非凸スパース正則化に対する確率伝搬法とその収束条件 坂田綾香(統計数理研究所), 許インイン(Aalto university)

Linear regression with nonconvex sparse penalty

$$\min_{\boldsymbol{x}} \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_{2}^{2} + J_{\lambda,a}(\boldsymbol{x}) \right\}$$

2

4

SCAD penalty

 $a = 5, \lambda = 1$

-2

0 х

D2-1

3

2.5

2

 $\frac{x}{h}$ 1.5

0.5

0

-6

 $a = 3, \lambda = 1$

 $a = 2, \lambda = 1$

-4

- ▶ $y \in \mathbb{R}^M$: Response variable
- \succ $A \in \mathbb{R}^{M \times N}$: Predictor matrix

▶
$$x \in \mathbb{R}^N$$
: Regression coefficient

$$J_{\lambda,a}(x) = \begin{cases} \lambda |x| & (|x| \le \lambda) \\ -\frac{x^2 - 2a\lambda |x| + \lambda^2}{2(a-1)} & (\lambda < |x| \le a\lambda) \\ \frac{(a+1)\lambda^2}{2} & (|x| > a\lambda) \end{cases}$$

a and λ are parameters that control the form of penalty.

In particular, *a* contributes to the nonconvexity.



D2-1 **非凸スパース正則化に対する確率伝搬法とその収束条件** 坂田綾香(統計数理研究所), 許インイン(Aalto university)

What we did

- Construction of Approximate Message Passing (AMP) algorithm
- Derivation of the necessary & sufficient condition for the stability of AMP
 This condition is seems to be valid for coordinate descent (CD).
- ✓ Quantification of the performance of SCAD by asymptotic analysis for AMP



An unbiased estimator of the prediction error is also calculated by AMP.





Learning Efficient Tensor Representation

with Ring Structure Networks

Qibin Zhao (D. Eng.)

Tensor Learning Unit, RIKEN Center for Advanced Intelligence Project (AIP)

- Tensor train can provide an efficient representation of high-order tensor data, with number of parameter $\mathcal{O}(r^2nd)$.
- We propose a generalized model of tensor train, which is a circular multilinear products of a sequence of 3rd-oder core tensors.
- Several algorithms are developed for tensor ring decomposition which includes block-wise ALS and SGD with high scalability.

102 ...



Tensor Ring Decomposition

Scalar representation

$$T(i_1, i_2, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_d = 1}^{r_1, \dots, r_d} \prod_{k=1}^d Z_k(\alpha_k, i_k, \alpha_{k+1}).$$

Slice representation

$$T(i_1, i_2, \ldots, i_d) = \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{Z}_1(i_1) \mathbf{Z}_2(i_2) \cdots \mathbf{Z}_d(i_d) \right\},$$

Algorithms:

Sequential SVDs

$$T_{\langle 1 \rangle}(i_1, \overline{i_2 \cdots i_d}) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} Z^{\leq 1}(i_1, \overline{\alpha_1 \alpha_2}) Z^{>1}(\overline{\alpha_1 \alpha_2}, \overline{i_2 \cdots i_d}).$$
$$Z^{>1}(\overline{\alpha_2 i_2}, \overline{i_3 \cdots i_d \alpha_1}) = \sum_{\alpha_3} Z_2(\overline{\alpha_2 i_2}, \alpha_3) Z^{>2}(\alpha_3, \overline{i_3 \cdots i_d \alpha_1}).$$

ALS algorithm

$$\mathbf{T}_{[k]} = \mathbf{Z}_{k(2)} \left(\mathbf{Z}_{[2]}^{\neq k} \right)^T,$$



$$T(i_1, i_2, \dots, i_d) = \text{Tr}(\mathbf{Z}_2(i_2), \mathbf{Z}_3(i_3), \dots, \mathbf{Z}_d(i_d), \mathbf{Z}_1(i_1))$$

= $\dots = \text{Tr}(\mathbf{Z}_d(i_d), \mathbf{Z}_1(i_1), \dots, \mathbf{Z}_{d-1}(i_{d-1})).$ (4)
Circular dimensional
permutation invariance

Block-wise ALS algorithm



小宮山純平(東大)本多淳也(東大)武田朗子(統数研)



- □ K個のインターネット広告をL < K個の枠に配置</p>
- クリック率=θ_iκ_l: {θ_i}はそれぞれの広告の良さ、 {κ_l}
 はそれぞれの枠の良さ
 図: 広告配置
- {θ_i}, {κ_l}をオンライン
 学習し最適配置を決定

	既存研究	本研究
$\{\theta_i\}$	未知	未知
$\{\kappa_l\}$	既知	未知



小宮山純平(東大)本多淳也(東大)武田朗子(統数研)



- □ K個のインターネット広告をL < K個の枠に配置</p>
- クリック率=θ_iκ_l: {θ_i}はそれぞれの広告の良さ、 {κ_l}
 はそれぞれの枠の良さ
 図: 広告配置
- {θ_i}, {κ_l}をオンライン
 学習し最適配置を決定

	既存研究	本研究
$\{\theta_i\}$	未知	未知
$\{\kappa_l\}$	既知	未知



つ2-4 Delayed Feedback を考慮した予測モデルの提案 **会 CyberAgent**。

今井優作 (株式会社サイバーエージェント Al Lab) 吉川友也 (千葉工業大学 人工知能・ソフトウェア技術研究センター)



予測モデルの構築にあたり目的変数が確定するまでに時間遅れが生じる問題がある
↓
Delayed Feedback Model は上記の問題に対して提案された予測モデルであり
2つのパラメトリックな確率モデル (ロジスティック回帰と指数分布) で表現される
↓

既存モデルでは時間遅れが指数分布に従うとしていたが、どのような分布が 適切かはデータ依存であるため特定の分布を仮定しないことが望ましい 本研究ではカーネル密度推定を拡張することで、時間遅れ分布を ノンパラメトリックに表現できる Delayed Feedback Model を提案する



$$h(d; \boldsymbol{x}) = \sum_{\ell=1}^{m} \alpha(\boldsymbol{x}, \ell) \cdot k(t_{\ell}, d)$$

m: カーネル関数の数 *t*_ℓ: ℓ 番目のカーネル関数の中心点

つ2-4 Delayed Feedback を考慮した予測モデルの提案 **会** CyberAgent.

今井優作 (株式会社サイバーエージェント Al Lab) 吉川友也 (千葉工業大学 人工知能・ソフトウェア技術研究センター)



予測モデルの構築にあたり目的変数が確定するまでに時間遅れが生じる問題がある ↓ Delayed Feedback Model は上記の問題に対して提案された予測モデルであり 2つのパラメトリックな確率モデル (ロジスティック回帰と指数分布) で表現される ↓ 既存モデルでは時間遅れが指数分布に従うとしていたが、どのような分布が

適切かはデータ依存であるため特定の分布を仮定しないことが望ましい 本研究では,時間遅れの分布に対してカーネル密度推定を用いることで ノンパラメトリックに分布を表現できるように拡張する



$$h(d; \boldsymbol{x}) = \sum_{\ell=1}^{m} \alpha(\boldsymbol{x}, \ell) \cdot k(t_{\ell}, d)$$

m: カーネル関数の数 *t*_ℓ: ℓ 番目のカーネル関数の中心点

D2-5: 重み付き射影法を使ったKernel Regressionによる予算付き追記学習 中部大学 山内康一郎



Limited General Regression Neural Network Plus (LGRNNPlus)

射影する度合いを最適に制御し、追記学習に伴う破壊的忘却現象を抑える

不必要な記憶・不要不急な記憶を適応的に忘却し、 メモリ消費量を抑える

Regret boundの理論解析 (kernel Perceptron版のみ)



