2.7.2 数値解析・データ解析

（1）研究開発領域の定義

自然・生命・社会現象を主として物理法則に基づいて記述した数理モデルを、コンピューターを用いて計算するための構成的な数学研究を行う領域を数値解析と呼ぶ。狭義には、微分方程式などの連続数理モデルに対するアルゴリズムの研究が数値解析[1)]である。シミュレーションを通じて各現象を研究する領域を数値解析と呼ぶこともある。データ解析は、現象の観測を通じて得られるデータから、その現象の特徴を抽出し、現象の背後にあるメカニズムを理解するための方法の開発と応用を行う領域である。数理モデルはデータ駆動（解析）により構築されるのが標準的であり、その点で、数値解析とデータ解析は現象の相補的な解析方法であるとも言える。

（2）キーワード

有限要素法、シミュレーション、数値線形代数、モンテカルロ法、不確実性定量評価、グラフ理論、フーリエ解析、ネットワーク解析、最適化、表現学習、位相的データ解析、精度保証付き数値計算

（3）研究開発領域の概要

［本領域の意義］

数値解析では、シミュレーションのために、現象の数理モデル化、モデルの数学的正当性担保、アルゴリズムの開発、計算結果の妥当性の検証までを一括して研究[2)]する。したがって、理工医学諸分野に向けては、シミュレーションの正当性を確立し、経験に基づく研究を数学的に体系化・言語化することで、万人が安心して利用可能な、そして社会への説明責任を果たし得る信頼性の高い手法やその成果を提供するものである。一方で、数学内部に向けては、連続数理モデルに対する離散的アルゴリズムの開発を通じて、研究の対象とするべき新しい問題を開拓し、数学自体の発展にも寄与する。数値解析は、コンピューター利用を前提としており、コンピューターの存在があってこそ、その理論は現実社会に寄与する。一方で、コンピューターの発明の前から、数学者は、抽象的な存在定理や定性的な性質の研究を超えて、問題の解の具体的な値を算出するためのアルゴリズムの開発を行うという、数値解析の芽となる理論を研究していた[3), 4)]。そのため、コンピューターの実用化と同時に、数値解析の理論は大きく発展することができた。

数値解析では数理モデル化を通じて現象の理解や制御を行うが、一方でデータ解析では現象が生み出す（一般には大量の）データが与えられたとき、そこから体系的にデータの特徴を捉え構造化することを通じて、現象のメカニズムを理解する（図2-7-3を参照）。特に近年ではビッグデータという言葉で表現されるような、人間では処理できないほどの大量かつ複雑なデータを対象とすることが多い。実際、科学技術基本計画で提案されているSociety 5.0の仕組みでは、ビッグデータをAIが解析した結果が人間にフィードバックされ、新たな価値を社会にもたらすことが期待されている[5), 6), 7)]。このようなデータ活用社会の実現に向けた多くの取り組みが進む中、解析手法のさらなる高性能化や解析結果の信頼性（例えば精度保証付き数値計算など）を確保するための方法論として数学の重要性が指摘され、近年活発に研究が行われている[8), 9), 10), 11), 12)]。

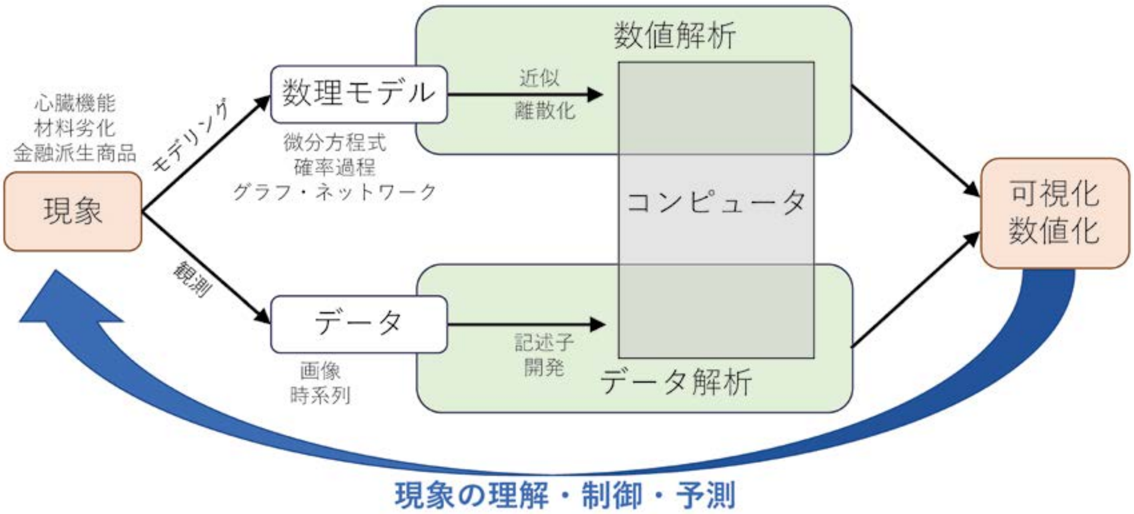

図2–7–3　　数値解析・データ解析領域の意義

［研究開発の動向］

❶ 数値解析の成立

数値解析の起源は17世紀後半の微分積分学の誕生にまでさかのぼることができる。実際、ニュートンが考案した、ニュートン法は、現在においても、計算量や正確さの観点から最も優れた求解の方法として知られている[13), 14)]。18世紀から19世紀にかけても、オイラー、ラグランジュ、ラプラス、ガウス、ヤコビなど歴史的な大数学者[3)]が、関数補間、積分、連立1次方程式、微分方程式などの（現代風に言えば）数値解析で重要な貢献をしたと考えられる。しかし、これらは、20世紀前半までは、あくまで個別の問題として認識されていた。数値解析が一つの研究分野として成立したのは、20世紀半ばのコンピューターの登場によってである。これにより、現実の諸問題を数理モデル化し数学的な問題として記述することで、コンピューターを用いたシミュレーションによる研究が可能になったのである。実際、数値解析という言葉が誕生し、一般に浸透したのは、1950年代後半のこと[15)]である。

