

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 6 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22700230

研究課題名(和文)階層的な確率モデルにおけるベイズ学習の汎用的利用法の確立

研究課題名(英文)General-purpose use of Bayesian learning for hierarchical probabilistic models

研究代表者

永田 賢二(Nagata, Kenji)

東京大学・新領域創成科学研究科・助教

研究者番号：10556062

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,400,000円、(間接経費) 720,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、ニューラルネットワークや隠れマルコフモデルなどの階層モデルに対して、ベイズ学習の汎用的な利用を目的とする。交換モンテカルロ法によるベイズ学習を取り扱い、工学的なインプリメントとして、交換モンテカルロ法の並列化を行うことにより、ベイズ学習の大幅な高速化による効率面の大幅な改善を目指す。また、交換モンテカルロ法の最適設計の構築や、動径基底関数ネットワークによるスペクトル分解に適用する。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this project is to establish a general-purpose use of Bayesian learning for hierarchical probabilistic model such as a neural network and a hidden Markov model. We use an exchange Monte Carlo method for performing Bayesian learning efficiently, and significantly improve the computational cost by parallelizing the exchange Monte Carlo method. Moreover, we construct an optimal design of the exchange Monte Carlo method and apply the proposed method to the spectral deconvolution for the radial basis function networks.

研究分野：機械学習

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 ベイズ学習 交換モンテカルロ法 メトロポリス法 スペクトル分解

1. 研究開始当初の背景

近年、大量の高次元データから有用な情報を引き出す技術であるデータマイニングや、その基礎を与える統計的機械学習は、情報科学のみならず、地球惑星科学や生命科学などで注目を浴びている分野である。これらの分野で得られた技術が広く社会に用いられるために取り組む課題として、学習の「精度」と「効率」の両面において優れた学習アルゴリズムの開発が重要である。

学習精度の観点では、統計的学習理論という分野において、さまざまな学習アルゴリズムの性質やその学習の精度を解明するための理論研究が精力的に行われている。その結果の一つとして、ニューラルネットワークや混合分布モデル、隠れマルコフモデルなどの階層的な構造をもつ確率的な学習モデルでは、学習アルゴリズムとして、ベイズ学習は最尤推定法に比べ、未知データについての予測の性能が優れていることが、理論的に明らかにされている。

一方で、ベイズ学習は、計算機実装の難しさも指摘されている。ベイズ学習では、モデルパラメータも確率変数とみなし、パラメータについての事後確率分布による期待値計算により、推定を行う手法である。ベイズ学習の枠組みを利用すると、観測データからは直接決定することができない隠れ変数の個数なども、確率変数とみなすことで原理的に推定することが可能であるといった利点も兼ね備えている。しかしながら、ほとんどの学習モデルの場合で、事後分布による期待値計算を解析的に実行することが困難であるといった問題もあり、実装するうえで、様々な近似手法が利用されている。

2. 研究の目的

本研究では、ニューラルネットワークや隠れマルコフモデルなどの階層モデルに対して、学習精度の優れたアルゴリズムとしてベイズ学習を考え、ベイズ学習の汎用的な利用を目的とする。その実現法として、交換モンテカルロ法によるベイズ学習の近似手法を取り扱い、工学的なインプリメントとして、交換モンテカルロ法の並列化を行うことにより、ベイズ学習の大幅な高速化による効率面の大幅な改善を目指す。また、得られたシステムをもとに、交換モンテカルロ法の最適設計の構築や、実データへの応用として、動径基底関数ネットワークによるスペクトル分解問題に適用する。

3. 研究の方法

階層モデルにおけるベイズ学習の性質の解明の手法として、近年、代数幾何学的手法が確立されてきた。また、その手法を用いることで、研究代表者である永田は、先行研究において、交換モンテカルロ法の平均交換率の解明を行った。本研究の目的である、ベ

