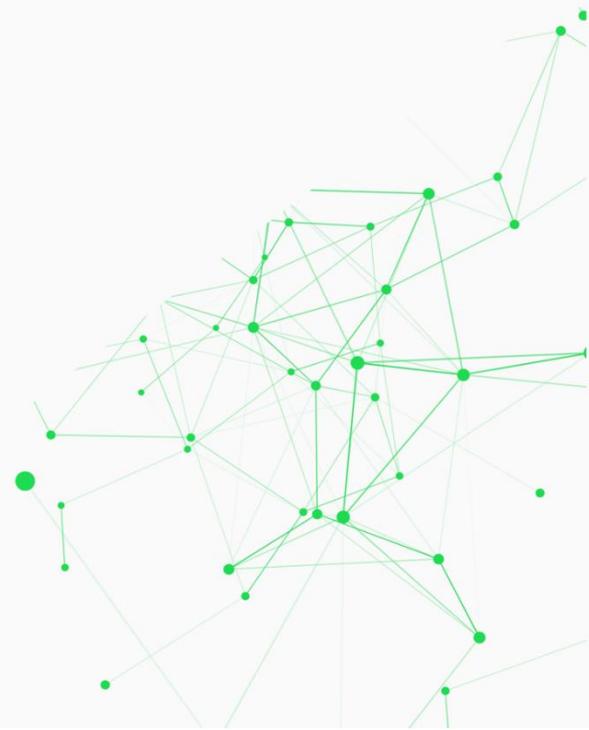


2020年度

AIPシンポジウム 成果報告会

RIKEN Center for Advanced Intelligence Project



汎用基盤技術研究グループの 活動紹介

杉山 将

汎用基盤技術研究グループ
グループディレクター



汎用グループの目標・戦略

- 現在の機械学習には様々な弱点がある：
 - 高品質の教師データが大量に必要
 - 学習結果の解釈が難しい
 - ……
- 独自の機械学習技術を開発し、国際的なイニシアチブを取る：
 - 深層学習の理論的理解
 - 深層学習の限界を超える新しいアルゴリズム
 - 応用分野への橋渡し

