令和2年度＜若手研究_再公募＞共同利用研究報告書

2021年05月01日

九州大学　マス・フォア・インダストリ研究所長 殿

所属・職名 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所・学術研究員

長田翔太

下記の通り共同研究の報告をいたします。

記

		整理番号	20200028	
1. 研究計画題目	実社会に見られる複雑なネットワークと無限粒子系の交差点			
2. 新規・継続	新規			
3. 種別	若手研究			
4. 種目	短期共同研究			
5. 研究代表者	氏名	長田翔太		
	所属部局名	九州大学マス・フォア・インダストリ研究所	職名	学術研究員
6. 研究実施期間	2021年02月22日(月曜日)～2021年03月19日(金曜日)			
7. キーワード	大規模相互作用系，普遍性，相転移・臨界現象，平均場理論，対数ソボレフ不等式，スペクトルギャップ，エントロピー			
8. 参加者人数	56人			

9. 本研究で得られた成果の概要

本共同研究は，無限粒子系の手法による実社会の問題へのアプローチの開拓を目標として，確率論の若手研究者が中心となって計画した．計画当初は，深層ニューラルネットワークや複雑ネットワークにおける最適化を粒子系の立場から解釈することで，確率論的な関数空間上の解析に定式化することで，実社会の問題を解決することを目指した．初めに，各自で粒子系の視点から深層学習や最適化問題に関するサーベイを行った．公開日程のワークショップでは，サーベイを元に本共同研究で扱う問題を提案し合った．

本共同研究では，行列式点過程の離散近似を用いることで，サンプリングコストの削減手法の開発を試みた．行列式点過程を用いたモンテカルロ法は近似制度が高いことが知られている．しかし，一般に行列式点過程のサンプリングコストは粒子数の３乗のオーダーであり，独立なサンプリングのオーダーである粒子数の１乗に比べて非常に高い．非公開日程では，サンプリングコストの削減に関する議論を行い，サンプリングコストと近似精度のトレードオフを行う手法を提案した．

本共同研究の期間中に着想を得た手法とその理論的研究は，今後学術論文として出版予定である．

2020年度 九州大学IMI 共同利用研究計画（若手研究）
短期共同利用研究
「実社会に見られる複雑なネットワークと無限粒子系の交差点」
成果報告書

研究代表者：長田翔太 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所・学術研究員)
須田颯 (東京大学大学院数理科学研究科・大学院生)
森隆大 (京都大学数理解析研究所・大学院生)
上島芳倫 (北海道大学大学院理学院数学専攻・大学院生)
林晃平 (東京大学大学院数理科学研究科・大学院生)
新井裕太 (千葉大学大学院融合理工学府・大学院生)

2021/4/30

概 要

本報告書は，2021 年 2 月 22 日 (月) および 2021 年 3 月 15 日 (月)〜29 日 (金) にかけて行われた短期共同研究「実社会に見られる複雑なネットワークと無限粒子系の交差点」の成果報告書である．本共同研究は，無限粒子系の手法による実社会の問題へのアプローチの開拓を目標として，確率論の若手研究者を中心に行われた．

計画当初は，深層ニューラルネットワークや複雑ネットワークにおける最適化を粒子系の立場から解釈することで，確率論的な関数空間上の解析に定式化することで，実社会の問題を解決することを目指した．初めに，各自で粒子系の視点から深層学習や最適化問題に関するサーベイを行った．公開日程のワークショップでは，サーベイを元に本共同研究で扱う問題を提案し合った．非公開日程では，行列式点過程を用いたモンテカルロ法に関する研究を行った．

行列式点過程の離散近似を用いることで，サンプリングコストの削減手法の開発を試みた．行列式点過程を用いたモンテカルロ法は近似制度が高いことが知られている．しかし，一般に行列式点過程のサンプリングコストは粒子数の 3 乗のオーダーであり，独立なサンプリングのオーダーである粒子数の 1 乗に比べて非常に高い．本共同研究では，α-行列式点過程やその離散化を用いた，サンプリングコストと近似精度のトレードオフを行う手法を提案した．

