

■ まえがき

データ解析の世界は大きな転換期を迎えています。背景には、コンピュータの計算処理能力の飛躍的向上と、インターネットやセンサーなどによって大量のデータが取得可能になったことがあります。それに伴い、統計解析手法においても、かつてないほど大規模で複雑なモデルやアルゴリズムが開発されてきています。特に注目されている技術は、2006年に発表された論文から一大ブームを巻き起こした深層学習と呼ばれる技術です。この技術では、解析のために大規模なニューラルネットワークモデルを構築し、分散処理などの高効率な計算技術を用いることによって、大量の高次元データを使った高精度な統計的予測を可能にしました。従来人工知能技術で困難とされた画像認識や音声認識においても高い性能を出しており、データ解析と人工知能の両分野はともに大きく発展しました。

一方で、実務的な解析で着実に成果を上げている手法が確率計算に基づくベイズ統計です。ベイズ統計では、モデリングというプロセスを通してデータに仮定できる知識や構造を積極的に導入していきます。特にデータに欠損や未確定の発生要因がある場合など“必要な情報がすべて揃っていない”ような状況において威力を発揮する手法です。また、データに対して明示的に仮定を導入するため、結果に対する解釈性が高いことも大きな利点です。

本書のテーマは深層学習とベイズ統計の融合です。従来の深層学習では、主に大量のデータを学習できるスケーラブルなモデルの開発や予測精度の改善が重視され、予測結果の根拠に対する解釈性や信頼度に関する評価は後回しにされてきました。その一方で、ベイズ統計は解釈性の高い解析が行える代わりに、大量・高次元のデータに対してスケールする手法の実応用は遅れていました。したがって、両者が互いの欠点を補いつつ歩み寄っていくのは極めて自然な帰結であるといえます。実際に、深層学習の分野では画像処理や音声処理、自然言語処理などの各分野に特化したネットワーク設計が行われるようになってきており、これはベイズ統計におけるモデリング作業に一致します。ベイズ統計から見ても、深層学習で多大な実績のある確率的勾配法などのアルゴリズムを積極的に取り入れることによって、大量データに対

するスケーラビリティを向上する取り組みが行われています。広い視点で捉えれば、「大規模・複雑なモデルの設計と効率的な確率計算」という大きなテーマの中で両者は結び付こうとしているといえるでしょう（図1）。

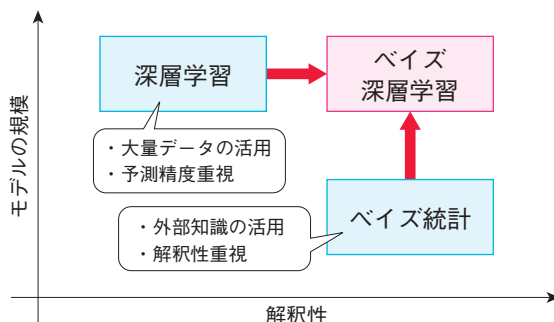


図1 ベイズ深層学習の目指す方向性

本書ではさらに、深層学習の分野で提案されている手法に対してベイズ統計による解釈を与えることによって、多くの理論的つながりや応用事例が生み出されていることを解説します。特に、深層学習のモデルをベイズの枠組みで捉えなおすことにより、これまで深層学習の改善のために開発された多くのアイデアが理論的に自然な形で解釈できることを示します。また、従来では実現の難しかった深層学習の予測の信頼度の評価やそれを活用した応用事例も紹介します。

本書では、深層学習あるいはベイズ統計のいずれかに関して基礎的な知識を持ち合わせている方を想定読者としています。最小限の前提知識は2章や3章で補足しますが、ベイズ統計と深層学習の双方を網羅的に解説しているのではなく、あくまで融合領域のみに着目していることに注意してください。参考として、下記のような書籍と併せて読めば、理解がスムーズになるでしょう。

- 須山敦志（著）、杉山将（監修）。ベイズ推論による機械学習入門。講談社，2017。
- 瀧雅人（著）。これならわかる深層学習入門。講談社，2017。

- C.M. ビショップ (著), パターン認識と機械学習 (上・下), 丸善出版, 2012.

また, 下記のサポートページで本書の正誤表や一部の実験結果などを掲載する予定です.

