

令和 5 年 6 月 9 日現在

機関番号：32641

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19H04186

研究課題名（和文）変分オートエンコーダと粒子フィルタの融合による状態空間モデリングの自動化

研究課題名（英文）Automation of a state space modeling by an integration of the variational auto encoder and particle filter

研究代表者

樋口 知之（Higuchi, Tomoyuki）

中央大学・理工学部・教授

研究者番号：70202273

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,090,000円

研究成果の概要（和文）：時系列データに潜むダイナミクスを記述する状態空間モデルを、深層学習の逐次生成モデルを利用して汎用的モデルに拡張した。モデル内に含まれるパラメータの推定法について、既存手法とは異なるタイプを採用することで、計算メモリを1/100に削減しつつも誤差を既存手法よりも小さくすることに成功した。この手法をシミュレーションデータやカオス現象データに適用し、多次元時系列データに対する表現学習手法としても有効であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

IoT（Internet of Things）の時代となり、人工物の機能や状態のモニタリングのために、膨大なセンサ情報をクラウドに集めることがさまざまな産業分野で企図・実施されている。IoTセンサから得られるデータは、その多くが動画を含めた時系列データである。深層学習の登場により特にこの5年間、ビッグデータが用意されれば、非線形・ガウス型の統計的モデリングの実行主体は、高い見識と豊富な経験をもつ人（モデラー）からマシンに移行する傾向が加速した。本研究では、このような時系列データの自動モデリングに資する基礎的研究を行った。

研究成果の概要（英文）：A state-space model describing the dynamics behind time-series data was extended to a general-purpose model using a sequential generative model of deep learning. By employing a different type of estimation method for the parameters included in the model, we succeeded in reducing the computational memory to 1/100 of that of existing methods while reducing the error to a smaller level than existing methods. We applied this method to simulation data and chaotic phenomenon data, and showed that it is also effective as a feature learning method for multidimensional time series data.

研究分野：時系列ビッグデータへのベイズモデリング。逐次生成深層確率モデルと状態空間モデルの融合手法。

キーワード：深層学習 状態空間モデル 変分オートエンコーダ 粒子フィルタ

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

統計的モデリングのこの25年間の大きな進歩は、スパースモデリングと深層学習の二つである。変数(要素)間の関係が線形で、パラメータ推定に用いる最適化関数がL1(尤度関数が非ガウス)である、いわゆる線形・非ガウス型の統計的モデリングはスパースモデリングにより半自動化された。一方、非線形・ガウス型の統計的モデルは、原理的には深層学習によって自動的に手に入れることが可能になった。深層学習の登場により特にこの5年間、ビッグデータが用意されれば、非線形・ガウス型の統計的モデリングの実行主体は、高い見識と豊富な経験をもつ人(モデルラー)からマシンに移行する傾向が加速した。

深層ニューラルネット(Deep Neural Net, 以後DNN)は識別モデルとして利用されるのが普通であるが、生成モデルに活用する研究も最近盛んに盛んである。DNNの生成モデル化とは、出力ベクトル $y$ を生成する確率モデルをDNNで構成することであり、話題のChatGPTはその代表例である。生成モデルを手にするメリットは、データの欠損・異常値処理、リスク解析、ペイズの定理を用いた逆解析など広範囲に渡る。2014年に提案されたVariational Auto Encoder(VAE)では、入力 $x$ の出力値を、 $y$ が従う確率モデルのパラメータベクトルとすることで生成モデル化を実現している。またエンコーダとデコーダの中間体として、入出力と比較して相当次元の低い潜在変数ベクトル $z$ を規定する。VAEではこの $z$ にホワイトノイズを加え、後段のDecoderへの入力となるベクトルを生成する点が特徴でもあり強みでもある。このようにVAEは、統計モデルとして記述された生成モデルであり、生成モデルの自動構築法や情報圧縮法としての汎用性から大きな期待が寄せられている。我々はVAEの中でも時系列データを取り扱うことに向けた、Sequential VAE(SVAE)に注目した。SVAEは潜在変数ベクトル $z$ の存在も含めて、確率変数ベクトル間の構造が状態空間モデルと類似している点がある理由である。

状態空間モデルはその強いマルコフ性の仮定により、遠く離れた過去の影響を現在に直接的に反映することが原理的に難しい。深層学習で採用されているRecurrent NN(RNN)も同様である。音声や自然言語向きのDNNとしてLong Short-Term Memory(LSTM)が有名であるが、LSTMと同様な深い構造は、状態空間モデルの枠組み内では表現が困難である。もしこれらの課題が、深層学習と粒子フィルタ(PF)の融合によって部分的にでも解決されたならば、具体的な応用場面の多さを鑑みると、そのインパクトは大きい。これが本研究を開始した強い動機であった。

