

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 23 日現在

機関番号：82401

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K19989

研究課題名(和文) ランダム行列の数理論によるディープラーニングの有効性の解明

研究課題名(英文) Research on performance of deep learning performance based on random matrix theory

研究代表者

瀧 雅人(Taki, Masato)

国立研究開発法人理化学研究所・数理創造プログラム・上級研究員

研究者番号：70548221

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,800,000円

研究成果の概要(和文)：深層学習の高い性能(汎化性能)の起源は大きな謎であるが、それに数理的・応用的なアプローチで取り組むことが目標であった。本助成事業で整備できた計算機環境によって、深層学習に関する様々な計算機実験を行うことができた。その結果、深層学習の性能向上に寄与する実践的なノウハウを蓄積することができた。そのノウハウを活用し、実験科学のデータなどに対して、機械学習の長所を生かした応用研究を行うことができた。その際には計算機実験による実務的な側面も重要であったが、数理的解析による機械学習モデルの改良・調整も大きな役割を果たした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

深層学習技術は、数理的側面と計算機科学的側面、そして応用を通じた実務的側面を持つが、その間の橋渡しを少しでもできるよう取り組んだ。科学における深層学習の応用研究はまだ始まって日が浅いが、共同研究者などをへ深層学習技術を提供することで、深層学習を使った科学研究が本邦でより進むよう本研究課題を進めた。また応用研究を通じて科学に適用する際の難しい点なども浮き彫りになり、それは今後の検討課題である。

研究成果の概要(英文)：The origin of the high performance of deep learning (generalization performance) is a big mystery. The goal of this project was to tackle it with a mathematical and applied approach. Various computer experiments related to deep learning were able to be carried out by the computer environment that was prepared by this grant project. As a result, we have accumulated practical know-how that contributes to the performance improvement of deep learning. Utilizing that know-how, we were able to conduct applied research on experimental science data, etc., while taking advantage of the strengths of machine learning. In that case, the practical side by the computer experiment was important, but the improvement and adjustment of the machine learning model by the mathematical analysis also played a big role.

研究分野：深層学習

キーワード：機械学習 数理物理 数理工学

1. 研究開始当初の背景

多層ニューラルネットワークによる機械学習(ディープラーニング)の急激な進歩が進む一方、その高い性能を可能にしている理論的なメカニズムは未解明であった。当初、理論物理学において巨大多体系の解析のために編み出されたランダム行列理論を用いることで、ディープラーニングの高いパフォーマンスの謎を理論的に解明できることが期待されていた。特に、ディープラーニングの誤差関数の形状(ランドスケープ)が、ランダム行列理論の厳密解で記述される、という示唆が存在した。またそのような理論解析によって、新たなディープラーニングアーキテクチャ開発のための指針が得られると期待された。

2. 研究の目的

ランダム行列理論などの数的手法によって、ディープラーニングの高いパフォーマンスの謎を理論的に解明する。その一例としてランダム行列理論を用いたモデル化・スペクトル解析を行う。そのような解析を通じて、ディープラーニングの学習が成功裏に汎化を導く仕組みの一端を明らかにする。また理論的な解析により、ディープラーニングの本質をランダム行列理論として精密に抽出し、アーキテクチャ開発のための新しいアイデアを得る。特にディープラーニングの学習では、ネットワークのデザイン、学習の際の様々な設定に応じて得られる汎化性能が変わる。より良い学習結果を導くための実践的アイデアを得るために理論的解析をヒントにする。

3. 研究の方法

システムのサイズが増大するにつれてスペクトルが縮退してゆく現象の本質をつかむため、理論的なトイモデルを用いる。そのモデルを数理モデルとして解析し、汎化が誘導される仕組みを理論的に解明する。その際に近似を用いることになるので、近似の正当性・結果の妥当性を確認する必要があり、そのために計算機環境を整備し数値実験を行う。またこれらの結果をより良いディープラーニングのデザインにつなげる。

4. 研究成果

本研究課題は数理的な深層学習の解析と、それを深層学習のアルゴリズム改良に活かすというテーマであったが、主に応用面できまじな結果が得られた。本研究費申請の主要な目的の一つは、深層学習を実装するための計算機環境の構築であった。実際、全くの専用計算機環境の存在しない状況から、GPUを搭載した専用ワークステーション・機械学習の計算機環境を構築することができた。それにより共同研究や数値実験においてとても有効な環境が利用できるようになった。その環境を利用することで、深層学習・機械学習の教育活動において、様々な計算機実験の結果を活用することができた。また、共同研究者との研究において様々なデータを深層学習で解析することができた。その一例として、機械学習の国際会議に付属した医療データに関する機械学習コンペティション(CIAR 2018 Grand Challenge on Breast Cancer Histology Images)で一定の成果を取められた。また実験物理学のデータに対する機械学習・深層学習の応用研究も行うことができた。この研究プロジェクトは現在も複数進行中であり、今後遅れて追加で論文化される予定である。

これら応用研究は、深層学習の理論的なデザインの検討も使うことで性能向上に成功した。一方、研究プロジェクトのもう一つの側面であるランダム行列による汎化の理論的理解に関しては、取り組みによって応用面での副産物はあったものの、難しい問題であり直接の結果にはまだ結びついていない。arXiv論文(arXiv:1709.02956)では、Residual Networkの勾配消失問題の統計的振る舞いを数理的に解析し、より適切なパラメータ初期化の提案を行ったが、ネットワー

クモデルの数理的挙動を扱うための手法が十分には存在しないため、大幅な近似・トイモデルが必要であるという制約があった。本研究課題終了後も、Gauss過程など最近の様々な発展も取り入れつつ、この方向性で引き続き研究する予定である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 瀧雅人
2. 発表標題 深層学習の応用二例：腫瘍組織画像と脳神経活動の解析について
3. 学会等名 医学と数学の接するところ（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧雅人
2. 発表標題 AIから創薬へ
3. 学会等名 第30回 日本心血管画像動態学会（招待講演）
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 瀧雅人	4. 発行年 2017年
2. 出版社 講談社サイエンティフィック	5. 総ページ数 352
3. 書名 これならわかる深層学習入門	

〔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
---------------------------	-----------------------	----