

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 3 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H01822

研究課題名（和文）深層学習に対する数値解析的アプローチ基盤の創出

研究課題名（英文）Creation of a foundation for a numerical approach to deep learning

研究代表者

降旗 大介（Furihata, Daisuke）

大阪大学・サイバーメディアセンター・教授

研究者番号：80242014

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,400,000円

研究成果の概要（和文）：数値解析学観点から類似ResNet等の新DNNを構築，異なる数値解法・画像認識等で性能評価をし，ネットワークの数値微分方程式表現について後退誤差解析からDNNと背後力学系を理解する基盤を研究し，DNNでの数値解析学的概念対応物を調査した．また，数値積分公式に基づく実験的DNN構築の研究として適切な公式の検証を行い，また，ネットワーク積分変換における数値積分理論の枠組も探究した．数値積分公式の積分変換誤差評価を行い理論基盤を創ること，また，DNN関数表現の適切な関数空間も研究した．また，既存研究に対し深さ段数を増やした積分変換近似についても研究を進めた．

研究成果の学術的意義や社会的意義

深層学習において，その理論的背景を明らかにすることは近年の大きな課題である．

これに対しネットワークの表現，力学系との連続極限対応などの理論的研究があり，微分方程式数値解法や関数近似・数値積分など数値解析学視点の重要性が深層学習研究者たちによって指摘され，問題解決可能性に期待が高まっている．

本研究成果は，数値解析学者の視座から現状を改めて理解・整理し，深層学習に対する数値解析学的アプローチ基盤を創出して深層学習理解を発展させること，逆のフィードバックで数値解析学に新展開をもたらすことで第四の科学時代における応用数学・数理科学自身の発展に寄与するもので，まさにこの期待に応えたものである．

研究成果の概要（英文）：We constructed new DNNs such as ResNet from the perspective of numerical analysis, evaluated their performance using different numerical solution methods and image recognition, and studied the basis for understanding DNNs and the underlying dynamical systems through backward error analysis of the numerical differential equation representation of the network, and investigated the numerical analytical conceptual equivalents in DNNs. We also verified appropriate formulas as part of our research into experimental DNN construction based on numerical integration formulas and explored the framework of numerical integration theory in network integral transforms. We evaluated the integral transform error of the numerical integration formula to create a theoretical foundation and studied appropriate function spaces for DNN function representations. We also researched integral transform approximations with more in-depth stages than existing research.

研究分野：数値解析学

キーワード：深層学習 数値解析 微分方程式 数値積分 関数近似

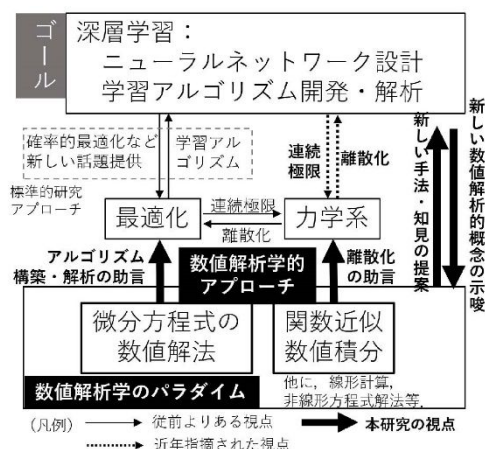
1. 研究開始当初の背景

近年、機械学習分野で深層学習(DNN)が成功を収め各種 AI 新技術の根底を支えると期待されている。しかしながら、現状でその理論的根拠は不明であり、理論整備の必要性も強く望まれてきた。この流れの中、最近ようやく理論研究の糸口が見つかりつつあり、とりわけ DNN を微分方程式の数値解法として理解しようとするなど、数値解析学諸概念との接続を希求するアプローチが、NIPS・ICML 等、機械学習分野のトップ会議において盛んに発表されている。例えば画像認識で ResNet は、その連続極限にある微分方程式を通じ数値解法と関連づけられ、その観点からネットワーク構造(数値解析学における離散化手法)や安定性が議論できるように思われた。またさらに、微分方程式そのものを連続的ネットワークとみなし、種々ニューラルネットワークはその数値計算の都合上現れるに過ぎないと考えるアプローチも提案されており、これによりニューラルネットワークは数値解法によって一段一般化され、未知のネットワーク構造が表出しうると期待できる。あるいは個々のニューロンを特徴付ける活性化関数として現在主流の ReLU に基づく DNN は、その連続極限によりある種の積分変換と関連づけられ、それに対する離散化(数値積分)の観点から議論可能に思われるなど、深層学習と数値解析学の関係性を模索する必要が強く示唆されていた。

