

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 15 日現在

機関番号：14603

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2015～2016

課題番号：15H06103

研究課題名（和文）確率密度関数の微分推定とその応用

研究課題名（英文）Density Derivative Estimation and its Applications

研究代表者

佐々木 博昭（Sasaki, Hiroaki）

奈良先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・助教

研究者番号：80756916

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,600,000円

研究成果の概要（和文）：確率密度関数の微分（以下、確率密度微分）を推定することは、統計的データ解析手法を構築する上で、重要な研究課題の1つである。確率密度微分を推定する上で、これまで、最初に確率密度関数を推定し、次にその微分を計算するという2段階推定が行われてきた。しかしながら、良い確率密度関数の推定結果が、必ずしも、良い確率密度微分の推定結果をもたらすとは限らないため、2段階推定は適切なアプローチではない。そこで、本研究では、確率密度関数の推定を行うことなく、直接的に、確率密度微分や確率密度微分とその密度関数の比を推定する方法を提案した。そして、提案した推定法を用いて、いくつかの統計的データ解析手法を構築した。

研究成果の概要（英文）：Estimating the derivatives of probability density functions is one of the important challenges in statistical data analysis. To estimate the derivatives, a naive approach is first to estimate the probability density function from data, and then to compute its derivatives. However, this approach can be unreliable because a good density estimator does not necessarily mean a good density derivative estimator. To overcome this challenge, we took a different approach that directly estimates density derivatives without going through density estimation. Based on the direct approach, we proposed two methods to estimate the derivatives of conditional density functions and the ratios of density derivatives to its density. With the proposed methods, we developed supervised dimensionality reduction and density ridge estimation methods.

研究分野：知能情報学

キーワード：機械学習 確率密度微分 次元削減 クラスタリング 多様体 モード回帰

1. 研究開始当初の背景

多くの統計的データ解析問題において、確率密度関数の微分（以下、確率密度微分）を推定することが必要される。例えば、平均シフトクラスタリングと呼ばれるクラスタリング法では、最初に、確率密度関数の勾配を推定し、次に、最急上昇法を用いて、データ点を極大点へ向けて更新する。最終的に、同じ極大点に収束したデータ点に対して、同じクラスタリングラベルを割り当てることでクラスタリングが実行される。確率密度微分推定を必要とする他のタスクとして、教師有り次元削減や確率密度関数のリッジ推定などがあり、確率密度微分推定は、重要な研究課題の1つであると考えられる。

確率密度微分を推定するために、先行研究では、最初に、確率密度関数を推定し、次に、その微分を計算するという2段階推定が行われてきた。しかしながら、良い確率密度関数の推定結果が、必ずしも良い確率密度微分の推定結果をもたらすとは限らないため、2段階推定は適切なアプローチではない。したがって、これまでの確率密度微分推定法には、推定精度について、改善の余地があると考えられる。

2. 研究の目的

本研究では、これまでと異なるアプローチに基づき、確率密度微分の推定法を提案する。そして、提案した推定手法を用いて、いくつかの統計的データ解析手法を構築する。さらに、過去に提案された確率微分推定法やデータ解析手法の新たな拡張や応用を行うことを目的とする。

3. 研究の方法

新たな確率密度微分推定法を提案する上で、我々のアプローチは、自乗損失関数の下で、確率密度微分モデルを真の確率密度微分に直接適合することである。このアプローチでは、確率密度関数の推定誤差の影響を受けることが無いため、高精度な微分推定が可能であると期待できる。この直接適合のアプローチに基づき、条件付き確率密度関数の微分と確率密度微分とその密度関数の比（以下、確率密度微分比）の推定法を提案する。

提案する条件付き確率密度関数の微分推定法と確率密度微分比の推定法は、それぞれ、教師有り次元削減と確率密度関数のリッジ推定へ応用する。そして、構築した次元削減法とリッジ推定法の有効性を数値実験によって確認する。

また、過去に提案された微分推定法やデータ解析法の新たな拡張や応用、既存手法との比較を行い、それらの有効性を確認する。

4. 研究成果

(1) 条件付き確率密度関数の微分推定と教師有り次元削減

教師有り次元削減の目的は、出力に対する情報の損失が小さい入力の部分空間を見つけることである。十分次元削減と呼ばれる教師有り次元削減の枠組みでは、条件付き確率密度関数の勾配を用いることで、固有値分解を活用した計算効率の良い次元削減が可能であることが知られていた。そこで、本研究では、上記した直接推定の考えに基づき、条件付き確率密度関数の勾配推定法を提案し、新たな教師有り次元削減法を構築した。そして、様々なデータセットを用いて、構築した教師有り次元削減法は、高い計算効率を実現するだけでなく、既存手法と比較して、高精度に部分空間の推定が可能であることを数値実験により確認した。