❷ 偏微分方程式の数値計算

1950年代半ばに構造力学分野において有限要素法が開発され、工学におけるシミュレーションと数学における基礎理論の整備だけでなく、汎用のソフトウェアの開発が爆発的に進んだ[16), 17), 18)]。現実の諸問題を連続数理モデル化（主に偏微分方程式）を通じて研究すること自体は、古くから行われている。実際、流体力学におけるナビエ・ストークス方程式[1]、電磁気学におけるマクスウェル方程式などは19世紀には導出されていた。しかしながら、これらを現実的な意味で解き、現象の理解や制御に役立てるようになったのは、コンピューターの発明と汎用ソフトウェア開発があってのことである。なお、有限要素法は関数解析学の理論と相性が良く、その理論的な正当性が、端正な数学理論で保証されるという応用数学の大きな成功例となった[19), 20), 21)]。有限要素法以外にも、偏微分方程式の数値計算法は多くある。有限差分法は、単純なアイデアに基づく方法であるが、研究の歴史は長く、現在でも、主に航空工学では汎用的な解法としてよく応用されている[20), 22)]。有限体積法は、有限要素法と有限差分法を組み合わせたような解法であり、

1　ナビエ・ストークス方程式の解の鋭敏性は、気象予測などでも大きな課題となっているが、この方程式の解の数値計算・数値解析の高度化にはその解の構造に対する研究（ミレニアム懸賞問題）の進展にも大いに依存する。

やはり汎用的な解法として、広く用いられている[23]。これら三つの方法が、汎用的な計算法である一方で、特定の方程式にしか適用できないが、つぼにはまれば、少ない計算量で高精度の解が得られるような方法も研究されている。境界要素法や代用電荷法（基本解解法）がそれにあたる[21], [24]。近年では、有限要素法や有限差分法とは異なり、計算格子を用いない粒子法と呼ばれる離散化手法もある。計算格子に丸め込まれないメリットがあり、自由表面を持つ流体の挙動など大きな変形を伴う問題に適する[25]。数値解析の黎明期から、現在に至るまで、さまざまな偏微分方程式に対する数値計算法の数学理論は、数値解析の中心的なテーマである。

❸ 数値解析と科学技術計算

コンピューターの性能向上に伴い、シミュレーションそのものを目的とする分野が大きくなり、科学技術計算、計算力学などと呼ばれるようになった。一方で、数値解析という言葉は、計算に関わる数学的な問題を研究すること、すなわち、数値計算によって解析学の問題を近似的に解く数学の一分野と、狭義に捉えられるようになった。

並列計算の実用化と低価格化、スーパーコンピューターの開発などに後押しされ、科学技術計算は、シミュレーションを超えて、社会の意思決定に影響を与えるまでになっている。2020年に理化学研究所が中心になって行われた、スーパーコンピューター（富岳）によるCOVID–19ウイルス飛沫感染シミュレーション[26] はその一例である。

❹ 数値線形代数、ランダムネスに基づくアルゴリズム

連続数理モデルと直接のつながりを意識しない（実際には、強く関連している）大規模線形計算（連立1次方程式の解法、固有値計算、特異値計算など）、最適化、ランダムネスに基づくアルゴリズムの研究も盛んである。特に、大規模線形計算を中心とする数値線形代数は、大きな研究コミュニティーとなっている。Googleの創始者が開発したアルゴリズムであるPageRankが、検索語に対する適切なウェブページを得るためにGoogleで採用されていることは有名である[27]。これは数値線形代数の大きな成果である。また、偏微分方程式の数値計算（❷を参照）のアルゴリズムは最終的に大規模線形計算に帰着することが多いため、計算速度や必要なメモリ量などは大規模線形計算部分に強く依存することが知られている。高次元数値積分や不確実性定量評価のためのモンテカルロ法や準モンテカルロ法は、1990年後半から金融工学におけるオプション価格の計算で広く使われるようになった[28]。

❺ ディープラーニング以前のデータ解析

データ解析自体はさかのぼればケプラーによる天体軌道データの解析を通じた楕円軌道の発見などにもたどり着くが、ここでは主にコンピューターの登場以降のデータ解析研究の動向について記述する。ディープラーニングが出現する以前のデータ解析において、グラフ理論[29] は重要な役割を果たし得た数学理論の一つとして挙げられる。グラフとは点の集まりと点を結ぶ辺からなる数学的対象である。その簡便性から、自然現象や社会現象の中には、グラフを用いてモデリングすることが可能なものも多くある。例えば通信基地局を点とし、基地局間の回線を辺とすることで通信網ネットワークはグラフとして表示される。他にも電気回路、交通・電力網ネットワーク、社会ネットワーク、遺伝子制御ネットワーク、神経網、原子や分子の結合ネットワークなども例に挙げられる。このようにグラフとしてモデル化される対象に対して、グラフ理論では最短経路問題、深さ優先・幅優先探索問題、最小カット・最大フロー問題、最小全域木問題などの数学的な問題が解決され、実データ解析に応用された[30]。このようなグラフ理論を用いたデータ解析はネットワーク解析とも呼ばれる。一方で時系列データ解析、信号処理、画像解析などではフーリエ解析やウェーブレット解析といった数学手法が活躍した。また力学系理論に基礎を置くデータ解析手法も開発されており、半世紀近く前のTakens埋め込み定理や動的モード分解（DMD）などは幅広い分野で応用されてい

