

論文内容の要旨

博士論文題目

ベイズ推定に基づく高次元データに対する特徴抽出に関する研究

氏名

大羽 成征

(論文内容の要旨)

高次元データを取り扱う際には、「次元の呪い」と呼ばれる種々の問題への対応が不可欠である。計算量爆発の問題、ノイズを含む学習データへの過適応の問題などが良く知られており、これらに対しては高次元ベクトルデータから比較的低次元の特徴ベクトルを抽出する特徴抽出の手法が必要である。また過適応の問題に対しては、モデル選択やモデルの正則化もまた必要となる。ベイズ推定は、近年になって応用の進んだパラメータ推定の方法であるが、これによればモデル選択とモデル正則化とが自然な形で定式化できる。本研究では、特徴抽出において実用上重要ないくつかのモデルに関するベイズ推定の計算方法を導き、応用を行った。

本論文は3部構成から成る。第1章では以降の章への導入として、高次元の問題の一般的な解説、ベイズ推定に関する一般的な解説を行う。第2章では、主成分分析とクラスタリングの考え方を発展させた確率モデルである確率的な主成分分析モデル、混合主成分分析モデルを取り扱う。これらの確率モデルは複雑な階層構造を持つため、ベイズ推定によるモデル選択と正則化の効果が大きい。そこで実際に最尤推定とベイズ推定のそれぞれに基づく定式化を比較することで、ベイズ推定のメリットを示した。またこれらのモデルを用いて欠測を含むデータを解析する方法について述べる。これにより、欠測を含むデータを直接用いてクラスタリングを行うことが可能となり、また同時に欠測予測も行うことができる。手書き文字の分類・認識問題に応用し、手法の有効性を議論する。高次元データの解析手法として従来の階層型ニューラルネットワークなどと同様以上の性能を持つことを示す。さらに、提案手法をバイオインフォマティクス分野におけるDNAマイクロアレイ解析に関して応用した結果についても述べる。DNAマイクロアレイ解析ではデータに含まれる欠測値の取り扱いが大きな問題となるが、ベイズ推定に基づく欠測予測法が、これまでに提案されている代表的な手法であるK平均法や特異値分解法に比べてはるかに高い性能を示すことが示された。第3章ではカーネル法の一つであるガウス過程回帰モデルを取り上げる。これは回帰問題一般に対するベイズ推定の問題になっている。ロボット制御等のリアルタイムな実問題への応用を考えると、関数近似器にはオンライン的に変動する環境への追従性能が必要になる。ガウス過程回帰モデルに対してデータの重みを時間に沿って減衰させていく方法、時間軸を入力空間に含める方法の二つを提案し、この両者が、カーネル共分散行列の自然な拡張によって得られることを示す。

(論文審査結果の要旨)

本博士論文は、高次元データを扱う問題を扱うことを主な目的として、確率モデルのベイズ推定に基づく新たな定式化、および、その応用による有効性検証を行った結果をまとめたものである。本論文の主な成果は要約すると以下のとおりである。(1) 混合主成分分析確率モデルのベイズ推定に関して変分法的ベイズ法に基づく新たな定式化を行っている。とくに変分法的ベイズ法に必要となる未知パラメータ間の因子化仮定を、最小限に抑えることで近似精度を上げている。得られたアルゴリズム (VB-EM アルゴリズム) は、そのステップごとに上限のある自由エネルギーを増加させており、したがって収束性が保証されている。(2) 混合主成分分析モデルを欠測予測に用いるために、VB-EM アルゴリズムの拡張法を開発している。これもまた収束性が保証されている。(3) 分布推定問題、文字認識問題、関数近似問題、欠測予測問題においてベイズ推定と最尤推定のモデル選択性能を比較し、ベイズ推定によるモデル選択の有効性を示している。とくに欠測予測に関する有効性を人工問題、実問題によって示している。(4) ガウス過程回帰法のオンライン学習法を提案している。

昨今では機械学習の分野においてベイズ推定の可能性が広く注目されており、複雑なモデルに対するベイズ推定が実際に実用上十分な速度と精度で計算可能であることを示し、実問題におけるベイズ的モデル選択の有効性を示した本研究の価値は高い。またとくに欠測値の取り扱いはバイオインフォマティクスの分野において重要視されていた未解決問題であり、本論文において新欠測予測法の提案とその有効性の立証がなされた点は高く評価できる。

(4) のガウス過程法はカーネル法的一种であり、カーネルを用いることで高次元入力空間を比較的低次元の特徴空間へ落とすことができる。ニューラルネットの代表的なモデルである多層パーセプトロンの隠れ層個数無限極限との等価性が示されていることと、関数近似問題に関するベイズ的に自然な定式化に基いているために注目されている。実時間学習では、オンライン的に過去の学習結果を忘却する必要があるが、本論文で示された2つの方法はこれを自然に実現しており、今後広範囲への応用が見込まれる。

以上から、本論文を博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。