JSTさきがけ 数理構造活用領域

研究総括 坂上 貴之(さかじょうたかし) 京都大学 大学院理学研究科 教授



戦略目標とさきがけ領域

戦略目標:「数理科学と情報科学の連携・融合による情報活用基盤の創出と社会への展開」

現状のAIやビッグデータ解析等データ駆動型のアプローチだけでは必ずしも十分に活用されていない実社会の情報を活用し尽くすための基盤を創出することを目指す。

- (A)数学・数理科学と情報科学の連携・融合による、数学の発想を取り入れた革新的な情報活用手法の創出に資する理論及び技術の構築
- (B) 様々な分野や産業界における情報の活用を加速・高度化する次世代アプリケーション基盤技術の創出

さきがけ領域「数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用」(2019年度発足)

数理構造活用領域



数理構造活用

多様な分野にある数理構造や数学的概念を、これまでと質の異なる新しい情報として抽出する数学・数理科学の力、それらを有効利用するための情報科学の力に期待。

数学・数理科学と情報科学の個人研究者が、それぞれの分野の強みを活かした研究を推進し、領域内で連携・融合することで、未来の社会の価値創出に資する多様な対象に潜む数理構造の抽出や数学概念の提案、その理論、それらを情報として利活用する情報活用基盤の構築をめざすもの」と位置づける。

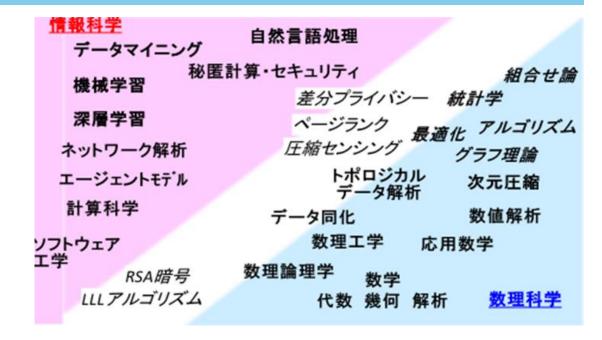


研究総括 坂上貴之

数理構造活用領域の目指したこと

研究成果の狙い:戦略目標(A)(B)に沿って、以下の観点から研究成果の創出を目指した。

- 1.未来の社会の価値へとつながる、様々な対象にある数理構造を提案する萌芽的、挑戦的な数学・数理科学研究
- 2.先進的なプロセス駆動型の数理モデルやデータ駆動型数理モデルの提案。また、それらの融合により、高い信頼性や効率化を実現するデータサイエンス研究。
- 3.数理構造や数学的概念を新しい情報として活用するための情報科学研究。
- 4.データの利用を画期的に促進させる計算高速化や高精度 化を達成する研究。
- 5.情報の高度な利活用に資する数学・数理科学・情報科学研究。



数理科学と情報科学の融合研究:

「目に見えない」数理構造の抽出+情報科学によるソフトウェア化 ⇒「目に見える」社会課題の解決へ

科学技術イノベーション創出に向けて:現代社会の課題解決に向け、十分に活用されていないデータや経験知に 潜む数理構造を、数学・数理科学よって明らかにし、情報科学によるデータ構造化、アルゴリズムの開発などを通 してソフトウェアとして実現することを目指す。

研究領域としての研究マネジメントの状況

領域マネジメント:研究者選考状況

選考方針

- 戦略目標を踏まえ「数学・数理科学」「情報科学」の二軸で「理論」「応用」を基準として、領域全体として、研究分野のポートフォリオを意識した
- 個々の研究提案においては、本領域目標達成に資するものであれば、数学・数理科学者はより数学ら しく、情報科学者はより情報らしい卓越した研究を採用.
- 数学・数理科学者と情報科学者の連携への意欲や、創出される新しい研究価値や活用についても評価
- 研究で「<u>できること</u>」だけでなく研究で「<u>やりたいこと</u>」が明確かつ卓越している提案を重視
- 研究成果のソフトウェア化や、開発した理論やソフトウェアを通じて周辺諸分野の研究者との共同研究などを通じて広く成果が展開される可能性があるものも評価。

選考状況

	応募・採択研究課題数(件)			
募集年度	応募数	面接数	採択数	
	心分女人	心分数 画设数		女性
2019年度	80	22	11	1
2020年度	47	17	9	0
2021年度	33	18	12*	2
合計	160	57	32*	3

2019年度から3年間募集;応募総数160件.面接対象57件.採択は32件.うち女性研究者は3名.

新型コロナウィルス感染症のパンデミックに伴い,2020年度,2021年度の応募数は減少.

しかし応募者の提案内容は極めて優れたものが 多く選考は厳しいものであった...

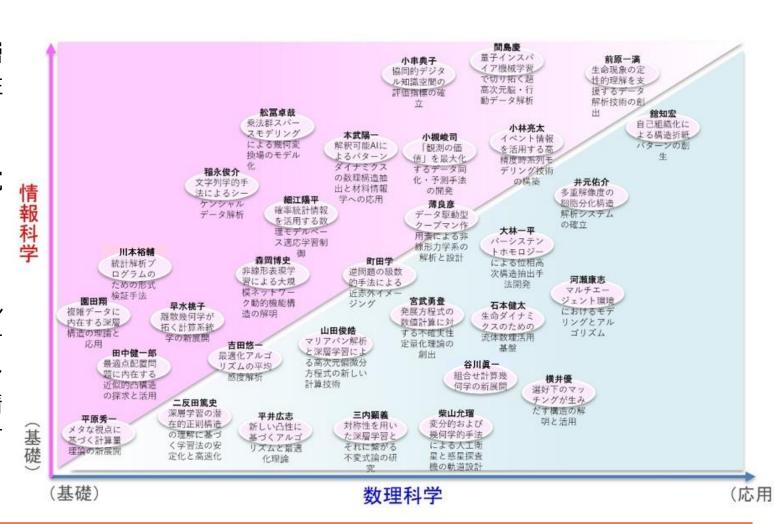
領域マネジメント: 選考結果

戦略目標(A)

メタ計算量理論・深層学習の数理研究、深層 学習を用いた微分方程式の解法、凸性や剛性 といった数理的観点、最適点配置、アルゴリ ズムの平均感度解析、非線形表現学習理論、 不確実性定量化など両分野を横断する研究 提案を選考できた。

戦略目標(B)

