

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 元年 6 月 20 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K13772

研究課題名(和文) 演繹的・帰納的セル・オートマトン構成法が織りなすデータと数理モデルの相互横断研究

研究課題名(英文) Cross-cutting research of data- and model-driven methods by interlacing deductive and inductive cellular automata constructing method

研究代表者

中野 直人 (Nakano, Naoto)

京都大学・国際高等教育院・特定講師

研究者番号：30612642

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、現象の新しいモデリング手法として統計的セル・オートマトン(CA)構成法を提案し、(A)CAの局所規則の選択性に対する数値解析的研究と、(B)データに対して定量的に適合するモデル化手法の精緻化の両面からのアプローチによって統計的CA構成法の確立を目指した。(A)ではCAとPDEの解との比較を区間演算の概念を用いて明らかにし、統計的CA構成法で導出される局所規則の選択法則に対する数学的な検証を与えた。(B)ではデータ駆動的に非線型波動現象の解挙動を模倣するモデルを構成した。さらに機械学習的手法との関連や力学全構造計算法への応用に結びつけ、現象モデリングの新しい手法を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

モデル駆動であるところの演繹的モデリングとデータ駆動であるところの帰納的モデリングを織り上げることによって、統計的セル・オートマトン(CA)構成法を中心として状態の遷移の本質的な成分をデータから抽出する手法を構築した。これにより複雑な現象に対してもその遷移の骨子を捉えたモデリングが可能となり、さらには背後にある数学的な構造についての理解の深化が可能となった。本研究による手法によってさまざまな現象のメカニズムの理解に対して大いに助けとなる可能性がある。

研究成果の概要(英文)：In this research, we studied empirical cellular automata (CA) construction method as a new modeling method for phenomena. We set the following two approaches to establish the empirical CA construction method: (A) numerical analysis on the selectivity of local rules of CA; (B) refinement of methodology for quantitative modelling. In (A), we investigated the relationship between solutions of CAs and PDEs by the use of interval operation and found the selection tendencies of resultant local rules of empirical CA mathematically. In (B), we constructed a model that mimics the solution behavior of nonlinear wave phenomena in a data driven manner. Furthermore, investigating the connection of our method with machine learning techniques and the method for analysis of global dynamics, we also obtained a novel method of modelling phenomenon.

研究分野：応用数学

キーワード：セル・オートマトン 応用数学 統計的モデリング 偏微分方程式 数値解析 データ主体解析

1. 研究開始当初の背景

現象のメカニズムの理解には適切なモデリングが必要不可欠である。関連する理論から偏微分方程式 (PDE) モデルを導き、それを解析する演繹的アプローチが常套であったが、昨今の実験や観測技術の進歩に伴い、データをモデリングに利活用する帰納的アプローチも注目されている。一般にはデータから PDE を構築するのは困難であり、適切な離散化の下で遷移の本質的な成分を抽出するセル・オートマトン (CA) による手法が有効である。

帰納的にデータから CA を構成する統計的 CA モデリングは Kawaharada-Lima(2013)によりその端緒が開かれ、実験データや PDE の数値解などに適用された。その局所規則は、各状態の組み合わせのデータ頻度から簡明に算出されるが、場当たりに与えられるに留まっていた。そのため、その規則の選択性の数学的理論付けが現象のメカニズムの理解に必要不可欠であった。一方、超離散化手法によって可積分系の PDE から CA を導出する研究もおこなわれている (Tokihito et al., 1996)。この手法はごく限られた方程式にしか適用できない問題点を持つものの、方程式から CA を構成する演繹的手法の可能性を示していた。

この状況に対し、研究代表者らは本研究開始 2 年前から研究グループを結成し、統計的構成法によるモデリングとモデル方程式の関連性についての研究を開始した。上記の帰納的・演繹的構成法の問題点を明確にし、データ解析と数値解析の両面からなる手法は、統計的 CA モデリング法の数学解析の嚆矢となった (関連する研究は国際会議の査読付きプロシーディングスとして二本受理済)。この連携研究を踏まえ、さらに本格的な研究活動への展開を目指すこととした。

2. 研究の目的

本研究課題では、現象の新しいモデリング手法として統計的セル・オートマトン (CA) 構成法を提案した。これは状態の遷移の本質的な成分をデータから抽出することを目的としており、(A) CA の局所規則の選択性に対する数値解析的研究 (演繹的アプローチ) と、(B) データに対して定量的に適合するモデル化手法の精緻化 (帰納的アプローチ) の両面からのアプローチによって統計的 CA 構成法の確立を目指す。データを利活用する帰納的手法を本手法の経糸とし、さらに演繹的手法によって数学理論を与え、それを緯糸として織り上げることにより、新しい数理モデルとしてのデータ駆動型モデリングへの可能性を探る。