(2) 確率密度微分比推定とリッジ推定

確率密度関数のリッジ推定の目的は、データ分布の中に隠れた低次元構造を見つけることである。また、リッジ推定は、非線形次元削減や多様体推定と密接に関連しており、理論的にも非常に興味深い問題である。確率密度関数のリッジを推定する1つの方法は、射影勾配法によって、データ点をリッジへ向けて更新することである。この射影勾配法では、確率密度関数の勾配ベクトルをリッジと直交する部分空間へ射影し、その射影した勾配を用いて、データ点をリッジへ向けて更新する。この部分空間を得るために、確率密度微分比を推定する必要がある。そこで、本研究では、確率密度微分比を直接的に推定する手法を提案し、リッジ推定法を構築した。そして、数値実験により、構築したリッジ推定法は、従来法よりも高精度に確率密度関数のリッジを推定可能であることを確認した。

(3) 微分推定・データ解析法の拡張と応用

上記に加え、過去に提案していた最小自乗対数密度勾配クラスタリングと呼ばれるクラスタリング法のモード回帰への応用と多様体クラスタリングへの拡張を行った。モード回帰では、入力変数と出力変数間に、複数の回帰関数が存在する状況を想定するため、通常回帰問題よりも複雑である。応用の結果、予め、回帰関数の数を指定する必要がない等の利点をもつモード回帰の手法が構築された。一方、多様体クラスタリングでは、リーマン多様体上のデータ点をクラスタリングするため、データ間の距離を測地距離で測る必要があるなど、その拡張は容易ではない。この拡張によって、グラスマン多様体に属するデータに関して、クラスタリング精度が大きく改善されることが確認された。

また、マルチタスク学習と呼ばれる機械学習の考えを活用し、既存の確率密度関数の対数の勾配の推定法を拡張した。拡張の結果、得られた推定法は、特に、少ないデータサン

プル数において有効であることを数値実験によって確認した。その他にも、上記した直接推定の考えを応用し、2乗相互情報量の微分推定法を新たに提案、そして、外れ値に頑強な教師有り次元削減法も構築した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 4 件)

① Voot Tangkaratt, Hiroaki Sasaki and Masashi Sugiyama, “Direct Estimation of the Derivative of Quadratic Mutual Information with Application in Supervised Dimension Reduction”, *Neural Computation*, in press. (査読有)

② 佐々木 博昭, 杉山 将, “確率密度微分の直接推定と機械学習への応用”, 数理解析研究所講究録, 1999巻, 2016, pp. 154-173. (査読無)

<https://repository.kulib.kyoto-u.ac.jp/dspace/handle/2433/224764>

③ Ikko Yamane, Hiroaki Sasaki and Masashi Sugiyama, “Regularized Multi-task Learning for Multi-Dimensional Log-Density Gradient Estimation”, *Neural Computation*, vol.28, no.7, 2016, pp. 1388-1410. (査読有)
doi: 10.1162/NECO_a_00844

④ Hiroaki Sasaki, Yung-Kyun Noh, Gang Niu and Masashi Sugiyama, “Direct Density Derivative Estimation”, *Neural Computation*, vol.28, no.6, 2016, pp. 1101-1140. (査読有)
doi: 10.1162/NECO_a_00835

[学会発表] (計 8 件)

① Mina Ashizawa, Hiroaki Sasaki, Tomoya Sakai and Masashi Sugiyama “Least-Squares Log-Density Gradient Clustering for Riemannian Manifolds”, the 20th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), 2017年4月20日～22日, Florida (USA).

② Hiroaki Sasaki, Takafumi Kanamori and Masashi Sugiyama, “Estimating Density Ridges by Direct Estimation of Density-Derivative-Ratios”, the 20th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics

(AISTATS), 2017年4月20日～22日, Florida (USA).

③ Hiroaki Sasaki, Yurina Ono and Masashi Sugiyama, “Modal Regression via Direct Log-Density Derivative Estimation”, the 23th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP), 2016年10月16日～21日, Kyoto (Japan).

④ Hiroaki Sasaki, Gang Niu and Masashi Sugiyama, “Non-Gaussian Component Analysis with Log-Density Gradient Estimation”, the 19th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), 2016年5月9日～11日, Cadiz (Spain).

⑤ 芦沢 未菜, 佐々木 博昭, 坂井 智哉, 杉山 将, “Least-Squares Log-Density Gradient Clustering for Riemannian Manifolds”, 情報論的学習理論と機械学習研究会 (IBISML), 2016年3月17日～18日, 統計数理研究所(東京都立川市).

⑥ Hiroaki Sasaki, Voot Tangkaratt and Masashi Sugiyama, “Sufficient Dimension Reduction via Direct Estimation of the Gradients of Logarithmic Conditional Densities”, the 7th Asian Conference on Machine Learning (ACML), 2015年11月20日～22日, Hong Kong (China).

⑦ 佐々木 博昭, Gang Niu, 杉山 将, “Non-Gaussian Component Analysis with Log-Density Gradient Estimation”, 第18回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS), 2015年11月25日～28日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市).

⑧ 佐々木 博昭, Voot Tangkaratt, 杉山 将, “Sufficient Dimension Reduction via Direct Estimation of the Gradients of Logarithmic Conditional Densities”, 第18回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS), 2015年11月25日～28日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市).

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

佐々木 博昭 (Hiroaki Sasaki)
奈良先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・助教
研究者番号：80756916

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者

(4) 研究協力者