

〒1920082 東京都八王子市東町 9 番 8 号 八王子東町センタービル 5 階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

decoder (14) on the basis of a loss function (19) that includes an error term indicating an error between the data (15) and the data (18), and a correction term indicating a probability calculated from the data (16) by using a plurality of probability distributions each having a variance corresponding to the threshold value.

(57) 要約: 入力データの分布に対応する特徴データの分布をもつオートエンコーダを生成する。情報処理装置 (10) は、データ (15) をエンコーダ (13) に入力してデータ (16) を生成する。情報処理装置 (10) は、大きさが閾値以下のノイズをデータ (16) に付加してデータ (17) を生成する。情報処理装置 (10) は、データ (17) をデコーダ (14) に入力してデータ (18) を生成する。情報処理装置 (10) は、データ (15) とデータ (18) との間の誤差を示す誤差項と、閾値に応じた分散をそれぞれもつ複数の確率分布を用いてデータ (16) から算出される確率を示す補正項とを含む損失関数 (19) に基づいて、エンコーダ (13) およびデコーダ (14) の訓練を実行する。

明 細 書

発明の名称：

機械学習プログラム、機械学習方法および情報処理装置

技術分野

[0001] 本発明は機械学習プログラム、機械学習方法および情報処理装置に関する。

背景技術

[0002] 機械学習モデルの1つに、エンコーダとデコーダとを含むオートエンコーダ（自己符号化器）がある。エンコーダは、入力データを、入力データよりもサイズが小さい特徴データに変換する。デコーダは、特徴データから入力データを予測する。オートエンコーダは、入力データを圧縮するために用いられることがある。また、オートエンコーダは、入力データの特徴を分析するために用いられることがある。

[0003] なお、入力データからエンコーダを用いて確率分布の平均および分散を算出し、確率分布からランダムにサンプルを選択し、選択されたサンプルからデコーダを用いて入力データを予測する分類オートエンコーダが提案されている。また、オートエンコーダを用いて物理システムのイベントの発生を予測するイベント予測方法が提案されている。また、入力データをデータ量の小さい圧縮データに変換するための変分オートエンコーダを訓練する機械学習システムが提案されている。

[0004] また、オートエンコーダを訓練する学習装置が提案されている。提案の学習装置は、エンコーダを用いて入力データを特徴データに変換し、特徴データにノイズを付加し、デコーダを用いてノイズ付き特徴データを出力データに変換する。学習装置は、入力データと出力データとの間の誤差と、特徴データの確率分布の情報エントロピーとを最小化するように、オートエンコーダのパラメータと特徴データの確率分布とを訓練する。

[0005] また、機械学習モデルを用いて画像データを符号化する画像符号化装置が

提案されている。提案の画像符号化装置は、画像データを潜在空間の特徴データに変換し、特徴データを量子化し、量子化特徴データをエントロピー符号化してビットストリームを生成する。

先行技術文献

特許文献

[0006] 特許文献1：米国特許出願公開第2019/0095798号明細書

特許文献2：特開2019-153279号公報

特許文献3：米国特許出願公開第2021/0027169号明細書

特許文献4：国際公開第2021/059349号

特許文献5：特開2021-150955号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0007] ユーザは、入力データの分布に対応する特徴データの分布をもつオートエンコーダを取得したいことがある。特徴データの分布がもつ性質として、ユーザは、2つの入力データの距離が大きいほど、当該2つの入力データに対応する2つの特徴データの距離が大きいことを期待することがある。この性質は、等長性と呼ばれることがある。また、ユーザは、入力データの分布が複数のピークをもつ多峰分布である場合、特徴データの分布も多峰分布であることを期待することがある。

[0008] しかし、オートエンコーダを訓練する従来の機械学習技術の中には、特徴データの分布が等長性をもち、かつ多峰分布であるようなオートエンコーダを生成する機械学習技術はなかった。そこで、1つの側面では、本発明は、入力データの分布に対応する特徴データの分布をもつオートエンコーダを生成することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0009] 1つの態様では、以下の処理をコンピュータに実行させることを特徴とする機械学習プログラムが提供される。第1のデータをエンコーダに入力して

第2のデータを生成する。大きさが閾値以下のノイズを第2のデータに付加して第3のデータを生成する。第3のデータをデコーダに入力して第4のデータを生成する。第1のデータと第4のデータとの間の誤差を示す誤差項と、閾値に応じた第1の分散をそれぞれもつ複数の第1の確率分布を用いて第2のデータから算出される確率を示す補正項とを含む損失関数に基づいて、エンコーダおよびデコーダの訓練を実行する。また、1つの態様では、コンピュータが実行することを特徴とする機械学習方法が提供される。また、1つの態様では、記憶部と制御部とを有することを特徴とする情報処理装置が提供される。

発明の効果

[0010] 1つの側面では、入力データの分布に対応する特徴データの分布をもつオートエンコーダが生成される。

本発明の上記および他の目的、特徴および利点は本発明の例として好ましい実施の形態を表す添付の図面と関連した以下の説明により明らかになるであろう。

図面の簡単な説明

[0011] [図1]第1の実施の形態の情報処理装置を説明するための図である。

[図2]第2の実施の形態の情報処理装置のハードウェア例を示す図である。

[図3]オートエンコーダの構造例を示す図である。

[図4]オートエンコーダの使用例を示す図である。

[図5]矩形窓関数とガウス型窓関数の例を示す図である。

[図6]入力データ空間と潜在空間の対応例を示す図である。

[図7]情報処理装置の機能例を示すブロック図である。

[図8]ハイパーパラメータテーブルの構造例を示す図である。

[図9]イテレーションデータの構造例を示す図である。

[図10]機械学習の手順例を示すフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0012] 以下、本実施の形態を図面を参照して説明する。まず、第1の実施の形態

を説明する。図 1 は、第 1 の実施の形態の情報処理装置を説明するための図である。第 1 の実施の形態の情報処理装置 10 は、訓練データを用いてオートエンコーダを訓練する機械学習を実行する。情報処理装置 10 は、クライアント装置でもよいしサーバ装置でもよい。情報処理装置 10 が、コンピュータまたは機械学習装置と呼ばれてもよい。

[0013] 情報処理装置 10 は、記憶部 11 および制御部 12 を有する。記憶部 11 は、RAM (Random Access Memory) などの揮発性半導体メモリでもよい。また、記憶部 11 は、HDD (Hard Disk Drive) やフラッシュメモリなどの不揮発性ストレージでもよい。

[0014] 制御部 12 は、例えば、CPU (Central Processing Unit)、GPU (Graphics Processing Unit)、DSP (Digital Signal Processor) などのプロセッサである。ただし、制御部 12 が、ASIC (Application Specific Integrated Circuit) やFPGA (Field Programmable Gate Array) などの電子回路を含んでもよい。プロセッサは、例えば、RAMなどのメモリ(記憶部 11 でもよい)に記憶されたプログラムを実行する。プロセッサの集合が、マルチプロセッサまたは単に「プロセッサ」と呼ばれてもよい。

[0015] 記憶部 11 は、オートエンコーダに含まれるエンコーダ 13 およびデコーダ 14 を記憶する。オートエンコーダ、エンコーダ 13 およびデコーダ 14 が、機械学習モデルと呼ばれてもよい。エンコーダ 13 およびデコーダ 14 はそれぞれ、機械学習によって値が更新されるパラメータを含む。エンコーダ 13 およびデコーダ 14 は、例えば、複数の層を含むニューラルネットワークである。その場合、エンコーダ 13 およびデコーダ 14 に含まれるパラメータは、例えば、隣接する層の間のエッジの重みである。エンコーダ 13 およびデコーダ 14 のパラメータ値は、例えば、訓練開始時に初期化される。

[0016] エンコーダ 13 は、入力データを、入力データよりサイズの小さい特徴データに変換する。特徴データは、例えば、入力データより次元の少ない特徴ベクトルである。特徴データが、潜在変数データまたは潜在変数ベクトルと

呼ばれることがある。デコーダ 14 は、特徴データを、特徴データよりサイズの大きい出力データに変換する。エンコーダ 13 と組み合わせて訓練されたデコーダ 14 は、特徴データから入力データを予測する。

[0017] 入力データの種類としては、様々なものが考えられる。入力データは、画像データでもよいし、音声データでもよいし、自然言語データでもよいし、その他の測定データでもよい。よって、オートエンコーダは、画像処理モデルでもよいし、音声処理モデルでもよいし、自然言語処理モデルでもよいし、測定データ分析モデルでもよい。

[0018] 情報処理装置 10 は、入力データの分布に対応する特徴データの分布をもつように、エンコーダ 13 およびデコーダ 14 を訓練する。特徴データの分布に期待される性質には、等長性および多峰性が含まれる。等長性は、入力データ上の相対的な距離が特徴データ上でも保存されることである。よって、2つの入力データの距離が大きいほど、当該2つの入力データに対応する2つの特徴データの距離も大きい。

[0019] 多峰性は、特徴データの分布が、出現確率について複数のピークをもつ多峰分布であることである。入力データは複数の種類に分類されることがあり、入力データの分布は複数の種類に対応する複数のピークをもつ多峰分布であることがある。その場合、特徴データの分布も多峰分布であることが好ましいことがある。等長性および多峰性をもつオートエンコーダは、例えば、入力データの特徴を分析する際に有用である。

[0020] 制御部 12 は、訓練データを用いてエンコーダ 13 およびデコーダ 14 を訓練する。訓練データは、ラベルが付与されていない教師なしデータであってもよい。制御部 12 は、データ 15 をエンコーダ 13 に入力することで、データ 15 からデータ 16 を生成する。データ 15 は入力データに相当し、データ 16 は特徴データに相当する。

[0021] 制御部 12 は、大きさが閾値以下のノイズをデータ 16 に付加することで、データ 16 からデータ 17 を生成する。データ 17 は、ノイズ付き特徴データに相当する。データ 16 が複数の次元を含むベクトルである場合、例え

ば、制御部 12 は、各次元の要素値に、大きさが閾値以下のランダムなノイズ値を加算する。例えば、制御部 12 は、絶対値が閾値以下の数値範囲をもつ一様分布の中から、ランダムにノイズ値を選択する。

[0022] 制御部 12 は、データ 17 をデコーダ 14 に入力することで、データ 17 からデータ 18 を生成する。データ 18 は出力データに相当し、データ 15 の予測結果と解釈される。制御部 12 は、データ 15, 16, 18 と損失関数 19 とに基づいて、エンコーダ 13 およびデコーダ 14 の訓練を実行する。このとき、制御部 12 は、損失関数 19 の値が小さくなるように、エンコーダ 13 およびデコーダ 14 のパラメータ値を更新する。

[0023] 損失関数 19 の値は、損失（ロス）と呼ばれてもよい。損失関数 19 は、誤差関数、コスト関数または目的関数と呼ばれてもよい。制御部 12 は、誤差逆伝播法によって、デコーダ 14 の末尾からエンコーダ 13 の先頭に向かって損失情報を伝搬してもよい。また、制御部 12 は、確率的勾配降下法によってパラメータ値を更新してもよい。

