

俯瞰報告書「数理科学」総論

(1) 序

時代は演繹から新たな帰納へ向かっているように見える。豊富なデータを処理する能力を獲得し、数学の膨大な蓄積とその上に築かれた最新の数理的方法論により、複雑で混沌とした現実からこれまでは見えなかった関係や法則の記述を可能とし、より深い自然や社会の理解が進んでいる。同時にこれらから新しく演繹すべきことも生まれつつある。この循環を介して、多くの困難な社会問題の解決に寄与し、今後の新たなスマート社会実現に向けて、数理科学はその基盤的多様性の維持、発展を使命としている。

歴史的には紀元前のナイル河の氾濫に対処すべく、測量、暦に端を発する（後の幾何学への発展の基礎となる）計量革命から、17世紀のニュートン力学を代表とする予測革命、そして産業革命、計算機の発明を経て、現在のAI・ネットワーク革命（第4次産業革命）まで、その発展を、数理科学は常に中核的な柱として支えてきた。ミレニアム懸賞問題¹⁾は数学における主要な未解決問題のリストであるが（時系列俯瞰図参照）、現時点で判断できるものに限ってさえ、今後の科学技術と社会へ大きな影響を与えるものも含まれている。

分野を貫く横断性は数学・数理科学に本質的に内在する「抽象性・普遍性・論理性」の通底理念に起因する。それらはあらゆる実験的検証の制約を受けず、感覚世界にも依拠し過ぎず、数学・数理科学が独立して形成されてきたことによる。このことが「信頼性・多様性・解釈性（意味）」をもたらす。さらにこの独立性は数学のもつ不思議な「拡張性」により新たな世界観や概念をもたらし、ウイグナーをして「不合理なまでの有用性」²⁾と言わしめた。数学・数理科学のもつ潜在的ポテンシャルを示す歴史的事例は数多い。例えば計算可能性、電子計算機概念は数学基礎論に端を発し、RSA暗号は素因数分解の困難性を安全性の根拠とする公開鍵暗号であるが、その基盤は整数論、とくに17世紀のフェルマーの小定理に帰する。現代のデジタル社会を支えている基本インフラはこれら極めて抽象的な数学を出発点とする。様々な数理モデリング・シミュレーションは、計算機の発展と共に現実および多様な仮想世界を理解し予測する主要な手段となっている。また量子力学における巨視的スケールでの実在性の破れ³⁾など、日常の常識では想像できない帰結もその抽象性と論理性から導かれる。因果推論、最適化問題は、本質的要因を取り出し、様々な条件下での適切な意思決定に極めて有用である。膨大なデータもほぼすべてベクトル化し線形空間で処理するため、大規模線形計算を始めとする数値計算手法は今後益々必要となり、同時に適切な前処理を含むアルゴリズム開発が必須となる。システム設計はCPS/IoTを始めとする産業横断的システム構築の基礎であり、機械学習の内部構造解明にも寄与する。また複雑データの解釈性においては、グラフ理論等による可視化も有効であ

るが、写像の理解という観点から様々な数理的手法がそのベールをはがしつつある。位相的データ解析のように、これまでの数学研究の古典的財産や埋もれたままであった成果にも全く新たな活躍の場が与えられることも忘れてはならない。その意味では、まだ発掘されていない数理の宝は多い。これらは信頼性、多様性、解釈性、拡張性のごく一例であり、今後各研究領域の連携がさらに進めば、より斬新な成果が生まれると考えられる。数学・数理科学のもう一つの大きな特徴は「有限と無限」、「離散と連続」、「秩序とランダム」を自由に行き来できることである。一旦、無限次元に上げて自由度を得た上で、有効自由度を取り出す、非常に大きな有限離散量を無限で近似し多彩な数理的手法を適用する、意味ある統計量を取り出すためにランダム性（無作為化）を用いる、など多くの実例が各研究領域の項目で示される。

