

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 5月28日現在

機関番号：33910

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2010～2012

課題番号：22500212

研究課題名（和文） 探索空間の特異領域を意識した特異モデル探索法

 研究課題名（英文） Search Method for a Singular Model Taking into Account
Singular Regions in a Search Space

研究代表者

中野 良平（NAKANO RYOHEI）

中部大学・工学部・教授

研究者番号：90324467

研究成果の概要（和文）：多層パーセプトロンの探索領域の特異領域を可約性写像を用いながら積極的に利用する探索法（SSF法）を提案し、隠れユニット数に相応しい品質の解を次々と求めることができることを計算機実験で示した。また、フラットな特異領域を進む能力を持つ固有ベクトル降下法を提案し、優秀な求解性能を実験で示した。さらに、同様の枠組みが複素多層パーセプトロンにも応用できて、非有界性と周期性を持つ解を求めるのに有効であることを示す初期成果を得た。

研究成果の概要（英文）：We proposed a new learning method called SSF for multilayer perceptron (MLP), which makes good use of singular regions to stably and successfully find excellent solutions commensurate with the number of hidden units. SSF worked well in our experiments using artificial and real data sets. We also proposed another learning method for MLP which utilizes eigen vector descent, and showed that it moved through flat singular regions to find excellent solutions. Moreover, we got very promising preliminary results that our SSF framework can be applied to learning of complex-valued MLP to find unbounded or periodic solutions.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	600,000	180,000	780,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
2012年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	1,600,000	480,000	2,080,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学、感性情報学・ソフトコンピューティング

キーワード：機械学習、特異モデル、探索法、特異領域

1. 研究開始当初の背景

(1) 多層パーセプトロン、RBF、混合正規分布、隠れマルコフモデル、ベイジアンネット、確率的文脈自由文法などよく知られた統計的学習モデルの多くは、フィッシャー情報行列が縮退するため通常の統計手法が適用できない特異モデルである。1990年代前半に

多層パーセプトロンの特異性が指摘されて以来、主に日本において特異モデルの研究が精力的に行われ、Watanabeらによりその数学的基礎が確立されてきた。例えば以下。
S. Watanabe: Algebraic geometry and statistical learning theory, Cambridge Univ. Press, 2009.

(2) 特異モデルの多くは、すでに幅広く工学の諸分野に応用されており、応用事例毎に最適な特異モデルを得るためには、探索法を用いて探索空間を探索する必要がある。特異モデルの探索空間には、探索を停滞させるフラットな特異領域が存在する。特異領域は計算温度が高い状態の解領域に対応していて、生物学の幹細胞（未分化な状態の細胞）に似ており、特異領域から任意の最適解へ分化すると考えられる。

(3) 特異領域は探索法を停滞させるため、従来は、特異領域を回避または解消する方法が模索されてきた。しかし、完全に回避することは難しく、たとえ回避できたとしても、その先において良質の解を得る保証はない。また、特異領域を解消する方法についても、実際の特異モデルにおいて有効な結果は得られていない状況にある。

2. 研究の目的

本研究の目的は、代表的な特異モデルである多層パーセプトロン、混合正規分布、確率的文脈自由文法を対象に、特異モデルの探索において、特異領域は大きな可能性を秘めるので、特異領域を初期点として利用したり、特異領域から脱出したり、計算温度やエントロピーを用いて探索空間を変形したりして、特異領域を意識した探索法を研究することにより、特異モデルの探索に関する技術課題を克服することにある。

具体的には、多層パーセプトロン、混合正規分布、確率的文脈自由文法を対象に以下を研究の目的とする。

- (1) 多層パーセプトロンの学習問題では、探索空間が多峰であり、得られる解は初期点依存で頼りないので、特異領域を活用して良解を安定して得る探索法を確立する。
- (2) 混合正規分布推定では、特異点を初期点として優れた探索法を確立する。
- (3) 確率的文脈自由文法推定は、トイプロブレムしか解けない現状探索技術をブレークスルーする。

3. 研究の方法

多層パーセプトロン、混合正規分布、確率的文脈自由文法を対象に以下の手順で研究を進める。ただし、3種の特異モデルを用いた研究は互いに独立しており、一部が不成功または未実施でも他の研究を進めることができる。

(1) 探索空間の形状調査と分析

良い探索法を考案するには、探索対象の地形を知る必要がある。そこで、特異モデルの探索空間の形状を計算機実験により調査す

る。多層パーセプトロンや混合正規分布の探索空間には特異領域が多数存在するので、探索法を走らせて、勾配やヘッセ行列の固有値を求めることにより形状分析する。

(2) 特異点を初期点とする探索法

特異モデルの探索では、特異点（特異領域の一点）を積極的に利用する探索法の可能性を模索する。実際、確定的アニーリング EM (DAEM) 法の初期点は、原始初期点と呼ぶ特異点であり、原始初期点は混合正規分布推定を EM アルゴリズムで探索する際の初期点として有力であることがわかってきている。多層パーセプトロンの学習でも、隠れユニット数が一つ少ないモデルの最適解と等価な出力を出す探索空間の一部は特異領域であり、そこを初期点とする探索法は有力であるので、その可能性を模索する。