2. 研究の目的

上の背景に述べた状況にあって、この本研究の核心に据える目的は、深層学習に対する数値解析学的アプローチとは何かを明らかにすることであり、それにまさに数値解析学の立場から切り込もうというのが本研究の趣旨である。

本研究目的の視座を図 1 に記す。従前、深層学習の研究は試行錯誤の DNN 設計と、その上での汎化誤差最小化によるパラメータ学習で成り立っていた。この意味で隣接学問分野は最適化である(図中「標準的研究アプローチ」)。これに対し、ネットワーク背後にその連続極限により力学系を透かし見、力学系分野を隣接学問領域として加えようというのが、われわれの考える新しい流れの思想である(「近年指摘された視点」)。さらにその先に数値解析学があるが、上述のとおり数値解析学者は不在であった。本研究ではこの描像を逆さまにして、数値解析学から出発し、最適化や力学系の先に深層学習を透かし見、それへの数値解析学的アプローチを創り出す立場に立つ(「本研究の視点」)。



3. 研究の方法

DNN の特徴抽出層はその深さ方向連続極限で常微分方程式に帰着することと DNN 全体は中間層の幅方向連続極限により積分変換に帰着することから本研究の方法としては数値微分方程式班(D班)と関数近似・数値積分班(A班)の2つの作業班を軸とする。そのうえで、本研究計画の構成を概ね時間進行に沿う3つのフェーズに分けて示す。

(1) 第1フェーズ(具体的研究に基づく予備調査):

学問的背景から具体的に行える実験的研究から着手し予備知見を蓄積する。第1フェーズでは、まずは上述 ResNet 等構造が単純なものについて検討する。D班は微分方程式の数値解法に基づく実験的 DNN 構築をテーマとし、ResNet 類似 DNN について、数値解析学の観点から新しい DNN を構築し画像認識等でその性能を評価する。具体的には例えば異なる近似精度の Runge-Kutta 法を試し性能を比較する。A班は数値積分公式に基づく実験的 DNN 構築をテーマとし、まず種々数値積分公式の適用・開発を試みる。A班の知見の DNN への検証を経て新 DNN 構築を目指す。

(2) 第2フェーズ(数値解析学的アプローチ基盤の構築):

上記予備知見を踏まえ実際に基盤を創る。D班はネットワークの数値微分方程式表現の枠組探究をテーマとし、(i) 後退誤差解析に基づいて、DNN と背後の力学系を同時に理解する基盤を作る、(ii) (i)に基づいて、数値解法の諸概念(解法の陽的・陰的、安定性、近似精度等)が DNN の何に対応するかを明らかにする、(iii) (ii)をさらに発展させて、構造保存解法を選択する可能性について検討する、という細目で研究を推進する。A班はネットワーク積分変換における数値積

分理論の枠組探究をテーマとし、(i) 前フェーズの実験結果を踏まえ、有望と思われる数値積分公式について積分変換における精密な誤差評価を行い理論基盤を創る、(ii) DNN の表す関数表現にとって適切な関数空間が何かを同時に模索する、(iii) 既存研究は深さ方向には1段の最も簡易な場合しか考えられていないが、この段数を増やした場合の積分変換とその近似についても検討する、の細目で研究を推進する。

(3) 第3フェーズ(基盤に基づく発展的展開)

