

令和 5 年 6 月 20 日現在

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K11933

研究課題名（和文）カーネルベイズ推論に基づく時系列アルゴリズムの開発と展開

研究課題名（英文）Development of time series algorithms based on kernel Bayesian inference

研究代表者

西山 悠（Nishiyama, Yu）

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・准教授

研究者番号：60586395

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：カーネルベイズ推論は確率分布のカーネル平均を推論する．カーネルベイズの枠組みで状態空間モデルのフィルタリングとスムージングを行うkernel Bayes' filter (KBF) とkernel Bayes' smoother (KBS)が提案されている．次の成果を得た：連続時間の状態空間モデルを考慮した連続-離散モデルのフィルタリングアルゴリズム(mbn-KBF)を開発した．スムージングアルゴリズム(mbn-KBS)を開発し，SVモデルにおける結果の詳細な可視化を行った．kernel Bayes' ruleの3種類とkernel Kalman ruleの数値的比較を行った．

研究成果の学術的意義や社会的意義

ベイズ学習はデータと事前分布から事後分布を計算する重要な学習法の1つであり，様々な応用の学習システムの基礎に位置付けられる．構造データ・高次元データに対する複雑な形を持つ事前分布，尤度，事後分布をコンピュータ上で実現するベイズ推論システムの構築が予測精度向上に重要である．カーネルベイズ推論はカーネル法の立場からこれにアプローチする．ベイズ推論を時系列に計算する応用事例に状態空間モデルのフィルタリングとスムージングがある．このタスクに対してカーネルベイズ推論の有効性を検証し，問題点の抽出・整理，更なる枠組みの改良・改善，新たな研究課題の発見につながる意義がある．

研究成果の概要（英文）：Kernel Bayesian inference infers kernel means (functions belonging to the reproducing kernel Hilbert space) of probability distributions. The kernel Bayes' filter (KBF) and kernel Bayes' smoother (KBS), which perform filtering and smoothing of state-space models in a kernel Bayesian framework, were proposed. In this study, we apply KBF and KBS to various state-space models to identify problems, refine and improve the framework, and discover new research topics. The following research results were obtained: A filtering algorithm (mbn-KBF) for continuous-discrete models was developed considering continuous-time state-space models. We developed a smoothing algorithm (mbn-KBS), visualized the results in the Stochastic Volatility model in detail, and created a movie. Three variants of the kernel Bayes' rule and kernel Kalman rule were numerically compared.

研究分野：機械学習

キーワード：カーネル平均埋め込み カーネルベイズ推論 状態空間モデル フィルタリング スムージング 最適輸送 Sinkhorn divergence

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。

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

確率分布の集合に内積や距離を定義すると、2つの確率分布の間で類似度や近さを議論できる。機械学習・人工知能分野では、確率分布のカーネル平均埋め込み (kernel mean embedding) を利用したアルゴリズム開発が行われている。確率分布のカーネル平均埋め込みは確率分布を正定値カーネルが定める再生核ヒルベルト空間に特徴写像の期待値により写像させた関数をいう。この関数を確率分布のカーネル平均ともいう。正定値カーネルを適切に選ぶと、カーネル平均は確率分布を一意に定める。カーネル平均埋め込みを使うと、確率分布の集合に内積と距離がヒルベルト空間の内積の意味で定義される。

機械学習・人工知能分野で研究されているカーネルベイズ推論 (kernel Bayesian Inference; KBI) は、確率分布を推論する代わりに、確率分布のカーネル平均 (再生核ヒルベルト空間に属する関数) を推論する。例えば、ベイズ事後分布を推定する代わりに、ベイズ事後分布のカーネル平均 (ベイズ事後分布に相当する再生核ヒルベルト空間に属する関数) を推定する。KBI はカーネル法が持つ利点を活かしながらベイズ推論ができる長所がある。

