

令和 4 年 5 月 24 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2021

課題番号：19K20342

研究課題名(和文) 識別マージンの強い分布的統制による頑健化と効率化の研究

研究課題名(英文) Robust and efficient learning algorithms through control of margin distributions

研究代表者

HOLLAND Matthew・James (Holland, Matthew J.)

大阪大学・産業科学研究所・助教

研究者番号：00810227

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：世間一般では「AI」と称される機械学習技術は、多種多様なデータと人間の英知による課題設計に基づく数値的な「フィードバック」(報酬、損失など)に駆動される。本研究では、これまでの機械学習ではパフォーマンスが頭打ちしている困難な学習課題の打開策として、学習アルゴリズムを動かすフィードバックを根本から見直し、広義のフィードバックの確率分布そのものをフィードバック生成の基軸として手法設計に挑戦してきた。分類課題に特化したマージン分布から出発し、最終的には多様な損失分布の位置やばらつきを捉えた指標の下での安定的な学習則にたどり着き、学習アルゴリズム設計の新たな一歩に貢献したと認識している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

機械学習技術が採用活動や最先端医療の現場に積極的に導入されている昨今の社会情勢を踏まえて、工学的な性能の維持と明確な保証はもちろん、その技術の利用に際しての意思決定の合理化、透明化、効率化などが喫緊の課題である。本研究の成果の多くは強い性能保証を付与した汎用的な学習アルゴリズムの開発や解析に相当するが、これらの結果以上に重要なのは、本研究の切り口を通して「AIの性能をどう捉えるべきかは議論・体系化すべきだ」と示した点である。この土台を踏まえて、信頼性の高い機械学習技術の確立に向けて、汎化能力の数値化方法、ユーザーの要望、学習則設計の三者をめぐるAIワークフローの改革を引き続き追求していく。

研究成果の概要(英文)：Machine learning algorithms are driven by noisy, data-driven feedback, typically in the form of some kind of stochastic reward or loss. In this project, our basic motivation is the existence of numerous learning tasks in which traditional methods fail to learn in a stable or efficient manner, and the desire to find a principled and theoretically grounded solution. Central to our approach was the notion placing our focus not on the average loss (in particular, classification margins), but rather the entire probability distribution of losses (or their gradients, etc.). By studying many novel ways to summarize distribution information, and pairing these feedback mechanisms with stabilizing sub-routines to ensure robust, efficient learning, we believe our results, taken together, represent a meaningful contribution to the foundations of learning algorithm design under diverse notions of "risk."

研究分野：機械学習

キーワード：統計的学習理論 機械学習

1. 研究開始当初の背景

機械学習技術が広く応用される典型的な学習課題は分類である。分類問題の難易度はデータの数と分布の性質、事前知識の有無、ラベルノイズの度合い、ラベル分布の不均衡、ラベルの取り得る数など、様々な要因によって大きく変わらう。従来の学習アルゴリズムを使って一定の成績を出すためには、これらの要因を加味した微調整が不可避であり、多くの人的資源と計算資源が不毛な試行錯誤に費やされている現実がある。次世代を支える基盤情報技術としての機械学習を昇華させるには、従来法にとって不都合のデータに効率よく、できる限りデータ駆動的に対応する方法論が急務である。

2. 研究の目的

本研究では、先述の背景を踏まえて、多くの分類手法で使われる確率的フィードバックともいえる識別マージンに主眼を置き、単なる「マージン期待値最大化」を超越し、識別マージンそのものの確率分布を最適化アルゴリズムの制御対象として、ロバスト性と適応性と計算効率を兼ね備えた革新的な学習アルゴリズムの設計と理論解析を通して、新たな原理に根付いた実用的な機械学習手法の方法論を切り開くことを目的としている。

3. 研究の方法

逐次的に更新されていく学習アルゴリズムが使う確率的フィードバックの分布をいかに統制すべきかが本研究の中心的な問いである。この研究期間を通して、多角的なアプローチを実施しており、分布統制を見据えたアルゴリズム設計法の要点は以下の通りである。

- 識別マージンの「ばらつき」を柔軟に捉えられる目的関数の導入。
- 事前知識がある場合、PAC-Bayes の枠組みを使って学習アルゴリズムの挙動を制約するが、データ分布の性質によらずロバストに行うための推定量の提案。
- 識別マージンに限らず分類問題に登場する広範な「損失」を捉える枠組みとして、損失分布の「位置」を柔軟に定義できる指標（CVaR、spectral risk など）を導入し、データ分布によらずロバストに学習できるアルゴリズムの開発。

これらの工夫を中心に、確率勾配法などの定番的最適化法と組み合わせた場合の汎化能力の理論保証（高い確率で成り立つえれーバウンドの導出）、基本原理を明確化させるための数値シミュレーション、大規模実データへの応用という3つのアプローチで種々の提案手法を評価し、それぞれの状況における従来法と比較し、提案法の特徴と付加価値を明確に示すアプローチをとっている。

4. 研究成果

先述の提案法によって得られた主な知見を中心に研究成果を簡潔に紹介する。

(1) 識別マージンの「ばらつき」を捉える効果

提案法が識別方法としての calibration を有していること、また提案法の目的関数の設定を変

えることによって従来法との乖離がどう変わるかを明らかにした上で、単純で実装しやすい提案法でも、従来法とは明確に異なるマージン分布は学習過程を通して導き出せるという事実を実験的に確認した(図1)。この成果は国際会議 AISTATS 2019 で採択され、この方法は提案者が後に JST さきがけ「信頼される AI の基盤技術」に採択された研究提案のキーマインドの礎に相当するとも言える。

