社会人向け講座「データ分析者養成コース」

機械学習技術とその数理基盤

(第2部)

第一回講義終了後修正版

鈴木大慈

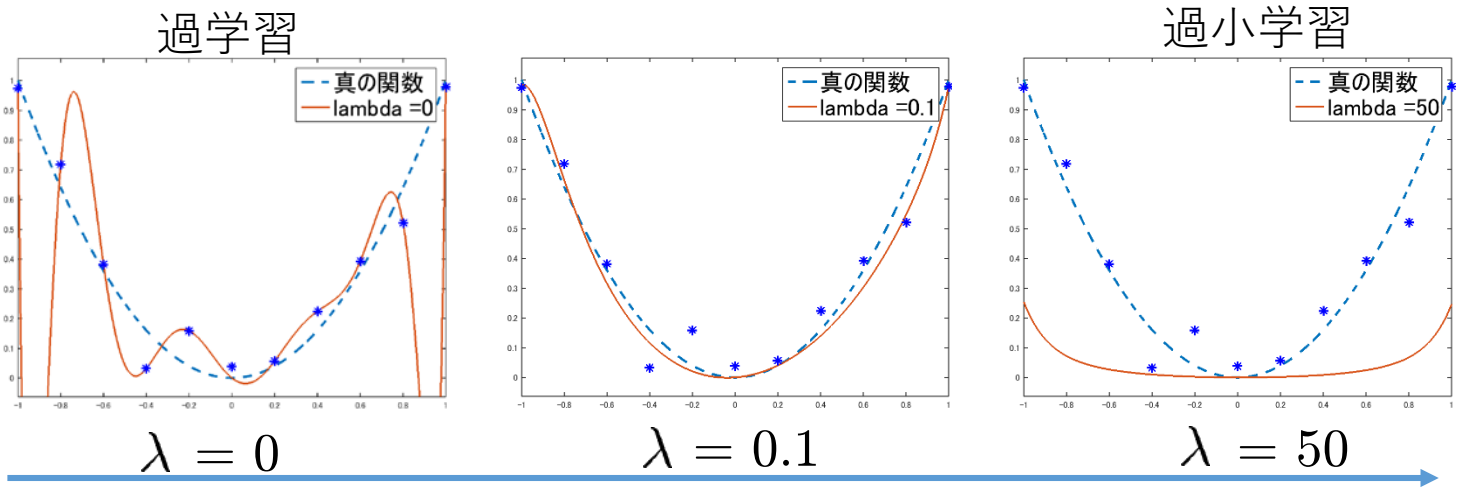
東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻

理研AIP

2018年4月4日/4月18日

前回の復習

- 機械学習の基本事項
  - プログラムするのは認識の仕方ではなく学習の仕方
- 過学習の問題
  - 正則化と変数選択
  - バイアス-バリアンスのトレードオフ
  - Mallows' Cp (正則化パラメータ), AIC (変数選択)



$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{15}} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (\beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_{15} x_i^{15})\}^2 + \lambda \|\beta\|_2^2$$

リッジ正則化

注意点

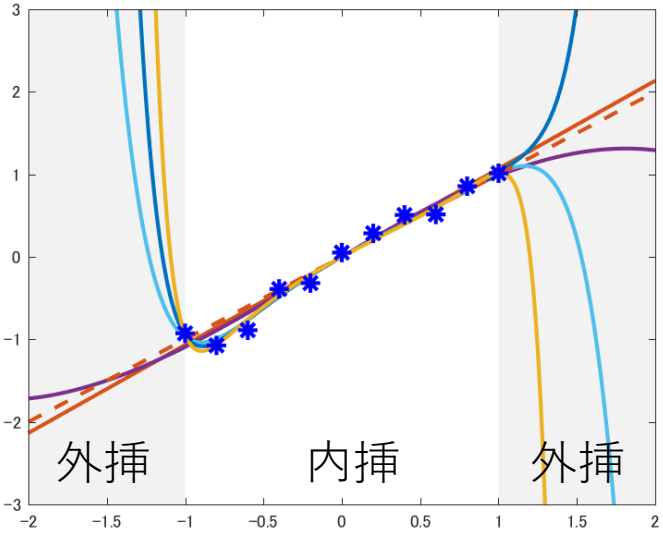
- 深層学習は“賢い”ので少ないデータで良い性能を出す？

  → NO. 複雑なモデルにはたくさんのデータが必要. 転移学習やワンショット学習といった技法を適宜活用する必要あり.

- 機械学習の性能を上げるには，まず良質なデータをなるべく多く用意
  - 手法はその後

- 機械学習の本質的限界：

  内挿と外挿



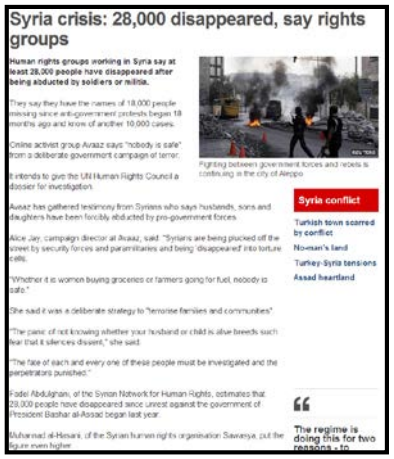
高次元スパース推定

高次元データ

インターネットや計測機器の発達により多様なデータが取得可能

多くの場合で高次元

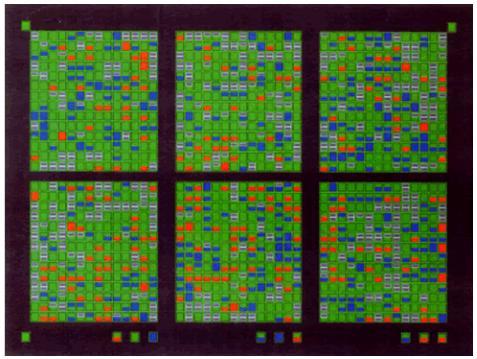
- 遺伝子データ
- テキストデータ
- マーケティングデータ
- 金融データ



Bag of words

数百万次元

Syria	13
people	5
bomb	7
economy	1
immigrants	2
soccer	0
walk	1

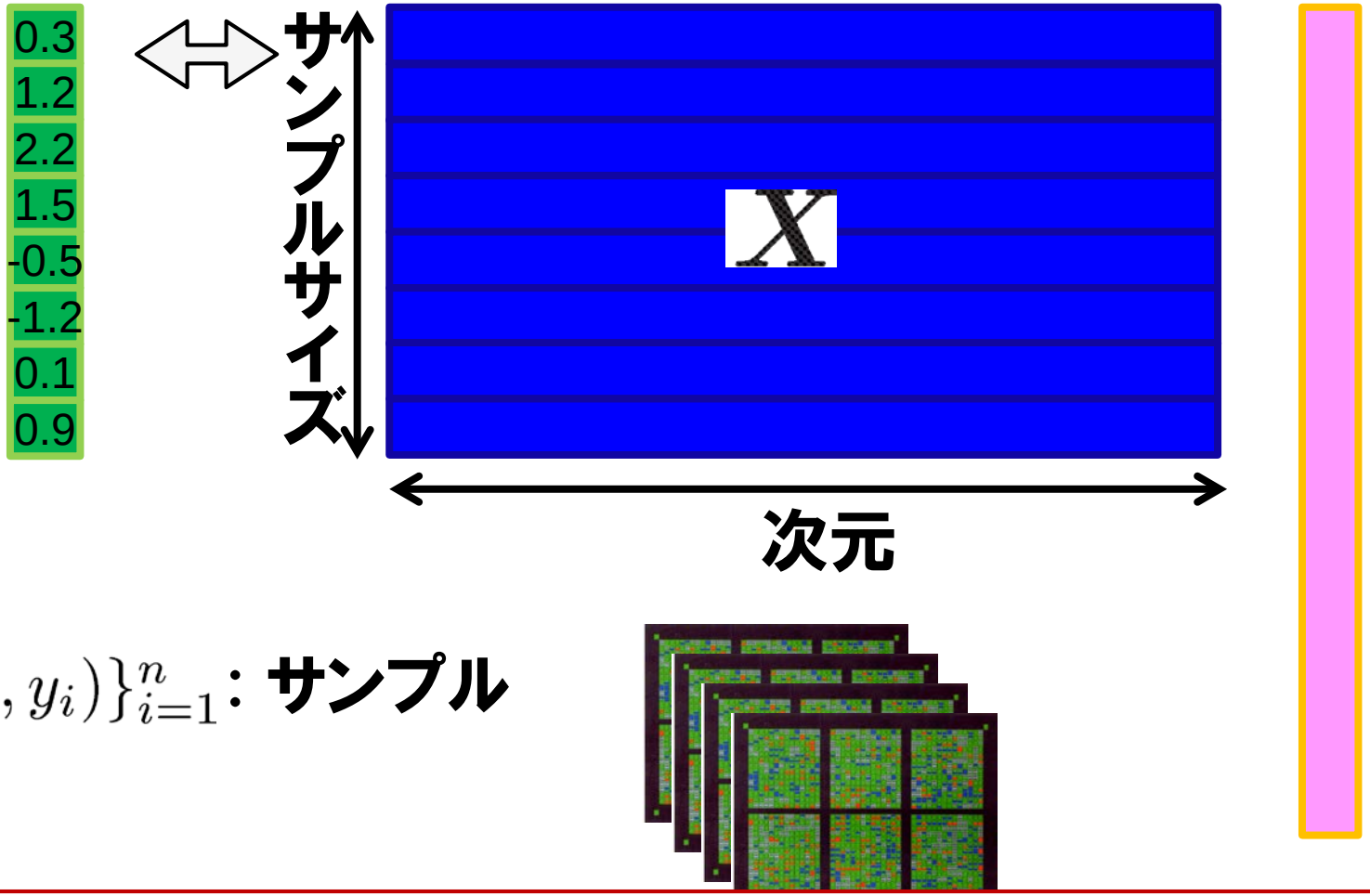


遺伝子発現量

数万次元

0.5
2.4
4.2
0.2
1.3
0.1
5.3

y $x^\top$ β



$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$: サンプル

次元 > サンプルサイズ → 余分な情報を落としたい

y $x^\top$ β

意味のある情報

無駄な情報

0.3
1.2
2.2
1.5
-0.5
-1.2
0.1
0.9

サンプルサイズ

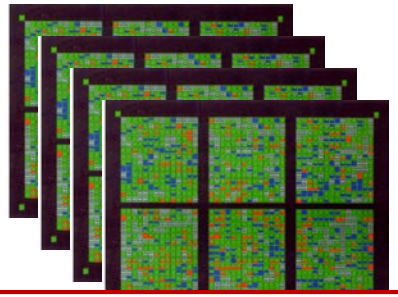
X

ここは無視

0

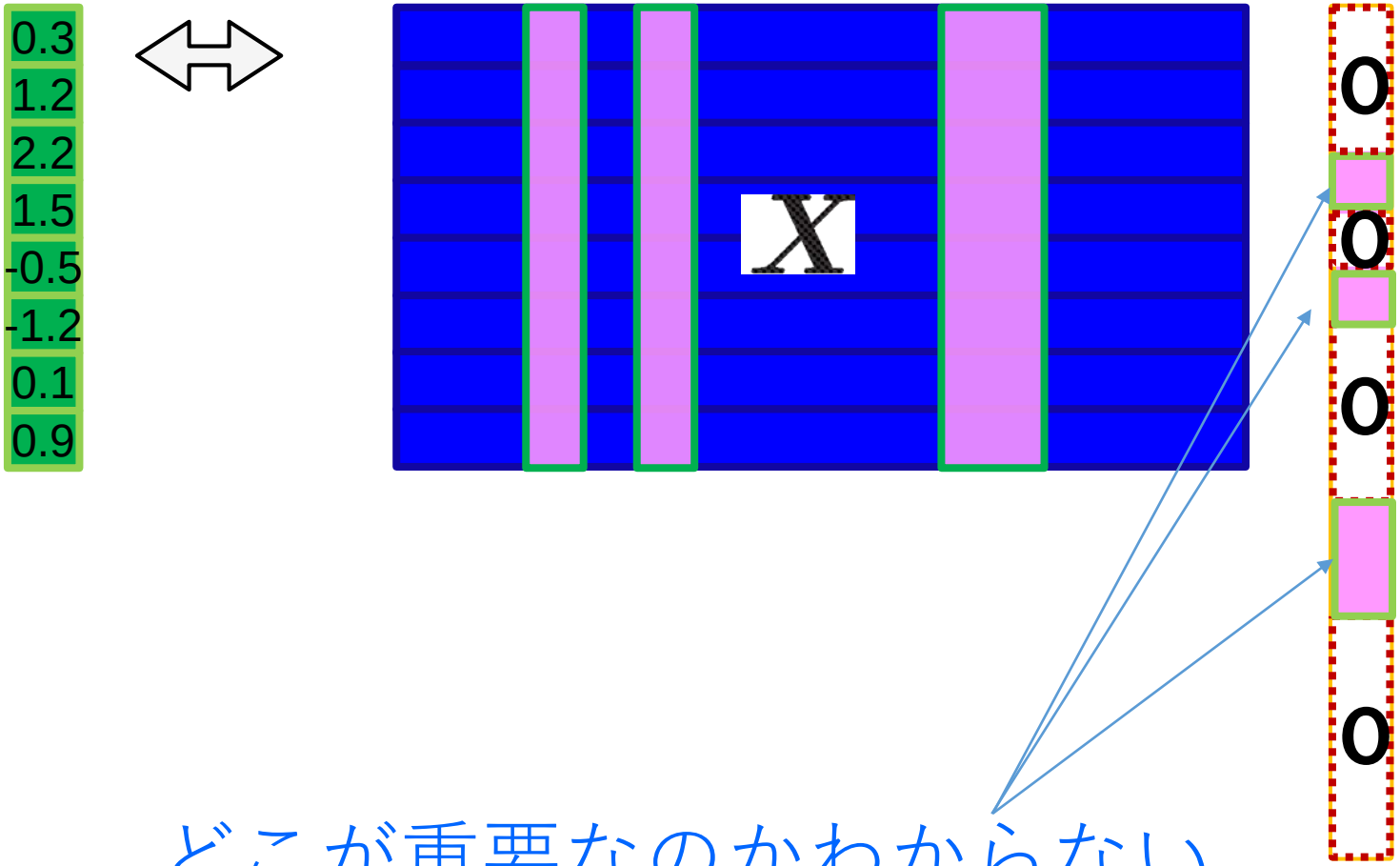
次元

$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$: サンプル



次元 > サンプルサイズ → 余分な情報を落としたい

スパースモデリング



どこが重要なのかわからない

→ 特徴選択：データから学習

予測に寄与する特徴量を特定できれば解釈性も上がる

AICによる特徴選択（組み合わせ的方法）

AIC: 赤池情報量規準 → 最尤推定量の予測誤差の不偏推定量

AIC最小化

$$\hat{\beta}_{\mathrm{AIC}} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \|Y - X\beta\|^2 + 2\sigma^2 \|\beta\|_0$$

データへの当てはまり

次元に対する罰則（正則化）

ただし$\|\beta\|_0 = \beta$の非ゼロ要素の個数 ：L_0ノルムと言う.

- 予測誤差を近似的に最小化
- 変数の組み合わせの数：2^p個の候補（膨大）
- NP困難

線形モデルを仮定

$$Y = X\beta^* + \xi$$

サンプルサイズn，次元p

観測ノイズ：分散σ^2の正規分布

LASSOによる特徴選択（凸最適化）

Lasso [L_1正則化] (R. Tsibshirani (1996))

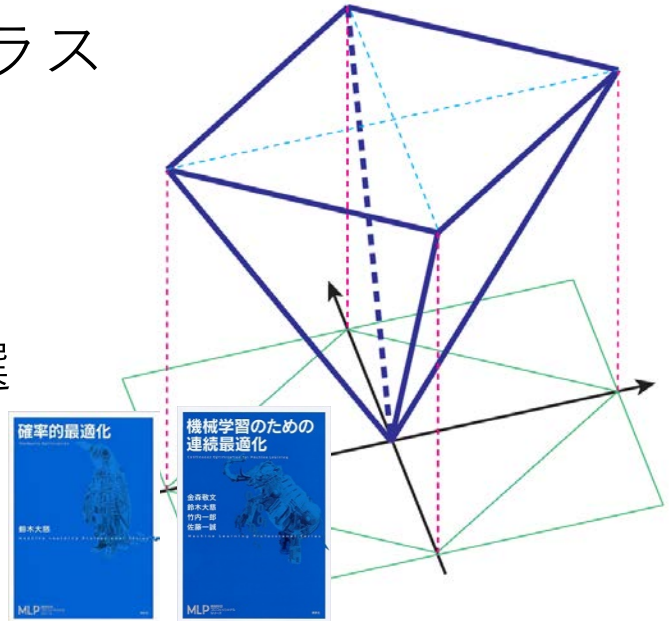
$$\hat{\beta}_{\text{Lasso}} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_1$$

データへの当てはまり　　次元に対する罰則（正則化）

ただし $\|\beta\|_1 = \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$ ：L_1ノルムと言う.

Lassoは**凸最適化**と呼ばれる問題のクラス

- **高速に解ける（近接勾配法等）**
- L_1ノルムはL_0ノルムを最も良く近似する凸関数
- パラメータλはクロスバリデーションで選べば良い.
- 理論が豊富.

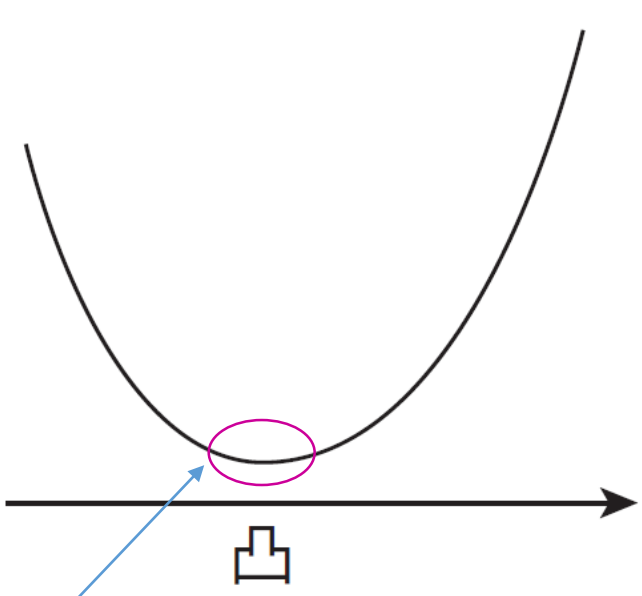


書籍：確率的最適化，機械学習のための連続最適化

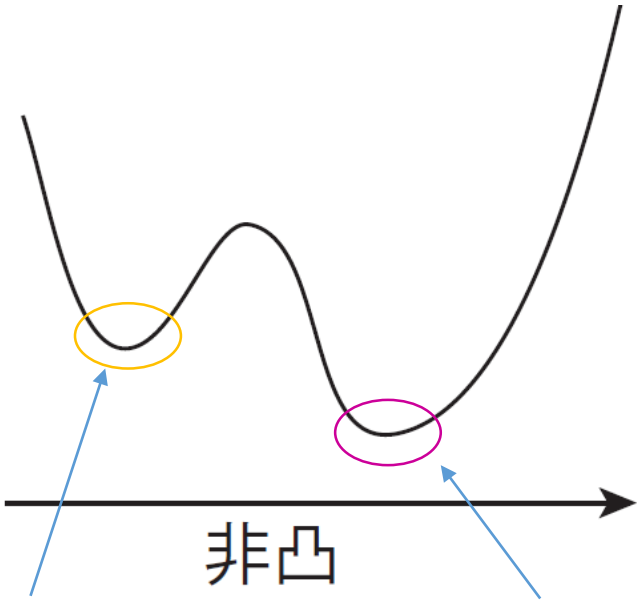
凸関数

凸最適化　＝　凸関数の最適化

$$\theta f(x) + (1-\theta) f(y) \geq f(\theta x + (1-\theta) y) \quad (\forall x, y \in \mathbb{R}^p, \theta \in [0,1])$$



