自動微分による大規模交通シミュレーションの最適化：リンク別流率密度関係キャリブレーション

瀬尾　亨[1]

[1]正会員　東京科学大学准教授　環境・社会理工学院（〒152-8550　東京都目黒区大岡山 2-12-1-W6-10）
E-mail: seo.t.701d@m.isct.ac.jp　(CorrespondingAuthor)

ネットワーク交通シミュレーションは，交通工学において広く用いられている．シミュレーションの際には，各リンクの流率密度関係（FD）パラメータを適切にキャリブレーションする必要がある．これまでは，リンク毎の個別観測による推定や，ネットワークシミュレーションを介した微分不要法による推定が用いられてきた．後者は大規模ネットワークにも適用されているが，勾配は近似的であり，推定の成否がリンクの交通状態に依存する点も十分には扱われていない．本研究では，近年著者によって提案された微分可能交通シミュレータ UNsim を用い，自動微分による厳密な勾配に基づき，三角形 FD の 3 変数をリンク別に同時推定する手法を提案する．これは，Fisher 情報量に基づきパラメータのリンク別識別可能性を判定する枠組みと，パラメータを効率よく推定するためのブロック座標降下法を組み合わせたものである．提案手法をリンク数約 2000，車両数 100 万台規模の双子実験で検証し，良好な推定結果が得られることを確認した．

Key Words: *traffic simulation, fundamental diagram, parameter calibration, automatic differentiation, differentiable simulation*

1. はじめに

大規模なネットワーク交通流シミュレーションは，交通計画，制御，評価において広く用いられている．その際，各リンクの流率密度関係（Fundamental Diagram: FD）パラメータ（自由流速度，容量，渋滞密度）を実態に合うよう設定しなければならない．FD パラメータはリンクごとに異なりうるため，大規模ネットワークでは数千のパラメータを設定する必要があり，シミュレーションの実用上大きな課題となる．

FD パラメータを実データから推定する際は，リンク毎個別推定[1)] とネットワーク全体の同時推定[2)] の二つのアプローチがある．前者では，各リンクから感知器やプローブカーなどにより得られたデータに基づき，FD 関数のパラメータを回帰により推定する[1),3)]．これは FD 推定としてはもっとも直接的である一方，大規模なネットワークのリンク毎に個別に推定するのはデータや作業量の観点から困難な場合もある．

後者では，ネットワーク交通流シミュレーションを用い，実際の交通量などを精度よく再現するような FD パラメータを推定する[4)–6)]．これは全リンクのパラメータを同時に推定でき，かつ現況再現性も向上できるため，シミュレーションのための FD 推定として都合が良い場合が多い．一方で，大規模シナリオで多数の FD 変数を同時に推定する場合は，以下で述べる計算上の大きな課題が生じる．

シミュレーションによる FD パラメータ同時推定問題は，FD 変数を決定変数として現況再現誤差を最小化する最適化問題として定式化され，繰り返し計算により誤差を少しずつ小さくするような決定変数値を求めていくアルゴリズムで解かれる例が非常に多い[5)]．そのような最適化問題の効率的求解には一般に勾配情報が必要となる（c.f., 最急降下法）が，通常のネットワーク交通流シミュレーションでは勾配は直接は求められない．差分法による数値微分の計算にはシミュレーションをパラメータ数と同じオーダー回数だけ実行する必要があるため，大規模シナリオでは実用上計算不可能である．そのため，既存の FD 推定手法はシミュレータをブラックボックスとして扱う微分不要法（e.g., ルールベース，SPSA）[5)]

が主流であるが，高次元では収束が遅い．また，簡易な解析的モデルや機械学習モデルを用いる手法（特に，勾配を微分可能モデルで近似するメタモデル・サロゲートモデルと呼ばれる手法）[7)–10)] も提案されているが，その近似精度は常に高いとは限らない．

近年，自動微分（Automatic Differentiation: AD）[11)] に基づく微分可能シミュレーションが注目されている．これは，パラメータ次元に依存しない計算コストで全パラメータの厳密な勾配を同時に算出する技術である．Seo[12)] は，AD により微分可能なネットワーク交通流シミュレータ UNsim を提案した．これを FD パラメータ推定に適用すれば，上述した FD パラメータ同時推定問題の勾配が未知である課題を直接解決でき，大規模ネットワークでのリンク別推定が可能になると考えられる．

ただし，FD パラメータ推定には勾配の精度とは別の困難がある．すなわち，FD 変数の識別可能性は，リンクの交通状態に依存するという点である．例えば，交通容量は渋滞が発生しないリンクでは観測に影響せず，推定は原理的に不可能である．そのため，全リンクを一律に推定・評価すると，推定の成否を正しく判定できない．

本研究の目的は，UNsim の AD を活用したリンク別 FD パラメータ推定手法の開発である．具体的には，リンク別三角形 FD の 3 変数を同時推定する手法を開発する．ここでは，AD によって得られる勾配情報を活用し，Fisher 情報量に基づきリンク別・パラメータ別の識別可能性を判定する枠組みと，パラメータを効率よく推定するためのブロック座標降下法を組み合わせた手法を提案する．そして，Chicago Sketch ネットワークでの双子実験により提案手法の性質を検証する．

2. 手法

(1) コンセプト

本研究が扱う問題は，交通ネットワークのリンク交通量・存在台数の観測データに基づき，各リンクの Fundamental Diagram（FD）パラメータを推定することである．具体的には，リンク l の三角形 FD を構成する自由流速度，容量，渋滞密度の 3 変数を全リンクについて同時に推定する．精度の悪い事前分布が所与であり，これを出発点として観測に整合する FD パラメータを探索する．

推定の枠組みは MAP（Maximum A Posteriori）推定に準じたものとする．目的関数は，シミュレーション出力と観測データの残差二乗和（観測項）と，推定値と事前分布の乖離（正則化項）の和として構成される．この目的関数を最小化するパラメータを推定値とする．勾配の算出には，微分可能シミュレータ UNsim の逆方向モード AD を活用する．これにより，パラメータ次元に依存しない計算コストで全パラメータに対する勾配を同時に算出できる．

FD パラメータ推定に固有の課題は，パラメータの識別可能性がリンクの交通状態に依存することである．自由流速度 u は自由流状態のリンクで，容量 q^* は渋滞が発生するリンクで，渋滞密度 κ は渋滞（特にスピルオーバーなどの大規模渋滞）が発生するリンクでのみ，それぞれ観測に有意な影響を与える．そのため，全リンクを一律に扱った推定精度の評価は不適切であり，各パラメータが各リンクでどの程度識別可能かを定量的に測定する枠組みが必要である．本研究では，AD で得られた勾配による Fisher 情報量に基づく識別可能性の判定と，パラメータ間の識別性の違いに適合したブロック座標降下法による最適化を提案する．

(2) 問題設定と目的関数定式化

有向グラフ $\mathcal{G} = (\mathcal{N}, \mathcal{L})$ で表されるネットワークを考える．$\mathcal{N}$ はノード集合，$\mathcal{L}$ はリンク集合である．各リンク $l \in \mathcal{L}$ の交通流特性は三角形 FD により規定され，自由流速度 u_l，容量 q_l^*，渋滞密度 κ_l の 3 パラメータで記述される．後退波速度 w_l はこれらから

$$w_l = \frac{q_l^* \, u_l}{u_l \kappa_l - q_l^*} \tag{1}$$

と導出される量であり，三角形 FD の妥当性のために $q_l^* < u_l \kappa_l$（すなわち $w_l > 0$）が必要である．推定対象はリンク別の FD パラメータ $\{u_l, q_l^*, \kappa_l\}_{l \in \mathcal{L}}$ であり，推定パラメータ数は $3|\mathcal{L}|$ である．OD 需要およびネットワーク構造は既知とする．観測データとして，一定時間間隔 ΔT_{obs} ごとのリンク通過交通量 $n_{l,j}^{\mathrm{obs}}$ とリンク存在台数 $m_{l,j}^{\mathrm{obs}}$ が与えられるとする．

