

氏 名 高柳 慎一

学位(専攻分野) 博士(統計科学)

学位記番号 総研大甲第 2152 号

学位授与の日付 2020 年 3 月 24 日

学位授与の要件 複合科学研究科 統計科学専攻
学位規則第6条第1項該当

学位論文題目 Backward Simulation of Stochastic Process Using a Time
Reverse Monte Carlo Method

論文審査委員 主 査 教授 上野 玄太
教授 伊庭 幸人
准教授 小山 慎介
教授 藤崎 弘士
日本医科大学 物理学教室

博士論文の要旨

氏 名 高柳 慎一

論文題目 Backward Simulation of Stochastic Process Using a Time Reverse Monte Carlo Method

In this thesis, we discuss “backward simulation,” which traces a time-reversed path from a target region to the initial configuration. If the outputs of the original simulation (“forward simulation”) are easily restored from those obtained by backward dynamics, we can use backward simulation as a computational tool. In particular, the time required to calculate the probability to reach a target region from the initial configurations can be significantly reduced when the target region is small, but the initial distribution is broad. An example is a computation of the probability that a typhoon will hit the Tokyo area exactly under a given stochastic model.

It is, however, difficult to design backward dynamics with the desired properties. The naive method described later defines a natural candidate for backward dynamics. naive method does not, however, work as expected; it does not reproduce the correct probabilities defined by the forward simulation, and the calculation of factors required to correct the bias is often computationally expensive. Surprisingly, this naive method does not work as expected; it does not reproduce the correct probabilities defined by the forward simulation, and the calculation of factors required to correct the bias is often computationally expensive.

The aim of this thesis is to draw attention to these facts and propose an algorithm that partially resolves the problem. We named this algorithm the time reverse Monte Carlo method (TRMC). TRMC is based on the ideas of sequential importance sampling (SIS) and sequential Monte Carlo (SMC). Time-reversed dynamics itself was discussed in several studies, mostly from a theoretical viewpoint. On the other hand, related computational problems are found in data science, especially in time-series analysis using state-space models. Our problem can formally be regarded as a limiting case of the “smoothing” part of these algorithms, where only one observation (“target”) is available at the end of the time series. There are, however, important differences from our problem, which are discussed in this thesis. TRMC essentially involves introducing simplified backward dynamics with a weight. This weight enables the bias of estimators to be corrected. In this algorithm, we introduce a backward transition probability. We can choose an arbitrary probability density as a backward transition probability, while the computation efficiency strongly depends on it.

To give concrete examples, we also present the numerical results. Forward simulations are used to check the consistency and computational efficiency of our result. TRMC with SIS was tested for the stochastic difference equation and the stochastic

typhoon model and the Lorenz 96 model; it converges more efficiently than forward simulations in some of these examples. Three types of improved versions of TRMC are also introduced. The first one is a higher-order approximation in backward dynamics. The second one is TRMC with resampling for simulations with a larger number of steps. The third one is TRMC with an external field. In these improvements, TRMC provides unbiased estimates of the probabilities without expensive computation. These three types of improved schemes are shown to be advantageous.

We also discussed the limitation. The examples provided in this thesis show that backward simulations using TRMC provide correct averages and can be more efficient than forward simulations. In these examples, the computational efficiencies of TRMC are higher than those obtained by forward simulation. Note that TRMC can be used to calculate the probability for an arbitrarily small target region; this would be impossible by using forward simulation. There are, however, cases in which TRMC is inefficient. First, TRMC is not advantageous if the time-reversed paths rarely encounter a region in which the initial density is high; this can occur when the initial density is not broad. Another case in which TRMC can be inefficient is when the weight is highly time dependent. If paths with smaller weights in the initial stage of backward simulation acquire larger weights in the latter stage, resampling of the path (particle splitting) in SMC may not be effective. In this case, if TRMC with SIS is ineffective, TRMC with SMC also shows poor performance.

At last, we show the possible improvement of TRMC and its relation to the Bayes formula. It is useful to introduce optimal backward dynamics. Although it is not easy to obtain these dynamics a priori, the formal definition is derived. This formulation appears similar to the formulas used in Bayesian inference when the probability obtained by forward simulations is regarded as an analog of the prior distribution. It is also considered as the optimal backward dynamics.