本共同研究期間中に着想を得た手法とその理論的研究は，今後，学術論文としての出版を目指す．

1　導入

1.1　無限粒子系と複雑なネットワークとの交差点

空間上の有限個あるいは無限個の粒子が相互作用する動的／静的な確率モデルの総称を無限粒子系という．無限個の粒子は本来無限次元の対象であり解析が困難であるが，各粒子は同一であるという対称性を課して無限次元の中でも対称な部分集合という小さな空間（＝配置空間）を考えることで，無限次元空間上の解析を行うことができる．深層ニューラルネットワークは，パラメータ成分を粒子だと思い，活性化関数の値を粒子のスピンだと思うことで，自然と無限粒子系とみなすことができる．本研究の目標は，無限粒子系の手法を用いた深層ニューラルネットワークにおける理論的側面の解明との最適化手法の構築である．特に，無限粒子系に付随する関数空間に注目することで無限粒子系的手法の開拓および進展が期待できる．

2　公開日程：2021年2月22日 (月)

公開日には，各自の専門ワークショップを行った，取り扱う問題を決めるため情報交換のための各参加者が専門と興味に基づいたサーベイを発表し,. 本節では，当日のプログラムと，各発表者の背景と着想および発表と問題の提案内容を記す.

2.1　公開日プログラム

ワークショップ名：実社会に見られる複雑なネットワークと無限粒子系の交差点
開催時期：2021–02–22 10:00～2021–02–22 17:00
場所：Zoom ミーティングによるオンライン開催

- 10:00–10:05

  オープニング

- 10:05–11:05

  Ising 模型とその組合せ最適化問題や機械学習への応用

  上島芳倫（北海道大学大学院理学院数学専攻）

- 11:20–11:50

  TASEP の可解性及び渋滞問題との関係性について

  新井裕太（千葉大学大学院融合理工学府）

- 13:00–13:30

  無限粒子系に関連したいくつかの問題について

  須田颯（東京大学大学院数理科学研究科）

- 13:45–15:15

  補間理論を用いた Dirichlet 空間の解析の展望

  森隆大（京都大学数理解析研究所）

- 15:30–16:00

  複雑ネットワークの数理

  林晃平（東京大学大学院数理科学研究科）

- 16:15–16:45

  行列式点過程の離散近似と L2 空間の等長変換

  長田翔太（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所）

- 16:45

  クロージング

2.2 Ising 模型とその組合せ最適化問題や機械学習への応用 (上島芳倫)

2.2.1 背景および着想

上島は Ising 模型に関する研究を行って来た．特に，その組合せ最適化問題への応用について論文を執筆し，現在投稿中である [FKHKKS20]．Ising 模型とは，物理学において強磁性体（磁石になり得る物質）のモデルの一種として知られているものである．数学的には，グラフ $G = (V, E)$ 上のスピン配置 $\sigma \in \{\pm 1\}^V$ があるエネルギーに従ってランダムに定まる，というモデルである．そのエネルギーはスピン同士の結合定数 $\{J_{x,y}\}_{\{x,y\}\in E}$ と外部磁場 $\{h_x\}_{x\in V}$ を与えることによって定義される．

強磁性体の解析のみならず，Ising 模型は組合せ最適化問題にも応用されている．組合せ最適化問題とは，取り得る状態が組合せとして与えられるもののコスト関数を最適化するという問題である．例えば，出発地からいくつかの都市を経由して元の場所に戻るコスト最小になるような経路を探索する問題（巡回セールスマン問題）などがある．組合せ最適化問題を Ising 模型を使って解くには，問題の状態をスピンで表し，グラフ上に定義された「重み」を $\{J_{x,y}\}_{\{x,y\}\in E}$ と $\{h_x\}_{x\in V}$ で翻訳するということを行う．そして，Ising 模型のエネルギーが最小となるスピン配置（基底状態）を「焼きなまし法」によって求める．基底状態を元の問題に翻訳し直せば，最適解が求められる．

2.2.2 発表内容

Ising 模型は機械学習にも使われており，この文脈では Boltzmann 機械と呼ばれている．ただし，問題意識が異なる．上述の文脈では結合定数と外部磁場を与えたときに如何なるスピン配置が実現されるかに興味がある一方で，機械学習ではスピン配置のデータが与えられたときにそれを実現する結合定数と外部磁場を推定すること（学習）に興味がある．一度，そのような推定値を得られれば，任意のデータを生成することができる（教師なし機械学習）．例えば，猫の画像データをスピンに翻訳して何枚も用意したとする．それらから適当な結合定数と外部磁場を推定すれば，その推定値から元々のデータと異なる新たな猫の画像データを作り出せる．

