

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 16 日現在

機関番号：12612

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26870821

研究課題名(和文) 確率分布の無限分解可能性とカーネルベイズ推論

研究課題名(英文) Kernel Bayes Inference and Infinitely Divisible Distributions

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・助教

研究者番号：60586395

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：機械学習でカーネル法とベイズ推論を組み合わせたカーネルベイズ推論が研究されている。カーネルベイズ推論は確率分布の再生核ヒルベルト空間における特徴量である「カーネル平均」を推論する。確率分布からカーネル平均への写像が単射となる正定値カーネルを特性的カーネルという。特性的カーネルはカーネル平均を利用するアルゴリズムで重要な役割を果たす。特性的カーネルと無限分解可能分布の関係を明らかにする研究成果として、有界連続で対称な無限分解可能密度関数は特性的カーネルとして使えることを示した。さらにカーネル法の効率的計算を可能にする関係式にカーネルトリックがあるが、これを拡張した畳み込みトリックを提案した。

研究成果の概要(英文)：Kernel Bayes Inference (KBI), which is a Bayesian inference based on kernel methods, has been studied. KBI infers kernel means, which are features of probability distributions in reproducing kernel Hilbert space. In KBI, characteristic kernels play an important role in specifying probability distributions by kernel means. We studied a connection between characteristic kernels and infinitely divisible distributions. We showed that continuous bounded and symmetric density functions of infinitely divisible distributions can be used for characteristic kernels. Within the infinitely divisible distributions, we proposed a convolution trick, which is a generalization of the kernel trick. The convolution trick can be used for developing various kernel algorithms that combine infinitely divisible distributions.

研究分野：機械学習、応用数学

キーワード：カーネル法 カーネルベイズ推論 無限分解可能分布 畳み込み無限分解可能カーネル 共役カーネル
畳み込みトリック 安定分布 一般化双曲型分布

1. 研究開始当初の背景

機械学習分野でカーネルベイズ推論が研究されている。ベイズ推論は確率分布を推論するものであるが、一方、カーネルベイズ推論は確率分布自身でなく、確率分布の再生核ヒルベルト空間内における表現である「カーネル平均」を推論するものである。確率分布の推定は多峰的で複雑な場合、難しいものとなるが、カーネル平均の推定はそれに比して比較的容易となる。また確率分布を再生核ヒルベルト空間内で扱うことにより、確率分布間の類似度や距離をカーネル平均の内積やノルムを経由して定義することが可能となる。

確率分布全体からカーネル平均全体への写像が単射となる正定値カーネルを特性的カーネルという。特性的カーネルを利用する場合、カーネル平均により確率分布を一意に特定することができ、カーネル平均は確率分布に関する十分な情報を持っていることになる。特性的カーネルの性質は、カーネルベイズ推論を始めカーネル平均に関わる機械学習アルゴリズム全般を支える重要な概念である。

正定値カーネルが特性的カーネルとなるための様々な数学的条件が研究されている。

2. 研究の目的

特性的カーネルはカーネル平均を扱う上で重要な正定値カーネルのクラスである。一方、確率論で無限分解可能分布のクラスが知られている。特性的カーネルと無限分解可能分布の数学的関係を明らかにすることを目的とする。これにより無限分解可能分布で蓄積された数学的知識をカーネルベイズ推論の枠組みに取り込むことができる。この理論的知見に基づき、カーネルベイズ推論のさらなる発展とアルゴリズム開発を検討する。

3. 研究の方法

特性的カーネルと無限分解可能分布の数学的関係を明らかにするため、特性的カーネルと無限分解可能分布がそれぞれ持つ数学的性質に着目し、理論的考察・比較・検討を重ねる。特に確率分布の畳み込み、密度関数の畳み込み、畳み込み半群の性質に着目して研究を進める。