D2-5: 重み付き射影法を使ったKernel Regressionによる予算付き追記学習 中部大学 山内康一郎



Limited General Regression Neural Network Plus (LGRNNPlus)

射影する度合いを最適に制御し、追記学習に伴う破壊的忘却現象を抑える

不必要な記憶・不要不急な記憶を適応的に忘却し、 メモリ消費量を抑える

Regret boundの理論解析 (kernel Perceptron版のみ)



D2-6 松田源立(東京大学) 適応的独立成分分析による ノイズ除去と特徴抽出

◈ 独立成分分析(ICA): 元信号分布の非ガウス性を 利用し、観測信号から元信号を推定する手法

 ◆ <u>適応的ICA: 非ガウス性の程度を適応的に評価し</u> <u>ガウス分布も統一的に評価可能</u>

D2-6 松田源立(東京大学) 適応的独立成分分析による ノイズ除去と特徴抽出

◈ 独立成分分析(ICA): 元信号分布の非ガウス性を 利用し、観測信号から元信号を推定する手法

 ◆ <u>適応的ICA: 非ガウス性の程度を適応的に評価し</u> <u>ガウス分布も統一的に評価可能</u>

D2-7:ベイズ推論による生成物時間分析を用いた触媒反応機構の解明

安倍雅史¹,水野雄太¹,板子健太郎²,中西(大野)義典^{1,3},佐々木岳彦²,福島孝治¹ 1:東大総合文化,2:東大新領域,3:JSTさきがけ

生成物時間分析(TAP)実験の概要

・触媒相での反応ガス濃度の時間変化から触媒の反応機構を解明





目的:ガスフローの時間変化からの触媒反応機構推定 部分観測(時間)から全体構造(時空間)へ



D2-8 一般化加法モデルの 全変動ノルムによる正則化

東京大学 情報理工学系研究科 松島 慎

D2-8:一般化加法モデルの全変動ノルムによる正則化(松島 慎)

 一般化加法モデル(Generalized Additive Model, GAM) [Hastie and Tibshirani 1986] $f(x) = \sum W_j(x_j)$ j=1..d 全変動ノルム(Total Variation Norm, TV-norm) $\|W(\cdot)\|_{TV} = \sup_{(x_n): \text{ increasing }} \sum_{n \in \mathbb{N}} |W(x_n) - W(x_{n+1})|$ 本研究:これらによる正則化つき経験リスク最小化 $\underset{f(x) = \sum_{j=1..d} w_j(x_j)}{\text{minimize}} \sum_{i=1...m} \log \left(1 + \exp(-y_i f(x_i))\right) + \lambda \sum_{j=1...d} \left\|w_j(\cdot)\|_{TV}\right\|_{TV}$ 学習 学習アルゴリズム Trainer Data 1-δ以上の確率で **Feature Cache** Writer Coordinate Feature $\left\{\vec{\phi}_{j,s,t}\right\}_{j,s,t}$ X Descent $\mathbb{E}_{x,y}\ell(\hat{f}(x),y) \leq \ell^* + \frac{2\rho Cd}{\sqrt{m}} + \frac{5C}{2}\sqrt{\frac{2\log(2/\delta)}{m}}$ Selection • Repeat • Repeat – Find argmax J' - Randomly choose (jst) in Feature Cache – Push it in Feature $\ell^* = \inf_{f \in GAM(C)} \mathbb{E}_{x,y}[\ell(x, y)] \quad \ell : \rho \text{-Lipchitz}$ - Perform GCD Cache - If w_{ist} stayed at 0, - If small enough, then $\hat{f} = \operatorname{argmin}_{f \in \operatorname{GAM}(C)} \frac{1}{m} \sum \ell(f(x_i), y_i)$ then delete it from break **Feature Cache**

I=1..*m*

関数微分法による深層ニューラルネットワークの構築 D2-9 ニ反田篤史 鈴木大慈 (東京大学)

・識別問題: ν: 真の分布, ν_X: 特徴について周辺分布 分類平面w ∈ ℝ^d と特徴抽出 φ ∈ L²(ν_X)を学習

 $min \mathcal{L}(\phi, w) = \mathbb{E}_{\nu}[l(\phi(x), y, w)] + \lambda R(\phi, w)$ • **関数微分法**: $L^{2}(\nu_{X})$ での微分をRKHSに射影し更新 $\phi \leftarrow \phi - \eta T_{k_{\phi}} \nabla_{\phi} \mathcal{L}(\phi) \left(\mathcal{L}(\phi) = \min_{w} \mathcal{L}(\phi, w)\right)$ ※真の分布による反復、実際は経験分布による反復で近似 **ResNetの層追加に相当**

 ・収束解析: 無限次元空間L²(v_x)での学習可能性を示す 最適化の観点から真の反復の収束解析 経験分布による誤差をバウンドし汎化性解析

関数微分法による深層ニューラルネットワークの構築 D2-9 ニ反田篤史 鈴木大慈 (東京大学)

・識別問題: ν: 真の分布, ν_X: 特徴について周辺分布 分類平面w ∈ ℝ^d と特徴抽出 φ ∈ L²(ν_X)を学習

 $min \mathcal{L}(\phi, w) = \mathbb{E}_{\nu}[l(\phi(x), y, w)] + \lambda R(\phi, w)$ • **関数微分法**: $L^{2}(\nu_{X})$ での微分をRKHSに射影し更新 $\phi \leftarrow \phi - \eta T_{k_{\phi}} \nabla_{\phi} \mathcal{L}(\phi) \left(\mathcal{L}(\phi) = \min_{w} \mathcal{L}(\phi, w)\right)$ ※真の分布による反復、実際は経験分布による反復で近似 **ResNetの層追加に相当**

 ・収束解析: 無限次元空間L²(v_x)での学習可能性を示す 最適化の観点から真の反復の収束解析 経験分布による誤差をバウンドし汎化性解析

D2-10 Estimating Piecewise Monotone Functions on Graphs Kentaro Minami (UT), Fumiyasu Komaki (UT/RIKEN)

Setting: Given a DAG G = (V, E), consider the problem of estimating piecewise monotone functions on G.

Approach: DAG regularization

Results: (1) Sharp oracle inequality (i.e. interpretable risk bound)

- (2) Provable sub-optimality of a famous existing method
- (3) Parameter selection criterion for submodular regularization

Keywords: Isotonic regression, Submodular regularization, Degrees of freedom





D2-10 Estimating Piecewise Monotone Functions on Graphs Kentaro Minami (UT), Fumiyasu Komaki (UT/RIKEN)

Setting: Given a DAG G = (V, E), consider the problem of estimating piecewise monotone functions on G.

Approach: DAG regularization

Results: (1) Sharp oracle inequality (i.e. interpretable risk bound)

- (2) Provable sub-optimality of a famous existing method
- (3) Parameter selection criterion for submodular regularization

Keywords: Isotonic regression, Submodular regularization, Degrees of freedom





深層混合モデルによるクラスタリング D2-11 林楓 (立命館), 岩田具治 (NTT CS研), 谷口忠大 (立命館) Goal 非ガウス型のクラスタ形状をもつデータに対するクラスタリング Method モデル クラス ▶ 深層混合モデル = 混合確率モデル + VAE $\boldsymbol{x}_n \stackrel{\mathrm{iid}}{\sim} N(\boldsymbol{\mu}_{z_n}, \boldsymbol{\Sigma}_{z_n}),$ $z_n \stackrel{\mathrm{iid}}{\sim} Categorical(\boldsymbol{\pi}),$ 潜在ベクトル Х $\boldsymbol{y}_n | \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{\gamma} \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(\mu(\boldsymbol{x}_n; \boldsymbol{\gamma}), \Sigma(\boldsymbol{x}_n; \boldsymbol{\gamma}))$ 近似推論 ΝN 非線形変換 $\operatorname{argmax}_{\gamma,\phi} \left\{ \sum_{n=1}^{N} \int q(\boldsymbol{x}_{n} | \boldsymbol{y}_{n}) \ln p(\boldsymbol{y}_{n} | \boldsymbol{x}_{n}, \gamma) \sum_{k=1}^{K} \pi_{k} p(\boldsymbol{x}_{n} | \boldsymbol{\mu}_{k}, \boldsymbol{\Sigma}_{k}) d\boldsymbol{x}_{n} \right\}$ • 下限を最大化するpとqのパラメータを求める 観測データ



