公開

研 究 終 了 報 告 書

「双対過程に基づくコンピューティングの展開」

研究期間: 2018 年 10 月～2022 年 3 月
研 究 者: 大久保 潤

1. 研究のねらい

本研究のねらいは、確率過程の双対性の数理を「コンピューティング」へと応用すること、そして理論の提案にとどまらずに実際に動作を実証することである。ここでの「双対性」とは、金融工学やロボットの制御などで用いられている確率微分方程式と、化学反応ダイナミクスの記述などに用いられている出生死滅過程とをつなぐ数理的な性質のことである。

例えば「フーリエ変換」という数理が信号処理や画像処理といった数値計算アルゴリズム、そして MRI (Magnetic Resonance Imaging)の開発などにつながったことなど、数理的な性質を工学的に利用することのインパクトは大きい。確率過程の「双対性」は幅広い分野で利用されている確率微分方程式とも関係することから、工学的にも有用な数理的性質の候補のひとつである。

確率微分方程式は微分できないノイズ項を含むことなどの扱いづらさを持つ。一方、双対となる出生死滅過程の変数は離散的であるため扱いやすい。数学や数理物理学の分野ではこの双対性の議論がされていたが、双対過程の系統的な導出方法は知られていなかった。また工学的な応用、特に有効な数値計算アルゴリズムについての研究は全く進んでいなかった。最近、扱いたい確率微分方程式から系統的に双対過程を導出する方法を開発できたため、ようやく工学的な利用を目指す最初の位置にたどり着いたと言える。

その最初の位置からの第一歩として、双対過程を用いた「事前計算」の枠組みの提案、および「事前計算」の結果を用いた「実行時の高速演算」による統計量の計算方法を提案する。なお、本研究では具体的な応用先としてフィルタリング、最適制御、機械学習を用いる。そして実際に双対性の数理を利用できるかどうかの検証とともに、実用化へと向けた理論や数値計算アルゴリズムの提案も行う。

この枠組みにより、実行時の計算の低コスト化、省電力化を目指すことができる。それらを通じてエッジコンピューティングや低計算能力の端末でのリアルタイム処理に適した計算原理を目指す。これらは『Sociery5.0 を支える革新的コンピューティング技術の創出』達成目標のうち、特に「情報処理を質的に大転換させる新しいコンピューティング技術の創出」に貢献するシーズをもつ。

2. 研究成果

(1)概要

研究成果として、理論的枠組みにおける「初等的な導出方法の発見」、数値計算手法における「組み合わせ論とレゾルベントを利用した新手法の提案」、および「適用範囲の拡大」の3つが挙げられる。

これまでは、双対過程の系統的導出に主に生成消滅演算子が利用されていた。生成消滅演算子は量子力学において用いられてきた手法であり、工学の広い分野で慣れ親しまれているわけではない。そのため、他の研究者が双対過程に関する研究に着手しづらい、具体的な

対象への適用がやりづらい、という問題点があった。そこで導出を見直し、部分積分と基底展開に基づいて理論の枠組みを書き換えることに成功した。大学初学年レベルの数学であり、扱いやすいことから、双対過程の自動導出コードの開発も容易になった。

さらに、これまでは双対過程の計算にモンテカルロ法を用いていたが、大量のサンプリングが必要であるなど計算量の点で問題があった。そこで組み合わせ論的な議論と、関数解析の分野で用いられているレゾルベントの概念を利用した数値計算アルゴリズムを提案した。これによりサンプリングが不要となり、事例によっては 100 倍程度の高速化を達成した。加えて、レゾルベントの利用で対応可能な時間間隔を大幅に伸ばすことができたため、データ同化や確率制御等の実用的な問題への適用を検討可能になった。他分野の手法とのつながりが見えたことから、今後さらなる改良と進展が見込まれる。

また、これまではフィルタリングに対する素朴な適用のみだったが、確率制御および機械学習における適用可能性を示した。適用の際、従来の双対性の利用では不十分であったが、さまざまな統計量を計算できるように枠組みを拡張して対応した。さらにデータ解析の分野で近年注目を浴びている Koopman 作用素とのつながりも明らかとなった。通常は拡張動的モード分解等によりデータから Koopman 行列を計算する。この Koopman 行列を解析することで、非線形的な対象を線形の手法で解析できることがすでにわかっている。そして本研究における双対性の利用により、方程式から Koopman 行列を直接計算できることが示された。これにより今後、データと方程式とをつなぐ新しい計算原理への展開が見込まれる。