る[31),32)]。

❻ ディープラーニング以降のデータ解析研究

膨大なデータから規則性を推論し未来予測をする「データ駆動型」の数理手法の開発が盛んである。データ駆動型の数学側からの貢献としては、素数の研究でいくつもの難問を解決したフィールズ賞受賞者のTerence Taoなどによる圧縮センシングが代表的である[33),34)]。また再生核ヒルベルト空間の理論を用いるカーネル法なども、数学理論がけん引したデータ解析手法として有名である[35)]。その後、特に近年の人工知能技術の発展により、データに基づく推論技術による社会課題の解決への期待が高まり、データからの推論に関する研究の必要性が加速している。その中心技術はディープラーニングである。解析学や最適化理論といった数学分野からの貢献もあり、ディープラーニングの理論的な理解が徐々に深まっている[36)]。特に大量のデータが手に入る画像解析や自然言語処理などで目覚ましい発展を遂げているが、一方で個別性の高い分野などで汎用モデルの適用だけでは解決しない課題も多い。また、推論結果の説明が十分にできない場合が多く（これを「説明可能性が低い」という）、医療診断などへの適用を妨げる原因になっている。このような問題を解決するには、与えられたデータを構造の本質を捉えた形で適切に記述することが重要であり、そのためそこに数学言語の表現能力の高さを有効利用する取り組みが近年注目されている。例えば自然言語処理などでは単語を適切なユークリッド空間に埋め込む表現学習が行われているが、その埋め込みの際にデータが持つ幾何やトポロジー構造を反映させた埋め込みを考えることで、学習能力を高める取り組みなどが行われている[37)]。またデータ構造の「穴」に着目した特徴付けを可能と位相的データ解析[38),39)]などもこの取り組みの一つと考えられ、21世紀に入ってから急速に理論および応用研究が進められている。なお、このような位相幾何学（トポロジー）の古典的概念が極めて有効な手段を提供することになった事実は、まさしく計算機の飛躍的発展によるものであり、近年の着目に値する数学応用の大きな一つである。その起源は、米国Rutgers University（Rutgers, The State University of New Jersey）で起こった数学者と生物学者の真の協働であった。

❼ 産業界の動向

産業界において、数値解析やデータ解析の研究をおこなう部門を持つ企業は、必ずしも多いわけではない。一方で、科学技術計算は、ほとんどの研究開発現場において必須の研究開発方法となっている。しかしながら、その多くは、商用ソフトウェアに依存しており、商用ソフトが前提としていない個別性の高い問題には対処できないという問題がある。また、こういった状況に対して、大学側からは産業からの課題解決を目指すスタディーグループなどが九州大学マス・フォア・インダストリ研究所（IMI）[40)]や東京大学大学院数理科学研究科[41)]などが主体となり実施されており、産業界で活躍する数理人材の育成[42)]を行っている。

（4）注目動向

［新展開・技術トピックス］

❶ ランダム化アルゴリズム

数値線形代数において、近年、ランダム化アルゴリズム[43),44)]の開発が注目されている。標準的なアルゴリズムは、ほとんどが決定論的なものであり、アルゴリズムを2回実行すると全く同じ結果になる。これに対し、ランダム化アルゴリズムでは、非決定論的観点に基づくランダム性を明示的に導入している。これにより、決定論的なアルゴリズムでは回避することが難しい「病的なケース」からの影響を最大限に減らし、効率的なアルゴリズムを開発することが可能となる。また、ランダム性をうまく導入することで、問題のサイズを効率的に縮小することも可能になる。結果的に、計算時間の短縮に大いに寄与する。若い分野であるにもかかわらず、ランダム化アルゴリズムについては、多くの優れたサーベイ論文やモノグラフが出版されている[45),46),47)]。

❷ **量子線形代数**

量子コンピューターの研究開発の急速な進展に伴い、多くの量子アルゴリズムが開発されている。ただし、一般のコンピューターで扱える問題が、すべて量子コンピューターで、直接に扱えるわけではない。その意味で量子コンピューターの、科学技術や産業応用への寄与は限定的になると考えられていた。しかし、近年、量子コンピューターでの実装を想定した数値線形代数アルゴリズムが盛んに研究されており、量子コンピューターを用いて、理工学における難問の解決やさまざまな産業応用のため量子アルゴリズム[48]が開発されている。

❸ **トポロジー・幾何学を用いたデータ解析手法の開発**

高次元空間で表される点列データは、データ解析の現場で多く登場するデータ形式である。従来のアプローチではこのような点列データに対してクラスタリングや低次元空間への射影を行うことでデータの特徴を捉えた可視化法を提案している。しかしながらこれらの手法ではデータが持つ本来の「かたち」の特徴が壊されることが多く、データ構造の情報を適切に利用できていないこともしばしばである。近年この問題を打開するために、最先端の幾何学やトポロジーを用いてデータの「かたち」を特徴付ける新たなデータ記述子の研究開発が世界的に進められている。このような取り組みの例として位相的データ解析[38), 39)]が挙げられるが、そこではパーシステントホモロジーと呼ばれる数学手法を用いて高次元データの穴の情報をマルチスケールで特徴付けることを可能にしている[49)]。従来法では取り扱うことができなかったデータ構造を記述できることから、材料科学、生命科学、医療画像診断、経済学、地質構造解析などさまざまな応用展開を広げている[38)]。その理論において、クイバーの表現論、層論、圏論などを駆使した現代数学の展開が行われていることも意義ある点である。また最適輸送理論と呼ばれる数学理論も、近年データ解析への応用が急速に進められている[50), 51)]。時系列データのように複数の離散的な時間ポイントで得られるデータ群を適切に連続補間することを可能とし、そこからダイナミクスに関する情報を引き出すことも可能な手法として注目されている。