D2-12 クラウドソーシングを用いた 半教師あり学習のための深層生成モデル

新恭兵(北大),小山聡(北大/理研AIP),栗原正仁(北大)

背景・問題設定

比較的低コストでラベル付きデータを集める方法としてクラウドソーシングが注目

- ・ 窓ワーカーの作業品質にはばらつきあり

→クラウドソーシングで得られたラベル付きデータ + ラベルなしデータからの学習

提案手法

ワーカーのラベリング過程に関する生成モデルに 基づいた方法を提案

- 真のラベルと潜在特徴を潜在変数として導入
- データの特徴ベクトルに関する分布も導入し, 深層ニューラルネットを用いて表現

実データ・シミュレーションデータを用いた実験で 既存手法を上回る性能 ワーカーのラベリングの特性を正しく学習している ことも確認

学生優秀プレゼンテーション賞対象



D2-12 クラウドソーシングを用いた 半教師あり学習のための深層生成モデル

新恭兵(北大),小山聡(北大/理研AIP),栗原正仁(北大)

背景・問題設定

比較的低コストでラベル付きデータを集める方法としてクラウドソーシングが注目

- ・ 窓ワーカーの作業品質にはばらつきあり

→クラウドソーシングで得られたラベル付きデータ + ラベルなしデータからの学習

提案手法

ワーカーのラベリング過程に関する生成モデルに 基づいた方法を提案

- 真のラベルと潜在特徴を潜在変数として導入
- データの特徴ベクトルに関する分布も導入し, 深層ニューラルネットを用いて表現

実データ・シミュレーションデータを用いた実験で 既存手法を上回る性能 ワーカーのラベリングの特性を正しく学習している ことも確認

学生優秀プレゼンテーション賞対象



D2-13 学生優秀プレゼンテーション賞対象 深層強化学習による車両と交通システムの最適化 大橋耕也(東エ大),幸島匡宏,堤田恭太,松林達史,戸田浩之(NTT) ・渋滞のない世界を目指し,深層強化学習の代表的な手法 Deep Q-Networkを用いた交通制御問題に取組みました.



 信号と車両の同時最適化を行うことで,従来法と比較して平均 待ち時間を最大約67%削減できるという実験結果を得ました.

動画用意しています!動画と技術詳細はD2-13まで!

D2-13 学生優秀プレゼンテーション賞対象 深層強化学習による車両と交通システムの最適化 大橋耕也(東エ大),幸島匡宏,堤田恭太,松林達史,戸田浩之(NTT) ・渋滞のない世界を目指し,深層強化学習の代表的な手法 Deep Q-Networkを用いた交通制御問題に取組みました.



 信号と車両の同時最適化を行うことで,従来法と比較して平均 待ち時間を最大約67%削減できるという実験結果を得ました.

動画用意しています!動画と技術詳細はD2-13まで!

^{学生優秀プレゼンテーション賞対象} [D2-14]**ガウス過程を用いたイオニクス結晶中における** 伝導キャリアの準安定構造探索

椙田大輔(名工大), 豊浦和明(京大), 金森研太(名工大), 竹内一郎(名工大)

準安定構造を材料科学的な知見なしに同定することは困難

問題



t-LaNbO4のポテンシャルエネルギー曲面

専門的知識なしに準安定構造を探索したい

提案:確率モデルに基づいた選択的探索



【D2-15】 学生優秀プレゼンテーション賞対象

単語辞書を併用した単語分割しない単語埋め込み

<u>Geewook Kim^{1,4} 福井 一輝^{2,4} 羽田 哲也^{3,4} 下平 英寿^{2,4}</u>

1. 京都大学 工学部 2. 京都大学大学院 情報学研究科 3. 大阪大学大学院 基礎工学研究科 4. 理化学研究所 革新知能統合研究センター

単語分割しない単語埋め込みの性能を 単語辞書と単語スコアの導入により向上させた



【D2-15】 学生優秀プレゼンテーション賞対象

単語辞書を併用した単語分割しない単語埋め込み

<u>Geewook Kim^{1,4} 福井 一輝^{2,4} 羽田 哲也^{3,4} 下平 英寿^{2,4}</u>

1. 京都大学 工学部 2. 京都大学大学院 情報学研究科 3. 大阪大学大学院 基礎工学研究科 4. 理化学研究所 革新知能統合研究センター

単語分割しない単語埋め込みの性能を 単語辞書と単語スコアの導入により向上させた





[1] Y. LeCun, L. Bottou, Y. Bengio, and P. Haffner. Gradient-based learning applied to document recognition. Proceedings of the IEEE, Vol. 86 (11), pp.2278-2324. 1998.



NTTコミュニケーション科学基礎研究所 渡邊千紘, 平松薫, 柏野邦夫



【手法】学習済みニューラルネットの結合関係を観測データとして、<u>似た結合パターンを</u> 持つユニットを分類(コミュニティ推定)</u>することにより、大まかな推論の構造を抽出_[2]



[2] 渡邊千紘, 平松薫, 柏野邦夫. 多層ニューラルネットにおける正負の結合重みに基づく大局構造抽出. 情報科学技術フォーラム(FIT2017), 2017年.

D2-17

Fully adaptive algorithm for pure exploration in linear bandits 徐 立元^{1,2},本多 淳也^{1,2},杉山 将^{2,1} 学生発表









D2-17

Fully adaptive algorithm for pure exploration in linear bandits 徐 立元^{1,2},本多 淳也^{1,2},杉山 将^{2,1} 学生発表









共鳴現象を用いた自己組織化リザーバコンピューティング

金澤 直輝, 山根 敏志 (IBM Research Tokyo)

Proposal: Model of hardware implementation of self-organizing reservoir (SOR)
 Approach: Exploiting Lorentzian nonlinearity induced by magnetic resonance

Reservoir Computing System:

D2-18

Synapse:



共鳴現象を用いた自己組織化リザーバコンピューティング

金澤 直輝, 山根 敏志 (IBM Research Tokyo)

Proposal: Model of hardware implementation of self-organizing reservoir (SOR)
 Approach: Exploiting Lorentzian nonlinearity induced by magnetic resonance

Reservoir Computing System:

D2-18

Synapse:




制限ボルツマンマシンの学習過程におけるエンタングルメントエントロ ピーの振る舞いを調べる

エンタングルメントエントロピー…量子力学系の情報量を定量化する





制限ボルツマンマシンの学習過程におけるエンタングルメントエントロ ピーの振る舞いを調べる

エンタングルメントエントロピー…量子力学系の情報量を定量化する



D2-20: 経験ベイズ法による行列・テンソル補完

<u>松田 孟留(東京大・情報理工)</u>,駒木 文保(東京大・情報理工&理研・脳センター)

$$M \sim N_{p,q}(0, I_p, \Sigma)$$
$$Y \mid M \sim N_{p,q}(M, \sigma^2 I_p, I_q)$$

We estimate *M* from observed entries of *Y* by using the EM algorithm.

D2-20: 経験ベイズ法による行列・テンソル補完

<u>松田 孟留(東京大・情報理工)</u>,駒木 文保(東京大・情報理工&理研・脳センター)

$$M \sim N_{p,q}(0, I_p, \Sigma)$$
$$Y \mid M \sim N_{p,q}(M, \sigma^2 I_p, I_q)$$

We estimate *M* from observed entries of *Y* by using the EM algorithm.

