Kobe University Repository : Kernel

PDF issue: 2025-05-25

時系列データのモデリングにおける代数的新手法とその展開

小松，瑞果

(Degree)
博士（計算科学）

(Date of Degree)
2022-03-25

(Date of Publication)
2024-03-25

(Resource Type)
doctoral thesis

(Report Number)
甲第8364号

(URL)
https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1008364

※ 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　小松　瑞果

専　攻　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。）

時系列データのモデリングにおける代数的新手法とその展開

指導教員　谷口　隆晴

時間発展型の現象を，微分方程式などを用いてモデル化し，解析する問題は，物理学，生物学，化学，制御工学など，様々な分野において現れる．例えば，運動方程式や化学反応式など，現象を支配すると考えられる第一原理などに基づいてモデルを構築する場合，モデルがもつパラメータには，対象とする現象に関する具体的な意味が与えられていることが多い．本論文では，主に，このようなパラメータの値を時系列データから推定することで現象を考察する状況を考え，ここで有効な代数的新手法を構築し，その応用について述べる．特に，第3章から第5章の内容については，モデリングへの代数的アプローチであると同時に，代数分野の研究としても，代数の数理モデリングへの新たな応用という意義をもつ．

第2章では，確立された数理モデリング手法が存在していない生命科学的現象であるアレルギーに着目し，これに対する数理モデリング，および，シミュレーションに関する実践的な研究を行った．第2章では，Husby らの実験データに対する，抗原・抗体の体内動態モデルの構築，シミュレーション手法の提案，および，個体の特徴に関する考察を行った．第2章における一つ目の成果は，実験結果を一部再現するモデルを構築したことである．具体的には，まず，実験内容や生理学および免疫学的知見に基づき，薬物動態モデルを応用することで，抗原・抗体の体内動態を表すモデルを構築した．提案モデルは，アレルギーの全身疾患性に着目した初めてのモデルであり，21 個の未知パラメータをもつ微分代数方程式で表された．これに対し，後述のパラメータ推定を行い，得られたパラメータをモデルに与えた場合の数値計算により，実験データが一部再現された，モデルの妥当性が部分的に確認できたといえる．二つ目の成果は，パラメータ推定を行うにあたり必要となる，提案モデルに対する数値計算方法の選定である．一般に，微分代数方程式は，その微分指数が1より大きい場合，数値計算が難しくなることが知られている．実際，提案モデルは微分指数が2であり，一般的なソルバーによる数値計算は適用困難である．しかし，著者は，提案モデルが Hessenberg 型微分代数方程式であることを証明し，これにより，例えば，Radau IIA 法などの数値計算方法が適当であることを明らかにした．三つ目の成果は，Multi-Start 法によるパラメータ推定とそれに対する記述統計を用いた解析の結果から，データに適合するパラメータの集合の特徴を取り出した点である．特に，これらは具体的に解釈可能なパラメータであり，個体の特徴が，抗原の吸収に関するパラメータに現れることを示唆する結果といえる．

第2章におけるパラメータ推定の結果から，二つの技術的課題が明らかになった．一つは，推定結果の初期値依存性である．具体的には，複数の初期パラメータからそれぞれ推定を行ったところ，初期パラメータによっては局所解が得られた点である．このような問題は，微分方程式で表されるモデルのパラメータ推定問題において，一般に生じ得ることであり，モデルが線形な場合にさえも生じ得る．二つ目の課題は，データによく適合するパラメータが一意に定まらず，パラメータを介した現象の考察が比較的困難であった点で

ある．これは，モデルは構造的に同定不可能なことに起因すると考えられ，このような状況は，観測データが限定的である場合などに生じやすい．この二つの課題については，アレルギーのモデリングにおける固有の問題ではなく，一般的な問題である．そこで，著者は，これらの問題に対して，それぞれ，第３章および第４章において，基礎研究的な視点で取り組んだ