[0024] 損失関数 19 は、誤差項および補正項を含む。誤差項は、データ 15 とデータ 18 との間の誤差を示す。誤差は、例えば、距離関数を用いて算出される。距離は、例えば、ユークリッド距離である。補正項は、ある確率分布のもとでデータ 16 に対して算出される確率を示す。第 1 の実施の形態の補正項は、ノイズに関する上記の閾値に応じた分散をそれぞれもつ複数の確率分布を使用する。例えば、補正項は、複数の確率分布によってデータ 16 に対して算出される複数の確率の重み付き和を規定する。

[0025] 各確率分布は正規分布（ガウス分布）であってもよく、複数の確率分布は混合ガウスモデル（GMM : Gaussian Mixture Model）を形成してもよい。複数の確率分布の重ね合わせは、確率密度のピーク（極大点）が複数ある多峰分布を表現することができる。ピークは、周辺の点よりも大きい確率密度をもつ頂点である。

[0026] 複数の確率分布は、エンコーダ 13 の出力に基づいて推定されてもよい。補正項が示す確率は、例えば、潜在空間においてデータ 16 から上記の閾値

の範囲内にある特徴データの確率密度、すなわち、データ 16 の近傍の確率密度を積分した確率の近似値である。誤差項が示す誤差が小さいほど、損失関数 19 の値は小さくなる。補正項が示す確率が大きいほど、損失関数 19 の値は小さくなる。補正項に負の符号が付されていてもよい。

[0027] 補正項は、以下のようにして規定される近似式であってもよい。本来の補正項は、例えば、元の複数の確率分布それぞれから、矩形窓関数によってデータ 16 の近傍の確率密度を抽出し、抽出された近傍の確率密度を積分し、複数の確率分布に対応する複数の積分値の重み付き和を算出する。元の複数の確率分布は、幾つかの入力データからエンコーダ 13 によって変換された幾つかの特徴データにフィットするように推定される。

[0028] 矩形窓関数は、データ 16 との差が前述の閾値未満である特徴データに対しては 1 を出力し、それ以外の特徴データに対しては 0 を出力する。データ 16 との差が閾値未満であるとは、例えば、ベクトルに含まれる全ての次元について、要素値の差の絶対値が閾値未満であることである。よって、各確率分布に矩形窓関数を乗じて積分することで、データ 16 との差が閾値未満である特徴データの確率密度を積分した近傍確率が算出される。

[0029] しかし、複数の確率分布に矩形窓関数を乗じて積分する本来の補正項は、微分不可能であることがあり、機械学習に用いることが難しいことがある。そこで、制御部 12 は、矩形窓関数をガウス型窓関数で近似する。ガウス型窓関数は、例えば、平均が 0 で、分散が矩形窓関数と同じである滑らかな確率密度関数である。ノイズの閾値が $T/2$ (T は正の定数) である場合、ガウス型窓関数の分散は $T^2/12$ である。ガウス型窓関数は、データ 16 との差が 0 である特徴データに対して、最大値の 1 を出力する。データ 16 との差が大きいほど、ガウス型窓関数の出力値が小さい。

[0030] 矩形窓関数をガウス型窓関数で近似した場合、近似式を展開することで、近似式から窓関数および積分演算が消去される。近似された補正項は微分可能であり、機械学習に用いることが可能である。元の確率分布にガウス型窓関数を乗じて積分することで、元の確率分布の確率密度の大きさと分散とが

修正される。確率密度は、元の確率分布の定数倍になる。分散は、元の確率分布よりも大きくなる。例えば、分散は、元の確率分布よりも、ガウス型窓関数の分散だけ大きくなる。よって、近似された補正項に含まれる各確率分布の分散は、ノイズの閾値に依存する。

[0031] 以上説明したように、第1の実施の形態の情報処理装置10は、データ15をエンコーダ13に入力してデータ16を生成する。情報処理装置10は、大きさが閾値以下のノイズをデータ16に付加してデータ17を生成する。情報処理装置10は、データ17をデコーダ14に入力してデータ18を生成する。情報処理装置10は、誤差項と補正項とを含む損失関数19に基づいて、エンコーダ13およびデコーダ14の訓練を実行する。誤差項は、データ15とデータ18との間の誤差を示す。補正項は、閾値に応じた分散をそれぞれもつ複数の確率分布を用いてデータ16から算出される確率を示す。

[0032] ノイズの閾値に依存する補正項が損失関数19に含まれるため、訓練されたオートエンコーダが等長性を獲得する。また、補正項が複数の確率分布の重ね合わせを示すため、入力データの分布が多峰分布である場合、特徴データの分布も多峰分布になる。よって、入力データの特徴を分析する上で有用なオートエンコーダが獲得される。

[0033] また、ノイズの閾値に応じた分散をそれぞれもつ複数の確率分布を用いて補正項が近似されるため、損失関数19の値を小さくするようにエンコーダ13およびデコーダ14のパラメータ値を更新する機械学習の実行が容易となる。よって、入力データの分布に対応する特徴データの分布をもつオートエンコーダが獲得される。

[0034] なお、情報処理装置10は、データ16に基づいて複数の第2の確率分布を推定してもよく、ノイズの閾値に基づいて複数の第2の確率分布を、補正項に含まれる複数の第1の確率分布に変換してもよい。これにより、機械学習を通じて、エンコーダ13およびデコーダ14に加えて特徴データの分布も最適化される。

- [0035] また、情報処理装置 10 は、ノイズに閾値に応じた第 3 の分散を、上記の複数の第 2 の確率分布がもつ第 2 の分散にそれぞれ加えることで、上記の複数の第 1 の確率分布がもつ第 1 の分散を算出してもよい。これにより、損失関数 19 を用いた機械学習が容易になるように補正項が近似される。また、第 3 の分散は、入力値の絶対値が閾値未満である場合に 1 を出力し、絶対値が閾値以上である場合に 0 を出力する矩形窓関数の分散であってもよい。これにより、補正項は、矩形窓関数を用いて算出される確率を近似できる。
- [0036] また、情報処理装置 10 は、データ 16 を生成する処理と、複数の第 2 の確率分布を推定する処理とを反復的に実行してもよい。この場合に、情報処理装置 10 は、第 1 のイテレーションで推定される複数の第 2 の確率分布を規定する第 1 のパラメータ値を、データ 16 に加えて、第 1 のイテレーションより前の第 2 のイテレーションで算出された第 2 のパラメータ値を用いて算出してもよい。これにより、推定される特徴データの分布が安定し、推定精度が向上する。また、特徴データの分布の収束が早くなる。
- [0037] 次に、第 2 の実施の形態を説明する。第 2 の実施の形態の情報処理装置 100 は、訓練データを用いてオートエンコーダを訓練する機械学習を実行する。また、情報処理装置 100 は、訓練されたオートエンコーダに含まれるエンコーダまたはデコーダを利用する予測処理を実行する。ただし、機械学習と予測処理とが別の情報処理装置によって実行されてもよい。情報処理装置 100 は、クライアント装置でもよいしサーバ装置でもよい。情報処理装置 100 が、コンピュータまたは機械学習装置と呼ばれてもよい。情報処理装置 100 は、第 1 の実施の形態の情報処理装置 10 に対応する。
- [0038] 図 2 は、第 2 の実施の形態の情報処理装置のハードウェア例を示す図である。情報処理装置 100 は、バスに接続された CPU 101、RAM 102、HDD 103、GPU 104、入力インタフェース 105、媒体リーダ 106 および通信インタフェース 107 を有する。CPU 101 は、第 1 の実施の形態の制御部 12 に対応する。RAM 102 または HDD 103 は、第 1 の実施の形態の記憶部 11 に対応する。

- [0039] CPU 101は、プログラムの命令を実行するプロセッサである。CPU 101は、HDD 103に記憶されたプログラムおよびデータをRAM 102にロードし、プログラムを実行する。情報処理装置100は、複数のプロセッサを有してもよい。
- [0040] RAM 102は、CPU 101で実行されるプログラムおよびCPU 101で演算に使用されるデータを一時的に記憶する揮発性半導体メモリである。情報処理装置100は、RAM以外の種類の揮発性メモリを有してもよい。
- [0041] HDD 103は、オペレーティングシステム（OS : Operating System）やミドルウェアやアプリケーションソフトウェアなどのソフトウェアのプログラムと、データとを記憶する不揮発性ストレージである。情報処理装置100は、フラッシュメモリやSSD（Solid State Drive）などの他の種類の不揮発性ストレージを有してもよい。
- [0042] GPU 104は、CPU 101と連携して画像処理を行い、情報処理装置100に接続された表示装置111に画像を出力する。表示装置111は、例えば、CRT（Cathode Ray Tube）ディスプレイ、液晶ディスプレイ、有機EL（Electro Luminescence）ディスプレイまたはプロジェクタである。情報処理装置100に、プリンタなどの他の種類の出力デバイスが接続されてもよい。
- [0043] また、GPU 104は、GPGPU（General Purpose Computing on Graphics Processing Unit）として使用されてもよい。GPU 104は、CPU 101からの指示に応じてプログラムを実行し得る。情報処理装置100は、RAM 102以外の揮発性半導体メモリをGPUメモリとして有してもよい。
- [0044] 入力インタフェース105は、情報処理装置100に接続された入力デバイス112から入力信号を受け付ける。入力デバイス112は、例えば、マウス、タッチパネルまたはキーボードである。情報処理装置100に複数の入力デバイスが接続されてもよい。

- [0045] 媒体リーダ106は、記録媒体113に記録されたプログラムおよびデータを読み取る読み取り装置である。記録媒体113は、例えば、磁気ディスク、光ディスクまたは半導体メモリである。磁気ディスクには、フレキシブルディスク（FD：Flexible Disk）およびHDDが含まれる。光ディスクには、CD（Compact Disc）およびDVD（Digital Versatile Disc）が含まれる。媒体リーダ106は、記録媒体113から読み取られたプログラムおよびデータを、RAM102やHDD103などの他の記録媒体にコピーする。読み取られたプログラムは、CPU101によって実行されることがある。
- [0046] 記録媒体113は、可搬型記録媒体であってもよい。記録媒体113は、プログラムおよびデータの配布に用いられることがある。また、記録媒体113およびHDD103が、コンピュータ読み取り可能な記録媒体と呼ばれてもよい。
- [0047] 通信インタフェース107は、ネットワーク114を介して他の情報処理装置と通信する。通信インタフェース107は、スイッチやルータなどの有線通信装置に接続される有線通信インタフェースでもよいし、基地局やアクセスポイントなどの無線通信装置に接続される無線通信インタフェースでもよい。
- [0048] 次に、オートエンコーダについて説明する。第2の実施の形態のオートエンコーダは、潜在空間上の距離が入力データ上の距離に比例するという等長性をもつ。このオートエンコーダが、変分オートエンコーダ（VAE：Variational Autoencoder）と呼ばれてもよい。等長性をもつオートエンコーダの一例として、RaDOGAGA（Rate-Distortion Optimization Guided Autoencoder for Generative Analysis）がある。
- [0049] RaDOGAGAは、次の非特許文献にも記載されている。Keizo Kato, Jing Zhou, Tomotake Sasaki and Akira Nakagawa, "Rate-Distortion Optimization Guided Autoencoder for Isometric Embedding in Euclidean Latent Space", Proc. of the 37th International Conference on Machine Learning

ng (ICML 2020), pp. 5166-5176, July 2020.