さらに数学的概念は、一旦確立すると元の実体からは離れ、大きな普遍性をもつと同時に明確で軽快な操作性と自由な推論を可能とする道具となる。内在する対称性は群論を生み出し、日常的に使う微積分もそこには無限が隠れているが我々は何ら気にせず、多くの未知の対象に適用できる。漸進的ではなく、質的に非連続な発展をもたらす数学・数理科学の革新性はこの大きな自由度にあると言える。

21世紀後半の数学・数理科学がどのようになるかの予見は難しいが、かつてポール・ヴァレリーが「我々は後退りながら未来に入っていく」⁴⁾と言ったように過去を鄭重に吟味すると同時に新たな流れとの交わりが豊穡な基盤的多様性を形作ると期待される。

（2）数理科学時系列俯瞰図

数理科学の発展に関する俯瞰図（時系列）を図1に示す。横軸が年代、縦軸がおおまかな取り組みの分野とテーマの広がりを表している。図中には、その時期に台頭した数理分野とエポックを示した。数学・数理科学の歴史は長いが、ここではその抽象化が進んだ20世紀中期以降に限定した。ヒルベルトが1900年にパリのICMで提示した23の未解決問題⁵⁾は20世紀の数学・数理科学に大きな足跡を残したが、2000年にクレイ数学研究所によって提出された7つのミレニアム懸賞問題も今後同様な影響を与えると期待される。それらを俯瞰図にエポックとして示した。代数幾何学が楕円曲線暗号のきっかけとなったように、21世紀後半にこれらの中から社会実装される技術が生まれる可能性もある。時系列の始まりである1930年代はゲーデルの不完全性定理により無矛盾な数学体系の危機が訪れたが、そこから計算可能性や電子計算機の原理が生まれたことは注目すべきである。さらに1932年にフォン・ノイマンは「量子力学の数学的基礎」を著したが、そこでは「状態の混合」という概念が明らかにされ、現在の量子情報理論の礎が作られた。この概念は1944年にモルゲンシュテルンとの共同研究⁶⁾で経済学の数学的公理化を行うときに、「混合戦略」という概念を生みだし、その後、社会科学、数理生態学等を含めゲーム理論の発展につながっ

た。

このように数理科学の裾野は現在でも広がりつつあり、かつその中核に数学の発展がある。それらを分離して俯瞰することは困難であるが、ここでは社会との関係を重視し、あえて3つの軸に沿って6つの研究開発領域を示した。

