



NTT DATA
Trusted Global Innovator

数理学のいまとこれから

2023年 11 月 22 日

シミュレーション&マイニング部 伊藤 孝太郎

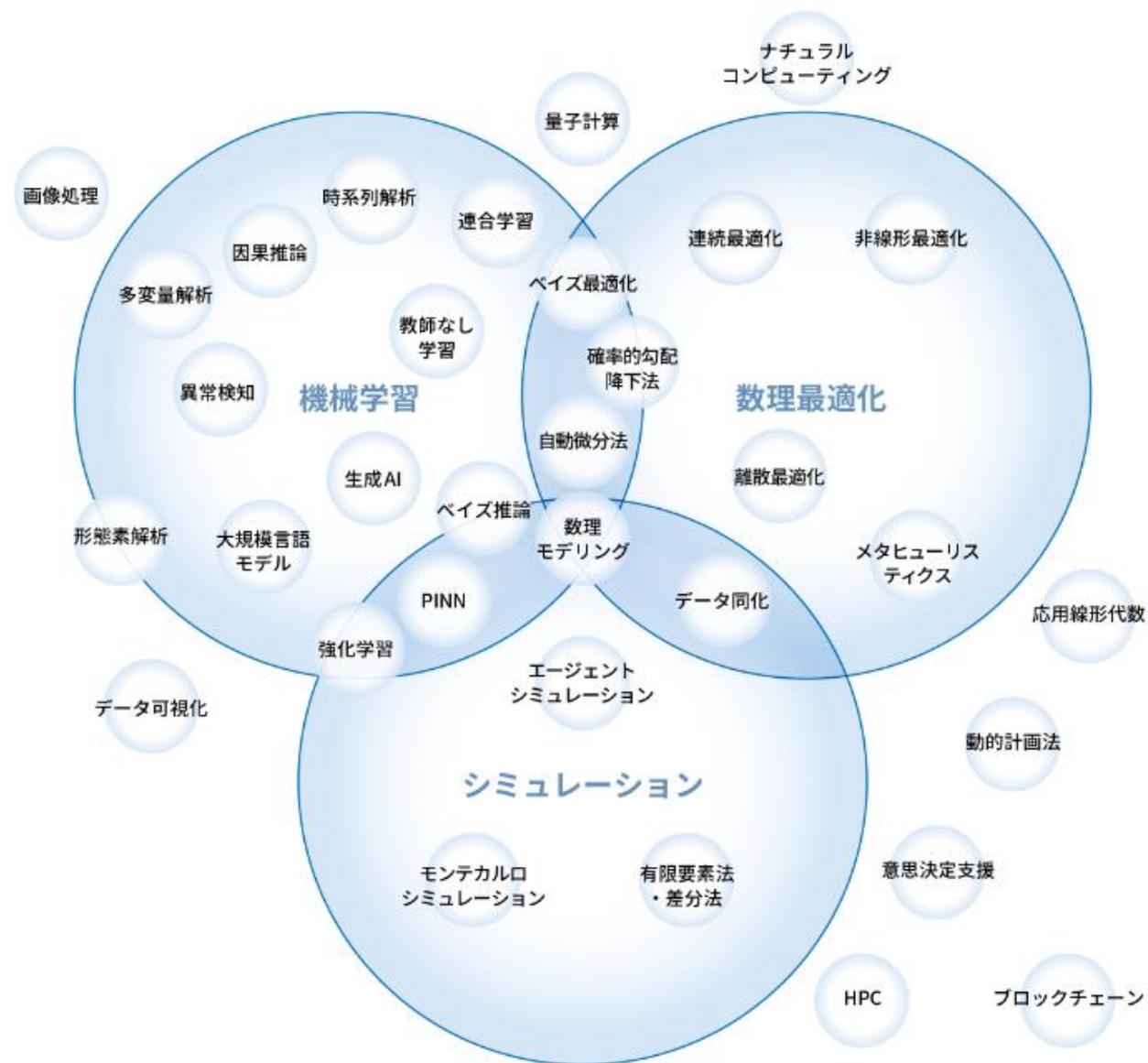
- 機械学習と数理最適化とシミュレーション
- 大規模言語モデルの波
- 数理科学の今(技術編)
- 数理科学の今(ビジネス編)
- 数理科学とビジネスのこれから

本日講演でわかること

- ✓ 機械学習、数理最適化、シミュレーション それぞれ得意領域があり適切に組み合わせる必要がある。1章
- ✓ 僕たちの仕事は、技術と課題・やりたいことを結びつけることである。1章
- ✓ 機械学習、数理最適化、シミュレーション の境界領域で注目されている技術トピック 2, 3章
- ✓ 機械学習、数理最適化、シミュレーション を組み合わせて課題解決した事例と日本の数理科学ビジネスの状況 4章
- ✓ LLMの発展にともなう、他の数理科学技術のビジネス応用の方向性。我々の役割の変化 5章