カーネルベイズ推論の枠組みの発展には、上記研究で得られた数学的知見を活用し、新たなアルゴリズムの導出を試みる。

4. 研究成果

(1) 特性的カーネルと無限分解可能分布の数学

的關係を明らかにする研究成果では、以下の数学的結果を得ることに成功した。全ての研究成果は、ユークリッド空間 \mathbb{R}^d 上の正定値カーネルとユークリッド空間 \mathbb{R}^d 上の確率分布に関する内容である。

①

\mathbb{R}^d 上の有界連続で対称な無限分解可能確率密度関数から作られる平行移動不変正定値カーネルを「畳み込み無限分解可能 (convolutionally infinitely divisible; CID) カーネル」と定義した。

(i) CID カーネルならば、特性的カーネルであることを示した。

CID カーネルとして以下の例を示した：ガウスカーネル、ラプラスカーネル、コーシーカーネル student-t カーネル、 α -安定カーネル、劣ガウス α -安定カーネル、一般化双曲型 (Generalized Hyperbolic; GH)カーネル、正規逆ガウス (normalized inverse Gaussian; NIG)カーネル、Variance Gamma (VG)カーネル、tempered α -安定カーネル。これらのカーネルは全て特性的な正定値カーネルとなる。

(ii) CID カーネルの全体は、畳み込みで閉であるが、和と積で閉でないことを示した。

②

確率モデルのカーネル平均を考える際、無限分解可能分布の確率モデルを考えることが 1 つの自然なクラスであることを示した。

(i) 正定値カーネルと確率分布の間の共役性をカーネル平均の意味で定義した。正定値カーネルと確率分布が共役とは、正定値カーネルとカーネル平均が同じパラメトリック密度関数族に属するときをいう。CID カーネルと無限分解可能分布は共役である。

(ii) 共役カーネルを一段階抽象化したものに、確率分布の「吸収的カーネル」と「被吸収的カーネル」を定義した。吸収的カーネルかつ被吸収的カーネルが共役カーネルとなる。

(iii) カーネル法の効率的計算の基礎となるカーネルトリック (kernel trick) を拡張した畳み込みトリック (convolution trick) を CID カーネルの範囲で提案した。畳み込みトリックは確率モデルのカーネル平均の内積計算を容易とするものである。確率モデルが縮退したデルタ分布に選ばれたとき、カーネルトリックに特別化される。デルタ分布を無限分解可能分布に拡張したとき畳み込みトリックが成立する。

カーネルトリックはカーネル法の様々なアルゴリズムを導出する際に重要となる基礎

関係式である。畳み込みトリックも同様に確率モデルのカーネル平均の内積計算を利用するアルゴリズムを導出する際、重要な基礎関係式になると考えている。

上記(i-iii)の性質を示した後、(i-iii)の具体例として以下の場合を示した: ガウス分布, ラプラス分布, コーシー分布, α -安定分布, 劣ガウス α -安定分布, 一般化双曲型 (Generalized Hyperbolic; GH) 分布, 正規逆ガウス(normalized inverse Gaussian; NIG) 分布, Variance Gamma (VG) 分布。

この研究成果を国内会議[7]で発表した。また研究成果は機械学習の国際論文誌に掲載された[1]。

(2)

パラメトリックモデルの無限分解可能分布とノンパラメトリックモデルのカーネルベイズ推論を融合するセミパラメトリックカーネルベイズ推論のアルゴリズムを開発した。特にセミパラメトリックカーネルベイズ推論を状態空間モデルの状態推定問題に適用し、フィルタリングアルゴリズムを開発した。具体的には、状態空間モデルの遷移過程は無限分解可能分布のパラメトリックノイズモデルで記述され、状態空間モデルの観測過程はカーネルベイズ推論によりデータからデータ駆動的に学習を行う。このセミパラメトリックカーネルベイズ推論の枠組みの中で、前述の数学的研究成果(畳み込みトリック)を利用している。