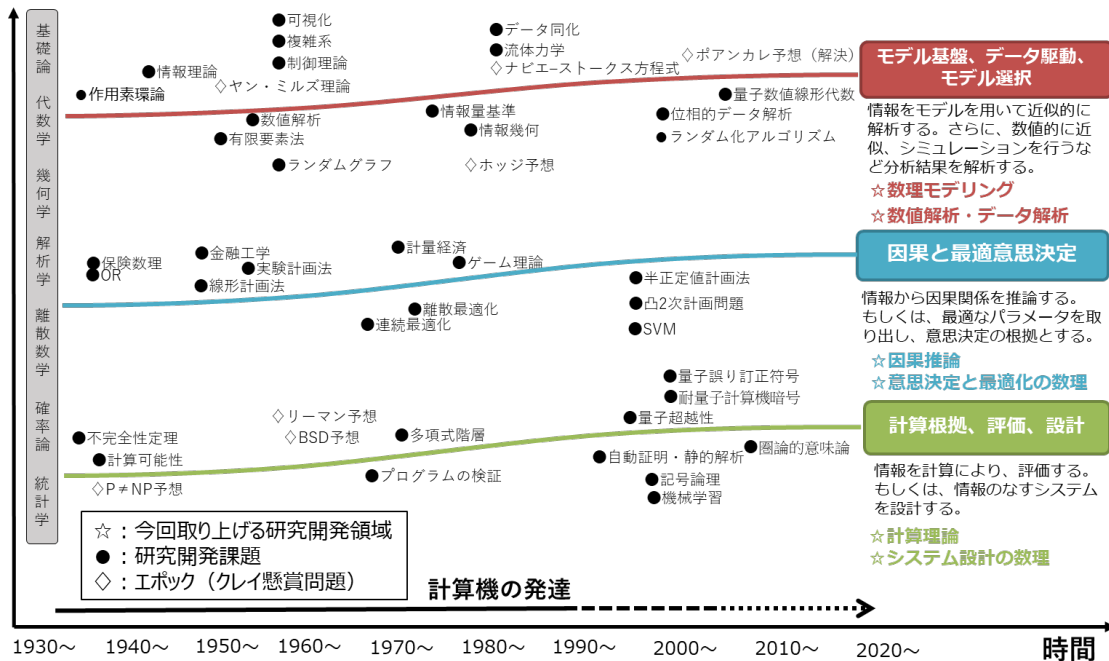


図1 数理科学区分時系列俯瞰図

①「モデル基盤、データ駆動、モデル選択」：モデリングは現実問題を数理の枠組みに載せるために不可欠であり、自然現象、社会現象を問わず理解、記述し、そして予測するための必須の手段である。最近では陽的なモデルを経由せず、データから縮約された有効モードを取り出す DMDやSINDy、さらにクープマン作用素理論を用いた手法など様々な技法⁷⁾が編み出されているが、その検証においては、古典的モデルの結果との整合性が不可欠と考えられる。得られたモデルをどう解くか、とくにその近似解法は離散と連続をつなぐ要であり、有限要素法を始めとする多彩な数値解析手法が開発され、より一般的な科学計算の信頼性に寄与している。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、ウラムやフォン・ノイマンらにより核分裂物質中の中性子の拡散の様子を知るために開発されたが、1990年代に金融工学におけるオプション価格の計算で広く使われ始めた。現在では計算機の発達と共に応用範囲は大きく広がり、複雑で計算量が莫大となる問題に対し、確率的ゲームとして標準的な道具の一つとなっている。また数値計算代数では、ランダム化アルゴリズムの開発が注目され、決定論的アルゴリズムの欠点を補うと同時に、計算効率にも寄与している。また関係性を理解する上でネットワーク解析技術の発展も著しい。通信・交通・電力・遺伝子制御など現代は多様な web の時

代であり、その構造理解、動的制御において不可欠な手法となっている⁸⁾。データ駆動型の推論技術としては、画像解析や自然言語処理で目覚ましい成果を挙げってきた深層学習の発展が著しいが、医療などへの応用においては、その解釈性向上が信頼性を増す上でも不可欠となる。これらデータ解析の前段階として解決せねばならない高いバリアとしてノイズ問題がある。現実のデータは多くのノイズを含み、そこに埋もれた知識を抽出する必要があり、それらノイズの蓄積は「次元の呪い」という統計的な問題を生み出す。これに対しても高次元統計学における固有値収束定理や特異値分解を応用して、非本質的なノイズ削減の数理的手法が最近開発された。これは既に稀少細胞腫の発見や低発現遺伝子機能の解明に貢献している⁹⁾。この分野は日進月歩であり、数学・数理科学からのさらなる貢献が今後期待される。

②「因果と最適意思決定」：現実の諸問題の多くは様々な制約下での最適化問題として定式化されるが、その端緒は1947年にダンツイックによって創始された線形計画法である。それは多面体上で線形関数を最大・最小化するものであり、連続最適化問題と離散（組合わせ）最適化問題がある。ここでは凸性、双対性などの概念が重要な役割を果たした。1970年代から計算複雑度¹⁰⁾の観点から離散的最適化問題は多項式時間解法が存在するかどうかを検討され、P対NP問題と関連づけられ、内点法が開発された。これにより半正定値計画問題など新たな最適化問題が解けることとなり、同時に連続最適化への応用も広がった。グラフ上の最適化問題を抽象化した「離散凸解析」¹¹⁾という枠組みでのマトロイド、劣モジュラ関数の研究、また乱数を用いる乱択アルゴリズムや整数計画問題における分岐切除法など、多彩な手法が開発され大きく発展した。これによりNP困難な大規模巡回セールスマン問題なども解ける範囲が大幅に広がった。これらの分野での日本の貢献は顕著であり、21世紀に入り機械学習やゲーム理論との協働も進み、社会的要請も大きく、今後の発展が期待される。