BEFORE





Created by Knut M. Syntad from Noun Project

D2-21:

Bi-Module PathNet: ネットワーク構造の汎用性と 学習の計算量の改善に向けた転移学習アルゴリズム

Bi-Module PathNet



D2-21:

Bi-Module PathNet: ネットワーク構造の汎用性と 学習の計算量の改善に向けた転移学習アルゴリズム 今井俊輔, 延原肇(筑波大学大学院)

D2 グレイゾーン幅を利用した悪腕存在チェックアルゴリズム 22 田畑公次(北大)中村篤祥(北大)本多淳也(東大)小松崎民樹(北大)



D2 グレイゾーン幅を利用した悪腕存在チェックアルゴリズム 22 田畑公次(北大)中村篤祥(北大)本多淳也(東大)小松崎民樹(北大)





中村 拓磨, 上月 正貴, 後藤 亮介(VASILY, Inc.)

ブランドの意味表現を判別/検索タスクに利用



© 2017 VASILY,Inc.

D2-23 ブランドコンセプトを反映したファッションアイテム類似検索

中村 拓磨, 上月 正貴, 後藤 亮介(VASILY, Inc.)



- 判別タスクに関して、学習サンプル数が小 さいラベルの判別をPrecisionの観点で改善
- 画像検索タスクに関して、意味内容が近い 画像を返すことに成功



© 2017 VASILY, Inc.

A Monotonic Policy Improvement from On- and Off-Policy Mixture Data 岩城諒 (Ryo Iwaki) 浅田稔 (Minoru Asada) 大阪大学

- Two desirable properties for Reinforcement Learning algorithms:
 Monotonic Policy Improvement and Off-policy learning.
- Lower bounding the performance improvement of the update with on- and off-policy mixture samples.
 Trust Region Policy Optimization + Experience Replay
 - Evaluation: two classical benchmark problems.



学生優秀プレゼンテーション賞対象

A Monotonic Policy Improvement from On- and Off-Policy Mixture Data 岩城諒 (Ryo Iwaki) 浅田稔 (Minoru Asada) 大阪大学

- Two desirable properties for Reinforcement Learning algorithms:
 Monotonic Policy Improvement and Off-policy learning.
- Lower bounding the performance improvement of the update with on- and off-policy mixture samples.
 Trust Region Policy Optimization + Experience Replay
 - Evaluation: two classical benchmark problems.



学生優秀プレゼンテーション賞対象

D2-25: ベイズ最適化を用いた 交通流信号制御の最適化 ^{()伊藤秀剛, 堤田恭太, 松林達史, 戸田浩之(NTT)}

●通行時間を減らしたい ⇒複数の信号を「まとめて制御」 どの信号をまとめれば良いのか?



信号をまとめる問題を「パラメータ空間の選択」 とみなしてベイズ最適化を適用する手法を提案

D2-25: ベイズ最適化を用いた 交通流信号制御の最適化 ^{()伊藤秀剛, 堤田恭太, 松林達史, 戸田浩之(NTT)}

●通行時間を減らしたい ⇒複数の信号を「まとめて制御」 どの信号をまとめれば良いのか?



信号をまとめる問題を「パラメータ空間の選択」 とみなしてベイズ最適化を適用する手法を提案



ベイズ機械学習によるテキストの論理構造抽出 *下涼, 宇都雅輝, 植野真臣(電気通信大学)

D2-26:





ベイズ機械学習によるテキストの論理構造抽出 *下涼, 宇都雅輝, 植野真臣(電気通信大学)

D2-26:



D2-27 サービス

サービス運用中のRNNモデルにおける パラメータ更新時の問題点とその緩和法

岩瀬智亮 大倉俊平(ヤフー株式会社)



D2-27 サービス

サービス運用中のRNNモデルにおける パラメータ更新時の問題点とその緩和法

岩瀬智亮 大倉俊平(ヤフー株式会社)



[D2-28] ソフトウェア依存関係ネットワークにおける ベイズ的コミュニティ抽出

渡邊裕貴 寺田実 (電気通信大学) 【学生優秀プレゼンテーション賞対象】

目的 オープンソースソフトウェアの分野における,ソフトウェアパッケージの複雑な依存関係から大局的な構造を抽出する.



[D2-28] ソフトウェア依存関係ネットワークにおける ベイズ的コミュニティ抽出

渡邊裕貴 寺田実 (電気通信大学) 【学生優秀プレゼンテーション賞対象】



ハイパーパラメータとコミュニティ数の設定法

 $oldsymbol{lpha}, C$:情報量規準_[2]に基づいて設定 $oldsymbol{eta}^{(1)}, oldsymbol{eta}^{(2)}$:観測データの次数分布から設定_[3]

WAIC =
$$-\frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \ln \left\{ \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \Pr(A_i | w_k) \right\} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \left[\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \left\{ \ln \Pr(A_i | w_k) \right\}^2 - \left\{ \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \ln \Pr(A_i | w_k) \right\}^2 \right]$$

Jiao Wang and C-H Lai. Detecting groups of similar components in complex networks. New J. Phys., Vol. 10, 123023, 2008.
 Sumio Watanabe, Asymptotic Equivalence of Bayes Cross Validation and Widely Applicable Information Criterion in Singular Learning Theory JMLR, Vol. 11, pp.3571-3594, 2010.
 原田尚幸, 竹内一郎, 中野良平. 次数分布に基づく事前情報を用いた複雑ネットワークのクラスタリング. 信学技報, Vol. 108, No. 372, NC2008-73, pp. 1–6, 2008.

D2-29:半教師あり学習による分子の物性予測 ^{グエンハイ(京大), 大野 健太(PFN), 前田 新一(PFN)</sub>}

分子のグラフ情報(原子vと原子間の結合関係e(v,w)) をもとにした分子の物性予測

<u>アプローチ</u> グラフからの階層的な特徴量抽出 (Neural message passingと同様に周辺のノードの情報から特徴抽出)

ind bonds

nformation

of atom

半教師あり学習 (グラフマイニングの問題に対して初)

$$h_{v}^{l+1} = \sigma \left(h_{v}^{l} + \sum_{w \in N(v)} H_{e(v,w)} h_{w}^{l} \right)$$
$$y(\boldsymbol{h}_{m}) = NN \left(\sum_{l=1}^{L} \sum_{v \in V_{m}} f(h_{v}^{l}) \right)$$

Preferred Networks

目的

 h_v^l : 階層/での原子v周辺の特徴量 $y(\boldsymbol{h}_m)$: 特徴量 \boldsymbol{h}_m を使った分子mの物性予測値



 $y(\mathbf{h}_m)$

2

計算機実験

・ 特徴量抽出の手法として優秀

	教師無し学習による特徴抽出手法						
		node2vec	sub2vec	graph2vec	WL kernel	Deep WL kernel	提案法
データ セット	MUTAG	72.63±10.2	61.05±15.80	83.15±9.25	80.63±3.07	82.95±1.96	86.46±5.97
	PTC	58.85±8.00	59.99±6.38	60.17±6.86	59.61±2.79	59.04±1.09	62.86±5.71

・ 半教師あり学習は有用





変化点検知において満たしたい性質:

変化点をオンラインで早期に同定 & 誤検出数を有限に抑える保証

本研究

D2-30

- 情報論的に可変窓サイズを最適設計
 - ・・・「MDL変化統計量」の計算
 - → 変化点をデータ圧縮の分割点として推定
- 誤検知を無限に起こす確率を上から抑える → 最適な閾値パラメータの値を決定
- 進最適な計算量でのアルゴリズムの構成



