

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 26 日現在

機関番号：12401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2016～2019

課題番号：16K00323

研究課題名（和文）双対関係を利用した時系列データモデリング手法の構築

研究課題名（英文）Time-series data modeling method based on duality relations in stochastic processes

研究代表者

大久保 潤（Ohkubo, Jun）

埼玉大学・情報メディア基盤センター・准教授

研究者番号：70451888

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的は、確率過程の双対性という数理的な性質を利用して、時系列データ解析の手法を構築することである。これまでに実際にフィルタリングが可能であることを示しており、さらに確率微分方程式だけではなく交通流などのモデルとしても用いられる確率過程に対する双対性の適用を可能にしたほか、パラメータ推定のための高速化やサンプリング効率の向上などの成果を得られた。当初の目標を超えて、双対性の数理を制御系などへと展開するなどの発展的な研究へと着手することもできた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

確率過程の双対性はこれまで主に数学や数値物理学の分野において研究されてきた。本研究課題では、その数理的な性質を工学的に応用するために、これまでの主に発見的に行われていた双対過程の系統的な導出を可能にし、さらに数値計算のための工夫を実施した。これらは数理的な側面からの学術的な意義を有するとともに、ムーアの法則による計算機の限界および新しい計算の枠組みが求められる中で、高速化・効率化へと向けて双対性の数理を利用するための第一歩という社会的な意義も有する。

研究成果の概要（英文）：This research project aims to construct a method for time-series data analysis based on duality relations in stochastic processes. It was shown that duality-based filtering is possible. Additionally, the following achievements were obtained: The application of the duality for the analysis of a particle hopping model; the speed-up of parameter estimation; the improvement of the Monte Carlo samplings. Beyond the scope of the initial aim, the trial of the application of the duality for control problems is also done.

研究分野：数理工学

キーワード：確率過程 双対性 時系列データ解析

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

時系列データに基づいた未観測状態の推定やモデル推定は、データ分析や意思決定に欠かせない作業である。特に確率微分方程式は基本的なモデルとして金融工学からロボットの制御など様々な領域で用いられている。粒子フィルタなどのモンテカルロ法に基づく手法が一般的であるが、これらの手法には一般に大きな計算量が必要とされる。少量のデータから確率微分方程式のモデル推定をおこなう研究も国内外で実施されているが、やはりモンテカルロ法の利用は必要となり、その計算量負荷は大きいのが現状である。今後、IoT (Internet of Things) 等を通じて迅速な情報処理の必要性が増すと予想される。このような背景を踏まえ、時系列データに対するフィルタリングやモデル推定の研究については、計算の高速化や軽量化という点において解決すべき課題が残されていた。

2. 研究の目的

本研究では、確率過程の双対性という数理的な枠組みを利用することにより、時系列データ解析の新しい手法を構築することを目的とした。

確率微分方程式の期待値や相関を、双対となる出生死滅過程を用いて計算できることは数学や数理物理学の分野を中心に知られていた。その工学的な応用については皆無と言ってよい状態であったが、研究代表者の研究成果によって双対過程の系統的な導出方法を構築できることが示されていた。そのため、双対過程に関して工学的な応用を見据えた研究を実施すること、そして実用性を増すための検討をすることが本研究の目的となる。

3. 研究の方法

双対性を利用した時系列データ解析手法の構築を目指すために、具体的には以下のような研究項目に関して研究を進めた。

- ・工学的な応用を見据えた数理的な性質の解明
- ・パラメータ推定の効率化
- ・双対過程を利用した事前計算の実施の際に必要なサンプリング手法の検討

漠然とした研究をおこなうのではなく、特に時系列データを具体的な対象と見据えることにより、実際の応用の道筋を見えやすくすることを意図した。また、これまでの研究代表者の研究により得られていた知見を用いつつ、重点サンプリング法やパラメータ推定手法、各種補間法などの具体的な数値計算手法を援用して研究を進めた。数理的な側面からの基礎的な検討だけではなく、実際に手法を適用する際に必要となる細かな数値計算のテクニックも視野に入れ、各項目について検討を進めた。

4. 研究成果

以下、得られた成果を見出しごとに分けて記載する。

- ・双対性の数理の応用先を広げるための基礎的な検討

数理的な基礎的研究として、対称単純排他過程(SSEP)および非対称単純排他過程(ASEP)と呼ばれる確率過程に関する双対性の適用を検討した。これらの確率過程は交通流の単純なモデルとして利用されることもあり、これまでも双対性に関する研究は幅広くおこなわれてきた。

