

平成30年6月26日現在

機関番号：82626

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2017

課題番号：25330283

研究課題名(和文) マルコフ連鎖モンテカルロ法の挙動に基づくベイズ推定におけるモデル選択手法の開発

研究課題名(英文) Development of model selection method for Bayesian estimation from behavior of Markov chain Monte Carlo method

研究代表者

永田 賢二 (Nagata, Kenji)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・情報・人間工学領域・主任研究員

研究者番号：10556062

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、MCMC法の挙動や緩和過程に基づいたベイズ推定の新たなモデル選択法の開発を行う。予想される結果として、MCMC法の設計指針が明らかになることが挙げられる。統計力学などで利用されるMCMC法は離散系であることが多く、本研究では連続系のアルゴリズムの挙動はより複雑であり、MCMC法の設計指針は幅広い分野への波及効果がある。また、階層的な確率モデルにおけるモデル選択手法を開発することは重要である。AICやBICに代表されるモデル選択規準は、漸近正規性を仮定し、階層モデルで使用するとバイアスが生じた結果が得られてしまう。汎用的に使えるモデル選択法の確立は非常に重要な課題である。

研究成果の概要(英文)：In this research, we develop a new model selection method for Bayesian estimation based on behavior and relaxation process of MCMC method. An expected result is that the design guidelines of the MCMC method are clarified. The MCMC method used in statistical mechanics and others is often discrete, and in this research the behavior of continuous algorithms is more complicated, and the design guidelines of MCMC method have a spillover effect on a wide range of fields. It is also important to develop a model selection method in a hierarchical probabilistic model. The model selection criteria typified by AIC and BIC assumes asymptotic normality, and when used in a hierarchical model, the result of bias is obtained. Establishing a general-purpose model selection method is a very important task.

研究分野：データ駆動科学

キーワード：マルコフ連鎖モンテカルロ法 ベイズ推定 モデル選択 スペクトル分解

## 1. 研究開始当初の背景

現在、インターネットを介した情報のやり取りが社会基盤の一部となっている。また、惑星科学や生命科学などの分野においても、観測に用いる顕微鏡や測定器の著しい発展により、性質が未解明な惑星や遺伝子などのデータを比較的容易に入手できるようになっている。これらの分野に共通することは、大量のデータが得られるという点であり、その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、近年注目を浴びるようになった学問分野である。

推定精度の高い学習機械を構築するために、統計的学習理論という分野で、さまざまな推定アルゴリズムの性質やその推定精度の解明に向けた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、ベイズ推定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。しかしながら、個別のモデルに対して、予測性能を表す汎化誤差やその主要項の係数である学習係数を明らかにするためには、高度な代数幾何学的手法を用いる必要があり、予測性能が明らかになっている学習モデルは限られている。

一方で、ベイズ推定を計算機上で実装する手法として、マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法がある。ベイズ推定では、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。この期待値計算は解析的に行うことが困難であり、上記に示した階層的な確率モデルでは、パラメータ空間上に特異構造があるため、事後分布の形状は複雑になってしまう。MCMC法では、こうした分布の形状によらず系統的に期待値計算を行うために、所望の確率分布からのサンプリングを行う。MCMC法によるベイズ推定は、モデルやそのパラメータ設定によらず、普遍的に用いることができる手法である。

上記の背景を元に、申請者は、ベイズ推定を効率的に行うことを目的として、レブ

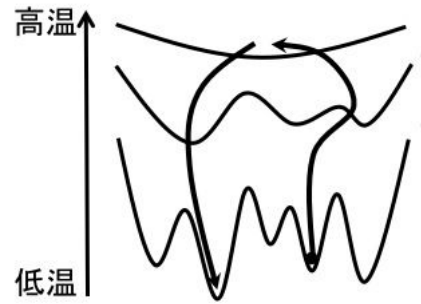


図1：REMC法の概念図

リカ交換モンテカルロ(REMC)法によるベイズ推定についての研究を行ってきた。REMC法では、図1のように、確率分布に温度パラメータを導入し、複数の温度から並列にサンプリングすることを行う。高温から徐々に温度を下げる焼きなまし法を模倣するだけでなく、詳細釣り合い条件を満たすように温度を上げ下げすることで、現実的な時間で確率分布からのサンプリングを実現することができる。