- [0050] 図3は、オートエンコーダの構造例を示す図である。オートエンコーダ140は、エンコーダ141およびデコーダ142を含む。エンコーダ141およびデコーダ142はそれぞれ、複数の層を含むニューラルネットワークである。エンコーダ141は、パラメータ θ を含む関数 f_{θ} として表現される。デコーダ142は、パラメータ ϕ を含む関数 g_{ϕ} として表現される。パラメータ θ 、 ϕ には、隣接する層の間のエッジの重みが含まれる。パラメータ θ 、 ϕ の値は、機械学習を通じて算出される。
- [0051] エンコーダ141は、入力データ144を受け付け、入力データ144を潜在変数ベクトルに変換する。潜在変数ベクトルは、特徴データまたは特徴ベクトルと呼ばれることがある。入力データ144は、複数の次元を含むベクトルである。潜在変数ベクトルの次元数は、入力データ144よりも小さい。よって、エンコーダ141は、入力データ144を圧縮して、入力データ144の特徴を小さいベクトルで表現する。
- [0052] デコーダ142は、潜在変数ベクトルを受け付け、潜在変数ベクトルを予測データ145に変換する。予測データ145は、複数の次元を含むベクトルである。予測データ145の次元数は、潜在変数ベクトルよりも大きく、通常は入力データ144と同じである。エンコーダ141が出力する潜在変数ベクトルをデコーダ142に入力した場合、予測データ145は、入力データ144の予測結果を示す。
- [0053] 潜在変数ベクトルが一定の確率分布に従うようにするため、情報処理装置100は、オートエンコーダ140の訓練時にサンプリング部143を使用する。サンプリング部143は、エンコーダ141が出力する潜在変数ベクトルの各次元にランダムなノイズを加算する。ノイズは、 $-T/2$ 以上 $T/2$ 以下の数値範囲をもつ一様分布からランダムに選択される。一様分布は、全ての事象が等確率で発生することを示す確率分布である。 T は、正の値をとるハイパーパラメータであり、ノイズ幅を示す。
- [0054] 情報処理装置100は、ノイズが付加された潜在変数ベクトルをデコーダ

142に入力する。情報処理装置100は、入力データ144と予測データ145との間の誤差146を算出する。誤差146は、距離関数Dを用いて算出される。例えば、誤差146は、入力データ144と予測データ145との間のユークリッド距離である。ただし、ユークリッド距離以外の距離指標が使用されてもよい。

[0055] 情報処理装置100は、誤差146を含む損失関数の値が小さくなるように、パラメータ θ 、 ϕ の値を更新する。例えば、情報処理装置100は、誤差逆伝播法により、デコーダ142の末尾からエンコーダ141の先頭に向かって損失情報を伝搬する。例えば、情報処理装置100は、確率的勾配降下法により、損失情報とパラメータ θ 、 ϕ の現在値とから勾配を算出し、算出された勾配を用いてパラメータ θ 、 ϕ の値を更新する。潜在変数ベクトルにノイズが付加されることで、潜在空間が一定の確率分布を形成する。

[0056] パラメータ θ 、 ϕ の値の更新は、入力データ144に相当する一定個数のデータレコードを含むミニバッチ単位で行われる。ミニバッチは、事前に用意された訓練データセットから抽出される。訓練データセットの各データレコードにはラベルが付与されていなくてもよく、オートエンコーダ140の機械学習は教師なし学習であってもよい。

[0057] 情報処理装置100は、ミニバッチに含まれる複数のデータレコードをそれぞれエンコーダ141に入力することで、複数の潜在変数ベクトルを生成する。情報処理装置100は、複数の潜在変数ベクトルにそれぞれノイズを付加する。情報処理装置100は、複数のノイズ付き潜在変数ベクトルをそれぞれデコーダ142に入力することで、予測データ145に相当する一定個数のデータレコードを生成する。

[0058] 1つのミニバッチから生成される複数の潜在変数ベクトルは、パラメータ ϕ をもつ確率分布 P_ϕ に従う。例えば、確率分布 P_ϕ は正規分布であり、パラメータ ϕ は平均および分散を含む。情報処理装置100は、ミニバッチ毎に、複数の潜在変数ベクトルを正規分布にフィッティングして、パラメータ ϕ の値を推定する。

[0059] 損失関数は、ミニバッチに含まれる複数のデータレコードの平均誤差を示す誤差項を含む。情報処理装置 100 は、ミニバッチ毎に、損失関数の値が小さくなるようにパラメータ θ , ϕ の値を更新する。情報処理装置 100 は、ミニバッチを抽出し、損失関数の値を算出し、パラメータ θ , ϕ の値を更新することを繰り返す。情報処理装置 100 は、反復回数が一定回数に達するまで上記の処理を繰り返してもよい。また、情報処理装置 100 は、パラメータ θ , ϕ の値が収束するまで上記の処理を繰り返してもよい。

[0060] ここで、潜在空間が等長性をもつようにするため、損失関数は、誤差項に加えて補正項を含む。補正項は、潜在変数ベクトルが確率分布 P_ϕ に従っている確からしさを示す確率を算出する。補正項は、ミニバッチ毎に推定される確率分布 P_ϕ を使用する。補正項は、ミニバッチに含まれる複数のデータレコードに対応する複数の潜在変数ベクトルの平均確率を示す。確率が大きいほど、損失関数の値が小さくなる。デコーダ 142 に入力されるノイズ付き潜在変数ベクトルはノイズ幅 T の揺らぎをもつため、補正項が示す確率は、生成された潜在変数ベクトルを中心とする幅 T の範囲の確率密度の積分である。

[0061] 次に、損失関数について更に説明する。数式 (1) は、第 2 の実施の形態で使用される損失関数の例である。数式 (1) において、 m はミニバッチサイズ、 X_i はミニバッチに含まれる i 番目の入力データレコード、 $\hat{X}_i$ は i 番目の予測データレコード、 D は距離関数、 β は正の値をとるハイパーパラメータ、 z_i は X_i から生成される潜在変数ベクトルである。 Q_{z_i} は、潜在空間において z_i の近傍の潜在変数ベクトルが出現する確率である。 $D(X_i, \hat{X}_i)$ が誤差項に相当し、 $-\beta \log Q_{z_i}$ が補正項に相当する。

[0062] [数1]

$$\operatorname{argmin}_{\theta, \phi} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \{D(X_i, \hat{X}_i) - \beta \log Q_{z_i}\} \quad (1)$$

[0063] 確率 Q_{z_i} は、数式 (2) のように規定される。数式 (2) において、 z は確率変数としての潜在変数、 $U(z)$ は矩形窓関数、 $P_\phi(z)$ は確率密度関

数である。矩形窓関数 $U(z)$ は、数式 (3) のように規定される。数式 (3) において、 z_j は引数のベクトルに含まれる j 番目の次元の要素値である。全ての次元の要素値が $-T/2$ より大きく $T/2$ より小さい場合、矩形窓関数 $U(z)$ は 1 を出力する。少なくとも 1 つの次元の要素値が上記の数値範囲に含まれない場合、矩形窓関数 $U(z)$ は 0 を出力する。

[0064] [数2]

$$Q_{z_i} = \int_{-\infty}^{\infty} U(z - z_i) P_{\psi}(z) dz \quad (2)$$

[0065] [数3]

$$U(z) = \begin{cases} 1 & \forall z_j \in z \left[-\frac{T}{2} < z_j < \frac{T}{2} \right] \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (3)$$

[0066] よって、数式 (2) の $U(z - z_i)$ は、潜在変数ベクトル z_i から $T/2$ の範囲内にある潜在変数ベクトル z に対して 1 を出力し、それ以外の潜在変数ベクトル z に対して 0 を出力する。そのため、確率 Q_{z_i} は、潜在変数ベクトル z_i から $T/2$ の範囲内にある潜在変数ベクトル z の確率密度を積分した確率である。

[0067] 潜在変数ベクトル z_i の近傍の確率が大きい場合、 z_i は確率分布 P_{ϕ} に十分に從っていると言える。そこで、補正項は、損失関数の値を小さくする。一方、潜在変数ベクトル z_i の近傍の確率が小さい場合、 z_i は確率分布 P_{ϕ} に十分に從っているとは言えない。そこで、補正項は、損失関数の値を大きくする。補正項は、潜在変数ベクトルに応じたペナルティを誤差項に対して付加しているとも言える。

[0068] 次に、潜在空間の確率分布を多峰分布にすることを考える。入力データが複数のクラスに分類される場合、入力データの確率分布は、確率密度のピークが複数個ある多峰分布になることがある。多峰分布は、例えば、混合ガウスモデルで表現される。混合ガウスモデルは、確率分布を、複数の正規分布の重み付き和で表現する。その場合、潜在空間の確率分布も多峰分布にな

ることが好ましいことがある。潜在空間を多峰分布で表現することで、潜在空間の等長性の精度も向上し得る。

[0069] 図4は、オートエンコーダの使用例を示す図である。エンコーダ141に入力される入力データの一例として、画像データが挙げられる。エンコーダ141は、画像データを、画像データよりもデータサイズが十分に小さい潜在変数ベクトルに変換する。デコーダ142は、潜在変数ベクトルから画像データを再現する。

[0070] 例えば、エンコーダ141は、入力画像データ151から潜在変数ベクトル153を生成する。また、エンコーダ141は、入力画像データ152から潜在変数ベクトル154を生成する。ユーザは、潜在変数ベクトル153、154を含む潜在変数ベクトル群の確率分布を見ることで、入力画像データ151、152を含む入力画像データ群の特徴を分析することがある。例えば、ユーザは、潜在空間の確率分布に基づいて、入力画像データを複数のクラスタに分類する。また、例えば、ユーザは、潜在空間の確率分布に基づいて、類似する入力画像データがもつ共通の特徴を抽出する。

[0071] また、例えば、デコーダ142は、潜在変数ベクトル153から予測画像データ155を生成する。予測画像データ155は、入力画像データ151の予測結果である。また、デコーダ142は、潜在変数ベクトル154から予測画像データ156を生成する。予測画像データ156は、入力画像データ152の予測結果である。なお、予測時には、デコーダ142に入力される潜在変数ベクトルにノイズが付加されなくてもよい。

[0072] ユーザは、既知の潜在変数ベクトルに類似する潜在変数ベクトルをデコーダ142に入力することで、既知の入力画像データと異なる画像データを作成することがある。これにより、画像データのバリエーションが増える。また、ユーザは、画像データと潜在変数との対応関係を分析することができる。

[0073] このように、エンコーダ141およびデコーダ142は、訓練時には組み合わせて訓練される一方、予測時にはそれぞれ単独で使用されることがある。

。なお、観測データから確率分布を推定する機械学習モデルは、生成モデルと呼ばれることがある。

[0074] 入力画像データ 151, 152 の一例として、タンパク質の分子構造を示すタンパク質構造画像が挙げられる。タンパク質構造は極めて複雑であるため、ユーザはタンパク質構造画像を直接的に分析することが難しい。そこで、ユーザは、潜在空間の確率分布を用いて、タンパク質構造の特徴を分析することがある。

[0075] 種々のタンパク質構造の中には類似するタンパク質構造と類似しないタンパク質構造とが含まれることがあり、種々のタンパク質構造は複数のクラスに分類されることがある。よって、タンパク質構造画像の確率分布が、多峰分布であることがある。また、潜在空間を用いてタンパク質構造を分析するには、潜在空間が等長性をもつことが好ましい。そのため、潜在空間の確率分布が等長性のある多峰分布になるように、エンコーダ 141 およびデコーダ 142 が訓練されることが好ましい。

