

平成 30 年 6 月 19 日現在

機関番号：62603

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2013～2017

課題番号：25120012

研究課題名(和文)セミパラメトリックベイズ推論アプローチによるスパースモデリングの深化と応用

研究課題名(英文)Deepening and applications of sparse modeling by approaches of semiparametric Bayesian inference

研究代表者

福水 健次(Fukumizu, Kenji)

統計数理研究所・数理・推論研究系・教授

研究者番号：60311362

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 40,300,000円

研究成果の概要(和文)：直接観測できない状態変数の遷移ダイナミクスと、その間接的な観測値とから、現在の状態を逐次的に推測するフィルタリングの問題において、観測系の単純なモデル化が不可能な状況でも有効に動作する推論法を提案し、ロボットの位置推定問題などに適用した場合、従来法に比べて推定精度が大幅に改善することが明らかとなった。また、複雑なスパースモデリングに対する高速最適化法に関して研究し、理論上最適な方法を提案した。

研究成果の概要(英文)：Filtering problems aims at estimating the current unobserved state variable from the unknown dynamics of the unobserved state variables and indirect observations. We consider filtering under the assumption that the observation model is uncertain and not able to be modeled easily, and proposed effective algorithms in such difficult situations. We confirmed the advantage of the proposed algorithms over existing relevant methods. We also studied fast methods for complex sparse modeling, and proposed an optimization methods that achieves the best convergence rate theoretically.

研究分野：機械学習, 数理統計

キーワード：スパースモデリング セミパラメトリック ベイズ推論 最適化 アルゴリズム

1. 研究開始当初の背景

従来のスパースモデリングでは、通常、線形モデルなど簡単なパラメトリックモデル(有限個のパラメータによる記述)によって現象が記述可能という前提をおくが、本領域が対象とする実験・計測データでは、系の複雑さや計測の不確定性により簡単なモデル化が困難な場合が多い。そのような状況下でも対象系に関する情報を有効に抽出するためには、支配方程式や観測過程が明確な部分をパラメトリックモデルで、不明確な部分をノンパラメトリックモデル(自由度を制約しないモデル)で扱うセミパラメトリックな推論法を確立し、従来のスパースモデリングからの本質的進展をはかることが重要である。

2. 研究の目的

本研究では、セミパラメトリックなベイズ推論を導入することにより、新たなスパースモデリングの方法論を確立することを目的とする。特に、自然科学分野の実験・計測データは、対象となる生体系・物理系の状態遷移を時系列的に計測する機会が多く、「状態空間モデル」として表すことができる。本研究では状態空間モデルを主要な研究対象とし、状態遷移や観測過程に不明確な部分がある場合に適用可能な、カーネル法に基づくセミパラメトリックなベイズ推論法を確立し、セミパラメトリック・スパースモデリングの方法を展開する。具体的には、以下の4課題を研究した。

【課題1】「カーネルベイズ推論の展開」カーネル法によるベイズ推論法の理論と方法の基盤の確立。

【課題2】「セミパラメトリック状態空間モデル」自然科学の実験・計測データのモデルとして、セミパラメトリック状態空間モデルを確立。

【課題3】「セミパラメトリック・スパースモデリング」線形モデルによらないスパースモデリングのアルゴリズム・最適化手法を開発。

【課題4】「スパース・シミュレーション表現によるセミパラメトリック推論」シミュレーションとスパースモデリングの融合により、不明確な観測系を伴うシステムの推定を行う。本課題は中間評価時に追加した。

3. 研究の方法

【課題1】「カーネルベイズ推論の展開」は、代表者の福水が、カーネルベイズ法を共に提案・発展させてきた Arthur Gretton のグループと協力しながら研究を進める。

【課題2】「セミパラメトリック状態空間モデル」は、代表者・福水の主導のもと、連携研究者(途中より分担者)西山、協力者(のち

博士研究員)金川らにより研究を推進する。【課題3】「セミパラメトリック・スパースモデリング」は、スパースモデリングに伴う最適化アルゴリズムと理論解析に関して高い業績を持つ鈴木が中心になって研究を進める。また、全体の統括および領域内の他の計画研究との連携は代表者・福水が主として行う。

本研究においては、計算不可の比較的高い機械学習・最適化の方法を研究するため、クラスタ計算機を購入して、計算機実験を行う。また、研究体制を図1に示した。

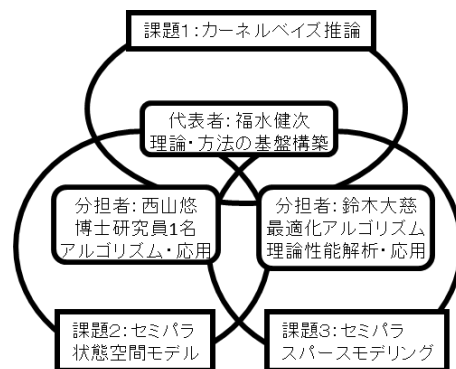


図1 研究組織

4. 研究成果

【課題1】カーネルベイズ推論の展開
確率論的解釈: 本研究の技術的柱であるカーネルベイズ推論に対し、分散、信頼区間、確率密度関数などの多くの統計量が、カーネルベイズ推論が与える重み付き和によって推定可能であることを理論的に証明した[18]。これにより、本方法論を多くの問題に適用するための技術基盤が確立した。

