

【2024年度・構成メンバー】

上級研究員：関坂宏子・田中章詞

SPDR：竹内大智・紅村冬太・東條広一

研究員：池田正弘 特別研究員：吉田純

JRA：伊藤歌那・後藤有輝・和知秀忠

客員研究員：E. Mehmet Kiral・石川勲・佐々田槇子・山本修司・他

Lie Group Bayesian Learning Rule

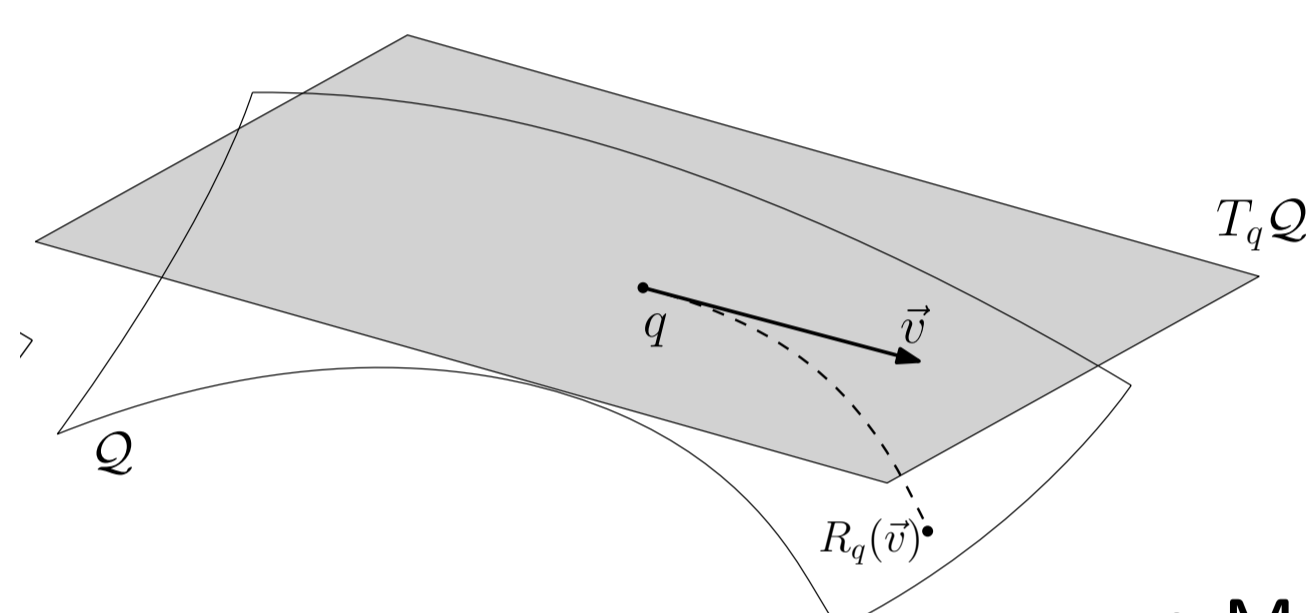
概要：統計多様体に、Lie群の作用を用いた新しいパラメータを入れる方法を考案した。ベイズ学習の勾配法が機能する枠組みを提唱
ベイズ学習では、統計多様体上の勾配法である「Bayes Learning Rule*」を用いて、損失関数の「最小値」ではなく、エントロピーが大きい「最小分布」を見出す *Khan&Havard, The Bayesian Learning Rule, JMLR **24**, 2023

勾配法を用いるとき、接ベクトルは、統計多様体上に乗らないので、従来方法では overshooting などの問題が生じていた

Lie群と呼ばれる微分幾何構造を持つ群 G を、従来のパラメータ空間 Θ に作用させると、Lie群の接ベクトルを自然と統計多様体上に乗せることができる

例： Lie群ごとに異なる Learning Rule が定義
加法群 $G = (\mathbb{R}^P, +)$ **乗法群** $G = (\mathbb{R}_{>0}^P, \times)$
アフィン群 $G = (\mathbb{R}^x \ltimes \mathbb{R})^P$

