

令和 3 年 5 月 31 日現在

機関番号：82401

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2018～2020

課題番号：18H06487・19K21550

研究課題名（和文）知識ベースと統計的機械学習の協調による知的センサデータ解析

研究課題名（英文）Intelligent Sensor Data Analysis based on Cooperation of Knowledge Bases and Statistical Machine Learning

研究代表者

武石 直也（Takeishi, Naoya）

国立研究開発法人理化学研究所・革新知能統合研究センター・特別研究員

研究者番号：20824030

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：統計的機械学習では、所望の問題を解くような仕組みがデータをもとに半自動的に獲得される。機械学習はさまざまなデータ・問題に対して用いられているが、その結果を解釈することが難しかったり、データ量が少ない場合には適切に学習を行えなかったりする問題がある。そこで本研究では、知識ベースとして各応用分野に存在するドメイン知識を機械学習に効率的に組み込むための方法を研究した。特に、工学分野等でよくあらわれるセンサデータを対象として、システム図（特徴量間の関係性）やシステムの安定性などにかかわる事前知識を機械学習モデルに組み込む方法を開発し、その有効性を確かめた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、センサデータ活用の場面で想定される形式の事前知識（システム図やシステムの安定性に関する知識）を機械学習に組み込む汎用的な方法を開発した。つまり、これまで利用することが難しかった、または利用するためには煩雑でアドホックな操作が必要だった事前知識を容易に機械学習で用いることができる。これにより、機械学習結果の効率や解釈性の向上が期待され、システム運用の場面で機械学習をさらに活用する助けになると期待できる。

研究成果の概要（英文）：Statistical machine learning is a procedure to acquire (semi-)automatically a system that solves particular tasks with data of such tasks as input. Machine learning has been utilized in various tasks and data, but it is still challenging to interpret the results and to adapt to a small-data regime. We studied methodologies to incorporate prior knowledge available as knowledge bases of application domains efficiently into machine learning. In particular, we focused on sensor data that often appear in engineering. We developed methods for incorporating prior knowledge, such as system diagrams (i.e., relation between feature of sensor data) and stability property of a system, into machine learning.

研究分野：機械学習

キーワード：統計的機械学習 知識ベース 事前知識 専門家知識 センサデータ解析

1. 研究開始当初の背景

自動車・工場・人工衛星といった工学システムからは多種多様なセンサデータを計測・取得することができる。センサデータはシステムの故障検知・メンテナンス支援・運用最適化などに有効に用いることができると考えられ、特に統計的機械学習に基づく各種の方法が研究されてきた。ところが、現実的には、センサデータに関する統計的機械学習の結果に基づいて運用上の意思決定が効率的になされることはまだ多くない。その理由としては、例えば、システムや環境の非定常性等のために実際に役に立つセンサデータの取得できる量や種類に限りがあることや、システムの専門家の知識と機械学習の結果との整合性(あるいは、明らかな非整合性)を判断することが難しいことなどが考えられる。特に、機械学習の性能に関する理論保証が簡単には得られない複雑な問題設定の場合は、結果のよしあしを判断するために専門家知識との整合性が非常に重要であることから、センサデータに対する機械学習を運用上有効に活用するためには、専門家知識と機械学習との協調が重要な課題といえる。

2. 研究の目的

本研究では、工学システムの運用において、センサデータに対する機械学習の結果を有効に活用するための専門家知識と機械学習との効果的な協調を大きな目的としている。特に、事前知識として知識ベースのような形式で蓄積されている専門家の知識を機械学習において活用することを目的とした(ただし、よく知られた古典的な知識表現に限らず、専門家知識を何らかの形式に表現したもの一般を知識ベースとして考える)。例えば、システムの構成図はシステム中に存在する機器やセンサの関係性を表しており、機械学習にとっても有用な事前知識である。しかし、機械学習のアルゴリズム側では、データ以外の事前知識(帰納バイアスと呼ばれる)として活用できるものの形式は基本的には限られていて(例:パラメタの事前分布・仮説空間・損失関数)。上述したシステム構成図のようなドメインに特有の事前知識形式を各機械学習タスクで有効に利用する方法は明らかでない。そこで本研究では、センサデータ活用の場面で利用可能と想定されるような事前知識の形式について、それを機械学習の手法に取り込むための方法論を明らかにする。