第３章では，入出力行列が標準形，状態行列の要素がパラメータの多項式である，連続時間または離散時間の線形状態空間モデルに対し，インパルス応答データを用いたパラメータ推定を行う問題に着目し，良い初期パラメータを与える手法を提案した．このような手法として，Parrilo らや Mercère らによる手法が挙げられる．これらの手法では，まずは，ブラックボックスモデリングを行い，得られたモデルの変換により，目的とするモデルのパラメータを推定する．このとき，反復法によらないブラックボックスモデリングを導入することで，パラメータ推定の初期値依存性が解消されると言われている．特に，Parrilo らは sum of squares 法に基づく実現手法を，一方で，Mercère らはシステム行列のベクトル化に基づく手法を提案した．これに対し，第３章では，ブラックボックスモデリングにより得られたモデルを，exhaustive modelling と，代数に基づく変数消去により変換し，パラメータを推定する手法を提案した．Exhaustive modelling は，Walter らによって提案された構造的可同定性解析手法に関連する，与えられたインパルス応答データを生成するモデルを網羅的に扱うための概念である．これを用いることで，Mercère らの手法と同様に，パラメータを陰的に推定することが可能である．また，Parrlio らや Mercère らの手法と異なり，提案手法は代数的消去に基づくため，状態行列の要素が，多項式でパラメータ化されている場合でも適用可能である．実際，数値実験において，多項式でパラメータ化された離散時間線形状態空間モデルに対して提案手法を適用したところ，精度よくパラメータを推定することができた．

第４章では，構造的に同定可能とは限らない多項式状態空間モデルに対し，適切なパラメータの集合を推定することでパラメータに関する考察を行うための枠組みを提案した．構造的に同定不可能なモデルに対する一般的なアプローチとして，観測方法やモデルの変更，パラメータに関する制約の追加などが挙げられる．しかし，このようなアプローチが現実的でない場合，同定不可能なモデルに対して，モデルの修正などをせずに，そのままパラメータ推定を行うこととなる．そこで，第４章では，データに適合するパラメータの集合をパラメータ多様体と定義し，これを推定するための理論および推定手法を構築し，実問題に応用した．提案手法では，まず，微分代数に基づき，状態空間モデルから状態変数およびその高階微分を消去することで入出力関係式を導出する．次に，入出力関係式に観測データを与えることで，パラメータに関する制約式を導出し，多くの場合，パラメータ多様体の閉包となる集合を導出する．より厳密には，提案手法では，Forsman の理論に基づき，微分消去を有限階の微分演算に帰着させ，代数的な枠組みにおいて入出力関係式

を導出する．ここで，パラメータのとる値によっては入出力関係式が変化し得ることを踏まえ，包括的グレブナー基底系を用いる．このようにして得られた複数の入出力関係式に対し，それぞれ，上の手順を適用することで，データに適合するパラメータの網羅的な扱いが可能となることを理論的に保証した．また，提案手法では，計算代数アルゴリズムを導入したために，計算機用いてパラメータ多様体を自動で導出することが可能である．さらに，提案手法を，薬物治療下の生体内ウイルスダイナミクスの実データ解析に応用した．その結果，既存研究では見落とされていた，薬効に関する考察の見落としを発見した．これは，実問題における提案手法の有効性を示すものである．

入出力関係式は，その代数的性質から，モデルの入出力関係に関する本質的な情報がすべて含まれている．これを踏まえると，入出力関係式は可同定性解析やパラメータ多様体の推定以外にも応用可能と考えられる．そこで，第５章では，これを morphological computation の理論解析に新たに応用した．Morphological computation とは，柔らかく変形可能な素材で作られたロボットなどを上手く扱うために提案された一つの概念であり，大まかに述べると，物体の柔らかさを制御の妨げとみるのではなく，むしろ，制御に役立つ計算資源とみなし，これを活用する，というものである．これに対する既存理論として，Hauser らによる理論などが挙げられ，これらは基本的には，非線形フィルタの近似理論に基づく．具体的には，時系列予測を行う際に，システムがある種の性質をもてば，万能近似性をもつ，といった主張に基づく．しかし，morphological computation で用いられようとしている物理システムが，このような性質をもつかどうかについて解析することは難しく，その実用性に課題があった．これに対し，第５章では，与えられたシステムをモデル化し，これに対する入出力関係式を導出することで，システムのもつ性質について具体的に解析する手法を提案した．また，実際に，ソフトロボットなどに用いられるいくつかのシステムをモデル化し，これらに対する提案手法の適用例を示した．適用例の一つでは，線形な質点ばね系を用いて表されるシステムの性質について解析を行った．具体的には，例えば，入出力関係式が定める線形微分方程式に対し，Routh-Hurwitz の安定判別法を用いることで，モデルによって表されるシステムがエコーステート性をもつための物理パラメータに関する条件を示した．なお，提案手法は代数に基づくため，非線形モデルに対しても適用可能である．また，別の適用例として，テンセグリティなどの一次元的な柔らかい物体の挙動の解析を目的とし，線形な質点ばねダンパー系を連結させたモデルに対する解析を行った．そこでは，システムの周波数特性に着目し，物理パラメータとの対応づけを行った．結果として，大きなダンパー係数をもつシステムが高周波成分を近似することは容易だが，低周波成分を近似することは難しいなど，システムの設計指針に役立つ考察が得られた．また，蛇型ロボットなどを弾性棒によりモデル化した場合の適用例においては，数値実験により，入出力関係式を用いた制御が可能であることを示した．