（2）詳細

研究開始前と研究開始後でのそれぞれの違いを図 1 に示す。以下、それぞれの項目について詳述する。

研究成果の概要

① 理論的枠組み

Weyl代数や生成消滅演算子に基づく導出
・研究参入のハードルが高い
・具体的な対象への適用をしづらい

→

部分積分と基底展開に基づく導出
・初等的な数理知識だけで理解可能
・双対過程の自動導出コードの開発

② 数値計算手法

モンテカルロ計算
・大量のサンプルが必要
・長時間発展が困難

→

組み合わせ論とレゾルベントの利用
・狙い撃ち計算による効率化と高速化
・長時間発展が可能になった

③ 適用範囲

フィルタリングへの素朴な適用のみ

→

・フィルタリング、制御、機械学習
・Koopman作用素との関係
→ データとの接続が視野に入った

図 1 研究開始前と研究開始後での違い

研究テーマＡ「双対性に関する理論的枠組みの見直しと整備」

具体的な対象への適用を検討する際、これまでの理論的枠組みのままだと扱いづらい点があった。これまでは数学における Weyl 代数や Lie 代数、量子力学における生成消滅演算子などの数理的枠組みを利用していた。これらは工学分野で広く慣れ親しまれているものではなく、双対過程の工学的な利用の障壁となり得る。さらにこれらは抽象的な議論には役立つものの、具体的な対象への適用の際に少し扱いづらい点があった。

そこで理論の枠組みを見直し、部分積分と基底展開だけを用いて系統的に双対過程を導出できることを示した。これは大学初学年で習うような数理的手法のみで、双対性に関する議論が可能になったことを意味する。さらに、数理的な道具が簡単になったことから、双対過程の自動導出コードの開発も容易になった。

以上の成果は主な研究成果の [1] に挙げた論文としてまとめた。今後、工学の分野において双対過程の利用を広げるために、この初等的な方法に基づく理論的枠組みは必須であると考えられる。

研究テーマＢ「双対性に関する数値計算手法の改良」

双対過程の利用により、双対となる出生死滅過程に対して「事前計算」をおこない、その結果を利用して確率微分方程式の統計量を計算する枠組みを構築できる。事前計算の結果を再利用できるため、実際の計算の際の計算量を削減でき、効率化につながるのがメリットではあったものの、一方で事前計算に非常に時間がかかるという問題点があった。これは事前計算にはモンテカルロ法が用いられており、大量のサンプリングが必要であったことに起因する。

