

研 究 報 告 書

「非線形非負行列分解を用いたディープニューラルネットワーク計算 手法の開発」

研究期間： 2018 年 4 月～2020 年 3 月

研究者番号： 50204

研 究 者： 今 倉 暁

1. 研究のねらい

近年、「ディープニューラルネットワーク(DNN)計算」に基づくディープラーニングは画像や音声データ、自然言語認識などの分野において高い性能を発揮しており、自動運転技術などへの応用が世界各国で進められている。

一方で、近年のコンピュータ技術の目覚ましい発展に伴って、超高速計算機の高度利用に基づく“計算科学”は各種の最先端分野においてその中心的な役割を果たしている。ただし、これらの複雑な科学技術計算を実施するためには、単に超大規模並列計算機を開発するだけでは不十分であり、その計算資源を効率的に使いこなすアルゴリズムの開発が重要であるとされ、大規模連立一次方程式や大規模固有値計算などの超並列アルゴリズムの開発が進められている。このような超大規模並列計算機の高度利用を前提としたアルゴリズム開発はディープニューラルネットワーク計算においても必要不可欠である。

DNN は入力データの重み付き平均、バイアス項および非線形活性化関数からなる神経細胞間の情報伝達に関する数学モデルを基盤とし、多階層ネットワーク化したものである。DNN 計算とは、入力データからネットワークを介して得られた出力データと正解データの「ズレ」を最小化するようにネットワークの重みおよびバイアスを最適化する非線形最適化問題として定式化される。その最適化問題の数値解法としては、確率的勾配降下法に基づくバックプロパゲーション(BP)法が標準的なアルゴリズムとして利用されている。しかしながら、大規模並列化を前提として作られたアルゴリズムではなく、必ずしも超大規模並列計算機との親和性が高いとは言えない。

本研究課題では、超大規模並列計算機の高度利用を前提とし、並列計算機との親和性の高い非線形非負行列分解(非線形 NMF)を利用した新しい DNN 計算法の開発を目的とする。加速フェーズにおいては、ACT-I プロジェクト研究期間(2016 年 12 月～2018 年 3 月)で開発を進めた基盤アルゴリズムである NMF 型 DNN 計算法の高度化を行う。また、固有値計算や行列分解などに対する高性能な行列分解技術を基盤とした各種のデータ解析手法の開発についても併せて取り組む。

本研究課題の推進により、現状では実現し得ない超大規模データの高速な解析を可能とし、現在放置されているビックデータから新しい価値の創出に繋がることが期待される。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究課題では、研究代表者がこれまでの研究で培った超並列アルゴリズム開発でのノウハウを活かし、現在の標準的手法であるバックプロパゲーション(BP)法とは異なるアプローチに基づくディープニューラルネットワーク(DNN)計算法として、超大規模並列計算機の高度利用を前提とし、並列計算機との親和性の高い行列分解型のアルゴリズムの開発を行った。具体的には、現在主流となっている活性化関数(ReLU)の非負値性に着目し、非線形非負行列分解(非線形 NMF)を利用した新しい DNN 計算法を開発した。

加速フェーズにおいては、基盤アルゴリズムの高度化として、複数ネットワークを併用する高並列 DNN 計算法の開発および BP 法と NMF 型 DNN 計算法を併用した高速化について研究を進めた。

また、固有値計算や行列分解などに対する高性能な行列分解技術を基盤とした各種のデータ解析手法の開発を行った。特に、行列トレースの最適化問題に基づく次元削減法に着目し、より多数の固有ベクトル情報を利用する、高性能な次元削減法の開発を行った。

(2) 詳細

本研究課題における、研究テーマは「非線形 NMF に基づく DNN 計算法の高性能化」および「行列計算を基盤とした別のデータ解析法の開発」である。各テーマに対する研究成果の詳細を以下に示す。

研究テーマ A「非線形 NMF に基づく DNN 計算法の高性能化」

➤ 基盤アルゴリズム開発

現在の標準的手法である BP 法と異なるアプローチに基づく DNN 計算法として、非線形 NMF に基づく DNN 計算法の開発を行った。提案手法は逐次的な最適化に基づき、各最適化ステップは本研究課題で新たに導入した制約・正則化項付き非線形 NMF である。また、提案手法の初期値設定として、NMF に基づくオートエンコーダーの開発も併せて行った。