パラメータの表現には指数を介した倍率表現を用いる．FD パラメータの事前分布を u_l^{prior}，$q_l^{*,\mathrm{prior}}$，$\kappa_l^{\mathrm{prior}}$ とし，推定値を

$$\hat{u}_l = u_l^{\mathrm{prior}} \cdot \exp(\theta_{u,l}) \tag{2a}$$

$$\hat{q}_l^* = q_l^{*,\mathrm{prior}} \cdot \exp(\theta_{q,l}) \tag{2b}$$

$$\hat{\kappa}_l = \kappa_l^{\mathrm{prior}} \cdot \exp(\theta_{\kappa,l}) \tag{2c}$$

とパラメータ化する．$\theta_{p,l}$ は各パラメータ $p \in \{u, q^*, \kappa\}$ の各リンク l に対する最適化変数であり，$f_{p,l} = \exp(\theta_{p,l})$ を倍率と呼ぶ．事前分布からの乖離がないとき $\theta_{p,l} = 0$（$f_{p,l} = 1$）である．対数空間での最適化とすることで，推定値の正値性が自然に保

証される．

3 つの倍率が独立に動くため，最適化の途中で $\hat{q}_l^* \geq \hat{u}_l \hat{\kappa}_l$ となり FD の妥当性が崩れる可能性がある．これを防ぐため，シミュレーションでは有効容量

$$\hat{q}_{l,\mathrm{eff}}^* = \min\left(\hat{q}_l^*,\, \alpha\, \hat{u}_l \hat{\kappa}_l\right) \tag{3}$$

を $\hat{q}_l^*$ に代えて用いる（$\alpha < 1$ は安全係数）．

目的関数を以下のように定義する：

$$L(\boldsymbol{\theta}) = L_{\mathrm{obs}}(\boldsymbol{\theta}) + L_{\mathrm{prior}}(\boldsymbol{\theta}) \tag{4}$$

ここに $\boldsymbol{\theta} = (\theta_{u,l}, \theta_{q,l}, \theta_{\kappa,l})_{l \in \mathcal{L}} \in \mathbb{R}^{3|\mathcal{L}|}$ は最適化変数ベクトルである．第一項の観測残差項は

$$\begin{aligned} L_{\mathrm{obs}}(\boldsymbol{\theta}) = &\sum_{l,j} \left(\hat{n}_{l,j}(\boldsymbol{\theta}) - n_{l,j}^{\mathrm{obs}}\right)^2 \\ &+ \sum_{l,j} \left(\hat{m}_{l,j}(\boldsymbol{\theta}) - m_{l,j}^{\mathrm{obs}}\right)^2 \end{aligned} \tag{5}$$

で与えられる．$\hat{n}_{l,j}(\boldsymbol{\theta})$，$\hat{m}_{l,j}(\boldsymbol{\theta})$ はそれぞれシミュレーション出力のリンク通過交通量と存在台数である．第二項の事前分布正則化項は

$$L_{\mathrm{prior}}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{p \in \{u, q^*, \kappa\}} \lambda_p \sum_{l \in \mathcal{L}} (f_{p,l} - 1)^2 \tag{6}$$

であり，$\lambda_p \geq 0$ はパラメータ p ごとの正則化重みである．

(3) 微分可能交通流シミュレータ UNsim

UNsim は Seo[12] が提案した AD により微分可能なネットワーク交通流シミュレータであり，LTM[13),14)] と DUO 経路選択モデル[13),15)] に基づく．本節ではその概略を述べる．詳細は Seo[12] を参照されたい．

LTM は，三角形 FD のもとで Kinematic Wave モデル[16),17)] の厳密な数値解を与えるマクロ交通流モデルである．各リンクの上流端と下流端での累積台数を状態変数とし，各タイムステップで各リンクの流出可能流率と受入可能流率を算出して，ノードモデルを介してリンク間のフロー配分を行い，累積台数を更新する．LTM の演算は全て算術演算と区分線形の min/max 演算で構成されるため，ほぼ至る所で劣勾配が定義される．LTM の CFL 条件に基づくタイムステップ幅は Cell Transmission Model と比較して大きいため，AD の逆伝播の計算コストが低い．

DUO 経路選択では，各タイムステップで各目的地への瞬間最短経路を求め，ノードでの分岐率を目的地別車両数に基づき算出する．最短経路探索自体は離散演算であるが，分岐率は目的地別累積台数の連続関数であるため微分可能である．さらに，ロジットモデルにより経路選択確率を平滑化し，リンクコストに対する勾配を非ゼロとしている．

UNsim の全シミュレーションは入力パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ から出力までの写像として表現され，逆方向モード AD により $\nabla_{\boldsymbol{\theta}} L$ をパラメータ次元 $|\boldsymbol{\theta}|$ に依存しない計算コストで算出できる．FD パラメータ推定では $\boldsymbol{\theta}$ は FD の倍率（$3|\mathcal{L}|$ 次元）に対応し，1 回の逆方向パスで全リンクの全パラメータに対する勾配が得られる．実装には Python と JAX[18)] を用い，GPU による高速化が可能である．例えば，後述する Chikago Sketch ネットワーク（リンク数約 2000，総需要約 100 万台，シミュレーション時間約 3 時間）のシナリオでは，産業用 GPU（GH200）を用いた場合，1 回のシミュレーション計算は約 0.2 秒，逆方向モード AD による全パラメータの勾配計算は約 0.6 秒で可能である．ただし，この際 VRAM 約 44GB を消費する．設定を変更して VRAM 消費量を約 2GB に低下させて家庭用 GPU（RTX5060Ti）を用いた場合，計算時間は約 2–3 倍になる．

(4) パラメータの識別可能性と Fisher 情報量

前述の通り FD パラメータ推定では，各パラメータの観測への感度はリンクの交通状態に強く依存し，識別可能性がリンクごとに大きく異なる．その識別可能性を定量的に判定する手法を述べる．

自由流速度 u_l は，リンク l を自由流状態で車両が通過する際の走行時間を規定するため，自由流状態のリンクで広範に識別可能である．容量 q_l^* は，需要が容量に達するリンクで流率の上限として観測に影響するため，ボトルネックとなるリンクで識別可能である．渋滞密度 κ_l は後退波速度 w_l（式 (1)）を通じて渋滞波の伝播速度と滞留台数を規定するが，渋滞が発生しないリンクでは車両挙動に影響せず，観測からは原理的に推定不能である．そのため，κ の識別可能リンクは u や q^* と比較して少数に限られると考えられる．

