

令和 3 年 6 月 21 日現在

機関番号：20103

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2020

課題番号：18K18107

研究課題名（和文）非線形特徴抽出の理論と方法

研究課題名（英文）Theory and methods for nonlinear feature extraction

研究代表者

佐々木 博昭（Sasaki, Hiroaki）

公立はこだて未来大学・システム情報科学部・准教授

研究者番号：80756916

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的は入力データに潜む非線形特徴抽出の理論と方法論を構築することである。理論的な側面では、非線形独立成分分析の理論構築だけでなく、相互情報量最大化、非線形部分空間推定を含む3つの枠組みを統一的に扱う教師なし非線形特徴抽出の枠組みを密度比推定に基づき提案した。また、方法論の側面では、ニューラルネットワークを用いた非線形特徴抽出の実践手法を提案した。特に、外れ値に頑強な特徴抽出手法を提案し、その外れ値に対する頑強性を理論解析と数値実験の両面から示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまでの教師なし非線形特徴抽出の実践手法は経験・発見的なアプローチに基づくことが多く、その理論的な背景を理解することが難しい状況にあった。それに対して、本研究で提案した統一的な枠組みは既存の非線形特徴抽出の理論的な基盤となる可能性があり、学術的な意義は大きい。また、提案した枠組みは密度比推定に基づくため、既存の密度比推定法を応用・拡張することによって、さらなる実践手法の発展が見込めるため、今後の成果が期待される研究内容である。

研究成果の概要（英文）：This research is aimed at developing a theory and methods for nonlinear feature extraction. A rigorous theory for nonlinear independent component analysis (ICA) was established. Furthermore, a unified framework has been proposed for unsupervised nonlinear feature extraction, which includes nonlinear ICA, maximization of mutual information and nonlinear subspace estimation as special cases. Practical methods were also proposed. Especially, a robust method against outliers was developed and investigated through both theoretical analysis and numerical experiments.

研究分野：機械学習

キーワード：非線形特徴抽出 非線形独立成分分析 外れ値 相互情報量最大化 ニューラルネットワーク 統計的因果推論

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

現代社会では多種多様なデータの大量取得が可能となり、非線形特徴抽出の研究が再度注目されている。例えば、深層学習では、多層ニューラルネットワークを用いて、繰り返し、各層の入力を非線形変換することによって、入力データの非線形特徴を抽出する。そして、この抽出された非線形特徴をクラス分類などのタスクへ応用することで、そのタスク精度が大きく改善される。また、データの重要な情報を含む低次元特徴を抽出、調査することで、入力データに対する新たな知見が得られる可能性がある。このような多層ニューラルネットワークを用いた手法は確率的勾配降下法との相性が良く、大規模データへ適用可能という利点がある。その一方で、従来の非線形特徴抽出法では(特に教師なし学習において)理論的根拠が乏しく、発見・経験的なアプローチが採用されることが多々あった。したがって、その特徴抽出法が実際にどんな問題を解いているのか、そして、どんな特徴を抽出しているかを理解することが容易ではない。そして、特徴抽出法を正しく理解することは特徴抽出の理論の発展だけでなく、応用という側面からも重要である。

2. 研究の目的

上記の背景を踏まえて、最初に、以下の課題に取り組む。

-【課題1】明確な理論的基盤をもつ教師なし非線形特徴抽出法の提案

後述するように、この課題では非線形独立成分分析の問題設定に基づき、教師なし学習問題における非線形特徴抽出法がどんな条件で、何が推定されるのかを理論的に明らかにし、実践手法を提案・拡張する。

上記のような背景もあり、非線形独立成分分析に加えて、相互情報量最大化が教師なし学習の非線形特徴抽出の枠組みとして再注目されている。しかしながら、非線形独立成分分析と相互情報量最大化の研究は独立に行われており、それら枠組み間の関係性はよく理解されていない。その関係性を理解することができれば、相互情報量最大化のために提案された実践手法を非線形独立成分分析へ応用(逆もまた然り)できる可能性があることに加え、非線形特徴抽出の共通原理の理解、そして新たな枠組みの構築につながることも期待できる。そこで、次の課題を以下とする。