イズ学習の汎用的アルゴリズムの開発を、代数幾何学的手法に基づき行う。これは、国内外でも未だに行われていない最先端の研究アプローチである。

4. 研究成果

本研究課題では、主に、以下の2つの課題を行った。その成果をそれぞれ簡潔に述べる。

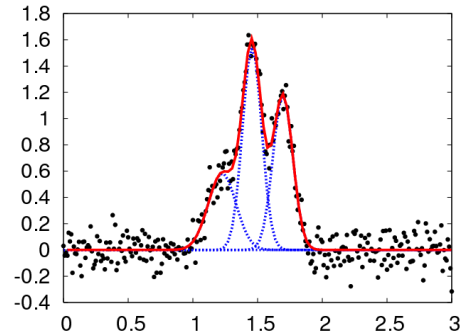


図1：スペクトル分解の一例

(1) 動径基底関数ネットワークによるスペクトル分解の開発

図1のような複数のピークを持つスペクトルデータをガウス関数などの単一のピークを持つスペクトルの線形和に分解することは、物理的観測量から対象物の定性・定量あるいは物性を調べる分光学において重要である。この問題はスペクトル分解と呼ばれ、物性物理学・生命科学・惑星科学など、多様な分野で必須の課題である。

スペクトル分解において、ピークの個数をどのように決定するかという問題は、どの分野でも共通の課題である。ピークが少ないと、データを再現することができないため適切でない。また、ピークが多すぎると、ノイズにまでフィットさせてしまい、余分なピークまで使うため適切でない。このように、ピークの個数にはトレードオフがあり、最適なピークを決定することは重要である。

スペクトル分解は、三層ニューラルネットワークの一つである動径基底関数(RBF)ネットワークの学習と等価であり、スペクトル分解におけるピークの個数の決定は、RBFネットワークにおけるモデル選択問題として位置づけられる。この着眼に基づき、本研究では、スペクトル分解におけるベイズ理論を構築し、ベイズ推定により、ピークの個数を推定する枠組みを構築した。アルゴリズムとして、交換モンテカルロ法を利用することで、パラメータ最適化の際に生じる局所最適解へのトラップの問題、および、モデル選択指標に用いる自由エネルギーの計算困難性の二つの問題を同時に解決するアルゴリズムが開発できた。

先述したように、スペクトル分解は、幅広い分光学において重要な課題である。そのため、本研究課題では、様々な自然科学の実

験・計測研究者との共同研究により、開発したスペクトル分解のアルゴリズムの適用を行い、有効性を幅広く示すことができた。

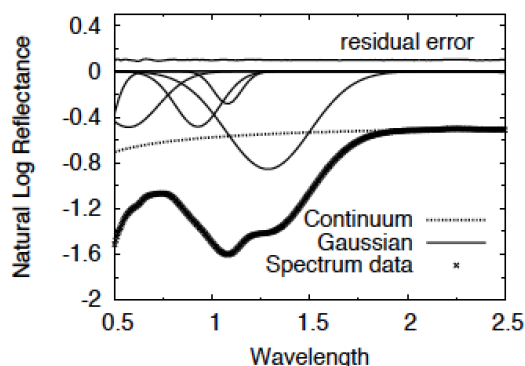


図2：惑星科学におけるスペクトル分解

惑星科学の分野では、地球型惑星のマントルの大部分を構成するケイ酸塩鉱物であるカンラン石(Olivine)の近赤外反射スペクトルのデータに適用し、複雑な複合吸収帯のスペクトル分解を行った。その結果、図3に示すような結果が得られ、モデル選択により決定されたピークの個数は、惑星科学の専門家が様々な関連情報を参考にしながら総合的に得た結論と同じ結果となり、また分離したスペクトル関数についてもまったく同じ結果が得られた。

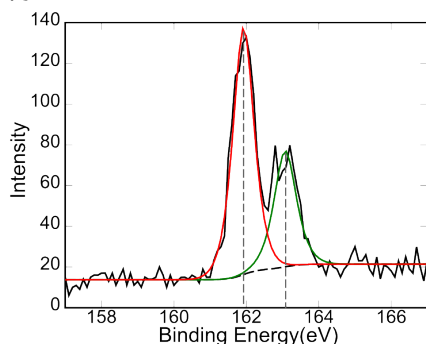


図3：二硫化モリブデンのスペクトル分解

物性物理学では、X線光電子分光法(X-ray photoelectron spectroscopy, XPS)のスペクトル分解を行った。XPSの標準試料として用いられている二硫化モリブデン(MoS_2)のスペクトルを対象として用いた。このピークは、分光学的解析上、ピークの個数が2つであり、ピーク位置などのパラメータも理論的に明らかにされている。本研究では、このスペクトルデータに開発したモデル選択アルゴリズムを適用し、図3に示すように、分光学的理論で得られた結果と一致した結果をデータのみから抽出することに成功した。