この識別可能性を定量的に測定するため，Fisher 情報量を用いる．観測残差ベクトルを $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{\theta})$ とし，評価点 $\boldsymbol{\theta}^*$ でのヤコビアンを $\boldsymbol{J} = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{r}|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}$ とする．評価点には，真値が既知の双子実験では真値を用いる．実データへの適用では真値が未知であるため，事前分布または推定値を評価点とすることになる．パラメータ θ_i に対する Fisher 情報量を

$$\mathrm{FI}_i = \|\boldsymbol{J}_{:,i}\|^2 = \sum_k J_{k,i}^2 \tag{7}$$

と定義する．$\boldsymbol{J}_{:,i}$ はヤコビアンの第 i 列であり，FI_i はパラメータ θ_i の微小な変化が観測残差に与える影響の大きさを表す．$\mathrm{FI}_i \approx 0$ のとき，パラメータ θ_i は観測から識別不能である．なお，FI_i は各パラメー

タ単独の感度であり，パラメータ間の交絡は考慮していない．

パラメータ種別 $p \in \{u, q^*, \kappa\}$ について，

$$\mathrm{FI}_{p,l} > \epsilon \cdot \max_{l' \in \mathcal{L}} \mathrm{FI}_{p,l'} \tag{8}$$

を満たすリンク l を識別可能リンクと定義する（ϵ は閾値パラメータ）．推定精度の評価は識別可能リンクに対してのみ行う．閾値は最大値に対する相対値であるため，識別可能リンクに分類されなかったリンクにも，弱い観測情報が残る場合がある．そのため，識別不可リンクのパラメータは，観測情報がほぼゼロであれば事前分布近傍に留まり，弱い情報が残っていればその分だけ改善する．いずれにせよ識別不可リンクでの改善は限定的であり，全リンクを一律に評価すると評価値は識別不可リンクのパラメータに支配され，識別可能リンクでの改善を反映しない．

Fisher 情報量の計算には順方向モード AD（JVP: Jacobian-Vector Product）を用いる．各パラメータに対応する標準基底ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ を接線ベクトルとして $\boldsymbol{J}\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{J}_{:,i}$ を算出し，そのノルム二乗を FI_i とする．順方向モード AD は逆方向モードと比較してピークメモリ消費が大幅に小さく，大規模ネットワークでも実行可能である．バッチ処理により複数の JVP を同時に計算することで，全 $3|\mathcal{L}|$ 個の Fisher 情報量を効率的に算出できる．

(5) ブロック座標降下法による最適化

FD の 3 パラメータ (u, q^*, κ) を素朴に同時最適化すると，勾配の大きい変数（典型的には u と q^*）が小さい変数（典型的には κ）を圧倒し，後者の推定精度が低下する可能性がある．そこで，パラメータの種類ごとに交互に最適化を進めるブロック座標降下法を用いる．具体的には，最適化を (u, q^*) ブロックと κ ブロックの 2 つに分割し，各ラウンドで以下の 2 ステージを交互に実行する．

1. (u, q^*) ステージ：κ を固定し，u と q^* のみを更新する．

2. κ ステージ：u と q^* を固定し，κ のみを更新する．

(u, q^*) ステージでは κ が固定されているため，自由流速度と容量の推定に集中できる．κ ステージでは，直近の (u, q^*) 推定値のもとで κ のみが更新されるため，κ の小さい勾配による更新が (u, q^*) の大きな勾配による更新と干渉せず，渋滞リンクにおける κ の推定精度の改善を図ることができる．この交互更新を複数ラウンド繰り返すことで，各ブロックの推定精度が相互に向上する．

交互ステージの後に，3 パラメータ全てを同時に更新する同時最適化ステージを追加する．交互ステージの終了時点で各ブロックは他方を固定した条件付き最適解の近傍にあり，(u, q^*) の勾配は交互ステージ開始時より小さいため，同時最適化ステージで κ の信号が圧倒されにくい．このステージはブロック間の相互作用を考慮して 3 パラメータを同時に調整し，全体の推定精度を改善する．

各ステージの最適化には Adam[19] を用い，学習率にコサイン減衰を適用する．ステップ t での学習率を

$$\eta(t) = \eta_{\min} + \frac{1}{2}(\eta_0 - \eta_{\min}) \left(1 + \cos\left(\frac{\pi t}{T_{\mathrm{phase}}}\right)\right) \tag{9}$$

とする．ここに，η_0 は初期学習率，$\eta_{\min}$ は学習率の下限，T_{phase} は当該ステージのステップ数である．減衰はステージ終盤で学習率を漸減させ，収束近傍での振動を抑制する．最適化変数にはクリッピング $\theta_{p,l} \in [\theta_{\min}, \theta_{\max}]$ を適用するとともに，Adam の更新量にもステップサイズ上限を設け，1 ステップでの急激なパラメータ変動を抑制する．そして，最適化の全過程を通じて推定精度の指標が最良となる反復のパラメータを記録し，これを最終的な推定値とする．

3. 数値実験

(1) シナリオ

提案手法の検証には Chicago Sketch ネットワーク[20] を用いた双子実験を実施した．Chicago Sketch ネットワークは大規模ベンチマークデータであり，今回の UNsim における実装では 927 ノード，2557 リンク，200 目的地からなる．なお，このネットワークは実際の道路網を詳細に再現するものではなく，交通分析上有用なようにリンク・ノードの縮約などの処理が施されている．そのため，FD 変数値が非現実的になっているリンクもある．シミュレーション時間は 12000 秒（200 分），タイムステップ幅 $\Delta t = 33.3$ 秒（360 ステップ），経路選択モデルには logit-DUO（温度パラメータ 240 秒）を用いた．推定対象はリンク別の FD3 変数 (u, q^*, κ) であり，推定パラメータ数は $3 \times 2557 = 7671$ である．シミュレーション結果を**図-1** に示す．

双子実験では，まず真の FD パラメータでシミュレーションを実行し，その出力から観測データを生成する．次に，真値に対して意図的に大きな誤差を加えた事前分布を出発点として推定を行い，推定値が真値にどの程度近づくかを評価する．評価のため，パラメータ p のリンク l における推定値と真値の比を $\rho_{p,l} = \hat{p}_l / p_l^{\mathrm{true}}$ と定義し，これを真値比と呼ぶ．式 (2) の倍率 $f_{p,l}$ が事前分布に対する比であるのに

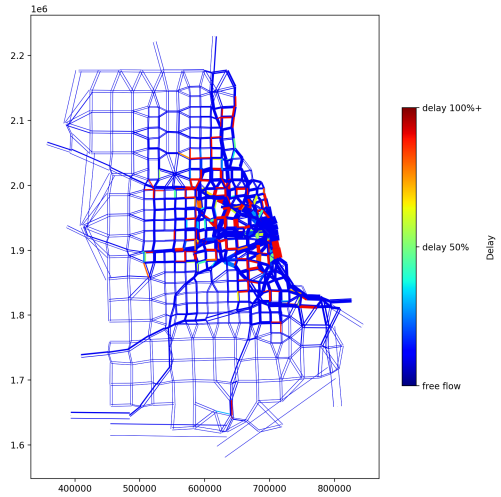


図-1　シミュレーション結果．リンク色はシミュレーション中の平均遅れ時間，太さは総交通量を意味する

対し，$\rho_{p,l}$ は真値に対する比であり，$\rho_{p,l}=1$ が真値への一致を意味する．FD パラメータの事前分布は，真値に対して各パラメータ・各リンクで独立に $U(0.7,1.3)$ の一様乱数を乗じたものとした（事前分布の MAPE（後述の式 (10)）$\approx 15\%$）．異なる乱数シードに基づく異なる事前分布を 10 通り用い，推定結果の安定性を評価した．観測データは $\Delta T_{\mathrm{obs}}=300$ 秒（5 分）間隔のリンク通過交通量とリンク存在台数とした（ノイズなし）．

最適化のパラメータ設定を**表-1** にまとめる．事前分布正則化は $\lambda_p=0$（全パラメータ）とした．FD の妥当性制約（式 (3)）の安全係数は $\alpha=0.95$，Fisher 情報量の識別閾値（式 (8)）は $\epsilon=10^{-3}$ とした．最適化変数のクリッピングは真値比に対して $\rho_{p,l}\in[0.4,1.5]$ と設定した．最良反復の保持の指標には，識別可能リンクにおける真値比 $\rho_{p,l}$ の 1 からの RMSE（以下，真値比 RMSE）の 3 パラメータ平均を用いた．これらの真値を用いる操作は双子実験に固有であり，実データへの適用では事前分布を基準とした設定に置き換える必要がある．なお，**表-1** の設定は，1 シードでの予備的なハイパーパラメータ探索（最適化構造，交互ラウンド数，学習率等の 15 設定）で上位に入った設定の一つである．探索では交互ラウンド数 2 の設定が最良であったが，同一設定でも試行間に 10–15%程度の変動があり，設定間の差は大きくはなかった．なお，ブロック座標降下法を用いない素朴な同時最適化は用いる場合と比較し顕著に精度が低いことを確認している．

推定精度の評価には，識別可能リンクにおける平均絶対パーセント誤差（MAPE）

$$\mathrm{MAPE}_p=\frac{100}{|\mathcal{I}_p|}\sum_{l\in\mathcal{I}_p}\frac{|\hat{p}_l-p_l^{\mathrm{true}}|}{p_l^{\mathrm{true}}} \tag{10}$$

を用いる．$\mathcal{I}_p$ はパラメータ p の識別可能リンク集合である．改善率は $(1-\mathrm{MAPE}_p^{\mathrm{post}}/\mathrm{MAPE}_p^{\mathrm{prior}})\times 100\%$ で算出する．

(2)　Fisher 情報量に基づく識別可能性

表-2 に Fisher 情報量に基づく識別可能リンク数を示す．Fisher 情報量は真値での順方向モード AD（バッチ JVP）により算出し，全 7671 パラメータの計算に約 4 分を要した（GH200 GPU，ピークメモリ約 6 GB）．なお，FI 占有率とは識別可能リンクの Fisher 情報量の和が全リンクの和に占める割合である．

識別可能リンク数は FD 変数種類によって大きく異なる．u は全リンクの約 18%で識別可能であり，自由流状態のリンクが広範に存在することを反映している．q^* はボトルネックとなるリンクに限定され約 7%，κ は大きな渋滞が発生するリンクのみで識別可能でありわずか 2%に限られる．いずれのパラメータでも識別可能リンクが Fisher 情報量の 97–99%を占有しており，残りの大多数のリンクでは Fisher 情報量がほぼゼロである．

(3)　収束過程

図-2 にブロック座標降下法の収束過程を示す．横軸は Adam ステップ，縦軸は識別可能リンクの真値比 RMSE（最良反復の保持の指標）である．

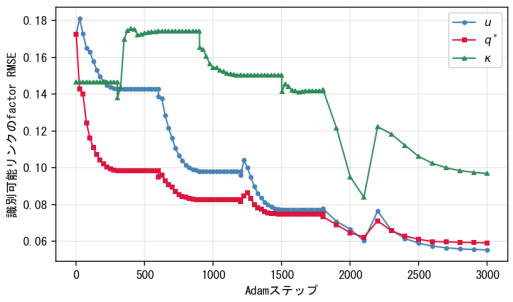


図-2　ブロック座標降下法の収束過程（識別可能リンクの真値比 RMSE）．ステップ 0–1800：交互ステージ（(u,q^*) ステージと κ ステージを各 300 ステップ ×3 ラウンド），ステップ 1800–3000：同時最適化．

収束過程にはブロック座標降下法の構造が明確に反映されている．(u,q^*) ステージ（ステップ 0–300, 600–900, 1200–1500）では u と q^* の RMSE が階段状に低下する一方，κ は固定されているため変化しない．κ ステージ（ステップ 300–600, 900–1200, 1500–1800）では κ のみが更新され，u と q^* は変化しない．た

表-1　最適化の設定

項目	設定値
交互ラウンド数	3（各ステージ 300 ステップ）
交互ラウンドステップ数	300
同時最適化ステップ数	1200
合計ステップ数	3000
学習率 η_0	0.02
学習率減衰率下限 $\eta_{\min}$	$0.05\eta_0$
クリッピング	真値比 $\rho_{p,l} \in [0.4,\ 1.5]$（$\log \rho_{p,l} \in [-0.92,\ 0.41]$）
ステップサイズ上限	0.1

表-2　Fisher 情報量に基づく識別可能リンク数

パラメータ	識別可能リンク	全リンクに占める割合	FI 占有率
自由流速度 u	456	17.8%	97%
容量 q^*	184	7.2%	99%
渋滞密度 κ	56	2.2%	99%

表-3　FD パラメータの推定結果（識別可能リンク，10 シード平均）

パラメータ	事前分布の MAPE	推定値の MAPE	改善率
u	14.9%	4.3%	+71%
q^*	14.8%	4.3%	+71%
κ	14.9%	8.9%	+40%

だし，1 ラウンド目の κ ステージでは κ の RMSE は 0.147 から 0.174 へむしろ上昇した．この段階では (u, q^*) の誤差がまだ大きく，κ がその誤差を補償する方向に動いたためと考えられる．2 ラウンド目以降の κ ステージでは κ の RMSE は低下し，交互ステージ終了時（ステップ 1800）には 0.142 となった．u と q^* はラウンドの進行に伴い段階的に改善した．

ステップ 1800 以降の同時最適化ステージでは 3 パラメータが同時に更新される．u と q^* はさらに改善が進む．κ の RMSE はこのステージで 0.142 から 0.084（ステップ 2100）まで大きく低下した．すなわち，このシードでは κ の改善の大部分は交互ステージではなく，交互ステージで得られた (u, q^*) を出発点とする同時最適化で生じている．その後 κ の RMSE は一時的に上昇して 0.097（ステップ 3000）に収束したが，最良反復の保持によりステップ 2100 の反復が最終的な推定値として採用された．

