

理化学研究所 革新知能統合研究センター の紹介



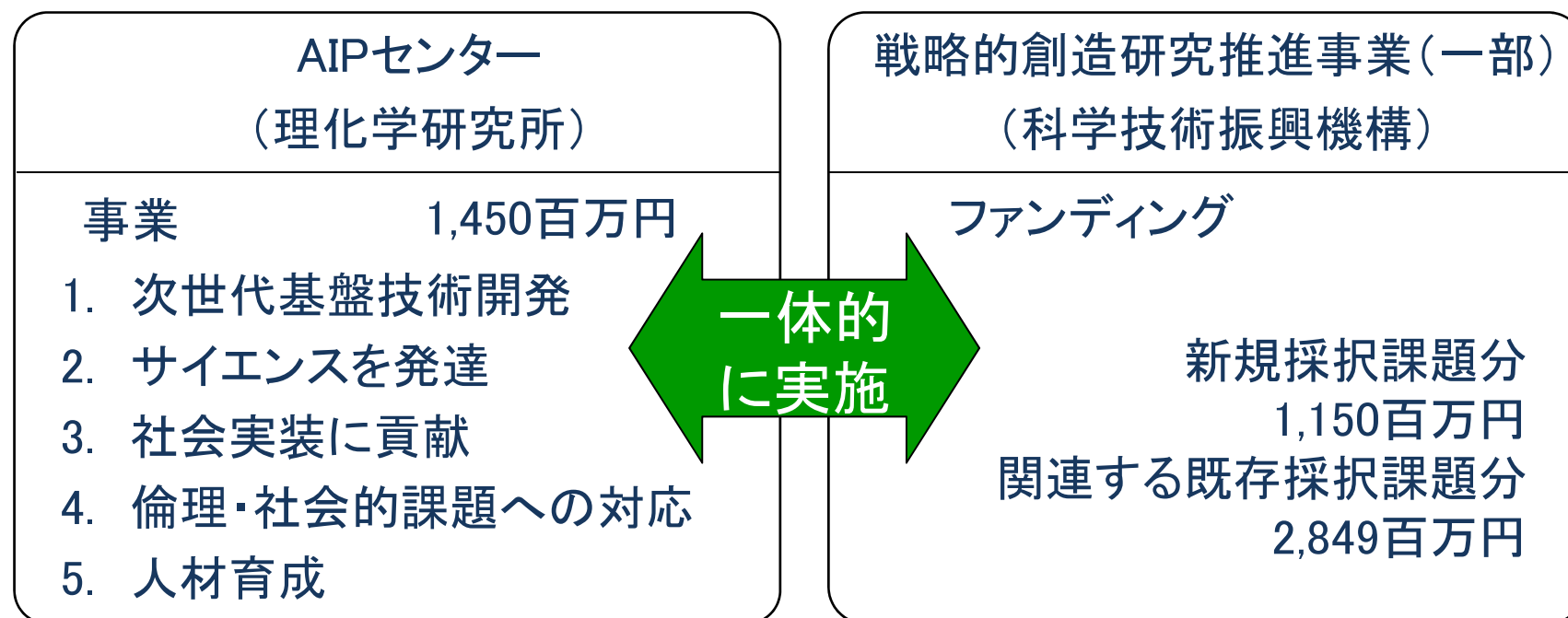
センター長
杉山 将

文科省AIPプロジェクト:

(Advanced Integrated Intelligence Platform Project)

人工知能/ビッグデータ/IoT/ サイバーセキュリティ統合プロジェクト

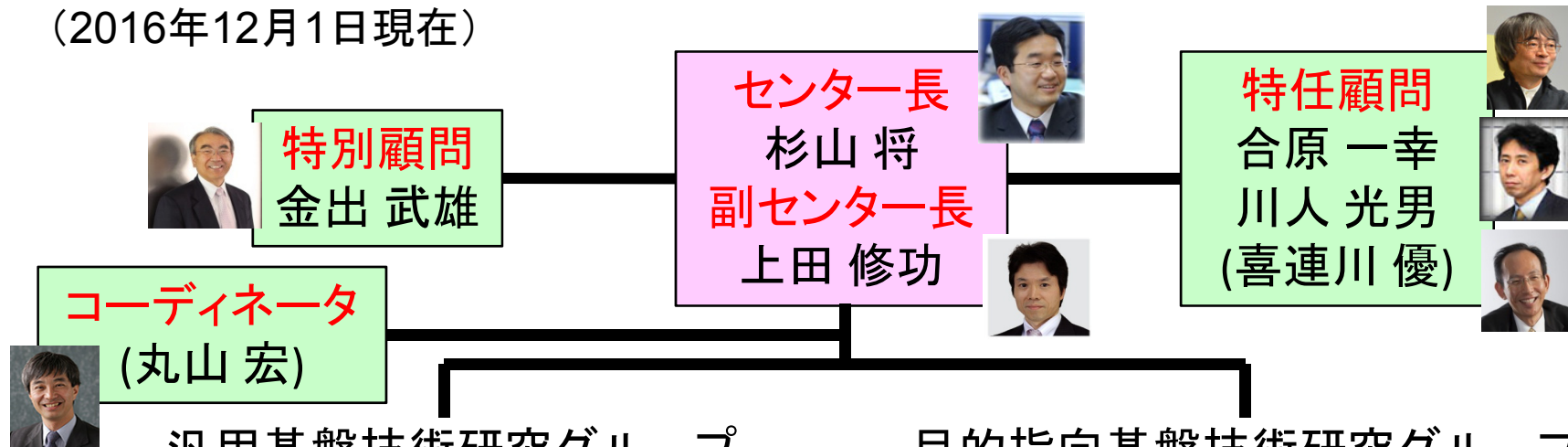
- 理化学研究所は, 2016年4月14日付で
革新知能統合研究(AIP)センターを設置