［注目すべき国内外のプロジェクト］

❶ **数値解析技術のオープンソース**

FreeFEM++[52)]やFEniCS[53)]は、有限要素法のオープンソースのソフトウェアであり、共に、大学や国を超えた、研究者のグループによって開発され、保守、管理がなされている。これらの根底をなす思想は、プログラミングの経験のない人でも有限要素法を実行できる環境を提供することである。結果、有限要素法のユーザーは、科学技術計算分野を超えて増加した。国内でも、有限要素法の汎用ソフトウェアの開発を行うADVENTUREプロジェクト[54)]があるが、ユーザーとしては科学技術計算の経験者を想定している。有限体積法に基づく数値流体計算用のオープンソースソフトウェアであるOpenFOAM[55)]も、利用のしやすさと扱える問題の多彩さから広く利用されている。なお、準モンテカルロ法についても、QMCpyというソフトウェアが公開され、非専門家でも使いやすい環境が整備されつつある。

❷ **臨床医療と数値解析・データ解析**

A. Quarteroni（Politecnico di Milano）が率いるiHEART（European Research Councilのプロジェクト）[56)]は、人間の心臓機能を数理モデル化した統合心臓モデルを構築し、数学的解析、数値解析方法の構築、大規模計算の実施、臨床医療現場へのフィードバックを行うプロジェクト（2017年から進行中）である。心臓機能のシミュレーションを目指す過程において、解析学、数値解析、科学技術計算における新しい問題を多く提供し、応用数学全体の発展に大いに寄与した。国内でも、規模は小さくなるが、CREST（現代の数理科学と連携するモデリング手法の構築）における研究チーム「臨床医療における数理モデリングの新たな展開」（代表：水藤寛（東北大学AIMR））[57)]は同様の趣旨でのプロジェクト（2015年～2021

年）であった。心臓機能のシミュレーションでは、国内では、UT-Heartプロジェクト[58]もあるが、上記のプロジェクトと比べると、科学技術計算としての役割、すなわち、シミュレーションと臨床応用により重きを置いている。

❸ 数学×データ解析の国内外プロジェクト

数学言語の高い表現能力をデータ解析研究に取り込む研究が、現在いくつかの国内プロジェクトとして取り組まれている。例えば人工知能の基盤技術開発を行う理化学研究所革新知能統合研究センター（理研AIP）では、情報や応用サイドの研究者だけでなく、数学者も多く参加し新たなデータ記述子の開発や機械学習研究の数学的理解の深化を目指す学術的取り組みが実施されている[59]。また近年ではJST CREST（数理モデリング（総括：坪井 俊（武蔵野大学））、数理的情報活用基盤（総括：上田修功（NTT）））や科研費・学術変革領域（A）（代表：平岡裕章（京都大学））などの大型研究費でも、数学が本質的な役割を果たす形でデータ科学のプロジェクトが実施されており、今後当該分野の世界的な位置付けを高めると同時に、国内研究者の裾野を広げる役割も期待されている。国外では米国国立科学財団（NSF）がデータ革命推進に向けた大型プロジェクトとして「TRIPODS」[60]を実施している。また比較的大規模な大学では独自のデータ科学の研究所[61]が設置され始めている。それらの部門は応用に焦点が当てられているものが多いが、必ずしも直接の応用を意識せず、データ科学を見据えた純粋数学も含む形での包括的研究に焦点が当てられている部門もある。

（5）科学技術的課題

❶ 高次元微分方程式の数値解析

統計量の近似計算、金融商品のオプション価格の計算やコンピューターグラフィックスの描画など幅広い分野に高次元の確率微分方程式が現れる。しかし、次元に対して計算量が指数的に増大し計算が困難になるという、いわゆる「次元の呪い」と呼ばれる障壁のため、数値解析による研究は限定的である[62, 63]。モンテカルロ法や準モンテカルロ法は、次元の呪いを緩和する有効な計算方法であり、近年、さらに複数のレベルの時間変数分割を用いることで、全体の計算量を抑えるマルチレベルモンテカルロ法[64]の研究開発が活発である。一方で、巨大な数の均質なエージェント間の戦略的相互作用を記述する数理モデルである平均場ゲーム方程式は、工学的・社会的な制御を目的に、近年、最も注目されている偏微分方程式の一つである[65, 66]。これは、時空間での境界値問題の形をしており、伝統的な問題設定、すなわち、時間初期値（終端値）問題ではない。したがって、数値解析方法には、抜本的に新しいアイデアが必要となる。近年、データ科学の分野でも、再注目されている最適輸送問題も、実は同様の構造をしている[50, 51]。従来の古典的な力学の問題設定に当てはまらない、時空間での境界値問題を、妥当と言える時間で、精度よく計算することは、今後の偏微分方程式の数値解析で避けて通れない重要な課題である。

