法政大学学術機関リポジトリ
HOSEI UNIVERSITY REPOSITORY

PDF issue: 2026-07-25

シミュレーション・プログラムの自動微分について

福室, 一行 / FUKUMURO, Ikko

(出版者 / Publisher)
法政大学大学院理工学・工学研究科
(雑誌名 / Journal or Publication Title)
法政大学大学院紀要. 理工学・工学研究科編 / 法政大学大学院紀要. 理工学・工学研究科編
(巻 / Volume)
55
(開始ページ / Start Page)
1
(終了ページ / End Page)
5
(発行年 / Year)
2014-03-24
(URL)
https://doi.org/10.15002/00010497

シミュレーション・プログラムの自動微分について

AUTOMATIC DIFFERENTIATION OF THE SIMULATION PROGRAM

福室　一行
Ikko FUKUMURO

指導教員　堀端康善

法政大学大学院工学研究科情報電子工学専攻修士課程

We create a simulation program based on the Burgers equation discretized in two ways. The two ways are LeapFlog/DuFort-Frankel method(explicit method) and first order upwind difference scheme(implicit method). We prepare the tangent program and adjoint program, which is generated by the normal procedures and automatic differentiation tool TAPENADE. Then, we have verified the integrity of the automatic differentiation tool TAPENADE.

Key Words *: Automatic differentiation, TAPENADE, Tangent program, Adjoint program*

1.　はじめに

自動微分ツール TAPENADE とはベクトル関数を計算するソースコンピュータプログラムを入力し, ベクトル関数の導関数を計算する新たなプログラム (タンジェントモデルとアジョイントモデル) を生成するものである. 生成されるプログラムの内, アジョイントモデルが特に重要であり, 気象予報などで使われるデータ同化の手法にアジョイント法というものがある. アジョイント法では全ての格子点の勾配が必要となるが, 勾配を求めるために必要となるのがアジョイントモデルである. しかしアジョイントモデルの作成はモデルの規模が大きくなると困難であるので, 自動微分ツール TAPENADE により正確に作れることがわかればデータ同化に応用できる.

本研究では 2 種類のシミュレーション・プログラムを扱った. 1 つ目は, Burgers 方程式を Leapfrog/DuFort-Frankel 法と 1 次精度風上差分陰解法の 2 種類の方法で離散化し, それを自動微分ツール TAPENADE への入力プログラムとして, それぞれのタンジェントプログラムとアジョイントプログラムを生成した. その生成されたプログラムが正しくできているかをそれぞれ検証した.

2 つ目は, ダウンバーストの数値シミュレーションを行う, 大気シミュレーション・プログラムのソースプログラムを自動微分しタンジェントプログラムを生成した. Burgers 方程式と同様の検証方法でタンジェントプログラムの整合性を検証した.

2.　TAPENADE によるタンジェントモデルとアジョイントモデルの導出

TAPENADE[1] とはプログラムを自動的に微分するツールである. 自動微分ツールはベクトル引数 $X \in R^n$ が与えられ, ベクトル関数 $Y = F(X) \in R^m$ を計算するソースコンピュータプログラム P を入力として取る. 自動微分ツールは引数 X が与えられた F の導関数を計算する新たなソースプログラムを生成する. 自動微分は実際にプログラム P の多くの (合理的な) 想定に依存する. 始めに, 自動微分はプログラム P が全ての可能な実行時の命令のシーケンスを表すことを想定し, 実際にそれらのシーケンスを微分する. それゆえ, プログラム P の制御を一時的に棚上げし, 自動微分は単純にこの制御を微分されたプログラムに再導入する. 言い換えれば, プログラム P は区分的にのみ微分される. 命令の任意のシーケンスはベクトル関数の構成で識別され, それぞれが微分可能であると想定されるとする. このようにして, 与えられた制御は

$$\begin{aligned} &P \;\; is \;\; \{I_1; I_2; ...I_P;\}, \\ &F = f_P \circ f_{P-1} \circ \cdots \circ f_1, \end{aligned} \tag{1}$$