SVAEのパラメータ学習は変分ペイズ学習で行われる。変分ペイズ学習は、事後分布 $p(x|y)$ を直接求めず、その近似事後分布 $q(x|y)$ を導入し、近似事後分布を逐次的に改善することで、最終的に良い事後分布を求める戦略である。そこではEvidence Lower Bound(ELBO)が重要な役割を果たす。ELBOのモンテカルロ近似計算をSVAEに適応したのはFiltering Variational Objectives(FIVO)である。しかしながらFIVOはモンテカルロサンプル数(通常、粒子数と呼ばれる)を増やしてもELBOの推定精度の大きな改善が得られないことが本質的な弱点である。FIVOよりも計算時間はかかるが、状態空間モデルでのスムージングアルゴリズムにヒントを得た、フォワードフィルタリング・バックワードリサンプリングのELVO版アルゴリズムである、PSVOの適用・改善もいろいろ試みられている。このようにFIVOにはELBOの推定量としていくつかの難点が残されていたため、新しい学習法も求められていた。

## 2. 研究の目的

SVAEでは、同時分布 $p(z_t, x_t | \cdot)$ とプロポージャー分布 $q(z_t | \cdot)$ が重要な役割を果たす。 $z_t$ と $x_t$ は、時刻 $t$ の潜在変数ベクトルおよび観測データベクトルである。SVAEの単純なモデルとして、2015年にKrishnanらによるディープカルマンフィルタ(DKF)がすでに提案されている。DKFでは、同時分布を事前分布 $p(z_t | z_{t-1})$ と観測モデル $p(x_t | z_t)$ に分解および簡素化している。従って、遠く離れた過去の影響を現在に直接的に反映することが原理的に難しくなっている。本研究開発では、事前分布およびプロポージャー分布の構成に関しても取り扱える範囲を拡大し、問題に適した状態空間モデルの同定が可能となる表現力の高いSVAEの開発を目指す。

非線形および非ガウスの状態空間モデルの一般的解法は、原理的にはPFによって与えられる。ただし、システムモデルと観測モデルの型は既知でなければならない。両モデル内に含まれるパラメータは、対数周辺尤度の最大化(経験ベイズ法)あるいはパラメータ分布を確率モデル化する階層ベイズ法によって定めることができる。対数周辺尤度の値はPFを用いて計算可能であるが、PFは条件付き分布のモンテカルロ近似であるため、特に対数周辺尤度の値は不安定である。FIVOは基本的にPFによって対数周辺尤度を計算しているため、同様の不安定性が大きな問題であった。この問題の解決が主たる目的の一つである。

## 3. 研究の方法

(1) DKFと本研究で狙う枠組みの関係性を整理するとともに、理論的枠組みの十分な検討を行う。SVAEはエンコーダ部分に時系列の長期依存性を保存するLSTMや長期の時系列間関係性を抽出できるTransformerを用いることで信号の効率的な圧縮が可能である。また、生成モデルと

して、内部状態の時間遷移を表すエボリュータと元の信号を復元するデコーダが用いられ、エボリュータはマルチプルレイヤーパーセプトロン (MLP) や LSTM、デコーダは MLP で主に設計される。デコーダ部分の MLP としては、密結合の比較的層数の少ないものが多い。具体的な細かい構造まで見ていくと、代表的なものでも 10 タイプある。これらの体系化のために数理モデルとして統一的に表記する。

(2) 状態空間モデルとしての解釈が可能な新しいタイプの SVAE の開発を行う。VAE のエンコーダ部分に Recurrent NN を含む Gated Recurrent Unit (以後 GRU)、LSTM などの、時系列向きの再帰的構造を含む DNN を採用する。このモデルを計算機上に実装し、ネットワークの構造とパラメータ学習に用いる評価関数の違いによるモデル同定の性能の変化を数値実験にて評価する。

(3)

パラメータ学習手法に関しては、まず FIVO の計算機への実装による検証をすすめる。FIVO と PSVO の数値実験比較を行う。線形ではあるが非ガウス性を示す状態空間モデルに従うような、異常値が観測データに時折混入するシミュレーションデータでもって、パラメータ学習に関する数値実験を行う。

結果しだいでは、逐次データ同化の別手法を援用することで、粒子数を劇的に減らしながら推定精度を向上させるアルゴリズムの開発を行う。逐次データ同化手法とは、PF、アンサンブルカルマンフィルタ (EnKF)、融合粒子フィルタ (MPF) など、分布表現にモンテカルロ的要素をとりこんだ、逐次ベイズフィルタの一般名称である。

(4)

