

令和 4 年 6 月 9 日現在

機関番号：32689

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K12115

研究課題名(和文)ビッグデータ機械学習のためのスケーラブルな非線形非凸多様体最適化手法

研究課題名(英文) Scalable non-linear and non-convex manifold optimization for big data machine learning

研究代表者

笠井 裕之 (Kasai, Hiroyuki)

早稲田大学・理工学術院・教授

研究者番号：40312079

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、ビッグデータを用いた実応用における品質精度と処理量効率性の大幅な向上を達成することを目指してリーマン多様体最適化手法に着目し、スケーラブルな非線形非凸多様体最適化手法について研究した。幾何的(多様体)制約付き深層学習のための深層学習確率的勾配法、二次最適性を実現する非厳密信頼領域、またそれらの応用について研究した。さらに、最適輸送問題の最適化手法とその応用について研究した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

多くの検討の対象がユークリッド空間を対象としているのに対して、本研究が対象とする空間はリーマン多様体であることから、その間に大きな理論上・実装上・実用上の隔りがある。リーマン多様体最適化は、従来のユークリッド空間における制約付き最適化とは全く思想が異なり、近年研究が本格化された極めて新しい手法である。日本国内での理論的・実践的研究例は極めて少ない。本研究は、これまでの応募者の研究成果を発展させ、近年進展が著しい深層学習についてリーマン多様体最適化の視点からアプローチするものであり、他に例を見ない極めて斬新な取り組みである。

研究成果の概要(英文)：This project addresses some scalable non-linear and non-convex optimization method on manifolds for big-data machine learning problems. For this, this project particularly considers stochastic gradient algorithms on manifolds for deep learning, a second-order inexact trust-region algorithms on manifolds, and those application studies on some numerical applications. In addition, optimal transport problem is addressed, and its optimization algorithm and some applications are investigated.

研究分野：情報通信工学

キーワード：最適化 多様体 確率的勾配法 最適輸送問題

1. 研究開始当初の背景

学術分野では、これまでの線形凸最適化手法を拡張したより高効率な手法の研究が進められている一方で、近年、非線形非凸最適化による新しい手法の研究も大きな成果を上げている。この背景には、2006年以降の深層ニューラルネットワークに代表される深層学習による画像・音響・自然言語処理等の応用分野における著しい性能向上が、その理由として挙げられる。このような著しい技術進歩の要因には、ニューラルネットワークのネットワークアーキテクチャや伝搬制御アルゴリズム等の技術進歩と平行して、ビッグデータを効率よく処理可能な最適化アルゴリズムの開発とその理論的収束解析の検討に依るところも大きい。しかしながら一方で、そのような非線形非凸関数には、多数の局所解や鞍点が点在し、大域的最適解はもとより大域的準最適解を求めることも困難を極め、これによる品質・性能低下は実応用においては喫緊の課題である。このような非線形非凸関数を対象としたビッグデータ解析のためのスケーラブルな非線形非凸最適化アルゴリズムの研究はまさに今始まったばかりである。時代が要請するデータ処理速度と精度への要求は増大し続けており、大規模データに対応可能な理論的高速収束性能を有するスケーラブルなアルゴリズムを実現することは、学術分野だけでなく産業分野においても重要な課題である。

2. 研究の目的

本研究では、ビッグデータを用いた実応用（認識・解析・推定等）における品質精度と処理量効率性の大幅な向上を達成することを目指してリーマン多様体最適化手法に着目し、スケーラブルな非線形非凸多様体最適化手法について研究する。具体的には、直交部分空間や正定値行列等の幾何的（多様体）制約付き深層学習のための深層学習確率的勾配法、二次最適性を実現する非厳密信頼領域法、またそれらの応用、オープンソフトウェアの公開、について研究する。さらに、多様体最適化問題の応用として最適輸送問題に着目し、最適化手法とその応用について検討する。

3. 研究の方法

多様体制約付き深層学習を目的とした一次最適性を実現する多様体確率的勾配法については、凸最適化で提案された関数の曲率情報を簡易的に近似する手法により高速化を実現する手法を多様体上で検討する。特に、ユークリッド空間内手法の多様体への一般化を考えた時に、多様体、特に行列多様体の構造に着目した新しい加速化を模索する。さらに、反復に伴う二点間の測地線に沿った移動において、近似的手法であるレトラクション演算子を用い、且つ平行移動についてベクトル移送演算子を用いた場合に発生する誤差について理論的に解析することで、当該手法の大域的収束性とその収束レートを導き出す。

二次最適性を実現する多様体非厳密信頼領域法については、これまでに検討してきた非厳密法をさらに拡張し、計算量要求が最も高いヘシアン情報計算処理、次に高い勾配計算処理、最後に関数値算出処理、のいずれも簡易的に計算する手法の検討を行う。

さらに、多様体最適化問題の応用として最適輸送問題に着目する。当該問題では、輸送行列が二重確率行列を構成する多様体空間に存在することから、多様体空間の定義を提案する。また、それに特化した最適化手法を検討する。さらに、半緩和最適輸送問題に着目し、その最適化手法について検討する。最後に、最適輸送問題の応用として、様々な構造データへの適用問題を検討する。

4. 研究成果

多様体制約付き深層学習を目的とした一次最適性を実現する多様体確率的勾配法については、行列多様体の行列構造に着目した、全く新しい多様体確率的勾配法を提案し、その有効性を示した。この手法は、行列多様体の列および行のベクトル構造に着目した適応項（Adaptive term）をアルゴリズム内部に組み込むことで、ユークリッド空間内手法にはない新しい手法となっている。理論的には、大域的収束性とその収束レートを導き出し、そのレートはユークリッド空間内手法と同等であることを証明した。成果は、オープンソフトウェアとして公開した。