[0076] このように、オートエンコーダ 140 の機械学習においては、潜在空間の確率分布が等長性のある多峰分布になることが好ましい場合がある。しかし、前述の数式 (2) の確率密度関数 $P_{\phi}(z)$ に混合ガウスモデルを代入すると、情報処理装置 100 は、確率 Q_{z_i} を解析的に解くことが難しいことがある。

[0077] 矩形窓関数と複数の正規分布との積の積分は微分不可能であり、確率 Q_{z_i} が微分不可能になる。そのため、誤差逆伝播法および確率的勾配降下法を用いた機械学習が難しいことがある。特に、潜在変数 z が高次元ベクトルである場合、確率 Q_{z_i} を解析的に解くことが難しく、数表を用いて確率の近似値を求めるライブラリを利用することも難しい。

[0078] そこで、情報処理装置 100 は、前述の数式 (2) の確率 Q_{z_i} を、微分可能な近似式に置換する。そのために、情報処理装置 100 は、前述の数式 (3) の矩形窓関数 $U(z)$ を、数式 (4) に示すガウス型窓関数 $G(z)$ で近似する。

[0079] [数4]

$$G(z) = \exp\left(-\frac{\|z\|^2}{2\sigma^2}\right) = \sqrt{2\pi}\sigma^d \mathcal{N}(z; 0, \sigma^2 I_d) \quad (4)$$

[0080] 数式（４）において、 d は潜在空間の次元数、 I_d は d 行 d 列の単位行列である。 $\mathcal{N}(z; \mu, \Sigma)$ は、 z を確率変数としてもち、 μ を平均ベクトルとしてもち、 Σ を分散共分散行列としてもつ正規分布である。 σ^2 は、ノイズ幅 T を用いて数式（５）のように規定される分散である。分散 σ^2 は、ガウス型窓関数 $G(z)$ の分散であり、幅 T の矩形窓関数 $U(z)$ の分散と等しいように設定される。

[0081] [数5]

$$\sigma^2 = \frac{T^2}{12} \quad (5)$$

[0082] 図５は、矩形窓関数とガウス型窓関数の例を示す図である。曲線１６１は、矩形窓関数 $U(z)$ を示す。曲線１６２は、ガウス型窓関数 $G(z)$ を示す。図５では、 $T^2 = 12$ であり $\sigma^2 = 1$ である場合を想定している。

[0083] ガウス型窓関数 $G(z)$ が出力する重みは、０以上１以下の数値である。ガウス型窓関数 $G(z)$ は、引数の値が０である場合に、最大値の１を出力する。ガウス型窓関数 $G(z)$ が出力する重みは、引数の値が０から離れるに従って減衰する。曲線１６２は正規分布の形状をもつものの、その振幅は正規分布の確率密度とは異なる。 $G(z)$ の出力は、平均が０で分散が σ^2 の正規分布によって規定される確率密度の定数倍である。

[0084] 前述の数式（２）において、確率密度関数 $P_\phi(z)$ に混合ガウスモデルを代入し、矩形窓関数に関する $U(z - z_i)$ をガウス型窓関数に関する $G(z - z_i)$ で近似した場合、確率 Q_{z_i} は数式（６）のように近似される。

[0085]

[数6]

$$\begin{aligned} Q_{z_i} &\approx \int_{-\infty}^{\infty} G(z - z_i) P_{\psi}(z) dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} G(z - z_i) \sum_{c=1}^C \pi_c \mathcal{N}(z; \mu_c, \Sigma_c) dz \end{aligned} \quad (6)$$

[0086] 数式（６）において、 C はクラスタ数である。潜在空間に出現する１つのクラスタは、１つの正規分布で表現される。よって、 C は正規分布の個数に相当する。 π_c は c 番目の正規分布の重みを示す混合係数、 μ_c は c 番目の正規分布の平均ベクトル、 Σ_c は c 番目の正規分布の分散共分散行列である。

[0087] 数式（６）の $G(z - z_i)$ に数式（４）を適用し、正規分布同士の積と積分演算とを展開すると、確率 Q_{z_i} は最終的に数式（７）のように近似される。確率 Q_{z_i} の近似式からは、窓関数および積分演算が消えている。

[0088] [数7]

$$\begin{aligned} Q_{z_i} &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi}\sigma^d \mathcal{N}(z; z_i, \sigma^2 I_d) \sum_{c=1}^C \pi_c \mathcal{N}(z; \mu_c, \Sigma_c) dz \\ &= \sum_{c=1}^C \pi_c \sqrt{2\pi}\sigma^d \mathcal{N}(z_i; \mu_c, \Sigma_c + \sigma^2 I_d) \end{aligned} \quad (7)$$

[0089] 近似式は、潜在変数ベクトル z_i に対して C 個の正規分布が示す確率を、混合係数 π_c で重み付けして合算することを示しており、混合ガウスモデルの形をもつ。ただし、ミニバッチから推定された元の混合ガウスモデルと異なり、各正規分布の確率が定数倍される。また、元の混合ガウスモデルと異なり、各正規分布の分散が σ^2 だけ大きくなる。よって、近似式は、ノイズ幅 T に応じた分散 σ^2 をそれぞれもつ複数の正規分布を含む。

[0090] 数式（７）に示す確率 Q_{z_i} の近似式は、閉形式であるため微分可能である。閉形式は、加算、乗算、指数関数などの微分可能な基本的関数を組み合わせた数式である。このため、確率 Q_{z_i} を含む損失関数が微分可能であり、情報処理装置１００は、誤差逆伝播法および確率的勾配降下法を用いた機械学

習を実行することができる。その結果、潜在変数ベクトルが等長性のある多峰分布に従うように、オートエンコーダ140が訓練される。

[0091] 図6は、入力データ空間と潜在空間の対応例を示す図である。グラフ163は、入力データ空間の確率分布を示す。グラフ163は、クラスタ163a, 163b, 163c, 163d, 163e, 163fを含む多峰分布を示す。

[0092] グラフ164は、単一の正規分布を用いて確率 Q_{z_i} を算出した場合に獲得される潜在空間の確率分布を示す。グラフ164は、クラスタ164a, 164b, 164c, 164d, 164e, 164fを含む。クラスタ164aはクラスタ163aに対応する。クラスタ164bはクラスタ163bに対応する。クラスタ164cはクラスタ163cに対応する。クラスタ164dはクラスタ163dに対応する。クラスタ164eはクラスタ163eに対応する。クラスタ164fはクラスタ163fに対応する。

[0093] ただし、クラスタ164a, 164b, 164c, 164d, 164e, 164fは、単峰分布を形成しており、多峰分布を形成していない。また、同じクラスタに属する入力データから類似する潜在変数ベクトルが生成されているものの、厳密には等長性が達成されていない。よって、潜在空間の確率分布に改善の余地がある。なお、単一の正規分布で表現される確率分布は、混合確率分布の混合数が1であると解釈することもできる。

[0094] グラフ165は、混合ガウスモデルを用いて確率 Q_{z_i} を算出した場合に獲得される潜在空間の確率分布を示す。グラフ165は、クラスタ165a, 165b, 165c, 165d, 165e, 165fを含む。クラスタ165aはクラスタ163aに対応する。クラスタ165bはクラスタ163bに対応する。クラスタ165cはクラスタ163cに対応する。クラスタ165dはクラスタ163dに対応する。クラスタ165eはクラスタ163eに対応する。クラスタ165fはクラスタ163fに対応する。

[0095] クラスタ165a, 165b, 165c, 165d, 165e, 165fは、入力データ空間に対応する多峰分布を形成している。また、潜在空間上

の距離が入力データ空間上の距離に比例するという等長性が達成されている。よって、グラフ 165 が示す確率分布は、入力データの特徴を分析する上で有用である。

[0096] 次に、確率分布 P_ϕ を規定するパラメータ ϕ の最適化について説明する。前述のように、パラメータ ϕ の値はミニバッチ毎に更新され、機械学習の間に複数回更新される。ここで、パラメータ ϕ の値を 1 回更新する際に、更新後の値を 1 つのミニバッチのみから算出すると、そのミニバッチに含まれるデータレコードの偶然性の影響を受けて、パラメータ ϕ の値が不安定になることがある。その結果、エンコーダ 141 を規定するパラメータ θ の値とデコーダ 142 を規定するパラメータ ϕ の値が、局所解に陥るリスクがある。

[0097] そこで、情報処理装置 100 は、数式 (8) ~ (10) に基づいてパラメータ ϕ の値を更新する。このとき、情報処理装置 100 は、1 つ前のミニバッチで算出されたパラメータ ϕ の値も参照する。パラメータ ϕ は、 C 個の正規分布それぞれの混合係数 π_c 、平均ベクトル μ_c および分散共分散行列 Σ_c を含む。情報処理装置 100 は、まず数式 (8) に従って混合係数 π_c を更新し、次に数式 (9) に従って平均ベクトル μ_c を更新し、最後に数式 (10) に従って分散共分散行列 Σ_c を更新する。

[0098] [数8]

$$\pi_c^{(\ell)} = \xi \pi_c^{(\ell-1)} + (1 - \xi) \frac{\sum_{i=1}^m p_{i,c}}{m} \quad (8)$$

[0099] [数9]

$$\mu_c^{(\ell)} = \xi \frac{\pi_c^{(\ell-1)}}{\pi_c^{(\ell)}} \mu_c^{(\ell-1)} + (1 - \xi) \frac{\sum_{i=1}^m p_{i,c} z_i}{m \pi_c^{(\ell)}} \quad (9)$$

[0100] [数10]

$$\Sigma_c^{(\ell)} = \xi \frac{\pi_c^{(\ell-1)}}{\pi_c^{(\ell)}} \Sigma_c^{(\ell-1)} + (1 - \xi) \frac{\sum_{i=1}^m p_{i,c} (z_i - \mu_c^{(\ell)}) (z_i - \mu_c^{(\ell)})^T}{m \pi_c^{(\ell)}} \quad (10)$$

[0101] 数式 (8) において、 $\pi^{(1)}_c$ は 1 回目のイテレーションで算出される c 番

目の正規分布の混合係数、 $\pi^{(l-1)}_c$ は $l-1$ 回目のイテレーションで算出される c 番目の正規分布の混合係数である。 ξ は0以上1以下の値をとるハイパーパラメータであり、前イテレーションの重みを示す。例えば、 ξ は0.95以上0.99以下である。

[0102] $p_{i,c}$ は、潜在変数ベクトル z_i が c 番目の正規分布に帰属する確率である。エンコーダ141は、入力データ X_i から、 d 次元の潜在変数ベクトル z_i と併せて C 次元の特徴ベクトル w_i を出力する。特徴ベクトル w_i は、入力データ X_i の特徴を C 次元で表現したベクトルである。情報処理装置100は、特徴ベクトル w_i の各次元の要素値をソフトマックス関数に入力することで、0以上1以下の値をとる帰属確率 $p_{i,c}$ を算出する。

