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

PDF issue: 2025-05-09

自動微分によるタンジェント・プログラムとアジョイント・プログラムの生成、およびそれらの検証

小川, 達也 / OGAWA, Tatsuya

(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
(巻 / Volume)
56
(開始ページ / Start Page)
1
(終了ページ / End Page)
4
(発行年 / Year)
2015-03-24
(URL)
https://doi.org/10.15002/00011121

自動微分によるタンジェント・プログラムとアジョイント・プログラムの作成およびそれらの検証

CREATING AND VERIFICATION OF TANGENT PROGRAM AND ADJOINT PROGRAM BY AUTOMATIC DIFFERENTIATION

小川 達也
Tatsuya OGAWA

指導教員 堀端康善

法政大学大学院理工学研究科電気電子工学専攻修士課程

We verify the integrity of Tangent program and Adjoint program which is generated by automatic differentiation tool TAPENADE.We use two simulation programs as an input toTAPENADE. The two programs are based on the Burgers equation discretized by first order upwind difference scheme(implicit method) and the downburst simulation program. Then, we calculate the gradient of the objective function with the Adjoint program.
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プログラムを入力し，ベクトル関数の導関数を計算する 2 種類のプログラム (タンジェントモデルとアジョイントモデル) を作成するソフトウェアツールである．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，気象予報などで用いられるデータ同化の手法であるアジョイント法で必要とされる．アジョイント法では計算領域の全ての格子点の初期値に関する勾配が必要となるが、アジョイントモデルを使ってこの勾配を短時間で求めることができる。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 により作成したアジョイントモデルを用いてデータ同化に応用できるかを検証する．

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たシミュレーション・プログラムである．

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・プログラムである．

各シミュレーション・プログラムを自動微分ツール TAPENADE への入力として，タンジェントプログラムとアジョイントプログラムを作成し，それらのプログラムの正当性を検証した．また，大気シミュレーションプログラムについて，アジョイントプログラムを使って勾配の計算を行い，有限差分法により求めた勾配との比較を行った．

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 とはプログラムを自動的に微分するツールである．[1] 自動微分ツールはベクトル引数 $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{R}^n$ が与えられ, ベクトル関数 $\boldsymbol{Y} = F(\boldsymbol{X}) \in \boldsymbol{R}^m$ を計算するソースプログラム 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．ここでプログラム P は区分的にのみ微分される．すなわち関数 F は基本関数 f_k の合成である。

$$F = f_P \circ f_{P-1} \circ \cdots \circ f_1 \tag{1}$$

最後に，自動微分は F の導関数を得るために，単純にチェーンルールを適用する．$\boldsymbol{X}_0 = \boldsymbol{X}$，$\boldsymbol{X}_k = f_k(\boldsymbol{X}_{k-1})$ 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．

$$F'(\boldsymbol{X}) = f'_P(\boldsymbol{X}_{p-1}) \times f'_{p-1}(\boldsymbol{X}_{p-2}) \times ... \times f'_1(\boldsymbol{X}_0) \tag{2}$$

ここで，初期値に擾乱 $\dot{\boldsymbol{X}}$ を与えると

$$F'(\boldsymbol{X}) \times \dot{\boldsymbol{X}} = f'_P(\boldsymbol{X}_{p-1}) \times f'_{p-1}(\boldsymbol{X}_{p-2}) \times ... \times f'_1(\boldsymbol{X}_0) \times \dot{\boldsymbol{X}} \tag{3}$$

となり擾乱の遷移が求められる．これが自動微分のタンジェントモードの原理である．

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．式 (2) より，勾配は

$$F'^{*}(\boldsymbol{X}) \times \bar{\boldsymbol{Y}} = f'^{*}_1(\boldsymbol{X}_0) \times f'^{*}_2(\boldsymbol{X}_1) \times ... \times f'^{*}_P(\boldsymbol{X}_{P-1}) \times \bar{\boldsymbol{Y}} \tag{4}$$

と書かれる．$\boldsymbol{F'}^{*}$ 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 $\bar{\boldsymbol{Y}}$ は微分されたプログラムへの入力である．また，$F'^{*}(\boldsymbol{X})$ は転置ヤコビ行列である．これが自動微分のアジョイントモードの原理である．

3. タンジェントプログラムおよびアジョイントプログラムの検証

タンジェントモデルでは十分に小さい初期擾乱を与えた際の相対誤差が初期擾乱の振幅に比例しなければならないことを利用して検証を行う．相対誤差は,

$$e_R = \frac{\|M[\boldsymbol{x}_0 + \delta\boldsymbol{x}_0] - M[\boldsymbol{x}_0] - \delta\boldsymbol{x}(t)\|_2}{\|\delta\boldsymbol{x}_0\|_2} \tag{5}$$