数学的にこの推定を実行するためには，分布同士の「近さ」を定義する必要がある．そういったある種のコストを最適化することによって，データの特徴を分布として捉えられると期待できる．「近さ」には専ら Kullback-Leibular 情報量が使われ，最適化手法には勾配降下法が用いられている．Boltzmann 機械では，グラフを 2 部グラフにした上で「近さ」に constrastive divergence と呼ばれる量を用いると，学習が現実的な時間で実行できることが知られている．このようなモデルは制限 Boltzmann 機械と呼ばれており，2 部グラフの実際のデータに一方の集合を可視層（実際のデータを対応させる），もう一方の集合を隠れ層という．

2.2.3 提案内容

制限 Boltzmann 機械は実際の応用がいくつもあるものの，その理論的な裏付けがなされていない部分も多い．例えば，Kullback-Leibular 情報量の代わりに constrastive divergence を使うことのある種の正当性は得られているものの，勾配降下法を使うことによるその収束速度やどの程度良い評価になっているのかについては疑問が残る．こういった問題を数学的に解明することは学習の所要時間や分布の近似精度を定量的に示すことができるので，工学的にも有用であることが期待できる．

また，制限 Boltzmann 機械は 2 部グラフを積み重ねることで，多層構造をもたせられる．これは現在広く研究されている深層学習に関連する．問題として，隠れ層の点の数を十分大きくすれば真の分布を近似できることが知られている [RB08] ものの，深層化によってどのように近似が変わるのかが理論的に不明瞭であることが挙げられる．この種の問題は neural network でも生じているので，Boltzmann 機械について解明できればそちらにも応用できる可能性がある．

2.2.4 文献

[Kam15] は深層 neural network や深層 Boltzmann 機械について，現在までに工学的に得られた結果が纏められている．理論的な背景やそれらのモデルを画像・音声に応用したことについても記述がある．

[Oso19] では Boltzmann 機械について [Kam15] よりも詳しい記述がある．深層学習も含め，時系列データや強化学習への応用の記載もある．

[TTK19] では，深層機械学習と物理学との関連が書かれている．特に，適当な Hamiltonian を設定することで，統計力学の枠組みから様々な機械学習のアルゴリズムが導出できることが示されている．この意味で，機械学習と粒子系と対応することが解る．他にも，機械学習によって相転移における臨界点の推定することなど，物理学の様々な問題との関係が記してある．

2.3 TASEP の可解性及び渋滞問題との関係性について (新井裕太)

2.3.1 背景および着想

渋滞は物流及び環境に悪影響を及ぼす現象として，世界中で認知されている．渋滞問題を解決するために，数学及び物理を用いた解析が行われており，ルール 184 が課された基本セル・オートマトン（ECA）[RSSS98] や 1 次元非対称単純排他過程（ASEP）[W86] 等がモデルとして扱われている．新井は 1 次元完全非対称単純排他過程（TASEP）を確率論及び数理物理的興味から研究している [A20]．そのため，ASEP の特殊な場合のモデルとして見れる TASEP が渋滞問題のモデルとして具体的にどのように研究されているかに興味を持ち文献調査を行った．文献調査の結果，[IN14] 及び [T19] を発見した．上記の文献ではモデルとして並列更新する離散時間ベルヌーイ TASEP を用いて渋滞研究を行っている．上記の研究を踏まえ，渋滞問題を考える上でより適切なモデルが何かを検討し，モデルとしてジャンプ確率がバラバラである並列更新する離散時間幾何 TASEP をモデルとして扱うという着想に至った．

2.3.2 発表および提案内容

新井は TASEP の可解性及び渋滞問題との関係性について講演した．具体的には，渋滞の定義を行った上でルール 184 を課した ECA 及び TASEP の定義を行い，TASEP がどのように渋滞問題を考える際のモデルとして見られるかを定義した．さらに，渋滞問題を考える上でより適切なモデルとして並列更新する離散時間幾何 TASEP が考えられることを説明し，その可解性（実際にそのモデルが計算できることを保証する性質）の証明をした．講演の最後に，渋滞問題を考える際に適切であるモデルとしてジャンプ確率がバラバラである並列更新する離散時間幾何 TASEP を紹介し，その可解性を証明するという問題を提案した．

