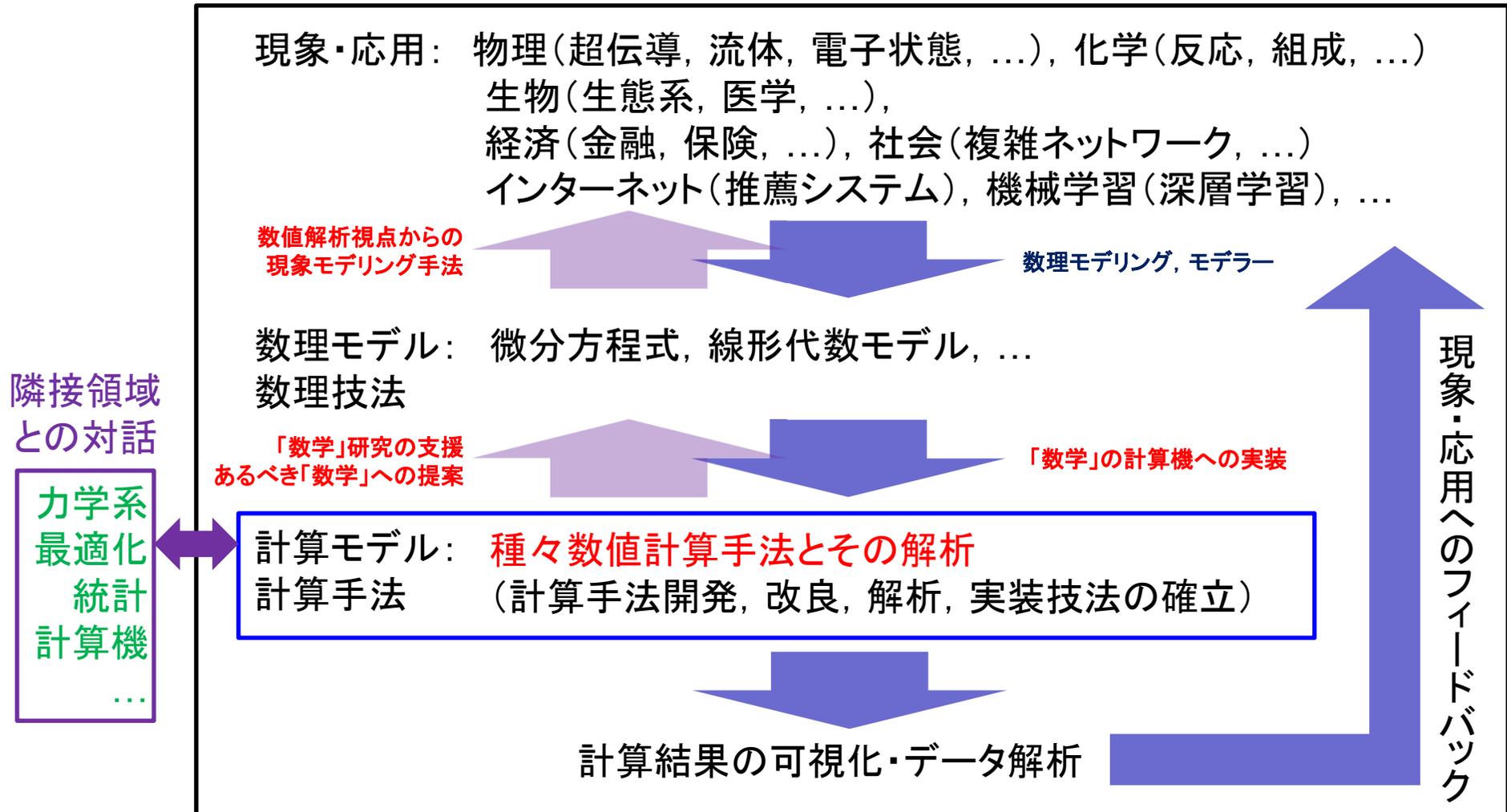


## 共通テーマ： 数値解析・シミュレーション とその応用

教授  
松尾宇泰数値解析全般  
構造保存解法  
モデル縮減  
シミュレーション准教授  
田中健一郎数値解析全般  
関数近似  
数値積分  
金融工学教授  
中島研吾  
(情報基盤センター)ハイパフォーマンス・  
コンピューティング  
計算科学助教  
佐藤峻構造保存解法  
微分代数方程式  
発展方程式助教  
伊藤伸一  
(地震研究所)計算物理,  
統計物理  
データ同化  
ベイズ統計