マッチング理論を用いた配分、統計解析アルゴリズムの形式検証,生命科学データに対する高度な数理解析手法、近赤外イメージングの逆解析、協同デジタル空間やイベント情報といったデジタル空間の活用を高度化する研究など,幅広い応用提案を選考できた。



数理科学×情報科学、基礎から応用まで幅広い分野の課題を採択、本目標の達成に向けた体制を構築

領域マネジメント:領域アドバイザー

アドバイザー名(専門分野)	所属	役職	観点
荒井 迅(力学系)	中部大学 (東京科学大学)	教授	幾何学・力学系理論,西浦数学探索領域さきがけ
岩田 覚(数理情報学)	東京大学	教授	離散数学
落合 啓之(表現論)	九州大学	教授	代数学 (表現論)
楠岡 成雄(確率論)	東京大学	名誉教授	解析学, 國府数学協働領域アドバイザー
小磯 深幸(微分幾何)	九州大学	教授 (名誉教授)	幾何学 (微分幾何), 西浦数学探索領域さきがけ
佐古 和恵(情報セキュリティ)	NEC (早稲田大学)	技術主幹 (教授)	暗号理論とその実装研究
徳山 豪(理論計算機科学、計算 幾何, アルゴリズム)	東北大学 (関西学院大学)	教授	数学・数理科学と情報科学をまたがる広範な分野 を対象
平田(河野) 典子(数論)	日本大学	教授 特任教授	代数学 (数論)
福水 健次(統計科学)	統計数理研究所	教授	統計学
三好 建正(データ同化、UQ)	理化学研究所	チームリーダー	不確実性定量化・データ同化の研究
【領域運営アドバイザー】 大田 佳宏(数理ソフト開発)	Arithmer,東京大学	代表取締役社長、 特任教授	数学・数理科学を活かした数理ソフト開発

[⇒] 卓越した研究業績を持つ、数理系と情報科学の専門家から**分野バランス良く**委嘱・企業・女性3名

領域マネジメント活動:領域会議

【領域会議】

計11回実施(うち4回オンライン,5回ハイブリッド)

【領域会議の進め方】

研究成果の口頭発表. 研究進捗状況を確認, 助言や指導を行う. 領域内連携が進むよう、各種オンライン会議ツールを利用. ポスターセッションを複数回実施.

【ペア発表】(1期生:第3回、2期生:第5回、3期生:第7回)

さきがけ研究者の研究内容への相互理解と研究連携を動機づけるため,三~四程度のグループを自己組織的に構成して「ペア発表」を行う.

【研究進捗確認】

(1期生:第5回、2期生:第7回,3期生:第9回) 研究進捗確認を行い、全領域アドバイザーから「<mark>数理構造活用研究進捗確認票</mark>」を作成し、研究進捗評価・今後1年の研究の方向性などについて指導、助言を行った。

【研究成果発表会検討会】

(1期生:第6回、2期生:第8回、3期生:10回) 成果報告会のプログラム企画検討会. パネルディス カッションのテーマの議論



領域マネジメント活動:研究指導体制

【サイトビジットの実施】

研究総括が, さきがけ研究者の研究場所を訪問して, 研究推進体制を確認. 関係者と面談を行う.

【担当アドバイザ制度】

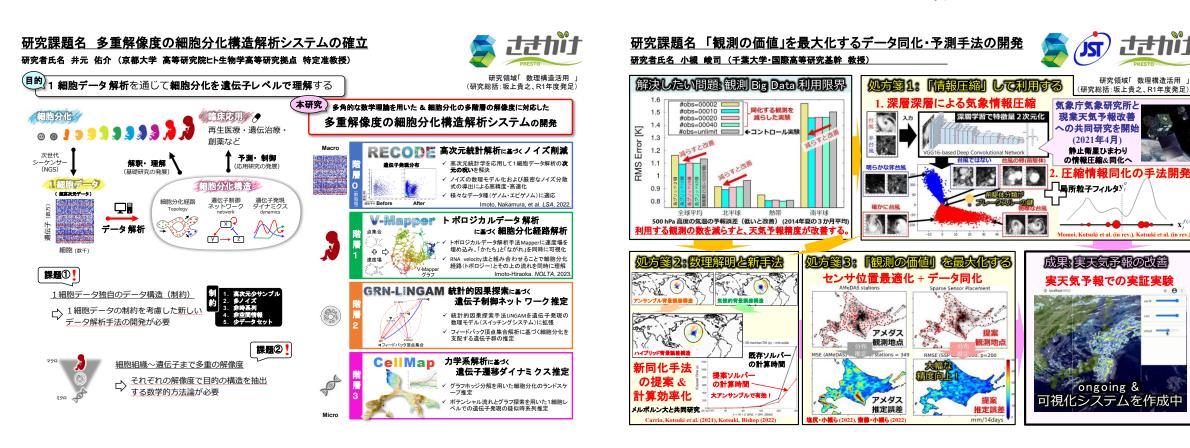
- ✓ 研究課題の専門性を考慮して,担 当アドバイザを指定.
- ✓ 1対1で、研究の進捗状況について年2回のミーティングを行い、領域会議と併せて年4回の適切な助言・指導の場を持てるように設定.

さきがけ研究者の研究進捗確認と きめ細やかな指導が可能になるよ う配慮

担当アドバイザー	一期生	二期生	三期生
荒井 迅	薄 良彦	井元 佑介	柴山 允瑠
岩田 覚	舘 知宏	前原 一満	小串 典子
落合 啓之	早水 桃子 平井 広志	舩富 卓哉	
楠岡 成雄	小林 亮太	山田 俊皓	宮武 勇登
小磯 深幸	石本 健太	田中 健一郎	本武 陽一
佐古 和恵	二反田 篤史	平原 秀一	間島 慶
徳山 豪	大林 一平	森岡 博史	横井 優 河瀬 康志
平田 典子	稲永 俊介		三内 顕義 谷川 眞一
福水 健次	小槻 峻司	川本 裕輔	園田 翔
三好 建正	吉田 悠一	町田 学	細江 陽平

領域マネジメント活動:更新型成果概要シート

- 領域会議のタイミングで、研究の概要・進捗状況・結果を一枚にパワーポイントファイルにまとめて提出
- 内向きの成果報告とするのではなく、他の専門の異なるさきがけ研究者にもわかりやすい一覧性のある魅力的なものとするよう、全体を俯瞰するように毎回更新 (最終的にさきがけ研究成果の概要を示す=名刺として)



領域マネジメント活動:領域期連携活動の促進

⇒ さきがけ数理構造勉強会の開催(領域内連携)

- ・ 第1回(2021年3月29日)吉田 悠一(1期生)「最適化アルゴリズムの平均感度解析」
- ・ 第2回(2022年3月22日)森岡 博史(2期生)「教師なし表現学習と非線形独立成分分析(ICA)」
- ・ 第3回(2022年4月11日)宮武 勇登(3期生)「微分方程式の数値計算の不確実性定量化」
- ・ 効果:さきがけ研究者の研究を領域内で広く共有、その後の共同研究や議論の活性化に貢献

◇ 研究テーマ別グルーピングの実施 (領域内連携)

研究課題の内容を踏まえて、自然な研究グループを組成.

