数理科学チーム　　坂内 健一

Mathematical Science Team

Kenichi Bannai

【目的】共同研究を通して、様々な数学理論を機械学習的課題に応用する

PERRON-FROBENIUS作用素による時系列データの解析

本研究では、時系列データのモデルである非線形力学系に対して、対応するRKHS上のPerrin-Frobenius作用素を用いて、力学系間の角度（metric）を定義した。

$$D = (f, h, x)$$

f：力学系　x：初期値

h：observable

間の角度（metric）を定義

$$f\colon \mathcal{M} \to \mathcal{M} \xrightarrow[\text{RKHSで捉える}]{\phi\colon \mathcal{M} \to \mathcal{H}_k} K_f\colon \mathcal{H}_k \to \mathcal{H}_k$$

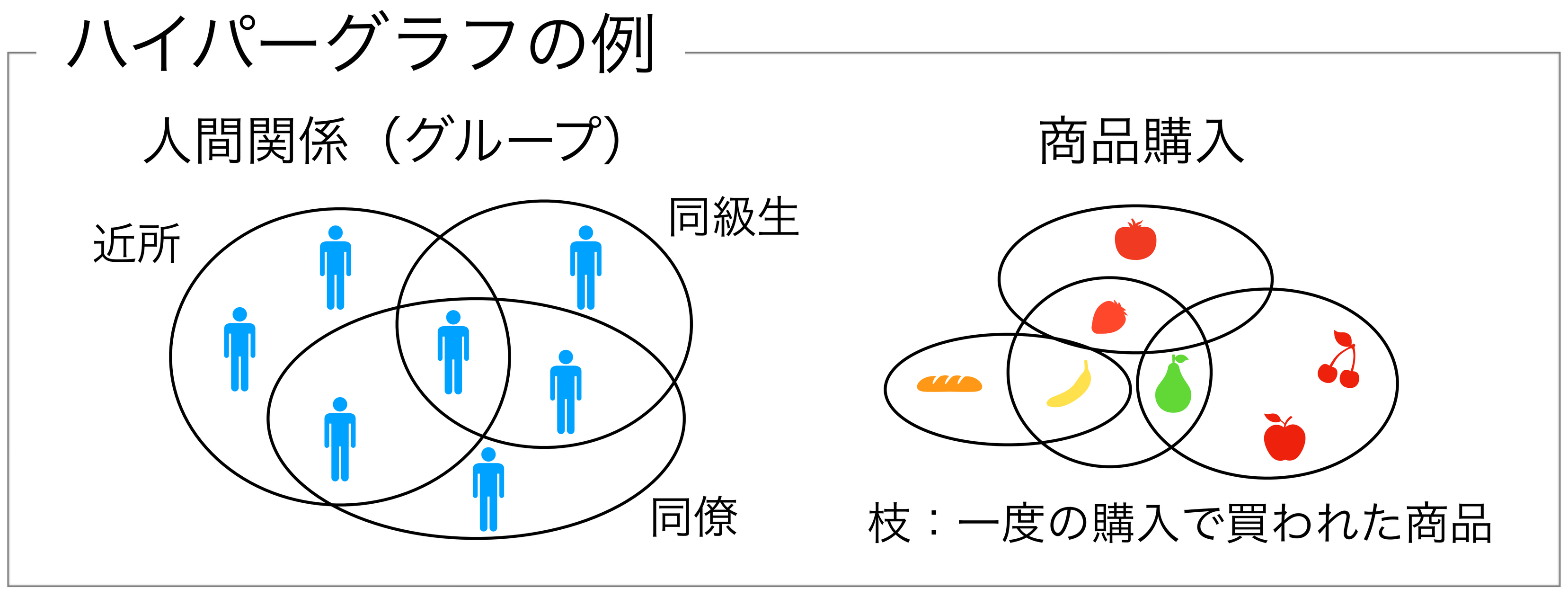
力学系　　**RKHSで捉える**　　Perron-Frobenius作用素

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

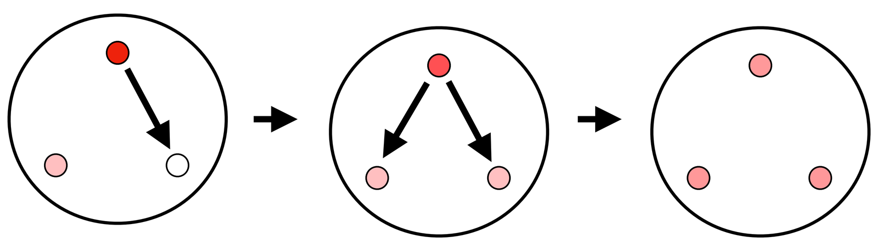
理研研究奨励賞受賞

AIP河原チーム、NTT研究所との共同研究。石川、池田が担当

熱を使ったハイパーグラフの解析



ハイパーグラフの熱
（Chan et al.）の伝わり方



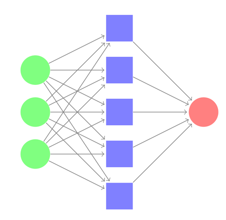
本研究では、F. Chungにより定義されたハイパーグラフの熱の概念を、ハイパーグラフのコミュニティ検索に応用した。