相関と因果は異なる概念であるが、無関係でもない。現実の利害が複雑に絡む実社会のデザインにおいて、説得力をもち、かつ公平性を担保できる因果推定の数理的手法を提示できるかは重要な課題である。ワクチンの有効性、最低賃金と雇用の問題など、疫学や経済の諸問題は多くの要素が絡み、その意思決定支援は容易ではない。ここに抽象性・普遍性・論理性に基盤をおく因果推論の手法は大きな力を発揮する。集団レベルでの因果効果を調べるために反事実モデルという考え方を導入し、その数理的枠組みとしては、潜在反応モデル、構造的因果モデルなどがある。無作為化というランダムネスの考え方がここでもその背後にある。交絡因子など標本選択バイアスを取り除き、偏りなく推定できるかどうかを数学的に明らかにすることが因果推論においては重要である。歴史的には1920年代から始まり、その成果はチューリング賞¹²⁾、ノーベル経済学賞¹³⁾の対象にもなり、実験室とは異なる「自然実験」という枠組みで、疫学、経済学や社会科学など多くの分野でそ

の有効性は発揮されている。今後はより広く21世紀の社会デザインにおいても貢献できると期待される。

③「計算根拠、評価、設計」：公開鍵暗号の安全性（多項式時間計算可能性）やP対NP問題にも関わる計算理論は数学基礎論の分野から1930年代に生まれてきた。近年では量子超越性、耐量子計算機暗号、量子誤り訂正符号にも深く関わる。現代確率論は確率概念を公理的に扱う代償として「ランダム」が何であるかには答えない。そのためデータ圧縮可能性に基づく情報量（コルゴモロフ複雑性）によりランダムか否かを判定する。計算可能性理論における計算論的ランダム性の理論と計算可能解析学の発展は著しい。計算可能解析学では、特に実数などの計算可能性が問題となる。「連続的なデータ構造をどうコンピュータで（近似的に）取り扱うか」「どのような数学的対象ならば（数学的構造を崩さずに）デジタルの世界にコード可能か」などが応用上も重要となる。ここに圏論のような抽象数学が有用となる。その下地として直観主義論理に基づく構成的数学があり、グロタンディークらの導入したトポスの概念¹⁴⁾を用いれば、計算可能解析学はトポス内部の解析学として整備できる。計算問題の複雑度の概念もトポス理論と様相概念を用いて解決できるという期待が高まっている。さらに耐量子暗号理論では乱数発生やハッシュ関数の構成への応用を見込んだ拡散性が高いエクスペンダーグラフ¹⁵⁾が注目されている。所謂ラマヌジャングラフはその中で特に重要であるが、これはそのグラフゼータ関数がリーマン予想（本来のリーマン予想は、ミレニアム懸賞問題）を満たすことに由来する。

（3）数理科学構造俯瞰図

数理科学を2つのレイヤーに分けて、6つの研究開発領域を配置したのが、図2の構造俯瞰図である。ここでは数理科学を便宜上2つの階層：（純粹）数学及び統計学から成る数理基盤、社会実装まで視野におく数理科学（・数理工学）と分けているが、その実体はすべてを含めた総体として広く捉えるべきものである。既に時系列俯瞰図で述べたように、当初、極めて抽象的な新概念の発見がその後の社会に大きな変革をもたらす例が数学・数理科学では稀ではない。新たな社会のデザインにふさわしい記述言語や概念なくしては、実応用もないのであるが、それは既に数学・数理科学の宝箱に潜んでいる可能性も高い。その意味で6つの研究領域の横の連携と共に数理基盤と数理科学（・数理工学）の縦の知の交流も不可欠である。以下ではその縦のつながりとして、時系列俯瞰図「モデル基盤、データ駆動、モデル選択」に現れたいくつかのキーワードを例にして示す。