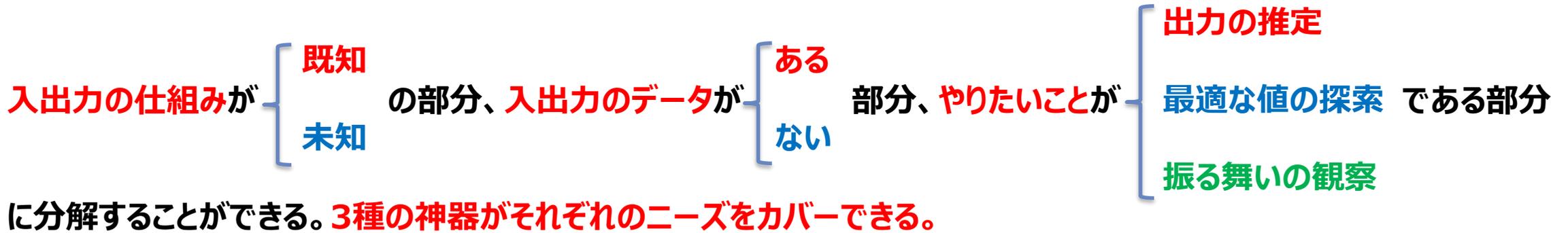
機械学習と数理最適化とシミュレーション

3種の神器：数理システムの技術アセット

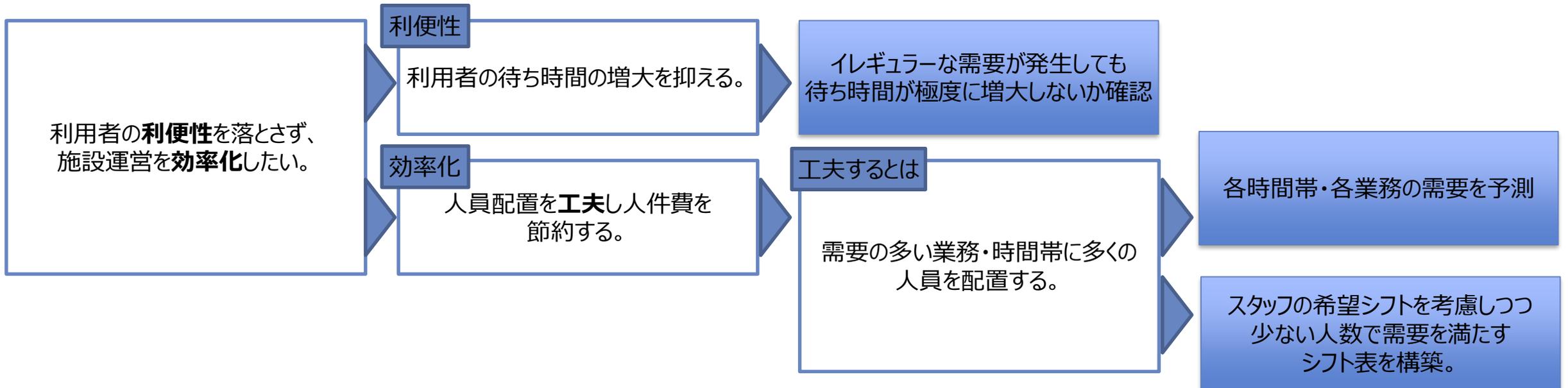


なぜ3種の神器が：3種の神器を組み合わせる

✓ 多くのビジネス課題は、課題を細かく分析すると、

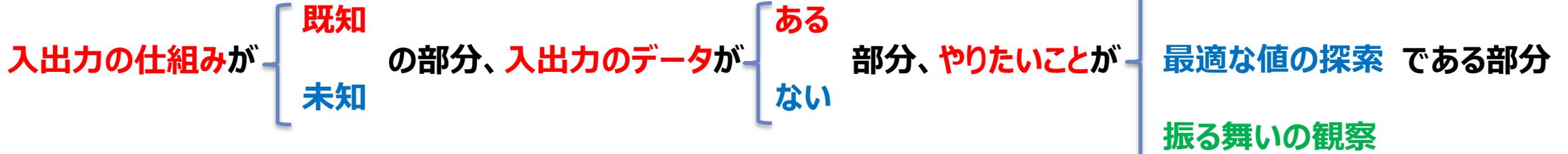


✓ 課題例：行政施設の効率化



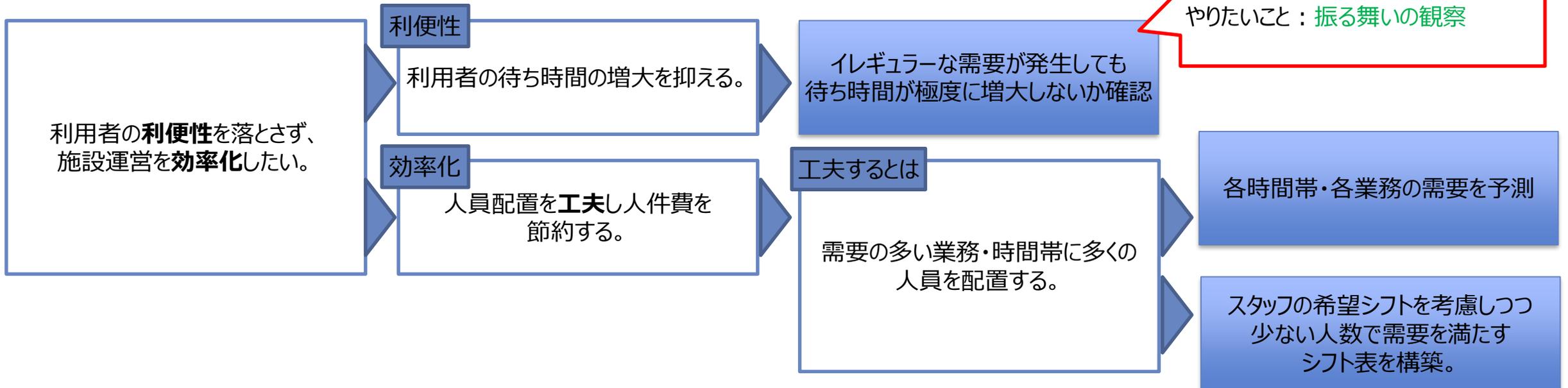
なぜ3種の神器が：3種の神器を組み合わせる

✓ 多くのビジネス課題は、課題を細かく分析すると、



に分解することができる。3種の神器がそれぞれのニーズをカバーできる。

✓ 課題例：行政施設の効率化



なぜ3種の神器か：3種の神器の比較

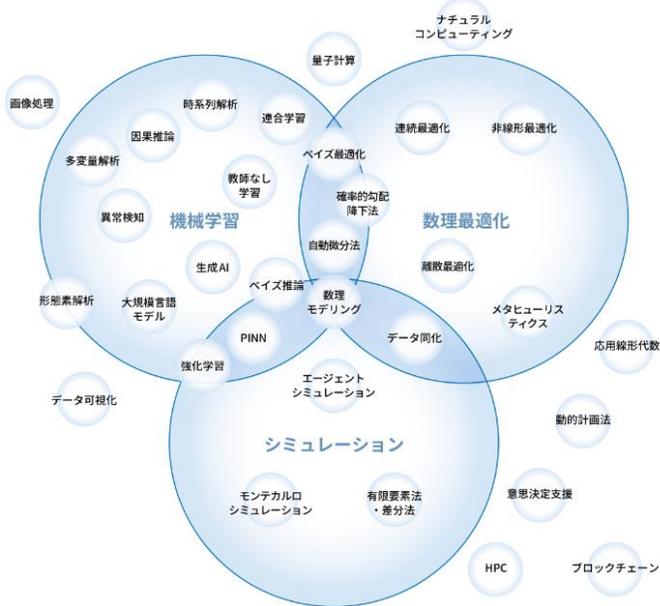
✓ 機械学習、数理最適化、シミュレーションの「おおざっぱな」比較。

	モデル	(過去の)入出力の組	やりたいこと	苦手なこと	例
機械学習	システムの入力と出力の関係 未知	システムの入力と出力の関係が たくさん存在。	データから 入力と出力の関係を学習・推定 する。	全く知らない入力に対する出力の推定	教師あり学習 需要予測 感情推定 etc.
数理最適化	変数と目的関数の関係 既知	なし	目的関数をできるだけ良くする 変数の組み合わせ・値 を探す。	モデル内の不確定要素 の決定。	連続最適化 組み合わせ最適化 etc.
シミュレーション	システムの入力と出力の関係 (入力が出力へと変化する法則) 既知	なし	さまざまな入力に対して出力の 振る舞いを観察 する。	モデル内の不確定要素 の決定。	微分方程式 人流シミュレーション etc.

