

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 29 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2014

課題番号：23540143

研究課題名(和文) 確率 Runge-Kutta 法の発展的研究

研究課題名(英文) Advanced research on stochastic Runge-Kutta methods

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) 3,800,000 円

研究成果の概要(和文)：常微分方程式にノイズ項を加えた微分方程式、つまり、確率微分方程式に対する数値解法を導出した。常微分方程式に対して、計算コストが比較的 low、数値計算誤差の増大を抑える解法が提案されている。本研究では、それらの利点を保持したまま、確率微分方程式の解法へと拡張した。応用例として、生化学反応のシミュレーションに我々の解法を適用し、その有効性を示した。

研究成果の概要(英文)：We have derived new numerical methods for stochastic differential equations, which are ordinary differential equations with noise terms. For ordinary differential equations, there are well-known good methods, whose computational costs are relatively low and which can avoid numerical errors' increasing. In the present study, we have succeeded in developing them into ones for stochastic differential equations, while keeping their advantages. As a practical example, we have applied our methods for simulation of biochemical reaction system, and showed the good performance of them.

研究分野：数値解析

キーワード：数値解法 確率微分方程式 数値的安定性 数値シミュレーション 生化学反応

1. 研究開始当初の背景

ある現象がどのようなメカニズムによって起こったどのような結果なのかを理解するのに数理モデルが役立つ。例えば、生物系の化学反応に関する数理モデルには、

- (1) 離散マルコフ過程の推移確率を用いた数理モデル、
- (2) 確率微分方程式 (SDE) によって記述される数理モデル、
- (3) 常微分方程式 (ODE) によって記述される数理モデル

がある。これらは、扱う分子の数に応じて使い分けられる。分子の数が少ない場合は、分子系の状態を分子数によって捉え、(1) の推移確率に従って状態の時間変化を確率的にシミュレーションできる。実際、その為のアルゴリズムが提案されており、化学反応を理解するのに強力な道具となっている。一方、分子の数が膨大である場合、分子系の状態を濃度によって捉え、その時間変化を ODE で表すことができる。これらの中間の場合、つまり分子の数が膨大という程でもなく確率的なノイズの影響を無視できない場合は、SDE による数理モデルが考えられる。本研究が対象とするのは (2) である。

d 次元の SDE の解過程を $X(t)$ ($0 \leq t \leq T$) と書き、 R^d 上の実数値関数を f とする時、 $f(X(T))$ の期待値 $E[f(X(T))]$ を求める問題を考える。この期待値は偏微分方程式の解として記述できるので、次元 d が十分に低いなら偏微分方程式の数値解法が使える。しかし、そうでないなら急激な計算量の増大によりそれらの解法で計算するのは困難である。一般に、様々な数値計算の問題において、モンテカルロ法は次元の増大による困難を克服するのに大変有効である。したがって、上で述べた問題に対しても、SDE を直接解くモンテカルロ的な手法が有効だと思われる。そのような解法として、弱い意味の近似を与える確率 Runge-Kutta (SRK) 法が挙げられる。

弱い意味の SRK 法は、上で述べた期待値の近似を与える。つまり、離散時刻 t_n ($1 \leq n \leq N$) における $X(t_n)$ の近似解を X_n と書き、ステップ幅を $h = t_n - t_{n-1}$ で表すと、 f に適当な滑らかさを仮定するとき $|E[f(X(T))] - E[f(X_n)]| = O(h^p)$ ($h \rightarrow 0$) が成立する。ここで、 p は Weak オーダーであり、近似解の収束の速さを示す。よって、大きな p を達成する SRK スキームを作成すればよい。

一方、SRK 法には別の意味の近似を与えるものがある。それらは強い意味の近似 (平均二乗意味の近似) を与える。もし $(E[|X(T) - X_n|^2])^{1/2} = O(h^q)$ ($h \rightarrow 0$) が成立するならば、近似解 X_n は Strong オーダー q で真の解 $X(T)$ に収束すると言う。

2. 研究の目的

本研究の目標は、本研究代表者と K.