複数のタイプの SVAE と新しいパラメータ学習手法を融合し、既知の非線形ガウス型の状態空間モデルで表現された時系列データに適用し、再現可能性を検討する。つまり、データ同化でいう、双子実験を行う。当初はシミュレーションデータによる検証を行う。状態空間モデルが時間とともに変容していくデータに対して、アルゴリズムの追従性や可塑性を数値実験により検討する。具体的な検証事例として、モデルは既知であるが内在するパラメータが時間とともにゆっくり変化する人工データに対してアルゴリズムを適用する。

非線形力学系分野で解析されている実データに適用し、新しい非線形モデルを提示する。

高次元時系列データに対して適用し、予測誤差の観点から有用性を確認するとともに、計算実行性を示す。

#### 4. 研究成果

(1) SVAE の多様なタイプも確率因果グラフの形で表現でき、エンコーダ・エボリュータ・デコーダで構成されている。これにより我々は SVAE の体系的表現を実現した。これにより、事前分布およびプロポーザル分布の構成に関しても取り扱える範囲を拡大し、問題に適した状態空間モデルの同定が可能となるアルゴリズムが開発できた。

(2) 評価関数の違いによるモデル同定の性能の変化を数値実験において、Latent Loss として、分散パラメータを固定し、平均値ベクトル間の差を平均二乗誤差で測る簡便な方法は、パラメータ学習スピードを加速し、ロバストな解を得る上では有効であることを我々は見いだした。

(3)

異常値混入シミュレーションデータへの適用について、FIVO を用いれば、データが少ない場合であっても安定したパラメータ推定も可能であることが分かった。また過学習の発生を減ずる効果も確認した。さらに FIVO や PSVO を用いて、既知の環境下でパラメータ学習が適切に実現できることを模擬データで確認するだけでなく、複数の実データを用いて推定方法の実効性を検討した。結果として、FIVO だと粒子数を相当増やしても、推定精度の向上があまり期待できないことを示した。これにより、FIVO よりアルゴリズムがかなり複雑だが原理的に推定性能の良いと想像される PSVO を用いた検証実験にも取り組んだ。

これらの結果から、逐次データ同化手法を取り入れることで効率的にパラメータを推定するアルゴリズムの開発に注力し、EnKF を援用した新しいアルゴリズム Ensemble Kalman Objective (EnKO) を開発した。

(4)

FIVO や PSVO の課題であった勾配の偏性や粒子の縮退が生じないことを確認した。これらの性質により、EnKO は FIVO よりも粒子数を 1/100 程度に削減可能で、効率的な学習アルゴリズムであることを、シミュレーションデータを用いた数値実験により実証した。