本研究計画最終フェーズとして、上記で得られたアプローチ基盤があって初めて得られる理論的結果・新DNN等の展開を目指す。本フェーズでは統合班の下で全体が一体として協働する。このフェーズでのテーマは下記の3つになる。第1テーマは数値解析学的DNN構成法の探究で、(i) 前フェーズで数値微分方程式・数値積分法に分かれて検討した本視点を統合し、数値解析学の立場からDNNの構成法について統一的な枠組が構成できるか検討する、(ii) 構造保存解法に基づくDNN構築の可能性を探究する、(iii) 最先端数値積分手法に基づくDNN構築法を探究する、の細目で研究を推進する。第2テーマはより複雑なDNNへの挑戦であり、以下の視点からさらなる探究を行う。(i) 時間・空間非一様格子の数値解法としての解釈(複雑構造DNNを「非一様格子上での適合的解法」として理解し拡張する)、(ii) スケーラブル・並列化構造保存解法によるDNN構築(スケーラブル解法、並列実行可能な手法等を拡張してDNNのスケーラビリティや幅方向並列性を探究する)といった内容である。第3テーマは数値解析学へのフィードバックの挑戦で、数値解析学へのフィードバック可能性を模索するものである。これらには(i) DNNでは有効でなくなる数値解析学的概念に対応して、顕在化する隠れた性質があると推測されるのでこれを探索する、(ii) DNNを積分変換と捉える解釈が与えるある種の関数近似手法は数値解析学的に新しい存在であるため、この可能性を模索する、といった内容である。

4. 研究成果

複数年に渡る研究プロジェクトであるので、おおよその時系列に沿って本研究の成果を記載する。まず、上記したように本研究は数値微分方程式班と関数近似・数値積分法の2つの作業班を軸とし、それに俯瞰・統合班および深層学習協力者を加えて全体を構成するものであり、そしていくつかのフェーズからなるものである。

(1) 第1フェーズは統合班の指揮の下、各班で以下の実験的研究を行う予定であった。まず、数値微分方程式班は「微分方程式の数値解法に基づく実験的DNN構築」を標語として計画を構成していた。これは、ResNetだけでなく類似DNN(PolyNet, FractalNet等)も数値解法と関連づけられる可能性が示唆されていたがその先にある「数値解法から生まれる新DNN」は極めて最近調査が始まったばかりであることから、数値解析学の観点から、実際に新しいDNNを構築し画像認識等でその性能を評価するものであった(例えば異なる近似精度のRunge-Kutta法を試し性能を比較する)。これらの計画に対し該当班は予備的な調査過程として実験的DNNを構築しその性能評価等を開始している。また、関数近似・数値積分法は「数値積分公式に基づく実験的DNN構築」という標語のもとに計画をたてていた。これは、数値積分公式に基づく観点からの新たなDNN構築の可能性が未解明であることから種々の数値積分公式の適用・開発によるこの可能性を調べるものである。本申請グループにはすでにその試みの実績がある(たとえば、一段NNにおける被積分関数に対して適切な重み・分点の組を数値解析学的に定めるアルゴリズムを考案している)ことからこの方向性で研究を発展、推進するものである。そして実際、DNNにどのような公式が真に有用であるかについて検証が必要であることから本段階でこの検証に取り掛かり、新たなDNNの構築に向けて検討を繰り返しているところである。

(2) 引き続き第2フェーズ「数値解析学的アプローチ基盤の構築」に段階をすすめる形で統合班の指揮の下、各班で以下の実験的研究を行った。まず数値微分方程式班は「ネットワークの数値微分方程式表現の枠組探究」テーマについて研究を開始、推進した。内容としては後退誤差解析に基づいてDNNと背後の力学系を同時に理解する基盤を作ること、そしてこの成果に基づいて、解法の陽的・陰的、安定性、近似精度などの数値解法がDNNに対応する数学的対象・性質を明らかにすることである。なお既存の研究ではPolyNetが陰的Euler法としての解釈できると主張しているが厳密ではなく、この成果によって修正を要するとみている。さらに構造保存解法を選択する可能性についての検討も行った。これはクラスタリングのためにHamilton系が優位である可能性が指摘されていることからシンプレクティック解法等の有効性が期待されていたためである。関数近似・数値積分法は「ネットワーク積分変換における数値積分理論の枠組探究」テーマに沿って研究を推進した。内容としては前フェーズの実験結果を踏まえて有望と思われる数値積分公式について積分変換における精密な誤差評価を行い理論基盤を創ることがまず挙げられる。このとき、函数論的・関数解析学的手法などが有効であった。また、DNNの関数表現にとって適切な関数空間の模索も行った。そして、これまで既存研究では深さ方向が1段の場合しか考えられていなかったが段数を増やした場合の積分変換とその近似についても研究を進めた。