そこで数値計算手法の視点から理論的な枠組みを完全に見直す作業をおこない、結果とし

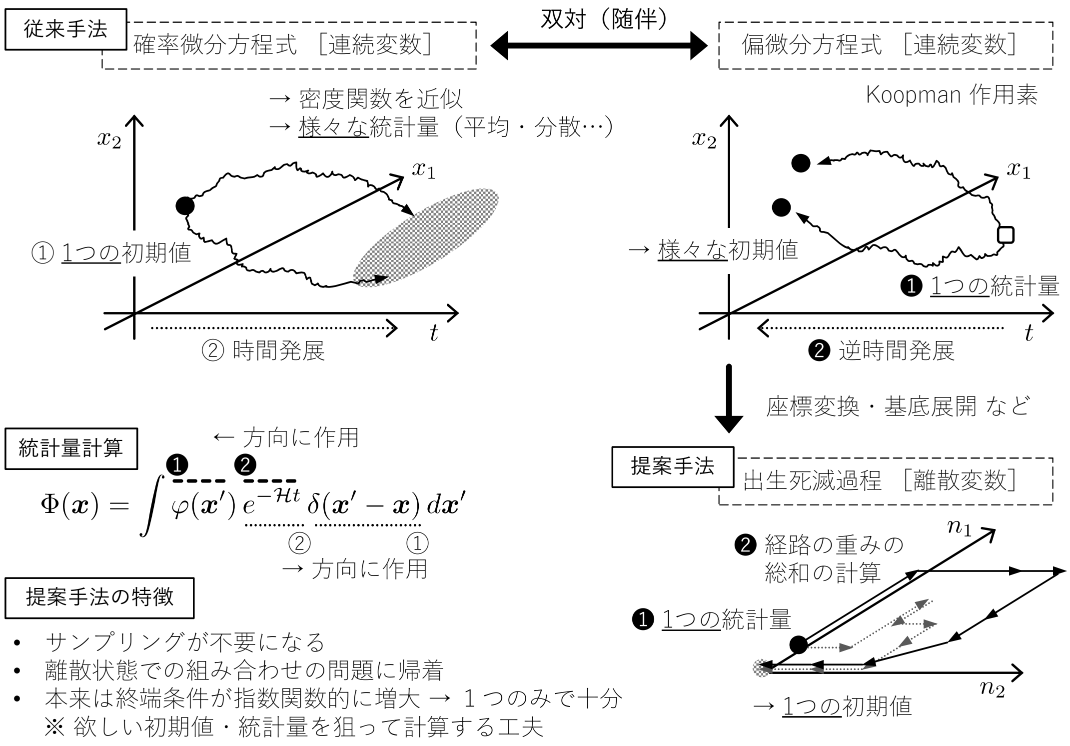

図 2 提案された数値計算アルゴリズムの特徴

て組み合わせ論を利用した数値計算アルゴリズムを構築した。アルゴリズムの特徴を図 2 に示す。この枠組みは欲しい量だけを狙い撃ちして計算するため、従来のサンプリングの際に出る無駄を削減でき、計算速度が大幅に向上した。このアルゴリズムを事前計算に利用できることはもちろん、この高速化により事前計算ではなくリアルタイムに双対性を利用する展開も見えてきた。実際に、従来手法よりも数十倍～100 倍程度の高速化が可能になる事例もある。また、組み合わせ論の分野にはさまざまな研究蓄積がある。現在は動的計画法に基づく数値計算アルゴリズムを利用しているが、組み合わせ論の研究分野の知見の利用により、さらなる効率化、高速化へとつながる可能性がある。

さらに、非常に大きな成果がレゾルベントの利用である。関数解析の分野においてレゾルベントという概念が知られている。演算子に対する逆行列のような概念であるが、レゾルベントを計算することにより、適用範囲を大きく広げることに成功した。図 3 に示したのは分散、すなわち「ばらつき具合」に対応する 2 次モーメントと呼ばれる統計量の計算結果である。横軸に示す「ある時刻における統計量」を計算するのが目的であるが、レゾルベントを利用しない場合には短い時間までしか計算できず、時間が長くなると計算が破綻する。しかし、レゾルベントの利用により大幅に計算可能な時間範囲を拡大できている。データ同化や制御の問題などに取り組む際には、ある程度の短時間に対応できれば十分であることが知られている。それでも既存の手法では対応できる範囲が短すぎたが、この改良で実用的な問題に対する適用可能性が見えてきた。その意味で、この成果は今後の工学的な応用につながる非常に大きな進展であると位置付けられる。

この点については主な研究成果の [2] に挙げた論文としてまとめた。

研究テーマ C「双対性に基づく新計算原理の適用範囲の拡大」

研究開始の時点では、双対性の応用事例としてはフィルタリング、具体的には非線形カルマンフィルタのみが検討されていた。もともと汎用的な計算ではなく、ドメイン指向コンピューティングに位置付けられる手法ではあるが、新計算原理としての発展のためには適用できる範囲を広げておくことは大切である。そこで、確率制御および機械学習への適用を実施した。適用の際、フィルタリングの際とは異なり、従来の双対性の利用だけでは不十分であることが判明した。そのため理論を見直し、さまざまな統計量を計算できるように枠組みを拡張するなどしている。

さらに、データ解析の分野で近年注目を浴びている Koopman 作用素とのつながりも明らかとなった。Koopman 作用素の特徴は線形性である。考えている方程式系が非線形であっても、線形の手法を用いて解析することができるようになるため、ニューラルネットワークの研究分野を含めて、さまざまな分野で Koopman 作用素およびその近似である Koopman 行列が利用されつつある。そして、実は双対過程の枠組みは「方程式からの Koopman 行列の直接計算」に対応していることが明らかとなった。これにより、データと方程式とをつなぐ新しい計算原理への展開が見込まれる。

