

令和 3 年 6 月 15 日現在

機関番号：62603

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2020

課題番号：18K19793

研究課題名（和文）深層学習の理論的究明による人工知能技術の革新

研究課題名（英文）Advance of artificial intelligence by theoretical investigation of deep learning

研究代表者

福水 健次（Fukumizu, Kenji）

統計数理研究所・数理・推論研究系・教授

研究者番号：60311362

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、数理的アプローチによって深層学習の学習ダイナミクスなどの理論解析を行った。その結果以下の結果を得た。（1）不連続な関数を推定する場合、深層ニューラルネットは、従来法である固定基底を用いる方法に比べて、推定精度に優位性がある（2）深層ニューラルネットが冗長な中間素子を持つ場合の誤差曲面の鞍点の構造が明らかとなった（3）深層生成ネットワークの学習ダイナミクスの安定性条件が明らかとなった。また、因果方向をメタ学習によって少数のデータから推定する方法を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

深層学習は応用面からの成功により現在の人工知能の基盤技術となっているが、モデルが強い非線形性を持つことから理論的な解析を行うことは容易ではなくブラックボックスとして使われる場合が多い。本研究は数理的手法で深層学習の性質を理論的に明らかにするものであり、ブラックボックスを超えた深層学習の理論、特に学習によって得られたネットワークの信頼性や、学習アルゴリズムの安定性に関して重要な知見が得られた。

研究成果の概要（英文）：This study theoretically analyzes the learning dynamics of deep neural networks with mathematical approaches. We have obtained the following results; (1) In estimating non-smooth functions, the deep neural networks have advantages over conventional models with fixed bases, (2) The saddle point structure has been revealed in the case that a network has surplus hidden units (3) Sufficient conditions have been obtained for the stability of deep generative models. Also, we have developed a meta-learning method for estimating causal directions with a small number of data.

研究分野：機械学習，数理統計

キーワード：人工知能 深層学習 機械学習

## 1. 研究開始当初の背景

人工知能(AI)技術が社会を変革する期待感が高まっている。その技術の中心は、深層学習と呼ばれる、多くの層を持つニューラルネットモデルによる関数関係の推定技術である。その成功の理由には、大量データが入手可能となり、それを扱える大自由度の深層モデルが導入されたこと、また計算機とソフトウェア技術の発達により実用的な時間で学習が可能となったことが挙げられる。

しかしながら深層学習では、大域最適解への収束保証の無い繰り返し型最適化アルゴリズムを用いるため、局所解を回避するための様々な工夫を要する。また実用的時間で学習を達成するため、多数のGPUによる並列計算と最適化の高速化のための工夫が行われる。その結果、学習法に関する高度なノウハウと高額な大規模計算資源を持つ一部の者のみが先端技術の恩恵を受けている。この問題は、AI技術を広く社会に浸透させる際の大きな障壁になる。

## 2. 研究の目的

背景で述べた問題を解決するため、本研究は数理的アプローチによってAI技術の革新をはかる。深層学習の繰り返し更新則の挙動(学習ダイナミクス)を解析することにより、その高い能力の要因を理論的に究明し、その知見に基づいて、はるかに低コストで安定した学習が可能な大自由度学習モデルを開発することを目的とする。これにより、多くの人々が低コストでAI技術を利用できる状況を実現し、社会の変革を加速しようとする。

## 3. 研究の方法

上記の目的を達成するため、以下の3課題を研究する。研究体制は図1の通りである。

【課題1】深層構造の学習ダイナミクス：深層の構造が学習ダイナミクスに及ぼす影響を解析することにより、深層学習の性能の理論的理解を可能にする。

【課題2】低コスト学習モデル：課題1の知見に基づき、低コストで安定な学習が可能な新しい学習モデルを開発する。そのために、カーネル設計により深層学習と同等の柔軟性を持つことが期待でき、かつ安定した最適化と理論解析が可能なカーネル法(関数解析的モデル)を基礎にすることにより、ノウハウに依らない低コスト学習を実現する。具体的には、次の2つのアプローチをとる。a) カーネル法ベースの方法：超大規模データに有効に働く学習法を、確率的最適化、擬似モンテカルロによる基底選択の観点などから研究する。b) 多層多解像度の関数空間：解像度の異なるカーネルを多層化することにより柔軟な学習モデルを構築し、超大自由度かつ低コストの学習法を開発する。

