

数学・数理科学と情報科学の連携・融合による情報活用基盤の創出と社会課題解決に向けた展開

2021 年度採択研究代表者

2021 年度 年次報告書

吉田朋広

東京大学大学院数理科学研究科

教授

大規模時空間従属性データ科学へ向けた先端的確率統計学の新展開

§ 1. 研究成果の概要

従属系に対する確率統計学、機械学習の理論とこれらの融合、さらにその生命科学等への展開を目指している。

(A) 確率過程の統計学の基礎となる推測理論および確率論の研究

レヴィ駆動型の確率微分方程式モデルの情報量規準の新しい形を与え、それらの理論的性質を示した。また、ウイナー汎関数の漸近展開法を研究した。

(B) 確率過程論と機械学習理論の融合、および統計計算理論の研究

平均場設定におけるニューラルネットワークの新しい最適化手法を提案した。確率的最適化手法として、有限次元の凸最適化問題で提案された双対平均加法を用い、多項式オーダーでの収束を実現した。粒子間の相互作用のある確率微分方程式(McKean-Vlasov 過程)は、ポテンシャルが非凸な場合の空間・時間離散化の誤差解析は難しいが、目的関数の勾配を求めるごとにサンプリングを実行することでこの困難を克服した¹⁾。また、深層ニューラルネットワークを用いて、関係データ解析に関する新しい統計手法の開発を行い、その有用性を確認した^{2),3)}。さらに、機械学習を利用した新しいベイズ計算法の開発、および区分確定的マルコフ過程の研究を進めている。

(C) 生命科学への従属性の統計学の展開

因果推論に関連する漸近理論の研究を行なった。生体時系列データに潜む変動指数の安定した推定法の研究とその実証、また、正規分散平均混合分布族に基づく混合効果モデリングの提案および理論研究を行った。

(D) 大規模従属系の高次元高頻度データに対する統計推測とその応用

柱状ブラウン運動で駆動された1次元空間放物型 SPDE モデルの係数パラメータに対する適応型推定法が Q-ブラウン運動で駆動された2次元空間放物型 SPDE モデルに応用可能となり、高頻度時空間データに基づく Q-ブラウン運動で駆動された2次元空間放物型 SPDE モデルの係数パラメータの適応型推定法を開発した。微小攪乱パラメータをもつ確率微分方程式で定義される微小拡散過程モデルにおけるドリフトパラメータとボラティリティパラメータの統計的推定について研究を行なった。

(E) 研究の統合と YUIMA による計算環境の構築

YUIMA の開発を進めた。また、YUIMA-Bayes のための関数群の検討を行った。

§ 2. 研究実施体制

(1) 東京大学グループ

① 研究代表者: 吉田 朋広 (東京大学大学院数理科学研究科 教授)

② 研究項目

確率微分方程式、確率偏微分方程式、点過程、学習理論との融合、半解析的方法の開発、YUIMA開発(確率微分方程式・点過程の統計解析、非正規確率過程)、臨床統計・混合モデル・縦断データ、因果推論・DTR・マッチング、生命科学への応用、時空間データ解析、高頻度データ解析

(2) 大阪大学グループ

① 主たる共同研究者: 内田 雅之 (大阪大学大学院基礎工学研究科 教授)

② 研究項目

確率微分方程式、確率偏微分方程式、計算機集約的方法の開発、YUIMA 開発(確率微分方程式の統計解析)、時空間データ解析、高頻度データ解析

(3) 九州大学グループ

① 主たる共同研究者: 増田 弘毅 (九州大学大学院数理学研究院 教授)

② 研究項目

確率微分方程式、学習理論との融合、半解析的方法の開発、混合モデル、YUIMA 開発(確率微分方程式・点過程の統計解析、期待値計算、非正規確率過程)、生命科学への応用、時空間データ解析、高頻度データ解析

(4) 統計数理研究所グループ

① 主たる共同研究者: 鎌谷 研吾 (統計数理研究所モデリング研究系 准教授)

② 研究項目

確率微分方程式、学習理論との融合、計算機集約的方法の開発、MCMC・ベイズ統計学的手法、YUIMA 開発(確率微分方程式・点過程の統計解析、非正規確率過程)、時空間データ解析

(5) 東京大学情報理工グループ

① 主たる共同研究者: 鈴木 大慈 (東京大学・大学院情報理工学系研究科 准教授)

② 研究項目

確率微分方程式、点過程、学習理論との融合、計算機集約的方法の開発、MCMC・ベイズ統計学的手法、臨床統計・混合モデル・縦断データ、因果推論・DTR・マッチング、生命科学への応用、高頻度データ解析

【代表的な原著論文情報】

- 1) Atsushi Nitanda, Denny Wu, Taiji Suzuki: Particle Dual Averaging: Optimization of Mean Field Neural Networks with Global Convergence Rate Analysis. *Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021)*, pp.19608–19621, 2021.
- 2) Chihiro Watanabe, and Taiji Suzuki: Deep Two-Way Matrix Reordering for Relational Data Analysis. *Neural Networks*, Vol. 146, pp. 303--315, 2022.
- 3) Chihiro Watanabe, Taiji Suzuki: AutoLL: Automatic Linear Layout of Graphs based on. Deep Neural Network. *IEEE Symposium Series on Computational Intelligence (SSCI 2021)*.