感度解析について

香田　正人，本間　俊充

感度解析における代表的な方法論や基本的な概念・考え方について，現代的アプローチに基づく新しい技術展開を解説する．本稿第1節では感度解析技術において基本となる考え方について述べる．第2，3節では各々，局所的感度解析（ローカル感度解析）とグローバル感度解析の代表的な方法論や基本的な概念・考え方について解説する．

キーワード：ローカル感度解析，感度微係数，汎関数微分，グローバル感度解析，FAST，Sobol' 法

1. 感度解析の考え方

現代社会が直面する重要課題として，地球温暖化の防止やクリーンな環境の保全，持続可能な経済を支える多様な資源とエネルギーの確保，さらには国際金融マーケットの安定化等が指摘されて久しい．こうした問題解決のために，地球温暖化の進行度や環境汚染レベルを予測して必要な施策を講じたり，原子力プラントや金融マーケットのリスク評価に基づくリスクの低減策などを決定するには，複雑な現象の予測を可能とする演繹的モデルの構築が必要になる．

しかし，様々の現象論的な要因が複合的に組み合わされた大規模複雑系においては，予測モデルのパラメータ（入力変数）に不確実さが付随するのが普通である．こうした入力変数の不確実さがモデル内に伝播されて，モデルの予測結果（出力変数）にも不確実さをもたらす．そのため，モデル因子が内包する不確実さを確率分布の形で組み込み，システムの入出力関係に着目した帰納的なモデルの開発を行うことが求められている．そうした場合，モデル因子の現象に対する説明力や，モデルへの“あてはまりのよさ”の評価が大切である．すなわち感度解析が重要となる．

モデル因子の現象論的な不確実さが，モデル出力の認識論的な不確実さに与える影響の度合を評価するのが感度解析である．言い換えれば，感度解析はモデル出力の不確実さに対するモデル因子の不確実さの寄与度を評価することである．感度解析により重要なモデル因子の同定を行い，クリティカルな要因を特定することができる．また，感度解析はリスク評価に基づくリスク低減のための施策や，関連研究の優先度の決定などにも有効である．感度解析における最近の新しい展開については，Saltelli らの成書[1]～[3]に詳しい．

十分な情報や知識が得られない不確実な状況下でも，冒頭に述べたような複合的課題に対して可能な代替案を評価し，必要とされる方向性を決定するようなアプローチとして Post-Normal Science（PNS）と呼ばれる考え方が提唱されている[4]．近年こうした科学技術に対するポストモダン主義的な考え方が注目されているが，感度解析は PNS に沿った技術として理解することができよう．以下ではそうした動向も踏まえ，感度解析全般において基本となる考え方につき要点をまとめる．

1.1 「モード2」のモデル構築様式

現代社会に解決が求められている様々な複合的課題について，自然界，人工物界や社会経済システム等のいわゆる大規模複雑系を対象として，十分な知識が得られない不確実な状況下で信頼性の高いモデルを構築するにはどうすればよいか？　それには，適当な数理モデルを学術論文の中に探すだけではなく，感度解析から洞察を得てモデルの改善に必要なヒントを探さなければならない．そうして現実の複合的諸問題のモデル構築にチャレンジする中で，既知のモデルの不十分さが感度解析によりあぶり出される結果として，学術的にも新しいモデルが開発され，研究の深化や発展につながることが期待できる．

現象自体に知識基盤を置くためには，大学や研究機関の専門家のみならず，複合的課題に通じた実務家，政策担当者，地域社会等の利害関係者（ステークホー

こうだ　まさと
筑波大学 大学院システム情報工学研究科
〒305-8573 つくば市天王台 1-1-1
ほんま　としみつ
日本原子力研究開発機構安全研究センター
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4

ルダー）が協働できる分野横断型の取り組みが必要となる．モデル構築に向けてのこのような接近は，ギボンズ（Gibons）が「モード2」の知的生産様式と名づけたモード論に通じる[5]．すなわち「モード1」の知的生産様式は，個々の専門分野の中で独創的学術価値を求めて行われる従来型のアカデミックな研究である．これに対して，「モード2」の知的生産様式は専門家のみならず，ステークホールダーが協働する分野横断型の取り組みである．

モデル構築においては現象論的要因が複雑に相互干渉するため，モデル因子の重要性の同定と出力結果の認識論的な解釈について，ステークホールダーの協働が欠かせない．こうした観点から，感度解析は「モード2」の知的生産様式に属するものと考えることができる．すなわち，現象の予測を行うための作業仮説としてモデルを捉えた場合に，感度解析は「モード2」のモデル構築様式として，“サービス可能な，すなわちモデル開発や，研究・施策の方針決定に役立つ知識と洞察（serviceable knowledge and insight）”を発見するツールであると解釈できる．