(3) さらに引き続き本計画最終フェーズである第3フェーズ「基盤に基づく発展的展開」に段階をすすめる形で統合班の指揮の下、全体が一体として協働し、以下の研究を行った。まず「数値解析学的 DNN 構成法の探求」テーマについて数値微分方程式班と関数近似・数値積分班の協働により研究を推進した。内容としては前フェーズで得た数値微分方程式・数値積分班の成果を統合して数値解析学的の立場から DNN の構成法について統一的な枠組み構成について検討し、さらに構造保存解法に基づく DNN 構築可能性を模索するものである。さらに、最悪誤差最小化公式をもつ最先端の数値積分手法に基づく DNN 構築法を探求した。さらに、「より複雑な DNN への挑戦」テーマに主に関数近似・数値積分班が主導の形で研究に取組み、現状で提唱されている種々の複雑な DNN について非一様格子上での適合的解釈を適用し、さらにモデル縮減によるスケーラブル解法や並列実行可能な手法を用いてこうした拡張の研究を行った。また、「数値解析学へのフィードバックの挑戦」テーマに数値微分方程式班と関数近似・数値積分班が協働し研究を推進した。これは数値解析学で扱う近似精度に代わる DNN 上の概念のフィードバックや、DNN がもつ積分変換としての性質の数値解析学へのフィードバックについての展開としての研究を進めた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計27件（うち査読付論文 22件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 van Meurs Patrick, Tanaka Ken'ichiro	4. 巻 29
2. 論文標題 Convergence rates for energies of interacting particles whose distribution spreads out as their number increases	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations	6. 最初と最後の頁 4~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1051/cocv/2022083	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yamagami Tomoki, Segawa Etsuo, Tanaka Ken'ichiro, Mihana Takatomo, Roehm Andre, Horisaki Ryoichi, Naruse Makoto	4. 巻 107
2. 論文標題 Skeleton structure inherent in discrete-time quantum walks	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 012222-1~16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.107.012222	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Matsubara Takashi, Miyatake Yuto, Yaguchi Takaharu	4. 巻 -
2. 論文標題 The Symplectic Adjoint Method: Memory-Efficient Backpropagation of Neural-Network-Based Differential Equations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems	6. 最初と最後の頁 1~13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/tnnls.2023.3242345	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 高倉 直哉、田中 健一郎	4. 巻 32
2. 論文標題 指数減衰する関数に対する全周波数領域におけるフーリエ変換の高精度な近似公式	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 日本応用数学会論文誌	6. 最初と最後の頁 75~100
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11540/jsiamt.32.2_75	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ushiyama Kansei, Sato Shun, Matsuo Takayasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Essential convergence rate of ordinary differential equations appearing in optimization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 119 ~ 122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.119	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akita Kosuke, Miyatake Yuto, Furihata Daisuke	4. 巻 14
2. 論文標題 Composing a surrogate observation operator for sequential data assimilation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 123 ~ 126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.123	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ushiyama Kansei, Sato Shun, Matsuo Takayasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Deriving efficient optimization methods based on stable explicit numerical methods	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 29 ~ 32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.29	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Oshiro Ryunosuke, Tanaka Ken'ichiro	4. 巻 14
2. 論文標題 Quadratures over graphs via the Frank-Wolfe method and its variant	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 41 ~ 44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.41	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kawai Shuto, Sato Shun, Matsuo Takayasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Mathematical analysis of a conservative numerical scheme for the Ostrovsky equation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 53 ~ 56
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.53	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okayama Tomoaki, Tanaka Ken'ichiro	4. 巻 15
2. 論文標題 Error analysis of approximation of derivatives by means of the Sinc approximation for double-exponentially decaying functions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 5 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.15.5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okayama, T, Tanaka, K'ichiro	4. 巻 15
2. 論文標題 Yet another DE-Sinc indefinite integration formula	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Dolomites Research Notes on Approximation	6. 最初と最後の頁 105 ~ 116
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14658/pupj-drna-2022-3-10	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ushiyama Kansei, Sato Shun, Matsuo Takayasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Deriving efficient optimization methods based on stable explicit numerical methods	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 29 ~ 32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.29	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kemmochi Tomoya, Sato Shun	4. 巻 62
2. 論文標題 Scalar auxiliary variable approach for conservative/dissipative partial differential equations with unbounded energy functionals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 903 ~ 930