例:生命科学(早水桃子、舩冨卓哉、前原一満、森岡博史、井元佑介)

効果:生命科学系の学会での共同セッションの提案.お互いの数理構造活用ついての情報交換も進んだ

◇JST三領域連携ワークショップ「情報科学と拓く新しい数理科学」(領域間連携)

さきがけ「数理構造活用」領域(研究総括 坂上 貴之)・CREST「数理的情報活用基盤」領域(研究総括 上田修功)・ACT-X「数理・情報」領域(研究総括 河原林 健一)の共同企画.

2022年9月14日 北海道大学大学院理学研究科にて実施

◇JST複雑流動領域「複雑流動」×「数理構造活用」セミナー(領域間連携)

JSTさきがけ「複雑流動」領域(研究総括 後藤 晋)共催. 2024年1月19日 東北大学流体科学研究所効果:共同研究(仲田・本武, 舩冨・佐藤) が組成

領域マネジメント活動:国内国外との連携活動

未解決問題ワークショップの開催(国内連携)

- ◆様々な研究者から「数学に関連する未解決問題」を募集、参加者全員で解決を目指す.
- ◆ 毎年実施(計5回)



Session "Young Mathematicians' Challenge" (国内連携)

- ♦ JST ERATO CREST さきがけ ACT-X 社 会創造事業 ムーン ショット型研究開発 事業、科研 (基盤研 究(S)、学術変革 (A)) に参画する若手 研究者の交流イベント.
- ◆ 毎年実施 (計5回)



その他,シンガポールA*STAR CFARとの連携ワークショップを2025年1月13日 にシンガポールにて開催 (国際連携)

領域マネジメント活動:アウトリーチ活動

数学キャラバン

- □ 高校生・一般を対象. 数学・ 数理科学への理解や興味を深めてもらうことを目的.
- 2011年度からJST数学関連領域が主催する形で継続実施.
- □ 毎年2回程度(計8回)実施



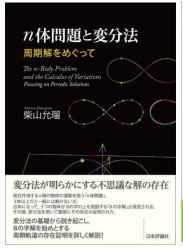
「数学セミナー」連載企画

■ 連載企画「数理 meets 情報科学 – DX時代の数理研究」 (2024年4月号~2025年6月号)



出版書籍

- 登録件数 90件
- 書籍17、総説17、 ソフトウェア・ データベース11、 その他記事45





ソフトウェア

- ・ 大林一平: <u>HomCloud (Persistent Homology)</u>
- 井元佑介:細胞解析ソフトウェア群RECODE, V-Mapper, GRN-LiNGAM, CellMap
- · 川本裕輔:StatWhy(統計的因果推論検証)
- 園田翔: <u>HyperTree Proof Search with Retrieval</u>
 <u>Augmented Tactic Generator</u> (LLM定理自動証明)

13

領域成果:昇進·受賞·招待講演

<u>昇進</u>

- □ さきがけ31名のうち23名が昇任助教・准教授相当 ⇒ 教授相当 11名助教相当 ⇒ 准教授相当 12名
- □ 小槻峻司,大林一平:研究員⇒教授
- □ 二反田篤史 助教⇒A*STAR Principal Scientist

招待講演

- □ 総数は259件(国際122件、国内137件)
- 国際学会が行うConference、Symposiumなどでの 招待講演は35件

<u>受賞</u>

- □ 総数 42件(以下代表的なもの)
- □ 石本 健太:科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞(2021年4月),現象数理学三村賞奨励賞(2021年12月),第11回 藤原洋数理科学賞奨励賞(2022年10月)
- □ 小槻 峻司:科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手 科学者賞(2022年4月)
- □ 二反田 篤史: Outstanding Paper Award(ICLR) (2021年4月)
- □ 早水 桃子:科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手 科学者賞(2022年4月)
- 平原 秀一: 船井研究奨励賞(2022年2月), Complexity Year in Review 2022 Lance Fortnow and Bill Gasarch (2022年12月), 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞(2024年4月)
- 細江 陽平:計測自動制御学会 制御部門パイオニア賞 (2023年3月), LAAS-CNRS DD-LAAS Research Fellow (2024年1月)

研究領域としての戦略目標の達成状況(1)研究成果の科学的・技術的観点

戦略目標の達成状況:研究成果概況

- ✓ 発表論文数 312件(査読付き国際論文302件、査読付き国内論文10件)
- ✓ 国際会議招待講演 122件
- ✓ 受賞 42件・書籍、総説、ソフトウェア・データベース 90件・特許出願 9件・プレス発表 20件
- · AI分野の上位5国際カンファレンス (2024年12月時点)
 - > Neural Information Processing Systems (NeurIPS) 5件
 - > International Conference on Learning Representations (ICLR) 5件
 - ➤ International Conference on Machine Learning (ICML) 1件
 - ➤ AAAI Conference on Artificial Intelligence 1件 (トップ1~20まで24件)
- ・ 計算機科学分野の上位5国際シンポジウム・ジャーナル(2024年12月時点)
 - > ACM SIAM Symposium on Discrete Algorithms 1件
 - > Journal of the ACM 1件
 - ➤ Theoretical Computer Science 4件(ほか、上位1~20まで11件)
- · 全学術分野の上位10ジャーナル(2024年12月時点)
 - ➤ Nature Communications 1件
 - ➤ Neural Information Processing Systems (NeurIPS) 5件(AI分野)
 - > Nature Information Processing Systems 5件
 - ➤ Advanced Materials 1件