2.4 無限粒子系に関連したいくつかの問題について (須田颯)

2.4.1 背景及および着想

須田の専門は統計力学の数学的基礎付けであり, 特に現実に見られる 巨視的現象 を 微視的系 である 無限粒子系 から極限操作を行うことにより厳密に導出すること, そのための数理的手法の開発や改善について研究している. 本短期共同研究公開日までの準備として, 実社会の問題であって統計力学的手法を応用しうる例や結果を調査し, どのような数理的拡張が可能であるかを考察した.

2.4.2 粒子勾配降下法

機械学習の興隆に伴い, 機械学習の中心的な道具としてのニューラルネットワークの数理的研究が現在盛んに行われている. 損失関数を最小化するための最適化アルゴリズムとしては勾配降下法, 各ステップごとに確率的摂動を加える確率勾配降下法やその類似物が標準的である. 近年では損失関数を系のエネルギー, パラメータを粒子とみなし, 勾配降下法に従ったパラメータのアップデートを粒子の時間発展とみなすことで, ニューラルネットワークを相互作用する多数の粒子からなる系として解析する手法が提唱されている. (cf. [RV-E18]) 系のダイナミクスは確率測度からなる距離空間上の勾配流となり, 最適輸送理論とも関連する興味深い視点である.

2.4.3 発表および提案内容

須田は上記した粒子勾配降下法について, その大まかな枠組みと自身の研究との関連について講演した. また, 須田は機械学習について明るくないため, 聴衆に対して次のような質問をした.

- [RV-E18] にまとめられている数理的結果の拡張について, 数学的に興味深い問題はいくつか考えられるが, 機械学習の観点から意味のあるような問題は何であるか分からない, どのような一般化を考えるべきだろうか？

質問に対して明確な答えは得られず, 時間切れとなった.

2.5 補間理論を用いた Dirichlet 空間の解析の展望 (森隆大)

2.5.1 背景および着想

確率論において, 熱方程式や無限粒子系を始めとする Markov 過程に関連した偏微分方程式について解の性質を解析する際, 状態空間がどのような次元であってもその解空間は可積分性が L^2 であることが多い.

一方で, 偏微分方程式論での解の評価においては Sobolev 空間 $W^{k,p}$, Besov 空間 $B^s_{p,q}$, Triebel-Lizorkin 空間 $F^s_{p,q}$ など様々な次数 p での可積分性の函数空間が設定されている. それらの空間では Sobolev 埋蔵定理や Gagliardo-Nirenberg 不等式に見られるように, 状態空間の次元と微分可能性に依存した精密な可積分性の評価が得られている. 臨界次元においては Zygmund 空間 $L\log L$, Orlicz 空間 L^Φ といった冪ではないより一般の指数を持つような可積分性の空間での解析も行われている.

森は, このような実解析学的な精密評価を確率論にも適用させることができれば確率過程のより本質的な理解へ迫ることができると考え, 本研究の着想を得た. 確率モデルの極限操作や近似操作において従来より収束の評価が良い空間を見つけることができれば, 応用として例えば数値シミュレーションの計算時間の短縮が可能になると期待している.

2.5.2 発表および提案内容

公開日での講演では, 上述したことを達成するための道具として, [Mor21] に基づき L^p-Kato 測度と Dirichlet 空間の Lebesgue 空間 L^{2p} への連続埋め込みとの関係を説明した. 一般に Markov 過程 (正確には Hunt 過程) と正則 Dirichlet 形式との対応が知られているため, この結果は L^2 ではない確率解析の一端であると言える. 更に, L^p-Kato 測度が冪オーダーの減衰を持つことと Dirichlet 空間と L^2 空間の補間空間が Lebesgue 空間へ連続に埋め込まれることとの関係についても説明した. これは Gagliardo-Nirenberg 不等式の確率論的な解釈と言える.

森は他にも実解析で知られている道具として, Littlewood-Paley 理論とウェーブレットそれぞれによる Besov 空間の特徴付けについて解説し, より一般に, 状態空間が測度距離空間であり, その上で定められた非負自己共役作用素に関する Besov 空間の研究 [Hu14] についても概説した.