効率化アルゴリズム: Kernel herding と呼ばれるサンプル点最適化によるデータ圧縮手法の高い有効性が明らかとなり、【課題2】におけるフィルタリングの手法に組み込み、精度を劣化させることなく計算効率を飛躍的に高めることを示した([13])。また、同様の理論を積分近似の一種であるQuadratureルールに適用することにより、想定した関数クラスに属さない、より滑らかな関数の積分近似をした場合でも近似精度の劣化が生じないことを、従来より一般的な枠組みで証明した。この結果をまとめた論文は機械学習分野の最難関国際会議であるNIPS2016に採択され([8])、拡充した論文を論文誌に投稿中である。

基礎アルゴリズムの深化: カーネル法による分布表現に関する基礎技術として、Stein作用素を利用したノンパラメトリックな適合度検定に関する研究を行い、高速に分布の適合度合と不適合な領域を同定する方法を提案した(図2)。この結果をまとめた論文は、NIPS2017においてBest Paper Awardを受賞した([2])。

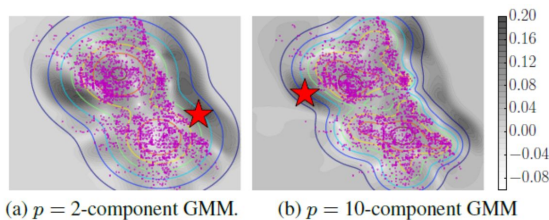


図 2 地点による適合度の違い

【課題 2】セミパラメトリック状態空間モデル
 サンプリング/厳密計算との融合：直接観測できない状態変数の遷移則と、その間接的な観測とから、現在の状態を逐次的に推測するフィルタリングの問題において、観測系の単純なモデル化が不可能な場合に、セミパラメトリックなベイズ推論に関して研究を行い 2つの方法を提案した。まず、モンテカルロサンプリングとカーネルベイズ則を組み合わせたカーネルモンテカルロ(KMC)フィルタを提案し、ロボットの位置推定問題などに適用してその有効性を示した(図3)。この結果をまとめた論文が国際著名誌 Neural Computation に発表された([13])。次に、加法的ガウスノイズなど、より強い仮定がある場合、厳密積分とカーネル法を組み合わせることでより有効な方法が構築可能であることを確認し、理論の論文が機械学習分野のトップ論文誌 JMLR に採択され([9])、方法の論文を現在改訂中である。

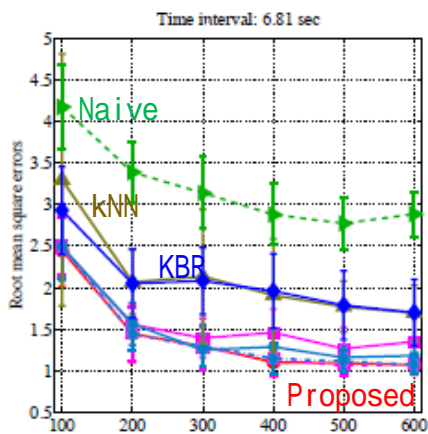


図 3 KMC フィルタの比較実験

【課題 3】セミパラメトリック・スパースモデリング
 効率的アルゴリズム：大規模高次元データの SpM 用のアルゴリズムとして以下の研究を行った。
 (a) 低ランクテンソル推定：低ランクテンソル推定(図4)は低ランク行列推定を拡張した潜在因子モデルの推定で、推薦システムやマルチタスク学習、時空間データ解析などの幅広い応用がある。本課題では、正則化学習

法とベイズ推定法を考察し、その統計的性質を明らかにした。正則化学習法では和型の方法と畳み込み型の方法を考察し、それらの推定誤差がテンソルのサイズや Tucker ランクに依存して決まることを示した[14]。さらに、ベイズ法を用いると観測デザインが特異であってもミニマックスな収束レートを達成することが解明された[7]。(b)構造的正則化の効率的計算方法。スパース正則化の一般的な定式化として構造的正則化を研究し、「大量」データに対する効率的最適化手法を開発した。提案手法は確率的最適化の技法と交互方向乗数法に基づき、応用範囲が広く実装が簡便で、非専門家でも容易に扱える。さらに、提案手法の収束性と収束速度の最適性を証明した[21]。