AIPセンターの研究体制図

3

(2016年12月1日現在)



汎用基盤技術研究グループ

杉山 将	不完全情報学習
武田 朗子	連続最適化
河原 吉伸	構造的学習
清水 昌平	因果推論
下平 英寿	数理統計学
Emtiyaz Khan	近似ベイズ推論
金森 敬文	非凸学習理論
鈴木 大慈	深層学習理論
畑埜 晃平	計算論的学習理論
竹之内 高志	幾何学的学習
坂内 健一	数理科学
佐々木 博昭	トポグラフィック特徴学習
本多 淳也	オンライン意志決定
前原 貴憲	離散最適化ユニット

目的指向基盤技術研究グループ

上田 修功	防災科学
竹内 一郎	データ駆動型生物医科学
鹿島 久嗣	ヒューマンコンピューテーション
佐久間 淳	人工知能セキュリティ・プライバシー
乾 健太郎	自然言語理解
松本 裕治	知識獲得
鈴木 晶子	人工知能倫理
津田 宏治	分子情報科学
原田 達也	医用機械知能
中川 裕志	プライバシーと社会制度
岡谷 貴之	インフラ管理ロボット技術
川鍋 一晃	脳情報統合解析
山下 宙人	計算脳ダイナミクス

AIPセンターの研究戦略1:

国籍を問わず優秀なメンバーを集める

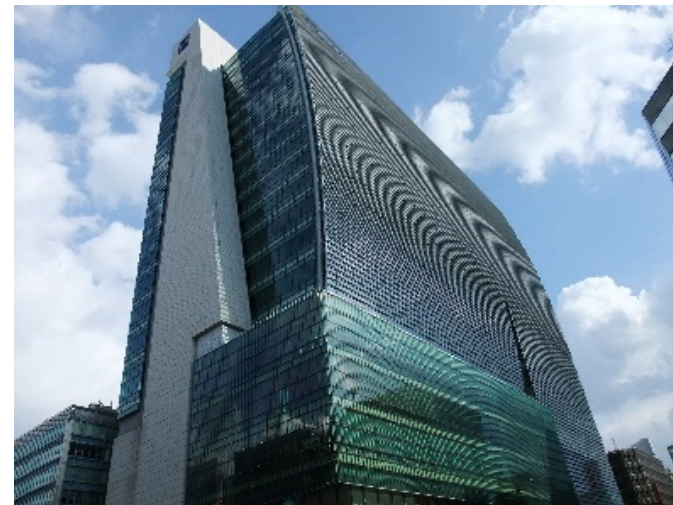
■ 外国人を積極的に登用:

- 優秀な研究者を国際的に競争力のある待遇で雇用
- 助っ人外国人でなく、真に国際的な研究拠点にする

■ 国内外から訪問者を受け入れやすい環境を準備:

- オフィスは東京駅近く
- 自由にディスカッションできる部屋

東京駅徒歩6分、日本橋駅直結の
日本橋一丁目ビルディング15階に入居
(2017年1月オープン予定)



AIPセンターの研究戦略2:

10年後を見据えた基礎研究を推進

■ 研究費は米国より2桁程度少ない:

- メジャーな応用研究は予算規模の勝負になりつつある

■ 基礎研究は未だ個人勝負:

- AlphaGoはDeepMindの少数の研究者の成果
- 現在大流行している深層学習も, 10年前は冷ややかに
- 数は多くないが日本にも優秀な理論研究者がいる
 - 深層学習の原理を理論的に解明し, 更なる性能・効率の向上
 - 深層学習で太刀打ちできない難題解決を目指した
次世代AI基盤技術の開発
- 研究費が少なくても逆転のチャンスはある!

AIPセンターの研究戦略3:

応用研究はテーマを厳選

■ 日本が元々強い分野をAIで更に強化:

- **iPS細胞**: 京都大学iPS細胞研究所(山中伸弥所長 [2012年ノーベル 生理学・医学賞受賞])
- **モノづくり**: 名古屋大学未来材料・システム研究所 (天野浩センター長 [2014年ノーベル物理学賞受賞])

■ 国内で行う必要のある社会的課題:

- **(高齢者)ヘルスケア**: 日本人のデータを解析すべき
- **防災・減災**: 日本(地域)に特化したシステムが必要
- **橋梁・トンネル等の検査**: 高度成長期からの課題
- **観光**: 地方再生の鍵

AIPセンターの研究戦略4: 人材育成を重視

7

■ **現状**: 日本のAI研究者は層が薄い

■ **高度な研究開発人材**を育成:

- 大学の非常勤研究者経由で学生を集める:

- 東大, 京大, 阪大, 東北大, 九大, 名大, 東工大, 筑波大, 名工大, 奈良先端大, 滋賀大, 静岡大, はこだて未来大, 慶大, . . .