3種の神器と我々の役割

✓ 我々の役割は、技術を課題を適切にマッチングすること。

技術



最新技術の調査検討。

GUIを利用したツールの構築。

適切な技術の選択、組み合わせの設計。

実際のソリューションの実装。

我々の役割

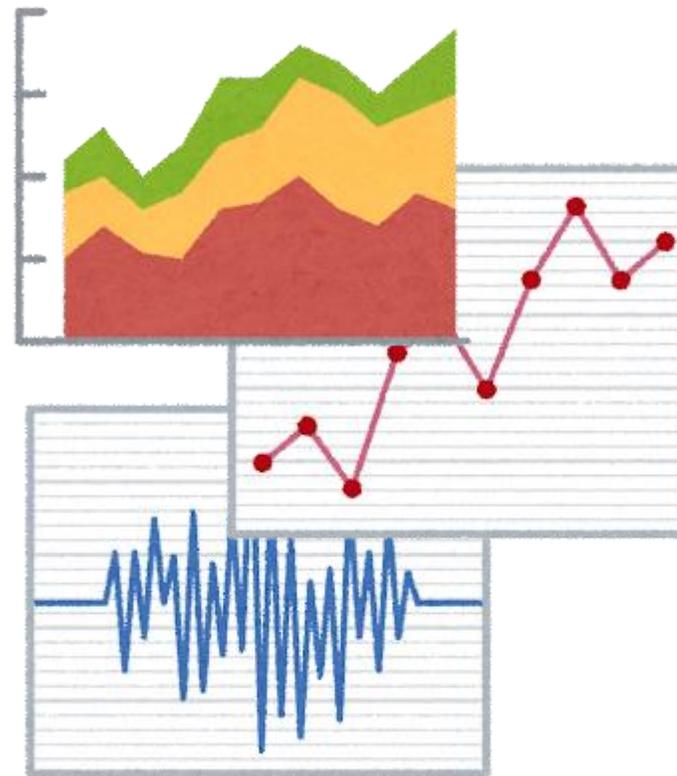
技術と課題のマッチング

課題のヒアリング。

課題の定式化。

解きたい問題を解ける問題へ。

課題・やりたいこと



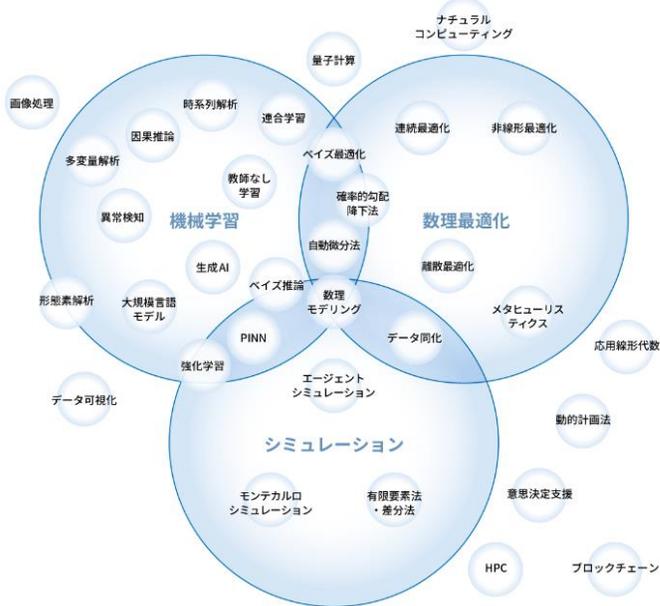
よりわかりやすく、より使いやすく

より緻密に、より細かく

3種の神器と我々の役割

✓ 我々の役割は、技術を課題を適切にマッチングすること。

技術



最新技術の調査検討。

GUIを利用したツールの構築。

適切な技術の選択、組み合わせの設計。

実際のソリューションの実装。

皆様の
役割

我々の
役割

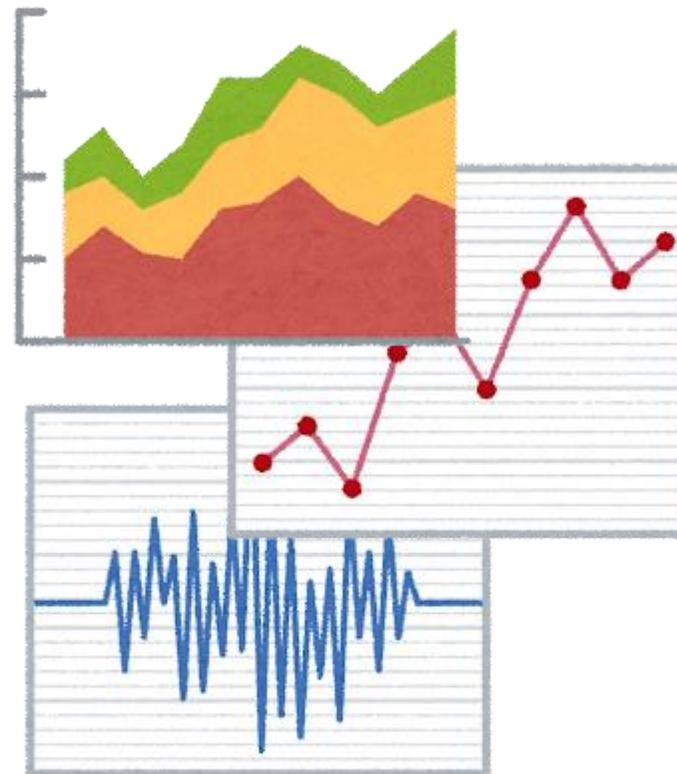
技術と
課題の
マッチング

課題のヒアリング。

課題の定式化。

解きたい問題を解ける問題へ。

課題・やりたいこと

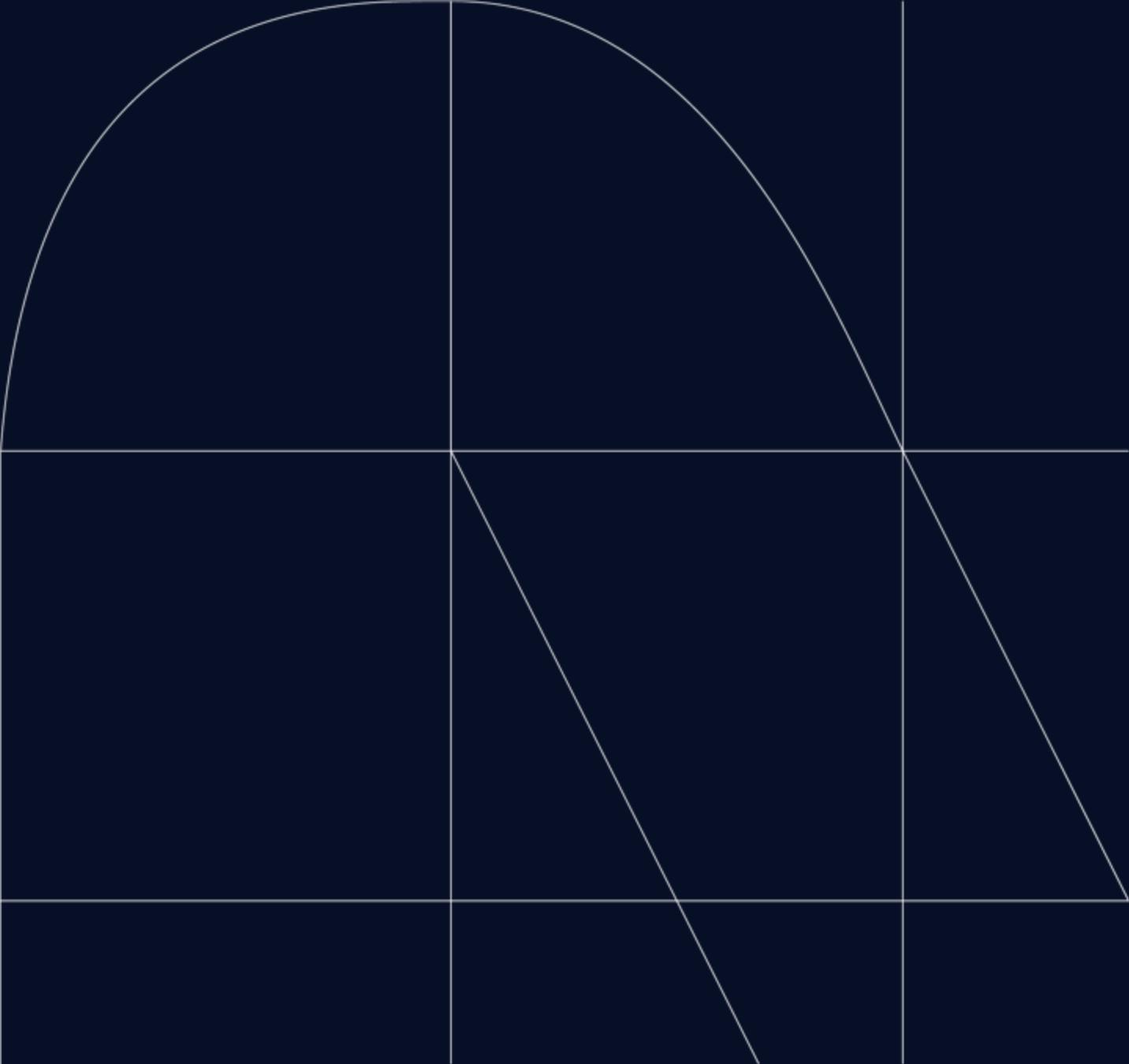


よりわかりやすく、より使いやすく

より緻密に、より細かく

02

大規模言語モデルの波



ChatGPT 4 ▾



You

大規模言語モデルとは何でしょうか。簡単に教えてください。



ChatGPT

大規模言語モデルは、膨大なテキストデータから言語のパターンを学習する人工知能の一種です。これらのモデルは、文章の生成、要約、翻訳、質問への回答など、多くの言語関連タスクを行うことができます。例えば、私自身がその一例で、OpenAIによって開発されたGPT-4という大規模言語モデルです。



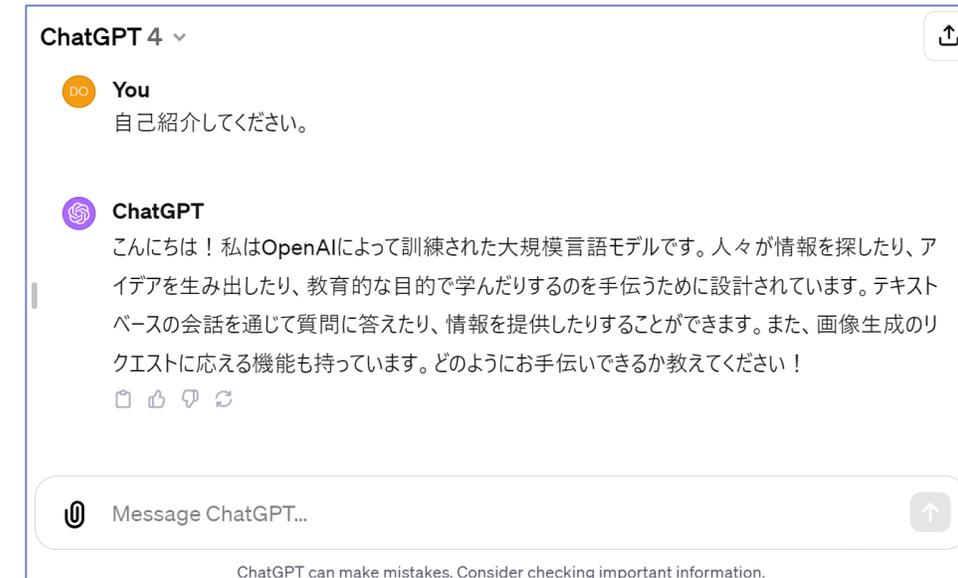
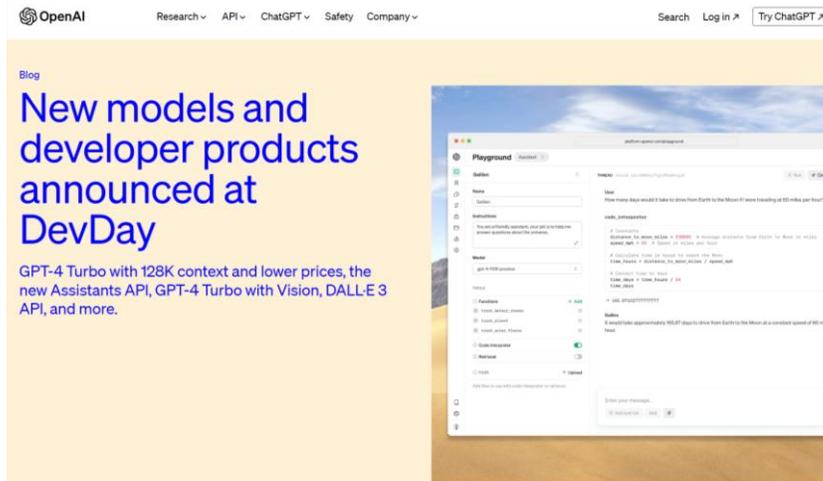
Message ChatGPT...



ChatGPT can make mistakes. Consider checking important information.

ChatGPTの台頭

- 2022/11/30にOpenAIが公開。公開から1週間で100万ユーザー、2か月で1億ユーザーに到達。高すぎる性能から大きな話題に。
- 2023年3月にはGPT-4が登場。さらに高性能化。画像もインプット可能に。
- 2023/11/6には GPT-4 Turbo が登場。より長文に対応し、2023年4月までの情報を学習、etc.



■ 安全な対話能力

LLMは基本的に、インターネットから収集した大量のテキストデータに基づいて訓練されるが、良くない表現まで学び取ってしまう。ChatGPTでは、さらに「チャットボットとして人間がより好む応答」の情報を人がフィードバック（RLHFと呼ばれる）。不適切な言葉遣いや偏見を含む回答が減り、実用性が向上した。

GPTs

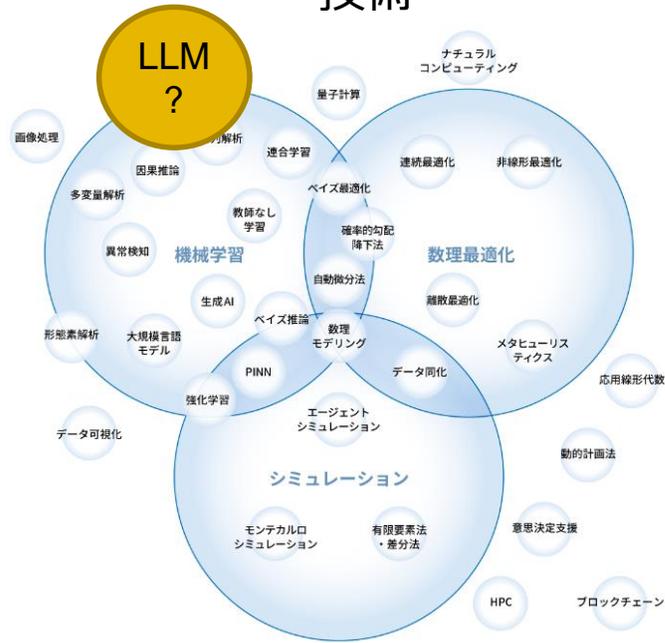
- 外部テキストやAPIと組み合わせて、それぞれ自由なカスタムChatGPTを作る機能。
⇒ アイデア次第で様々な応用が可能。

The image displays a grid of nine custom GPT cards, each with a unique icon and a brief description of its function. The cards are arranged in a 3x3 grid on a dark green background.

- Chef's Assistant:** Icon of a chef's hat and whisk. Description: "I can help you with recipes and ingredients you need." (partially visible)
- Creative Writing Coach:** Icon of a fountain pen. Description: "I'm excited to read your work and give you feedback to improve your skills."
- Laundry Buddy:** Icon of a washing machine. Description: "Ask me anything about stains, settings, sorting and everything laundry."
- Game Time:** Icon of a die. Description: "I can quickly explain board games or card games to players of any skill level. Let the games begin!"
- Tech Advisor:** Icon of a horse wearing a headset. Description: "From setting up a printer to troubleshooting a device, I'm here to help you step-by-step."
- Math Tutor:** Icon of a calculator. Description: "I can help kids with math. Just enter the problem and I'll help you." (partially visible)
- Sticker Whiz:** Icon of a wizard. Description: "I'll help turn your wildest dreams into die-cut stickers, shipped to your door."
- The Negotiator:** Icon of a person in a suit. Description: "I'll help you advocate for yourself and get better outcomes. Become a great negotiator."