-【課題2】教師なし非線形特徴抽出の統一的な枠組みの構築

3. 研究の方法

上記した2つの課題について研究の方法をそれぞれ述べる。

【課題1】明確な理論的基盤をもつ非線形特徴抽出法の構築

明確な理論的基盤をもつ非線形特徴抽出法を構築するために、本研究では、最初に、独立成分分析の問題設定に着目した。独立成分分析の目的は、複数の混合信号として観測されたデータから混合前の信号(以下、源信号)を最小の事前知識で推定することである。この問題における難しさは、どのように源信号が混合されているのかを事前に知ることができないことにある。これまでに、混合過程が線形変換の場合、源信号を推定可能であることが理論的に示されているが、混合過程が非線形変換の場合、どういった条件下でどの程度、源信号を推定することができるかについて十分な理解が得られていなかった。そこで、本研究では、混合過程が非線形である非線形独立成分分析において、源信号がどの程度まで推定可能か、そして、その推定可能となる条件を理論的に明らかにする。そして、その理論的な根拠に基づき、ニューラルネットワークを用いた非線形独立成分分析の実践手法を提案、さらに拡張する。

【課題2】教師なし非線形特徴抽出の統一的な枠組みの構築

非線形独立成分分析以外にも特徴抽出の枠組みは以前から提案されている。その1つが相互情報量最大化である。興味深いことに、近年、ニューラルネットワークを用いて提案された相互情報量最大化の実践手法は、全く異なる目的をもつ非線形独立成分分析の実践手法と類似している。そこで、この実践手法の類似性に着目し、この2つの非線形特徴抽出の枠組みに存在する共通要因を理論的に調査し、これらを統一的に扱う枠組みを構築する。そして、この統一的な視点から他にどのような非線形特徴抽出の枠組みがありうるかを考察し、実践手法も提案する。

4. 研究成果

【課題1】明確な理論的基盤をもつ非線形特徴抽出法の構築

最初に、発表文献 (Hyvärinen et al., AISTATS, 2019) の研究成果を述べる。この文献では、非線形独立成分分析において、源信号をどの程度推定可能かならびにその推定条件を理論的に明らかにしただけでなく、非線形独立成分分析の実践手法も提案した。本研究では、源信号を推定する上で、入力データに加えて、補助データを導入する。多くの実践的な場面において、この補助データの取得は困難ではなく、入力データからも作成可能である。時系列データの例では、時刻 t におけるデータを入力データとすると、時刻 t より過去のデータを補助データとして用いることができる。最も重要な推定条件は、補助データが与えられている下での源信号各成分の条件付き独立性である。そして、この条件付き独立性の仮定下で、成分毎の非線形関数の不確定性を除き、源信号が推定可能であることを示した。この理論的な結果に基づき、非線形独立成分分析の実践手法を提案した。非線形独立成分分析は教師なし学習問題であるが、この実践手法は教師あり学習問題を通して源信号を推定する。具体的には、入力データと補助データのペアをクラス1、入力データとシャッフルした補助データのペアをクラス2とすることで、2クラス分類問題を構築する。そして、この2クラス分類問題に対してロジスティック回帰を適用することで、源信号に対応する非線形特徴を学習する。

次に、発表文献 (Sasaki et al., UAI, 2020) の研究成果を述べる。上では、ロジスティック回帰に基づき、非線形独立成分分析の実践手法が構築された。しかしながら、ロジスティック回帰は外れ値の影響を受けやすいことが知られており、その非線形独立成分分析の実践手法もまた外れ値の影響を受けやすいことが考えられる。そこで、本研究では、源信号が外れ値で汚染された状況を想定し、源信号推定がどのように外れ値の影響を受けるかを理論的に調査する。理論的な調査の結果として、源信号の確率分布の裾付近に外れ値が集中しているときに、源信号の推定が困難になることを示唆する結果を得た。この結果は、外れ値に頑強な実践手法の構築は重要であることを意味する。次に、外れ値に頑強な非線形独立成分分析の実践手法を提案した。上記した非線形独立成分分析の実践手法はロジスティック回帰に基づき構築されているが、本研究では、 α -ダイバージェンスを用いることによって、外れ値に頑強な手法を提案した。実際、影響関数を用いた理論的な調査により、提案手法が外れ値に対して頑強であることを示した。その一方、影響関数を用いた同様の調査により、ロジスティック回帰に基づく既存手法は外れ値の影響を受けやすいことを示唆する結果を得た。事実、提案法の外れ値に対する頑強性と既存法の外れ値に対する脆弱性を数値実験により確認した。さらに、この非線形独立成分分析を統計的因果推論へ応用した。fMRI データへ適用した結果、興味深い因果関係を表す有向グラフが確認された (図1)。

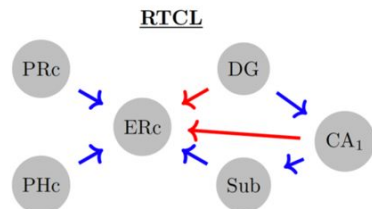


図1：提案手法 (RTCL) を用いた統計的因果推論の fMRI データへの応用 (Sasaki et al., UAI, 2020)。有効グラフの各頂点は脳部位、矢印は推定された脳部位間の因果関係を表す。

