科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年 ６ 月 ７ 日現在

機関番号：６２６０３
研究種目：基盤研究(B)
研究期間：2010～2013
課題番号：２２３０００９８

研究課題名（和文）統計的推論を支える効率的計算アルゴリズムに関する数理基盤

研究課題名（英文）Mathematical foundation of efficient algorithms for statistical inference

研究代表者
福水　健次（Fukumizu, Kenji）

統計数理研究所・大学共同利用機関等の部局等・教授

研究者番号：６０３１１３６２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　9,400,000円、（間接経費）　2,820,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的である，グラフ構造を利用した伝搬型アルゴリズムの数理的解明に関しては，近似確率計算の代表的手法である確率伝搬法に対して，グラフゼータ関数を用いた新たな数学的解析法を導入して，従来のアプローチよりも精緻な結果が得られることを確認した．また，ループ展開の方法により，近似精度に関する理論的結果も得た．
　また，期待値伝搬法の理論解析の数理基盤としてカーネル法に基づく無限次元指数分布族を導入して，それを用いた推論法の提案との理論的性質の解明を行った．

研究成果の概要（英文）：As a new mathematical method for analyzing propagation algorithms on graphs, a novel Graph zeta function has been proposed for the analysis of the loopy belief propagation algorithm, and used for revealing stronger theoretical results than the known ones. Also, a method of loop expansion has been proposed for analyzing the approximation error of the loopy belief propagation.
　As a mathematical foundation of the expectation propagation, an infinite dimensional exponential family has been proposed based on positive definite kernels, and its estimation methods and theoretical properties have been studied.

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・統計科学

キーワード：グラフ　アルゴリズム　確率計算　情報幾何　位相幾何

１．研究開始当初の背景

情報通信や生命科学などの発展により生じた，複雑な構造を持つ高次元・大容量データに対する統計的推論には，グラフィカルモデルを利用した階層モデルなど複雑なモデリングが不可欠である．有限状態の変数を含む推論には計算量の組み合わせ的爆発が，連続変数に対しては積分の数値計算が必要となることが多く，有効な計算アルゴリズムの研究が極めて重要な課題となっていた．

本研究では特に，グラフ構造によって記述される確率分布（グラフィカルモデル，マルコフランダム場）を用いた推論に適用される，グラフ構造を利用した効率的近似計算アルゴリズムの数理的理解を主なターゲットとする．代表的方法である確率伝搬法は，多くの実問題でその有効性が示されているが，その収束性や正確性などについての理論は，単ループなど特別な場合の正確性や収束性に関する緩い十分条件が与えられている程度で，多くの理論的性質が依然として未知のまま残されていた．したがって，伝搬型アルゴリズムの持つ本質的な構造を定式化し，上記のアプローチを統合するような数理的道具の開発が望まれていた．

２．研究の目的

本研究は，グラフを用いた伝搬型アルゴリズムに対して新しい数理基盤を創成し，アルゴリズムの収束性，収束解の近似性能に関する理論解析を行い，アルゴリズムの改良とその応用を図ることを目的とした．

特に，

① 伝搬型アルゴリズムの位相幾何的研究
② 伝搬型アルゴリズムの代数幾何的研究
③ 期待値伝搬法の無限次元情報幾何的研究

の３点をその具体的目的として設定した．

３．研究の方法

代表者の福水と研究協力者の渡辺が提案した，確率伝搬法とグラフゼータ関数（伊原ゼータ関数）との関係に基づいて，伝搬型アルゴリズムの数理解析に対する，位相的・代数的不変量に基づく新しい方法論を構築する．また，確率伝搬法のアルゴリズムは統計物理で考察されてきた計算手法と密接な関係にあるため，グラフの様々な位相的・代数的不変量と統計物理的量との関係を考察し，アルゴリズムの解析をより深化させる．