LLMの役割

技術

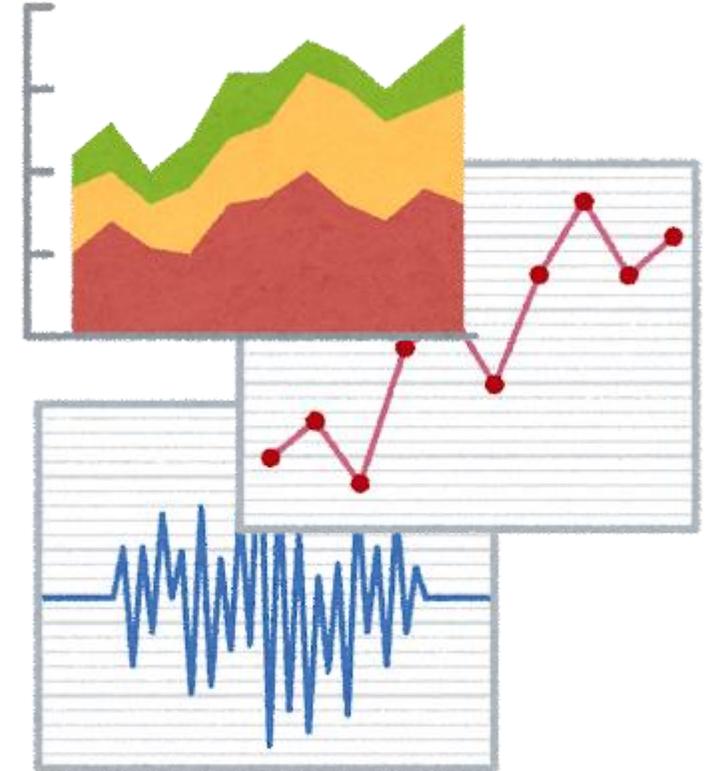


最新技術の調査検討。
GUIを利用したツールの構築。
適切な技術の選択、組み合わせの設計。
実際のソリューションの実装。

我々の役割
技術と課題のマッチング

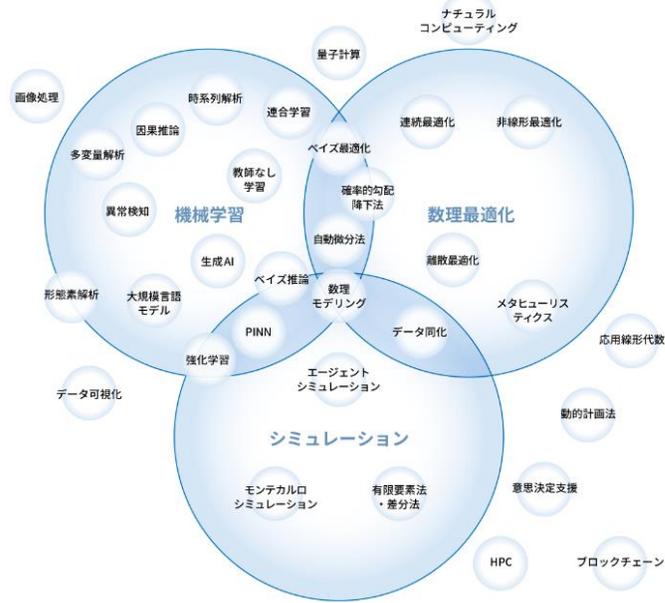
課題のヒアリング。
課題の定式化。
解きたい問題を解ける問題へ。

課題・やりたいこと



LLMの役割

技術



最新技術の調査検討。

GUIを利用したツールの構築。

適切な技術の選択、組み合わせの設計。

実際のソリューションの実装。

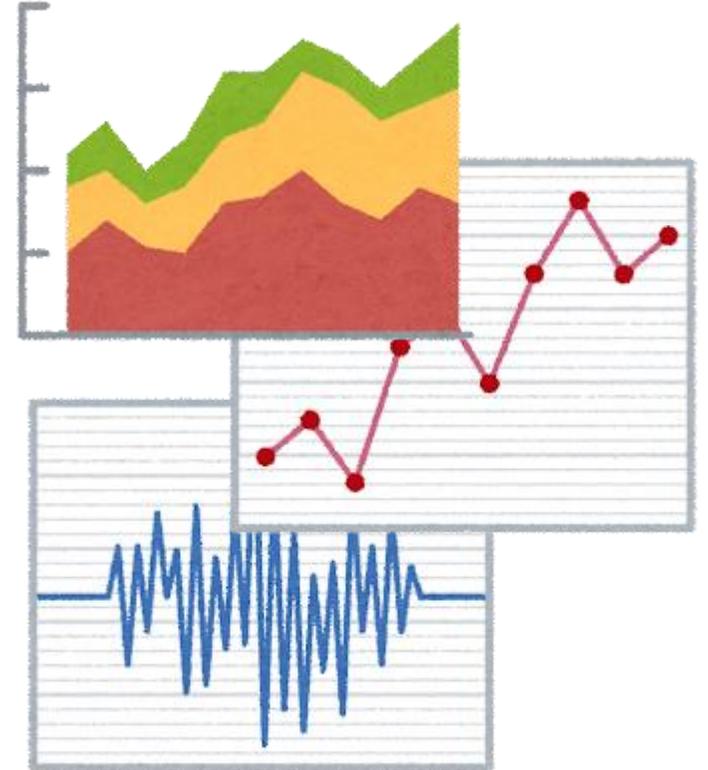
LLM?

課題のヒアリング。

課題の定式化。

解きたい問題を解ける問題へ。

課題・やりたいこと



LLMの役割

✓ LLMは技術と課題をつなぐ役割も担い得る。

技術

ナチュラ
ルコンピュー
ティング

You
行政施設の毎業務毎の来場者数のデータを利用して、日時や天気から来場者数を予測する機械学習モデルを構築するコードを教えてください。

ChatGPT
機械学習モデルを構築するためのコードは、多くの要因に依存します。以下に、基本的なステップとPythonコードの例を示します。この例では、簡単な線形回帰モデルを使用します。データの性質によっては、より複雑なモデルが必要かもしれません。また、データの前処理や特徴量エンジニアリングも重要です。

```
python Copy code

# 必要なライブラリのインポート
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
from sklearn.compose import ColumnTransformer
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.impute import SimpleImputer

# データの読み込み
# ここでは、CSVファイルを仮定します。実際のデータ形式に合わせて変更してください。
data = pd.read_csv('your_data.csv')

# データの確認
print(data.head())

# 特徴量と目的変数の選択
```

LLM?

課題・やりたいこと

You
機械学習、数理最適化やシミュレーションを利用して、行政施設の業務の効率化を図りたいのですが何かアイデアはありますか？

ChatGPT
行政施設の業務の効率化に向けて、機械学習、数理最適化、およびシミュレーションを組み合わせることでさまざまなアイデアが考えられます。以下はいくつかの具体的なアイデアです。

1. 予測分析に基づくリソース割り当て:
 - 過去の業務データを使用して、ピーク時や混雑が予測される日時を特定します。
 - 予測結果に基づき、スタッフの割り当てや施設の開放時間の調整を行います。
2. キュー最適化:
 - 受付や窓口のキューの長さをモニタリングし、待ち時間を最小化するための最適なスケジュールを立てます。
 - キューの長さや処理時間のデータを収集し、最適な窓口数やスタッフ配置を予測します。
3. 施設内の配置最適化:
 - シミュレーションを使用して、施設内の配置を最適化します。これにより、スタッフと設備の配置を調整し、業務フローをスムーズにします。

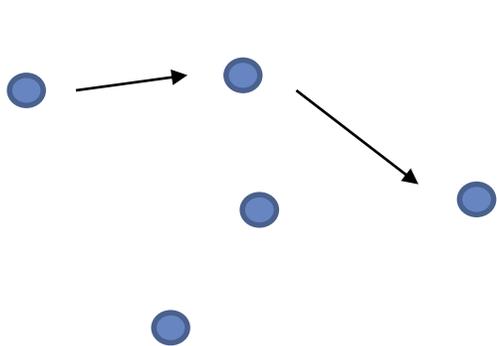
03

数理学の今(技術編)

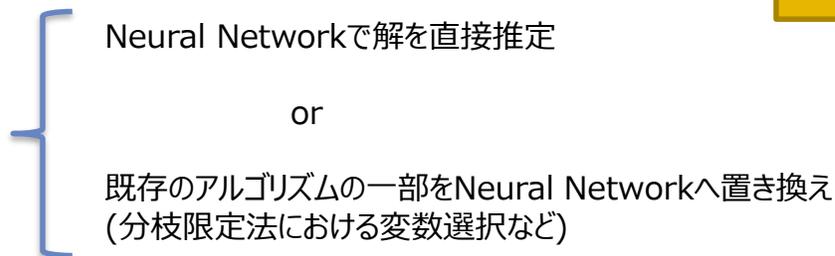


✓ 深層強化学習を利用した組み合わせ最適化問題へのアプローチ。

数理最適化をより高速に



巡回セールスマン問題



※何度も問題を解いて目的関数の値を確認し、Neural Networkを更新していく。

○最適化の高速化

✗制約条件の考慮

✗最適化ソルバとしての「汎化性能」

Mazyavkina, Nina, et al. "Reinforcement learning for combinatorial optimization: A survey." *Computers & Operations Research* 134 (2021): 105400.

<https://www.msiism.jp/article/reinforcement-learning-for-combinatorial-optimization.html>

✓ LLMに直接数理最適化問題を解かせる。

数理最適化をより扱いやすく

You are given a list of points with coordinates below: (0): (-4, 5), (1): (17, 76), (2): (-9, 0), (3): (-31, -86), (4): (53, -35), (5): (26, 91), (6): (65, -33), (7): (26, 86), (8): (-13, -70), (9): (13, 79), (10): (-73, -86), (11): (-45, 93), (12): (74, 24), (13): (67, -42), (14): (87, 51), (15): (83, 94), (16): (-7, 52), (17): (-89, 47), (18): (0, -38), (19): (61, 58).