【課題2】教師なし非線形特徴抽出の統一的な枠組みの構築

【課題1】では非線形独立成分分析の実践手法を提案した。興味深いことに、近年、注目されている相互情報量最大化の実践手法 (Belghazi, ICML, 2018) は、非線形独立成分分析と数学的に類似した構造をもつ。この類似性に着目し、本研究では確率密度関数の比 (以下、密度比) の推定を介した非線形特徴抽出の枠組みを提案した。この枠組みにおける密度比とは、入力データと補助データの同時確率密度関数と入力データと補助データのそれぞれの周辺確率密度関数の積の比である。実際、非線形独立成分分析と相互情報量最大化の実践手法もまた密度比を実行しているとも解釈できる。

この統一的な枠組みの提案だけでなく、相互情報量最大化と非線形独立成分分析を理論的に再調査した。その結果、密度比推定が相互情報量最大化の必要十分条件であることを理論的に明らかにした。さらに、非線形独立成分分析において、密度比推定を通して源信号を推定可能であることを示し、文献 (Hyvärinen et al., AISTATS, 2019) とは異なる推定条件を導出した。その導出した推定条件から、「補助データの次元が源信号の推定で大きな役割を果たす」という新たな知見が得られた。実際、入力データの次元を固定したとき、補助データの次元が大きくなるにつれて、源信号の推定精度が改善されることを数値実験によって示した。これらの結果は、源信号を高精度に推定するために、入力データに対して相対的に高い次元をもつ補助データを用意すべきであることを示唆している。また、相互情報量最大化と非線形独立成分分析に加えて、

提案した統一的な枠組みに属する新たな非線形特徴推定の枠組みを提案した。この枠組みでは、補助データと統計的な依存関係にある低次元変数からなる非線形部分空間を推定することを目的とし、その低次元な非線形部分空間が推定可能となる条件を導出した。

提案した統一的な枠組みに基づき、 χ^2 -ダイバージェンスを用いた密度比推定の実践手法を提案した。そして、提案法を用いて学習された非線形特徴を他クラス分類問題へ応用し、データに外れ値が含まれている場合に、他手法よりも分類精度が改善されることを確認した。さらに、相互情報量最大化で提案されていた手法 (Belghazi, ICML, 2018) を非線形独立成分分析へ応用し、新たな非線形独立成分分析の実践手法を構築した。そして、データ数が少ない場合に、構築手法は既存手法よりも推定精度が高いことを数値実験により確認した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Hiroaki Sasaki, Tomoya Sakai, Takafumi Kanamori	4. 巻 -
2. 論文標題 Robust modal regression with direct log-density derivative estimation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the international conference on uncertainty in artificial intelligence (UAI)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Hiroaki Sasaki, Takashi Takenouchi, Ricardo Monti, Apoo Hyvarinen	4. 巻 -
2. 論文標題 Robust contrastive learning and nonlinear ICA in the presence of outliers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the international conference on uncertainty in artificial intelligence (UAI)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Apoo Hyvarinen, Hiroaki Sasaki and Richard E. Turner	4. 巻 89
2. 論文標題 Nonlinear ICA Using Auxiliary Variables and Generalized Contrastive Learning	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS)	6. 最初と最後の頁 859-868
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 1件/うち国際学会 4件）

1. 発表者名 佐々木 博昭, 坂井 智哉, 金森 敬文
2. 発表標題 Robust modal regression with direct log-density derivative estimation
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐々木 博昭, 竹之内 高志, Ricardo Monti, Aapo Hyvarinen
2. 発表標題 Robust contrastive learning and nonlinear ICA in the presence of outliers
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Sasaki
2. 発表標題 Hunting Geometric Features in the Probability Density Function with Direct Density-Derivative-Ratio Estimation
3. 学会等名 the 11th International Conference of the ERCIM WG on Computational and Methodological Statistics (Organized session: "Mean shift and localization techniques") (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Aapo Hyvarinen, Hiroaki Sasaki and Richard E. Turner
2. 発表標題 Nonlinear ICA Using Auxiliary Variables and Generalized Contrastive Learning
3. 学会等名 International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Sasaki, Tomoya Sakai and Takafumi Kanamori
2. 発表標題 Robust modal regression with direct gradient approximation of modal regression risk
3. 学会等名 Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroaki Sasaki, Takashi Takenouchi, Ricardo Monti and Aapo Hyvarinen
2. 発表標題 Robust contrastive learning and nonlinear ICA in the presence of outliers
3. 学会等名 Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI 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
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------