さらに、大規模スパース最適化に対するミニバッチ確率的勾配法の高速度アルゴリズムとして、二重加速確率的分散縮小勾配法を提案した。この方法は、理論的な収束性が保証されており、現在理論上世界最速の方法である。論文が NIPS2017 において発表されている([1])。

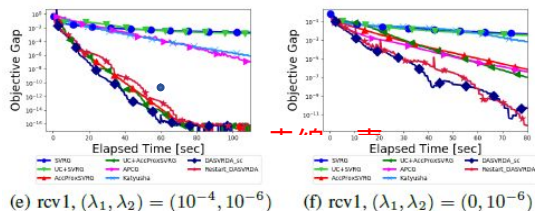


図 4 二重可測確率的分散縮小勾配法 (赤線・青線が提案法)

【課題 4】「スパースシミュレーション表現によるセミパラメトリック推論」
 状態空間モデルに基づくフィルタリングの方法をスパース化するアルゴリズムを開発した。またその方法を地球科学班および公募班の携わるプレート滑りの推定問題への適用を試みた。

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 45 件)

1. T. Murata, T. Suzuki “Doubly Accelerated Stochastic Variance Reduced Dual Averaging Method for Regularized Empirical Risk Minimization” Advances in Neural Information Processing Systems 30 (NIPS2017), pp.608-617. (査読あり)
2. W. Jitkrittum, W. Xu, Z. Szabo, K. Fukumizu, A. Gretton “A Linear-Time Kernel Goodness-of-Fit Test” Advances

- in Neural Information Processing Systems 30 (NIPS 2017), 2017 (査読あり , Best Paper Award)
3. S. Liu, A. Takeda, T. Suzuki, K. Fukumizu “Trimmed Density Ratio Estimation” Advances in Neural Information Processing Systems 30 (NIPS 2017), 2017 (査読あり)
 4. K. Muandet, K. Fukumizu, B. K. Sriperumbudur, B. Schölkopf “Kernel Mean Embedding of Distributions: A Review and Beyond” Foundations and Trends in Machine Learning, 10, 1-141, 2017 (査読あり)
 5. B. Sriperumbudur, K. Fukumizu, A. Gretton, A. Hyvärinen, Revant Kumar “Density Estimation in Infinite Dimensional Exponential Families” Journal of Machine Learning Research, 18(57), 1-59, 2017 (査読あり)
 6. S. Liu, K. Fukumizu, T. Suzuki “Learning sparse structural changes in high-dimensional Markov networks” Behaviormetrika, 44(1) 265-286, 2017 (査読あり)
 7. H. Kanagawa, T. Suzuki, H. Kobayashi, N. Shimizu, Y. Tagami “Gaussian process nonparametric tensor estimator and its minimax optimality” Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning, 1632-1641, 2016 (査読あり)
 8. M. Kanagawa, B. K. Sriperumbudur, K. Fukumizu “Convergence guarantees for kernel-based quadrature rules in misspecified settings” Advances in Neural Information Processing Systems, 30, 3288-3296, 2016 (査読あり)
 9. Y. Nishiyama, K. Fukumizu “Characteristic Kernels and Infinitely Divisible Distributions” Journal of Machine Learning Research, 17(180), 1-28, 2016 (査読あり)
 10. K. Muandet, B. Sriperumbudur, K. Fukumizu, A. Gretton, B. Schölkopf “Kernel Mean Shrinkage Estimators” Journal of Machine Learning Research, 17(48), 1-41, 2016 (査読あり)
 11. S. Liu, T. Suzuki, R. Relator, J. Sese, M. Sugiyama, K. Fukumizu “Support Consistency of Direct Sparse-Change Learning in Markov Networks” Annals of Statistics, 2016, 34, 2016 (査読あり)
 12. S. Liu, T. Suzuki, M. Sugiyama, K. Fukumizu “Structure Learning of Partitioned Markov Networks” Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning (ICML2015), 439-448, 2016 (査読あり)
 13. M. Kanagawa, Y. Nishiyama, A. Gretton, K. Fukumizu “Filtering with State-Observation Examples via Kernel Monte Carlo Filter” Neural Computation, Vol. 28, No. 2: 382-444, 2015
 14. T. Suzuki “Convergence rate of Bayesian tensor estimator and its minimax optimality” JMLR Workshop and Conference Proceedings: the 32nd International Conference on Machine Learning (ICML2015), 37, 1273-1282, 2015. (査読あり)
 15. B. Schölkopf, K. Muandet, K. Fukumizu, S. Harmeling, J. Peters “Computing functions of random variables via reproducing kernel Hilbert space representations” Statistics and Computing, 25(4), 755-766, 2015 (査読あり)
 16. S. Hara, T. Morimura, T. Takahashi, H. Yanagisawa, T. Suzuki “A Consistent Method for Graph Based Anomaly Localization” Journal of Machine Learning Research, Workshop & Conference Proceedings (AISTATS2015), 38, 333-341, 2015 (査読あり)
 17. K. Fukumizu and C. Leng, “Gradient-based kernel dimension reduction for regression”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 109(505), pp. 359-370, 2014. (査読あり)
 18. M. Kanagawa, and K. Fukumizu, “Recovering distributions from Gaussian RKHS embeddings”, *Journal of Machine Learning Research, W&CP (Proc. AISTATS 2014)*, vol. 33, pp. 457-465, 2014. (査読あり)
 19. R. Tomioka and T. Suzuki, “Convex tensor decomposition via structured Schatten norm regularization”, *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 26, pp. 1331-1339, 2014. (査読あり)
 20. K. Muandet, K. Fukumizu, B. Sriperumbudur, A. Gretton and B. Schölkopf “Kernel mean estimation and Stein effect”, *Journal of Machine Learning Research, Workshop & Conference Proceedings (ICML2014)*, vol. 32, pp. 10-18, 2014. (査読あり)
 21. T. Suzuki “Stochastic Dual Coordinate Ascent with Alternating Direction Method of Multipliers” JMLR Workshop and Conference Proceedings (ICML2014), 32(1):736-744, 2014 (査読あり)