Burrage (2010) が提案した効率的な SRK 族を基に上の (2) に挙げた数理モデルに向けた様々な SRK スキームを作成することである。研究開始当初の目的としては、以下のようなことを念頭に置いた。

- (1) 数値解の非負性を保つ SRK スキームを導出する。
- (2) 多次元の Wiener 過程による乗法的ノイズ項をもつ SDE に対して、ドリフト係数に関してのみ陰的である Weak オーダー 2 の Rosenbrock-Wanner スキームを導出する。
- (3) 1次元の Wiener 過程による乗法的ノイズ項をもつ SDE に対して、Weak オーダー 3 の SRK スキームを導出する。
- (4) その他、数値的安定性に優れた陽的 SRK スキーム、所用の誤差に応じて離散時間の刻み幅を自動的に制御する SRK スキームなど様々な SRK スキームを導出する。

3. 研究の方法

「研究目的」欄に挙げた課題に以下の手順で取り組んだ。本研究は、オックスフォード大学の K. Burrage 教授、ヨハネスケプラー大学の E. Buckwar 教授、サラマンカ大学の A. Tocino 教授、ウメオ大学の D. Cohen 教授らと協力しながら遂行した。

- (1) まず、メールで連絡を取りながら基本的な準備を行う。例えば、課題を進めるにあたって重要な文献を教えてもらい、それらを読んで知識を蓄える。あるいは、疑問点を明確しそれについて考察する。4ヶ月程度を準備に充てる。
- (2) その後先方の研究室に出向き、1、2ヶ月間滞在する。ディスカッションを通して、時には数値実験で確認しながら、アイデアを練り上げていく。
- (3) 帰国後はメール等で連絡を取りながら練り上げたアイデアの実現に向けて研究を進め、課題をやり遂げる。成果をまとめて、海外の一流学術誌に論文を投稿する。

4. 研究成果

- (1) 数値的に扱いにくい生化学反応システムをシミュレーションする為に、陽的な exponential Euler 法を導出した。本解法は、準線形なドリフト項と非可換なノイズ項を持つ多次元の伊藤型 SDE を解く。数値解の非負性を保つ為に projection 法を採用し、それと SDE の数値解法と組み合わせ、生化学反応に関する数値実験を行った。その結果、特に数値的に解きにくい問題に対して我々の解法と projection 法の組み合わせが有効であるとわかった。これらの結果をまとめて、論文に発表した。

- (2) ODE に対する 4 次の Runge-Kutta 法を拡張し, 非可換な伊藤型 SDE に対して弱い意味で 2 次の与える SRK スキームを導出した. これまでは SRK 法の数値安定性解析にはスカラーのテスト方程式が用いられるのが通例であったが, 近年, 多次元のテスト方程式と新しい解析法が提案された. この解析法を我々の解法に適用し, 多次元安定性解析を行った. これらの成果を論文 に発表した.
- (3) この次に述べる項目 (4) では「SRK 法に Chebyshev 法 (Runge-Kutta 法の一つ) を埋め込む」というアイデアを用いる. これは, 伊藤型 SDE に対する SRK 法にも使え, 強い意味の近似を与える SRK 法にも使える. そこで, Roessler (2009) によって提案された強い意味の近似を与える SRK 法に Chebyshev 法を埋め込み, 伊藤型及び Stratonovich 型 SDE に対して強い意味で 1 次であり, かつ, 安定領域が拡張された陽的 SRK スキームを導出し, 研究成果を論文 にまとめた.
- (4) ODE に対する Chebyshev 法 を拡張し, Weak オーダー 2 の陽的 SRK スキームを導出した. 本スキームは陽的な解法であるから計算コストが低い. その一方で, 本スキームは拡張された数値的安定領域を持つので, ドリフト係数の固有値が負の実軸周りに分布する問題に対して効果的である. 研究成果を論文 にまとめた.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 7 件)

Yoshio Komori, David Cohen and Kevin Burrage, High order explicit exponential Runge-Kutta methods for the weak approximation of solutions of stochastic differential equations, Technical Report CSSE-41, Faculty of Computer Science & Systems Engineering, Kyushu Institute of Technology, 2014, 査読無.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, A stochastic exponential Euler scheme for simulation of stiff biochemical reaction systems, BIT Numerical Mathematics, Vol. 54, pp. 1067-1085, 2014, 査読有.

(<http://dx.doi.org/10.1007/s10543-014-0485-1>)

Yoshio Komori and Evelyn Buckwar, Stochastic Runge-Kutta methods with deterministic high order for ordinary differential equations, BIT Numerical

Mathematics, Vol. 53, pp. 617-639, 2013, 査読有.