M. Ikeda, A. Miyauchi, Y. Takai, and Y. Yoshida. Finding Cheeger Cuts in Hypergraphs via Heat Equation, arXiv:1809.04396

NII吉田悠一氏、AIP宮内氏と共同研究。池田、高井が担当

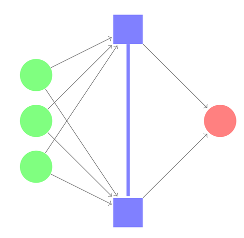
浅いNNの積分表示

本研究では、浅いNeural Networkの backpropagationによる学習を、リジレット変換で解釈した。



$$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{p} c_j \sigma(\boldsymbol{a}_j \cdot \boldsymbol{x} - b_j)$$

連続化 ↓↑ **離散化**



$$S[\gamma](\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}} \gamma(\boldsymbol{a}, b)\sigma(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x} - b)\mu(\boldsymbol{a})\mathrm{d}\boldsymbol{a}\mathrm{d}b$$

f のリジレット変換 $R[f]$ は、$S[R[f]] = f$ をみたす関数

S.Sonoda, I.Ishikawa, M.Ikeda, K.Hagihara, Y.Sawano, T.Matsubara, N.Murata, Integral representation of shallow neural network that attains the global minimum, arXiv:1805.07517, 2018

AIP園田氏などとの共同研究。石川、池田、萩原が担当

多目的最適化問題のパレートフロントの、ベジエ単体による推定

多目的最適化問題：　$f : X \to \mathbb{R}^m$ の最小値を調べる

パレート解集合

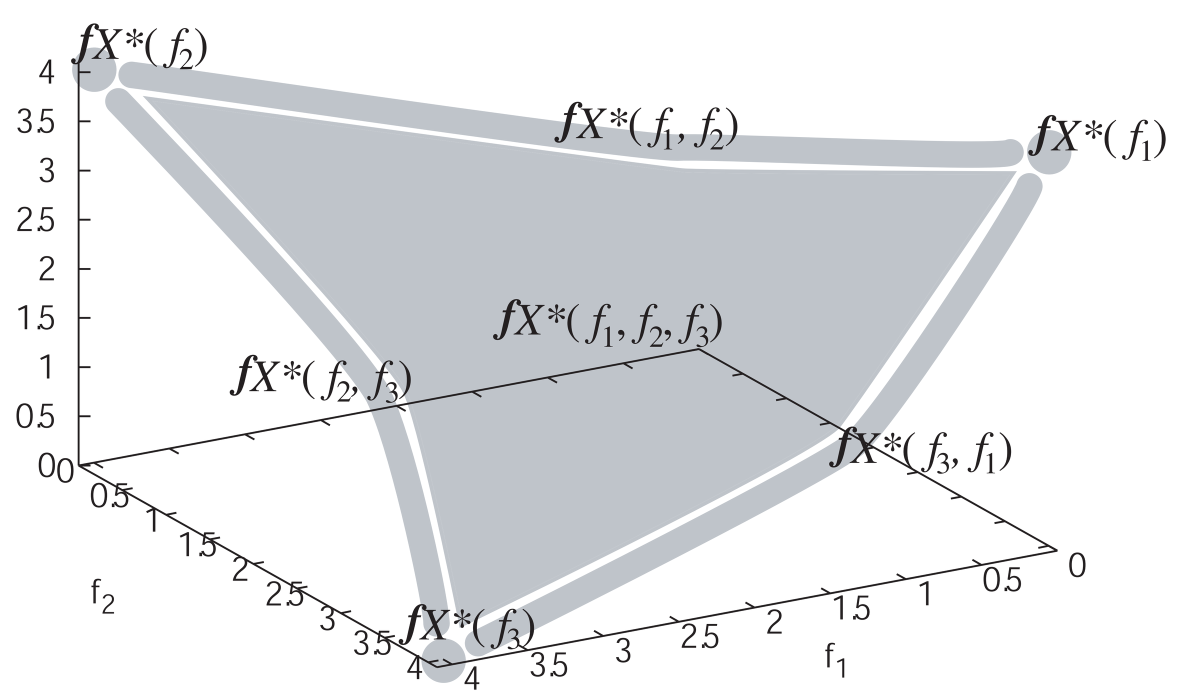
$$X^*(f) = \{x^* \in X \mid \nexists x \in X\ f(x) < f(x^*)\}$$

Smale73などにより、fが凸連続な場合などには、位相幾何的な「単体」の構造が入ることが期待されている。

パレートフロント（パレート解集合の像）

$$fX^*(f) := f(X^*(f)) \subset \mathbb{R}^m$$

本研究では、CGなどに用いられるベジエ曲線の高次元版である「ベジエ単体」を用いて、パレートフロントに誘導される単体の構造を低次元から高速・帰納的に近似する「骨格近似法」を提案した。



ベジエ単体　$P_{\boldsymbol{d}}$：制御点

$$\boldsymbol{d} = (d_i) \in \mathbb{N}^m \qquad |\boldsymbol{d}| = \sum d_i = D$$

$$B(\boldsymbol{t}) := \sum_{|\boldsymbol{d}|=D} \binom{N}{\boldsymbol{d}} \boldsymbol{t}^{\boldsymbol{d}} P_{\boldsymbol{d}}$$

$$\boldsymbol{t} \in \Delta^m \subset \mathbb{R}^m$$

Kobayashi, et. al, Bezier Simplex Fitting: Describing Pareto Fronts of Simplicial Problems with Small Samples in Multi-objective Optimization, AAAI-19

富士通、AIP杉山氏との共同研究
三内、田中、坂内が担当