- 連携企業の研究者・エンジニアを集める:

- 現在, 様々な企業と具体的な連携プランを議論中

■ **データサイエンティスト**を育成:

- 大学や研究所と協力して教育プログラムを実施

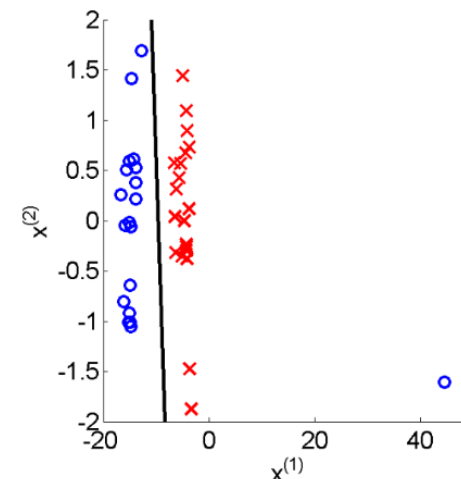
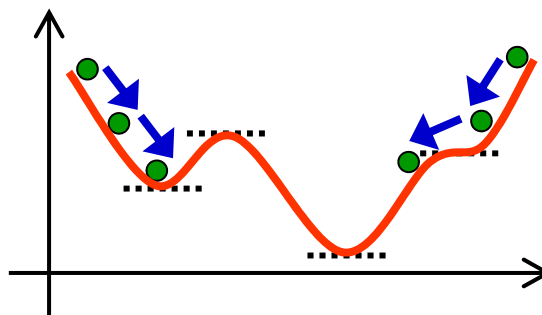
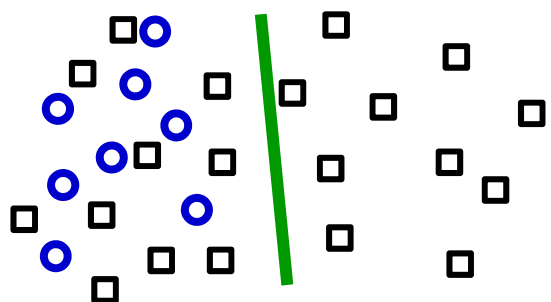
研究課題例：次世代基盤技術開発⁸

■ 深層学習の原理解明：

- 更なる予測性能と計算効率の向上

■ 深層学習でできないことを実現：

- 疎・不完全・超高次元データからの学習
- ストリーミングデータに対するリアルタイム学習
- 異常値・雑音を含むデータに対するロバスト学習
- マルチモーダルデータに対する学習
- 限られた情報からの学習



研究課題例：サイエンスの発達

9

■ iPS細胞の品質評価の自動化：

- iPS細胞の分化能の評価
- 移植した細胞の腫瘍化リスクの評価
- ゲノム上の点変異，挿入・欠失，コピー数変異，構造変異を検出

■ 生産製造技術の最適化：

- 効率的データ取得法
- 解析結果のフィードバックに基づいた製造装置の改良

■ 分子・物質設計の効率化

- 最適な分子構造を効率的に探索

研究課題例：社会実装に貢献

10

■ 超高齢社会へ向けた医療サポート

- 循環器医療画像からの診断支援
- 電子医療記録からの予後予測
- 会話を通じた高齢者の認知機能の維持向上

■ 老朽化が進むインフラへの対応

- 自動操縦ドローンを駆使し、
動画から橋梁などの危険
個所を自律的に特定

■ 甚大な自然災害への対応

- 甚大災害をもたらす異常気象を予測し、
被害を最小限に抑え迅速に復旧できる
社会システムを構築

研究課題例：社会的課題への対応¹¹

- 人工知能技術が社会に浸透する際の倫理的・法的・社会的影響を議論
 - 技術的特異点(シンギュラリティ)の影響分析
- 人工知能の倫理を数理的に解決：
 - プライバシ：暗号化データ上で動作する人工知能
 - セキュリティ：人工知能への敵対的攻撃に対する耐性
 - 倫理：予測・意思決定における公平性の保証

研究課題例：人材育成

12

- 大学や研究所と協力して、
データサイエンティストや
サイバーセキュリティ人材等の教育を実施
- クラウドソーシングを用いた
遠隔データ解析人材育成システムの構築

