

令和元年5月12日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K19958

研究課題名(和文) 深層学習によるモンテカルロ積分の高速化フレームワーク

研究課題名(英文) Accelerating Monte Carlo Integration using Deep Learning

研究代表者

蜂須賀 恵也 (Hachisuka, Toshiya)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授

研究者番号：00748650

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 5,000,000円

研究成果の概要(和文)：自然画像認識や翻訳などで、深層学習をはじめとした大規模データに基づく機械学習は、実用面で画期的な成果を挙げつつある。これらの手法に共通する概念は、データの背後にある未知のモデルをデータから推測するというものである。例えば、画像の識別では、人間が画像を見て識別するという複雑かつ未知のプロセスを、画像とその正しい識別の組を大量に用意することで、データのみからそのプロセスを学習している。本研究では、このデータ駆動型の深層学習の成功を受け、未知の確率分布のモデル化に深層学習を使い、数値積分手法の一種であるモンテカルロ積分の計算効率を向上させる枠組みについて研究をおこなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、機械学習は様々な問題を解決するために使われているが、その多くは特定の問題を解くための手法として使われている。本研究では、機械学習を一般化し、データの関連性を見出す計算モデルとして捉えることで、より一般的な数値計算の問題(特に定積分の計算)を解くための手法として昇華させる事を目的としている。研究成果は、特定の問題に限らず、様々な計算問題の基礎的な手法として、機械学習を使う枠組みを提案しており、機械学習の新たな応用として、今後の発展が見込まれる。

研究成果の概要(英文)：Deep learning using massive datasets has been producing groundbreaking results in many practical applications such as natural image classification and machine translation. Common to these applications is to predict an unknown model behind those massive amount of data by observing only those data. For example, image classification models a complex and unknown process of how human perceives images just based on pairs of images and corresponding classification labels. In this project, given the success of such data-driven approaches in deep learning, we have developed a framework that applies the same data-driven concept to model a probability distribution using deep learning in order to accelerate Monte Carlo integration.

研究分野：コンピュータグラフィックス

キーワード：機械学習 モンテカルロ法 サンプリング

## 1. 研究開始当初の背景

深層学習をはじめとした大規模データに基づく機械学習は、画像認識や機械翻訳などで大きな成果を上げている。これらの問題に共通する概念は、膨大なデータの背後に存在する未知の構造（モデル）を、データのみを用いて推定することである。例えば画像認識では、画像に何か含まれるかを認識する、人間の脳の処理が未知のモデルである。未知であるがゆえに、その処理を計算機上で実現することはできないが、画像と含まれる物体の組のデータを大量に用意し、その関係性を数値計算によって推定することで、画像認識の問題を解くことができる。

これは、計算機が「画像を認識できるようになる」というように、一般に分かりやすい表現で説明される事があるが、計算機が実際に人間の認知プロセスを再現しているわけではない。それよりは、データの関連性を見出す既存の手法やアルゴリズムが、大規模データに対して実用的なレベルにまで発展したために、画像認識に使えるようになった、という説明が現状に即している。したがって、データの関連性を見出すという視点からは、画像認識や機械翻訳にとどまらず、何らかの別の応用が可能ならずであるという着想に至った。

## 2. 研究の目的

上記の機械学習に関する見方に基づき、与えられた関数の定積分を解く数値積分の問題について、機械学習による高速化を達成することを目的とする。図1は従来からの機械学習の使われ方と本研究での使われ方の概念の違いを示す。

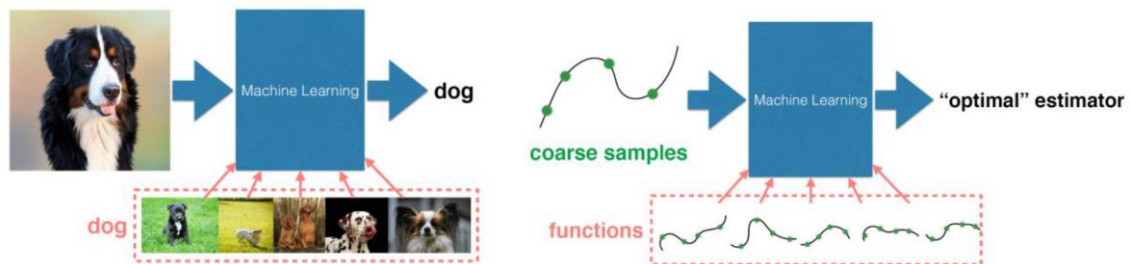


図1：機械学習の画像認識への応用（左）と本研究でのモンテカルロ積分への応用（右）

つまり、例えば「画像」と「犬」というデータの結びつきを、大量の例から推定できるようになるのであれば、同様に、大量の被積分関数とそれぞれに対応する「最適な」積分の計算手法の例を与えれば、別の新たな被積分関数に対しても、機械学習によって「最適な」計算手法が推定できるであろう、という仮説に基づいている。

