

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2022

課題番号：17K05369

研究課題名(和文)大規模の確率微分方程式に対する陽的数値解法の研究

研究課題名(英文) Research on explicit numerical methods for high-dimensional stochastic differential equations

研究代表者

小守 良雄 (Komori, Yoshio)

九州工業大学・大学院情報工学研究院・准教授

研究者番号：20285430

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：生化学、物理学、ファイナンスなど様々な分野で現象を理解するのに数理モデルの利用が考えられ、それらは現象の未来予測に繋がる。数理モデルは、通例、常微分方程式(ODE)など微分方程式で記述される。本研究では、ODEにノイズ項を加えた微分方程式、つまり、確率微分方程式(SDE)に対する近似解法を導出した。これらは、SDEで記述される数理モデルが表す現象の未来予測に役立つ。

研究成果の学術的意義や社会的意義

確率偏微分方程式を空間方向に離散化すると高い次元のSDEが現れる。一般的に、これは数値的に解きにくい stiff な問題になる。本研究課題に挙げた数値解法は、それを高精度で高速に解くことができる。数理解析に対する要求の高まりとともに、確率的な振る舞いを考慮した数理モデルが今後様々な分野に広がることが予想される。したがって、本研究課題の成果は将来的に非常に広範な分野に影響を及ぼすと考えられる。

研究成果の概要(英文)：In order to understand phenomena in many fields such as Biochemistry, Physics and Finance, we can utilize mathematical models and they are helpful for us to predict how a phenomenon evolves as time goes. The mathematical models are usually described by differential equations such as ordinary differential equations (ODEs). In the present research project, we have derived new numerical methods for stochastic differential equations (SDEs), which are ODEs with noise terms. They will help us to investigate the time evolutions of phenomena described by SDEs.

研究分野：数値解析

キーワード：陽的解法 確率微分方程式 ルンゲ・クッタ・チェビシェフ 確率遅延微分方程式 Exponential Runge-Kutta

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、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

生物学、化学、物理学、ファイナンスなど様々な分野で現象を理解するのに、数理モデルの利用が考えられる。その際、より現実的なモデルを構築する為に確率的な効果が考慮され、数理モデルはしばしば確率偏微分方程式によって記述される。これをコンピュータで解く為に、空間離散近似を適用すると大規模の確率(常)微分方程式(SDE)に至る。このようにして得られる方程式は、一般に、数値的に解きにくい stiff な問題になる。常微分方程式(ODE)であれば、stiff な問題に対しては陰的解法が有効であるが、計算量の爆発的な増加の為に、上の SDE に対してはそうではない。本研究では、stiff な SDE に対する陽的数値解法を構築する。加えて、生化学反応への応用問題についても考察する。

SDE の解が解析的に求まるのは稀である。その為、近似解を与える数値解法が提案され、近年発展を遂げている。近似には主に 2 種類あり、「強い意味」と「弱い意味」の近似がある。

多次元の SDE の解過程を  $X(t)$  ( $0 \leq t \leq T$ ) と書くと、終端時刻  $T$  における確率変数  $X(T)$  を直接近似するのが強い意味の近似である。例えば離散時刻  $t_n$  ( $0 \leq n \leq N$ ) における  $X(t_n)$  の近似解を  $X_n$  と書く時、めいめいの標本に対して、確率変数  $X(T)$  の実現値を確率変数  $X_N$  の実現値で近似する。この時、誤差は  $(E[|X(T) - X_N|^2])^{1/2}$  によって測られる。ただし、 $|\cdot|$  はユークリッドノルム、 $E[\cdot]$  は期待値演算を表す。ステップ幅の最大値  $\max_{1 \leq n \leq N} (t_n - t_{n-1})$  を  $h$  で表す時、もし  $(E[|X(T) - X_N|^2])^{1/2} = O(h^p)$  ( $h \rightarrow 0$ ) が成立するならば、近似解  $X_N$  は Strong オーダー  $p$  で真の解  $X(T)$  に収束するという。一般的な多次元 SDE に対する最も精度が高い解法として、Strong オーダー 1 の確率 Runge-Kutta (SRK) 法などが提案されている。

他方、確率変数  $X(T)$  を直接近似するのではなく、 $X(T)$  に関する任意のモーメントを近似するのが弱い意味の近似である。十分滑らかな任意の実数値関数を  $f$  で表す時、誤差は  $|E[f(X(T))] - E[f(X_N)]|$  によって測られる。もし任意の  $f$  に関して  $|E[f(X(T))] - E[f(X_N)]| = O(h^p)$  ( $h \rightarrow 0$ ) が成立するならば、近似解  $X_N$  は Weak オーダー  $p$  で真の解に収束するという。一般的な多次元 SDE に対する最も精度が高い解法として、Weak オーダー 2 の SRK 法が提案されている。

