



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

(氏名：小松瑞果 NO. 1)

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 II A 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

(氏名：小松瑞果 NO. 2)

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に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、Parrilo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

(氏名：小松瑞果 NO. 3)

を導出する。ここで、パラメータのとり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、計算機を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、柔軟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状態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、システム的设计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。