## 3. 研究の方法

与えられた関数の積分を計算する手法として、乱数を用いたモンテカルロ積分に特に注目する。モンテカルロ積分では、ユーザーが事前に定めた確率密度関数によって、ランダムに被積分関数の値を評価し、得られた値と生成した確率密度の比の期待値を計算することで、任意の被積分関数の計算を可能としている。

モンテカルロ積分の誤差は、被積分関数と確率密度関数で定義される関数の分散に比例することが知られており、特に、確率密度関数と被積分関数とが厳密に比例するとき、分散がゼロになり、計算誤差もゼロになる。そのような確率密度関数の定義には、解こうとしている定積分が含まれるため、実際に使用することはできない。しかし、被積分関数に対して、なるべく比例するような確率密度関数を使用することで、計算を効率化できる事が知られている。

本研究では、モンテカルロ積分に関する二つの問題について機械学習を適用した。一つめは、ユーザーによって確率密度関数の候補が複数与えられたとき、ある被積分関数について、最も計算効率のよい確率密度関数を、実際に積分計算を行うことなく自動で選択する問題である。二つめは、被積分関数の評価値の集合が与えられたとき、被積分関数になるべく比例するような「最適な」確率密度関数と、それに従うサンプルの生成手法を、機械学習を用いて行う枠組みの研究である。

#### 4. 研究成果

##### (1) 複数の確率密度関数から、被積分関数に対して「最適」な確率密度関数を選ぶ手法

与えられた被積分関数に対して、複数の確率密度関数が考えられるような問題として、コンピュータグラフィックスにおける光伝搬シミュレーションがある。光伝搬シミュレーションは、幾何光学に基づけば、単なる定積分として定義することができる。我々の過去の研究成果によれば [Hachisuka2012]、光伝搬シミュレーションの様々な手法は、同一の定積分の問題（光伝搬シミュレーション）を、それぞれに違う確率密度関数を用いて計算している、単なるモンテカルロ積分とみなすことが可能である。したがって、確率密度関数が被積分関数とほぼ比例するような場合が、手法によって異なることがある。図2はその例を示す。左側の画像の組では、赤枠内において、手法2の方が、同じ計算時間で正確な結果を出している（計算効率が良い）が、右側の画像の組では、逆に手法1の方が正確な結果を出している。



図2：異なる光伝搬シミュレーション手法の、同一の計算時間での比較

このような手法の選択は、従来、ユーザーの直観や試行錯誤によって行われてきたが、この研究成果ではそれを機械学習によって自動化することを試みた。図3はその概念図を示す。

