

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 16 日現在

機関番号：62603

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25330299

研究課題名(和文)大自由度力学系のレアイベントサンプリングと極限リスク解析

研究課題名(英文)Rare event sampling in high-dimensional dynamical systems and analysis of extreme events

研究代表者

伊庭 幸人(Iba, Yukito)

統計数理研究所・大学共同利用機関等の部局等・教授

研究者番号：30213200

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,700,000円

研究成果の概要(和文)：与えられた確率的な力学系(雑音を含む非線形のダイナミクス)に対して、珍しい現象(レアイベント)を効率的にサンプリングし、その確率をバイアスなしに計算する手法を研究し、「時間逆転シミュレーション」の方法を開発した。開発した手法は、ゴールとなる珍しい事象(たとえば東京に台風が来襲する)から初期値に向かって逆にパスを生成することで、ゴールの範囲が狭い場合の計算効率を高める点に特徴がある。逐次インポートランス・サンプリング法(SIS)を利用することで、適正な計算時間で確率をバイアスなく計算できることが示された。提案手法はさまざまな極端事象の解析に応用できることが期待される。

研究成果の概要(英文)：Rare event sampling in nonlinear stochastic dynamical systems is studied. We developed a "time-reversed simulation method", by which we can efficiently generate rare events and estimate unbiasedly their probabilities. The key idea of the proposed method is to generate paths (trajectories) from the target event (a rare event such as an exact hit of a big typhoon to Tokyo) to initial states; this can improve the efficiency of the simulation when the target region is small. Using sequential importance sampling algorithm (SIS), unbiased estimates of the probabilities of rare events are calculated without much increase of computational burden. The proposed method can be applied to the analysis of risks of extreme events.

研究分野：統計科学, モンテカルロ法

キーワード：レアイベント 極端事象 モンテカルロ法 確率計算

1. 研究開始当初の背景

(1) さまざまな分野で、与えられた確率モデルのもとでの「珍しい現象」(レアイベント)をサンプリングし、その確率を計算する手法に継続的な興味を持たれてきた。

(2) 近年、マルコフ連鎖モンテカルロ法(MCMC)や逐次モンテカルロ法などの発展により、複雑な確率的システムに対しても珍しい事象のサンプリングや確率の計算が可能になってきているが、分子シミュレーションをはじめとしたさまざまな分野で独立に研究が行われており、学際的な交流が不足していた。

(3) 研究代表者は、MCMCの一種であるマルチカノニカル法やレプリカ交換モンテカルロ法を利用してきわめて珍しい事象(たとえば確率が10のマイナス100乗のオーダー)を扱う手法の発展に注力してきた。典型的な応用例としては、ランダム行列やランダムグラフのレアイベント、カオス力学系の「珍しい軌道」を与える初期値の探索と実現確率の計算などがある。

(4) 一方、災害の予測や自動設計などの応用では、中程度に珍しい事象(たとえば確率が1/100から1/10000程度)の効率的なサンプリングが要求されることが多いが、これをMCMCやSMCなどの新しい手法で扱うのには、別の工夫や方法論が必要とされ、未開拓の課題があると考えられる。

2. 研究の目的

(1) 台風、津波、大規模停電などの極限リスクへの社会的関心が増大している。極限リスクの解析を非線形複雑系の立場からみると、大自由度の非線形力学系において「珍しい現象(レアイベント)に至る初期条件や雑音パターンを効率的にサンプリングし、その生起確率を評価する」問題と考えられる。

(2) 本研究計画では、極限リスク解析への応用を目指して、現代的な機械学習・確率情報処理の手法を用いた大自由度力学系のレアイベントサンプリング手法を新たに構築することを目指す。

(3) 具体的には、これまで研究を進めてきたマルコフ連鎖モンテカルロ法に基づく手法を大自由度系に拡張し、カーネル回帰などを使った予測手法と組み合わせることで目標を実現する

3. 研究の方法

(1) これまで行ってきたマルチカノニカル法を利用したレアイベントサンプリングの研究をまとめて欧文のレビュー論文を作成し、研究の足掛かりとする。

(2) 新たに開発する方法を簡単な確率的力学系モデルに対して数値的に実装し、その正当性と効率を検証する。有望な結果を得た場合には、順次より大規模、あるいは現実的なモデルに対してもテストを行う。それらの成果を学会発表し、さらに欧文論文にまとめる。

(3) 毎年一回以上、関連分野の海外の研究者を招へいしたワークショップを行い、研究成果を議論するとともに、情報を収集する。また、国内・海外によらず、さまざまな分野(たとえば分子シミュレーション)において、レアイベントサンプリングに興味を持つ研究者との交流と情報交換につとめる。