これらの確率過程に対して、これまで研究代表者が開発してきた系統的な双対過程の導出方法を適用し、その結果として SSEP についてこれまで知られていなかった開放境界条件下での双対過程を導出することに成功した。また、開放境界条件下での ASEP の双対に関する議論も可能であることを示した。

本成果は、確率微分方程式や出生死滅過程だけではなく、スピン演算子を用いた確率過程にも系統的な双対過程の導出方法が応用可能であることを示し、応用の幅を広げることに成功したと言える。

- ・出生死滅過程に対する新しい双対性の利用方法の提案

確率微分方程式に対する双対過程として、出生死滅過程を扱う必要があることはこれまでの研究により判明していた。本検討では、その出生死滅過程における遷移確率の計算そのものにも双対性を利用できることを示した。

さらに、計算のためのアルゴリズムにも工夫を加えた。具体的には、確率的に解釈できない双対過程をそのまま連立微分方程式として数値的に解くことでも、実際に双対の性質を利用できることを示した。この双対性を利用することによってパラメータ推定などに必要とされる繰り返し計算を避けることができ、この理論的枠組みは時系列データモデリングの高速化に役立つと期待される。

なお、双対性において扱う変数の数が多くなる場合、次元数が巨大になり連立微分方程式を直接解くことができなくなる。そこでモンテカルロ法を用いる必要があるが、その際に「負符号問題」と呼ばれる数値的取り扱いにおける困難性が生じることも、簡単な例を用いて明らかにした。

・確率微分方程式のパラメータ推定の高速化

先行研究で提案されていたパラメータ推定手法では、各データの出発点の空間座標に関する条件付きモーメントと呼ばれる量が必要となる。そのため空間を細かく離散化し、空間座標点すべてについて、あらかじめ条件付きモーメントを計算しておく必要があった。その際、空間を細かく離散化することから、この方法には膨大な計算量が必要になるという問題点があった。

本検討では、条件付きモーメントのべき乗の部分を先に展開したうえで、双対性を用いて事前計算をおこなう工夫を導入した。この工夫によって、条件付きモーメントに必要な出発点の空間座標を引数とする形の式を導出でき、離散化したすべての空間座標に関する事前計算が不要となることから、計算量を大幅に削減することが可能となった。

・確率的勾配法に関する検討

双対性の応用の幅を広げるための模索として、機械学習等でも用いられている確率的勾配法に関する研究を実施した。具体的には、通常、離散的な時間発展として捉えられる勾配法に対して、演算子形式を用いた再解釈をおこなった。演算子形式は本研究課題のメインテーマである双対性の利用についての鍵となる部分である。実際に、本研究課題で主に扱う双対性がワイル代数と呼ばれる非可換代数と関係していることが明らかとなっており、非可換な演算子をどのように数値的に扱うべきかについての検討は、アルゴリズム改良の一助となることが期待される。

ここでは特に「分割演算子法」と呼ばれる計算化学分野などで用いられている手法の応用可能性について、基礎的な側面から検討を実施した。数値実験を用いて、確率的勾配法の演算子形式としての再解釈の妥当性や、分割演算子法の応用可能性について検証した。大幅な計算効率の向上にはつながらなかったものの、今後の検討の基礎となる成果を得られた。

・サンプリング手法の改良

事前計算で利用されるモンテカルロ計算において、非常に多くのサンプリングを必要とすることがこれまでの研究によって明らかになっていた。そこで、事前計算で利用されるアルゴリズムを含む、より一般的な「イベント駆動型」のシミュレーションに関する改良の提案と検証を実施した。イベント駆動型のシミュレーションは待ち行列理論や化学反応系の研究でも利用される応用範囲の広いものである。

通常、シミュレーションのサンプル数を増やすためには乱数の発生回数も増やす必要があるが、例えば一度の乱数発生から複数のサンプリング結果を得られれば、効率の良いシミュレーションが可能となる。本検討では、重点サンプリングの考え方を利用することで、乱数の発生回数を減らせる可能性を示唆し、実際に簡単なシステムに対する適用を通して効率性が向上することを示すことができた。同じ乱数を利用することによるバイアスの問題等の数理的な研究が今後必要となるが、本研究課題において提案していた手法の実用性を高める成果と言える。

・双対性の制御系への応用に関する検討

もともとの課題は時系列データ解析手法のための研究であったが、研究を進めるなかで、双対性をロボットなどの制御の問題とつなげられる可能性に気がついた。ロボットなどのシステムは確率微分方程式で定式化されることも多く、時系列データ解析における定式化との類似性も多い。そこで、双対性の応用可能性の幅を広げる観点から、制御系に関して双対性に注目した基礎的な検討も実施した。