22. D. Sejdinovic, B. Sriperumbudur, A. Gretton, and K. Fukumizu, "Equivalence of distance-based and RKHS-based statistics in hypothesis testing", *Annals of Statistics*, vol. 41(5), pp. 2263-2702, 2013. (査読あり)
23. K. Fukumizu, L. Song, A. Gretton "Kernel Bayes' Rule: Bayesian Inference with Positive Definite Kernels" *Journal of Machine Learning Research*, 14, 3753-3783, 2013 (査読あり)

〔学会発表〕(計 3 8 件)

1. T. Suzuki, Generalization error analysis of deep learning and its application to network structure determination. French-Japanese Workshop on Deep Learning and Artificial Intelligence. 2017 (招待講演)
2. T. Suzuki, Generalization Error and Compressibility of Deep Learning via Kernel Analysis. Tokyo Deep Learning Workshop 2017 (招待講演)
3. S. Liu, Partitioned Markov Networks. MIRU2016 第 19 回画像の認識・理解シンポジウム. 2016 (招待講演)
4. 福水健次. カーネル法の最前線. 第 19 回情報論的学習理論ワークショップチュートリアル. 2016
5. 鈴木大慈. 確率的最適化から始める機械学習入門. 第 18 回情報論的学習理論ワークショップチュートリアル. 2015
6. K. Fukumizu, Statistical Machine Learning in the Era of Data. UK-Japan Big Data Workshop.2015 (招待講演)
7. 鈴木大慈. マルチプルカーネル学習とスパース推定の統計的性質. 日本数学会年会招待講演. 2014
8. T. Suzuki, Stochastic Dual Coordinate Ascent with Alternating Direction Method of Multipliers. NIPS workshop "Optimization for Machine Learning" 2013
9. T. Suzuki, Dual Averaging and Proximal Gradient Descent for Online Alternating Direction Multiplier Method. The 6th Workshop on Information Theoretic Methods in Science and Engineering (WITMSE2013). (招待講演) 2013

〔図書〕(計 2 件)

1. 鈴木大慈「確率的最適化」講談社サイエンスフィク. 2015. 176 ページ
2. 嶋田茂, 伊藤大雄, 坂本 比呂志, 當仲寛哲, 鷲尾隆, 上田修功, 杉山将, 鹿島

久嗣, 鈴木大慈, ほか 36 名. 「ビッグデータ・マネジメント - データサイエンティストのためのデータ利活用技術と事例」エヌ・ティー・エス. 2013 年. 329 ページ

〔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

<http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/>

<http://sparse-modeling.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

福水 健次 (FUKUMIZU, Kenji)
 統計数理研究所・数理・推論研究系・教授
 研究者番号 : 60311362

(2) 研究分担者

鈴木 大慈 (SUZUKI, Taiji)
 東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授
 研究者番号 : 60551372

西山 悠 (NISHIYAMA, Yu)

電気通信大学・大学院情報理工学系研究科・助教
 研究者番号 : 60586395
 (H26 年 11 月より)

富岡 亮太 (TOMIOKA, Ryota)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・助教
 研究者番号 : 70518282
 (H25 年 9 月に海外異動により資格喪失)

(3) 連携研究者

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
(H26年11月まで)

柳 松 (LIU, Song)
統計数理研究所・統計的機械学習研究セン
ター・特任助教
研究者番号： 80760579
(H27年からH29年8月まで)

(4)研究協力者

()