

戦略的創造研究推進事業 AIP 加速課題
研究課題「限られた教師情報からの高精度な予測
モデルの構築」

研究終了報告書

研究期間 2020年4月～2023年3月

研究代表者：原田 達也
(東京大学 先端科学技術研究センター、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本課題の目標は、限られた教師データからの高精度な予測モデルの自動構築基盤の実現である。この目標のために、1) 少ない教師データを活用した予測モデルの学習理論とアルゴリズム、2) 知識転移の理論とアルゴリズム、3) 高精度な予測モデルの自動構築と応用、の3つの観点から取り組んでいく。

1) に関して、従来の機械学習技術は、音声認識、画像理解、言語翻訳などの分野において、高品質な教師情報を大量に用いることによって、人を超えるレベルの予測性能を達成してきた。しかし、医療、災害、材料など限られた教師情報しか得られない応用も多く、機械学習の更なる普及に向けて大きな障壁となっている。そこで、限られた教師情報からでも学習可能な機械学習手法、および、ラベル雑音の影響を軽減するための技術の開発に取り組んだ。

限られた教師情報からの学習に関しては、弱い教師情報からでも分類器の予測誤差を不偏推定できる汎用的なアプローチを考案し、理論保証を持って教師付き学習と同程度の予測性能が達成できることを示した。更に、深層モデルに対するリスク補正技術を考案し、予測性能を大幅に向上させられることを示した。そして、一連の成果をまとめた英語専門書を MIT Press より出版した。

ラベル雑音に関しては、ラベル反転確率を表す雑音遷移行列が分かれば、その影響を系統的に補正できることが知られている。しかし、ラベル雑音を含むデータから雑音遷移行列を推定する問題は数学的に不良設定問題であり、直接的に解くことができない。そこで、雑音遷移行列の推定に必要な制約条件を数学的に明らかにし、それを正則化として取り込むことによって、理論保証をもって雑音遷移行列と分類器を同時に学習できるアルゴリズムを開発した。更に、入力に依存するラベル雑音の対処技術や、深層学習の記憶効果を用いたロバスト学習手法も開発した。

また、発展的な取り組みとして、バイアスを含むデータからの学習、深層モデルの対比事前学習、敵対的雑音に対するロバスト学習技術に関する研究も行い、様々な新技術を開発した。

2) に関して、ソースドメインで学習されたモデルを、ターゲットドメインに適用すると、ドメインの違いにより期待する精度がでない場合がある。教師無しドメイン適応(UDA)は、この問題解決の有力候補であり、ほとんどの UDA 手法は、ソースとターゲットの分布を一致させることで問題解決を図ってきた。しかし、異なるクラスからのサンプルが混在してしまう状況、つまり、結合誤差についてはその推定困難さゆえに無視されてきた。そこで、本課題ではこの本質的問題を解決するために、結合誤差の上界に関連する目的関数と安定した学習手法を考案し、さまざまな UDA 問題に有効であることを確認した。

また、プライバシーに関する懸念の高まりにより、知識転移においてターゲットドメインでの学習にソースデータの直接的利用が可能とは限らない状況が増加している。この問題を解決するため、学習済みソースモデルのみを用いて、対象ドメインの予測誤差の上限を求める新しい定理を導出し、さらに、ソースデータやモデルパラメータにも直接アクセスすることなくターゲットモデルを学習可能な、プライバシー保護に配慮したアルゴリズムも考案した。

3) に関して、モデルの自動構築には、探索範囲を広げると膨大な計算コストがかかるために、モデルの飛躍的な効率性向上が求められる。そこで、ニューロモルフィックデバイス上で超効率的に動作するスパイクニューラルネットワークによる新たな生成モデルを考案した。

データの特性に応じて適切な空間でモデルを学習することは自然であると考えられるが、現状のニューラルネットワークはほとんどが平坦なユークリッド空間上で構築されており、例えば、階層構造のような指数関数的に広がりを持つデータの学習には適切ではなかった。そこで、双曲空間における新規のニューラルネットワークの実現を行った。この新しい方法論は、パラメータを増やすことなく、多項ロジスティック回帰、完全連結層、畳み込み層、注意機構を統一的な数学的解釈の下で構築している。

上記の手法を統合するために、以前の CREST プロジェクトで開発した Web ブラウザ上で

推論が世界最速で動作する WebDNN を、分散計算可能なように拡張を行った。この分散計算プラットフォームによるクラスタシステムのプロトタイプ構築と、杉山グループで開発した弱教師学習手法や連合学習手法等を実装し、有効性の検証を行った。

さらに、実世界には時間を含めると 4 次元の低次元構造が存在し、この低次元構造を前提知識として活用することによって、大幅なアノテーションコストの削減につながる可能性がある。そこで、スパースな観測動画から制御可能な 3 次元モデルを獲得する手法の実現や、部分観測の点群データから、非剛体物体再構築の新規手法を構築した。

