

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：82626

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2013～2016

課題番号：25330276

研究課題名（和文）特徴空間の幾何構造を利用した学習アルゴリズムの構築

研究課題名（英文）Development of the learning algorithm based on feature space geometry

研究代表者

赤穂 昭太郎（Akaho, Shotaro）

国立研究開発法人産業技術総合研究所・人間情報研究部門・研究グループ長

研究者番号：40356340

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,800,000円

研究成果の概要（和文）：機械学習が有効に働くためには入力信号間の距離を的確にとらえることが非常に重要となる。本研究課題では、情報幾何学や再生核ヒルベルト空間理論の枠組みを基本とし、空間に自然な構造を入れることによって機械学習アルゴリズムを改善する試みを行った。応用として、データ数が少ないときに類似の学習問題の結果を融合することによって学習精度の向上をはかる転移学習や、高次元中に埋め込まれた低次元構造の次元を推定する問題に適用し有効性を確認した。

研究成果の概要（英文）：In order for machine learning to work effectively, it is very important to accurately capture the distance between input signals. In this research project, we tried to improve machine learning algorithm by introducing natural structure into space based on the framework of information geometry and reproducing kernel Hilbert space theory. As applications, the effectiveness was confirmed by applying to the problem of transfer learning which improves learning accuracy by synthesizing the results of similar learning problems when the number of data is small, and the problem of estimating the dimension of low dimensional structure embedded in high dimension space.

研究分野：機械学習

キーワード：情報幾何 コーネル法

1. 研究開始当初の背景

近年急速に集積されつつある大規模で多様なデータを解析するために、統計学や計算科学の知見を取り入れた機械学習の手法が発展し、実問題への応用も進められている。

その中でも、サポートベクターマシンに代表されるカーネル法は、入力空間を非線形変換により(一般に高次元の)特徴空間に写像した上で線形の変量解析を行うことによって、非線形モデルを線形モデルの枠組みで構築することを可能にした。

ただし、これまでのところ、カーネル法の利点は入力空間から特徴空間への順方向の場合に限定されていて、一旦特徴空間に写像したものを入力空間に戻す逆方向の推論については確立した手法が存在しない。このような逆方向の推論は多くの実問題において需要の多い問題である。

例えば、ノイズの加わった入力のノイズを除去するという課題がある。この課題に対し、古典的な線形手法である主成分分析では、主成分軸に射影することによってノイズを除去することができる。

一方、主成分分析をカーネル法によって拡張したカーネル主成分分析では、その射影が特徴空間における点として得られるが、それを入力に対応させる逆変換が必要である上に、一般には厳密に対応する入力が存在しない。これは、入力空間全体の像が特徴空間の部分多様体にしか過ぎないことに由来している。

そこで、通常は近似的に、特徴空間上で最も近くに写像される入力を探索する手法が用いられる。それは preimage 問題と呼ばれているが、カーネル法の順方向の単純さに比べてかなり複雑であるため、研究例はきわめて少ない。

さらに、preimage 問題を含む多くのカーネル手法では、入力における距離の構造が特徴空間では大きく異なるにも関わらず、それを考慮していない。例えばカーネル主成分分析では特徴空間において分散が最大となる軸を求めるが、距離の構造が変わっているため、元となる入力空間上では必ずしも散らばりの大きな方向を求めているとは限らない。

代表者と分担者は、これまで画像を元にしたパターン認識やコンピュータビジョンのタスクに対してカーネル手法の適用を試みてきたが、上記のような問題点に直面し、それらの解決を目指す中で、特徴空間の構造を明らかにし、それに基づき、preimage 問題をはじめとするカーネル法を再構築すれば、より自然な結果を出力するデータ解析手法が得られるのではないかとこの着想を得た。