(4)　推定結果

表-3 に 10 シードの平均推定結果を示す．3 パラメータ全てにおいて，識別可能リンクで事前分布からの改善が確認された．

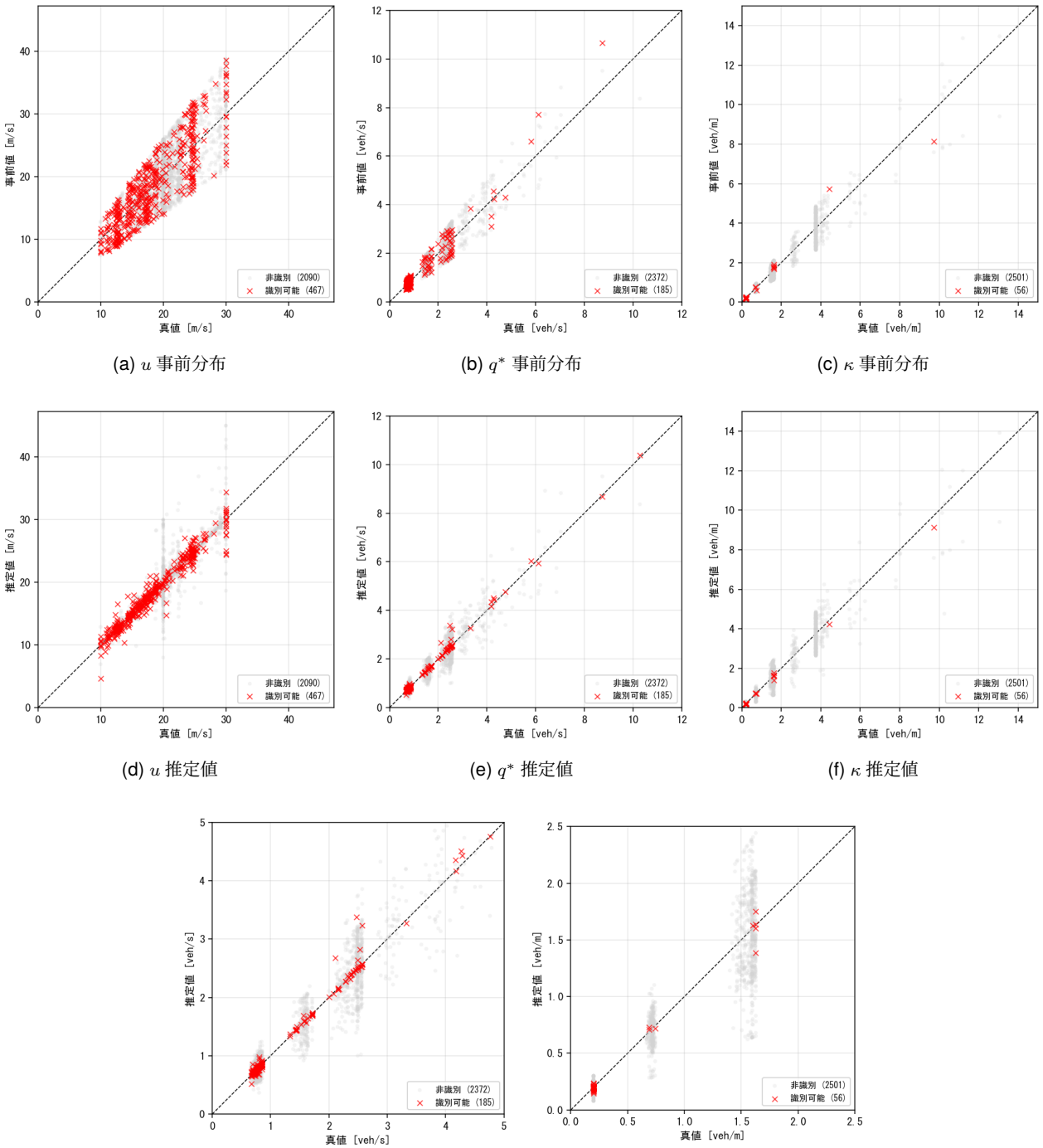
u は改善率+71%（標準偏差 9%）であった．q^* は改善率+71%（標準偏差 7%）であった．κ は改善率+40%であるが標準偏差 21%と大きく，シード間の変動が顕著であった．10 シードのうち 2 シードでは κ の改善率が $+5\%$，$+11\%$に留まった．κ の識別可能リンクはわずか 56 であり，少数リンクの推定成否に結果が大きく依存するためと考えられる．リンク交通量の R^2 は平均 0.9992 であり，観測データの再現性は高い．最適化問題の求解時間は 1 シードあたり約 40 分であった（GH200 GPU，内訳は Fisher 情報量の計算が約 4 分，最適化 3000 ステップが約 35 分）．

図-3 に 1 シードの FD パラメータの推定値と真値を比較する散布図を示す．u では識別可能リンクが推定後に事前分布と比較し対角線近傍に収束している．u の識別不可リンクも対角線に近づいており，10 シード平均の識別不可リンクの MAPE は 15.0%から 4.8%に改善した．これは，u については閾値以下のリンクにも弱い観測情報が残っていることを示す．q^* では識別可能リンクで対角線への収束が確認できる一方，識別不可リンクはほぼ事前分布に留まっている（識別不可リンクの MAPE は 15.0%から 13.7%）．κ では識別可能リンク数がわずか 56 と少ないものの，該当リンクでは対角線に近づいていることがわかる．一方，κ の識別不可リンクは事前分布から真値と無関係な方向にドリフトしており，識別不可リンクの MAPE は 15.1%から 18.2%に悪化した．すなわち，識別不可リンクの挙動はパラメータにより異なり，u では改善し，q^* では事前分布に留まり，κ ではドリフトが生じている．

識別可能リンクと全リンクでは推定精度の傾向が大きく異なる．全リンク MAPE で評価すると，u は 15.0%から 4.7%へ+69%の改善であるが，q^* は 15.0%から 13.0%へ+13%の改善に留まり，κ は 15.1%から 18.0%へむしろ悪化する（-20%）．

(5)　代表リンクの FD 図

識別可能性と推定結果の関係をリンク単位で確認するため，**図-4**，**図-5** に代表リンクの FD と実際の交通状態を流率–密度平面上に示す．全リンクを 3 パラメータの識別可否の組合せ（8 パターン）に分類し，各パターンの代表リンク（3 リンク，該当が 1 リンクのパターンは 1 リンク）を示す．実際の交通状態は，真値でのシミュレーションにおける各タイムステップのリンク上流端・下流端の流率（累積台数の差分）を，Newell の待ち行列条件（下流端では到着累積台数の L_l/u_l 前の値を流出累積台数が下回るとき，上



(a) u 事前分布　(b) q^* 事前分布　(c) κ 事前分布

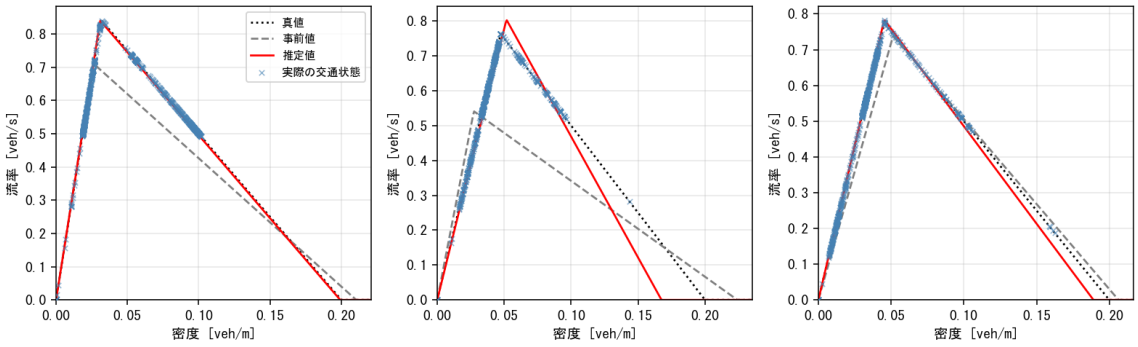
(d) u 推定値　(e) q^* 推定値　(f) κ 推定値

(g) q^* 推定値（拡大）　(h) κ 推定値（拡大）

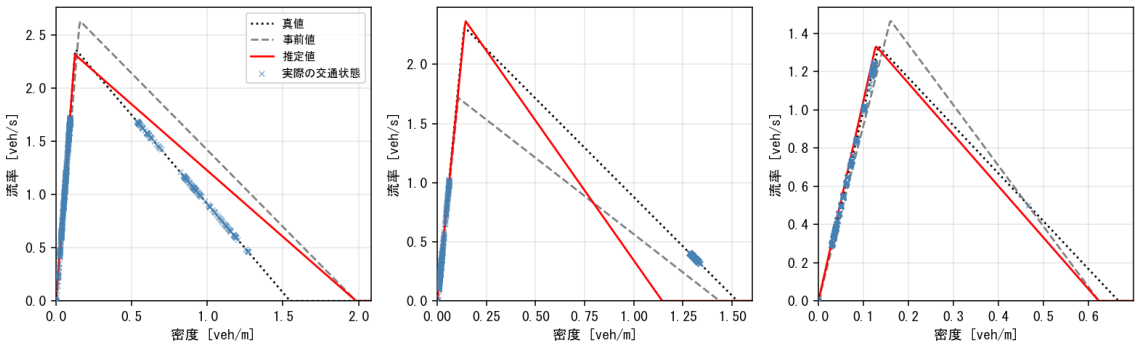
図-3　FD パラメータの真値 vs 事前分布（上段）・推定値（中段）の散布図．下段は q^* と κ の推定値の拡大

流端では流出累積台数の L_l/w_l 前の値に $\kappa_l L_l$ を加えた値に到着累積台数が達するときに渋滞側）により自由流側と渋滞側に振り分け，真の FD に当てはめて密度に変換した点である．したがって実際の交通状態は定義上真の FD 上に乗り，その分布がリンクの経験した交通状態の範囲を表す．

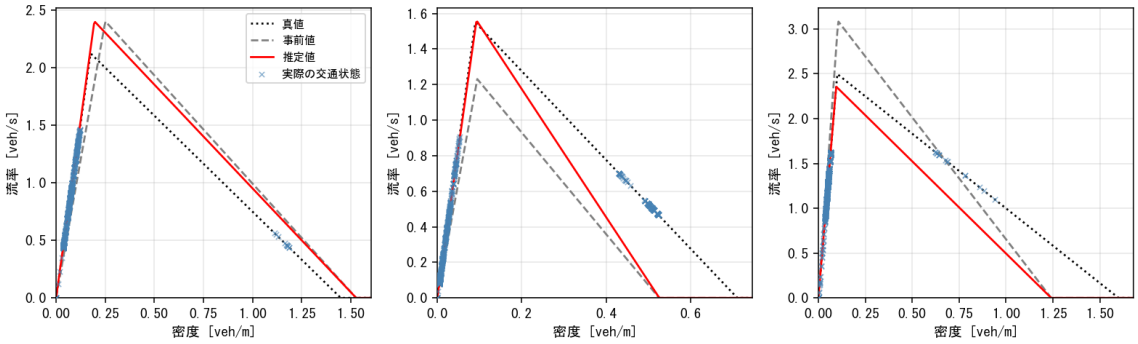
3 パラメータ全てが識別可能なリンク（**図-4a**）では，実際の交通状態が自由流側，頂点近傍，渋滞側の広い範囲に分布しており，推定された FD は真の FD と概ね一致する．ただし中央のリンクのように，渋滞側の状態が密度の低い範囲に限られる場合は，κ（渋滞側の切片）は観測された範囲の外挿により決まるため，渋滞側の遠方で真の FD とのずれが残る．u と q^* が識別可能で κ が識別不可のリンク（**図-4b**）では，自由流側と頂点近傍の状態が多数ある一方，渋滞側の状態は少数で狭い範囲に限られ，κ の



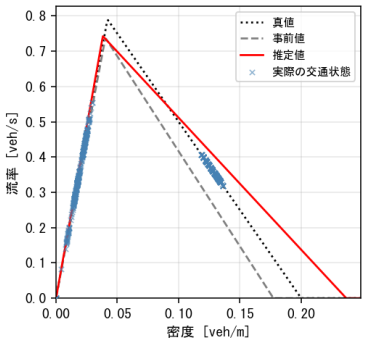
(a) u，q^*，κ の全てが識別可能（29 リンク）



(b) u，q^* が識別可能，κ が識別不可（109 リンク）



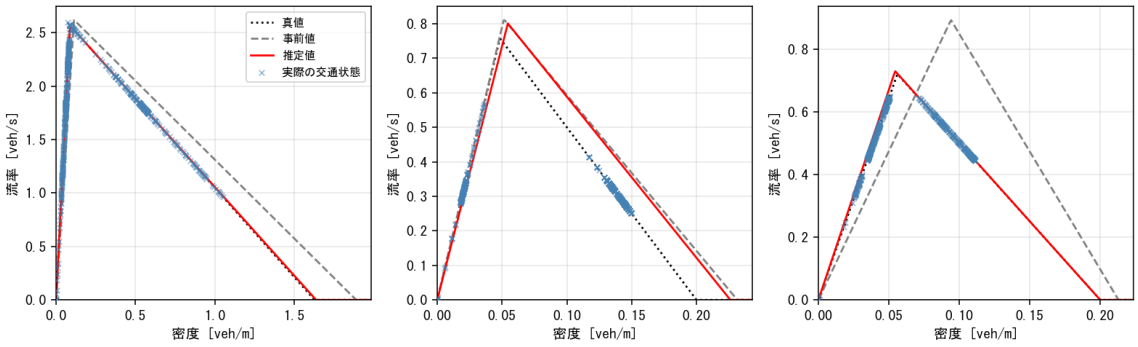
(c) u のみ識別可能（328 リンク）



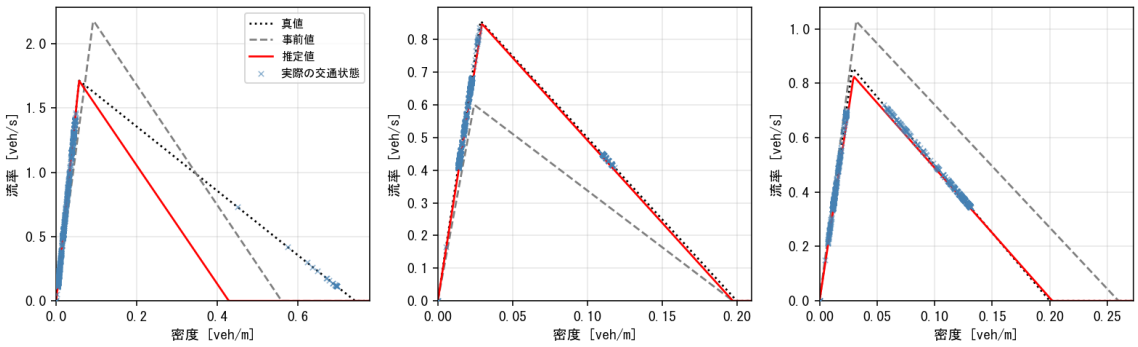
(d) u，κ が識別可能，q^* が識別不可（1 リンク）

図-4　代表リンクの FD と実際の交通状態（u が識別可能なパターン）．各パターンの代表リンクを示す．

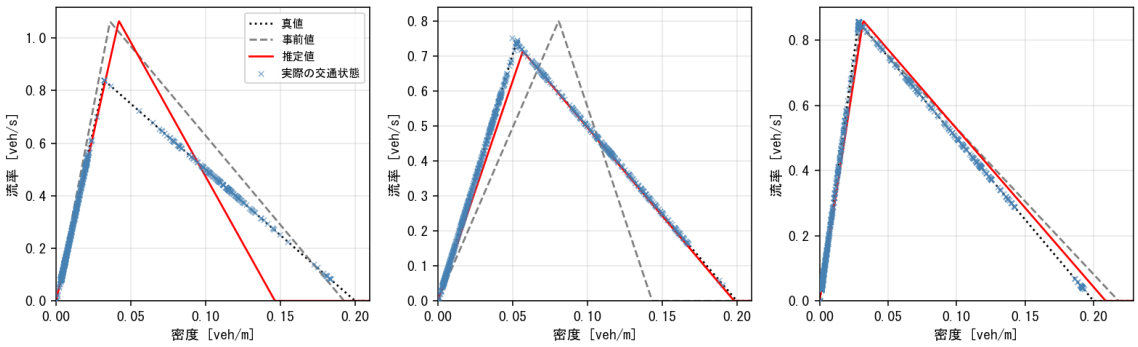
推定値は事前分布に留まるか事前分布から離れている．u のみ識別可能なリンク（**図-4c**）では，状態は自由流側の低流率域に集中しており，推定された FD の自由流側の傾きは真値と一致するが，κ は事前分