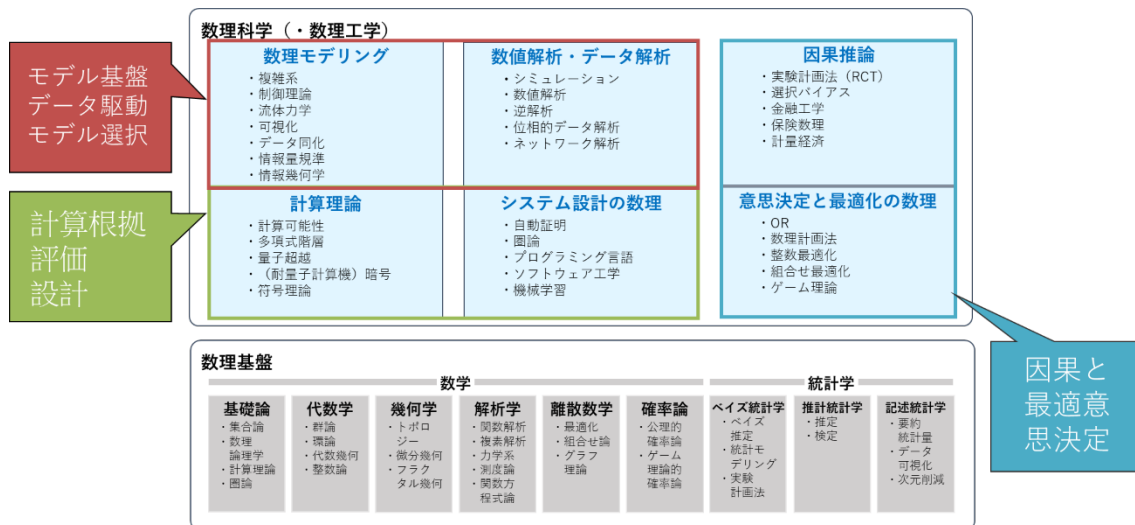


図2 数理科学区分構造俯瞰図

【情報幾何】：統計的推論の微分幾何学といえる。インドの統計学者 ラオは1945年、23歳の時に書いた論文で、確率分布族の族を幾何学的な図形とみて、そこにフィッシャー情報行列に基づくリーマン計量の導入を示唆したことが端緒となった。情報を離散的なものとするのではなく、つながった連続的な多様体としてその構造を解析することで統計学、情報理論の分野に新たな方法論を提供した¹⁶⁾。リーマン計量とアフィン双対接続という幾何構造が導入されることにより、確率分布の族は双対平坦という性質をもつ。検定の高次理論など解析的には苦勞する諸問題に、この方法論は見通しのよい幾何学的展望と解決を与えた。この分野での日本の貢献は大きく、その数学的深化と同時に時系列、システム制御、最適化理論、統計物理など異分野をつなぐ幾何的の共通言語として発展している¹⁷⁾。最近ではカーネル法を始めとする様々な機械学習アルゴリズムの統一的理解にも寄与している。

【位相的データ解析】：古典的な位相幾何学の基礎概念であるホモロジーは穴の概念の拡張であるが、そこから形や大きさも含めた情報をデータから取り出す手法としてパーシステントホモロジーが生まれた。この出力集合に最適輸送¹⁸⁾¹⁹⁾で開発されたワッサースタイン距離を入れることにより、そのロバストネスなど多くの有用な数学的結果が得られると同時に、医療等を含む幅広い応用への道が開けた。最近では時間方向も含めた拡張も試みられており、そこではクイバー (多元環) の表現論が重要となる。この位相的データ解析は材料科学におけるアモルファスとランダムの違いを明確にし、最近の生命科学への応用も目覚ましい。また流体の渦構造の解明にもトポロジーが有用であり、気象から医療までその応用は広がりつつある。