2. 研究の目的

本研究の目的は、カーネル法における逆問題を高い精度で効率的に解くための新たな学習アルゴリズムを構築することである。具体的には、カーネル法で用いられる非線形

な特徴写像の構造を幾何学的に明らかにすることで、入力の構造を反映した自然な評価基準を導出して精度を上げるとともに、逆問題を凸最適化の枠組みで構築することによって計算効率の高い推定アルゴリズムを導出する。さらに、パターン認識やコンピュータビジョンへの応用を例として、実応用における有効性を検証する。

3. 研究の方法

以下の4つの課題に分けて研究を行う

- (1) 特徴空間の幾何学的構造の解明
- (2) 特徴空間の構造を反映した学習アルゴリズムの構築
- (3) アルゴリズムの精度や収束性の理論的解明
- (4) preimage 問題のパターン認識やコンピュータビジョンへの応用における従来手法との比較

このうち、特徴空間の幾何学的構造の解明においては、代表者が近年研究を行っている情報幾何学の観点から、距離や位相の微分幾何構造を明らかにし、学習アルゴリズム構築に有用な知見を得る。

preimage 問題のパターン認識への応用としては、識別の精度を上げるために識別が困難であると考えられる入力パターンをユーザに提示する能動学習を扱う。過去には遺伝的アルゴリズムを用いた計算負荷の高い手法を提案しているが、凸最適化と特徴空間の構造を考慮することにより、計算量と精度の両方を向上させることを目指す。

また、コンピュータビジョンではカーネル法を用いたノンパラメトリックな曲線あてはめの手法を開発し、視覚的により自然なあてはめの実現を目指す。

4. 研究成果

(1) 点と点との間の類似度について、直線度を反映した幾何学量として設計し、その類似度からスペクトラルクラスタリングというクラスタリング手法によってサンプルをクラスタリングする手法を開発した。このクラスタリング手法は魚眼レンズなどから得られるゆがんだ画像からでも安定した直線を抽出することができるという特徴を持つ。提案手法を実画像に適用した実験により既存手法より優れていることを示した。この成果は国際会議 CAIP において採択された。

(2) 再生核ヒルベルト空間上の曲線あてはめ問題について数値実験を行い、入力空間の計量や特徴写像の構造の関係を調べ、主成分分析と劣成分分析の関連性や、高次元になった場合にそれぞれのもつ問題点を明らかにした。具体的には、主成分分析では preimage 問題を解くのが数値的に不安定であることと、なめらかな曲面が得られるとは限らないこと、劣成分分析ではあてはめ曲線の自由度が高すぎてどの曲面を選ぶべきかの明確な

指針がないことが分かった。これらの成果は従来漠然と信じられてきたことを覆す結果であり、国際会議 CAIP に採択され、また国際学会での招待講演を行った。

(3) 複数の情報源に共通して含まれる情報を非線形抽出する手法として用いられるカーネル正準相関分析の改良を行った。通常の方法では、変換の自由度が高すぎるため、元の入力空間の情報とはほとんど無関係な成分が得られることがあるため、入力空間と特徴空間の間の相互情報量を最大化することにより、最近棒識別器に基づく推定法を採用したが、非常に多数の局所最適解があることがわかったためマルコフ連鎖モンテカルロ法の一つである交換法によってより大域的な探索を行って解の改良を行った。人工データについて、カーネル正準相関分析ではうまくちゅうしゅつできない内部構造を抽出することに成功した。この結果は国際会議 ICONIP に採録された。

(4) 研究期間の後半には、情報幾何学による自然な幾何構造に着目した研究を行った。まず、正規分布の空間での曲指数分布あてはめについてアルゴリズムの構築と数値実験を行った。情報幾何学の空間はユークリッド空間ではなく曲がった空間であるため、一意的な射影であっても一般に繰り返し演算を必要とする。そこで情報幾何学で基本的な拡張ピタゴラスの定理に基づき、ロバストな射影の推定法を考案した。これは種々の機械学習の設定に応用可能であり、非負値行列分解や転移学習などの応用についても適用可能であることを示した。非負値行列分解においては、自然言語処理で用いられるトピックモデルと同等のモデルに対し、幾何的に自然な定式化が存在することを示した。また、スパースな基底ベクトルの場合に数値的な不安定性が生じることが問題であったが、提案手法ではそれも回避できる。