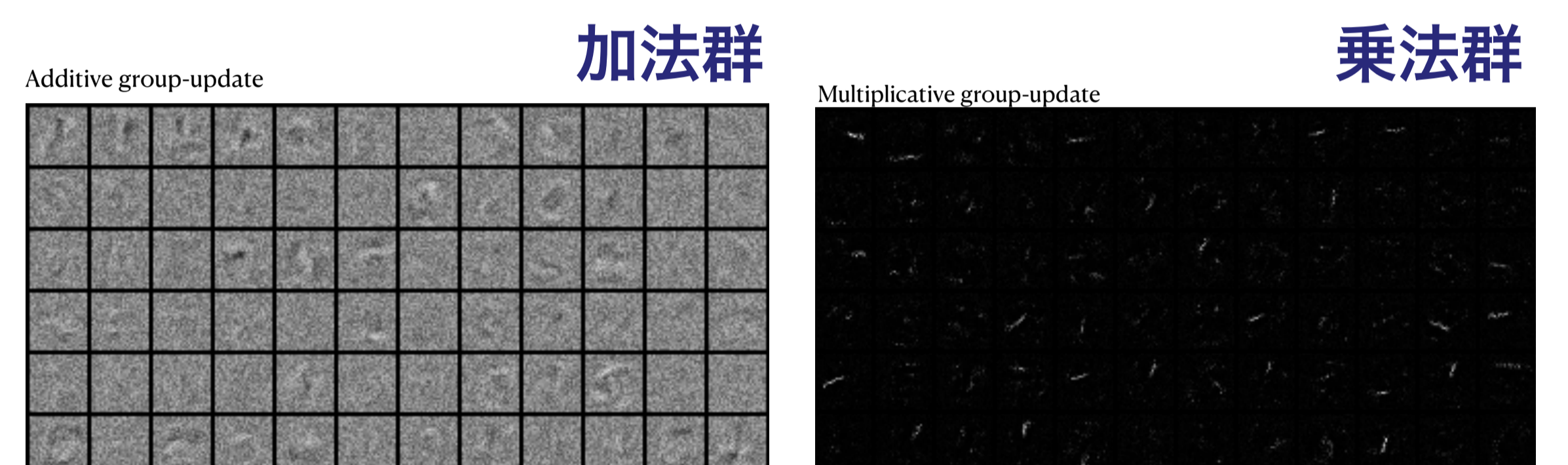
学習後、NNの最初の層の状況



- M. E. Kiral, T. Möllenhoff, M. Khan, AISTATS 2023
- M. E. Kiral, K. Tojo, T. Möllenhoff, M. Khan and K. Bannai, in preparation