交換モンテカルロ法の高効率化を考える上で、温度パラメータの設定が重要である。温度パラメータが少なすぎると、隣り合った温度間での交換頻度が激減し、多くしすぎると、それぞれの温度上でのサンプリング時間が膨大になってしまう。この問題に対し、申請者は、二つの確率分布間での平均的な交換の頻度(平均交換率)に着目し、低温極限のもとで平均交換率の漸近形を解析的に求めることに成功した。これにより、温度パラメータを指数的に設定することが最適であるという、REMC法の設計指針を与えることに成功した。さらに、平均交換率がベイズ推定の予測精度を支配する学習係数に深く関係していることを明らかにした。これは、REMCの挙動がベイズ推定における予測精度の解明や新たなモデル選択規準を与える可能性を強く示唆する。

## 2. 研究の目的

以上の研究背景から、MCMC法の挙動や緩和過程と、ベイズ推定における予測精度は、深い関係があることが示唆される。本研究では、MCMC法の挙動や緩和過程に基づいたベイズ推定の新たなモデル選択法の開発を行う。

予想される結果として、MCMC法の設

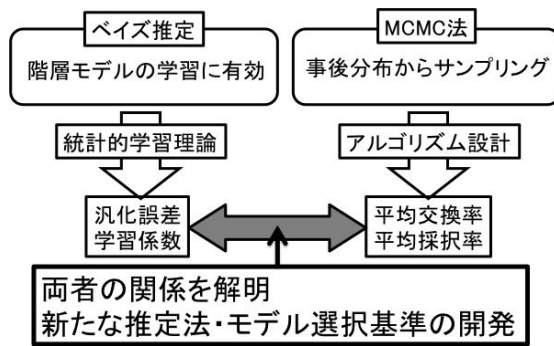


図 2：本研究課題の目的

計指針が明らかになることが挙げられる。通常、統計力学などで利用される MCMC 法は、スピンモデルに代表されるように離散系であるのに対し、本研究では連続系を扱うため、アルゴリズムの挙動はより複雑であるため、MCMC 法の設計指針が与えられることは、幅広い分野への波及効果がある。

また、階層的な確率モデルにおける系統的なモデル選択手法を開発することは独創的な点である。AIC や BIC に代表されるモデル選択規準は、漸近正規性を仮定しているため、階層モデルで使用するとバイアスがのった結果が得られてしまう。また、代数幾何学的手法に基づくモデル選択規準は、理論が複雑であり、個別に規準を作る必要があるため、汎用的に使えるモデル選択法の確立は非常に重要な課題である。

### 3. 研究の方法

具体的には、研究期間内に以下の三つの課題に取り組む。

#### A. メトロポリス法における平均採択率の解明

MCMC 法の最も基礎的なアルゴリズムとして、メトロポリス法に着目し、メトロポリス法における平均採択率を解析的に導出することを行う。これにより、メトロポリス法における最適な候補分布の設計指針を明らかにするだけでなく、自由エネルギーとの関係性を通して、ベイズ推定の汎化誤差との関連性も明らかにする。

#### B. メトロポリス法の平均採択率に基づくモデル選択手法の開発

課題 A で明らかにした平均採択率の結果にもとづき、新たなモデル選択手法の開発を行う。従来のベイズ推定におけるモデル

選択で利用される確率的複雑さ(自由エネルギー)に着目し、そのエントロピー項を平均採択率との解析的な関係から、メトロポリス法の数値計算結果により求め、効率的なモデル選択手法を開発する。

#### C. 動径基底関数ネットワークのスペクトル分解への応用

天文学や物性物理学のような自然科学分野では、計測によって複雑なスペクトルデータが得られる。そのようなスペクトルデータからの情報抽出として、動径基底関数ネットワークによるスペクトル分解が近年用いられている。本研究では、課題 A, B で構築したモデル選択手法を、自然科学分野で得られるスペクトルデータの解析に応用し、スペクトルを構成する基底関数の個数を自動的に決定する。これにより、科学的に有意な情報を効率的に抽出することを行う。

