

審査の結果の要旨

氏名 木脇 太一

近年、新しい機械学習手法として深層の識別モデルが大きな成功を収めており、理論的な解析も複数報告されて来ている。その反面、Deep Generative Model (DGM, 深層生成モデル) に関しては多くの未解決問題が残されている。問題点のひとつとして、DGM に関する性能評価指標の不十分さが上げられる。本論文は、DGM の構成様式のひとつである Boltzmann Machines (BM, ボルツマンマシン) の持つ特性に着目し、実用上有用な大規模 BM に対する数理的解析を行うことで、この問題に対する解決の糸口を探ったものである。具体的な方法として、本論文では、BM に関するデータに依存した性能指標およびデータに依存しないモデルの表現能力に関する性能指標のそれぞれに対して数理的な解析を行っている。

本論文は、「Mathematical Analysis of Large-Scale Boltzmann Machines」(大規模ボルツマンマシンの数理的解析) と題し、7 章より成る。

第 1 章「Introduction」(はじめに) では、深層学習を含めた機械学習手法を俯瞰し、深層化の意義について議論している。またこれらの背景に基づいて、BM を研究する利点と本研究の位置づけを明確にするとともに、本研究の全体構成を説明している。

第 2 章「Boltzmann Machines」(ボルツマンマシン) では、BM の学習アルゴリズムおよびデータに依存した生成性能の指標を与えるための代表的な手法である Annealed Importance Sampling (AIS) に関して、詳細に説明している。

第 3 章「Information Transmission Efficiency from Data to Representations of Gaussian RBMs」(ガウシアン RBMs におけるデータから表現への情報転送効率) では、近似的に評価したガウシアン RBM (GRBM) におけるデータから隠れ表現への相互情報量と、隠れ表現を画像識別問題へ利用した際の識別性能の関係性に着目し、GRBM 表現のデータに依存した識別性能の指標に関して研究した。まず GRBM の学習において、長期の学習により識別問題に有用な特徴量が失われてしまう現象を実験的に発見した。

GRBM 表現を用いて画像識別を行う際、この現象により識別性能が悪化してしまう。ここではこの現象に対処するために、GRBM 表現とデータ間の相互情報量を近似的に評価し、その近似値が最大となる時点で学習を止める早期学習終了法を提案した。さらに、GRBM 表現に対して学習した Support Vector Machines の識別性能を実験的に確かめることにより、提案法の有効性を確認した。

第 4 章「Designing an Initial Distribution for Annealing Gaussian RBMs」(ガウシアン RBMs のアニーリングのための初期分布の設計)では、GRBM を対象にした AIS において高い推定精度を達成するための初期分布の効果的な設計法について研究した。従来、GRBM のアニーリングにおける初期分布としては、重み行列が零である GRBM が用いられてきた。この初期分布は対角な共分散行列を持つガウス分布と等しく、非零の変数間相関を持つ一般の GRBM に対する近似分布としては適切とは限らない。そこでここでは、非対角共分散行列を持ちうるガウス分布を初期分布として選ぶことのできる、新たなアニーリング・パスの設計を行った。この方法を用いることで適切な共分散行列を持つ初期分布からアニーリングを行うことが可能となる。また、AIS 推定精度が改善されることを数値実験から確かめた。

第 5 章「Optimizing an Annealing Schedule for BMs」(BMs のためのアニーリング・スケジュールの最適化)では、一般の BM を対象とした AIS に関して、推定誤差最小化の意味でのアニーリング・スケジュールの近似的最適化を行った。AIS により良好な推定精度を得るための一つの重要な条件として、アニーリング・スケジュールの適切な設定がある。従来、アニーリング・スケジュールとしては試行錯誤を通して発見的に構成されたものか、最適性を考慮していない線形スケジュールが実用上多く用いられてきた。いくつか自動的な構成法が提案されているものの、計算量、BM への適用可能性、最適化指標の明確さなどの点で問題があった。ここでは理想的な近似条件下において AIS 推定誤差を支配する汎関数を導出し、その最小化問題を数値的に解くことにより、最適アニーリング・スケジュールを近似するアルゴリズムを提案した。また導出に用いた近似が良く成り立つ大きなアニーリング・ステップ数のもとで、提案法による推定精度が従来法を上回ることを数値実験を通して確認した。

第 6 章「Quantifying and Enhancing the Representational Power of Deeply Layered BMs」(深階層 BMs の表現能力の定量化および改善)では、BM の表現能力の近似的な解析を通して、新たな深階層 BM を提案することで生成性能の改善に取り組んでいる。BM を含む DGM に対する従来の研究では、DGM の表現能力が理論的に深く理解されないまま、実験的研究が理論的

研究に先行してきた。そこでここでは BM を対象として表現能力に対する理論的な基準を用いることで、効果的な深階層 BM アーキテクチャの設計を試みた。まず BM がデータ空間に持つ **negative log probability** の上界を与える区分線形関数を導出し、その区分線形領域の数を数えることにより BM の表現能力を近似的に評価する方法を提案した。この評価指標の上で従来提案されていた **Deep BM (DBM)** の表現能力が強く限定されたものであることを示した。この制限を取り除くための新たな深階層 BM として **soft-Deep BM (sDBM)** を提案し、パラメータ数に対する指數的な評価指標の向上を理論的に示した。また実験的にも従来報告されていた **DGM** による結果を大きく改善する結果を得た。

第 7 章「**Conclusion**」(結論) は、本論文の結論をまとめたものである。

以上を要するに、本論文は大規模ボルツマンマシンに対して、識別問題および生成問題での評価を扱ったデータに依存した性能評価ならびに生成モデルとしての表現能力を扱ったデータに依存しない性能評価の両面で数理的解析を行っている。この成果は、情報科学および電気系工学上貢献するところが大きい。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。