

令和 2 年 7 月 2 日現在

機関番号：62615

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K12743

研究課題名（和文）潜在変数モデルにおける変分ベイズ法の理論解析

研究課題名（英文）Theoretical Analysis of Variational Bayesian Inference for Latent Variable Models

研究代表者

小西 卓哉 (Konishi, Takuya)

国立情報学研究所・ビッグデータ数理国際研究センター・特任研究員

研究者番号：20760169

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,900,000円

研究成果の概要（和文）：潜在変数モデルはデータの背後に隠れた特徴や関係を表現する確率モデルである。潜在変数モデルをベイズ推定する方法の一つに変分ベイズ法が知られている。これまでに様々な潜在変数モデルの学習アルゴリズムが開発され、変分ベイズ法に関する研究が盛んに行われている。本研究では、特に変分ベイズ法に基づく学習アルゴリズムの理論的な側面に焦点を当て、従来研究ではカバーできていない潜在変数モデルの学習アルゴリズムの漸近解析を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ベイズ推定は機械学習や統計学を中心に自然科学の様々な分野で応用されている。その一方で、潜在変数モデルのような複雑な確率モデルに対しては計算量的に厳密な推定が困難なことが知られている。変分ベイズ法はこの問題を解決する有力な近似手法の一つであり、本研究で行った変分ベイズ法の理論的な解析によって学習アルゴリズムの基礎的な理解が深まるとともに、応用範囲が広がることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：Latent variable models are probabilistic models to represent the hidden features and relations behind data. Variational Bayesian inference provides a learning algorithm for latent variable models and is recognized as an active research topic in machine learning and statistics. We focus on the theoretical aspects of variational Bayesian inference and analyze the asymptotic behavior of learning algorithms of latent variable models that have not considered in the literature.

研究分野：機械学習

キーワード：ベイズ学習 変分ベイズ法 機械学習

### 1. 研究開始当初の背景

潜在変数モデルはデータの背後に隠れた特徴や関係を潜在変数として表現する確率モデルである。例えば、混合モデルや隠れマルコフモデル、確率的主成分分析などが挙げられる。画像や音声、テキストなど様々なデータのモデル化に利用できるため、機械学習や統計学を中心に幅広く応用されている。

ベイズ推定はベイズの定理に基づきパラメータの事後確率分布を求めることで、不確実性を考慮して確率モデルを推定する方法である。潜在変数モデルのベイズ推定は潜在変数とパラメータの事後確率分布を求めるために期待値の計算がボトルネックとなり、計算量的に困難になる場合が多い。この問題を解決する方法として変分ベイズ法が知られている。変分ベイズ法は事後確率分布に制約を仮定することで、ベイズ推定を近似的に行う手法であり、これまでに様々な潜在変数モデルの変分ベイズ法に基づく学習アルゴリズムが開発され、効率性の改善などに研究が行われている。

変分ベイズ法の重要性が高まるにつれて、その理論的な解析の必要性も高まっている。変分ベイズ法によってどのようなモデルが学習されるのか理解が進むことで、学習アルゴリズムの動作の保証にもつながるため、より多くの場面で利用されることが期待されるが、依然として不明な部分が多いのが現状である。

### 2. 研究の目的

本研究では、潜在変数モデルの変分ベイズ法に基づく学習アルゴリズムに焦点を当て、理論的な解析を行うことを主な目的とする。特に、従来の研究では扱われていなかった潜在変数モデルの学習アルゴリズムに着目し解析することで、アルゴリズムの挙動を明らかにすることを目指す。

### 3. 研究の方法

本研究では、特に変分ベイズ法に基づく学習アルゴリズムの漸近的な解析手法に着目する[1]。この解析手法では、学習アルゴリズムによって最適化する変分自由エネルギーのサンプル数に関する極限のもとでの振る舞いを調べることで、変分自由エネルギーの漸近形や、学習の結果得られるモデルの性質を明らかにすることができる。[1]では混合ガウスモデルの変分ベイズ法に基づく学習で事前に設定するハイパーパラメータと学習後に得られるモデルパラメータの粗密との関係を理論的に明らかにした(図1)。この解析手法を応用することで、他の発展的な潜在変数モデルの学習アルゴリズムの挙動を明らかにする。

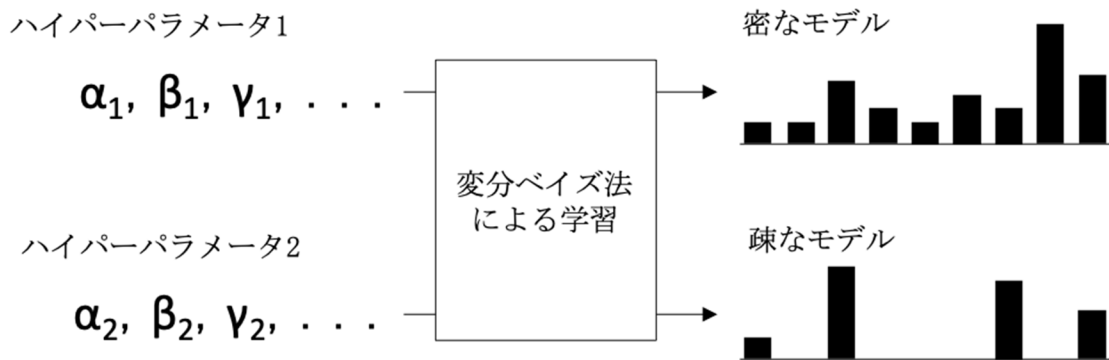


図1 ハイパーパラメータが学習結果に与える影響

### 4. 研究成果

関係データをモデル化するために利用される確率的ブロックモデルと呼ばれる潜在変数モデルに着目し、その変分ベイズ法に基づく学習アルゴリズムについて漸近解析を行った。確率的ブロックモデルは扱うデータの種類によってモデルの形状が多少異なる。研究開始時はネットワークデータの確率的ブロックモデルを解析対象としていたが、途中で想定したような解析が困難であることが判明した。そこで、2部グラフデータの確率的ブロックモデルに解析対象を変更して漸近解析を行った。結果として部分的に狙った解析に成功した。ただ、現時点ではまだ解析が困難な部分が残っており、何らかの対応策を必要としている。本研究を通してこれまでに得た結果を基に引き続き研究を継続していく。

また、本研究の遂行を通して得られた機械学習の知見を活かし、上記の主な研究課題と並行して、不確実性を伴う最適化問題とその予測に関する研究課題にも取り組んだ。その研究成果として勾配ブースティングの新たな学習アルゴリズムを提案した。

#### 参考文献

[1] K. Watanabe and S. Watanabe. Stochastic complexities of Gaussian mixtures in variational Bayesian approximation. *Journal of Machine Learning Research*, Vol.7, pp.625-644, 2006.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Takuya Konishi, Takuro Fukunaga
2. 発表標題 End-to-End Learning for Prediction and Optimization with Gradient Boosting
3. 学会等名 The European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----