1.2 シナリオ分析（What-If Analysis）

モデルの入力変数（パラメータ）を対象として，1回の入力変数のサンプリングの都度（one-at-a-time）に出力変数を計算し，想定される入力変数をすべて網羅するまで数値シミュレーションを繰り返す感度解析の伝統的な手法がある．予測モデルの場合などには，将来の状況変化を見越したシナリオ（what-if 仮説）に基づいて入力変数を生成し，シナリオ・パラメータの分布に従ったサンプリングを繰り返して数値シミュレーションを行う．そのため，こうした感度解析はシナリオ分析として理解することができる．

金融マーケットにおける最近の国際的なバブル崩壊に見られたように，衝撃的な不測の状況変化に対しても，リスクシナリオに基づく感度解析により事前にリスクヘッジ等の対応策を準備し，数値シミュレーションを繰り返しながら先手を打っていく機動的なビジネス戦略の策定などにシナリオ分析が有効である．ただし，シナリオ・パラメータのサンプリング1回ごとに数値シミュレーションを繰り返すため，一般的に計算コストが高くなる．またリスクの定量化においては，現象論的要因が複雑に絡まるモデル因子に対して，想定される状況変化をシナリオ・パラメータに有効に反映させる必要があり，上述の「モード2」の様式による分野横断型の協働も必要となる．

モデル因子に付随する不確実さを確率分布の形で組み込んで，現実に起こりうる擬似シナリオに基づく感度解析を行う場合には，モンテカルロ法がよく使われる．もし事前に確率分布関数が分かっていれば，それに従ったシナリオ・パラメータのサンプリングを行って数値シミュレーションを行えばよい．こうしたリスクの定量化や評価などにおいて，復元を許してリスクレンジからのリサンプリングを繰り返す手法を parametric bootstrapping と呼ぶ．

1.3 グローバル感度解析と GIGO

近年，グローバル感度解析（global sensitivity analysis）が注目されている．グローバル感度解析は，現象に関する入出力関係などのシステム機能に着目し，内包する不確実さを確率分布の形で組み込んだ，帰納的なモデルからのアプローチと考えることができる．例えば，分散分析（ANOVA：Analysis of Variance）に基づくグローバル感度解析手法としては，モデル因子の高次元空間における Fourier 変換やモンテカルロ法によるサンプリングの適用により，モデル出力の総分散（すなわち不確実さ）を関連するモデル因子の各次元の分散に分解して総分散への寄与度を評価する．詳しくは，本特集号の別稿（劉氏による第2論文と，本間による第3論文）や，本稿の3節を参照されたい．

分散分析や上述のシナリオ分析の適用に当たっては，モデル因子のサンプリングを行う際に GIGO（Garbage-In Garbage-Out）に注意すべきことがよく知られている．つまり，“ゴミを入力すれば，ゴミが出力される”のは必然の道理であり，許容される入力変数の高次元パラメータ空間におけるサンプル軌道のエルゴード性（ergodicity）や，シナリオ・パラメータの発生頻度分布などに留意して適切なサンプリングを行う必要がある．こうした問題については，本特集の香田による第4論文で解説する．

1.4 感度解析の限界

上述のように感度解析にはモデルに基づく数値シミュレーションが必須となるが，Oreskes らは Science 誌に発表されたポストモダン調の有名な論文[6]で，予測モデルの数値的検証には一般的に限界が伴うことを指摘している．これは作業仮説としての予測モデルが持つヒューリスティックな本質に関係するもので，数値シミュレーションによってはモデルを真だと証明することはできないこと，すなわち予測モデルとは“開いた系”についての発見的表現に過ぎず，ユニー

クには決定できないことを警告するものである．つまり，モデル構築の際に便宜上組み込まれた仮説やアプリオリな論拠はモデル自体を開いた系にし，数値シミュレーションは出力変数と外界実現値との一致を示すことで，モデルの信頼性を部分的に正当化（corroborate）するに留まる[7]．

こうした指摘は感度解析にとっても無縁ではあり得ず，その有効性と限界についての重要な示唆を与え，感度解析を研究し適用する際には常に念頭におくべきである．したがってモデル構築における感度解析の主要な役割は，モデル因子の擾乱や不確実さに対するモデルの出力結果について，外部観測値との直接比較や，可能な他のモデルによる出力値とのモデル間の相互比較を行い，不一致がある場合にはモデルを批判的に吟味し，より信頼性の高いモデル開発への改善につなげることにある．

2．局所的感度解析について

本節では，現象に対して演繹的に導かれた状態方程式や数理モデルを前提に，システムの状態変数やモデル関数に対する局所的な感度解析で重要となる方法論や基本的概念・考え方について解説する．ここでの“局所的”とは，基準とする状態変数や参照するモデル因子の値を固定し，その近傍における感度解析という意味である．これは，1.3節で簡単に触れたグローバル感度解析に対して，ローカル感度解析（local sensitivity analysis）とも呼ばれる．

