

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 29 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2013～2016

課題番号：25700022

研究課題名(和文) 情報量に基づく新しい機械学習理論とその応用

研究課題名(英文) Theory and Application of Information-Based Machine Learning

研究代表者

杉山 将 (Sugiyama, Masashi)

東京大学・新領域創成科学研究科・教授

研究者番号：90334515

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 19,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、密度比や密度差を各密度を推定することなく直接学習する手法を開発し、それらに基づく様々な機械学習アルゴリズムを開発した。具体的には、半教師付き分類アルゴリズム、教師なしクラスタリングアルゴリズム、教師付き因果推論アルゴリズム、教師付き次元削減アルゴリズム、教師なし次元削減アルゴリズム、正例とラベルなしデータからの分類アルゴリズム、ターゲットシフト下での教師付き学習法、異ドメイン間オブジェクト適合法などを開発した。また、密度微分を密度を推定することなく直接学習する手法も開発し、モード回帰アルゴリズム、非正規成分分析アルゴリズムなどを開発した。

研究成果の概要(英文)：In this research project, we developed methods for directly learning the density ratio and density difference without estimating each density, and based on them, we developed various machine learning algorithms. This includes algorithms of semi-supervised classification, unsupervised clustering, supervised causal inference, supervised dimension reduction, unsupervised dimension reduction, classification from positive and unlabeled data, supervised learning under target shift, and cross-domain object matching. We also developed methods for directly learning the density derivative without estimating the density itself, and based on them, we developed algorithms of modal regression and non-Gaussian component analysis.

研究分野：機械学習

キーワード：機械学習 情報量 密度比 密度差 密度微分 教師付き学習 教師なし学習 強化学習

1. 研究開始当初の背景

近年、機械学習の技術は、ウェブデータの知的処理、センサーネットワーク情報の自動分析など、様々な場面で活用されている。最先端の機械学習技術は、量的側面においては既に人間の能力を凌駕する領域に達している。しかし、実世界の複雑な知的情報処理課題を精度良く解決するためには、質的側面において更なるブレイクスルーが必要とされている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、実世界の複雑な知的情報処理課題の高精度な解決に資する新しい機械学習技術を開発することである。

知的情報処理における学習の精度は、汎化能力(学習していないデータに対する予測能力)によって評価されるのが一般的である。汎化能力を獲得するための基本原理は、「似たデータは似た振る舞いをする」という前提であり、古典的な最近傍識別器からサポートベクトルマシンに代表されるカーネル法まで、様々な機械学習手法がこの原理に基づいて設計されている。そのため、データ間の類似度を適切に定義することが、汎化能力の向上のために非常に重要である。

一方、学習精度を向上させる全く別の取り組みとして、類似した学習タスクのデータを積極的に活用する転移学習も、近年注目されている。転移学習では、タスク間の類似度を適切に決定することが重要であるが、現状は応用例に合わせて発見的な手法で類似度を定義することが多く、決定的な方法論は未だ見つかっていない。このように、様々な知的情報処理課題には何らかの類似度の学習が内在しているにもかかわらず、これまでの類似度学習の研究は個別の課題ごとに議論されるに留まっていた。そこで本研究では、類似度学習を一段上の階層から捉え直し、異質データ間の類似度、タスク間の類似度、クラス間の類似度などを統一的に扱うことのできる新しい機械学習の理論体系を構築する。そして、その枠組みのもとで様々な機械学習アルゴリズムを開発する。

3. 研究の方法

本研究における類似度学習の統一理論の根幹をなす概念は、情報理論の分野で重要な役割を果たしている相互情報量である。相互情報量は、同時確率密度関数から周辺確率密度関数の積へのカルバック・ライブラー距離と解釈できる。本研究では、相互情報量を一般化し、様々な尺度のもとでの確率密度関数間の距離を考える。