となる. ここで各 f_k は命令 I_k によって実装された基本関数である. 最後に, 自動微分は F の導関数を入手するために, 単純にチェーンルールを適用する. $X_0 = X$, $X_k = f_k(X_{k-1})$ とするとき, チェーンルールにより F のヤコビ行列 F' が与えられる.

$$F'(X) = f'_P(X_{p-1}) \times f'_{p-1}(X_{p-2}) \times ... \times f'_1(X_0) \tag{2}$$

これらは機械的に命令 I'_k のシーケンスに翻訳することができる．また, これらのシーケンスはプログラムPの制御のコピーの中に挿入され, プログラム P' となる．実際には, ヤコビ行列 $F'(X)$ は大量の計算と保存領域を必要とし, 方程式 (2) では繰り返し行列の掛け算を行っており, そのオーダは $m \times n$ となる．そこで, 初期値に擾乱 $\dot{X}$ を与え $F'(X) \times \dot{X}$ とし

$$\begin{aligned} F'(X) \times \dot{X} =& f'_P(X_{p-1}) \times f'_{p-1}(X_{p-2}) \\ & \times ... \times f'_1(X_0) \times \dot{X} \end{aligned} \tag{3}$$

となる．これは行列とベクトルの掛け算を維持するため, 右から左へと計算すると効率が良い．最初の命令の導関数は最初に必要とされ, こうして元のプログラムの命令に差し込まれるため, 実装が容易である．これが自動微分のタンジェントモードの原理であり, タンジェントモードで微分されたプログラムはプログラム P のタンジェントプログラム, または $\dot{P}$ と書かれる．

次に, アジョイントプログラムの生成であるが, アジョイントモデルは勾配を計算するためのプログラムである．勾配はスカラー値関数でのみ定義される．一般的なケースで, Y がベクトルであるとき, 新しい結果として, スカラー線形結合 $Y^* \times \bar{Y}$ を定義する必要がある．Y^* の星記号は転置を表しており, 行ベクトルとなる．重みベクトル $\bar{Y}$ は微分されたプログラムへの入力である．それゆえに, $Y^* \times \bar{Y}$ の勾配は $F'^*(X) \times \bar{Y}$ となる．ここで, $F'^*(X)$ は転置ヤコビ行列である．方程式 (2) を使い, 勾配は

$$\begin{aligned} F'^*(X) \times \bar{Y} =& f'^*_1(X_0) \times f'^*_2(X_1) \\ & \times ... \times f'^*_{p-1}(X_{p-2}) \times f'^*_p(X_{p-1}) \times \bar{Y} \end{aligned} \tag{4}$$

と書かれる．$A \times B$ の転置は $B^* \times A^*$ であるため時間方向が逆になる．タンジェントモードと同様に, 右から左へと計算すると効率が良い．これが自動微分のアジョイントモードの原理であり, アジョイントモードで微分されたプログラムはプログラム P のアジョイントプログラム．または, $\bar{P}$ と書かれる．

TAPENADE を使用する際に必要な情報は, ソースプログラム, トップルーチン名, 独立入力変数, 従属出力変数である．これらを指定してタンジェントモードかアジョイントモードを選択し自動微分する．

3. Burgers 方程式の離散化

自動微分ツール TAPENADE の検証のために, Burgers 方程式 [2] を扱う．Burgers 方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{R}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{5}$$

となる．

この方程式を Leapfrog/DuFort-Frankel 法と 1 次精度風上差分陰解法の 2 種類の方法で離散化した．陽解法である Leapfrog/DuFort-Frankel 法と陰解法である 1 次精度風上差分陰解法は離散化したあとの解法が大きく異なる．陽解法は現在の時刻 t における値を基にして時刻 $t + \Delta t$ の値を代数的に求め, それを繰り返していく方法である．それに対して陰解法は少し未来の時間における値を仮定し, その仮定値が正しいかどうかを場の支配方程式を使って調べて, 誤差がゼロになるように仮定値を収束させていくという方法である．したがって巨大な行列式（連立 1 次方程式）を解く必要があり, 係数行列への値を代入しできた行列式を三重対角アルゴリズム法 (TDMA) で解くという手順を踏まなければならない．

