# 機械学習に代表されるデータ科学の非線形解析学を用いた研究

研究ノート

池　田　正　弘*

Research on data science exemplified by machine learning using nonlinear analysis

Key Words: Machine Learning, Data Science, Nonlinear Analysis

## はじめに

私は、これまで、自然界に現れる様々な現象を数式で表し、その性質を数学的に理解する研究に取り組んできました。例えば、温度が広がっていく現象を表す「拡散方程式」、音や波が伝わる様子を表す「波動方程式」、そして量子力学に現れる「シュレディンガー方程式」など、自然現象の背後にある微分方程式を対象として、その解の振る舞いや構造を、関数解析・調和解析・変分法といった高度な数学を用いて理論的に研究してきました。近年では、こうした数学の知見を、機械学習やデータ科学の分野にも応用しています。深層学習やニューラルネットワーク、カーネル法、さらに作用素論に基づくデータ解析といった、現代の人工知能技術を支える枠組みについて、「なぜうまくいくのか」「どこまで信頼できるのか」といった本質的な問いに答えるため、数学の立場から理論的な土台を与える研究を進めています。その際には、力学系や微分方程式、最適化理論、関数空間論、関数解析、C*環、グラフ理論、極大単調作用素といった、幅広い数学分野の手法を組み合わせ、“理論的に保証された、安心して使えるデータ解析手法”の創出を目指しています。さらに、単に数学を機械学習に「応用する」だけではなく、データ科学が抱える新しい課題や現場のニーズから刺激を受け、それをきっかけとして新しい数学理論そのものを発展させる研究にも取り組んでいます[1)]。つまり、「数学 → データ科学」への応用と、「データ科学 → 新しい数学理論」への発展という、双方向の循環をつくることを目標にしています。このように、私は自然現象の理解と人工知能・データ科学の発展という、一見離れているように見える2つの世界を、数学という共通言語で結びつける研究を続けています。


「非線形力学系理論のデータ解析への応用」に関するセミナー

## 自然現象の背後にある数理構造の解析的研究

私の研究は「自然現象を数学の言葉でどこまで正確に理解できるか」という問いに真正面から取り組むものです。波・熱・振動・量子現象といった多様な現象は、微分方程式と呼ばれる数式で表すことができます。しかし、現実の自然現象を忠実に反映する方程式ほど複雑であり、その解がどのように振る舞うかを理論的に理解することは決して容易ではありません。特に非線形偏微分方程式と呼ばれるクラスの方程式では、

・解が本当に存在するのか
・どれくらい長い時間「壊れず」に存在できるのか
・逆に、有限時間で爆発（破綻）してしまうのか
・時間が十分に経過した後、どのような状態に落ち着いていくのか

* Masahiro IKEDA
1984年8月生まれ
大阪大学大学院 理学研究科 数学専攻
博士後期課程（2013年）
現在、大阪大学大学院 情報科学研究科
情報工学システム専攻　准教授
理学博士
TEL：06-6879-4521
E-mail: ikeda@ist.osaka-u.ac.jp

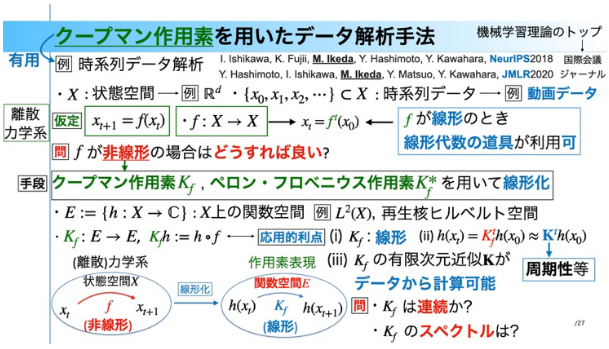
といった、基本的でありながら極めて本質的な問題が未解決のまま残されてきました。私は、これらの問題に対して、理論解析の立場から体系的に取り組み、国際的にも重要とされる未解決問題の解決に数多く貢献してきました。具体的には、これまで「長時間存在すると考えられていた」状況で、実際には非線形効果によって解が有限時間で爆発することを厳密に証明するなど、既存の予想を覆す重要な成果を挙げてきました。一方で、解が長時間にわたって安定して存在する場合についても、その解の最大存在時刻（寿命）の評価[2]や、時間無限大での振る舞いを精密に解析し、数学的に確かな理解を与える研究を進めています。これらの結果は、単なるテクニカルな計算ではなく、非線形解析・関数空間論・変分法・力学系理論など、複数の高度な数学的手法を組み合わせ、方程式固有の構造を丁寧に読み解くことで得られたものです。また、自身の発見した証明方法は、国際的に議論されてきた問題の理解を進める理論的基盤として、多くの研究者に利用されています。私のいくつかの微分方程式に関する研究が評価され2015年度日本数学会賞建部賢弘賞奨励賞を受賞した。


2015年度日本数学会賞建部賢弘賞奨励賞受賞の様子

一見すると抽象的な研究に見えるかもしれませんが、「数学的にどこまで予測が可能か」「どの条件で破綻が起こり得るのか」を明確にすることは、物理学・工学・材料科学・数値解析、さらには人工知能やデータ科学など、さまざまな応用分野において、信頼できるモデル設計や安全なシステム構築につながります。

**作用素論に基づく理論保証付きデータ解析手法の創出**

私の近年の研究は、人工知能や機械学習、ネットワーク科学といった現代のデータ科学が抱える根本問題に対して、作用素論・（非線形）関数解析・微分方程式論を中心とする高度な数学理論を導入し、理論的に信頼性の高い解析枠組みを体系的に構築することを目的としている。データ科学は応用面で大きな成功を収めてきた一方で、理論的保証や数理的整合性の観点からは未解決の課題が数多く残されており、私はこうした本質的課題に真正面から取り組み、段階的かつ着実に理論的解答を提示してきた。




