

論文の内容の要旨

論文題目 **Extracting Knowledge from Databases by Redundancy Reduction**
(和訳 冗長性圧縮によるデータベースからの知識抽出に関する研究)

氏名 葛錫金

1. はじめに

知覚信号の処理により周囲から知識を抽出することは困難かつ複雑な逆問題である。Barlow は知覚刺激の統計的圧縮による脳内部での外界モデル構築について仮説[1]を提示し、最近その仮説を実装した Lee と Seung による研究[2]があり、非負行列分解 (**Non-negative Matrix Factorization** 以下 **NMF** に略) を使用して、局所的構造要素の重ねあわせから全体像をつかむことができるようになった。

本論文では、以上の研究成果の具体的な課題への適用を考え、セマンティックスについての明示的な取り扱いを目的にした非負条件下での単純な順結合階層型ニューラルネットワークを開発した。知識抽出の対象としては、2D画像から生体情報に至る質的に異なる課題を選定して、本手法の適用について検討し、多様なデータベース群からの知識抽出についての検討を行った。

2. モデルの概要

今回使用したモデルは3層から成り立っている。入力層と出力層のニューロンは同数であり、最初に主成分解析 (**Principal Component Analysis** 以下 **PCA** に略) を行い、全体的な基礎イメージを学習する。非負自動連想 (**Non-Negative Autoassociation** 以下 **NNA** に略) モデルでは、すべてのシナプスが正または0に限定される。学習の過程では、シナプスは正の値を取る限り誤差逆伝播学

習により変更される。出力層にあるニューロンは線形である。訓練の過程では、各パターンは入力及び出力として使用される。内部層のニューロンの数は、入力・出力層より少なく、情報は効率的に内部層に圧縮される。訓練終了後、内部層の各ニューロンは学習に用いた集合の構造要素に対応したものとなる。

3. 課題への応用例

NNAは、構造要素の抽出により多次元パターンを圧縮する特性を持つ方法である。非負条件を使用して、構造単位は各部分に相当する局所的イメージを表現する。この条件により、NNAは全体一部分関係に着目して知識を形成する人間の脳の物体認知モデルに対するアプローチとして考えることができる。この方法の適用可能な問題は我々の身の回りに数多く存在する。本論文では最初に二次元情報の例として、顔と漢字を取り上げる。次に多次元情報の例として文献情報と生体情報とを取り上げる。これらの適用は、上述の方法の拡張による多次元問題からの知識抽出を目標としている。

3-1 人の顔への適用

NNAを最初に顔の像のデータベースに適用した。二次元イメージに関してNNAは収束性が良好で、顔を構造要素の線形組み合わせとして表現可能である。しかし、これらの部分イメージはPCAによる顔全体のイメージとは非常に異なる。図1で示したように、NNAは顔の各部分に似た局所的特徴を抽出する。内部層のニューロンは目を表現するものもあれば、鼻、口、眼鏡を表現するものもある。図1からも明らかなように顔全体は、目、鼻やその他の部分の内部層ニューロンからの選択的発火によって表現されている。

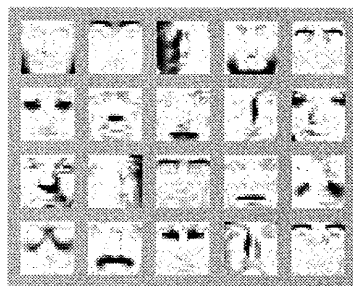


図1 NNAを顔の像のデータベースに適用した時抽出した構造要素。
各構造要素は内部層ニューロンに表現された情報である。

3-2 NNAとNMFの差異

人の顔への適用例では、NNAとNMFは似た結果を示したが、常に同じ結果を示すわけではない。この差を示すために、Hintonらのデータを適用した[3]。学習例は縦横の線にあたる結合した20個の基礎イメージにより作成した。計算中にて内部層が20個のニューロンで構成されている場合、NNA、NMF共に縦横の正確な線を示した。しかし内部層を30個のニューロンに増やすと、全く異なる結果を示した(図2)。NMFは自動的に線で、より細かな部分に分割化し、また余分な記号化を生み出す。強調しておかねばならないのは、NNAは20個の構造要素で表現でき、残り10個の内部ニューロンは不活性であることである。この特性は、内部層の非線形性また学習メカニズムが誤差逆伝播学習アルゴリズムにより決定されることによるものである。