公開日および非公開日の議論の中で, 長田 [Osa20] による行列式点過程の木表現が Haar ウェーブレットによる点過程の表現と捉えられることに自身の研究との共通点を見出し, Dirichlet 形式や実解析学の理論を応用することで良い近似評価ができる可能性を模索した.

2.6 複雑ネットワークの数理 (林晃平)

2.6.1 背景および着想

実社会におけるネットワークにみられる複雑性に着目し、観測される複雑性の数学的定式化やそれを実現するモデルについて調査した．従来のモデルにおける空間構造として，解析が容易になるように周期性や一様な構造をもつ（例えば正方格子のような）性質の良いものを扱う場合が多い．しかし，実社会のグラフ構造はより複雑であり，より現実に即したモデリングが重要である．本研究では特に確率論の立場から実社会に即した空間を扱い，詳細な解析を行うことを目指すことにした．

2.6.2 発表および提案内容

実社会の複雑なネットワークを表現したグラフとして重要なものは，グラフの次数分布がべき乗分布になるという「スケールフリー性」およびクラスターが多く観測されかつグラフの平均距離が小さいという「スモールワールド性」を満たすものである．これら 2 つの性質を満たすグラフを「複雑ネットワーク」と呼ぶ．スモールワールド性質を満たすグラフの例として Watts-Strogatz モデル [WS98]，両方の性質を満たす複雑ネットワークの例として Barabási-Albert モデル [BA99] が挙げられる．公開日の講演では，複雑ネットワーク上のランダムウォークを考え，特異的な現象を見出すことを目指し，そのためのアプローチの一つとして遷移確率が長距離相関を持つような正方格子上のランダムウォークに変換することを提案した．

2.7 行列式点過程の離散近似と L^2 空間の等長変換 (長田翔太)

2.7.1 背景および着想

長田は，行列式点過程を用いたモンテカルロ法に関する文献 [BH20] を調査した．行列式点過程はランダム行列の固有値分布，全域一様木，一様タイリングなど様々な対象の中に現れる構造である．負の相関を持つため粒子同士が互いに近づきすぎないという性質を持っており，Poisson 点過程や独立同分布に従った無相関なサンプリングとは異なる様相を持っており，repulsive な粒子配置サンプリングの実現に用いられる．上述の [BH20] は，特別な性質を満たす行列式点過程をルベーグ測度の近似として用いたモンテカルロ法を研究しており，コンパクトなサポートを持つ C^1-級関数に対して積分を行列式点過程による線形統計量近似した場合，粒子数を増やす際の近似の分散のオーダーが Gauss 求積と比較して小さいということが知られている．

2.7.2 発表および提案内容

公開日では上述の論文を紹介し，サンプリングに関する提案を行った．線形統計量の分散の小ささは，直交多項式の和でカーネルが構成される行列式点過程に見られる性質であるため，ハイパーキューブ上の rigid な行列式点過程に対し粒子数に関する極限に条件を課せば同様の結果が期待できる．一方で，行

列式点過程は一般にサンプリングは計算コストは独立に粒子をサンプリングした場合の 3 乗であり，上述の論文ではコストを下げる工夫に関しては考察されていない．そこで，行列式点過程の離散近似 [?] を用いることで独立な点過程と行列式点過程の補間的なサンプリングを試みることを提案した．この場合，分散は大きくなることが予想されるため，サンプリングコストと近似制度のトレードオフを行うという問題を提案した．

3 非公開日

非公開日は，公開日のワークショップを元に以下の問題に取り組んだ：

(A) Ising 模型の実社会の問題への応用．

(B) 行列式点過程を用いたモンテカルロ法のサンプリングコストと近似精度とのトレードオフ．

3.1 (A) Ising 模型の実社会の問題に応用

統計力学において強磁性体の典型的なモデルである Ising 模型は，機械学習の文脈では Boltzmann 機械とも呼ばれる．両者は動機が異なっており，前者は数学的なグラフの頂点と辺に与えた重みからグラフ上の安定なスピン配置を求めることに動機があるのに対し，後者は逆にいくつかのスピンは位置から適当な重みを推定することに動機がある．Ising 模型を実社会の問題への応用について，以下の提案を行った：