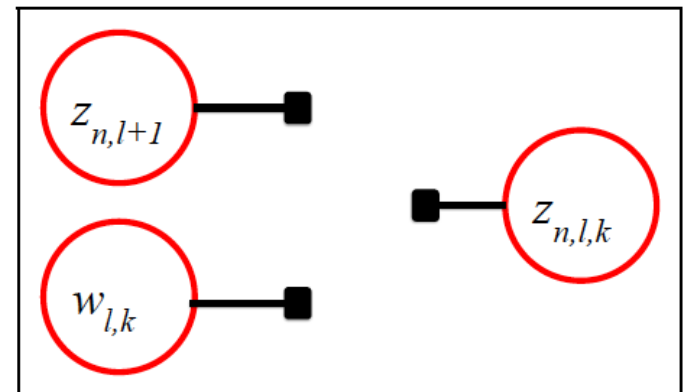
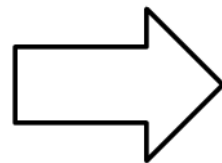
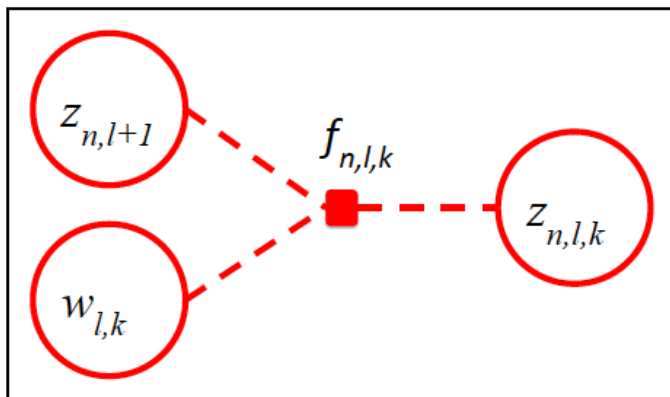
理研AIPセンターの取組のまとめ¹³

- **短～中期の取組**：現在のAI先端技術を活用して
 - 日本が元々強い分野を更に強化（iPS, モノづくり等）
 - 国内で行う必要のある社会課題を解決（ヘルスケア, 防災・減災, インフラ検査, 観光等）
 - 国内大学・企業の人材育成（先端研究OJT, 教育）
 - 深層学習の原理を解明し, 更なる性能・効率の向上
- **中～長期の取組**：次世代のAI基盤技術を開発して
 - 深層学習で太刀打ちできない難題を解決（限定情報学習, オンライン学習, ロバスト学習, 因果推論等）
 - 新産業の創生（産業界と連携して, 高度な数学に基づく次世代AI基盤技術をいち早く実用化）

Inference on Complex Bayesian Models using Simple Computations.

Mohammad Emtiyaz Khan and Wu Lin (AIP, RIKEN)

- ❑ New method for inference probabilistic graphical models that contain **difficult** terms by using **Stochastic Message-Passing**.
 - Non-conjugate terms (e.g. in logistic regression, we have Gaussian distribution with **logistic** likelihood).
- ❑ Main Idea: conjugate approximations for non-conjugate terms by using “proximal-gradient” method.
 - E.g. approximate logistic likelihood by Gaussian, which converts logistic regression to linear regression.
- ❑ Benefit: Modular, scalable, generalizable, and convergent updates.



数理最適化から機械学習へのアプローチ

武田 朗子 (統計数理研究所 / 理研AIPセンター)

- 難しいクラスの数理最適化問題に対し、効率の良い解法の開発
 - ✓ 非凸最適化 (非凸二次最適化, スパース最適化)
 - ✓ 不確実性下での最適化法 (ロバスト最適化)
- これらの最適化手法を機械学習へ適用:
3つの成果を紹介

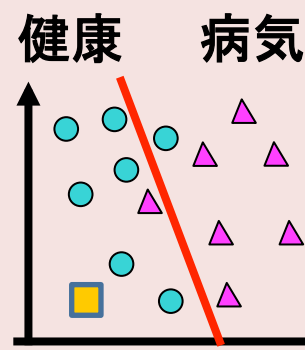
成果1

ロバスト最適化のアイデアに基づく,
統一的な二値判別モデル

$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{x}\|^2 \quad \text{s.t.} \quad \boldsymbol{x} \in \text{bd}(\mathcal{U}_+ \ominus \mathcal{U}_-)$$



二値判別問題

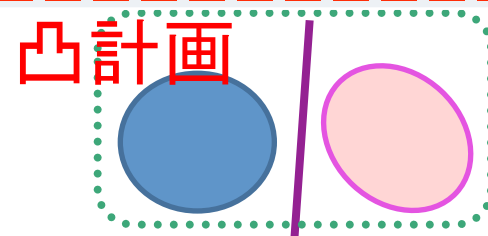
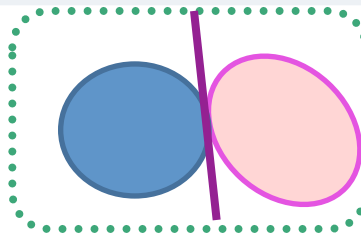
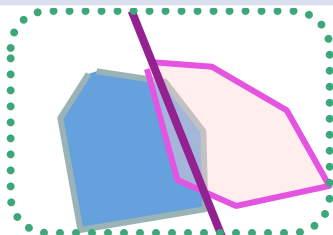


SVM, ロジスティック回帰,
FDA等, 様々な判別法

既存モデルとの関係

統一的な二値判別モデル: $\min_x \|x\|^2 \text{ s.t. } x \in \text{bd}(\mathcal{U}_+ \ominus \mathcal{U}_-)$

$\mathcal{U}_+, \mathcal{U}_-$	交わりあり	接する	交わりなし
楕円1:	なし	Fisher Discriminant Analysis (FDA) Fukunaga ('90)	Sparse Feature Selection Bhattacharyya ('04)
楕円2:	なし	Minimax Probability Machine (MPM) Lanckriet et al. ('02)	Minimum Margin-MPM Nath & Bhattacharyya ('07)
縮退凸包:	E _v -SVM Perez-Cruz et al. ('03)	v-SVM Scholkopf et al. ('00)	
凸包:		-----	Hard Margin SVM Boser et al. ('92)

