研究課題名：連続型数理モデル構築のための不確実性定量化手法

高精度ではない計算、どう信頼する？

大阪大学サイバーメディアセンター 宮武勇登

高精度計算は難しい？そもそも必要？→ 計算の信頼性評価

科学技術計算の基盤

アルゴリズム
(数値解析学)

大規模・高精度計算の
需要の高まり

計算機
(計算機科学)

過去半世紀に大きく進展

既存の問題設定に対しては
成熟しつつある

ムーアの法則の終焉
(スパコンなどは発展しているが...)

近未来のシミュレーションの信頼性、結構危うい？

ユーザーの需要に応える

微分方程式の数値計算の信頼性定量化手法

観測データと数値解から、誤差の**増減**も反映し
信頼性を**高速**に定量化する手法を開発

- ✓ 計算結果への過信を防止！
- ✓ 逆に無駄な計算も回避
  - ✓ 限りある計算資源の有効活用
  - ✓ 省エネ
- ✓ 地球固体科学などへの展開の可能性

以下、研究内容の詳細

研究背景

観測データから微分方程式のパラメータ推定

(地球科学分野等で重要な問題設定)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{\theta}), \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0$$

→ $\boldsymbol{\theta}$ を推定したい

問題点

通常、数値解をデータに当てはめて推定を行うが、
数値解の誤差がデータのノイズより大きいと、
大きなバイアスがかかりうる

そこで

データと数値解から、数値解の信頼度を定量化！

ACT-Iと加速フェーズにおける提案

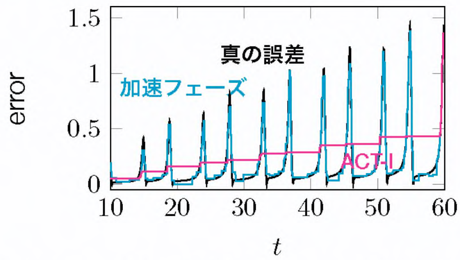
離散化誤差を確率変数としてモデル化

$$\xi_i = x_i - x(t_i) \sim \mathrm{N}(0, \sigma_i^2)$$

離散化誤差分散 $\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2$ を推定

ACT-I：単調制約 $\sigma_i^2 \leq \sigma_{i+1}^2$ を課して推定

加速：正則化により単調性を弱めて推定



正則化により、より真の誤差に近い推定（定量化）！

「一般化近単調回帰」理論の提案により実現

$X_i \sim \mathrm{N}(\mu_i, 1)$
ガウス分布

$X_i \sim p(\theta_i \mid 1)$ (exponential family)
ガウス分布, 二項分布, ポアソン分布,
χ^2 分布,...

単調回帰

(e.g. Barlow+ 1972)

$$\min_{\mu_1 \leq \cdots \leq \mu_n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_i)^2$$

アルゴリズム：PAVA

一般化単調回帰

(Robertson+ 1988)

$$\min_{\theta_1 \leq \cdots \leq \theta_n} \sum_{i=1}^{n} -\log p(x_i \mid \theta_i)$$

アルゴリズム：PAVA (with 変数変換)

近単調回帰

(Tibshirani+ 2011)

$$\min_{\mu} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} (\mu_i - \mu_{i+1})_+$$

アルゴリズム：修正PAVA

一般化近単調回帰

(Matsuda, M. 2021)

$$\min_{\theta_1 \leq \cdots \leq \theta_n} \sum_{i=1}^{n} -\log p(x_i \mid \theta_i) + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} (\theta_i - \theta_{i+1})_+$$

アルゴリズム：修正PAVA (with 変数変換)

主な発表論文

[1] T. Matsuda, Y. Miyatake:
Estimation of ordinary differential equation models with discretization error quantification,
SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif. 9 (2021) 302–331.

[2] T. Matsuda, Y. Miyatake:
Genaralized nearly isotonic regression,
arXiv:2108.13010 [stat.ME]

[3] S. Ito, T. Matsuda, Y. Miyatake:
Adjoint-based exact Hessian computation,
BIT Numer. Math. 61 (2021) 503–522.