的な時間発展 $u_{k+1} = \Psi_h(u_k)$ に対し,「摂動型時間発展」を

$$U_{k+1} = \Psi_h(U_k) + \xi_k(h), \quad k = 0, \dots, K-1 \tag{2}$$

で定義する [3]．ここで，$\xi_k(h)$ は独立同分布に従う適切なスケールの確率変数である．摂動型数値解法は (2) のように定義される時間発展写像を指すが，標語的に述べれば，通常の決定論的な数値解法で一ステップ時間発展するごとに，適切なスケールの摂動を加える数値解法と言える．

3　摂動型数値解法の性質

数値解法の性質について最大の関心は誤差，すなわち厳密解と近似解の差 $\|u_k - U_k\|$ の評価である．摂動型数値解法 (2) について，U_k は確率変数であるから，特に期待値 $\mathbb{E}\|u_k - U_k\|$ の振る舞いについて考えよう．

直感的には，ベースの数値解法 Ψ_h による誤差に比べて摂動の大きさが十分小さければ，U_k は $\tilde{u}_k$ と似た振る舞いになり $\mathbb{E}\|u_k - U_k\| \approx \|u_k - \tilde{u}_k\|$ が期待できそうである．一方で，摂動の大きさの方が支配的であれば，期待値 $\mathbb{E}\|u_k - U_k\|$ の振る舞いは Ψ_h ではなく摂動に大きく依存するであろう．適切な条件のもと，この直感は正しい．以下，関連する定理の概略を述べる．ただし，正確に述べるにはやや煩雑な仮定が多いため，肝心な点を中心に記述する．

まず，Ψ_h は q 次精度の数値解法であるとする．すなわち，h には依存しない定数 $C \geq 1$ が存在し，

$$\sup_{u \in \mathbb{R}^d} \|\Phi_h(u) - \Psi_h(u)\| \leq Ch^{q+1}$$

が成り立つと仮定する．ただし，Φ_h は厳密な時間発展写像を表す．なお，この仮定は（決定論的な）数値解法の精度を議論する際の標準的な仮定である．q としては，通常 1 以上の整数を想定する．

次に，確率変数 $\xi_k(h)$ $(k = 1, \dots, K-1)$ について，ある $p \geq 1$ と定数 $C \geq 1$ が存在し，

$$\mathbb{E}\left[\|\xi_k(h)\|^2\right] \leq Ch^{2p+1}$$

が成り立つと仮定する．また，各 k に対して，$\xi_k(h)$ の平均は 0 であるとする．なお，実際の数値計算では，例えば適切なガウス分布からのサンプリングで実現できる．

以上の仮定に加えて，常微分方程式 (1) を定義する f について適切な仮定のもと，

$$\mathbb{E}\left[\max_{k \in \{1,\dots,K\}} \|u_k - U_k\|^2\right] \leq Ch^{\min(2p,2q)} \tag{3}$$

が成り立つ [6]．これがメインの主張である．ここで，評価 (3) を考察してみたい．前提として，ベースの数値解法 Ψ_h については q が大きいほど誤差が小さいと言え，摂動については p が大きいほどその影響は小さいと言える．評価 (3) を見てみると，$p = q$ の場合に限り，摂動の影響が無視できるほど小さいわけでもなければ，摂動の影響が支配的になるわけでもないことがわかる．

[1] u_k だけではなく，u_{k-1} や u_{k-2} など過去の近似解も利用して u_{k+1} を計算する数値解法は多段解法と呼ばれる．

4　摂動型数値解法の利用

本稿では，摂動型数値解法について，その定義と評価についての一例を紹介した．摂動型数値解法の利用方法としては，何度も数値計算を行うことで，決定論的な微分方程式に対する近似解を分布として得（離散的な各時刻でヒストグラムが得られる），その分布の裾の広さから近似解の信頼性（$\approx$ 誤差）を定量的に評価する（ことを目指す）．本稿で述べた評価 (3) は，摂動のスケールをどのように設定すべきかを判断する道標になるものである．ベースの数値解法 Ψ_h に応じて p を設定するのが標準的な流れとなるため，$p=q$ とするのが自然であろう．しかし，$\mathbb{E}\big[\|\xi_k(h)\|^2\big]$ を h^{2p+1} に比例するように設定すべきことは分かっても，比例係数をどのように設定すればよいかはアプリケーション（すなわちどのような問題意識で摂動型数値解法を用いるのか）に依存し，定石と言えるような方法は知られていないのが現状である．

比例係数も含めて適切な摂動を設定できた場合には，例えば，逆問題の文脈で微分方程式に含まれるのパラメータをベイズ推定する際に，従来の決定論的な数値解法では事後分布が誤った値の近くに過度に集中してしまう問題があるのに対し，摂動型数値解法を用いるとその問題がある程度解消される（推定結果の信頼度が低い場合は，裾の広い事後分布が得られる）ことが報告されている．しかしながら，多くの応用分野において，これまで用いられてきた決定論的数値解法を摂動型数値解法に置き換えれば多大な利点があると言えるほど手法も理論も進展しているとは言えず，まだまだ黎明期であり今後の進展が待たれる．

5　関連する文献等の情報

最後に，幾つか文献等を紹介したい．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] H. C. Lie, A. Stuart and T. J. Sullivan, Strong convergence rates of probabilistic integrators for ordinary differential equations, Stat. Comput., 29 (2019), 1265–1283.

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

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