学生 M1: 3名; M2: 4名; D1: 1名; D2: 2名; D3: 1名



これまでの数値解析： 応用を数学にブレークダウンしフィードバック

これからの数値解析： 諸科学分野と対話し, 連続と離散の行き来を通じて  
 「計算機上のあらゆる計算を司る」 基礎学問

## ■ 数学としての数値解析

- 「丸め誤差」: 浮動小数点の集合  $\neq$  線形空間 の帰結
- 「無限」の禁止: 固有値・特異値

数学を計算機に乗せるのは簡単な仕事ではない

だが、それを成し遂げるのもまた、数学の仕事。(例)幾何学的数値解法.

## ■ 計算機から見た数値解析

- 「計算可能」と「実用的スピードで計算可能」は別
- 最終的には、計算機をよく知る必要 (キャッシュ, メモリ, 通信帯域, ...)

数理的アルゴリズムを書いただけでは 絵に描いた餅

場合によって数理に戻って考え直す (例)線形計算の部分空間法

## ■ 情報科学から見た数値解析

- 数値計算に適したデータ構造。(例)データのテンソル分解とその計算.
- 【つい最近】深層学習理論の数値解析学的解釈
- 【つい最近】データ同化と数値解析

最適化 (勾配法, ...) , 統計 (MCMC, 不確かな数理モデル, ...) ,  
機械学習 (レコメンダシステム, ...) , 物理学・化学・生物学, 金融工学, ...  
様々な隣接数理工学分野・科学分野 と横断的に行き来する研究分野です

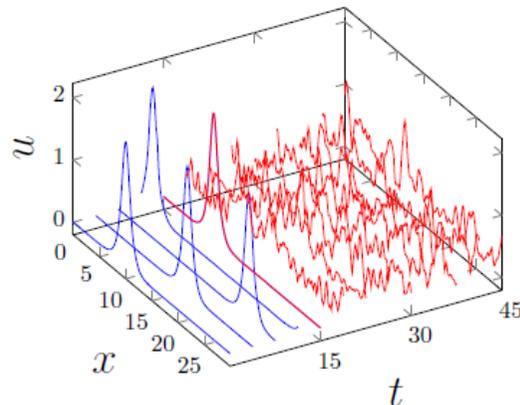


## ■ 構造保存型数値計算法 (幾何学的数値解法)

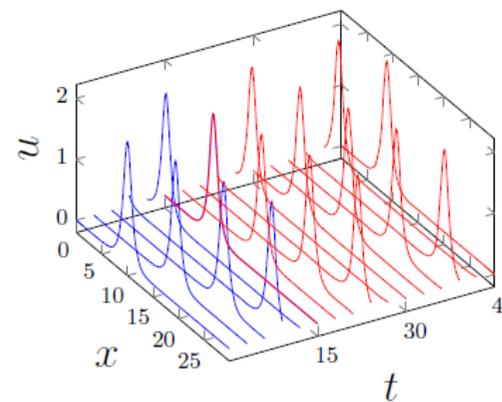
対象の数理構造 (≡ 物理的構造 ≡ しばしば幾何学的構造) を尊重した解法.

2000年頃から数値解析学のメインピックのひとつ.

日本はこの分野で**世界的拠点**のひとつ (東大 & 阪大)



通常の数値計算法の解 ( $T_s = 15$ )



SMR ( $T_s = 15, T = 45$ ) 解 [Peng-Mohseni, 2015]

## ■ 深層学習・最適化の数値解析学的側面

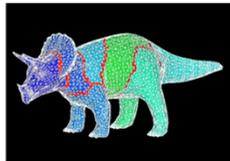
科研費『構造保存型数値計算法の概念に基づく深層学習・最適化手法の新展開』2021～

科研費『無限次元最適化とその近似による新しい計算科学の探究』2020～

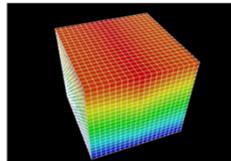
## ■ 線形計算, テンソルとその圧縮 (構造保存モデル縮減)