【複雑系・データ同化】：複雑な時系列データをどのように解釈するかはポワソンの「解かずして解く」という力学系の定性的理論が大きな発想の転換となった。ガロアによる群論の創始と同様、数学がなすパラダイムシフトである。陽的な解を経ずして様々な漸近的挙動の解明に貢献しただけでなく、後のカオス、フラクタルの萌芽となった。近年は実験や観測から極めて短時間に膨大なデータが取得できるようになってきた。それらを用いて予測や制御に役立てることは、分野を問わず重要となっている。一方で気象学や生態学において、1960年代から大幅に次元縮約されたモデル方程式、具体的にはローレンツ方程式やロジスティック写像などが研究され、そこに内在する（決定論的）カオスと呼ばれる構造が明らかになってきた。その初期値への鋭敏性から現象の中・長期予測は難しいのではなく、原理的に不可能となった。その乖離を埋めるために、例えば気象予測においては、観測データを適切に用いて、次々と良い初期値を時間発展の中で選択し、現実的に意味のある予測を可能とするのがデータ同化手法である。アンサンブルカルマンフィルター法など、多様な手法が開発されている。これにより基本法則であるナビエ・ストークス方程式を主軸とする気象モデルに内在するカオスの性質を克服し、計算機の飛躍的發展と共にその精度を高めることにより、集中豪雨予測等にも貢献できるようになった²⁰⁾。

一方、基本法則が知られていない、あるいは不完全な場合には、埋め込み写像など力学系理論の道具が極めて有用となる。与えられた時系列から逆問題を解くことにより隠された法則の発見をもたらす。それらの情報は短期の精密予測に用いることができる。最近では、時系列解析もリザバー計算法のように機械学習の枠組みでの発展も著しい。気候変動、砂漠化問題、疾病予測などカタストロフ的な兆候の予測は極めて困難な課題であるが、ティッピングポイント、レジリエンスなど力学系の諸概念が説明原理に役立つ²¹⁾。それらがデータ解析と組み合わせられ数学的にも信頼性のある定量的予測手法として今後は発展していくであろう。現在我々の生存の基盤である地球システムに与えるヒトの影響は無視できない形で進行している。短期の気象予測、次世代に大きな影響を与える気候崩壊など広義の環境変動予測、また我々自身に関わる疾病予測、人口問題、エネルギー・水・食料問題、さらに脳科学等を含む複雑系を包括的に理解し、生存維持に役立てるために、今後も数理科学の基盤的多様性が不可欠となる。

（４）終わりに。

実体よりも関係性が重要となり、また社会のグローバル化に伴い、個の役割が見えにくくなってきている。しかし個と社会の関係は、絶えず相互作用し、作り作られていく関係であり、現象学的社会学でいうところの「再帰性」あるいは「反映性」というものに近い。つまり内発的に個が変わることで、社会全体が大きく変化する可能性を示唆している。換言すれば、関係性の理解が個に対する理解を深める手立てにもなる。上に述べたように、我々が直面している多くの課題は緊急性が高いが、それらは互いに密接に関係し

ており、個別の技術開発は必須としても、それらのみでは限界があり、個のレベルでのマインドセットの有りようが問われる。その際の指針の一つとして、本俯瞰報告書で述べられる数理科学の考え方や視点は示唆的である。個レベルでは認識しにくい広い時空間での波及効果を知るには、包括的な数理モデルが有用であり、統計的に有意な示唆を与え、行動変容に寄与できる。2019年から続く COVID-19はまだ終焉していないが、科学的知見に基づく行動と望ましい倫理的姿勢について多くの教訓を得た。疾病予測のみならず、気候変動、生物多様性からエネルギー、食料問題などのグローバル課題、さらには投票などの社会制度や様々なプライシング方式まで数理科学の果たしうる役割は多面的である。その有用性のポテンシャルは大きい、同時に限界もある。社会科学、人文科学の知見も合わせ、今後さらに議論を深めていく必要がある。

5. 参考文献

1) ミレニアム懸賞問題

<https://www.claymath.org/millennium-problems>

2) Eugene Wigner, THE UNREASONABLE EFFECTIVENESS OF MATHEMATICS IN THE NATURAL SCIENCES, Communications in Pure and Applied Mathematics, Vol. 13, No. I (1960). PDF は以下にもある.

