

TMCMC×TSM-ROM（線形化管理 + 解析微分/JIT）

実装アーキテクチャ／実行フロー／性能・精度の勘所

Keisuke Nishioka
IKM_Hiwi / tmcmc

January 17, 2026

この資料のゴール

- 入口 case2_tmcmc_linearization.py から辿れる実行系を俯瞰
- どこが重いか（性能）／何が推定を支配するか（精度）を一枚で説明
- 監査可能な再現性ログ（config/likelihood_meta/diagnostics）を示す

要点（論文化／発表向け）

- **手法:** TMCMC (ESS-tempering) + TSM-ROM (線形化点 θ_0 更新)
- **狙い:** 初期は線形化 OFF で頑健に探索，後半は線形化 ON + θ_0 更新で MAP 近傍を高速・高精度に
- **監査:** $\beta=1$ 到達，尤度定義の明文化 (likelihood_meta)，診断 CSV の保存

最短の説明

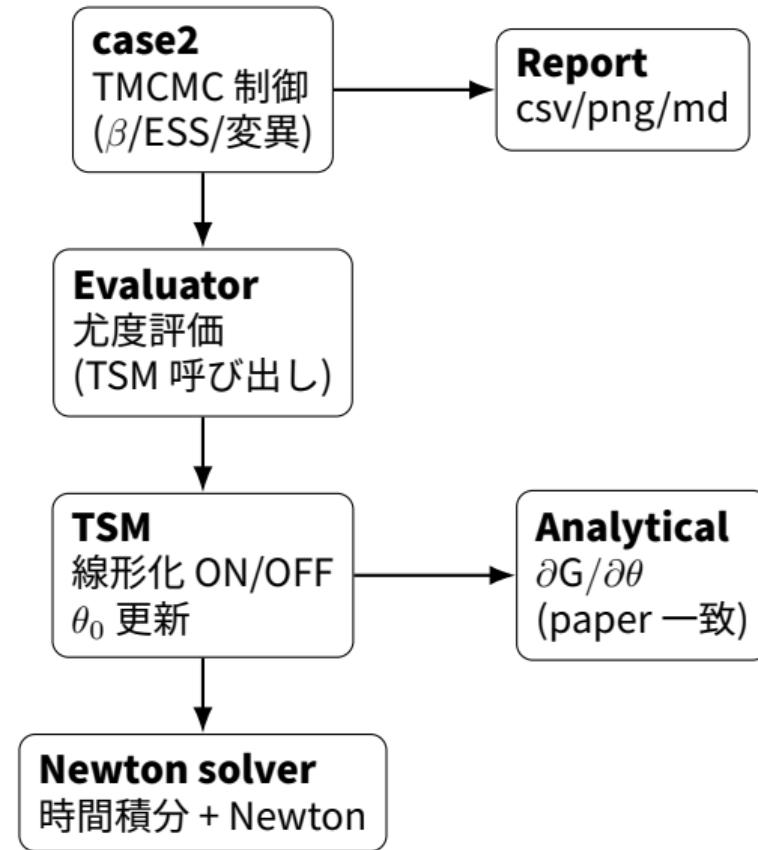
`run_pipeline.py` が `run_dir` を作り、`case2_tmcmc_linearization.py` を実行した後に `make_report.py` で `REPORT.md` を生成する。

- 進捗ログ: `subprocess.log` / `pipeline.log`
- 監査ログ: `config.json`, `likelihood_meta_*.json`

主要モジュール（実行に効く）

- 入口/制御: `case2_tmcmc_linearization.py`
- 設定: `config.py`
- TSM (線形化/JIT) : `demo_analytical_tsm_with_linearization_jit.py`
- 物理モデル (Newton+ 時間積分) : `improved1207_paper_jit.py`
- 解析微分 (paper mode) : `paper_analytical_derivatives.py`
- 診断/レポート: `mcmc_diagnostics.py`, `make_report.py`