## ■ 離散関数解析

## ■ 力学系理論と数値解析学



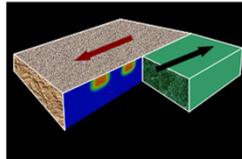
有限要素法  
Finite Element Method  
FEM



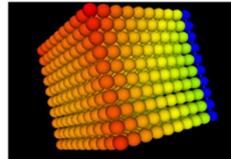
差分法  
Finite Difference Method  
FDM



有限体積法  
Finite Volume Method  
FVM



境界要素法  
Boundary Element Method  
BEM



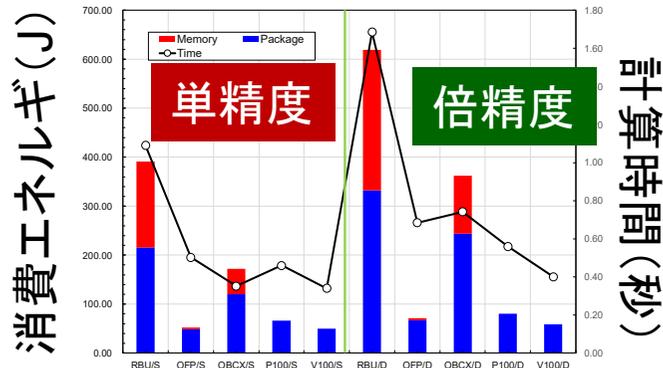
個別要素法  
Discrete Element Method  
DEM

• 計算科学=「第3の科学」

- 大規模並列コンピュータによるシミュレーション
- 偏微分方程式数値解:有限要素法, 差分法他
  - 詳細な計算=大規模モデル(メッシュ)
- 大規模連立一次方程式の求解に帰着される

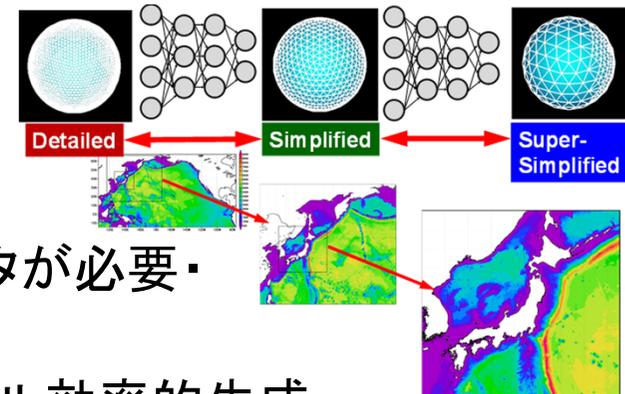
• 数値線形代数

- 大規模連立一次方程式の高性能並列解法
- 前処理付反復法・多重格子法(Multigrid法)
- 混合精度演算(倍精度+単精度+半精度)による高性能・高効率(低消費電力)手法+精度保証手法



• (計算+データ+学習)融合による問題解決  
(Simulation+Data+Learning) (AI for HPC)

- 機械学習による計算結果予測:大量の訓練データが必要・既存の結果群の内挿しかできない
- 階層型DDA(Data Driven Approach):簡易モデル効率的生成



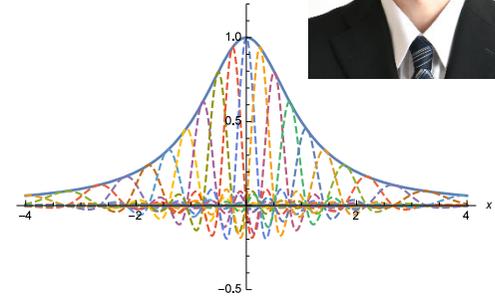


## ■ 研究例:

### 主題: 関数・積分・積分変換の近似理論・手法

#### (1) 正則関数に対する近似理論・手法

- A) 超高精度公式の設計・解析, 最良近似の追求  
(複素解析・ポテンシャル・関数解析・最適化など)



#### (2) 高次元関数近似・数値積分

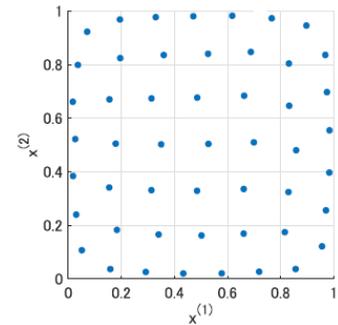
- A) カーネル法  $f(x) \approx s_f(x) = \sum_{j=1}^n c_j K(x, x_j) \quad \int_{\Omega} f(x) d\mu(x) \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$

- B) 近似用標本点の最良配置の追求

【例: 数値積分の場合】

$$-2 \sum_{j=1}^N w_j \int_{\Omega} K(x_j, x) d\mu(x) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_i w_j K(x_i, x_j) \rightarrow \text{最小化}$$