汎用グループの体制

2021.2.1現在
リーダー: 17名
常勤研究員: 48名

3



実応用



機械学習の
アルゴリズム開発



推論・探索・検定の
アルゴリズム開発



理論保証



学習理論の構築



最適化理論の構築



数学的知見



基礎数理

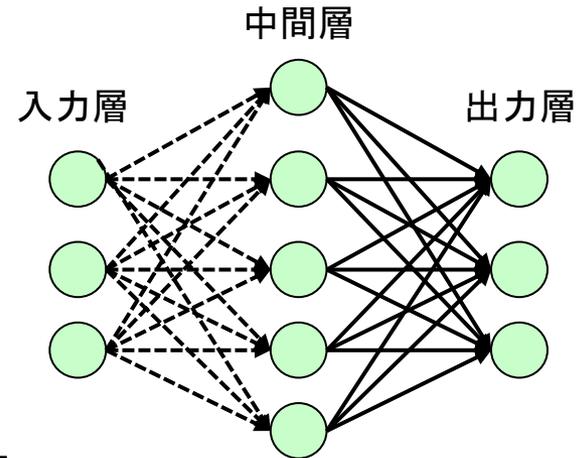


発表の流れ

1. 深層学習を理解する
2. 深層学習の限界を超える
3. 応用分野への貢献
4. まとめと今後の展望

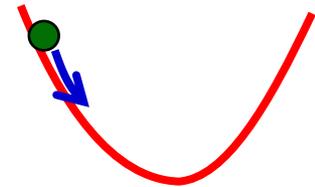
■ 「浅い」モデルを用いて予測：

- 中間層と出力層の間の重みのみを学習
- 最適化が簡単
- 統計的学習理論により、理論的な振る舞いが(ほぼ)解明



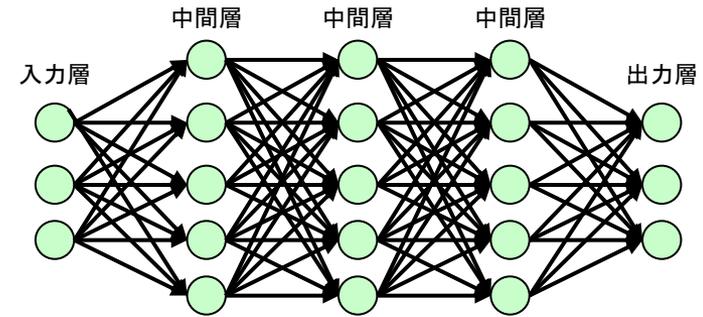
■ 10年くらい前までの最先端：

- 中間素子数を増やすことで性能向上
→ 大規模データに適用できない
- 入力が高次元の場合に性能が劣化
→ 「次元の呪い」を受ける



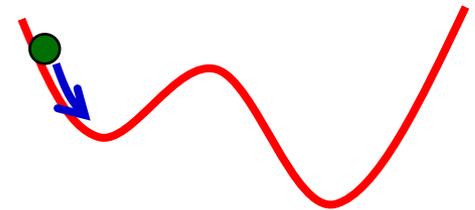
■ 深層学習:

- 多数の中間層を積み重ねる
 - 人間の神経回路とのアナロジー
 - データの「表現」を学習
- 高次元のデータに対しても予測性能が高い
- 最適化は非常に難しい



■ 研究成果: 深層学習が本当に優れていることを数学的に証明

- 大域的最適化が可能
- 高次元でも予測が当たる
- 万能な近似能力がある



大域的最適化が可能

7

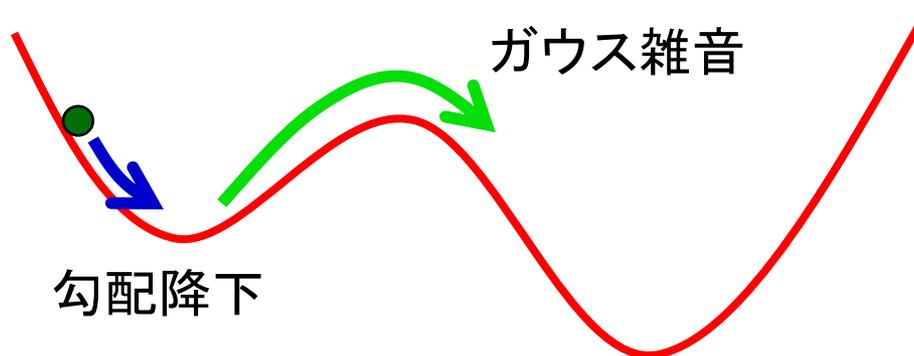
Suzuki & Akiyama (ICLR2021)

■ 確率的勾配法に適切なガウス雑音を加えれば、
大域的最適解に収束する：

- 離散時間である勾配学習アルゴリズムの連続時間版を考えることにより証明

$$dX_t = -\nabla \left(\hat{L}(X_t) + \frac{\lambda}{2} \|X_t\|_{\mathcal{H}_K}^2 \right) dt + \sqrt{\frac{2}{\beta}} d\xi_t$$

$$\hat{L}(X_k) - \int \hat{L}(x) d\pi_\infty(x) \lesssim \exp(-\Lambda_\eta^* k \eta) + \frac{c\beta}{\Lambda_0^*} \eta^{1/2-\kappa}$$



次元の呪いは受けない

8

Suzuki (NeurIPS2020)

- 浅い学習の予測誤差は、データの入力次元 d とともに増加する:

$$R_{\text{lin}}(\mathcal{F}_\gamma) := \inf_{\hat{f}: \text{linear}} \sup_{f^\circ \in \mathcal{F}_\gamma} \mathbb{E}_{D_n} [\|\hat{f} - f^\circ\|_{L_2(P_X)}^2] \quad R_{\text{lin}}(\mathcal{F}_\gamma) \gtrsim n^{-\frac{2\tilde{\beta}+d}{2\tilde{\beta}+2d} - \kappa'}$$