で求める．アジョイントモデルの検証には以下の恒等式を用いる．

$$(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0)^T(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0) = (\delta\boldsymbol{x}_0)^T\boldsymbol{L}^T(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0) \tag{6}$$

(6) 式の両辺の相対誤差を以下のようにする．

$$e_R = \frac{(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0)^T(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0) - (\delta\boldsymbol{x}_0)^T\boldsymbol{L}^T(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0)}{(\delta\boldsymbol{x}_0)^T\boldsymbol{L}^T(\boldsymbol{L}\delta\boldsymbol{x}_0)} \tag{7}$$

計算による丸め誤差の影響がないとすると，アジョイントプログラムがタンジェントプログラムに対して正確であるなら，相対誤差 (7) 式は計算機 ε 程度になる．

4. Burgers 方程式の離散化

Burgers 方程式 [2] を用いて TAPENADE の検証を行う．

$$\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u}\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial x} = \frac{1}{R}\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial x^2} \tag{8}$$

この方程式を Leapfrog/DuFort-Frankel 法と 1 次精度風上差分陰解法の 2 つの方法で離散化した．Leapfrog/DuFort-Frankel 法は陽解法であり，現在時刻 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．

1 次精度風上差分陰解法は陰解法であり，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．陰解法では，巨大な連立一次方程式を解く必要があり，三重対角アルゴリズム (TDMA) を用いて解くという手順を踏まなければならない．

本研究では，初期値を $sin2\pi x$，格子点数を 100，計算領域を $0 \leq x \leq 1$，境界条件を $u(0) = 0$，$u(1) = 0$ とする．1 次精度風上差分陰解法において，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．

5. Burgers 方程式における検証結果

1 次精度風上差分陰解法を用いた時間発展モデルを TAPENADE へ入力して得られ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以下に示す．ここで，タンジェントプログラムの初期値は初期擾乱であり，アジョイントプログラムの初期値はタンジェントプログラムの結果である．

タンジェントプログラムの相対誤差は初期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，一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できていることが検証できた．

表 1 一次精度風上差分 (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
1.0×10^{-3}	5.4110350E-04	1.1262991E-16
9.0×10^{-4}	4.8699159E-04	1.3904927E-16
8.0×10^{-4}	4.3288018E-04	1.7598424E-16
7.0×10^{-4}	3.7876920E-04	0.0000000E+00
6.0×10^{-4}	3.2465861E-04	3.1286087E-16
5.0×10^{-4}	2.7054834E-04	0.0000000E+00
4.0×10^{-4}	2.1643834E-04	1.7598424E-16
3.0×10^{-4}	1.6232857E-04	1.5643043E-16
2.0×10^{-4}	1.0821895E-04	1.7598424E-16
1.0×10^{-4}	5.4109452E-05	1.7598424E-16

6. 大気シミュレーションプログラムによる数値実験

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．

大気シミュレーションプログラムで 0 分から 5 秒ごとの 73 時点で 6 分間のシミュレーションを行う．0 分，2 分，4 分，6 分の時点での雨粒を図 2 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 2 の通りである．

表 2 計算領域，格子数，時間刻み幅

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

7. 大気シミュレーションにおける検証結果

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とアジョイントプログラムを作成した．時間発展モデルは 6 章のプログラムを用い，タンジェントプログラムの初期値として，初期値を与えた雨粒だけ (図 2 における球の内側の雨粒) に以下にある初期擾乱を与える．また，タイムステップ数は 72 とする．タンジェントプログラムの結果をアジョイントプログラムの初期値としてアジョイントプログラムの検証を行う．それぞれ (5) 式，(7) 式から求めた相対誤差を表 3 に示す．

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

アジョイントプログラムの相対誤差は計算機 ε 程度に小さくないが，これは計算による丸め誤差の影響によるものと考えられる．

表 3 大気シミュレーションの検証結果

初期擾乱	タンジェント	アジョイント
1.0×10^{-6}	2.2001120E-11	3.47739156925E-04
9.0×10^{-7}	1.9800809E-11	3.47739156924E-04
8.0×10^{-7}	1.7600197E-11	3.47739156928E-04
7.0×10^{-7}	1.5400007E-11	3.47739156928E-04
6.0×10^{-7}	1.3199317E-11	3.47739156926E-04
5.0×10^{-7}	1.0999829E-11	3.47739156924E-04
4.0×10^{-7}	8.7993015E-12	3.47739156928E-04
3.0×10^{-7}	6.6000122E-12	3.47739156926E-04
2.0×10^{-7}	4.3995122E-12	3.47739156929E-04
1.0×10^{-7}	2.1973787E-12	3.47739156930E-04