戦略目標達成状況:達成目標(A)

達成目標(A)「数学・数理科学と情報科学の連携・融合による、数学の発想を取り入れた革新的な情報活用手法の 創出に資する理論及び技術の構築」1)様々な対象にある新しい数理構造の提案と活用

研究者	対象	数理構造
園田 翔	深層学習モデル	深層構造の積分方程式表現と群構造
舘 知宏	折り紙工学	折りの幾何構造の巨視的視点と自己組織化
田中 健一郎	最適点配置モデル	汎関数の凸性、近似凸性
谷川 眞一	物体の詰め込み問題	グラフ剛性理論・組み合わせ構造
二反田 篤史	深層学習モデル	ニューラルネットワークの平均場理論
平井 広志	離散最適化問題	CAT(0)の凸性
吉田 悠一	最適化アルゴリズム	アルゴリズムの平均感度

機械学習モデル・離散最適化・折り紙工学など多様な対象に新しい数理構造が導入された

研究成果例(二反田篤史:A*STAR CFAR)

目的:

深層学習 (Neural Network=NN) の数理構造の理解と,その活用により効率的学習を実現する.

数理構造:

平均場NN理論に基づく最適化理論

成果:

- > 確率的勾配降下法の挙動記述
- > 確率的勾配降下法の収束解析
- 効率的な収束保証つき最適化法の提案と実証
- Outstanding Paper Award: The Ninth International Conference on Learning Representation (ICLR, 2021)

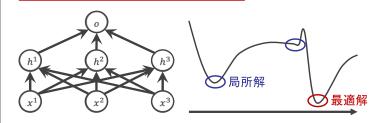
研究課題名 深層学習の潜在的正則構造の理解に基づく学習法の安定化と高速化

研究者氏名 二反田 篤史 (九州工業大学大学院情報工学研究院 准教授)



テーマ:最適化の観点に基づくニューラルネットワークの理論. 目標:学習が成功する理由を解明し効率的学習法を開発.

▶ 深層学習に掛かる計算コストを軽減.

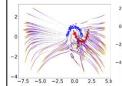


ニューラルネットワーク(NN)の汎化性能はモデリングと学習で用いる最適化法に強く依存 ▶ 最適化法に基づく学習理論

「これまでの成果:NNの局所理論と大域理論への布石. NTK理論:NNの最適化の局所的な挙動を記述. 成果1:学習対象の関数が初期点周辺にある場合,平均化 確率的勾配降下法が最適性能を発揮することを証明.

局所的な挙動の理解を深めた▶局所理論から大域理論へ 平均場NN理論:NNの大域的最適化理論

大きな学習率を用いる確率的勾配降下法の挙動を記述.



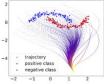


図:パラメータの推移. (左)NTK理論のNN (右)平均場NN 平均場NNはより有意なパラメー タに収束▶NNの特徴抽出機能 [∕]これまでの成果:NNの大域理論.

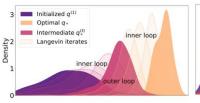
研究領域「 数理構造活用 」 (研究総括:坂上貴之、R1年度発足)

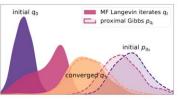
平均場NNは表現学習能力を備えるモデリングである

▶ 平均場NNを解析するための凸最適化理論を展開.

成果2:確率的勾配降下法の収束解析.

成果3:効率的な収束保証付き最適化法の提案



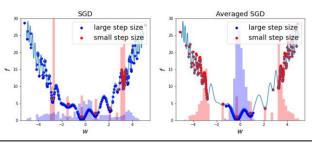


平均場NNを確率分布で表現. 最適化を確率分布空間の凸理論で解析.

これまでの成果で得られた知見:大きな学習率の有効性 NNの特性である表現学習能力を引き出すためには?

▶ 大きな学習率を用いた最適化でデータに効率的に適合する パラメータを獲得することが重要.

最新成果:大きな学習率+平均化確率的勾配降下法深層学習モデルにおいて平坦性バイアスが向上する.



研究成果例(園田翔:理化学研究所)

目的:

深層学習 (Deep Neural Network=DNN) の「深層性」に 関する数理構造の理解.

数理構造:

合成写像の分解にもとづく「深層分解」の数学理論(積分変換+群表現論)

成果:

- ➤ 全結合隠れn層方程式と形式 的DNN方程式の解
- ➤ 隠れn層NNのKoopman作用 素表現の汎化誤差評価
- ➢ 深層学習モデルの関数近似 の仕組みの統一的理解
- ➤ LLMによる数学的推論・定理 自動証明研究へ展開

研究課題名:複雑データに内在する深層構造の理論と応用

研究者氏名: 園田 翔 (理化学研究所 革新知能統合研究センター 上級研究員) 研究進捗概要(2024年9月・第10回領域会議)

EPRESTO

研究領域「 数理構造活用 」 (研究総括:坂上貴之、R1年度発足)

研究のねらい

機械学習理論の課題

現行の学習理論は深層構造が苦手 →理論と現実のギャップ大

顧客が本当にほしいもの

 $\sigma(A_2\sigma(A_1x-b_1)-b_2)$ Softmax $(QK^t)V$, LLM, ...

現実に扱えるもの

隠れ1層,区分線形,RKHS 行列積,摂動近似,連続深さ…

研究目的

写像 f を合成写像 h_L 。…。 h_1 に分解する深層分解 の理論と方法を開発し、特に写像やデータの「深さ」を定式化して、次世代の情報技術へ展開する

研究課題1: $f = DNN[\gamma]$ を解く 式が具体的に与えられている場合

研究課題2: $f = h_L \circ \cdots \circ h_1$ を解く

式が満たす条件が与えられている場合

研究課題3: $f \approx h_L \circ \cdots \circ h_1$ を解く 実タスクに対するアルゴリズム開発



(補足)

DNNの表現力=仮説集合Hの大きさ 汎化誤差=概念cと仮説hの乖離度G 表現力が高いほど汎化誤差の理論評価は大きし 一方,現実の汎化誤差は圧倒的に小さい 高精度な見積もりはAIの設計に利用できる

研究成果

研究課題1+2:

- 群表現論を用いて**全結合隠れn層方程** 式と**形式的DNN方程式**を解いた

(NeurReps2023, 投稿中)