(学牛優秀プレゼンテーション嘗対象)

*本研究はJST-CRESTの一部として行われた



変化点検知において満たしたい性質:

変化点をオンラインで早期に同定 & 誤検出数を有限に抑える保証

本研究

D2-30

- 情報論的に可変窓サイズを最適設計
 - ・・・「MDL変化統計量」の計算
 - → 変化点をデータ圧縮の分割点として推定
- 誤検知を無限に起こす確率を上から抑える → 最適な閾値パラメータの値を決定
- 進最適な計算量でのアルゴリズムの構成



(学牛優秀プレゼンテーション嘗対象)

*本研究はJST-CRESTの一部として行われた



カーネル正準相関分析を用いたデータ融合法の提案

○光廣 正基*, 星野 崇宏**

* 慶應義塾大学大学院経済学研究科D1

** 慶應義塾大学経済学部/理化学研究所革新知能統合研究センター

複数の多変量データを縮約して統合する場合, Z1と Y11 のように各データの個体が共通していたり,教師ありでデータ間が紐づいていたりすることが多い



2つの異なる情報源から取得した教師なしの多変量データ X_1, X_2 の融合法を提案

STEP1: $Z_1 \ge Z_2$ が共通の低次元空間に縮約されるように $(Z_1, Y_{11}) \ge (Z_2, Y_{22})$ のそれぞれにカーネル正準相関分析法を適用し,各正準変量を同時推定する

STEP2:共変量側の正準変量間でマッチングし, 欠測変量を予測する

共変量

アウトカム変数



カーネル正準相関分析を用いたデータ融合法の提案

○光廣 正基*, 星野 崇宏**

* 慶應義塾大学大学院経済学研究科D1

** 慶應義塾大学経済学部/理化学研究所革新知能統合研究センター

複数の多変量データを縮約して統合する場合, Z1と Y11 のように各データの個体が共通していたり,教師ありでデータ間が紐づいていたりすることが多い



2つの異なる情報源から取得した教師なしの多変量データ X_1, X_2 の融合法を提案

STEP1: $Z_1 \ge Z_2$ が共通の低次元空間に縮約されるように $(Z_1, Y_{11}) \ge (Z_2, Y_{22})$ のそれぞれにカーネル正準相関分析法を適用し,各正準変量を同時推定する

STEP2:共変量側の正準変量間でマッチングし, 欠測変量を予測する

共変量

アウトカム変数





D2-33 A Study on the Performance of DDPG (Deep Deterministic Policy Gradiant) 洪青(筑波大),谷村勇輔(産総研/筑波大),中田秀基(産総研/筑波大)

In order to prove the performance of DDPG in continuous and high-dimension environment (like car games or auto-drive system) we setup a simplified virtual environment and train the model to accomplish a task (break boxes). The result shows that the performance of the DDPG is good way to control continuous action spaces.



High-Dimension action space LIS(base on unity3d)







Performance after trainning 2hours

D2-33 A Study on the Performance of DDPG (Deep Deterministic Policy Gradiant) 洪青(筑波大),谷村勇輔(産総研/筑波大),中田秀基(産総研/筑波大)

In order to prove the performance of DDPG in continuous and high-dimension environment (like car games or auto-drive system) we setup a simplified virtual environment and train the model to accomplish a task (break boxes). The result shows that the performance of the DDPG is good way to control continuous action spaces.



High-Dimension action space LIS(base on unity3d)







Performance after trainning 2hours

D2-34. 収益分布推定の不確実性に基づく効率的な探索法 ^{学生発表} 野口裕貴(慶応大), 楠本充(Preferred Networks), 前田新一(Preferred Networks)

目的: 強化学習における効率的な探索の手法

収益Rの分布化 → 多項分布 分布の不確実性の表現 → ディリクレ分布



ディリクレ分布の更新 p(R | D) ∝ p(r_t|s_a,a_t, R)^βp(R) 収益 R=Σγ^{t-1}r_t

収益の不確実性に基づく探索 **Bayesian UCB** (Bayesian Upper Confidence Bound) p(R|D)action1 各分布のN%の値 action2 к 各行動の収益分布 価値の不確実性が高い行動を優先 探索を促す











ベースライン (ディリクレ分布 + epsilon-greedy)

ランダムで報酬=1に 辿り着く確率:0.2¹² = 4e-9 ランダムでは事実上、**到達不能** greedy行動は更に 右下への探索を困難に









NTT Confidential

山中友貴, 高橋大志, 山田真徳 (NTT)

D2-35:密度推定器を用いた

■ VAE等の確率密度推定器を用いた教師なし異常検知 □ 少数データを無視して学習しがち

確率的ホワイトリスト生成による異常検知





VAEにより推定された分布

データ数が少ない分布はうまく学習できず誤検知の原因に



※赤青緑の違いはスケールの違い



NTT Confidential

山中友貴, 高橋大志, 山田真徳 (NTT)

VAEとクラスタリング手法を組み合わせ、 少数データをも精度良く学習できるシステムを提案

提案システム



少数データの分布も精度良く推定し誤検知を低減



Copyright©2017 NTT Corp. All Rights Reserved.

観測が制限されたオンラインスパース線形回帰問題 に対する効率的アルゴリズム [D2-36]

伊藤 伸志(NEC) 波多野 大督(NII) 澄田 範奈(NII) 矢部 顕大(NEC) 福永 拓郎(JSTさきがけ) 垣村 尚徳(慶應義塾大学) 河原林 健一(NII)

問題設定

- 入力パラメータ k:
 観測可能な特徴量の数
- 入力データ(逐次的入力):





]標

リグレット R_T をできるだけ小さくしたい



既存研究

非実用的

- 劣線形リグレット(R_T = O(T^{1–δ}))を達成する**指数時間**アルゴリズムが存在 [Kale In COLT2014, Foster et al. In COLT2016]
- 劣線形リグレットを達成する多項式時間アルゴリズムの構築は計算量的に**困難** (NP⊆BPPでない限り不可能) [Foster et al. In COLT2016]

本研究

入力データに仮定(スパースな生成モデルの存在など)をおいたうえで, **劣線形リグレット**を達成する **多項式時間** アルゴリズムを提案


NEC-AIST AI Cooperative Research Laboratory



NEC-AIST AI Cooperative Research Laboratory

D2-38: 頭部姿勢情報からのストレス予測

草野 仁志, 堀口 裕士, 馬場 雪乃, 鹿島 久嗣 京都大学大学院情報学研究科

∎背景

ユーザーのストレス予測は広告の最適化やワークロード最適化など多数の応用先があり、 今後普及が見込まれるVRにおけるストレス予測手法を開発したい

■問題設定

1.VRヘッドセットを装着した状態でストレスを誘発する動画、リラックスした状態を誘 発する動画それぞれを視聴

2.VRヘッドセットより取得したセンサーデータからユーザーがストレス状態かを予測



VRで各コンテンツを視聴

ヘッドセットのセンサーデータ から特徴量を抽出

作成した特徴量から ストレス状態かを予測

KYOTO UNIVERSITY

D2-38: 頭部姿勢情報からのストレス予測 草野 仁志, 堀口 裕士, 馬場 雪乃, 鹿島 久嗣 京都大学大学院情報学研究科

■本研究の貢献

- 普及したVRヘッドセットから取得したセンサーデータから首の動きに含まれる心拍 の特徴に基いて、コンテンツ閲覧時のストレスを予測するシステムを開発
 - 長案手法は心電計などの外部ツールを利用せず、またカメラを通じたユーザー画像の取得を行わないのでプライバシーの問題が少ない
- 簡易実験を通じて提案手法の予測性能を検証した