(5) 転移学習については、e-混合モデルが最大エントロピー規準などの観点から有効であると考え、さらに柔軟なモデル化のためにノンパラメトリックな設定で推定を行う手法に拡張した。従来手法はノンパラメトリックな設定に対しては適用できないため、提案手法はその意味でも有効である。これらの結果は国際会議 ICONIP や IGAIA で発表した。

(6) 幾何学的な観点から、高次元空間に埋め込まれた低次元多様体構造を抽出する際に重要となる次元推定についても研究を進めた。確率質量の局所的なテイラー展開に基づく拡張により、精度の高い手法を開発した。

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 4 件)

Jun Fujiki, Shotaro Akaho, Flexible Hypersurface Fitting with RBF Kernels, Lecture Notes in Computer Science 8047, 286-293, 2013

DOI 10.1007/978-3-642-40261-6_34

Hideitsu Hino, Jun Fujiki, Shotaro Akaho, Yoshihiko Mochizuki, Noboru Murata, Pairwise Similarity for Line Extraction from Distorted Images, Lecture Notes in Computer Science 8048, 250-257, 2013

DOI 10.1007/978-3-642-40246-3_31

Takamitsu Araki, Shotaro Akaho, A Kernel Method to Extract Common Features Based on Mutual Information, Lecture Notes in Computer Science 8835, 26-34, 2014

DOI 10.1007/978-3-319-12640-1_4

Tomoaki Chiba, Hideitsu Hino, Shotaro Akaho, Noboru Murata, Time-Varying Transition Probability Matrix Estimation and Its Application to Brand Share Analysis, PLOS ONE, 12, e0169981, 2016

DOI 10.1371/journal.pone.0169981

[学会発表](計 8 件)

Shotaro Akaho, On the robust nonlinear curve fitting, Workshop on Mathematical Approaches to Large-Dimensional Data Analysis, March 2014, 東京

赤穂昭太郎, 機械学習におけるコストをめぐる話題, 電子情報通信学会 IBISML 研究会, 2013 年 9 月, 鳥取

奈良寧々花, 高野健, 日野英逸, 赤穂昭太郎, 村田昇, 非負値行列分解の情報幾何, 情報論的学習理論ワークショップ, 2015 年 11 月, つくば

高野健, 日野英逸, 赤穂昭太郎, 村田昇, ノンパラメトリックモデルの e 混合推定とその応用, 情報論的学習理論ワークショップ, 2015 年 11 月, つくば

兼村厚範, 大成弘子, 鹿内学, 橋本将崇, 赤穂昭太郎, 能力テスト得点の非負行列分解, 情報論的学習理論ワークショップ, 2015 年 11 月, つくば

藤木淳, 赤穂昭太郎, ガウス核を用いた柔軟な超曲面あてはめに向けて, 情報論的学習理論ワークショップ, 2015 年 11 月, つくば

Shotaro Akaho, Hideitsu Hino, Neneka Nara, Ken Takano, Noboru Murata, A Projection Algorithm Based on the Pythagorean Theorem and its Applications, Information Geometry and its Applications IV (IGAIA IV), June 2016, チェコ

日野英逸, 赤穂昭太郎, 藤木淳, 村田昇,
重回帰を用いた高次局所潜在的次元推定,
電子情報通信学会 IBISML 研究会, 2016
年9月, 富山

6. 研究組織

(1) 研究代表者

赤穂昭太郎 (AKAHO, Shotaro)
国立研究開発法人産業技術総合研究所・人
間情報研究部門・研究グループ長
研究者番号: 40356340

(2) 研究分担者

藤木淳 (FUJIKI, Jun)
福岡大学・理学部・准教授
研究者番号: 10357907