手書き数字認識(MNIST)や関数近似に対して、提案手法は古典的な BP 法と同程度の認識性能を発揮することを示した。また、バイアス・正則化項により過学習の抑制が可能であることが示された。

➤ アルゴリズムの高度化

NMF 型 DNN 計算法の高度化として、図 1 に示すような複数のネットワークを組み合わせた構造を考え、各ネットワークを並列に学習する手法を考案した。このようなネットワークを用いることで、並列性能および中間層のユニット数が増えることによる高い認識性能を発揮することが期待される。このような並列ネットワークを BP 法および NMF 型 DNN 計算法を用いて学習したところ、図 2 に示すように、特に NMF 型 DNN 計算法に顕著に性能改善が見られた。

また、並列ネットワーク数を p とすると、各中間層のユニット数が p 倍された大きなネットワークの部分構造になっているため、大きなネットワークを学習する際の前処理としても利用することができる。

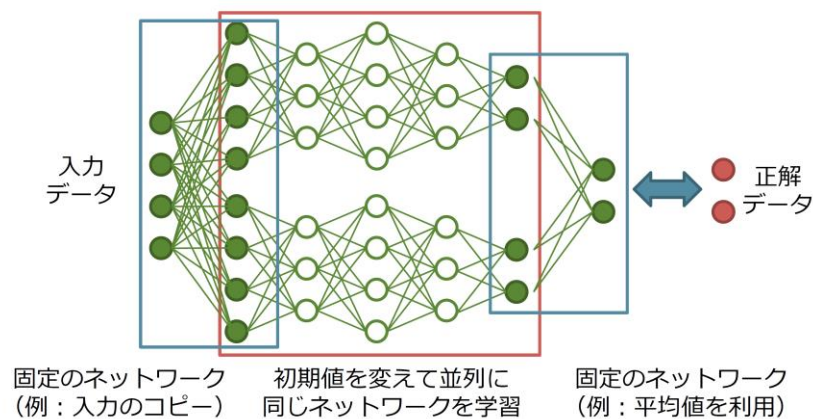


図1. 複数ネットワークによる並列化.

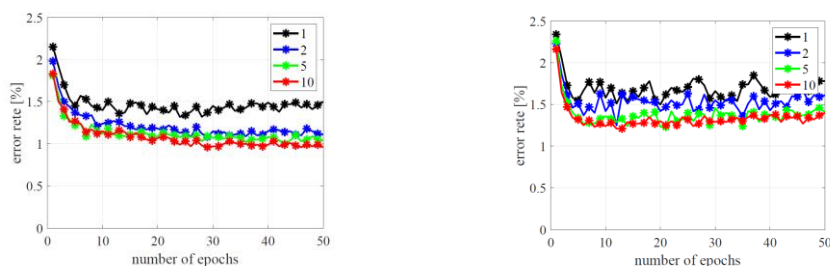


図2. MNIST による複数ネットワークの数値実験. (左)BP 法、(右)NMF 型 DNN 計算法

上記の知見を元にアルゴリズムの高度化を行い、現在論文執筆を進めている。

研究テーマ B「行列計算を基盤とした別のデータ解析法の開発」

➤ 行列トレースの最適化に基づく次元削減法の高性能化

本研究課題では、高次元データに対する次元削減法として、局所性保存射影(LPP)や主成分分析(PCA)など行列のトレースの最適化に基づく手法に着目し、解析性能を改善する新しい次元削減法として、複素モーメント型次元削減法(CMSE)を提案した。従来のトレースの最適化に基づく次元削減法は削減する次元分の少数の固有ベクトルのみを利用する。これに対して、CMSE 法ではより多くの固有ベクトルを利用するよう、複数の固有ベクトルを含む複素モーメント型部分空間を利用することで性能改善を図る。また、提案法は行列のトレースと教師データを利用した 2 乗誤差を組み合わせた目的関数を設定する(図3)。