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. 弱教師付き学習の理論体系構築とアルゴリズム開発

概要: 深層学習を含む従来の教師付き機械学習手法で高い予測性能を達成するためには、大量の良質な教師情報が必要であった。本研究では、弱い教師情報だけからでも強い教師情報を用いた場合と同程度の予測性能が達成できる画期的な弱教師付き学習の理論体系を構築した。更に、深層モデルに対する予測性能向上技術も考案し、様々な弱教師付き学習問題に対する実用的なアルゴリズムを開発した。

2. 雑音を含む教師ラベルからの分類器学習の理論構築

概要: 雑音を含むデータからの学習は古典的な問題であり、ビッグデータさえあれば問題ないと認識される事が多い。しかし、分類問題に対してはラベル雑音を明示的に除去する機構が必要であり、重要な未解決問題である。この歴史的な難題に対して、本プロジェクトでは理論的成果を積み上げ、適切な条件のもとでも、ラベル雑音を含むデータから統計的一致性を持って分類器を学習できる画期的な学習理論の構築に初めて成功した。

3. 非ユークリッドニューラルネットワークの開発

概要: 現在ほとんどのニューラルネットワークは暗にユークリッド空間を仮定しているが、データの性質に応じて空間を適切に選択できれば、データの効率的処理が可能であると考えられる。そこで、ニューラルネットワークの基本構成要素を、単一の双曲幾何学モデルで一般化し、パラメータを増やすことなく、多項ロジスティック回帰、完全連結層、畳み込み層、注意機構を統一的な数学的解釈の下で構築した。この双曲空間上の新規ニューラルネットワークを用いることで、階層的構造を持つデータを効率的にモデル化できることを示した。

<科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

1. 二つの深層モデルを用いた超ロバスト「共教示」学習法の開発

概要: 深層学習では、良質の訓練データには素早く適合でき、雑音を含む訓練データへの適合には時間がかかることが経験的に知られている。そこで、二つの深層モデルを用いて、早く適合できたデータを選んで互いに教え合うという共教示と名付けた独自の学習パラダイムを提案した。更に、共教示での教え方に工夫を加えることにより、教師ラベルの半数に雑音を加えても、その影響を抑制してロバストに学習できることを実証した。

2. 視覚情報からの時空間再構築に関する研究

概要: 視覚情報から時空間構造を推定する機能は、人間の根本的な能力の一つであり、これを機械で実現できれば、自動運転、ロボティクス、VR などの広範な応用に活用できるだけでなく、時空間情報を事前知識として少数教師情報からの実世界認識機能の実現も可能である。そこで、構造が分からない物体であってもスパースな視点の動画から教師なしで、制御可能な写實的 3 次元モデルを獲得する画期的な手法を考案した。また、深度画像から時間的に変形する非剛体物体の高精度な再構成手法も実現した。

3. 教師無しドメイン適応に関する研究

概要:あるドメインで学習したモデルを予測精度の劣化なく異なるドメインに適応できれば、ラベルリッチなシミュレーション上のモデルを実世界に転用可能となるために、アノテーションコストを大幅に削減できる。そこで、ターゲットにラベルがない状況でのドメイン適応(UDA)において、今まで見落とされていた結合誤差を考慮した効率的な手法を提案した。さらに、ソースのデータやモデルパラメータに直接アクセスできなくともラベル情報のないターゲットに転移可能なプライバシー保護に対応した画期的な UDA 手法を考案した。

<代表的な論文>

1. Xia, X., Liu, T., Han, B., Wang, N., Gong, M., Liu, H., Niu, G., Tao, D., & Sugiyama, M.

Parts-dependent label noise: Towards instance-dependent label noise.

In Proceedings of Neural Information Processing Systems (NeurIPS2020), pp. 7597-7610, 2020.

スポットライト採択率:280/9454=3.0%

概要:これまでのラベル雑音に対する研究は、雑音の特性が入力データに依存しないという仮定のもとで行われてきた。しかし、現実には、分類境界に近いデータほど雑音が大きいなど、雑音の特性が入力に依存することが多い。そこで、雑音が部分ごとに分解できるという仮定のもとで、入力依存雑音を補正できる初めてのアルゴリズムを構築した。この成果は、NeurIPS2020 のスポットライト講演に選ばれ、国際的に高い評価を得た。

2. Fang, T., Lu, N., Niu, G. and Sugiyama, M.

Rethinking importance weighting for deep learning under distribution shift.

In Proceedings of Neural Information Processing Systems (NeurIPS2020), pp. 11996-12007, 2020.

