

幾何と機械学習 : A short intro

2022年4月18日

瀧川 一学

ichigaku.takigawa@riken.jp

1. 幾何的深層学習(GDL)とGraph Neural Networks(GNNs)
2. トポロジカルデータ解析(TDA)
3. 多様体学習
4. 情報幾何学

2は青木さんが解説されるので詳細省略！

Geometrical and Topological Representation Learning

<https://gt-rl.github.io/cfp>

ICLR Workshop on Geometrical and Topological Representation Learning

Scope and topics

- Applications of geometry- or topology-based models
- Approximation schemes in topological data analysis
- Big data and scalability aspects
- Equivariant neural networks
- Graph representation learning
- Higher-order features of unstructured and structured data sets
- Manifold learning at scale
- Message passing and beyond
- New datasets and benchmarks
- Topological machine learning



1. 幾何的深層学習とGraph Neural Networks
2. トポロジカルデータ解析
3. 多様体学習

2は青木さんが解説されるので詳細省略！

なぜ機械学習で幾何を考えるのか？

1. 対象が幾何構造を持つ

→ 計算幾何 (CV, CG, 地理情報, etc)

※ 代数幾何

(渡辺澄夫先生のご研究)

→ 位相幾何 (材料科学, 物理, etc)

2. 対象が幾何構造上に分布する

→ 微分幾何 (多様体学習)

都合上、2→3→1で紹介します

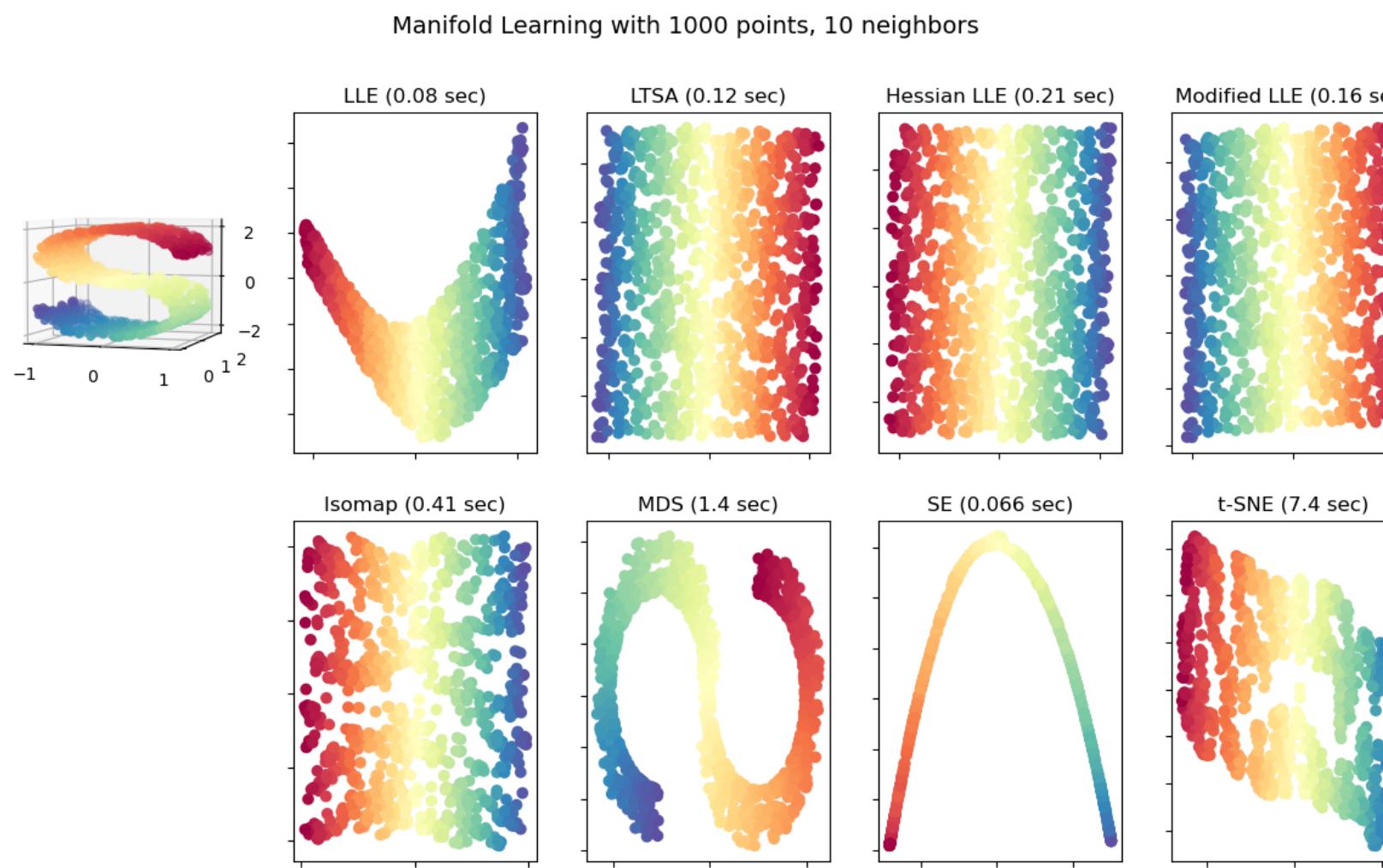
(青木さんの話は1の位相幾何)

3. 機械学習モデルが幾何構造を持つ

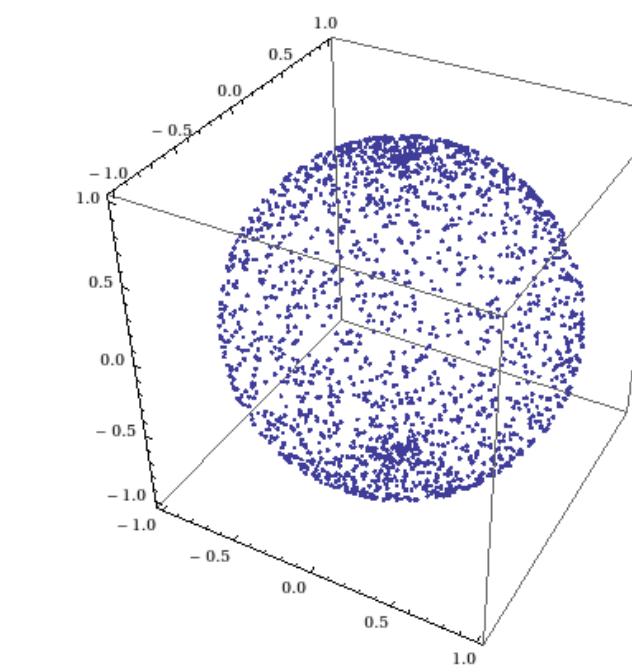
→ 微分幾何 (情報幾何)

2. 対象が幾何構造上に分布する

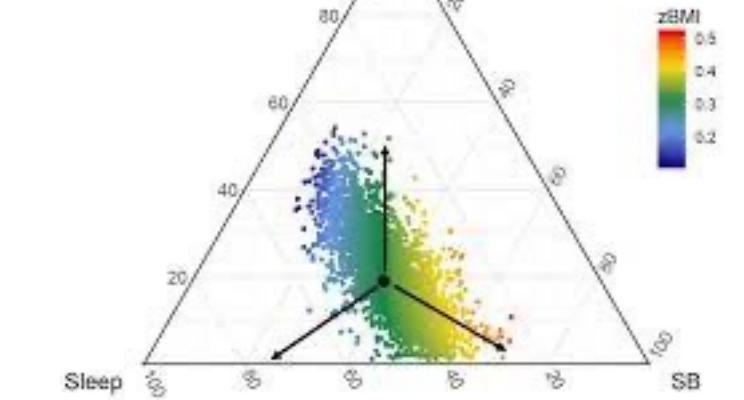
この中では多くの人にとって**多様体学習等**として一番馴染みがあるので
(PCA, MDS, Isomap, LLE, t-SNE, UMAP, etc)



Angular Data
or Directional Statistics
(Riemannian manifolds,
Stiefel manifold, etc)



Compositional Data
(Aitchison geometry)



2. 対象が幾何構造上に分布する

"多様体仮説" 高次元データは、より低次の部分多様体上にほぼ分布？

sklearn.manifold: Manifold Learning

The `sklearn.manifold` module implements data embedding techniques.

User guide: See the [Manifold learning](#) section for further details.

<code>manifold.Isomap(*[, n_neighbors, ...])</code>	Isomap Embedding.
<code>manifold.LocallyLinearEmbedding(*[, ...])</code>	Locally Linear Embedding.

<code>manifold.MDS([n_components, metric, n_init, ...])</code>	Multidimensional scaling.
--	---------------------------

<code>manifold.SpectralEmbedding([n_components, ...])</code>	Spectral embedding for non-linear dimensionality reduction.
--	---

<code>manifold.TSNE([n_components, perplexity, ...])</code>	T-distributed Stochastic Neighbor Embedding.
---	--

<code>manifold.locally_linear_embedding(X, *, ...)</code>	Perform a Locally Linear Embedding analysis on the data.
---	--

<code>manifold.smacof(dissimilarities, *[, ...])</code>	Compute multidimensional scaling using the SMACOF algorithm.
---	--

<code>manifold.spectral_embedding(adjacency, *, [, ...])</code>	Project the sample on the first eigenvectors of the graph Laplacian.
---	--

<code>manifold.trustworthiness(X, X_embedded, *, [, ...])</code>	Expresses to what extent the local structure is retained.
--	---

2. 対象が幾何構造上に分布する

IsomapとLLEの論文が立て続けにScienceに出て認知度向上に大貢献？

Science. 2000 Dec 22;290(5500):2319-23

Science. 2000 Dec 22;290(5500):2323-6.

A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction

Joshua B. Tenenbaum,^{1*} Vin de Silva,² John C. Langford³

Scientists working with large volumes of high-dimensional data, such as global climate patterns, stellar spectra, or human gene distributions, regularly confront the problem of dimensionality reduction: finding meaningful low-dimensional structures hidden in their high-dimensional observations. The human brain confronts the same problem in everyday perception, extracting from its high-dimensional sensory inputs—30,000 auditory nerve fibers or 10^6 optic nerve fibers—a manageably small number of perceptually relevant features. Here we describe an approach to solving dimensionality reduction problems that uses easily measured local metric information to learn the underlying global geometry of a data set. Unlike classical techniques such as principal component analysis (PCA) and multidimensional scaling (MDS), our approach

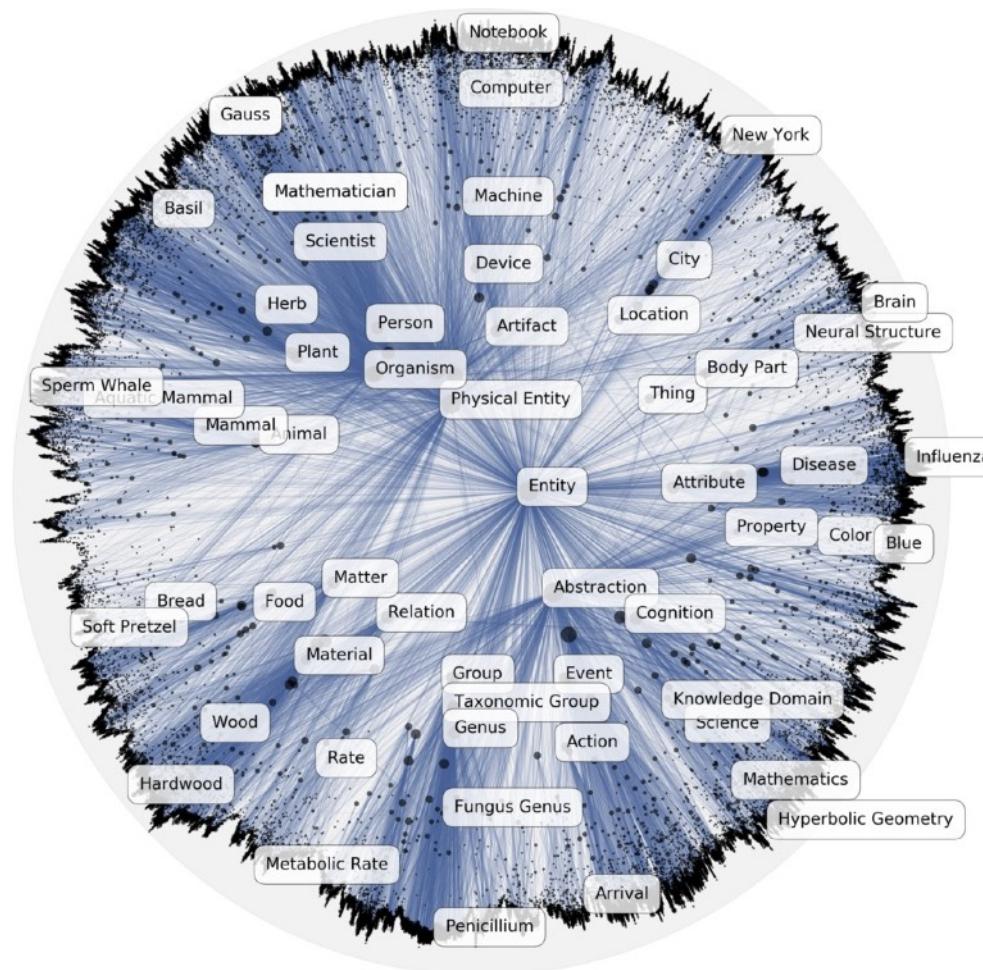
Nonlinear Dimensionality Reduction by Locally Linear Embedding

Sam T. Roweis¹ and Lawrence K. Saul²

Many areas of science depend on exploratory data analysis and visualization. The need to analyze large amounts of multivariate data raises the fundamental problem of dimensionality reduction: how to discover compact representations of high-dimensional data. Here, we introduce locally linear embedding (LLE), an unsupervised learning algorithm that computes low-dimensional, neighborhood-preserving embeddings of high-dimensional inputs. Unlike clustering methods for local dimensionality reduction, LLE maps its inputs into a single global coordinate system of lower dimensionality, and its optimizations do not involve local minima. By exploiting the local symmetries of linear reconstructions, LLE is able to learn the global structure of nonlinear manifolds, such as those generated by images of faces or documents of text.

2. 対象が幾何構造上に分布する

NLPの単語などシンボリックデータは階層性(木構造)を伴うのでEuclid空間ではなく双曲空間(n次元Poincaré球)にembeddingする方が、めちゃ効率的だと示した
Poincaré Embeddingsも当時話題に！



Riemannian geometry, Gyrovector space, etc

NIPS2017

<https://arxiv.org/abs/1705.08039>

**Poincaré Embeddings for
Learning Hierarchical Representations**

Maximilian Nickel
Facebook AI Research
maxn@fb.com

Douwe Kiela
Facebook AI Research
dkiela@fb.com

2. 対象が幾何構造上に分布する

ICLR Computational Geometry & Topology Challenge 2022

<https://github.com/geomstats/challenge-iclr-2022>

The purpose of this challenge is to foster reproducible research in geometric (deep) learning, by crowdsourcing the open-source implementation of **learning algorithms on manifolds**. Participants are asked to contribute code for a published/unpublished algorithm, following Scikit-Learn/[Geomstats](#)' or pytorch's APIs and computational primitives, benchmark it, and demonstrate its use in real-world scenarios.