(3) 特異領域からの脱出法

探索空間に点在する特異領域は勾配がゼロとなるフラットな形状であるため勾配を利用する探索法は停滞する。そこで、勾配がゼロであっても探索を進めることができる探索法の考案を目指す。本研究項目は多層パーセプトロンを対象に行う。

(4) 探索空間を変形する探索法

計算温度を導入して、高温から低温に向けて変化させることにより、探索空間を変形させて良質の解を求める探索法を模索する。このアイデアは、すでに混合正規分布推定において、確定的アニーリング法において実現されているが、多層パーセプトロンへの導入を検討する。

4. 研究成果

(1) 混合正規分布推定の解空間は多峰であるため、通常の探索法 (EM アルゴリズム) では初期点に依存した局所解しか得られない。この局所最適性を克服するため、高温における解 (原始初期点と呼ぶ、特異点である) を初期点とする確定的アニーリング (DA) が導入された。解品質をさらに改良するため、原始初期点を初期点として、DA の代わりに変分ベイズ (VB) 法を用いた方法を考案し、数値実験により解品質が一層改善されることを確認した (雑誌論文④)。

(2) 多層パーセプトロンの学習において、特異領域は探索停滞を招くため、通常は回避することを考えるが、本研究では、特異領域を積極的に利用しつつ、隠れユニット数を増やしてゆき、与えられた隠れユニット数にふさわしい良質の解に到達する特異階段追跡法 (SSF: Singularity Stairs Following) の基本アルゴリズムを考案し、具体的な実現ア

ルゴリズムを順次提案した。具体的には、可約性写像 γ を利用した SSF1.0 (学会発表⑨、⑩)、可約性写像 γ に $\alpha \beta$ を加えた SSF1.1 (図書①)、さらに固有値降下法と初期点の数を大幅に削減した SSF1.2 (雑誌論文③) を順次提案し、数値実験により、版を重ねる毎に、処理時間の短縮と所期の解品質を検証した。一連の研究は、学会発表⑨の後、主催者から、継続研究投稿の依頼があり、研究を進めて、版の改良を進めた次第である。その後、さらに高速化を実現するため、多くの探索経路が合流して同じ解に到達することに着目し、探索の枝刈りの概念を導入して、SSF1.3 を考案し計算機実験を進めている (学会発表①)。

(3) 多層パーセプトロンの探索空間は、ヘッセ行列を使って調べてみると、条件数が巨大なクレバス形状に満ちていることがわかった。そのようなクレバスに入ると、通常の探索法は進むことができず、トラップされてしまう。そこで、ヘッセ行列の固有ベクトルを探索方向として利用する固有ベクトル降下法 (EVD: Eigen Vector Descent) を考案し、シグモイド型、多項式型の多層パーセプトロンにおいて、人工データや実データを用いて実験したところ、クレバスに入ってもトラップされず、そこを脱出して、最適解に到達できることがわかった (学会発表⑥、⑧)。なお、学会発表⑥は、ICAIA2012 の Best Student Paper Award を受賞した。

(4) 入出力や重みが複素数となる複素多層パーセプトロン (複素 MLP) は、実 MLP にはない周期性や非有界性という魅力的な表現能力を持つ。複素 MLP の探索空間も実 MLP と同様に、条件数が巨大なクレバス形状に満ちており、通常の探索法では良解が得られない。そこで、Wirtinger 微分を用いて複素 MLP のヘッセ行列を求め、可約性写像と逐次型の固有ベクトル降下を用いた新探索法を考案し、従来法では得られない良解が得られることを計算機実験によって確認した (学会発表⑤、⑦、⑩)。その後、実 MLP の高速探索法である BFGS 法を複素 MLP に適用する理論研究を進め、それを実装し、有効性を計算機実験にて確認した (雑誌論文①、学会発表④)。

(5) 上記で開発した SSF を多層パーセプトロンモデル選択に適用する研究を進めた。多層パーセプトロンのモデル選択には、これまで多数の選択基準が提案された。AIC や BIC のように最尤推定値だけを用いるものや WAIC や DIC のようにサンプリング法を用いるものがあるが、いずれにおいても、隠れユニット数の増加に対する解品質の単調性が保証されないと判定結果が信頼できない。従来の独立ラン法ではそれが保証されないが、SSF を

用いればそれが保証される利点がある。SSF を用いて、各種基準を比較評価して、様々な知見を得た (学会発表②)。

(6) 文脈自由文法的一种である L システム (特に、最もシンプルな確定的文脈自由 L システム) を対象に、整数論を用いて、一つの文から文法を発見する LGIN 法 (L-system Grammar Induction based on Number theory) を考案し、6 種の植物モデルを用いた数値実験により、その実現性と処理負荷の軽さを検証した (学会発表⑫)。また、数法則発見において、名義区分線形モデル回帰法の有効性を検証した (学会発表⑬)。次に、L システムで生成された文に変異を加えて得られる変異有り文から元の L システム文法を発見する方法として、枚挙法に基づく LGIC 法 (L-system Grammar Induction with error Correction) を考案し、削除型と追加型の変異を対象に計算機実験を行い、削除型では約 20% まで、追加型では 6% までであれば復元できることを確認した (雑誌論文②、学会発表③)。なお、学会発表③は、ICMLDA2012 の Best Paper Award を受賞した。その後、主催者から継続研究投稿の依頼があり、研究を進めて、雑誌論文②を投稿した次第である。