(再生核Hilbert空間, エネルギー最小化問題など)

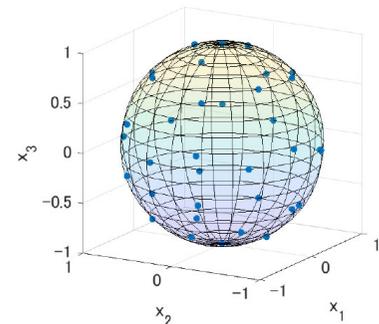


#### (3) 応用

- A) ファイナンス分野への応用

- B) 機械学習分野への応用

- 積分表現の離散化によるニューラルネットの構成





## ■ 研究例：構造保存数値解法の対象の拡大

通常の変分構造 (例):  $u_t = \partial_x \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$

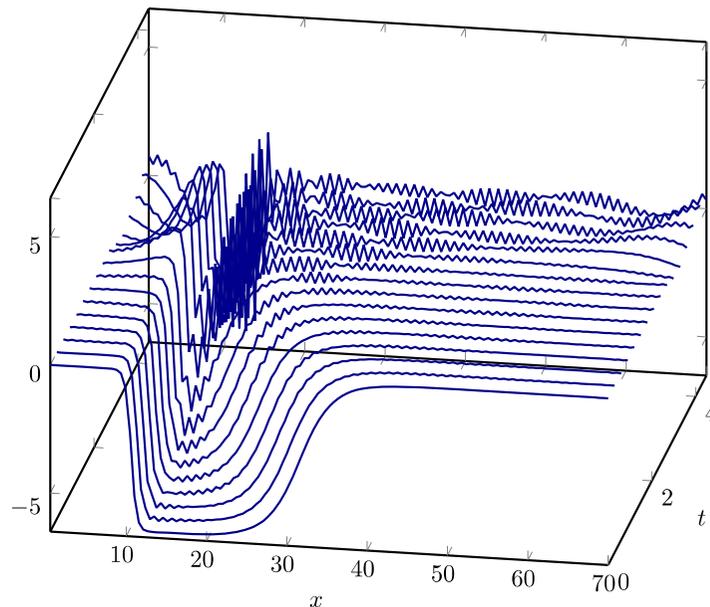


より難しい方程式:  $\partial_x u_t = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$

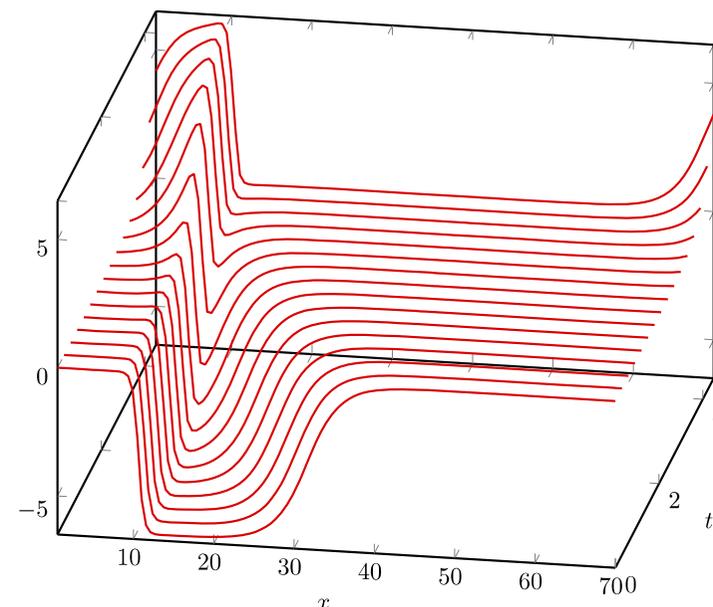
どちらも保存則をもつ:  $\mathcal{H}(u) = \text{const.}$