確率制御に関する適用については主な研究成果の [3] に挙げた論文としてまとめた。Koopman 作用素との関係については英語学術論文にまとめ、投稿中である。機械学習に関する内容は、今後内容を整理し、英語学術論文としてまとめる。

※ Koopman 作用素に関する論文（preprint）：https://arxiv.org/abs/2111.07213

３． 今後の展開

まず、組み合わせ論とレゾルベントを利用した数値計算アルゴリズムの基礎的検討と改良が必要となる。双対性の枠組みの適用範囲を広げることが非常に大変だったものの、このアルゴリズムの提案によって、ようやく実用的な計算への道が見えてきた。ただ、さらなる効率化を目指しながら基礎的な性質を明らかにすることは、他の研究者が安心して双対性を利用した研究に着手するために必要である。これまでの取り組みとは異なる研究知識が必要になることもあり、組み合わせ論に関係する学術変革領域の公募研究に応募し、採択された。今後 1～3 年程度をかけ、基礎的な性質を明らかにしながら、他研究領域の研究者が参入しやすい形を整えていく。

また、特に双対性と Koopman 作用素との関係性を明らかにしたことにより、データと方程式とを結びつける新しい計算の枠組みを視野に入れることができるようになった。さきがけでの研究成果を第一歩として、さらに具体的な適用例を増やしながら、開発を主体とした展開が社会実装には不可欠となる。そのため本さきがけの研究成果に基づき、JST 創発的研究支援事業に応募したところ、2022 年度からの採択が決まった。2022 年から 7 年程度をかけて、データとの接続手法の確立、数値計算アルゴリズムの改良とコードの開発を進める予定である。本研究成果は数値計算アルゴリズムに関する技術であるため、コードの公開とライブラリへの組み込み等が進むことが社会実装につなげるための鍵となる。そのため、適用事例ごとに開発したコードの公開を順次実施する予定であり、少しずつ双対性を利用した手法への理解を広めていく。なお、この手法は、計算の省力化や効率化のために既存の技術の一部を置き換える要素技術に位置付けられる。2030 年頃にはいくつかの具体例で実際に既存技術の代替案として検討されるようになることを目指す。

４． 自己評価

【研究目的の達成状況】

当初の研究目的である、「双対性に基づく新計算原理の基礎を固めること」、「実際に応用可能であることを示すこと」について、達成できたと言える。

研究開始時点においては素朴な数値計算アルゴリズムでも十分に応用は可能であると考えていたのに対して、事前計算に時間がかかりすぎること、また少し長い時間発展をおこなおうとすると計算結果が発散することなど、想定していなかった困難が発生した。研究遂行により、組み合わせ論とレゾルベントを利用した数値計算アルゴリズムを提案することができたものの、研究期間の半ば過ぎまでこの問題に悩まされていたため、他分野の研究者への宣伝や波及にかけられる時間が少なくなってしまった。

一方で、粘り強く取り組み続け、最終的に問題の解決策を見つけられたこと、また組み合わせ論や Koopman 作用素など、別の研究分野とのつながりを新規に発見したことで研究の今後の広がりが見えてきたことは評価できると考えている。

【研究の進め方（研究実施体制及び研究費執行状況）】

理論的な研究であるため、高額な実験設備などは不要であった。そのため研究費の主な用途は研究補助者の雇用と、研究進行に必要な大型計算機の購入であった。研究補助者

の協力により、特にコードの開発の点での調査を円滑に進めることができた。また、計画的に必要な計算機の購入を進めることができた。もともと大量の連立微分方程式を数値的に解くために購入していた大規模メモリ搭載の計算機を、途中からは組み合わせ論に基づく数値計算アルゴリズムにも利用することができるなど、当初は予想していなかった研究の進展でも特に困ることはなく研究を遂行できた。

