

数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用  
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

田中 健一郎

東京大学 大学院情報理工学系研究科  
准教授

最適点配置問題に内在する近似的凸構造の探求と活用

## § 1. 研究成果の概要

2021年度は、統計的学習の分野などで用いられるカーネル求積法に対して、性質の良い標本点を効率的に配置する問題に引き続き取り組んだ。当年度は、大別して以下の3つの観点(a)-(c)から、研究を進めた。

(a) Frank-Wolfe 法の改良と、その応用による kernel herding の改良。

カーネル求積に対する主な算法の一つに、kernel herding という方法がある。この方法は、有限次元空間上の凸目的関数を最小化する方法である Frank-Wolfe 法を、無限次元空間上の問題に拡張したものとみなせる。本研究では、Frank-Wolfe 法に対する新たな加速法を開発した。そして、それを kernel herding に適用して収束次数の評価を与え、実際の性能も既存手法より良いことを示した(引用した原著論文の[1])。

(b) 最適輸送問題の枠組の導入。

上記の kernel herding の方法は、最悪誤差のある種の凸性を用いているものの、新たに追加する標本点を選ぶ際、一般には風潰しが必要になる。そこで、本研究では、標本点群を初期配置から時間発展させる方針も追求してきた。そこで、最適輸送に現れる Wasserstein 勾配流に沿って標本点群を時間発展させることで、最悪誤差の(近似)最小点に到達する方法に着目した。そして、その加速法を提案した。詳細な理論的検討は今後の課題である。

(c) 求積公式をグラフ上で考えた場合に関する、「離散凸性」の発見。

有限集合上の関数に対する求積公式の考察を行った。この問題を、有限集合上の測度を少ない標本点数で近似する問題ととらえると、最適輸送問題を用いた定式化が得られる。そして、この定式化の中に「離散凸関数」が現れることを見出した。算法の設計や詳細な理論的検討は今後の課題である。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Kazuma Tsuji, Ken'ichiro Tanaka, Sebastian Pokutta: Sparser Kernel Herding with Pairwise Conditional Gradients without Swap Steps. to appear in Proceedings of ICML 2022 (The 39th International Conference on Machine Learning). (arXiv:2110.12650)