以下では，対象を演繹的に操作してモデル構築やシステムを最適化する立場から，入力変数を関数に拡張した場合の取り扱い方や確率感度解析，さらに最適化への応用例としての設計感度についても触れる．また，特に断らない限りモデル因子としてのパラメータと入力変数，システムの状態変数と出力変数とは同義とする．

2.1 感度微係数

システムの状態変数を $y_i(i=1,2,\cdots,n)$，パラメータを $x_j(j=1,2,\cdots,k)$ として，状態変数（出力変数）に対するパラメータ（入力変数）の寄与度を計算することを考える．もし，パラメータの変化量（差分）が十分小さければ，状態変数の差分に対する入力変数の差分の比，すなわち差分商は微係数の定義式に他ならない．したがって，感度微係数 S_{ij} を以下の偏微分により定義する．

$$S_{ij}=\frac{\partial y_i}{\partial x_j}$$
$$\cong\frac{y_i(x_1,x_2,\cdots,x_j+\Delta_j,\cdots,x_k)-y_i(x_1,x_2,\cdots,x_j,\cdots,x_k)}{\Delta_j} \qquad (1)$$

ここに Δ_j はパラメータ x_j に対する微小差分量を表し，(1)式の右辺は感度微係数 S_{ij} の有限差分（finite difference）である．ここで $(n\times k)$ 次元の感度行列を $S\equiv[S_{ij}]$ と定義する．

感度微係数（partial derivative sensitivity coefficient）は，システムの状態変数に対するパラメータの寄与度を局所的に与えるものである．このとき，感度行列要素の絶対値の大小関係を比較することで，パラメータの重要性を評価することができる．すなわち，感度微係数の絶対値が大きなパラメータは状態変数への寄与も相対的に大きいと考えられるので重要性が高い．例えば，もし感度微係数が0であればそのパラメータを固定してモデル因子から省略できる．その他，感度微係数の符号はパラメータが状態変数へ及ぼす効果の符号を与えるので，パラメータの特性理解に有用である．また，状態変数の局所的な勾配情報を与えるのでシステムの最適化に利用できることはいうまでもない．

感度微係数を正規化することにより得られる指標として，$\bar{x}_j$，$\bar{y}_i$ で平均値を表したとき，$\bar{S}_{ij}=\bar{x}_j\partial y_i/\bar{y}_i\partial x_j=\partial(\log y_i)/\partial(\log x_j)$ がある．これは(1)式の感度微係数を各変数の確率分布の平均値で無次元化したもので，相対感度（relative sensitivity）とも呼ばれる．また，各変数の標準偏差 σ_j^x，σ_i^y によって正規化した代表的感度指標として，$\hat{S}_{ij}=\sigma_j^x\partial y_i/\sigma_i^y\partial x_j$ もよく使われる．

2.2 直接法

システムの状態方程式が以下の常微分方程式（一般的には発展方程式）で与えられるものとする．

$$\frac{d\boldsymbol{y}(t)}{dt}=f(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{y}(0)=\boldsymbol{y}_0 \qquad (2)$$

ここで，$\boldsymbol{y}$ は n 次元の状態変数ベクトル，$\boldsymbol{x}$ は k 次元のパラメータベクトルとする．

このとき，(2)式の両辺をパラメータ x_j で偏微分をすると次の行列方程式を得る．

$$\frac{dS}{dt}=JS+F \qquad (3)$$

ここに $S=[S_{ij}]$ は2.1節で定義した感度行列，$J=[\partial f_i/\partial y_l]$ は $(n\times n)$ 次元の Jacobian 行列，そして $F=[\partial f_i/\partial x_j]$ である．初期条件を0として(3)式を解け

ば感度微係数を評価することができる．例えば，定常解として $S^{\infty}=-J^{-1}F$ を得る．

上で示した感度微係数の評価手法を直接法（direct method）と呼ぶ[8]．直接法は，パラメータの代表値を入力して(2)式を状態変数について解き，得られる状態変数の基準軌道に沿ったパラメータの感度微係数を局所的に評価するものである．このアプローチは，パラメータが状態変数の動特性に及ぼす影響についてのモデル間比較やモデル構築において有効であるが，有限差分近似による直接法の評価は計算コストが高いものとなる．直接法を中心とした非平衡化学反応系に対する感度解析についてはVarmaらの成書[9]に詳しい．

2.3 汎関数微分

システムの状態方程式が偏微分方程式で記述される場合などには，パラメータを空間座標 r と時間 t の関数に拡張して $x_j(r,t)$ で与える．このとき，汎関数微分（functional derivative）により感度微係数を定義すると便利である．例えば，(2)式の発展方程式に空間座標を取り込んだ定式化を行い，パラメータ関数についての変分 $\delta x_j(r,t)$ に対する状態変数の変分 δy_i を，線型項に関して評価すると形式的に次式が得られる．

$$\delta y_i=\sum_j\iint\frac{\delta y_i}{\delta x_j(r,t)}\delta x_j(r,t)drdt \tag{4}$$

