

令和 5 年 6 月 17 日現在

機関番号：32503

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19H04173

研究課題名（和文）高次元空間上の検索として見た機械学習諸問題：解釈と解法

研究課題名（英文）Machine learning problems as retrieval in high dimensional space

研究代表者

新保 仁（SHIMBO, Masashi）

千葉工業大学・人工知能・ソフトウェア技術研究センター・主席研究員

研究者番号：90311589

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究における主要な成果は以下の通りである。(1) 知識グラフ埋め込みの改良。特に、「経路問い合わせ」と呼ばれる問い合わせに従来モデルが不适当であることを指摘し、これを解消するモデルを提案した。また、推論時のメモリ使用量削減のため、知識グラフ埋め込みの二値量子化法を提案した。(2) ニューラルネットワークを用いた画像の事前表現学習で最近提案された非対照学習による手法が、埋め込み次元が高い場合に非効率なことを指摘し、下流タスクの精度を保ったまま、この欠点を取り除くスケーラブルな非対称学習法を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

多くのニューラルネットワークの応用分野において、外部知識を、知識グラフとして表現して活用する手法が多く提案されており、我々の成果はこういったアプローチの補助となる。表現学習に関する提案法は、スケーラブルな特徴量非相関化法であるが、これは画像のみならず多様なデータの表現学習にもほぼそのまま適用可能である。また、提案法は特徴量の非相関化が必要な表現学習以外のタスクにも広く用いることができる。

研究成果の概要（英文）：The main results in this project are as follows:

(1) Improvement of knowledge graph embedding. Specifically, we pointed out that the existing models for knowledge graph embedding are unsuitable for queries called "path queries," and proposed a model that overcome this shortcoming. Also, to reduce memory usage during inference, we proposed a binary quantization method for knowledge graph embedding.

(2) We pointed out that the recent non-contrastive learning models for image representation are inefficient for high-dimensional embeddings, and proposed a scalable alternative that removes this drawback while maintaining downstream accuracy.

研究分野：知能情報学

キーワード：近傍検索 知識グラフ 表現学習 事前学習 非相関化

1 研究開始当初の背景

ニューラルネットワークの応用が進み、それと親和性の高いベクトル空間モデル (さまざまなオブジェクトをベクトル空間上の点として表現し、ベクトル演算によってオブジェクト間の近さ・類似度を捉えることを目的とする) の研究が盛んになっている。このうち、もっとも基本的な演算は、高次元ベクトル空間における距離や内積の計量である。さらに、それら演算に基づく近傍検索 (nearest neighbor search) は、多くの処理のために不可欠な技術である。

2 研究の目的

本研究では、各種機械学習のタスクを、高次元空間における検索の問題として再解釈し、タスク性能を向上させる手法を開発する。さらに、ニューラルネットワークの出力層に注目する。ネットワークの訓練に用いられる種々の損失関数の利点および欠点を、研究代表者・分担者のこれまでの高次元空間上の尺度に関する研究成果に基づいて分析し、性能及び効率を改善する。

3 研究の方法

種々のデータを対象とした実応用タスクへの適用・性能向上を目指し、一般的な知見の獲得および汎用技術の開発を目指す。

4 研究成果

本研究によって得られた主要な成果を以下に要約する。

(1) 知識グラフのベクトル空間への埋込みに関する研究

知識グラフは、事物間の関係をグラフの形で表現した知識ベースの一種である。最近のアプローチでは、事物・関係をベクトル空間への埋め込み、ベクトル演算によって知識グラフ上の推論を実現する。こ

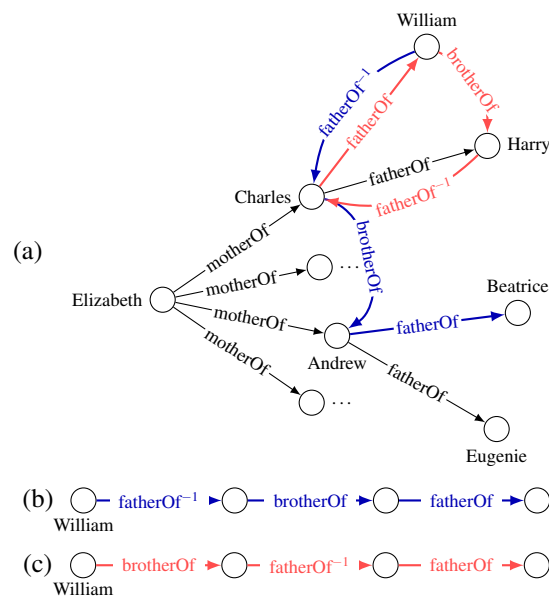


図 1: (a) 知識グラフの例 (b,c) William を視点とする二つの異なる経路問い合わせ。主流の知識グラフ埋め込み法のいくつかはこれらを区別できず同じ結果を返す。