Koopman線形作用素を用いたデータ解析の骨子

私は作用素論を中核に据えた「作用素論的データ解析」という研究枠組みを主導的に展開してきた。非線形力学系の差異を測る計量構成という長年の未解決問題に理論的な解答を与えた[3]のみならず、Koopman 作用素や Perron–Frobenius（PF）作用素の理論を、再生核Hilbert空間（RKHS）またはBanach空間、C*加群、さらに Besov空間や Morrey空間といった精緻な関数空間へと拡張した[4]。特に、再生核Banach空間や C*加群といった豊富な数学的構造を有する枠組みの下で、カーネルデータ解析手法を再構築した[5]。また、RKHS上のPF作用素やカーネル平均埋め込みを用いた異常検知・時系列解析手法を確立することで、単なる理論研究にとどまらず、応用現場で活用可能なレベルの理論保証付きデータ解析基盤の構築に寄与している[6]。

ネットワーク科学に関しては、通常のグラフでは記述できない複雑な関係性を扱うハイパーグラフについても、私は重要な役割を果たしてきた。ハイパーグラフ上の多値（非線形）ラプラシアンを有する熱方程式の一意性といった未解決問題に対し、非線形半群理論を適用して理論的に解決し、それを基盤と

して、コミュニティ検出やクラスタリング、PageRankの一般化、Cheeger 型不等式、さらには Ricci 曲率といったネットワーク解析指標へ発展させる理論枠組みを確立した。これにより、ハイパーグラフの構造解析に数学的厳密性と応用上の有効性を同時に与えることに成功し、関連分野の研究進展にも貢献している[6)]。

ニューラルネットワークについても、私は経験的性能に依存するのではなく、解析学的・関数空間論的視点から理論基盤を与えることを目標に研究を進めている。浅いニューラルネットに対して逆誤差伝搬における大域最適解の存在を証明し、さらに Besov 空間・Triebel–Lizorkin 空間などの高機能な関数空間理論を導入することにより、ニューラルネットが近似可能な関数クラスの構造や表現能力を数学的に明確化した。また、生成モデルとして注目を集める可逆ニューラルネット（Glow など）に関する表現能力・普遍性についても理論的理解を推進しており、ニューラルネットワークを“ブラックボックス”として扱うのではなく、精密な数学対象として解析するための理論基盤を整備している。

これらの成果は、KDD・ICML・NeurIPSといったトップ国際会議、ならびに JMLR・TCS、さらには純粋数学のトップジャーナルである Mathematische Annalen など、国際的に権威のある媒体に多数掲載されており、国内外の研究コミュニティから高い評価を受けている。可逆ニューラルネットワークの万能近似性を明らかにした論文[7)]はNeurIPSにおいてオーラルとして採択された（上位1%程度）。また、これらの研究は国内外の優れた研究者との連携を通じて推進している。

## おわりに

以上のように、私はこれまで、作用素論・解析学に基づくデータ解析と偏微分方程式の研究を両輪として、未解決問題の解決と理論枠組みの構築を進めてきた。今後は、Koopman 作用素が連続スペクトラムをもつ場合の解析手法の確立という、国際的にも未踏の領域に対して取り組み、既に得られている予備成果をさらに一般の非線形力学系へ拡張するとともに、観測データからの推定理論へと結びつけていく。また、異常検知システムや再生核ヒルベルト C*加群理論のデータ解析への応用など、産学連携型の研究も継続的に推進し、その数学的基盤をさらに強化する。さらに、ハイパーグラフ解析やスペクトラルグラフ理論の発展、ニューラルネットワークの理論解析、非線形偏微分方程式の未解決課題など、既に進展の得られている複数の研究テーマについて、次の段階へ進めていく、強固な共同研究体制と明確な研究戦略のもと、今後も、数学の厳密性と応用分野の要請を両立させながら、長期的に意義のある成果を安定的に創出し続け、信頼性の高い数理科学基盤の構築に貢献していきたいと考えている。

## 参考文献

1） 筆者のHP: https://sites.google.com/view/masahiroikedaswebpage/home

2） M. Ikeda and M. Sobajima, Life-span of solutions to semilinear wave equation with time-dependent critical damping for specially localized initial data, Mathematische Annalen, **372**,（3）, 1017―1040.

3） I. Ishikawa, K. Fujii, M. Ikeda, Y. Hashimoto and Y. Kawahara, Metric on nonlinear dynamical systems with Perron-Frobenius operators, Proc. of NeurIPS 2018.

4） M. Ikeda, I. Ishikawa and K. Taniguchi, Boundedness of composition operators on higher order Besov spaces in one dimension, Mathematische Annalen., **388**,（2024）, 4487--4510.

5） Y. Hashimoto, I. Ishikawa, M. Ikeda, F. Komura, T. Katsura and Y. Kawahara, Reproducing kernel Hilbert C*-modules and kernel mean embeddings, Journal of Machine Learning Research **22**,（2021）, 1--56.

6） M. Ikeda, A. Miyauchi, Y. Takai and Y. Yoshida, Finding Cheeger Cuts in Hypergraphs via Heat Equation, Theoretical Computer Science, **930**, 2022, 1--23.

7） T. Teshima, I. Ishikawa, K. Tojo, K. Oono, M. Ikeda and M. Sugiyama, Coupling-based invertible neural networks are universal diffeomorphism approximators, Advances in Neural Information Processing Systems 33, 3362―3373.