また，効率的計算アルゴリズムの数理解析に対する新しい方法論として，ホモロジー代数的な手法を用いた代数的方法論を考察する．数学分野においては，幾何学的対象の位相的性質は，ホモトピー，ホモロジーなどの代数的量で表現して解析することによって系統的な研究を行う方法論が確立している．そこで，グラフ上のさまざまな伝搬アルゴリズムに関連して定義されたグラフの不変量に対し，そこから導かれるホモロジー代数的な量を考察することにより，グラフの位相的・代数的性質とアルゴリズムの関連を系統的に研究する方法論を構築していく．

さらに，無限次元指数型分布族を用いたアルゴリズムの解析を行う．福水が提案した無限次元指数型分布族は，通常の有限次元指数型分布族から外れた分布族にも指数型分布族と同様の議論を可能にするので，この概念を，分担者の池田・田中が発展させた情報幾何的アプローチと統合し，期待値伝搬法の情報幾何的解析を研究する．

４．研究成果

以下に本研究の主たる成果に関して述べる．

（１）グラフ上の伝搬アルゴリズムの最も代表的な近似計算アルゴリズムは，確率伝搬法と呼ばれる周辺分布の近似計算アルゴリズムである．このアルゴリズムは，ベイズ推論における事後確率の計算などに必須であり，マルコフ確率場による推論や，符号の復号アルゴリズムなど，多くの応用で有用性が確認されているが，収束性や近似精度を理論的に研究することは必ずしも容易でない．この研究では，グラフ上定義される井原ゼータ関数を拡張し，確率伝搬法のダイナミクスやそれを記述するためのベーテ自由エネルギーとの関連を明らかにした．ベーテ自由エネルギーは，その鞍点が確率伝搬法の安定点と一致することが知られており，確率伝搬法のダイナミクスを議論するためによく用いられている．

より具体的には，グラフ $\mathrm{G}=(\mathrm{V},\mathrm{E})$ のノードを添え字に持つ有限状態確率変数 $\mathrm{X}=(\mathrm{X}_1,\dots,\mathrm{X}_\mathrm{n})$の同時分布を

$$\mathrm{P}(\mathrm{X})=\frac{1}{Z}\prod_{(ij)\in E}\Psi_{ij}(X_i,X_j)$$

$$=\frac{1}{Z}\prod_{(ij)\in E}e^{\theta_{ij}\cdot s_{ij}(X_i,X_j)+\theta_i s(X_i)+\theta_j s(X_j)}$$

によって与えるとき，周辺分布 $\mathrm{P}(X_i)$を与える計算を効率的に行う方法が確率伝搬法である．グラフがサイクルを持つ場合には，一般には確率伝搬法は厳密な値を与えるとは限らないことが知られている．

グラフゼータ関数 $\zeta_\mathrm{G}(u)$ は，グラフ G を有向グラフと見たときに，有向エッジ集合 u を変数に持つ関数である（定義は文献①を参照）．本研究では，

$$\zeta_\mathrm{G}^{-1}(u)$$

$$=\det\left(\nabla^2 F_b(u)\right)\prod_{ij\in E}Var[s_{ij}]\prod_{i\in V}Var[s_i]^{1-d_i}$$

が成り立つことを示した．ここでF_bはベーテ自由エネルギー，d_iはノードiの次数を表す．さらに，uが確率伝搬法の安定点で与えられるとき，上式はさらに

$$\det(I-\nabla T_{BP}(u))$$

に一致することを示した．ここで T_{BP}は確率伝搬法の１ステップのダイナミクスを表し

ている．

これらの公式から，以下の事実が導かれる．

i）ベーテ自由エネルギーが局所一致するビリーフ (b_{ij}, b_i)集合の上で凸関数であるための必要十分条件は，サイクル数$n(G) \coloneqq |E| - |V| +$ (連結成分数)が0か1であることである．

ii）$n(G) = 2$であるグラフに対し，$\theta_{ij} < 0$なるエッジが存在すれば，確率伝搬法の安定点は高々一つである．

i）は，確率伝搬法の収束点の一意性と収束性の条件となっており，ii）は確率伝搬法の収束点の一意性に対する十分条件を与えている（図 1）．これらの結果は，確率伝搬法に関してこれまで知られていた事実よりも強い結果である．