また、様々なノイズレベルのデータにも同様の解析を行い、ピークパラメータが正確に抽出できる限界のノイズレベルをデータから明らかにすることに成功した。XPS測定の場合、観測時間を長くしたり、用いるX線源を強力にすることで、ノイズレベルを下げる

ことができる。また、物質のダイナミクスを調べる為の時間分解XPSにおける、最小限の測定時間を見積もる手法に応用することが可能となった。

これらの成果により、自然科学における幅広い分野で、提案したアルゴリズムは注目されるようになった。平成25年7月より発足された新学術領域研究「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」では、自然科学の幅広い分野における実験・計測データから背後にある情報を抽出する普遍的な方法の一つとして、本アルゴリズムが着目され、当該領域のホームページを介して、幅広くオープンソースとして普及していく予定である。

(2) モンテカルロ法と学習係数の関係に基づくアルゴリズム開発

モンテカルロ法に基づくアルゴリズムは、確率的な更新に基づくため、収束の判定が難しく、また、計算量が膨大になりがちである。そのため、効率のよいアルゴリズムを目指す為に、交換モンテカルロ法における温度パラメータの設計などの指針を与えることは重要な課題である。

研究代表者である永田は、先行研究において、交換モンテカルロ法における平均交換率の漸近挙動を理論的に明らかにすることに成功しており、これは、温度パラメータの設計指針を与える重要な結果である。

本研究課題では、上記理論解析で用いた代数幾何学的なアプローチを応用することで、マルコフ連鎖モンテカルロ法の一つであるメトロポリス法における平均採択率を導出することに成功した。これにより、メトロポリス法における更新の際のステップサイズというパラメータの設計指針を与えることに成功した。メトロポリス法は、交換モンテカルロ法の内部ルーチンで必要となるアルゴリズムであるため、交換モンテカルロ法にも良い影響をあたえる。

また、上記二つの解析結果から、交換モンテカルロ法における平均採択率やメトロポリス法の平均交換率は、ベイズ学習における未知データの予測精度を表す学習係数と呼ばれる定数との関係が明らかになった。この学習係数は、モデルやデータにより一意に定まる量であり、ベイズ学習の性質を明らかにする上で重要な定数であるにも関わらず、導出には、代数幾何学における特異点解消を用いる必要があり、系統的に導出することが困難であった。そこで本研究課題では、平均交換率や平均採択率と学習係数との関係性に着目し、交換モンテカルロ法の挙動を調べることで、学習係数を導出する新たなアルゴリズムを開発し、RBFネットワークの学習で開発したアルゴリズムを適用し、その有効性を明らかにした。

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11件)