↳ 何でも良いから実装を実問題のユースケースでデモしあうクラウドソーシングで知見収集
(賞金 : 1位 \$2000, 2位 \$1000, 3位 \$500)

[Geomstats](#)というパッケージ(後述)のgithub repoにプルリクを送る形でホストされている

2. 対象が幾何構造上に分布する

去年のChallengeが論文になっていたので見てみると…

The screenshot shows a red-themed arXiv preprint page. At the top left is the arXiv logo. To the right are search and help links. The main title is "Computer Science > Computational Geometry". Below it, the submission details say "[Submitted on 22 Aug 2021 (v1), last revised 25 Aug 2021 (this version, v2)]". The title of the paper is "ICLR 2021 Challenge for Computational Geometry & Topology: Design and Results". The authors' names are listed in blue. A summary of the paper follows, mentioning the ICLR 2021 workshop and the competition's goals. At the bottom, there are subjects, citation information, and a DOI link.

arXiv > cs > arXiv:2108.09810

Search...
Help | Advanced S

Computer Science > Computational Geometry

[Submitted on 22 Aug 2021 (v1), last revised 25 Aug 2021 (this version, v2)]

ICLR 2021 Challenge for Computational Geometry & Topology: Design and Results

Nina Miolane, Matteo Caorsi, Umberto Lupo, Marius Guerard, Nicolas Guiui, Johan Mathe, Yann Cabanes, Wojciech Reise, Thomas Davies, António Leitão, Somesh Mohapatra, Saiteja Utpala, Shailja Shailja, Gabriele Corso, Guoxi Liu, Federico Iuricich, Andrei Manolache, Mihaela Nistor, Matei Bejan, Armand Mihai Nicolicioiu, Bogdan-Alexandru Luchian, Mihai-Sorin Stupariu, Florent Michel, Khanh Dao Duc, Bilal Abdulrahman, Maxim Beketov, Elodie Maignant, Zhiyuan Liu, Marek Černý, Martin Bauw, Santiago Velasco-Forero, Jesus Angulo, Yanan Long

This paper presents the computational challenge on differential geometry and topology that happened within the ICLR 2021 workshop "Geometric and Topological Representation Learning". The competition asked participants to provide creative contributions to the fields of computational geometry and topology through the open-source repositories Geomstats and Giotto-TDA. The challenge attracted 16 teams in its two month duration. This paper describes the design of the challenge and summarizes its main findings.

Subjects: Computational Geometry (cs.CG); Differential Geometry (math.DG); General Topology (math.GN)

Cite as: arXiv:2108.09810 [cs.CG]
(or arXiv:2108.09810v2 [cs.CG] for this version)
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2108.09810> ⓘ

2. 対象が幾何構造上に分布する

昨年はGeomstatsもしくはGiotto-TDAを使ったNotebookを作るお題? (Abstractでも言及)

Computational Geometry and Topology Challenge The ICLR 2021 Computational Geometry and Topology Challenge aimed to address these issues by encouraging researchers to delve into open-source implementations of differential geometry and topology. The participants were asked to create computational notebooks using the open-source software Geomstats (Miolane et al., 2020) and Giotto-TDA (Tauzin et al., 2020). The goal was to showcase some of the aforementioned “appropriate tools” for modern research in the mathematical sciences. The participants of the challenge were rewarded by the publication of the present paper and with prizes for the three winning teams.

- [Geomstats: A Python Package for Riemannian Geometry in Machine Learning \(2020\)](#)
<https://arxiv.org/abs/2004.04667>
- [giotto-tda: A Topological Data Analysis Toolkit for Machine Learning and Data Exploration \(2020\)](#)
<https://arxiv.org/abs/2004.02551>

2. 対象が幾何構造上に分布する

- Geomstats: A Python Package for Riemannian Geometry in Machine Learning (2020)
<https://arxiv.org/abs/2004.04667>

4. Usage: Examples of Learning on Riemannian manifolds

The folder `examples` provides sample codes to get started with GEOMSTATS. More involved GEOMSTATS applications can be found at: github.com/geomstats/applications. This section illustrates the use of GEOMSTATS to generalize learning algorithms to Riemannian manifolds. The following code snippet illustrates the use of K -means on the hypersphere.

```
sphere = Hypersphere(dimension=5)
clustering = OnlineKMeans(metric=sphere.metric, n_clusters=4)
clustering = clustering.fit(data)
```

The following code snippet shows the use of tangent PCA on the 3D rotations.

```
so3 = SpecialOrthogonal(n=3)
metric = so3.bi_invariant_metric
tpca = TangentPCA(metric=metric, n_components=2)
tpca = tpca.fit(data, base_point=metric.mean(data))
tangent_projected_data = tpca.transform(data)
```

2. 対象が幾何構造上に分布する

- Geomstats: A Python Package for Riemannian Geometry in Machine Learning (2020)
<https://arxiv.org/abs/2004.04667>

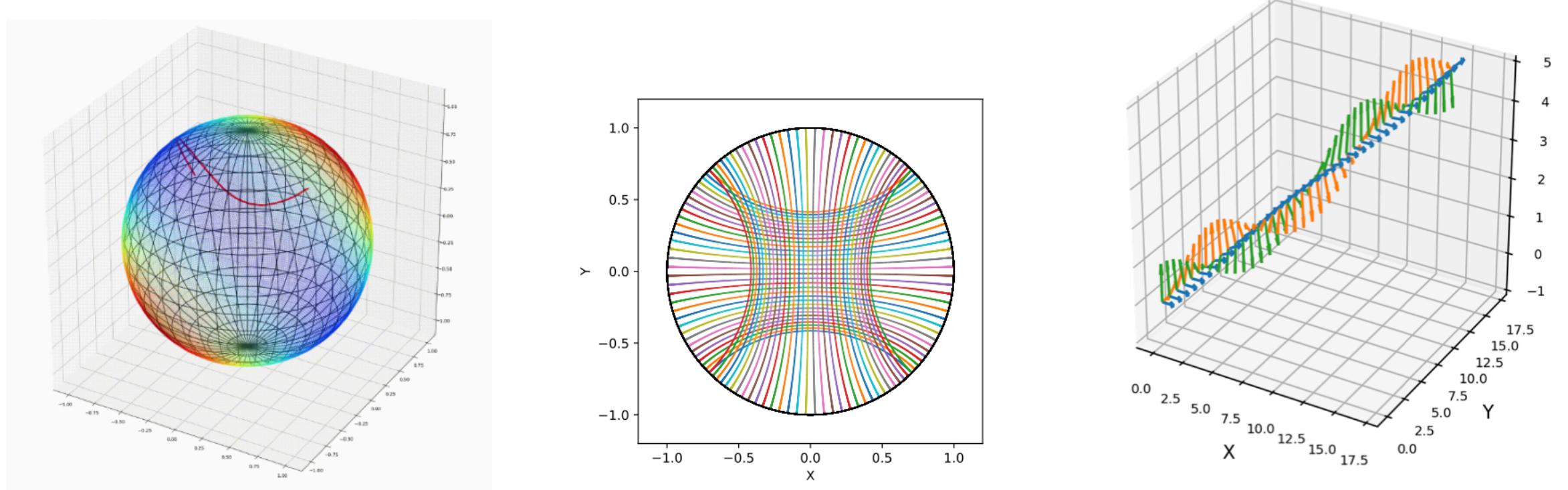
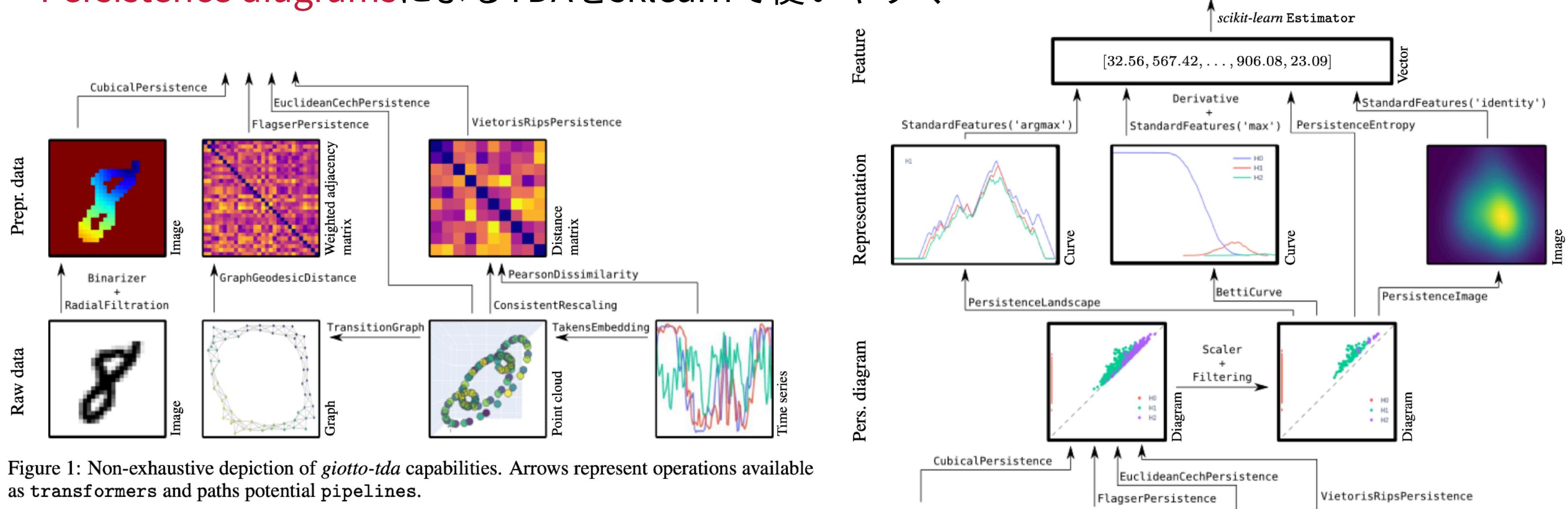


Figure 1: Left: Minimization of a scalar field on the sphere \mathbb{S}^2 using Riemannian gradient descent.
Middle: Regular geodesic grid on the hyperbolic space \mathbb{H}^2 in Poincaré disk representation.
Right: Geodesic on the Lie group $\text{SE}(3)$ for the canonical left-invariant metric.
These and more examples are available at geomstats.ai.

トポロジカルデータ解析(TDA) for 1. 対象が幾何構造を持つ

- giotto-tda: A Topological Data Analysis Toolkit for Machine Learning and Data Exploration (2020)
<https://arxiv.org/abs/2004.02551>

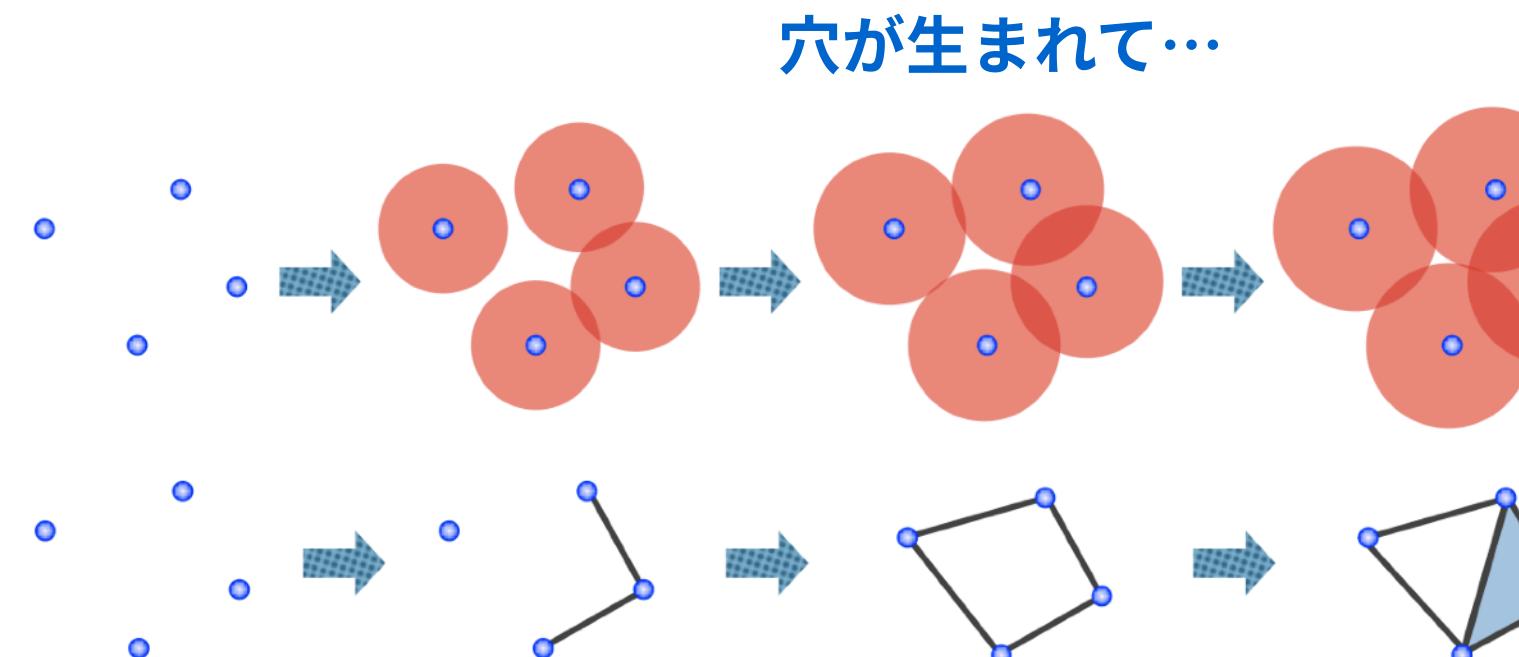
Persistence diagramsによるTDAをsklearnで使いやすく



計算ホモロジー

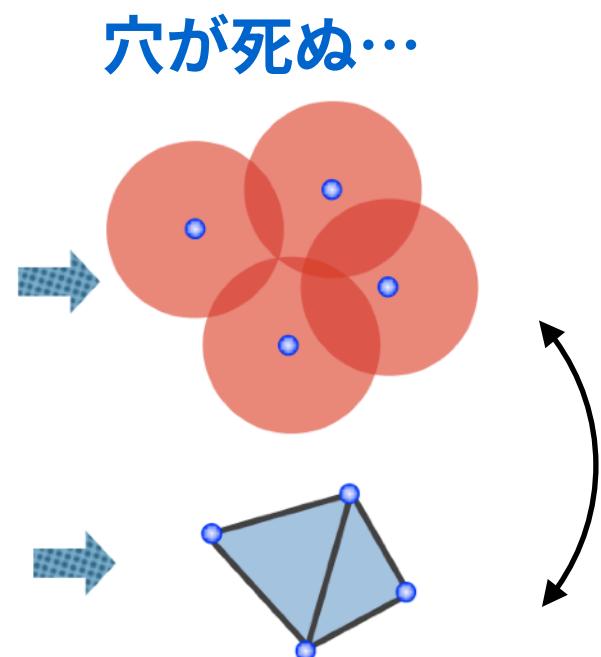
平岡先生の講義資料より借用 https://www.math.chuo-u.ac.jp/ENCwMATH/EwM70_Hiraoka.pdf