局所最適解＝大域的最適解



局所最適解　　大域的最適解

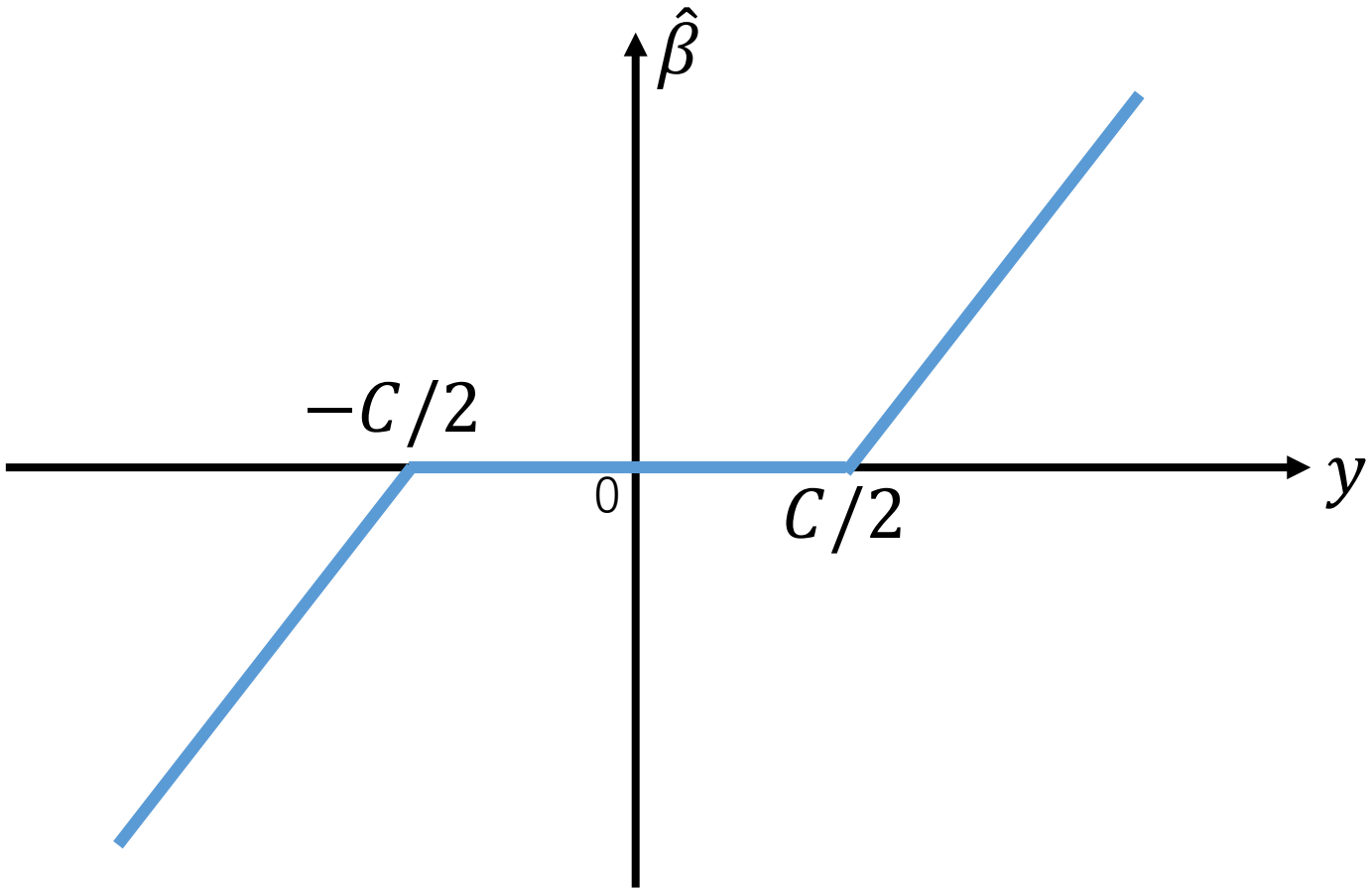
凸関数は局所最適解が大域的最適解

→ 効率的な最適化が可能な場合が多い

簡単な例

1 次元の場合

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}} (y - \beta)^2 + C|\beta|$$



Lassoのスパース性

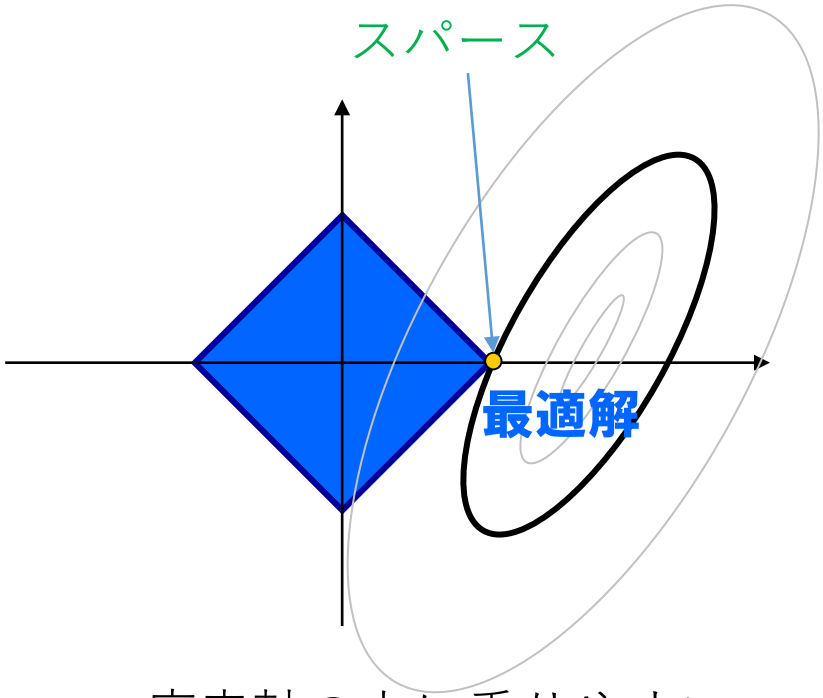
$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \|X\beta - Y\|_2^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|. \quad \Leftrightarrow \quad \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \|X\beta - Y\|^2 \text{ s.t. } \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \leq C$$

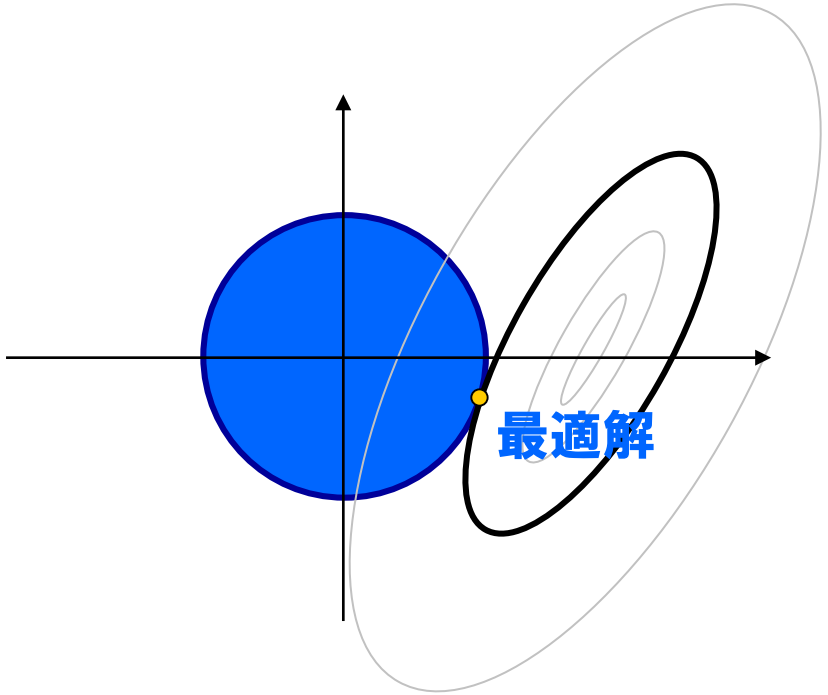
L1正則化

$$\|\beta\|_1 = |\beta_1| + \cdots + |\beta_p|$$

L２正則化（リッジ正則化）

$$\|\beta\|_2^2 = \beta_1^2 + \cdots + \beta_p^2$$





座表軸の上に乗りやすい

スパース推定によって予測に必要な変数が自動的に選ばれる

スパース性の恩恵

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \|X\beta - Y\|_2^2 + \lambda_n \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$

d = 真のベクトルβ^*の非ゼロ要素の数 (予測に寄与する変数の数)

定理 (Lassoの収束レート (Bickel et al., 2009; Zhang, 2009))

ある条件のもと（制限等長性など），ある定数Cが存在して，

$$\|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2 \leq C \frac{d \log(p)}{n}$$

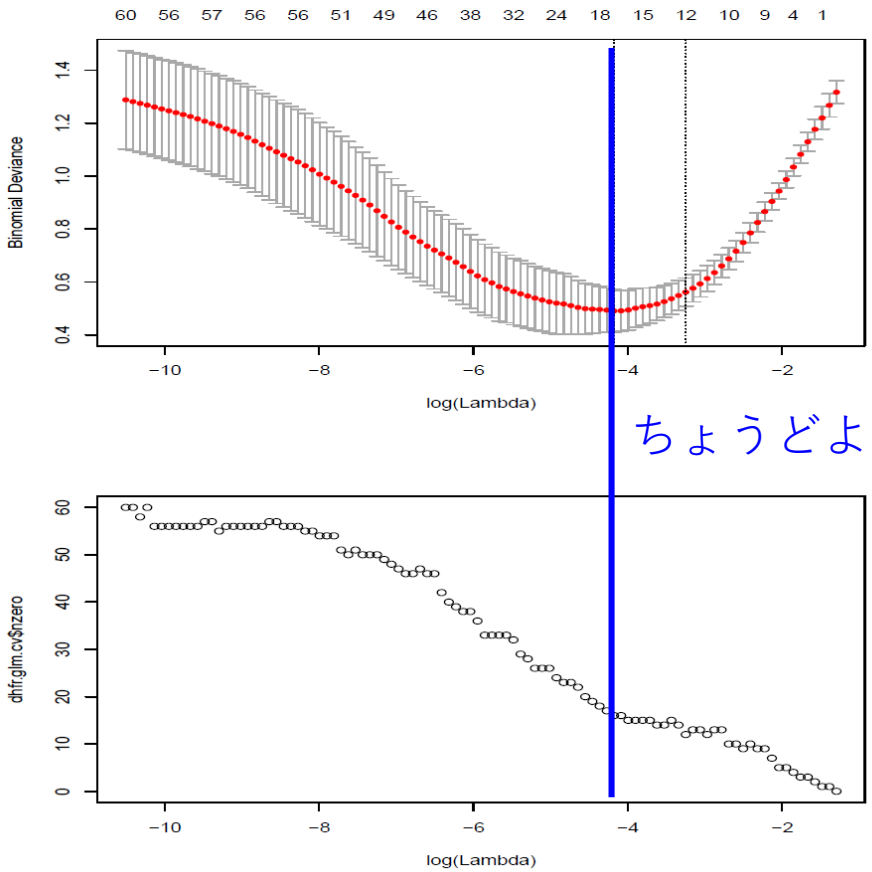
- 全体の次元pはたかだか$O(\log(p))$でしか影響しない!
- 実質的次元dが支配的.
- 高次元スパースな問題を精度よく解くことができる.

} **過学習を防止**

推定誤差 $\frac{d \log(p)}{n} \ll \frac{p}{n}$ (最小二乗法)
過学習してしまう

低次元性（スパース性）をうまく利用できている.

ジヒドロ葉酸レダクターゼデータにおける実験



CVスコア
(予測精度)

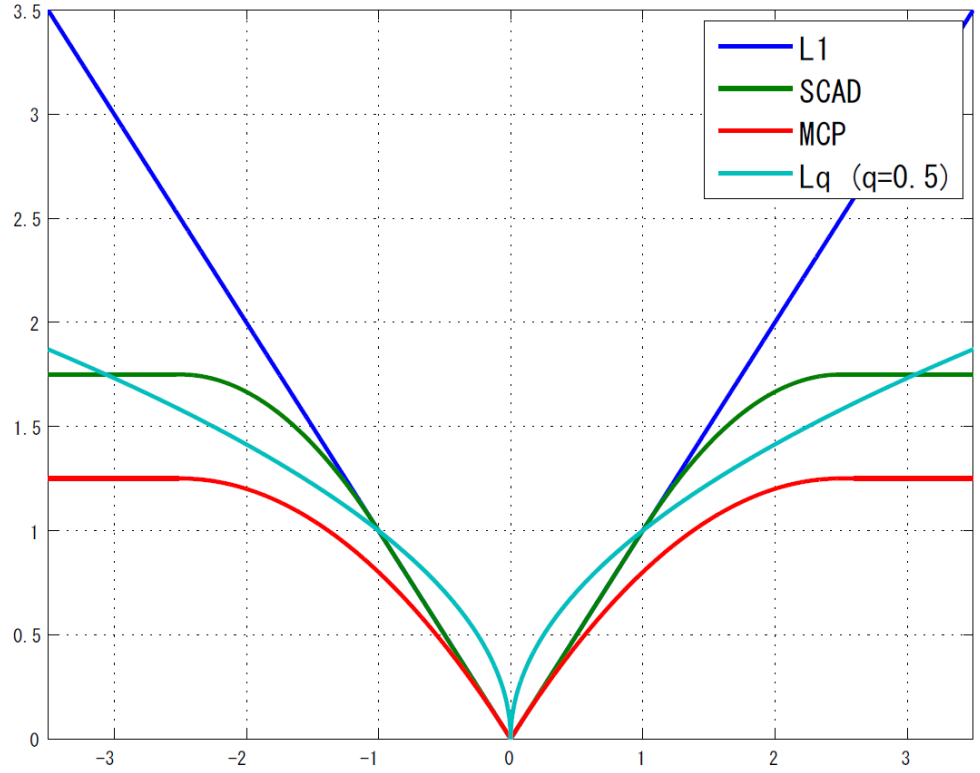
ちょうどよい正則化

非ゼロ要素の個数

スパース性と汎化誤差

横軸：正則化パラメータ．縦軸：(上段) CV スコア,(下段) 非ゼロ要素個数

非凸正則化



SCAD

$$\rho(|\beta|,\lambda) = \begin{cases} \lambda|\beta| & (|\beta| \le \lambda) \\ \frac{-|\beta|^2+2a\lambda|\beta|-\lambda^2}{2(a-1)}| & (\lambda < |\beta| \le a\lambda) \\ \frac{(a+1)\lambda^2}{2}| & (|\beta| \le a\lambda) \end{cases}$$

MCP

$$\rho(|\beta|;\lambda) = \lambda \int_0^{|\beta|} (1 - x/(\gamma\lambda))_+ \mathrm{d}x$$

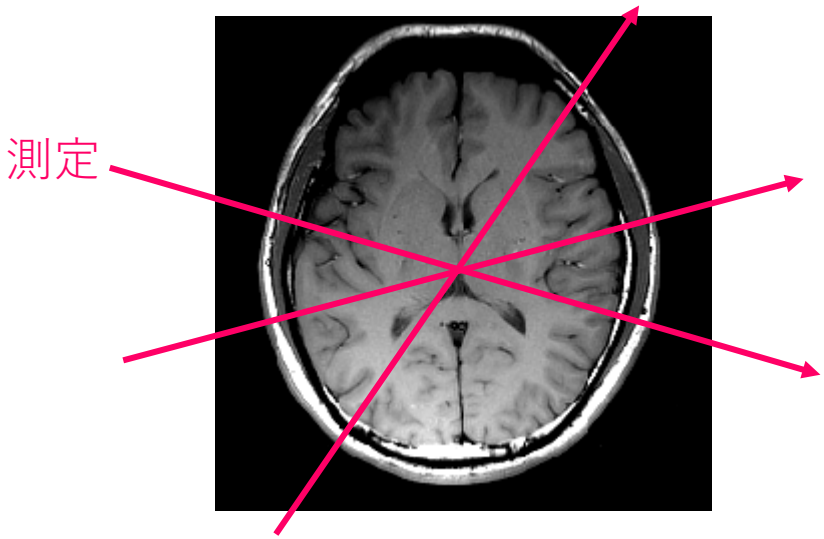
- SCAD (Smoothly Clipped Absolute Deviation) (Fan and Li, 2001)
- MCP (Minimax Concave Penalty) (Zhang, 2010)
- Lq 正則化(q < 1), Bridge 正則化(Frank and Friedman, 1993)

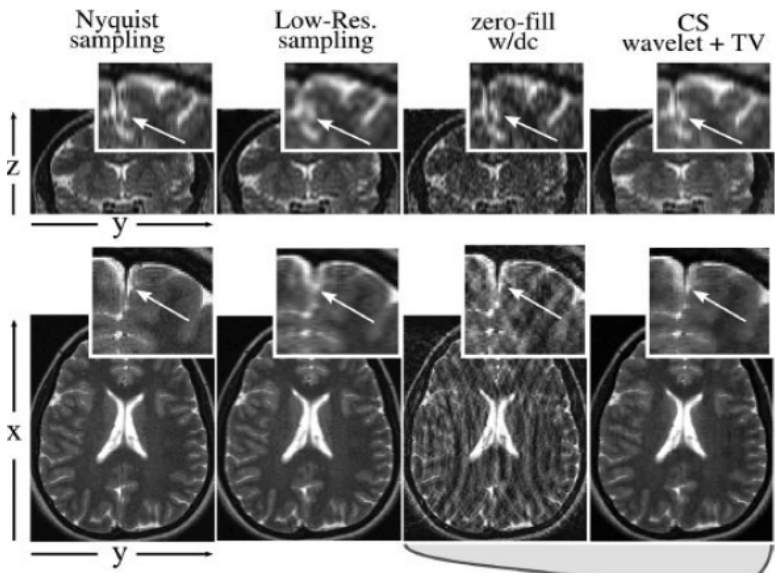
よりスパースな解．その代わり最適化は難しくなる．

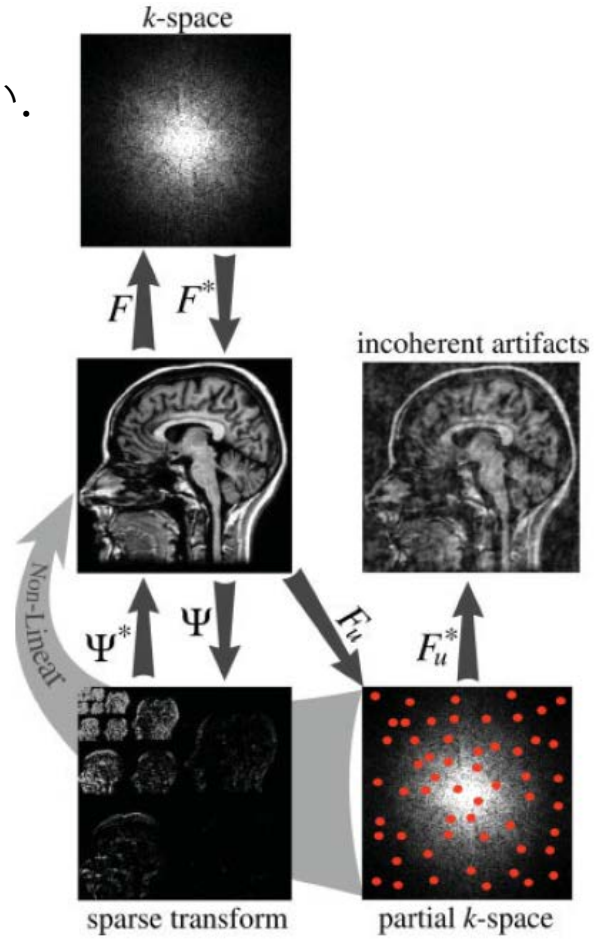
ただし，最近は局所最適解でも統計的性質は良いことが示されている．

MRIへの応用

なるべく測定時間（観測回数）を減らしたい.