(<http://dx.doi.org/10.1007/s10543-013-0419-3>)

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Strong first order S-ROCK methods for stochastic differential equations, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 242, pp. 261-274, 2013, 査読有.

(<http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2012.10.026>)

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Multi-dimensional linear stability analysis of S-ROCK methods for Ito stochastic differential equations, AIP Conference Proceedings, Vol. 1479, pp. 1391-1394, 2012, 査読有.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Weak second order S-ROCK methods for Stratonovich stochastic differential equations, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 236, pp. 2895-2908, 2012, 査読有.

(<http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2012.01.033>)

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Supplement: efficient weak second-order stochastic Runge-Kutta methods for non-commutative Stratonovich stochastic differential equations, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 235, pp. 5326-5329, 2011, 査読有.

(<http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2011.04.021>)

[学会発表](計 13 件)

小守良雄, Exponential Runge-Kutta methods for stiff stochastic differential equations, 京都大学数理解析研究所研究集会「応用数理と計算科学における理論と応用の融合」, 2013 年 10 月 17 日, 京都大学数理解析研究所.

Yoshio Komori, David Cohen and Kevin Burrage, High order explicit exponential Runge-Kutta methods for the weak approximation of solutions of stochastic differential equations, International Conference on Scientific Computational and Differential Equations 2013, 2013 年 9 月 18 日, University of Valladolid, Valladolid, Spain.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Stochastic exponential Euler scheme for simulation of stiff biochemical reaction system, 19th IMACS World Congress, 2013 年 8 月 27 日, Real

Centro Universitario El Escorial-Maria Cristina, El Escorial, Spain.

小守良雄, Stochastic Runge-Kutta methods with deterministic high order for ordinary differential equations, 国立情報学研究所研究ミーティング, 2013年3月29日, 国立情報学研究所.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Runge-Kutta Chebyshev methods for stochastic ordinary differential equations, Auckland Numerical Ordinary Differential Equations 2013, 2013年1月11日, University of Auckland, Auckland, New Zealand.

Yoshio Komori, Multi-dimensional linear stability analysis of stochastic Runge-Kutta methods with deterministic high order, First Austrian Stochastics Days, 2012年9月25日, Johannes Kepler University Linz, Linz, Austria.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Multi-dimensional linear stability analysis of S-ROCK methods for Ito stochastic differential equations, International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics 2012, 2012年9月21日, Kypriotis Hotels and Conference Center, Kos, Greece.

小守良雄, Kevin Burrage, 強い意味で1次の確率ルンゲ・クッタ・チェビシエフ法, 日本応用数理学会 2012年度年会, 2012年8月30日, 稚内全日空ホテル.

小守良雄, Kevin Burrage, Strong first order S-ROCK methods for stochastic differential equations, 国立情報学研究所研究ミーティング, 2012年3月15日, 国立情報学研究所.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Weak second order S-ROCK methods for Stratonovich stochastic differential equations, 2012 Tokyo Workshop on Structure-Preserving Methods, 2012年1月16日, 東京大学.

Yoshio Komori and Kevin Burrage, Explicit Runge-Kutta methods with large stability regions for Ito stochastic differential equations, International Conference on Computational Engineering 2011, 2011年10月4日, Darmstadtium conference center, Darmstadt, Germany.

Yoshio Komori and Evelyn Buckwar, Stochastic Runge-Kutta Methods with deterministic high order for ordinary differential equations,

International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics 2011, 2011年9月21日, G-Hotels, Halkidiki, Greece.

小守良雄, Kevin Burrage, 伊藤型確率微分方程式に対して大きな安定領域をもつ陽的ルンゲ・クッタ法, 日本応用数理学会 2011年度年会, 2011年9月14日, 同志社大学.

[その他]

<http://galois.ces.kyutech.ac.jp/~komori/index.html>

6. 研究組織

(1) 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

(2) 研究協力者

Kevin Burrage
オックスフォード大学・コンピューティングラボラトリー・教授

Evelyn Buckwar
ヨハネスケプラー大学・確率解析学研究所・教授

Angel Tocino
サラマンカ大学・数学科・准教授

David Cohen
ウメオ大学・数学科・講師