アダムス法を用いた常微分方程式の統計的推測

小林光木
早稲田大学大学院基幹理工学研究科 数学応用数理専攻

次の常微分方程式に従う現象を観測してノイズのあるデータを得たとき, 真値パラメータ $\theta = \theta_0 \in \Theta$ を推定する:

$$\frac{du}{dt} = f(t, u; \theta) \quad \text{for } t > 0. \tag{1}$$

ただし, 有界な開集合 $\Theta \subset \mathbb{R}^M$ に対して $\theta \in \overline{\Theta}$ とし, 各 θ に対して $f(;\theta) \in C^k(\mathbb{R}^2)$ とする. また, , 観測データ $\{(t_n, u_n)\}_{n=1}^N$ は次を満たすデータとする:

$$t_n = nh,\ u_n = u(t_n; \theta_0) + \varepsilon_n \quad (n = 1, \ldots, N).$$

ただし, $h > 0$ を刻み幅, $u(t; \theta_0)$ をある初期条件と $\theta = \theta_0$ における (1) の解とし, 観測ノイズ ε_n は平均が 0 かつ独立同分布とする. 真値 θ_0 を推定する手法としては, オイラー法による近似を用いた疑似尤度が知られており, それを用いて最尤推定量などを構成する (例えば, Brewer et al. [1]).

本講演ではアダムス法による近似解の構成法を応用し, 疑似尤度 $\ell_N(\theta)$ と最尤推定量 $\hat{\theta}$ を次のように定める:

$$\ell_N(\theta) = \sum_{n=k-1}^{N-1} \left| u_{n+1} - u_n - h\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{f}_n(\theta) \right|^2, \quad \hat{\theta} = \arg\min_{\theta \in \overline{\Theta}} \ell_N(\theta)$$

ただし, $\boldsymbol{\beta}$ は k 次アダムス・ムルトン法 [2] の近似に伴う係数とし, $f_n(\theta) = f(t_n, u_n; \theta)$ に対して $\boldsymbol{f}_n(\theta) = (f_{n-k+2}(\theta), \ldots, f_{n+1}(\theta))$ とする. (k 次アダムス・バッシュフォース法を用いた場合も同様に定められる.)

このアダムス法を用いた最尤推定法は, オイラー法を用いた最尤推定法に比べて良い結果が期待でき, 実際スモールデータでノイズが少ない場合などでは非常に有効である. ここで, 次のようなモデルの線形性を仮定する:

$$f(t, u; \theta) = \sum_{i=1}^{M} \theta_i \phi_i(t, u), \quad \phi \in C^k(\mathbb{R}^2).$$

このとき, 最尤推定量 $\hat{\theta} = \arg\min \ell_N(\theta)$ は

$$\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

で与えられる. ただし, $X_n = \nabla_\theta(\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{f}_n)$ に対して $X = (X_{k-1}, \ldots, X_{N-1})^T$ とし, $D_h u_n = (u_{n+1} - u_n)/h$ に対して $Y = (D_h u_{k-1}, \ldots, D_h u_{N-1})$ とする. このことを用いた数値結果は当日報告する.

参考文献

[1] D. Brewer, M. Barenco, R. Callard, M. Hubank, and J. Stark, *Fitting ordinary differential equations to short time course data*, Philosophical Transactions of the Royal Society A, 366 (2008), pp. 519–544.

[2] J. C. Butcher, *Numerical methods for ordinary differential equations*, John Wiley & Sons, 2016.