(2) ロバストな PAC-Bayes 法の先駆け

従来の PAC-Bayes の理論解析では、観測データやそれに基づく損失の確率分布がある程度「おとなしい」ものでなければ、強力な性能保証を付与することができない。

それに対して、提案者が他の学習アルゴリズムのロバスト化の技法として開発した方法を従来の PAC-Bayes 化に取り入れることで、有限モデルならば、データに対する仮定を置くことなく、高い確率での強い性能保証が出せることを示し、これが国際会議 NeurIPS 2019 に採択された。基本的な技法の精密な性能検証も付与し(図2)、新たなアルゴリズム開発方法について展望した。この研究成果に触発され、PAC-Bayes の世界的権威ともいえる Benjamin Guedj を中心とする研究グループがロバストな PAC-Bayes のさらなる応用や原理的な限界をより精緻に示すなど、本研究が活発な研究活動を引き起こしたと言える。

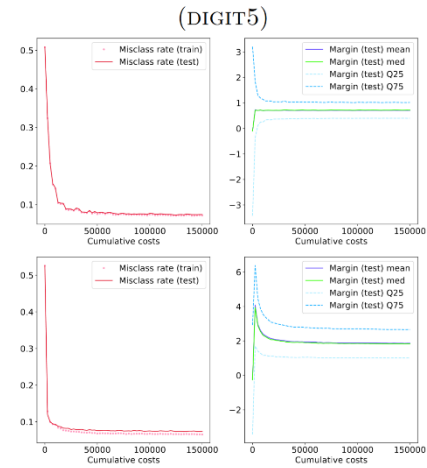


図1 提案法(上段)と従来法(下段)のマージン分布等の違い。

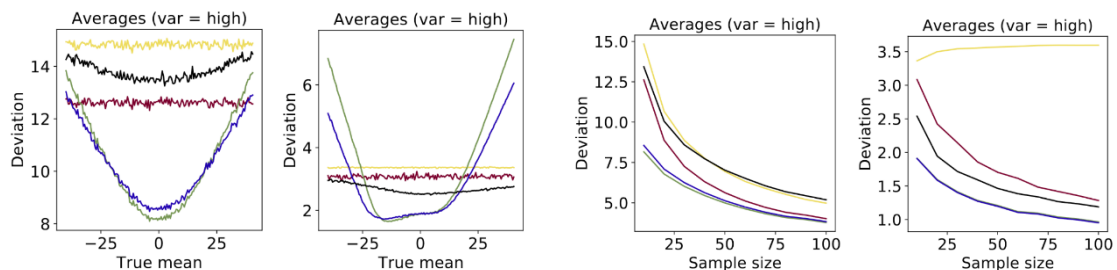


図2 ロバストな PAC-Bayes を支える推定量の変調と推定制度の変容。

(3) ワーストケース重視でも安定的に学習できる

より多くの分類手法をカバーできる新手法を目指すべく、識別マージンを抽象化して分類問題における「損失」に対応できる新たな枠組みを追求した。その結果として、損失分布の統制をいかに行うべきかという重要で本質的な問いに直面し、その最初の切り口として平均値ではなく損失分布の上の裾(性能が悪化する方向)を重要視するリスク指標を取り入れて、ほぼ任意の滑らかな損失関数でも通用する汎用的なアプローチを開発した。指標とは具体的に最初は CVaR、その後は一般化された spectral risk に主眼を置き、外れ値に特に敏感なこれらを前提とした確率勾配法を改変し、効率よく安定的に学習することが保証される手法を構築し、入念な実験を通して従来法との優劣を確認し、識別マージンをはじめとする多種多様な分類法の分布統制をロバストに行う有望な提案として、AISTATS 2021 と AISTATS 2022 それぞれに論文が採択され、その手法を既存方と円滑に融合できるようにオープンソース化してソフトウェアを公開した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 7件）

1. 発表者名 Matthew J. Holland, El Mehdi Haress
2. 発表標題 Spectral risk-based learning using unbounded losses
3. 学会等名 AISTATS 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Matthew J. Holland
2. 発表標題 Anytime Guarantees Under Heavy-Tailed Data
3. 学会等名 AAAI 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Matthew J. Holland
2. 発表標題 Scaling-Up Robust Gradient Descent Techniques
3. 学会等名 AAAI 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Matthew J. Holland
2. 発表標題 Robustness and scalability under heavy tails, without strong convexity
3. 学会等名 AISTATS 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Matthew J. Holland
2. 発表標題 Learning with risk-averse feedback under potentially heavy tails
3. 学会等名 AISTATS 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Matthew J. Holland
2. 発表標題 Classification using margin pursuit
3. 学会等名 AISTATS 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Matthew J. Holland
2. 発表標題 PAC-Bayes under potentially heavy tails
3. 学会等名 NeurIPS 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

AAAI 2022採択論文の掲載先 https://arxiv.org/abs/2105.11135 関連ソフトウェア: https://github.com/feedbackward/anytime AISTATS 2022採択論文の掲載先 https://arxiv.org/abs/2105.04816 関連ソフトウェア: https://github.com/feedbackward/spectral AAAI 2021採択論文の掲載先 https://ojs.aaai.org/index.php/AAAI/article/view/16940 AISTATS 2021採択論文の掲載先 http://proceedings.mlr.press/v130/ AISTATS 2021論文(その1)のコードとデモンストレーション https://github.com/feedbackward/sgd-roboost AISTATS 2021論文(その2)のコードとデモンストレーション https://github.com/feedbackward/robrisk 本研究の数値実験のコードと解説を含む公開リポジトリ https://github.com/feedbackward/catcube
--

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
---------	---------