画像はwavelet基底に関して[スパース](#)
→少数の観測（サンプル）でも大丈夫

[Lustig, Donoho and Pauly: Sparse MRI: The application of compressed sensing for rapid MR imaging, 2007]

スパース共分散選択

$$x_k \sim N(0,\Sigma)\ \ (\text{i.i.d.}, \Sigma \in \mathbb{R}^{p\times p}), \qquad \widehat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k x_k^\top$$

$$\hat{S} = \underset{S:\text{半正定対称}}{\arg\min} \left\{ -\log(\det(S)) + \mathrm{Tr}[S\widehat{\Sigma}] + \lambda \sum_{i,j=1}^{p} |S_{i,j}| \right\}.$$

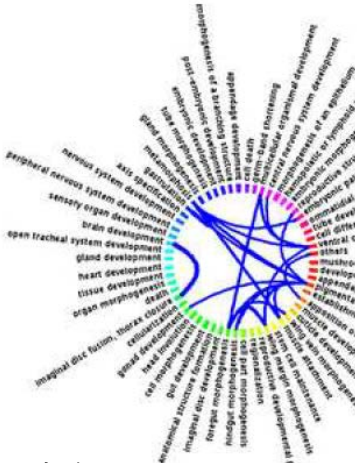
データへの当てはまり（正規分布の負対数尤度）

L1正則化

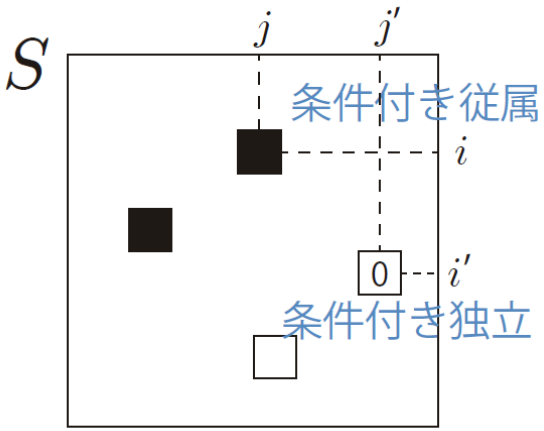
[Meinshausen and Buhlmann, 2006, Yuan and Lin, 2007, Banerjee et al., 2008]

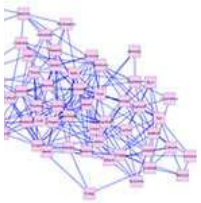
- Σの逆行列Sを推定
- S_{ij}=0 ⇔ 「X_iとX_jが条件付き独立」
- S_{ij}=0なら変数X_iと変数X_jは直接的に相互作用しないという意味

グラフィカルモデルが凸最適化で推定可能



遺伝子ネットワ

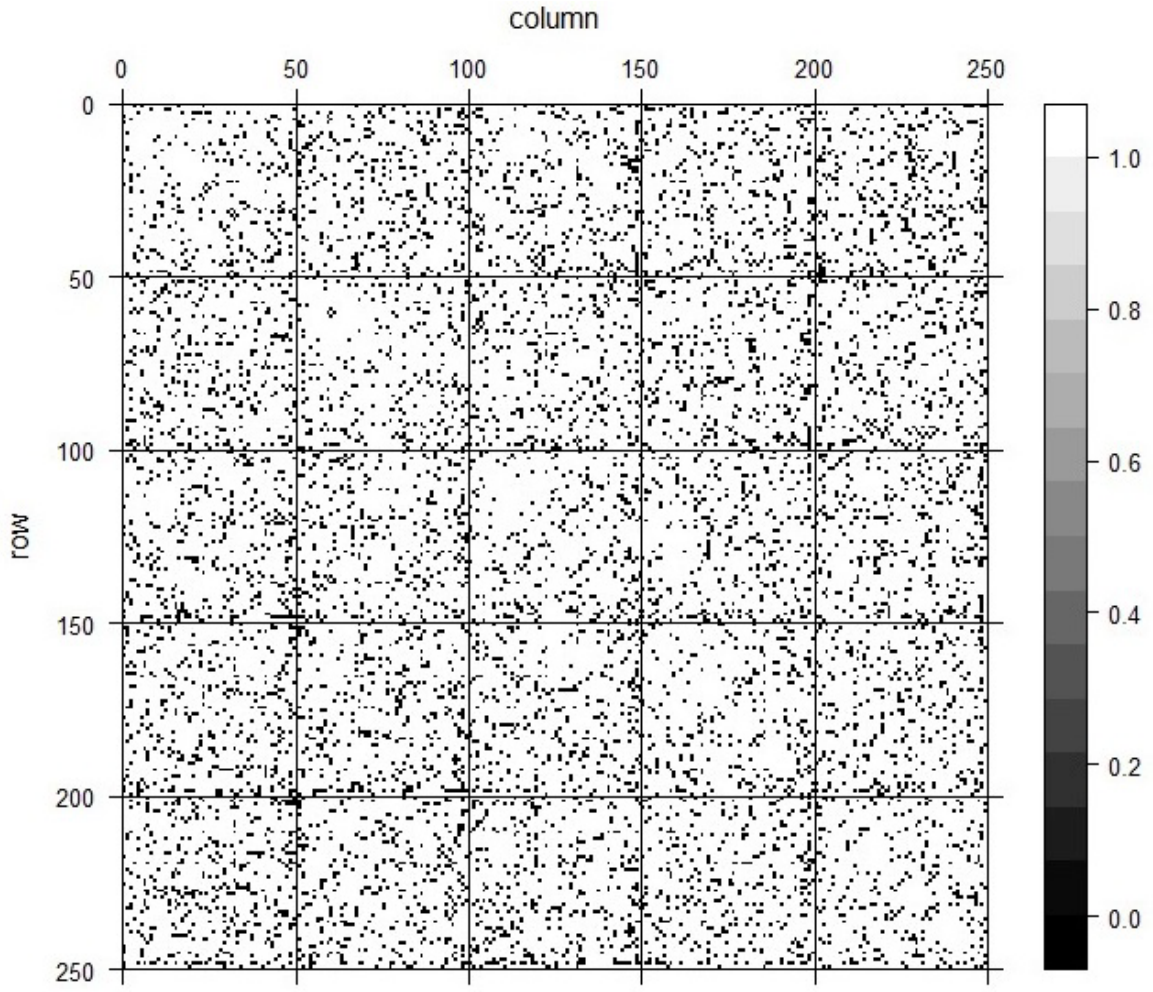




員間の関係

から推定）

[Kolar+etal,2010]



NASDAQ 銘柄からランダム抽出した50 銘柄.
株価データを用いた分散共分散選択. 時間差も考慮.
(2011 年1 月4 日から2014 年12 月31 日まで)
(Lie Michael, Bachelor thesis)

その他のスパース性

スパース正則化はL1正則化だけではない.

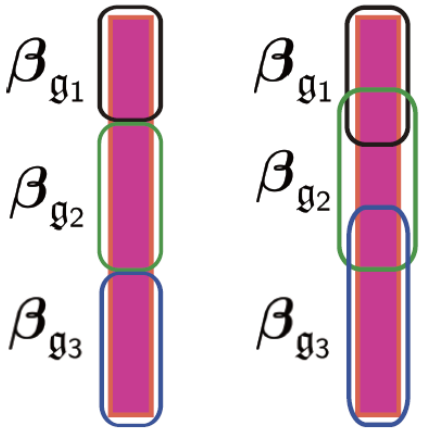
他にも以下のようなより構造を持った正則化がある.

構造的正則化

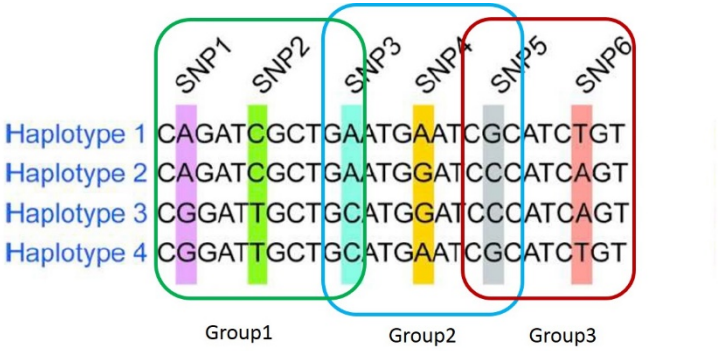
- グループ正則化：変数のグループごと 0 にする.
- 一般化連結正則化
- トレースノルム正則化

グループ正則化

$$\psi(\beta) = C \sum_{\mathfrak{g} \in \mathfrak{G}} \|\beta_{\mathfrak{g}}\|$$



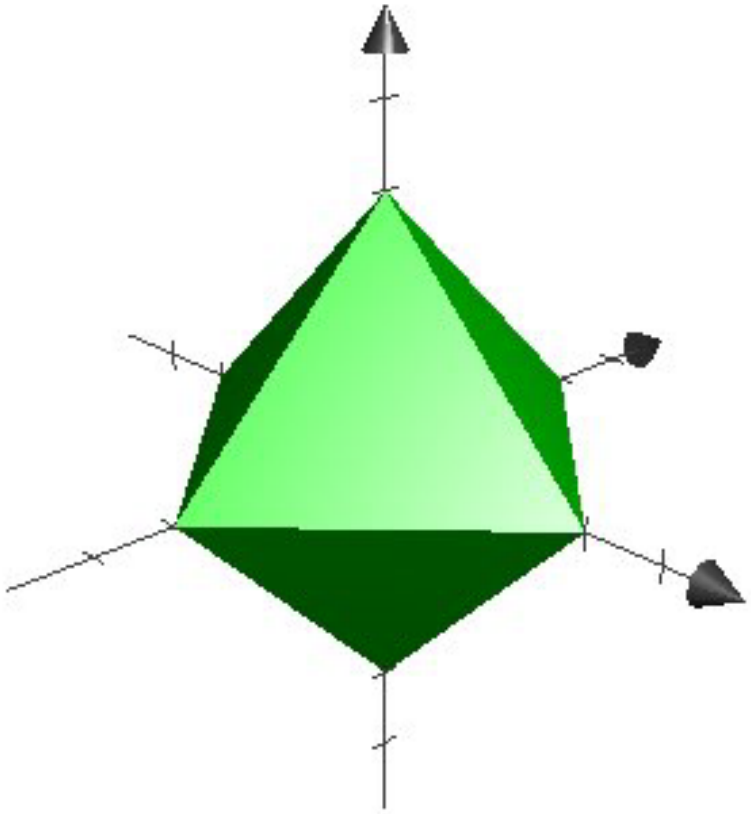
- グループごとに正則化
- グループ全体が0になりやすい.



Genome Wide Association Study (GWAS)
[Balding `06, McCarthy et al. `08]

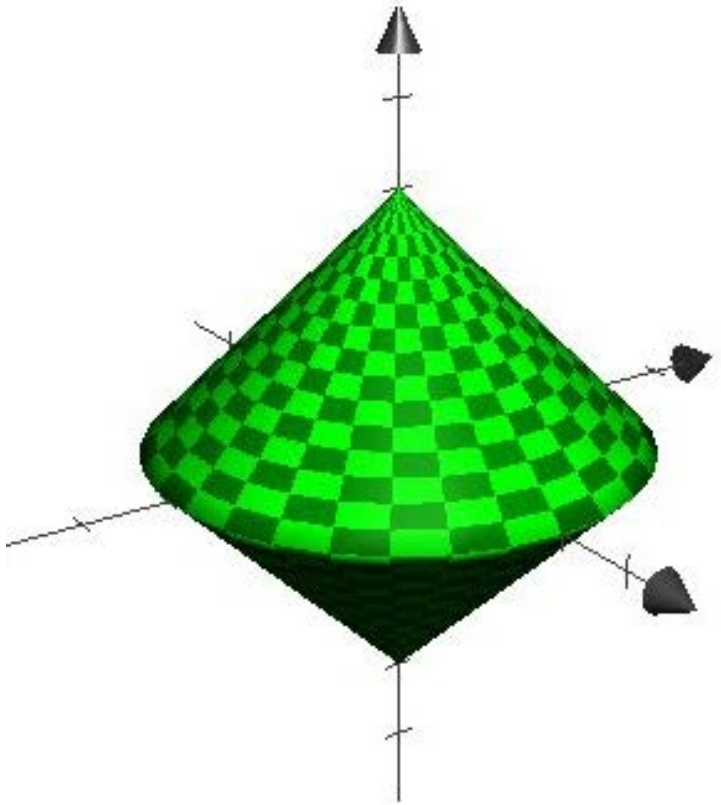
グループ正則化の概形

Lasso



$$|\beta_1| + |\beta_2| + |\beta_3| \leq 1$$

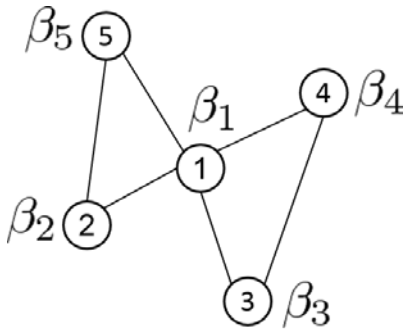
Group Lasso

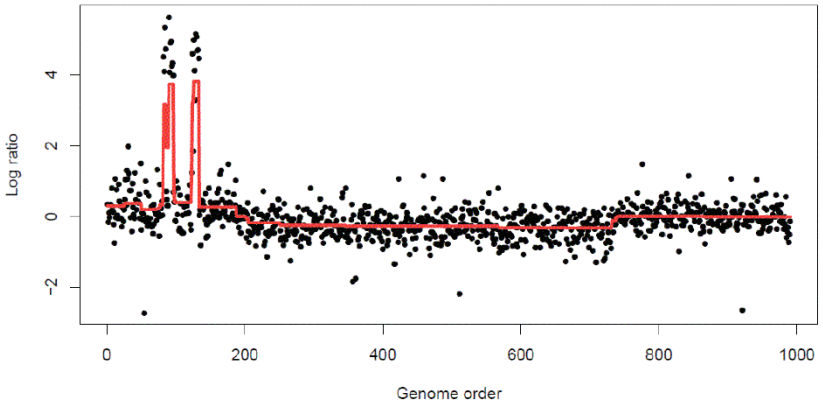


$$\sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2} + |\beta_3| \leq 1$$

一般化連結正則化（Fused Lasso）

$$\psi(\beta) = \sum_{(i,j)\in E} |\beta_i - \beta_j|$$





Fused lasso による遺伝子データ解析
[Tibshirani and Taylor `11]

TVデノイジング
（パッチを使わないデノイジング）
[Chambolle `04, Mairal et al., 2009]

背景切り出し [Mairal et al.: 2011]

テスト画像　L1正則化　L1/L2グループ正則化　一般化連結正則化

低ランク行列補完

ベクトルから**行列**の学習へ

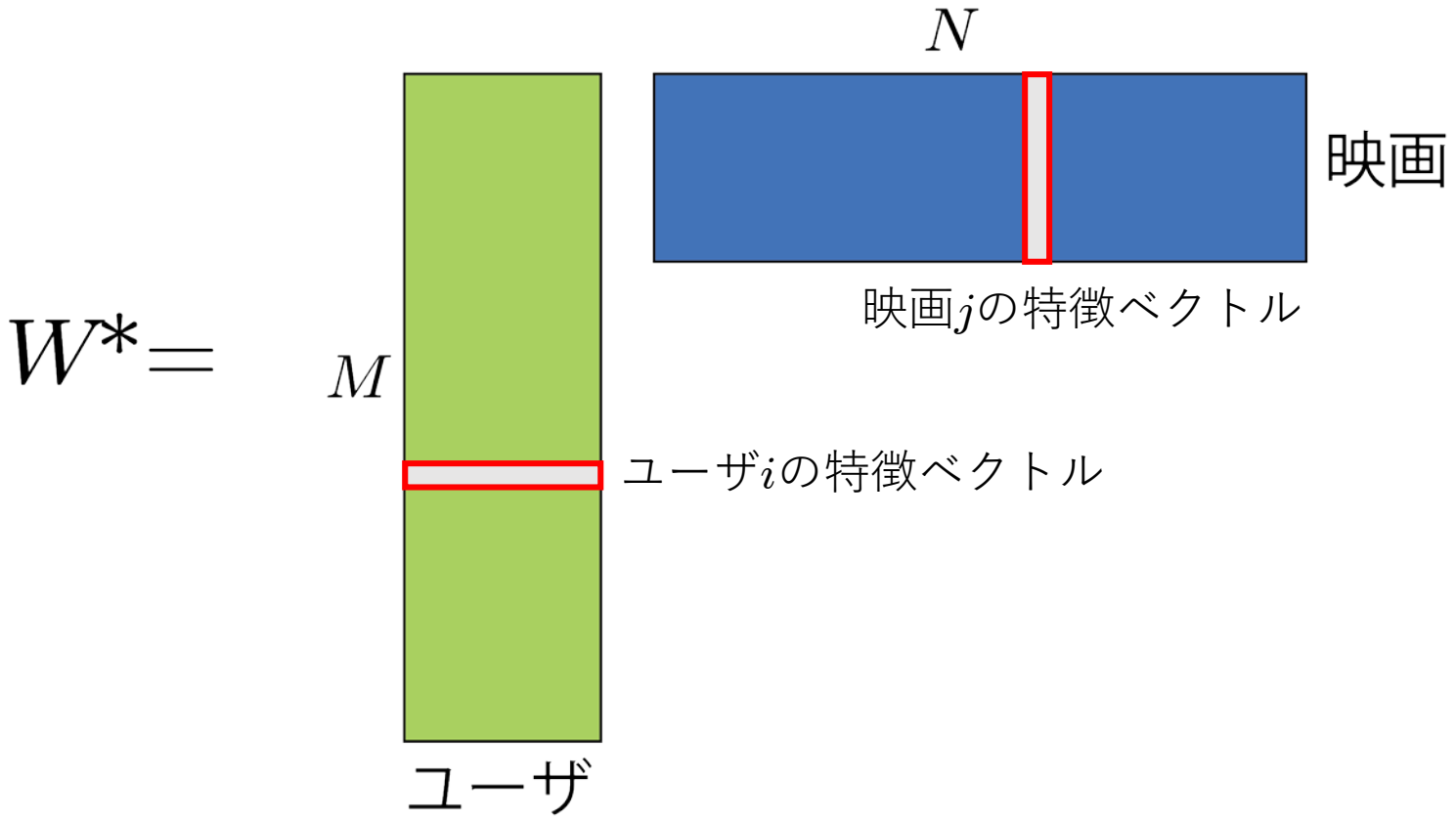
- 推薦システム

	映画 A	映画 B	映画 C	・・・	映画 X
ユーザ 1	4	8	4	・・・	2
ユーザ 2	2	4	2	・・・	1
ユーザ 3	2	4	2	・・・	1
⋮					

ランク 1 と仮定

各ユーザーが各映画をどれだけ好むかという部分的情報がある.
→　残りの部分（*の部分）を埋めたい.
　　低ランク行列補完で可能.

e.g., Netflix prize (100万ドルの賞金,　48万ユーザ×１万8千映画)



低ランク行列の学習は「ユーザ」と「映画」の低次元表現を学習することに他ならない.
→交互最適化法やトレースノルム正則化法で学習可能

推定誤差 $O\left(\frac{r(M+N)}{n}\right) \ll O\left(\frac{MN}{n}\right)$ (低ランク性を利用しない最小二乗法)

r:ランク

スパース表現，辞書学習

(a) (b)

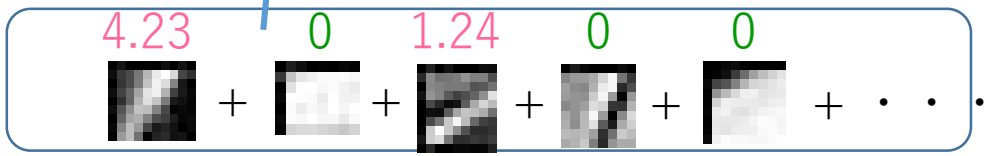
Mairal, Elad and Sapiro: Sparse Representation for Color Image Restoration. *IEEE Transactions on Image Processing*, Vol. 17, No. 1, 2008.

低ランク行列推定による辞書学習

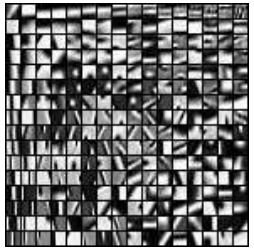
スパースコーディング

観測画像 x = 辞書（イメージパッチ）D × スパースな係数 α + ノイズ ξ

$$x = D\alpha + \xi$$



学習された辞書



$$(\hat{D}, \hat{\alpha}) = \underset{D\in\mathbb{R}^{p\times k}, \alpha_i\in\mathbb{R}^k}{\arg\min} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|x_i - D\alpha_i\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} \|\alpha_i\|_1$$

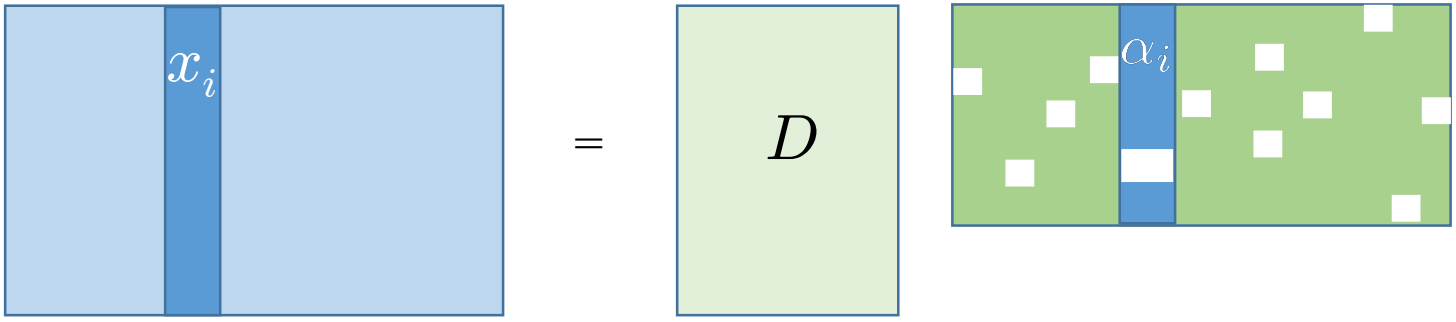
$$\text{s.t.} \quad \|D_{:,j}\| \le 1 \quad (j = 1, \ldots, k)$$

各画像がスパースな係数で表現できるような辞書を構成

x_i $(i=1,\ldots,n)$ ：n枚の画像

α_i $(i=1,\ldots,n)$ ：n枚の画像それぞれの係数（学習対象）

D：全画像共通の辞書（学習対象）



実際はイメージパッチ（D）と係数（α）を交互に最適化して学習.