【研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果】

まず数理的な概念の工学的な応用の実例を増やす点において、本研究成果の意義が大きいと考えている。量子コンピュータなども含めて、新しい概念に基づく新計算原理が社会に及ぼすインパクトは大きい。双対性は数学や数理物理学の分野では研究されていたものの、工学的な利用が検討されていなかった。系統的な導出方法および数値計算アルゴリズムの欠如がその理由であり、そこに取り組む研究者は皆無であった。さきがけ研究での取り組み前も含め、長期間に渡り粘り強く研究を進めた結果、実用化へはまだ研究が必要な段階ではあるが、実際に効率化や高速化を示すことができるようになってきた。その意味で、独創的で先駆的な基礎研究を推進できたと言える。

また近年、人工知能と機械学習の技術が注目され、さまざまな分野で利用されるようになっている。しかし、精度のよい学習には大量のデータが必要になるなどの問題もある。本研究成果により、当初は予定していなかった「データと方程式とを結びつける新しい枠組み」が見えてきた。これにより、事前知識を有効活用することで少量のデータで学習すること、方程式を通じた学習結果の再利用など、実用的な面でも波及効果の大きい研究へと計画を進めている。現象の本質を記述するという意味合いで「方程式は最高の圧縮技術」であると言える。このようなデータと方程式とを双対性により結びつける研究計画に着手するためには、初等的な手法による理論の見直し、組み合わせ論とレゾルベントの利用、そして Koopman 作用素との関係性の発見などの本研究成果が不可欠であった。その意味で、非常に重要な波及効果を持つと考えている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 4件

1. Jun Ohkubo and Yuuki Arai, Duality in stochastic processes from the viewpoint of basis expansion, J. Stat. Mech. 2019, Vol. 2019, Article No. 063202 (13 pages).

これまで量子力学で利用されている生成消滅演算子や、数学における Lie 代数に基づいて双対確率過程が議論されていた。そのためこれらの数理的手法に習熟していない研究者には手を出しづらいものになっていた。本論文では双対確率過程の導出過程を見直し、初等的な部分積分と基底展開によって議論できることを明らかにした。これにより、系統的な導出が容易になったばかりでなく、双対過程の自動導出コードの開発にもつながった。

2. Jun Ohkubo, Combinatorics for calculating expectation values of functions in systems with evolution governed by stochastic differential equations, 2021, J. Stat. Mech. Vol. 2021, Article No. 013401 (18 pages).

フィルタリングなどの情報処理に双対過程を利用する際、これまではモンテカルロ法に基づく事前計算が利用されており、大量の計算時間が必要となっていた。本論文では、組合せ論的な議論による計算手法と作用素のレゾルベントの利用を提案した。これにより計算量の大幅削減および手法の適用範囲の大幅な拡張に成功した。本成果は双対過程を実用的な問題に利用するための非常に重要な進展であり、今後の研究に欠かせない成果となった。
3. Jun Ohkubo, Connection among stochastic Hamilton–Jacobi–Bellman equation, path–integral, and Koopman operator on nonlinear stochastic optimal control, 2021, J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 90, Article No. 104802 (9 pages).
ノイズのある環境下における制御問題をリアルタイムに実行するのは容易ではない。本論文では確率的ハミルトン–ヤコビ–ベルマン方程式に対して双対過程の数理を適用し、フィードバック制御入力を求めるアルゴリズムを提案した。これまでのフィルタリングに対する双対過程の利用とは数理構造が少し異なっており、適用のための工夫を提案している。この適用範囲を拡張するための工夫は、今後の研究における拡張の基本となる。

（2）特許出願

特許出願なし。

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

主な学会発表として以下の2件の招待講演を挙げる。

大久保 潤、"確率過程の双対性を利用したコンピューティング"、
2019 年 電子情報通信学会総合大会 企画シンポジウム BI-11
情報ネットワークとその科学 –最新研究動向と今後に向けて–
(2019 年 3 月 19 日、早稲田大学 西早稲田キャンパス)
※ 情報系の幅広い聴衆向けに研究概要と成果を伝えることができた。

大久保 潤、"双対を用いた計算について"、第 8 回信州関数解析シンポジウム
(2019 年 11 月 28 日、信州大学 松本キャンパス)
※ 数学者中心の研究会であり、数学的な観点からの議論を実施することができた。