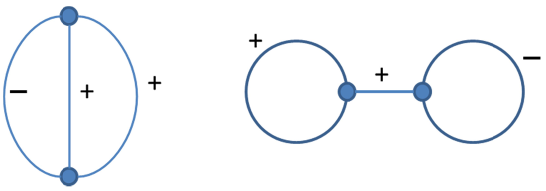

図 1. ii)の条件を満たすサイクル数 2 のグラフの例

（2）確率伝搬法の収束点に対して，得られた周辺分布が，真の周辺分布とどれぐらい近いかを議論することは，重要な課題である．この問題に対して，文献②では，グラフのループ展開という方法を新しく導入し，この問題を議論した．

特に，この研究では，真の分配関数（正規化定数Z）と，確率伝搬法の安定点から構成されるそのベーテ近似 Z_B との比 Z/Z_B を，グラフの各ループ（サイクル）に対応する項によって展開する公式を導いた．この結果を用いると，1サイクルのグラフ上の2値確率変数に対する確率伝搬法の収束解に閾値処理を施すと，厳密な MAP 解が得られるという従来の結果(Weiss 2000)の別証明を与えることも可能である．また，さまざまなグラフ多項式と関連が深いことも明らかにしており，今後のさらなる展開が期待される．

（3）正定値カーネルによって定まる無限次元指数分布族は，期待値伝搬法の解析に有用と考えられるが，本研究では，より一般に，カーネル法によるベイズ推論を行う方法に関して検討した．

ベイズ推論の基礎はベイズ則

$$p(x|y) = \frac{p(y|x)\pi(x)}{p(y)}$$

であるが，分母の $p(y) = \int p(y|x)\pi(x)dx$ の計算に必要となる積分は，限られた場合にしか陽に計算できないため，数値積分やサンプリングなどの方法による近似計算が非常に重要な課題として研究されてきた．

本研究では，カーネル法に基づいて，行列計算によるベイズ事後確率の表現を得る「カーネルベイズ則」を開発し，その理論解析と実データへの応用による検証を行った．

カーネルベイズ則は，代表者らが中心になって研究を進めてきたカーネル平均による確率分布の表現に基礎を置いている．空間 Ω 上で，確率分布 P に従う確率変数 X と，Ω 上の正定値カーネル k が与えられたとき，X のカーネル平均を

$$m_X := E[k(\cdot, X)]$$

により定義する．i.i.d.サンプル $X_1, \ldots, X_n$が与えられた時，推定量は

$$\widehat{m}_X = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} k(\cdot, X_i)$$

により定義される．カーネル k としてガウスカーネルなどを用いると，カーネル平均が確率分布を一意に定めることが知られており，確率分布に関する推論問題を解くために，カーネル平均に関する推論を行う方法論が発展してきた（文献⑤参照）．

いま，事前確率のカーネル平均による表現が $\widehat{m}_\pi = \sum_j^\ell \gamma_j k(\cdot, U_j)$で与えられており，条件付き確率 $p(y|x)$を与える同時分布 P_{XY}に従う i.i.d.サンプル$(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$があるとき，観測値 $Y = y_0$が与えられたときの事後確率 $p(X|Y = y_0)$ のカーネル平均が

$$\widehat{m}_{X|Y=y_0} = \sum_{i=1}^{n} w_i(y_0) k(\cdot, X_i)$$

の形で与えられる．ここで，$w_i(y_0)$ はグラム行列$\left(k(X_i, X_j)\right), \left(k(Y_i, Y_j)\right), \left(k(X_i, U_j)\right)$および事前確率を表現する (γ_i) を用いて，行列計算によって求めることができる．したがって，カーネルベイズ則は，効率的な行列計算によるノンパラメトリックなベイズ推論法を与えている（図 2）．