- 隠れn層NNの**Koopman作用素表現**を 定式化し汎化誤差を評価した (ICLR2024)
- Fourier表示を用いて**等質空間・関数空間上**で隠れ1層NN方程式を解いた (ICML2022, NeurIPS2022, JSPI2024)
- 深層学習モデルの関数近似の仕組みが統一 的視点で理解できるようになった
- 受賞1件, 国際招待講演15件, 集中講義6件 . 書籍執筆中
- 関数解析から表現論・代数学へ展開

研究課題3:

- AIによる自動研究PJT (AutoRes) に参加
- LLMによる数学的推論(AITP2023)
- LLMによる定理自動証明

(AITP2024,SLACS2024,TPP2024)

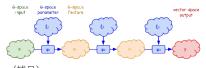
- 高品質データによるLLMの推論性能向上 (準備中)

発展課題:

- 帯域制限NNの近似下限評価 (ICML2023)
- 量子機械学習とのコラボ (ICML2023)
- 関数解析的物理学(本武先生. 進行中)
- 統計的学習から計算機科学・数理論理学・実験物 理学へ展開

今後の展開

- 理論に基づくAIシステムの設計
- LLM・生成AIの学習理論
- 幅・深さの回路変換
- 代数・計算を考慮した学習理論
- 新不変量「深さ」の幾何学



(補足)

データだけでなくパラメータにも双対的な群 作用があることを発見した

- データとパラメータの背後にある**群作用**に着目することで,多様な学習機械の関数近似の仕組みを統一的に記述できるようになった

研究成果例(吉田悠一:国立情報学研究所)

目的:

アルゴリズムの信頼性(不正確な 入力に対する出力の信頼性)

数理構造:

アルゴリズムの「平均感度」

成果:

- アルゴリズムに対する入力に 対する不確実定量を可能にし た.
- 新しいアルゴリズムの「評価 の軸」を与えた。
- これまで知られたアルゴリズムに適用して、その有効性を検証。

研究課題名 最適化アルゴリズムの平均感度解析

研究者氏名 吉田 悠一(国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授)



研究領域「数理構造活用」 (研究総括:坂上貴之、R1年度発足)

アルゴリズムによる意思決定や知識発見は既に社会の一部 ⇒ アルゴリズムは高速・高精度なだけでなく、高い信頼性が必要

平均感度という概念を提案

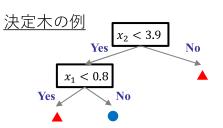
平均感度が低い = 入力が不正確でもアルゴリズムの出力を信頼できる

本研究の目標:アルゴリズムを平均感度の観点から見直す

- 今まで使われてきたアルゴリズムの平均感度は低いか?
- 今までの速度・精度を保ったまま平均感度を低くできるか?

成果例:決定木学習

(精度) 学習データをよく再現する決定木を出力したい (解釈性) 学習データの欠損に対して出力を安定にしたい

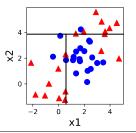


決定木による学習

学習データ(右図の●と▲)から決定木 (右図の空間分割と青赤の領域)を学習

従来手法は欠損で決定木が大きく変化し 解釈性が損なわれていた

両立可能!



戦略目標達成状況:達成目標(A)

達成目標(A)「数学・数理科学と情報科学の連携・融合による、数学の発想を取り入れた革新的な情報活用手法の 創出に資する理論及び技術の構築」 2) 先進的な数理モデルの提案とデータ科学研究

研究者	対象	数理モデル
石本 健太	流体中の微生物の運動	奇弾性による能動的な生物の運動モデル
小槻 峻司	気象現象	局所フィルタによる非ガウスアンサンブルデータ同化モデル
小林 亮太	神経スパイク時系列データ	点過程に基づく統計的モデリング
柴山 允瑠	人工衛星の軌道設計	変分法や位相幾何学に基づくハミルトンカ学系モデル
薄 良彦	電力・空調ネットワーク制御問題	生成子のレゾルベントの特徴付けによるクープマン作用素モデル
早水 桃子	生物の進化系統樹	系統ネットワークを用いた離散数学モデル
町田 学	近赤外線イメージング	複写輸送方程式モデルとその逆解析
宮武 勇登	微分方程式の数値解法	誤差の確率変数化による不確実性定量モデル

多彩な対象の数理モデリング・多種多様な数理構造の活用

研究成果例(石本健太:京都大学)

目的:

生命現象(動き)と流体現象 (流れ)の相互作用を理解する

数理構造:

流れと生命の動きを結びつける 新数理概念

成果:

- ▶ 軸対称性の拡張である「ら せん対称性」と生物の「か たち」を表現する新定数 「石本定数」が広く認知
- エネルギー保存則を満たさ ない線型弾性体「奇弾性」 の考察から、自発的内部揺 らぎによる遊泳を記述する 奇弾性遊泳定理を証明
- ▶ 数多くの受賞

研究課題名 生命ダイナミクスのための流体数理活用基盤 研究者氏名 石本 健太 (京都大学数理解析研究所 准教授)

生命現象 X 流体現象 物体の「かたち」 環境の「流れ」

「 動き= 生命ダイナミクス」

新しい流体力学の横築 生命現象の理解

数理構造の発見

見えないものを見る

生物実験

数值計算

生物にシステムを '計算'させる

高速・高精度 複雑な現象の計算

data-drivenモデリング

多次元データ の利活用

研究の背景

- ・流体方程式が線形でも移動境界による非線形性が生じる
- ・生物データには生物由来のノイズ
- ・複雑境界の流体計算は大規模になりがち
- ・実験・数値計算によるデータがあっても理解には理論が必要

研究の狙いと目標

- ・細胞スケールの「流れ」と「かたち」に潜む数理構造に着目
- 新規の概念や情報処理技術の創出
- ・社会で利活用できる流体数理基盤の確立を目指す

表彰およびその他の活動

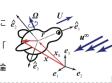
- ·日本数学会応用数学研究奨励賞 (2021)
- · 文部科学省若手科学者賞 (2021)
- ・現象数理三村賞奨励賞(2021)
- Phys Rev Fluids誌 Editors' suggestion (2020)
- ・雑誌「数理科学」での連載:全19回(2020-2022)
- ・RIMS訪問滞在型プロジェクト(2021)



執筆中!

