Nonconvex Learning Theory Team
Takafumi Kanamori
非凸学習理論チーム　金森 敬文

RIKEN

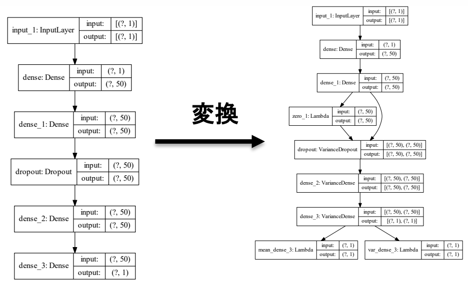
Center for Advanced Intelligence Project

深層ニューラルネットワークの不確実性評価

問題：深層ニューラルネットワークの予測不確実性を評価する．

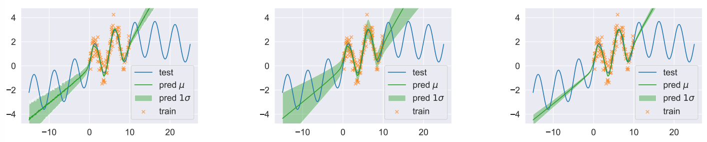
貢献：ドロップアウトを用いて学習された深層ニューラルネットワークに対して，実装が容易で計算効率が高い不確実性評価の方法を提案した．

フィードフォワードニューラルネットワークだけでなくリカンレントニューラルネットワークに対しても有効性を確認した．
応用例：分布外データの検知



通常のネットワーク　**不確実性を取り入れたネットワーク**

過剰な信頼性(over confidence) を回避. 自動運転などで重要な技術



真の不確実性　**提案法**　**既存の方法**

[Mae, Kumagai, Kanamori, Neural Networks(2021)]

複雑な統計モデルのための推定法の開発

問題設定： $x_1,\dots,x_n \sim q(x)$．データから分布 $q(x)$ を推定

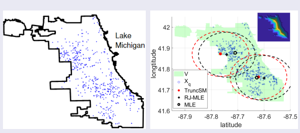
- 普遍的な問題．さまざまな設定でこれまで深く研究されている．
- 統計モデル $p(x;\theta)=\tilde{p}(x;\theta)/Z_\theta$．さまざまな制約により，規格化定数 Z_θ が計算できないことが多い． ⟶ 標準的な推定方法が使えない．

- S. Liu, T. et al.: Fisher-div による推定法を拡張し，複雑なドメイン上での推定を可能にする方法 (Truncated Score Matching; TruncSM) を開発した (投稿中)

TruncSM

地図上の区域のような複雑なドメイン上の分布推定

1. 重み付きフィッシャー距離による推定
2. 重み $g(x)$：データ領域の境界までの距離 → 効率的な計算
3. 推定精度の詳細な解析．



切断混合ガウス分布の推定

行列空間上のデータ解析

行列空間上のデータ

- グラスマン多様体，シュティーフェル多様体，etc：方向推定，剛体の運動推定などのモデリング．
  正定値行列：信号処理，コンピュータビジョン，脳科学．
- 行列多様体上の確率密度推定，モード推定：アルゴリズム，収束性，ロバスト性の証明．

[Sasaki, et al., AISTATS 2022]

最尤推定量の許容性とマルコフ過程の再帰性の理論解析

- Stein のパラドックス：d 次元正規分布の平均値推定は $d \geqq 3$ のとき縮小推定を使うとリスクが改善
- L.Brown の関係：d 次元 Brown 運動の $d \leqq 2$ 再帰性・$d \geqq 3$ 非再帰性と関係

目標 正規分布と Brown 運動の関係をマルコフ過程へ一般化したい．
モチベーション Cauchy 過程：$d=1$ で再帰的・$d \geqq 2$ で非再帰的
証明の戦略 許容的な推定量との Bayes リスクの差 $=0$ or >0

主結果：一般化 L.Brown の等式

KL 損失での予測分布の Bayes リスクの差は，尤度が定めるマルコフ過程の Dirichlet 形式に等しい：

$$\mathbb{E}^{M_\pi}\left[\mathrm{KL}\left(p_\pi \| p_{\pi_U}\right)\right]=\mathcal{E}\left(\sqrt{M_\pi},\sqrt{M_\pi}\right).$$

ここで p_π は許容的予測分布，p_{π_U} は最尤推定量，M_π は周辺尤度

Dirichlet 形式は対応するマルコフ過程により

- マルコフ過程が再帰的のとき，$^{\exists}\pi, \mathcal{E}\left(\sqrt{M_\pi},\sqrt{M_\pi}\right)\to 0$
- マルコフ過程が非再帰的のとき，$^{\forall}\pi, \mathcal{E}\left(\sqrt{M_\pi},\sqrt{M_\pi}\right)>0$

系：Cauchy 分布・安定分布

- Cauchy 分布の位置母数の最尤推定は
  - $d=1$ 許容的
  - $d \geqq 2$ 非許容的
- 指数 $\alpha<1$ の安定分布の場合は $d=1$ でも非許容的となる！

微分作用素を含んだ統計的目的関数の理論解析

主結果 ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ での凸関数 $\rho(\theta,Z)$ の局所漸近正規性（LAN）

主結果：無限次元局所漸近正規性

$F_n(\theta)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \rho(\theta,Z_i)$ は $n\to\infty$ のとき

$$n\left[F_n\left(\theta^*+\frac{1}{\sqrt{n}}t\right)-F_n(\theta^*)\right] \rightsquigarrow \langle t,\mathcal{N}\rangle+\frac{1}{2}\left\langle \nabla_\theta^2 F_0 t,t\right\rangle,$$

ここで $t=\sqrt{n}\left(\hat{\theta}_n-\theta^*\right)$．さらに $\nabla_\theta^2 F_0$ は可逆にできる．必要な条件は劣微分 ∂F_n の各点での弱収束だけ！

目的 微分作用素を含んだ最適化問題．PDE の固有値問題など：

$$\min_{\|\varphi\|=1,\ \frac{\partial\varphi}{\partial n}\big|_{\partial\Omega}=0} \mathbb{E}\left[\rho(\varphi,X)\right]=\mathbb{E}\left[\langle\nabla\varphi(X),\nabla\varphi(X)\rangle\right].$$

今後の展開

- 複雑な定義域をもつ高次元データの解析法のための数理基盤を構築．
- 適切な統計的距離による生成モデルの効率的推定法の開発．
- 深層ニューラルネットワークの不確実性評価と実用的な能動学習アルゴリズム