3. 研究の方法

センサデータ活用の場面で利用可能と想定される事前知識の各形式について、有用と考えられる機械学習タスクを(なるべく一般性を失わないように)定め、両者を統合する方法を開発する。また、さまざまな事前知識の活用のためにはさまざまな機械学習の方法が候補として存在することが望ましいため、特にセンサデータに対して有用と考えられる機械学習手法についても可能であれば開発を進める。開発した方法はシミュレータから生成したデータや公開されているデータによって性能を実験で確かめる。

4. 研究成果

(1) 不完全な知識グラフで表される事前知識を確率的生成モデルの事前分布として利用する方法を開発し、その有効性を確かめた。ここで知識グラフとは、エンティティ(例えば機械学習のタスクでは特徴量やその背後の変数)の間の関係性をグラフとして表したものを指す。開発した手法によって、特徴量の直接の関係性だけでなく、間接的な関係を含む知識グラフを事前知識として利用することができる。ただしこの方法は、適用可能な確率的生成モデルの種類が限られるという限界がある。この成果は、統計的関係学習等に関する査読あり国際ワークショップ(8th International Workshop on Statistical Relational AI)において論文として発表した。

(2) 上記(1)の手法では、適用可能なモデルが限られるという限界があった。そこで、特徴量間の関係性が直接示されている場合に限定することで、より広範な確率的生成モデルについて事前知識を活用して正則化することのできる方法を開発した。特に、特徴量間の非線形な依存性をカーネル法を用いた独立性指標によって表現して正則化に用いることによって、深層ニューラルネットワークを用いたモデルを含む一般の確率的生成モデルに対して事前知識を入れ込むこ

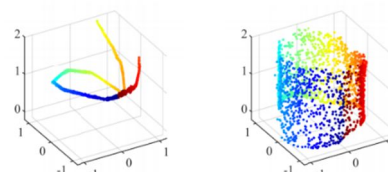


図1 GANの正則化

とが可能となった。

図1に示すのは、提案手法によって敵対的生成ネットワーク(Generative Adversarial Network, GAN)を正則化した場合(右)としなかった場合(左)の、学習したGANからの生成を比較したものである。正則化なしではモード崩壊(mode collapse)として知られる現象によって真の分布(円筒のような分布)を再現できていない。一方、提案手法によって垂直方向以外の軸に関してある程度の依存性があるという事前知識を入れ込んだ場合には、適切に分布を再現することができている。この例は手法の理解のためのごく簡単なものだが、実際には化学プラントのシミュレーションデータや太陽光発電量のデータなどに対して、GANだけでなく変分オートエンコーダ(Variational Autoencoder, VAE)を学習する際に事前知識を利用することの有効性を実験的に確かめた。

この成果は、人工知能に関する著名な査読あり国際会議(29th International Joint Conference on Artificial Intelligence)において論文として発表した。

(3) センサデータは多くの場合時系列であり、時系列をうみだすシステムは力学系としてモデル化するのが自然な場合が多い。深層学習などによって力学系を学習することも当然可能であるが、単純にデータに対してフィッティングするだけでは、学習モデルが力学系にとって重要な性質を備える保証はない。本研究では特に力学系の重要な性質のひとつである安定不変集合に着目し、事前知識として指定したような安定不変集合を備える力学系モデルを構成・学習する方法を開発した。この方法によって、力学系の漸近的な挙動についての事前知識(例えば、対象の系が周期的な運動に収束する、つまりリミットサイクルを持つことを知っている)を力学系に対する機械学習に利用できる。

図2に応用例を示す。ここでは円柱背後の流れを記録したデータの長期予測($t=0$ から $t=200$)を行っている。上段が真のデータ、中段が事前知識なしの深層学習モデルによる予測、下段が安定不変集合に関する事前知識を入れ込んだ深層学習モデルによる予測(つまり提案手法)である。事前知識なしでは予測が発散してしまう一方、提案手法によって事前知識を入れ込んだことで(若干の位相のずれはあるが)振動パターンを再現できている。また他のデータでも有効性を確かめた。

この成果は、人工知能に関する著名な査読あり国際会議(35th AAAI Conference on Artificial Intelligence)において論文として発表した。