このとき(4)式の積分核，すなわち密度関数として与えられる $\delta y_i/\delta x_j(r,t)$ が汎関数微分である．こうして得られた汎関数微分を用いて，感度密度関数（sensitivity density function）を $S_{ij}(r,t)=\delta y_i/\delta x_j(r,t)$ で定義する．

感度密度関数を導出するために，線型発展方程式についての基本解を与えるGreen関数を使用する手法が提案されている[10]．他方，温室効果ガスなどの環境への拡散現象は放物型の偏微分方程式である大気拡散方程式で表される．このようにシステムの状態方程式が偏微分方程式で記述される場合の分布定数系（distributed parameter system）に対しては，変分法による定式化に基づく随伴方程式を利用して，汎関数微分を評価する変分的感度解析（variational sensitivity analysis）が提案されている[8][11][12]．変分的感度解析における随伴関数（adjoint function）と，Green関数は非斉次線型微分方程式の解に関連した感度関数として相互に対応付けが可能なことを指摘しておく．

2.4 Novikovの定理と確率感度解析

確率的な状態方程式，すなわち(2)式の発展方程式にノイズが加法的に付随するような確率システムを考える．このとき，ノイズをパラメータ関数とみなしてGauss過程 $\xi(t)$ によって定義したとき，次のNovikovの定理が成立する．

$$\langle\xi(t)f(y(t))\rangle=\int_0^t\langle\xi(t)\xi(s)\rangle\left\langle\frac{\delta f(y(t))}{\delta\xi(s)}\right\rangle ds \tag{5}$$

ここに $\langle\cdot\rangle$ は期待値を表し，(5)式の右辺中の $\delta f(y(t))/\delta\xi(s)$ はモデル関数に対するGauss過程（ノイズ）の汎関数微分である．上式は，右辺中のモデル関数のノイズに対する感度（汎関数微分）が，期待値の意味でノイズとモデル関数の積（左辺）として評価できることを示しており，確率感度解析（stochastic sensitivity analysis）において有用である．

変分的手法に基づく確率感度解析のバイオ分野における“ゆらぎシステム”への応用については，本特集のライプニッツ氏と若宮氏による第5論文を参照されたい．Novikovの定理は確率システム，例えば確率ニューラルネットワークの定式化[13][14]や，最適化問題における解の探索法の開発[15]にも応用される．

他方，金融工学・数理ファイナンス分野の確率感度解析には，1980年代に理論的発展を遂げたMalliavin解析[16]に基づく手法がある．これはWiener過程（幾何ブラウン運動）についての確率解析で，ファイナンス分野の金融派生商品の評価に使われることで有名なBlack-Scholes方程式などを取り扱うものである．この詳しい内容については本特集のコハツ ヒガ氏と安田氏による第6論文を参照されたい．詳細については省略するが，確率過程に一般化された感度微係数の評価法として，Malliavin解析における部分積分公式と上述のNovikovの定理には一種のアナロジーがあることを指摘しておきたい．

2.5 最適化への応用—設計感度

本節で取り扱った感度微係数や汎関数微分は，関数の局所的な勾配情報を与えるので，感度解析以外の数値最適化などの応用分野でも詳しく調べられている．例えば，最急降下法やNewton法による最適解の探索はその代表的なものである．こうした最適化問題は本稿の主題ではないが，局所的感度解析の重要な適用分野として設計感度（design sensitivity）について触れておく．

構造力学や流体力学の分野では，支配方程式となる偏微分方程式に関して，システムの定義領域に境界条

件が付与される．境界条件はシステムの幾何学的な形状を固定して与えられるのが普通であるが，最適形状を決定するような問題の場合には自由境界問題として定式化される．こうした自由境界問題では，形状を与える境界座標それ自体を設計変数として取り扱うため，局所的感度解析を境界座標に対して拡張する必要がある．設計感度は，最適設計の目的関数に対する境界座標の変分についての汎関数微分を与えるもので，2.3節で述べた変分的感度解析を用いて計算することができる．流体力学分野の最小抵抗形状やロケット・ノズルの最適設計に対する設計感度の導出と適用については，文献[17][18]を参照されたい．

3. グローバル感度解析について

1.3節でグローバル感度解析（global sensitivity analysis）に触れたが，ここで“グローバル”とは，モデルの入力因子は一定あるいは無限の領域で，かつ確率密度関数で示される分布形状に沿って調べられる．また，入力因子によって生起されたモデル出力は，対象とする他のすべての入力因子の変化も同時に考慮して評価される，という意味において“グローバル”である．

以下では，まずモンテカルロ法を用いたサンプリングに基づく手法としてよく用いられるいくつかの統計量を示す．これらは通常，モデルの線型性あるいは単調性に依存する．モデルの構造に依存しない，いわゆるモデル独立（model independent）な方法として広く用いられている分散に基づく手法を次に解説する．最後に，モデル出力の分布形状自体に及ぼす入力因子の影響を尺度として，最近，提案されたモーメントに依存しない手法について取り上げる．

