

論文内容の要旨

申請者氏名 ZHANG FAN

ガウス過程回帰はノンパラメトリックな確率モデルであり、予測値だけでなく、予測の信頼度を表す予測標準偏差をも計算することができる。また、カーネル関数を設計することで自由自在に非線形化でき、尤度関数を変えることで外れ値に頑健なモデルにしたり、分類モデルに拡張したりでき、非常に柔軟性の高いアルゴリズムといえる。このため、ガウス過程は材料科学や創薬研究でよく用いられている。さらに近年では、深層学習とガウス過程回帰を組み合わせた深層カーネルガウス過程やガウス過程回帰を複数組み合わせた深層ガウス過程なども提案されており、これらはガウス過程回帰より高い精度でモデリングできることが報告されている。

しかしながら、ガウス過程回帰はノンパラメトリックであるため、解釈するのが難しい。近年では、様々な観点から解釈可能なAIが求められている。解釈可能性にはグローバルな解釈性とローカルな解釈性がある。ガウス過程回帰をグローバルに解釈する方法としてカーネル関数のスケールパラメータやARDカーネルのlengthパラメータを比較する方法などがある。しかし、ARDカーネルは目的変数と線形な関係にある説明変数を重要でないと判断してしまうことを指摘し、感度分析を用いて特徴量重要度を計算する手法を提案している。一方で近年、モデルに依存しないローカルな解釈を行う手法が数多く提案されている。LIMEやkernel SHAPのような解釈可能な代理モデルを用いて解釈する手法があるが、これらは乱数によって結果が変化することや、高次元データに対しては計算コストが高くなる欠点がある。他にも勾配を用いて解釈する感度分析がある。しかし、感度分析はSensitivityとImplementation invarianceという2つの公理を満たさないことが示されており、これらの公理を満たす勾配を用いた手法として、Integrated Gradientsが提案され、深層学習モデルを解釈する際によく用いられる。しかし、これらの手法をそのまま使用しただけではガウス過程の予測値は解釈できるが、予測標準偏差を解釈することは難しい。GPRと同等で解釈可能な確率モデルGPXも開発されているが、GPXでは深層学習などと組み合わせると解釈するのが難しくなってしまう。そこで、本研究ではGPRはもちろん、DKLGPRやGPCなども解釈できるIntegraed Gradinetsベース手法を開発したので報告する。

論文審査結果の要旨

申請者氏名 ZHANG FAN

ベイズ最適化を活用した物性の最適な化学構造式を推定する方法を提案した。その方法はDKLGPRやGPCなども解釈できるIntegraed Gradinetsベース手法であり、博士として十分な内容の研究であると判断できる。