

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

Większość modeli matematycznych zjawisk naturalnych opiera się na rozumieniu procesów biologicznych lub fizycznych, co umożliwia zaproponowanie ogólnej struktury równań. Kolejnym krokiem jest walidacja i kalibracja modeli na podstawie danych empirycznych, co często stanowi wyzwanie naukowe. Mimo że ten krok jest kluczowy dla dokładności predykcyjnej modelu, rzadko jest podejmowany. Niniejszy projekt ma na celu przezwycięzenie tych trudności poprzez ustanowienie niezbędnych ram analitycznych, ze szczególnym naciskiem na identyfikację parametrów w modelach różnych procesów, takich jak wzrost guza, przepływ ruchu i zjawiska geofizyczne. Kluczową zaletą projektu jest innowacyjne zastosowanie i rozwój technik równań różniczkowych cząstkowych (PDE), dobrze zintegrowanych z metodami statystycznymi. To połączenie pozwoli osiągnąć znaczące postępy w obszarach optymalizacji, próbkowania, wnioskowania i uczenia maszynowego. Z jednej strony, podejścia statystyczne, takie jak wnioskowanie bayesowskie, odgrywają kluczową rolę w identyfikacji parametrów PDE, z drugiej strony, nowo pojawiające się metody potoków gradientowych wykazują duży potencjał w rozwijaniu algorytmów próbkowania. Cele badawcze skupiają się wokół następujących problemów badawczych:

Identyfikacja parametrów: Problem identyfikacji parametrów jest kluczowym krokiem w kierunku opracowania rzeczywiście praktycznych modeli. Teoretyczna analiza nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych, będąca przedmiotem intensywnych badań, dotyczy wielu skomplikowanych zagadnień, takich jak istnienie, jednoznaczność i regularność rozwiązań. Jednak aby móc przejść do kolejnych etapów — budowy algorytmów numerycznych, wykonywania obliczeń oraz przewidywania procesów zachodzących w rzeczywistym świecie — niezbędna staje się kalibracja niektórych parametrów równań. W przypadku, gdy parametry te nie są znane a priori, istnieją różne metody ich wyznaczania.

Metody próbkowania: Próbkowanie polega na wybieraniu reprezentatywnych punktów z większego zbioru danych, aby oszacować cechy całej populacji. Problem ten, szczególnie w przypadku rozkładów prawdopodobieństwa znanych tylko do stałej normalizacyjnej, jest kluczowy w naukach obliczeniowych, inżynierii oraz statystyce bayesowskiej. Najnowsze badania sugerują, że algorytmy oparte na potokach gradientowych w przestrzeni miar prawdopodobieństwa otwierają nowe możliwości w zakresie próbkowania. Celem jest rozwój tej dziedziny poprzez dostosowanie metod potoków gradientowych, aby opracować precyzyjne algorytmy istotne zarówno dla próbkowania, jak i identyfikacji parametrów.

Stabilność parametrów: Projektu ma również na celu pogłębienie zrozumienia oraz rozwój nowych metod analitycznych do badania zależności rozwiązań silnie nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych (PDE) od parametrów. Pomimo tego, że stabilność rozwiązań względem parametrów jest kluczowa dla walidacji i kalibracji modeli biomedycznych i inżynierskich, jak również w problemach optymalizacyjnych, w których dąży się do minimalizacji funkcjonału za pomocą równań sterujących, to zagadnienia takie jak ciągłość Höldera (lub Lipschitzowska) i różniczkowalność rozwiązań pozostają w dużej mierze niezbadane. Kluczowym wyzwaniem jest określenie regularności rozwiązań względem parametrów. W zastosowaniach praktycznych wybór metod numerycznych o optymalnym tempie zbieżności powinien być dostosowany do oczekiwanej regularności rozwiązań. Pozwala to odróżnić heurystyczne metody numeryczne od tych, których poprawność oraz tempo zbieżności można wykazać.

Rozszerzone grafony: Ważnym obszarem badań projektu jest wyprowadzenie granicy pola średniego (mean-field limit) dla systemów wieloagentowych dla szerokiego zakresu grafów rzadkich, znanych jako rozszerzone grafony (extended graphons). Projekt skupia się na niewymiennych systemach wieloagentowych z nieidentycznymi agentami. Analiza takich układów wymaga sięgnięcia do różnych działów matematyki, w tym równań różniczkowych cząstkowych, analizy stochastycznej i teorii grafów. Nowa koncepcja granic dla rozszerzonych grafonów ujmuje strukturę łączności sieci, która odgrywa kluczową rolę w dynamice kolektywnej. Obszar ten był ostatnio przedmiotem badań, ale tylko w odniesieniu do układów konserwatywnych. Chcemy rozszerzyć tę koncepcję na układy niekonserwatywne, co jest bardzo ważne, bo modele biologiczne są zwykle wyrażane jako prawa równowagi, a nie zachowania.