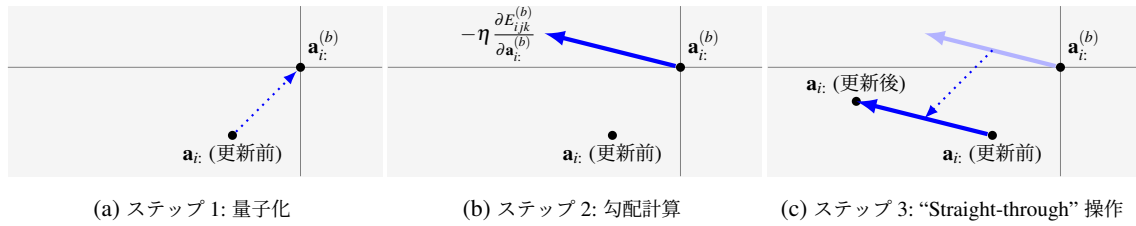


図 2: Straight-through 操作を用いた \mathbf{a}_i の更新. 量子化された座標 $\mathbf{a}_i^{(b)}$ での勾配を用いて更新する.

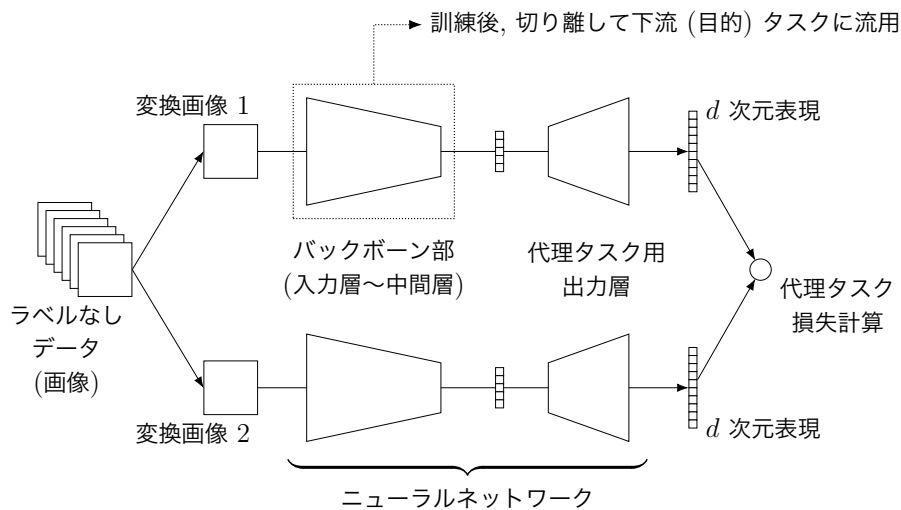


図 3: 非対称学習による事前表現学習

これらの手法は、ベクトル空間上に、エンティティ (事物) に加え、それらの間の二項関係までも埋め込み、ベクトル演算を用いて、未知の関係の存在を予測する。

- (i) 従来の知識グラフ研究では、もっぱら、グラフ上の個々の辺 (1 個の関係を表す) が存在するかどうか (すなわち、その関係が辺の両端の事物の間に成り立つかどうか) の予測 (「知識グラフ補完」と呼ばれる) を対象にしていた。われわれは、既存法の多くにおいて、複数の関係が連なった問い合わせ (グラフ上では「辺の連鎖」すなわち「経路」に対応するため「経路問い合わせ」と呼ばれる) に関して不適切なモデル化がなされていることを指摘し、これを解消するモデルを提案した。図 1
- (ii) 知識グラフ埋め込みの二値量子化に関する研究を行った。提案法によって推論時のメモリ使用量が削減できるため、モバイルデバイスなどでの知識グラフを活用したアプリケーションへの可能性につながる。量子化を用いたパラメータベクトル更新の模式図を図 2 に示す。
- (iii) テスト時のクエリが既知の場合 (transductive な設定)、その情報の活用可能性について調査した。

(2) 負例を用いない非対照表現学習の高速化

従来、画像の事前表現学習では、対照学習による手法が主流であったが、損失計算にサンプル数の 2 乗オーダーの計算時間を要する。2021–2022 年にかけて、対照学習を用いず、かわりに埋め込み表現を構成する特徴量を、正則化関数を用いて非相関化する手法 (Barlow Twins, VICReg) が発表され注目を集めた。模式図を図 3 に示す。これらの新手法における損失計算時間は、サンプル数の線形オーダーであり大きな利点であるが、一方で、埋め込み次元数 d に対して 2 乗オーダーの依存性が生じている (対照学習法の d への依存は線形にすぎない)。この依存性は、大きさ $d \times d$ の相関行列に基づいて正則化項が定義されて

