

2023年度共同利用研究報告書

2024年02月29日

所属・職名 東京大学大学院数理科学研究科・博士課程一年

磯部 伸

| | | 整理番号 | 2023a014 | |
|----------|--|----------------|----------|--------|
| 1.研究計画題目 | 数値解析と機械学習の協同が拓く新時代の数理科学 | | | |
| 2.新規・継続 | 新規 | | | |
| 3.種別 | 若手・学生研究 | | | |
| 4.種目 | 短期共同研究 | | | |
| 5.開催方法 | ハイブリッド開催 | | | |
| 6.研究代表者 | 氏名 | 磯部 伸 | | |
| | 所属 部局名 | 東京大学大学院数理科学研究科 | 職名 | 博士課程一年 |
| 7.研究実施期間 | 2023年11月02日(木曜日)～2023年11月03日(金曜日) | | | |
| 8.キーワード | 数値解析, 数値計算, 機械学習, 深層学習, 数理解析, 微分方程式, 数理モデル | | | |
| 9.参加者人数 | 91人 | | | |

10.本研究で得られた成果の概要

本共同研究で挙げられた主な成果は、「微分方程式と機械学習」に関わる様々な分野に、横断的にまたがる研究者コミュニティが創出されたことである。

具体的な事実はいくつかある。

ひとつには、本共同研究終了後、第3回数理解析若手交流会という、若手数学者コミュニティ内のワークショップに、本共同研究の講演者である越塚氏が、招待されたことである。

越塚氏の所属は、情報系であり、数学コミュニティとは離れていたが、交流会主催者が、本共同研究を機に越塚氏の存在を知り、招待するに至ったと伝え聞いた。

また、講演者の中の、数学、工学、情報科学を背景に持つ研究者数名で、生成モデルで最近流行しているFlow Matchingと呼ばれる技術を、物理ダイナミクスの同定に用いるという方向性で、定期的な研究会合が実施されるに至った。

さらには、(時)系列データを処理するためのニューラルネットワークとして、Mambaに代表される構造状態空間モデルについても、時系列解析に詳しい専門家も取り込み、来年度から研究会合が実施される予定である。

まだ、具体的な研究成果を上げることはできていないが、来年度以降、本共同研究を萌芽とした研究成果が発表できると考えている。

その際には、各々の背景を活かす形で、よい研究分担がなされるであろう。

数値解析と機械学習の協同が拓く 新時代の数理科学 成果報告書

磯部 伸（東京大学大学院数理科学研究科博士課程）

2024年2月28日

本報告書では、2023年11月02日（木）から2023年11月3日（金・祝）の期間に行われた、若手・学生研究-短期共同研究「数値解析と機械学習の協同が拓く新時代の数理科学」の実施報告をおこなう。

1 本共同研究のねらい

近年、深層学習に代表される機械学習技術を、物理シミュレーションを目的とした数値計算技術に取り込もうという動きが、国際的に高まっている。実際、機械学習のトップカンファレンスであるICLRでは、“[Physics for Machine Learning](#)”と題したワークショップが開催される程であった。また、本共同研究当日に先立って丁度行われた、[第26回情報論的学習理論ワークショップ \(IBIS\)](#)では、「物理シミュレーションのための機械学習入門」と題したチュートリアルが行われ、国内の機械学習コミュニティにおいても、数値計算分野に注目が集まっている。

このような情勢を踏まえ、本共同研究の目的は、[計画書](#)で述べたように、

本共同研究の目的は、伝統的な数値計算技術と、近年急速に発展している機械学習技術を相補的に組み合わせた、信頼性が高く汎用的なシミュレーション技術を開発すること

としたのであった。

上記の目的は、既に国内外の研究動向の流行に流されただけに一見思われるかもしれない。しかしながら、研究代表者の知る限り、上記目的と同様の方向性で研究・開発に取り組む研究グループは、国内に分散してしまっており、コミュニティとしては、欧米と比較して小さいと言わざるを得ない状況である。特に、数値計算技術と機械学習技術の双方に通底する言語基盤を与えるはずの数理科学は、グループ間で共有されておらず、このことがグループを超えたコミュニティの創出を妨げてしまっている。

そこで、本共同研究では、「数値計算技術と機械学習技術の融合領域を探索する研究コミュニティの創出」を目標とし、来年度以降、本共同研究で生まれた研究者ネットワークを活用して、信頼性が高く汎用的なシミュレーション技術のための基礎研究を推進していくことを目指す。

2 実施状況

前述した目標達成のために、以下の様に共同研究を実施した。

2.1 準備段階について

研究会実施の準備として、定期的な会合を開催していた。会合参加者は、研究代表者の磯部に加え、組織委員である株式会社豊田中央研究所研究員の井上氏、九州大学 IMI 准教授の田上先生を含んだ数名であり、採択から集会実施までの間、4 か月に一度程度の頻度でおこなった。会合の中で、最も議題に上がったのは、講演者の決定であった。前述した目標を達成するために、なるべく分野が重ならないようにしつつも、「広義の」数理を基盤とする研究を志向する研究者・技術者を、講演者として集めることにした。ここで、「広義の」数理と述べたのは、数学的証明に代表されるような、演繹的な推論だけでなく、数値計算を用いて、現実のデータから、帰納的に、数理的な構造を見出そうとする試みも含むという意味である。最終的に、「微分方程式と機械学習」というテーマのもとで、下記のように、多様な専門性をもつ方々を講演者として招待することにした：