スポットライト採択率:280/9454=3.0%

概要:プライバシー保護のため、学習に用いる訓練データにバイアスが含まれることがある。そのようなデータからでも、バイアスの影響を除去して学習・予測が行える汎用的な深層学習アルゴリズムを開発し、その有効性を計算機実験により示した。従来研究では共変量シフトなど、対応できるバイアスの種類に強い制限があったが、本技術は任意のバイアスに対応できる初めての手法であり、NeurIPS2020 のスポットライト講演に選ばれるなど、国際的に高い評価を受けた。

3. Yang Li, Tatsuya Harada and Leopard: Learning partial point cloud matching in rigid and deformable scenes. IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), pp. 5554-5564, 2022. (Oral acceptance rate=4.2%)

概要:本論文では、剛体や非剛体物体の双方に対応可能な部分点群マッチングのための学習型アプローチを提案した。提案手法では、点群表現を特徴空間と3次元位置空間とに分離するアーキテクチャ、3次元相対距離情報を明示的に表現する位置符号化手法、点群間の相対位置を変更するリポジショニング技術を新規に考案した。変形可能な場合では、先行技術よりも圧倒的に高い非剛体特徴マッチング再現率を達成し、CVPR2022 でオーラル講演に選ばれるなど、国際的に高い評価を受けている。

4. Yuki Kawana, Yusuke Mukuta and Tatsuya Harada. Unsupervised Pose-aware Part Decomposition for Man-made Articulated Objects. The European Conference on Computer Vision (ECCV), pp. 558-575, 2022. (Oral acceptance rate=2.7%)

概要:本論文では、戸棚、扉、メガネといった機械的な関節を持つ人工関節物体を対象とし、視覚情報から教師なしでこれらの物体の部品への分解とその姿勢を推定する新規手法を開発した。この手法は新規環境において扉や窓の開閉などのロボットによる物体操作に必要な不可欠だけではなく、VR空間上の物体モデル作成等の幅広い応用が可能である。視覚情報を用いて人工物の部品分解と姿勢推定を教師なしで実現した独自性の高い手法であり、

ECCV2022 でオーラル講演に選ばれるなど、国際的に高い評価を受けている。

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

① 原田グループ

研究代表者:原田 達也 (東京大学先端科学技術研究センター 教授)

研究項目

1. 知識転移の理論とアルゴリズム開発
教師情報が大量に得られる領域(ソースドメイン)で獲得した予測モデルを、教師情報がほとんど得られない領域(ターゲットドメイン)に転用するドメイン適応の問題に取り組む。
2. 実世界の時空間モデル化と生成モデル
実世界を認識するための常識や前提知識として様々な課題に転移可能な時空間モデルを視覚情報から構築する手法を開発する。
3. 高精度な予測モデルの自動構築基盤の実現と応用
限られた教師データから予測モデルを自動で構築するための新たな機械学習手法の開発、ロバストかつ効率的な生成モデルやプラットフォーム非依存の計算基盤を実現する。

② 杉山グループ

主たる共同研究者:杉山 将(理化学研究所革新知能統合研究センター チームリーダー)

研究項目

1. 弱教師付き学習の理論構築とアルゴリズム開発
弱い教師情報からでも、通常の教師付き学習と同程度の予測性能を達成できる学習理論の構築と、深層モデルに対する実用的学習アルゴリズムの開発を行う。また、バイアスを持つデータからの学習理論とアルゴリズムも構築する。
2. ラベル雑音ロバスト学習の理論構築とアルゴリズム開発
ラベル雑音を含む教師データから、雑音遷移行列を推定するための基礎理論、および、それに基づくロバスト機械学習アルゴリズムを構築する。また、雑音遷移行列が入力データに依存する場合に対する実用的な推定アルゴリズムや、深層学習の特性を生かした超ロバスト学習技術を開発する。
3. 敵対的攻撃に対する対処法の開発
様々な敵対的データに対してロバスト性を有する学習アルゴリズムとニューラルネットワークのアーキテクチャ探索に関する研究を行う。また、敵対的学習の考え方を分類以外にも拡張する。

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

原田グループでは、少数の教師情報からの予測モデル構築、時空間再構築などの研究に関して、

Princeton University, U.S.A.

Sorbonne University, France

Indian Institute of Technology Hyderabad (IITH), India

Hong Kong Baptist University, China

University of Queensland, Australia

Microsoft Research Asia, China

Institut de Recherche et Coordination Acoustique/Musique (IRCAM), France

AI research at NVIDIA, U.S.A.

Google Brain

などの研究者と連携している。

杉山グループでは、弱教師付き学習、ラベル雑音ロバスト学習、敵対的学習などの研究を行う上で、

Nanyang Technological University, Singapore

National University of Singapore, Singapore

National Taiwan University, Taiwan

Tsinghua University, China

Southeast University, China

Nanjing University of Science and Technology, China

Shandong University, China

Hong Kong Baptist University, China

University of Sydney, Australia

University of Queensland, Australia

University of Melbourne, Australia

University of Luxembourg, Luxembourg,

などの研究者と連携している。