近似ベイズ推論チームと共同研究

$$\pi: G \times \Theta \rightarrow \Theta$$

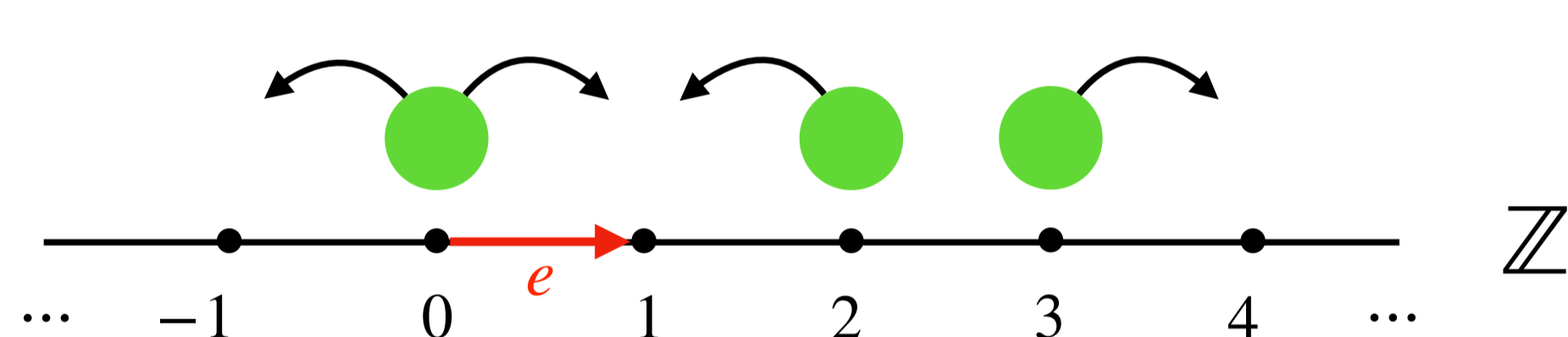


Lie群の選択により、振る舞いが異なる

Microscopic Models of Large Scale interacting Systems

概要：統計物理の数学的基礎付を与える流体力学極限において、非常に一般的なマイクロモデルを定義し、幾何学的な情報から保存量など不変量を導出する方法を提案。

流体力学極限



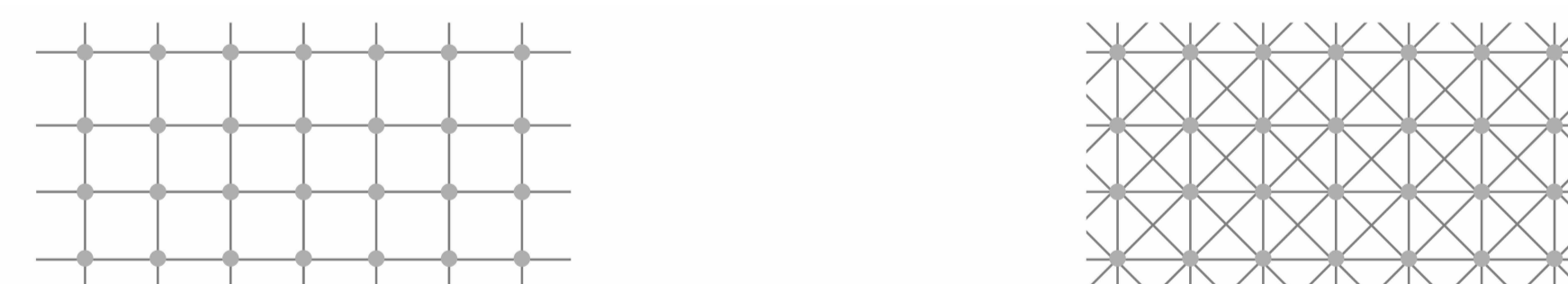
スケール極限

$$\frac{d}{dt}\rho(x, t) = \frac{d^2}{dx^2}\rho(x, t)$$

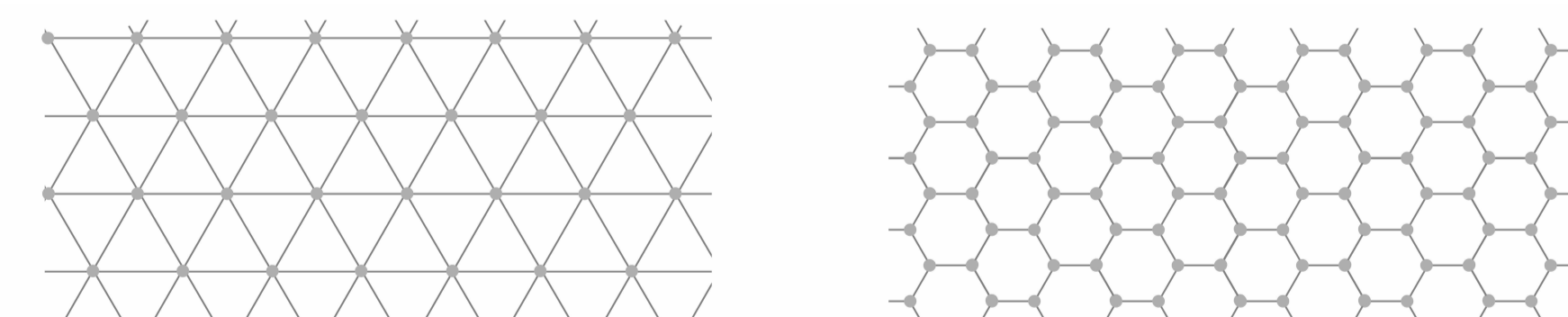
最も簡単なマイクロモデルは、1次元ユークリッド格子 \mathbb{Z} 上の **Exclusion Process**。粒子は、隣接する頂点が空いていたら確率的に遷移する