（別紙１）　　論文審査の結果の要旨

氏名	小松瑞果		
論文題目	時系列データのモデリングにおける代数的新手法とその展開		
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	准教授	谷口隆晴
	副　査		

要　　旨

時間発展型の現象を，微分方程式などを用いてモデル化し，解析する問題は，物理学，生物学，化学，制御工学など，様々な分野において現れる．例えば，運動方程式や化学反応式など，現象を支配すると考えられる第一原理などに基づいてモデルを構築する場合，モデルがもつパラメータには，対象とする現象に関する具体的な意味が与えられていることが多い．本論文では，主に，モデルパラメータを時系列データから推定することで現象を考察する場合を考え，それに対する，新たな代数的アプローチを提案すると同時に，その応用について論じられている．

第２章では，確立された数理モデリング手法が存在していない生命科学的現象であるアレルギーに着目し，これに対する数理モデリング，および，数値シミュレーション手法について論じられている．具体的には，Husby らの実験データに対する，抗原・抗体の体内動態モデルの構築，シミュレーション手法の提案，および，個体の特徴に関する考察を行っている．本論文では，まず，実験内容や生理学および免疫学的知見に基づき，薬物動態モデルを応用することで，抗原・抗体の体内動態を表すモデルを構築している．提案モデルは，アレルギーの全身疾患性に着目した初めてのモデルであり，21 個の未知パラメータをもつ微分代数方程式で表される．また，実際に，データからパラメータを推定し，数値計算が行われており，その結果，実験データが一部再現され，モデルの妥当性が部分的に確認されている．また，Multi-Start 法によってデータに適合するパラメータを複数求め，それらを統計的に解析することで，個体の特徴が，抗原の吸収に関するパラメータに現れる可能性があることを示している．
数値計算手法についても考察されている．実際，モデルは微分代数方程式となっているが，一般に，微分代数方程式は，微分指数が 1 より大きい場合，数値計算が困難になると言われている．提案モデルは微分指数が 2 であり，一般的なソルバーによる数値計算は適用困難であったが，本論文では，提案モデルが Hessenberg 型微分代数方程式であることを証明しており，これにより RadauIIA 法などの数値計算方法が有効であることを示し，これにより，数値計算上の困難を解決している．本章の内容については，査読付き論文誌である，日本応用数理学会論文誌に掲載されている．

次に，本論文では，第２章におけるパラメータ推定の結果から生じた，二つの技術的課題について論じている．一つは，推定結果の初期値依存性であり，二つ目は，データに適合するパラメータが一意に定まらず，パラメータを介した現象の考察が困難であった点である．これらは，モデルは構造的に同定不可能なことに起因すると考えられ，このような状況は，観測データが限定的である場合などに生じやすい．これらは，アレルギーのモデリングに限らない，一般的な問題である．第３章および第４章においては，このような問題に関する基礎的な研究結果について述べられている．

第３章では，連続時間または離散時間の線形状態空間モデルに対し，インパルス応答データからパラメータ推定を行う問題に着目し，特に，モデルのパラメータ依存性が多項式であるような場合について，良い初期パラメータを与える手法を提案している．このような手法としては，Parrilo らや Mercère らによる手法が提案されているが，これらの手法では，まず，ブラックボックスモデリングを行い，それを変換することで，目的とするモデルのパラメータを推定する．通常，パラメータ推定には，ニュートン法などの反復法を用いられるが，そのような方法では，推定されたパラメータが初期値に依存してしまう．上述の方法では，これを，ブラックボックスモデルの導入により解消しようとする．具体的には Parrilo らは sum of squares 法に基づく実現手法を，Mercère らはシステム行列のベクトル化に基づく手法を提案している．