- 深層学習の予測誤差は入力次元に依存しない:

$$\mathbb{E}_{D_n} \left[\mathbb{E}_{W_k} [\|f_{W_k} - f^\circ\|_{L_2(P_X)}^2 | D_n] \right] \lesssim n^{-\frac{\gamma}{\alpha_1 - 3\alpha_2 + 1}} + \Xi_k$$

- 高次元データに対する予測誤差:

- 深層学習: $1/n$

- 浅い学習: $1/\sqrt{n}$

n : ラベル付き訓練データ数

- 深層学習は少ないデータから精度良く学習できる

深層モデルの万能性

9

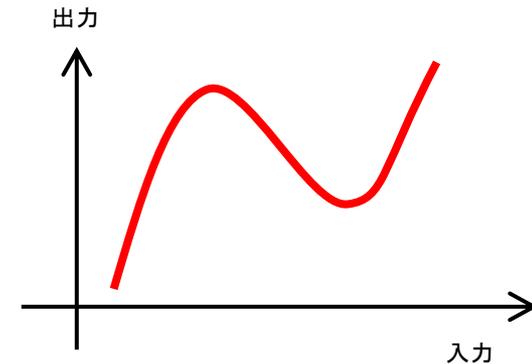
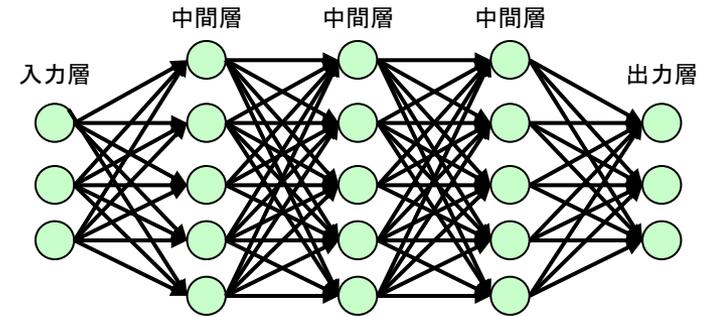
■ 深層モデルは関数：

- 複雑な関数を表現できる方が良い

■ あらゆる関数を表現できるモデルを**万能モデル**とよぶ

■ よく知られた深層モデルは**万能**：

- 3層ニューラルネット Hornik et al. (1989); Cybenko (1989)
- 全結合ニューラルネット Lu et al. (2017); Hanin & Sellke (2018)
- 畳み込みニューラルネット Zhou (2020); Heinecke et al. (2020)
- 残差ニューラルネット Sejun et al. (2020); Paulo & Bahman (2020)

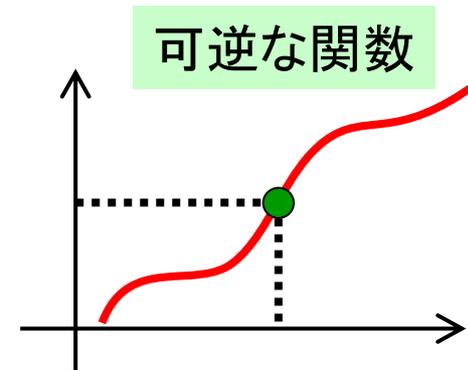
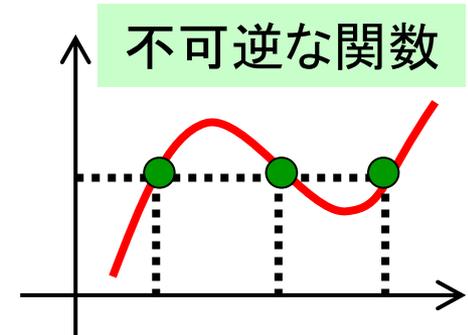


可逆ニューラルネットの万能性 10

Teshima et al. (NeurIPS2020)

■ 可逆ニューラルネット:

- 逆関数が計算できる特殊なモデル
- 近年, 半教師付き学習, 転移学習, 生成モデリング, 確率推論などで活用
- **万能性は未解明** (可逆関数を足すと可逆でなくなることがあるため難しい)



■ 成果: 可逆ニューラルネットは万能!