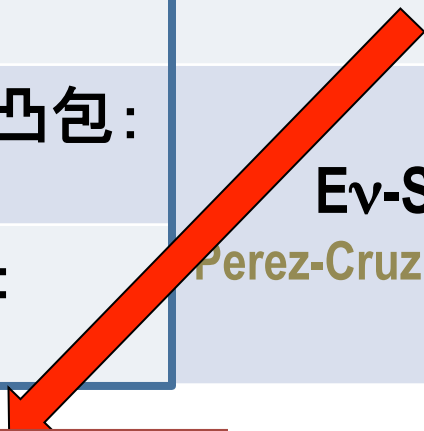


既存モデルとの関係

統一的な二値判別モデル: $\min_x \|x\|^2 \text{ s.t. } x \in \text{bd}(\mathcal{U}_+ \ominus \mathcal{U}_-)$

$\mathcal{U}_+, \mathcal{U}_-$	交わりあり	接する	交わりなし
楕円1:	モデル提案 (非凸2次最適化)	Fisher Discriminant Analysis (FDA) Fukunaga ('90)	Sparse Feature Selection Bhattacharyya ('04)
楕円2:	モデル提案 (非凸2次最適化)	Minimax Probability Machine (MPM) Lanckriet et al. ('02)	Minimum Margin-MPM Nath & Bhattacharyya ('07)
縮退凸包:	E ν -SVM Perez-Cruz et al. ('03)	ν -SVM Scholkopf et al. ('00)	
凸包:		-----	Hard Margin SVM Boser et al. ('92)

成果2



CDT問題の
解法提案

成果3



凸計画

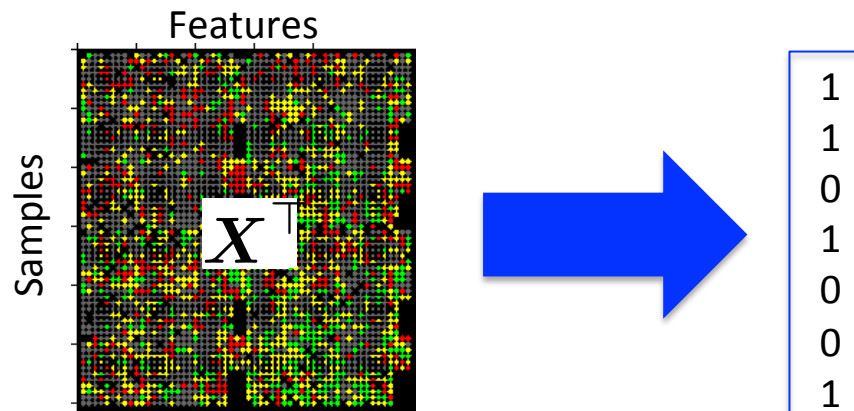
統一的な解法の提案

カーネル法に基づく特徴選択

Makoto Yamada (Kyoto Univ, JST PRESTO)

with Y. Umezu, K. Fukumizu, I. Takeuchi

- Feature selection/variable selection
 - Input, Output vectors: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, $y \in \mathbb{R}$
 - Pair data: $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} p(\mathbf{x}, y)$
- Goal: Select k ($k < d$) features of input $\mathbf{x}$ that are responsible for output y .
- Application: Biomarker detection



Post Selection inference with Kernels

- Feature selection is not good enough for scientists!
- We may want to test whether the selected features are statistically significant (p-values!!).
- Idea: First selecting features from data, and then testing the selected features.
- HSIC based post selection inference (hsicInf)
 - Can be used for any types of data 😊
 - Can handle nonlinearity through kernels 😊

組合せ論的 メトリカルタスクシステム 問題

九州大学 / 理研AIP 計算論的学習理論チーム

畑埜 晃平

共同研究者：

中園 拓己・森富 賢一郎・瀧本 英二（九州大学）

メトリカルタスクシステム (MTS) 問題

- オンライン意思決定問題の 1 つ

For $t = 1, \dots, T$:

アルゴリズム



意思決定 $c_t \in C$



環境



フィードバック



$f_t \in F$

- 各試行 t 毎のコスト：
意思決定 c_t に対する損失
+ 意思決定の変更に対するペナルティ
(意思決定間の「距離」に基づく)

- 具体例

- 株式投資 (手数料)
- ページング



- ゴール：競合比 = アルゴリズムの累積コスト / 全能神様の累積コスト の最小化

本研究:組合せ論的MTS問題

[Nakazono-Moridomi-H-Takimoto ALT16]

組合せ論的MTS問題

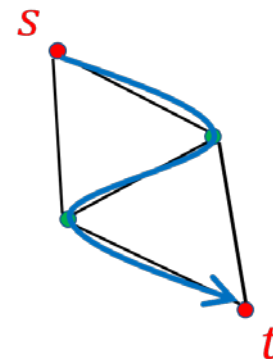
- 意志決定の集合 $C \subseteq \{0,1\}^d$ (d に対して指数的に大)
- 例: ルーティング, 全域木, 完全マッチングなど