3. 研究の方法

本研究は、演繹的アプローチ (A) と帰納的アプローチ (B) の両面から CA モデリングの研究をおこなうものである。具体的には以下の通りである。

(A) 演繹的アプローチ：数値解析的手法により、統計的 CA モデリングにおける局所規則の選択性を数学的に解析し、PDE から CA を構成する新たな手法を構築する。

(B) 帰納的アプローチ：統計的 CA モデリング手法の精緻化をおこない、データに対して定量的に適合する CA モデルの適用範囲の拡大をめざす。

(A)：すでに成果が出始めている偏微分方程式 (PDE) から統計的 CA を構築する手法の改良をおこなう。CA は時空間と状態が離散化されているが、適切な変数変換により、元の PDE の数値解と比較が可能である。そのため、まずは拡散方程式に対して、定量的な近似モデルとなるための適切なセルの取り方や状態の離散化を数値解析の見地から検討することで CA 構成手法を改良した。また、この手法は区間演算と関係があり、導かれる局所規則を数学的に解析することが可能であるメリットをもつ。ここで得られる知見を参考にして、拡散現象だけでなく、移流や波動など他の PDE に対しても本手法の適用が可能となるか検討した。

(B)：研究代表者らによってこれまで得られた、データのみから統計的に CA を構成する帰納的手法を精緻化する。統計的 CA モデリングにおけるセルの取り方やセルの取り得る状態数の設定は、適切な表現力をもつモデルの構築のためにも重要であるが、セルの数や状態数を増やすと、同時に推定すべきモデルパラメータが増えるため、適切な推定が困難になる。これは (A) における適切なセルの取り方などの知見を援用して対処した。また、この問題は統計学のモデル選択と類似な部分があり、その手法も参考にして検討をおこなった。

4. 研究成果

平成 28 年度は、研究計画の通り、(A) と (B) の双方において、空間一次元の場合に限定し、統計的 CA 構成法に関する数理科学的理解の深化を目指した。具体的には以下の通りである。(A)：偏微分方程式 (PDE) から統計的に CA を構築する手法の改良をおこなった。CA は時空間と状態が離散値を取るモデルだが、適切な値の変換により、元の PDE の解と比較が可能である。そのため、まずは拡散方程式に対して、定量的な近似モデルとしての適切なセルの取り方や状態離散化を数値解析の見地から検討した。また、この手法は区間演算と関係があり、統計的 CA 構成法で導出される局所規則について、その選択法則に対する数学的な解析が可能となった。ここで得られた知見は論文として発表した。また、それを参考にして、拡散現象だけでなく、移流や波動など

他の PDE に対する本手法の適用可能性についても検討をおこなった。(B): 研究代表者らによってこれまで得られた, データのみから統計的に CA を構成する帰納的手法を精緻化した. 本モデリング手法によるセル配置や状態数の設定は適切な表現力をもつモデルの構築のためにも重要である. この場合, セルの数や状態数を増やすと同時に推定すべきモデルパラメータが増えるが, (A)における適切なセルの取り方などの知見を援用した対処法を施し, 粘性 Burgers 方程式の解挙動を模倣する CA の構成に成功した.

平成 29 年度は, 研究計画の通り, (A)と(B)の両アプローチから横断的に CA 構成法を精緻化することを目標とした. そのため, 帰納的に導出した統計的 CA の解析的な表現を試みた. 非粘性 Burgers 方程式では特性曲線の方法で解を記述できるため, 得られるべき統計的 CA の局所規則を解析的に計算することができた. これは統計的 CA の演繹表現と言える. ここで得られる局所規則は統計的 CA 計算時のパラメータに依存して定まるものであるが, そのパラメータ依存性も込めて明らかにすることができた. これは, 実際の統計処理によって得られる統計的 CA の正当性の評価につながられるため, (A)と(B)の両アプローチによる横断研究としては重要な結果と言える. また, 適切な条件下では, 十分小さい粘性係数を持つ Burgers 方程式の解は非粘性 Burgers 方程式の解と定量的に近い. 解析的に得られた非粘性 Burgers 方程式の局所規則の演繹表現を応用して, 粘性 Burgers 方程式に対する得られるべき統計的 CA の評価が可能となった. 粘性 Burgers 方程式に対しては超離散法による CA の導出が知られているが, 我々の手法は元の方程式の解挙動を適切に模倣する CA の導出方法であるため, 統計的 CA モデリングの有効性を支持する結果と言える.