フィルトレーション



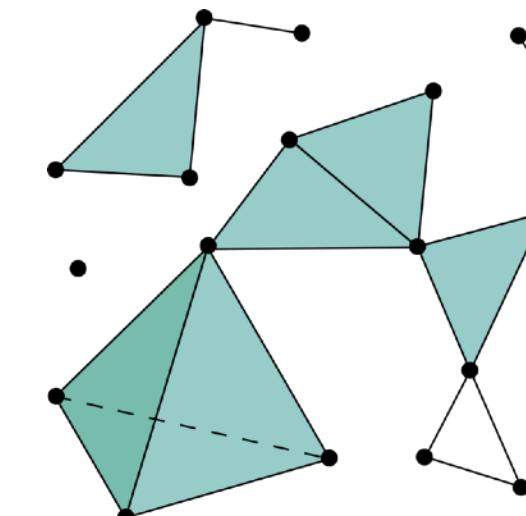
入力のPoint Setを「つながり」(穴が何個あいてるかで抽象)の変化で特徴づけ

穴が死ぬ…



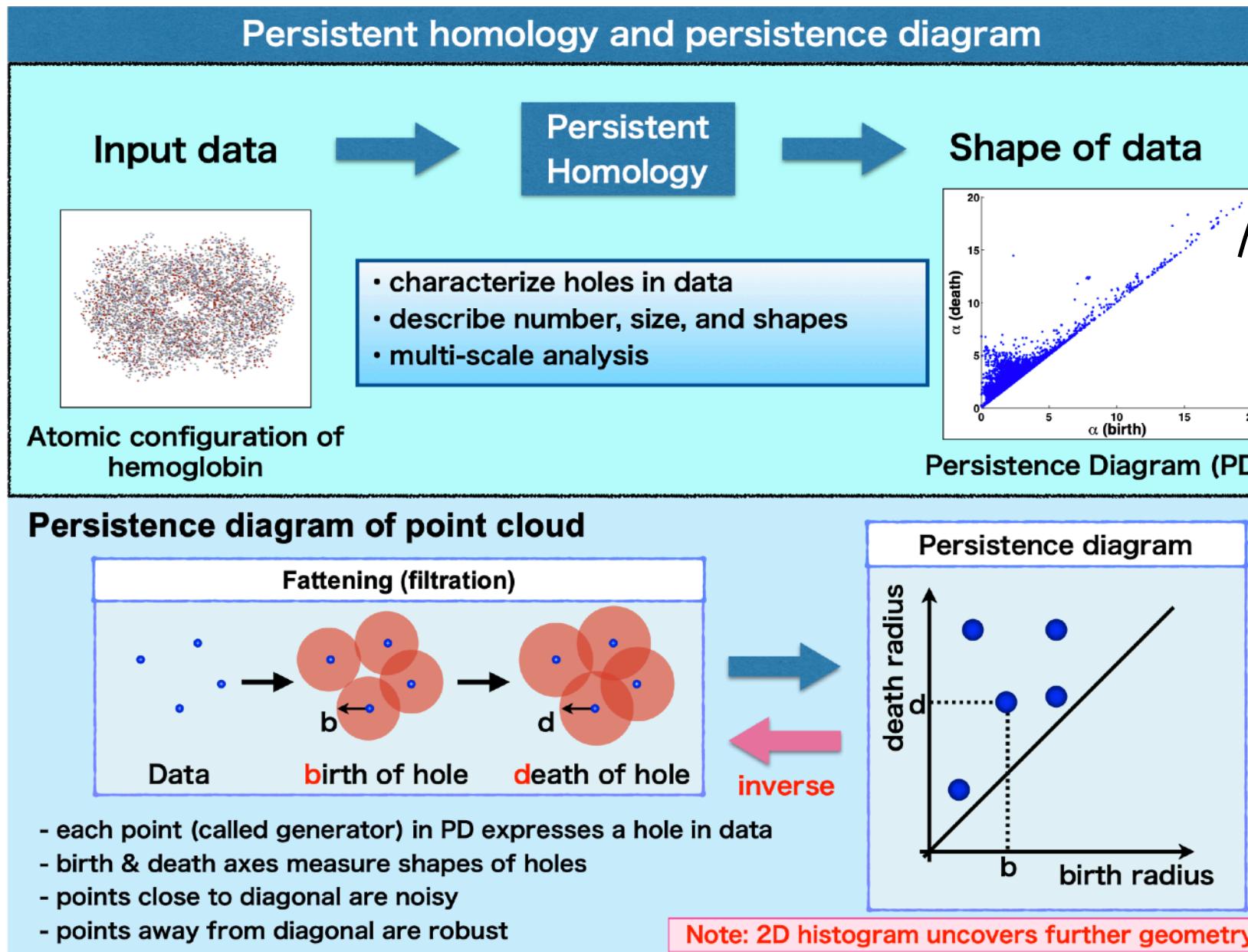
つながりだけ見れば
(トポロジとしては)
同じ！

単体複体(穴が計算可能!)

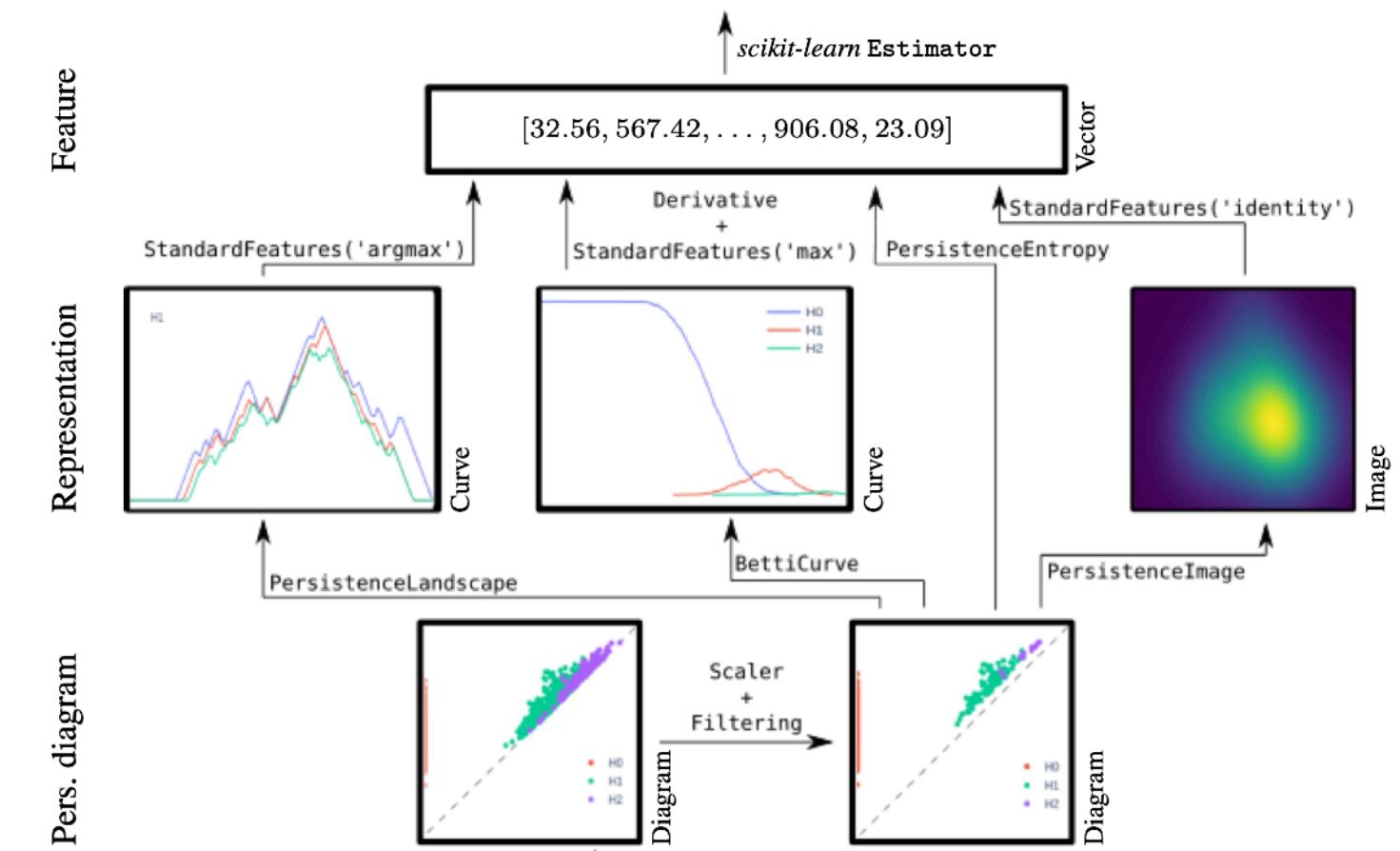


特徴量としてのPersistence diagrams (PDs)

平岡先生の講義資料より抜粋 https://www.math.chuo-u.ac.jp/ENCwMATH/EwM70_Hiraoka.pdf



このPDをさらに何らかの方法で
特徴量化して機械学習で使う



補足：TDAのユースケース

機械学習界隈では↓が有名? (citation数的に)

<https://www.jmlr.org/papers/volume16/bubenik15a/bubenik15a.pdf>

Journal of Machine Learning Research 16 (2015) 77-102

Submitted 7/14; Published 1/15

Statistical Topological Data Analysis using Persistence Landscapes

Peter Bubenik

*Department of Mathematics
Cleveland State University
Cleveland, OH 44115-2214, USA*

PETER.BUBENIK@GMAIL.COM

補足：TDAのユースケース

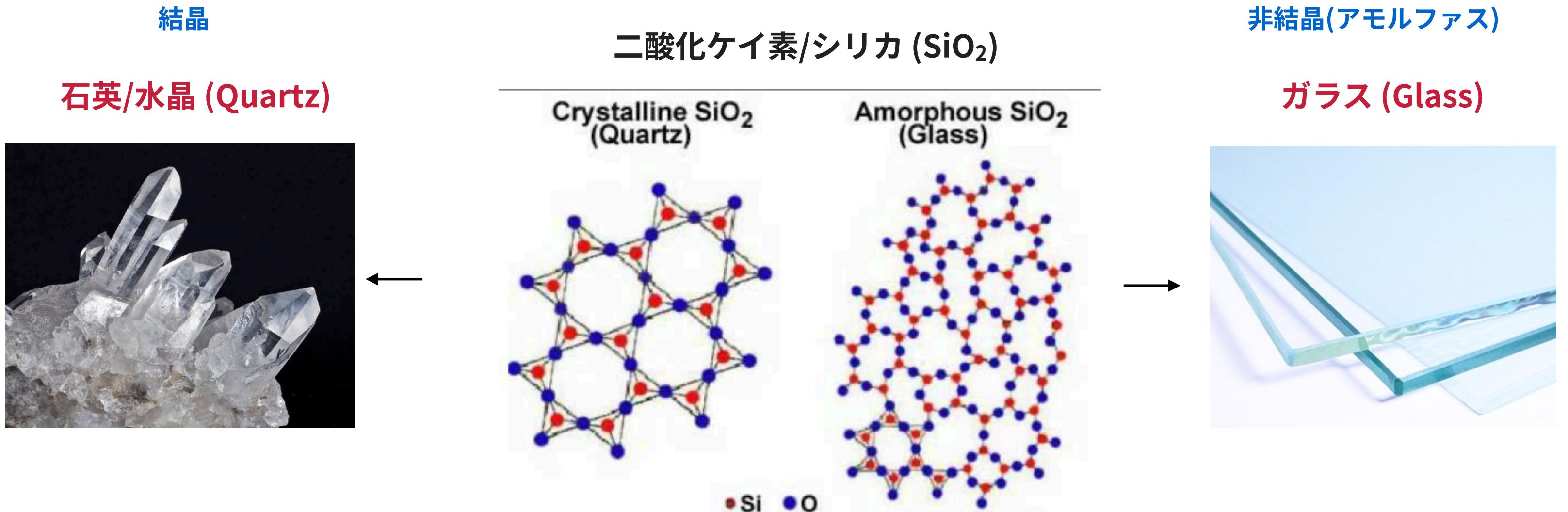


Fig. 1. Schematic of silica molecule.

Boussaa, S.A.; Kheloufi, A.; Zaourar, B.; Kerkar, F. Valorization of Algerian Sand for Photovoltaic Application. *Acta Phys. Pol. A* **2016**, 129, 133–137.

補足：TDAのユースケース

北大の小林・原渕・瀧川はこのさきがけ仲間

JST CREST 数理モデリング

【平岡 裕章】ソフトマター記述言語の創造に向けた位相的データ解析理論の構築

◀ トップに戻る

| 研究代表者



平岡 裕章

京都大学
高等研究院
教授

[研究チームのホームページ](#)

| 研究概要

本研究では、トポロジー、表現論、確率論、統計学を融合させた革新的データ解析手法を開発し、データ科学における新たな基盤技術を構築します。数学的手法の中心はパーシステントホモロジーと呼ばれる概念であり、データの「形」を定量的に記述する理論を確立します。更に、本手法をソフトマターの構造解析へ応用し、高機能ガラス材料設計や、疾患関連タンパク質のフォールディング構造解析といった挑戦的基礎研究を実施します。

JST さきがけ マテリアルズインフォ

【中村 壮伸】トポロジカルデータ解析に基づくアモルファス構造の包括的記述と特徴抽出

◀ トップに戻る

| さきがけ研究者



中村 壮伸

産業技術総合研究所
機能材料コンピュテーションナルデザイン研究センター
研究員

| 研究概要

結晶では幾何構造を記述する数理的手法がある事によってマテリアルズインフォマティクス(MI)の適用を可能にしました。他方、非晶質材料では幾何構造を記述する汎用的数理的手法がないためMIの適用を困難にしています。申請者は近年発明されたパーシステントホモロジーを用いて非晶質構造を記述する手法を提案し、MIの適用範囲を広げるとともにアモルファス材料の構造物性相関の指導原理を探求します。

補足：TDAのユースケース



平成28年6月14日

東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 (WPI-AIMR)
情報・システム研究機構 統計数理研究所 (ISM)
科学技術振興機構 (JST)

ガラスの「形」を数学的に解明 ～トポロジーで読み解く無秩序の中の秩序～

東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 (WPI-AIMR) の平岡 裕章 准教授、中村 壮伸 助教を中心とした研究グループは、統計数理研究所 (ISM) および科学技術振興機構 (JST) と共同で数学的手法を開発することで、ガラスに含まれる階層的な幾何構造を解明することに成功しました。

周期性を持たないガラスの原子配置構造は非常に複雑であり、その構造を理解するために、適切な記述法を開発することが長年求められていました。本研究グループは、トポロジー^{注1)} を応用することでこの問題を解決することに成功しました。さらに、ここで開発された数学手法は物質に特化しない普遍的なものであることから、情報ストレージや太陽光パネルなどのガラス開発に加え、マテリアルズインフォマティックス^{注2)} なども含めた幅広い材料開発への応用が期待されます。

本成果は、平成28年6月13日の週（米国東部時間）に、米国科学アカデミー紀要（PNAS）「Proceedings of the National Academy of Sciences」オンライン速報版に掲載されます。