3.1 サンプリングに基づく手法

モンテカルロ法を用いたサンプリングに基づくグローバル感度解析は，入力因子（パラメータ）の不確実さ伝播解析（あるいは誤差伝播解析）に付随して実施されてきた[19]．モンテカルロ解析では，モデルの入力因子のランダムに選択された値の組に対してモデル計算を実施し，得られたモデル出力の組から評価結果の不確実さを決定し（不確実さ解析：uncertainty analysis），次に，この不確実さに対する入力因子の寄与度を定量化する（感度解析）．一般には，この解析は次の5段階で実施される．

① 各入力因子の範囲と分布の選択

② 分布形状からの各入力因子の値のサンプリング

$$\boldsymbol{x}_i=[x_{i,1}, x_{i,2}, \cdots, x_{i,k}],\ i=1, 2, \cdots, m$$

③ 選択された入力値の組に対するモデル計算の実施

$$y_i=f(x_{i,1}, x_{i,2}, \cdots, x_{i,k})=f(\boldsymbol{x}_i),\ i=1, 2, \cdots, m$$

④ 不確実さ解析の実施

⑤ 感度解析の実施

ここで，$\{\boldsymbol{x}_i, y_i\}$はサンプリングで得られた入力値とモデル計算で得られたモデル出力値を表す．

入力因子のサンプリングには，ランダムサンプリングの他，層別サンプリングの一種であるラテン超方格法（Latin Hypercube Sampling）[20]がよく用いられる．通常，直接，モデル計算を実行するが，対象とするモデルが複雑で，多数のサンプリング値でのモデル計算に膨大な時間を要する場合には，実験計画法を用いて応答局面法（response surface methodology）によるモデル近似を作成し，その近似モデルに対して入力因子の分布を考慮したモンテカルロ解析を実施することが，原子力分野等で膨大な計算時間を要するモデルに対しては行われている．応答局面法については成書[21]を参照されたい．

一連のモンテカルロ解析では，入力因子$\boldsymbol{x}_i$からモデル出力y_iへのマッピングが得られ，それを用いて不確実さおよび感度解析が実施される．不確実さ解析では，通常得られたモデル出力$y_i (i=1, 2, \cdots, m)$の期待値$E(y)$および分散$V(y)$が推定される．モンテカルロ法を用いたサンプリングに基づくグローバル感度解析には種々の手法が利用される[19]．最も簡便には，散布図を用いることにより，入力因子とモデル出力間のしきい値の存在や非線型性を見いだすことができる．統計指標としては，例えば，以下の相関係数（Peason product moment correlation coefficient），

$$PEAR_l=\frac{Cov(y, x_l)}{\sigma_l \sigma_y} \tag{6}$$

が用いられる．ここで，$Cov(y, x_l)$は共分散，σ_l, σ_yは標準偏差を表す．モデル出力yを入力因子$\boldsymbol{x}$に関する線型回帰式で以下のように近似した場合，

$$y \cong b_0+\sum_{i=1}^{N} b_l x_i \tag{7}$$

yとx_lの関係として，以下の標準回帰係数SRC（standardized regression coefficients）

$$SRC_l=\frac{b_l \sigma_l}{\sigma_y} \tag{8}$$

も利用される．また，モデル出力と入力因子を各々回帰式で近似し，新たに$y-\hat{y}$と$x_l-\hat{x}_l$の間の相関係数として定義される偏相関係数（partial correlation coefficients) も利用できる．

これらの統計指標に基づく入力因子の重要度の順序付けは，以下で定義される決定係数 R_y^2

$$R_y^2=\frac{\sum_{i=1}^{N}(\hat{y}_i-\bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i-\bar{y})^2} \tag{9}$$

の大きさに依存する．ここで，$\hat{y}$ は回帰式による推定値，$\bar{y}$ は平均値を表す．R_y^2 は回帰式で説明できるモデル出力の分散の割合を示し，1に近ければ回帰性能がよい．逆に，この値が小さい場合モデルの回帰性能が劣るので，*SRC* 等による入力因子の順位付けには注意が必要である[22]．また *SRC* に基づく入力因子の順序付けは，システムモデルを記述する線型回帰モデルに関する情報であって，システムモデルそれ自身に関する情報ではないことに注意を要する．

非線型モデルに対しては，入力因子とモデル出力を順位数に変換した統計指標，例えば，スピアマン相関係数 (Spearman coefficient)，標準順位回帰係数 (standardized rank regression coefficients)，偏順位相関係数 (partial rank correlation coefficients) 等のノンパラメトリック統計が推奨される[19]．順位数に基づく手法は，入力因子とモデル出力の関係が単調ならば，頑健で容易に感度解析が実行できる．これらの統計量は，順位数に対する決定係数 R^2 が1に近い場合，すなわち単調モデルに対して有効となる．一方，順位数変換は解析対象のモデル自体を修正することになるので，そこから得られる入力因子の重要度に関する情報はより定性的になる．