1. 実社会に即した問題を組合せ最適化問題として定式化し，それを焼きなまし法で解く．
2. Boltzmann 機械に対して，従来のものと異なる「近さ」を導入することで，モデル分布が真の分布へ収束する速さや精度を数学的に評価する．
3. 隠れ層を深層化した制限 Boltzmann 機械が，十分大きい頂点数の 1 つの隠れ層のみをもつ制限 Boltzmann 機械に等価であることを数学的に証明する．
4. 焼きなまし法や勾配降下法の更新式において，そのスケーリング極限を取ることによって，対応する偏微分方程式を導出する．

1 は既に確立されている手法の応用であり，具体的な問題を探すことに主眼がある．焼きなまし法は，Ising 模型のエネルギー的に最も安定な状態（基底状態）を求めるアルゴリズムとして知られている．例えば，コストを最小化するような旅程を求めることなど，ある種の社会問題は膨大な組合せの中から最小値を与える状態を探す必要に迫られることが多々ある．そのような組合せ最適化問題は，Ising 模型に翻訳して焼きなまし法を適用することで，最適解を探すことができる．特定の問題に対する Ising 模型への翻訳手法は見出されている．それを足掛かりに新たな問題を Ising 模型に翻訳することで，最適化問題を解決できると考えられる．

2 は従来と異なる新しい手法を導入する試みである．現在の（統計的）機械学習では，データが何らかの分布に従って生成されていると考え，それを Gibbs 分布で推定している．推定の際には専ら Kullback-Leibler 情報量を分布間の距離と見なし，そのコストを最適化している．こういった距離を問題の（グラフの）種類に応じて変化させることで，過学習や最適化の困難などを解決できるか検討する余地があると思われる．特に，距離に応じて収束の仕方がどのように変化するのか評価を行うことで，これらの困難を解決可能か検討できると思われる．

3 は近年活発に研究されている深層学習と関連する話題である．二部グラフ上で考えた Boltzmann 機械を制限 Boltzmann 機械という．二部グラフの一方の頂点集合を可視層，もう一方の頂点集合を隠れ層

と呼ぶ．この隠れ層の頂点数を十分大きくしたときに，任意の分布が Gibbs 分布で表現可能なことが知られている．しかし，そのような操作は実装上の困難を伴う．また，実用上は隠れ層を 1 つのみならず，いくつも重ねること（深層化）で，十分な表現能力を備えられることが経験的に知られている．これを理論的に解明することは，機械学習の分野で現在抱えている「学習の結果得られたモデルの解釈」問題に一石を投じられると期待できる．また，深層 Boltzmann 機械での結果の深層ニューラルネットワークへの応用可能性も考えられる．

4 は従来の最適化手法と異なる観点を提供するものである．機械学習の最適化問題には専ら勾配降下法が用いられてきた．それを確率測度から成る距離空間上の勾配流による時間発展と捉え直し，そのスケーリング極限を取ることで偏微分方程式を導く．その偏微分方程式を解析することで，別の観点から焼きなまし法や勾配降下法の問題にアプローチできる可能性がある．

3.2 (B) : 行列式点過程を用いたモンテカルロ法のサンプリングコストと近似精度とのトレードオフ

モンテカルロ法の目的は，d 次元の超立方体 $I^d = [-1,1]^d \subset \mathbb{R}^d$ 上の実数値関数 $f : I^d \to \mathbb{R}$ の I^d 上の測度 μ に関する積分値を，適切な点集合 $\{x_1, \dots, x_N\} \subset I^d$ 上の重み付き和で近似することである：

$$\int_{I^d} f(x)\mu(dx) \approx \sum_{n=1}^{N} \omega_n(x_1, \dots, x_N) f(x_n).$$

近似したい関数のクラスと測度に対する適切な点集合 $\{x_1, \dots, x_N\}$ の選び方が問題となる．例えば，$d = 1$ では，多項式関数とルベーグ測度に対してガウス求積が知られている．行列式点過程は反発力が働く粒子系を表しており，空間上に一様に分布する粒子系をサンプルできる．[BH20] では，一般の次元において，I^d 上のコンパクトサポートな関数とルベーグ測度に対し，多重直交多項式を用いて構成した行列式点過程のサンプルにおける重み付き和が良い近似を与えることを示している．一方で，行列式点過程のサンプリングは，一般には粒子数の 3 乗のオーダーのコストがかかることが知られている．本共同利用では計算コストの改善を実行するために以下の提案を行った：