❷ 幾何学的方法を用いたデータ解析手法の安定性の問題

与えられたデータに対して、グラフや多面体などの離散的な対象を構成して解析を行う手法は多く開発されているが、そこではデータ解析の安定性が問題になる場合が多い。つまり入力データが微小に変化した際に、解析結果が変化前の結果と近しいものになっているかを考える必要がある。ミレニアム懸賞問題にあるナビエ・ストークス方程式の解の初期値に対する鋭敏性などもその典型的な問題を与えている。現実の問題では入力データには観測ノイズや近似誤差が含まれていることが自然なため、解析手法はこのような摂動に対して安定であることが求められる。しかしながらグラフや多面体を経由して解析する場合、対象が離散的であることから通常は安定性をもたず、なんらかの工夫を施す必要がある。この点を解決する方法として、例えばパーシステントホモロジーでは、データから離散的対象の１パラメーター族を構成することでこの問題を解決している[67]。その他の方法についても、データ解析の信頼性を向上させるために安定性の問

題が解決されることが望まれる。

❸ データ駆動型数値解析への対応

数値解析の対象となる連続数理モデルは、古典的な物理法則に基づいて導出されることが普通であった。しかし、近年、ビッグデータを利用して、数理モデルの構成と数値解析を一体化した研究が登場し、大変注目を浴びており、すでに多くの研究成果が世界中で発表されている[68), 69), 70)]。これは、物理法則に基づく数理モデルと、機械学習などによるデータ駆動型アルゴリズムを組み合わせる、いわばデータ駆動型数値解析と言える新しい研究領域である。しかし、従来の数値解析とは、目標の設定などが異なるため、例えば、精度や計算速度（計算量）という概念が根本的に異なる。この違いを的確に認識し、科学技術計算においてシミュレーションの妥当性を確保する概念（validation & verification）[71), 72), 73)]を、データ駆動型数値解析において確立することは、今後重要である。

❹ データ解析結果の説明可能性に対する数学からの貢献

AI技術のブラックボックス問題に代表されるように、現在のデータ解析手法では解析結果に対する説明が十分であるとは言い難い。この問題を数学的に解決するには、現時点で大きく分けて以下の二つの方法が有力視されている：（a）現象の数理モデリングを構成する、（b）表現能力の高いデータ記述子を構成する。（a）は生命科学、材料科学、気象学等々で近年の機械学習手法と融合させながら発展している。（b）は比較的新しく、最先端数学を用いた表現能力の高いデータ記述子を開発する試みである。現時点では個別の案件で優れた性能を示す例[74),75)]が多く報告されており、今後広く一般化されることが望まれる。

（6）その他の課題

❶ 数値解析・データ解析コミュニティーの維持

数値解析やデータ解析の研究者は、個人の研究活動を基本としており、研究室、所属機関や国を超えて、研究テーマごとにバーチャルに研究グループを構成する。個別の研究は科研費などで経済的にサポートされているが、グループそのものは一つの機関に所属しているわけではないので、長期的な視野での人材確保が難しい。数値解析・データ解析は、数学的な真理としては時間がたっても価値がかわらない一方で、技術の変化とともに実用的な価値や位置付けが変化する。したがって、数値解析・データ解析分野における人材育成は、複数の研究グループが協力して行うことが必須である。しかし、わが国の現在のシステムでは数学分野の伝統的な単一の師弟関係に基づいており、グループによる人材育成は困難である。結果、国際競争力の維持は不確実・不安定なものとなっている。より長期的な理念に基づいた人材の育成・確保が望まれる。このような人材育成の課題は応用・実用を主目的とした数理科学分野に広く共通するが、特に数値解析・データ解析分野において顕著である。

❷ 産業界における人材の活用

産業界では、数値解析・データ解析を専門とする部署を持つ企業は限られているが、それらを必要とする業態の企業はすべからく数値・データ解析を必要としており、いろいろな部門に数値解析・データ解析および科学技術計算を行う研究者が少しずつ在籍しているのが普通である。結果、ヨコの関係での情報共有が十分でなく、各企業が独立に「車輪の再発明」を行っている例が存在する。個々の企業の立場は尊重するのは当然として、数値解析・データ解析および科学技術計算を看板に掲げた上で情報共有できる仕組みがあれば、各企業個別の潜在的な研究力を全体で高めることができる。

❸ 数値解析と科学技術計算の協働

数値解析と科学技術計算は、源流は同じであるものの、コンピューター技術の発達につれて、価値観や

目標の違いが大きくなりつつある。コンピューターの登場以前に、数値解析に必要な数学理論が用意されていたことを考慮すると、両者の間の価値観の溝を放置するのは、得策ではなく、意識して協働の場を作るべきである。また、プログラミング言語や計算基礎理論などのコンピューターサイエンスと、数値解析、科学技術計算研究者が共同のプロジェクトを実施する例も、見られない。これについても同様の理由で、意識して協働の場を作るべきである。