- (1) Yosuke Otsubo, Jun-ichi Inoue, Kenji Nagata and Masato Okada, "Code-division multiple-access multiuser demodulator by using quantum fluctuations," to be published in Physical Review E, 査読あり, 2014.
- (2) Yoshinori Nakanishi-Ohno, Kenji Nagata, Hayaru Shouno and Masato Okada, "Distribution estimation of hyperparameters in Markov random field models," Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 47, pp.045001-1-045001-14, 査読あり, 2014.
- (3) Shimpei Yotsukura, Toshiaki Omori, Kenji Nagata and Masato Okada, "Sparse Estimation of Spike-Triggered Average," IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Application, Vol. 7, pp. 15-21, 査読あり, 2014.
- (4) Tatsu Kuwatani, Kenji Nagata, Masato Okada and Mitsuhiro Toriumi, "Markov random field modeling for mapping geofluid distributions from seismic velocity structures," Earth, Planets and Space, Vol. 66, pp.5-1-5-9, 査読あり, 2014.
- (5) Satoru Tokuda, Kenji Nagata and Masato Okada, "A numerical analysis of learning coefficient in radial basis function network," IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Application, Vol. 6, pp.117-123, 査読あり, 2013.
- (6) Yosuke Otsubo, Jun-ichi Inoue, Kenji Nagata and Masato Okada, "Effect of quantum fluctuation in error-correcting codes," Physical Review E, Vol.86, pp.051138-1-051138-10, 査読あり, 2012.
- (7) Yoshinori Ohno, Kenji Nagata, Tatsu Kuwatani, Hayaru Shouno and Masato Okada, "Deterministic algorithm for nonlinear Markov random field model," Journal of the Physical Society of Japan, Vol.81, pp.064006-1-064006-10, 査読あり, 2012.
- (8) Kenji Nagata, Seiji Sugita and Masato Okada, "Bayesian spectral deconvolution with the exchange Monte Carlo method," Neural Networks, Vol.28, pp.82-89, 査読あり, 2012.
- (9) Tatsu Kuwatani, Kenji Nagata, Masato Okada and Mitsuhiro Toriumi, "Precise estimation of pressure-temperature paths from zoned minerals using markov random field modeling: theory and synthetic inversion," Contributions to Mineralogy and Petrology, Vol.163, pp.547-562, 査読あり, 2012.
- (10) Yosuke Otsubo, Kenji Nagata, Masafumi Oizumi and Masato Okada, "Influence of synaptic depression on memory storage capacity," Journal of the Physical Society of Japan, Vol.28, pp.084004-1-084004-11, 査読あり, 2011.
- (11) Yosuke Otsubo, Kenji Nagata, Masafumi Oizumi and Masato Okada, "Instabilities in associative memory model with synaptic depression and switching phenomena among attractors," Journal of the Physical Society of Japan, Vol.79, pp.084002-1-084002-9, 査読あり, 2010.

[学会発表](計26件)

- (1) 徳田悟, 永田賢二, 渡辺澄夫, 岡田真人. 交換モンテカルロ法を用いた情報量規準 WBIC の計算機実験による検証, 電子情報通信学会技術報告, NC2013-109, 2014年3月18日, 玉川大学, 東京.
- (2) 永田賢二, 村岡怜, 佐々木岳彦, 岡田真人. ベイズ推定に基づくスペクトル分解と必要最小計測時間の推定について, 電子情報通信学会技術報告, NC2013-108, 2014年3月18日, 玉川大学, 東京.
- (3) 永田賢二. スペクトル分解と代数幾何, 新学術領域「疎性モデリング」公募説明会, 2013年10月3日, 統計数理研究所, 東京. (招待講演)
- (4) 永田賢二. スペクトル分解によるデータ駆動科学, 新学術領域 ELC/疎性モデリング合同シンポジウム, 2013年9月