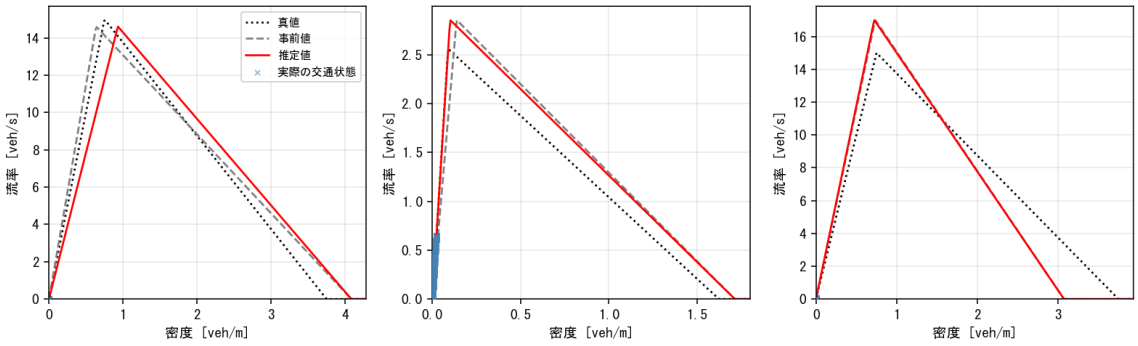
(a) q^*，κ が識別可能（16 リンク）



(b) q^* のみ識別可能（31 リンク）



(c) κ のみ識別可能（10 リンク）



(d) 全て識別不可（2033 リンク）

図-5　代表リンクの FD と実際の交通状態（u が識別不可なパターン）

布のまま変化しない．q^* は事前分布から真値の方向に変化しているが，頂点近傍の状態がないため，これは閾値以下の弱い観測情報による変化と考えられる．中央のリンクには渋滞側の状態も存在するが，κ は識別不可と判定され事前分布のまま変化していないため，推定された FD は渋滞側の状態を通らない．

u が識別不可のパターン（**図-5**）のリンクは，全てが識別不可のパターンを除き，自由流側の状態を有するにもかかわらず u が識別不可と判定されている．これらのリンクは長さが概ね 1000–3300 m であり，自由流走行時間は 40–130 秒程度とタイムステップ幅 $\Delta t = 33.3$ 秒の 1–4 倍に留まるため，u の変化が観測に与える影響が小さいためと推測される．q^* と κ が識別可能なリンク（**図-5a**）および q^* のみ識別可能なリンク（**図-5b**）では，渋滞側の状態を有するリンクで推定された FD は概ね真の FD に一致した．一方，**図-5b** の左のリンクのように，渋滞側に広く状態が分布するにもかかわらず κ が識別不可と判定され，推定値が事前分布より悪化した例も存在する．κ のみ識別可能なリンク（**図-5c**）の左のリンクでも，状態は両側に分布するが q^* の推定値は事前分布のまま変化していない．識別可能性の判定は相対閾値 ϵ に基づくため，Fisher 情報量の大きいリンクが存在すると，ある程度の観測情報を持つリンクも識別不可に分類される場合があると考えられる．全て識別不可のリンク（**図-5d**）は，交通量がゼロのセントロイドコネクタ，または流率が容量の数分の 1 以下に留まるリンクであり，q^* と κ は事前分布のまま変化せず，u のみが変化している．交通量がゼロのリンクでも u の推定値が事前分布から移動しているのは，経路選択が全リンクの自由流走行時間に依存するため，交通量がなくても u が他リンクの交通量に微小に影響するためと考えられる．これは，**第 3 章 (4) 節**で述べた u の識別不可リンクの改善にも寄与していると推測される．

(6) 考察

以上の結果を踏まえ，提案手法の特徴を考察する．

第一に，逆方向モード AD により 7671 変数の FD パラメータ推定が約 40 分で計算可能であることが示された．逆方向モード AD では 1 回の逆方向パスで全パラメータに対する勾配を算出できるため，勾配計算のコストがパラメータ次元に依存しない．SPSA などの微分不要法では 7671 次元に対して収束が極めて遅いと予想され（c.f., Seo[12] による混雑課金最適化計算実験での比較），AD の活用が大規模 FD 推定を現実的な時間で計算可能にしていると考えられる．

第二に，Fisher 情報量に基づく識別可能性の評価が FD パラメータ推定において必要であることが確認された．全リンク MAPE で評価すると κ は事前分布より悪化するが，識別可能リンクのみで評価すると+40%の改善が確認される．全リンク一律の評価値は識別不能な大多数のリンクに支配され，識別可能リンクでの改善を反映しない．

第三に，識別性が異なる 3 パラメータの同時推定において，u と q^* は良好な精度で，κ も一定の精度で推定できた．u と q^* は識別可能リンクが多く，勾配も大きいため，交互ステージの早い段階で安定して改善し，10 シード全てで+50%以上の改善率を得た．κ は識別可能リンクが 56（全リンクの 2%）と少なく，勾配も小さいため，推定条件は 3 パラメータの中で最も厳しい．この条件下でも κ は 10 シード全てで改善し，平均+40%の改善率を得た．ただし，少数リンクでの推定成否が全体の精度指標に直接影響するため，改善率のシード間変動は大きい（5–69%）．**図-2** によると，κ の改善の大部分は交互ステージではなく，交互ステージで得られた (u, q^*) を出発点とする同時最適化で生じた．なお，同等の条件のもとで全 3000 ステップを同時最適化とした際は交互ステージ付きの設定より劣っていた」（MAPE 値がパラメータ・シード毎に概ね 1.2–2.0 倍になり，特に κ の誤差が大きい傾向にあった）．そのため，交互ステージは (u, q^*) を先に収束させ，同時最適化における κ の推定を容易にする役割を果たしていると考えられる．

本研究の限界として，以下の点が挙げられる．第一に，双子実験のみによる検証であり，シミュレーションモデルの構造誤差が存在しない理想的な条件での結果である．実データへの適用では FD の関数形の不一致や観測ノイズにより推定精度が低下する可能性がある．第二に，Fisher 情報量の評価点，最良反復の選択，クリッピング範囲の 3 点で真値を用いており，これらは双子実験でのみ可能な操作である．実データでは，Fisher 情報量は事前分布または推定値で評価し，最良反復は検証用観測に対する目的関数で選択し，クリッピング範囲は事前分布を基準に設定することになる．特に事前分布で評価した Fisher 情報量は真値でのものと異なり得るため，識別可能リンクの判定精度が低下する可能性がある．第三に，OD 需要を既知としている点であり，実際には OD 需要自体も不確実である．FD パラメータと OD 需要の同時推定は両者の識別可能性が相互に影響するため，より困難な問題となる．