適切なスケール極限で、拡散方程式を導出

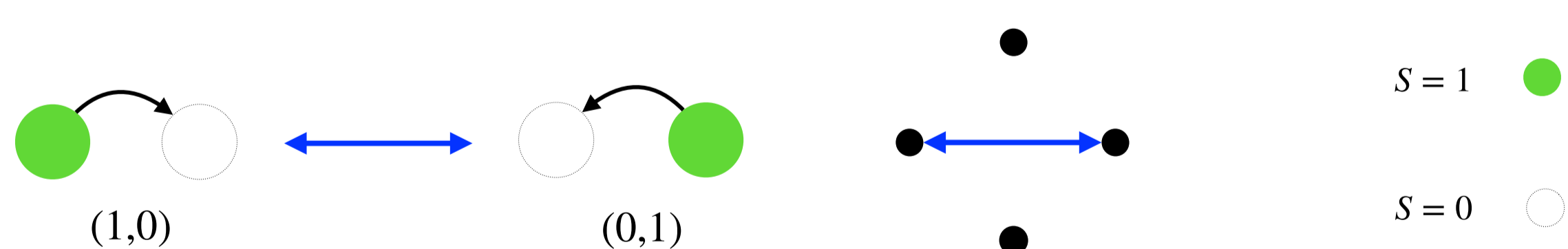
▶ Euclidean Lattice, Euclidean Lattice with nearest 2-neighbor



▶ Hexagonal Lattice, Triangular Lattice



粒子の動きを「相互作用」と呼ばれるグラフで表現



$$S = \{0,1\}$$

$$(S \times S, \phi) \quad \phi \subset S \times S$$

S ：有限集合

$S \times S$ を頂点集合とする
一般のグラフに拡張

任意の有限集合と、任意の「良い」相互作用を扱う汎用的なマイクロモデルを提案

\mathbb{Z} を一般の結晶格子に拡張

- K. Bannai, Y. Kametani, M. Sasada, Topological Structures of Large Scale Interacting Systems via Uniform Functions and Forms, Forum of Mathematics, Sigma, Volume **12** (2024), e107; DOI: [10.1017/fms.2024.61](https://doi.org/10.1017/fms.2024.61).
- K. Bannai, J. Koriki, M. Sasada, H. Wachi, S. Yamamoto, On Interactions for Large Scale Interacting Systems, [arXiv:2410.06778 \[math.PR\]](https://arxiv.org/abs/2410.06778)
- K. Bannai, M. Sasada, On Uniform Functions on Configuration Spaces of Large Scale Interacting Systems, [arXiv:2408.12886 \[math.PR\]](https://arxiv.org/abs/2408.12886).

その他

[1] Yuji Hirono, Akinori Tanaka, Kenji Fukushima, Understanding Diffusion Models by Feynman's Path Integral, ICML 2024.

[2] Yasunari Hikima, Ken Kobayashi, Akinori Tanaka, Akiyoshi Sannai, Naoki Hamada, Stochastic Gradient Descent for Bézier Simplex Representation of Pareto Set in Multi-Objective Optimization, AISTATS 2024.

[3] M Ohnishi, I Ishikawa, Y. Kuroki, M. Ikeda, Dynamic structure estimation from Bandit Feedback, Transactions on Machine Learning Research, 2024.