既存研究

- 様々な距離指標に対してほぼ最適な競合比
- 最悪時指数時間

本研究

- 一様距離に対してほぼ最適オードの競合比
- 多くの意思決定の集合に対して多項式時間
- **キーアイデア: 学習理論におけるオンライン予測の知見を競合比解析に導入**



Stochastic Primal Dual Coordinate Method における適応的サンプリング

柴垣 篤志, 竹内 一郎 (名古屋工業大学)

目的: 確率的最適化手法である SPDC, Doubly SPDC の高速化

SPDC: 双対変数の一部をランダムに選び更新 →
主変数すべてを更新

DSPDC: 双対変数の一部をランダムに選び更新 →
主変数の一部をランダムに選び更新

手法:

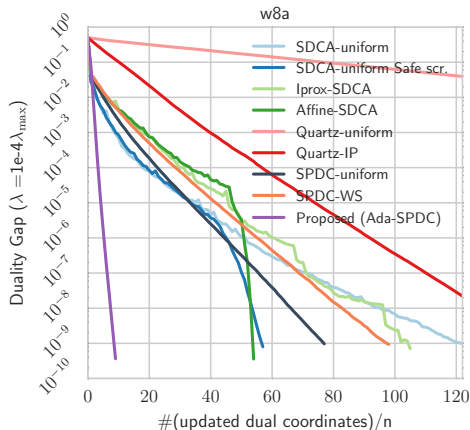
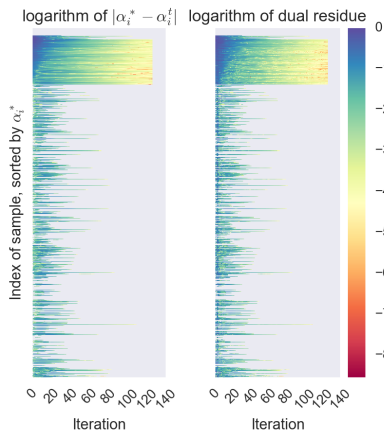
更新する変数のサンプリングを一様分布からではなく,
任意の分布を考えて収束の解析を行う

→ サンプリングの分布を適応的に変更することを考える

数値実験の結果

理想的には最適解と現在の解の差が大きい変数を更新したいが、
不可能なので最適性条件の違反度に依存した分布を採用

Elastic net + Smoothed hinge loss



劣モジュール関数を用いた構造正則化学習とその応用

河原 吉伸（阪大／理研）

1

パラメータに対する構造的な制限を加える正則化項の多くは、劣モジュール関数の連続緩和として表現できる：

$$\min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(y_i, f(\mathbf{x}_i; \mathbf{w})) + \lambda \cdot \Omega(\mathbf{w})$$

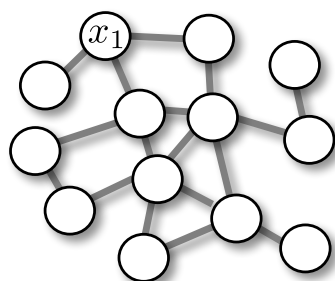
損失関数

学習モデル

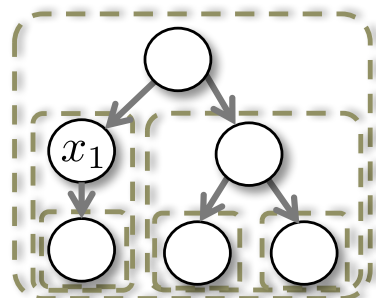
構造正則化項

こういった変数間の組合せ的な構造が、正則化項として組み込まれる

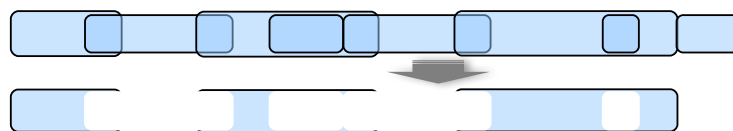
⇒ 劣モジュール関数の連続緩和 で表される



グラフ構造



階層構造



グループ構造

その他、有向グラフ上のパスや、2次元グリッド上でのブロック構造など。

劣モジュラ関数を用いた構造正則化学習とその応用

河原 吉伸 (阪大／理研)

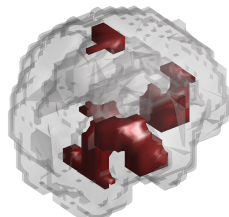
結合正則化のフロー計算への帰着, アルツハイマー病診断
などへの応用 (Bo et al., AAAI'14, ACM TIST (2015))

(結合正則化項)

$$\Omega(w) = \sum_{(i,j) \in E} a_{ij} |w_i - w_j|$$

カット関数のLovasz拡張である性質を利用して, proxの計算を高速に計算可能なネットワークフローの計算へ帰着

ADNIデータへの適用例



分類精度 (30MCI) 89.8 %

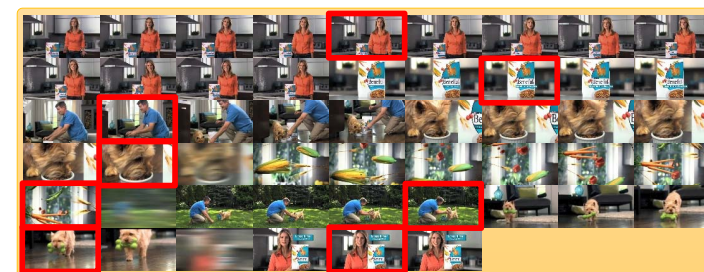
代表的サンプル選択への適用

(Wang et al., Pattern Recognition (2017))

$$\min_{V \in \mathbb{R}^{n \times n}} \frac{1}{2} \|X - XV\|^2 + \lambda_1 \sum_{i=1}^n \|v^i\| + \lambda_2 \sum_{i,j=1}^n \theta_{ij} |v^i - v^j| + \lambda_3 \sum_{i,j=1}^n \rho_{ij} |v_i - v_j|$$