[0103] 数式(9)において、 $\mu^{(l)}_c$ は l 回目のイテレーションで算出される c 番目の正規分布の平均ベクトル、 $\mu^{(l-1)}_c$ は $l-1$ 回目のイテレーションで算出される c 番目の正規分布の平均ベクトルである。数式(10)において、 $\Sigma^{(l)}_c$ は l 回目のイテレーションで算出される c 番目の正規分布の分散共分散行列、 $\Sigma^{(l-1)}_c$ は $l-1$ 回目のイテレーションで算出される c 番目の正規分布の分散共分散行列である。なお、初回イテレーションでは、 $\xi=0$ とみなして $\pi^{(1)}_c$ 、 $\mu^{(1)}_c$ 、 $\Sigma^{(1)}_c$ が算出される。

[0104] このように、情報処理装置100は、前のミニバッチで算出されたパラメータ ϕ の値を元にして、パラメータ ϕ の値を緩やかに更新する。よって、複数のミニバッチを通してパラメータ ϕ の値が安定し、パラメータ θ 、 ϕ の値が局所解に陥るリスクが低下する。

[0105] 次に、情報処理装置100の機能および処理手順について説明する。図7は、情報処理装置の機能例を示すブロック図である。情報処理装置100は、訓練データ記憶部121、ハイパーパラメータ記憶部122、モデル記憶部123、機械学習部124および予測部125を有する。訓練データ記憶部121、ハイパーパラメータ記憶部122およびモデル記憶部123は、例えば、RAM102、GPUメモリまたはHDD103を用いて実装される。機械学習部124および予測部125は、例えば、CPU101または

GPU104と、プログラムとを用いて実装される。

- [0106] 訓練データ記憶部121は、訓練データセットを記憶する。訓練データセットは、複数のデータレコードを含む。例えば、訓練データセットは、複数の画像データレコードを含む。各データレコードには、ラベルが付与されていなくてもよい。
- [0107] ハイパーパラメータ記憶部122は、機械学習に使用されるハイパーパラメータの値を記憶する。ハイパーパラメータの値は、例えば、ユーザから指定される。ハイパーパラメータの値は、機械学習の開始前に指定される。モデル記憶部123は、訓練済みの機械学習モデルとして、訓練済みのオートエンコーダを記憶する。訓練済みのオートエンコーダは、組み合わせて訓練されたエンコーダとデコーダとを含む。
- [0108] 機械学習部124は、訓練データ記憶部121に記憶された訓練データセットと、ハイパーパラメータ記憶部122に記憶されたハイパーパラメータの値とを用いて、オートエンコーダを訓練する。このとき、機械学習部124は、訓練データセットからミニバッチを抽出し、ミニバッチに含まれる各データレコードをオートエンコーダに入力して損失関数の値を算出し、損失関数の値をフィードバックしてオートエンコーダのパラメータ値を更新する。機械学習部124は、上記の処理を反復する。
- [0109] 機械学習部124は、訓練されたオートエンコーダをモデル記憶部123に保存する。なお、機械学習部124は、訓練されたオートエンコーダを表示装置111に表示してもよいし、他の情報処理装置に送信してもよい。
- [0110] 予測部125は、モデル記憶部123からオートエンコーダを読み出す。予測部125は、ユーザからの入力に応じて、エンコーダまたはデコーダを用いて予測処理を行う。例えば、予測部125は、指定された入力データをエンコーダに入力することで、その入力データの特徴を抽出する。また、予測部125は、指定された潜在変数ベクトルをデコーダに入力することで、その潜在変数ベクトルを特徴としてもつ予測データを生成する。なお、予測部125は、予測処理の結果を不揮発性ストレージに保存してもよいし、表

示装置 1 1 1 に表示してもよいし、他の情報処理装置に送信してもよい。

- [0111] 図 8 は、ハイパーパラメータテーブルの構造例を示す図である。ハイパーパラメータテーブル 1 3 1 は、ハイパーパラメータ記憶部 1 2 2 に記憶される。ハイパーパラメータテーブル 1 3 1 には、複数のハイパーパラメータのハイパーパラメータ値が登録される。ハイパーパラメータには、ノイズ幅 T 、損失関数係数 β 、確率分布係数 ξ 、クラスタ数 C 、ミニバッチサイズ m および距離関数 D が含まれる。
- [0112] ノイズ幅 T は、機械学習時に潜在変数ベクトルに付加されるノイズの大きさを調整する。損失関数係数 β は、損失関数に含まれる誤差項と比べた補正項の重みである。確率分布係数 ξ は、確率分布 P_ϕ のパラメータ ϕ の値を更新する際の 1 回の更新量を調整する。クラスタ数 C は、入力データの種類数である。ミニバッチサイズ m は、1 つのミニバッチに含まれるデータレコードの個数である。距離関数 D は、入力データと予測データの間の誤差を算出する関数であり、例えば、ユークリッド距離を算出する。
- [0113] 図 9 は、イテレーションデータの構造例を示す図である。ミニバッチ毎に生成されるイテレーションデータには、ミニバッチテーブル 1 3 2 および混合ガウス分布テーブル 1 3 3 が含まれる。ミニバッチテーブル 1 3 2 および混合ガウス分布テーブル 1 3 3 は、機械学習部 1 2 4 によって生成される。
- [0114] ミニバッチテーブル 1 3 2 は、入力データ $X_1, X_2, \dots, X_m$ と潜在変数ベクトル $z_1, z_2, \dots, z_m$ と予測データ $X^{\wedge}_1, X^{\wedge}_2, \dots, X^{\wedge}_m$ とを対応付ける。入力データ X_i をエンコーダに入力することで、潜在変数ベクトル z_i が生成される。潜在変数ベクトル z_i にノイズを付加してデコーダに入力することで、予測データ $X^{\wedge}_i$ が生成される。
- [0115] 混合ガウス分布テーブル 1 3 3 は、混合係数 $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_C$ と平均ベクトル $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_C$ と分散共分散行列 $\Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_C$ とを対応付ける。混合係数 π_c 、平均ベクトル μ_c および分散共分散行列 Σ_c は、前イテレーションの π_c, μ_c, Σ_c と現イテレーションの潜在変数ベクトル $z_1, z_2, \dots, z_m$ とから算出される。

- [0116] 図10は、機械学習の手順例を示すフローチャートである。機械学習部124は、ハイパーパラメータ値を取得する。例えば、機械学習部124は、ハイパーパラメータテーブル131からハイパーパラメータ値を読み出す。ハイパーパラメータには、 T 、 β 、 ξ 、 C 、 m 、 D が含まれる(S10)。機械学習部124は、オートエンコーダに含まれるエンコーダおよびデコーダのパラメータ値を初期化する(S11)。
- [0117] 機械学習部124は、訓練データセットの中から、ミニバッチサイズ m の入力データを抽出する。このとき、機械学習部124は、未使用の入力データを優先的に抽出することが好ましい(S12)。機械学習部124は、エンコーダを用いて入力データから潜在変数ベクトルを生成する(S13)。機械学習部124は、潜在変数ベクトルにノイズを付与する。このとき、機械学習部124は、潜在変数ベクトルに含まれる各次元に、 $-T/2$ 以上 $T/2$ 以下の一様分布からランダムに選択されたノイズを加算する(S14)。
- [0118] 機械学習部124は、デコーダを用いてノイズ付き潜在変数ベクトルから予測データを生成する(S15)。機械学習部124は、前イテレーションの混合ガウス分布と、ステップS13で生成された潜在変数ベクトルとに基づいて、混合ガウス分布を更新する。ただし、初回イテレーションでは、機械学習部124は、ステップS13で生成された潜在変数ベクトルに基づいて混合ガウス分布を推定する(S16)。
- [0119] 機械学習部124は、ノイズ幅 T から算出される分散 σ^2 を用いて、ステップS16で更新された混合ガウス分布を修正することで、確率 Q_{z_i} を規定し、確率 Q_{z_i} を含む補正項を規定する(S17)。機械学習部124は、入力データと予測データとの間の誤差を示す誤差項と、ステップS17の補正項とを含む損失関数を規定する(S18)。
- [0120] 機械学習部124は、ステップS18の損失関数の値が小さくなるように、エンコーダおよびデコーダのパラメータ値を更新する(S19)。機械学習部124は、ステップS12～S19のイテレーション回数が閾値に達し

たか判断する。イテレーション回数が閾値に達した場合はステップS 2 1に処理が進み、イテレーション回数が閾値に達していない場合はステップS 1 2に処理に戻る（S 2 0）。

[0121] 機械学習部1 2 4は、訓練されたエンコーダおよびデコーダを出力する。機械学習部1 2 4は、エンコーダおよびデコーダを不揮発性ストレージに保存してもよいし、表示装置1 1 1に表示してもよいし、他の情報処理装置に送信してもよい（S 2 1）。

[0122] 以上説明したように、第2の実施の形態の情報処理装置1 0 0は、エンコーダが出力する潜在変数ベクトルにノイズ幅Tのノイズを付加してデコーダに入力する。これにより、潜在変数 z が一定の確率分布に従うようにオートエンコーダが訓練される。

[0123] また、情報処理装置1 0 0は、生成された潜在変数ベクトルを中心とする幅Tの範囲内の確率を示す補正項を、損失関数に追加する。これにより、2つの潜在変数ベクトルの距離が、当該潜在変数ベクトルに対応する入力データの距離に比例するという等長性が獲得される。また、情報処理装置1 0 0は、補正項に使用する確率分布を混合ガウスモデルで表現する。これにより、入力データの確率分布が多峰分布である場合、潜在変数 z も多峰分布に従う。よって、入力データの特徴を分析する上で有用な潜在空間が獲得される。

[0124] また、情報処理装置1 0 0は、補正項に使用する矩形窓関数をガウス型窓関数で近似する。これにより、補正項の近似式から窓関数や積分演算が消去される。近似式は、元の混合ガウスモデルの確率密度を定数倍し、元の混合ガウスモデルの分散をノイズ幅Tに対応する分散 σ^2 だけ大きくする。よって、混合ガウスモデルを使用した場合であっても、損失関数が微分可能関数になり、誤差逆伝播法や確率的勾配降下法の実行が容易になる。

[0125] また、情報処理装置1 0 0は、現イテレーションのミニバッチのみから混合ガウスモデルを推定する代わりに、前イテレーションの混合ガウスモデルのパラメータ値を重み ξ で引き継ぐ。これにより、複数のイテレーションを

通して混合ガウスモデルが安定し、オートエンコーダのパラメータ値が局所解に陥るリスクが低下する。

[0126] 上記については単に本発明の原理を示すものである。更に、多数の変形や変更が当業者にとって可能であり、本発明は上記に示し、説明した正確な構成および応用例に限定されるものではなく、対応する全ての変形例および均等物は、添付の請求項およびその均等物による本発明の範囲とみなされる。