KBI の応用事例には、時系列モデリングである状態空間モデルのフィルタリングとスムージングのタスクへの適用がある。KBI の枠組みで状態空間モデルのフィルタリングとスムージングを行う kernel Bayes' filter (KBF) と kernel Bayes' smoother (KBS) が提案された。これらのアルゴリズムは、時系列的にフィルタリング分布、予測分布、スムージング分布を逐次推定する代わりに、時系列的にそれらのカーネル平均を逐次推定する。

### 2. 研究の目的

KBI に基づく状態空間モデルのフィルタリング KBF とスムージング KBS アルゴリズムが提案されたが、様々な状態空間モデルの条件下でアルゴリズムの有効性を検証しておらず、周辺の知見が蓄積されていない。そこで本研究では、カーネルベイズ推論に基づく時系列アルゴリズム KBF, KBS を様々な状態空間モデルに適用し、問題点の抽出・整理、KBI の枠組みの改良・改善、新たな研究課題の発見を図る。

### 3. 研究の方法

状態空間モデルは具体的には離散時間時不変状態空間モデルを対象とする。離散時間時不変状態空間モデルは、次の3つ組で構成される：状態集合上の初期分布、状態集合から次状態集合への条件付き確率 (状態遷移確率)、状態集合から観測集合への条件付き確率 (観測過程確率)。実応用で状態空間モデルのフィルタリングとスムージングを行う際には、この3つ組をデータから推定する必要がある。

KBI に基づく KBF や KBS では、訓練データからカーネル平均埋め込みを使い、状態遷移確率と観測過程確率のカーネル平均をノンパラメトリックに推定して、フィルタリングとスムージングのタスクを行う。このアルゴリズムをノンパラメトリック推定であることを強調して nonparametric KBF (n-KBF), nonparametric KBS (n-KBS) と呼ぶ。

一方、状態遷移確率と観測過程確率のいずれか一方が簡単なパラメトリックモデルで同定可能な場合、カーネル平均埋め込みによるノンパラメトリック推定と確率モデルによるパラメトリック推定を融合したフィルタリングとスムージングを行いたい。このアルゴリズムは次の2種類に大別できる。1つ目は状態遷移確率を確率モデルによりパラメトリック推定し、観測過程確率をカーネル平均埋め込みによりノンパラメトリック推定する場合である。このアルゴリズムを model-based and nonparametric KBF (mbn-KBF), model-based and nonparametric KBS (mbn-KBS) と呼ぶことにする。2つ目は逆に状態遷移確率をカーネル平均埋め込みによりノンパラメトリック推定し、観測過程確率を確率モデルによりパラメトリック推定する場合である。このアルゴリズムを nonparametric and model-based KBF (nmb-KBF), nonparametric and model-based KBS (nmb-KBS) と呼ぶことにする。

この6つのアルゴリズム n-KBF, n-KBS, mbn-KBF, mbn-KBS, nmb-KBF, nmb-KBS 周辺について知見を蓄積し、問題点の抽出・整理、KBI の枠組みの改良・改善、新たな研究課題の発見を図る。

### 4. 研究成果

## 【2020年度】

### (1) 関数値カーネルリッジ回帰以外のカーネル平均推定量の構成と検証

KBIやそれから得られるKBF, KBSは, Le Song らが導いた関数値カーネルリッジ回帰の最適化によりカーネル平均推定量を構成している. KBI, KBF, KBSの空間計算量・時間計算量の削減やロバスト推定量構成のために, 他のカーネル平均推定量を検討した. 6種類の関係する手法 (不完全 Cholesky分解, Nystrom近似, random Fourier features, divide and conquer法, Nadaraya-Watson推定量, k近傍法) に基づきカーネル平均推定量を構成し, ground-truthのRKHSノルムが計算できる数値実験の条件で, 各推定量を数値的に比較した. 各6種類の推定量の違いについて知見を得た.