スパースコーディングを用いたデノイジング

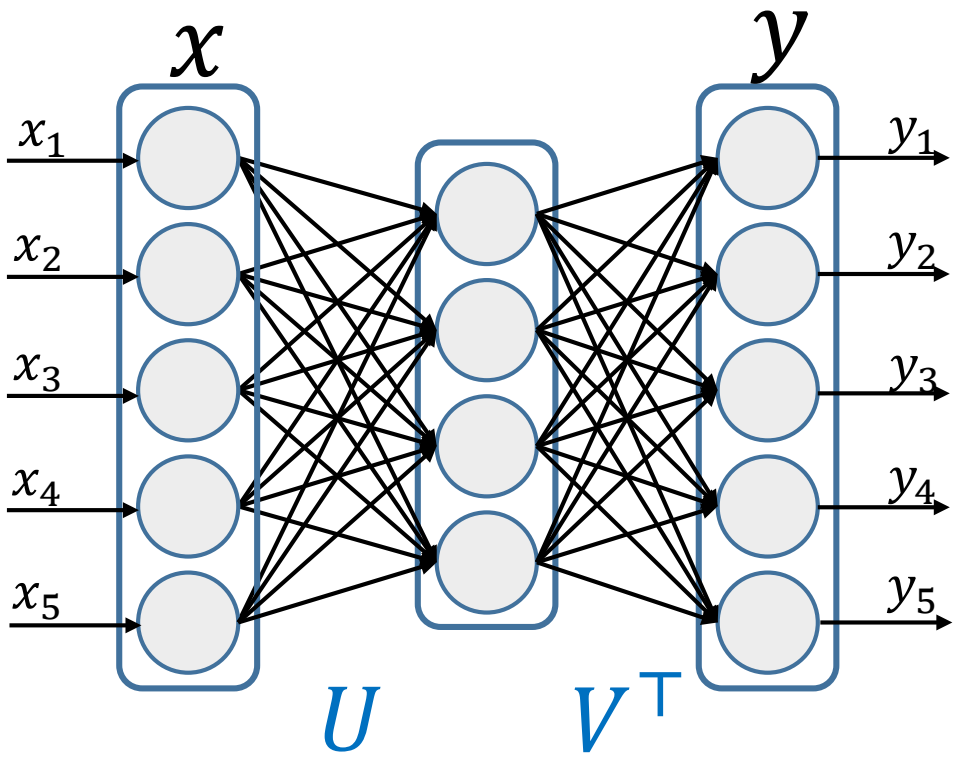
This image is taken from MLSS2012 tutorial by F. Bach.

Mairal et al.: Non-local sparse models for image restoration.
In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2009.

スパース表現を用いた画像補完

Mairal, Elad and Sapiro: Sparse Representation for Color Image Restoration. *IEEE Transactions on Image Processing*, Vol. 17, No. 1, 2008.

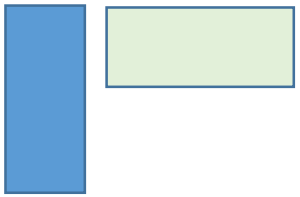
3層ニューラルネットワーク



$$f(x) = V^\top U x$$

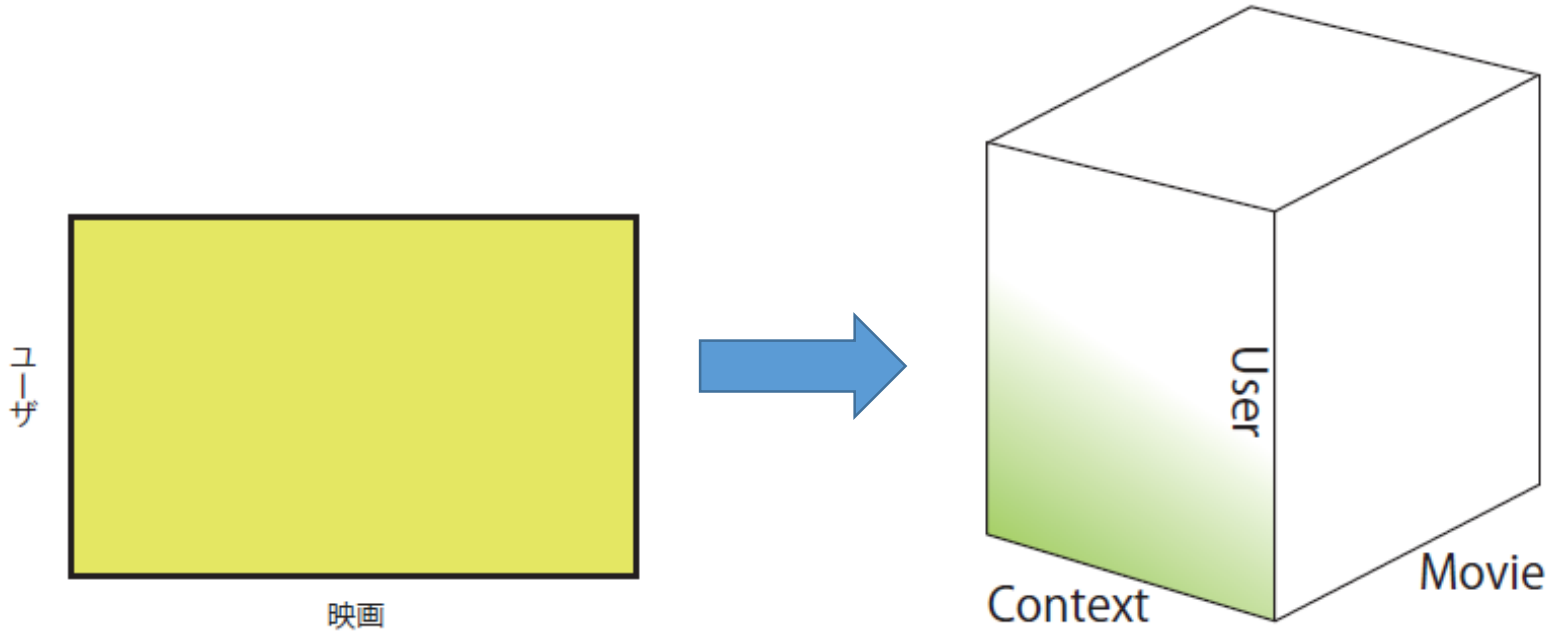
$$f(x) = V^\top h(Ux)$$

低ランク行列



- 縮小ランク回帰
- マルチタスク学習

テンソルへの拡張



行列

$$X_{ij} = \sum_{r=1}^{d} u_{r,i}^{(1)} u_{r,j}^{(2)}$$

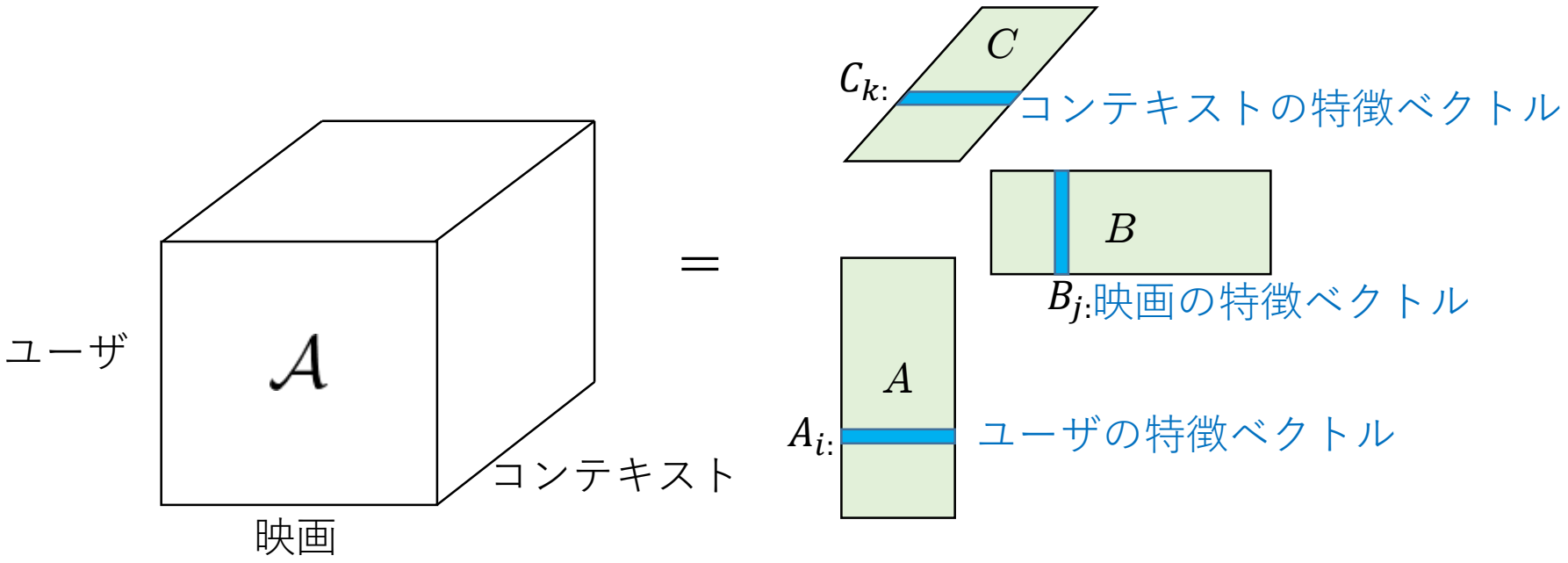
テンソル

$$X_{ijk} = \sum_{r=1}^{d} u_{r,i}^{(1)} u_{r,j}^{(2)} u_{r,k}^{(3)}$$

応用

- 推薦システム
- 自然言語処理（単語のベクトル表現）
- 時空間データ解析
- 関係データ解析
- マルチタスク学習

低ランクテンソルモデル



$$\mathcal{A}_{ijk} = A_{i1}B_{j1}C_{k1} + A_{i2}B_{j2}C_{k2} + \cdots + A_{id}B_{jd}C_{kd}$$

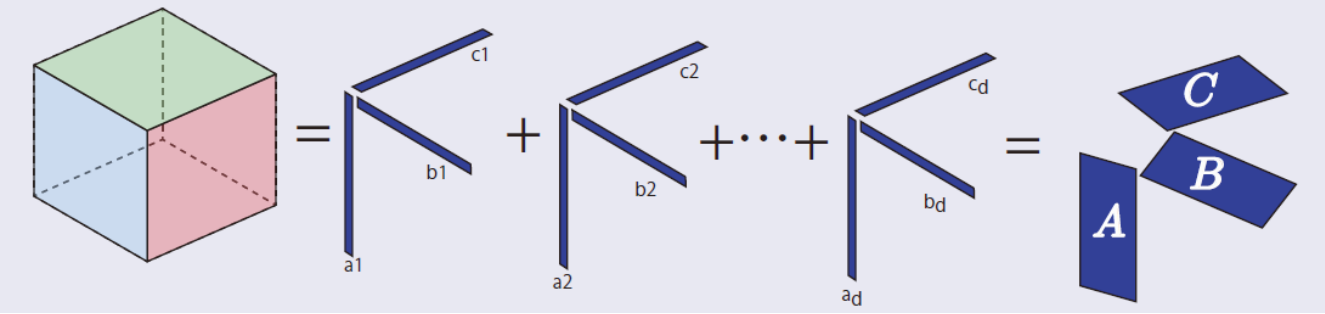
ユーザiが持つ因子1の重み

映画jが持つ因子1の重み

コンテキストkが持つ因子1の重み

テンソル分解

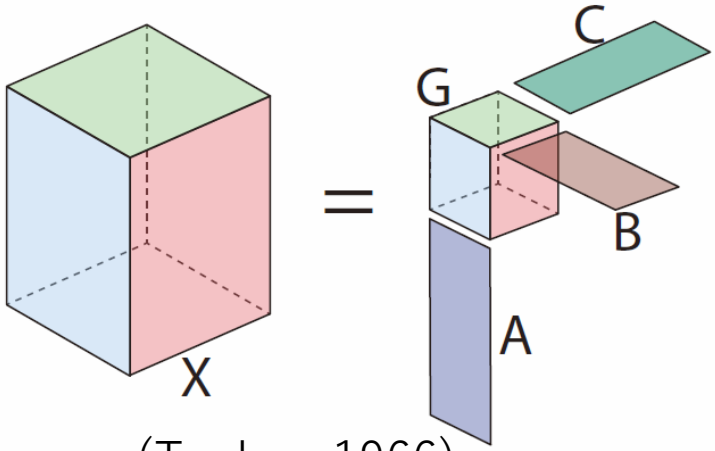
CP-分解/ランク



Canonical Polyadic 分解(Hitchcock, 1927; Hitchcock, 1927)
CANDECOMP/PARAFAC (Carroll & Chang, 1970; Harshman, 1970)

計算はNP困難，ある条件の元で分解の一意性あり

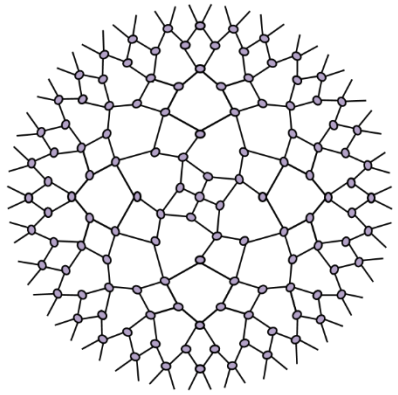
Tucker-分解/ランク



(Tucker, 1966)

特異値分解で計算可能

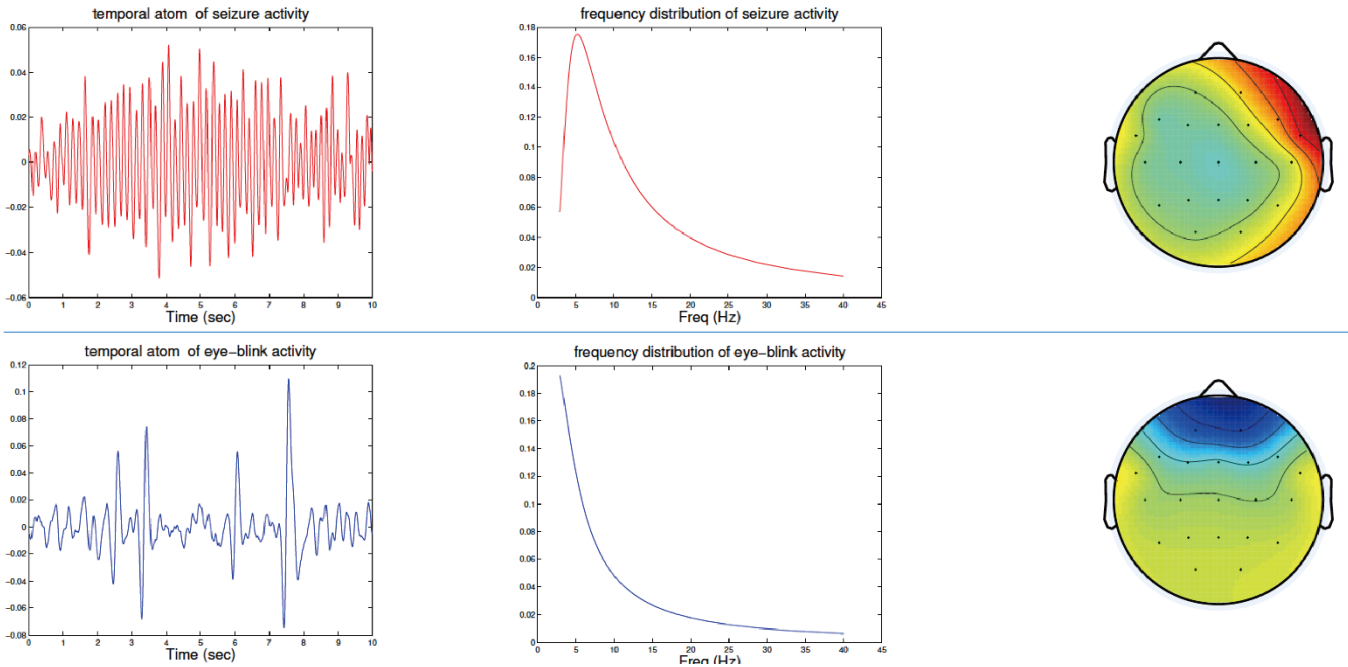
テンソルネットワーク



(物理学で発展)

時空間解析への応用例

EEGデータ解析

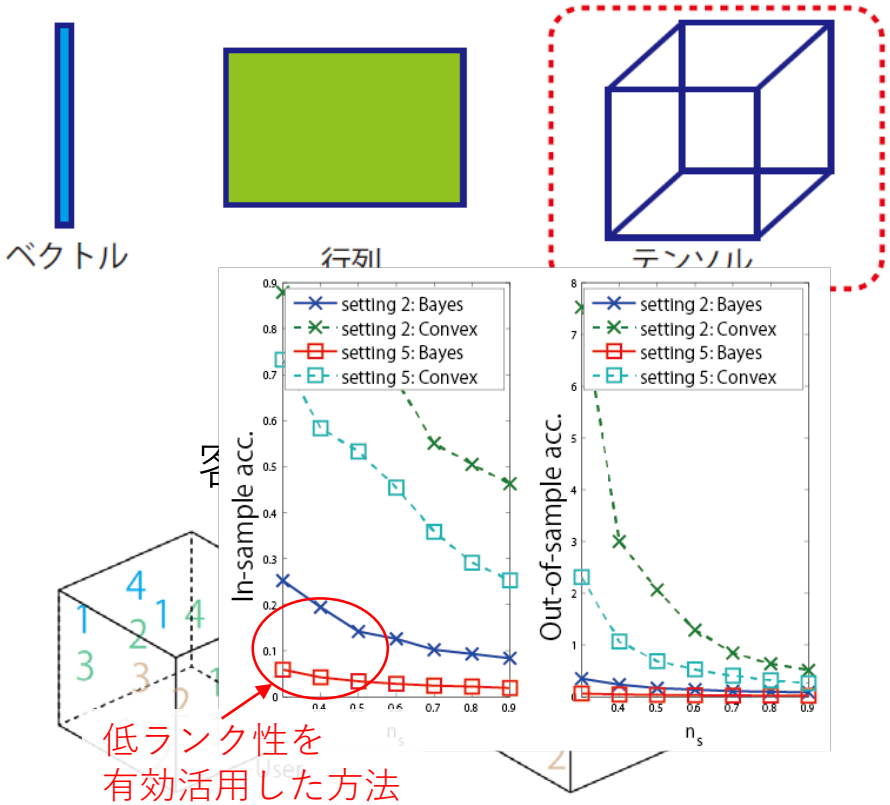


time × frequency × space

CP分解

EEG monitoring: Epileptic seizure onset localization (De Vos et al., 2007)

テンソルの学習



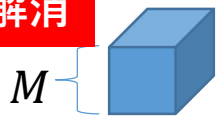
通常(最小二乗法)

$$M^K/n$$

低ランク性を利用した方法
(ベイズ推定法等)

$$dKM/n$$

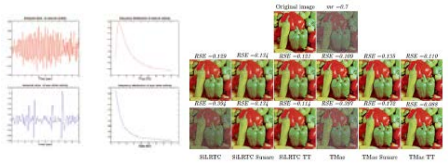
次元の呪いを解消



K:次元
d:ランク($\ll M$)

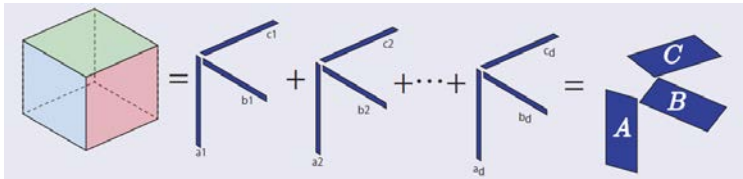
[Suzuki,ICML2015;Kanagawa+et al.,ICML2016;Suzuki+et al.,NIPS2016]

他の応用例：
-時空間データ解析
-画像処理
-自然言語処理
-深層学習



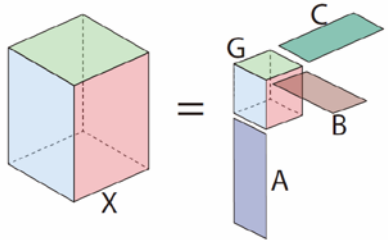
テンソルの“ランク”

CP-分解/ランク



Canonical Polyadic 分解(Hitchcock, 1927; Hitchcock, 1927)
CANDECOMP/PARAFAC (Carroll & Chang, 1970; Harshman, 1970)

Tucker-分解/ランク



(Tucker, 1966)