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10543-021-00904-w	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tatsuoka Fuminori, Sogabe Tomohiro, Miyatake Yuto, Kemmochi Tomoya, Zhang Shao-Liang	4. 巻 54
2. 論文標題 Computing the matrix fractional power with the double exponential formula	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ETNA - Electronic Transactions on Numerical Analysis	6. 最初と最後の頁 558 ~ 580
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1553/etna_vol154s558	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ito Shin-ichi, Matsuda Takeru, Miyatake Yuto	4. 巻 61
2. 論文標題 Adjoint-based exact Hessian computation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 503 ~ 522
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10543-020-00833-0	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okumura Makoto, Fukao Takeshi, Furihata Daisuke, Yoshikawa Shuji	4. 巻 21
2. 論文標題 A second-order accurate structure-preserving scheme for the Cahn-Hilliard equation with a dynamic boundary condition	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Communications on Pure & Applied Analysis	6. 最初と最後の頁 355 ~ 355
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3934/cpaa.2021181	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kansei Ushiyama, Shun Sato, Takayasu Matsuo	4. 巻 14
2. 論文標題 Deriving efficient optimization methods based on stable explicit numerical methods	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 29-32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.29	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toni Karvonen, Simo Sarkka, Ken'ichiro Tanaka	4. 巻 87
2. 論文標題 Kernel-based interpolation at approximate Fekete points	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Numerical Algorithms	6. 最初と最後の頁 445-468
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11075-020-00973-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ryunosuke Oshiro, Ken'ichiro Tanaka	4. 巻 12
2. 論文標題 Effective methods for obtaining good points for quadrature in reproducing kernel Hilbert spaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 61-64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.12.61	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tatsuoka Fuminori, Sogabe Tomohiro, Miyatake Yuto, Kemmochi Tomoya, Zhang Shao-Liang	4. 巻 54
2. 論文標題 Computing the matrix fractional power with the double exponential formula	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ETNA - Electronic Transactions on Numerical Analysis	6. 最初と最後の頁 558 ~ 580
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1553/etna_vol154s558	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ito Shin-ichi, Matsuda Takeru, Miyatake Yuto	4. 巻 61
2. 論文標題 Adjoint-based exact Hessian computation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 503 ~ 522
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10543-020-00833-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sakakibara Koya, Miyatake Yuto	4. 巻 424
2. 論文標題 A fully discrete curve-shortening polygonal evolution law for moving boundary problems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Physics	6. 最初と最後の頁 109857 ~ 109857
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcp.2020.109857	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Matsuda Takeru, Miyatake Yuto	4. 巻 388
2. 論文標題 Generalization of partitioned Runge-Kutta methods for adjoint systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 113308 ~ 113308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cam.2020.113308	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sakai Tsubasa, Kudo Shuhei, Imachi Hiroto, Miyatake Yuto, Hoshi Takeo, Yamamoto Yusaku	4. 巻 38
2. 論文標題 A parallelizable energy-preserving integrator MB4 and its application to quantum-mechanical wavepacket dynamics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 105 ~ 123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s13160-020-00430-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuda Takeru, Miyatake Yuto	4. 巻 9
2. 論文標題 Estimation of Ordinary Differential Equation Models with Discretization Error Quantification	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification	6. 最初と最後の頁 302 ~ 331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/19M1278405	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, Takaharu Yaguchi	4. 巻 35
2. 論文標題 Symplectic adjoint method for exact gradient of neural ODE with minimal memory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advances in Neural Information Processing Systems	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okumura Makoto, Furihata Daisuke	4. 巻 40
2. 論文標題 A structure-preserving scheme for the Allen-Cahn equation with a dynamic boundary condition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Discrete & Continuous Dynamical Systems - A	6. 最初と最後の頁 4927 ~ 4960
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3934/dcds.2020206	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計50件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 12件)

