

## 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: 1名; M2: 3名; D1: 0名; D2: 1名; D3: 3名

現象・応用： 物理(超伝導, 流体, 電子状態, ...), 化学(反応, 組成, ...)  
 生物(生態系, 医学, ...),  
 経済(金融, 保険, ...), 社会(複雑ネットワーク, ...)  
 インターネット(推薦システム), 機械学習(深層学習), ...

数値解析視点からの  
現象モデリング手法

数理モデリング, モデラー

数理モデル： 微分方程式, 線形代数モデル, ...  
 数理技法

「数学」研究の支援  
あるべき「数学」への提案

「数学」の計算機への実装

計算モデル： **種々数値計算手法とその解析**  
 計算手法 (計算手法開発, 改良, 解析, 実装技法の確立)

計算結果の可視化・データ解析

現象・応用へのフィードバック

隣接領域  
との対話

力学系  
最適化  
統計  
計算機  
...

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

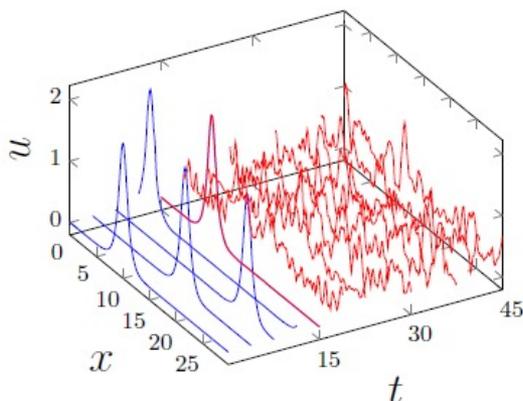


## ■ 構造保存型数値計算法 (幾何学的数値解法)

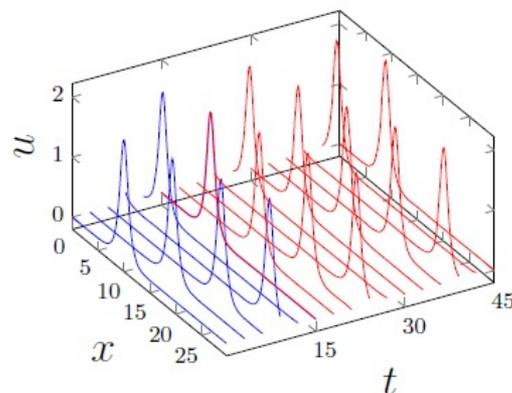
対象の数理構造 ( $\equiv$  物理的構造  $\equiv$  しばしば幾何学的構造) を尊重した解法.

2000年頃から数値解析学のメイントピックのひとつ.

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

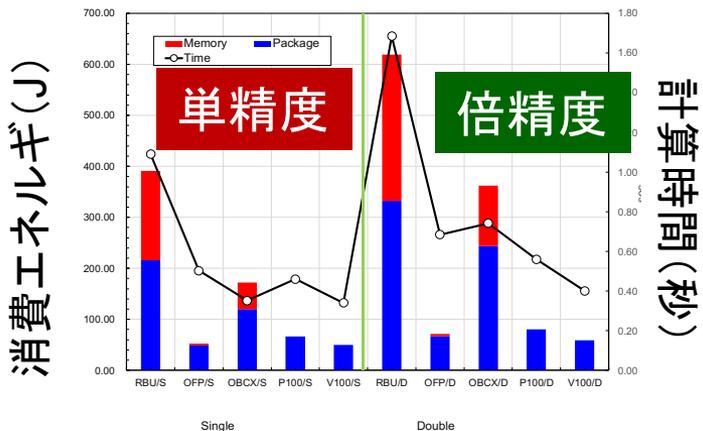
科研費『構造保存型数値計算法の概念に基づく深層学習・最適化手法の新展開』2021～

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



## 計算科学=「第3の科学」

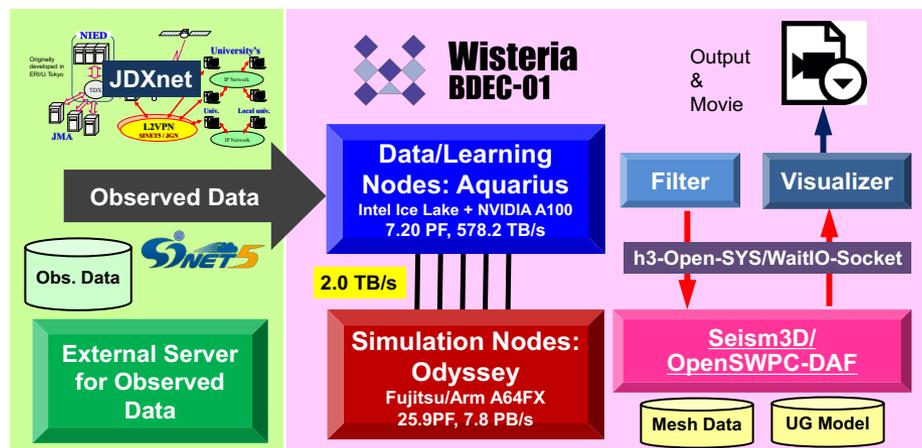
- スーパーコンピュータによるシミュレーション
- 偏微分方程式数値解: 有限要素法等
  - 詳細な計算=大規模モデル(メッシュ)
- 大規模連立一次方程式の求解に帰着

