

平成 30 年 6 月 7 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26280086

研究課題名(和文) 離散凸解析に基づく機械学習アルゴリズム体系の構築とその応用

研究課題名(英文) Development of machine learning algorithms based on discrete convex analysis

研究代表者

河原 吉伸 (Kawahara, Yoshinobu)

大阪大学・産業科学研究所・准教授

研究者番号：00514796

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,300,000円

研究成果の概要(和文)：多くの機械学習における問題では、問題構造を有効に利用することで組合せ最適化等で扱われる構造依存な計算体系に帰着することが可能になり、飛躍的に高速・正確な計算が可能となることが期待できる。更にこのようなアプローチをとることにより、データやタスクが持つ構造的な事前情報の利用が可能となるため、解釈性のある結果/モデル獲得へつながる。このような考えの下、本研究では、離散凸性(特に劣モジュラ性)に関連する組合せ論的方法を利用した機械学習のための基礎理論・アルゴリズム開発を行った。また、これらを複数ドメインにおいて適用・検証し、応用的知見獲得や有用性実証までを含めた研究を進めた。

研究成果の概要(英文)：In this study, we developed several machine learning algorithms based on discrete convexity such as submodularity. In particular, we developed efficient learning algorithm with structured sparsity, which is formulated with continuous relaxations of submodular functions. We applied those to problems in several engineering fields, and confirmed the proposed methods effectiveness in those problems.

研究分野：機械学習

キーワード：機械学習 組合せ最適化

1. 研究開始当初の背景

高度な知能情報処理を実現するアルゴリズム体系である機械学習は、近年ますますその重要性を増す研究領域の一つである。しかし既存の枠組みのみでは、近年の大規模なデータを扱う必要性や、解の解釈性への要求の高度化に対して多くの場合に十分な対応は困難であるという問題がある。

本研究では、多くの機械学習アルゴリズムが入力依存の計算体系、つまりその計算コストがサンプル数や入力変数の次元などで決まる定式化が中心であることに着目した。一方で、組合せ最適化分野で議論されるアルゴリズムは構造依存な場合が多い。例えばグラフに関するアルゴリズムの計算量は、ノード数に加えエッジ数により評価される事が多いが、一般にエッジは変数間の構造に他ならない。

従来、機械学習と組合せ最適化の両分野は、これまで接点が少なく発展してきた経緯がある。しかし近年になり、機械学習でよく用いられる正則化と呼ばれる枠組み中でデータ構造を用いる際には、劣モジュラ性(集合関数中の凸性)が重要な役割を持つ事が知られるようになり、機械学習分野における組合せ論的方法の必要性が注目されるようになってきた。

2. 研究の目的

上述のような背景から、本研究では、多くの機械学習における問題では、問題構造を有効に利用することで組合せ最適化等で扱われる構造依存な計算体系に帰着することが可能になり、飛躍的に高速・正確な計算が可能となることを期待できると考えた。更にこのようなアプローチをとることにより、データやタスクが持つ構造的な事前情報の利用が可能となるため、解釈性のある結果/モデル獲得へつながる。

このような考えの下、本研究では特に、離散凸性(特に劣モジュラ性)に関連する組合せ論的方法を利用した機械学習のための基礎理論・アルゴリズム開発を行う。また、これらを複数ドメインにおいて適用・検証し、応用的知見獲得や有用性実証までを含めた研究を行うことを目的とするものである。

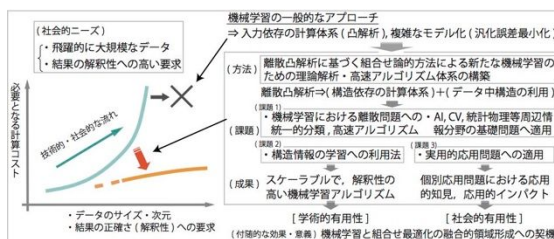


図1. 研究目的の概要

3. 研究の方法

本研究は、次の3つの課題に取り組むことで上記の目的の達成を目指すものである。

(課題1) 離散凸性に基づく機械学習のための理論解析/高速アルゴリズム体系の構築

離散凸性などの組合せ的構造に基づく視点から、機械学習への既存の個別的な組合せ論的方法を整理すると共に、統一的な理論解析・高速アルゴリズム体系の構築を行う。

(課題2) 事前情報としてのデータの組合せ的構造を用いた学習アルゴリズムの開発

現実のデータ解析場面では、事前に利用可能な、データや扱うタスクに関する組合せ的構造情報が存在する機会が多い。そのためここでは、このような問題やタスク中の組合せ的構造を離散凸性に基づき機械学習へ取り込む方法論と、これに基づく高速アルゴリズムの開発を行う。

(課題3) 個別問題の特性を用いた超高速アルゴリズムの設計とその応用

(課題1)と(課題2)による枠組みをもとに、特に重要な個別問題に対して、個々の特性を用いたアルゴリズムの更なる高速化を行う。そして最終的には手法評価に加え、ゲノムワイドな遺伝子データ解析や、動画データにおけるリアルタイムによる高度な学習処理など、従来技術では困難であった問題に対し導出方法の適用を行い、これら応用における実用可能性の検証を行う。