参考: ガラスとGraph Neural Networks

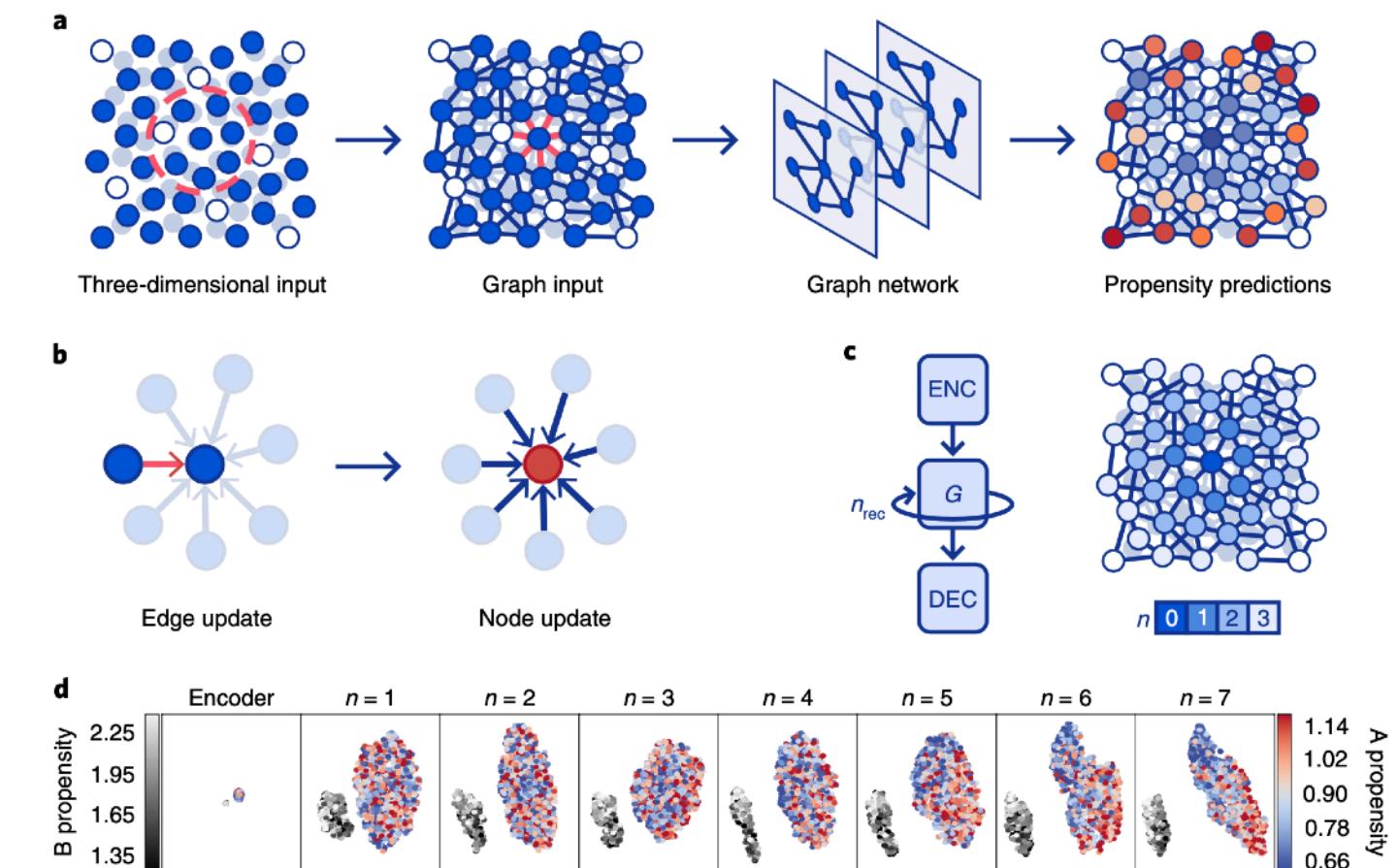
<https://www.deepmind.com/blog/towards-understanding-glasses-with-graph-neural-networks>



Unveiling the predictive power of static structure in glassy systems

V. Bapst^{1,3}✉, T. Keck^{1,3}, A. Grabska-Barwińska¹, C. Donner¹, E. D. Cubuk², S. S. Schoenholz², A. Obika¹, A. W. R. Nelson¹, T. Back¹, D. Hassabis¹ and P. Kohli¹

Despite decades of theoretical studies, the nature of the glass transition remains elusive and debated, while the existence of structural predictors of its dynamics is a major open question. Recent approaches propose inferring predictors from a variety of human-defined features using machine learning. Here we determine the long-time evolution of a glassy system solely from the initial particle positions and without any handcrafted features, using graph neural networks as a powerful model. We show that this method outperforms current state-of-the-art methods, generalizing over a wide range of temperatures, pressures and densities. In shear experiments, it predicts the locations of rearranging particles. The structural predictors learned by our network exhibit a correlation length that increases with larger timescales to reach the size of our system. Beyond glasses, our method could apply to many other physical systems that map to a graph of local interaction.



Bapst, V., Keck, T., Grabska-Barwińska, A. et al. Unveiling the predictive power of static structure in glassy systems. *Nat. Phys.* **16**, 448–454 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41567-020-0842-8>

なぜ機械学習で幾何を考えるのか？

1. 対象が幾何構造を持つ

→ 計算幾何 (CV, CG, 地理情報, etc)

※ 代数幾何

(渡辺澄夫先生のご研究)

→ 位相幾何 (材料科学, 物理, etc)

2. 対象が幾何構造上に分布する

→ 微分幾何 (多様体学習)

都合上、2→3→1で紹介します
(青木さんの話は1の位相幾何)

3. 機械学習モデルが幾何構造を持つ

→ 微分幾何 (情報幾何)

情報幾何

超絶分かりやすい赤穂先生のスライドより、ド定番の一例を借用！

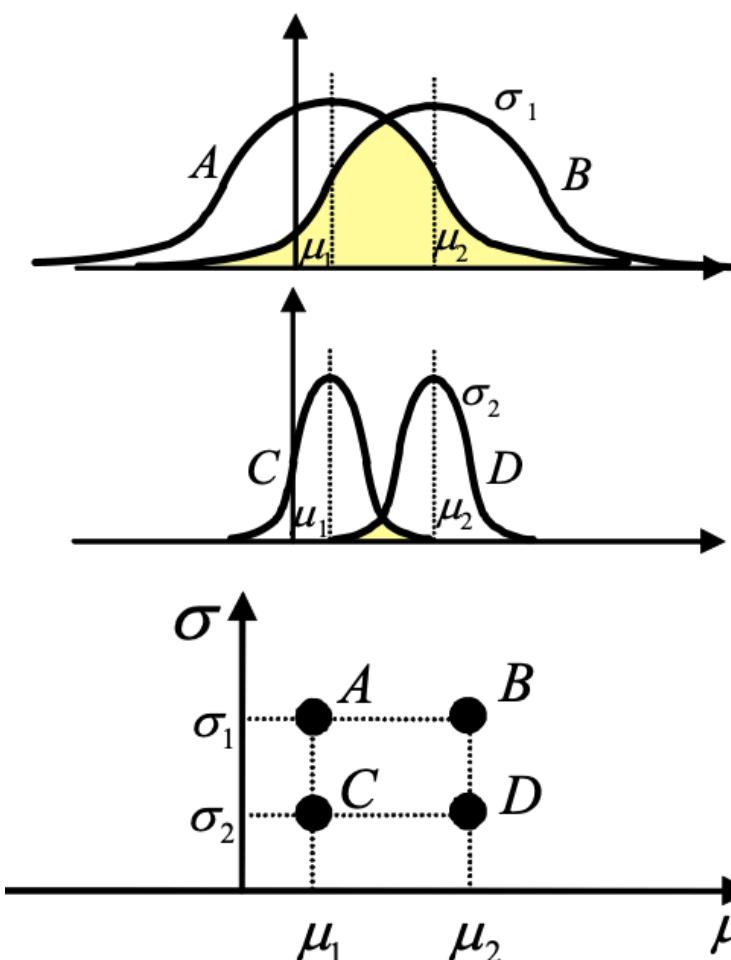
<https://staff.aist.go.jp/s.akaho/papers/infogeo.pdf>

正規分布 $N(\mu, \sigma)$ の集合
を μ, σ を座標にし Euclid
空間で表現すると…

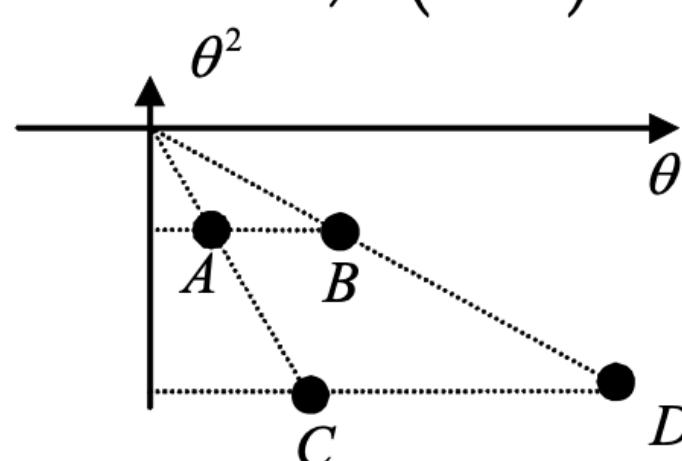
A-B と C-D の隔たりが
同じになってしまう！



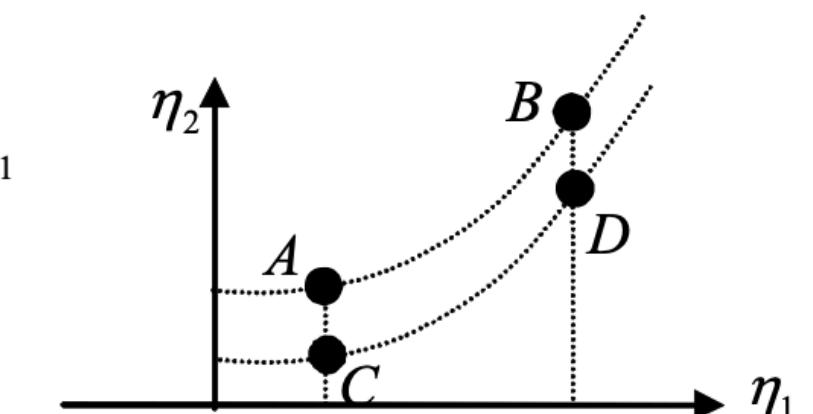
Fisher情報量を計量として
「曲がった空間」が適切



$$\theta^1 = \frac{\mu}{\sigma^2}$$
$$\theta^2 = -\frac{1}{(2\sigma^2)}$$



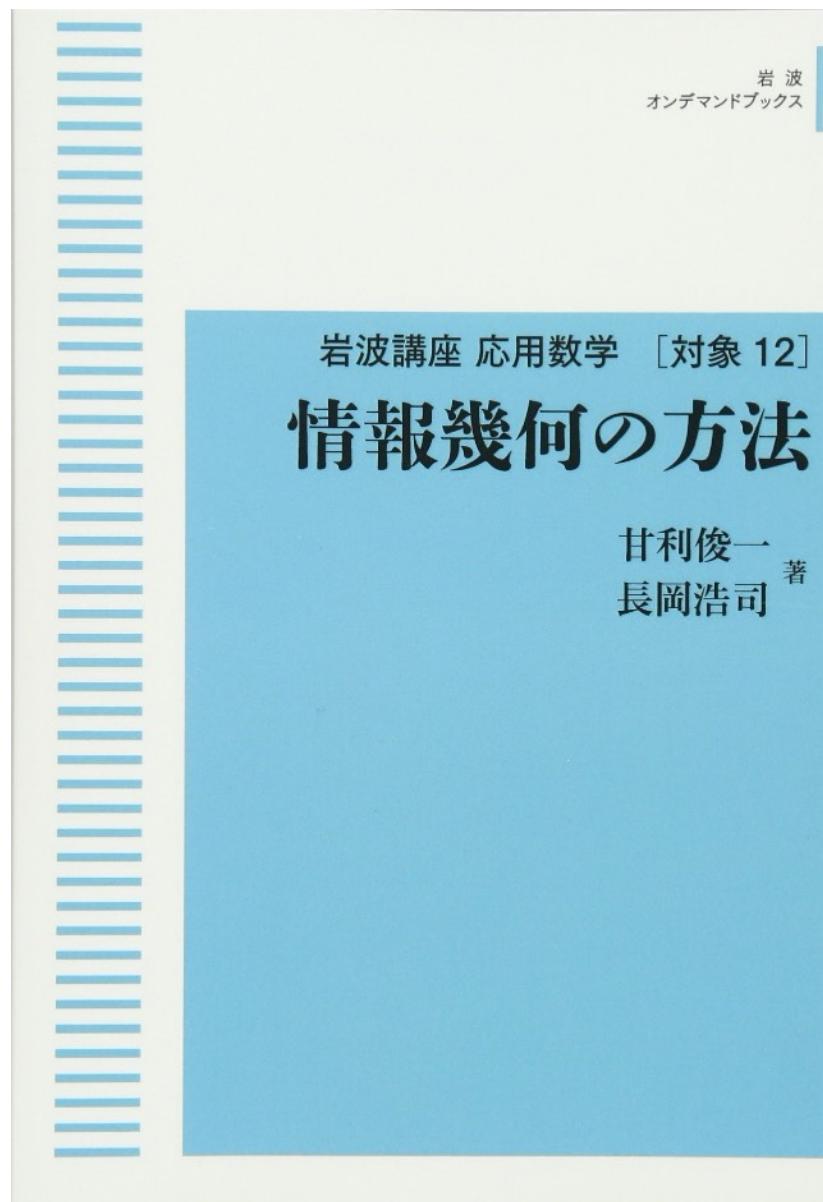
$$\eta_1 = E_\theta[x] = \mu$$
$$\eta_2 = E_\theta[x^2] = \mu^2 + \sigma^2$$



その「曲がった空間」を平坦にしたい…
(2種類のやり方が自然に定まり、双対接続
という非常に美しい幾何構造が成立)

蛇足: 私と情報幾何

甘利俊一・長岡浩司 (1998)



- 岩波講座 応用数学シリーズが**リアルタイムで発売**されたころちょうど学部学生で流行っていたこの本をものすごく勉強した。
- ちなみにこの本は(長岡先生の手により?)数学的に洗練した形になっていて**初心者向けではない**ことがあとあと判明。みんな最初は素朴で分かりやすい甘利先生の「Differential-Geometrical Methods in Statistics (1985)」のコピーで勉強したそう。
- **長岡浩司**先生は北大を去った後だったが、**塩谷浩之**先生(当時助手、現・室蘭工大・教授)を師匠とする同級生 **内田くん**(現・早稲田大・教授)と密だったので「情報幾何」の話を知ったのだと思う
- 香川県出身の私は文字通り札幌に知り合いゼロの上、没交渉だったので、研究室配属までは、私の友達は**内田くん**と**飯塚くん**(北大情報・自律系工学研究室・准教授)の2人だけだった…