平成 30 年度は, 局所規則の演繹表現の理解を深化させ, 局所規則の選択性に関する理論を精緻化させた. 平成 29 年度では粘性 Burgers 方程式の統計的 CA を非粘性の場合で評価したが, 粘性 Burgers 方程式の場合は熱核による Duhamel の原理を用いて方程式を積分形で表現することが可能であり, その時間発展を評価することで統計的 CA の局所規則の演繹表現を計算した. 統計的 CA 構成法は, データ駆動的モデリング手法の一つであるため, 機械学習的手法との関連性を考察することは重要である. これに関連し, ニューラルネットワークを用いた CA 構成法に着手した. その性能や適用可能性については今後も検討の余地があるが, 興味深い示唆を得ることができたのは有意義であった. さらにデータからモデルを構成する手法である遅延座標系を用いた手法との関連や, 力学全構造計算法との応用も考察した. また, 本統計的 CA 構成法は, 少ない状態数でも複数の伝播速度を持つ Burgers 方程式の解挙動を模倣する CA を構成可能であったため, 本質的に現象の表現力が豊富なモデリング手法である. この手法を 2 次元のパターン表現モデルに適用を検討し, 統計的 CA モデリングの応用可能性をさらに広げることができたと言える.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 3 件)

[Akane Kawaharada](#), [Tomoyuki Miyaji](#), [Naoto Nakano](#), Analysis of a method for constructing a cellular automaton from a continuous system, International Journal of Networking and Computing Vol. 6, 230-242 (2016) (査読あり)

[川原田茜](#), [宮路智行](#), [中野直人](#), 統計的にセル・オートマトンをモデルする: その目的と実践, 数理解析研究所講究録, 第 2057 巻 2017 年 67-80.

[Miyaji Tomoyuki](#), [Sviridova Nina](#), [Aihara Kazuyuki](#), [Zhao Tiejun](#), [Nakano Akimasa](#), Human photoplethysmogram through the Morse graph: Searching for the saddle point in experimental data, Chaos, Vol. 29, 043121 (2019) (査読あり)

〔学会発表〕(計 9 件)

[川原田茜](#), 実データに基づくセル・オートマトンモデルの構成とその応用, 第 1 回京都教育大学数学談話会, 2016 年 04 月 27 日

[川原田茜](#), 偏微分方程式を模倣するセル・オートマトンモデルの構成と解析, 第 29 回京都大学応用数学セミナー, 2016 年 05 月 24 日

[宮路智行](#), 統計的にセル・オートマトンをモデルする: その目的と実践, RIMS 共同研究「統計的モデリングと予測理論のための統合的 数理解析」, 2016 年 08 月 10 日

[中野直人](#), 粘性バーガース方程式とそれに対する統計的構成法によるセル・オートマトンモデリング, 日本流体力学会年会 2016, 2016 年 09 月 26 日

[中野直人](#), Empirical CA construction method for the viscous Burgers equation and its characteristics, 日本数学会 2017 年度年会, 2017 年 03 月 27 日

宮路智行，統計的にセル・オートマトンをモデルする：その実践と展開，RIMS 共同研究「統計的モデリングと予測理論のための統合的数理研究の展開」，2017 年 8 月 28 日

宮路智行，統計的にセル・オートマトンをモデルする：その展開と展望，RIMS 共同研究(グループ型)「統計的モデリングと予測理論のための統合的数理研究の展開」，2018 年 8 月 27 日

中野直人，次元縮約と力学再構成：グレブナ基底と遅延座標埋め込み，RIMS 共同研究(グループ型)「統計的モデリングと予測理論のための統合的数理研究の展開」，2018 年 8 月 29 日

中野直人，Model reduction and reconstruction based on Groebner-Takens framework，京都大学理学研究科 MACS プログラム SG4 & 11 Joint Seminar: 数学と統計・データ科学，2019 年 2 月 18 日

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：宮路 智行

ローマ字氏名：(MIYAJI, tomoyuki)

所属研究機関名：明治大学

部局名：研究・知財戦略機構

職名：特任准教授

研究者番号 (8 桁)：20613342

研究分担者氏名：川原田 茜

ローマ字氏名：(KAWAHARADA, akane)

所属研究機関名：京都教育大学

部局名：教育学部

職名：講師

研究者番号 (8 桁)：70710953

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：大林 一平

ローマ字氏名：(OBAYASHI, Ippei)

研究協力者氏名：廣瀬 三平

ローマ字氏名：(HIROSE, Sanpei)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。