符号の説明

[0127] 10 情報処理装置
11 記憶部
12 制御部
13 エンコーダ
14 デコーダ
15, 16, 17, 18 データ
19 損失関数

請求の範囲

- [請求項1] 第1のデータをエンコーダに入力して第2のデータを生成し、
大きさが閾値以下のノイズを前記第2のデータに付加して第3のデータを生成し、
前記第3のデータをデコーダに入力して第4のデータを生成し、
前記第1のデータと前記第4のデータとの間の誤差を示す誤差項と、前記閾値に応じた第1の分散をそれぞれもつ複数の第1の確率分布を用いて前記第2のデータから算出される確率を示す補正項とを含む損失関数に基づいて、前記エンコーダおよび前記デコーダの訓練を実行する、
処理をコンピュータに実行させることを特徴とする機械学習プログラム。
- [請求項2] 前記訓練は、前記第2のデータに基づいて、第2の分散をそれぞれもつ複数の第2の確率分布を推定し、前記閾値に基づいて、前記複数の第2の確率分布を前記複数の第1の確率分布に変換する処理を含む、
ことを特徴とする請求項1に記載の機械学習プログラム。
- [請求項3] 前記変換する処理は、前記閾値に応じた第3の分散を前記第2の分散に加えることで、前記第1の分散を算出する処理を含む、
ことを特徴とする請求項2に記載の機械学習プログラム。
- [請求項4] 前記第3の分散は、入力値の絶対値が前記閾値未満である場合に1を出力し、前記絶対値が前記閾値以上である場合に0を出力する矩形関数の分散である、
ことを特徴とする請求項3に記載の機械学習プログラム。
- [請求項5] 前記第2のデータを生成する処理と前記推定する処理とは、反復的に実行され、
前記推定する処理は、第1のイテレーションで推定される前記複数の第2の確率分布を示す第1のパラメータ値を、前記第1のイテレー

ションで生成された前記第2のデータと、前記第1のイテレーションより前の第2のイテレーションで推定された前記複数の第2の確率分布を示す第2のパラメータ値とから算出する処理を含む、

ことを特徴とする請求項2に記載の機械学習プログラム。

[請求項6]

第1のデータをエンコーダに入力して第2のデータを生成し、
大きさが閾値以下のノイズを前記第2のデータに付加して第3のデータを生成し、

前記第3のデータをデコーダに入力して第4のデータを生成し、

前記第1のデータと前記第4のデータとの間の誤差を示す誤差項と、前記閾値に応じた第1の分散をそれぞれもつ複数の第1の確率分布を用いて前記第2のデータから算出される確率を示す補正項とを含む損失関数に基づいて、前記エンコーダおよび前記デコーダの訓練を実行する、

処理をコンピュータが実行することを特徴とする機械学習方法。

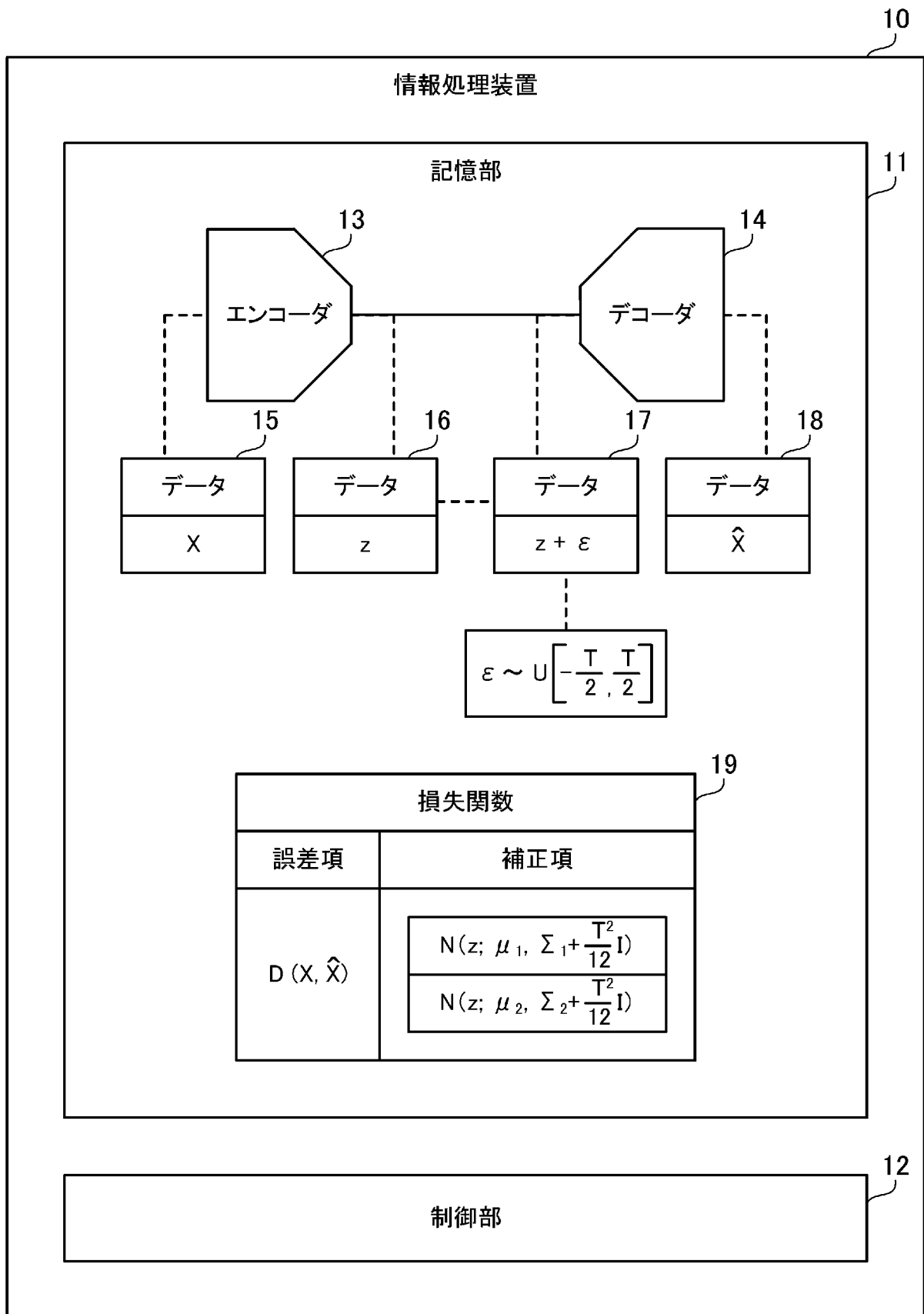
[請求項7]

エンコーダとデコーダとを記憶する記憶部と、

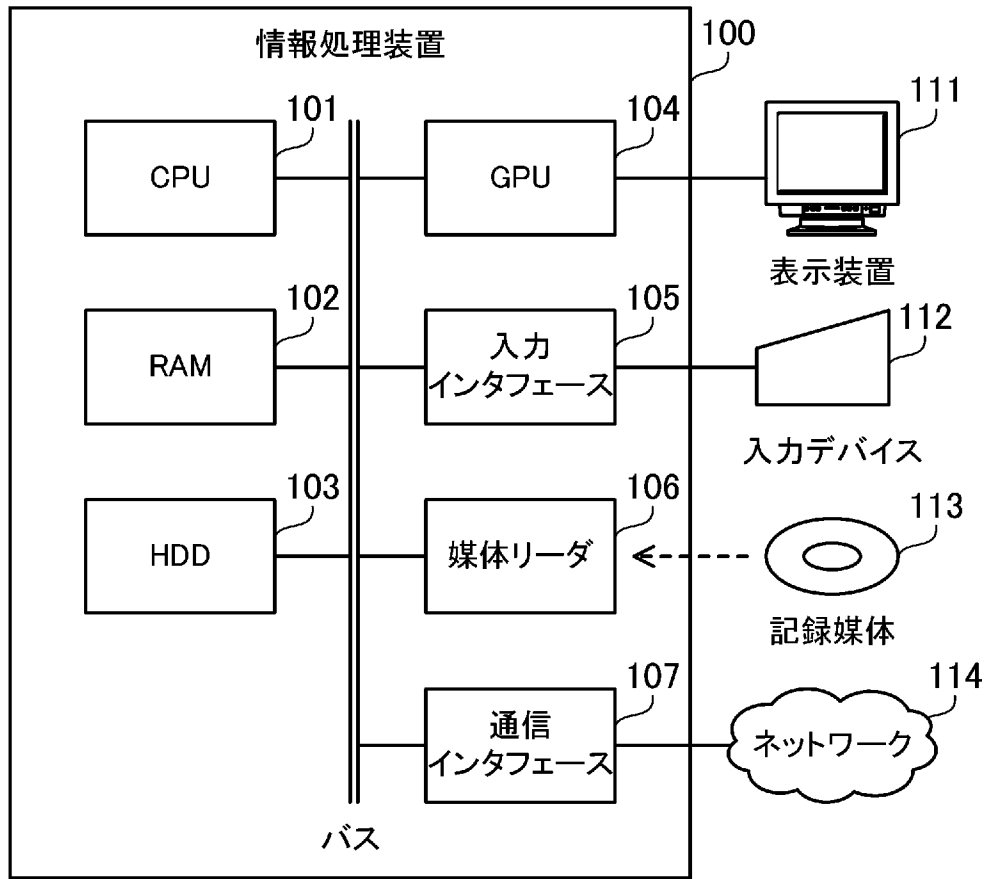
第1のデータを前記エンコーダに入力して第2のデータを生成し、
大きさが閾値以下のノイズを前記第2のデータに付加して第3のデータを生成し、前記第3のデータを前記デコーダに入力して第4のデータを生成し、前記第1のデータと前記第4のデータとの間の誤差を示す誤差項と、前記閾値に応じた第1の分散をそれぞれもつ複数の第1の確率分布を用いて前記第2のデータから算出される確率を示す補正項とを含む損失関数に基づいて、前記エンコーダおよび前記デコーダの訓練を実行する制御部と、

を有することを特徴とする情報処理装置。

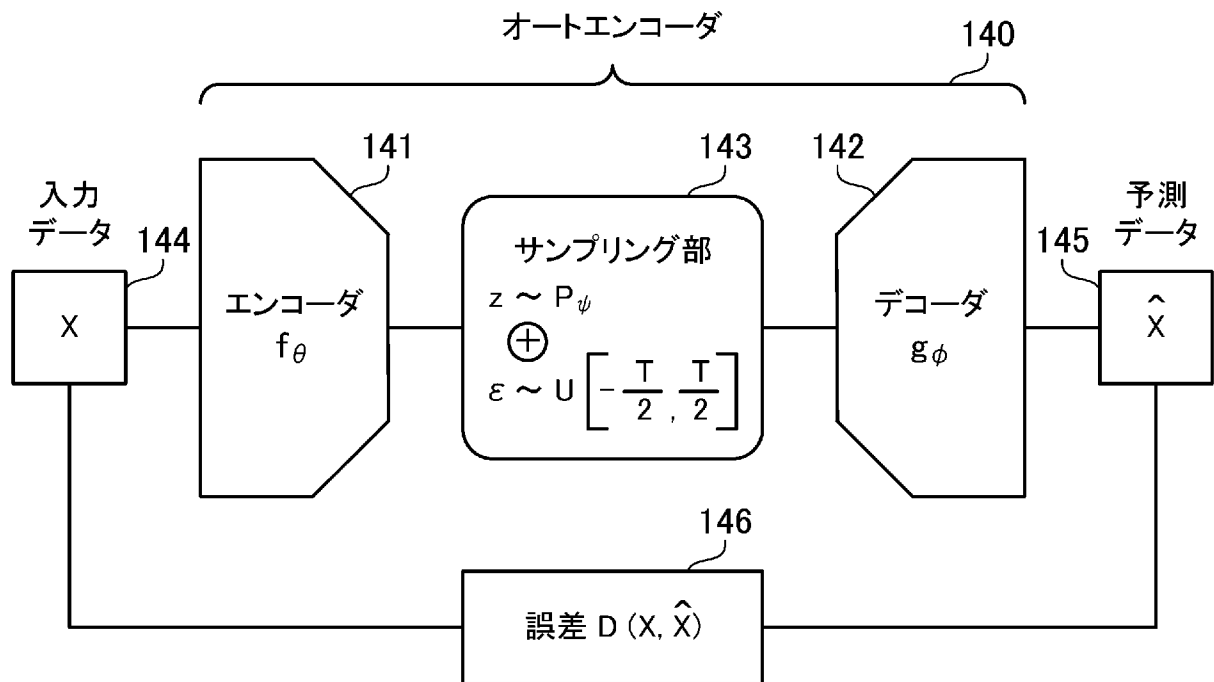
[図1]