本研究は、組合せ最適化/機械学習両分野に関わる理論的解析やアルゴリズム導出から、ドメインでの応用的研究にわたる比較的広範囲なものである。そのため本研究では、機械学習・組合せ最適化の両分野、および応用的研究分野の各分野の複数研究者が参加して遂行する(図2も参照)。

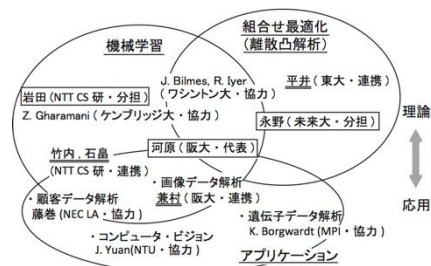


図2. 参加研究者の専門分野

4. 研究成果

まず、本研究で得られた理論、またはアルゴリズム的な内容に関する研究成果について述べる。これについては、大きく次の2つに分けられる。つまり、一般に計算困難な問題への比較的効率的な計算アルゴリズムの導出、及び問題構造を正則化を介して学習へ利用するための枠組みの開発である。なおいずれも、劣モジュラ性を中心とした離散構造

を利用することにより得られる。

前者については、例えば[5]では、NP 困難な組合せ最適化問題の(劣モジュラ関数と優モジュラ関数の和で表される)評価関数において、優モジュラ項に木などの構造が存在する際にその構造を利用することで効率的に厳密解に近い近似解が得られるアルゴリズムを複数提案し、その検証を行なっている。図3は、このような考えに基づき導出したいくつかのアルゴリズムの典型的な数値例を示したものである。収束性や解の厳密性などに違いがあることが分かる(詳細は論文を参照のこと)。

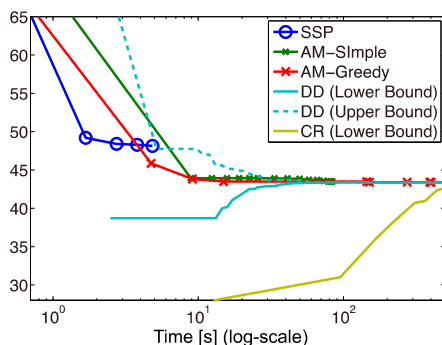


図3. 優モジュラ項の構造を利用したアルゴリズムの適用例

そして後者については、既存の多くの構造正則化項が、劣モジュラ関数のロヴァース拡張として得られることについて示し、更にこの構造を利用することで最終的な最適化計算が効率的に計算可能なネットワークフロー計算の反復へ帰着できることを示した。例えば図4は、いくつかの既存手法と上記の提案手法との計算時間の比較例を示したものである(PARAが提案手法)。

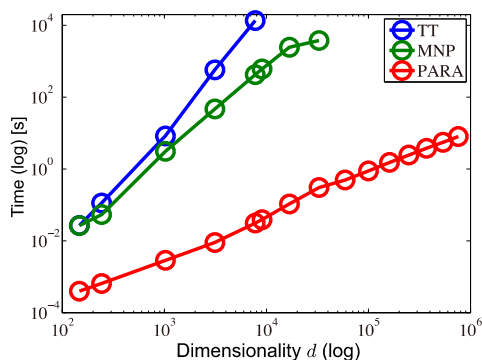


図4. 計算時間の比較例

また[1,6]では、この原理に基づいた効率的な定式化により結合正則化と呼ばれる構造正則化学習アルゴリズムを導出し、脳画像を用いたアルツハイマー病の診断へと適用しその有用性を確認した。[4]では、より一般的な結合正則化(高階結合正則化)についても同様の計算へ帰着できることを示し、その効率的な最適化アルゴリズムを導出した。

これらを含むその他の成果と、分野におけ

るそれらの位置付けについては、代表者・河原と分担者・永野との共著による著書[11]においてもまとめられている。

次に、上記で開発した手法に関する応用的研究の成果について述べる。まず例えば[2]では、遺伝子データ解析における課題を、最終的に、効率的計算が可能な最小カット問題へと帰着し計算する枠組みを提案した。[3,7]は同じく遺伝子データ解析へ構造正則化学習を適用した成果に関するものである。また[9]では、[4]の枠組みをテンソル分解へと拡張し、交通データへと適用しその有用性を確認した(図5も参照)。

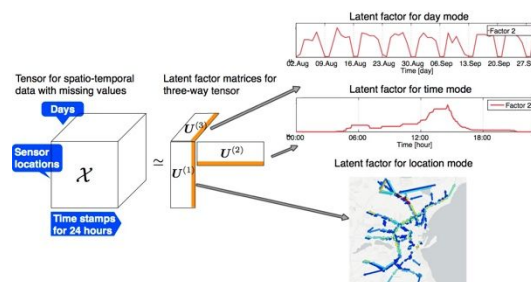


図5. 高階結合正則化テンソル分解

また[8]では、同様な高速な構造正則化学習を用いて、コンピュータ・ビジョンにおける重要な問題の一つである代表サンプル選択を行う枠組みを提案した。例えば図6は、これを動画の代表画面の選択へ利用した例である。