時間発展モデルのタイムステップ数を 100 刻みで 0〜500 までシミュレーションした結果を, 図 1 に示す．

4. TAPENADE の整合性の検証

2 種類の方法で離散化した Burgers 方程式の時間発展モデルを TAPENADE の入力プログラムとして自動微分し, タンジェントプログラムとアジョイントプログラムの検証を行う．タンジェントモデルでは十分に小さい擾乱の振幅で相対誤差が初期条件の振幅に比例しなければならないことを利用して検証する．相対誤差は,

$$e_R = \frac{\|M[\mathbf{x}_0 + \delta\mathbf{x}_0] - M(\mathbf{x}_0) - \delta\mathbf{x}(t)\|_2}{\|\delta\mathbf{x}(0)\|_2} \tag{6}$$

で求める．アジョイントモデルの検証には以下の恒等式

$$(\mathbf{L}\delta x_0)^T(\mathbf{L}\delta x_0) = (\delta x_0)^T\mathbf{L}^T(\mathbf{L}\delta x_0) \tag{7}$$

を用いる．左辺はタンジェントプログラムだけを必要とし, 右辺はアジョイントプログラムを必要とするので検証することができる．本研究では (7) の両辺の相対誤差を

$$e_R = \frac{(\mathbf{L}\delta x_0)^T(\mathbf{L}\delta x_0) - (\delta x_0)^T\mathbf{L}^T(\mathbf{L}\delta x_0)}{(\delta x_0)^T\mathbf{L}^T(\mathbf{L}\delta x_0)} \tag{8}$$

として, 実際にアジョイントプログラムがタンジェントプログラムに関して正確であるなら, 相対誤差 (8) は計算機 ϵ 程度になる．

5. Burgers 方程式での検証結果

Burgers 方程式の初期値を $sin2\pi x$, タンジェントプログラムの初期値を 10^{-3}, アジョイントプログラムの初期値をタンジェントプログラムの計算結果とする．また, 格子点数を 100, タイムステップ数を 100 とする．

上記の条件で 2 種類の差分スキームにより差分化した Burgers 方程式を TAPENADE により自動微分したタン

ジェントプログラムとアジョイントプログラムの相対誤差を表にまとめる．TAPENADE が正確であればタンジェントプログラムでは相対誤差が初期擾乱に比例し, アジョイントプログラムでは相対誤差が計算機 ϵ 程度になる．ここで計算機 ϵ は 0.22204460E-15 である．

表 1: Leapfrog/DuFort-Frankel 法での検証結果

初期擾乱	タンジェント	アジョイント
1.0E-3	0.47330586E-03	0.21307422E-15
0.9E-3	0.42597510E-03	0.26305459E-15
0.8E-3	0.37864441E-03	0.00000000E+00
0.7E-3	0.33131377E-03	0.21742267E-15
0.6E-3	0.28398319E-03	0.44390463E-15
0.5E-3	0.23665261E-03	0.21307422E-15
0.4E-3	0.18932204E-03	0.00000000E+00
0.3E-3	0.14199152E-03	0.44390463E-15
0.2E-3	0.94661002E-04	0.00000000E+00
0.1E-3	0.47330498E-04	0.00000000E+00

タンジェントプログラムの相対誤差は擾乱に比例しており, アジョイントプログラムの相対誤差は計算機 ϵ 程度であるので Leapfrog/DuFort-Frankel 法の時間発展モデルを正確に自動微分していることが検証できた．

表 2: 1 次精度風上差分 (陰解法) での検証結果

初期擾乱	タンジェント	アジョイント
1.0E-3	0.28938674E-03	0.20161248E-14
0.9E-3	0.26044631E-03	0.66374481E-15
0.8E-3	0.28938674E-03	0.63003902E-15
0.7E-3	0.20256708E-03	0.13715135E-15
0.6E-3	0.17362814E-03	0.56003469E-15
0.5E-3	0.14468956E-03	0.20161248E-14
0.4E-3	0.11575127E-03	0.63003902E-15
0.3E-3	0.86813252E-04	0.56003469E-15
0.2E-3	0.57875396E-04	0.63003902E-15
0.1E-3	0.28937667E-04	0.63003902E-15