（7）国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	○	↗	スーパーコンピューターの開発など科学技術計算の世界的な水準は高い。理化学研究所革新知能統合研究センターや大型研究費によるプロジェクト[8), 9), 10), 59)]などもあり、数学を積極的に用いたデータ解析の基礎研究は盛んである。
	応用研究・開発	○	→	工学系における数値解析・データ解析のレベルが高く、応用研究自体は活発であるが、実用化まで可能な応用研究が少ない印象である。一般企業に関しても、数値解析・データ解析で世界最先端の研究・技術を持つ企業は多い。しかし、産学連携が弱く、お互いの資源を十分に活用できていない。
米国	基礎研究	◎	↗	数値解析のテーマごとに研究を世界的にリードする研究グループが国内に点在している[76), 77), 78)]。世界中から優秀な学生を取り込み次々と新たな方法論を開発し分野をけん引している。多くの主要大学でデータ解析の研究所を設立するなどの動きも目立つ[61)]。新しい重要な研究の種を見つけて、それを研究のトレンドにし、基礎研究としても応用研究としても成果を上げるスピードの速さは突出している。
	応用研究・開発	◎	↗	数値解析・データ解析研究ともに巨大IT企業が世界的な応用研究活動をけん引している[79)]。産学連携が充実していることから人材育成も活発で、大学で開発された技術の企業への移転がスムーズである。
欧州	基礎研究	◎	↗	テーマごとに研究を世界的にリードする研究グループが欧州内に点在している。フランス国立情報学自動制御研究所（INRIA[80)]）は欧州を代表するデータ解析の研究開発機関であり、欧州の多くの大学を巻き込んで、基礎研究だけでなく応用研究も活発に行っている。なお、応用研究が活発でない国でも純粋数学の研究水準と関連して、数値解析・データ解析の基礎研究が活発である[80), 81)]。
	応用研究・開発	◎	↗	大学側から産学連携を積極的に推し進める様子は見えないが、企業が数値解析・データ解析の人材を積極的に登用し、結果的に産学連携が推進されている。特に、欧州では、日本と異なり、数値解析・データ解析の人材の育成は数理科学系の学部が担っているため、企業が研究テーマを指定して数理科学系の大学院の奨学金（給料）を援助する制度との相乗効果が現れている。
中国	基礎研究	◎	↗	数値解析・データ解析研究ともに非常に盛んに研究が行われている。ただし、膨大な論文発表数に比較して、新たな方法論が中国で開発されているという印象はなく、むしろ米国などで開発された手法を後追いしている感が強い。主に米国で活躍した研究者を中国に招聘したり、クロスアポイントを積極活用したりしており、近く、世界的なイニシアチブをとることになる可能性は高い。
	応用研究・開発	△	→	国家主導で重点的に投資が行われているが、現段階で、目立った成果はない。
韓国	基礎研究	×	→	目立った成果はない。
	応用研究・開発	×	→	目立った成果はない。

（註1）フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

（註2）現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている　○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない　×：特筆すべき活動・成果が見えていない

（註3）トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

参考文献

1) Lloyd N. Trefethen, “The Definition of Numerical Analysis,” *SIAM News* 25, no. 6 (1992). Lloyd N. Trefethen「数値解析の定義」岡田裕, 三井斌友 訳『応用数理』3 巻 2 号（1993）: 133-137., https://doi.org/10.11540/bjsiam.3.2_133.
2) Alfio Quarteroni, *Algorithms for a New World: When Big Data and Mathematical Models Meet* (Springer Cham, 2022)., https://doi.org/10.1007/978-3-030-96166-4.
3) Herman H. Goldstine, *A History of Numerical Analysis: form the 16th through the 19th Century*, Studies in the History of Mathematics and Physical Sciences 2 (New York: Springer, 1977)., https://doi.org/10.1007/978-1-4684-9472-3.
4) A. N. コルモゴロフ 編『19世紀の数学 III：チェビシェフの関数論：差分法』藤田宏 監訳（朝倉書店, 2009).
5) 内閣府「Society 5.0」https://www8.cao.go.jp/cstp/society5_0/, (2023年3月8日アクセス).
6) 一般社団法人日本経済団体連合会「Society 5.0：ともに創造する未来（2018年11月13日）」https://www.keidanren.or.jp/policy/2018/095_honbun.pdf, (2023年3月8日アクセス).
7) 坂中靖志「Society 5.0におけるIoTの役割」『電子情報通信学会誌』102 巻 5 号 (2019): 378-382.
8) 国立情報学研究所蓮尾研究室「ERATO Metamathematics for Systems Design Project（蓮尾メタ数理システムデザインプロジェクト）」https://group-mmm.org/eratommsd/ja/, (2023年3月8日アクセス).
9)「データ記述科学の創出と諸分野への横断的展開：令和4年度－8年度 文部科学省・科研費・学術変革領域（A）」https://data-descriptive-science.org, (2023年3月8日アクセス).
10) 未来社会創造事業（JST MIRAI）「未来医療を創出する4次元トポロジカルデータ解析数理共通基盤の開発」https://tfda.jp, (2023年3月8日アクセス).
11) 大石進一 編著『精度保証付き数値計算の基礎』(東京: コロナ社, 2018).
12) 中尾充宏, 渡部善隆『実例で学ぶ精度保証付き数値計算：理論と実践』SGCライブラリ 85 (東京: サイエンス社, 2011).
13) 齊藤宣一『数値解析入門』大学数学の入門 9 (東京: 東京大学出版会, 2012).
14) 杉原正顯, 室田一雄『数値計算法の数理』(岩波書店, 1994).
15) 加藤敏夫「数理物理学」『日本物理学会誌』15 巻 3 号 (1960): 170-174., https://doi.org/10.11316/butsuri1946.15.170.
16) Ray W. Clough, “Original formulation of the finite element method,” *Finite Elements in Analysis and Design* 7, no. 2 (1990): 89-101., https://doi.org/10.1016/0168-874X(90)90001-U.
17) J. Tinsley Oden, “Finite elements: An introduction,” *Handbook of Numerical Analysis* 2 (1991): 3-15., https://doi.org/10.1016/S1570-8659(05)80038-9.
18) Ivo Babuska, “Courant Element: Before and After,” in *Finite element methods: fifty years of*

