論 文 の 内 容 の 要 旨

論文題目　Koksma–Hlawka 型不等式に基づくグラフ求積法の構成と解析
（Construction and Analysis of Graph Quadrature Based on Koksma–Hlawka Type Inequalities）

氏　　名　大城　隆之介

グラフ上の関数に対する数値積分公式を設計する「グラフ求積」の手法は，近年になって注目を集めており，様々な研究がなされている．グラフ求積の既存手法は大別すると二つに分けられる．一つ目はグラフ上の Gauss 型数値積分公式に対応するグラフィカルデザインと呼ばれる手法であり，もう一つは，Koksma–Hlawka 型不等式に基づく手法である．本研究では後者の手法に注目する．グラフ上の関数についての Koksma–Hlawka 型不等式として，既存手法で用いられているものとして，Linderman ら (2020) によるものや，Brown (2021) によるものがある．Linderman ら (2020) ではグラフラプラシアンのスペクトルによって定まる関数のノルムを用いて Koksma–Hlawka 型不等式を導出している．Koksma–Hlawka 型不等式は，関数の「大きさ」の定め方が重要になる．一方，Brown (2021) は，1-Wasserstein 距離に関する Koksma–Hlawka 型不等式を導出している．

本研究では，Koksma–Hlawka 型不等式に基づき，カーネル求積に基づくアプローチと，1-Wasserstein 距離の最小化によるアプローチの二つを提案する．

カーネル求積に基づくアプローチでは，まず，Seto ら (2014) によって導入された再生核に変数を加えることにより定義される Sobolev 様ノルムを用いたグラフ上の再生核 Hilbert 空間を新たに考える．そして，その空間に対し，カーネル求積の立場からグラフ求積法を構成することを提案する．そこでは，カーネル求積の手法として一定の成功を収めている，カーネルハーディングと等価な手法である Frank–Wolfe 法，およびその亜種である Away-Steps Frank–Wolfe 法を適用した．Away-Steps Frank–Wolfe 法によって得られるグラフ上の数値積分公式について，Lacoste-Julien ら (2015) の結果から理論的な誤差の収束速度を導出できる．これにより，ASFW 法に基づくグラフ求積の最悪誤差は，その数値積分公式に用いる点数に対し指数収束をし，また収束の速さはグ

ラフラプラシアンの最大固有値に依存し，それが小さいほど高速であることを証明した．なお数値実験では，FW 法と ASFW 法により得られる数値積分法は性能にほとんど差がないことが確認された．

1-Wasserstein 距離の最小化によるアプローチについては，本研究は数値積分公式の重みの制約に応じ，以下の二種類の異なるグラフ求積の構成法を提案する．均等重みの場合はペナルティを付与し問題を緩和した上で DC （Difference of Convex functions）計画に帰着させるアプローチを，非均等重みの場合は *k*-メディアン問題に基づくアプローチを提案する．どちらもグラフ上の厳密な積分の測度と数値積分に対応した測度の間の 1-Wasserstein 距離を直接最小化することにより，数値積分公式を設計する．この最小化問題は非凸最小化問題となり困難であるため，均等重みの場合はペナルティを付与し問題を緩和した上で，DC 計画によるアプローチを用いて最小化を行い，数値積分公式を設計した．また，その際に用いたアルゴリズムの停止性の証明も行った．非均等重みの場合は，この最小化問題が *k*-メディアン問題に帰着されることをまず証明した．その上で，既存の *k*-メディアン問題の近似アルゴリズムを適用して数値積分公式を設計した．さらに，数値実験により性能を検証した．