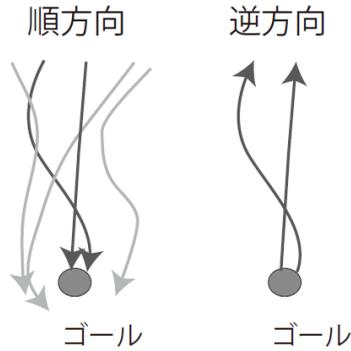
4. 研究成果

(1) マルチカノニカル法によるレアイベントサンプリングに関する最近の発展とこれまでの自分の研究をまとめて欧文の総合報告として投稿し、受理・掲載された。とりあげた内容は、ランダム行列やランダムグラフの固有値の大偏差、カオス力学系の珍しい軌道のサンプリング、サロゲートデータの生成などである。

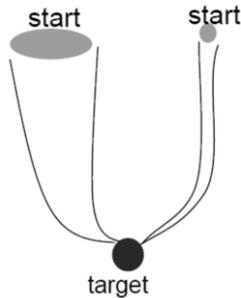
(2) 大規模洪水のモデルをレプリカ交換モンテカルロ法で扱った研究の成果を共同研究者が東京で行われた国際研究集会で発表した。しかしながら、マルチカノニカル法やレプリカ交換モンテカルロ法を素朴に適用したのでは、現実的な確率で起きる極端事象については、必ずしも十分に効果的とはいえないのではないかと、という感触を得た。

(3) そこで、予定通りマルコフ連鎖モンテカルロ法とカーネル回帰を組み合わせたレアイベントサンプリング手法について研究を進めたが、研究途上で、次項目に示す「時間逆転シミュレーション法」の着想を経たため、研究の主軸をそちらに転換することとなった。

(4) レアイベントサンプリングの手法としての「時間逆転シミュレーション」の手法を提案した。おおまかな考え方を事例で示すと次のようになる。たとえば、マルコフ連鎖あるいは非線形の自己回帰モデルで表わされる「確率台風モデル」のもとで「南海上の一定の領域で発生した台風が東京を直撃する確率」が求めたいとする。このとき、時間逆転シミュレーションにおいては、ゴールである東京から出発点の南海上へ逆方向のパスを辿って計算を行う。「出発点の存在領域」よりも「ゴール」が小さい場合には、これによって計算効率の改善が可能になる。こうした「時間逆転」については理論的な考察はあるものの、一般の確率的力学系についてレアイベントの計算手法として提案したものは見当たらない。



(5) 「時間逆転シミュレーション」は一見すると簡単に実現できるように思われる。しかし単純に確率差分方程式をニュートン法などで逆に解いていく方法では、高次元の場合に逆関数の計算で飛躍的に計算量が増えるという問題がある。また、それだけでなく、連続時間極限の場合にも求まる確率にバイアスが生じることがわかる。これは経路にそっての圧縮率が異なることから直観的に説明できる(下の図)。



(6) これらの問題点を解決するために、次の2つの段階からなる方法を考案した。
 ①簡単に扱える「近似的な時間逆転ダイナミクス」を導入する。
 ②上で導入したダイナミクスと本来のダイナミクスの差を逐次インポートランス・サンプリング法(SIS)によって補正する。

(7) 順方向のダイナミクスが雑音 η_t を含む確率差分方程式

$$x_{t+1} = x_t + f(x_t) + \eta_t$$

で表わされる場合であれば、

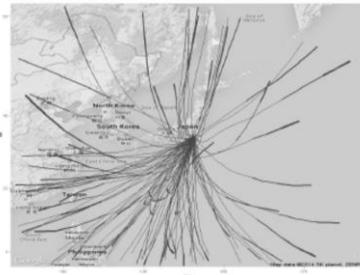
$$x_{t+1} = x_t + f(x_{t+1}) + \eta_t$$

のように関数 f の引数を入れ替えれば

$$x_t = x_{t+1} - f(x_{t+1}) - \eta_t$$

となり、時間を逆転したダイナミクスが逐次的に解けることになるが、この式は簡単で汎用性のある「近似的な時間逆転ダイナミクス」として利用することができる。

(8) 以下に示した図は確率台風モデルにおける順方向および逆方向(時間逆転)シミュレーションで生成されたパスである。いずれの場合も、終点でゴールまたは出発領域にヒットしなかったパスは最後に消去される。



(9) 単に時間を逆転した経路を生成し、レアイベントを生起させるだけでなく、レアイベントの確率がバイアスなく求まることが、提案手法の重要な利点である。このことを確かめるため、以下の①~③のシステムで数値実験を行い、乱数列を変えて順方向のダイナミクスを多数回実行して求めた確率と提案手法で求めた確率が一致するかテストした。