4. おわりに

本研究では，自動微分に基づく微分可能交通流シミュレータ UNsim を活用し，リンク別 FD パラメータ（自由流速度 u，容量 q^*，渋滞密度 κ）の推定手法を提案し，Chicago Sketch ネットワーク（2557 リンク，7671 変数）での双子実験により検証した．提案手法は，逆方向モード AD による全パラメータの勾

配の同時算出，順方向モード AD で求めた Fisher 情報量に基づくリンク別・パラメータ別の識別可能性の判定，および識別性の違いに対応したブロック座標降下法から構成される．

Fisher 情報量に基づく判定では，識別可能リンクは 10 シード平均で u で 456（全リンクの約 18%），q^* で 184（約 7%），κ で 56（約 2%）であり，リンクの交通状態に対応した識別性の違いが確認された．識別可能リンクにおける推定精度（MAPE）は，10 シード平均で事前分布から u が+71%，q^* が+71%，κ が+40% 改善し，リンク交通量の再現性は $R^2 = 0.9992$ であった．計算時間は 1 シードあたり約 40 分（GH200 GPU）であった．一方，全リンクで評価すると κ の MAPE は事前分布より悪化しており，識別不能なリンクを含めた一律の評価値は識別可能リンクでの改善を反映しない．そのため，FD パラメータ推定の評価には識別可能リンクの特定が必要であるといえる．以上により，微分可能交通シミュレータによるリンク別 FD パラメータ推定が理想的条件下では可能であることが示された．

今後の課題はいくつか考えられる．最も重要なものは，実データへの適用と，それに伴うモデル構造誤差の影響の評価である．本研究の双子実験では真の交通状況も同じシミュレーションモデルで生成しており，FD の関数形の不一致や観測ノイズは存在しない．次に，κ の推定精度はシード間の変動が大きい（改善率 5–69%）．観測データの時間解像度の向上や κ に対する事前分布正則化の導入により，この変動を抑えられる可能性がある．また，ブロック座標降下法の寄与の大きさは複数シードでの比較により確認する必要がある．さらに，本研究では OD 需要を既知としたが，実際には OD 需要も不確実であるため，FD パラメータと OD 需要の同時推定への拡張が必要である．

謝辞：本研究は JSPS 科研費 24K01002 および JST・JICA SATREPS JP-MJSA2405 の助成を受けた．

REFERENCES

1) Greenshields, B. D.: A study of traffic capacity, *Highway Research Board Proceedings*, Vol. 14, pp. 448–477, 1935.
2) 桑原雅夫: シミュレーションモデルのリンク容量値の自動調整, 生産研究, Vol.54, No.4, pp.295–298, 2002.
3) Seo, T., Kawasaki, Y., Kusakabe, T., and Asakura, Y.: Fundamental diagram estimation by using trajectories of probe vehicles, *Transportation Research Part B: Methodological*, Vol.122, pp.40–56, 2019.
4) Balakrishna, R., Ben-Akiva, M., and Koutsopoulos, H. N.: Offline calibration of dynamic traffic assignment: simultaneous demand-and-supply estimation, *Transportation Research Record*, Vol.2003, No.1, pp.50–58, 2007.
5) Antoniou, C., Azevedo, C. L., Lu, L., Pereira, F., and Ben-Akiva, M.: W-SPSA in practice: Approximation of weight matrices and calibration of traffic simulation models, *Transportation Research Procedia*, Vol.7, pp.233–253, 2015.
6) Wei, G., Rydergren, C., Gundlegard, D., Ekström, J., and Flötteröd, G.: Network-wide calibration of link capacities for dynamic traffic assignment models, *Journal of Advanced Transportation*, Vol.2025, No.1, pp.8854907, 2025.
7) Jiang, Z. and Huang, Y.-X.: Parametric calibration of speed–density relationships in mesoscopic traffic simulator with data mining, *Information Sciences*, Vol.179, No.12, pp.2002–2013, 2009.
8) 加納誠: ニューロ同定モデルによる交通流シミュレーションのパラメータ自動調整, PhD thesis.
9) Gu, Z., Saberi, M., Sarvi, M., and Liu, Z.: A big data approach for clustering and calibration of link fundamental diagrams for large-scale network simulation applications, *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, Vol.94, pp.151–171, 2018.
10) 奥山理奈, 三目直登, 内田英明, 藤井秀樹, 山田知典, 吉村忍: 機械学習を用いた交通流モデルのパラメータ同定, 計算力学講演会講演論文集, p. 190, 2019.
11) Baydin, A. G., Pearlmutter, B. A., Radul, A. A., and Siskind, J. M.: Automatic differentiation in machine learning: a survey, *Journal of Machine Learning Research*, Vol.18, No.153, pp.1–43, 2018.
12) Seo, T.: End-to-end differentiable network traffic simulation with dynamic route choice, *arXiv preprint arXiv: 2604.11380*, 2026.
13) Kuwahara, M. and Akamatsu, T.: Dynamic user optimal assignment with physical queues for a many-to-many OD pattern, *Transportation Research Part B: Methodological*, Vol.35, No.5, pp.461–479, 2001.
14) Yperman, I., Logghe, S., Tampere, C. M., and Immers, B.: The multicommodity link transmission model for dynamic network loading, *Transportation Research Board 85th Annual Meeting*, 2006.
15) Ran, B., Boyce, D. E., and LeBlanc, L. J.: A new class of instantaneous dynamic user-optimal traffic assignment models, *Operations Research*, Vol.41, No.1, pp.192–202, 1993.
16) Lighthill, M. J. and Whitham, G. B.: On kinematic waves. II. a theory of traffic flow on long crowded roads, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, Vol.229, No.1178, pp.317–345, 1955.
17) Richards, P. I.: Shock waves on the highway, *Operations Research*, Vol.4, No.1, pp.42–51, 1956.
18) Bradbury, J., Frostig, R., Hawkins, P., Johnson, M. J., Leary, C., Maclaurin, D., Necula, G., Paszke, A., VanderPlas, J., Wanderman-Milne, S., and Zhang, Q.: JAX: composable transformations of Python+NumPy programs, `http://github.com/jax-ml/jax`, 2018.
19) Kingma, D. P. and Ba, J.: Adam: A method for stochastic optimization, *International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2015.
20) Transportation Networks for Research Core Team: Transportation networks for research, 2021, Accessed 2021-10-01.

Autodiff-based optimization for large-scale traffic simulation: per-link fundamental diagram parameter calibration

Toru SEO

Network traffic simulation is an important tool in traffic engineering. Simulation requires appropriate calibration of the fundamental diagram parameters of each link. Conventionally, this calibration has relied on fitting to observations of individual links or on derivative-free calibration through network simulation. The latter has been applied to large-scale networks, but its gradients are approximate, and the dependence of estimation success on the traffic state of each link has not been fully addressed. This study proposes a method that simultaneously estimates the three parameters of the triangular fundamental diagram for each link, using exact gradients obtained by automatic differentiation in the differentiable traffic simulator UNsim recently proposed by the author. The study also introduces a framework that determines the per-link identifiability of the parameters based on Fisher information, and a block coordinate descent scheme for estimating weakly identifiable parameters. The proposed method was validated by twin experiments with about 2000 links and one million vehicles, and improvement over the prior was confirmed on the identifiable links.