- 証明には, 1970年代に示された微分幾何学の特殊な構造定理を活用
- AIPの**機械学習**と**純粋数学**の若手研究者が, 重要な未解決問題を解決
- NeurIPS2020にてオーラル発表 (採択率1%)

1. 深層学習を理解する
2. 深層学習の限界を超える
3. 応用分野への貢献
4. まとめと今後の展望

- 人間は、人生を通して継続的に学習
- 今の深層学習は一つのタスクのみを学習
- 深層モデルを継続的に学習させると、過去の知識を壊滅的に忘却してしまう
- **忘却の回避**が近年の重要研究課題：
 - ディープマインド社 Kirkpatrick et al. (2018); Titsias et al. (2020)
 - ケンブリッジ大学 Nguyen et al. (2018)
 - スタンフォード大学 Zenke et al. (2017)
- しかし、**忘却と適応のトレードオフ**のため、まだ十分な性能が得られていない

ベイズ型継続学習

Pan et al.
(NeurIPS2020)

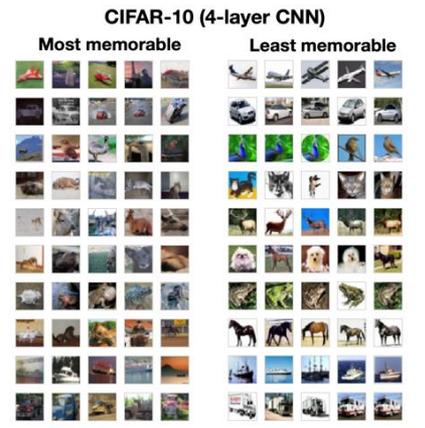
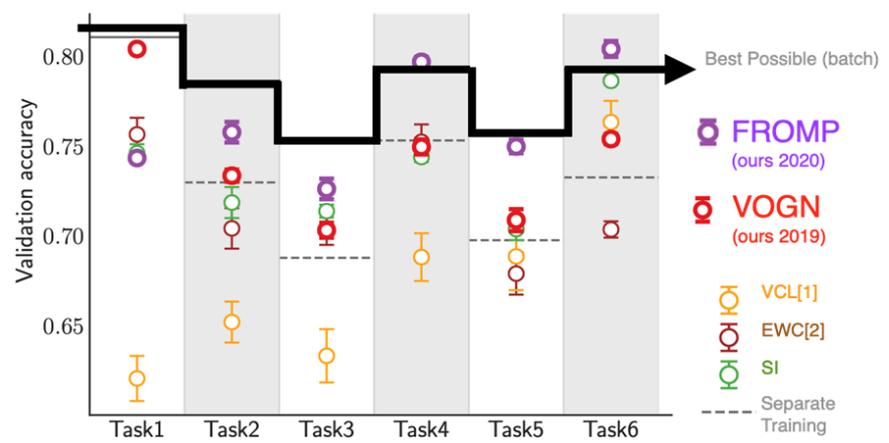
■ ベイズ推論による不確実性を利用して:

- 重要な過去のデータを思い出す
- 思い出したデータを再学習

■ 独自開発のスケラブルな変分ベイズ学習技術を用いて, 実時間学習を実現

Khan and Lin (AISTATS2017)

- 従来法を大きく超える予測性能を達成
- NeurIPS2020にてオーラル発表(採択率1%)



