

令和 6 年 5 月 29 日現在

機関番号：12601

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2021～2023

課題番号：21K21310

研究課題名（和文）多段階の学習に基づくヒューリスティクス法の解析：統計力学的アプローチ

研究課題名（英文）Statistical mechanics of heuristic methods in multi-stage learning

研究代表者

高橋 昂（Takahashi, Takashi）

東京大学・大学院理学系研究科（理学部）・助教

研究者番号：90906661

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的は、擬似的なラベルを学習済のモデルに基づいてデータ点に付与し、それを用いて改めて新たなモデルを学習する操作を繰り返すという自己学習アルゴリズムの挙動を解明することであった。そのために、2クラスの分類の問題において線形モデルを当該手法で学習した際の挙動を、統計力学の平均場理論を用いて解析した。これにより、更新回数に応じて最適なアプローチが異なるということ明らかとし、当該アルゴリズムを用いて効率的に汎化性能を向上させるためのアプローチを整理した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

データ科学の実務的な場面ではラベル付きデータが十分にあるという理想的な設定にないことは一般的で、分析者は様々なヒューリスティクスを用いて問題に対処している。そのなかで多段階の学習に基づくヒューリスティクスはアイデアを実装に繋げやすく、近年盛んに用いられている。本研究はその流れに沿い、そのような多段階の学習に基づくヒューリスティクスの利用方法に関する示唆を与えるものであり、実務に向けた理論的知見を新たに加えたという意義があると思われる。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this study was to understand the behavior of a self-training algorithm that assigns pseudo labels to data points based on a pre-trained model and then retrains a new model using these labels. To achieve this, we analyzed the behavior of a linear model trained with this method for a binary classification problem using the mean-field theory of statistical mechanics. This analysis showed that the optimal approach varies with the number of iterations, and we organized strategies for efficiently improving generalization performance using this algorithm.

研究分野：ソフトコンピューティング

キーワード：統計力学 半教師あり学習 レプリカ法

1. 研究開始当初の背景

統計的学習の実践において、分析者はデータやタスクの特性に応じて様々なヒューリスティクス手法を用いて課題に取り組んでいる。近年では、既存の学習済みモデルと学習データを組み合わせ、新たなモデルを改めて学習させる多段階の学習プロセスが盛んに利用されている。このような学習手法は複雑なモデルの学習においても、アイデアを容易に実装できるという利点がある。一方で、学習結果は、データの性質と既存モデルの性質が組み合わさって定まるといった複雑な構造を持つため、性能向上の機構については理論的な知見が乏しい。そのため、これらの手法の有用性は、実際に学習を行って手探り的に確認せざるを得ない状況にある。

2. 研究の目的

本研究では、多段階学習を含むヒューリスティクス手法を系統的に分析し、それらがいつ・なぜ・どのように性能を改善するのかを明らかにすることを目的とした。しかしヒューリスティクス法は、そもそもデータやタスクの特性に応じて発見的に構成されるため、一般的な立場からの完全な回答はあり得ない。そこで、実際に用いられているいくつかの手法のうち、有用かつ解析の見込みが立つ手法として、疑似ラベルを用いた自己学習(Self-Training, ST)に着目し、その動作機構の解明を試みた。

ST は、少数のラベル付きデータと大量のラベルなしデータを組み合わせて学習を行う半教師あり学習の基本的なアルゴリズムである。基本的なアイデアは、学習済みモデルの予測に基づいてラベルなしデータに疑似ラベルを付与し、その疑似ラベルを真のラベルとみなして再度教師あり学習を行うというものである。この際、疑似ラベルには必ず誤りが含まれており、これがどのように性能改善に寄与するのか、また、どのようなヒューリスティクスを組み合わせることが効率的な改善につながるのかといった点が論点となっていた。

3. 研究の方法

本研究では、2成分混合ガウス分布によって生成されたデータをもとに線形モデルを ST で学習する様子を統計力学的にモデル化して解析した。ST では疑似ラベルを用いた学習を繰り返すため、動力学的な解析を行う必要がある。いっぽうで、多段階の学習の各ステップにおいて毎回コスト関数を最小化することでパラメータを更新するので、更新後のパラメータの表現を陽に与えることはできない。そこで、本研究ではガラス物性の研究で用いられる Franz-Parisi ポテンシャルの解析法を参考に、階層的に多段階にレプリカ法を用いることで、各ステップでの学習結果を特徴づける方法を用いた。このようにレプリカ法を用いることで動力学を記述する理論形式が存在することは以前から知られていたが[Franz and Parisi 2013]、これまでの機械学習分野での適用は1ステップの更新の場合に限定されていた。技術的には、本研究はそれらを拡張し、機械学習の実際的な方法の解析へと適用可能とするという意義も持っている。

