粒子フィルタを用いたハミルトン系の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Hamilton Systems by Particle Filters

佐藤 哲 †
Tetsu R. Satoh†

1. はじめに

ハミルトン系に対する数値シミュレーションの有力な手法として，幾何的数値解析法 [1] の研究が盛んである．幾何的数値解析法の代表的な特徴は，理論的な保存量を保存するように微分方程式を解く点にある．しかし，任意の保存量を保存する汎用的な幾何的数値解析法は開発されていない．そこで本発表では，計算機統計学を利用した粒子フィルタを使った汎用的な幾何的数値解析法を提案する．

2. 粒子フィルタによる数値計算

粒子フィルタ [2][3] は，ノイズが混入していると考えられる時系列の観測データに対し，真のデータを確率的に推定する手法の一つである．ところで，観測データに適用する粒子フィルタと幾何的数値解析法には，図 1 に示すような類似が考えられる．従って，粒子フィルタを数値計算へ有効に応用できる可能性がある．

粒子フィルタは非常に一般的な状態空間モデルを扱うことが理論的には可能であるが，情報幾何的な特異点等の困難を避けるために，本節では次のような白色雑音に基づく時系列モデルを扱う：

$$\left\{\begin{array}{lcl} \boldsymbol{x}_k &=& \boldsymbol{F}_k(\boldsymbol{x}_{k-1}, \boldsymbol{v}_k) \\ \boldsymbol{y}_k &=& \boldsymbol{H}_k(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{w}_k) \end{array}\right. .$$

ここで，$\boldsymbol{x}_k$ は時刻 $t = t_k$ での実際には観測できない状態空間変数，$\boldsymbol{y}_k$ は観測結果，$\boldsymbol{v}_k$ と $\boldsymbol{w}_k$ は白色雑音，$\boldsymbol{F}_k$ はシステムモデルと呼ばれる関数，$\boldsymbol{H}_k$ は観測モデルと呼ばれる関数である．粒子フィルタは，実際に観測された量 $\boldsymbol{y}_k$ から状態 $\boldsymbol{x}_k$ を推定することが目的である．これは数値計算で言うと，離散的に計算された結果 $\boldsymbol{y}_k$ から，真の値 $\boldsymbol{x}_k$ を推定することに対応する．そして提案手法では，$\boldsymbol{F}_k$ はオイラー法など任意の数値計算法，$\boldsymbol{H}_k$ は $\boldsymbol{x}_k$ の値に無関係に決まる保存量を計算する関数とする．

観測値 $\boldsymbol{y}_k$ から真の値 $\boldsymbol{x}_k$ を推定するために，粒子フィルタでは $t = t_{k-1}$ の観測値 $\boldsymbol{y}_{k-1}$ が得られた時にベイズの定理を用いて $\boldsymbol{x}_{k-1}$ の確率密度分布が m 個の粒子を用いて近似されているとする：

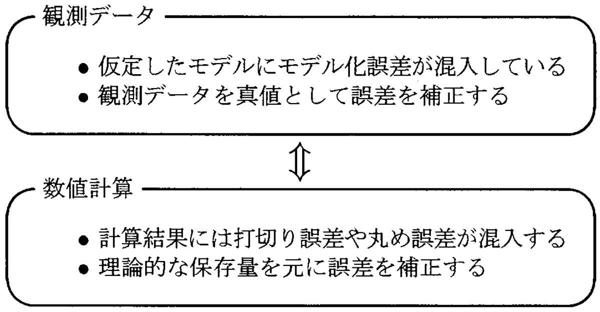

図 1: 粒子フィルタに対する観測データと数値計算

$$\{\boldsymbol{f}_{k-1}^{(1)}, \boldsymbol{f}_{k-1}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{f}_{k-1}^{(m)}\} \sim p(\boldsymbol{x}_{k-1}|\boldsymbol{y}_{k-1}). \qquad (1)$$