相関と因果

■ 機械学習：データの相関をもとに予測

- チョコ消費量を使えば，ノーベル賞受賞者が大体予測できる

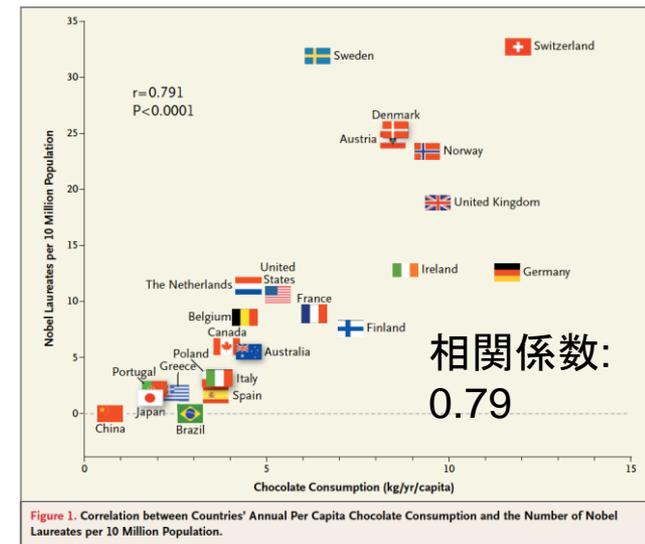
■ ノーベル賞受賞者数を増やすためには？

- チョコをたくさん食べても増えない
- 相関と因果は違う

■ 因果推論：介入効果を知る

- チョコ消費量を変えると，ノーベル賞受賞者数は（どのくらい）変わるのか？

Messerli (2012)



ノーベル賞受賞者の数

チョコレート消費量

因果推論の革新的新手法

15

■ ランダム化比較試験 (A/Bテスト):

- 被験者を2群にわけ, 1群だけ介入
- 病気の治療などでは倫理的な問題

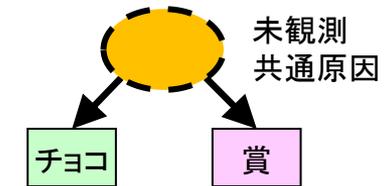
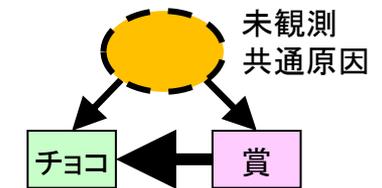
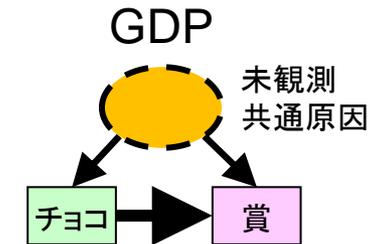
■ 介入せずに因果関係を求めたい:

- 隠れた要因の扱いが,
因果推論の最大の課題の一つ

■ 隠れた要因の存在下でも, 全体構造が推定可能な初めての手法を開発:

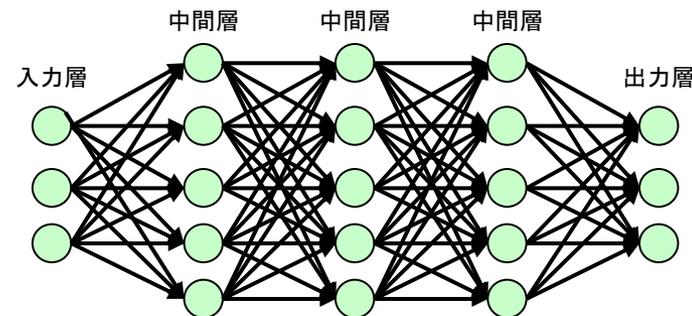
- 音声の分離に用いられる技術を応用して,
隠れ要因を分離

■ 公開したソフトウェアを国内外の企業が利用



Maeda & Shimizu (AISTATS2020)

- 深層学習は、一般に予測性能が高いが、学習しすぎると性能が低下する(過学習)。
- これまでに、過学習を回避するための様々な技法が提案：
 - 正則化
 - 早期終了
 - ドロップアウト
- 更なる過学習回避が重要課題



■ ニューラルネットの記憶能力: Arpit et al. (ICML2017) Zhang et al. (ICLR2017)

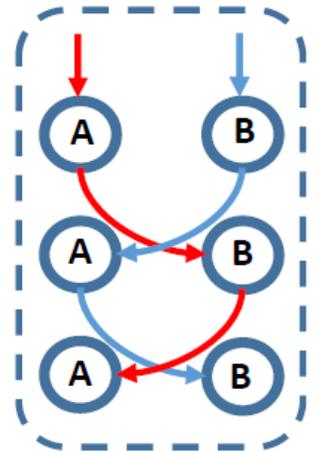
- 確率的降下学習は雑音なしデータに早く記憶
- しかし, 単純な早期終了ではうまくいかない

■ 2つのニューラルネットを用いた共教示:

- 誤差の小さいデータを選んで教え合う
Han et al. (NeurIPS2018)

- 出力が合致しないデータだけを教える
Yu et al. (ICML2019)