多様性

局所的鋭敏性



動画の代表的シーンの選択への適用例

高速に解ける条件の導出 (パラメトリックフローへの帰着)

(Kawahara & Yamaguchi, Arxiv (2015))

結合的な疎性 => 対称劣モジュラ関数のLovasz拡張

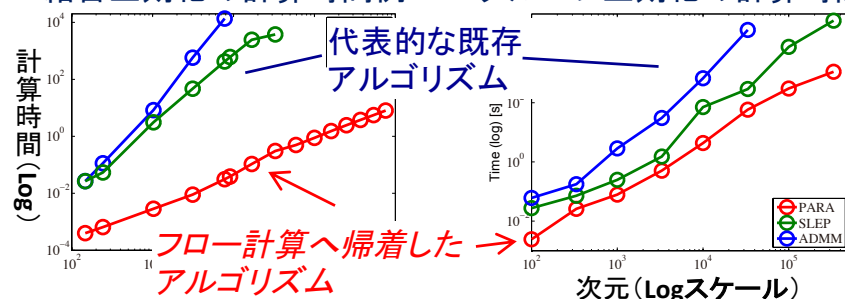
$\Omega(w)$

グループ的疎性 => $\sup_{t \in P_+(F)} \sum_{i \in V} t_i^{1/r} |w_i|$

非減少な劣モジュラ関数

結合正則化の計算時間例

グループ正則化の計算時間例

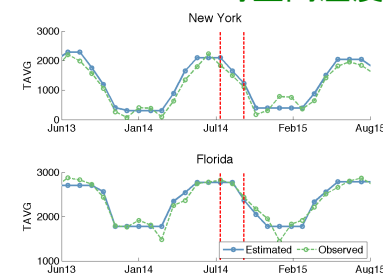


高階結合正則化への拡張

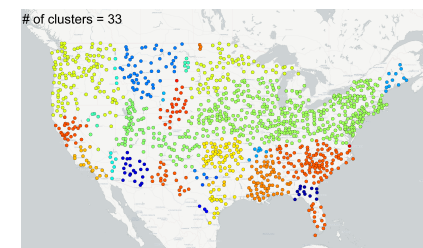
(Takeuchi et al., ECML-PKDD'15, TensorLern'16)

$$\Omega(w) = \sum_{k=1}^K \left(\sum_{i \in g_k} c_{k,i} \|z_i - \bar{z}_{k,i}\|_1 + \theta_k(z_{s_k}) - z_{t_k} \right)$$

