

早稲田大学大学院 先進理工学研究科

博士論文審査報告書

論文題目

深層ニューラルネットの積分表現理論

Integral Representation Theory
of Deep Neural Networks

申請者

園田	翔
Sho	SONODA

電気・情報生命専攻 情報学習システム研究

2017年2月

ニューラルネットは20世紀半ばに脳の数理モデルとして登場して以来、新規アルゴリズムの提案・数学的理論の進展・実問題への応用展開が相互に絡み合いながら、約20年の周期で盛衰を繰り返し発展してきた。最近では、画像処理・信号処理・自然言語処理といった応用分野で威力を発揮し、また囲碁などのゲームプログラムにおいても利用され注目を浴びている。近年の急速な発展は、素子数の増加による大規模化だけではなく、層状構造の多層化を進めた深層学習と呼ばれる技術が1つの原動力となっている。深層学習とは、これまでは困難となされていた膨大な数のパラメタ群の学習を、さまざまな方法を巧妙に組み合わせて効率良く行うための技術の集合体である。例えば、中間層の活性化関数としての非有界関数の利用、多層化されたニューラルネットをDAE (denoising autoencoder) やRBM (restricted Boltzmann machine) といった比較的単純な構造に分解して予備的な学習を行う事前学習の導入、プーリング層や畳み込み層と呼ばれる恣意的なフィルタ構造の採用、ドロップアウトによる確率的な構造の多様化など新旧様々なアイデアが取り込まれている。深層学習は実問題において威力を発揮している新たな学習の枠組であるが、なぜそれほどまでに性能が良いのかについては現在のところ理論的に明瞭な答えは与えられていない。

本論文の著者は、深層学習に取り入れられている個々の技術に着目し、学習の機序の理解を目的として以下の2つの結果を得ている。1つは、新たに活性化関数として導入されたReLU (rectified linear unit) と呼ばれる切断冪関数によって表現される関数のクラスを明らかにしたことである。もう1つは、DAEを用いた事前学習において得られる中間表現が、入力分布のエントロピーを減少させる輸送問題の解と密接に関係していることを明らかにしたことである。いずれの解析においても、本来離散系で記述されるニューラルネットの連続系での極限、すなわち積分表現を構成し、その厳密な記述から得られる解析結果を還元することによって離散近似としてのニューラルネットを理解することを基本的な考え方としている。

以下に本論文の構成と概要、および評価をまとめる。

第1章「序論」では昨今のニューラルネットの理論研究の概略を解説するとともに本論文の構成を述べている。第2章「本研究の位置づけ」においては、まず深層学習の理論研究の最近の動向を筆者自身の考えを交えながらまとめている。時代を分割して研究の進み方を解説するとともに、理論的に解決すべき問題として筆者が注目している学習により獲得される内部表現の問題について詳しく述べている。その後、深層ニューラルネットの基本構成要素となる浅いニューラルネットにおいて展開された関数近似理論、学習能力の評価、リッジレット解析など、これまでの主要な研究の流れを整理し、自身の研究の位置づけを明確にしている。

第3章「数学的準備」および第4章「ニューラルネットの積分表現理論」では、必要となる数学的な道具立てを網羅的に整理している。第3章の前半では本論文で対象とする超関数の空間、Fourier変換、Radon変換、ウェーブレット変換といった積分変換の定義・性質をまとめている。後半では拡散方程式と輸送問題の関係、また近年輸送問題との関係が明らかになってきた Wasserstein 幾何学についてまとめている。第4章では、浅いニューラルネットの解析のために90年代に提案されたリッジレット解析について自身で新たに計算した内容も含め整理している。また、超関数の空間で独自の理論を展開するための道具立てとして、リッジレット変換をRadon変換とウェーブレット変換の合成変換として再定義している。これらはいずれも既存の研究とはいえ、比較的新しい研究分野であり、まとまった文献もないので、統一的に整理されたレビューとしても重要な章となっている。

第5章「有界でない活性化関数のための積分表現理論」では、超関数によるリッジレット変換を駆使し、ReLUを含む非有界な活性化関数を用いた3層ニューラルネットの積分変換と再構成公式を示し、独自の積分表現理論を構築している。既存の理論では扱われなかった関数のクラスにまで活性化関数を広げることができること、およびその活性化関数で表現できる関数のクラスを厳密に示しており、その理論的な価値は評価に値する。これは実問題において経験的に知られてはいたが、理論的には明らかでなかった「なぜReLUを用いたニューラルネットには十分な近似能力があるのか?」という問いに対する1つの回答を示したことになる。

第6章「デノイジング・オートエンコーダーの積分表現理論」では、深層ニューラルネットの1つであるDAEの積分表現を構成している。その要点は、まずDAEを輸送写像として捉えること、多層のDAEの積層表現に対して同値な輸送写像の合成写像が存在すること、合成されたDAEの連続極限として導かれる微分方程式から多層のDAEの積分表現が得られることとまとめることができる。更に、連続極限としてのDAEを用いた事前学習の過程はデータ分布のエントロピーを最小化する逆拡散過程として理解でき、事前学習で得られるのはエントロピーを最小化する輸送写像であることを示している。したがって、実際の離散系での学習はこの過程の近似として理解することができる。これらの結果はDAEの構造に依存したものであるものの、深層ニューラルネットの多層構造に関する積分表現は初めて得られたものであり、解析結果の重要性はもとより、新たな解析手法の提案としても評価できる。

第7章「積分表現の離散化による学習法」では、第5章で得られた浅いニューラルネットの積分表現の応用として新たな学習方法を考案している。具体的には、積分表現からパラメタ空間の確率分布を構成し、ランダムサンプリングを用いることによってパラ

メタの学習を行う方法を提案するとともに、高次元入力において厳密なサンプリングが困難になる問題に対して効率的な近似法の提案を行っている。また、提案する学習方法の有効性については数値実験により確認している。ここで提案された学習方法は、誤差逆伝播法のような既存の学習方法とは全く異なるものであり、大規模データに対するニューラルネットの新たな学習方法の開発に貢献できるものと考えられる。

第8章「結論」では、本研究で得られた知見をまとめるとともに、今後の展望を述べている。

以上、深層構造をもつニューラルネットの学習機構を解明するために、本論文において著者は数理科学的に重要な2つの成果をあげている。1つ目は、超関数を用いた積分変換により浅いニューラルネットの活性化関数のクラスを従来考えられていたものより拡張していることである。2つ目は、深層ニューラルネットの1つである積層DAEの積分表現を構成することにより、その学習機構が輸送写像によるエントロピー最小化と本質的に同等であることを解明したことである。これらは深層構造をもつニューラルネットの解析における新たな結果であり、またそこで用いた方法論も筆者独自のものとして学術的にも評価できる。よって、博士(工学)の学位論文として価値あるものと認められる。

2017年1月

審査員

主査	早稲田大学 教授	博士(工学)	東京大学	村田 昇
	早稲田大学 教授	博士(工学)	早稲田大学	渡邊 亮
	早稲田大学 教授	博士(医学)	京都大学	井上 真郷
	早稲田大学 准教授	博士(理学)	東京工業大学	浜田 道昭
	産業技術総合研究所 研究員	博士(工学)	東京大学	赤穂 昭太郎