確率密度関数間の距離は、各確率密度関数を推定して、それらの距離を計算することにより推定できる。しかし、このような単純なアプローチでは、距離の推定精度が悪いことが知られている。そこで、研究代表者がこれまでに取り組んできた密度比推定(それぞれ

の確率密度関数を推定することなく、それらの比を直接推定する枠組み)を更に発展させるとともに、密度差推定(それぞれの確率密度関数を推定することなく、それらの差を直接推定する枠組み)、更には、密度微分推定(確率密度関数を推定することなく、その微分を直接推定する枠組み)の理論とアルゴリズムを開発する。そして、それらの基盤技術に基づく様々な機械学習アルゴリズムを開発する。

4. 研究成果

密度比推定、密度差推定、密度微分推定の枠組みのもと、半教師付き分類アルゴリズム、教師なしクラスタリングアルゴリズム、教師付き因果推論アルゴリズム、教師付き次元削減アルゴリズム、教師なし次元削減アルゴリズム、正例とラベルなしデータからの分類アルゴリズム、ターゲットシフト下での教師付き学習法、異ドメイン間オブジェクト適合法、モード回帰アルゴリズム、非正規成分分析アルゴリズムなど、様々な教師付き学習、教師なし学習アルゴリズムを開発した。

また、開発した次元削減手法を高次元強化学習に応用し、実用的なモデルベース型強化学習アルゴリズムを開発した。

更に、データ集合が持つ自然な幾何構造を活かした主成分分析アルゴリズム、定常部分空間解析アルゴリズム、モード探索型クラスタリングアルゴリズムを開発した。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計21件)

1. Horev, I., Yger, F., & Sugiyama, M. Geometry-aware principal component analysis for symmetric positive definite matrices. *Machine Learning*, to appear. (査読有り)
2. du Plessis, M. C., Niu, G., & Sugiyama, M. Class-prior estimation for learning from positive and unlabeled data. *Machine Learning*, to appear. (査読有り)
3. Yamane, I., Sasaki, H., & Sugiyama, M. Regularized multi-task learning for multi-dimensional log-density gradient estimation. *Neural Computation*, vol.28, no.7, pp.1388-1410, 2016. (査読有り)
4. Sasaki, H., Noh, Y.-K., Niu, G., & Sugiyama, M. Direct density-derivative estimation. *Neural Computation*, vol.28, no.6, pp.1101-1140, 2016. (査読有り)
5. Tangkaratt, V., Morimoto, J., & Sugiyama, M. Model-based reinforcement learning with dimension reduction. *Neural Networks*, vol.84, pp.1-16, 2016. (査読有り)
6. Kawakubo, H., du Plessis, M. C., &