分類問題に対する数値実験から、CMSE 法は従来の次元削減法と比較して分類性能を向上させる結果が得られた(図4)。また、並列実験の結果から高いストロングスケラビリティを示す結果が得られた。

次元削減法は各種のデータ解析において重要な役割を果たし、本研究で提案された手法は、既存の次元削減法と比較して同等以上の性能を発揮する。また高い並列性を示すことから、大規模データ解析に対する有効な手法となりうる。

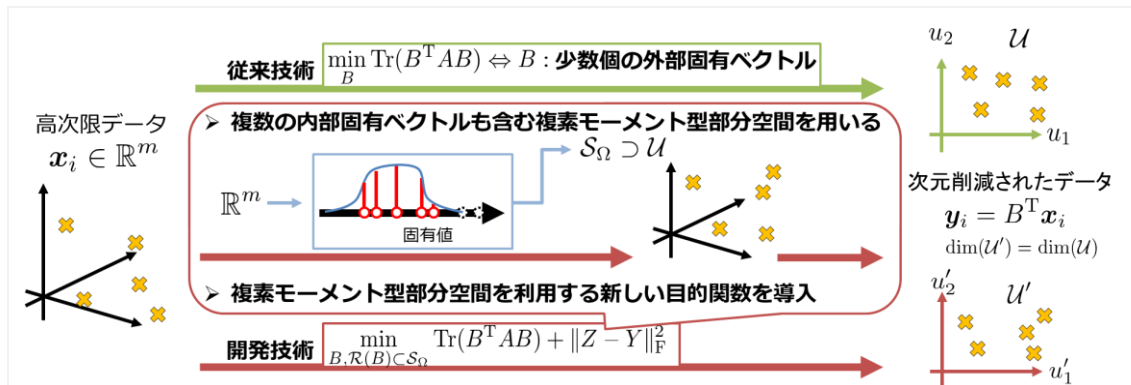


図3. 行列トレースの最適化に基づく従来の次元削減法と CMSE 法の概略

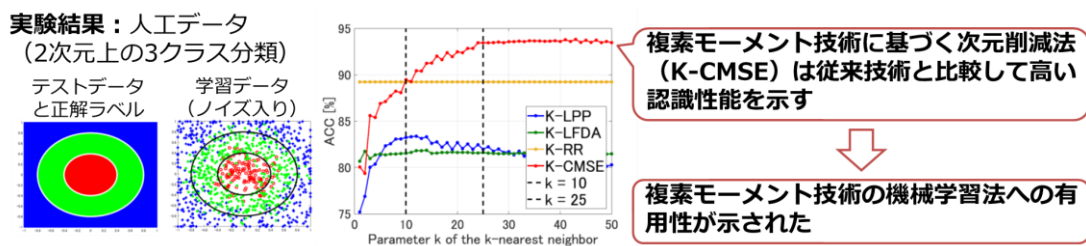


図4. 行列トレースの最適化に基づく従来の次元削減法と CMSE 法の実験結果

本成果は人工知能、機械学習分野のトップカンファレンスの一つである AAAI-19 (採択率: 16.2%、投稿件数: 7700 件) に採択された [論文(原著論文) 発表 1]。

➤ その他関連研究

その他の関連研究として、行列計算を基盤として、特徴量選択技術や異常検知法など各種のデータ解析手法の研究を進めており、その研究成果について複数の論文が掲載された[論文(原著論文) 発表 2]–[論文(原著論文) 発表 5]。

3. 今後の展開

本研究課題では、超大規模並列計算機の高度利用を前提とし、並列計算機との親和性の高い非線形非負行列分解(非線形 NMF)を利用した新しい DNN 計算法の開発および行列分解に基づく他のデータ解析手法の開発を目的とした。今後は、高性能行列計算を基盤としたディープラーニングや機械学習法の開発を進めるとともに、各種の応用分野からのニーズに対応した応用研究を進めていきたいと考えている。

DNN 計算のみにかぎらず様々なデータ解析において、高速・高並列な行列計算法に基づくアルゴリズムの再設計を行い、効率的な解法群を構築する。また、ソフトウェア化し高速・高並列なデータ解析基盤とすることを目指す。