また、統計力学的なモデル化においては疑似ラベルの構成法(ソフトラベルかハードラベルかといった点)に関する自由度、および疑似ラベルの信頼度に応じてデータ点を取り除くためのヒューリスティクスを組み合わせる自由度を残すことで、実際的な ST の手法に近い設定での解析が可能となるように注意した。

4. 研究成果

上述の設定における統計力学モデルを解析することで ST の平均場理論を構築し、設定ごとに最適なハイパーパラメータを探索し、各設定における最適なパラメータから動作機構を探った。その結果、以下のような成果を得た。(i) 更新回数が小さい場合には若干のノイズを含んだラベルに対してモデルをフィットさせることでパラメータを大きく更新するという、「ある程度正しいラベルにフィットさせる」という ST の標語的な描像のもとに動作し、信頼度の低いラベルをデータから省く疑似ラベル選択(Pseudo-label selection, PLS)というヒューリスティクスが非常に有用であることが明らかとなった。これは先行研究において、総繰り返し回数が10回程度の場合には PLS の導入が重要であるという実験の報告と整合的である[Rizve et al. 2021]。いっぽう、(ii) 更新回数が大きいときには一回一回の更新におけるパラメータの変動量を小さくし、微少な更新を積み重ねる戦略が有効である。このとき、更新回数が十分長い場合には真つ当な損失関数を用いる限り、ほぼ常に最適な方向の分類面を得ることが可能である。これは、疑似ラベルに対する損失が、パラメータ更新時に蓄積されうるノイズを打ち消す正則化のような役

割を果たすためである。(iv)ただし、真のラベルに偏りが生じる分布の場合、分類面の向きが良くてもバイアス項の最適性は素朴な ST の実装では担保されない。(v)そこで、疑似ラベルをソフトラベルからハードラベルに徐々に変更する疑似ラベルアニーリングと呼ばれるヒューリスティックを導入すると、真のラベルに偏りがある場合でも、全データ点に真のラベルがついている場合と同等の性能が得られる。つまり、ST はラベル付きデータが少ししかなくても、教師あり学習と同等の性能を出すことができる。

これまでも自己学習の反復を長時間行うことで、特定の場合にベイズ最適な分類器が得られるという理論的な成果が報告されていたが [Oymak and Gulcu 2021, Frei et al. 2022]、本研究はその背後にある描像を明確にしたものとも言える。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Nakamura Yuta, Takahashi Takashi, Kabashima Yoshiyuki	4. 巻 55
2. 論文標題 Statistical mechanics analysis of generalized multi-dimensional knapsack problems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 375003 ~ 375003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/ac8381	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Na Siqi, Huang Tianyao, Liu Yimin, Takahashi Takashi, Kabashima Yoshiyuki, Wang Xiqin	4. 巻 71
2. 論文標題 Compressed Sensing Radar Detectors Under the Row-Orthogonal Design Model: A Statistical Mechanics Perspective	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Signal Processing	6. 最初と最後の頁 2668 ~ 2682
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/tsp.2023.3297743	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Koki Okajima, Xiangming Meng, Takashi Takahashi, Yoshiyuki Kabashim	4. 巻 206
2. 論文標題 Average case analysis of Lasso under ultra sparse conditions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of The 26th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics	6. 最初と最後の頁 11317-11330
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Takahashi Takashi	4. 巻 2023
2. 論文標題 Role of Bootstrap Averaging in Generalized Approximate Message Passing	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 2023 IEEE International Symposium on Information Theory (ISIT)	6. 最初と最後の頁 767-772
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ISIT54713.2023.10206490	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Takashi Takahashi
2. 発表標題 Sharp Asymptotics of Self-training with Linear Classifier
3. 学会等名 Youth in High-Dimensions: Recent Progress in Machine Learning, High-Dimensional Statistics and Inference (国際学会)
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 高橋 昂
2. 発表標題 反復型自己学習アルゴリズムのレプリカ解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会 2022年9月14日
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 高橋 昂
2. 発表標題 ブートストラップ平均化された不偏推定量の統計力学的解析
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会 2023年3月25日
4. 発表年 2022年～2023年

1. 発表者名 高橋 昂
2. 発表標題 半教師あり学習の平衡統計力学的解析
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋昂
2. 発表標題 反復型自己学習アルゴリズムのレプリカ解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高橋昂
2. 発表標題 疑似ラベルを用いた学習のレプリカ解析
3. 学会等名 第57回統計的機械学習セミナー（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高橋昂
2. 発表標題 疑似ラベルを用いた自己学習の平均場解析
3. 学会等名 滋賀大学データサイエンスセミナー（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 高橋昂
2. 発表標題 疑似ラベルの構成法について
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Takashi Takahashi
2. 発表標題 Exploring bagging with structured data: Insights from precise asymptotics
3. 学会等名 Workshop on Learning and Inference from Structured Data: Universality, Correlations and Beyond (smr 3850) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takashi Takahashi
2. 発表標題 A Statistical Mechanics Analysis of Iterative Self-Training
3. 学会等名 STATPHYS28 (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関