蛇足: 北大・数学教室と情報幾何

- 当時の北大理学部の数学教室で古畠仁先生(現・教授)がアフィン微分幾何の観点で情報幾何を数学的に研究されていた。
- その関係で、黒瀬俊先生(現・関西学院大・教授)の特講に出席した(2003年)。下記解説を偶然読んでいた上、「5. 応用(2) 情報幾何と統計多様体」とあり興味を持ちもぐりで参加

黒瀬 俊, 微分幾何と情報空間. <特集> 情報空間: その応用の拡がり, 数理科学 1993年12月号 No.366

黒瀬 俊(福岡大) (特別講義IX)

1月14日(火)~1月17日(金)

アフィン微分幾何とその応用 アフィン微分幾何の基本的な事項について解説し、射影微分幾何や情報幾何への応用について概説します。

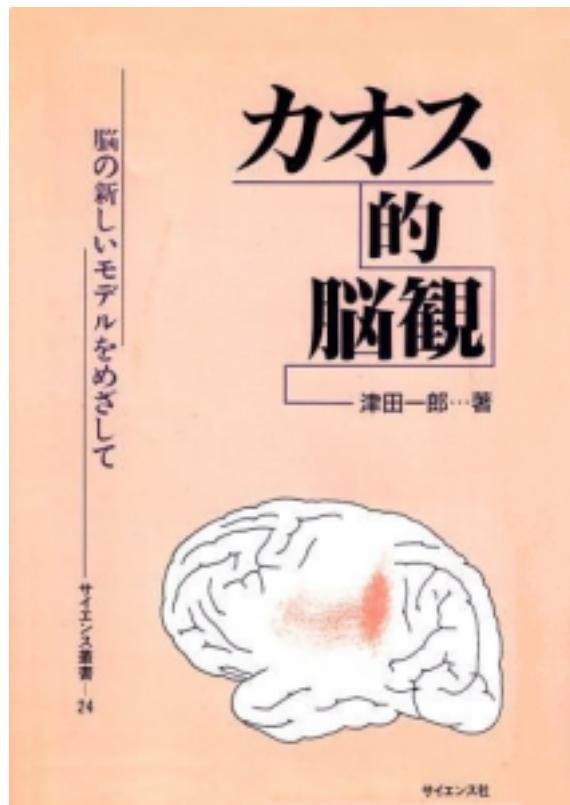
1. 幾何の一般的な道具についての準備
2. アフィン空間の超曲面の基本的な理論
3. アフィン空間の余次元2の中心アフィン部分多様体の理論
4. 応用(1)一射影微分幾何
5. 応用(2)一情報幾何と統計多様体

履修条件は特にうけませんが、ユークリッド空間の(超)曲面論と多様体(特に、接ベクトル場)に関する基本的な知識があれば、理解しやすいと思います。

蛇足の蛇足…

もう一つ決定的に流行しており私たちに多大な影響を及ぼしたのが「複雑系」(非線形物理)の話題(と脳科学・認知科学?)だったが、それはまた別の話…

津田一郎先生, 北大情報・複雑系工学講座, KKZ先生・横井先生, …



私が人生で初めて(大学1年のとき)
自分の意思で作ったプログラムは
マンデルブロ集合の可視化(by
Delphi)だった…

なぜ機械学習で幾何を考えるのか？

1. 対象が幾何構造を持つ

→ 計算幾何 (CV, CG, 地理情報, etc)

→ 位相幾何 (材料科学, 物理, etc)

2. 対象が幾何構造上に分布する

→ 微分幾何 (多様体学習)

3. 機械学習モデルが幾何構造を持つ

→ 微分幾何 (情報幾何)

※ 代数幾何

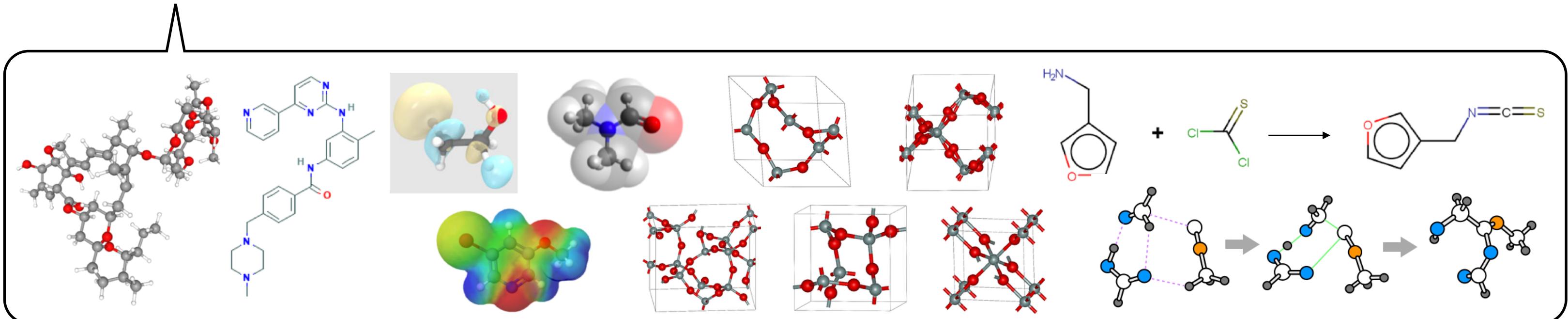
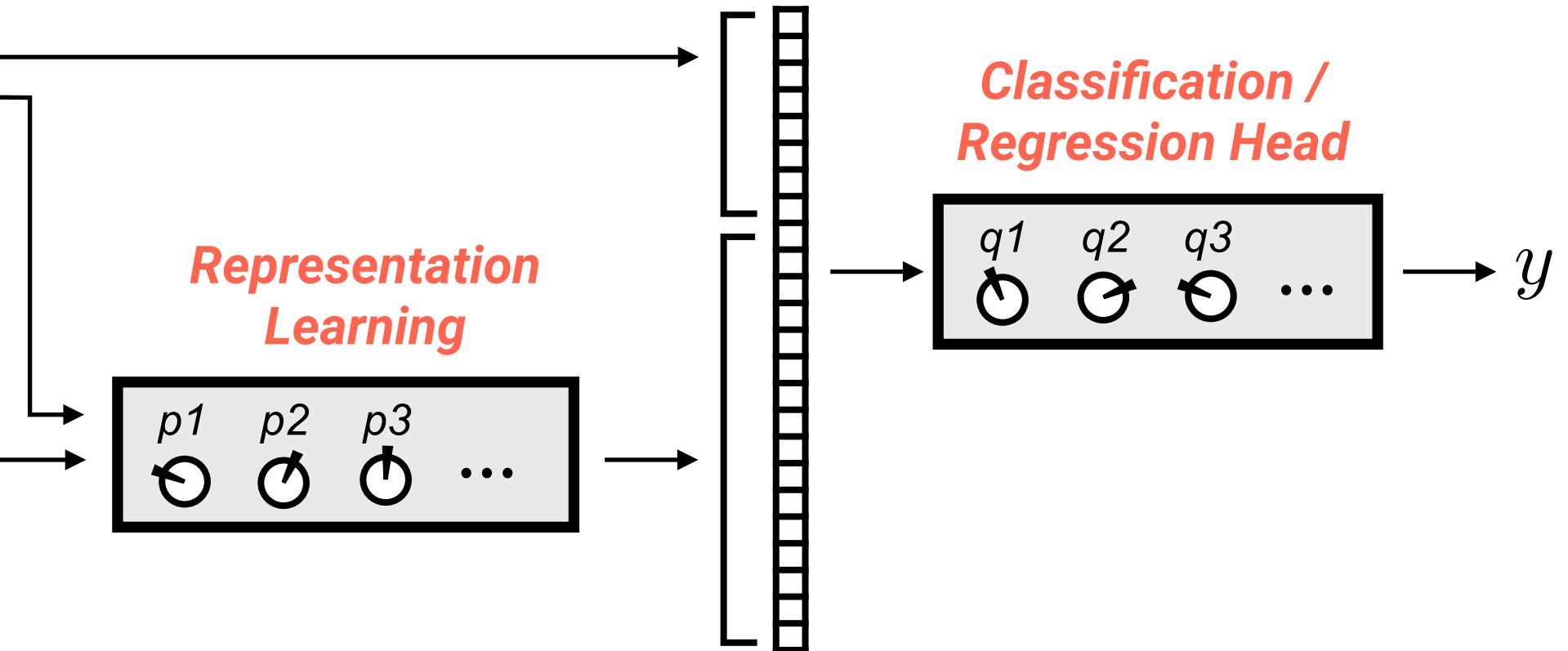
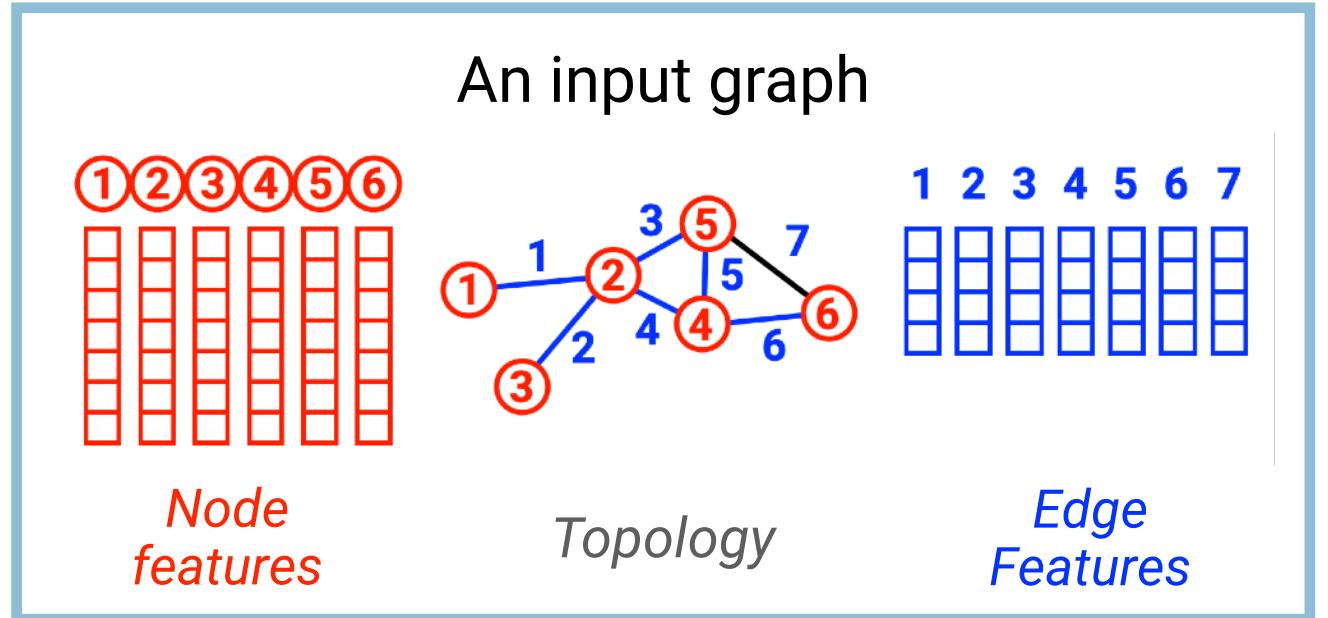
(渡辺澄夫先生のご研究)

都合上、2→3→1で紹介します

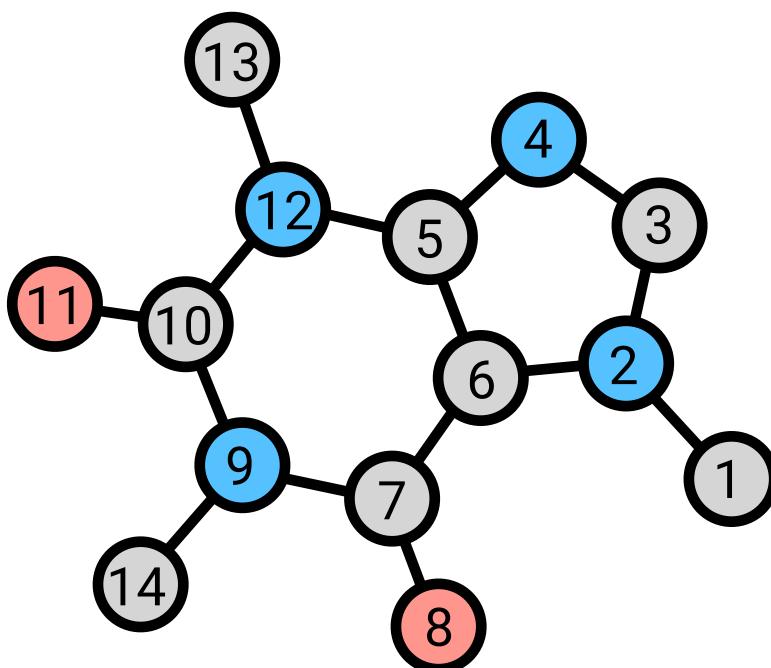
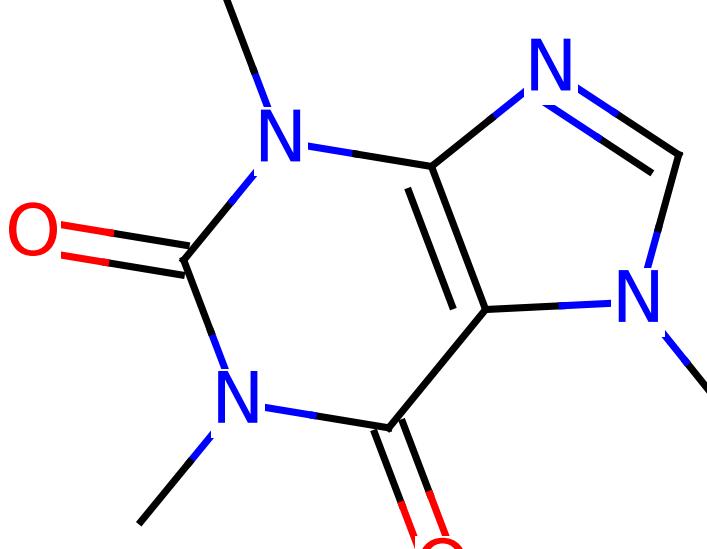
(青木さんの話は1の位相幾何)

分子科学とGraph Neural Networks

Other Info (Conditions, Environment, ...)