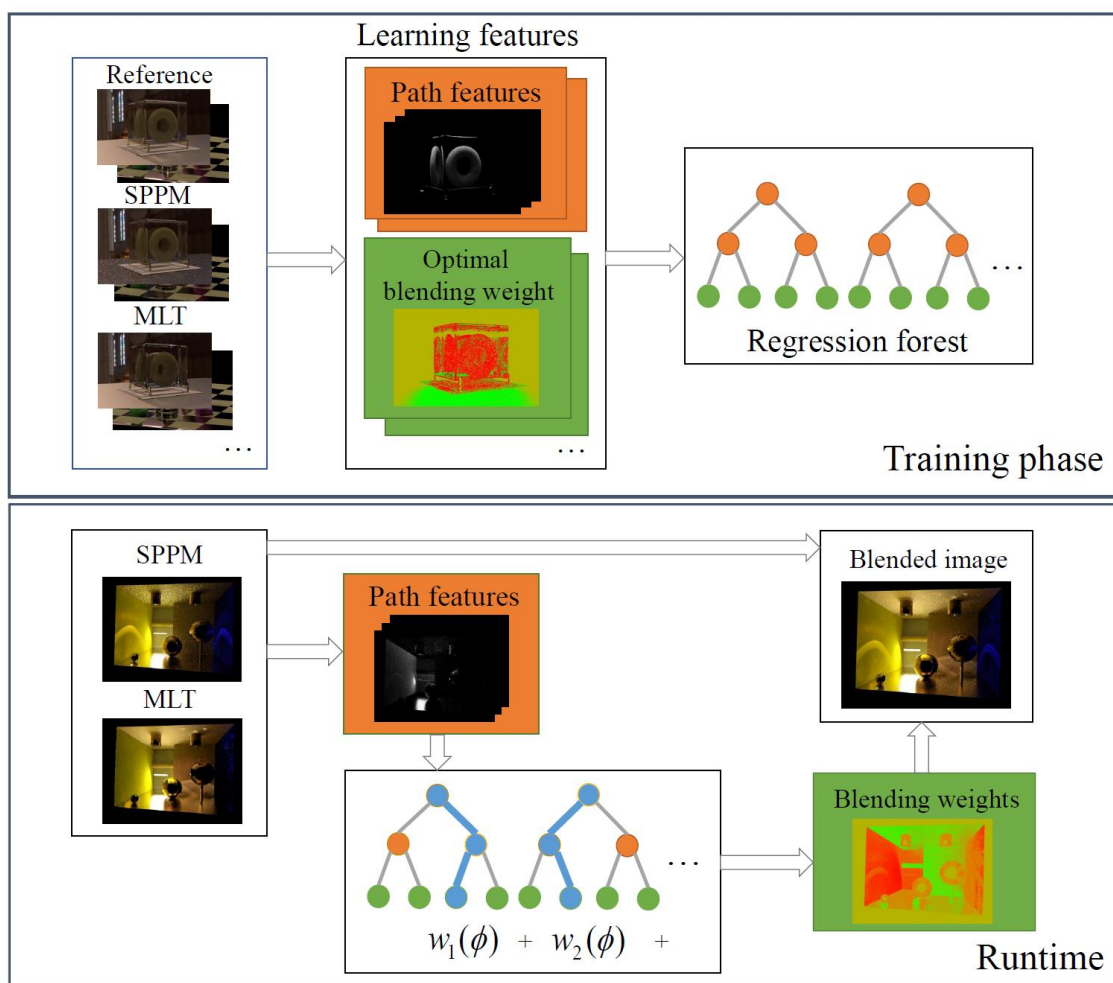


図3：機械学習による計算手法（確率密度関数）の自動選択の概念図

提案手法は、学習時（Training phase）実行時（Runtime）に分かれており、学習時には二つの手法（SPPM、MLT）で同一のシーンにおける光伝搬シミュレーションを行い、その計算誤差を最小にするような使い分けマップ（Optimal blending weight）と、画像の特徴量（Path features）



を抽出する。そして、特徴量と使い分けマップの関係性を、機械学習のアルゴリズムの一種である、regression forest によって事前学習する。実行時には、新たなシーンに対して、それぞれの手法にちょうど半分の計算時間を与えた画像を計算し、特徴量を抽出する。その後、その特徴量を入力として、学習済みの regression forest によって使い分けマップを推定し、使い分けマップによって計算結果を重みづけし、最終的な出力とする。

この研究成果では、最適な手法を事前に選択するという目的を直接達成するのは困難であると考え、そのためのステップとして、複数の手法で計算した結果を最適に重みづけして計算結果を出力する方針とした。図4はその結果の一例を示す。