## 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)融合による効率的問題解決

- Wisteria/BDEC-01システム
- h3-Open-BDEC
  - 革新的基盤ソフトウェア
- 観測データ同化による長周期地震動リアルタイム予測
  - 地震発生時の的確な避難計画
- 機械学習による三次元地下構造モデル推定
  - 観測データ・シミュレーションデータ解析

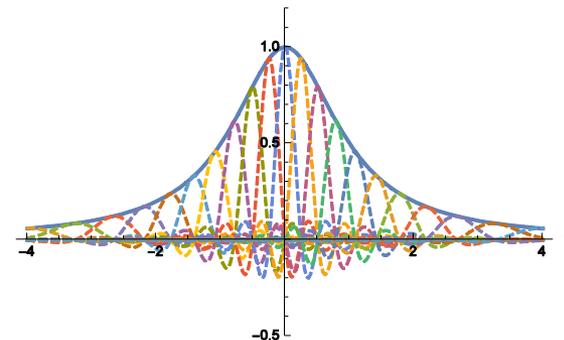




## 主題：関数・積分などの近似理論・計算公式の最適設計

### 1. 解析関数に対する近似公式の設計/解析

- DE公式(積分), DE-Sinc公式(関数),
- DE公式の大規模行列関数計算への応用 **【科研費】**
- エネルギー最小化による標本点の生成法と理論



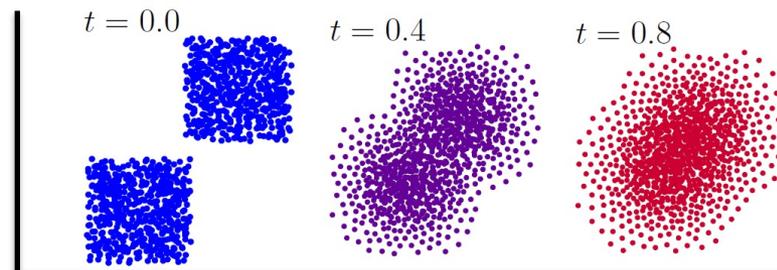
### 2. 数値積分に対する変数変換の最適設計

- JSIAM Letters Vol. 11 (2019) pp. 65-68 (卒論生の方との共著).  
日本応用数理学会 2020 年度論文賞 JSIAM Letters 部門受賞

### 3. カーネルを用いた(高次元)関数近似/数値積分の設計

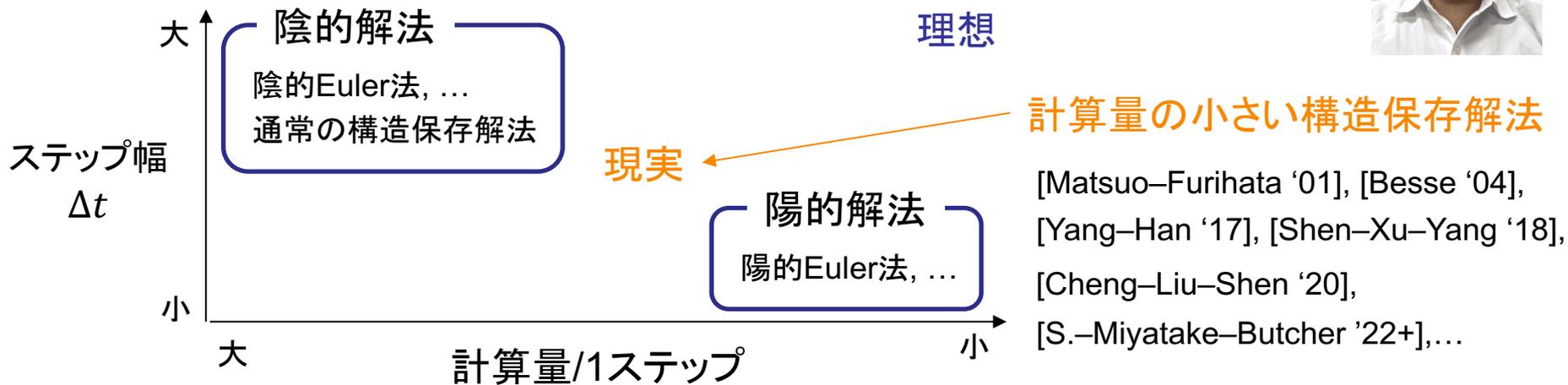
- カーネルハーディング (関数空間版最適化法) の加速法・理論解析
  - キーワード：再生核ヒルベルト空間, カーネル法, 凸汎関数の最適化
- 粒子勾配流の加速法・理論解析 **【JSTさきがけ】**
  - キーワード：最適輸送問題, Wasserstein勾配流, 測地的凸関数