1. 発表者名 Daisuke Furihata
2. 発表標題 A particle dynamics model for coarsening process of phase separation phenomenon modeled by the Cahn-Hilliard Equation
3. 学会等名 JSPS seminar 2022 "Topics in computational methods for stochastic and deterministic differential equations" (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 particle dynamics model による Cahn-Hilliard 方程式解の粗視化
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 Structure-preserving algorithm, optimization problem and applications to nano-particle problems
3. 学会等名 High-index saddleの探索アルゴリズムとその応用
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomoaki Miyatake, Yuto Miyatake, Daisuke Furihata
2. 発表標題 A Particle Dynamics Model for Coarsening Process of Cahn-Hilliard Equation
3. 学会等名 WCCM-APCOM YOKOHAMA 2022 (15th World Congress on Computation Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computation Mechanics) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 非線形差分作用素の近似誤差プロファイルと入力誤差への耐性
3. 学会等名 第27回計算工学講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Miyatake
2. 発表標題 Adjoint-based exact Hessian computation
3. 学会等名 Workshop on Functional Inference and Machine Intelligence (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Miyatake
2. 発表標題 A family of fourth-order energy-preserving integrators
3. 学会等名 ANODE (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Miyatake
2. 発表標題 Generalized nearly isotonic regression and its applications to discretization error quantification of ODEs
3. 学会等名 JSPS Alumni Seminar Topics in computational methods for stochastic and deterministic differential equations (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Miyatake
2. 発表標題 A family of fourth-order energy-preserving integrators
3. 学会等名 ICNAAM 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Matsuda, Y. Miyatake
2. 発表標題 Quantifying the error in the numerical integration of ODEs based on isotonic regression
3. 学会等名 WCCM-APCOM 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Matsuda, Y. Miyatake
2. 発表標題 Piecewise monotone estimation in one-parameter exponential families
3. 学会等名 EcoSta 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 上島智哉, 佐藤峻, 牛山寛生, 松尾 宇泰, 田中健一郎
2. 発表標題 最適化手法由来のヘッセ行列を伴う連続力学系モデルに対する数値解析学的アプローチ
3. 学会等名 日本応用数理学会2023年研究部会連合発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 牛山 寛生, 佐藤峻, 松尾 宇泰
2. 発表標題 最適化手法記述のための弱い離散勾配について
3. 学会等名 2022年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐藤峻, 牛山 寛生, 松尾 宇泰
2. 発表標題 連続最適化に対する数値解析学的アプローチ
3. 学会等名 RIMS共同研究 (公開型)「数値解析が拓く次世代情報社会～エッジから富岳まで～」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野沢 諒太, 佐藤峻, 松尾 宇泰
2. 発表標題 Nesterovの加速勾配法の変刻み線形多段法としての解釈とその応用について
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 牛山 寛生, 佐藤峻, 松尾 宇泰
2. 発表標題 勾配流に対する離散勾配を用いた最適化手法の統一的記述について
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 上野 颯人, 田中 健一郎
2. 発表標題 均衡測度の数値計算に対する近似法について
3. 学会等名 日本応用数理学会 第19回 研究部会連合発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中 健一郎
2. 発表標題 Swap stepの無い条件付き勾配法およびkernel herding法への応用
3. 学会等名 京都大学応用数学セミナー (KUAMS) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小暮 祥弘, 田中 健一郎
2. 発表標題 指数重み付き混合ベゾフ空間のウェーブレット係数による特徴づけに基づくスパースグリッドの構成
3. 学会等名 2022年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山上 智輝, 瀬川 悦生, 田中 健一郎, 巳鼻 孝朋, レーム アンドレ, 堀崎 遼一, 成瀬 誠
2. 発表標題 離散時間1次元量子ウォークの骨格構造について
3. 学会等名 2022年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Yamagami, E. Segawa, K. Tanaka, T. Mihana, A. Roehm, R. Horisaki, M. Naruse
2. 発表標題 Skeleton structure inherent in quantum walks
3. 学会等名 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kazuma Tsuji, Ken'ichiro Tanaka, Sebastian Pokutta
2. 発表標題 Pairwise Conditional Gradients without Swap Steps and Sparser Kernel Herding
3. 学会等名 The 6th RIKEN-IMI-ISM-NUS-ZIB-MODAL-NHR Workshop on Advances in Classical and Quantum Algorithms for Optimization and Machine Learning
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大城 隆之介, 田中 健一郎
2. 発表標題 最適輸送問題によるグラフ求積の定式化へのK-メディアン問題・DC計画によるアプローチ
3. 学会等名 日本応用数理学会 2022年度 年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡山 友昭, 田中 健一郎
2. 発表標題 二重指数関数型減衰関数に対するSinc関数近似に基づく微分近似の誤差評価
3. 学会等名 日本応用数理学会 2022年度 年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山本 かけい, 田中 健一郎, 松尾 宇泰
2. 発表標題 二重指数関数型数値積分公式によるガンマ関数の数値計算法の提案
3. 学会等名 日本応用数理学会 2022年度 年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kazuma Tsuji, Ken'ichiro Tanaka, Sebastian Pokutta
2. 発表標題 Pairwise Conditional Gradients without Swap Steps and Sparser Kernel Herding
3. 学会等名 The 39th International Conference on Machine Learning (ICML 2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山上 智輝, 瀬川 悦生, 田中 健一郎, 巳鼻 孝朋, レーム アンドレ, 堀崎 遼一
2. 発表標題 量子ウォークにより駆動されるランダムウォークの推移確率の骨格構造
3. 学会等名 電子情報通信学会複雑コミュニケーションサイエンス研究会 (CCS/NLP) (プログラム)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 High-order linearly implicit schemes conserving quadratic invariants
3. 学会等名 ANODE2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 High-order linearly implicit schemes conserving quadratic invariants
3. 学会等名 JSPS Seminar: Topics in computational methods for stochastic and deterministic differential equations (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮武 勇登, 曾我部 知広
2. 発表標題 非負制約付き2次計画問題に対する適応型射影SOR法
3. 学会等名 日本応用数学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 牛山 寛生, 佐藤 峻, 松尾 宇泰
2. 発表標題 最適化に現れる常微分方程式の本質的な収束レート
3. 学会等名 日本応用数学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 牛山 寛生, 佐藤 峻, 松尾 宇泰
2. 発表標題 最適化に適した安定な数値解法について
3. 学会等名 日本応用数学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 非線形差分 -線形計算であることを捨てて-
3. 学会等名 北陸応用数理研究会2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 非線形性をもたせた差分による微分近似
3. 学会等名 第26回計算工学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 非線形性差分とその応用
3. 学会等名 日本応用数理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 対数差分とその応用
3. 学会等名 第126回 HMMCセミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 対数差分をはじめとする非線形差分公式の解析
3. 学会等名 日本応用数理学会研究部会連合発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 連続最適化問題に対する微分方程式の数値解法によるアプローチ
3. 学会等名 京都大学応用数学セミナー
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 混合微分を含む発展方程式に対する構造保存数値解法
3. 学会等名 高専間ネットワークによる微分方程式研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 Scalar Auxiliary Variable法と保存的exponential Runge-Kutta法の組合せによる高速かつ高精度なスキームの構成
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松田 孟留, 宮武 勇登
2. 発表標題 一般化近単調回帰と常微分方程式の数値計算の誤差推定
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城 隆之介, 田中 健一郎
2. 発表標題 グラフ求積へのFrank - Wolfe法の適用
3. 学会等名 日本応用数学会 2021年 研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城 隆之介, 田中 健一郎
2. 発表標題 カーネル求積によるグラフ求積とその収束解析
3. 学会等名 2021年度 応用数学合同研究集会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Matsubara, Y. Miyatake, T. Yaguchi
2. 発表標題 Symplectic adjoint method for exact gradient of neural ODE with minimal memory
3. 学会等名 Advances in Neural Information Processing Systems 35 (NeurIPS2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 牛山 寛生, 佐藤 峻, 松尾 宇泰
2. 発表標題 最適化に現れる常微分方程式の本質的な収束レート
3. 学会等名 日本応用数学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 二次の保存量をもつ常微分方程式に対する線形かつ高精度な構造保存数値解法
3. 学会等名 数値解析セミナー
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shin-ichi Ito, Takeru Matsuda, Yuto Miyatake
2. 発表標題 Adjoint-based computation of the exact Hessian-vector multiplication
3. 学会等名 ICNAAM 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 伊藤 伸一, 松田 孟留, 宮武 勇登
2. 発表標題 Second-order adjoint方程式に基づくヘッセ行列の計算について
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 任意凸多角形上での離散微分積分則とそれらに基づく偏微分方程式の構造保存数値解法
3. 学会等名 第25回計算工学講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 降旗 大介
2. 発表標題 凸多角形格子上の積分定理とその証明
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	松尾 宇泰 (Matsuo Takayasu) (90293670)	東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授 (12601)	
研究分担者	田中 健一郎 (Tanaka Kenichiro) (70610640)	東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授 (12601)	
研究分担者	宮武 勇登 (Miyatake Yuto) (60757384)	大阪大学・サイバーメディアセンター・准教授 (14401)	
研究分担者	佐藤 峻 (Sato Shun) (40849072)	東京大学・大学院情報理工学系研究科・助教 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------