- Sugiyama, M. Computationally efficient class-prior estimation under class balance change using energy distance. *IEICE Transactions on Information and Systems*, vol.E99-D, no.1, pp.176-186, 2016. (査読有り)
7. du Plessis, M. C., Shiino, H., & Sugiyama, M. Online direct density-ratio estimation applied to inlier-based outlier detection. *Neural Computation*, vol.27, no.9, pp.1899-1914, 2015. (査読有り)
 8. Yamada, M., Sigal, L., Raptis, M., Toyoda, M., Chang, Y., & Sugiyama, M. Cross-domain matching with squared-loss mutual information. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol.37, no.9, pp.1764-1776, 2015. (査読有り)
 9. 杉山 将, 入江 清, 友納 正裕. 相互情報量を用いた機械学習とそのロボティクスへの応用. *日本ロボット学会誌*, vol.33, no.2, pp.86-91, 2015. (査読有り)
 10. Zhang, H., Ma, Y., & Sugiyama, M. Bandit-based task assignment for heterogeneous crowdsourcing. *Neural Computation*, vol.27, no.11, pp.2447-2475, 2015. (査読有り)
 11. 杉山 将, 山田 誠, ドゥ・プレシ マーティヌス・クリストフェル, リウ ソン. 非定常環境下での学習: 共変量シフト適応, クラスバランス変化適応, 変化検知. *日本統計学会論文誌*, vol.44, no.1, pp.113-136, 2014. (査読有り)
 12. Sainui, J. & Sugiyama, M. Unsupervised dimension reduction via least-squares quadratic mutual information. *IEICE Transactions on Information and Systems*, vol.E97-D, no.10, pp.2806-2809, 2014. (査読有り)
 13. Yamada, M., Sugiyama, M., & Sese, J. Least-squares independence regression for non-linear causal inference under non-Gaussian noise. *Machine Learning*, vol.96, no.3, pp.249-267, 2014. (査読有り)
 14. Nguyen, T. D., du Plessis, M. C., Kanamori, T., & Sugiyama, M. Constrained least-squares density-difference estimation. *IEICE Transactions on Information and Systems*, vol.E97-D, no.7, pp.1822-1829, 2014. (査読有り)
 15. du Plessis, M. C. & Sugiyama, M. Class prior estimation from positive and unlabeled data. *IEICE Transactions on Information and Systems*, vol.E97-D, no.5, pp.1358-1362, 2014. (査読有り)
 16. Calandriello, D., Niu, G., & Sugiyama, M. Semi-supervised information-maximization clustering. *Neural Networks*, vol.57, pp.103-111, 2014. (査読有り)
 17. Sugiyama, M., Niu, G., Yamada, M., Kimura, M., & Hachiya, H. Information-maximization clustering based on squared-loss mutual information. *Neural Computation*, vol.26, no.1, pp.84-131, 2014. (査読有り)
 18. du Plessis, M. C. & Sugiyama, M. Semi-supervised learning of class balance under class-prior change by distribution matching. *Neural Networks*, vol.50, pp.110-119, 2014. (査読有り)
 19. Kanamori, T. & Sugiyama, M. Statistical analysis of distance estimators with density differences and density ratios. *Entropy*, vol.16, no.2, pp.921-942, 2014. (査読有り)
 20. Sainui, J. & Sugiyama, M. Unsupervised dimension reduction via least-squares quadratic mutual information. *IEICE Transactions on Information and Systems*, vol.E97-D, no.10, pp.2806-2809, 2014. (査読有り)
 21. Sugiyama, M., Yamada, M., & du Plessis, M. C. Learning under non-stationarity: Covariate shift and class-balance change. *WIREs Computational Statistics*, vol.5, no.6, pp.465-477, 2013. (査読有り)
- [学会発表](計15件)
1. Ashizawa, M., Sasaki, H., Sakai, T., & Sugiyama, M. Least-squares log-density gradient clustering for Riemannian manifolds. In *Proceedings of 29th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS2017)*, Fort Lauderdale, Florida, USA, Apr. 20-22, 2017, to appear. (査読有り)
 2. Tangkaratt, V., van Hoof, H., Parisi, S., Neumann, G., Peters, J., & Sugiyama, M. Policy search with high-dimensional context variables. In *Proceedings of the Twenty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2017)*, pp.2632-2638, San Francisco, California, USA, Feb. 4-9, 2017. (査読有り)
 3. Kawakubo, H. & Sugiyama, M. Semi-supervised sufficient dimension reduction under class-prior change. In *Proceedings of Conference on Technologies and Applications of Artificial Intelligence (TAAI2016)*,