数値解法の重要な性質として数値的安定性がある。これは、計算過程で混入する数値誤差の増大を抑え込むことを意味する。一般に、陽的な数値解法は計算コストが低いが、数値的安定性に劣る。しかし、ODE の数値解法では、安定性に優れた陽的な解法が提案されている。Orthogonal-Runge-Kutta-Chebyshev 法(語の並びとは異なり ROCK 法と呼ばれる)や exponential Runge-Kutta (RK) 法である。通例 ODE に対する数値解法より SDE に対する数値解法の方が複雑であり、近似精度だけでなく安定性も考慮した数値解法を得るのは難しい。

## 2. 研究の目的

研究の目的は、非常に次元の高い SDE に対して、安定性に優れた陽的 SRK 法を導出することである。その為に、安定性に優れた ODE に対する陽的解法を SRK 法に埋め込む。研究開始当初の目標としては、以下のようなことを念頭に置いた。

- (1) 論文 [Komori and Burrage (J. Comput. Appl. Math., 2012)] で提案した Strong オーダー 1 の SRK 法を改良する。この文献の陽的解法は SDE に対して良好な安定性を持つが、欠点がある。それを取り除く。
- (2) Weak オーダー 2 の exponential RK 法に関する研究を完成させて、論文に発表する。テクニカルレポート [Komori, Cohen and Burrage (KIT Tech. Rep., 2015)] で Weak オーダー 2 の exponential RK 法を導出した。これを発展させて、原稿をある論文誌に投稿したが、掲載には至らなかった。referee からの厳しい要求に答えるべく、この研究を進めているところである。これを早く完成させる。
- (3) 論文 [Abdulle, Vilmart and Zgalakis (SIAM J. Sci. Compt., 2013)] で提案された解法を改良する。この論文の陽的解法は安定性に優れているが、数値的に解きにくい stiff な問題では分散の精度が極端に下がる傾向がある。この欠点を取り除く。

## 3. 研究の方法

本研究代表者が主に研究を遂行し、海外共同研究者の K. Burrage 教授と共同で研究を進めた。同教授は生化学及び数値解析の両面に精通しており、研究目標を達成する上で必要な共同研究者である。平成 29 年度と 30 年度に同教授の研究室に短期滞在し、ディスカッションや緊密な情報交換を行った。研究目的の (2) については、これらと関係の深い研究を行っている D. Cohen 教授も海外共同研究者に加わり、メールにて意見交換を行った。

令和 2 年度も同研究室に短期滞在を予定していたが、コロナのパンデミックの為に、渡航直前に中止になった。その代わりに K. Burrage 教授からの呼びかけによって、既にオーストラリアに渡っていた博士課程の学生 Y. Guoguo 君を入れた 3 人の Skype ゼミが始まった。これは週 1 回の頻度で行われた。このゼミでは、新たに 3 つの研究テーマに取り組んだ。これらは、上で言及した研究テーマとは全く異なり、計画当初は予期していなかったテーマであった。加

えて、A. Tocino 教授から別の研究プロジェクトへの誘いがあり、そこでも、当初は予期していなかった研究テーマに携わることになった。

令和 3 年度になっても K. Burrage 教授達との Skype ゼミを続けたが、ある事情により 9 月に中止せざるを得なくなった。その後はメールのやりとりで共同研究を続け、3 つのテーマの内、2 つのテーマについては一流の国際論文誌への論文掲載が決まった。一方、A. Tocino 教授との共同研究については、名古屋大学名誉教授の三井氏にも加わってもらって、研究を進めた。その結果、国際論文誌への論文掲載が決まった。

