

归纳バイアスと

分子の組合せ的表現、幾何的表現

A01班

瀧川一学

理研AIP & 北大ICReDD

★ 自己紹介: 瀧川一学

- 「機械学習」と「機械発見」を研究しています。
- うどん県生まれ、北海道大学出身
- 学生時代はニッカンスポーツの印刷所之深夜勤務
+ ソフトウェアベンチャー勤務(主にJavaアプリ開発)
- 一身上の都合で、湊先生ご転出の1年後に北大准教授を辞め
現在京都郊外在住 (お休んでした...)
- (妻の) 祖母が12月之 100さい になります!! (学生いないのは嬉しい)
⇒ 学生・授業・入試・OQ委員は無くなった
- コロナ渦がもたらした新しい趣味
 - Rubik's cube
 - Typing (+typevacer.10FF2)
>100 WPM ました。
 - 囲碁

石研究について

関心は特に「離散構造を伴う機械学習」「データ中心の自然科学研究」

経歴

北大卒業(工藤研) ⇒ 北大PD(田中COE) ⇒ 京大助教(鳥見塚研)
⇒ 北大准教授(田中研 → 湊研 → 瀧川研) ⇒ 理研 & 北大

現所属

クロスアポイント } 理研AIP iPS細胞連携医学的リスク回避チーム
北大 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICREDD)

• 主業務は幹細胞生物学(理研)と化学(北大)
画像やグラフの深層学習が多いです。

• 長らく境界領域の仕事をしていて機械学習屋。
学術的なバックグラウンドは統計科学と信号処理。

• 決定木・ランダム木のマニア(Leo Breimanの追っかけ)

趣味が高い(?)
統計学研究の講演
をしています。

+ Reviewers: NeurIPS 2017-2021 (2018 top reviewer, 2019 best reviewer)
ICML 2017-2021 (2020, 2021 top reviewer), ICLR 2018-2022年

A01班(宇野班)への私の関心

研究はとてもおもしろかったけど、全然つかわなかった技術たちを整理し
(つかわれなかった)

主業務の良い道具立てとなる「新しい最適化の問題創出」をしたい!!
(化学・生命科学)

※ 私の承認欲求や広報の問題ではなく「問題デザイン・定式化」の
実問題からの根本的な解離に由来すると考えている。

- ① 有限の連続値ランダムデータを要素に含む離散最適化
Rashomon効果と解釈多様性
- ② グレイボックス最適化
高次元研究と帰納バイアスのデザイン
- ③ 人間を要素として含む最適化
言語のためのデザイン?

今日のポスター発表 「機械学習」から「機械発見」へ!!

「帰納バイアスと分子の組合せ的表現・幾何的表現」をゴールに見据えて下記3つを考える

1. Subclass Coverの研究

「あざく計算時間のかかるその厳密最適化は本当に必要ですか？」

⇒ ユースケースを真剣に考える

2. Graph Mining とそれに基づく機械学習の研究

「ビール買うとき実際にオムツを見かけたことはありますか？」

⇒ データマイニングは「発見」じゃない!?

3. SIG-FPAI と発見科学の研究

有川先生の科研費特定領域「巨大学術社会情報からの知識発見に関する基礎研究(略称: 発見科学)」(1998-2001)

領域出版物「発見科学とデータマイニング」(2001, 森下真一・宮野悟編)

を再考したい!!