■特徴抽出の流れ

- 1. センサーデータからノイズを除去
- 2. 心拍を含む周波数帯をフィルターで抽出
- 3. 心拍における既知のストレス指標の算出し、特徴量とする

KYOTO UNIVERSITY



今泉允聡(統数研) Manohar Kaul(IITH) **被覆木**:標本の木構造による閉球で全体をカバーしたい







今泉允聡(統数研) Manohar Kaul(IITH) **被覆木**:標本の木構造による閉球で全体をカバーしたい





D2-40 学生優秀プレゼンテーション賞対象 アウトプットの重み付き和に基づくRNN言語モデル 川田航希(電通大) 西山悠(電通大) 川野秀一(電通大)

■背景

▶言語モデルでは単語1つ1つがoutput embeddingを持つ
▶単語は文脈に応じて様々な意味で用いられる



問題点:英単語bankの例 bankと文脈1の内積が高い →bankの出現確率が高い

文脈2でbankが出現するが、 bankと文脈2の内積が低い →bankの出現確率が低い →予測失敗

▶単語1つに対し、2つのoutput embeddingを持たせる
▶ゲートを導入し、2つのoutput embeddingに重み付けする
▶ゲートは文脈に応じて単語の意味を選択する役割を持つ

D2-40 学生優秀プレゼンテーション賞対象 アウトプットの重み付き和に基づくRNN言語モデル 川田航希(電通大) 西山悠(電通大) 川野秀一(電通大)

■背景

▶言語モデルでは単語1つ1つがoutput embeddingを持つ
▶単語は文脈に応じて様々な意味で用いられる



問題点:英単語bankの例 bankと文脈1の内積が高い →bankの出現確率が高い

文脈2でbankが出現するが、 bankと文脈2の内積が低い →bankの出現確率が低い →予測失敗

▶単語1つに対し、2つのoutput embeddingを持たせる
▶ゲートを導入し、2つのoutput embeddingに重み付けする
▶ゲートは文脈に応じて単語の意味を選択する役割を持つ



提案:オンデマンドな学習と推論

- 1. クエリー(テストデータの入力) に近い近傍データ集合を求める
- 2.近傍データ集合に対して線形モデルを 仮定し、ベイズ推定(or 最尤推定)



データ数が無限に増えても、最適なモデルに近づくわけではない



近傍では線形と仮定













BPCA



PCA



局所的なベイズ学習法を ミニパッチごとに適用して得られた 超解像の例

オリジナル 高解像度



低解像画像



D2-42Constrained Deep Q-learninggradually approaching ordinary Q-learning大西 翔太1、石井信1、安井裕司2、中西 康輔2、喜住 祐紀2、内部 英治3

1. 京都大学情報学研究科 2. 本田技術研究所 3. 国際電気通信基礎技術研究所

[目的] Deep Q learningにおけるサンプル効率の向上

Deep Q Network (DQN)は、目標値を計算するためのターゲットネットワークを導入 し、サンプル間の依存関係を軽減することで学習を安定化させたが、ターゲット を更新するまで価値が伝搬しないためサンプル効率が悪かった。本研究では制約 付き問題として定式化してサンプル効率を改善する。

[提案手法] Q-learningの更新則を用い、制約項を入れる

$$L(\theta) = E_{s,a,r,s'\sim D} \left(\left(r + \gamma Q(s',a^*;\theta^-) - Q(s,a;\theta) \right)^2 + \lambda \frac{E(s',a^*)}{a^*} \right)$$
$$a^* = \max_{a'} T(s',a';\theta^-)$$

制約条件

$$\begin{split} E(s',a^*) &= \left(T(s',a^*;\theta^-) - Q(s',a^*;\theta)\right)^2 \\ when \; E(s',a^*) \leq \epsilon, \; \lambda = 0 \end{split}$$

	学習前期	\rightarrow	学習後期
制約有効頻度	高	\rightarrow	低
更新則	DQN に近い	\rightarrow	Q learning

MNIST maze における実験とその結果

MNIST maze [Elfwing et al., 2014]





提案手法(Constrained_DQN)は、従来法 (original_DQN)より速く学習していることがわ かる。また、ターゲットネットワークの更新 頻度に対してロバストであるという結果も得 られている。



目標: 異なる分布を持つ複数のドメインのデータを統合して 目標ドメインでの予測精度が高いモデルを学習する



- 病院毎に患者の背景情報が異なる(データの分布の施設間差)
- 大病院であってもデータ数は少ない(全てのデータを使いたい)



- K=1のとき, 共変量シフトの下での相対密度比[Yamada et al. '13]
- 複数の元ドメインに対して混合モデルを考えていることに相当
- $\beta, \beta_1, ..., \beta_K$ が各ドメインの重要度を制御するパラメータ

チャレンジ:ドメインの数だけ推定パラメータが増える

ベイズ最適化によるパラメータ最適化

目的関数: $f = \begin{cases} input : \beta, \beta_1, ..., \beta_K \\ output : classification accuracy \end{cases}$

• $\beta \approx 0$ なドメインは目標タスクには不要と解釈できる(ドメイン選択) → negative transfer の回避が期待できる



小西 卓哉(NII) 福永 拓郎(JSTさきがけ) 藤田 澄男(ヤフー) 河原林 健一(NII)

- 問題:ナップサック制約付き単調劣モジュラ関数の最大化
 - 各アイテムが確率的に決まる状態をもつ
 - 状態によって目的関数とナップサック制約への貢献の両方が決まる
- **本研究**:理論保証がある適応的な近似アルゴリズムの提案
 - 連続緩和問題の最適化 + 丸めアルゴリズム
 - ユーザの反応を考慮したニュースリストの推薦への応用





小西 卓哉(NII) 福永 拓郎(JSTさきがけ) 藤田 澄男(ヤフー) 河原林 健一(NII)

- 問題:ナップサック制約付き単調劣モジュラ関数の最大化
 - 各アイテムが確率的に決まる状態をもつ
 - 状態によって目的関数とナップサック制約への貢献の両方が決まる
- **本研究**:理論保証がある適応的な近似アルゴリズムの提案
 - 連続緩和問題の最適化 + 丸めアルゴリズム
 - ユーザの反応を考慮したニュースリストの推薦への応用





単語間の共起の強さを測る [Church&Hanks'90]

学習が軽いカウントするだけ

 文間の**関連の強さ**を測る [Li+'16]

😩 学習が重い

yを生成して誤差逆伝搬

😃 疎性に強い

連続表現、高い汎化能力

 $\phi(x) = k(x, \cdot), \ \psi(y) = \ell(y, \cdot)$ $\Sigma_{YX} = \mathbf{E}[\phi(X)\psi(Y)^{\top}] - \mathbf{E}[\phi(X)]\mathbf{E}[\psi(Y)^{\top}]$





単語間の共起の強さを測る [Church&Hanks'90]

学習が軽いカウントするだけ

 文間の**関連の強さ**を測る [Li+'16]

😩 学習が重い

yを生成して誤差逆伝搬

😃 疎性に強い

連続表現、高い汎化能力

 $\phi(x) = k(x, \cdot), \ \psi(y) = \ell(y, \cdot)$ $\Sigma_{YX} = \mathbf{E}[\phi(X)\psi(Y)^{\top}] - \mathbf{E}[\phi(X)]\mathbf{E}[\psi(Y)^{\top}]$



Kernel recursive ABC

point estimation with intractable likelihood

Takafumi Kajihara(NEC/AIST), Keisuke Yamazaki(AIST), Motonobu Kanagawa (Max Planck Institute for Intelligent Systems), Kenji Fukumizu(ISM)

Approximate Bayesian computation (ABC) is about the derivation of posterior distribution when the likelihood function q is impossible or too expensive to compute.

$p(\theta|y) \propto q(y|\theta) \pi(\theta)$

We propose a novel method for point estimation with intractable likelihood relying on ABC. Its relation to maximum likelihood estimate (MLE) is discussed.