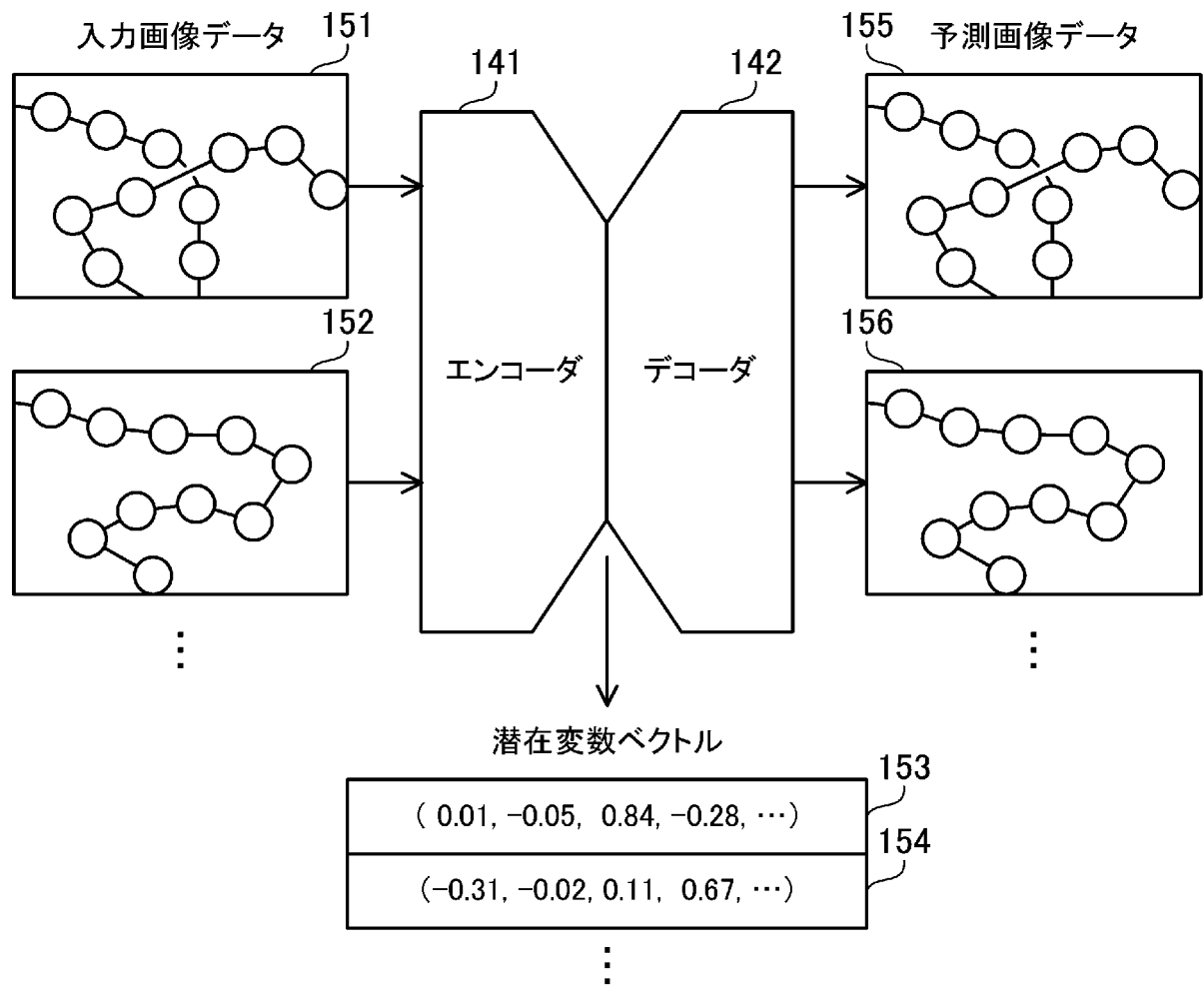
[図2]



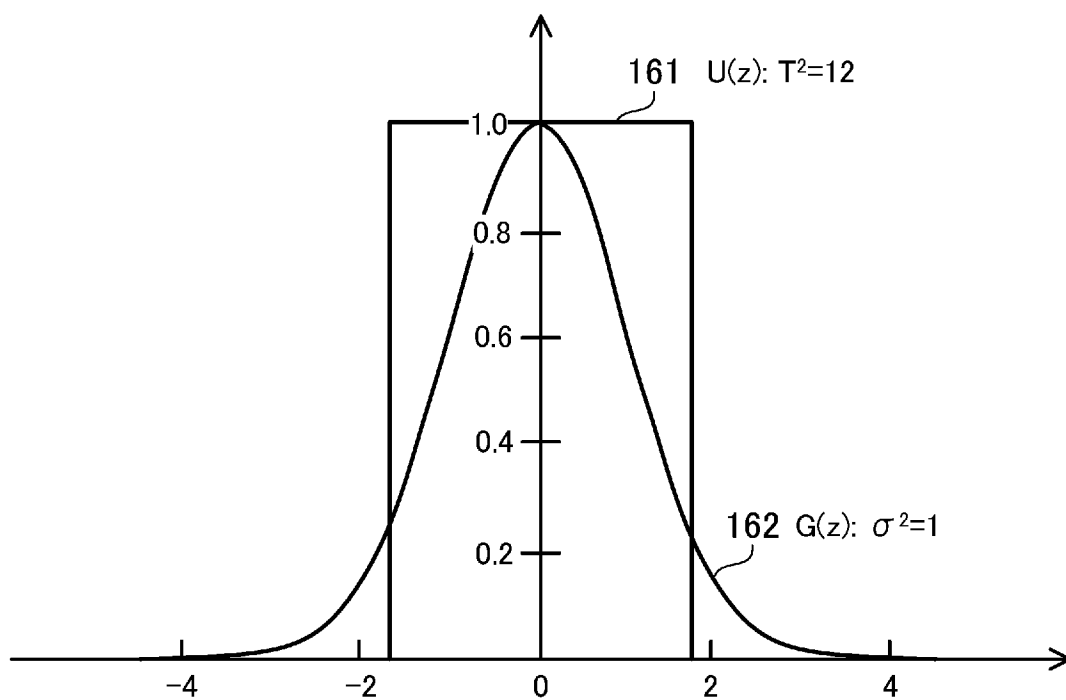
[図3]



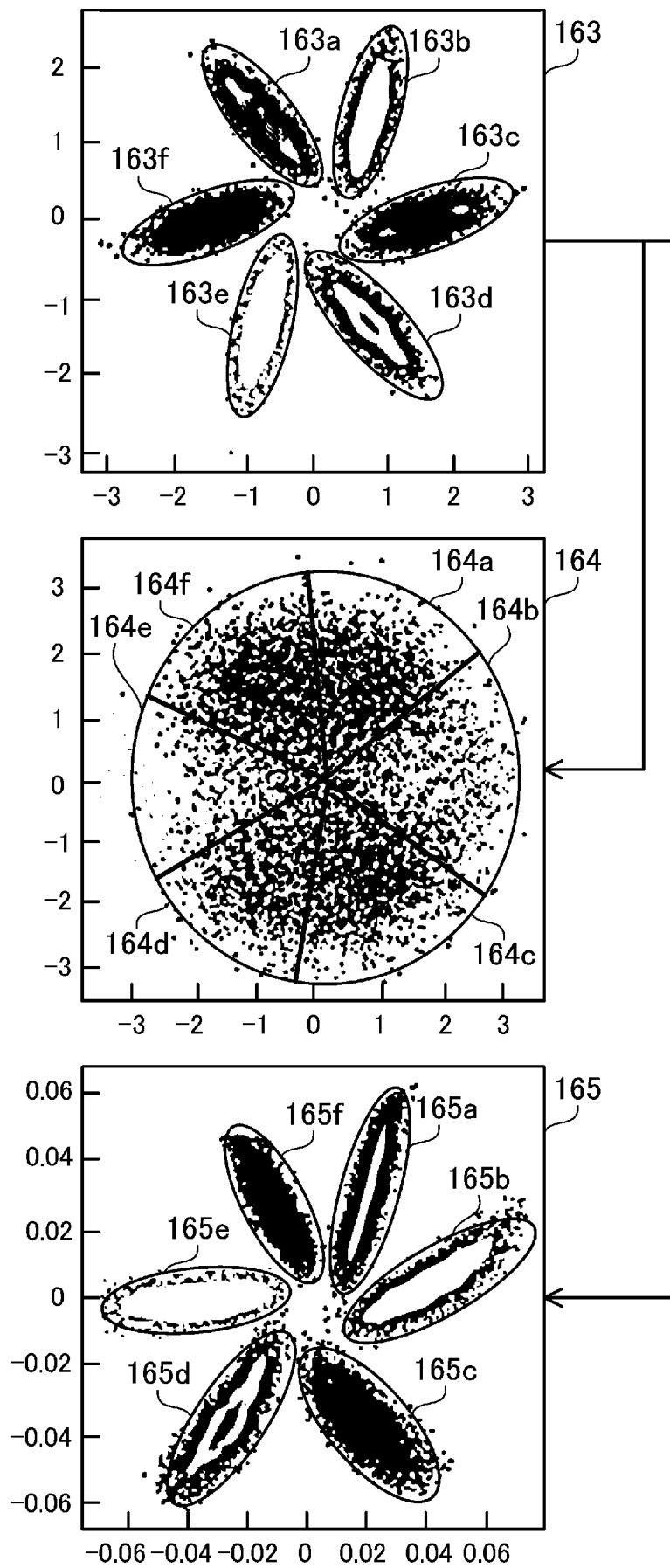
[図4]



