

2023 年度年次報告書

数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用

2021 年度採択研究代表者

宮武 勇登

大阪大学 サイバーメディアセンター  
准教授

発展方程式の数値計算に対する不確実性定量化理論の創出

## 研究成果の概要

本年度も、昨年度に引き続き、初期値問題を数値計算する際の誤差の時間発展を定量的に評価する手法について研究を行った。

数値計算の誤差の単調増大性の仮定を弱めた定量化手法の研究については、単調増大性を仮定した手法とともに、その核となるいくつかのアルゴリズムをまとめたパッケージを Julia 言語で作成し、IsoFuns.jl というパッケージ名で公開した。今後も段階的に機能の追加やドキュメントの充実を図っていく予定である。<https://yutomiyatake.github.io/IsoFuns.jl/build/index.html> 偏微分方程式への展開を想定して進めている、各変数に対する誤差同士の相関を考慮した定量化手法の研究では、アルゴリズムの改良と収束証明の簡略化などを行い、論文も採択されている(1)。また、最終年度に進める計画であった、ベイズ推定を想定した離散化誤差定量化手法の研究についても、進展があった。基本的には、離散化誤差を表現する確率変数に対し、その事後分布が(区分)単調性を持つように適切に事前分布を課す必要がある。事前分布の設定について、いくつかのアイデアを得、簡単な数値実験で検証は行っているが、一方で、大規模問題を想定するとサンプリング等についても注意する必要がある。最終年度ではより洗練された手法へと改良していきたい。

その他、逆問題での需要から、将来的には本研究課題の成果と組み合わせることを想定している、Neural Network を用いた微分方程式の数値解法についても、構造保存性の観点から研究を進めた (2, 3)。また、応用例の一つとして、偏微分方程式モデルに基づく画像復元手法について、splitting 法に基づくアルゴリズムの開発を行った。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) N. Marumo, T. Matsuda, Y. Miyatake, Modelling the discretization error of initial value problems using the Wishart distribution, Appl. Math. Lett. 147 (2023) 108833.
- 2) H. Chu, S. Wei, T. Liu, Y. Zhao, Y. Miyatake, Lyapunov-stable deep equilibrium models, The 38th Annual AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2024.
- 3) H. Chu, Y. Miyatake, W. Cui, S. Wei, D. Furihata, Structure-preserving physics-informed neural networks with energy or Lyapunov structure, arXiv:2401.04986.