1. 行列式点過程の離散表現を応用する．
2. サンプリングコストと近似精度のトレードオフを評価する．

空間 S 上の点過程とは，配置空間（$=$ S 上の点測度の可算和で表されるラドン測度からなる空間）上の確率測度である．点過程は，空間上の各場所の粒子の存在確率密度を与える n 点相関関数と呼ばれる関数族で特徴づけられる．特に 1 点相関関数は点密度と呼ばれ，粒子の存在密度を表す．行列式点過程とは，相関関数 $\{\rho^n\}_{n\in\mathbb{N}}$ が 1 つのカーネル $K : S \times S \to \mathbb{C}$ の行列式で与えられる点過程である：

$$\rho^n(x_1, \dots, x_n) = \det[K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^n.$$

S 上のカーネルが（S 上のラドン測度 λ の下で）トレースクラスであるとは, 付随する $L^2(S, \lambda)$ 上の積分作用素がトレースクラスとなることである．カーネルが局所トレースクラスであるとは，任意のコンパクト集合 $A \subset S$ に対して，カーネルに付随する積分作用素の $L^2(A, \lambda)$ 上への制限がトレースクラスとなることである．エルミート対称かつ局所トレースクラスであるカーネルに対して，行列式点過程の存在定理が知られている [ST1, Sosh]．以下では，カーネルはエルミート対称かつ局所トレースクラスであるとする．

行列式点過程の離散表現とは, 空間の可算分割 A_i $(i = 1, 2, \dots)$ が与えられたとき, 各分割内にある粒子の個数分布 $\{\xi(A_i)\}_i$ と分布が等しくなるような離散空間 $\{1, 2, \dots\}$ 上の (行列式点過程とは限らない) 点過程 $\eta = \{\eta(\{i\})\}_i$ を構成することである．

Goldman [Gol10, Proposition 12, Lemma 16] では，カーネルの固有関数展開に基づく行列式点過程の離散表現について考察している．そこでは，カーネルが有限個の固有値 $0 < \alpha_i < 1$, $n = 1, \dots, M$ と正

規直交系 $\{\psi_i\}_{i=1}^M$ により $K(x,y)=\sum_{i=1}^M \alpha_n\psi_i(x)\psi_i(y)$ と表現されている場合に限り, 有限分割 $\{A_i\}_{i=1}^N$ に対応する離散表現を与え, その後 Lyons [Lyo14, Proposition 12, 16] は Goldman の結果をカーネルがトレースクラス, 分割が可算分割の場合にまで拡張した.

離散表現の局所トレースクラスなるカーネルへの拡張は, まず長田-長田 [OO18] により状態空間に関する非常に緩い仮定の下で達成された. なお, この仮定は例えば Euclid 空間に対しては Haar ウェーブレット基底の存在を仮定するという, [OO18] の目的である行列式点仮定の末尾自明性を示すためには自然な仮定である. 最終的に Lyons [Lyo18] によりこの仮定も外され, 一般の状態空間の上での局所トレースクラスなるカーネルを持つ行列式点過程の離散表現が与えられた.

本共同利用では, 応用上 [OO18] のような Haar ウェーブレット基底が具体的に存在する状況で, ウェーブレットの分解能と行列式点過程の離散近似の定量的評価との関連性を研究した. 一般の行列式点過程の N 粒子のサンプリングには N^3 のオーダーのコストがかかるが，離散空間上の行列式点過程の中には，$N\log N$ でサンプル可能なものが知られている（例えば，[LP] の Chapter 4）. 離散表現を用いることで，より早いサンプリングが期待できる. また，離散表現によるサンプルと元の行列式点過程によるサンプルによる近似精度を比較することで，サンプリングコストと近似精度のトレードオフという問題が考えられる. 将来的に，コンパクトサポートでない Wavelet による離散近似を用いることで，分割レベルの対応はないが，例えば，独立性や「反発力」を見れるのではないかと期待している.