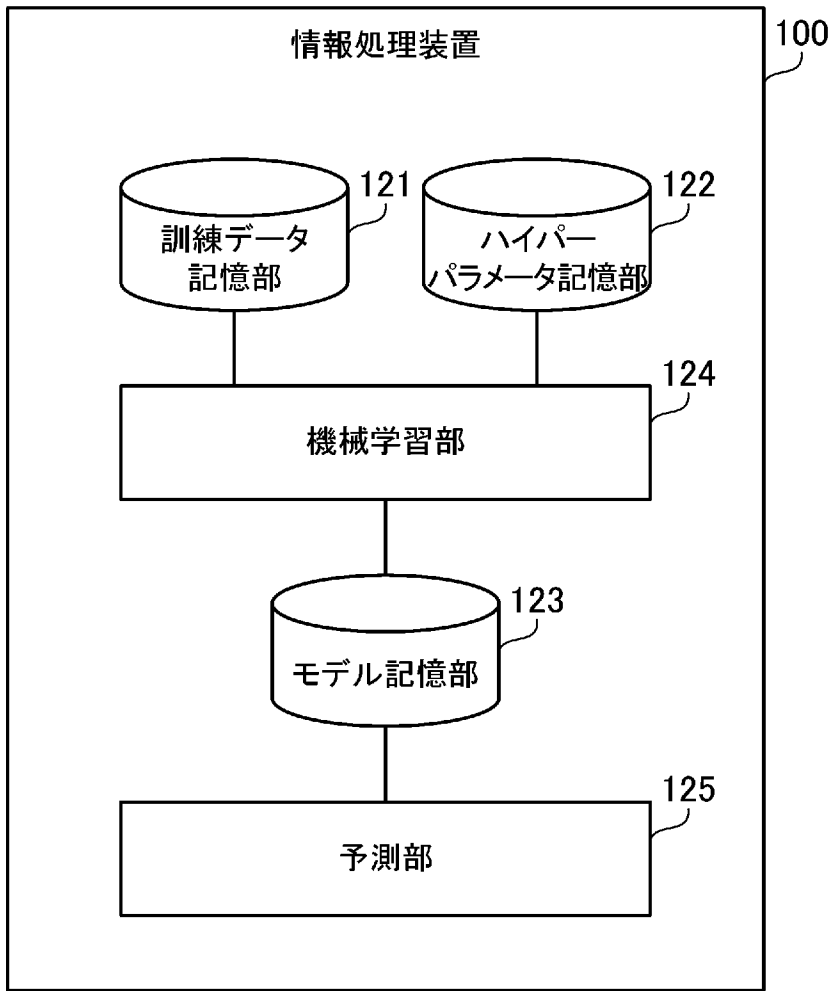
[図5]



[図6]



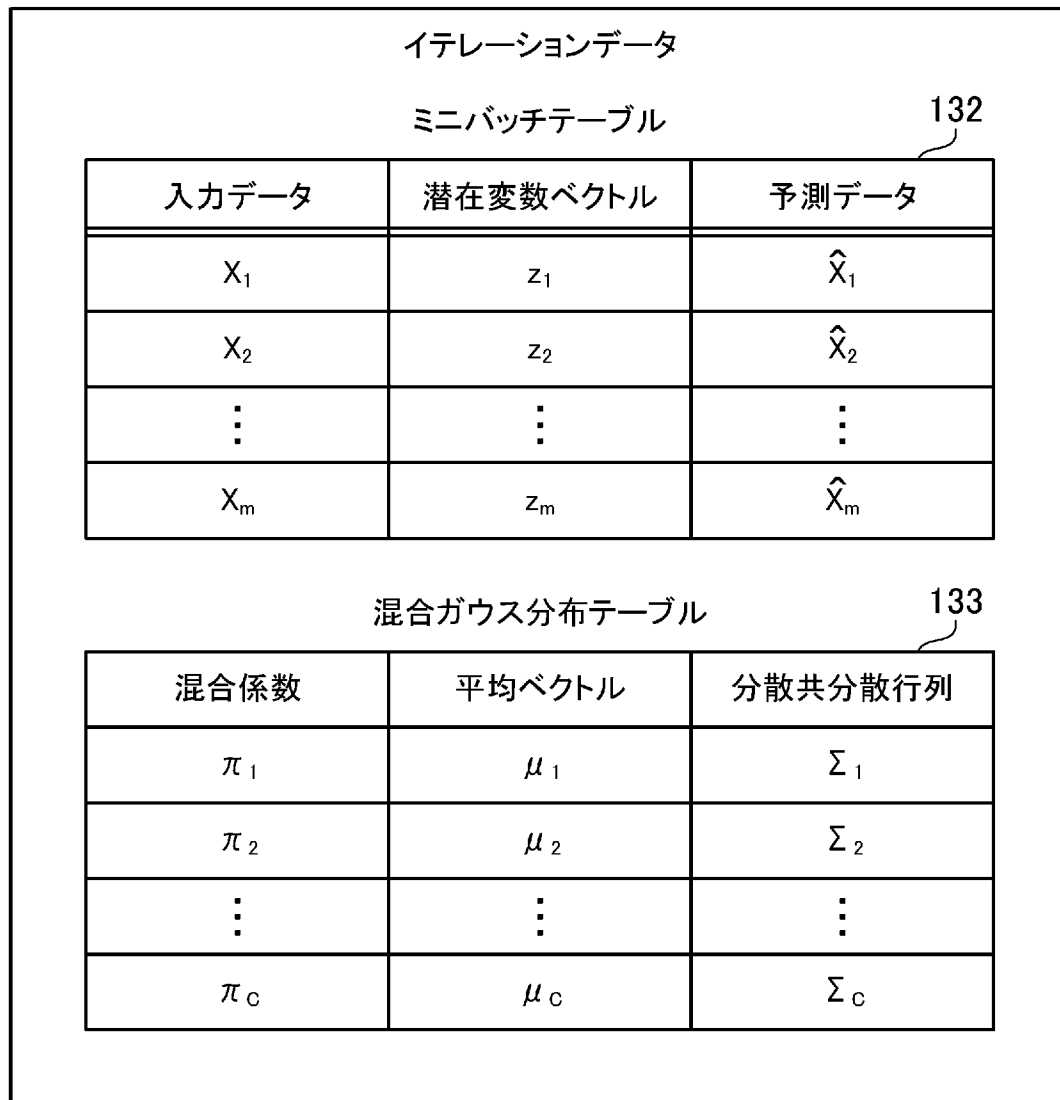
[図7]



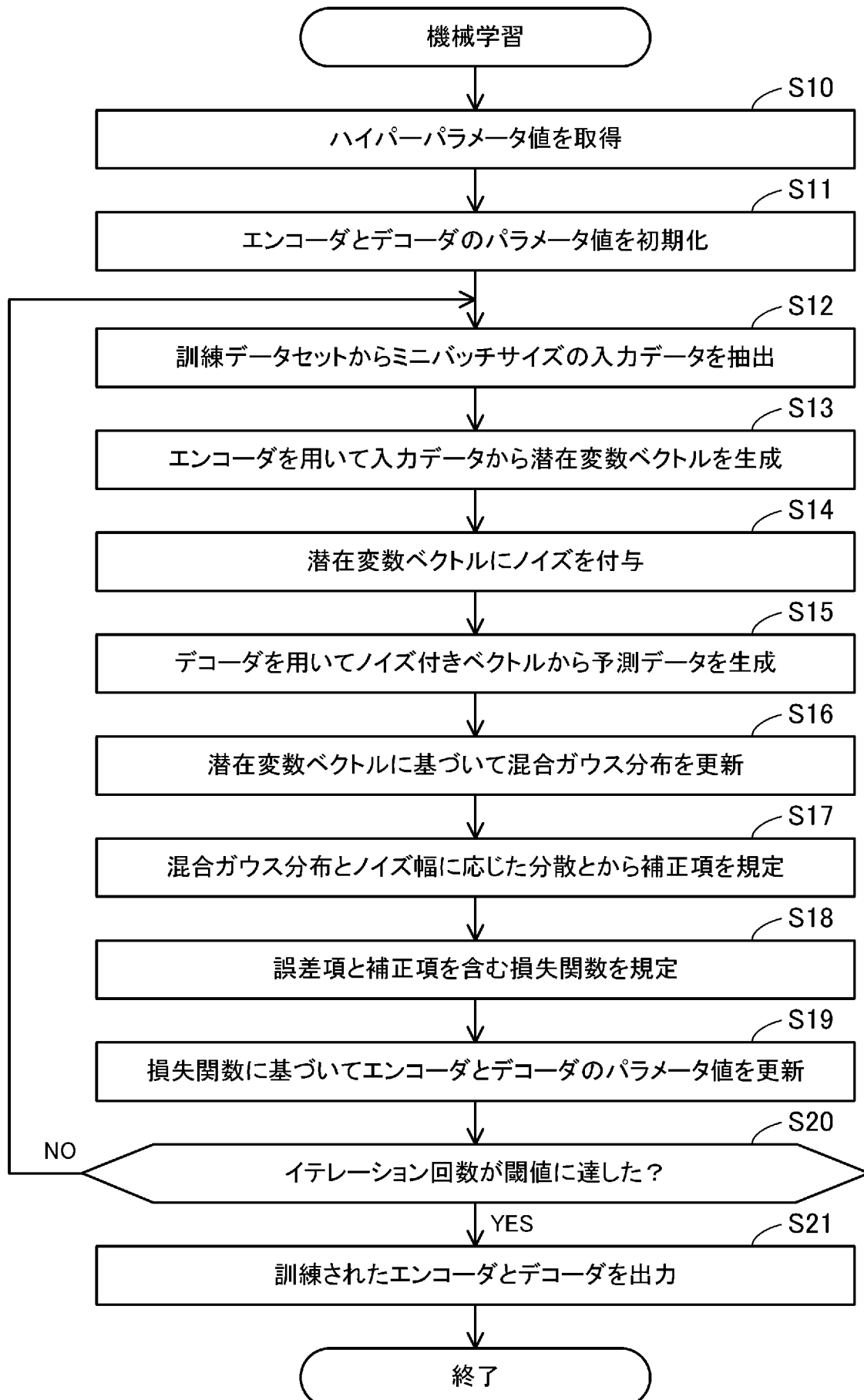
[図8]

ハイパーパラメータテーブル		131
ハイパーパラメータ	値	
ノイズ幅 T	0.04	
損失関数係数 β	0.1	
確率分布係数 ξ	0.95	
クラスタ数 C	6	
ミニバッチサイズ m	64	
距離関数 D	ユークリッド距離	

[図9]



[図10]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2023/021090

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER G06N 3/0455 (2023.01)i FI: G06N3/0455 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G06N3/0455 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2023 Registered utility model specifications of Japan 1996-2023 Published registered utility model applications of Japan 1994-2023 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	今井拓司, Sexy Technology: 富士通研が新たな深層生成モデル技術; 入力データの分布を学習, 潜在変数分布と線形に, Nikkei Robotics, 10 October 2020, vol. 64, pp. 12-17, ISSN 2189-5783, non-official translation (IMAI, Takuji, Fujitsu Laboratories develop new deep generative model technology; learning input data distribution, linearly with latent variable distribution) see, in particular, fig. 1-3	1-7
☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: “A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed “T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art “&” document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 14 August 2023		Date of mailing of the international search report 22 August 2023
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G06N 3/0455(2023.01)i FI: G06N3/0455		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G06N3/0455 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922 - 1996年 日本国公開実用新案公報 1971 - 2023年 日本国実用新案登録公報 1996 - 2023年 日本国登録実用新案公報 1994 - 2023年 国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	今井拓司, Sexy Technology : 富士通研が新たな深層生成モデル技術 ; 入力データの分布を学習、潜在変数分布と線形に, 日経Robotics, 2020.10.10, 第64号, pp.12-17, ISSN 2189-5783 特に図1-3を参照。	1-7
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。 * 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日 14. 08. 2023	国際調査報告の発送日 22. 08. 2023	
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 坂庭 剛史 5B 9288 電話番号 03-3581-1101 内線 3545	