Molecular Graphs



Node features

1. Atomic number
2. # of directly-bonded neighbors
3. # of hydrogens
4. Formal charge
5. Atomic mass
6. Is in a ring?

		1.	2.	3.	4.	5.	6.
1	C	6	4	3	0	12.011	0
2	N	7	3	0	0	14.007	1
3	C	6	3	1	0	12.011	1
4	N	7	2	0	0	14.007	1
5	C	6	3	0	0	12.011	1
6	C	6	3	0	0	12.011	1
7	C	6	3	0	0	12.011	1
8	O	8	1	0	0	15.999	0
9	N	7	3	0	0	14.007	1
10	C	6	3	0	0	12.011	1
11	O	8	1	0	0	15.999	0
12	N	7	3	0	0	14.007	1
13	C	6	4	3	0	12.011	0
14	C	6	4	3	0	12.011	0

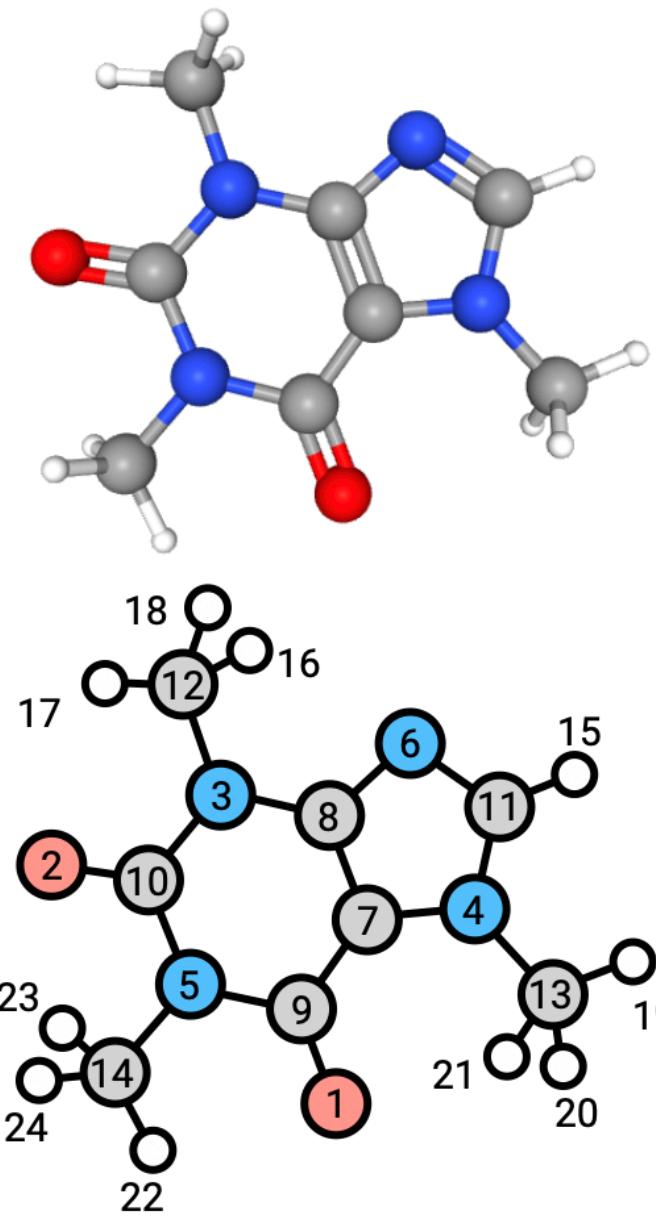
Edge features

1. Bond type
2. Stereochemistry

		1.	2.
1	2	1	0
2	3	12	0
3	4	12	0
4	5	12	0
5	6	12	0
6	7	12	0
7	8	2	0
7	9	12	0
9	10	12	0
10	11	2	0
10	12	12	0
12	13	1	0
9	14	1	0
6	2	12	0
12	5	12	0

Geometric Graphs

Graph in Euclid Space



Nodes

		z	x	y	z
1	O	8	0.470	2.569	0.001
2	O	8	-3.127	-0.444	-0.000
3	N	7	-0.969	-1.313	0.000
4	N	7	2.218	0.141	-0.000
5	N	7	-1.348	1.080	-0.000
6	N	7	1.412	-1.937	0.000
7	C	6	0.858	0.259	-0.001
8	C	6	0.390	-1.026	-0.000
9	C	6	0.031	1.422	-0.001
10	C	6	-1.906	-0.250	-0.000
11	C	6	2.503	-1.200	0.000
12	C	6	-1.428	-2.696	0.001
13	C	6	3.193	1.206	0.000
14	C	6	-2.297	2.188	0.001
15	H	1	3.516	-1.579	0.001
16	H	1	-1.045	-3.197	-0.894
17	H	1	-2.519	-2.760	0.001
18	H	1	-1.045	-3.196	0.896
19	H	1	4.199	0.780	0.000
20	H	1	3.047	1.809	-0.899
21	H	1	3.047	1.808	0.900
22	H	1	-1.809	3.165	-0.000
23	H	1	-2.932	2.103	0.888
24	H	1	-2.935	2.102	-0.885

Edges

		type	distance
1	9	2	1.228
2	10	2	1.236
3	8	1	1.388
3	10	1	1.417
3	12	1	1.458
4	7	1	1.365
4	11	1	1.371
4	13	1	1.443
5	9	1	1.420
5	10	1	1.442
5	14	1	1.459
6	8	1	1.369
6	11	2	1.317
7	8	2	1.368
7	9	1	1.427
11	15	1	1.082
12	16	1	1.094
12	17	1	1.093
12	18	1	1.094
13	19	1	1.093
13	20	1	1.093
13	21	1	1.093
14	22	1	1.092
14	23	1	1.095
14	24	1	1.095

+ Can be added

Non-geometric node features

Non-geometric edge features



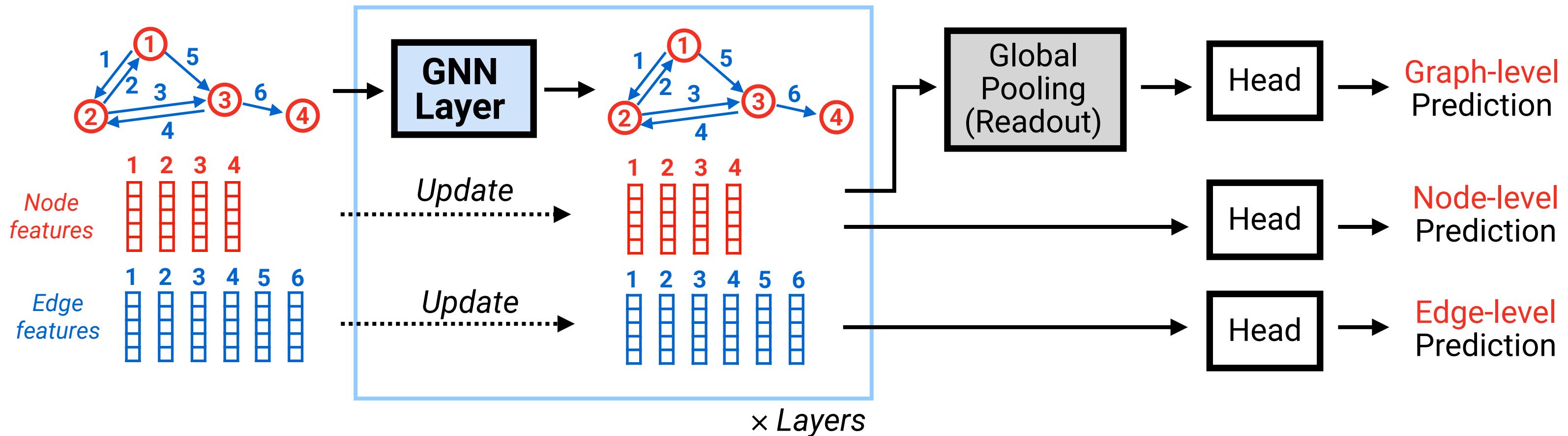
Graphといいつつ Point Set

$$\{x_i \in \mathbb{R}^3 : i = 1, \dots, n\}$$

として扱う(エッジは明示的には入力しない)場合が多い

完全グラフを考える(Transformer),
cut offは頂点間距離で内部的に定義,
etc...

Graph Neural NetworksとMessage Passing



Travel Time Estimation (Google Maps, Baidu Maps)

Derrow-Pinion A, She J, Wong D, Lange O, Hester T, Perez L, et al. [ETA Prediction with Graph Neural Networks in Google Maps](#). CIKM 2021

Fang X, Huang J, Wang F, Zeng L, Liang H, Wang H. [ConSTGAT: Contextual Spatial-Temporal Graph Attention Network for Travel Time Estimation at Baidu Maps](#). KDD 2020

Siri Triggering (Apple)

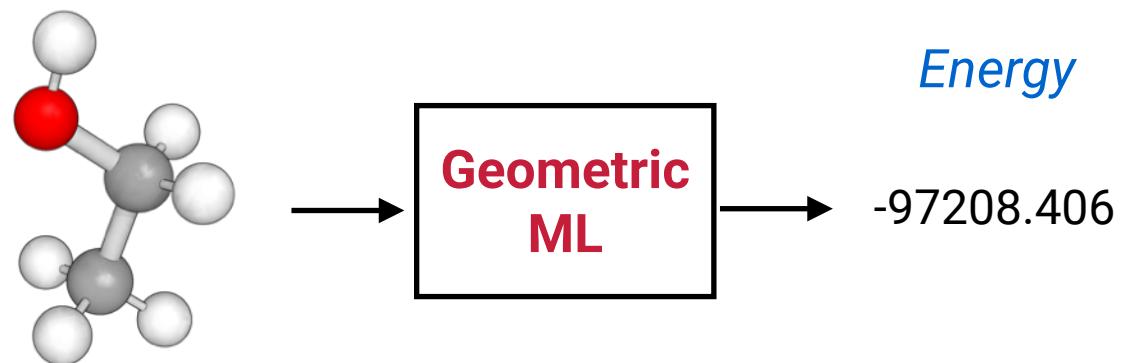
Dighe P, Adya S, Li N, Vishnubhotla S, Naik D, Sagar A, et al. [Lattice-Based Improvements for Voice Triggering Using Graph Neural Networks](#). ICASSP 2020

Knowledge Collection (Amazon)

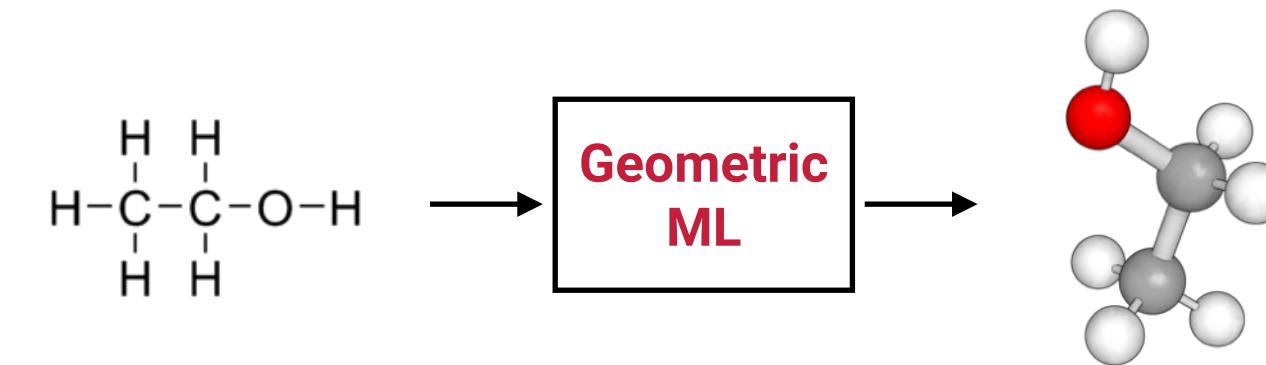
Dong XL, He X, Kan A, Li X, Liang Y, Ma J, et al. [AutoKnow: Self-Driving Knowledge Collection for Products of Thousands of Types](#). KDD 2020

幾何的な予測タスクの例

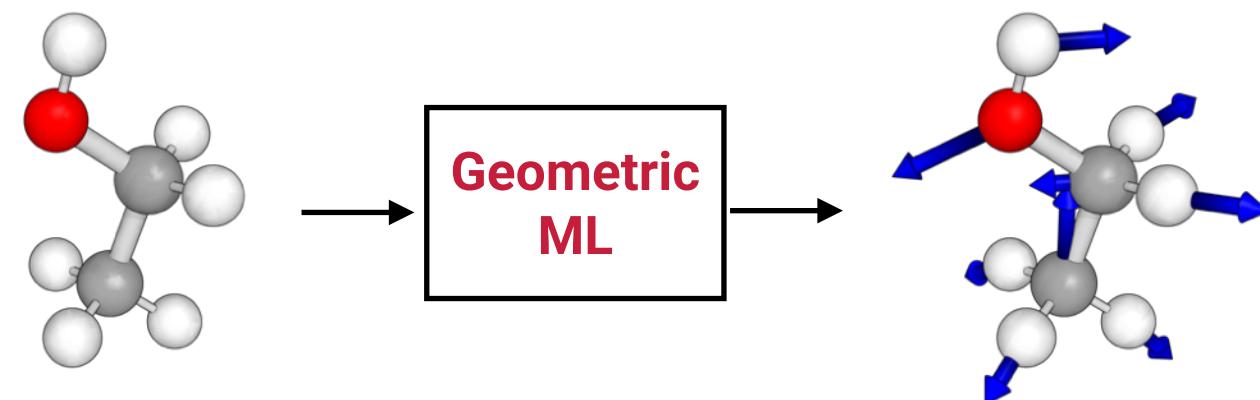
"ML Potential" or *Property Prediction*



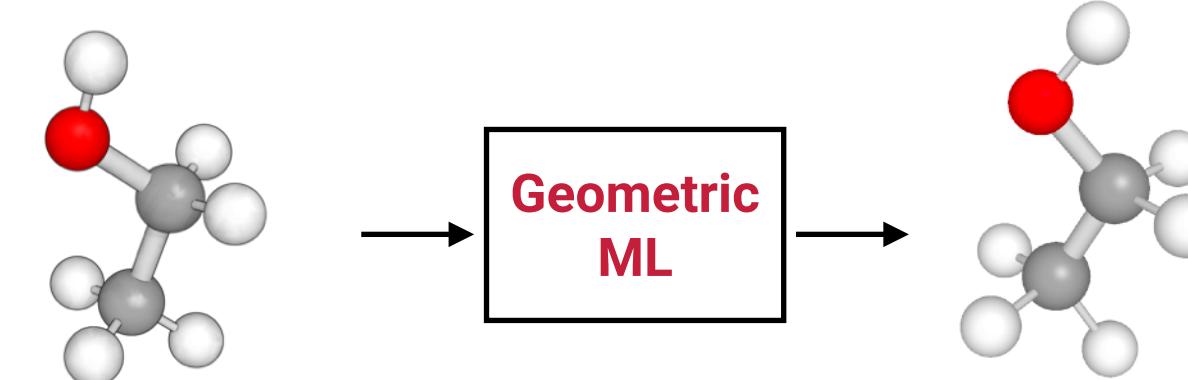
"ML Conformer Generation"



