

# 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

今倉 暁 (筑波大学 システム情報系・人工知能科学センター)

Web: <http://www.cs.tsukuba.ac.jp/~imakura/> E-mail: [imakura@cs.tsukuba.ac.jp](mailto:imakura@cs.tsukuba.ac.jp)

## 新しい機械学習のアルゴリズム

### 研究背景・解決すべき問題

(スーパー) コンピュータの高度利用に基づく、高性能行列計算技術を前提としたアルゴリズム開発

シミュレーション分野

データ解析分野

線形  
方程式

固有値  
分解

ディープ  
ラーニング

機械  
学習

応用研究 問題や需要に合わせたアルゴリズム開発

理論研究 数値線形代数に基づく基盤アルゴリズム開発

基盤技術 スーパーコンピュータの高度利用技術

シミュレーション分野では、  
→ 古くから活発に進められている

データ解析分野では、  
→ 必ずしも十分とは言えない  
(本プロジェクトのターゲット)

### 解決方法・波及効果

- 開発項目1: 高性能行列計算技術を前提としたディープニューラルネットワーク (DNN) 計算法の開発
- 開発項目2: 高性能行列計算技術を前提とした機械学習法の開発
- 開発項目3: 高性能基盤行列計算法の開発

「スーパーコンピュータ × 機械学習」による  
サイバーフィジカル社会の実現へ!

### 成果・今後の展開

- 非線形非負値行列因子分解 (非線形NMF) 型DNN計算法の開発に成功! → 実応用に向けた研究を実施中
- 複素モーメント型次元削減法の開発に成功! → 実応用に向けた研究を実施中
- 各種行列計算アルゴリズムの開発に成功!

広範なニーズに対応するアルゴリズム開発を目指す!

現在、医療・金融分野等での応用を想定した、「分散データ統合解析技術」の開発を進めている

#### 開発項目1

##### 非線形NMF型DNN計算法

[ICONIP 2016, Neural Processing Letters 2018, IJMLC 2018]

- ✓ DNNモデル: 活性化関数: ReLU
- ✓ 目的関数: 二乗誤差 + 正則化

$$\min_{W,b} E + \lambda \sum_{i=1}^d \|W_i\|$$

$$E = \|Y - Waf(W_{d-1} \dots f(W_1 X + b_1 \mathbf{1}^T) \dots + b_{d-1} \mathbf{1}^T) + b_d \mathbf{1}^T\|$$

##### ✓ 基盤アイデア

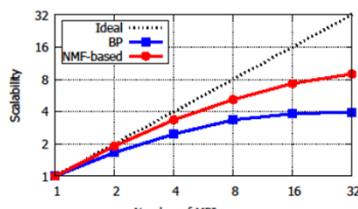
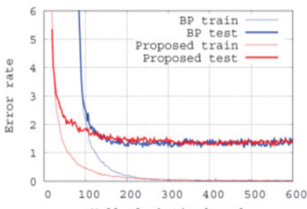
- ・最適化ステップ: 非線形NMFに基づく逐次最適化

$$\min_{W_i, b_i, (Z_{i-1} \geq 0)} \|\hat{Z}_i - f(W_i Z_{i-1} + b_i \mathbf{1}^T)\|_F + \alpha \|W_i\| + \beta \|Z_{i-1}\|, \\ i = d-1, d-2, \dots, 2$$

- ・更新ステップ: 計算したWからZを更新
- ・反復計算: 得られたW,Zを初期値として最適化・更新ステップを繰り返す

##### ✓ 性能評価

- ・テスト問題: 画像認識 (MNIST)



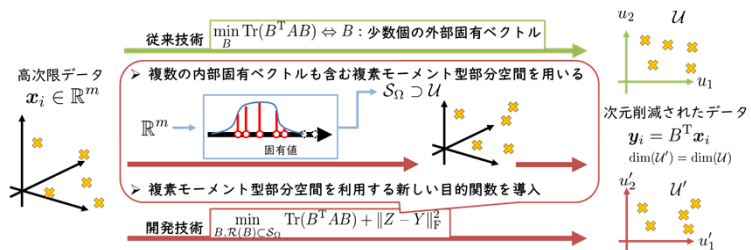
古典的なBP法と同程度の認識性能と高い並列性を実現!

#### 開発項目2

##### 複素モーメント型次元削減法 (CMSE)

[AAAI 2019]

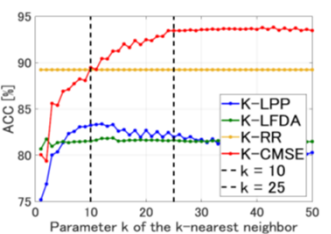
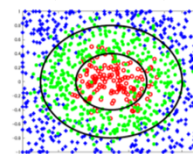
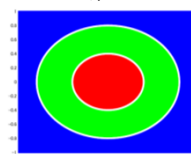
- ✓ 基盤アイデア: 近年注目される並列固有値解法の基盤技術である複素モーメント技術を応用



##### ✓ 性能評価

テストデータと正解ラベル

学習データ (ノイズ入り)



複素モーメント技術の機械学習法への有用性が示された!

#### 開発項目3

##### 各種行列計算アルゴリズム

- ✓ 線形方程式解法 [JJIAM 2019, JCAM 2020a, ...]
- ✓ 固有値解法 [Parallel Comput. 2018, JCAM 2020b, ...]
- ✓ 行列分解法 [Comput. Math. Appl. 2019]
- ✓ 行列直交化 [JJIAM 2018]