その他の話題

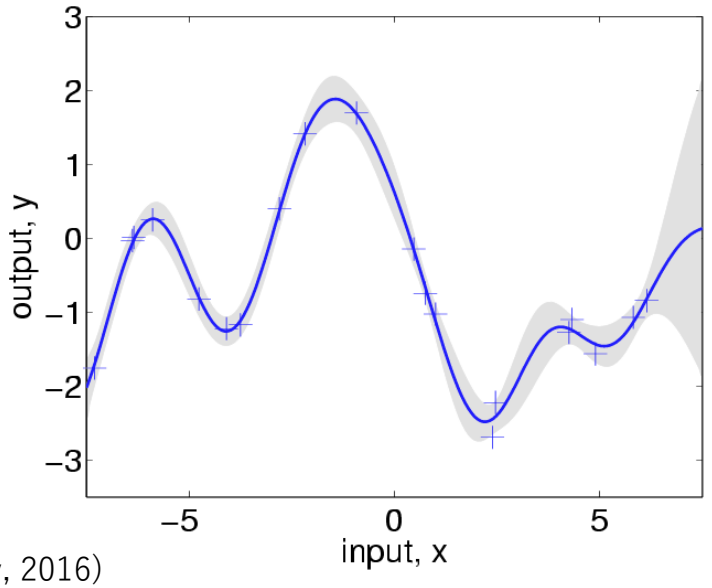
ガウス過程回帰

- ガウス過程を事前分布を用いたベイズ推定

$$p(f|D_n) = \frac{p(D_n|f)\Pi(f)}{\int p(D_n|f)\Pi(\mathrm{d}f)}$$

事後分布
無限次元関数空間上の分布

ガウス過程事前分布



ベイズ最適化：
化合物の探索で大きな成果

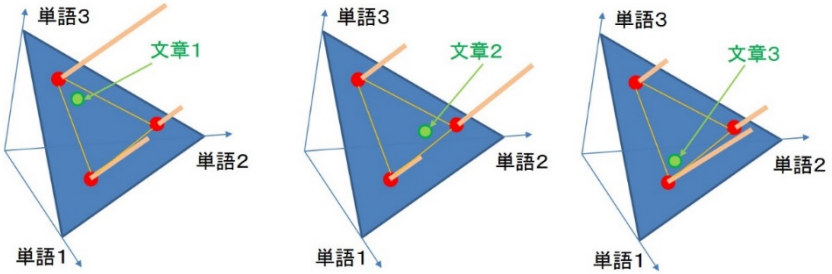
(Seko et al., Phys. Rev. B., 2014; Ueno et al.: Materials Discovery, 2016)

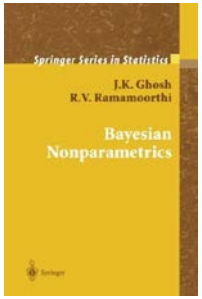
関連技術：ノンパラメトリックベイズ

- Dirichlet過程

  文章分類，トピックモデル

空間点過程：
Levy過程→Poisson過程
→Gamma過程→Dirichlet過程

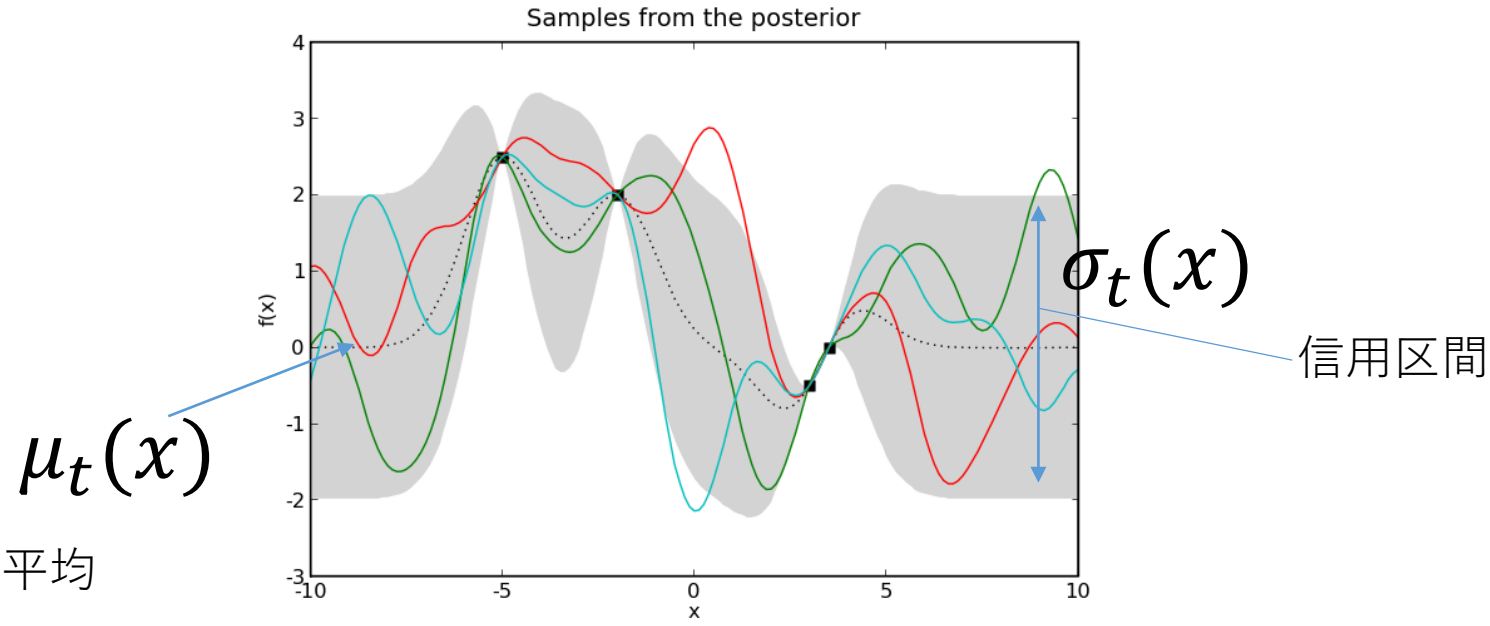




ベイズ最適化

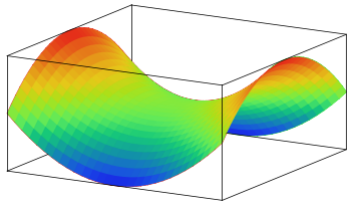
設定：関数f(x)の最大化をしたい.
しかし，関数値を求めるのにコストがかかる.
なるべく少ない回数で最大値に到達したい.

ベイズ最適化
「ベイズ推定（ガウス過程回帰）を利用して適切な入力点xを選択」

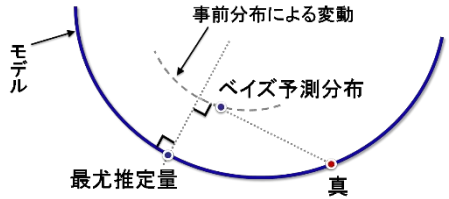


情報幾何学

- 統計モデルをリーマン多様体とみなす
  - Fisher計量，α -接続
- 座標変換に不変な性質を捉える



- 高次漸近論，ニューラルネットワークの理論，独立成分分析
- ベイズ予測分布の改良 (Komaki, 2006)
- マルチスケールブートストラップ法 (Shimodaira, 2004)

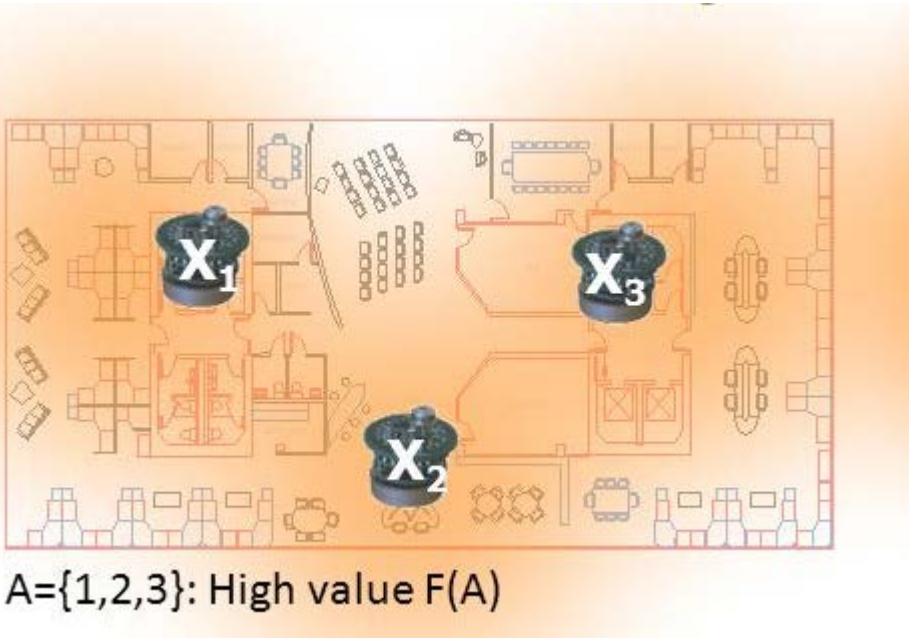


甘利俊一

組合せ最適化（離散最適化）

最短路問題

センサー配置問題



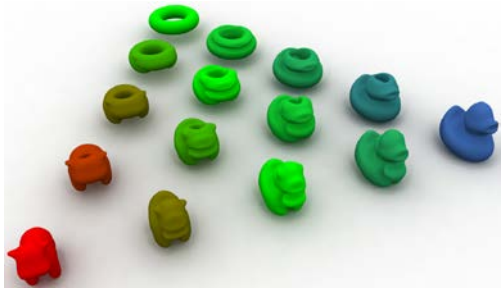
少ない労力で最大の効果

学習理論

$$\sup_{f\in\mathcal{F}}\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}f(x_i)-\mathrm{E}[f]\right| < ?$$

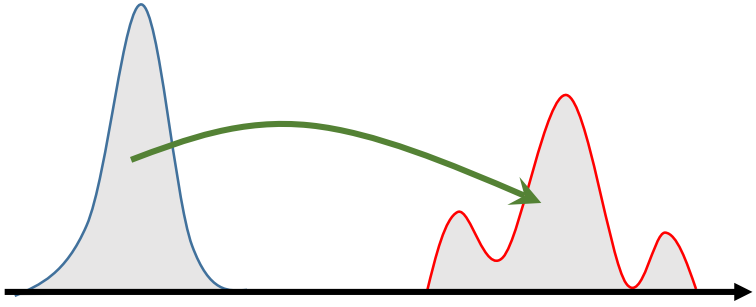
- 経験過程の理論
  - Rademacher複雑度，VC次元，メトリック・エントロピー
- 確率集中不等式
  - Talagrandの集中不等式，ガウシアン集中不等式，Hoeffdingの不等式，Bernsteinの不等式
- 対数ソボレフ不等式

  → 最適輸送理論，Wasserstein幾何



Gaspard Monge　Leonid Kantorovich

$$\inf_{\pi\in\Pi(\mu,\nu)}\int c(x,y)\mathrm{d}\pi(x,y)=\sup\left\{\int\psi\mathrm{d}\mu-\int\phi\mathrm{d}\nu\mid\psi(x)+\phi(y)\le c(x,y)\right\}$$



Felix Otto

Cedric Villani

Deep Learning
深層学習

機械学習と人工知能の歴史

1946： ENIAC，高い計算能力
フォン・ノイマン「俺の次に頭の良い奴ができた」
1952： A. Samuelによるチェッカーズプログラム

統計的学習

ルールベース

1960年代前半：
ELIZA（イライザ），
擬似心理療法士

1980年代：
エキスパートシステム

人手による学習ルールの作りこみの限界
「膨大な数の例外」

Siriなどにつながる

1957：Perceptron，ニューラルネットワークの先駆け
第一次ニューラルネットワークブーム
1963：線形サポートベクトルマシン

線形モデルの限界

1980年代：多層パーセプトロン，誤差逆伝搬，
畳み込みネット
第二次ニューラルネットワークブーム
1992： 非線形サポートベクトルマシン
（カーネル法）

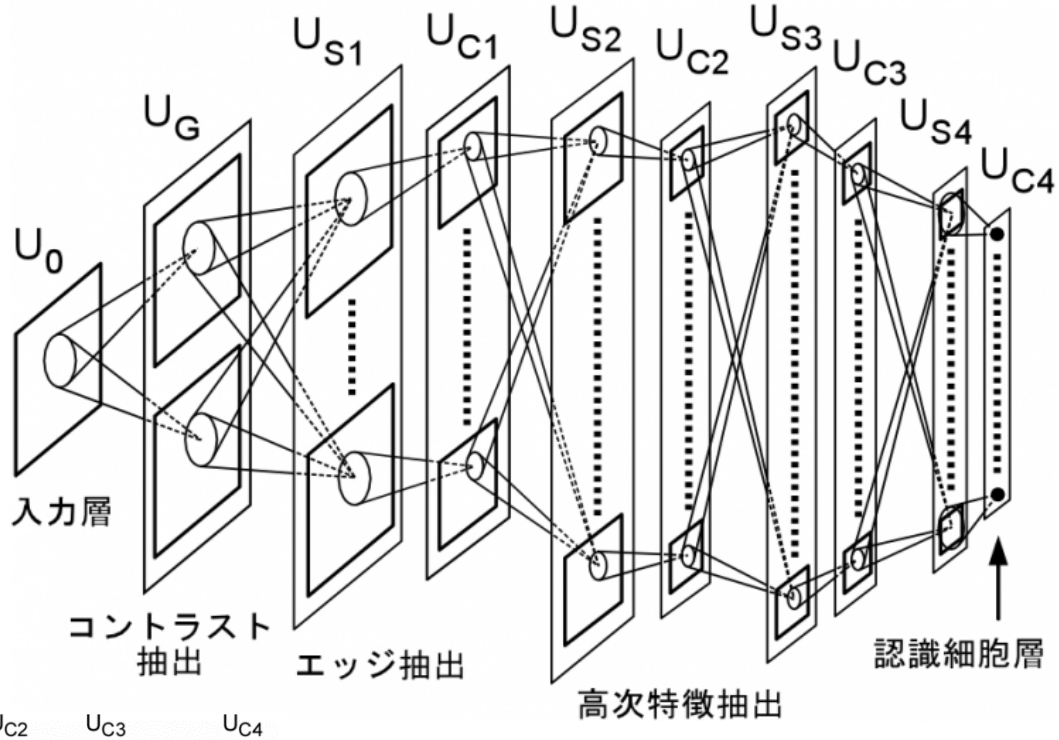
非凸性の問題

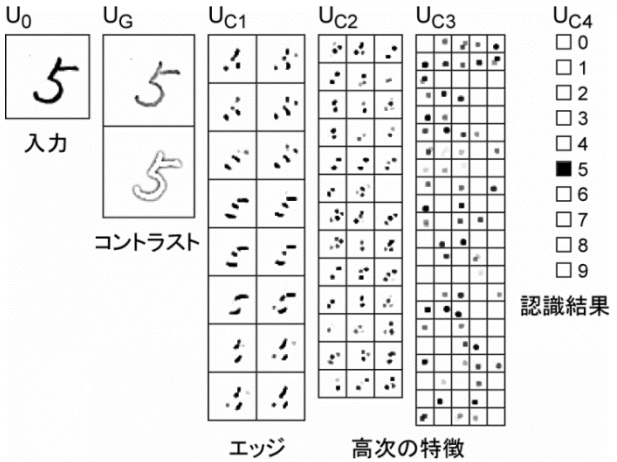
1996： スパース学習（Lasso）
2003： トピックモデル（LDA）
2012： Supervision（Alex-net）
第三次ニューラルネットワークブーム

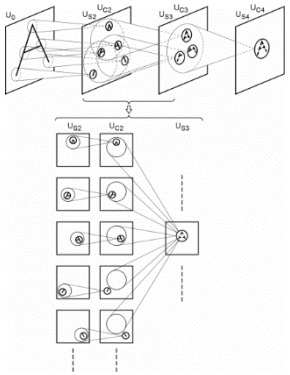
データの増加
＋計算機の強化

ネオコグニトロン

[福島,79]



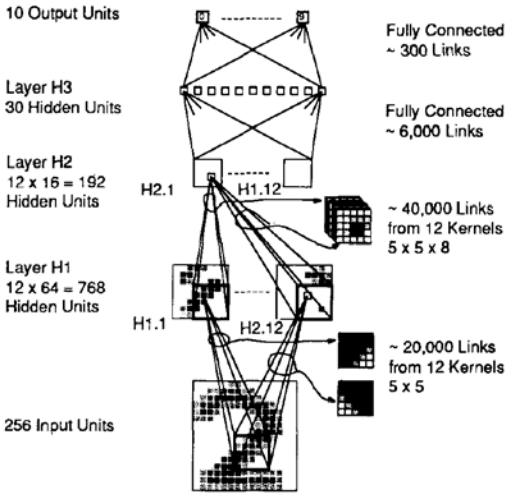




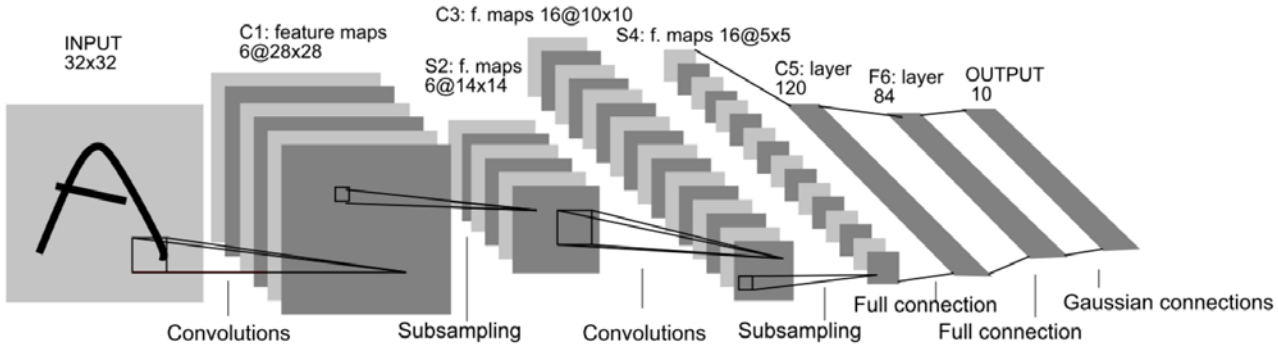
- 人間の脳を模倣
- 畳み込みネットの初期型
- 自己組織型学習
  →素子を足してゆく

LeNet

[LeCun+etal,89]



LeNet-5
[LeCun etal,98]



- 畳み込み＋プーリング：現在も使われている構造
- 誤差逆伝搬法でパラメータを更新
- 手書き文字認識データセット（MNIST）で９９％の精度を達成

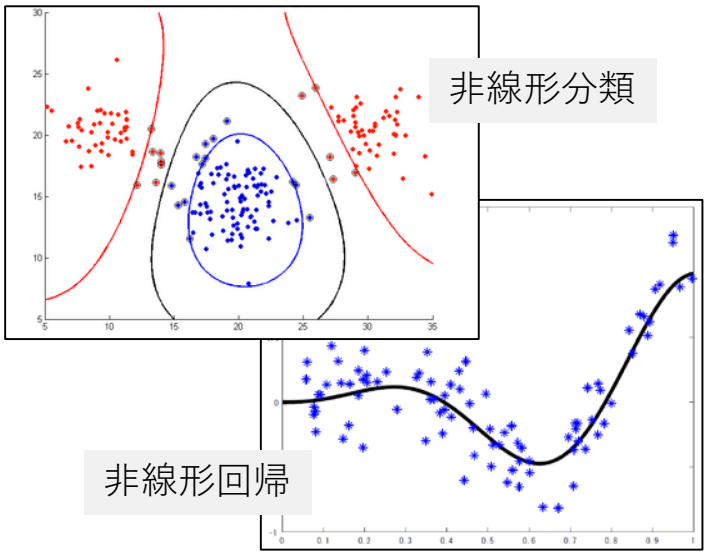
カーネル法

$$\min_{\alpha_i, b} \sum_{i=1}^{n} \max\left\{1 - y_i\left(\sum_{j=1}^{n} k(x_j, x_i)\alpha_j + b\right), 0\right\} + C\sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j k(x_i, x_j)$$

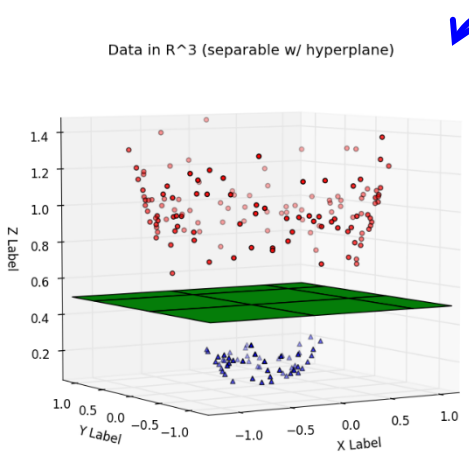
カーネルトリック

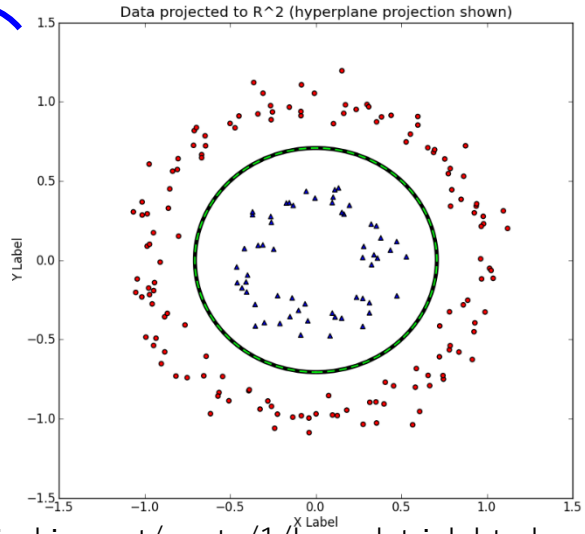
$$k(x, x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{H}}$$