この研究成果を国内会議[3]と機械学習の国際会議 NIPS2014 ワークショップ[6]で発表した。また上記アルゴリズムの matlab ソフトウェアを開発した。

(3)

カーネルベイズ推論に基づき状態空間モデルのスムージングを行うカーネルベイズスムーザ(kernel Bayes Smoother)のアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは状態空間モデルの遷移過程と観測過程をそれぞれ教師ありデータからノンパラメトリックに学習を行い、隠れ状態のスムージングを行うものである。カーネルベイズスムーザは以下のように他手法(カルマンフィルタ・スムージング, パーティクルフィルタ, ガウシアンプロセスフィルタ・スムージング)と比較して、広範囲な状態空間モデルで有効である。

- ・カルマンフィルタ・スムージングは遷移過程と観測過程に線形ガウスを仮定する。
- ・パーティクルフィルタは非線形モデルに対応可能であるが、尤度モデルを仮定する必要がある。
- ・ガウシアンプロセスフィルタ・スムージングは遷移過程と観測過程のそれぞれの教師

ありデータからデータ駆動的に学習可能であるが、正規性を仮定し多峰ノイズモデルに対応することができない。

- ・カーネルベイズスムーザは遷移過程と観測過程のそれぞれの教師ありデータからデータ駆動的に学習可能であり、また多峰ノイズモデルにも対応可能である。

前述の数学的研究成果である様々な CID カーネルがカーネルベイズスムーザに適用可能であり、無限分解可能分布に基づくカーネルベイズ推論として一般的なアルゴリズムとなっている。

この研究成果を国際シンポジウム[4, 5]で発表した。また研究成果は人工知能と統計の国際会議論文 AISTATS2016 に採択された[2]。

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 1 件)

[1]Yu Nishiyama and Kenji Fukumizu, "Characteristic Kernels and Infinitely Divisible Distributions", Journal of Machine Learning Research, 17(180), pp. 1-28, 2016. (査読あり)

[学会発表] (計 6 件)

[2]Yu Nishiyama, Amir Hossein Afsharinejad, Shunsuke Naruse, Byron Boots, Le Song, "The Nonparametric Kernel Bayes Smoother", The 19th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS 2016), pp. 547-555, Cadiz (Spain), May 9-11 2016. (査読あり)

[3] 西山悠, "カーネルベイズスムージングとカーネル平均 Toolbox の作成", 第 25 回日本神経回路学会全国大会 (JNNS 2015), pp. 60-61, 電気通信大学(東京都調布市), 2015 年 9 月 4 日. (査読あり)

[4]Yu Nishiyama, Amir Hossein Afsharinejad, Shunsuke Naruse, Byron Boots, Le Song, "Nonparametric Smoothing on State Space Models with Kernel Mean Embeddings", STM2015 & CSM2015, The Institute of Statistical Mathematics, Tachikawa (Tokyo), July 15th 2015. (査読なし)

[5]Yu Nishiyama, Amir Hossein Afsharinejad, Shunsuke Naruse, Byron Boots, Le Song, "Nonparametric Smoothing on State Space Models with Kernel Mean Embeddings", 1st Symposium on Intelligent

Systems in Science and Industry (SISSI),
Max Planck Institute, Tuebingen(Germany),
July 12th 2015. (査読なし)

[6] Yu Nishiyama, Motonobu Kanagawa,
Arthur Gretton, Kenji Fukumizu,
"Model-based Kernel Sum Rule with
Applications to State Space Models", The
Neural Information Processing Systems
(NIPS) Workshop: ABC in Montreal,
Montreal(Canada), Dec. 12th. 2014. (査読
あり)

[7] 西山悠, "カーネル法と確率分布の無限
分解可能性", 日本応用数理学会 2014 年度
年会, 政策研究大学院大学(東京都港区),
2014/9/5. (査読なし)

[その他]

ホームページ等

<https://sites.google.com/site/ynishiyam/>

6. 研究組織

(1) 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・
助教

研究者番号 : 60586395