タンジェントプログラムの相対誤差は擾乱に比例しており, アジョイントプログラムの相対誤差は計算機 ϵ 程度であるので 1 次精度風上差分 (陰解法) の時間発展モデルを正確に自動微分していることが検証できた．

6. 大気シミュレーションプログラム

次に, ダウンバーストの数値シミュレーションを行う大気シミュレーション・プログラムをソースプログラムにし, TAPENADE で自動微分する．ダウンバーストとは, 雲の中の雨粒が蒸発し空気の温度を下げることで, 空気の密度が増加し非常に強い下降気流が生じることである．本実験のシミュレーションプログラムでは, 初期値に球状の範囲に雨粒をセットし, 時間経過ごとの雨粒の変化と風速の変化をシミュレーションする．

7. 数値実験

大気シミュレータで 6 分間のシミュレーションを行う．シミュレーション結果のうち, 雨粒と風速の x 成分を観測データとみなす．0 分から 5 秒ごとの 73 時点での観測データを使用して，初期時刻の大気情報を推定する．0 分, 2 分, 4 分, 6 分の時点での雨粒, 風速を, それぞれ図 2, 図 3 に示す．

実験で使用したシミュレーションの対象領域，格子数，時間刻み幅は表 3 の通りである．

表 3: 対象領域, 格子数, 時間刻み幅

領域	20km × 20km × 10km
格子	16 × 16 × 16
時間刻み幅	$\Delta t = 5$ 秒 $\Delta\tau = 2.5$ 秒

8. 大気シミュレーションでの検証結果

大気シミュレーションの時間発展モデルを TAPENADE で自動微分し, タンジェントプログラムを生成した．時間発展モデルは 7. 章を使い, タンジェントプログラムの初期値を 1.0^{-5} に設定する．またタイムステップ数を 24 とする．

表 4: 大気シミュレーションでの検証結果

初期擾乱	タンジェント
1.0E-5	2.50335762E-04
0.9E-6	2.22530607E-04
0.8E-6	2.00275521E-04
0.7E-6	1.75244104E-04
0.6E-6	1.50211829E-04
0.5E-6	1.25178685E-04
0.4E-6	1.00144684E-04
0.3E-6	7.51098030E-05
0.2E-6	5.00740730E-05

タンジェントプログラムの相対誤差は擾乱に比例しており, 大気シミュレーション・プログラムの時間発展モデルを正確に自動微分していることが検証できた．

9. まとめ

Burgers 方程式のソースプログラムを自動微分し, タンジェントプログラムとアジョイントプログラムについて検証した．また大気シミュレーションのソースプログラムを自動微分し, タンジェントプログラムについて検証した．それぞれ検証した結果, TAPENADE の整合性の確認ができた．

参考文献

[1] Laurent Hascoët, Valérie Pascual, : INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMA-

TIQUE ET AUTOMATIQUE, TAPENADE 2.1 user's guide, INRIA, 2004

[2] Eugenia Kalnay, : Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability, CAMBRIDGE, 2003