非線形写像 ϕ



http://wiki.eigenvector.com/index.php?title=Svmda





http://www.eric-kim.net/eric-kim-net/posts/1/kernel_trick.html

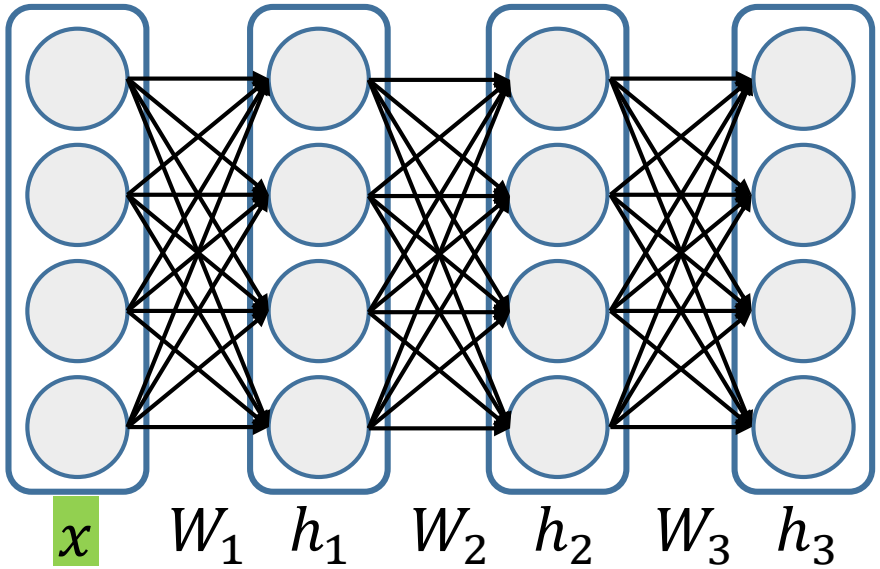
関数解析：再生核ヒルベルト空間の理論

- **凸最適化問題**で解ける.
  - ✓ 効率的な最適化手法が存在.
  - ✓ 解は一つ. 誰が解いても同じ答えが返ってくる.
- **VC理論・経験過程の理論**による汎化誤差の保証.

$$\|\hat{f} - f_0\|_{L_2}^2 \leq O_p(n^{-\frac{1}{1+s}})$$

Vladimir Vapnik

深層学習の構造



基本的に「線形変換」と「非線形活性化関数」の繰り返し．

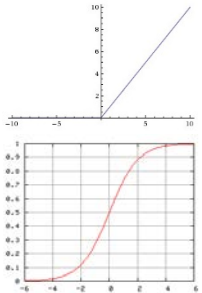
x → W_1x → $h_1(W_1x)$ → $W_2h_1(W_1x)$ → $h_2(W_2h_1(W_1x))$

入力　線形変換　非線形変換　線形変換　非線形変換

$$h_1(u) = [h_{11}(u_1), h_{12}(u_2), \ldots, h_{1d}(u_d)]^T$$

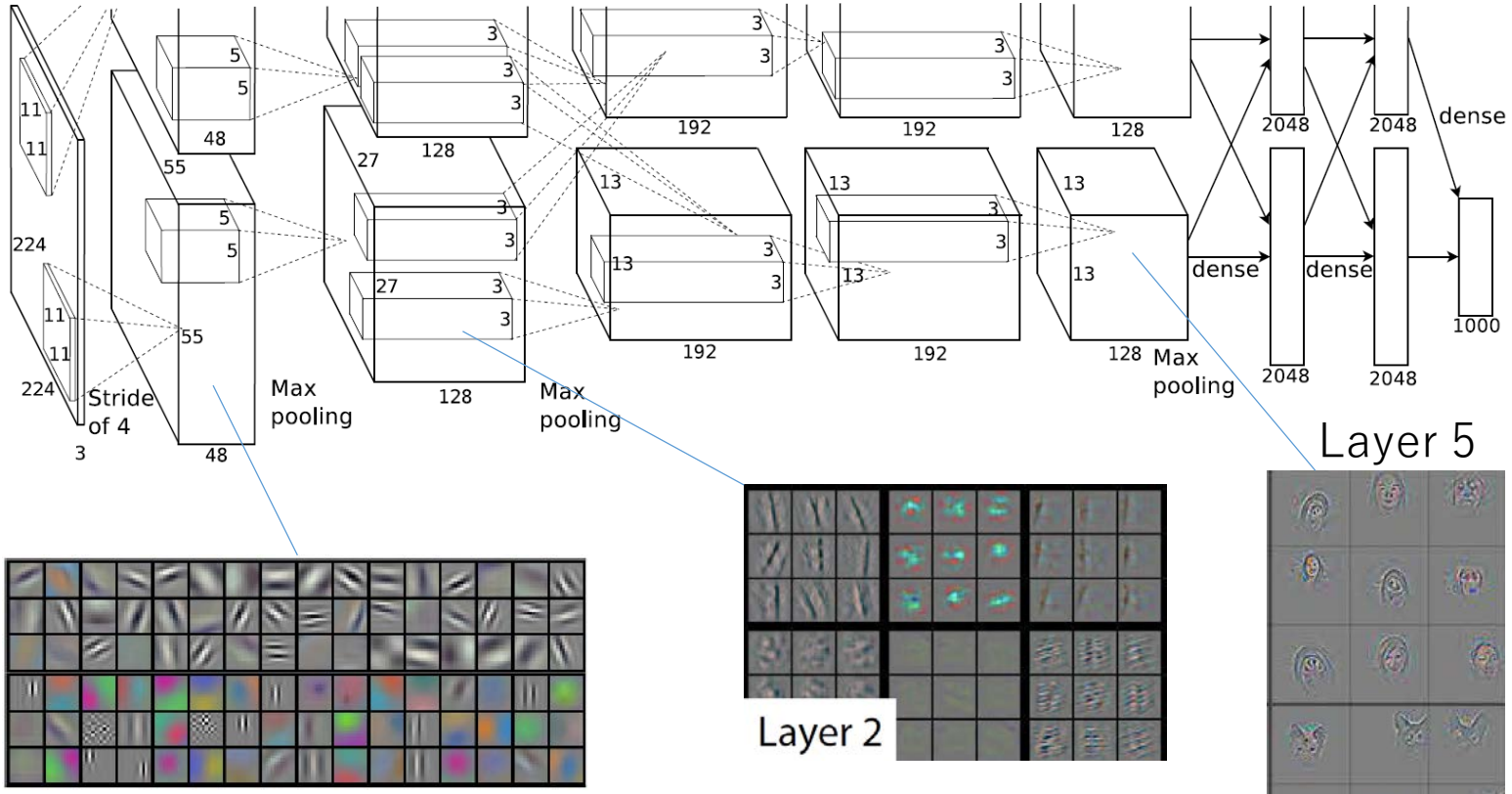
活性化関数は通常要素ごとにかかる．Poolingのように要素ごとでない非線形変換もある．

- ☆ReLU (Rectified Linear Unit)：　$h(u) = \max\{u, 0\}$
- シグモイド関数：　$h(u) = \dfrac{1}{1+e^{-u}}$



Alex-net [Krizhevsky, Sutskever + Hinton, 2012]

畳み込みニューラルネットを 5 層積み重ね（+pooling+3層の全結合層）

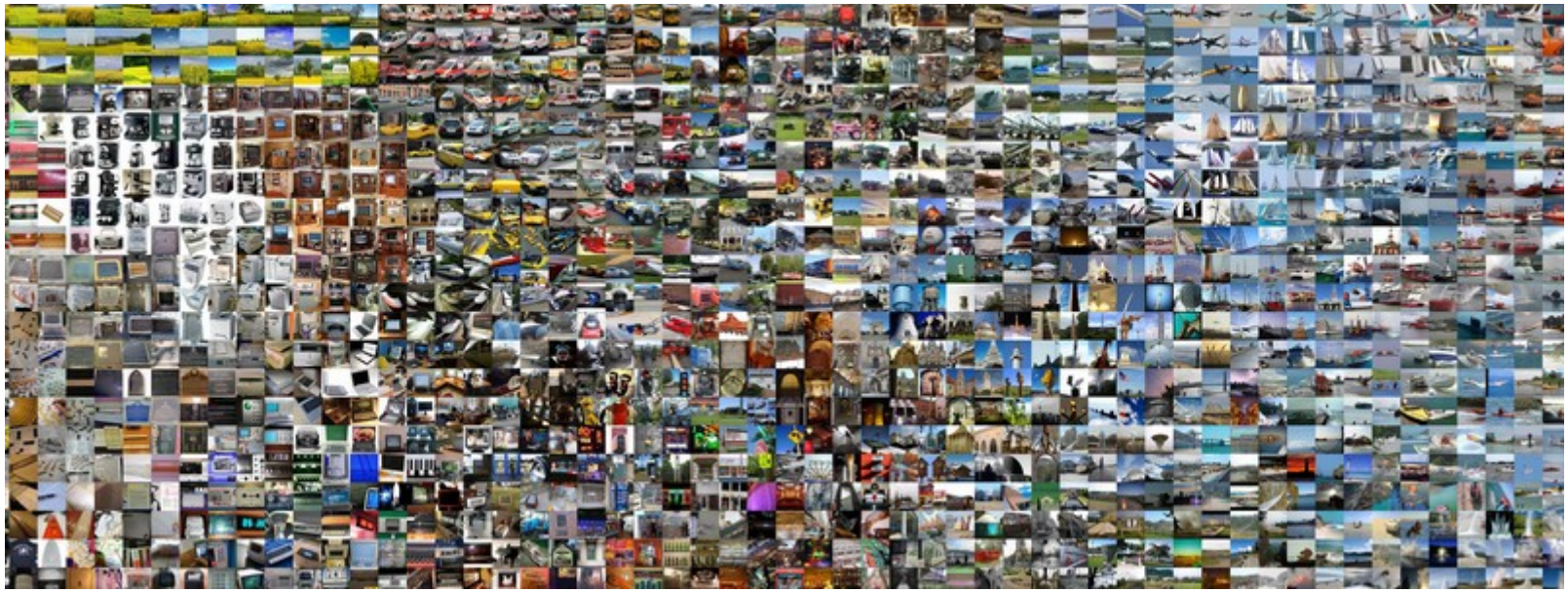


イメージパッチのようなものが学習されている

⇒　特徴量の自動学習

中間層ではより抽象的な情報がコードされる

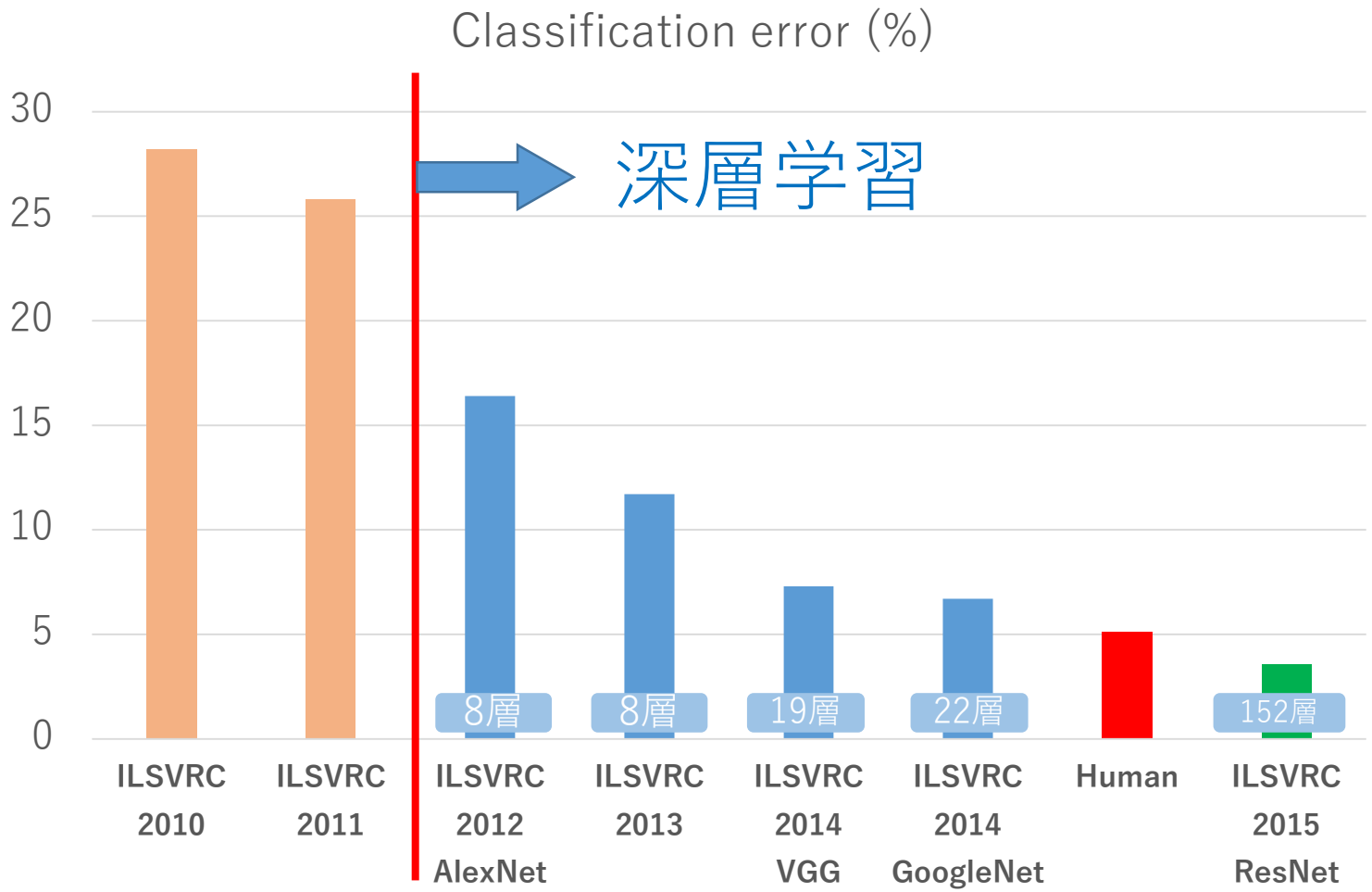
ImageNet



ImageNet: 21,841カテゴリ，14,197,122枚の訓練画像データ

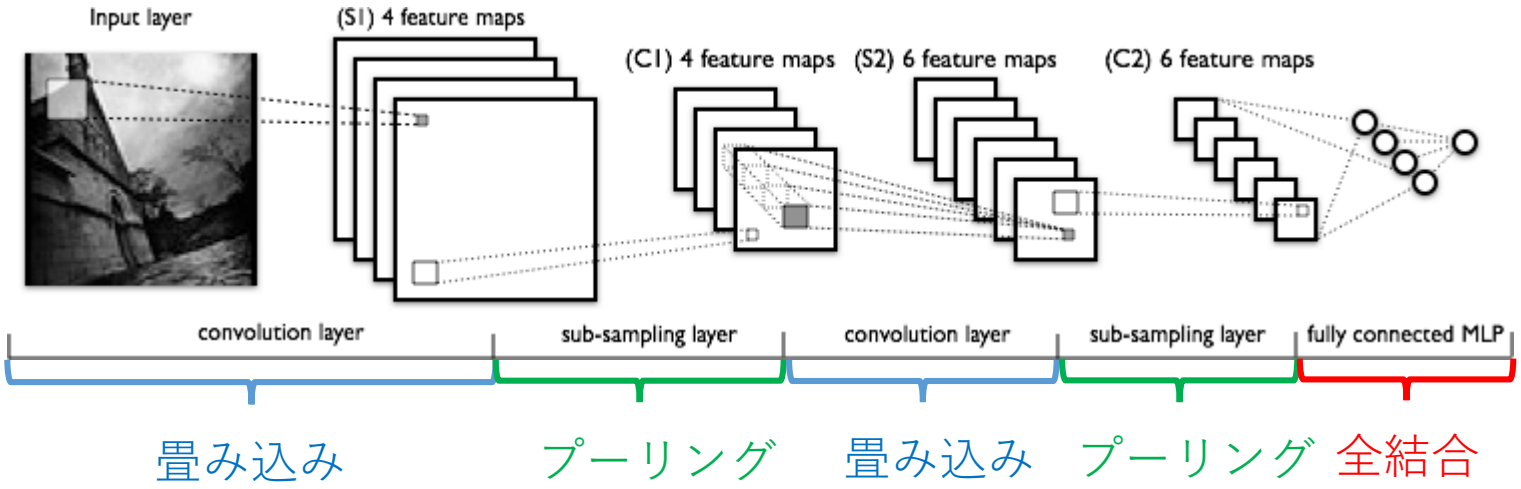
[J. Deng, W. Dong, R. Socher, L.-J. Li, K. Li, and L. Fei-Fei.
ImageNet: A Large-Scale Hierarchical Image Database. In CVPR09, 2009.]

ImageNetデータにおける識別精度の変遷



ImageNet: 21841クラス，14,197,122枚の訓練画像データ
そのうち1000クラスでコンペティション

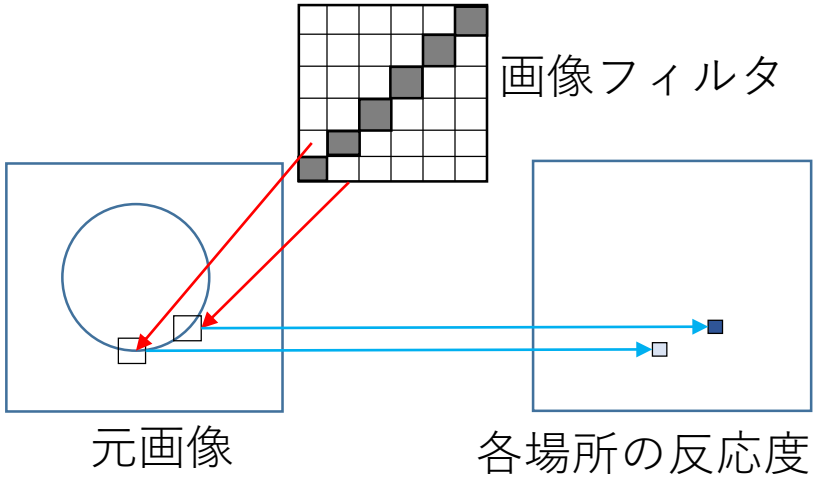
畳み込みニューラルネット (Convolutional Neural Network, CNN)

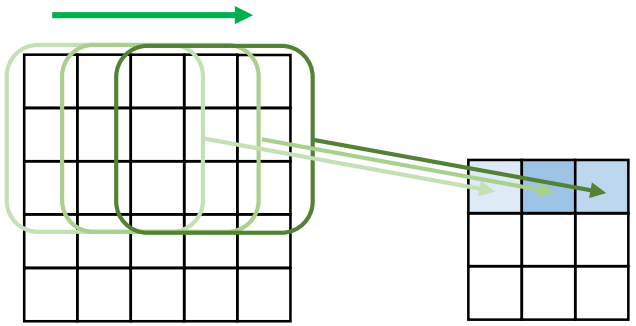


- 畳み込みとプーリングを交互に積み重ねる
- 最後に全結合層を重ねる.
  - 畳み込み (Convolution)：パターンの抽出
  - プーリング (Pooling)：移動不変性を獲得
  - 全結合 (Fully-connected)：最終的な判別器を構成

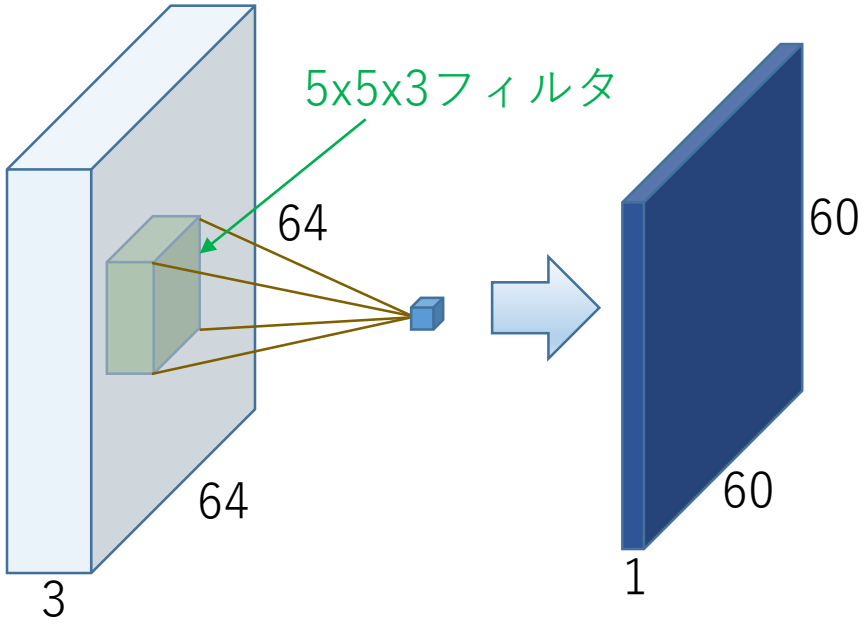
畳み込み層

$$X'_{i,j} = \sum_{k,l} X_{i+k,j+l} F_{k,l}$$

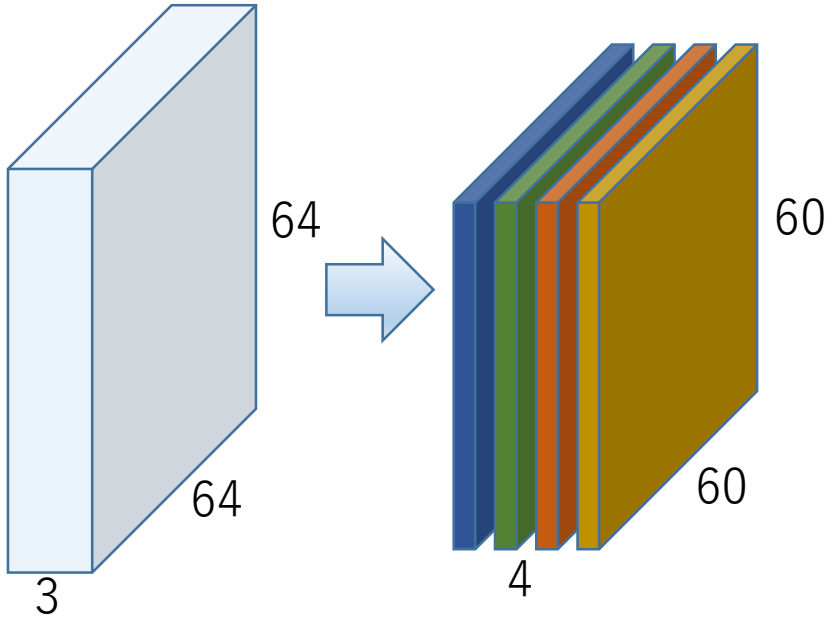




- 画像フィルタをずらしながら畳み込む.
- 複数のフィルタを用意して特徴量を構成.