the Courant element, eds. Michel Krizek, Pekka Neittaanmaki, and Rolf Stenberg, Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics 164 (New York: Marcel Dekker, Inc., 1994), 37-51.
19) 菊地文雄『有限要素法の数理：数学的基礎と誤差解析』計算力学とCAEシリーズ 13（東京: 培風館, 1994).
20) 菊地文雄, 齊藤宣一『数値解析の原理：現象の解明をめざして』(岩波書店, 2016).
21) 田端正久『偏微分方程式の数値解析』(岩波書店, 2010).
22) 桑原邦郎, 河村哲也 編著『流体計算と差分』(朝倉書店, 2005).
23) Robert Eymard, Thierry Gallouët and Raphaèle Herbin, "Finite volume methods," *Handbook of Numerical Analysis* 7 (2000）: 713-1018., https://doi.org/10.1016/S1570-86598(00)07005-8.
24) 岡本久, 桂田祐史「ポテンシャル問題の高速解法」『応用数理』2 巻 3 号（1992）: 212-230., https://doi.org/10.11540/bjsiam.2.3_212.
25) 後藤仁志『粒子法：連続体・混相流・粒状体のための計算科学』(東京: 森北出版, 2018).
26) rikenchannel「スーパーコンピュータ「富岳」記者勉強会：室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策（4）」理化学研究所, https://www.youtube.com/watch?v=267HdDdIywI,（2023年3月8日アクセス）.
27) Amy N. Langville and Carl D. Meyer, *Google's PageRank and Beyond: The Science of Search Engine Rankings* (Princeton: Princeton University Press, 2012).
28) Pierre L'Ecuyer, "Quasi-Monte Carlo methods with applications in finance," *Finance and Stochastics* 13 (2009）: 307-349., https://doi.org/10.1007/s00780-009-0095-y.
29) 伊理正夫「グラフの理論とその応用1」『電子通信学会誌』54 巻 12 号（1971）: 1704-1710.
伊理正夫「グラフの理論とその応用2」『電子通信学会誌』55 巻 1 号（1972）: 51-57.
伊理正夫「グラフの理論とその応用3」『電子通信学会誌』55 巻 2 号（1972）: 225-232.
伊理正夫「グラフの理論とその応用4」『電子通信学会誌』55 巻 3 号（1972）: 380-387.
伊理正夫「グラフの理論とその応用5・完」『電子通信学会誌』55 巻 5 号（1972）: 664-670.
30) Robert Sedgewick and Kevin Wayne, *Algorithms*, 4th ed. (Addison-Wesley Professional, 2011).
31) Tim Sauer, James A. Yorke, and Martin Casdagli, "Embedology," *Journal of Statistical Physics* 65（1991）: 579-616., https://doi.org/10.1007/BF01053745.
32) Jonathan H. Tu, et al., "On dynamic mode decomposition: Theory and applications," *Journal of Computational Dynamics* 1, no. 2（2014）: 391-421., https://doi.org/10.3934/jcd.2014.1.391.
33) Emmanuel J. Candes and Terence Tao, "Near-Optimal Signal Recovery From Random Projections: Universal Encoding Strategies?" *IEEE Transactions on Information Theory* 52, no. 12 (2006）: 5406-5425., https://doi.org/10.1109/TIT.2006.885507.
34) David L. Donoho, "Compressed sensing," *IEEE Transactions on Information Theory* 52, no. 4（2006）: 1289-1306., https://doi.org/10.1109/TIT.2006.871582.
35) 福水健次『カーネル法入門 - 正定値カーネルによるデータ解析 -』シリーズ多変量データの統計科学 8（東京: 朝倉書店, 2010).
36) 岡谷貴之『深層学習』機械学習プロフェッショナルシリーズ（東京: 講談社, 2015).
37) ICLR Workshop on Geometrical and Topological Representation Learning, https://gt-rl.github.io,（2023年3月8日アクセス）.
38) Gunnar Carlsson and Mikael Vejdemo-Johansson, *Topological Data Analysis with Applications* (Cambridge: Cambridge University Press, 2021)., https://doi.org/10.1017/9781108975704.

39) 平岡裕章「トポロジカルデータ解析」『科学』92 巻 8 号 (2022).
40) 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, Study Group Workshop 2022 https://sgw2022.imi.kyushu-u.ac.jp/index.html,（2023年3月8日アクセス）.
41) 東京大学大学院数理科学研究科 附属数理科学連携基盤センター, スタディグループhttps://www.ms.u-tokyo.ac.jp/icms/study-group.html,（2023年3月8日アクセス）.
42) 一般社団法人日本応用数理学会「日本応用数理学会における数理科学研究の加速に向けた取組み」https://jsiam.org/files/2022/02/proposal20211112.pdf,（2023年3月8日アクセス）.
43) Yuji Nakatsukasa, “Afterword: Major Developments in Numerical Linear Algebra since1997,” in *Numerical Linear Algebra*, eds. Lloyd N. Trefethen and David Bau, The 25th Anniversary ed.（Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2022）, 363-370.
44) XXI Householder Symposium on Numerical Linear Algebra, https://users.ba.cnr.it/iac/irmanm21/HHXXI/index.html,（2023年3月8日アクセス）.
45) Michael W. Mahoney, “Randomized algorithms for matrices and data,” arXiv, https://doi.org/10.48550/arXiv.1104.5557,（2023年3月8日アクセス）.
46) Per-Gunnar Martinsson and Joel A. Tropp, “Randomized numerical linear algebra: Foundations and algorithms,” *Acta Numerica* 29（2020）: 403-572., https://doi.org/10.1017/S0962492920000021.
47) Gernot Akemann, Jinho Baik, and Philippe Di Francesco, *The Oxford Handbook of Random Matrix Theory*（Oxford: Oxford University Press, 2011）.
48) Institute for Pure & Applied Mathematics（IPAM）, Workshops: Quantum Numerical Linear Algebra, University of California, Los Angeles, http://www.ipam.ucla.edu/programs/workshops/quantum-numerical-linear-algebra/,（2023年3月8日アクセス）.
49) 平岡裕章『タンパク質構造とトポロジー：パーシステントホモロジー群入門』三村昌泰, 竹内康博, 森田善久 編, シリーズ・現象を解明する数学 (東京: 共立出版, 2013).
50) Gabriel Peyré and Marco Cuturi, “Computational Optimal Transport: With Applications to Data Science,” *Foundations and Trends® in Machine Learning* 11, no. 5-6（2019）: 355-607., http://dx.doi.org/10.1561/2200000073.
51) Cédric Villani, *Optimal Transport: Old and New*, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 338 (Berlin, Heidelberg: Springer, 2009)., https://doi.org/10.1007/978-3-540-71050-9.
52) FreeFEM ++ , https://freefem.org,（2023年3月8日アクセス）.
53) FEniCSx, https://fenicsproject.org,（2023年3月8日アクセス）.
54) 設計用大規模計算力学システム開発プロジェクト（ADVENTURE PROJECT）, https://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/,（2023年3月8日アクセス）.
55) OpenCFD Ltd, “Open FOAM,” https://www.openfoam.com,（2023年3月8日アクセス）.
56) European Commission, “An Integrated Heart Model for the simulation of the cardiac function (iHEART),” https://cordis.europa.eu/project/id/740132,（2023年3月8日アクセス）.
57) 東北大学材料科学高等研究所（AIMR）「CREST 臨床医療における数理モデリングの新たな展開」https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/suito_labo/CREST/,（2023年3月8日アクセス）.
58) 株式会社UT-Heart研究所, http://ut-heart.com/jp/index.html,（2023年3月8日アクセス）.
59) 理化学研究所革新知能統合研究センター, 数理科学チームhttps://www.riken.jp/research/labs/aip/generic_tech/math_sci/,（2023年3月8日アクセス）.
60) TRIPODS Institute for Theoretical Foundations of Data Science, http://tripods.cs.umass.edu,