- 20日,九州大学,福岡.(招待講演)
- (5) Kenji Nagata, "Learning Coefficient for Bayesian Learning and Markov Chain Monte Carlo Method," Frontier of Statistical Physics and Information Processing 2013, 2013年7月11日, Kyoto University, Kyoto.
- (6) 永田賢二, 北園淳, 永福智史, 田村了以, 岡田真人. MCMC法を利用した変数選択問題における解の効率的全数探索, 日本物理学会第68回年次大会, 2013年3月26日, 広島大学, 広島.
- (7) 大野義典, 永田賢二, 庄野逸, 岡田真人, マルコフ確率場モデルのハイパーパラメータ分布推定, 日本物理学会第68回年次大会, 2013年3月26日, 広島大学, 広島.
- (8) 徳田悟, 永田賢二, 岡田真人. 動径基底関数ネットワークにおける学習係数の数値解析, 日本物理学会第68回年次大会, 2013年3月26日, 広島大学, 広島.
- (9) Yosuke Otsubo, Jun-ichi Inoue, Kenji Nagata and Masato Okada, "The effect of quantum fluctuation in information processing," International Conference on the Diverse Applications of Statistical Physics, SINP, 2013年1月14日, Kolkata, India.
- (10) 徳田悟, 永田賢二, 岡田真人. 動径基底関数ネットワークにおける学習係数の数値的導出, 電子情報通信学会技術報告, NC2012-78, 2012年12月12日, 豊橋技術科学大学, 愛知.
- (11) 大野義典, 永田賢二, 庄野逸, 岡田真人. マルコフ確率場モデルにおけるハイパーパラメータの分布推定, 電子情報通信学会技術報告, NC2012-86, 2012年12月12日, 豊橋技術科学大学, 愛知.
- (12) Tatsu Kuwatani, Kenji Nagata, Masato Okada and Mitsuhiro Toriumi, "Application of Markov random field models for inversion problems in geosciences," American Geophysical Union, 2012 Fall Meeting, 2012年12月9日, San Francisco, USA.
- (13) Jun Kitazono, Kenji Nagata, Satoshi Eifuku, Ryo Tamura and Masato Okada, "Sparse modeling for face identification in monkey anterior temporal cortical areas," International Symposium on Face Perception and Recognition, 2012年11月1日, Okazaki Conference Center, Aichi.
- (14) 永田賢二. ベイズ推定によるスペクトル分解, 第一回東大新領域・KEK連携教育シンポジウム, 2012年9月11日, 高エネルギー加速器研究機構(KEK), 茨城.(招待講演)
- (15) Kenji Nagata, Sumio Watanabe and Masato Okada, "Analysis of acceptance rate for Metropolis algorithm and relationship between Bayesian learning," International Society on Bayesian Analysis 2012 World Meeting (ISBA2012), 2012年6月28日, 京都テルサ, 京都.
- (16) 桑谷立, 永田賢二, 岡田真人, 鳥海光弘. マルコフランダムフィールドモデルの地球科学における様々な応用, 日本地球惑星科学連合2012年大会, 2012年5月20日, 幕張メッセ, 千葉.
- (17) 大野義典, 永田賢二, 桑谷立, 庄野逸, 岡田真人. 非線形マルコフ確率場のハイパーパラメータ推定における決定論的アルゴリズム, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月27日, 関西学院大学, 兵庫.
- (18) 永田賢二, 村岡怜, 佐々木岳彦, 岡田真人. スペクトル分解のベイズ理論, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月27日, 関西学院大学, 兵庫.
- (19) 永田賢二, 岡田真人. メトロポリス法の平均採択率の解析とステップサイズの関係について, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月27日, 関西学院大学, 兵庫.
- (20) 永田賢二, 岡田真人. ベイズ推定における学習係数とメトロポリス法における平均採択率の関係, 電子情報通信学会技術報告, NC2011-111, 2012年1月27日, はこだて未来大学, 北海道.
- (21) 大野義典, 永田賢二, 庄野逸, 岡田真人. 非線形マルコフ確率場モデルにおけるハイパーパラメータ推定の決定論的アルゴリズム, 電子情報通信学会技術報告, 2011年11月24日, 東北大学, 仙台.
- (22) 永田賢二, 岡田真人. メトロポリス法

における平均採択率の挙動について,
第14回情報論的学習理論ワークショップ
(IBIS2011), 2011年11月10日, 奈良
女子大学, 奈良.

- (23) 桑谷立, 永田賢二, 岡田真人, 烏海光
弘. マルコフランダムフィールド(MRF)
モデルを用いた地震波速度構造からの
流体分布推定, 電子情報通信学会技術
報告, 2011年7月26日, 神戸大学, 兵
庫.
- (24) 村岡怜, 永田賢二, 佐々木岳彦, 岡田
真人. XPS データ解析へのベイズ推定の
応用, 第四回情報論的学習理論と機械
学習研究会(IBISML), 2011年3月29日,
大阪大学, 大阪.
- (25) Seiji Sugita, Kenji Nagata, Nobuko
Tsuboi, Takahiro Hiroi and Masato
Okada, "A New Modified Gaussian
Model (MGM) Using a Bayesian
Estimation Approach: Toward
Automated Analysis of Planetary
Spectra," 42nd Lunar and Planetary
Science Conference, 2011年3月7日,
Texas, USA.
- (26) 永田賢二, 杉田精司, 岡田真人. 交換
モンテカルロ法による反射スペクトル
における複合吸収帯の推定, 第一回情
報論的学習理論と機械学習(IBISML),
2010年6月15日, 東京大学, 東京.

〔その他〕

ホームページ等

<http://mns.k.u-tokyo.ac.jp/~nagata/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永田 賢二 (NAGATA, Kenji)

東京大学・大学院新領域創成科学研究科・助
教

研究者番号: 10556062