



常微分方程式モデルの学習における数値積分法の解析・設計手法の提案

寺川, 峻平

(Degree)

博士 (システム情報学)

(Date of Degree)

2025-03-25

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲第9220号

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/0100496501>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



(別紙様式 3)

論文内容の要旨

氏 名 _____ 寺川 峻平 _____

専 攻 _____ システム情報学研究科 計算科学専攻 _____

論文題目 (外国語の場合は, その和訳を併記すること。)

常微分方程式モデルの学習における数値積分法の解析・設計手法の提案

指導教員 _____ 横川 三津夫 _____

本研究では、現象を連続時間の常微分方程式モデルでモデル化する際のいくつかの課題について取り組んだ。力学における運動方程式を始め、様々な分野において現象の時間発展の様子を常微分方程式によりモデル化し予測・解析する試みがなされている。そのような試みにおいて、対象となる現象を目的に応じて適切にモデル化することは重要である。モデル化の方法には多種多様なものが存在するが、本研究の前半（第 2 章）では複雑な系を部分系の連成によって構成的にモデル化する方法、後半（第 3 章、第 4 章）では非線形なブラックボックスモデルをデータ駆動的に学習する方法に着目し、研究を行った。

以下、各章の内容について詳しく説明する。

第 2 章では、2 つのハミルトン系を連成する際に、連成後の系がシンプレクティック性を持つ条件を調べた。複雑な系をモデル化する際、系を分割して個別にモデル化し、連成することで系全体のモデルを与えるというアプローチが考えられる。本研究では、複数のハミルトン系が相互作用により連成する場合について、物理的に自然で、また数値計算の観点からも望ましいモデルとなるための、相互作用の条件を明らかにした。ハミルトン系とは、ハミルトン力学によって導出できる力学系であり、上述の通り、シンプレクティック形式の保存則で特徴付けられる。この保存則をもつ系に対しては、シンプレクティック法と呼ばれる数値計算法がエネルギー保存則などの再現性や計算効率などの観点から非常に有効である。しかし、上記のような連成系に対しては、シンプレクティック形式の保存則が明らかになっておらず、シンプレクティック法の有効性は保証されていなかった。

この研究では、第 1 段階として、ピアノ全体の物理モデルの一部を考え、弦と駒と呼ばれる部分をそれぞれハミルトン系である波動方程式と弾性方程式によりモデル化して連成するケースを扱った。それらの間を散逸のない力で接続し、系全体のエネルギーが保存することを条件として相互作用を定め、要請した保存則が成り立っていることを数値実験により確認した。つぎに、第 2 段階として、一般のハミルトン系同士の連成系があるシンプレクティック形式を保存するための条件を示し、第 1 段階の系で定めた相互作用がそれを満たすことを確認した。

第 3 章では、観測データを用いて常微分方程式モデルを学習する際に生じるモデル化誤差を定式化した。近年、機械学習技術の発展により、対象となる系の観測データを用いてその系の支配方程式を学習するアプローチが提案・再発見されている。現象の観測データは多くの場合離散時間でサンプリングされるため、連続時間の常微分方程式モデルを得る過程において、しばしば数値積分法（以下、離散化手法と呼ぶ）が用いられる場合がある。この際、常微分方程式から離散解を得る際に計算誤差が生じるように、モデル化に離散化手法を用いる際にも離散化手法に起因するモデル化誤差が生じうる。しかし、モデル化に用いる **Neural Network** の構造やデータに含まれるノイズなどの他の要因と比べ、離散化手法の選択がモデル化誤差に与える影響についてはあまり注目されてこなかった。

この種のモデル化誤差は、モデル化対象の系の性質および利用する離散化手法の性質に依存すると考えられる。そこで、**Dahlquist** のテスト方程式により定まるダイナミクスによりモデル化対象の性質を表現し、それに対してモデル化を行った際のモデル化誤差を定義した。**Dahlquist** のテスト方程式は振動・減衰を表す 1 つの複素パラメータにより特徴づけられるため、モデル化誤差を調べる離散化手法を一つ決めると、様々なテスト方程式に対するモデル化誤差を複素平面上に可視化することが可能となる。

続いて、実際にいくつかの **Runge-Kutta** 法に対して解析を行った。特に重要な結果として、2 段以上の **Runge-Kutta** 法を用いた際には、観測データを完全に再現するようなモデルが複数存在し、得られるモデルが一意に定まらない可能性があることが明らかになった。

また、以上のような理論的結果を、簡単な **Neural Network** を用いた学習実験により確認した。学習実験の結果、結果の非一意性が現れる場合とそうでない場合があること、どちらの場合も予想された結果のいずれかが学習されることが確認された。非一意性が現れない場合についてはさらなる検証を行い、その原因が実験に用いた **Neural Network** の性質にある可能性を示した。

第 4 章では、第 3 章で導入されたモデル化誤差の観点で、モデル化に特化した数値積分法、特に線形多段階法の設計手法を提案した。現象のモデル化において、振動の周波数分布や減衰の程度といった対象の現象の特徴がおおまかにでも事前にわかっている場合を考える。そのような場合に、事前にわかっている特徴の近傍でモデル化誤差が小さくなるような、すなわちその現象のモデル化用の離散化手法が設計できれば、より誤差の小さいモデル化が行える可能性がある。

そのような設計手法の考案にあたり、本研究では線形多段階法と呼ばれる離散化手法の一群に着目した。線形多段階法は **Runge-Kutta** 法のような 1 段階法と異なり、一般には離散解軌道上の 3 つ以上の時刻の点に関する方程式となっている。そのため、通常の常微分方程式の数値計算の目的では、**Runge-Kutta** 法と比べて扱いが難しく、利用される機会は少ない。しかしモデル化の目的においては、**Runge-Kutta** 法には結果の非一意性の問題があることが第 3 章で明らかになった一方で、線形多段階法を用いた場合は結果が一意に定まることがわかった。さらに、これに着目し、モデル化対象の系の特徴を **Dahlquist** のテスト方程式の形で近似的に表現して十分な数与えることで、モデル化用の線形多段階法を一つ定める方法を提案した。

氏名	寺川 峻平		
論文 題目	常微分方程式モデルの学習における数値積分法の解析・設計手法の提案		
審査 委員	区 分	職 名	氏 名
	主 査	教授	横川 三津夫
	副 査	教授	陰山 聡
	副 査	教授	佐野 英樹
	副 査	教授	谷口 隆晴
	副 査		
要 旨			
近年、物理現象の観測データから機械学習の手法によって、現象を記述する数理モデルを導出する手法が注目されている。本論文では、特に、微分方程式モデルを観測データから構築する際の手法や、設計指針となるような理論が提案されている。本論文は、大きく2つの部分に分かれている。前半は、古典力学的な記述が可能である系を連成する場合の手法について考察されており、後半は、微分方程式モデルを深層学習などのブラックボックスモデルで導出する場合に利用される数値積分法の誤差解析と、設計方法について報告されている。以下、それぞれの内容について、詳細に説明する。 第2章では、古典力学的な記述が可能である系として、特にハミルトン系を考え、それらが相互作用によって連成する場合に、連成系がやはりハミルトン系となるような条件を考えている。ハミルトン系は、ニュートン力学における運動方程式を拡張したものであり、特に、シンプレクティック構造と呼ばれる幾何学的な構造をもつことが知られている。シンプレクティック構造は、物理学の諸法則が成り立つために重要な性質である。理論的に重要というだけでなく、応用上も非常に重要であり、特に、この性質を保つように設計された数値解法であるシンプレクティック数値積分法は、物理シミュレーションにおいて欠かせないものとなっている。本論文第2章では、まず、具体的な例として、波動方程式と弾性体方程式が連成した場合の相互作用について、連成系がエネルギー保存則を満たすように相互作用を定める方法が提案されている。また、シンプレクティック性についても、2つの系が連成した場合に、シンプレクティック構造を保つための相互作用に対する条件が示された。また、この条件を利用することで、具体的に導出した波動方程式と弾性体方程式の連成系が、シンプレクティック性をもつことが示されている。したがって、このようにして導出された方程式は、シンプレクティック構造を保ち、従って、シンプレクティック数値積分法が適用可能であることが明らかとなった。これらの研究結果は、日本応用数学会論文誌、<i>JSIAM Letters</i>、および <i>Mathematics</i> に掲載された。また、日本応用数学会論文誌に掲載された論文は論文賞を受賞した。 第3章では、観測データから、データを記述する常微分方程式モデルを、ブラックボックスモデルで学習する際に生じるある種の誤差評価指標について議論されている。時系列データなどの観測データから、そのデータを表す微分方程式モデルを導出することは、解析対象のデータの理解や現象の予測などにおいて重要である。データから微分方程式モデルを導出する方法としては、深層学習やカーネル法などが利用出来るが、データは、適当な時間間隔でサンプルされたサンプルデータとなることが多いため、深層学習などで微分方程式モデルを学習するためには、微分方程式の数値解法と組み合わせる必要がある。そのため、得られるモデルは、数値計算のための離散化誤差に影響されたものになってしまう。このときに生じるモデル化誤差と離散化手法の関係は、これまで議論されてこなかった。これに対して、本論文では、そのような誤差評価指標を新たに提案し、具体的な手法について、実際にモデル化誤差を解析している。 具体的には、誤差評価指標として、<i>Dahlquist</i> のテスト方程式を利用した方法が提案されている。<i>Dahlquist</i> のテスト方程式は、微分方程式の数値計算手法の安定性解析に利用されている方程式であり、その数値計算手法の安定性を、計算対象の微分方程式の解の減衰の強さや、振動の速さによって議論するものである。この方法は、手法の安定性の理解のために確立された方法であり、信頼されて利用されてきた解析方法である。モデル化誤差も、数値計算の結果から、安定性と同様に、数値計算手法だけでなく、モデル化対象のダイナミクスの性質に大きく影響されることが確認された。そこで、寺川氏は、モデル化誤差の解析に <i>Dahlquist</i> のテスト方程式を応用した。これによって、減衰・振動の強さによって、どの程度、誤差が生じ得るかを、数値解法ごとに可視化する方法を提案した。これは、数値解法をモデル化のために用いるときに、どのようなダイナミクスに適しているかを明らかにするものであり、数値解法の理論解析手法であると同時に、数値解法の設計指針を与えるものでもある。			

氏名	寺川峻平
第 3 章では、この誤差評価指標を導入し、実際に Runge-Kutta 法の解析を行っている。また、解析結果が正しいかどうかを、ニューラルネットワークを利用したモデルを用いて、数値的に検証している。特に、重要な結果として、2 段以上の Runge-Kutta 法を利用した場合、データからモデルが一意に定まらないことが理論的に示されている。これは、Runge-Kutta 法が、実質的に、モデル化に適していない方法であることを示しており、モデル化に適した、新たな数値解法の設計が必要であることを示す重要な結果である。この結果は、論文誌 <i>Mathematics</i> に掲載された。また、一部の内容は国際会議 NeurIPS のワークショップである <i>Machine Learning and the Physical Sciences</i> に採択された。 第 3 章で示された、Runge-Kutta 法がモデル化に適さないという結論は、モデル化のための新たな数値解法を設計する必要があるということを意味している。そこで、第 4 章では、実際に、そのような方法が提案されている。提案手法は、線形多段解法に基づくものである。第 3 章と同様の方針に基づき、線形多段階法を用いた場合のモデル化誤差を解析すると、まず、線形多段解法を用いると、Runge-Kutta 法とは異なり、モデルが一意に定まることが示されている。これは、モデル化のためには線形多段解法を用いれば良いという非常に重要な結論を導く結果である。また、具体的に、モデル化対象のデータのダイナミクスに合わせて、数値計算法を設計する方法も提案されている。 本研究は、微分方程式モデリング手法において、物理法則を保つ連成モデルの構築法や、モデル化のための数値計算法の設計指針について研究したものであり、物理モデリング・シミュレーションのためのモデリング手法・理論において、重要な知見を得たものとして価値ある集積である。提出された論文はシステム情報学研究科学位論文評価基準を満たしており、学位申請者の寺川峻平は、博士（システム情報学）の学位を得る資格があると認める。	