氏　　　名	ガラムカリ　和
学位(専攻分野)	博士(情報学)
学位記番号	総研大甲第 2416 号
学位授与の日付	2023 年 3 月 24 日
学位授与の要件	複合科学研究科　情報学専攻 学位規則第6条第1項該当
学位論文題目	Convex Manifold Approximation for Tensors
論文審査委員	主　査　杉山　麿人 情報学専攻　准教授 吉田　悠一 情報学専攻　教授 井上　克巳 情報学専攻　教授 三村　和史 広島市立大学　大学院情報科学研究科　教授 山田　誠 京都大学　大学院情報学研究科　准教授

（様式３）

博士論文の要旨

氏　　名　ガラムカリ　和

論文題目　Convex Manifold Approximation for Tensors

Dimensionality reduction constructs low-dimensional features of high-dimensional data and is widely used in machine learning and data mining. Low-rank approximation is a well-established dimensionality reduction method, which represents data with a linear combination of a small number of bases. It is originally designed for matrices, and recently extended for multi-dimensional arrays, or tensors. However, most of dimensionality reduction methods, including low-rank approximation, still have a number of issues, including the necessity of non-convex optimization in their reduction processes, which causes the initial value dependency.

This study formulates dimensionality reduction of non-negative multi-dimensional arrays as a convex problem. The key idea is to describe model manifolds containing dimensionality-reduced arrays with a dual-flat coordinate system used in information geometry. We can define a flat model manifold by mapping a multi-dimensional array to a discrete probability distribution and formulating dimensionality reduction as an operation of reducing natural parameters of the distribution. This flatness guarantees that a convex optimization can find an optimal point on the model manifold that globally minimizes the Kullback-Leibler divergence from the data.

In the first part of this dissertation, we analyze the low-rank approximation, a typical dimensionality reduction method, from an information-geometric viewpoint and propose a non-gradient-based low-rank approximation for tensors. The set of low-rank tensors is not guaranteed to be flat. Therefore, we formulate the low-rank approximation as a convex problem by extracting flat subspaces in the space of low-rank tensors and regarding them as model manifolds. We prove that the projection onto the model manifold can be realized by performing multiple rank-1 approximations, where the exact solution is obtained in a closed form. Since this optimization is not based on the gradient method, the user does not need to carefully tune initial values, learning rates, or stopping criteria. As we show numerically, the proposed method is faster than traditional low-rank approximations because it does not involve iterative operations.

In addition, using the property that projections onto the model manifold do not change the expected value of the distribution, we derive a solution formula of the best rank-1 simultaneous approximation for non-negative multiple matrices. Moreover, as an application of the formula, we develop an efficient method for rank-1 non-negative matrix factorization with missing values. We use the fact that the objective function of non-negative matrix factorization with missing values coincides with that of simultaneous factorization for non-negative multiple matrices under appropriate permutations on rows and columns. Since this method is not based on the gradient method, it has the advantage of not requiring appropriate settings for initial values, learning rate, and stopping criteria, which have been issues in the past.

Our analysis using information geometry not only leads to the above novel algorithms but also reveals the analogy of rank-1 approximation and mean-field approximation, which further enables us to show the uniqueness of the balanced rank-1 tensor.

Furthermore, in the second part of this dissertation, we introduce tensor many-body approximation as a novel convex dimensionality reduction method. The proposed method uses interactions between modes in the tensor instead of a low-rank structure. We model such interactions using an energy function by following the standard strategy of statistical mechanics, which can be viewed as a natural extension of the rank-1 approximation for tensors. The proposed method has the following three advantages: it does not require rank tuning, the cost function is guaranteed to be convex, and the best solution can be efficiently obtained by the natural gradient method. Furthermore, we propose an interaction representation that can visually describe interactions between modes in a tensor. This visualization can be transformed into a tensor network, which shows the nontrivial relationship between our formulation and the existing tensor low-rank approximation. In particular, tensor many-body approximations with appropriately chosen active interactions can be regarded as constrained tensor ring decompositions, which can be solved by convex optimization. This finding of a class that can be solved by convex optimization in tensor ring decomposition is novel and interesting as it has been suffered from the difficulty of non-convex optimization to date.

This research enables efficient dimensionality reduction through discussions across three fields: linear algebra, which deals with tensors and matrices; information geometry, the geometry of probability distributions; and energy-based models, a methodology inspired by statistical mechanics that deals with interactions.