【課題3】効率的実装：上記の学習モデルを効率的に実装するソフトウェア技術を研究し、画像認識・生成タスクなどへの応用によって検証を行う。

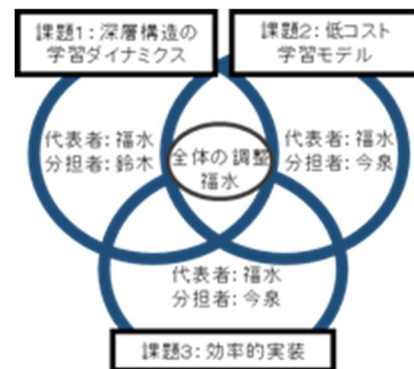


図1：研究体制

## 4. 研究成果

研究の結果、次のような4つの主成果を得た。

### [成果1] 不連続な関数に対する推定精度

深層ニューラルネットは様々な応用タスクにおいて従来法を凌駕する性能を見せているが、この良好な性能の理由を理論的に解明することは重要な課題である。本研究では、微分不能な点や不連続な点を含む関数(図2)を推定するような場合に注目して、Fourier展開、スプラインなどの固定基底を持つ関数推定の方法と深層ニューラルネットとの比較を理論的に行った。その結果、ReLU活性化関数を持つ深層ニューラルネットが、訓練データ数に対する汎化誤差の減少レートに関して、固定基底の方法よりも優れていることが明らかとなった。不連続な関数の推定問題は、画像の深度推定など応用上も重要なクラスを含んでおり、応用上も示唆のある結果である。

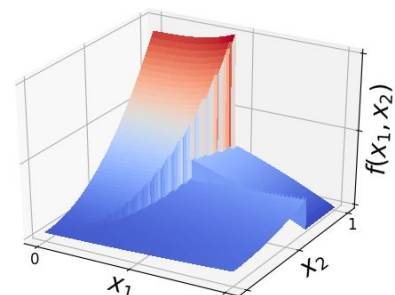


図2：滑らかでない関数

この成果は機械学習分野のトップ国際会議のひとつである Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS 2019)に採択された。

### [成果2] 深層学習モデルの局所極小解の構造

深層構造を持つモデルの損失関数の大局的構造を理解する目的で、ReLU や滑らかなシグモイド関数を活性化関数として持つ深層ニューラルネットモデルに対して、中間層が必要以上の素子数を有する場合を考え(図3)、その冗長なパラメトリゼーションが損失関数の停留点構造にどのような影響を与えるかを理論的に解析し、パラメータ空間の低次元部分集合が同一の関数を与える平坦な鞍点を構成することを示した。また、その解析と PAC-Bayes 的議論を組み合わせることによって、冗長なパラメトリゼーションによる汎化誤差の劣化は、正則なパラメトリゼーションを持つ場合と比較して小さいことを示した。また、冗長なネットワークで学習された最適解の汎化誤差が、活性化関数によって異なる振る舞いを持つことが示唆された。この成果をまとめた論文は、機械学習分野のトップ国際会議 Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2019)に採択された。

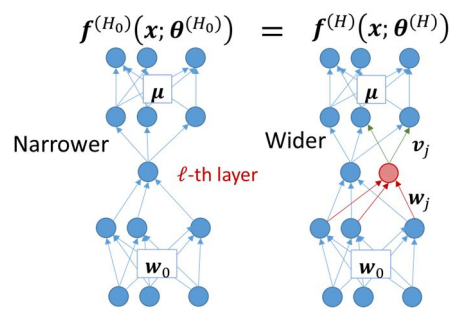


図3：冗長なネットワークへの埋め込み

[成果3] 敵対的生成ネットワークの学習安定化

深層生成モデルとして最も有名である敵対的生成ネットワーク(GAN, 図4)の生成器の学習ダイナミクスに関して研究を行った。GANの学習では安定化が重要な課題となっており、さまざまな発見的方法がいくつも提案されている。これらの方法に理論的な理解を与えるため、確率分布上の最適化の観点から、Lipschitz-smoothnessによる収束の十分条件を考察することによって解析を行った。その結果として、GANの識別機が完全に学習できるという条件の下、生成器の勾配法による学習が収束するための十分要件を明らかにした。さらに既存のよく用いられる学習安定化手法が、この十分条件を部分的に満たす効果を与えていることを示した。また、inf-convolutionの概念を用いることによって、上記の十分条件をすべて満足するための、識別機の学習に対する正則化項の導入法を提案し、簡単な計算機実験によって理論解析の妥当性を検証した。この研究成果は深層学習をはじめとする人工知能分野のトップ国際会議である International Conference on Learning Representation (ICLR2020)に採択された。

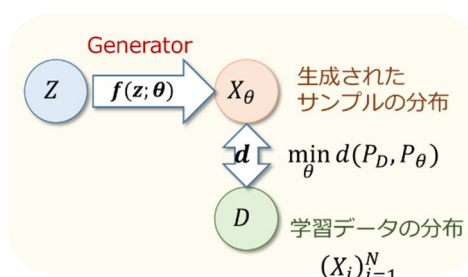


図4：GANの構成

[成果4] 深層モデルによる因果方向のメタ学習

深層学習を用いた因果方向の推定問題に関して研究を行った。特に、少数データからの因果方向推定を可能とするために、多数の因果方向に関する例(データ)から帰納的に因果方向を推定するメタ学習を適用する方法 Meta-CGNN(図5)を開発した。ベンチマークデータセットにおいてメタ学習の効果が確認でき、従来の最も精度のよい方法と同程度の性能が出ることを示した。この成果は、人工知能分野のトップ国際会議 AAAI2020 に採択された。

