ハイパフォマンスコンピューティングとスパースモデリング

岡田 真人[1,a)]

概要：実験や観測によって得られるデータを少数の説明変数で記述することを目的とする「モデリング」は自然科学の重要なアプローチの一つである．スパースモデリングは，高次元データからの説明変数の自動抽出を最適化問題の形に定式化する．本講演では，スパースモデリングの適用例を紹介し，ハイパフォマンスコンピューティングとスパースモデリングの関係を述べる．

1. はじめに

モデル化は，自然科学の基本的なアプローチを構成している．天体観測の結果を分析し，思索を重ねることで得られた古典力学はこの模範例である．モデル化においては，データを記述する説明変数の選択は，多くの場合に研究者による試行錯誤にゆだねられている．多点の計測に代表される計測技術の飛躍的向上により，そこから生み出される高次元データの振る舞いは複雑であり，説明変数の選択は格段に難しくなる．スパースモデリングとはこのような困難を解決するために提案された，普遍的なモデリング手法の総称である．このスパースモデリングの特長を元に，我々は「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」を提案し，平成 25 年度科学研究費補助金「新学術領域研究（研究領域提案型）」の新規の研究領域として採択された．本講演では，スパースモデリングの適用例を紹介し，スパースモデリングの深化にとって，ハイパフォマンスコンピューティングがいかに重要かを述べる．

2. 圧縮センシング

本講演ではまずスパースモデリングの典型例の一つである圧縮センシングを解説する [1], [2], [3], [4]．圧縮センシングでは，高次元データのスパース性の仮定することにより，標本化定理で示されるサンプル数よりも少ないサンプルで信号の再構成が可能となる．

M 次元ベクトルの観測信号 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_M)$ が，N 次元ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_N)$ から，以下の線形方程式で生成されているものとする，

$$y_i = \sum_{j=1}^{N} \phi_{ij} x_j,\ i = 1, 2, \cdots, M. \tag{1}$$

ここで $M < N$ のときは，$\boldsymbol{x}$ が求まらず，この問題は解が一意に定まらない不良設定問題になっている．

その解決策として，ここで $\boldsymbol{x}$ の要素の一部が 0 であると仮定する．これをスパース性の仮定と呼ぶ．$\boldsymbol{x}$ にスパース性の拘束条件を導入することで，問題を両設定化する訳である．この問題を解くために，次の最適化関数 E_1 を導入し，

$$E_1 = \sum_{i=1}^{M} (y_i - \sum_{j}^{N} \phi_{ij} x_j)^2 + \lambda \sum_{j}^{N} |x_j|. \tag{2}$$

スパースなベクトル $\boldsymbol{x}$ を求める [1], [2], [3], [4]．この枠組を圧縮センシングとよぶ．ここで $\lambda > 0$ は正則化パラメータであるが，ここでは詳細は説明しない．この問題は凸計画問題となるため，種々の凸計画問題の解法が利用でき，その計算量は $O(N^3)$ である．圧縮センシングは，スパース性の導入により，少ないサンプリング数でも良質の信号を得る枠組みであり，医用画像の MRI やタンパク質の NMR(核磁気共鳴) などに盛んに応用されている．

3. ブラインドセンシングとモデル化

式 (2) の圧縮センシングを拡張し，同一の特性を持つ複数の観測信号 $\boldsymbol{y}^\mu$ $(\mu = 1, 2, \cdots, p)$ を用いて，より元信号 $\boldsymbol{x}^\mu$ $(\mu = 1, 2, \cdots, p)$ をスパースに表現する，基底ベクトル $\Phi = (\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \cdots, \boldsymbol{\phi}_N)$ を求めることを考える [5]．ここでは，§2 と同様に個々の画像が式 (1) のように展開できると仮定し，p 個の観測信号 $\{\boldsymbol{y}^\mu\}$ のみから，元信号 $\{\boldsymbol{x}^\mu\}$ と，§2 では既知であるとした基底ベクトル $\{\boldsymbol{\phi}_i\}$ を同時推定する．そのため式 (2) にならい，以下の最適化関す E_2 を導入する，

[1] 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻
Department of Complexity Science and Engineering, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Kashiwa, Chiba, 277-8561, Japan
[a)] okada@k.u-tokyo.ac.jp

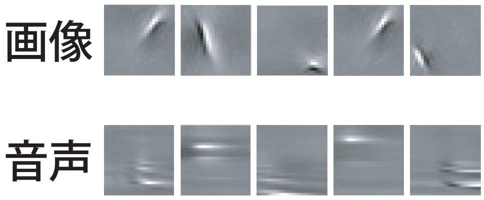

図 1 抽出された基底関数の例．上図が自然画像に対する基底であり，ガボールフィルタによく似た基底関数が抽出されている [5]．下図がサルの音声に対応する基底であり，和音に対応する基底関数が抽出されている [6], [7], [8]

$$E_2 = \sum_{\mu=1}^{p}\left(\sum_{i=1}^{M}(y_i^{\mu} - \sum_{j=1}^{N}\phi_{ij}x_j^{\mu})^2 + \lambda\sum_{i}|x_j^{\mu}|.\right). \quad (3)$$