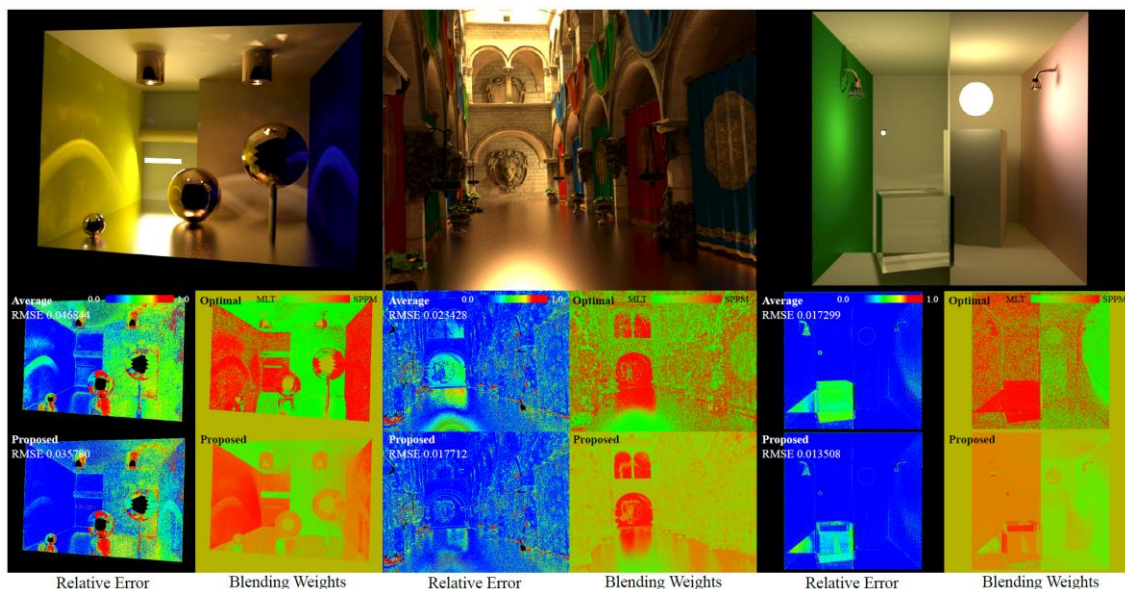


図4：最適な重みづけ（上段）と提案手法による重みづけ（下段）の比較

この成果に基づけば、例えば重みづけマップの画像全体での平均を取り、最も重みがい大きい手法を最適な手法と捉えるならば、与えられたシーンに対して（計算時間を半分にすれば）最適な計算手法を選ぶことが可能である。詳細な議論と結果は、モンテカルロ法の基礎・応用をテーマとする主要な学会のMCQMCに付随する論文として出版された(5①)。今後の展望としては、同様の手法が、より一般的な定積分の問題に適用可能かどうか検証する事が考えられる。

## (2) 被積分関数の評価値のみから、確率密度関数とサンプルの生成を行う手法

一般に、任意の与えられた被積分関数に対して、それに比例するような確率密度関数を導出するのは、困難であるか不可能であるとされている。さらに、確率密度関数が導出できたとしても、その確率密度分布に沿ってサンプルを生成する事自体、困難な問題である。

本研究成果では、それらの問題を解くため、被積分関数の評価値のみを集合として与えることで、それに比例する確率密度関数とそのサンプリング生成のための手法を同時に学習する枠組みを開発した。具体的には、被積分関数の変数の値とその評価値の組を学習データとして用いる。その変数の値を入力とし、その評価値を返すようなニューラルネットワークを考えて、それを学習させるが、ネットワークの構造に工夫がある。

まず、確率密度関数は、単調増加関数である累積密度関数の微分である事を踏まえて、本質的に単調増加関数しか学習しないようなネットワーク構造を内部に持つ。次に、ニューラルネットワークが与えられたとき、学習に使われる誤差逆伝播法の性質から、その微分の値を計算するネットワークが自動的に構築できるため、その自動生成されたネットワークを確率密度関数のネットワークとすることができる。さらに、確率密度関数と被積分関数の比例定数を、推定するネットワークを別途考える。最終的に、それら二つのネットワークの積が、被積分関数を近似するように学習する。サンプルの生成は、累積密度関数のネットワークの逆関数を定義する事で可能になり、与えられた被積分関数に対してのサンプリングを可能とする。本研究は未発表の成果である。

研究開始当初は競合する手法は存在しなかったが、その後、Müllerらが同様な手法を提案・発表したため[Müller2018]、手法としての差別化と詳細な比較を行った後に、論文として提出する予定である。

(3) 参考文献

[Hachisuka2012] Hachisuka, T., Pantaleoni, J., & Jensen, H. W. (2012). A path space extension for robust light transport simulation. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 31(6), 191.

[Müller2018] Müller, T., McWilliams, B., Rousselle, F., Gross, M., Novák, J. (2018). Neural importance sampling. *arXiv preprint arXiv:1808.03856*.

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 1 件)

- ① Otsu H., Kinuwaki S., Hachisuka T. "Supervised Learning of How to Blend Light Transport Simulations". In: Owen A., Glynn P. (eds) *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods*. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, vol 241. Springer, Cham, 2018, doi:10.1007/978-3-319-91436-7\_23.

[学会発表] (計 0 件)

該当なし。

[その他]

研究代表者のホームページ : <https://www.ci.i.u-tokyo.ac.jp/~hachisuka/>

6. 研究組織

該当なし。

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。