時空間温度分布の推定への適用例



New YorkとFloridaの時間変化



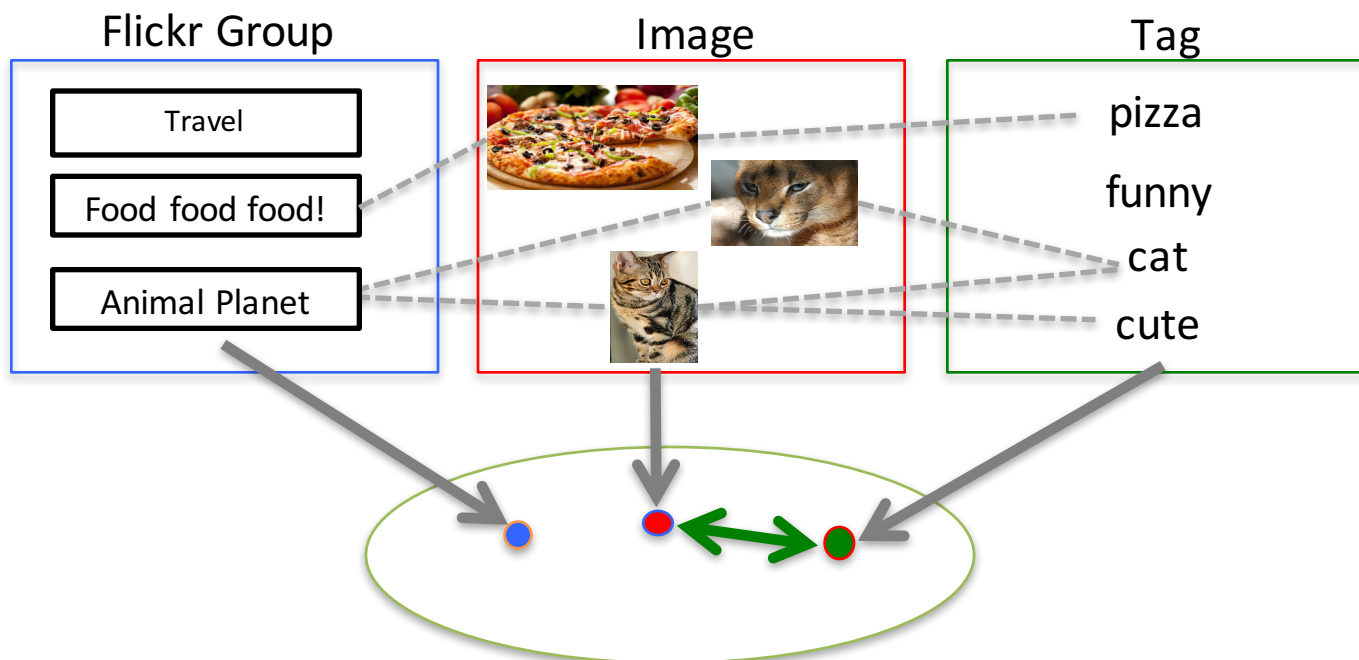
September, 2014

クロスドメインマッチング相関分析とその応用

大阪大学 下平研究室, 理研AIP 数理統計学チーム

Cross-Domain Matching Correlation Analysis (**CDMCA**) (Shimodaira 2016)

- 複数のドメインにおけるデータを次元削減により統合する多変量解析手法
- 関連するデータベクトル対がより近くなるように, 共通の低次元空間へ埋め込む

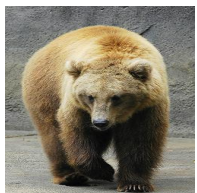
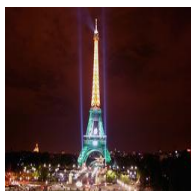


$$\underset{\mathbf{A}^1 \dots \mathbf{A}^D}{\text{minimize}} \quad \frac{1}{2} \sum_{d=1}^D \sum_{e=1}^D \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_e} w_{ij}^{de} \|(\mathbf{A}^d)^\top \mathbf{x}_i^d - (\mathbf{A}^e)^\top \mathbf{x}_j^e\|^2$$

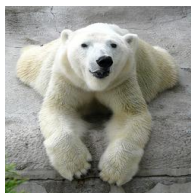
画像と単語の同時埋め込み



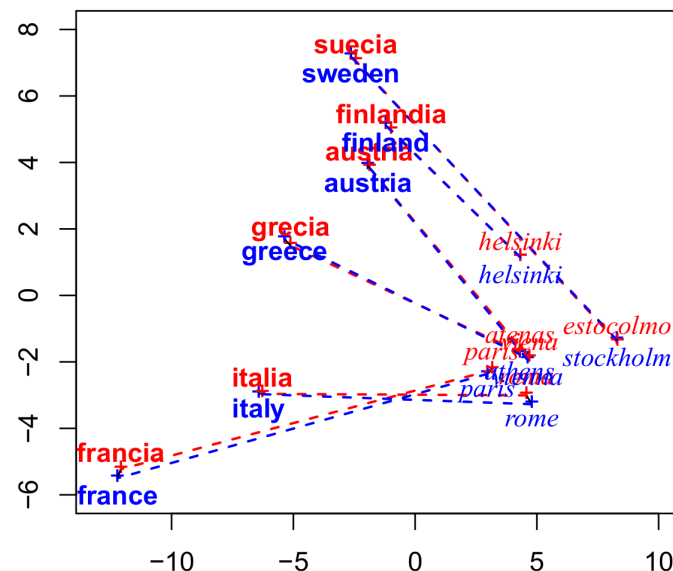
- day + night =



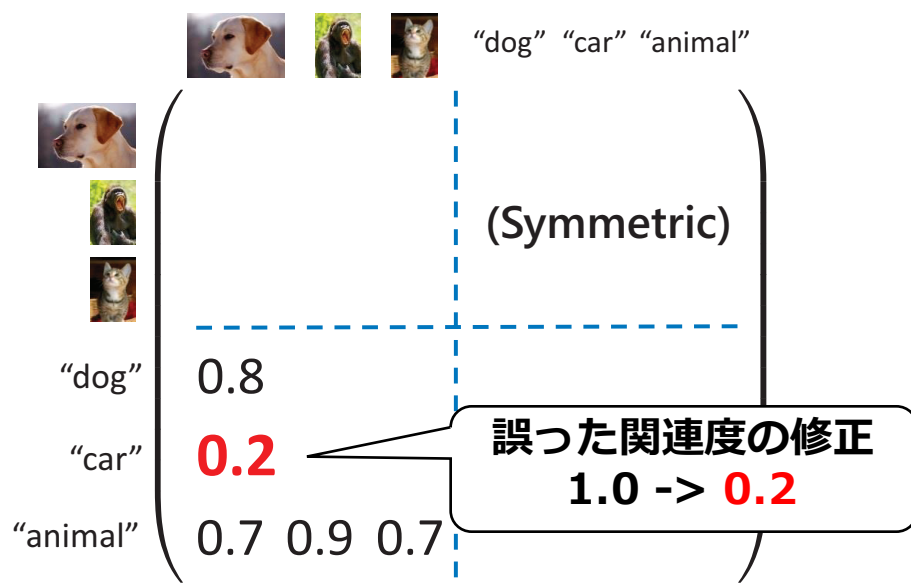
- brown + white =



多言語単語埋め込み



リンクの重みによるロバスト化



深層学習の組み込み