Below are some previous traces and their lengths. The traces are arranged in descending order based on their lengths, where lower values are better.

<trace> 0,13,3,16,19,2,17,5,4,7,18,8,1,9,6,14,11,15,10,12 </trace>

length:
2254

<trace> 0,18,4,11,9,7,14,17,12,15,10,5,19,3,13,16,1,6,8,2 </trace>

length:
2017

<trace> 0,11,4,13,6,10,8,17,12,15,3,5,19,2,1,18,14,7,16,9 </trace>

length:
1953

<trace> 0,10,4,18,6,8,7,16,14,11,2,15,9,1,5,19,13,12,17,3 </trace>

length:
1840

Give me a new trace that is different from all traces above, and has a length lower than any of the above. The trace should traverse all points exactly once. The trace should start with <trace> and end with </trace>.

問題を直接自然言語で記述。

“解”候補と目的関数値の履歴を
プロンプトに与え、目的関数値を
より良くする“解”候補を出力させる。

○複雑な定式化を必要とせず自然言語
で問題を記述

✗制約条件の考慮

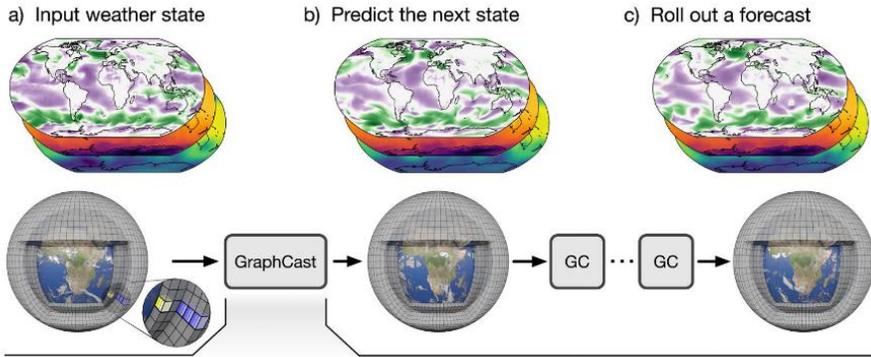
✗大規模な問題の扱い

Yang, Chengrun, et al. "Large language models as optimizers." *arXiv preprint arXiv:2309.03409* (2023).

シミュレーション×機械学習/LLM

✓ 微分方程式をDeep Learningで解く。

シミュレーションをより高速に



地球規模の天候シミュレーション。
10日間のシミュレーションをTPU v4で1分。
微分方程式を利用したスーパーコンピュータによる
数値解法のアプローチでは2時間。精度も一部
指標で上回る。

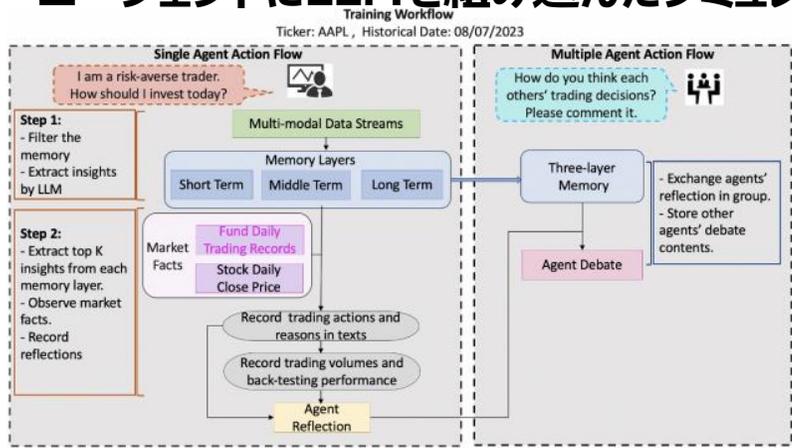
○シミュレーションの高速化

✗学習データの構築

Lam, Remi, et al. "GraphCast: Learning skillful medium-range global weather forecasting." *arXiv preprint arXiv:2212.12794* (2022).

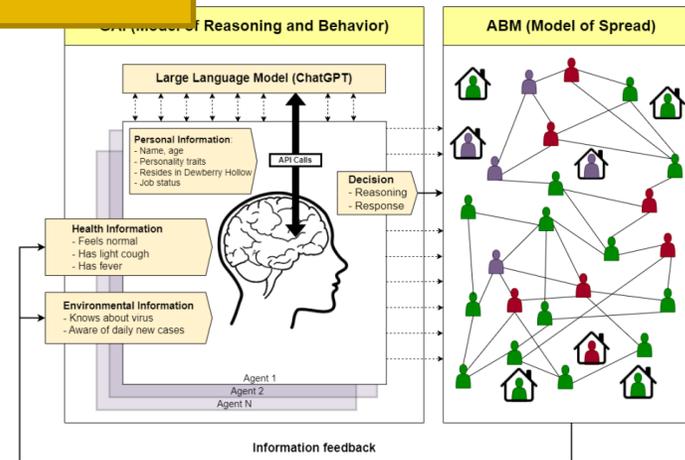
✓ エージェントにLLMを組み込んだシミュレーション

エージェントをより人間らしく



株式売買のための
ディスカッションと
シミュレーション

Li, Yang, et al. "TradingGPT: Multi-Agent System with Layered Memory and Distinct Characters for Enhanced Financial Trading Performance." *arXiv preprint arXiv:2309.03736* (2023).



感染症の広がりに対する
人々の振る舞いを
シミュレート。

感染が広がるとひきこもるので感
染者数が減少、収まってくると外
出して感染が拡大、という
「感染者数の波」が再現。

Williams+: Epidemic Modeling with Generative Agents, arxiv: 2306.02552 (2023)

新しい“機会学習”? : In Context Learning (ICL)

「推論のみで少数の例示からパターンを“学習”し、新しい例に正しく適用できる」というLLMの性質。
LLMの最も盛んな利用方法の一つ。

DE

I don't need you to explain why.

Just give me the single number for the last question. Don't add other words to your answer.

1,4->5

3,10->13

100,2->102

3,4->



7

DE

Apple→Red, Lime→Green, Corn→



Corn→Yellow

新しい“機会学習”? : In Context Learning (ICL)

✓ In Context Learning において“学習”される“モデル”はどこにあるのか。

⇒

LLMの特定の層における最後の入力トークンに対する出力が、ICLによって“学習”されるモデルパラメータの役割を果たす。

✓ In Context Learningにおいて“モデル”はどのように“学習”されるのか。

⇒

LLMのTransformer1層が勾配降下法の1stepのような役割を果たす。

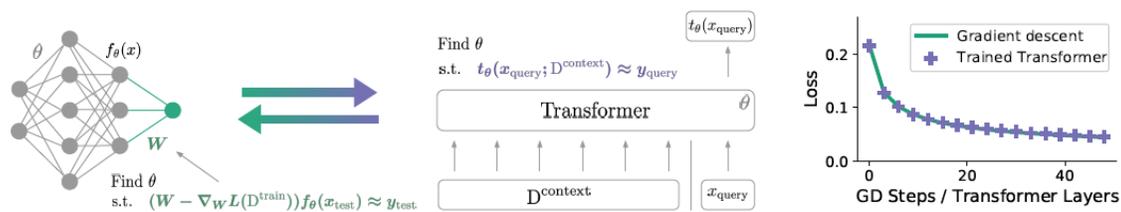
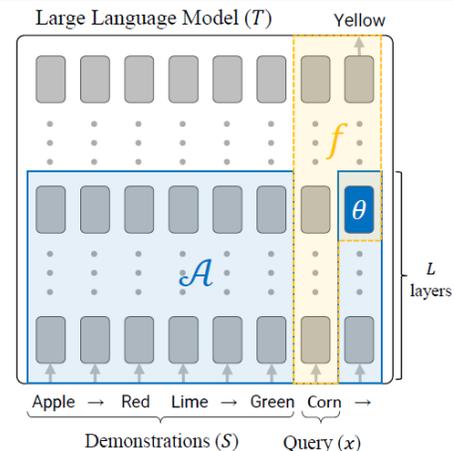


Figure 1. Illustration of our hypothesis: **gradient-based optimization and attention-based in-context learning are equivalent**. Left: Learning a neural network output layer by gradient descent on a dataset D^{train} . The task-shared meta-parameters θ are obtained by meta-learning with the goal that after adjusting the neural network output layer, the model generalizes well on unseen data. Center: Illustration of a Transformer that adjusts its query prediction on the data given in-context i.e. $t_\theta(x_{\text{query}}; D^{\text{context}})$. The weights of the Transformer are optimized to predict the next token y_{query} . Right: Our results confirm the hypothesis that learning with K steps of gradient descent on a dataset D^{train} (green part of the left plot) matches trained Transformers with K linear self-attention layers (central plot) when given D^{train} as in-context data D^{context} .

Von Oswald, Johannes, et al. "Transformers learn in-context by gradient descent." International Conference on Machine Learning. PMLR, 2023.