モジュール相関（図）



TMCMC (β tempering) の要点

- prior ($\beta=0$) → posterior ($\beta=1$) へ段階的遷移
- ステージごとに $\Delta\beta$ を ESS 目標に合わせて調整（上下限あり）
- 重み更新 → ESS → リサンプル → mutation (MCMC) で混合を維持

重要チェック

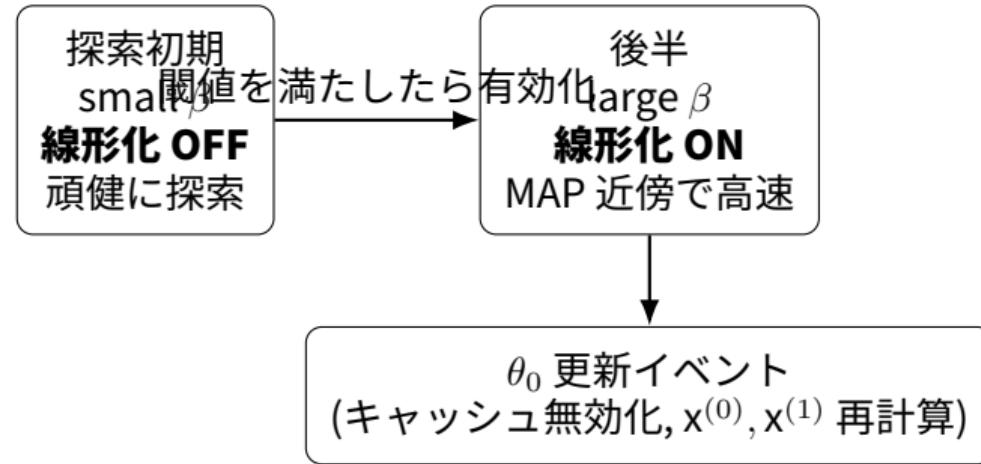
$\beta=1$ に到達していること（ログに “beta reached 1.0” が出るか）

線形化近似

$$x(\theta) \approx x(\theta_0) + \frac{\partial x}{\partial \theta} \Big|_{\theta_0} (\theta - \theta_0) \quad (1)$$

- 探索初期 (小 β) : 線形化 OFF で非線形性を取り込む
- 後半 (大 β) : 線形化 ON で高速化 (MAP 近傍で精度良)
- `update_linearization_point(theta0)` でキャッシュ無効化 + 再計算

いつ線形化するか（概念）



- ROM error と $\|\Delta\theta_0\|$ で更新の健全性を監視する.

物理モデル (Newton + 時間積分)

- `run_deterministic`: 時間方向に進めて各ステップを Newton で解く
- `compute_Q_vector`, `compute_Jacobian_matrix`: 残差とヤコビアン
- `alpha_schedule`: `switch_time`/`switch_step`/`switch_frac` をサポート
(`M3_val`)

解析微分 (paper mode)

- paper_analytical_derivatives.py: $\partial G / \partial \theta$ を paper-consistent に実装
- complex-step 参照で検証できる (verify 関数あり)
- complex-step を成立させる前提: $\theta \rightarrow (A, b)$ が複素 dtype を保持

再現性（監査ログ）

- config.json: seed / mode / TMCMC 設定 / モデル設定
- likelihood_meta_*.json: 尤度定義 (var_total 等の内訳)
- diagnostics_tables/*.csv: β , 受理率, ROM error, θ_0 履歴
- REPORT.md: しきい値による PASS/WARN/FAIL を自動整理

1 コマンドパイプライン:

```
python tmcmc/run_pipeline.py --mode paper --seed 123 --run-id  
paper_M1_seed123_fixed --models M1 --lock-paper-conditions  
--use-paper-analytical
```

論文条件固定: sigma_obs=0.01, cov_rel=0.005

性能 (どこが支配的か)

- **最大**: BiofilmTSM_Analytical.solve_tsm()
- **最大**: BiofilmNewtonSolver.run_deterministic() (内部で Q/J + Newton)
- **大**: 感度 $x^{(1)}$ 生成 (線形化が効かない時期に重い)
- **中**: TMCMC 枠 (β 更新/リサンプル/mutation)
- **小**: 可視化・I/O (条件次第で増える)