8. アジョイントプログラムによる勾配の計算

1 章で述べたように，アジョイントプログラムは勾配を計算するためのプログラムである．本研究では，(9) 式の目的関数の初期値に関する勾配を，雨粒と風速の x 成分 $\boldsymbol{u}$ の 2 つについて，2 種類の手法で求め，比較する．

$$J(\boldsymbol{x}_0) = \frac{1}{2}\sum_{t=0}^{N}(\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{xob}_t)^2 \tag{9}$$

ここで，t は時刻ステップであり，$\boldsymbol{xob}_t$ は各時刻における観測データである．

1 つ目は大気シミュレーションの時間発展モデルから有限要素法を用いて求める方法である．2 つ目は大気シミュレーションのアジョイントプログラムを用いて求める方法である．雨粒と風速の x 成分についての勾配の計算結果を，それぞれ図 3，図 4 及び図 5，図 6 に結果を示す．

2 つの方法で求めた勾配は十分な精度で一致しており，TAPENADE で自動微分して作成したアジョイントプログラムで十分な精度の勾配が計算できた．

また，2 つの方法の実行時間 (CPU 時間) は表 4 に示す．

表 4 勾配の計算のための CPU 時間 (s)

有限差分法	アジョイント
4092	2.69

有限差分法を用いた場合と比較して，極めて短い実行時間で勾配を計算することができている．

9. まとめ

自動微分ツール TAPENADE を用いてソースプログラムを自動微分することについて論じた．Burgers 方程式と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，生成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検証を行い，正確に自動微分できていることを確認した．

また，大気シミュレーションにおいてアジョイントプログラムを用いて，目的関数の勾配が十分な精度で計算できることを示した．そのうえ，有限差分法を用いた場合と比較して実行時間 (CPU 時間) を大幅に減少させることができた．

参考文献

1) Laurent Hascoët, Valérie Pascual, : INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET AUTOMATIQUE, TAPENADE 2.1 user's guide, INRIA, 2004
2) Eugenia Kalnay, : Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability, CAMBRIDGE, 2003