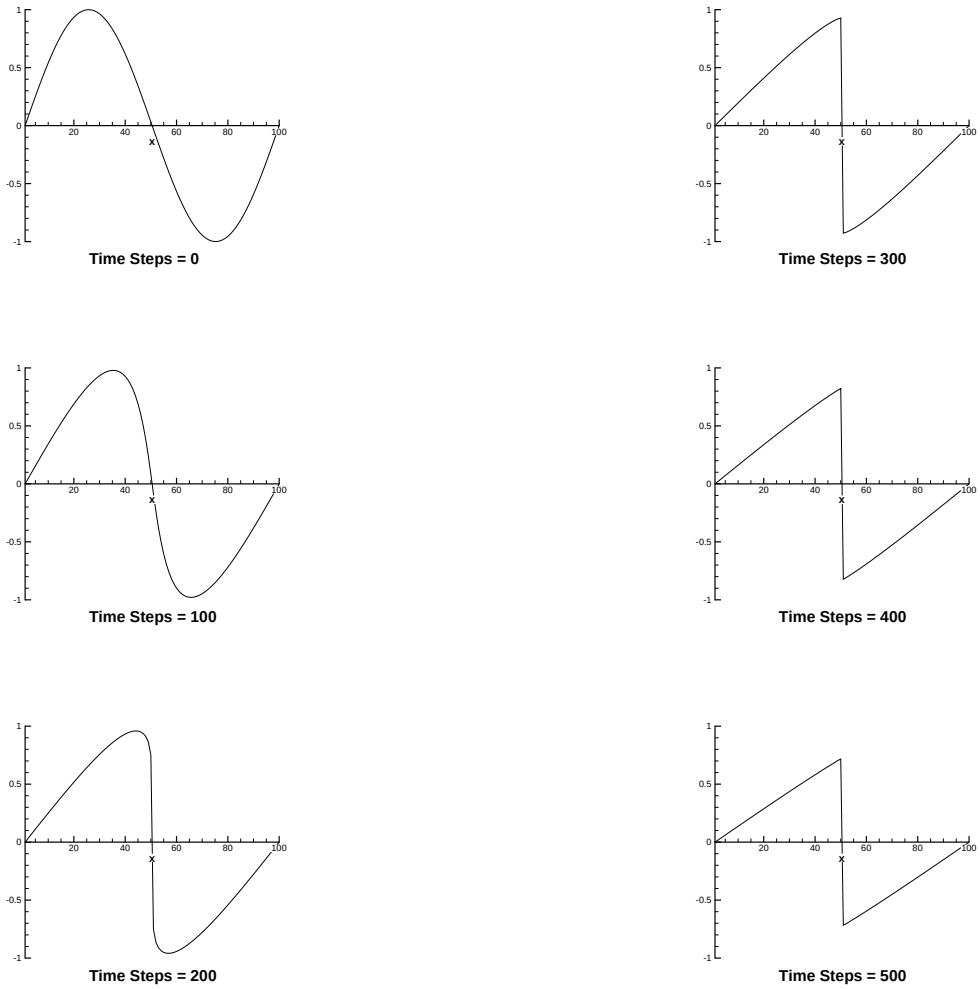

図 1: 時間発展モデルの計算結果

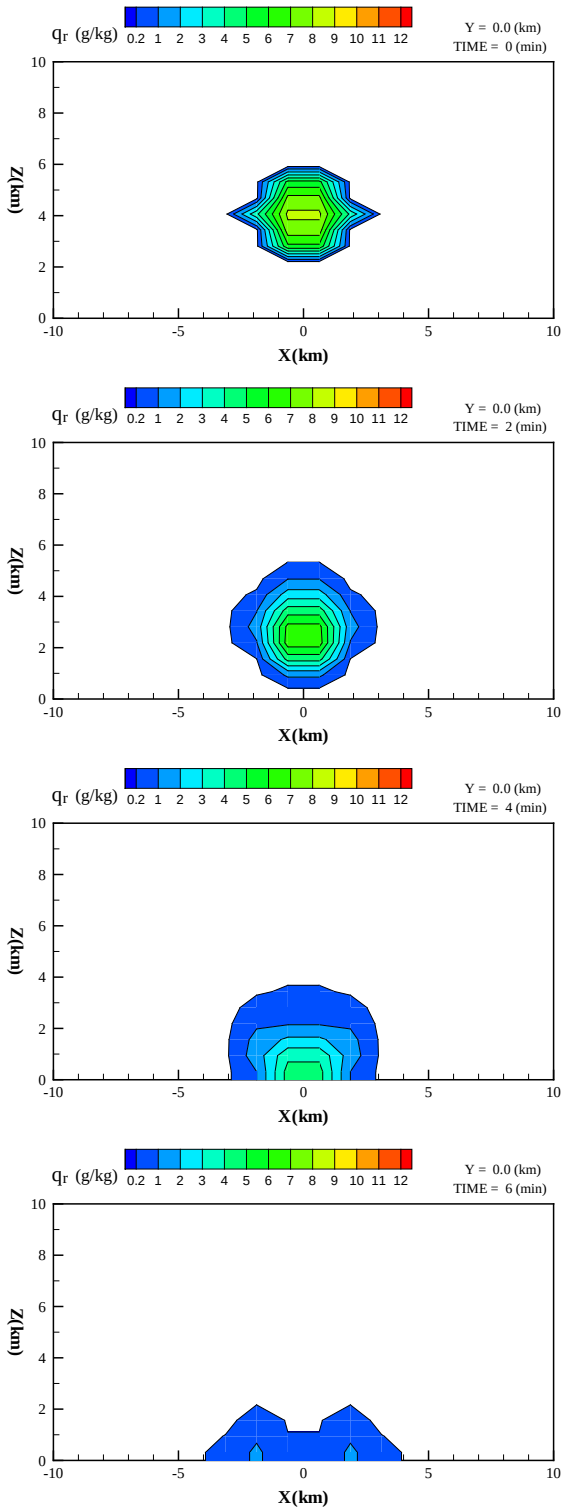