- 井上大輔（株式会社豊田中央研究所・研究員、マルチエージェント制御が専門）
- 堀江正信（株式会社 RICOS・基盤研究部部長、機械学習技術を用いた PDE の数値計算アルゴリズムの開発が専門）
- 谷口隆晴（神戸大学大学院システム情報学研究科・准教授、幾何学的数値解析と Neural ODE の融合が専門）
- 越塚毅（東京大学情報理工学系研究科・博士課程、深層学習を用いた拡散現象のモデリングが専門）
- 橋本悠香（NTT ネットワークサービスシステム研究所/理研 AIP・研究員、数値線形代数と作用素環論的データ解析が専門）
- 中井拳吾（岡山大学・講師、力学系理論を用いたデータ解析が専門）
- 江藤徳宏（東京大学大学院数理科学研究科・博士課程、界面発展方程式、および深層学習を用いた界面発展方程式の数値計算が専門）

また、「理論のための理論」ではない、機械学習技術を産業応用可能にするための数理の開拓を念頭に、講演者には、数理・情報系の博士課程学生、大学教員といった、学术界に籍を置いた研究者だけでなく、企業研究員も複数含めた。

2.2 当日の公開プログラムについて

公開プログラムは、[公式 web](#) に掲載した通りに遂行された。講演者は、一名を除き、対面講演をおこなった。このおかげで、講演中でもかなり活発な質疑応答を促すことができた。実際、一日目の講演は、質疑が活発になるがあまり、休憩時間が無くなってしまふほどであった。オンライン講演に関しても、IMI の事務員の方々のサポートにより、大変スムーズに講演を行うことができた。

2.3 非公開プログラムについて

一日目の公開プログラム終了後、本来であれば講演する予定だった企業技術者の方に代わり、深層ニューラルネットワークの関数近似能力に関する研究を行っている博士課程学生に講演をお願いした。まだ、アイデア段階の研究に関する入門的な内容を講演して頂いたおかげで、参加者間の議論が活発になった。

3 得られた成果

本共同研究で挙げられた主な成果は、「微分方程式と機械学習」に関わる様々な分野に、横断的にまたがる研究者コミュニティが創出されたことである。具体的な事実はいくつかある。ひとつには、本共同研究終了後、[第3回数理解析若手交流会](#)という、若手数学者コミュニティ内のワークショップに、本共同研究の講演者である越塚氏が、招待されたことである。越塚氏の所属は、情報系であり、数学コミュニティとは離れていたが、交流会主催者が、本共同研究を機に越塚氏の存在を知り、招待するに至ったと伝え聞いた。また、講演者の中の、数学、工学、情報科学を背景に持つ研究者数名で、生成モデルで最近流行している Flow Matching と呼ばれる技術を、物理ダイナミクスの同定に用いるという方向性で、定期的な研究会合が実施されるに至った。さらには、(時) 系列データを処理するためのニューラルネットワークとして、Mamba に代表される構造状態空間モデルについても、時系列解析に詳しい専門家も取り込み、来年度から研究会合が実施される予定である。

まだ、具体的な研究成果を上げることはできていないが、来年度以降、本共同研究を萌芽とした研究成果が発表できると考えている。その際には、各々の背景を活かす形で、よい研究分担がなされるであろう。

開催日: 2023/11/02~2023/11/03

数値解析と機械学習の協同が拓く新時代の数理科学 | 2023a014

プログラム

11月2日(木)

● 13:00-14:00

磯部 伸(東京大学)

微分方程式論と深層学習間の相互作用の活性化に向けて

※2日目(11/3)の最初の講演がこちらに変更となりました

● 14:00-15:00

越塚 毅(東京大学)

Schrödinger Bridge問題に基づく拡散生成モデル学習

● 15:00-16:00

中井 拳吾(岡山大学)

機械学習モデルの力学系解析

● 16:00-17:00

江藤 徳宏(東京大学)

深層学習による界面発展方程式の数値計算について

11月3日(金・祝)

● 13:00-14:00

井上 大輔(株式会社豊田中央研究所)

大規模マルチエージェントシステムの制御のための平均場モデルとその数値計算

※1日目(11/2)の最初の講演がこちらに変更となりました

● 14:00-15:00

谷口 隆晴(神戸大学)

深層物理モデルにおける数値解析技術の応用について

● 15:00-16:00

橋本 悠香(NTTネットワークサービスシステム研究所)

C*環によるニューラルネットワークパラメータの一般化

● 16:00-17:00

堀江 正信(株式会社RICOS)

物理現象の性質を満たす機械学習モデルによる偏微分方程式ソルバ