一方、二次最適性を実現する多様体非厳密信頼領域法については、一様ランダムサンプリングだけでなく重み付きサンプリングについても検討対象とし、理論的収束レート解析を実現した。合わせて、収束レートを達成するサンプリング数の限界下限サイズについても導出した。しかしながら、これまでの提案手法を超える性能を示すことには成功しなかった。

最適輸送問題においては、輸送行列が二重確率行列を構成する多様体空間に存在することに着目し、その空間と最適化のための各種処理のための定式化を行った。この情報をもとに、新たな最適化手法を検討した。提案手法が、従来の最適輸送問題で使用される線形計画問題用アルゴリズムよりも高速であり、また最新のシンクホーンと同等程度の速度であること、およびパラメータ非依存による安定性を確認した。成果は、オープンソフトウェアとして公開した。

さらに、一部緩和の最適輸送問題の定式化について、Frank-Wolfe 手法の拡張方法を提案した。特に、アルゴリズムでは、座標降下法による高速化を実現し、理論面では収束解析を提案した。数値実験では、色転送問題に適用し、提案手法の有効性を確認した。

さらに、最適輸送問題の応用問題においては、グラフ構造を有するデータおよびシーケンス構造を有するデータについての検討へと研究対象をさらに拡大した。グラフ構造問題では、グラフカーネルでよく用いられる WL アルゴリズムの問題を解決するため、WL 部分木間のノード距離を木構造編集距離で定義し、このノード距離を応用して最適輸送の枠組みを利用した埋め込み空間上のグラフ距離を提案した。一方、シーケンス構造問題では、シーケンスの各要素における隣接関係を表す変化量シーケンスを定義し、シーケンスデータ間の輸送距離損失に加え、変化量シーケンス間の輸送距離損失を新たに考慮することで、隣接要素間の関係性を考慮したマッチングを実現した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8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 J. Huang and H. Kasai	4. 巻 0
2. 論文標題 Graph embedding using multi-layer adjacent point merging model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)	6. 最初と最後の頁 0
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 -
1. 著者名 B. Mishra, H. Kasai, and P. Jawanpuria	4. 巻 0
2. 論文標題 Riemannian optimization on the simplex of positive definite matrices	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 NeurIPS workshop OPT2020	6. 最初と最後の頁 0
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 M. Horie and H. Kasai	4. 巻 0
2. 論文標題 Consistency-aware and inconsistency-aware graph-based multi-view clustering	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 28th International European Signal Processing Conference (EUSIPCO) 2020	6. 最初と最後の頁 0
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.23919/Eusipco47968.2020.9287516	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 -
1. 著者名 T. Fukunaga and H. Kasai	4. 巻 0
2. 論文標題 Wasserstein k-means with sparse simplex projection	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 25th International Conference on Pattern Recognition (ICPR) 2020	6. 最初と最後の頁 0
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/ICPR48806.2021.9412131	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 -

1. 著者名 Hiroyuki Kasai, Pratik Kumar Jawanpuria, Bamdev Mishra	4. 巻 PMLR 97
2. 論文標題 Riemannian adaptive stochastic gradient algorithms on matrix manifolds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 36th International Conference on Machine Learning (ICML2019)	6. 最初と最後の頁 3262-3271
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 Hiroyuki Kasai	4. 巻 NA
2. 論文標題 Multi-view Wasserstein discriminant analysis with entropic regularized Wasserstein distance	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)	6. 最初と最後の頁 NA
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ICASSP40776.2020.9054427	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 -

1. 著者名 Riku Hashimoto, Hiroyuki Kasai	4. 巻 NA
2. 論文標題 Sequential Semi-Orthogonal Multi-Level NMF with Negative Residual Reduction for Network Embedding	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)	6. 最初と最後の頁 NA
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ICASSP40776.2020.9054660	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 -

1. 著者名 Hiromi Narimatsu, Hiroyuki Kasai	4. 巻 NA
2. 論文標題 Overlapped State Hidden Semi-Markov Model for Grouped Multiple Sequences	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)	6. 最初と最後の頁 NA
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ICASSP40776.2020.9054136	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 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 福永拓海, 笠井裕之
2. 発表標題 緩和最適輸送問題のための Frank-Wolfeアルゴリズム高速化手法と色転写問題への応用
3. 学会等名 情報処理学会AVM研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Z. Fang and H. Kasai
2. 発表標題 OT-based graph similarity using shortest-path length,
3. 学会等名 情報処理学会AVM研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 堀江光彦, 笠井裕之
2. 発表標題 隣接要素の関連と時間分布の違いを考慮したグループ化シーケンスマッチング手法の検討
3. 学会等名 情報処理学会AVM研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 J. Huang and H. Kasai
2. 発表標題 A Wasserstein graph kernel based on substructure isomorphism problem of shortest paths
3. 学会等名 情報処理学会AVM研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 橋本陸 , 笠井裕之
2. 発表標題 ネットワーク・ワードエンベディングのための負値残差低減および半直交制約付き非負値行列分解
3. 学会等名 研究報告オーディオビジュアル複合情報処理 (AVM)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 笠井裕之
2. 発表標題 エントロピー正則化Wasserstein距離に基づくマルチビューWasserstein判別法
3. 学会等名 研究報告オーディオビジュアル複合情報処理 (AVM)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 笠井裕之
2. 発表標題 非線形構造制約付き大規模機械学習問題への取り組み ~非厳密リーマン多様体最適化の理論と応用~
3. 学会等名 研究報告オーディオビジュアル複合情報処理 (AVM) (招待講演)
4. 発表年 2019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
---------	---------