- pp.146-153, Hsinchu, Taiwan, Nov. 25-27, 2016. (査読有り)
4. Horev, I., Yger, F., & Sugiyama, M. Geometry-aware stationary subspace analysis. In Proceedings of the 8th Asian Conference on Machine Learning (ACML2016), pp.430-444, Hamilton, New Zealand, Nov. 16-18, 2016. (査読有り)
 5. Sasaki, H., Ono, Y., & Sugiyama, M. Modal regression via direct log-density derivative estimation. In Proceedings of 23rd International Conference on Neural Information Processing (ICONIP2016), pp.108-116, Kyoto, Japan, Oct. 16-21, 2016. (査読有り)
 6. Sasaki, H., Niu, G., & Sugiyama, M. Non-Gaussian component analysis with log-density gradient estimation. In Proceedings of 19th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS2016), pp.1177-1185, Cadiz, Spain, May 9-11, 2016. (査読有り)
 7. Nguyen, T. D., du Plessis, M. C., & Sugiyama, M. Target shift adaptation in supervised learning. In Proceedings of the 7th Asian Conference on Machine Learning (ACML2015), pp.285-300, Hong Kong, China, Nov. 20-22, 2015. (査読有り)
 8. du Plessis, M. C., Niu, G., & Sugiyama, M. Class-prior estimation for learning from positive and unlabeled data. In Proceedings of the 7th Asian Conference on Machine Learning (ACML2015), pp.221-236, Hong Kong, China, Nov. 20-22, 2015. (査読有り)
 9. Sasaki, H., Tangkaratt, V., & Sugiyama, M. Sufficient dimension reduction via direct estimation of the gradients of logarithmic conditional densities. In Proceedings of the 7th Asian Conference on Machine Learning (ACML2015), pp.33-48, Hong Kong, China, Nov. 20-22, 2015. (査読有り)
 10. Horev, I., Yger, F., & Sugiyama, M. Geometry-aware principal component analysis for symmetric positive definite matrices. In Proceedings of the 7th Asian Conference on Machine Learning (ACML2015), pp.1-16, Hong Kong, China, Nov. 20-22, 2015. (査読有り)
 11. Sasaki, H., Hyvärinen, A., & Sugiyama, M. Clustering via mode seeking by direct estimation of the gradient of a log-density. In Proceedings of European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECMLPKDD2014), pp.19-34, Nancy, France, Sep. 15-19, 2014. (査読有り)
 12. Niu, G., Dai, B., du Plessis, M. C., & Sugiyama, M. Transductive learning with multi-class volume approximation. In Proceedings of 31st International Conference on Machine Learning (ICML2014), pp.1377-1385, Beijing, China, Jun. 21-26, 2014. (査読有り)
 13. Noh, Y.-K., Sugiyama, M., Liu, S., du Plessis, M. C., Park, F. C., & Lee, D. D. Bias reduction and metric learning for nearest-neighbor estimation of Kullback-Leibler divergence. In Proceedings of Seventeenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS2014), pp.669-677, Reykjavik, Iceland, Apr. 22-24, 2014. (査読有り)
 14. du Plessis, M. C., Niu, G., & Sugiyama, M. Clustering unclustered data: Unsupervised binary labeling of two datasets having different class balances. In Proceedings of Conference on Technologies and Applications of Artificial Intelligence (TAAI2013), pp.1-6, Taipei, Taiwan, Dec. 6-8, 2013. (査読有り)
 15. Niu, G., Jitkrittum, W., Dai, B., Hachiya, H., & Sugiyama, M. Squared-loss mutual information regularization. In Proceedings of 30th International Conference on Machine Learning (ICML2013), pp.10-18, Atlanta, Georgia, USA, Jun. 16-21, 2013. (査読有り)
- [図書](計3件)
1. Sugiyama, M. Introduction to Statistical Machine Learning, 534 pages, Morgan Kaufmann, Amsterdam, the Netherlands, 2015.
 2. 井手 剛, 杉山 将. 異常検知と変化検知, 192 ページ, 講談社, 東京, 2015.
 3. 杉山 将. イラストで学ぶ機械学習: 最小二乗法による識別モデル学習を中心に, 232 ページ, 講談社, 東京, 2013.
- [その他]
ホームページ
<http://www.ms.k.u-tokyo.ac.jp/sugi/>
6. 研究組織
(1) 研究代表者
杉山 将 (SUGIYAMA, Masashi)
東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授
研究者番号: 90334515