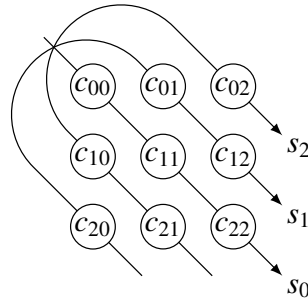


図 4: 提案した正則化項の計算原理: 3×3 相関行列 $\mathbf{C} = [c_{ij}]_{i,j=0}^2$ を使った例. 3×3 行列要素を 3 ずつ和を取って 3 次元ベクトル $\mathbf{s} = [s_0, s_1, s_2]$ として「要約」し, その要素を 0 に近づける. ベクトル \mathbf{s} は FFT を用いて高速に計算可能である.

いることに起因する. われわれはこの問題に対処するため, 新しい非相関化正則化関数を開発した. 相関行列の個々の要素を制約するのではなく, それらの d 個の和について制約を加える. 図 4 に $d = 3$ の場合の計算方法を掲げる.

先行研究より正則化の効果は緩いが, Fast Fourier Transform (FFT) アルゴリズムを使うことで, 計算時間の次元数 d への依存性を $O(d \log d)$ に改善できる. また, 提案正則化の緩さは, Stochastic Gradient Descent に類する逐次学習の過程で, 特徴量をシャッフルすることで克服できることを示した. 複数の標準的ベンチマークタスクを用いた検証実験の結果, 高次元埋め込みの際, 従来法に対して, 条件の悪い場合には 1.2 倍, 条件の良い場合には 3 倍以上の速度向上が見られ, 下流タスク・転移学習における精度も従来法と遜色なかった. なお, 本研究で開発した正則化関数は, 表現学習に限らず非相関化が必要なタスク一般に適用可能である.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Hayashi Katsuhiko, Kishimoto Koki, Shimbo Masashi	4. 巻 35
2. 論文標題 Binarized Embeddings for Fast, Space-Efficient Knowledge Graph Completion	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering	6. 最初と最後の頁 141-153
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/TKDE.2021.3075070	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 Hayashi Katsuhiko, Kishimoto Koki, Shimbo Masashi	4. 巻 -
2. 論文標題 A Greedy Bit-flip Training Algorithm for Binarized Knowledge Graph Embeddings	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Findings of the Association for Computational Linguistics: EMNLP 2020	6. 最初と最後の頁 109-114
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.18653/v1/2020.findings-emnlp.10	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 Van-Thuy Phi, Joan Santoso, Van-Hien Tran, Hiroyuki Shindo, Masashi Shimbo, and Yuji Matsumoto	4. 巻 7
2. 論文標題 Distant supervision for relation extraction via piecewise attention and bag-level contextual inference	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 IEEE Access	6. 最初と最後の頁 103570-103582
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/ACCESS.2019.2932041	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5件（うち招待講演 0件/うち国際学会 4件）

1. 発表者名 Koki Kishimoto, Katsuhiko Hayashi, Genki Akai, Masashi Shimbo, and Kazunori Komatani
2. 発表標題 Binarized knowledge graph embeddings
3. 学会等名 41st European Conference on Information Retrieval (ECIR '19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Katsuhiko Hayashi and Masashi Shimbo
2. 発表標題 A non-commutative bilinear model for answering path queries in knowledge graphs
3. 学会等名 Proceedings of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP), pp.2422-2430 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Lu Yuxun, Yutaro Shigeto, Katsuhiko Hayashi, Masashi Shimbo
2. 発表標題 A Simple Reranking Method for Knowledge Graph Completion
3. 学会等名 情報処理学会 第241回自然言語処理研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yutaro Shigeto, Masashi Shimbo, Yuya Yoshikawa, Akikazu Takeuchi
2. 発表標題 Learning Decorrelated Representations Efficiently Using Fast Fourier Transform
3. 学会等名 Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition 2023 (CVPR), pp.2052-2060 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hirose Yushi, Shimbo Masashi, Watanabe Taro
2. 発表標題 Transductive Data Augmentation with Relational Path Rule Mining for Knowledge Graph Embedding
3. 学会等名 Proceedings of the 12th IEEE International Conference on Big Knowledge, pp.377-384 (国際学会)
4. 発表年 2021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
研究 分 担 者	重藤 優太郎 (SHIGETO Yutaro) (50803392)	千葉工業大学・人工知能・ソフトウェア技術研究センター・ 主任研究員 (32503)	

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