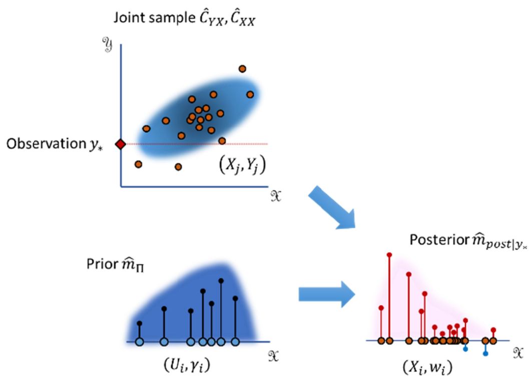

図 2. カーネルベイズ則のイメージ

基礎的な比較実験によって，カーネルベイズ則は，カーネル密度関数と importance weight を用いた既存のノンパラメトリック事後確率計算法と比べ，高次元の場合に良好な推定精度が得られることが示されている（図 3）．

また，データ数が無限に多くなる極限において，上記の推定量が真の事後分布のカーネル平均に収束する一致性や，その収束レート

の上界も理論的に明らかにした．

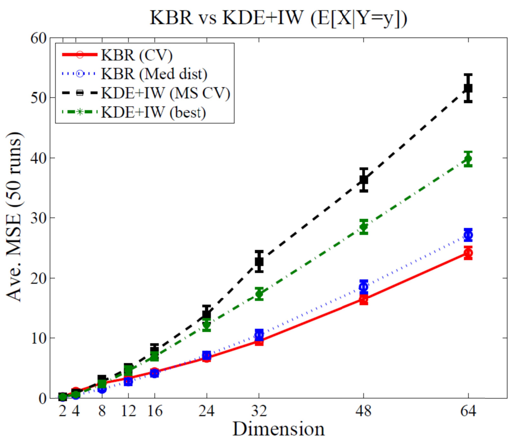

図 3．カーネルベイズ則と密度関数推定＋importance weight との精度比較

カーネルベイズ則は，パラメトリックなモデルを使わずに，データから変数間の関係を推定してベイズ推論を行う方法であるので，簡単なパラメトリックモデルを想定しづらい複雑な変数関係を有するベイズ推論の問題に有効である．本研究では，その例として，室内に固定されて向きを動かせるビデオカメラの画像から，カメラの向きを推定する問題に応用した．あらかじめ，カメラの向きと画像の組の正しいデータが収集されており，これを訓練データとして用いて，自由に向きを動かしながら撮像された画像データから，その向きを推定することを目的とする．この問題は，ノンパラメトリックな状態空間モデルとして定式化することが可能である．すなわち，時刻 t におけるカメラの向きを X_t，画像データを Y_t とし，向きの遷移則を $p(X_t|X_{t-1})$，向きから画像への条件付き確率を $p(Y_t|X_t)$ とするとき，その確率は状態空間モデル

$$p(X,Y) = p(X_0,Y_0)\prod_{t=1}^{T} p(Y_t|X_t)q(X_t|X_{t-1})$$

により与えられる（図４）．ここで，カメラの向きから画像への条件付き確率は，室内の状況に依存するため簡単なモデル化を行うことが非常に困難であり，データから推定を行うほうが有効と考えられる．したがってカーネルベイズ則の適用が有望である．

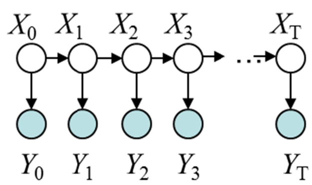

図 4．状態空間モデル

この問題を，カーネルベイズ則（KBR）と，既存技術である線形ガウスモデルによる Kalman フィルタによって推定した結果を表１に示す．

noise	KBR (Trace)	Kalman filter(Q)
$\sigma^2 = 10^{-4}$	0.15±< 0.01	0.56 ± 0.02
$\sigma^2 = 10^{-3}$	0.21±0.01	0.54 ± 0.02