### 4. 金融数理における資産価格・リスク評価に対する数値計算





## ■ 構造保存数値解法的高速化



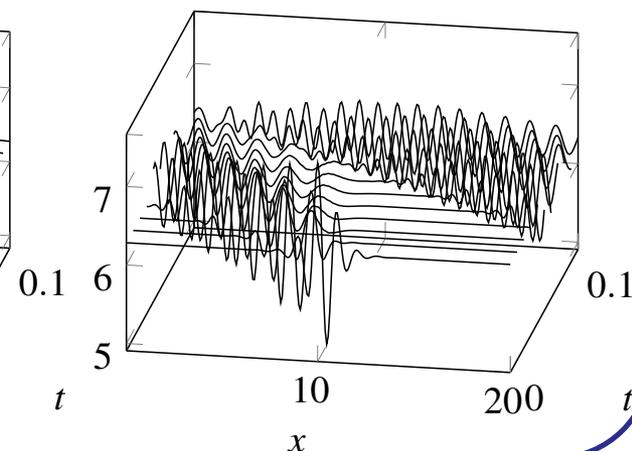
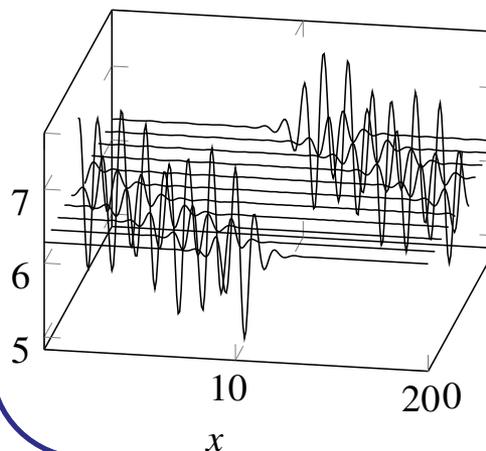
右の数値例に対する  
ステップ幅と総実行時間

$\Delta x$	通常		高速化	
	$\Delta t$	実行時間	$\Delta t$	実行時間
20/256	$10^{-3}$	28秒	$10^{-6}$	72秒
20/512	$10^{-3}$	801秒	$10^{-6}$	152秒

