

2024 年度年次報告書
信頼される AI の基盤技術
2022 年度採択研究代表者

二見 太

大阪大学 大学院基礎工学研究科
講師

情報理論を用いた不確実性に関する学習理論の展開

研究成果の概要

本年度は研究計画(A)情報理論を使った不確実性の定量化および学習理論の構築, (B)テストデータと訓練データの関係に依存する不確実性の理論の構築, (D)統計的不確実性を活用するシミュレーションモデルや探索問題への応用, に関して, 昨年度まで取り組んできた理論的解析結果を発展させることで取り組んだ.

まず昨年度まで取り組んできた情報理論を活用したアルゴリズム依存型解析を不確実性の定量化の一種である較正誤差の評価問題に適用することを行った. 較正誤差は分類問題であれば, 機械学習モデルによるラベルの予測確率と実際のデータのラベル頻度の乖離を意味する. その定義の通り, 予測を確立を伴って行う際には機械学習モデルの出力する確率値の意味を現実のデータに立脚させるという点で不確実性評価において重要な役割を果たす概念である. こうした較正誤差については様々な定量化(推定量)が知られているが, 標本数に対しての非漸近的な解析は限られていた. そこで我々はまずそうした定量化(推定量)に対する解析を行うことで, 定量化の際に現れるパラメータについてそのバイアスを最小にするための方法を明らかにした. 次に深層学習モデルをはじめとするモデルは較正誤差が大きくなることが多く, 既存研究では訓練データとは異なる較正用データを用いてその予測確率を補正することで解決を図ることが広く行われる. 我々はそうした方法に対して情報理論的解析を適用することで, 較正用データで補正されたモデルが, 未知のテストデータに対しても較正されるための条件を明らかにした. またその解析をもとに新たな理論保証付きアルゴリズムを考案した. 現在その内容について論文を執筆中である.

次に, 昨年度に引き続き, 予測の不確実性について, 特に「データの不足に起因するとされる不確実性」に関しての研究を行った. 昨年度の研究ではモデルの選択ミスがないことや厳密なベイズ事後分布が得られるといった必ずしも現実的には満たされない仮定の下に行っていた解析について, そうした仮定を取り除いた解析結果を得ることができた. またそうした解析結果は既存の変分ベイズにおける予測の不確実性の挙動と密接に関係があることを踏まえ, 不確実性の評価をより適切に行うことのできる新しい変分ベイズアルゴリズムを開発した. 現在こうしたデータの不足の不確実性と較正誤差に関して更なる解析を進めている.

【代表的な原著論文情報】

- 1) F. Futami, & M. Fujisawa, Information-theoretic Generalization Analysis for Expected Calibration Error In A. Globerson and L. Mackey and D. Belgrave and A. Fan and U. Paquet and J. Tomczak and C. Zhang (Eds.), Advances in Neural Information Processing Systems 37, pp. 84246-84297, 2024.
- 2) Futoshi Futami. Epistemic Uncertainty and Excess Risk in Variational Inference. To be appeared in Proceedings of 28th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS2025).