Kernel recursive ABC

point estimation with intractable likelihood

Takafumi Kajihara(NEC/AIST), Keisuke Yamazaki(AIST), Motonobu Kanagawa (Max Planck Institute for Intelligent Systems), Kenji Fukumizu(ISM)

Approximate Bayesian computation (ABC) is about the derivation of posterior distribution when the likelihood function q is impossible or too expensive to compute.

$p(\theta|y) \propto q(y|\theta) \pi(\theta)$

We propose a novel method for point estimation with intractable likelihood relying on ABC. Its relation to maximum likelihood estimate (MLE) is discussed.

*学生優秀プレゼンテーション賞対象 D2-48・動画フレームごとのコメント密度の推定による画像サムネイル生成 山口想(電通大) 大垣慶介(ドワンゴ) 松井勇佑(NII) 小田桐 優理(ドワンゴ)

動画の入力に対して,動画の各フレーム毎のコメント情報を用いて動画要約を行う



目的

・コメント密度の高いフレームが動画を最も説明していると仮定し、
 動画から<u>コメント密度を推定</u>し、その密度のピーク点数点を動画の要約として用いる、
 ・推定することができれば、コメントの付与されていない動画に対しても有効である。

*学生優秀プレゼンテーション賞対象 D2-48・動画フレームごとのコメント密度の推定による画像サムネイル生成 山口想(電通大) 大垣慶介(ドワンゴ) 松井勇佑(NII) 小田桐 優理(ドワンゴ)

手法

既存手法:動画毎に設定されたサムネイル画像を教師データとして分類モデルを構築 <u>提案手法:</u>動画の各フレームごとのコメント密度を推定するための回帰モデルを構築

画像サムネイル推薦タスク



既存手法より提案手法の方が 好ましいサムネイルを推薦することができた. 動画要約タスク

既存手法: 画像サムネイル予測モデル



提案手法: コメント密度推定モデル



D2-49: U-netを用いた細胞画像からのNC比推定 石部大夢,奥田敬二郎,佐藤匠,佐藤瞭,長岡風吹,山地穂岳(東京大学) 佐藤一誠(東京大学/RIKEN)

NC比とは、核と細胞質の容積比のことで、 細胞診における悪性細胞の重要な判定基準の一つ



細胞画像:1050枚(約50症例分) 核と細胞質をアノテーションしてデータセットを作成 テストデータとして200細胞画像を分類 3つのモデルを用いてNC比を推定 U-NET-2:核と細胞質を個別にセグメンテーション→NC比推定 U-NET-3:核と細胞質を同時にセグメンテーション→NC比推定 U-NET-NC:NC比の誤差も損失関数に入れてNC比推定





清水仁,大塚琢馬,岩田具治,澤田宏,上田修功 (NTTコミュニケーション科学基礎研究所)

・ 有向グラフ上をエージェントが移動する人流シミュレーションを想定
・ エージェントパラメータを適切に設定することが課題

В		エージェントパラメータの例							
		ID	出発時刻		出発地	目的地			
		1							
		2			?				
	3			•					
A	C	•••	•••		•••	•••			
NTT	現実世界	計算機		Copyright©2017 NTT corp. All Rights Reserved.					

1



清水仁,大塚琢馬,岩田具治,澤田宏,上田修功 (NTTコミュニケーション科学基礎研究所)

- 本研究では、エッジの通過人数の部分観測に基いて、
- 効率的に経路別のエージェント人数を推定する手法を提案



Correction of Covariate Shift Bias Produced by Action of Optimization

亮太(NEC) 比嘉

目的: aを操作後の仮想的な期待値収益(マクロスコピックな量)を知りたい

結果: ミクロにyを推定するより、密度比で直接推定したほうがbiasを抑制できる!



\Orchestrating a brighter world

Correction of Covariate Shift Bias Produced by Action of Optimization

亮太(NEC) 比嘉

目的: aを操作後の仮想的な期待値収益(マクロスコピックな量)を知りたい

結果: ミクロにyを推定するより、密度比で直接推定したほうがbiasを抑制できる!



\Orchestrating a brighter world

PU-データに対する スパースSVM の同時セーフスクリーニング

杉山 太信^{1,2},前原 貴憲² 1: 東京工業大学 2: 理化学研究所革新知能統合研究センター

分類問題に用いられるスパースSVMに対して、不必要なサンプル・特徴量を除くことで 高速化する手法: セーフスクリーニングが提案された[Zhang et al. 2017]

多くの実データは正例とラベル無しデータからなる(PU-データ)ため、このようなデータに 対する同時セーフスクリーニングが必要となる

スパースなPU-データ



PU-データに対するスパースSVM の同時セーフスクリーニング

※学生優秀プレゼンテーション賞対象





漸進的に変化の伴う時系列データに対して 潜在構造変化/構造の不確定性を検出する規準を提案



漸進的に変化の伴う時系列データに対して下記の課題を考え、記述長最小原理に基づいた検出手法を提案

- 1. 時系列データを生成する潜在構造を推定する問題
- 2. 時系列データの斬新的変化に着目し、変化による構造の不確定性を捉える問題



漸進的に変化の伴う時系列データに対して 潜在構造変化/構造の不確定性を検出する規準を提案



漸進的に変化の伴う時系列データに対して下記の課題を考え、記述長最小原理に基づいた検出手法を提案

- 1. 時系列データを生成する潜在構造を推定する問題
- 2. 時系列データの斬新的変化に着目し、変化による構造の不確定性を捉える問題

系列モデル学習におけるαダイバージェンスを用いた目的関数の統合

小山田創哲(リクルート・産総研・京大)菊池悠太(PFN)兼村厚範(産総研)前田新一(PFN)石井信(京大・ATR)

機械翻訳のような系列生成タスクにおいてよく用いられる(1) 尤度最適化ベースの目的関数と (2) 強化学習ベースの目的関数の間には次のような一長一短がある.

(1) 尤度最適化ベース 学習の効率はいいが,本来最適化すべき目的関数との間に「ズレ」がある.

(2) 強化学習べース 学習の効率は悪いが,本来最適化すべき目的関数を正しく最適化している.

本研究ではこれらがトレードオフの関係にあり同時に解決するのは難しいことを説明した上で, αダイバージェンスを用いてこれら2タイプの目的関数を一般化した目的関数を提案する.さらに, これら2タイプの目的関数の中間に対応する目的関数(α=0.4など)を最小化する学習が, より高い性能をもたらすことを実験的に示す.



系列モデル学習におけるαダイバージェンスを用いた目的関数の統合

小山田創哲(リクルート・産総研・京大)菊池悠太(PFN)兼村厚範(産総研)前田新一(PFN)石井信(京大・ATR)

機械翻訳のような系列生成タスクにおいてよく用いられる(1) 尤度最適化ベースの目的関数と (2) 強化学習ベースの目的関数の間には次のような一長一短がある.

(1) 尤度最適化ベース 学習の効率はいいが,本来最適化すべき目的関数との間に「ズレ」がある.

(2) 強化学習べース 学習の効率は悪いが,本来最適化すべき目的関数を正しく最適化している.

本研究ではこれらがトレードオフの関係にあり同時に解決するのは難しいことを説明した上で, αダイバージェンスを用いてこれら2タイプの目的関数を一般化した目的関数を提案する.さらに, これら2タイプの目的関数の中間に対応する目的関数(α=0.4など)を最小化する学習が, より高い性能をもたらすことを実験的に示す.