参考文献

[Kam15] 神嶌敏弘 編，麻生英樹，安田宗樹，前田新一，岡野原大輔，岡谷貴之，久保陽太郎，ボレガラダヌシカ 著『深層学習—Deep learning—』（近代科学社，2015 年）

[FKHKKS20] B.H. Fukushima-Kimura, S. Handa, K. Kamakura, Y. Kamijima, A. Sakai. Mixing time and simulated annealing for the stochastic cellular automata. Preprint. arXiv:2007.11287.

[Luc14] A. Lucas. Ising formulations of many NP problems. *Front. Phys.*, **12** (2014): `https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fphy.2014.00005`.

[Oso19] 恐神貴行『ボルツマンマシン』シリーズ 情報科学における確率モデル 2 （コロナ社，2019 年）

[RB08] N. Le Roux and Y. Bengio. Representational power of restricted boltzmann machines and deep belief networks. *Neural Comput.* **20** (2008): 1631–1649.

[TTK19] 田中章詞，富谷昭夫，橋本幸士『ディープラーニングと物理学　原理がわかる、応用ができる』（講談社，2019 年）

[IN14] 伊藤秀剛, 西成活裕, TASEP を用いた交差点における車と歩行者の交通モデルの解析, 交通流シミュレーションシンポジウム論文集, **20**, (2014).

[T19] 友枝 明保, 「渋滞」を分析する数理モデルとしてのセルオートマトンとその応用, システム・制御・情報 = Systems, control and information : システム制御情報学会誌, **63**, (2019).

[A20] Y. Arai, The KPZ fixed point for discrete time TASEPs, *J. Phys. A*, **53**, 415202, (2020).

[RSSS98] N.Rajewsky, L. Santen, A. Schadschneider and M. Schreckenberg, *J. stat. Phys.* **92**, 151-194, (1998).

[W86] S. Wolfram, *Theory and Applications of Cellular Automata*, (Singapore: World Scientific), (1986).

[RV-E18] G. M. Rotsoff and E. Vanden-Eijnden *Trainability and Accuracy of Neural Networks: An Interacting Particle System Approach.* arXiv: 1805.00915

[Hu14] G. Hu. Besov and Triebel-Lizorkin spaces associated with non-negative self-adjoint operators. *J. Math. Anal. Appl.*, 411(2):753–772, 2014.

[Mor21] 森隆大. L^p-Kato 測度と Dirichlet 空間の Sobolev 埋め込みとの関係について. 京都大学数理解析研究所講究録 **2177**, 2021.

[Osa20] S. Osada. Tree representations of α-determinantal point processes. In *Stochastic Analysis on Large Scale Interacting Systems*, RIMS Kôkyûroku Bessatsu, B79, pages 33–49. Res. Inst. Math. Sci. (RIMS), Kyoto, 2020.

[BA99] A.-L. Barabási and R. Albert: *Emergence of scaling in random networks*, Science **286**, 509-512, 1999.

[WS98] D.J. Watts and S.H. Strogatz: *Collective dynamics of small-world networks*, Nature **393**, 440-442, 1998.

[BH20] R. Bardenet and A. Hardy. Monte Carlo with determinantal point processes. *Ann. Appl. Probab.*, 30(1):368–417, 2020.

[ST1] Shirai, Tomoyuki, and Yoichiro Takahashi. "Random point fields associated with certain Fredholm determinants I: fermion, Poisson and boson point processes." Journal of Functional Analysis 205.2 (2003): 414-463.

[Sosh] Soshnikov, Alexander. "Determinantal random point fields." Russian Mathematical Surveys 55.5 (2000): 923.

[Gol10] A. Goldman. The Palm measure and the Voronoi tessellation for the Ginibre process. *Ann. Appl. Probab.*, 20(1):90–128, 2010.

[Lyo14] R. Lyons. Determinantal probability: basic properties and conjectures. In *Proceedings of the International Congress of Mathematicians—Seoul 2014. Vol. IV*, pages 137–161. Kyung Moon Sa, Seoul, 2014.

[OO18] H. Osada and S. Osada. Discrete approximations of determinantal point processes on continuous spaces: tree representations and tail triviality. *J. Stat. Phys.*, 170(2):421–435, 2018.

[Lyo18] R. Lyons. A note on tail triviality for determinantal point processes. *Electron. Commun. Probab.*, 23:Paper No. 72, 3, 2018.

[LP] Lyons, Russell, and Yuval Peres. Probability on trees and networks. Vol. 42. Cambridge University Press, 2017.