高速・高並列なデータ解析基盤を整備することができれば、様々な応用分野において現状では実現し得ない超大規模データの高速な解析を可能とし、現在放置されているビックデータから新しい価値の創出に繋がることが期待される。

4. 自己評価

本研究課題の研究目的は超大規模並列計算機の高度利用を前提とし、バックプロパゲーション法とは異なる新しい計算法の開発・高性能化を行うことである。

研究開発期間において、非線形 NMF に基づく DNN 計算法の高性能化および行列計算を基盤とした各種の機械学習法の開発を進めた。これらの結果は複数の学術論文および査読付き国際会議に採択されている。また、本研究成果の応用先として医療、生命、農業関連の研究者や企業との共同研究に発展している。以上のことから、当初の研究目的は十分に達成されたと考えられる。

本研究課題の遂行にあたり、研究補助者 3 名を雇用し研究補助としてデータ収集および解析依頼し、週 1 回のミーティングを継続して行うことで、研究代表者の統括のもと研究課題を実施した。研究費は主に、計算機購入費、国際会議への旅費、書籍購入費の他、論文の英文校正費として計画通りに執行した。

従来法である BP 法は、DNN 計算法として 30 年の実績を持つ標準的なアルゴリズムであり、画像認識を始めとして多くの成果を挙げている。一方、BP 法以外の DNN 計算法についてはあまり研究が進められておらず、本研究課題の BP 法と全く異なるアプローチに基づく手法の開発は萌芽的かつ挑戦性の高い研究であると言える。

また、本手法の高性能化とともに、高速・高並列なデータ解析基盤を整備することができれば、BP 法があまり有効ではなく DNN 計算が用いられてこなかった様々な応用分野においても DNN 計算の可能性を広げることができる。これにより、現状では実現し得ない超大規模データの高速な解析を可能とし、現在放置されているビックデータから新しい価値の創出に繋がることが期待される。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Akira Imakura, Momo Matsuda, Xiucai Ye, Tetsuya Sakurai, Complex Moment-Based Supervised Eigenmap for Dimensionality Reduction, Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, Vol. 33, pp. 3910–3918. 2019.
2. Xiucai Ye, Hongmin Li, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Distributed Collaborative Feature Selection Based on Intermediate Representation, Proceedings of the Twenty-Eighth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-19), pp. 4142–4149, 2019.
3. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Data Collaboration Analysis Framework Using Centralization of Individual Intermediate Representations for Distributed Data Sets, ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part A: Civil Engineering, Vol. 6, Issue 2, 04020018, 2020.
4. Momo Matsuda, Keiichi Morikuni, Akira Imakura, Xiucai Ye, Tetsuya Sakurai, Multiclass spectral feature scaling method for dimensionality reduction, Intelligent Data Analysis, (accepted)
5. Hiroyuki Yoda, Akira Imakura, Momo Matsuda, Xiucai Ye, Tetsuya Sakurai, Novelty Detection in Multimodal Datasets Based on Least Square Probabilistic Analysis, International Journal of Machine Learning and Computing (IJMLC), (accepted).

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. 筑波大学 若手教員奨励賞(2018 年 11 月)
2. Akira Imakura, Momo Matsuda, Xiucai Ye, Tetsuya Sakurai, A complex moment-based dimensionality reduction for data analysis, 2019 Mini-Workshop on Computational Science (MWCS2019), Dalian University of Technology, China, August 18–19, 2019.
3. Akira Imakura, Momo Matsuda, Xiucai Ye, Tetsuya Sakurai, A novel dimensionality reduction method using a complex moment-based subspace, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019), the Universitat de Valencia, Spain, July 15–19, 2019.
4. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Nonlinear semi-NMF based method for deep neural network computations and its improvements, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019), the Universitat de Valencia, Spain, July 15–19, 2019.
5. Akira Imakura, Nonlinear semi-NMF based method for deep neural network computations, International Symposium on “Digital Science Now”, University of Tsukuba, Japan, June 7, 2019.