モデルの非線型性あるいは非単調性は，モデル構築でしばしば遭遇する問題であり，グローバル感度解析では，さらにモデル独立な手法が求められる．その意味で，以下に示す分散に基づく手法は非常に有効である．

3.2 分散に基づく手法

分散に基づく手法のうちFAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test) が，最も早く1970年代に化学反応速度論の分野で導入された[23]～[25]．FASTはモデル独立で，モデル出力の期待値と分散，および分散に対する個々の入力因子の寄与度を推定する手法で，現在においても最も洗練されたグローバル感度解析手法の一つである．FASTの真髄は，入力因子の多次元空間を適切に定義された探索曲線 (search curve) で調べることにある．

システムが以下の状態方程式で記述されるとする．

$$\frac{d\boldsymbol{y}(t)}{dt}=f(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{y}(0)=\boldsymbol{y}_0 \tag{10}$$

ここで，$\boldsymbol{y}$ は n 次元の状態変数ベクトル，$\boldsymbol{x}$ は k 次元のパラメータベクトルとする．すべてのパラメータ x_j の一斉の変化に対する各 y_i の感度を決定することを考える．パラメータ x_j の値は，固有の変動あるいは不確実さに起因する分布で与えられるとすると，状態変数の期待値は次式で与えられる．

$$E(y_i)=\int\cdots\int y_i(x_1,\cdots,x_k)\times p(x_1,\cdots,x_k)dx_1,\cdots,dx_k \tag{11}$$

ここで，p はパラメータ $\boldsymbol{x}$ の確率密度関数である．

FASTのアイデアは，(11)式の $\boldsymbol{x}$ についての k 次元積分を，以下の変換関数 G_l を用いて s についての1次元積分に変換することにある．

$$x_l=G_l(\sin\omega_l s),\ l=1,2,\cdots,k \tag{12}$$

ここで，$\{\omega_l\}$ に適当な整数の角振動数を選択すると，パラメータ $\boldsymbol{x}$ はスカラー変数 $s\in(-\pi,\pi)$ の周期関数となり，状態変数の期待値は以下のように表すことができる．

$$E(y_i)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}y_i(x_1(s),x_2(s),\cdots,x_k(s))ds \tag{13}$$

また，y_i の分散は s 空間における y_i のフーリエ級数を用いて，

$$\begin{aligned}V(y_i)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}y_i^2(x_1(s),x_2(s),\cdots,x_k(s))ds-|E(y_i)|^2\\&=\sum_{j=-\infty}^{\infty}(A_j^2+B_j^2)-(A_0^2+B_0^2)=2\sum_{j=1}^{\infty}(A_j^2+B_j^2)\end{aligned} \tag{14}$$

で与えられる．ここで，

$$A_j=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}y_i(x_1(s),x_2(s),\cdots,x_k(s))\cos jsds \tag{15}$$

$$B_j=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}y_i(x_1(s),x_2(s),\cdots,x_k(s))\sin jsds \tag{16}$$

FAST手法では，パラメータ x_l に対応する特性周波数 ω_l とその高周波数成分 $j=p\omega_l$，$p=1,2,\cdots$ に対する(15)および(16)式のフーリエ係数から得られる偏分散 (partial variance) V_{ω_l} と総分散 (total variance) V の比 $S_{\omega_l}=V_{\omega_l}/V$ をパラメータ x_l の感度とした．詳しくは，本特集号の別稿（劉氏による第2論文と香田による第4論文）を参照されたい．

ロシアの数学者Sobol'によって提案された分散に基づく手法は，パラメータ $\boldsymbol{x}$ に関するモデル関数 $f(\boldsymbol{x})=f(x_1,x_2,\cdots,x_k)$ をパラメータの各次元の増加に従って分解した総和で表すことに基づく[26]．モデ

ル関数の分解から，その分散は以下のように分解することができる．

$$D=\sum_{i=1}^{k}D_i+\sum_{1\leq i<j\leq k}D_{i,j}+\cdots+D_{1,2,\cdots,k} \tag{17}$$

ここから，一般に総分散 D に対する寄与度の感度指標として，

$$S_{i_1,\cdots i_s}=\frac{D_{i_1,\cdots,i_s}}{D},\quad 1\leq i_1<\cdots<i_s\leq k \tag{18}$$

を定義した．Sobol' 指標は高次の交互作用の項も含み，各パラメータ（入力因子）に関する1次オーダーの分散項の寄与（主効果）を定義したFASTより優れている．しかしながら，Sobol' 指標の各偏分散項は，モンテカルロ法による多重積分によって計算するため計算コストも大きい．分散分解（variance decomposition）に含まれる項数は 2^k-1 で，入力因子の数 k が例え小さくとも，すべての偏分散項の計算では，積分のサンプル数を N とすると，モデル計算の数は $N\times(2^k-1)$ で計算コストは膨大となる．また，入力因子の数が多ければ，無視できない高次の項の出現する可能性も大きくなる．