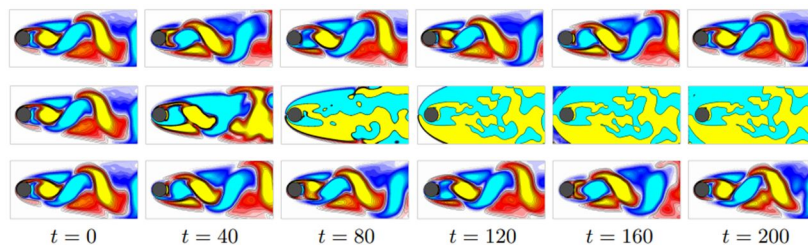


図 2 円柱背後の流れの深層学習モデルによる予測

(4) 上述のようにセンサデータなどの時系列データは力学系の学習や解析によって扱うことができる場合が多い。そこで、力学系をデータに基づいて解析する方法論として注目されているクープマン作用素に基づく方法についても研究を行った。特に、観測されているシステムの動作モードが離散的に変化することを事前知識としてわかっている場合にそれを活用できる方法を開発した。これは、クープマン作用素に基づく力学系解析のデータによる手法のひとつとして知られる動的モード分解の確率的解釈を発展させたものである。また、データ空間の幾何的構造を利用してクープマン作用素の固有関数などを推定する手法に対して、機械学習でよく用いられるカーネル学習手法を組み合わせる方法を開発した。これらの成果は、制御理論に関する主要な査読あり国際会議(57th IEEE Conference on Decision and Control)や機械学習に関するアジアの主要な査読あり国際会議(11th Asian Conference on Machine Learning)において論文として発表した。

(5) 力学系学習に事前知識を用いる方法として、さらに、複数の力学系間の類似性に関する事前情報を機械学習に入れ込む方法を開発した。例えば互いに若干異なる同種のシステムについて計測したセンサデータがある場合に、各システムで個別に力学系を学習するのではなく、システム間に期待される類似性を利用して複数の力学系を同時に学習したほうが情報を効率的に利用できると考えられる。これは機械学習ではマルチタスク学習として知られる問題である。従来のマルチタスク学習の手法では力学系間の類似性を適切に扱うことができなかつたため、本研究ではクープマン作用素に基づく力学系間の類似度指標を利用して、力学系のマルチタスク学習を定式化した。この成果は、制御理論に関する主要な査読あり国際会議(59th IEEE Conference on Decision and Control)で論文として発表した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Naoya Takeishi	4. 巻 101
2. 論文標題 Kernel Learning for Data-Driven Spectral Analysis of Koopman Operators	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of Machine Learning Research	6. 最初と最後の頁 956 ~ 971
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 Naoya Takeishi, Yoshinobu Kawahara	4. 巻 -
2. 論文標題 Knowledge-Based Regularization in Generative Modeling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the 29th International Joint Conference on Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 2390 ~ 2396
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 Naoya Takeishi	4. 巻 -
2. 論文標題 Shapley Values of Reconstruction Errors of PCA for Explaining Anomaly Detection	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2019 International Conference on Data Mining Workshops	6. 最初と最後の頁 793-798
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/ICDMW.2019.00117	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 Sasaki, Naoya Takeishi, Takehisa Yairi, Koichi Hori	4. 巻 11671
2. 論文標題 Neural Gray-Box Identification of Nonlinear Partial Differential Equations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 309 ~ 321
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-3-030-29911-8_24	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 Naoya Takeishi, Takehisa Yair, Kawahara Yoshinobu	4. 巻 -
2. 論文標題 Factorially Switching Dynamic Mode Decomposition for Koopman Analysis of Time-Variant Systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2018 IEEE Conference on Decision and Control	6. 最初と最後の頁 6402 ~ 6408
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/CDC.2018.8619846	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 Naoya Takeishi, Yoshinobu Kawahara	4. 巻 -
2. 論文標題 Learning Multiple Nonlinear Dynamical Systems with Side Information	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2020 IEEE Conference on Decision and Control	6. 最初と最後の頁 3206 ~ 3211
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/CDC42340.2020.9304482	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4件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 武石 直也
2. 発表標題 再構成誤差のシャープレイ値による異常検知の説明
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 武石 直也
2. 発表標題 時変動的モード分解
3. 学会等名 第33回人工知能学会全国大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoya Takeishi、Kosuke Akimoto
2. 発表標題 Knowledge-Based Distant Regularization in Learning Probabilistic Models
3. 学会等名 The 8th International Workshop on Statistical Relational AI (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 武石 直也
2. 発表標題 知識グラフによる生成モデル学習の正則化
3. 学会等名 第21回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2018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
---------	---------