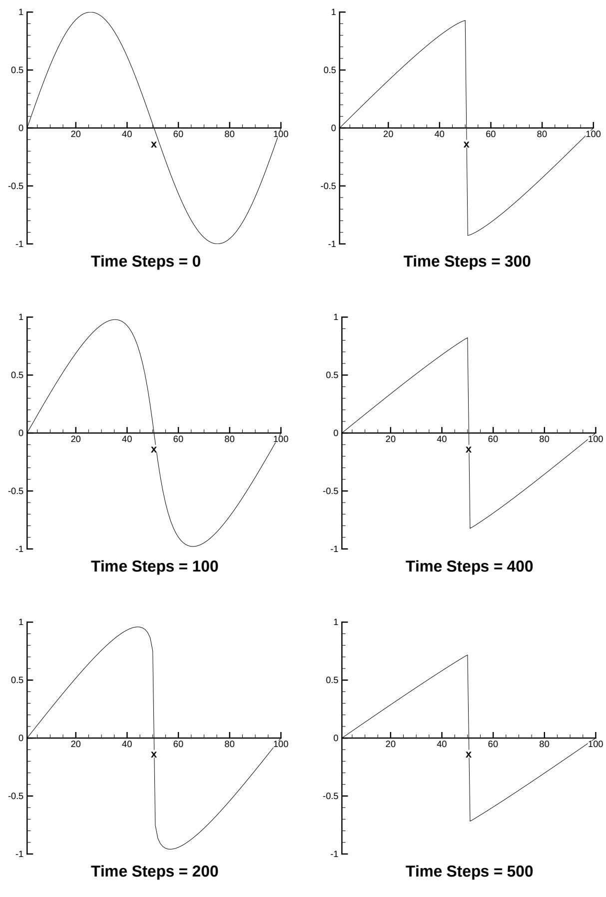

図 1 一次精度風上差分による Burgers 方程式の時間発展モデルの計算結果

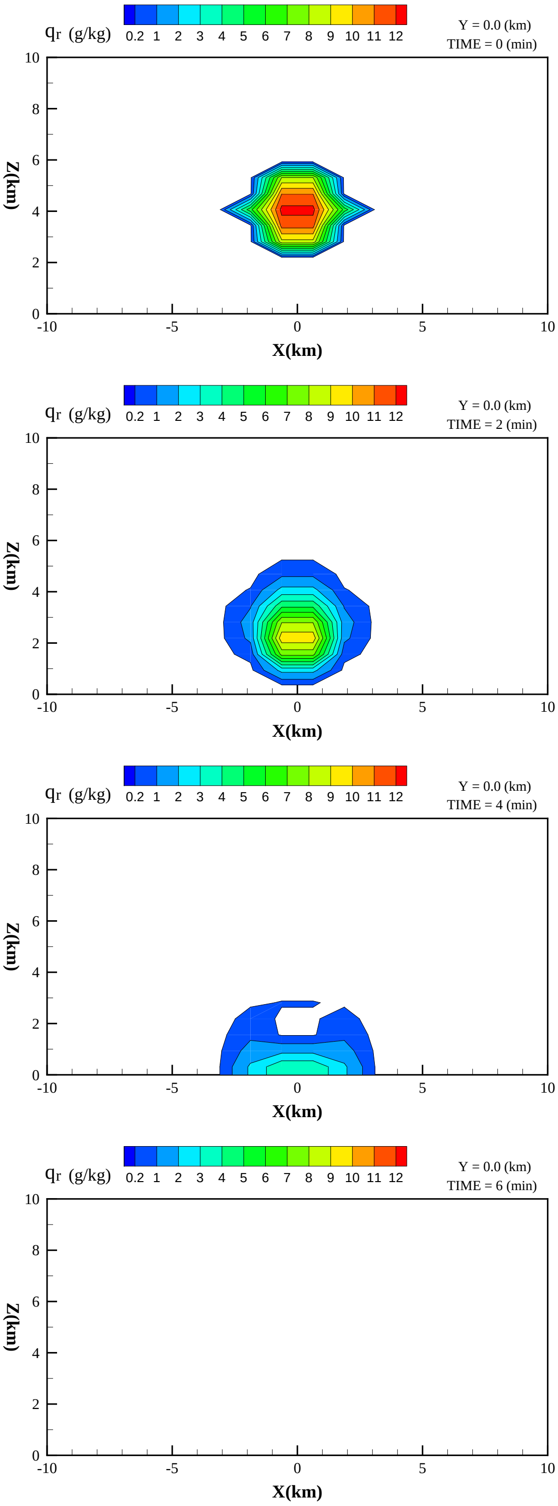

図 2 y=0 の x-z 断面における雨粒の場 (0 分，2 分，4 分，6 分)

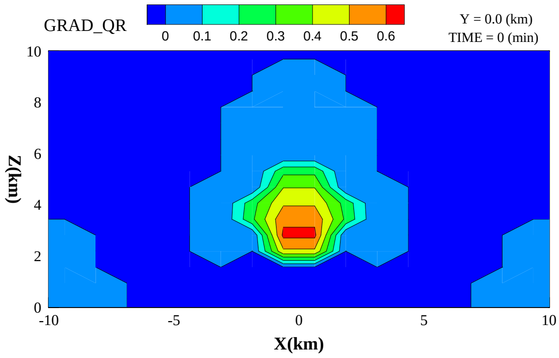

図 3 有限差分法で計算した雨粒の勾配

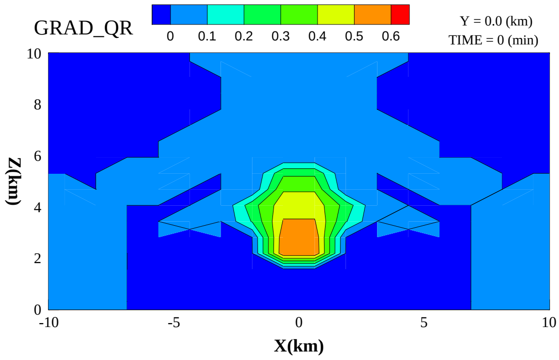

図 4 アジョイントプログラムで計算した雨粒の勾配

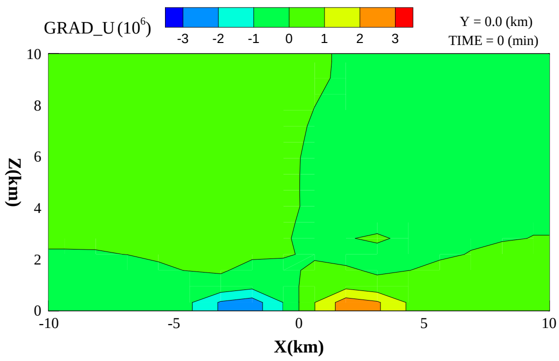

図 5 有限差分法で計算した風速の x 成分の勾配

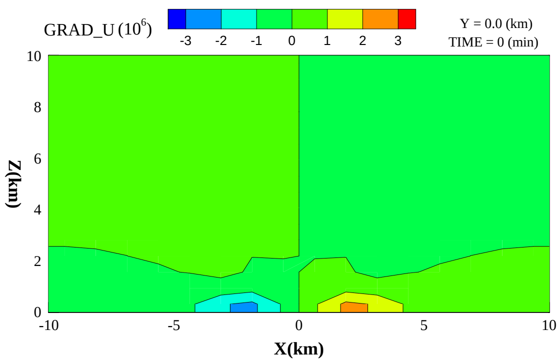

図 6 アジョイントプログラムで計算した風速の x 成分の勾配