### 4. 研究成果

上記の研究方法に従い、研究実施を行い、各課題ともに一定の成果が得られた。特に顕著な成果が得られた B と C について以下で解説する。

#### B. メトロポリス法の平均採択率に基づくモデル選択手法の開発

メトロポリス法の平均採択率に先立ち、レプリカ交換モンテカルロ法における平均交換率から学習係数(代数幾何学における実対数閾値)を計算するアルゴリズムを開発し、動径基底関数ネットワークにおける学習係数の導出を行った[雑誌論文 12]。また、学習係数がベイズ推定における比熱と等価であることを利用し、ベイズ比熱を求めるアルゴリズムに拡張し、これを求めることでベイズ推定に関する構造の違いを示す相転移現象を捉えられることをシミュレーションにより明らかにした[学会発表 4]。

またモデル選択として、特徴選択問題のようにモデルの候補が特徴の数に対して指数的に増大し計算量が膨大になるケースに対して、レプリカ交換モンテカルロ法とマルチヒストグラム法を利用し効率的にモデル選択を行う手法を開発した[雑誌論文 8]。

この手法は、地球科学や心理学、材料科学など様々な分野の特徴選択に利用されるに至っている。

### C. 動径基底関数ネットワークのスペクトル分解への応用

本研究課題の研究開始前に開発したレプリカ交換モンテカルロ法を用いたベイズ推定によるスペクトル分解法を、生命科学のNMRデータ[6]や惑星科学の鉱物に関する反射スペクトルデータ[7]に適用した。これによって、スペクトルの由来となったアミノ酸の同定や、カンラン石に含まれる鉄・マグネシウム比といった物理的情報のスペクトルデータからの抽出に成功した。さらに、それまでのスペクトル分解法では既知として事前に与える必要のあった、スペクトルのノイズ分散を、それを確率変数としてベイズ的に扱うことで推定することを実現した[5]。その推定では新たな計算を行うことなく、レプリカ交換モンテカルロ法においてサンプリングの効率化の観点から導入されるレプリカ準位の情報を有効活用し、計算量の増大を伴わないノイズ推定を実現した。この手法を用いることで、事前にノイズ量がわからない実際の実験系におけるスペクトル分解が実現される。

また、スペクトルデータが時系列として得られた際に、各時刻でのスペクトルを分解するとともに、時刻間でのピークパラメータの遷移モデルを同時に推定する手法を開発し[雑誌論文 5]、天文学や物性学での時間分割スペクトルへのデータ解析への展望