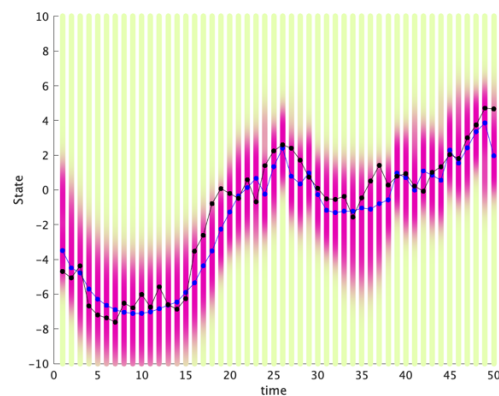
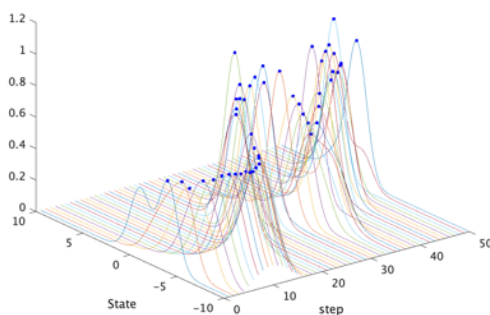
### (2) 連続-離散モデルにおけるmbn-KBFの開発

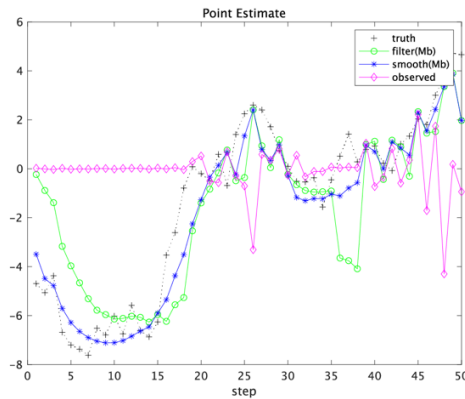
以前開発されたmbn-KBFは, 離散時間状態空間モデルを対象としており, 観測値が不規則な時間間隔 (ランダム時間等) で得られるときの状態空間モデルのフィルタリングには適用できない. そこで本研究では, この問題点を解決するため, 状態遷移が連続時間のWiener過程に従う場合の連続-離散モデルを考え, 従来のMb-KBFを拡張した. 具体的な数値計算手法としては, 予測ステップにEuler-Maruyamaスキームを使い, フィルタリングステップにカーネルベイズ則 (適宜Kernel Herding手法を援用する) を使って行った. 提案アルゴリズムを人工データ数値実験と実データ数値実験 (vision-based robot localization) に適用し, いくつかの他のノンパラメトリック手法 (Nadaraya-Watson推定, Gaussian Process回帰, 等) と比較した結果, 本提案法の有効性が状態推定精度 (RMSE) の点で検証された.

## 【2021年度】

### (3) mbn-KBS のアルゴリズム開発と Stochastic Volatility モデルでの検証

mbn-KBF に対応する平滑化アルゴリズム mbn-KBS は未開発であった. そこで mbn-KBS アルゴリズムを開発し, 状態空間モデルが Stochastic Volatility モデルの場合に有効性を検証した. 関連手法 (mbn-KBF, n-KBS) と比較して隠れ状態の推定精度 (RMSE) が良くなる結果を得た. 本アルゴリズム mbn-KBS は 4 つの超パラメータのチューニングを必要とするが, 超パラメータを変化させたときのアルゴリズムの振る舞いの詳細な検証を行った. 特に超パラメータ 4 つを変化させたときの直観的に分かりやすい可視化と動画を作成した.





左上図: Stochastic Volatility モデルに対して mbn-KBS で推定されたスムージング分布のカーネル平均 (再生核ヒルベルト空間の関数) の時系列を表す. 青点は各時刻のスムージング分布のカーネル平均の最大値に対する点推定値を表す.