精度 (何が推定を支配するか)

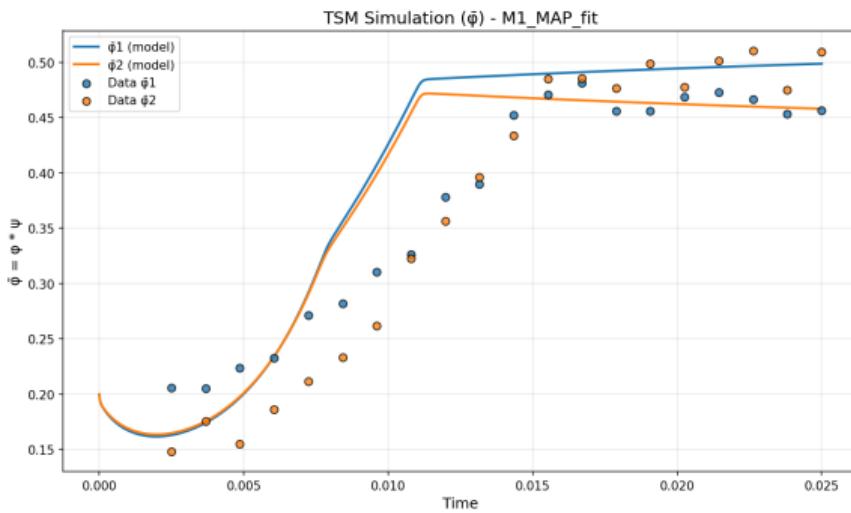
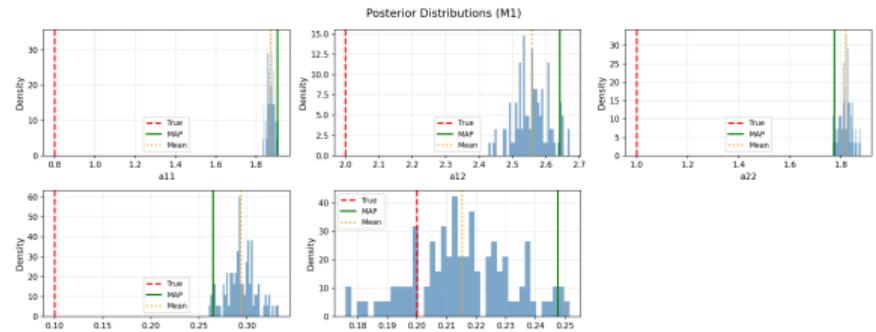
- **最大**: 尤度定義 (σ_{obs} , $\text{Var}(\bar{\phi}\bar{\psi})$ と Cov の扱い)
- **大**: TSM 妥当性 (ROM error, 線形化点管理, 解析微分)
- **大**: 線形化 ON のタイミングと更新規則 (早すぎると壊れる／遅いと遅い)
- **中**: 数値安定化 (dt, Newton 許容, クリップ/ペナルティ)
- **中**: TMCMC 設定 (粒子数/ステージ/mutation steps)