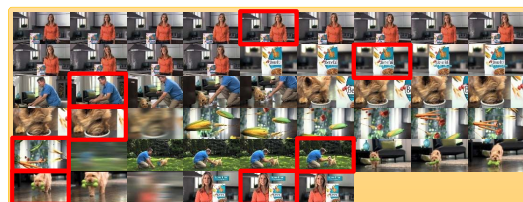


図5. 代表サンプル選択の適用例

これら以外にも、[10]における超解像度解析など複数の応用における提案した枠組みの適用・検証を行い有用性の確認を行った。

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)

[査読付き論文](計10件)

[1] B. Xin, Y. Kawahara, Y. Wang, and W. Gao, "Efficient Generalized Fused Lasso with Application to the Diagnosis of Alzheimer's Disease," in *Proceedings of the 28th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI14)*, pp.2163-2169, 2014.

[2] M. Sugiyama, C. Azencott, G. Dominik, Y. Kawahara, and K. Borgwardt, "Multi-task feature selection with multiple networks via maximum flows," in *Proceedings of*

the 2014 SIAM Conference on Data Mining (SDM'14), pp.199-207, 2014.

[3] K. Nagata, Y. Kawahara, T. Washio, and A. Unami, "Toxicogenomic Predictive Model with Group Sparse Regularization Based on Transcription Factor Network Information," *Fundamental Toxicological Sciences*, 2(4): 161-170, 2015.

[4] K. Takeuchi, Y. Kawahara, and T. Iwata, "Higher order fused regularization for supervised learning with grouped parameters," in *Proceedings of the 2015 European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML - PKDD'15)*, pp.577-593, 2015.

[5] Y. Kawahara, R. Iyer, and J. Bilmes, "On approximate non-submodular minimization via tree-structured supermodularity," in *Proceedings of the 18th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS'15)*, pp.444-452, 2015.

[6] B. Xin, Y. Kawahara, Y. Wang, L. Hu, and W. Gao, "Efficient generalized fused Lasso and its applications," *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology (TIST)*, 7(4): 60:1-60:22, 2016.

[7] K. Nagata, Y. Kawahara, T. Washio, and A. Unami, "Toxicogenomic Prediction with Graph-based Structured Regularization on Transcription Factor Network," *Fundamental Toxicological Sciences*, 3(2): 39-46, 2016.

[8] H. Wang, Y. Kawahara, C. Weng, and J. Yuan, "Representative Selection with Structured Sparsity," *Pattern Recognition*, 63: 268-278, 2017

[9] K. Takeuchi, Y. Kawahara, and T. Iwata, "Structurally regularized non-negative tensor factorization for spatiotemporal pattern discoveries," in *Proceedings of the 2017 European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML - PKDD'17)*, pp.127-139, 2017.

[10] T. Wazawa, Y. Arai, Y. Kawahara, H. Takauchi, T. Washio, and T. Nagai, "Highly biocompatible super-resolution fluorescence imaging using the fast photoswitching fluorescent protein Kohinoor and SPoD-ExPAN with Lp-regularized image reconstruction," *Microscopy*, 67(2): 89-98, 2018.

〔学会発表〕(計 13 件)

〔図書〕(計 1 件)

[11] 河原吉伸, 永野清仁, 「劣モジュラ最適化と機械学習」, 機械学習プロフェッショナルシリーズ, 講談社サイエンティフィック, 2015年12月.

〔産業財産権〕

出願状況(計 1 件)

名称: 解析装置、方法、及びプログラム
発明者: 竹内孝、岩田具治、河原吉伸
権利者: 日本電信電話株式会社、国立大学
法人大阪大学
種類: 特許
番号: 特願 2016-036106
出願年月日: 2016年10月26日
国内外の別: 国内

6. 研究組織

(1)研究代表者

河原 吉伸 (KAWAHARA, Yoshinobu)
大阪大学・産業科学研究所・准教授
研究者番号: 00514796

(2)研究分担者

岩田 具治 (IWATA, Tomoharu)
日本電信電話株式会社・NTT コミュニケー
ション科学研究所・主任研究員
研究者番号: 70396159

永野 清仁 (NAGANO, Kiyohito)
群馬大学・社会情報学部・准教授
研究者番号: 20515176

(3)連携研究者

平井 広志 (HIRAI, Hiroshi)
東京大学・大学院情報理工学系研究科・准
教授
研究者番号: 20378952

兼村 厚範 (KANEMURA, Atsunori)
産業技術総合研究所・情報数理研究グルー
プ・研究員
研究者番号: 50580297

石畠 正和 (ISHIHATA, Masakazu)
日本電信電話株式会社・NTT コミュニケー
ション科学研究所・研究員
研究者番号: 80726563

竹内 孝 (TAKEUCHI, Koh)
日本電信電話株式会社・NTT コミュニケー
ション科学研究所・研究員
研究者番号: 30726568