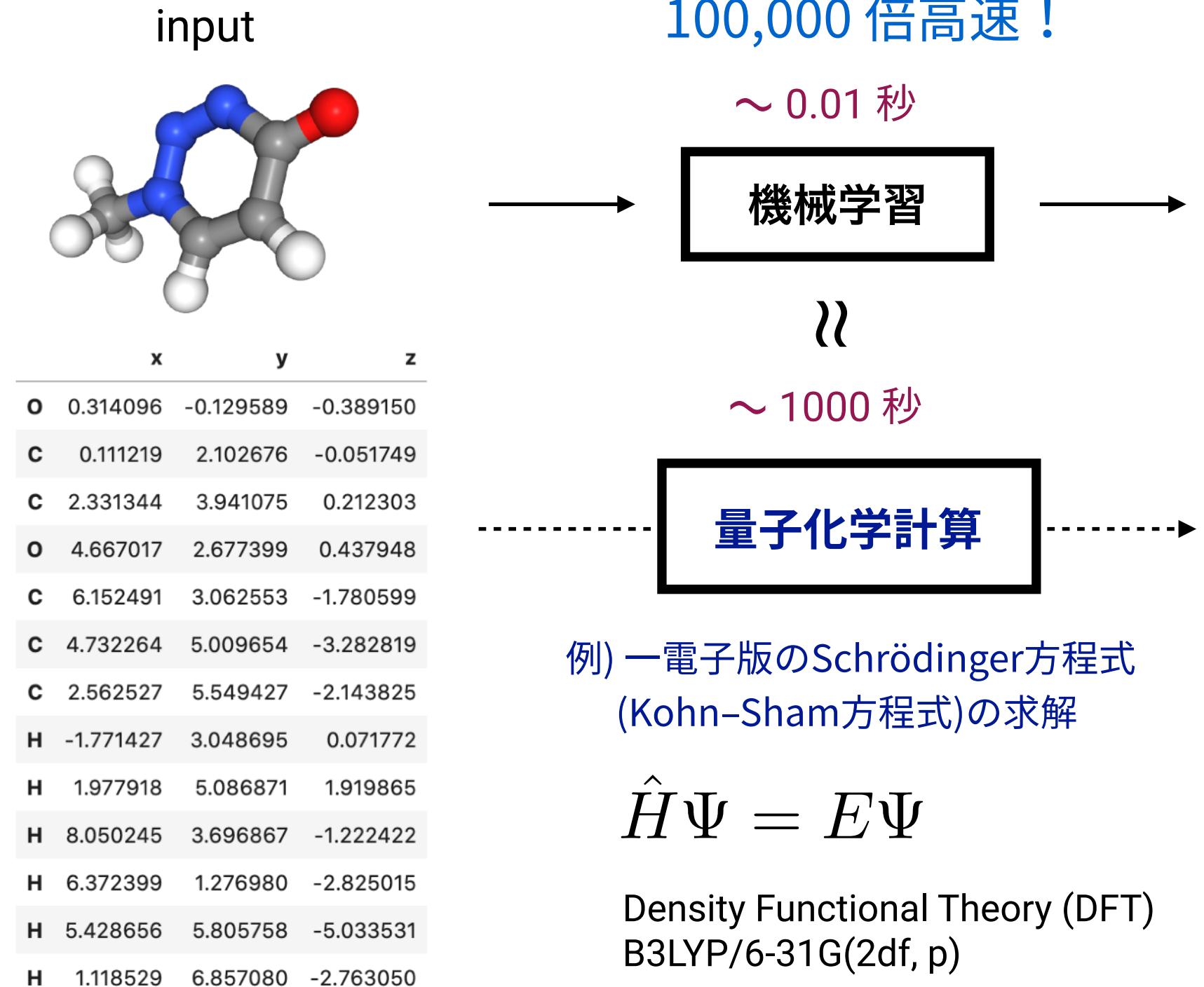
"ML Force field"



"ML Dynamics Simulator"



GNNの汎用性：3Dの幾何構造も同じ枠組で扱える



output

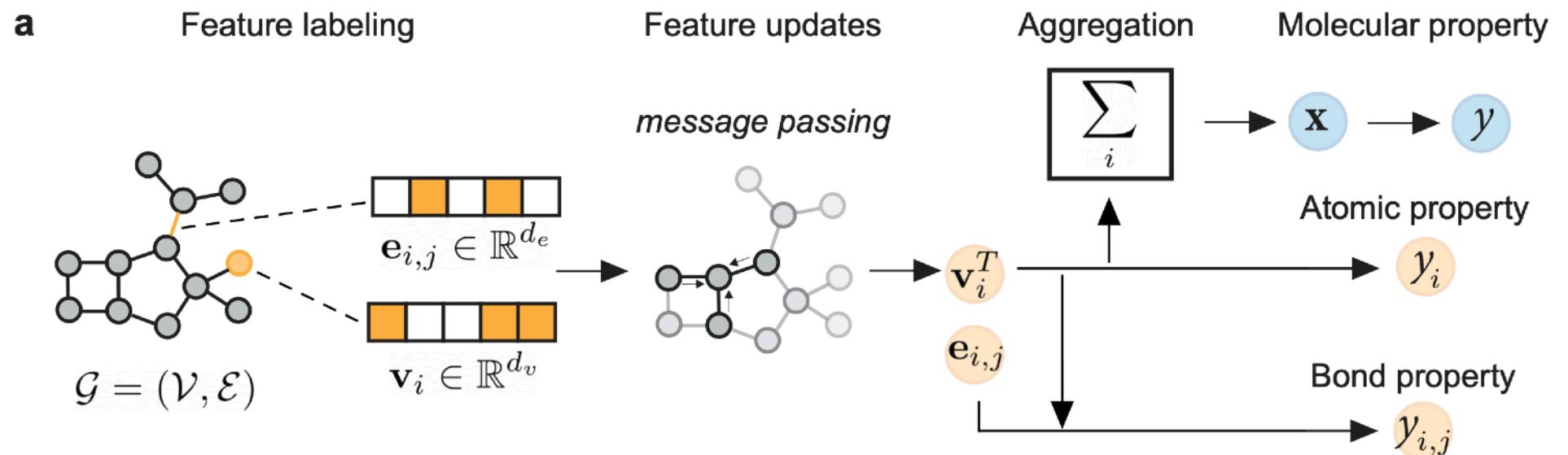
- 内部エネルギー
- 自由エネルギー
- ゼロ点振動エネルギー
- 最高被占軌道 (HOMO)
- 最低空軌道 (LUMO)
- 分極率
- 双極子モーメント
- 熱容量
- エンタルピー
- ⋮

分子の深層表現学習

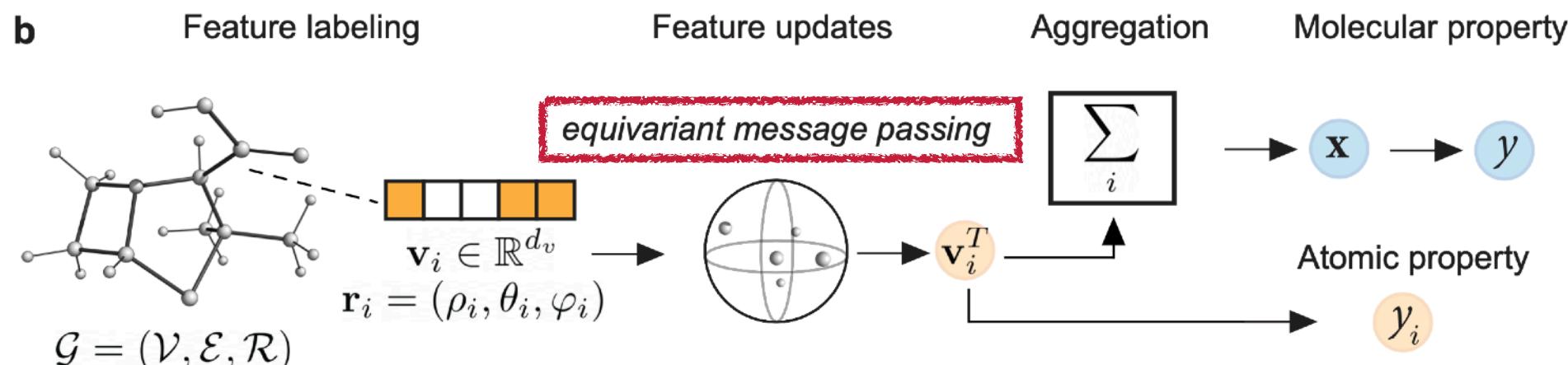
Atz K, Grisoni F, Schneider G.

Geometric deep learning on molecular representations.

Nature Machine Intelligence. 2021;3: 1023–1032. <https://arxiv.org/abs/2107.12375>

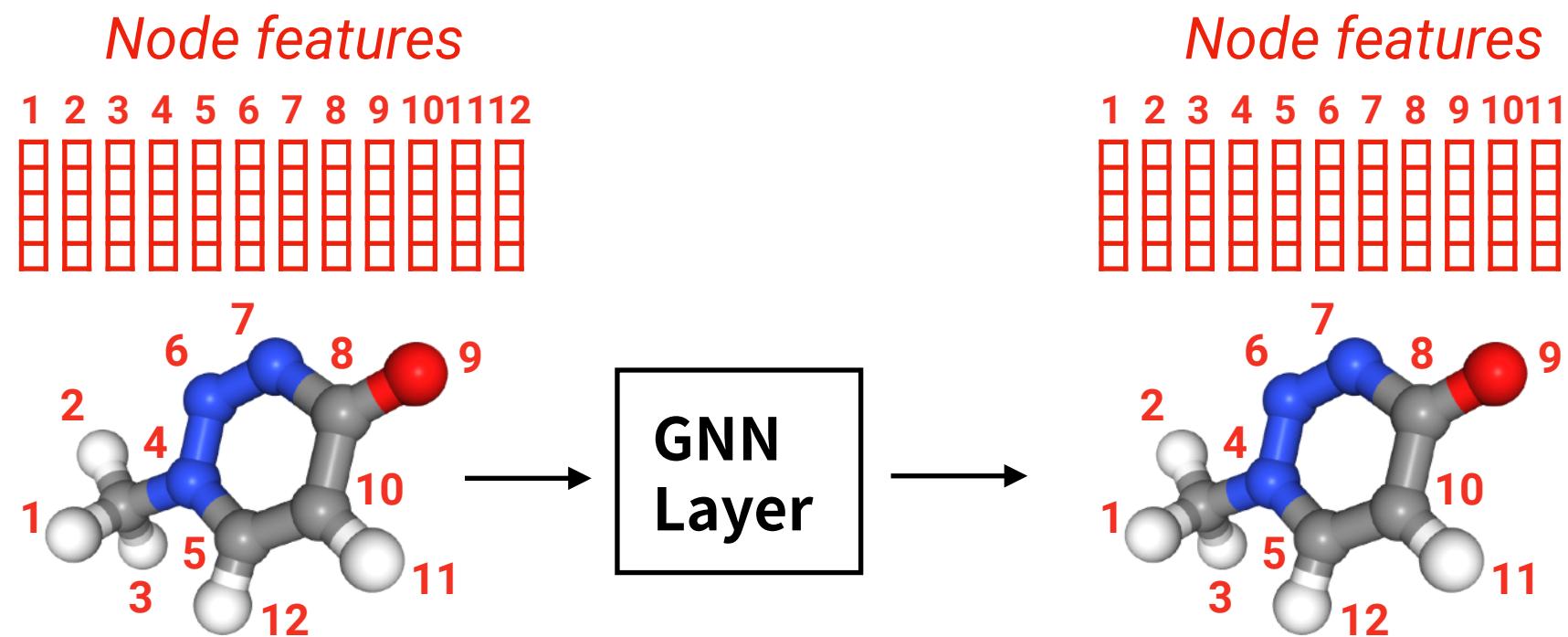


幾何的タスクの特徴的な要件



Equivariant
Message Passing

SE(3)- or E(3)-同変なMessage Passingのデザイン



幾何グラフを入力に考える場合、GNNのメッセージパッシングはユークリッド運動群に関する**同変性**をそなえるべき

- ユークリッド群 $E(3)$ ：3Dの並進・回転対称性
 - 特殊ユークリッド群 $SE(3)$ ： $E(3)$ +鏡像対称性

E(3)-invariant

Schütt et al, **SchNet**. (2017) <https://arxiv.org/abs/1706.08566>

SE(3)-equivariant

Unke et al, **PhysNet**. (2019) <https://arxiv.org/abs/1902.08408>

E(3)-equivariant

Klicpera et al, DimeNet++. (2020) <https://arxiv.org/abs/2011.14115>

Invariant

$$f(g \cdot x) = f(x)$$

Equivariant

$$f(g \cdot x) = g \cdot f(x)$$

幾何的深層學習(GDL)

GNNは幅広い幾何構造を統一的に扱える枠組み (機械學習のエルランゲン・プログラム!?)

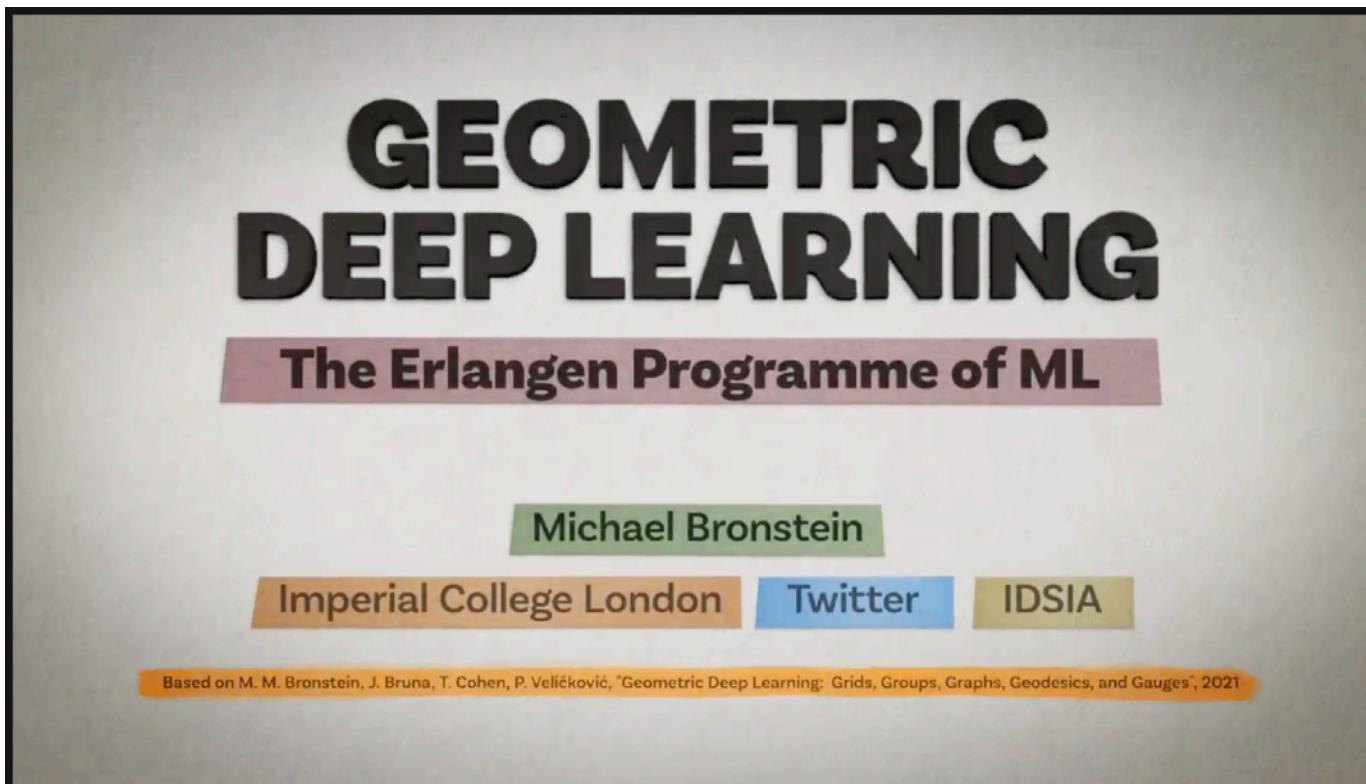
[Submitted on 27 Apr 2021 (v1), last revised 2 May 2021 (this version, v2)]