右上図: マゼンタは左上図の関数値に対するカラーマップを表す. 各時刻の内部状態の ground-truth (黒点) とスムージング分布のカーネル平均の最大値の点推定値(青)の比較を表す.

下図: Stochastic Volatility モデルに対して内部状態の ground-truth (黒点), 観測値 (マゼンタ), mbn-KBF の点推定値 (緑), mbn-KBS の点推定値(青)の結果を表す.

#### (4) コーシーノイズモデルに対応する mbn-KBF の開発

状態空間モデルの状態遷移確率で大きな外れ値ノイズが発生する場合, mbn-KBF 内で加法的ガウスノイズモデルを用いた学習より, 加法的コーシーノイズモデルを用いた学習が有効と考えられる. しかしそのアルゴリズムは未開発であった. そこで大きな外れ値ノイズが発生する状態遷移確率に対応するため, 加法的コーシーノイズモデルとコーシーカーネルの共役性に着目した Cauchy Mb-KBF を開発した. またコーシーカーネルにおける点推定アルゴリズムを導出した. 人工数値実験の結果, 提案手法は加法的ガウスノイズモデルを用いた学習より, 隠れ状態の推定精度 (RMSE) が良くなる結果を得た.

#### 【2022年度】

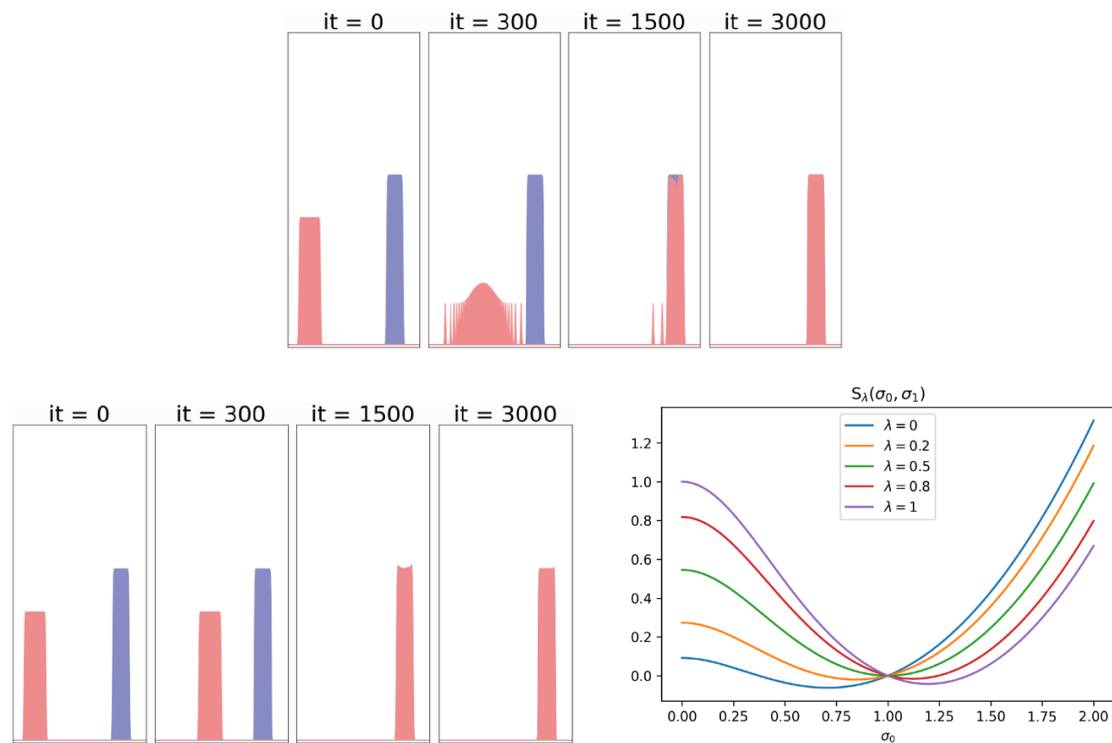
#### (5) kernel Bayes' rule (KBR) の3種類の亜種とkernel Kalman rule (KKR) の数値的比較