開発したアルゴリズムの実データへの適用も行った。特に、カオス時系列データと想定されている多次元時系列データに対して適用し、カオス研究の観点から新知見を得た。

次元の高い時系列データへの適用可能性を確認するため、人の歩行の動き (つまり歩容) の計測データに対しても実験を行った。歩容データは各関節のオイラー角で構成されており、50 次元である。FIVO は振幅的動きの振幅を過小推定する一方、EnKO は、予測精度の指標である MSE (Mean Squared Error) で長期に渡って高い精度であった。回転する手書き文字データ (28 x 28 次元) の動画像ベンチマークデータへの適用に関しては、EnKO は一貫して予測 MSE が最小であり、学習手法として優れたものであることを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 2件／うち国際共著 1件／うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Ching Jianye, Wu Stephen, Phoon Kok-Kwang	4. 巻 147
2. 論文標題 Constructing Quasi-Site-Specific Multivariate Probability Distribution Using Hierarchical Bayesian Model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Engineering Mechanics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001964	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Wu Stephen, Ching Jianye, Phoon Kok-Kwang	4. 巻 99
2. 論文標題 Quasi-site-specific soil property prediction using a cluster-based hierarchical Bayesian model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Structural Safety	6. 最初と最後の頁 102253 ~ 102253
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.strusafe.2022.102253	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Huang Yong, Zhang Haoyu, Li Hui, Wu Stephen	4. 巻 146
2. 論文標題 Recovering compressed images for automatic crack segmentation using generative models	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Mechanical Systems and Signal Processing	6. 最初と最後の頁 107061 ~ 107061
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ymsp.2020.107061	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Wu Stephen, Ching Jianye, Phoon Kok-Kwang	4. 巻 99
2. 論文標題 Quasi-site-specific soil property prediction using a cluster-based hierarchical Bayesian model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Structural Safety	6. 最初と最後の頁 102253 ~ 102253
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.strusafe.2022.102253	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 樋口 知之	4. 巻 51
2. 論文標題 隣接領域との競争と共創が促す統計学の力強い発展	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 日本統計学会誌	6. 最初と最後の頁 213 ~ 244
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11329/jjssj.51.213	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 中村 和幸	4. 巻 279
2. 論文標題 数理データサイエンスの拡がりと応用-生命基礎科学から診断支援まで	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 医学のあゆみ	6. 最初と最後の頁 188-193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計21件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 大野航太, 小川知之
2. 発表標題 Stability of Traveling Wave in nonlocally coupled oscillator system
3. 学会等名 2022年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ishizone, T., Higuchi, T., Okusa, K., & Nakamura, K.
2. 発表標題 An Online System of Detecting Anomalies and Estimating Cycle Times for Production Lines.
3. 学会等名 IECON 2022 - 48th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Oshima, H., Ishizone, T., Nakamura, K., & Higuchi, T.
2. 発表標題 Occupancy Detection for General Households by Bidirectional LSTM with Attention
3. 学会等名 IECON 2022 - 48th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中村和幸
2. 発表標題 システム理解のためのデータ分析手法と適用例の紹介
3. 学会等名 サンゴ礁生態系におけるレドックスエコバイオロジー研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中村和幸
2. 発表標題 数理・データサイエンス分野からの医学・生命科学への貢献について
3. 学会等名 明治大学・聖マリアンナ医科大学共同研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石首根毅
2. 発表標題 深層時系列生成モデルによる表現学習
3. 学会等名 2022年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中村和幸
2. 発表標題 データ同化とデータ駆動型モデリング：理論とスコープ
3. 学会等名 生理研研究会「第2回 人工知能技術と科学の協調と展開」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石首根毅，樋口知之，中村和幸
2. 発表標題 逐次フィルタリングを用いた逐次変分自己符号化器の効率的な学習フレームワーク
3. 学会等名 人工知能学会全国大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石首根毅，樋口知之，中村和幸
2. 発表標題 逐次変分自己符号化器の効率的な学習アルゴリズム
3. 学会等名 第20回コンピューテーショナル・インテリジェンス研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石首根 毅，樋口 知之， 中村 和幸
2. 発表標題 Ensemble Kalman Filter を活用した時系列モデルの変分推論フレームワーク
3. 学会等名 2021年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 樋口知之
2. 発表標題 帰納と演繹の融合： データ同化と深層学習
3. 学会等名 応用統計学フロンティアセミナー（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石首根毅，樋口知之，中村和幸
2. 発表標題 深層生成モデルによる時系列モデルの同定
3. 学会等名 情報処理学会第84回全国大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 富田隼輔，中畝誠，山田融，塚沢和憲，中村和幸
2. 発表標題 農業分野の回帰問題における少数部分ラベルの予測精度向上 リサンプリングを用いた画像データによる深層学習
3. 学会等名 情報処理学会第84回全国大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 下村真生，中村和幸
2. 発表標題 農作物収量予測に向けた可視化手法の適用分析事例
3. 学会等名 人工知能学会第34回全国大会
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 下村真生, 中畝誠, 山田融, 塚澤和憲, 中村和幸
2. 発表標題 CNNを用いた農作物の収量予測とGrad-RAMによる可視化の検討
3. 学会等名 第19回情報科学技術フォーラム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石首根毅, 樋口知之, 中村和幸
2. 発表標題 変分推論・非線形フィルタリングを駆使した時系列データの潜在モデルの推論・予測
3. 学会等名 情報処理学会第83回全国大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下村真生, 中村和幸
2. 発表標題 予測値への負の寄与を考慮したCNN回帰モデル解釈手法
3. 学会等名 情報処理学会第83回全国大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 樋口知之
2. 発表標題 AI・データサイエンス人材育成の産業界との協働
3. 学会等名 第11回横幹連合コンファレンス(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 樋口知之
2. 発表標題 隣接領域との競争と共創が促す統計学の力強い発展
3. 学会等名 2021年度統計関連学会連合大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下村真生, 中村和幸
2. 発表標題 深層学習を用いた医療画像診断における可視化選択指標
3. 学会等名 日本数学会異分野異業種研究交流会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下村真生, 中村和幸
2. 発表標題 CNNに対する可視化手法の計算機実験による比較評価
3. 学会等名 情報処理学会第82回全国大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	中村 和幸  (Nakamura Kazuyuki)  (40462171)	明治大学・総合数理学部・専任教授   (32682)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	Wu Stephen  (Wu Stephen)  (70804186)	統計数理研究所・データ科学研究系・准教授    (62603)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 協力者	石曾根 毅  (ISHIZONE TSUYOSHI)		
研究 協力者	大野 航太  (OHNO KOTA)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
その他の国・地域	統計科学研究所中央研究院（台湾）			
米国	Johns Hopkins University			
シンガポール	National University of Singapore			