

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 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

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

§ 1. 研究成果の概要

本年度は、常微分方程式の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。将来的にはデータ同化などの文脈への展開を狙っているため、本来は、モデルとなる常微分方程式自体の不確実性や初期値の不確実性も考慮に入れたうえで、数値計算の誤差の定量的評価を目指すことが望ましいが、まずは、人工的な問題設定ではあるが、常微分方程式や初期値に不確実性はないという状況で、ノイズ付き時系列観測データと数値解から数値計算の誤差を定量化する手法を検討した。

上記の問題設定に対し、さきがけ研究開始前までに、統計学における単調回帰理論を用いた定量化手法を開発してきた。これは、多くの微分方程式とその数値計算において数値計算の誤差は時間発展とともに増大する傾向にあるという観察に基づき、誤差の時間発展のモデルを構築し、そのモデルを用いて定量化を行うものである。このモデルの特徴として

- ・各時刻で数値計算の誤差はガウス分布に従う
- ・数値計算の誤差は時間発展とともに単調に増大する

ということが挙げられる。また、常微分方程式の各変数に対する誤差同士の間には相関はないという仮定をおいていた。このような仮定は、定量化する際のコストの軽減が可能という利点はあるものの、必ずしも多くの問題に対して適切ではないという側面もある。そこで、主に以下の2点の研究 (A) 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¹⁾
(B) 各変数に対する誤差同士の間相関を考慮した定量化手法の研究
を行った。(A)では単調回帰理論を拡張した一般化近単調回帰理論を整備することで、誤差の増減の振る舞いも捉えることが可能となった。また、(B)では Wishart 分布を用いた誤差のモデルを提案し、現状では計算コストの問題から適用範囲は小規模な常微分方程式に限られるものの、変数間の相関を考慮した定量化が可能となることを数値実験を通して確認した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Matsuda and Y. Miyatake, “Piecewise monotone estimation in one-parameter exponential families”, arXiv:2108.13010, 2021.