この次元の問題を解決する方法として，ある入力因子 x_i に起因するモデル関数 $f(\boldsymbol{x})$ の分散の総分散に対する寄与度を表す"総感度指標（total sensitivity index）" S_{T_i} が提案された[26][27]．例えば，3つの入力因子の場合，因子1に対する S_{T_i} は，$S_{T_1}=S_1+S_{1,2}+S_{1,3}+S_{1,2,3}$ で与えられる．ここで，S_1 は1次の感度指標（主効果）で，$S_{1,j}$ は1と1以外の他の因子との交互作用からなる2次の感度指標である．この場合，$N\times(k+1)$ のモデル計算で高次の項まで考慮した感度指標の評価が可能となる．詳しくは，本特集号の別稿（本間による第3論文）を参照されたい．

3.3 モーメントに依存しない手法

近年，分散に基づく手法のようにモデル出力の特定のモーメントを対象にするのではなく，モデル出力の分布形状に着目した不確実さ重要度指標が提案されている．ここでは，モデル出力の確率密度分布に着目したモーメントに依存しない感度指標 δ_i を紹介する[28]．δ_i は以下のように定義される．

$$\delta_i=\frac{1}{2}E_{X_i}[A(X_i)]=\frac{1}{2}\int A(X_i)f_{X_i}(x_i)dx_i \tag{19}$$

ここで，

$$A(X_i)=\int|f_Y(y)-f_{Y|X_i}(y)|dy \tag{20}$$

は，図1に示すように，モデル出力の確率密度分布 $f_Y(y)$ と着目する入力因子 x_i を X_i に固定したときの

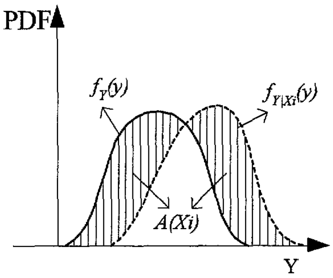

図1 $A(X_i)$ の定義

条件付確率密度分布 $f_{Y|X_i}(y)$ で挟まれる部分の面積に相当する．$A(X_i)$ は固定する X_i の値に依存するので，δ_i は(19)式のように入力因子 x_i の確率分布を考慮した $A(X_i)$ の期待値の1/2で定義されている．1/2は規格化のための定数である．モデル出力の確率密度分布の変化が大きい入力因子ほど重要度が高いと位置づけられる．

本手法をモデル出力の確率密度分布の変化から，累積確率分布の変化へ拡張した手法も提案されている[29]．モーメントに依存しない手法は，(19)および(20)式の定義から，分散に基づく手法のように入力因子が独立である必要はないという特徴を有している．しかしながら，δ_i の計算は2重積分であり，計算コストが大きい弱点がある．

4. おわりに

感度解析，特にグローバル感度解析の分野におけるここ10数年の進展は，欧州委員会共同研究センター（European Commission Joint Research Centre）のIspra研究所（Italy）にあるEconometrics and Applied Statistics Unit[30]の精力的な活動に負うところが大きい．1995年にイタリアのBelgirateで第1回の国際ワークショップSAMO（Sensitivity Analysis of Model Output）'95が開催されて以来，3年ごとに開催され本年7月にMilanoで6回目を迎えた．また，1999年以来，5回のサマースクールも開催されている．彼らのHPからは，これらワークショップにおける資料や本特集号で紹介しているFASTやSobol' 法，Sobol' の準乱数列等のソフトウェアもダウンロードできる．また，彼らの開発した不確実さ感度解析の汎用ソフトウェアSimLabにもリンクしているので，興味のある読者は参照されたい．また，国際ワークショップSAMO等での発表論文については，関連する学術誌特集号[31]～[37]も参照されたい．

参考文献

[1] A. Saltelli, K. Chan and E. M. Scott (Eds) : Sensitivity Analysis, John Wiley & Sons, 2000.

[2] A. Saltelli, S. Tarantola, F. Campolongo and M. Ratto : Sensitivity Analysis in Practice : A guide to assessing scientific models, John Wiley & Sons, 2004.

[3] A. Saltelli, M. Ratto, T. Andres, F. Campolongo, J. Cariboni, D. Gatelli, M. Saisana and S. Tarantola : Global Sensitivity Analysis The Primer, John Wiley & Sons, 2008.

[4] S. O. Funtowicz and J. R. Ravets : "Science for post-normal age, " Futures, vol. 25, pp. 735-755, 1993.

[5] ギボンズ (M. Gibons 編著, 小林信一監訳) : 現代社会と知の創造 モード論とは何か, 丸善, 1997.

[6] N. Oreskes, K. Shrader-Frechet and K. Belitz : "Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences," Science, vol. 263, pp. 641-646, 1994.

[7] 香田正人 :「シミュレーションの限界 (巻頭言)」, シミュレーション (日本シミュレーション学会誌) 第 17 巻, p. 265, 1998.