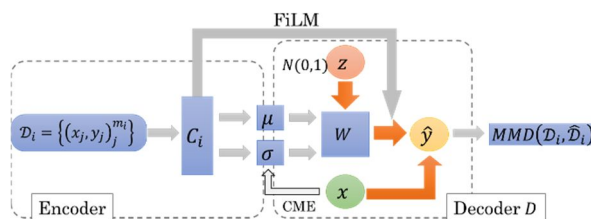


図5：Meta-CGNNの構成

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 K. Fukumizu, S. Yamaguchi, Y. Mototake, and M. Tanaka	4. 巻 32
2. 論文標題 Semi-flat minima and saddle points by embedding neural networks to overparameterization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Advances in Neural Processing Systems	6. 最初と最後の頁 13868-13876
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 C. Chu, K. Minami, and K. Fukumizu	4. 巻 1
2. 論文標題 Smoothness and Stability in GANs	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Conference on Representation Learning	6. 最初と最後の頁 1-31
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 該当する

1. 著者名 Masaaki Imaizumi, Takanori Maehara, Yuichi Yoshida	4. 巻 84
2. 論文標題 Statistically Efficient Estimation for Non-Smooth Probability Densities	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of Machine Learning Research Workshop & Conference Proceedings (AISTATS 2018)	6. 最初と最後の頁 978-987
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 Masaaki Imaizumi and Kengo Kato	4. 巻 *
2. 論文標題 A simple method to construct confidence bands in functional linear regression	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Statistica Sinica	6. 最初と最後の頁 *_*
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 今泉允聡、福水 健次	4. 巻 ?
2. 論文標題 Deep Neural Networks Learn Non-Smooth Functions Effectively	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 2018年度統計関連学会連合大会講演予稿集	6. 最初と最後の頁 *_*
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 無
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 Atsushi Nitanda and Taiji Suzuki	4. 巻 80:
2. 論文標題 Functional gradient boosting based on residual network perception	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning: PMLR	6. 最初と最後の頁 3819--3828
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 Atsushi Nitanda and Taiji Suzuki	4. 巻 84
2. 論文標題 Gradient Layer: Enhancing the Convergence of Adversarial Training for Generative Models	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AISTATS2018, Proceedings of Machine Learning Research	6. 最初と最後の頁 454--463
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 Taiji Suzuki	4. 巻 84
2. 論文標題 Fast generalization error bound of deep learning from a kernel perspective	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AISTATS2018, Proceedings of Machine Learning Research	6. 最初と最後の頁 1397--1406
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 Jean-Francois Ton, Dino Sejdinovic, Kenji Fukumizu	4. 巻 11
2. 論文標題 Meta Learning for Causal Direction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence 35	6. 最初と最後の頁 9897-9905
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 該当する

[学会発表] 計6件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 Kenji Fukumizu
2. 発表標題 Smoothness and Stability in Learning GANs
3. 学会等名 Workshop on Functional Inference and Machine Intelligence (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masaaki Imaizumi and Kenji Fukumizu
2. 発表標題 Deep Neural Networks Learn Non-Smooth Functions Effectively
3. 学会等名 ICML 2018 Workshop on Theory of Deep Learning (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 今泉 允聡、福水 健次
2. 発表標題 汎化誤差評価によるGANの理論解析
3. 学会等名 第21回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2018) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Taiji Suzuki:
2. 発表標題 Generalization error of deep learning with connection to sparse estimation in function space
3. 学会等名 Workshop on Functional Inference and Machine Intelligence (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Taiji Suzuki
2. 発表標題 Compressing deep neural network and its generalization error analysis via kernel theory
3. 学会等名 Reinforcement Learning & Biological Intelligence, learning from biology, learning for biology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Taiji Suzuki
2. 発表標題 Adaptivity of Deep ReLU Network for Learning in Besov Spaces.
3. 学会等名 Forum "Math-for-Industry" 2018 - Big Data Analysis, AI, Fintech, Math in Finances and Economics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Kenji Fukumizu's home page <a href="http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/">http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/</a>
---

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
研究分担者	鈴木 大慈  (Suzuki Taiji)  (60551372)	東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授    (12601)	
研究分担者	今泉 允聡  (Imaizumi Masaaki)  (90814088)	東京大学・大学院総合文化研究科・准教授    (12601)	

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