このような粒子分布 $\boldsymbol{f}_{k-1}^{(i)}$ と白色雑音 $\boldsymbol{v}_k$ 観測値 $\boldsymbol{y}_{k-1}$ から現在の状態 $\boldsymbol{x}_k$ を表す分布 $p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{y}_{k-1})$ を近似するための粒子が，次のように推定できる：

$$\boldsymbol{p}_k^{(i)} = \boldsymbol{F}_k(\boldsymbol{f}_{k-1}^{(i)}, \boldsymbol{v}_k^{(i)}). \qquad (2)$$

次に分布に対し現在の観測値を考慮して修正を加えるために，実際の観測値 $\boldsymbol{y}_k$ とシステムモデルからの予測である粒子 $\boldsymbol{p}_n^{(i)}$ の違いを表す比を $\alpha_k^{(i)}$ として次のように計算する：

$$\alpha_k^{(i)} = r(\boldsymbol{H}_k^{-1}(\boldsymbol{y}_k, \boldsymbol{p}_k^{(i)})) \left|\frac{\partial \boldsymbol{H}_k^{-1}}{\partial \boldsymbol{y}_k}\right|. \qquad (3)$$

ここで，r は白色雑音 $\boldsymbol{w}$ の確率密度関数，$\boldsymbol{H}_k^{-1}$ は $\boldsymbol{y}_k$ と $\boldsymbol{p}_k^{(i)}$ により一意に決まる白色雑音を与える関数とする．そして粒子の集合 $\{\boldsymbol{p}_k^{(1)}, \boldsymbol{p}_k^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_k^{(m)}\}$ から，$\alpha_k^{(i)}$ に比例した確率で再サンプリングして $\boldsymbol{f}_k^{(i)}$ とする．集合 $\boldsymbol{f}_k^{(i)}$ は，修正された現在の状態 $\boldsymbol{x}_k$ を表す分布 $p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{y}_k)$ の近似となる．微分方程式の数値解法の場合，$\boldsymbol{H}_k^{-1}$ は例えばエネルギー保存則を満たすための関数，r はガウス関数等を用いることができる．

3. 調和振動子による実験例

ハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right) \qquad (4)$$

† 株式会社オプトリンクス，Optlynx Co.,Ltd.

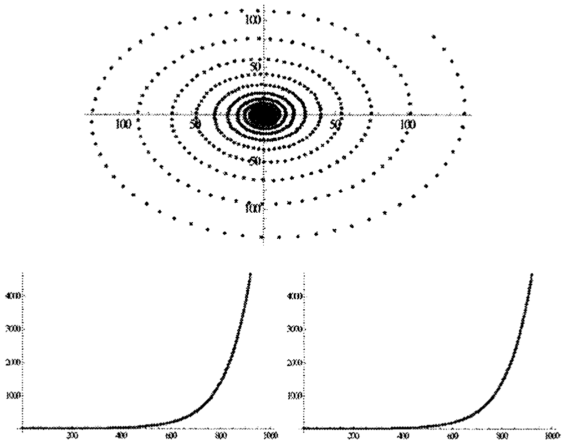

図 2: オイラー法による計算結果．上段：軌道，下段左：ハミルトニアン，下段右：影のハミルトニアン

と表される調和振動子を用いた数値実験例を紹介する．ここで p は運動量成分，q は座標成分であり，解析解を $p-q$ 平面にプロットすると円になる．この場合，ハミルトンの正準方程式は

$$\left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{dp}{dt} & = & -q \\ \dfrac{dq}{dt} & = & p \end{array}\right. \tag{5}$$

となり，1 次の陽的オイラー法による差分スキームは次のようになる：

$$\left\{\begin{array}{lcl} p_{k+1} & = & p_k - \tau q_k \\ q_{k+1} & = & q_k + \tau p_k \end{array}\right. . \tag{6}$$