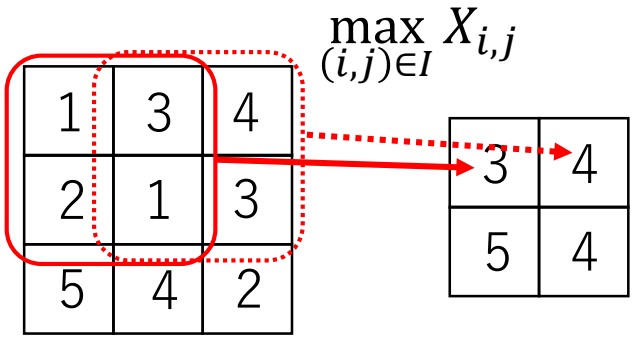
- RGBカラー画像は「深さ3」のデータ.
- 奥行きも入れたフィルターで畳み込み.



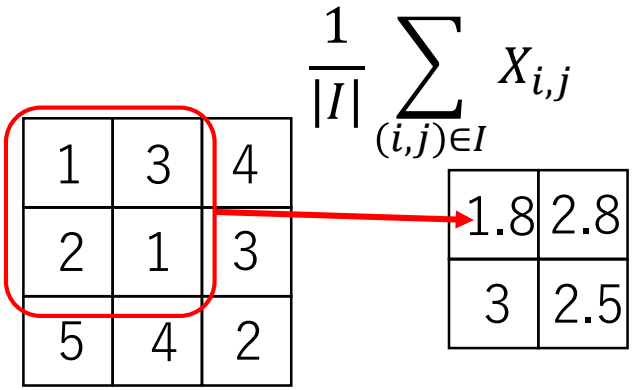
複数フィルタ

プーリング層

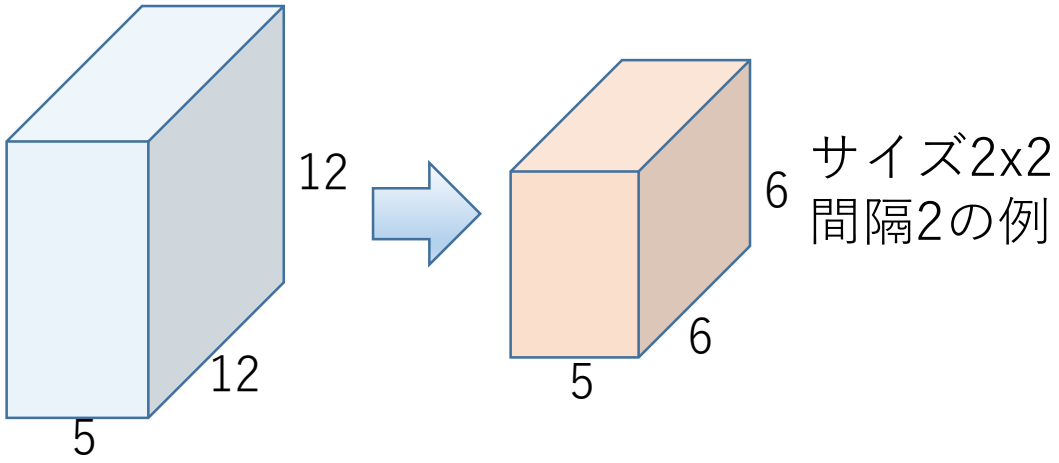
- ある特徴量に選択的に発火している箇所がその領域にあるか検出.
- 少しのずれを吸収する作用→移動不変性



Max-プーリング



Average-プーリング



損失関数最小化

経験損失（訓練誤差）

$$L(W) = \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, f(x_i, W))$$

$\ell(y, y') = (y - y')^2$ 二乗損失（回帰）

$\ell(y, y') = -\sum_{k=1}^{K} y_k \log(y'_k)$ Cross-entropy損失（多値判別）

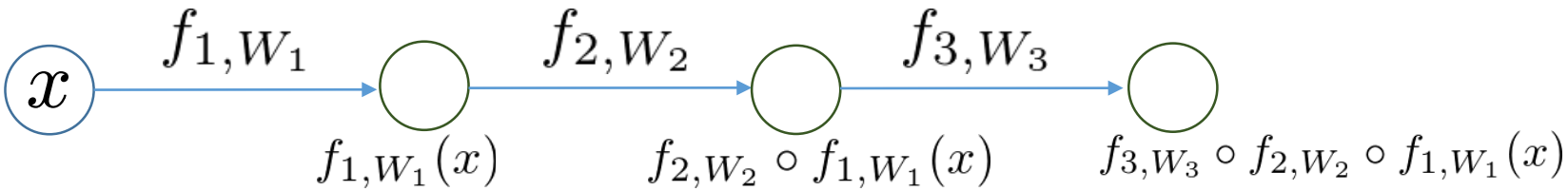
$$\min_W L(W)$$

$$W^t = W^{t-1} - \eta \partial_W L(W)$$

- 基本的には確率的勾配降下法 (SGD) で最適化を実行
- AdaGrad, Adam, Natural gradientといった方法で高速化

微分はどうやって求める？ → 誤差逆伝搬法

誤差逆伝搬法



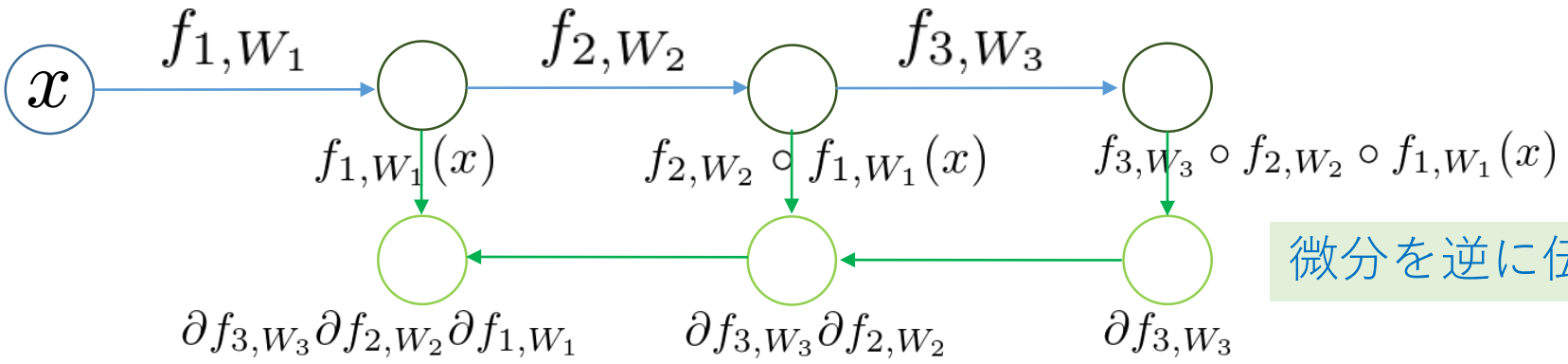
例： $f_{1,W_1}(x) = h(W_1 x)$

合成関数

$$f(x;W) = f_{3,W_3}(f_{2,W_2}(f_{1,W_1}(x)))$$
$$= f_{3,W_3} \circ f_{2,W_2} \circ f_{1,W_1}(x)$$

合成関数の微分

$$\frac{\partial f}{\partial W_1}(x) = \frac{\partial f_{3,W_3}}{\partial f_{2,W_2}} \frac{\partial f_{2,W_2}}{\partial f_{1,W_1}} \frac{\partial f_{1,W_1}}{\partial W_1}(x)$$



連鎖律を用いて微分を伝搬

$$\frac{\partial f}{\partial W_3}(x) = \frac{\partial f_{3,W_3}}{\partial W_3}\left(f_{2,W_2} \circ f_{3,W_3}(x)\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial W_2}(x) = \frac{\partial f_{3,W_3}}{\partial f_{2,W_2}} \frac{\partial f_{2,W_2}}{\partial W_2}(f_{3,W_3}(x))$$

$$\frac{\partial f}{\partial W_1}(x) = \frac{\partial f_{3,W_3}}{\partial f_{2,W_2}} \frac{\partial f_{2,W_2}}{\partial f_{1,W_1}} \frac{\partial f_{1,W_1}}{\partial W_1}(x)$$

パラメータによる微分と入力による微分は違うが，情報をシェアできる．

$f_{1,W}(x) = h(Wx)$ の場合　　$u = Wx$

$$\frac{\partial f_{1,W}}{\partial W_{ij}}(x) = \frac{\partial h}{\partial u_i}(u) x_j \qquad \frac{\partial f_{1,W_1}}{\partial x_j}(x) = \sum_i \frac{\partial h}{\partial u_i}(u) W_{ij}$$

確率的勾配降下法 (SGD)

(Stochastic Gradient Descent)

沢山データがあるときに強力

$$\min_W \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}}_{\text{重い}} \ell(z_i, W)$$

大きな問題を分割して個別に処理

普通の勾配降下法：

$$W^t = W^{t-1} - \alpha \nabla L(W)$$

$$= W^{t-1} - \alpha \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}}_{\text{全データの計算}} \nabla \ell(z_i, W)$$

確率的勾配降下法 (SGD)

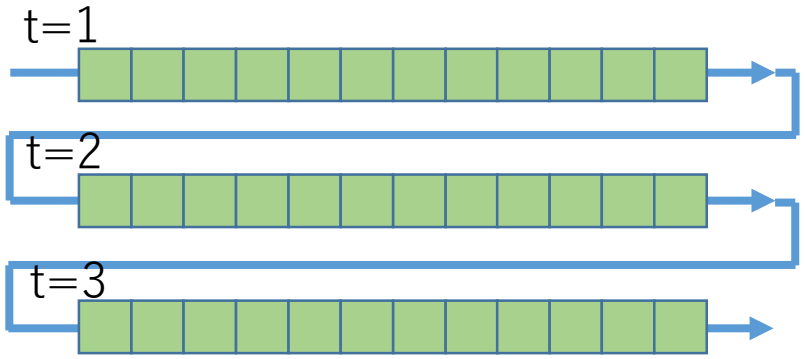
(Stochastic Gradient Descent)

沢山データがあるときに強力

$$\min_W \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(z_i, W)}_{\text{重い}}$$

大きな問題を分割して個別に処理

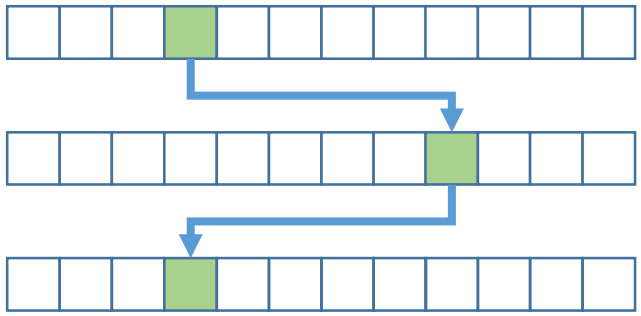
普通の勾配降下法：



$$W^t = W^{t-1} - \alpha\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\nabla\ell(z_i, W)$$

確率的勾配降下法：

毎回の更新でデータを一つ(または少量)しか見ない



$$W^t = W^{t-1} - \alpha\nabla\ell(z_i, W)$$

確率的勾配降下法 (SGD)

(Stochastic Gradient Descent)

沢山データがあるときに強力

$$\min_W \frac{1}{n} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \ell(z_i, W)}_{\text{重い}}$$

大きな問題を分割して個別に処理

- ランダムに一つのデータ z_{i_t} を観測.
- 選択した一つのデータで勾配を計算：

$$g_t = \nabla_W \ell(z_i, W^{(t-1)})$$

← O(1)の計算量

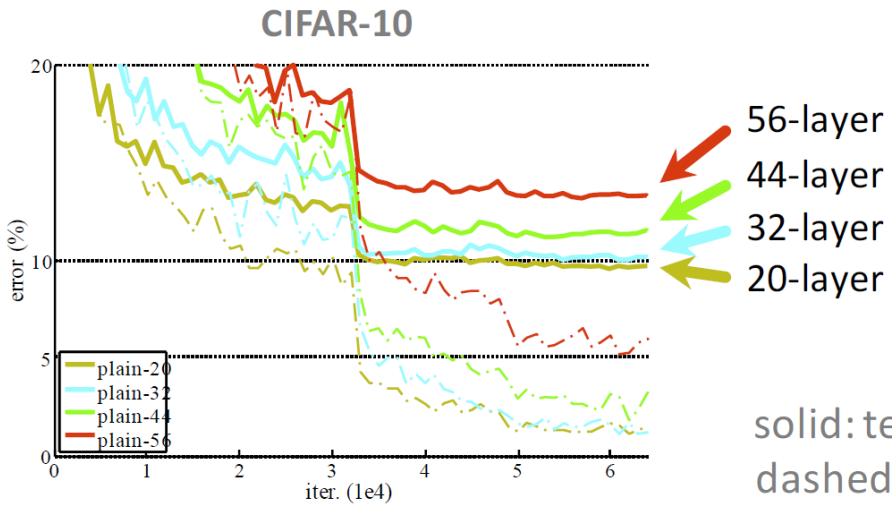
- 勾配方向へ更新（近接勾配法と同じ更新式）：

$$W^{(t)} = W^{(t-1)} - \alpha g_t$$

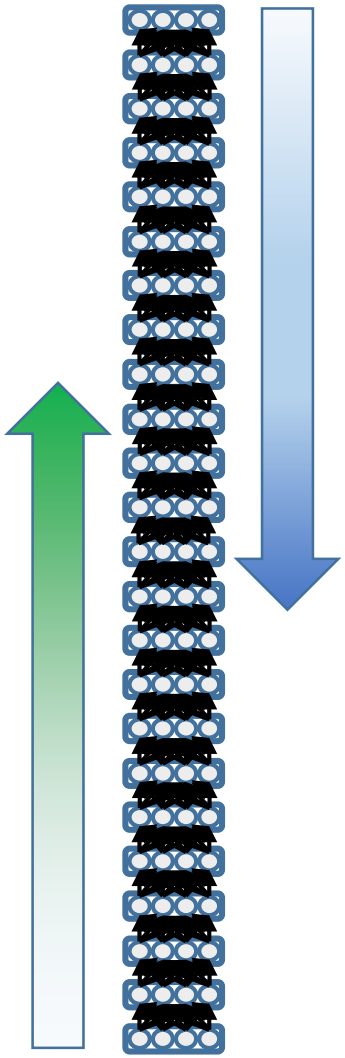
理論的にも実験的にもトータルの計算量で得することが知られている.

深ければ良い？

A：必ずしもそうではない.



誤差の情報が伝わらない

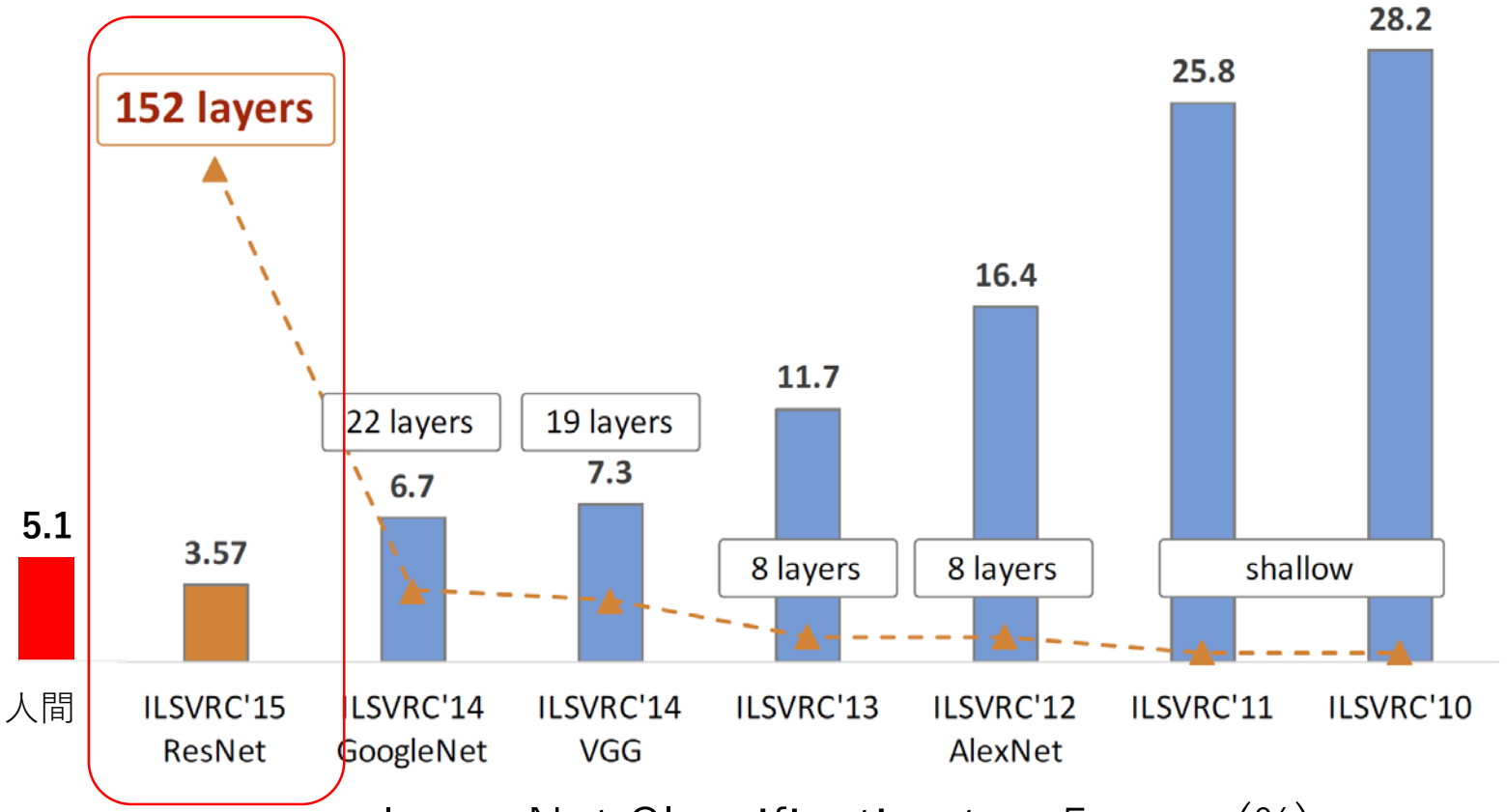


入力の情報が伝わらない

He, Zhang, Ren, & Sun. “Deep Residual Learning for Image Recognition”. CVPR 2016.

He. “Deep Residual Network”. ICML2016 tutorial.

ResNet (Deep Residual Net)



ImageNet Classification top-5 error (%)

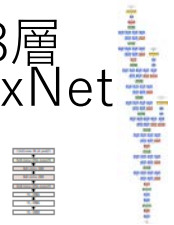
He, Zhang, Ren, & Sun. "Deep Residual Learning for Image Recognition". CVPR 2016. (CVPR2016 best paper award)

He. "Deep Residual Network". ICML2016 tutorial.