氏名　小松瑞果

これに対し，第３章では，ブラックボックスモデリングにより得られたモデルを，exhaustive modelling と，代数に基づく変数消去により変換し，パラメータを推定する手法が提案されている．Exhaustive modelling は，構造的可同定性解析手法に関連する，与えられたインパルス応答データを生成するモデルを網羅的に扱うための概念であり，Walter らによって提案された．これを用いることで，Mercère らの手法と同様に，パラメータを陰的に推定することが可能となる．一方，既存手法と異なり，提案手法は代数的消去に基いている．そのため，状態行列の要素が，多項式でパラメータ化されている場合にも適用可能である．また，多項式でパラメータ化された，離散時間線形状態空間モデルに対する数値実験も行われており，提案手法の有効性が確認されている．本章の内容については，査読付き論文誌である Nonlinear Theory and Its Applications に掲載されている．

第４章では，構造的に同定可能とは限らない多項式状態空間モデルに対し，データに適合するパラメータを網羅的に抽出する手法が提案されている．一般に，モデルが同定不可能な場合には，観測方法やモデルの変更，パラメータに関する制約の追加などによって，パラメータが一意に定まるように修正される．しかし，そのようなことが難しい場合には，モデルの修正などをせずに，そのままパラメータ推定を行う必要がある．本論文では，データに適合するパラメータの集合をパラメータ多様体と定義し，これを推定するための理論および推定手法が構築されている．提案手法では，まず，微分代数に基づき，状態空間モデルから状態変数およびその高階微分を消去することで入出力関係式を導出する．次に，入出力関係式に観測データを与えることで，パラメータに関する制約式を導く．より厳密には Forsman の理論に基づき，微分消去を有限階の微分演算に帰着させ，代数的な枠組みにおいて入出力関係式を求める．そのように導出された制約式は，多くの場合，パラメータ多様体の閉包となる集合を定める．ただし，パラメータのとる値によっては入出力関係式が変化し得る．そのため，消去計算には，包括的グレブナー基底系を用いる．本論文では，そのようにすることで，データに適合するパラメータの網羅的な扱いが可能となることが理論的に保証されている．さらに，提案手法の有効性を示すために，手法を薬物治療下の生体内ウイルスダイナミクスのデータに応用し，その結果，既存研究では見落とされていた，薬効に関する考察の見落としが新たに発見されている．

最後に，入出力関係式は，モデルの入出力関係に関する本質的な情報を含んでいることを踏まえ，新たな展開として，第 5 章では，その morphological computation の理論解析への応用が論じられている．Morphological computation とは，ソフトロボットの制御などを目的として考案された概念であり，物体の柔らかさを制御の妨げとみるのではなく，むしろ，制御に役立つ計算資源とみなし，これを活用しようとするものである．これに対する既存理論としては，Hauser らによる理論などが挙げられるが，これらは基本的に関数解析的な手法によって，万能近似性を示そうとするものである．しかし，morphological computation で用いられる物理システムが，理論の仮定を満たすかどうかの確認は難しく，より実用的な理論が望まれている．
これに対し，本論文では，与えられたシステムのモデルに対して入出力関係式を導出し，それによって，システムを具体的に解析する手法を提案している．また，実際に，ソフトロボットなどに関係するシステムをモデル化し，提案手法を適用している．まず，線形な質点ばね系を用いて表されるシステムに対して，入出力関係式が定める線形微分方程式に対し，Routh-Hurwitz の安定判別法を用いることで，システムがエコーステート性をもつための物理パラメータに関する条件が示されている．次に，テンセグリティなどの一次元的な柔らかい物体の挙動の解析を目的とし，線形な質点ばねダンパー系を連結させたモデルについて，システムの周波数特性と物理パラメータの対応づけが行われている．また，その結果から，ダンパー係数とシステムが近似可能な周波数領域の関係などについての考察が述べられている．蛇型ロボットなどを弾性棒によりモデル化した場合の適用例においては，数値実験により，入出力関係式を用いた制御が可能であることが示されている．本章の内容は，査読付き論文誌である The International Journal of Robotics Research に掲載された．

本研究は，数理モデリングについて，代数的なアプローチからの新たな手法について研究したものであり，特に同定不可能なモデルに対するパラメータ推定手法や，微分代数の新たな応用につ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 申請者の小松瑞果は，博士(計算科学)の学位を得る資格があると認める．