具体的には制御対象が確率微分方程式にしたがうシステムを考えた。すなわち各時刻ステップでノイズの影響により制御対象が不規則に動いてしまうような制御系である。そのような不確実な環境下において、まず、どのような最終目的地に向かいたいのかをコスト関数として設定する。つまり向かいたくない場所には大きなコストを付与することで、目的地に到達しやすい形にする。さらに途中で通過することが望ましくない場所に対しても大きなコストが付与されるような形でコスト関数を定義する。これらのコスト関数に加えて電力制約等も考慮し、あまり制御入力が大きくなるようにしない。以上のような設定で、現在の状態に対してどのような制御入力を与えれば良いのか、ということを探ることが制御系で解くべき問題となる。

このような問題設定に対しては、すでに様々な研究成果が存在する。本検討においては、そのなかでも特に経路積分制御と呼ばれる手法についての部分的改良を試みた。制御系でハミルトン・ヤコビ・ベルマン方程式と呼ばれる制御の基本となる方程式が、そもそも時間方向を逆向きに考える形となっている。経路積分制御は、ハミルトン・ヤコビ・ベルマン方程式をもう一度、逆向きに時間発展させることで達成される。しかし、モンテカルロ法の利用によって次元の呪いを避けられる一方で、まだ計算量が多いという問題点もあった。

以上のような制御問題の数理的な構造に対して、これまでの本研究課題で扱っていた確率微分方程式と出生死滅過程との間の双対性との関係性が期待された。そこで本検討ではまず制御系に関する計算量削減について検討するため、素朴な関数補間の手法を利用することを提案した。提案によって実際に計算量を削減できることを示したほか、その後も基礎的な検討を進めた

結果、双対性の枠組みを利用した制御手法の構築も視野に入ってきた。この研究課題はもともとの時系列データモデリング手法の構築という目標を超えた新しいものであり、今後、本研究課題終了後にも引き続き研究を進める予定である。

確率過程の双対性は、これまで主に数学や数物理学の分野において研究されてきた。本研究課題では、その数理的な性質を工学的に応用するために、これまでの主に発見的に行われていた双対過程の系統的な導出を可能にし、さらに数値計算のための工夫を実施した。これらは数理的な側面からの学術的な意義を有するとともに、ムーアの法則による計算機の限界および新しい計算の枠組みが求められる中で、高速化・効率化へと向けて双対性の数理を利用するための第一歩という社会的な意義も有する。さらに制御系も見据えた新しい応用につながる研究にも着手できたなど、当初の目的を超えた展開を達成できたと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Jun Ohkubo	4. 巻 95
2. 論文標題 Duality-based calculations for transition probabilities in stochastic chemical reaction	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. E	6. 最初と最後の頁 023304-1--7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.023304	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jun Ohkubo	4. 巻 50
2. 論文標題 On dualities for SSEP and ASEP with open boundary conditions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Phys. A: Math. Theor.	6. 最初と最後の頁 095004-1--21
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1088/1751-8121/aa56f8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 大久保潤
2. 発表標題 双対を用いた計算について
3. 学会等名 第8回信州関数解析シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大久保潤
2. 発表標題 イベント駆動型シミュレーションのサンプリング効率化について
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 武田雄介, 大久保 潤
2. 発表標題 双対性と経路積分を用いた最適制御における補間法の利用
3. 学会等名 電子情報通信学会 2018年ソサイエティ大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Jun Ohkubo
2. 発表標題 Computation based on Duality in Stochastic Processes and Its Application
3. 学会等名 2018 International Symposium for Advanced Computing and Information Technology (ISACIT 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 荒井祐樹, 大久保 潤
2. 発表標題 確率微分方程式のモデル推定の双対性に基づいた数値計算法の提案
3. 学会等名 FIT2017 第16回情報科学技術フォーラム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 鈴木和磨, 大久保 潤
2. 発表標題 分割演算子法を用いた確率的勾配法の検討
3. 学会等名 FIT2017 第16回情報科学技術フォーラム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大久保潤
2. 発表標題 双対確率過程に対するモンテカルロ法の適用について
3. 学会等名 日本物理学会 第72回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大久保潤
2. 発表標題 開放境界条件をもつSSEPおよびASEPにおける双対過程について
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究業績のページ（研究代表者が作成した，大学の個人ページ） http://www.sp.ics.saitama-u.ac.jp/ohkubo/publications_j.html</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