- 誤差の大きいデータに対して勾配上昇
Han et al. (ICML2020)



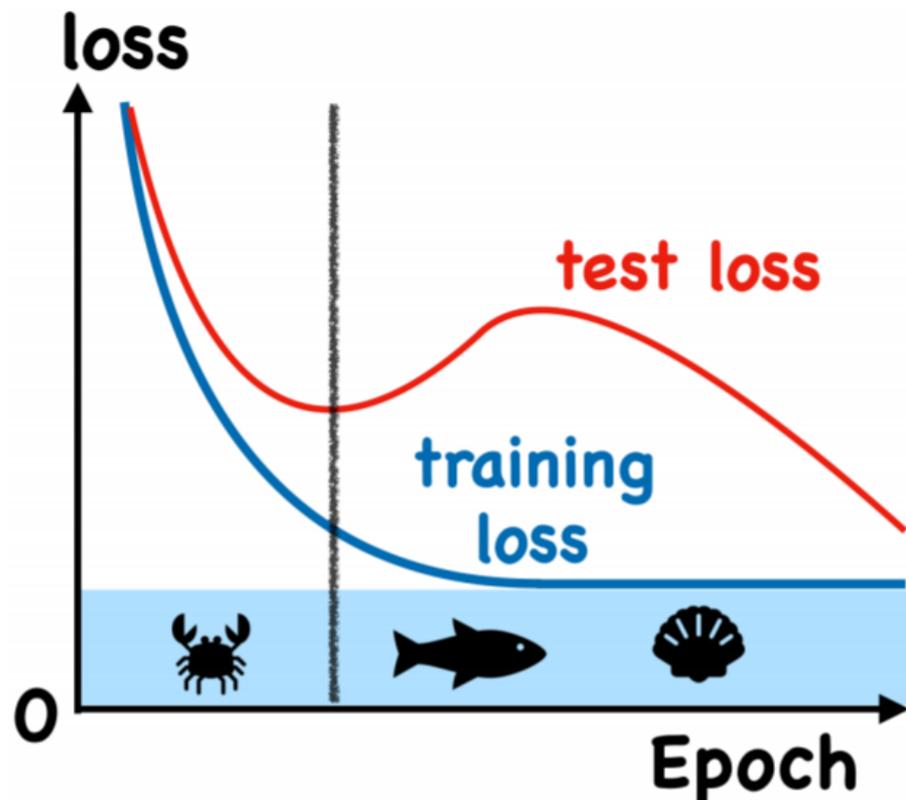
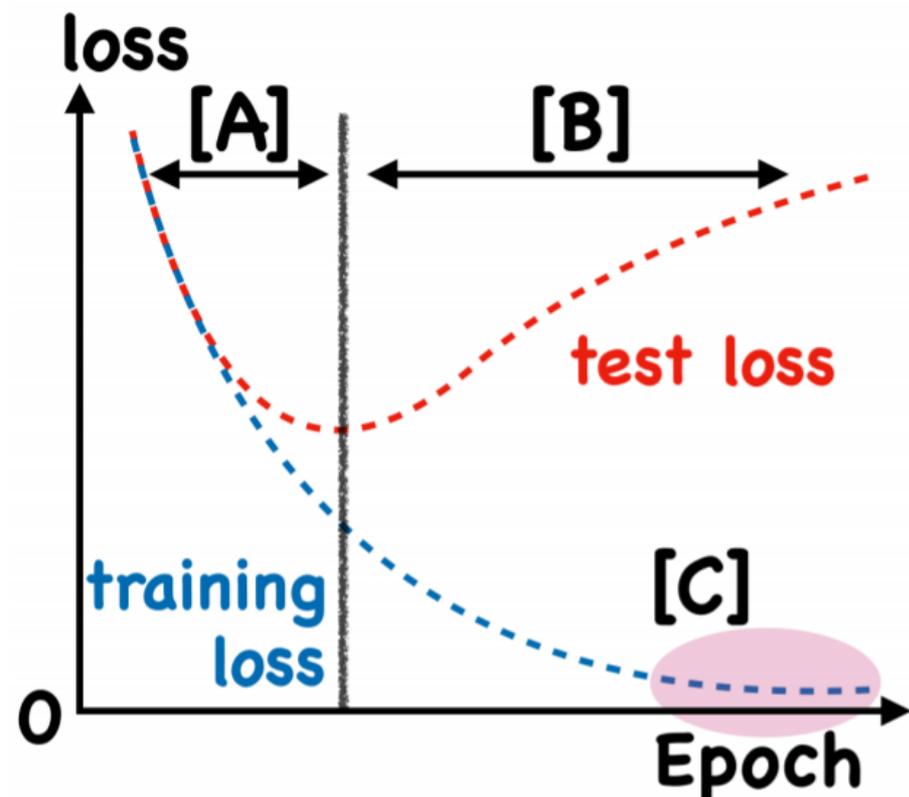
■ 理論はないが, 実験的には超ロバスト:

- 50%のラベルをランダムに変えてもうまく学習できる!

洪水法：新しい過学習抑制パラダイム ¹⁸

- ニューラルネットは雑音に過適合しやすい？
- 訓練誤差を「洪水」させて過適合を抑制：
 - 二重降下が誘発される？

Ishida et al. (ICML2020)



1. 深層学習を理解する
2. 深層学習の限界を超える
3. 応用分野への貢献
4. まとめと今後の展望

様々な応用につながる 基礎技術研究

- テンソルデータ解析 → 深層モデル圧縮
- 非凸最適化理論 → システム同定
- 圧縮データ学習 → 大規模移動データ解析
- 動的システム同定 → 時系列モデリング
- 連続的意思決定 → 5G通信最適化
- 位相的データ解析 → 金属ガラス構造解明
- 高次元統計解析 → 急性骨髄性白血病治療
- 並列探索 → 新規化合物生成

産業界との連携1： 重機による施工の自動化

- **鹿島・コマツ**では、熟練技能労働者の高齢化に備え、次世代建設生産システムの開発に着手
- 自動化施工管制室から作業指示を出し、**複数の建設機械を同時に稼働**：
 - 自動化重機の自律的制御
 - 自動化施工における生産計画の最適化

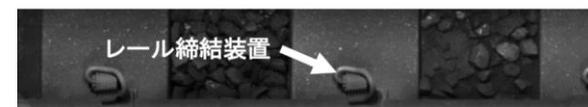


産業界との連携2: 鉄道インフラの保線サポート

- **JR東日本**は、線路設備モニタリング装置を導入し、線路状態の把握が可能に
- 将来の労働人口の減少を見据え、**線路状態をAIで遠隔監視**:
 - 線路状態の将来予測
 - 異常の自動検知
 - 線路の修繕計画の提案



線路設備モニタリング装置



軌道材料の画像の例 (正常な状態)

(目的Gとも連携)

発表の流れ

1. 深層学習を理解する
2. 深層学習の限界を超える
3. 応用分野への貢献
4. まとめと今後の展望

- **汎用Gの目標**: ビッグデータが収集できない場面でも機能する新しい機械学習技術を開発
- そのためには、インクリメンタルでない独自の理論・コンセプトが必要
 - **深層学習の理解**: 最適化・統計学習・表現理論を統合した理論体系
 - **深層学習の限界の打破**: 弱教師付き学習, 構造データ学習, 継続学習, 因果推論, 並列探索
- これらの技術開発を通して, 日本が目指す **trusted quality AI** の実現に貢献する

- **インパクトのある成果の創出:**
 - 2015年以前: 主要国際会議でのオーラル発表はほとんどなし
 - 現在: AIPからNeurIPS2020オーラル2件(採択率1%), スポットライト7件(同3%), ICLR2021オーラル2件(同2%)
- **裾野の拡大:**
 - 2015年以前: ICML, NeurIPSへの日本からの採択はひと桁
 - 現在: AIPからICML2020に18件, NeurIPS2020に21件, AISTATS2021に17件, ICLR2021に8件
- **国際的リーダーシップの発揮:**
 - ACML2020, IJCAI2020, NeurIPS2020などで弱教師付き学習やテンソル学習などのワークショップを主催
- **今後, 国際的なビジビリティの更なる向上を目指す**