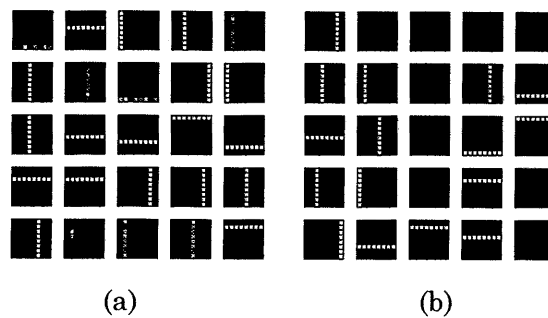


図2 Hintonらのデータを適用した時 (a) NMF、(b)NNAにより抽出した構造要素。NNAでは不必要な内部層ニューロンは除去される。

3-3 漢字への適用

漢字は、常に意味のあるいくつかの成分から構成され、形が似た字は関連のある字である。例えば図3(a)の上段の漢字の左側(へん)は、水を表す成分である。もしこれらの成分が最初に認知され、各漢字が成分の組み合わせで表現されているならば、擬似アルファベットのアプローチにより、漢字を簡単に認識することが出来ると考えられる。この点を明らかにするために、図3(a)のような漢字群を使い、この中からNNAにより図3(b)に示す構造要素を学習した。これらの構造要素は漢字の成分に良い一致を示した。

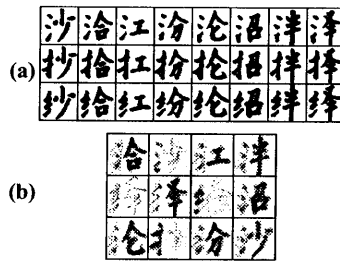


図3 (a)手書きによる頻繁に使用される24個の漢字。(b)NNAにより抽出した構造要素。

3-4 英単語の接頭語と接尾語への適用

部分表現モデルとしては、NNAの適用範囲は上記のような視覚的パターンだけでなく、言語の構造発見にも応用可能である。単純な例として、英単語認識の問題を考察してみる。例としてHamletを選択した。NNAは局所的な変化に敏感であり、10文字の英単語を使用した。結果的にNNAは接頭語と接尾語を見出すことができた。文章への拡張については、単語群の集約操作が必要となる。

4. クラスタリングアルゴリズム

部分群の認識も重要な課題であるが、与えられたパターンがどの集合に属するか正確に判断することも同様に重要なことである。本論文は、材料シミュレーションで幅広く使用される原子間ポテンシャルの考えに基づいた新しいアルゴリズムについて考察した。この方法では、パターンを原子で表現し、個々のパターンの類似性により原子間力を定義する。似たパターンが集合体を形成する場合、系全体で安定状態となる。このように、クラスタリング問題は安定構造を見出す問題に変換することが可能である。ランダムな構造の場合、最適解を見出すためシミュレーテッドアニリング手法を使用し、試験的に作り出されたデータで最初に適用し、十分な収束性を示した。今回用いたアヤメのデータは、クラスタリングに標準的な例であり、PCAで得られた結果と非常に似た結果が新しいアルゴリズムでも得たことから、本手法は適用範囲の広い手法であると言える。

4-1 遺伝子発現パターンへの適用

実用的な課題として、遺伝子発現パターンによるガン分類への適用を試みた。ここでは急性白血病を例に採った。急性白血病には2つのタイプがあり、1つ

は急性リンパ球性白血病 (Acute Lymphoblastic Leukemia 以下ALLに略)、もう1つは急性骨髄性白血病 (Acute Myeloid Leukemia 以下AMLに略) である。ALLとAMLを区別することは、正確な治療を施すために重要なことである。ここでは遺伝子発現パターンに72人の患者のそれぞれ7129種類の遺伝子群を使用した[4]。これらの72人の遺伝子発現量を成分に持つ巨大なベクトルに新しいアルゴリズムを適用することにより、図4の示すように2次元マップ化を得た。このマップでは、ALLとAMLの2種類を明らかに区別することが可能である。

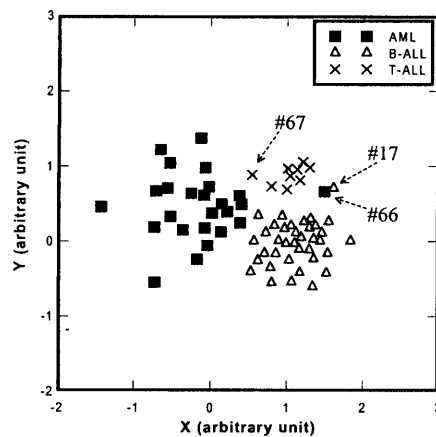


図4 遺伝子発現量パターンのクラスターリングによるガン分類。

5. 結論

大規模なデータベースから知識を抽出する2種類の方法を開発し、顔、漢字、文章、生体情報の分類と解釈に適用した。また材料科学における原子間ポテンシャルに関する概念を活用複雑な情報の可視化手法を開発した他、知識抽出のための補完的手法としてガン分類に関して分類アルゴリズムを開発し妥当な結果を取得して、本研究により開発した手法の有用性を示した。

(参考文献)

- [1]H. B. Barlow, Neural Computation, 1, 295-311 (1989).
- [2]D. D. Lee,& H. S. Seung, Nature 401, 788-791 (1999).
- [3]G. E. Hinton, P. Dayan, B. J. Frey, & R. M. Neal, Science, 268, 1158-1161, (1995).
- [4]T. R. Golub, et al., Science 286, 531-537, (1999).