（2023年3月8日アクセス）.
61) Data Science Institute, Columbia University, https://datascience.columbia.edu,（2023年3月8日アクセス）.
62) Harald Niederreiter, *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics 63（Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1992）., https://doi.org/10.1137/1.9781611970081.
63) 鈴木航介, 合田隆「準モンテカルロ法の最前線」『日本応用数理学会論文誌』30巻4号（2020）: 320-374., https://doi.org/10.11540/jsiamt.30.4_320.
64) Michael B. Giles, "Multilevel Monte Carlo methods," *Acta Numerica* 24（2018）: 259-328., https://doi.org/10.1017/S096249291500001X.
65) Jean-Michel Lasry and Pierre-Louis Lions, "Mean field games," *Japanese Journal of Mathematics* 2（2007）: 229-260., https://doi.org/10.1007/s11537-007-0657-8.
66) René Carmona and François Delarue, *Probabilistic Theory of Mean Field Games with Applications*, I & II, Probability Theory and Stochastic Modelling 83-84（Springer Cham, 2018）.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-58920-6 ; https://doi.org/10.1007/978-3-319-56436-4.
67) David Cohen-Steiner, Herbert Edelsbrunner, and John Harer, "Stability of Persistence Diagrams," *Discrete & Computational Geometry* 37（2007）: 103-120., https://doi.org/10.1007/s00454-006-1276-5.
68) Maziar Raissia, Paris Perdikarisb, and George Em Karniadakisa, "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations," *Journal of Computational Physics* 378（2019）: 686-707., https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045.
69) William Bradleya, et al., "Perspectives on the integration between first-principles and data-driven modeling," *Computers & Chemical Engineering* 166（2022）: 107898., https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.107898.
70) Shahed Rezaei, et al., "A mixed formulation for physics-informed neural networks as a potential solver for engineering problems in heterogeneous domains: Comparison with finite element method," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 401, Part B（2022）: 115616., https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115616.
71) Ivo Babuska and J. Tinsley Oden, "Verification and validation in computational engineering and science: basic concepts," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, no. 36-38（2004）: 4057-4066., https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.03.002.
72) Ivo Babuska and J. Tinsley Oden, "The Reliability of Computer Predictions: Can They Be Trusted?" *International Journal of Numerical Analysis and Modeling* 3, no. 3（2006）: 255-272.
73) J. Tinsley Oden, et al., "Research directions in computational mechanics," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192, no. 7-8（2003）: 913-922., https://doi.org/10.1016/S0045-7825(02)00616-3.
74) Yasuaki Hiraoka, et al., "Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology," *PNAS* 113, no. 26（2016）: 7035-7040., https://doi.org/10.1073/pnas.1520877113.
75) Emi Minamitani, et al., "Topological descriptor of thermal conductivity in amorphous Si," *Journal of Chemical Physics* 156（2022）: 244502., https://doi.org/10.1063/5.0093441.

76) Institute for Mathematics and its Applications, College of Science and Engineering, University of Minnesota, https://cse.umn.edu/ima,（2023年3月8日アクセス）.
77) UC Davis TETRAPODS Institute of Data Science（UCD4IDS）, https://ucd4ids.ucdavis.edu,（2023年3月8日アクセス）.
78) Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, https://cims.nyu.edu/dynamic/,（2023年3月8日アクセス）.
79) ログミー編集部「GAFAやピクサーでは数学者が活躍 ビジネスの課題を解決する数学の可能性：若山正人氏インタビュー」logmiBiz, https://logmi.jp/business/articles/320948,（2023年3月8日アクセス）.
80) National Institute for Research in Digital Science and Technology（INRIA）, https://www.inria.fr/en,（2023年3月8日アクセス）.
81) Laboratoire Jacques-Louis Lions, Sorbonne Université, https://www.ljll.math.upmc.fr/en/the-laboratory/?lang=fr,（2023年3月8日アクセス）.