

微分計算科学の理論・応用・展開

Derivative Computational Science – Theory, Application, and Future -

■ アブストラクト ■

講演者：井元 佑介（京都大学高等研究院）

講演タイトル：超双対数に基づく微分計算の理論・応用・展開

アブストラクト：超双対数（Hyper-dual number, HDN）は複数の冪零数を用いて表現される数であり，その代数的性質を利用することで，関数の微分の数値計算に応用することができる。本講演では，超双対数の代数的性質や超双対数空間における関数の拡張作用素の性質、行列表現などの理論的側面と，超双対数に基づく固有値微分法による超弾塑性材料モデルへの応用研究について紹介する。さらに，未解決問題や今後の展望についても議論する。

【招待講演】

講演者：松原成志朗（名古屋大学大学院工学研究科機械システム工学専攻）

共著者：山中耀介（東北大学），韓霽珂（東北大学），寺田賢二郎（東北大学）

講演タイトル：増分ポテンシャル法による非弾性固体材料の有限要素解析

アブストラクト：近年，非弾性固体材料の有限要素解析手法として増分ポテンシャル法が注目されている。増分ポテンシャル法は，最小ポテンシャルエネルギーの原理を基軸とした理論体系を持ち，非弾性材料構成則を含めたすべての支配方程式を2種のポテンシャル関数によって記述することが可能である。本講演では，最大塑性散逸の原理を出発点として本手法を概説するとともに，超双対数を用いた高階微分近似法との親和性についても述べる。

【招待講演】

講演者氏名：出口翔大（九州大学工学府土木工学専攻）

共著者：浅井光輝（九州大学工学研究院社会基盤部門）

講演タイトル：自動微分を用いたニューラルネットワーク PINN による未知パラメータの逆解析

アブストラクト：様々な機械学習手法が台頭する中で，ニューラルネットワークが広く注目されている。誤差逆伝播法（後退型の自動微分）に基づいて誤差勾配の算出・学習を行うニューラルネットワークに対して，同様に自動微分を利用して支配方程式（質量・運動量の保存則）との整合性を評価・学習する深層学習モデル PINN (Physics-Informed Neural Network) が発展し始めている。本講演では，PINN を用いて境界値問題を教師データ無しで解く例や，限定的な教師データの下で未知パラメータを逆解析する例を紹介する。

【招待講演】

講演者：久保田 光一（中央大学理工学部）

講演タイトル：アルゴリズム微分・自動微分

アブストラクト：自動微分は 1960 年代から既に実装例が提案されているが，最近ではアルゴリズム微分と呼ばれることが多くなってきた微分係数を計算する手法である．これには大きく forward と reverse という 2 種類の計算法がある．どちらも多くの研究者により同時多発的に同様の手法を色々な文脈で提案されてきた．1991 年に自動微分に関する国際会議が開催されて以降，多種多様な実装が提案されてきているが，ここでは自動微分に至る文脈の簡単な紹介と，それに関連して forward/reverse による高階微分計算等のための単純な実装といくつかの応用例を紹介する．