ここで，τ は離散化の刻み幅である．このスキームによる計算結果を図 2 に示す．ハミルトニアンによりエネルギーの保存性を，影のハミルトニアンによりシンプレクティック性の保存性を確認することができる．初期値は $(p_0, q_0) = (0.0, 1.0)$，$\tau = 0.1$ である．軌道が発散し，その原因としてエネルギーやシンプレクティック性が保存されていないことが分かる．

次に，$\boldsymbol{F}_k = \{p_k - \tau q_k + u, q_k + \tau p_k + v\}$，$\alpha_k^{(i)} = (\sqrt{2\pi}\sigma)^{-1} \exp\{-(H - H_0)^2/(2\sigma^2)\}$ とおき，粒子フィルタを実行する．ここで，u，v は平均 0.0，分散 0.1 の正規分布に従う乱数，H は式 (4) で定義されるハミルトニアン，H_0 はハミルトニアンの初期値，$\sigma = 0.1$，$\tau = 0.1$ である．粒子数は $m = 100$ とした．ハミルトニアン等は値のゆらぎはあるものの，オイラー法のような発散が無いことが確認でき，軌道も発散せずに閉じている．軌道の各点は $m = 100$ 個の粒子の平均座標をプロットしているが，解析解である半径 1.0 の円に近い軌道を描いている．保存量のゆれ幅は 0.3 程度で，刻み幅程度の指数オーダに収まっている．ここで導入したシステムモデル $\boldsymbol{F}_k$ は 1 次の陽的オイラー法に乱数を加えただけのものであり，粒子フィルタの再サンプリングを利用することによりオイラー法から保存量を持つ幾何的数値解析法を構成できたことになる．

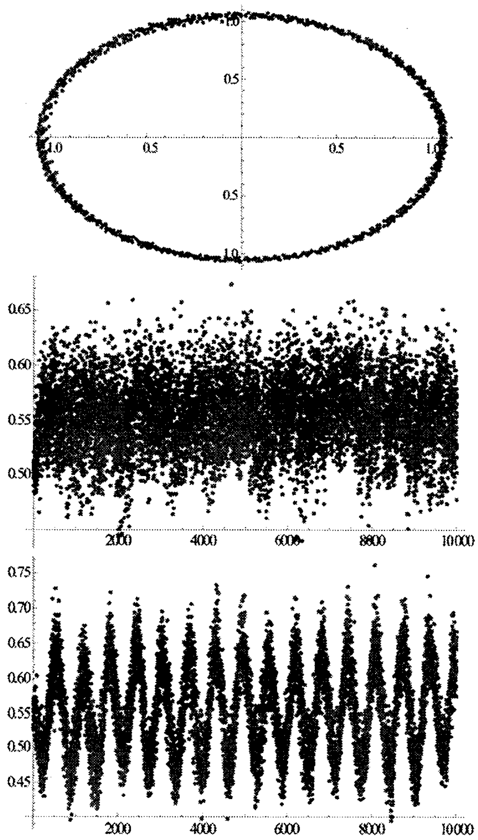

図 3: 粒子フィルタによる計算結果．上：軌道，中：ハミルトニアン，下：影のハミルトニアン

以上の計算とグラフ描画には，*Mathematica 6.0.1* を用いた．

4. おわりに

古典的なオイラー法に対し粒子フィルタを適用することで，エネルギーやシンプレクティック性を保存する幾何的数値解析法の性能を持たせ，シミュレーション精度を向上させられることを示した．

参考文献

[1] Hairer, E., Lubich, C. and Wanner, G.: *Geometric Numerical Integration–Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2002.

[2] 北川源四朗：モンテカルロ・フィルタおよび平滑化について，統計数理，Vol. 44, No. 1, pp. 31–48 (1996).

[3] 樋口知之：粒子フィルタ，電子情報通信学会誌，Vol. 88, No. 12, pp. 989–994 (2005).