Roe Hendel, Mor Geva, Amir Globerson, In-Context Learning Creates Task Vectors, arXiv:2310.15916, 2023

※LLMがICLによってどのようにさまざまなタスクを解いているのか明らかになりつつある。



人類が未だにうまく扱えていないタスクをLLMが解く機構を分析することで、新たなアルゴリズムの発見の可能性も。

(AI for Science)

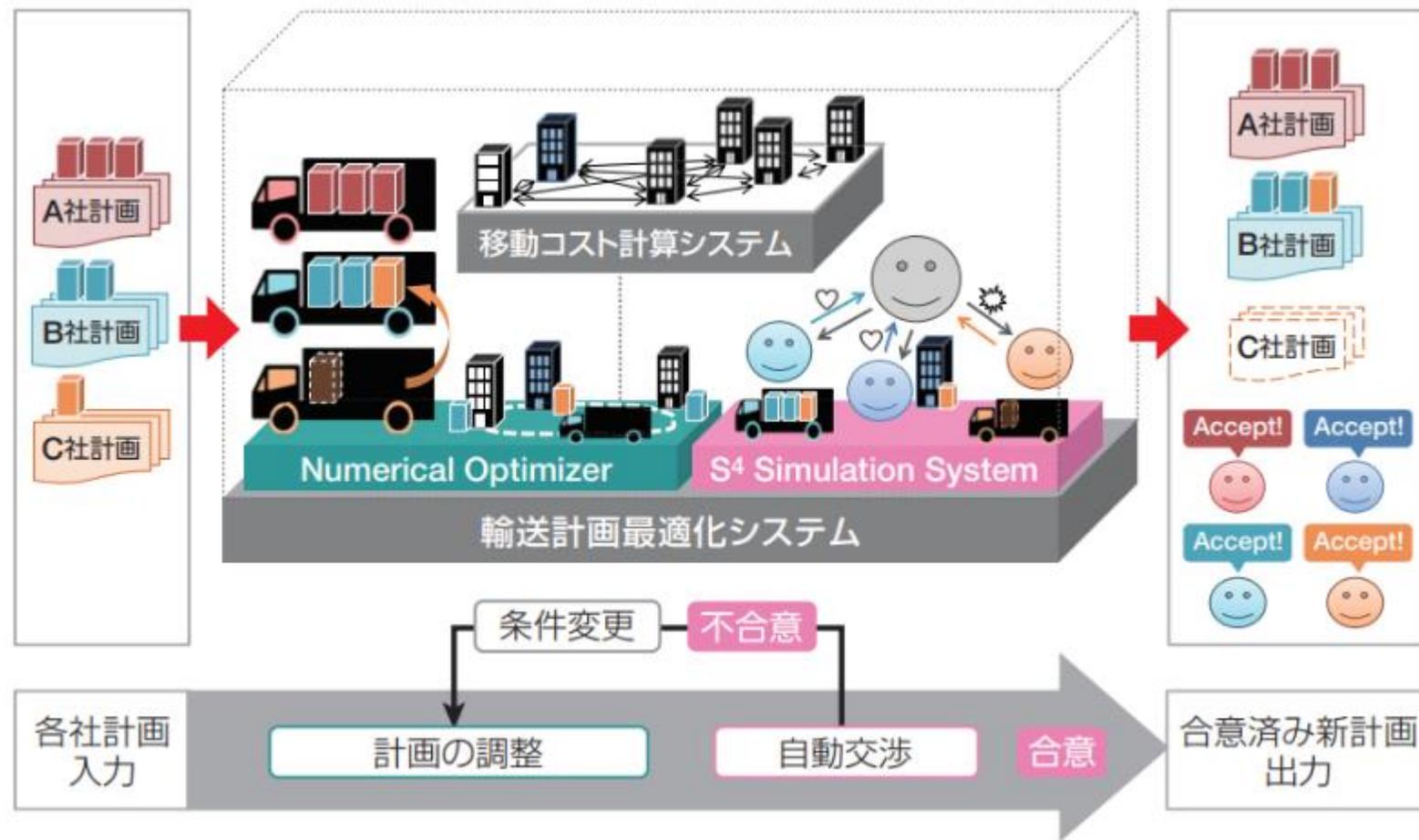
04

数理学の今(ビジネス編)

機械学習×数理最適化×シミュレーション ビジネス事例

✓ 沖電気工業株式会社様

物流手配における業界横断的な輸配送計画調整(最適化)と自動交渉(シミュレーション)を組み合わせたプラットフォーム



- ✓ 複数社の配送計画を統合し、業界全体で移動コストが小さくなるような効率のよい新たな配送計画を作成。
- ✓ 配送計画によっては特定の配送業者が損をしてしまうことになるので、AIが価格交渉を行う。
- ✓ 交渉が決裂した場合は条件を変更して新たな配送計画を作成する。



交渉シミュレーションのイメージ

機械学習×数理最適化×シミュレーション ビジネス事例

- ✓ 株式会社セブン&アイ・ホールディングス様
即時配送と計画配送の実応用にむけた配送最適化アルゴリズムの開発。

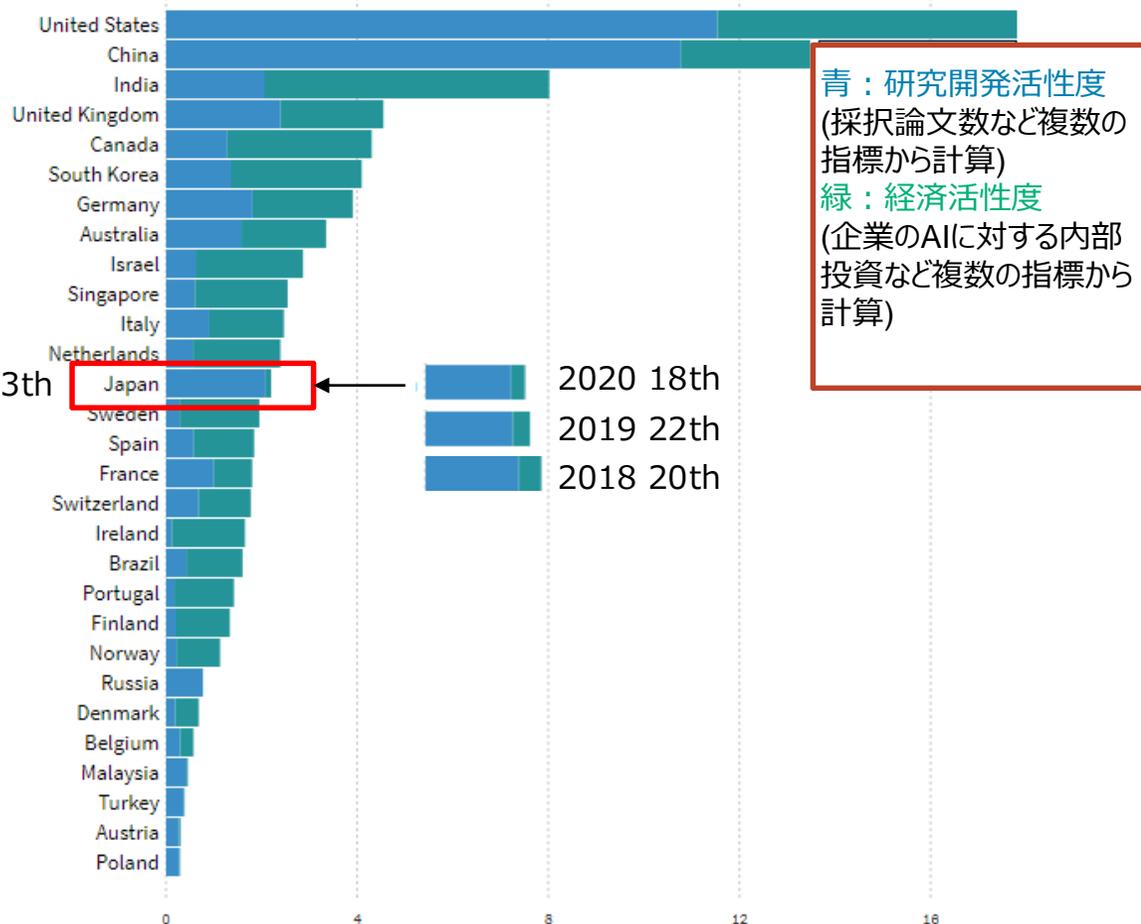


- ✓ ネットコンビニ事業の配送効率を最適化したい。
 - ✓ 新注文発生時、すでに複数のタスクを持っている各配達員の誰に新しい配達を任せるべきか。
- ✓ 配達員の総移動距離、総注文数などからなるコスト関数が最小となる配達員に新しい注文を差配。
- ✓ 実際の注文履歴通りの注文が発生していった場合の配達を地図上でシミュレーション。KPI(遅配件数、必要配達員人数etc.)を最適化するようにコスト関数内の不確定パラメータを最適化。

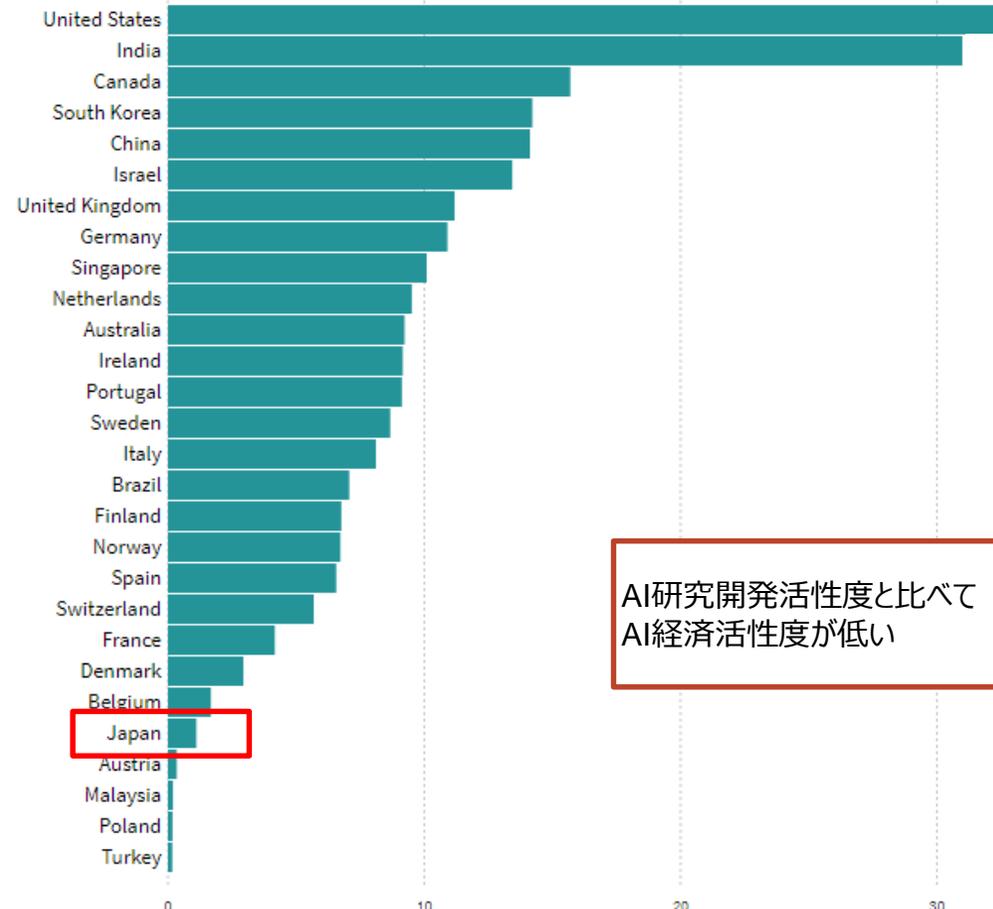
すばらしい事例は多々あるが・・・：日本のAIビジネスの現状

- ✓ 世界的にみて、日本のAIのビジネス活用の活発度は研究開発の活発度と比較して極めて少ない。
- ✓ 日本のAIブームは始まってすらいないという現状。研究開発結果を社会に還元できていない。