計算量の小さい構造保存解法の数値例

成功: 十分小さいステップ幅

失敗: 大きすぎるステップ幅



## ■ 最適化と微分方程式の数値解法の関係

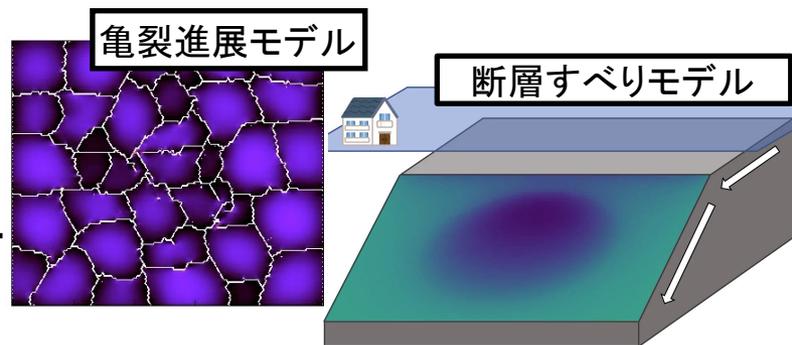


## ■ 研究: 大規模複雑現象からの情報抽出論の構築

シミュレーション + データ同化 + 統計モデリング

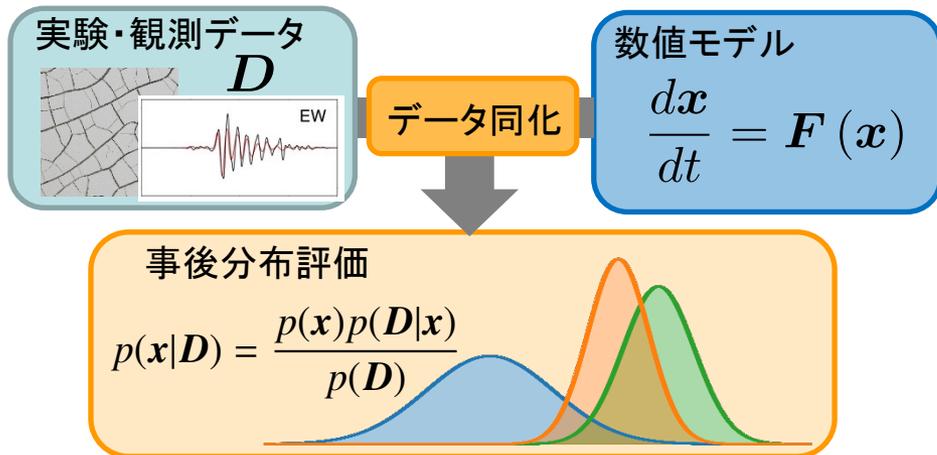
### (1) シミュレーション

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, ...



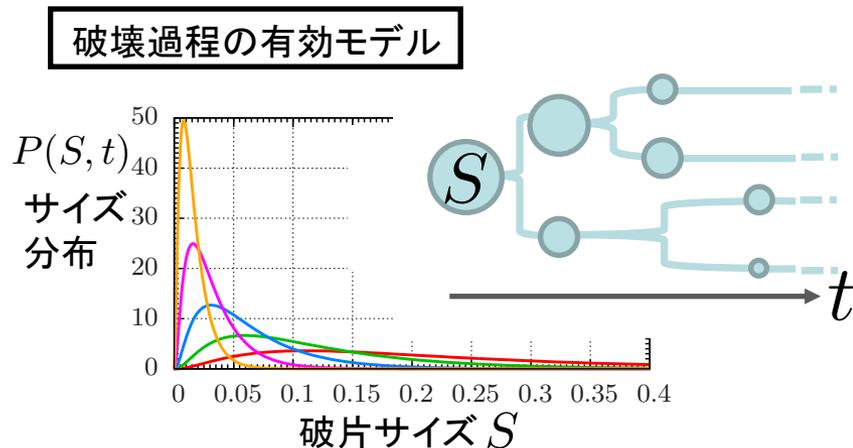
### (2) データ同化

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

卒業論文	年度	指導教員	卒業論文タイトル
2020年度		松尾宇泰 教授	Ostrovsky方程式の構造保存スキームの数学的解析
2020年度		松尾宇泰 教授	ニューラル微分方程式の力学系的視点に基づく拡張に関する研究
2020年度		田中健一郎 准教授	リッジレット解析による浅いニューラルネットの重みの決定方法の改良
2020年度		田中健一郎 准教授	有理式近似を用いた代用電荷法における電荷点の削減と再配置
2019年度		松尾宇泰 教授	アジョイント法に基づく無限次元データ同化によるハミルトン系の推定
2019年度		松尾宇泰 教授	An Explicit QTT Representation of p-harmonic operator (p 重調和作用素の陽な QTT 分解)
2019年度		田中健一郎 准教授	2ファクターモデルを用いたデフォルト依存関係の分析
2019年度		田中健一郎 准教授	Maximum likelihood estimation of the Fisher-Bingham distribution via efficient calculation of its normalizing constant (Fisher-Bingham分布の規格化定数の計算とパラメータの最尤推定)
修士論文	年度	指導教員	修士論文タイトル
2020年度		松尾宇泰 教授	高速な構造保存解法に基づく連続最適化アルゴリズムの構成と解析
2020年度		松尾宇泰 教授	離散微積分不等式の統一的解析に関する研究
2020年度		田中健一郎 准教授	行列符号関数を用いた可制御性グラミアンの数値積分による数値計算
2020年度		田中健一郎 准教授	Efficient discretization of measures by optimization: numerics of analytic functions and cubature construction
2019年度		松尾宇泰 教授	多様な形状の領域・境界条件の拡散型偏微分方程式に対するメッシュフリーな構造保存解法
2019年度		松尾宇泰 教授	移流現象を示す偏微分方程式の空間シフト付モデル縮減
2019年度		田中健一郎 准教授	再生核ヒルベルト空間上の求積・補間に用いる良い点配置の効率的生成法
2019年度		田中健一郎 准教授	Hawkes過程におけるCVaRの効率的な計算手法の研究
博士論文	年度	指導教員	博士論文タイトル
2019年度		中島研吾 教授	ロバストな並列多重格子法のための効率的なニアカーネルベクトル抽出手法の研究
2018年度		松尾宇泰 教授	拘束条件つき発展方程式に対する幾何学的数値計算法
2014年度		松尾宇泰 教授	エネルギー関数を持つ発展方程式に対する幾何学的数値計算法