左辺の微分作用素の取扱いは要注意

素直な構造保存数値解法



適切な構造保存数値解法

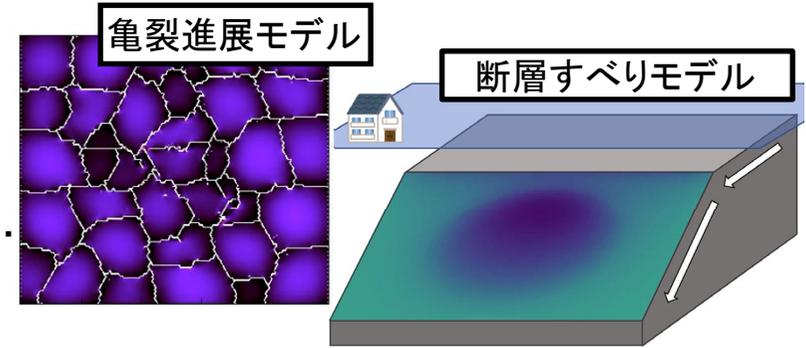




■ 研究: 大規模複雑現象からの情報抽出論の構築  
シミュレーション + データ同化 + 統計モデリング

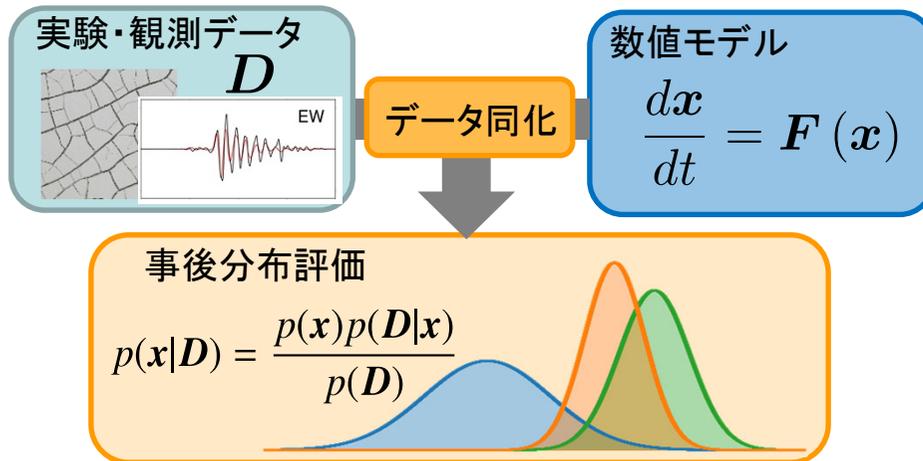
(1) シミュレーション

岩石・金属粒成長, 亀裂進展, 断層モデル, ...  
Phase-field 法, SPH法, 有限要素法, ...



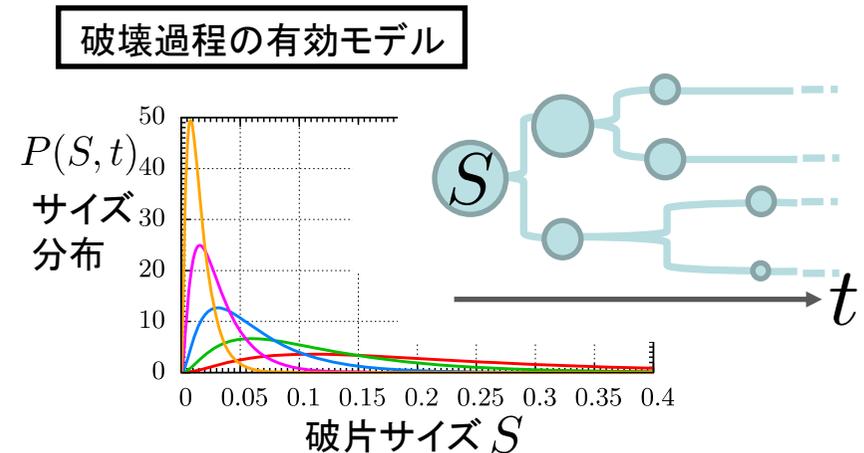
(2) データ同化

4次元変分法, 不確実性評価  
事後分布からの効率的な情報抽出



(3) 統計モデリング

マルコフ過程, ベイズモデリング  
素過程抽出に基づく有効モデル



## 応用のために 数学 を 計算機 に乗せる研究室

物理学・化学・生物学  
社会科学・金融工学  
大規模データ演算...

微分方程式論, 関数  
解析, 線形代数, 幾  
何, 力学系理論, ...

アルゴリズム, プログ  
ラミング, 高速化,  
データ構造, HPC, ...

- 応用 に興味があり, その計算 (シミュレーション) をしたい人, アルゴリズムを研究したい人
- 数学 に興味があり, それを計算機に乗せるやり方に興味がある人 (計算機の上で壊れてしまった 数学の世界 を救いたい人)
- 計算機 や プログラミング が得意で, それでできることに興味がある人

紙と鉛筆 でも 計算機だけ でも 研究できます！

でも, 全部できると とても強い 研究者になります