KBRはベイズ事後分布のカーネル平均埋め込みを計算する手法である. KBRを実現するアルゴリズムには3種類のvariantsが知られていた. しかしそれらのアルゴリズムには数値的不安定が報告されていた. そこでGebhardt et. al (2019) はKalman filterの導出と似た方法でKKRを提案し, 数値的安定性を向上させたKBRを実現した. KBRの3種類とKKRの比較実験を行い, 双方の利点・問題点を調査する研究を行った. お互いの利点を活用したアルゴリズム開発を検討する.

#### (6) 最適輸送理論におけるSinkhorn divergenceの拡張

カーネル平均埋め込みは2つの確率測度間に内積と距離を定義する. これはMaximum Mean Discrepancy (MMD)として知られ, 確率測度を使った応用に広がる. 一方, 最適輸送理論では確率測度間に最適輸送距離やそれに関するdivergenceを定義する方法を研究している. 最適輸送理論ではコスト関数つき空間で2つの確率測度間の最適輸送経路を計算する. Cututri (2013) は, 最適輸送経路の計算量を削減するため, エントロピー制約つき

最適輸送(EOT)を導入した. EOTのある種の極限とカーネル法のMMDが等しいことが知られる. しかしEOTの輸送コストはdivergenceの性質を満たさないことが知られる. Feydy et al. (2019)は, EOTにdivergenceの性質を持たせたSinkhorn divergence (SD) を提案した. しかしFeydy et al. (2019) が導入した修正法はEOTの輸送コストがdivergenceの性質を満たすための唯一の必要条件ではない. そこでFeydy et al. (2019)が提案したバイアス修正項を凸結合に拡張した Extended Sinkhorn divergence (ESD)を提案した. ESDもdivergenceの性質を持つことを数学的に明らかにした. また1次元確率分布における数値実験の結果で, 提案法(ESD)が従来法 (SD)より効率的な輸送経路を辿る数値例の存在を示した. 今後2次元や高次元確率分布の最適輸送の数値実験を行い, 提案法(ESD)の有効性を検証する.



上図: 目的は初期確率分布 (赤色) をターゲット確率分布 (青色) に輸送すること. 従来法 (SD) の最適化による各 iteration ごとの確率分布 (赤) の時間変化と経路.

iteration=1500のとき確率分布(赤)はターゲット確率分布 (青色)に収束しきれていない.

左下図: 上図と同様. 提案法 (ESD) の最適化による各 iteration ごとの確率分布 (赤) の時間変化と経路. 提案法は確率密度関数の形(赤)を保ちながらターゲット確率分布 (青色)に近づく.

右下図: ガウス分布のときの提案法の損失関数の概要. 従来法(SD)の最適化は  $\lambda=0.5$  (緑色)の損失関数を使うことに相当する. 提案法(ESD)の最適化は,  $\sigma_0$  との大小関係の条件に応じて, 他の  $\lambda$  値(他の色の損失関数)を使うことに相当する.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 0件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 三輪恭平, 西山悠	4. 巻 122
2. 論文標題 バイアス修正項の凸結合によるSinkhornダイバージェンスの拡張	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 電子情報通信学会 信学技報	6. 最初と最後の頁 48-53
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 無
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2件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 三輪恭平, 西山悠
2. 発表標題 バイアス修正項を凸結合に拡張したSinkhorn divergenceの検討
3. 学会等名 IBISML2022 workshop
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 崎田健太郎, 西山悠
2. 発表標題 Kernel Kalman Rule とKernel Bayes' Rule の数値的比較
3. 学会等名 IBISML2022 workshop
4. 発表年 2022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
---------	---------