D2-55: The optimal-baseline estimator is)[ST not the optimal baseline-estimator <u>Paavo Parmas</u>¹, Jan Peters², Kenji Doya¹ ¹OIST, ²TU Darmstadt 「学生」

Background: Given $\{x_i\}, \{f(x_i)\} \sim p(x;\theta)$, estimate $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \left(\mathbb{E}\left[f(x)\right]\right)$

Likelihood ratio gradient: $\frac{d}{d\theta} \left(\mathbb{E} \left[f(x) \right] \right) = \mathbb{E} \left[\left(\frac{d}{d\theta} \log(p(x;\theta)) \left(f(x) - b \right) \right] \right]$

Often used in reinforcement learning, variational inference, stochastic optimisation, etc. **Task:**

choose b to minimise variance of the gradient

Previous result:

Constant b can be chosen arbitrarily without introducing bias

optimal b is $\frac{\mathbb{E}\left[(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\log p(x))^2 f(x)\right]}{\mathbb{E}\left[(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\log p(x))^2\right]}$

... but, a b estimated from the same data $\{x_i\}$ will introduce a bias into the gradient estimator! The estimator will not be optimal!

D2-55: The optimal-baseline estimator is not the optimal baseline-estimator <u>Paavo Parmas</u>¹, Jan Peters², Kenji Doya¹ ¹OIST, ²TU Darmstadt 「学生」

Results:

Mean baseline gives unbiased direction, but magnitude is biased by (N-1)/N. Every other weighted average baseline will in general not yield an unbiased direction. Derived new methods for debiasing use of baseline.

Derived various other new baseline estimators that account for estimation uncertainty.

Theory verified computationally:


D2-57: 確率的勾配MCMCを用いた有界確率変数の生成



D2-57: 確率的勾配MCMCを用いた有界確率変数の生成



D2-58: Mixture of Experts for Multiple Instance Learning 勝木 孝行 / Takayuki Katsuki, IBM Research – Tokyo, IBM Research AI

C

 Multiple Instance Learning (MIL) で扱うような、各データ点が複数のインスタンスのバッグと見なせるデー タ(系列データ等)を扱う際に、Mixture of Expertsを利用する

IBM IEN 🐨 🦇 IBM IEN 🐨 🦇 IBM IEN 🐨 🗰 IBM IEN



| センサー時系列から未来の特定のセンサー値を予測

時刻t+1

時刻t

D2-58: Mixture of Experts for Multiple Instance Learning 勝木 孝行 / Takayuki Katsuki, IBM Research – Tokyo, IBM Research AI

C

 Multiple Instance Learning (MIL) で扱うような、各データ点が複数のインスタンスのバッグと見なせるデー タ(系列データ等)を扱う際に、Mixture of Expertsを利用する

IBM IEN 🐨 🦇 IBM IEN 🐨 🦇 IBM IEN 🐨 🗰 IBM IEN



| センサー時系列から未来の特定のセンサー値を予測

時刻t+1

時刻t

ニューラルネットワークによる様々な相転移の検出 <u>荒井 俊太</u>, 大関 真之, 片岡 駿, 田中 和之(東北大 大学院情報)

- 1次元横磁場イジングモデルのスピン配位σから横磁場Γを教師あり学習
 することで量子相転移を検出
- <u>事前に相転移点を教えず</u>に, NNの重みを見ることで相転移点が分かる.
 →NNはスピンの画像から特徴を抽出し, 最適化の過程で横磁場で

 条件づけられた重みの確率分布を学習しているのでは?



ニューラルネットワークによる様々な相転移の検出 <u>荒井 俊太</u>, 大関 真之, 片岡 駿, 田中 和之(東北大 大学院情報)

- 1次元横磁場イジングモデルのスピン配位σから横磁場Γを教師あり学習
 することで量子相転移を検出
- <u>事前に相転移点を教えず</u>に, NNの重みを見ることで相転移点が分かる.
 →NNはスピンの画像から特徴を抽出し, 最適化の過程で横磁場で

 条件づけられた重みの確率分布を学習しているのでは?



D2-60: データ融合におけるホットデック法の妥当性 松下亮祐(株式会社NTTデータ数理システム)



疑問:融合済データに基づく分析結果はどのくらい信頼できるか?

NTTDATA

研究内容

- ・真の確率分布に対する近似精度の評価
 - Wasserstein 距離
- •i.i.d.サンプルと比べたときの推定量の劣化具合の評価
 - 推定誤差の増分

D2-60: データ融合におけるホットデック法の妥当性 松下亮祐(株式会社NTTデータ数理システム)



疑問:融合済データに基づく分析結果はどのくらい信頼できるか?

NTTDATA

研究内容

- ・真の確率分布に対する近似精度の評価
 - Wasserstein 距離
- •i.i.d.サンプルと比べたときの推定量の劣化具合の評価
 - 推定誤差の増分

D2-61 連続値隠れ変数を用いた混合ガウスモデル

江藤 カ(NEC データサイエンス研究所)

■バイナリ値隠れ変数だと

■<u>連続値隠れ変数だと</u>

$$\begin{cases} p(y|x,\theta) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \mathcal{N}(y; w_k^\top x, \sigma_k^2) \\ p(z|\theta) = \operatorname{Multi}_{K,1}(z;\alpha) = \prod_{k=1}^{K} \alpha_k^{z_k} & \bullet \bullet & \bullet \\ z_k \in \{0,1\}, \sum_{k=1}^{K} z_k = 1 & \bullet & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;$$





D2-61 連続値隠れ変数を用いた混合ガウスモデル

江藤 カ(NEC データサイエンス研究所)

■バイナリ値隠れ変数だと

■<u>連続値隠れ変数だと</u>

$$\begin{cases} p(y|x,\theta) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \mathcal{N}(y; w_k^\top x, \sigma_k^2) \\ p(z|\theta) = \operatorname{Multi}_{K,1}(z;\alpha) = \prod_{k=1}^{K} \alpha_k^{z_k} & \bullet \bullet & \bullet \\ z_k \in \{0,1\}, \sum_{k=1}^{K} z_k = 1 & \bullet & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ \alpha_k \ge 0, \sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1 & \bullet \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;\alpha,M) \\ p(z|\theta) = \mathcal{N}(z;$$





D2-62: 組み合わせ行動空間上のQ学習によるメンテナンス区間最適化

谷本啓 (NEC / 京大)

問題:

- 多数の対象から各時刻でメンテナンスする対象を 最適化し、長期的なリスクとコストを抑えたい
- 行動コストは対象の地理関係に依存する 距離が近い対象をついでにメンテナンスしたい
- 特に、高速道路など対象が一次元的に分布して いる場合を考える



一般的な手法:

- 予め区間に区切っておき、区間ごとにメンテナンスするべきかどうか判断する - × 最適でない区切りとなる可能性がある

提案手法:Q学習による「メンテナンス優先度」推定+組み合わせ最適化

- ✓ メンテナンス区間の最適化により(コスト+リスク)を低減
- ✓ 適切なQ関数のモデル化により最適化はメンテナンス対象数に対して線形時間
- ✓ 中間的に優先度が算出されるため最適化結果の解釈可能

D2-62: 組み合わせ行動空間上のQ学習によるメンテナンス区間最適化

谷本啓 (NEC / 京大)

問題:

- 多数の対象から各時刻でメンテナンスする対象を 最適化し、長期的なリスクとコストを抑えたい
- 行動コストは対象の地理関係に依存する 距離が近い対象をついでにメンテナンスしたい
- 特に、高速道路など対象が一次元的に分布して いる場合を考える



一般的な手法:

- 予め区間に区切っておき、区間ごとにメンテナンスするべきかどうか判断する - × 最適でない区切りとなる可能性がある

提案手法:Q学習による「メンテナンス優先度」推定+組み合わせ最適化

- ✓ メンテナンス区間の最適化により(コスト+リスク)を低減
- ✓ 適切なQ関数のモデル化により最適化はメンテナンス対象数に対して線形時間
- ✓ 中間的に優先度が算出されるため最適化結果の解釈可能