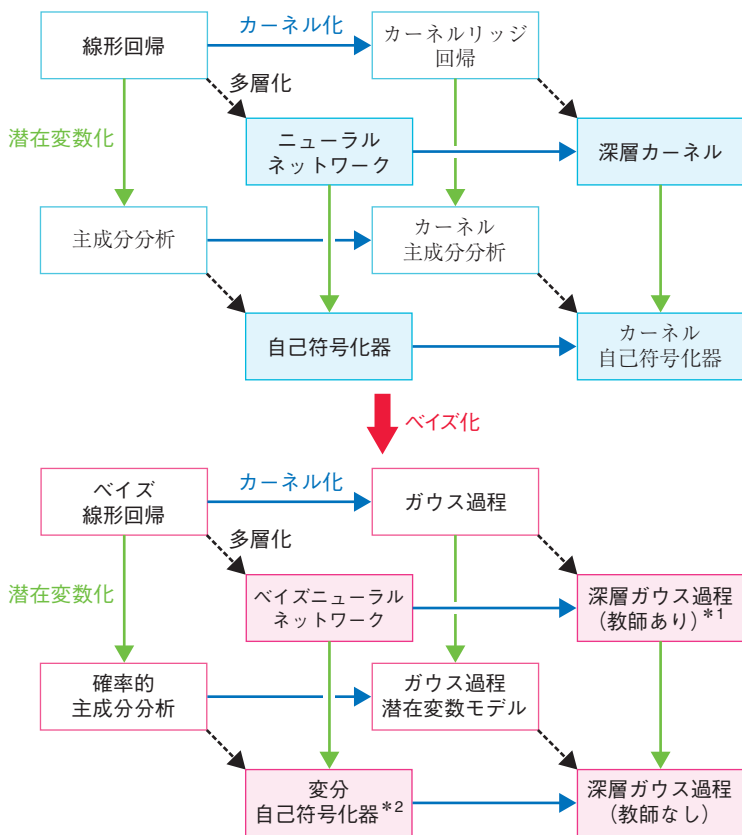
- <https://github.com/sammy-suyama/BayesianDeepLearningBook>

1 章では, 深層学習とベイズ統計の歴史を簡単に振り返ります. 特に, かつて深層学習とベイズ統計の融合が理論レベルで試みられたことと, 両者が再び合流することになった背景や意義を解説します. 2 章と 3 章では, 基本的なニューラルネットワークのモデルや学習方法と, ベイズ統計における確率推論の基礎を導入します. 4 章では, 本書の残り後半を通じて必要になる近似ベイズ推論の手法をいくつか紹介し, 続く 5 章ではそれらの手法のベイズニューラルネットワークへの適用例を示します. 6 章では近年注目を集めている深層生成モデルのベイズ的な取り扱い方を解説します. 7 章では, ノンパラメトリックな回帰モデルであるガウス過程を紹介し, 深層学習モデルとの深いつながりを示します. 参考として, 図 2 では, 機械学習の領域で頻繁に取り扱われるモデル群とその関係性を図示しており, 特に太字で書かれているモデルは本書で具体的に解説していきます.

本書を執筆するにあたって, 理化学研究所革新知能統合研究センターセンター長・東京大学教授の杉山将先生には多大なご協力をいただきました. 査読にご協力いただいた東京大学の鈴木大慈先生, 佐藤一誠先生には, 多くの有益なアドバイスをいただきました. 岡本弘野氏, 河野慎氏, 谷口尚平氏, 林俊介氏, 松嶋達也氏, 森賀新氏には, 原稿の改善にご協力いただきました. また, 講談社サイエンティフィクの横山真吾氏には, 執筆作業全般にわたって大変お世話になりました. 皆様には心より感謝申し上げます. 最後に, 執筆期間中に恋人から妻になった百々子には, 長い期間大きな苦勞をかけることとなってしまいましたが, 決して愛想をつかすことなく, 温かくサポートしてくれたことに深く感謝しています.

2019 年 6 月 22 日

須山 敦志



*1 厳密には深層ガウス過程はガウス過程を複数重ねたモデルであり、深層カーネルのベイズ化ではありません。ただし、深層カーネルを使ったガウス過程も本書で解説します。

*2 同じモデルを変分推論法以外のアルゴリズムで学習させることも可能です。

図2 本書で取り扱うモデルの関係性