博士論文審査結果

Name in Full
氏名 高柳 慎一Title
論文題目

Backward Simulation of Stochastic Process Using a Time Reverse Monte Carlo Method

○ 論文の概要

本論文は本文 6 章と Appendix、参考文献リストを合わせて 76 頁からなり、英語で執筆されている。通常の数値シミュレーションは、ある初期状態を与え、その時間発展を計算することで最終状態を得る。一方で本論文は逆に、興味のある最終状態をターゲットとして定め、そこから初期状態に戻る確率的シミュレーション (backward simulation) の手法を提案したものである。研究の目的は、backward simulation の結果から「もとの順方向のシミュレーションが、ターゲットとした最終状態をもたらす確率」を求めることである。ターゲットに対応した初期状態のとりうる範囲が非常に大きい場合は、backward simulation を用いることで、少ない計算時間で効率的に結果が得られることが期待できる。具体例として、順方向のシミュレーションとして台風の経路の確率モデルを仮定したときに、「赤道付近のある領域で発生した台風が東京のきわめて近くを通る確率」を計算するという課題が挙げられている。

1 章では、解くべき問題を数学的に定式化し、雑音を含んだ方程式を形式的に解いて「逆方向のダイナミクス」を求める素朴なアプローチでは (1) 逆関数を求める計算コストが大きいこと、(2) 変数変換のヤコビ行列式が現れて確率の値が変わってしまう、という問題があることを指摘している。

2 章では、逐次インポートランスサンプリング法 (SIS) および逐次モンテカルロ法 (SMC) の一般論を紹介している。

3 章では、本論文の主題である Time Reverse Monte Carlo method (TRMC) が導入されている。TRMC では、近似的な逆方向遷移確率を導入し、それによって得られる経路の確率密度と求めたい確率密度の比を SIS と同様の考え方で補正して確率を計算する。この章ではさらに、確率差分方程式の場合に使える簡便な逆方向遷移確率が提案されている。

4 章では、簡単な確率差分方程式 (2 変数)、確率台風モデル (4 変数)、ローレンツ 96 モデル (9 変数) に対して、前章で提案した TRMC を適用している。いずれの場合にも、ターゲットの再現確率は順方向のシミュレーションによるものと一致することが確認された。TRMC を実装するための計算量の増加を考慮に入れても、効率が数倍～十数倍になる場合があることが示されている。

5 章では、より効率的な方法の確立に向けて、(1) 逆方向遷移確率の高次近似、(2) 粒子のリサンプリングを含めた SMC を導入する方法、(3) 「外場」(バイアス項) を導入する方法、の 3 つが論じられ、具体例に関する効果が実証されている。

6 章では、与えられた手法の限界と改良案について議論が行われている。その中で、状態空間モデルにおける平滑化問題との関連及び相違が論じられ、その方面の先行研究・関連研究にも触れている。

Appendix では、拡散過程の時間逆転理論の既存研究のレビュー、およびファイナンスへの TRMC の応用の試みに関して述べている。

出願論文の内容のうち、1 章から 5 章の前半の主要部分は、日本物理学会の欧文誌 *Journal of the Physical Society of Japan* (査読あり) に掲載されている。

○ 論文の評価

「台風が東京のきわめて近くを通る」といった、頻度は少ないが深刻な影響をもたらす事象の確率の推定には、計算コストがかかることが知られている。順方向のシミュレーションでは最終状態を指定することができないため、多数の初期状態を用いた時間積分を実行し、東京の近くを通る結果が得られるのを待つよりほかはないからである。本論文は、最終状態から出発し、時間を逆向きにたどるというアプローチをとり、台風が東京のきわめて近くを通ることを保証したうえでその確率の推定を行うという、独創的な方法を提案している。

学術的な意義として、時間を逆向きにたどる近似的な遷移確率モデルと、この近似モデルから正しい確率の値を求めるための重みの設計法を提案したことが挙げられる。時間変化量が現時点と次時点とで近いだろうという発想から、順方向のシミュレーションを巧みに利用した逆向き遷移確率モデルである。その結果、従来と比べて 3 倍から 16 倍の計算効率化を実現している。この提案手法の有用性は、台風の例からも明らかのように、重大な事象・興味ある事象の確率を効率よく推定できるという点であり、広く応用が見込まれ、高く評価できる。

以上の理由により、審査委員会は、本論文が学位の授与に値すると判断した。