圧縮センシングに対して，この枠組はブランドセンシングと呼ばれている．Olshausen と Field は，この枠組みを自然画像に適用し，基底ベクトルとして図 1 の上図のようなガボールフィルタに似た関数が得られることを示した [5]．基底ベクトルとして求められたガボールフィルタは画像圧縮に用いられる JPEG2000 とも関係があることからも，得られた基底ベクトルは用いた自然画像の物理的もしくは統計的な特性を自動抽出していると考えれる．

Terashima らは，ピアノやサルの音声などを周波数展開した二次元次元時空間スペクトルを画像入力として用いて，Olshausen と Field の方法で基底ベクトルを求めた [6], [7], [8]．音声に対して得られた基底ベクトルは，図 1 の下図のように基本周波数の整数倍を含む和音に対応していた．ヒトの声やサルの鳴き声は，調音器官の物理的特性により，和音で構成されている．また，遠くから聞こえる音は，その音が生成されたであろう物体の基本周波数の定数倍からなる和音で構成されているはずである．

これら画像と音声に関する二つの知見は，同一特性を持つと思われる多数の観測信号を，スパースに表現する基底ベクトルには，それら観測信号が得られた系の物理特性が何らかの形で含まれることがわかる．つまり，これらは，我々が系の物理特性を陽に知らなくても，そこから観測されるデータをスパース化することにより，系のモデリングができることを強く示唆している．これがスパースモデリングの語源である．

4. スペクトル分解

図 2 のようなマルチピークスペクトルを，有限個のガウス関数のようなシングルピーク関数の線形和であらわすスペクトル分解を議論する [9]．ここでは無限自由度の関数を，シングルピーク関数の位置，分散，強度等の有限個のパラメータで表現するので，スペクトル分解もスパースモデリングの一種と考えることができる．スペクトル分解では，基底関数の個数 K をいかに決めるかが重要な問題である．K が小さすぎるとデータを再現するための自由度が少なくなる．一方，K を大きくしすぎるとデータの再現性は良くなるが，観測ノイズを再現するために余分な基底関数を用いてしまう．このように K に関するトレードオフがあり，最適な K が存在することがわかる．この最適な K を選ぶことを統計学ではモデル選択とよぶ．本講演ではベイズ推論に基づく，基底関数の数 K をデータのみから推定する理論的枠組みを紹介する [9]．ここではベイズ事後確率を求めるために，レプリカ交換モンテカルロ (REMC) 法を用いる [10]

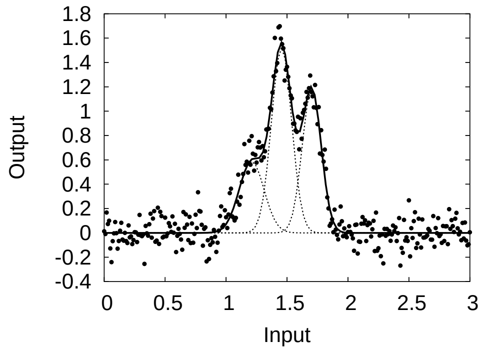

図 2 スペクトル分解

5. HPC との関連

これまで述べたようにスパースモデリングでは，スパースな表現を自動獲得するために，計算量の多い最適化問題を解いたり，REMC のように非常に多くの計算量を必要とするサンプリング手法を多用する．我々の新学術領域の目的が達成され，スパースモデリングの普遍性により，計測／自然科学関係からの機械学習へのニーズが大幅に増える事が予想できる．私たちは，その過程で，問題をより高速にする計算機の開発，問題をより高速に解くアルゴリズムの開発など HPC の中心課題の一群の研究の進展が必要不可欠であると考えている．

参考文献

[1] Candes and Tao, *IEEE Trans. Inf. Theory*, **52**, 5406?5425 (2006).
[2] Donoho, *IEEE Trans. Inf. Theory* **52**, 1289?1306, (2006).
[3] 田中 利幸, *IEICE Fundamentals Review*, **4**, 39 (2010).
[4] Kabashima, Wadayama, and Tanaka, *J. Stat. Mech.: Theory Exp*, L09003 (2009).
[5] Olshausen and Field, *Nature*, **381**, 607 - 609 (1996).
[6] Terashima and Hosoya, *Network: Computation in Neural Systems* **20**, 253-267 (2009).
[7] Terashima, Hosoya, Tani, Ichinohe and Okada, *Neurocomputing* **103**, 14-21 (2013).
[8] Terashima, and Okada, *Advances in Neural Information Processing Systems* **25**, 2321-2329 (2012).
[9] Nagata, Sugita and Okada, *Neural Networks*, **28**, 82-89 (2012).
[10] Hukushima and Nemoto, 1604-1608, Journal of Physical Society of Japan, 65