

令和 2 年度 【 学園研究費助成金 < B > 】 研究成果報告書

学部名 現代マネジメント

フリガナ イイ マサル
氏 名 石井雅治

研究期間 令和 2 年度

研究課題名 機械学習における汎化能力の物理学

研究組織

	氏 名	学 部	職 位
研究代表者	石井雅治	現代マネジメント	教授
研究分担者			
研究分担者			

1. 本研究開始の背景や目的等 (200 字~300 字程度で記述)

近年における深層学習の広範囲の成功の核は、データから自律的に高い汎化性能を達成することにある。しかしそのメカニズムは依然として謎であり、その解明は今日における機械学習の最も重要な課題の 1 つであるといつてよい。

本研究は、この課題に挑むことを目的とするものであり、汎化能力を、関数空間の幾何学とその力学、すなわち一種の物理学としてとらえ、その発生メカニズムについて、具体的に逐次のステップの空間周波数領域における動的構造をまでを明らかにしようとするものである。

2. 研究の推進方策 (300 字程度で記述)

本研究は、深層学習を含む最急降下法が持つ学習能力を、幾何的に表現し直し、関数空間の幾何と、勾配微分方程式系の差分特性との相互的構造の結果としてとらえ、具体的に差分ステップの関数基底上での法則性や汎化能力の動的構造を主に解析的方法で明らかにしようとするものである。

特に、特異値分解を利用し、特異値と関数空間の基底との対応を考え、また更に解析の対象を解法の数学的構造から、物理学的な観測状況にまで広げることによって、最急降下法が良い解を導く条件を体系的に解析した。

また、解析的方法では証明が困難であるが、考察の鍵となる重要な事項について、数値実験を用いて解析的方法に架橋し、広い射程での解明を目指した。

3. 研究成果の概要 (600字～800字程度で記述)

教師有り学習において、早期停止付き最急降下法が汎化性能を含め“よい解”を導くということが経験則として知られていた。本年度の研究でこの経験則の一部を解明することに成功した。

この解法が導く解のロバスト性は、解法の持つ特異分解の構造によって保証される。しかしこのロバスト性は、通常、誤差を大きくするから、無条件で解の“良さ”を保証するものではない。更に、汎化性能等の異なる“良さ”が要求される場合もある。解の良さは、単に解法の数学的構造に由来するものでなく、他の潜在的な条件に支えられているのである。

我々は、解析の対象を解法の数学的構造から、“観測状況”にまで広げることによって、この潜在的な条件を体系的に解析した。観測状況とは、観測者が、誤差を含むデータ生成過程モデルを通して、観測値を観測し、これを生成する内部値を推定するという状況を定式化したものである。すなわち、a.観測者の要求、b.データ生成過程のモデル特性、c.観測データの特性、の組を“観測状況”とし、特に“評価値付き直交部分空間”を導入して観測者の要求する解の良さを定式化した。

この結果、観測者が要求するような“良さ”を持つ解が得られることと、観測状況について次の整合性条件が成立することが必要十分であることが明らかになった。この整合性条件とは、(i) 関数空間における評価値付き部分空間の一部の直和と、モデル関数のパラメータ微分の左特異値ベクトルの一部が張る部分空間が一致し、(ii) 評価値と特異値の順序が一致し、更に、(iii) 観測データは主にこの部分空間に分布するというものである。

深層神経回路網では、モデル関数のパラメータ微分が常に変化するにも関わらず、概ねこの整合性条件が成立し、その結果、早期停止によって高い汎化性能を持つ良い解が得られると推定される。現状では、この解析的な取り扱いが困難であり、数値実験による検証を進めている。

4. キーワード (本研究のキーワードを1項目以上8項目以内で記載)

①最急降下法	②早期停止	③深層神経回路網	④汎化能力
⑤特異値分解	⑥関数空間	⑦観測状況	⑧

5. 研究成果及び今後の展望 (公開した研究成果、今後の研究成果公開予定・方法等について記載すること。既に公開したものについては次の通り記載すること。著書は、著者名、書名、頁数、発行年月日、出版社名を記載。論文は、著書名、題名、掲載誌名、発行年、巻・号・頁を記載。学会発表は発表者名、発表標題、学会名、発表年月日を記載。著者名、発表者名が多い場合には主な者を記載し、他〇名等で省略可。発表数が多い場合には代表的なもののみ数件を記載。)

研究成果

石井雅治, 線型不良設定問題における早期停止付き最急降下法, 社会とマネジメント, 2021年, Vol.18, pp.1-14.

今後の展望

特異値分解と関数空間の基底との対応を通じて、深層神経回路網における最急降下法の解の収束の様子がもう少し詳しく解析できれば、汎化能力の解析が精密に検討できる段階になる。この段階に至った時点で、神経回路網の主要学会である NeurIPS に発表を申し込みたい。(新型コロナウイルス感染症の問題があり、2021年の開催は不確実)