Geometric Deep Learning: Grids, Groups, Graphs, Geodesics, and Gauges

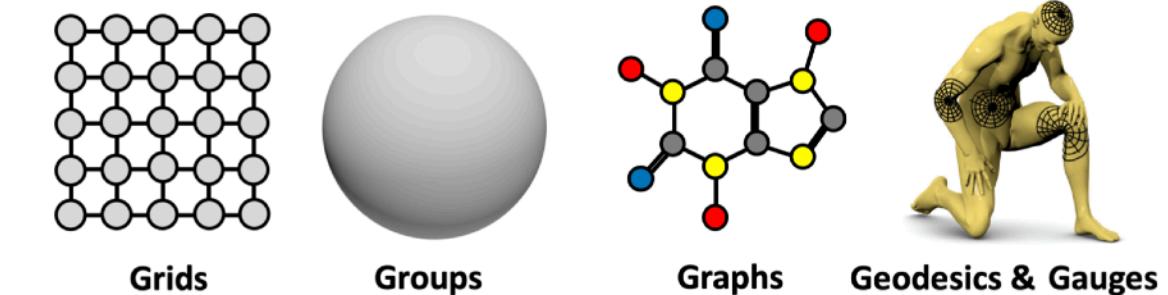
Michael M. Bronstein, Joan Bruna, Taco Cohen, Petar Veličković

<https://arxiv.org/abs/2104.13478>

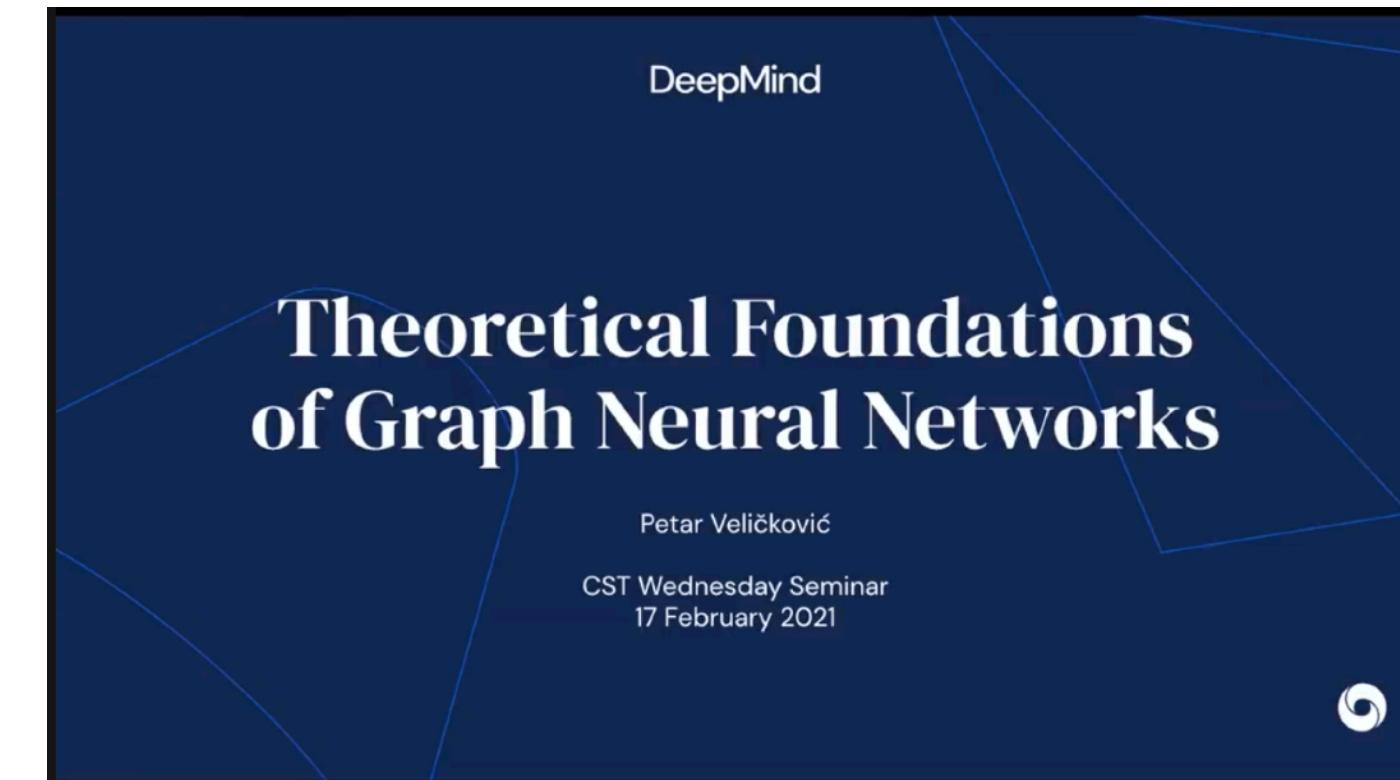
ICLR 2021 Keynote (Michael Bronstein)



<https://youtu.be/w6Pw4MOzMuo>



Seminar Talk (Petar Veličković)



<https://youtu.be/uF53xsT7mjc>

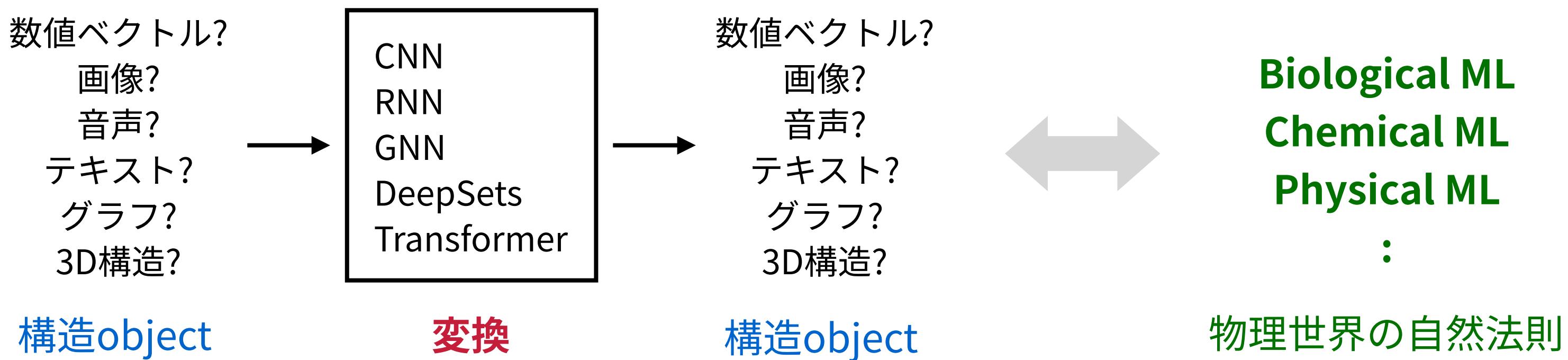
エルランゲン・プログラム: 「幾何」 とは何か?

1872年フェリックス・クラインが23歳でエルランゲン大学の教授職に就く際、幾何学とは何かどのように研究すべきものかを示した指針

幾何学とは変換(シンメトリー)によって変わらない性質の研究

“it is only slightly overstating the case to say that physics is the study of symmetry.”

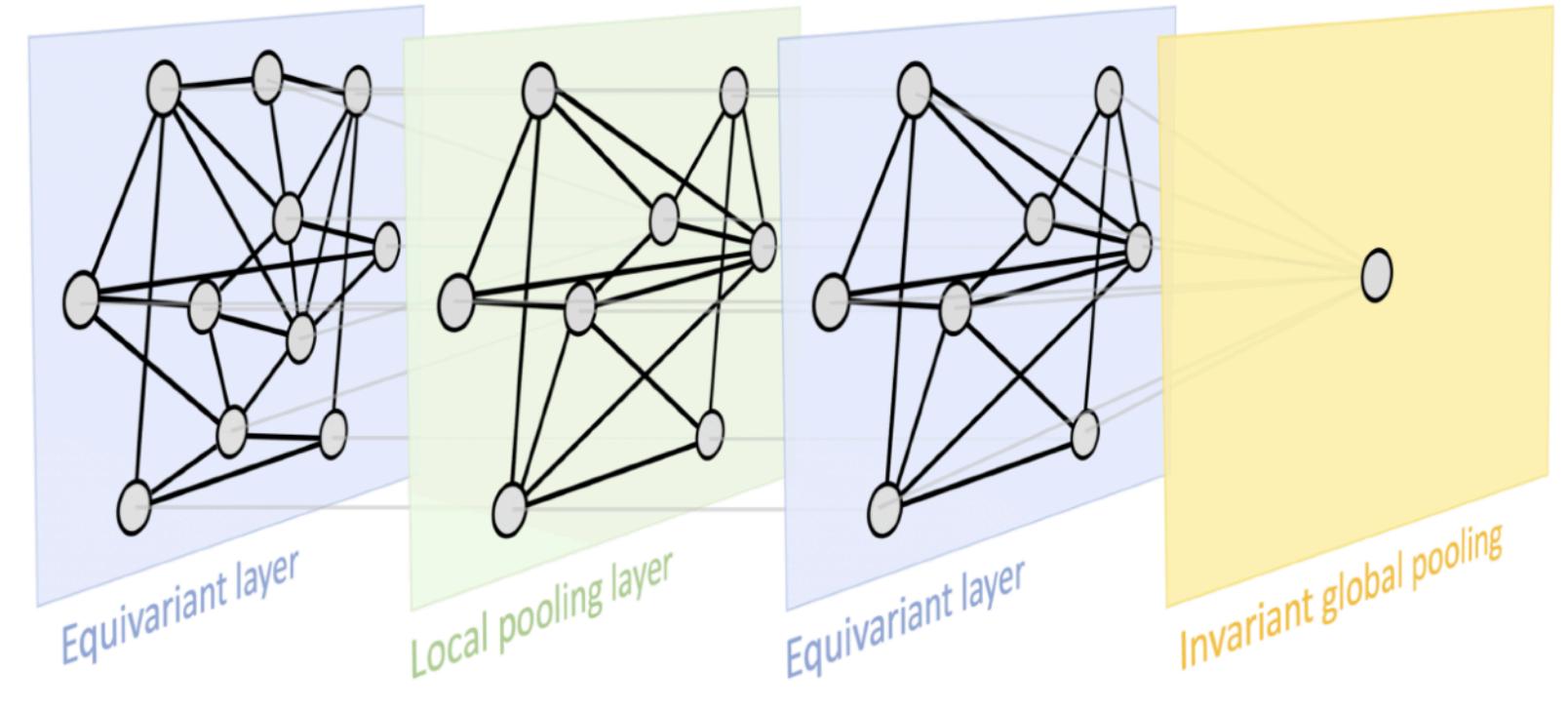
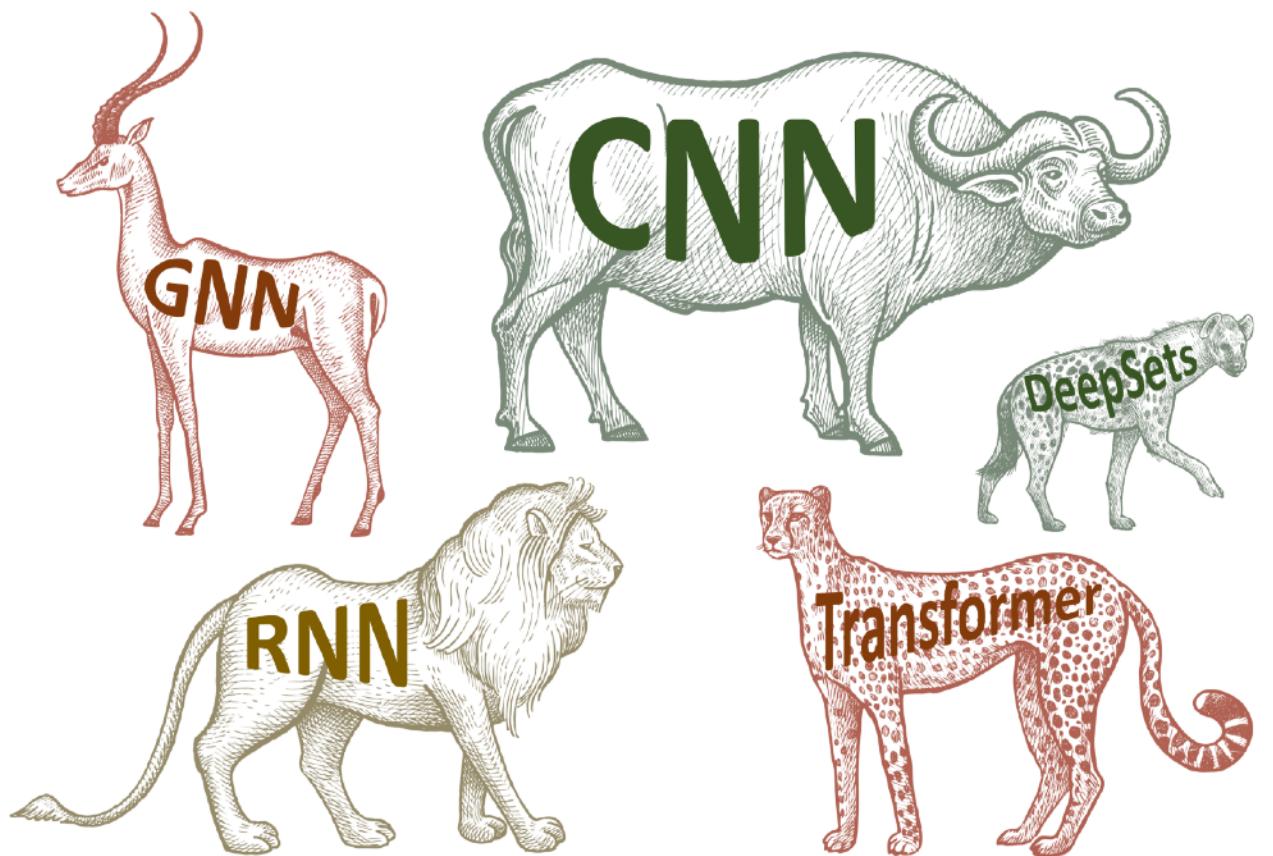
Philip Anderson



幾何的深層学習(GDL)=機械学習のエルランゲン・プログラム



- 変換で不变な性質から既存モデルをunify
= GNNの一般化として捉えられる!
- モデル設計の一般方針を導く
- 物理世界を理解する"人工知能"でも必須!?



Geometric Deep Learning blueprint.

まとめ

1. 対象が幾何構造を持つ
 - 計算幾何 (CV, CG, 地理情報, etc)
 - 位相幾何 (材料科学, 物理, etc)
2. 対象が幾何構造上に分布する
 - 微分幾何 (多様体学習)
3. 機械学習モデルが幾何構造を持つ
 - 微分幾何 (情報幾何)

1. 幾何的深層学習(GDL)と
Graph Neural Networks(GNNs)
 2. トポロジカルデータ解析(TDA)
 3. 多様体学習
 4. 情報幾何学