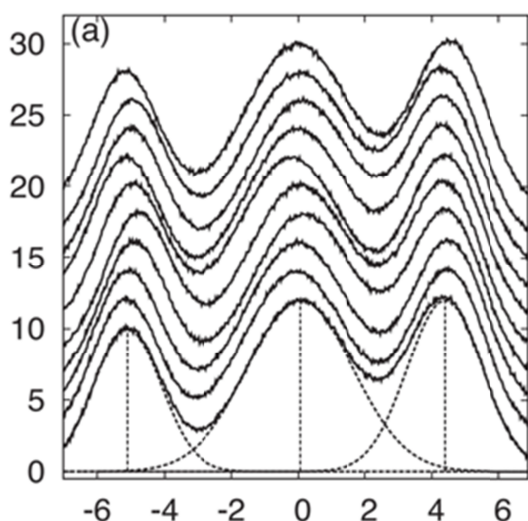


図3：時間分割スペクトル分解

も明らかにした。

現在、本課題を通して確立されたスペクトル分解法は、構造材料や原子核実験といった幅広い分野で活用されるに至っている。

### 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 12 件)

1. Akira Yada, Kenji Nagata, Yasunobu Ando, Tarojiro Matsumura, Sakina Ichinoseki and Kazuhiko Sato, Machine Learning Approach for Prediction of Reaction Yield with Simulated Catalyst Parameters, Chemistry Letters, Vol.47, pp.284-287, 2018.
2. M. Kano, H. Nagao, K. Nagata, S. Ito, S. Sakai, S. Nakagawa, M. Hori, and N. Hirata, Seismic wavefield imaging of long-period ground motion in the Tokyo metropolitan area, Japan, Journal of Geophysical Research, Vol.122, pp.5435-5451, 2017.
3. Satoru Tokuda, Kenji Nagata, and Masato Okada, Simultaneous estimation of noise variance and number of peaks in Bayesian spectral deconvolution, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.86, 024001, 2017.
4. Hikaru Takenaka, Kenji Nagata, Takashi Mizokawa, and Masato Okada, Bayesian Approach to Effective Model of NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> Triangular Lattice with Boltzmann Factor, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.86, 124003, 2016.
5. Shin Murata, Kenji Nagata, Makoto Uemura, and Masato Okada, Extraction of Latent Dynamical Structure from Time-series Spectral Data, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.85, 104003, 2016.
6. Yasuhiko Igarashi, Kenji Nagata, Tatsu Kuwatani, Toshiaki Omori, Yoshinori Nakanishi-Ohno and Masato Okada, Three

levels of data-driven science, Journal of Physics: Conference Series, Vol.669, 120001, 2016.

7. Peng K. Hong, Hideaki Miyamoto, Takafumi Niihara, Seiji Sugita, Kenji Nagata, James M. Dohm and Masato Okada, An automatic deconvolution method for modified Gaussian model using the exchange Monte Carlo method: application to reflectance spectra of synthetic clinopyroxene, Journal of Geology & Geophysics, Vol.5, 243, 2016.

8. Kenji Nagata, Jun Kitazono, Shin-ichi Nakajima, Satoshi Eifuku, Ryoji Tamura and Masato Okada, An exhaustive search and stability of sparse estimation for feature selection problem, IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications, Vol.8, pp.23-30, 2015.

9. Hikaru Takenaka, Kenji Nagata, Takashi Mizokawa, Masato Okada, Model selection of NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> triangular lattice by Bayesian inference, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.83, 124706, 2014.

10. Kensuke Wakasugi, Tatsu Kuwatani, Kenji Nagata, Hideki Asoh and Masato Okada, Verification of effectiveness of a probabilistic algorithm for latent structure extraction using an associative memory model, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, 104801, 2014.

11. Yoshinori Nakanishi-Ohno, Kenji Nagata, Hayaru Shouno, Masato Okada, Distribution estimation of hyperparameters in Markov random field models, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol.47, 045001, 2014.

12. Satoru Tokuda, Kenji Nagata, Masato Okada, A Numerical Analysis of Learning Coefficient in Radial Basis Function Network, IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications, Vol.6, pp.117-123, 2013.

〔学会発表〕(計 25 件)

(一部抜粋して記載)

1. Kenji Nagata, Spectral deconvolution and Bayesian estimation, 5th International Symposium on Kumamoto Synchrotron Radiation (ISKSR5): Progress of Data Analysis, Data-Driven Science, and Theory for Science (招待講演), 2017.

2. Kenji Nagata, AI for catalyst informatics, 第2回 北大-理研-産総研「触媒研究」合同シンポジウム (招待講演), 2016.

3. Kenji Nagata, Sparse Modeling and Data-Driven Science, Asia Oceania Geoscience Society (AOGS) 13th Annual Meeting (招待講演), 2016.

4. Satoru Tokuda, Kenji Nagata, Masato Okada, A theory of phase transitions and crossovers in statistical estimation: Toward a data-driven approach for physical science, International Meeting on “High-Dimensional Data Driven Science” (HD3-2015), 2015.

5. 永田賢二, 交換モンテカルロ法によるベイズ推定とデータ駆動科学, 電子情報通信学会信号処理研究会 (招待講演), 2014.

6. 永田賢二, 交換モンテカルロ法を用いたベイズ推定とデータ駆動科学, 第58回システム制御情報学会研究発表講演会 (招待講演), 2014.

7. 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, 電子情報通信学会ニューロコンピューティング研究会, 2014.

8. Kenji Nagata, An Efficient Exhaustive Search for Variable Selection Using MCMC method, ELC International Meeting on "Inference, Computation, and Spin Glasses" (ICSG2013), 2013.

〔図書〕(計 0 件)

〔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〕

ホームページ等

6．研究組織

(1)研究代表者

永田賢二（Kenji Nagata）

国立研究開発法人産業技術総合研究所・人工知能研究センター・主任研究員  
研究者番号：10556062