<https://www.maths.ed.ac.uk/~v1ranick/papers/wigner.pdf>

3) 量子力学における巨視的実在性の破れ

<https://group.ntt.jp/newsrelease/2016/11/04/161104a.html>

4) ポール・ヴァレリー: 『精神の危機 他十五篇』岩波文庫 (page 156), 『精神の政治学』中公文庫 (page 65)など.

5) 「ヒルベルト23の問題」, 杉浦光夫編, 1997年, 日本評論社

6) John von Neuman and Oskar Morgenstern, *Theory of Games and Economic Behavior* (3rd ed.), Princeton, New Jersey: Princeton University Press (1953) [1944]

7) Steven L. Brunton and J. Nathan Kutz, *Data-driven Science and Engineering -Machine Learning, Dynamical Systems and Control*, Cambridge University Press (2019).

- 8) Network Science by Albert-László Barabási:
<http://networksciencebook.com/>
- 9) Y Imoto, T Nakamura, E G Escobar, M Yoshiwaki, Y Kojima, Y Yabuta, Y Katou, T Yamamoto, Y Hiraoka, M Saitou,
Resolution of the curse of dimensionality in single-cell RNA sequencing data analysis,
Life Science Alliance, Vol. 5 (12), e202201591, DOI: 10.26508/lisa.202201591 (2022)
- 1 0) Sanjeev Arora and Boaz Barak, *Computational Complexity: A Modern Approach*,
Cambridge University Press (2009)
- 1 1) K. Murota: Discrete convex analysis, *Mathematical Programming*, 83 (1998), 313-371.
- 1 2) Judea Pearl: ACM A.M. Turing Award
<https://www.acm.org/media-center/2012/march/judea-pearl-wins-acm-a.m.-turing-award-for-contributions-that-transformed-artificial-intelligence>
- 1 3) David Card: 2021年度ノーベル経済学賞
<https://www.nobelprize.org/uploads/2021/10/press-economicsciencesprize2021-2.pdf>
- 1 4) グロタンディークのトポス：
Olivia Caramello, *Theories, Sites, Toposes*, Oxford University Press (2017)
- 1 5) エクスパンダーグラフ：
SHLOMO HOORY, NATHAN LINIAL, AND AVI WIGDERSON, EXPANDER GRAPHS AND THEIR APPLICATIONS, BULLETIN (New Series) OF THE AMERICAN MATHEMATICAL SOCIETY, Volume 43, Number 4, 2006.
- 1 6) S. Amari, *Differential-Geometrical Methods in Statistics*, Lecture Notes in Statistics , Vol.28, Springer (1985).
- 1 7) 甘利俊一, 情報幾何学の新展開 新版 (SGC ライブラリ)、サイエンス社 (2019)
- 1 8) Villani, Cedric, *Topics in optimal transportation*. No. 58. American Mathematical Soc. (2003)

1 9) Kolouri, Soheil, et al. Optimal Mass Transport: Signal processing and machine-learning applications. IEEE Signal Processing Magazine 34,4, 43-59 (2017)

2 0) 三好建正, 「富岳」を使ったゲリラ豪雨予報:

<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20210713/pdf/20210713.pdf>

2 1) P. Ashwin, S. Wieczorek, R. Vitolo, and P. Cox, Tipping points in open systems: bifurcation, noise-induced and rate-dependent examples in the climate system, Phil. Trans. R. Soc. A 370, 1166–1184, doi:10.1098/rsta.2011.0306 (2012)