令和 4 年度に K. Burrage 教授の研究室に短期滞在し、残り 1 つの研究テーマについてディスカッションを行った。

#### 4. 研究成果

- (1) 安定性に優れた ODE に対する陽的解法の一つとして、exponential RK 法が知られている。このクラスの解法は exponential matrix 関数の計算を必要とするが、近年これを高速に計算するアルゴリズムが提案され、それに応じて exponential RK 法が十分に現実的な解法として見直されるようになった。我々はこのクラスの解法を拡張して、SDE に対して弱い意味で 2 次であり、平均二乗の意味で絶対安定な exponential RK 解法を導出した。得られた結果を論文 [Komori, Cohen and Burrage (SIAM J. Sci. Compt., 2017)] に発表した。
- (2) 平成 29 年秋にサンクトペテルブルク大学の若手研究者 A. Eremin を短期の academic visitor として受け入れたのをきっかけに、SDE に遅延項が含まれた確率遅延微分方程式 (SDDE) に対する数値解法の研究に取り組む機会を得た。それにより、伊藤型 SDDE に対して強い意味の近似を与え、安定性に優れた陽的解法を導出した。得られた結果を論文 [Komori, Eremin and Burrage (J. Comput. Appl. Math., 2019)] に発表した。
- (3) 上で言及したように、K. Burrage 教授とその研究室の留学生 G. Yang 君と一緒に Skype ミーティングを定期的に行うようになり、いくつかの研究成果を得た。その一つとして、SDE の解に対する Magnus 展開を利用し、新しいタイプの解法を得た。得られた結果を論文 [Yang, Burrage, Komori, Burrage and Ding (Numer. Algo., 2021)] に発表した。
- (4) 上で言及したように、A. Tocino 教授から研究プロジェクトへの誘いがあり、調和振動子へ減衰力が働きつつ、加法的なノイズも加わる系を考え、確率法によって数値的に保存される物理量と計算精度を調べた。得られた結果を論文 [Tocino, Komori and Mitsui (Math. Comput. Simul., 2022)] に発表した。
- (5) K. Burrage 教授と G. Yang 君との別の研究プロジェクトでは、移流項が半線形な非自律的 SDE を考え、これに対して物理量を保存する exponential RK 法を導出した。その際、ODE の数値解法において知られている B-series 理論を拡張し、次数拘束条件を導いた。そのような拡張は他の文献でもしばしば見られるが、ここで取り扱った exponential RK 法では B-series の重みの決め方に特別な注意が必要であった。得られた結果を論文 [Yang, Burrage, Komori and Ding (BIT Numer. Math., 2023)] に発表した。
- (6) 研究目的の (3) で述べた研究課題に取り組み、非常に次元が高く、数値的に解きにくい stiff な伊藤型 SDE に対する陽的解法を導出した。それを導出する為に我々は、線形誤差解析を用い、Strang splitting 型の解法における考え方を取り入れた。本解法には、ROCK 法が埋め込まれている。本解法は、Weak オーダー 2 を達成し、安定性に優れているだけでなく、比較的大きな時間刻み幅で高い計算精度をもつ。また、我々は exponential RK 法における重要な課題、exponential matrix 関数の高速計算にも取り組み、Krylov 部分空間法を使ったアルゴリズムを実装した。これにより、非常に高次元の問題において、我々の数値解法と exponential RK 法を数値的に比較できるようになった。確率偏微分方程式の空間離散近似によって生じる、高次元の SDE にこれらの解法を適用し、我々の解法は比較的大きな時間刻み幅で、精度の高い近似解を与えることを示した。これらの結果をまとめて、原稿を一流の国際論文誌に投稿した。原稿は、現在査読中である。掲載が決まれば、直ちにそのことを本研究代表者のホームページにて知らせる予定である。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 7件/うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Yang Guoguo, Burrage Kevin, Komori Yoshio, Ding Xiaohua	4. 巻 62
2. 論文標題 A new class of structure-preserving stochastic exponential Runge-Kutta integrators for stochastic differential equations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 1591 ~ 1623
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10543-022-00924-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Tocino Angel, Komori Yoshio, Mitsui Taketomo	4. 巻 199
2. 論文標題 Integration of the stochastic underdamped harmonic oscillator by the $\theta$ -method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Mathematics and Computers in Simulation	6. 最初と最後の頁 217 ~ 230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.matcom.2022.03.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Komori Yoshio, Eremin Alexey, Burrage Kevin	4. 巻 2293
2. 論文標題 Stability analysis of numerical methods using a linear test SDE with delay and non-delay in a diffusion term	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 100005-1 ~ 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0026922	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Yang Guoguo, Burrage Kevin, Komori Yoshio, Burrage Pamela, Ding Xiaohua	4. 巻 88
2. 論文標題 A class of new Magnus-type methods for semi-linear non-commutative Ito stochastic differential equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Numerical Algorithms	6. 最初と最後の頁 1641 ~ 1665
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11075-021-01089-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Komori Yoshio, Erenin Alexey, Burrage Kevin	4. 巻 353
2. 論文標題 S-ROCK methods for stochastic delay differential equations with one fixed delay	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 345 ~ 354
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cam.2018.12.042	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Komori Yoshio, Cohen David, Burrage Kevin	4. 巻 39
2. 論文標題 Weak Second Order Explicit Exponential Runge--Kutta Methods for Stochastic Differential Equations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Scientific Computing	6. 最初と最後の頁 A2857 ~ A2878
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/15M1041341	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Komori Yoshio, Burrage Kevin	4. 巻 CSSE-45
2. 論文標題 Modified S-ROCK methods for weak second order approximations to the solution of Ito stochastic differential equations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Kyushu Institute of Technology Technical Report	6. 最初と最後の頁 1 ~ 19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計2件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Y. Komori
2. 発表標題 Explicit numerical methods for weak second order approximations to the solution of stiff Ito stochastic differential equations
3. 学会等名 The 9th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Komori, A. Eremin and K. Burrage
2. 発表標題 Stability analysis of numerical methods using a linear test SDE with delay and non-delay in a diffusion term
3. 学会等名 International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Yoshio Komori's homepage  <a href="http://galois.ces.kyutech.ac.jp/~komori/index.html">http://galois.ces.kyutech.ac.jp/~komori/index.html</a></p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	Burrage Kevin  (Burrage Kevin)		
研究協力者	Yang Guoguo  (Yang Guoguo)		
研究協力者	Cohen David  (Cohen David)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	Tocino Angel  (Tocino Angel)		
研究協力者	三井 斌友  (Mitsui Kaketomo)		
研究協力者	Eremin Alexey  (Eremin Alexey)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
オーストラリア	クイーンズランド工科大学			
中国	ハルビン工業大学			
スウェーデン	ウメオ大学			
スペイン	サラマンカ大学			
ロシア連邦	サンクトペテルブルク大学			