図 2: y=0 の x-z 断面における雨粒の場 (0 分, 2 分, 4 分, 6 分)

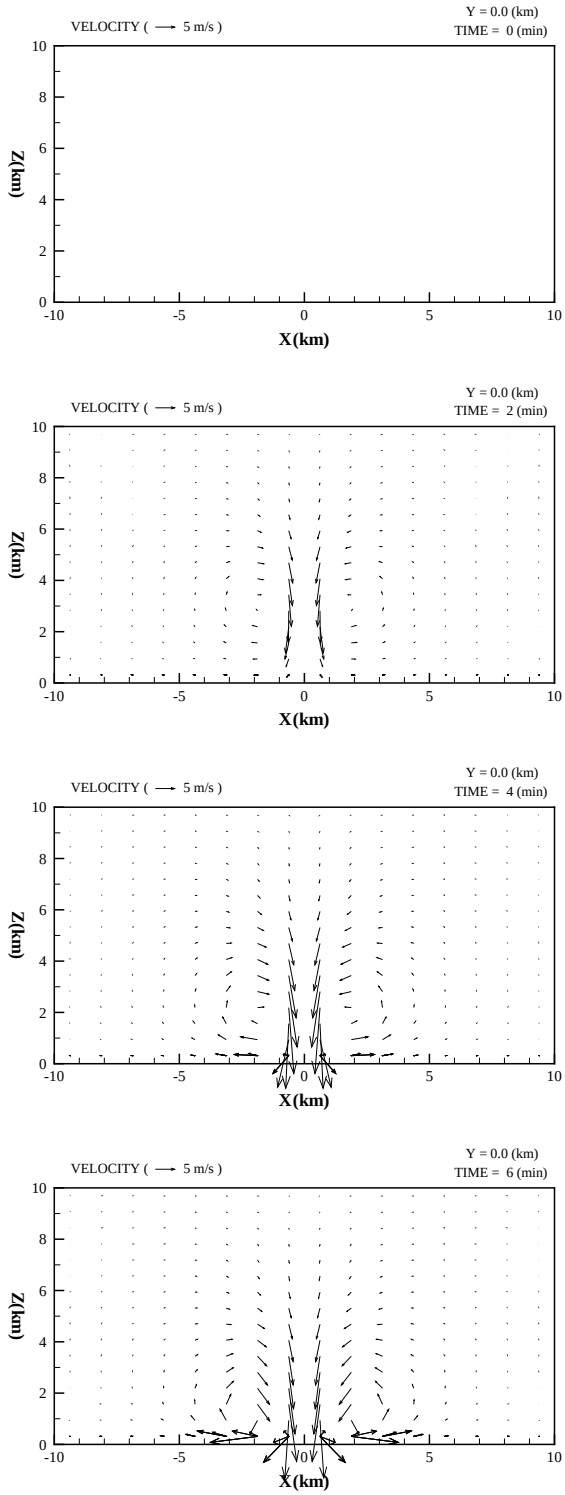

図 3: y=0 の x-z 断面における風速の場 (0 分, 2 分, 4 分, 6 分)