① 2変数の確率差分方程式モデル。最も簡単な例として、非線形の確率微分方程式を離散化した

$$x_{i+1} = x_i + \lambda_x y_i^2 \Delta t + \epsilon_x \sqrt{\Delta t}$$

$$y_{i+1} = y_i + \lambda_y x_i \Delta t + \epsilon_y \sqrt{\Delta t}$$

を考えた。

② 確率台風モデル。災害への応用のプロトタイプとして、中野慎也(統計数理研究所)らにより作成された確率台風モデルを考えた。位置と速度がともに2次元のベクトルであり、合計4変数のモデルとなる。

$$x_{i+1} = x + v_i$$

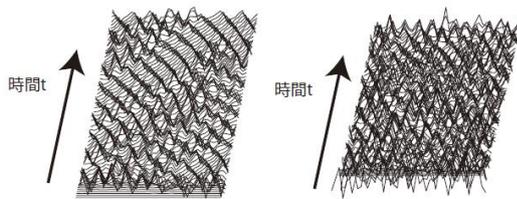
$$v_{i+1} = V(x_{i+1}) + w(v_i - V(x_i)) + \epsilon_i \sqrt{\Delta t}$$

$$V(x_i) = a_0 + a_1 x_{\phi,i} + a_2 \sin x_{\lambda,i} + a_3 \sin^2 x_{\lambda,i}$$

③ より高次元の例として非線形の連立常微分方程式モデルであるLorentz96モデルに雑音を加えたもの(時間は離散化)を考えた。

$$\frac{dx_k}{dt} = -x_k - 2x_{k-1} + x_{k-1}x_{k+1} - x_k + F + \epsilon$$

Lorentz96モデルのシミュレーションの例を以下に示す。ただし、実験に用いたのは、これよりサイズが小さいもの(変数の個数が9)である。



①～③のいずれの場合についても、統計誤差の範囲でバイアスのない確率の推定値が得られることが確かめられた。

(10) 計算効率については、初期値の存在する領域やゴールの面積の設定などに依存するが、たとえば $1/10 \sim 1/10000$ 程度の確率で起きるレアイベントに対して、「同一の誤差を達成するために発生させるパス（軌跡）の数」で十倍～数十倍程度、提案手法を実装したために増加した計算時間を含む「実際の計算時間」で数倍～数十倍の効率化が可能だが、上の実験から示唆される。

(11) 時間逆転シミュレーション法によるレアイベントサンプリングについて、国内研究会および国際研究会（次項目）で発表し、参加者と討論した。また、従来から研究しているマルチカノニカル法によるレアイベントサンプリングについても同様に国際研究会（次項目）で発表し、参加者と討論した。

(12) 国際研究会（ワークショップ）のシリーズ「rare event sampling and related topics I」「rare event sampling and related topics II」「rare event sampling and related topics III」を2013～2015各年度1回ずつ、3年連続で開催した。毎回、関連領域の外国人研究者を招へいし情報収集と討論を行った。

(13) 今後の課題としては、以下があげられる。

① ここまでの研究で得られた結果を欧文の論文として投稿する。

② 現在は初期値からゴールまでの時間ステップ数が与えられているという設定で考えているが、ゴールまでの時間ステップ数が正確に与えられていない場合（一定の幅を許す場合）にも適用できるように提案手法を拡張する。

③ 「近似的な時間逆転ダイナミクス」を改良する。

④ 無駄な経路がなるべく生じないように、ゴールからの時間逆転したパスを初期値の存在しうる領域に誘導する手法（「ガイド場」）を導入する。

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2件）

- ① Takashi Washio and Yukito Iba, Rare Flood Scenario Analysis Using Observed Rain Fall Data, Proc. JSST 2013, International Conference on Simulation Technology, 査読有、CD版でページ表記なし
- ② Yukito Iba, Nen Saito, and Kitajima Akimasa, Multicanonical MCMC for Sampling Rare Events, Annals of the Institute of Statistical Mathematics, 査読有、Vol. 66, No. 3, 611-645, 2014

〔学会発表〕（計4件）

- ① 高柳 慎一、伊庭幸人、粒子モンテカルロ法による時間逆転シミュレーション、第17回情報論的学習理論ワークショップ（IBIS14）、2014年11月18日 名古屋工業大学（愛知、名古屋）
- ② Shinichi Takayanagi, Yukito Iba, Sampling time-reversed path ensembles using sequential Monte Carlo, Rare Event Sampling and Related Topics II, 2015年03月27日 統計数理研究所（東京、立川）
- ③ Yukito Iba, Rare event sampling using multicanonical MCMC and time-reversed simulation, Rare Event Sampling and Related Topics III, 2015年11月12日 統計数理研究所（東京、立川）
- ④ Yukito Iba and Shinichi Takayanagi, Sampling time-reversed path ensembles, Topics in Advanced Monte Carlo Methods, 2016年03月09日、統計数理研究所（東京、立川）。

〔その他〕

実施した国際研究会（ワークショップ）のホームページのURLは以下の通りである。

① rare event sampling and related topics I

<http://www.ism.ac.jp/~iba/ken2014Mar4-5.html>

② rare event sampling and related topics II

<http://www.ism.ac.jp/~iba/ken2015Mar27-28.html>

③ rare event sampling and related topics III

<http://www.ism.ac.jp/~iba/ken2015Nov12-13.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

伊庭 幸人 (IBA, Yukito)

統計数理研究所・モデリング研究系・教授

研究者番号：30213200