2021 AI総合活性度ランキング

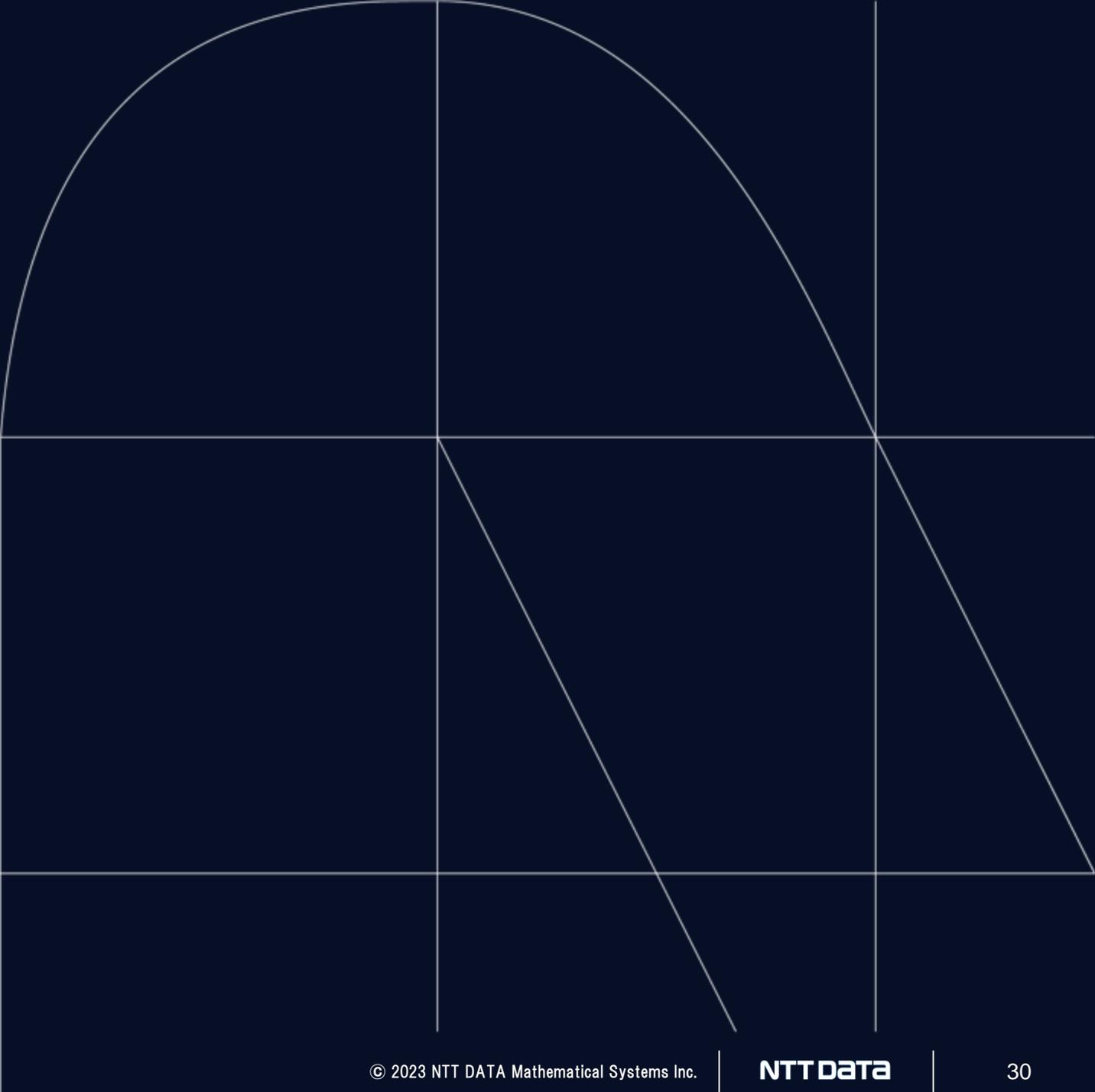


2021 AI経済活性度ランキング



05

数理学とビジネスのこれから



LLMの影響：StockX現象

✓ StockX

- ✓ 時価総額約4000億円。スニーカーなどコレクター要素の高い品の個人間取引プラットフォーム。

カレントカルチャーのためのプラットフォーム

世界の最人気アイテムになるべく快適にアクセスできるようにすることが、当社のミッションです。最先端のスニーカーやアパレル、電化製品にコレクターズアイテム、トレーディングカードやアクセサリを取引しよう。



鑑定について

+++++

購入について

+++++

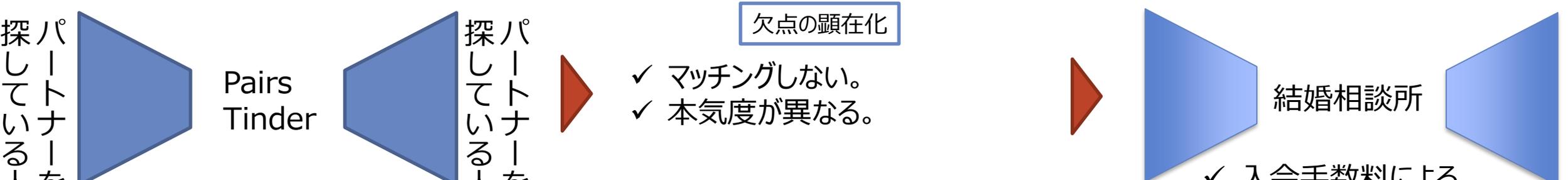
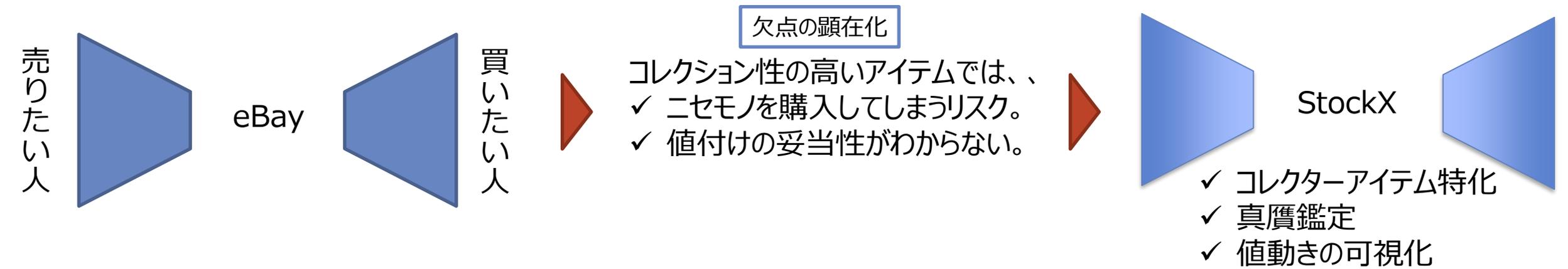
販売について

+++++

LLMの影響：StockX現象

✓ StockX現象

支配的なマッチングプラットフォームによる市場全体の活性化を受けて、プラットフォームの欠点が顕在化。その欠点を解決する形で、当該プラットフォームが支配的だと思われていた市場の特定セクションに別のプラットフォームが隆盛する現象。



婚活するなら IBJ 結婚相談所へ入会したきっかけを教えてください n=1,875

	20代	30代	40代	50代~
結婚する知人の紹介や年齢に惹きを感じた	34.7%	33.1%	29.6%	20.9%
マッチングアプリや婚活パーティーで結果が出なかった	23.7%	28.0%	22.3%	29.7%
コロナ禍、結婚意欲が高まった	15.3%	8.6%	11.9%	8.8%
数年以内に子供が欲しいと感じた	13.2%	15.5%	12.9%	6.0%
結婚相談所で成婚した知人がいる	2.6%	6.8%	6.0%	7.1%
その他	10.5%	8.0%	17.3%	27.5%