[8] M. Koda, A. Dogru and J. H. Seinfeld : "Sensitivity analysis of partial differential equations with application to reaction and diffusion processes," Journal of Computational Physics, vol. 30, pp. 259-282, 1979.

[9] A. Varma, M. Morbidelli and H. Wu : Parametric Sensitivity in Chemical Systems, Cambridge University Press, 1999.

[10] M. Demiralp and H. Rabitz : "Chemical kinetic functional sensitivity analysis : elementary sensitivities, " Journal of Chemical Physics, vol. 74, pp. 3362-3375, 1981.

[11] M. Koda and J. H. Seinfeld : "Sensitivity analysis of distributed parameter systems," IEEE Transactions on Automatic Control, vol. AC-27, pp. 951-955, 1982.

[12] M. Koda : "Sensitivity analysis of the atmospheric diffusion equation," Atmospheric Environment, vol. 16, pp. 2595-2601, 1982.

[13] M. Koda : "Neural network learning based on stochastic sensitivity analysis," IEEE Transactions on System, Man, and Cybernetics, Part B : Cybernetics, vol. 27, pp. 132-135, 1997.

[14] M. Koda : "Stochastic sensitivity analysis and Langevin simulation for neural network learning," Reliability Engineering and System Safety, vol. 57, pp. 71-78, 1997.

[15] H. Okano and M. Koda : "An optimization algorithm based on stochastic sensitivity analysis for noisy objective landscapes," Reliability Engineering and System Safety, vol. 79, pp. 245-252, 2003.

[16] D. Nualert : The Malliavin Calculus and Related Topics, Springer, 1995.

[17] M. Koda : "Optimum design of fluid mechanical distributed-parameter systems," Large Scale Systems, vol. 6, pp. 279-291, 1984.

[18] A. H. Ibrahim and S. N. Tiwari : "Variational sensitivity analysis and design optimization," Computers and Fluids, vol. 38, pp. 1887-1894, 2009.

[19] J. C. Helton : "Uncertainty and sensitivity analysis techniques for use in performance assessment for radioactive waste disposal," Reliability Engineering and System Safety, vol. 42, pp. 327-367, 1993.

[20] M. D. Mckay, R. J. Beckman and W. J. Conover : "A comparison of three methods of selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code," Technometrics, vol. 21, pp. 239-245, 1979.

[21] G. E. P. Box and N. R. Draper : Empirical Model-Building and Response Surfaces, John Wiley & Sons, 1987.

[22] A. Saltelli, T. H. Andres and T. Homma : "Sensitivity analysis of model output : An Investigation of new techniques," Computational Statistics and Data Analysis, vol. 15, pp. 211-238, 1993.

[23] A. Saltelli, T. H. Andres and T. Homma : "Sensitivity analysis of model output : an investigation of new techniques," Comput. Statist. Data Anal., vol. 15, pp. 211-238, 1993.

[24] R. I. Cukier, H. B. Levine and K. E. Shuler : "Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems," Journal of Computational Physics, vol. 26, pp. 1-42, 1978.

[25] M. Koda, G. McRae and J. H. Seinfeld : "Automatic sensitivity analysis of kinetic mechanisms," International Journal of Chemical Kinetics, vol. 11, pp. 427-444, 1979.

[26] I. M. Sobol' : "Sensitivity analysis for nonlinear mathematical models," Mathematical Modeling & Computational Experiment, vol. 1, pp. 407-414, 1993.

[27] T. Homma and A. Saltelli : "Importance measures in global sensitivity analysis of model output," Reliability Engineering and System Safety, vol. 52, pp. 1-17, 1996.

[28] E. Borgonovo : "A new uncertainty importance

measure," Reliability Engineering and System Safety, vol. 92, pp. 771-784, 2007.
[29] Q. Liu and T. Homma: "A new importance measure for sensitivity analysis," Journal of Nuclear Science and Technology, vol. 47 (1), pp. 53-61, 2010.
[30] http://sensitivity-analysis.jrc.ec.europa.eu
[31] International Journal of Chemical Kinetics, Selected Kinetics Papers from the Sensitivity Analysis of Model Output Conference (SAMO 2007), vol. 40 (11), 2008.
[32] Reliability Engineering and System Safety, Special Issue on Sensitivity Analysis, vol. 94 (7), 2009.
[33] Reliability Engineering and System Safety, The Fourth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output (SAMO 2004), vol. 91 (10-11), 2006.
[34] Reliability Engineering and System Safety, SAMO 2001: methodological advances and innovative applications of sensitivity analysis, vol. 79 (2), 2003.
[35] Reliability Engineering and System Safety, Special issue on Sensitivity Analysis, vol. 57 (1), 1997.
[36] Computer Physics Communications, Special issue on Sensitivity Analysis, vol. 117 (1-2), 1999.
[37] Journal of Statistical Computation and Simulation, Special issue on Sensitivity Analysis, vol. 57 (1-4), 1997.