流体方程式を介した「かたち」の 対称性

- ・流体中の物体運動の方程式に 8 基づく対称性の導入
- ・流体力学的な軸対称性物体 らせん対称性」の発見
- ・新しい「かたち」の分類理論



流れデータを使った「かたち」の 表現

- ・流体方程式の基本解を用いた 「流れ」の簡略化記述「正則化 極法 | の開発
- 「流れ」からデータ駆動的に 求められる



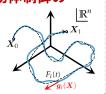
物体構造連成問題の高速数値計算

- ・流体中のアクティブな弾性体の運動は 「かたち」と「流れ」を同時に解くこと
- ・弾性棒を折れ線で表現することで物体 と流体の強結合問題に対する高速かつ安 定な数値スキームを達成



「流れ」を用いた物体制御の

- ・幾何学的制御理論をに基づい て「流れ」を介して複数の物体 を操作できることを証明
- ・仟意の物体操作を行うための アルゴリズムを作成





生命科学での活用

- ・微生物集団運動の大 規模な数値シミュレー ションの実装が可能に
- ・流体力学的な「かた ち」のパラメータを実
- 験的に計測も可能に
- ・流体中の物体運動の簡潔な数理モデルの 構築が可能に

実社会での活用

- 大量の精子鞭毛波 形を自動的に解析す るための画像解析技 術の開発
- 企業・クリニック との産学共同による 精子診断システムの



物質科学での活用

- ・アクティブな弾性体の運動記 述するゲージ場の理論の構築
- ・ランダムな内部 ノイズから方向を 持つ遊泳を実現



戦略目標達成状況:達成目標(A)

達成目標(A)「数学・数理科学と情報科学の連携・融合による、数学の発想を取り入れた革新的な情報活用手法の 創出に資する理論及び技術の構築」3) 数理構造や数学概念を活用する情報科学研究

研究者	数理構造	情報活用基盤
稲永 俊介	文字列の組み合わせ構造	文字列データ高速処理アルゴリズム
大林 一平	パーシステントホモロジー	逆解析を可能にするトポロジカルデータ解析ソフトウェア
小串 典子	二部グラフ構造	協働デジタル空間の解析アルゴリズム
川本 裕輔	信念ホーア論理・様相論理	統計的因果推論の正しさの形式検証アルゴリズム
三内 顕義	対称性と不変式論	深層学習の高度化
本武 陽一	位相的データ解析・力学系	解釈可能AIモデル構築
森岡 博史	非線形独立成分分析	高次抽象的なデータの因果推定アルゴリズム
山田 俊皓	確率微分方程式・マリアバン解析	深層学習を用いた高次元偏微分方程式の解法

高度な数理構造を導入,様々な対象に対して有効なアルゴリズムやソフトウェアを提供

研究成果例 (川本裕輔:産業技術総合研究所)

目的:

実験科学の統計解析の形式検証 (解析の適切さを厳密に検証)

数理構造:

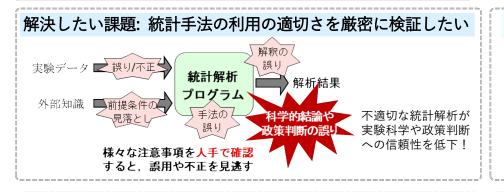
信念ホーア論理・因果ホーア論理

成果:

- 蓋然性を有する解析の形式 検証理論の構築
- ▶ 多重比較やp値ハッキングに 対する推論
- 実験/観察中の介入などが関係する推論にも対応
- StatWhy (統計的因果推論 を行うプログラムの正しさ を記述・検証)の開発

研究課題名 統計解析プログラムのための形式検証手法

研究者氏名 川本 裕輔 (産業技術総合研究所 情報・人間工学領域 主任研究員)



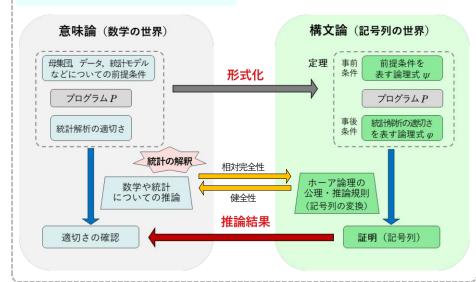
TETIT

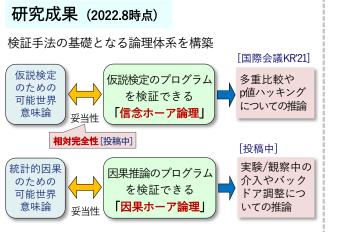
解決手段 研究領域「数理構造活用」 (研究総括: 坂上貴之、R1年度発足)

プログラムの形式検証手法を拡張し応用.

形式手法とは システムが仕様を満たすかどうかを、 数理論理学に基づき厳密に検証する手法 M | φ システムを表す 数理モデル 仕様を表す 論理式







進行中&今後の研究

- 他の統計手法のための拡張
- •推論の自動化・実装

統計解析プログラム の検証技術を確立し、 統計の信頼性向上の ための基盤を構築

2022.8

研究成果例(森岡博史:理化学研究所)

目的:

集合体が複雑な高直能を発現することの数理構造を理解

数理構造:

非線形独立成分分析(ICA)

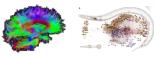
成果:

- ▶ ダイナミクスの背後で駆動 する潜在成分の抽出
- ▶ 多次元因果構造推定(ネットワーク表現学習)
- ▶ 複数のモダリティの潜在変数と因果構造の推定
- ▶ JST さきがけ 未来数理科学 領域に採択.

研究課題名:非線形表現学習による大規模ネットワーク動的機能構造の解明

研究者氏名 森岡 博史 (国立研究開発法人理化学研究所 革新知能統合研究センター 研究員)

なぜ単純な個の集合体に複雑な高次機能が発現するのか?







認知, 意思決定, 意識, 記憶...

群知能, 分散最適化.



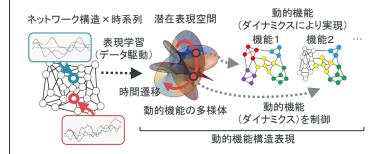


タンパク質→細胞(信号伝達)→代謝

社会的秩序, コンセンサス形成.

動的機能はどう発現?共通する数理メカニズムは?