表 1．KBR と Kalman フィルタとの推定誤差の比較（2 乗誤差の平均）

σ^2 は画像に加えたガウスノイズのレベルである．カーネルベイズ則では向きの表現を回転群により表し，行列に対するカーネル $k(A,B) = \mathrm{Trace}[AB^{-1}]$を用いた．カルマンフィルタでは，向きのベクトル表現として標準的な四元数表示を用いた．表１からわかるように，カーネルベイズ則を用いたフィルタは，問題の非線形性を効果的に推定しており，より高い推定精度を示している．

カーネルベイズ則は，汎用的で柔軟な，計算効率の高いベイズ推論法となっており，新しい技術として注目をされている．代表者の福水はこの研究テーマに関して，Asian Conference on Machine Learning や IMS Asia-Pacific Rim Meeting をはじめとして，多くの国際学会などで招待講演を行っている．

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計２９件）

① Y. Watanabe and <u>K. Fukumizu</u>. Graph Zeta function in the Bethe free energy in and loopy belief propagation. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 22. 2017-2025, 2010. 査読有

② Y. Watanabe and <u>K. Fukumizu</u>. New graph polynomials form the Bethe approximation of the Ising partition function. *Combinatorics, Probability and Computing*, 20, 299-320, 2010. 査読有

③ B. K. Sriperumbudur, B.K., <u>K. Fukumizu</u>, and G.R.G. Lanckriet, G.R.G. Universality, Characteristic Kernels and RKHS Embedding of Measures. *Journal of Machine Learning Research* 12, 2389-2410, 2011. 査読有

④ M. Yasuda, <u>Y. Kabashima</u>, Y. and K. Tanaka. Replica Plefka expansion of Ising systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P04002, 2 012. 査読有

⑤ L. Song, <u>K. Fukumizu</u>, and A. Gretton. Kernel embeddings of conditional

distributions. *IEEE Signal Processing Magazine* 30, 98-111, 2013. 査読有

⑥ R. Matsushita and T. Tanaka. Low-rank matrix reconstruction and clustering via approximate message passing. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 26, 917-925. 2014. 査読有

⑦ K. Fukumizu, L. Song, and A. Gretton. Kernel Bayes' Rule: Bayesian inference with positive definite kernels. *Journal of Machine Learning Research* 14, 3753-3783, 2013. 査読有

⑧ J. Manton, D. Applebaum, S. Ikeda, and N.I. Bihan. Introduction to the issue on differential geometry in signal processing. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing* 7(4) 573-575, 2013 査読無.

〔学会発表〕（計２２件）

① K. Fukumizu. Statistical Inference with Reproducing Kernels. The 8th international ISAAC Congress. 2011 年８月. 招待講演

② Watanabe, Y. and Fukumizu, K. Graph Zeta Function and Loopy Belief Propagation. 2011 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications. 2011 年 9 月. 招待講演

③ K. Fukumizu. Kernel Method for Bayesian Inference. The 2nd Asian Conference on Machine Learning, 2010 年 11 月. 招待講演

④ K. Fukumizu. Statistical Methods with Positive Definite Kernels. The 2nd IMS Asia-Pacific Rim Meeting. 2012 年 7 月. 招待講演

⑤ K. Fukumizu. Regularization in kernel method for Bayesian inference. Applied Inverse Problem Conference. 2013 年 7 月. 招待講演

〔図書〕（計　１件）

福水健次「カーネル法入門　―正定値カーネルによるデータ解析―」朝倉書店．2010

〔産業財産権〕

○出願状況（計　０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計　０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ：
http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/

６．研究組織

(1)研究代表者

福水　健次（FUKUMIZU, Kenji）
統計数理研究所・数理・推論研究系・教授
研究者番号：６０３１１３６２

(2)研究分担者

田中　利幸（TANAKA, Toshiyuki）
京都大学・情報学研究科・教授
研究者番号：　１０２５４１５３

池田　思朗（IKEDA, Shiro）
統計数理研究所・数理・推論研究系・准教授
研究者番号：６０３３６１０１

樺島　祥之（KABASHIMA, Yoshiyuki）
東京工業大学・総合理工学研究科・教授
研究者番号：８０２６０６５２

(3)連携研究者

(　　　)

研究者番号：