図のネタ（そのまま発表に使える）

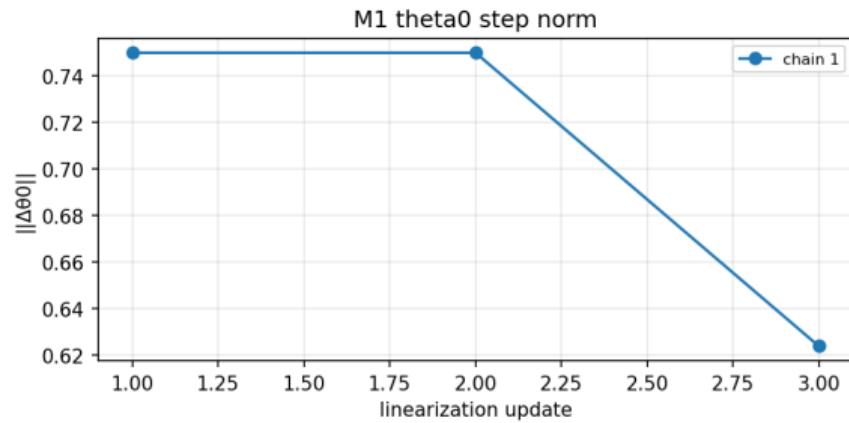
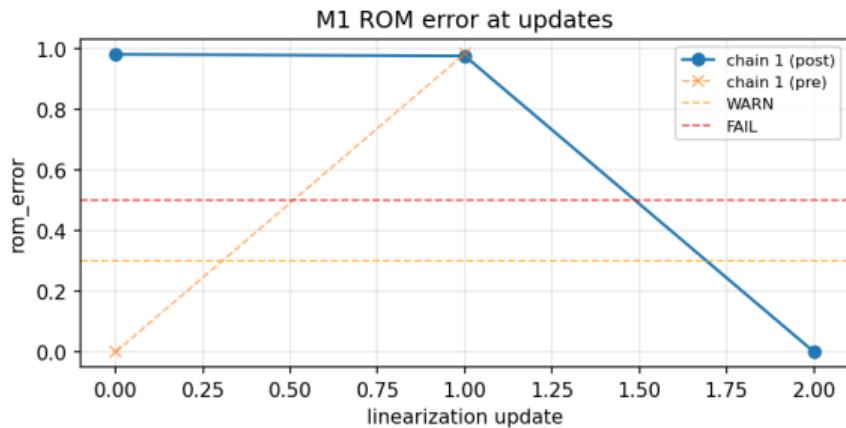
- β スケジュール（チェーン別） + “beta reached 1.0” の確認
- ROM error の更新イベント系列 (pre/post)
- θ_0 更新のステップノルム ($\|\Delta\theta_0\|$)
- Posterior (M1/M2/M3/M3_val) と MAP/MEAN fit
- Cost–Accuracy tradeoff (FOM 評価回数 or wall-time vs MAP error)

実例 (auto-picked best run)

Best run id: m1_check_np100_ns15 (存在する場合のみ埋め込み)



診断例（ROM妥当性）



まとめ

- 外枠は run_pipeline → case2 → make_report
- 中核コストは solve_tsm と Newton 時間積分
- $\beta=1$ 到達と尤度定義の明文化が監査・再現性の肝

PASS チェック (結果を主張する前に)

最低限の合格条件

- 全チェーンで $\beta=1$ 到達 (posterior 到達)
- likelihood_meta_*.json を保存 (分散モデルが明示)
- solver ログに NaN/Inf なし, 診断 CSV が出力されている
- ROM error と $\|\Delta\theta_0\|$ が安定 (更新が破綻していない)

参考文献

-  L. Fritsch, H. Geisler, J. Grashorn, F. Klempt, M. Soleimani, M. Broggi, P. Junker, M. Beer. Bayesian updating of bacterial microfilms under hybrid uncertainties with a novel surrogate model. [tmcmc/Bayesian updating of bacterial microfilms under hybrid uncertainties with a novel surrogate model - Kopie.pdf](#).
-  F. Klempt, H. Geisler, M. Soleimani, P. Junker. A continuum multi-species biofilm model with a novel interaction scheme. [arXiv:2509.01274v1, 2025. tmcmc/biofilm_simulation.pdf](#).
-  P. Junker, D. Balzani. An extended Hamilton principle as unifying theory for coupled problems and dissipative microstructure evolution. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2021. DOI: [10.1007/s00161-021-01017-z](https://doi.org/10.1007/s00161-021-01017-z). [tmcmc/hamiltonian.pdf](#).
-  N. Heine et al. Influence of species composition and cultivation condition on peri-implant biofilm dysbiosis in vitro. *Front. Oral Health*, 2025. DOI: [10.3389/froh.2025.1649419](https://doi.org/10.3389/froh.2025.1649419). [tmcmc/Influence of species composition and cultivation condition on peri-implant biofilm dysbiosis in vitro.pdf](#).