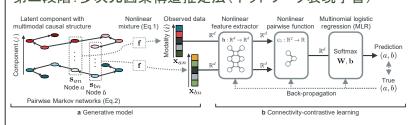
本プロジェクト:新たな非線形ネットワークダイナミクス表現 学習法の開発による挑戦



- ・本研究者らの非線形独立成分分析(ICA)理論の発展
- ・新理論:ネットワークダイナミクスからの表現学習・同定
- ・データ・モデル駆動の融合. 未知の構造・表現の発見

ダイナミクスを背後で駆動する潜在成分(表現)の抽出・同定を実現

第二段階:多次元因果構造推定法(ネットワーク表現学習)



マルチモーダル観測データ(モダリティ×ノード)の背後にある

多次元因果構造の抽出・同定

 $\mathbf{x}_t = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{t-v:t-1}, \mathbf{s}_t)$

Morioka et al., AISTATS 2021

Morioka et al., submitted

第三段階: 多モダリティ因果表現学習法

複数のモダリティ(グループ)を持つ潜在変数とその因果構造の抽出・同定 非線形観測を自動的に脱混合(表現学習+因果推定を同時に行う)

戦略目標達成状況:達成目標(B)

達成目標(B)「様々な分野や産業界における情報の活用を加速・高度化する次世代アプリケーション基盤技術の創出」4) データの利用を画期的に促進させる計算高速化や高精度化

研究者	利用対象	成果
井元 佑介	一細胞遺伝子発現データ	高速ノイズ除去(RECODE)、位相的データ解析手法(V-Mapper)、 統計的因果探索手法(GRN-LiNGAM)
舩冨 卓哉	ヒト胚子断層スライスデータ	乗法群スパースモデリング再構成手法
細江 陽平	自動車自動制御	非定常確率過程による高速適応学習制御器
前原 一満	大規模オミクスデータ	ホッジ分解に基づくダイナミクス抽出(ddHodge)
間島 慶	脳波データ	量子インスパイア高速計算法

研究成果例(井元佑介:京都大学)

目的:

生命細胞分化の階層構造の理解 に向けた多重解像度解析

数理構造:

高次元統計学・トポロジカル データ解析・統計的因果探索

成果:

- ➤ RECODE:シングルセルデー 夕発現でーたのノイズ削減
- ➤ V-Mapper: 細胞分化経路の 流れの位相的構造の推定.
- > GRN-LiNGAM, CellMap: 細胞文化構造のランドス ケープ解析
- ➤ JST CREST予測基盤領域 採 択、JST Moonshot MS8の 気象制御課題に転用

研究課題名 多重解像度の細胞分化構造解析システムの確立

研究者氏名 井元 佑介 (京都大学 高等研究院とト生物学高等研究拠点 特定助教)

研究背景・目的

細胞分化を遺伝子レベルで理解する 問題点 従来手法の組み合わせ 1細胞遺伝子発現デー では重要な情報が失わ 夕解析による1細胞ダ イナミクスの構造抽出 れる

将来展望



研究領域「 数理構造活用 (研究総括: 坂上貴之、R1年度発足)

理論 生命の設計原理の解明

- ヒトの発生の理解
- 遺伝進化学の発展
- 種差の解明 など

応用

- 最先端医療の発展
- 人工臓器生成の効率化 遺伝子疾患の治療法の確立
- 感染症のワクチン開発 など

研究内容

数学・データ科学によるアプローチ

多角的な数学理論を用いた1細胞遺伝子発現データ解析システムの開発

① 遺伝子発現の真実を見抜く

高次元統計学に基づく ノイズ削減 ★ ノイズに埋もれていた情報

を復元 ★ 従来型のデータ解析の精

度が向上



② 細胞分化のかたちを見抜く

トポロジカルデータ 解析に基づく細胞 分化経路解析

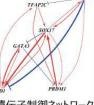
★ 細胞分化の分岐構 造を解明 (細胞集団解像度)



③ 遺伝子のつながりを見抜く

統計的因果探索に 基づく遺伝子制御 ネットワーク解析

★ 細胞分化における遺伝子 の役割を解明 (1細胞解像度)



遺伝子制御ネットワーク

シングルセル遺伝子発現データのノイズ削減法 RECODE の開発 [1,3]

- ●次元削減、統計量評価、クラスタリング、遺伝子発現分布、発現変動解析などが改善
- エピゲノムデータ(scATAC-seq)・空間トランスリプトームデータへの拡張
- 位相的構造・流れ構造を同時推定するトポロジカルデータ解析手法 V-Mapper の開発 [2]
- ●免疫細胞における未知の細胞分化経路の発見
- ●グラフホッジ分解に基づく流れ構造の解釈

符号付き遺伝子制御ネットワークを推定可能な GRN-LiNGAM の開発 細胞分化構造の地形表現手法の開発(さきがけ内共同成果)[4]

- data analysis. Life Science Alliance, 2022.

- PCT/JP2021/022318, 2021.
- [4] (招待講演)井元、平岡、谷地村、前原、高次元遺伝子発現ダイナミクスのランドスケーブ解析:細胞分化の予測 制御に向けてシステム制御情報学会 非線形ダイナミクスの解析と制御, 2022.

戦略目標達成状況:達成目標(B)

達成目標(B)「様々な分野や産業界における情報の活用を加速・高度化する次世代アプリケーション基盤技術の創出」**5)情報の高度な利活用に資する数学・数理科学・情報科学研究**

研究者	数理構造	活用先
河瀬 康志	離散最適化(制約つき割当問題)	情報の非対称性・偏在の緩和
平原 秀一	メタ計算量理論	セキュリティ、個人情報保護
横井 優	離散最適化(選好つきマッチング問題)	情報の非対称性・偏在の緩和

研究成果例(平原秀一:国立情報学研究所)

目的:

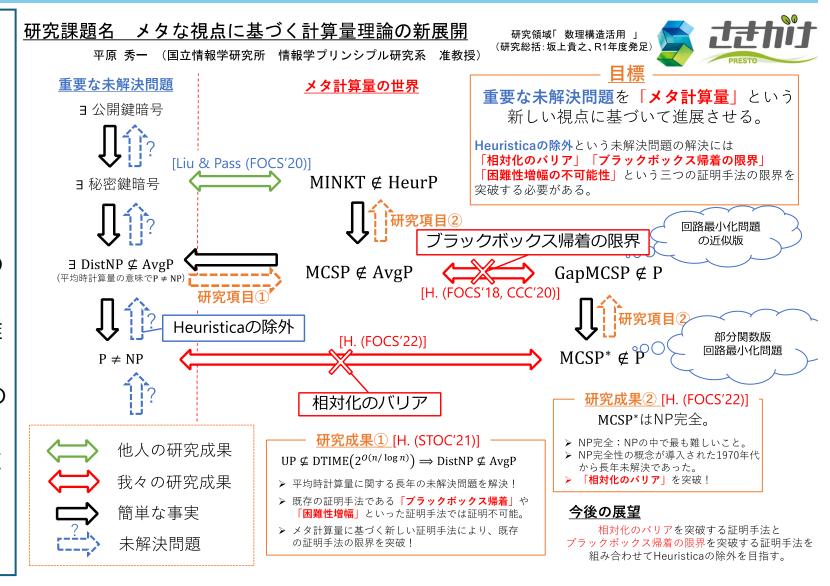
安全な公開鍵暗号が存在するかと いう未解決問題の解決

数理構造:

メタ計算量理論

成果:

- ▶ 暗号存在に関する4つの階層の 現実可能性を探求.
- ▶ 階層をまたぐときの極めて困難 な課題を次々に解決.
- ▶ クレイの未解決問題(P≠NP)の 解決に重要なマイルストーン
- ▶ 計算機科学分野で顕著な業績に 与えられる「Complexity result of the year 2022」を 日本人初の受賞者



領域内外の連携活動成果

稲永俊介x吉田悠一

- □ 吉田の提案する「平均感度」を、稲永が研究する圧縮アルゴリズムの頑健評価へ応用し、「圧縮感度」の新概念の提案へつながる.
- 多数知られている圧縮アルゴリズムの性能を俯瞰的に再評価し、高速パターン検索可能な圧縮データ構造の発見.

小槻峻司×井元佑介×薄良彦×舩冨卓哉

- □ 領域内連携でそれぞれの研究成果を統合.
- □ 内閣府ムーンショット型研究開発プログラム目標 8 (気象制御) のPMに小槻が就任.
- 本領域で開発された数理構造が気象制御可能性の 課題のコア技術として用いられている。

その他の連携(領域内外)

- 早水桃子 x 井元佑介 x 前原一満 x 舩冨卓哉らによる細胞分化軌跡推定課題への共同の取り組み. ⇒井元がJST CREST「予測数学基盤」領域の研究代表者として採択.
- 町田学x大林一平=パーシステントホモロジーを 用いたマウスの脳におけるエントロピーの空間部 婦推定.
- □ 細江陽平 x 田中健一郎 = 自動運転制御の実現に利用可能な非定常確率過程の共同研究.
- □ 間島慶x小山佳(さきがけ「多感覚システム」領域)=猿の行動傾向を行動テータから定量的に評価(Nature Comm.).
- □ 本武陽一x仲田資季(さきがけ「複雑流動」領域) = 位相的データ解析と行列・テンソル分解による流動場の抽出と予測研究(さきがけFS研究).

研究領域としての戦略目標の達成状況(2)研究成果の社会的・経済的な観点

数理構造活用の他分野へのインパクト

舘知宏(1期生)

- □ 自己組織化構 造折り紙の数 理構造(微分 幾何・力学 系)の解明
- 美術家・建築 家・学生など を巻き込んだ アートと数理 の融合活動
- □ 「つながるか たち展」の定 期開催
- □ 文化への貢献

成果3:分野協働の問題発見と研究ネットワーク構築

- 「かたち」の数理を介してアートと諸科学分野をつ なぐ制作・展示を行った
- 問題発見・研究を通して、アートインスタレーション制作・建築空間構造への応用提案を行った
- 未解決問題解決・問題発見の協働ワークショップを 開催し、幾何学・建築・計算科学の共同研究成果に 導いた(Structural Origami Gathering 2020~2022)





つながるかたち展 2021,2022

野老朝雄(美術家)との協働

Japan House での展示 (有職組紐道明との協働) 2022 (Photo by Wagner Romano / Japan House São Paulo)

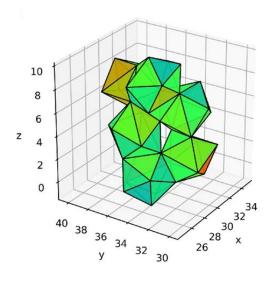


オリンピックエンブレムから発想した Auxetic Material (Warisaya et.al. 2021)

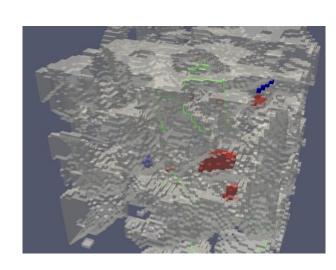
曲線折り幾何学に基づく構造 提案(Mundilova et.al. 2021)

大林一平(1期生)

- □ パーシステントホモロジーの計算ソフトウェア 「HomCloud」の開発
- 逆解析ができる世界唯一のソフトウェアとしておおくの材料科学分野や産業利用がなされている.



金属ガラスの乱雑さ の解明研究

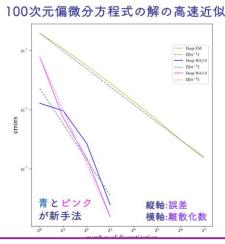


焼結鉱の三次元X線CT データの解析

数理構造活用の他分野へのインパクト

山田俊皓(2期生)

- □「次元の呪い」解消: Deep Learningを用いた高 次元偏微分方程式の高速数 値解法の提案
- □ 金融機関リスク管理:評価 調整(XVA)計算に効果



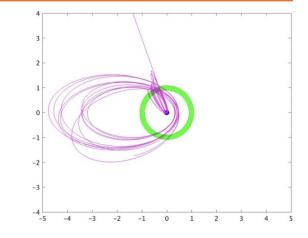
河瀬康志・横井優 (3期生)

- □ 現実な制約条件の下で の安定マッチング問題 の数理構造の解明
- □ 保育園への児童割当, 研修医の配置,学生割 当,フードバンクにお ける食料公平配分.



柴山允瑠(3期生)

- □ ハミルトンカ学系+変 分構造による衛星軌道 設計の数理構造の解明
- □ JAXAとの定期的な研究 会合を開催・軌道設計 研究者と共同研究



本武陽一(3期生)

- 解釈可能AIに基づく物理モデリング法の開発.
- NIMS, J-PARCといった材料科学分野の国立研究 所との共同研究
- 輸送機器メーカーやSNSマーケティング民間業者 との共同研究