Form8・Separate Sheet
（様式８・別紙１）

Results of the doctoral thesis screening

博士論文審査結果

Name in Full
氏　　名　　ガラムカリ　和

Title
論文題目　　Convex Manifold Approximation for Tensors

本学位論文は、「Convex Manifold Approximation for Tensors」と題し、行列やテンソルを対象としたデータ解析技術、特にそれらを近似し分解する手法について、情報幾何学的なアプローチからの理論と実践に関する成果を述べている。行列やテンソルは、線形代数的なデータ解析における主要な対象であり、これまで低ランク近似を中心とした分解の技術が発達してきた。しかし、低ランク近似は一般に非凸最適化を含むために不安定となり、特にテンソルの低ランク近似ではランクの設定が非自明であったり、そもそも解が無数に存在してしまう不良設定問題となっていたり、といった課題が知られている。そこで本論文では、情報幾何学的な観点から低ランク近似を捉え直し、新たに最適化手法を設計することで、最適化の凸化を実現し、上記の問題を本質的に解決する手法を提案している。本学位論文は英語で執筆されており、全 6 章から構成されている。

第 1 章「Introduction」では、まず研究の背景として、行列やテンソルに対する低ランク近似問題を導入し、これまでの技術や課題について紹介している。その後、非負テンソルを離散確率分布として捉えることで、低ランク近似問題がどのような情報幾何学的操作として実現されるのかを議論している。最適化の凸性といった提案アプローチが内包する特徴について述べ、本論文の主要な貢献についてまとめている。

第 2 章「Preliminaries」では、研究を展開していく際に用いる数理モデルについて、その内容をまとめて導入している。具体的には、半順序の構造を持つ離散分布を扱うための対数線形モデルと、パラメータが持つ情報幾何学的な性質、そして確率分布がなす統計多様体における最適化について述べている。

第 3 章「Legendre Tucker rank Reduction」では、非負テンソルに対する高速な低タッカーランク近似手法 LTR を提案している。テンソルでは、タッカーランクと呼ばれるランクに着目し、低タッカーランク近似によってテンソルを分解する手法が広く用いられている。本論文では、テンソルに対して情報幾何学的なパラメータ変換をおこなうことで、タッカーランク 1 近似が平均場近似と一致することを示し、かつ勾配法を用いることなく解析的に厳密解が計算できることに着目している。この性質に基づき、ランク 1 近似を部分的に繰り返し適用することで、任意のランクに対する低タッカーランク近似が KL ダイバージェンス最小化として凸最適化で実現できることを理論的に示すとともに、効率的なアルゴリズムを提案している。実データを用いた実験によって、LTR が既存手法より高速に動作し、かつ同程度の近似精度が維持できることを示している。

第 4 章「Fast Rank-1 NMF for Missing Data with KL Divergence」では、欠損値を持つ行列に対する高速なランク 1 近似手法を提案している。まず複数の非負行列を同時に分解する問題に着目し、ランク 1 近似であれば解析的に厳密解が計算できることを理論的に

示している。さらに、欠損値を持つ行列の分解において、欠損箇所がグリッド状になるような特定の条件を満たすときに複数行列分解と等価な問題となることに着目し、欠損箇所を増やすことで任意の欠損値を持つ行列の高速なランク 1 近似を凸最適化で実現するアルゴリズム A1GM を提案している。実データを用いた実験によって、既存手法よりも高速に低ランク近似が達成できることを示している。

第 3 章、第 4 章では一貫して低ランク近似問題を扱い、問題を適切に限定することで凸最適化へと変換することに成功してきたが、一般に低ランク近似は非凸最適化になってしまう。そこで第 5 章「Many-Body Approximation for Nonnegative Tensors」では、まず低ランク近似問題の幾何学的な性質を解析し、非凸性の原因として低ランクの行列やテンソルがなす空間が幾何学的に平坦ではないことを見出している。そして、この問題を本質的に解決するために、低ランク性ではなくテンソルのモード間の相互作用に着目し、取りうる相互作用を限定することでテンソルを近似する手法である多体近似を新たに提案している。多体近似は常に凸最適化であることが保証され、二次の勾配を用いた自然勾配法による高速な最適化が可能である。さらに、ユーザーが直感的にモデルを指定できるように、テンソルモード間相互作用を図示するための方法論を確立している。人工データおよび実データを用いた実験によって、既存の低ランク近似手法と比較して、より高速かつ同程度の近似精度が安定的に達成できることを示している。

最後に、第 6 章「Conclusion」で本論文の貢献をまとめ、提案手法の限界や欠点、そして今後の課題や展望について述べている。

公開発表会では、博士論文の章立てに従って発表がおこなわれ、その後におこなわれた論文審査会及び口述試験では、審査員からの質疑に対して適切に回答がなされた。質疑応答後に審査委員会を開催し、審査委員で議論をおこなった。審査委員会では、出願者が情報学分野の十分な知識と研究能力を持つと認められるとともに、博士研究がテンソル分解において十分な新規性を有しており、かつ学術的にも優れた貢献であることが評価された。

以上を要するに本学位論文は、テンソルの近似や分解に対する情報幾何学的アプローチが持つ理論的性質を精緻に議論し、かつ実効的な手法を提案したものであり、今後の同分野の発展に影響を与えうる独創的かつ完成度の高い研究成果である。また、本学位論文の成果は、学術雑誌論文 1 件、フルペーパー査読付き国際会議論文 2 件として発表され、学術的な貢献も認められる。以上の理由により、審査委員会は、本論文が学位の授与に値すると判断した。