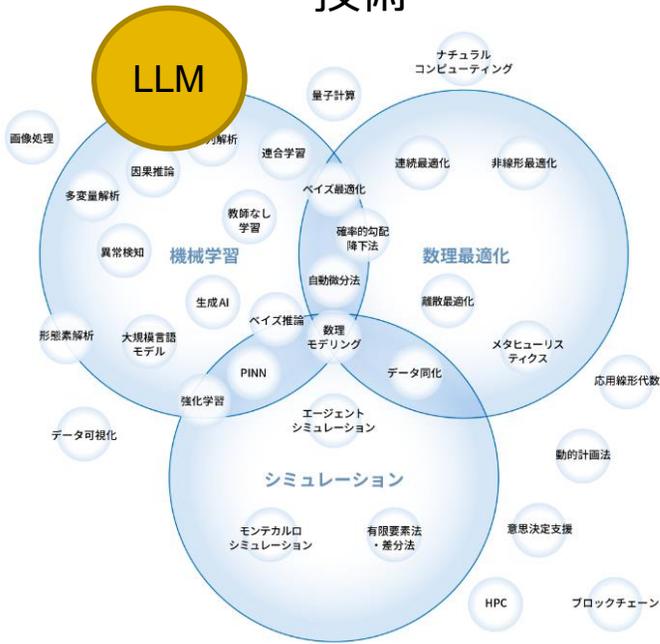
LLMの影響：StockX現象

- ✓ LLMは技術と課題をラフにマッチングする役割を担いうる。
 - ✓ LLMの影響で数理学全体の活性度の上昇を期待。
- ✓ LLMに対するStockX現象に相当する我々の役割や技術が今後さらに重要になる可能性がある。そのためには、LLMでできること、できないこと、LLM利用ユーザのペインを理解することが重要。



ツールとしてのLLM

技術



最新技術の調査検討。

GUIを利用したツールの構築。

適切な技術の選択、組み合わせの設計。

実際のソリューションの実装。

我々の役割

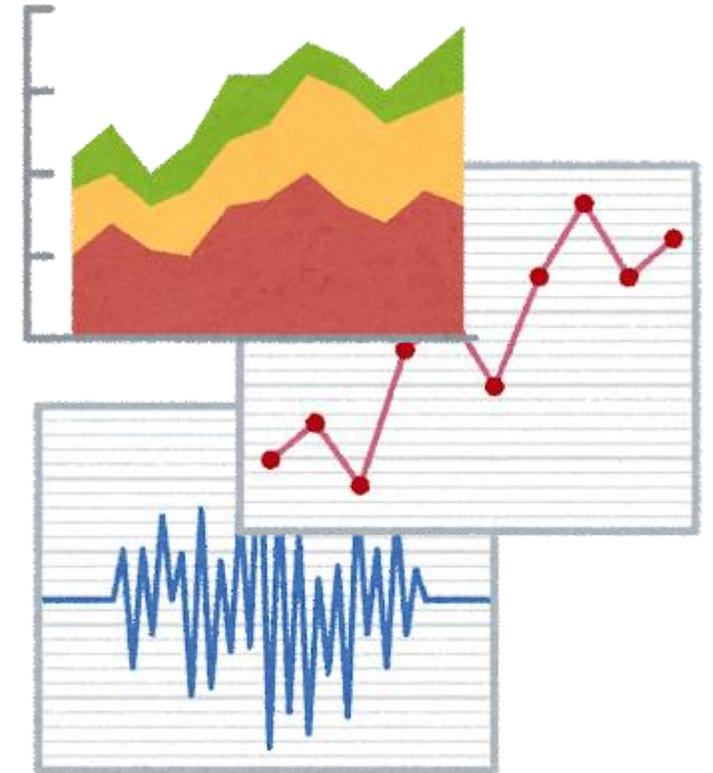
技術と課題のマッチング

課題のヒアリング。

課題の定式化。

解きたい問題を解ける問題へ。

課題・やりたいこと



ツールとしてのLLM

✓ ツールとしても極めて興味深い技術であり、われわれも様々な検討を行っております。

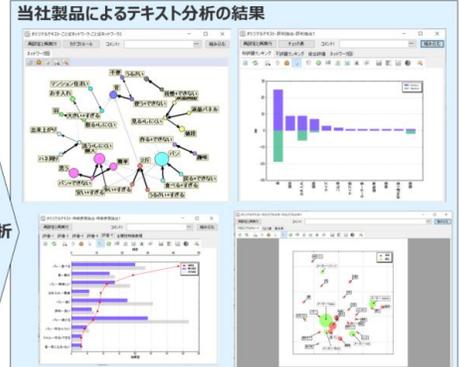
分析アシスタント

当社事例：分析結果の解釈、および次の方針提案

分析初心者
ホームペーカー製品の開発担当として、お客様の意見を把握したい。

ホームペーカー製品のクチコミレビューデータ

評価	製品名	性別	年代	購入価格	書き込み日	レビュー
3A	女性	20代	9908	2018/1/6	高層がパン焼き機が欲しいとのことだったので、シンプルな機能のこちらを購入しました。が、半月で生焼け状態にしかなくなりました。運が悪かったかもしれませんが、プレゼントしたものだし気持ちもばいでした。	
4B	男性	40代	21380	2016/1/5	妻にプレゼントで購入しました。以前からパン作りが趣味でオープンで焼いていたのですが、パン焼き機で手軽においしいパンが焼けるようになったと喜んでくれています。	
5C	女性	40代	19220	2015/4/5	購入したばかりでは毎日パンを焼いていますが、材料代など計算すると普通にパンを焼くより安いかも。(ホームペーカーの代金は考慮していません)市販のパンは2日後にはおいしくないので、このホームペーカーで焼いたパンはやわらかさも固さもあっておいしいです。	



分析

初心者が試しに分析してみるの容易だが、さらに分析を深掘りしたり、分析結果からより高度な知見を引き出すにはハードルがある

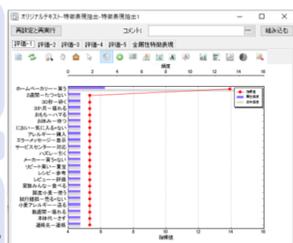
当社事例：分析結果の解釈、および次の方針提案

ユーザーの目的に応じて、分析結果を解釈して次の方針を提案するアプリを作成しました

ユーザー
私はホームペーカー製品の開発を担当しており、より顧客満足度の高い製品を開発したいと考えています。製品のクチコミサイトのレビューデータを分析することで、お客様が求めていることや不満を知りたいです。分析結果のうち、「特徴表現抽出」の解釈や考察の仮説を教えてください。

アプリ
データは、テキストの分析結果を示しており、係り受けと属性の関係度合いを表しています。指標値が大きいくほど、その係り受けが属性におけるキーワードであることを示します。...「評価-1」のグラフについて、お客様は、
仮説1：他の人が購入していることや故障がないことを重視しています。
仮説2：頻繁に使用することや効率的にパンを作ることを期待しています。
仮説3：操作が簡単であることや、時間の節約になることを求めています。

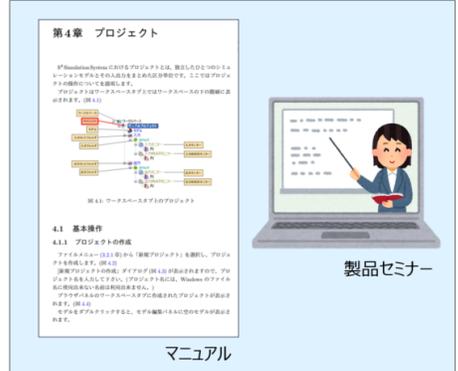
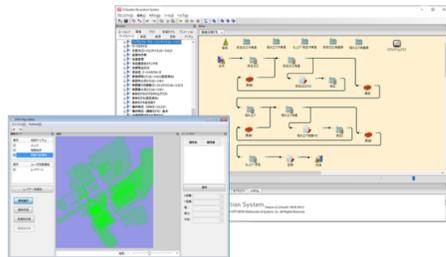
ユーザー
次に何をすればよいですか。
分析方針案1：単語頻度分析と共起分析を組み合わせ、ホームペーカーの特徴や利点を把握する
単語頻度分析を行い、「評価-1」に関連する単語を抽出します。例えば「美味しい」や「簡単」等です。これらの単語はお客様が購入時に重視しているとみられます。次に共起分析を行い、これらの単語と共起する単語を抽出します。例えば「美味しい」と共起する単語として、「パン」や「食パン」が挙げられます。これらを実行することで、特徴や利点に関する具体的な情報を把握できます。LLMに「優秀な分析エージェント」になってもらい、分析に慣れないユーザーを導かせる



製品操作に対するQAチャット

当社事例：QAチャットアプリ

S⁴ (エスクワトロ) Simulation System
当社が開発した 汎用シミュレーションソフトウェア。
GUI 操作を通じて様々なシミュレーションを行える。



ユーザーはマニュアル、製品セミナーやサポートを活用し、所望のシミュレーションを実行できるようになる。
→さらに使いやすさを向上させたい。

© 2023 NTT DATA Mathematical Systems Inc. 14 NTT DATA

当社事例：QAチャットアプリ

当社製品の特徴や使い方を、マニュアルの参照箇所も示しながら回答するアプリを作成しました

ユーザー
S4 (エスクワトロ) Simulation Systemの特徴をすべて教えてください。マニュアルの参照箇所も教えてください。

アプリ
S4 Simulation Systemの特徴は以下ようになります。
1. グラフィカルなモデル記述: 部品を配置しリンクを貼る手順でモデルを表現します。(参照箇所: 1.2.1)
2. 部品編集によるカスタマイズ: 各部品は様々なパラメータを持ち、修正することで個々の部品をモデル化できます。(参照箇所: 1.2.2)
...
以上がS4 Simulation Systemの特徴です。参照箇所はそれぞれの特徴の後に記載しています。

ユーザー
銀行の窓口にお客さんが並んでいる状況をモデル化したいのですが、どのような部品を使用すればよいですか？マニュアルの参照箇所も教えてください。

アプリ
お客さんが並んでいる状況をモデル化するためには、以下の部品を使用することができます。
1. 窓口業務用部品 (部品番号: 18)
- 資源「窓口(CounterService)」(部品番号: 18.1.1): 受付窓口を表す部品です。窓口のスケジュールや開閉状態を設定することができます。
...
これらの部品を組み合わせ、銀行の窓口にお客さんが並んでいる状況をモデル化することができます。

ぜひ、展示ブースへお越しください。
ディスカッションさせてください!

© 2023 NTT DATA Mathematical Systems Inc. 15 ユーザー満足度向上やサポート工数削減を図る

Web記事：LLMのビジネス活用～OpenAI APIによるQAアプリ作成事例～
<https://www.msii.jp/article/llm-qa-app.html>



NTT DATA
Trusted Global Innovator