(7) 今後の展望

- SSF の一層の高速化
- 複素 SSF の開発と応用
- SSF を用いた MLP モデル選択
- 誤り訂正付き L システム文法発見

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 4 件)

- ① 鈴村真矢、中野良平、複素 BFGS 法を用いた複素ニューラルネットワークの学習法、電子情報通信学会論文誌、査読有、Vol.J96-D、No.3、pp.423-431、2013
- ② R. Nakano、Error correction of enumerative induction of deterministic context-free L-system grammar、査読有、IAENG International Journal of Computer Science、Vol. 40、No. 1、pp.47-52、2013
- ③ S. Satoh、R. Nakano、Fast and stable learning utilizing singular regions of multilayer perceptron、Neural Processing Letters、査読有、doi: 10.1007/s11063-013-9283-z、pp.1-17、2013
- ④ Y. Ishikawa、I. Takeuchi、R. Nakano、Multi-directional search from the primitive initial point for Gaussian

mixture estimation using variational Bayes method, Neural Networks, 査読有、Vol.23、No.3、pp.356--364、2010

[学会発表] (計13件)

- ① 佐藤聖也、中野良平、特異領域を活用した多層パーセプトロン探索法、電子情報通信学会技術研究報告ニューロコンピューティング研究会、2013年1月24日、北海道大学
- ② 大脇高之、中野良平、特異階段追跡法を用いたサンプリング法による多層パーセプトロンモデル選択、電子情報通信学会技術研究報告ニューロコンピューティング研究会、2013年1月24日、北海道大学
- ③ R. Nakano、S. Suzumura、Grammatical induction with error correction for deterministic context-free L-systems、International Conference on Machine Learning and Data Analysis (ICMLDA) 2012、査読有、Oct. 24--26、2012、Berkeley、USA
- ④ 鈴木真矢、中野良平、BFGS法と可約性写像を用いた複素多層パーセプトロン探索法、計測自動制御学会第2回コンピューターショナル・インテリジェンス研究会、2012年9月28日、岡山大学
- ⑤ S. Suzumura、R. Nakano、Complex-valued multilayer perceptron search utilizing eigen vector descent and reducibility mapping、International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) 2012、査読有、Sep. 11--14、2012、Lausanne、Switzerland
- ⑥ S. Satoh、R. Nakano、Eigen vector descent and line search for multilayer perceptron、International Conference on Artificial Intelligence and Applications (ICAIA) 2012、査読有、March 14--16、2012、Hong Kong
- ⑦ 鈴木真矢、中野良平、固有ベクトル降下法と可約性写像を用いた複素多層パーセプトロン探索法、電子情報通信学会技術研究報告ニューロコンピューティング研究会、2011年12月20日、名古屋工業大学
- ⑧ 佐藤聖也、中野良平、多層パーセプトロンにおける固有ベクトル降下法と直線探索、電子情報通信学会技術研究報告ニューロコンピューティング研究会、2011年12月20日、名古屋工業大学
- ⑨ R. Nakano、S. Satoh、T. Ohwaki、Learning method utilizing singular region of multilayer perceptron、International Conference on Neural Computation Theory and Applications

(NCTA) 2011、査読有、Oct. 24--26、2011、Paris、France

- ⑩ 鈴木真矢、中野良平、複素多層パーセプトロンの探索空間と探索法、計測自動制御学会第1回コンピューターショナル・インテリジェンス研究会、2011年9月30日、京都工芸繊維大学
- ⑪ 佐藤聖也、大脇高之、中野良平、多層パーセプトロンの特異領域を利用した探索法、電子情報通信学会技術研究報告ニューロコンピューティング研究会、2010年12月19日、名古屋大学
- ⑫ R. Nakano、N. Yamada、Number theory-based induction of deterministic context-free L-system grammar、the 2nd International Joint Conference on Knowledge Discovery, Knowledge Eng. & Knowledge Management (IC3K) 2010、査読有、Oct. 25--28、2010、Valencia、Spain
- ⑬ Y. Tanahashi、R. Nakano、K. Saito、Nominally conditioned linear regression、International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN) 2010、査読有、Sep. 15--18、2010、Thessaloniki、Greece

[図書] (計1件)

- ① S. Satoh、R. Nakano、Studies in Computational Intelligence 465、Springer、362ページ、2013

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.nipl.cs.chubu.ac.jp/~nakano/index-j.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中野 良平 (NAKANO RYOHEI)
中部大学・工学部・教授
研究者番号：90324467

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし