

氏 名 金 森 敬 文

学位（専攻分野） 博士(学術)

学 位 記 番 号 総研大甲第419号

学位授与の日付 平成11年9月30日

学位授与の要件 数物科学研究科 統計科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学 位 論 文 題 目 能動学習の統計的漸近理論

論文審査委員 主 査 教 授 中野 純司

教 授 江口 真透

教 授 尾崎 統

助 教 授 栗木 哲

村田 昇（理化学研究所）

本論文では、システムへの入力確率分布を観測者が設定できるような学習系について考察した。このような学習系における学習は能動学習と呼ばれ、ニューラルネットワークの分野では最近になって研究が行われるようになった。ここでまず考察する必要があるのは、システムに対してどのような入力を、どのようなタイミングで与えるべきかという問題である。学習した機械とシステムとの誤差を Kullback-Leibler divergence を用いて測ることにして、設定したモデルが正しいときと間違っているときに分けて、この問題についての考察を行った。

最初にモデルが正しいときを考える。この場合、入力の分布によらずに最尤推定量は一致性を持つ。そこで、推定量として最尤推定量を用いる。このとき最適な入力は、環境の分布と適切な質問の分布の混合分布として求めることができる。いま観測者は、システムへの質問分布を指定することができ、また、システムへの入力を環境の分布から質問分布へと切り替える時点を指定できるとする。学習者が設定できるこれらのパラメータを学習パラメータと呼ぶことにする。このとき、観測者はシステムと環境に関する完全な知識を持っていないために、最適な学習パラメータを設定することはできない。そこで、いくつか例題を観測して、それにもとづいて学習パラメータを設定し、その学習パラメータにしたがって例題を収集するという学習方法を採用する。このような学習アルゴリズムの具体的な構成として ALA(s) を提案した。ここで、パラメータ s は、最適な学習パラメータを推定するために始めに収集する例題の個数を表している。能動学習アルゴリズム ALA(s) は、漸近的に一次のオーダーでは最適なアルゴリズムであることがわかる。さらに高次のオーダーを計算することにより、ALA(s)の最適なパラメータ s_{opt} を決定することができ、総例題数を T とすると、 $s_{opt}=O(T^{1/2})$ となることがわかる。ALA(s)のパラメータ s が大きいときには学習パラメータを良く推定できるが、その推定結果を用いて収集できる例題の数は $T-s$ 個となってしまい、ここにトレードオフが生じる。その結果として最適なパラメータ s_{opt} が定まる。ALA(s)のパラメータ s に関する以上の結果は、能動学習を行うときのアルゴリズムの設計指針になると考えられる。さらに情報幾何を用いて、環境のみから入力を生成する受動学習と、質問を入力として用いることが可能な能動学習の汎化誤差の差について考察した。汎化誤差の一次のオーダーに着目し、受動学習と能動学習の汎化誤差の差を e -接続に関する平均曲率ベクトルを用いた幾何学量と対応付けた。その結果、能動学習が受動学習よりも効果的であるようなモデルを幾何学的に特徴付けることができた。

次にモデルが間違っているときを考える。この場合、環境とは異なる質問分布を用いて例題を生成すると、その例題に対して最尤推定量を用いてシステムの最適パラメータを推定しても一般には一致性を持たない。これは、モデルが間違っている状況では、システムの最適パラメータは環境によって異なるために生じる現象である。本論文では推定量の一致性を回復するために重み付き最尤推定量を用いた学習法を提案している。重み付き最尤推定量は一般に統計的な有効性は保証されていないが、一致性を回復するための簡便な方法として利用できる。また、重み付き最尤推定量を計算するためには、重みを知る必要があ

る。そこで、1) システムが置かれている環境が既知のとき、2) 環境はあるパラメトリックモデルに含まれているとき、という二通りの設定のもとで、能動学習のアルゴリズムについて考察した。1) の状況では、重み付き最尤推定量の重みを正確に決定することができる。ALA(s)と同様にして、重み付き最尤推定量を用いた能動学習アルゴリズム W-ALA₁(s)を構成した。このアルゴリズムのパラメータ s は、最適な学習パラメータを推定するために始めに収集する例題の数を表している。W-ALA₁(s)の汎化誤差を高次項まで計算することにより、パラメータ s を最適化することができる。それによると、総例題数 T に対して、 $s_{opt} = O(T^{1/2})$ とすれば良いことがわかる。2) の状況では、重み付き最尤推定量の重みを推定する必要がある。このとき、重みを正確に知ることは不可能であり、推定された重みを用いた重み付き最尤推定量はバイアスを持つことになる。重みによるバイアスを考慮して、能動学習のアルゴリズムを構成したものが W-ALA₂(s)である。

ところで、実際の状況を考えてみると、一致性が保証されている推定量は、データ数が無限大のときには好ましいが、データ数が有限という現実的な状況では、必ずしも良い推定量というわけではないといえる。そのことを考慮して、学習データから適切な重み関数を決定するために、重み付き最尤推定量の情報量規準を構成して、その情報量規準を用いた能動学習アルゴリズム IC-ALA を構成した。能動学習のアルゴリズム IC-ALA は、W-ALA₁の推定量を学習データに対して推定量を適応的に選択できるように改良したものである。

最適実験計画の分野では、実験の設計のためのさまざまな基準が提案されているが、ここでは、学習理論における汎化誤差を実験設計の基準として用いた。それにより、学習理論や推定論で発展しているさまざまな手法を導入することが可能になる。本論文で提案した情報量規準を用いる方法も、一般的な推定論や学習理論の方法を実験の設計に応用したものである。一般的に、情報量規準はモデル選択という文脈で現れることが多いが、ここでは推定量を選択するための規準として用いている。本論文で示したような情報量規準の使い方も、学習に柔軟性を持たせる意味で非常に有効的であると考えられる。

論文の審査結果の要旨

審査委員会は金森敬文君の論文について慎重に検討するとともに、公開論文発表会を開催して審査を行った。提出された論文はニューラルネットワークで研究されている能動学習の枠組みを、ひとつの統計的な観点から考察したものである。すなわち回帰分析における説明変数がある確率分布に従う場合に、それを一時的に別のものに指定する操作を行い、それらの中で観察されたデータを用いてモデルのパラメータ推定を行うものである。統一的な損失関数として Kullback-Leibler ダイバージェンスを採用し、それを最小化するという観点からのアルゴリズムをいろいろな場合に対して与えた。そしてそれらの方法に関して、漸近理論的な検討がなされた。

(1) 論文概要。論文は6章からなっている。第1章では、学習理論の一般論の中で能動学習が紹介され、最適実験計画との関連について歴史的背景が述べられている。第2章は学習理論の枠組みが確率分布を用いて記述され、統計的決定理論に沿って損失関数が導入された。第3章はモデルが正しい時の能動学習について考察された。まず、推定のアルゴリズムが提案される。次に、能動学習の汎化誤差の下限を求め、提案したアルゴリズムがその下限を達成することを漸近論で証明する。また、能動学習と受動学習の比較を情報幾何学的な立場から解釈した。第4章ではモデルが必ずしも正しくない時の能動学習について考察された。重み付き最尤推定による能動学習アルゴリズムが提案され、その汎化誤差を与える漸近公式が示された。第5章では、情報量規準を用いた適応的能動学習を提案している。これは4章で求められた公式を援用して重み付けのワンパラメータ族を適応的に定めたものである。第6章は今後の課題と考察についてまとめられている。なお、多くの章で、理論的考察のあとには計算機実験が行われ、その理論の妥当性を検証している。

(2) 論文の評価。本論文の第一の貢献は、統計学の最適実験計画に能動学習の枠組みを持ち込んだことである。学習理論における能動学習はニューラルネットワークの分野で盛んに研究されるようになってきているが、それに対して統計的観点から考察を行い、最適実験計画の分野を拡大したことは評価できる。第二の貢献は、上記の枠組みの中で、考えられる多くの場合に対して、具体的な推論のアルゴリズムを与えるとともにその性質を漸近理論により明らかにしたことである。また、数値実験により、その妥当性を確認していることも重要である。

以上のように、本論文は統計学に、ニューラルネットワークと学習理論での考え方を導入するという重要な知見をもたらしたものである。このことにより、本論文は博士号取得に十分値する内容を有するものと判断する。