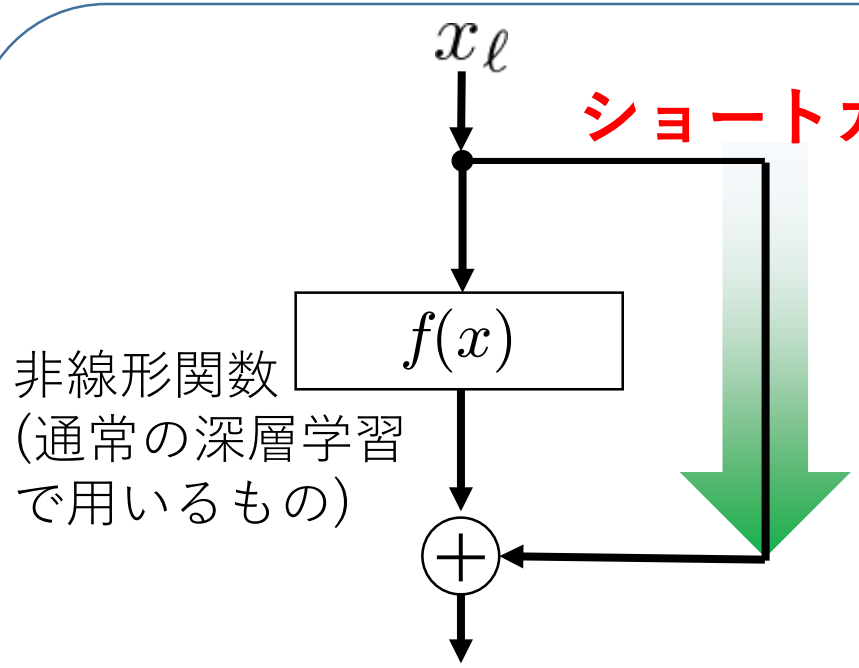
ResNet
152層

22層
GoogleNet

8層
AlexNet



ResNetの構造



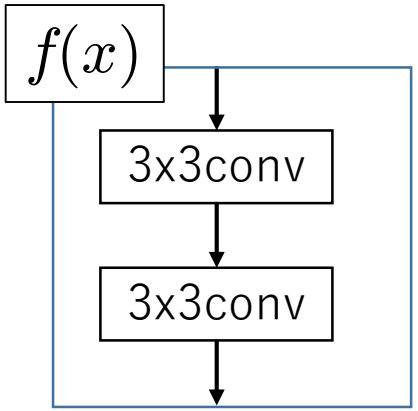
$$x_{\ell+1} = x_\ell + f(x_\ell)$$

$$x_{\ell+2} = x_\ell + f(x_\ell) + f(x_{\ell+1})$$

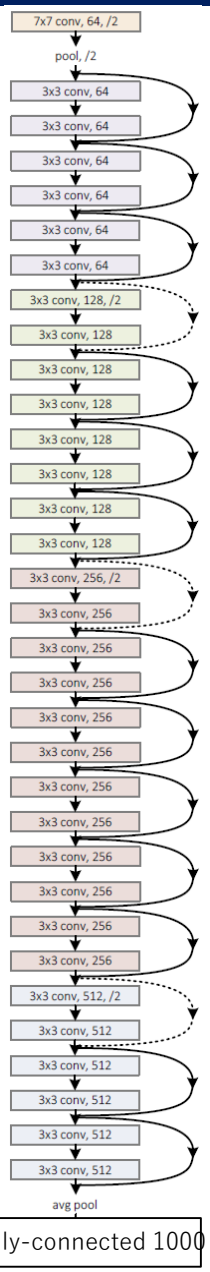
$$\vdots$$

$$x_L = x_\ell + \sum_{k=\ell}^{L-1} f(x_k)$$

情報が減衰せずに伝わる



CIFAR-10などの画像認識タスクでは$f(x)$として2層の畳み込み層を用いたものが良かった.



1000層を超えるものもある

ResNetの変種

- **Stochastic Depth**

  [Huang,Sun,Liu,Sedra,Weinberger: Deep Networks with Stochastic Depth, 2016]

  学習中に接続を確率的に切る.

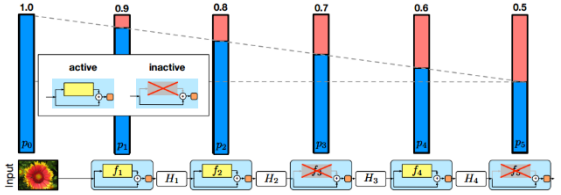
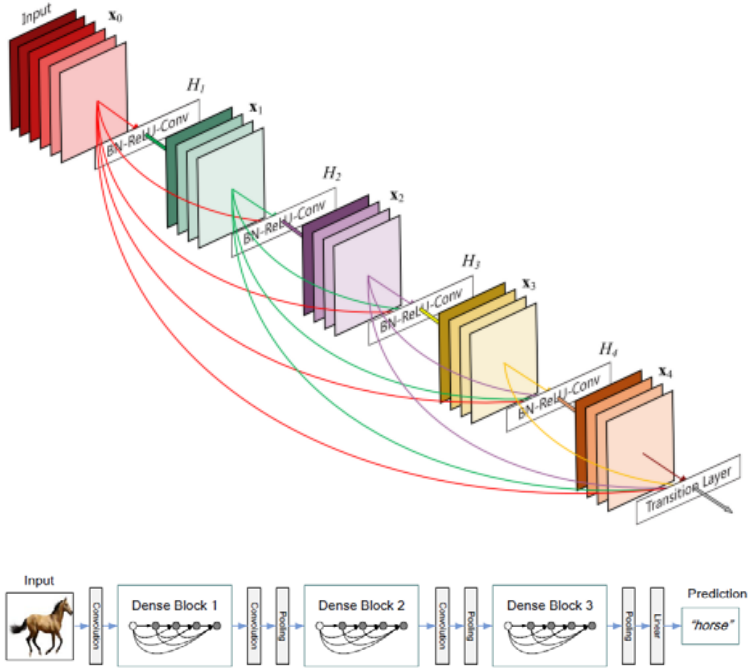


Fig. 2. The linear decay of p_ℓ illustrated on a ResNet with stochastic depth for $p_0 = 1$ and $p_L = 0.5$. Conceptually, we treat the input to the first ResBlock as H_0, which is always active.

- **DenseNet** [Huang, Liu, Weinberger, van der Maaten: Densely Connected Convolutional Networks, 2016]
  (CVPR2017 best paper award)

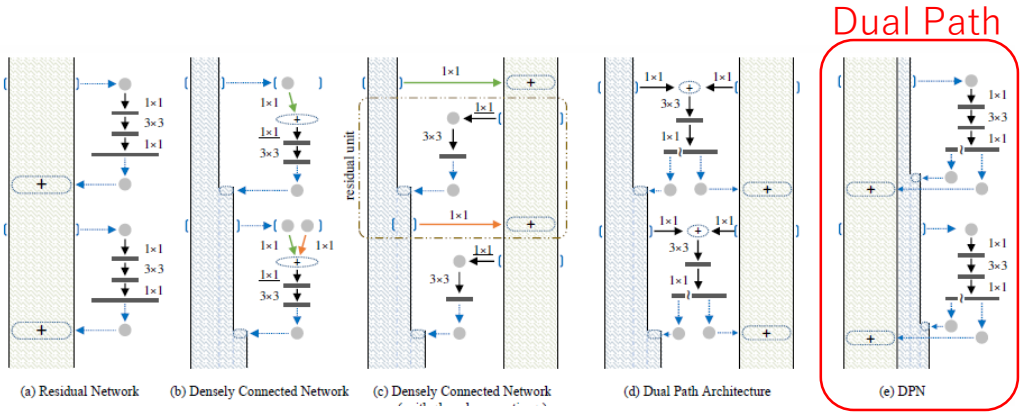
長いスキップを用いて密な結合を用いる



DenseNetの様子

- **Dual Path Networks**

[Chen, Li, Xiao, Jin, Yan, Feng: Dual Path Networks, 2017]



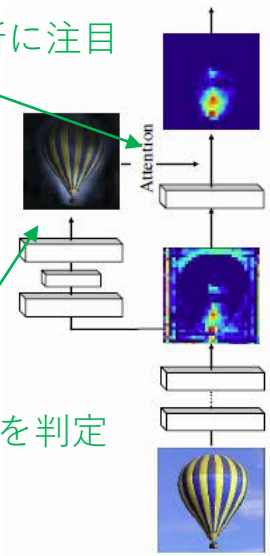
ResNetとDenseNetの良い部分を組み合わせ.
ILSVRC2017のObject localization部門で１位.

Residual Attention Network

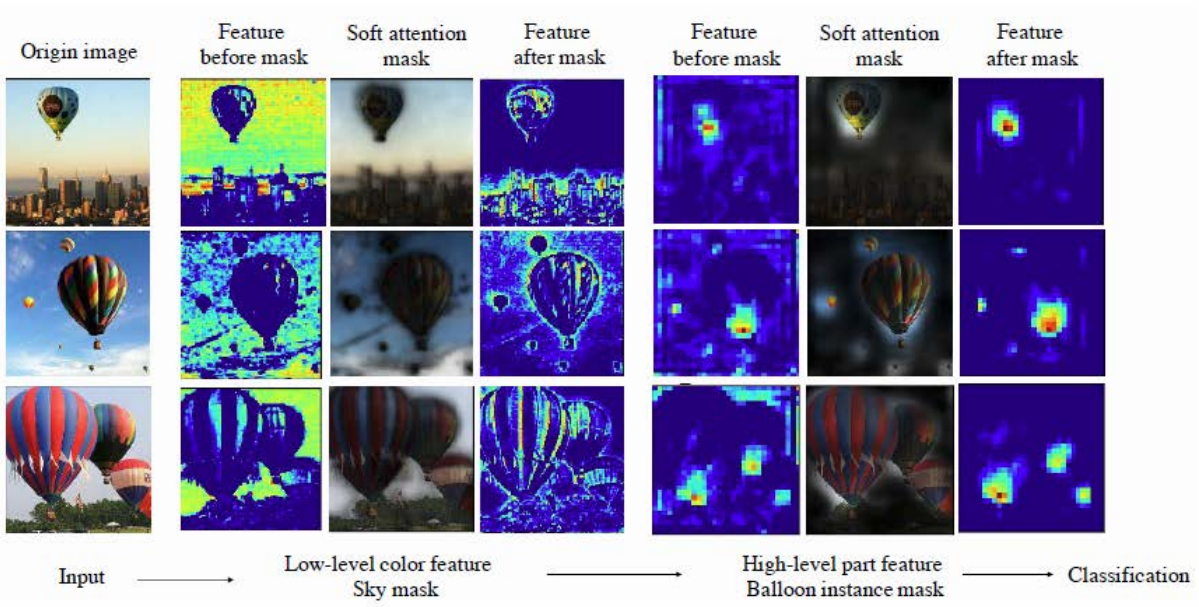
ILSVRC2017のObject detection部門１位

重要そうな場所に注目

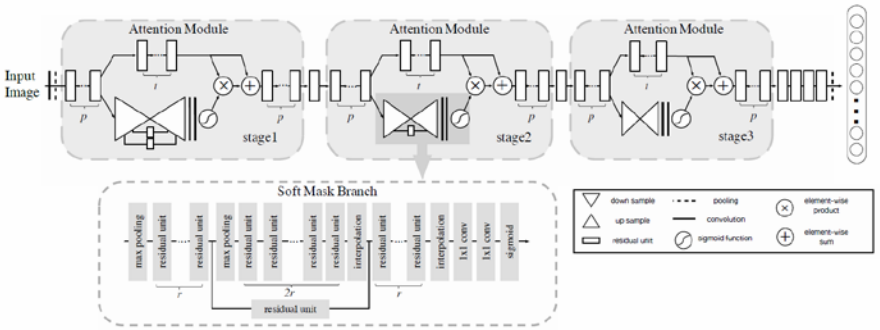
重要そうな場所を判定

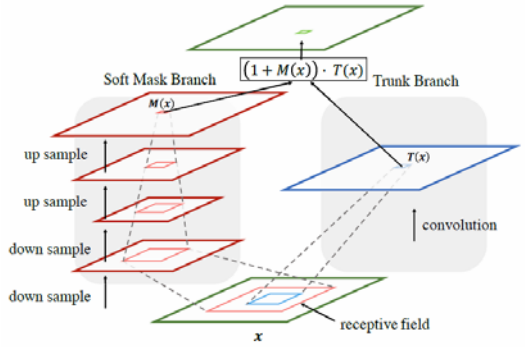


Attention mechanism



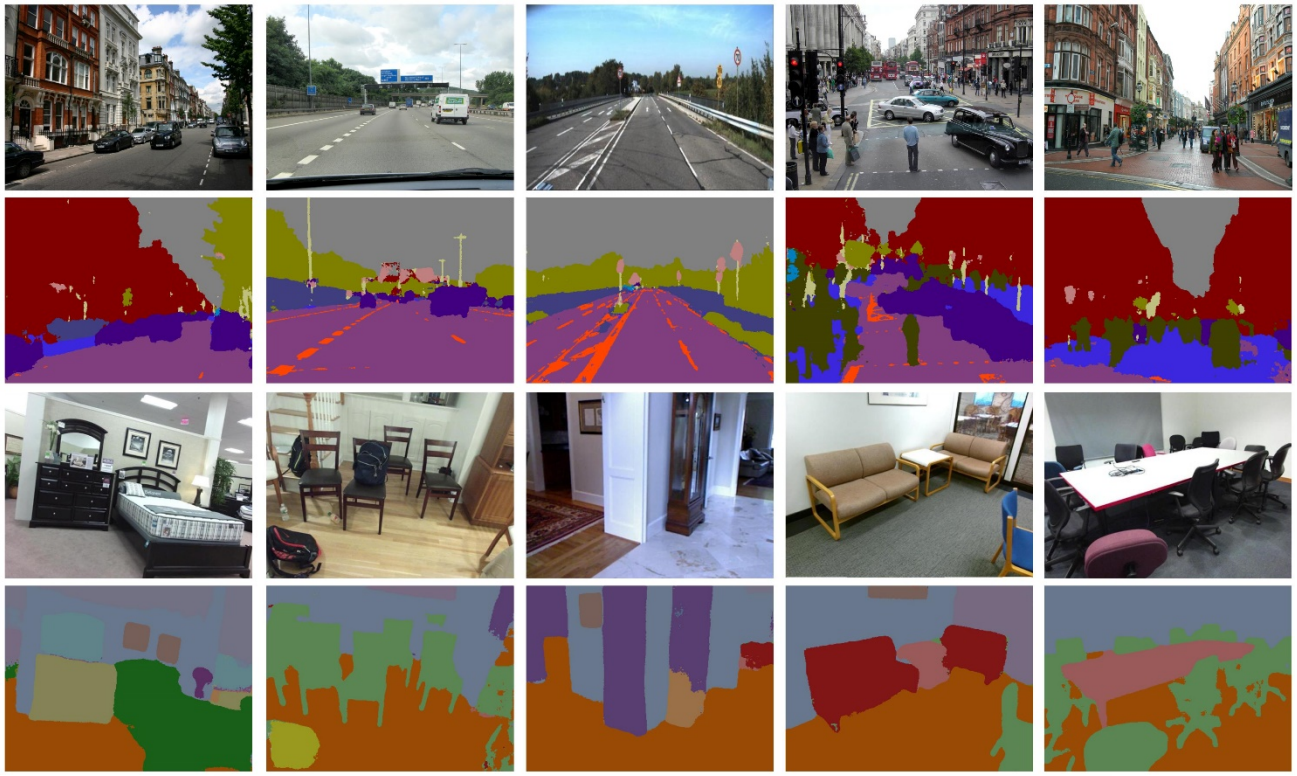
ResNetに選択的注意の機構を付与





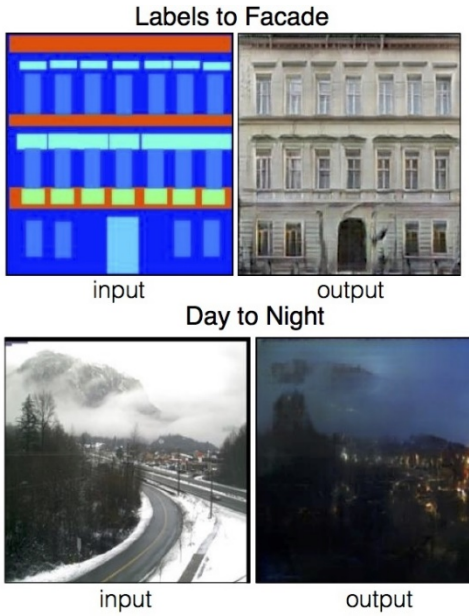
[Wang F, Jiang M, Qian C, et al. Residual Attention Network for Image Classification. arXiv:1704.06904, 2017]

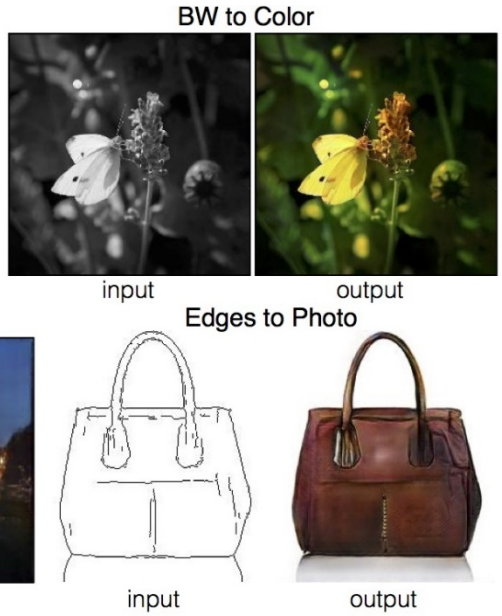
SegNet



Badrinarayanan, Kendall, Cipolla: SegNet: A Deep Convolutional Encoder-Decoder Architecture for Image Segmentation. 2015.

Pix2Pix





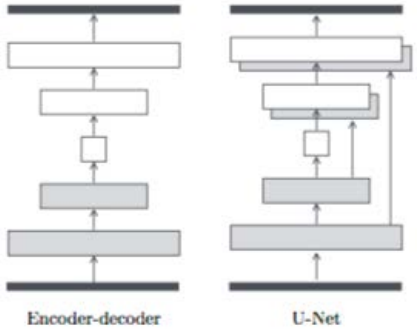
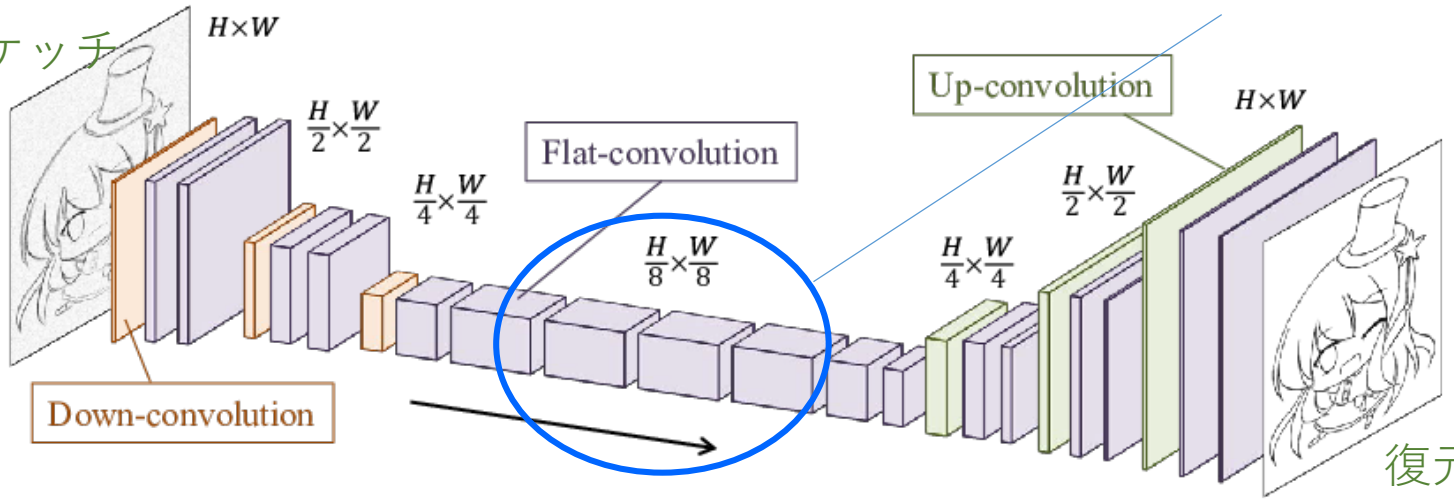


Figure 3: Two choices for the architecture of the generator. The "U-Net" [34] is an encoder-decoder with skip connections between mirrored layers in the encoder and decoder stacks.

Chainerによる自動彩色

Isola, Zhu, Zhou, and Efros :Image-to-Image Translation with Conditional Adversarial Networks. 2016

ラフスケッチの自動線画化



[Simo-Serra et al., SIGGRAPH2016]

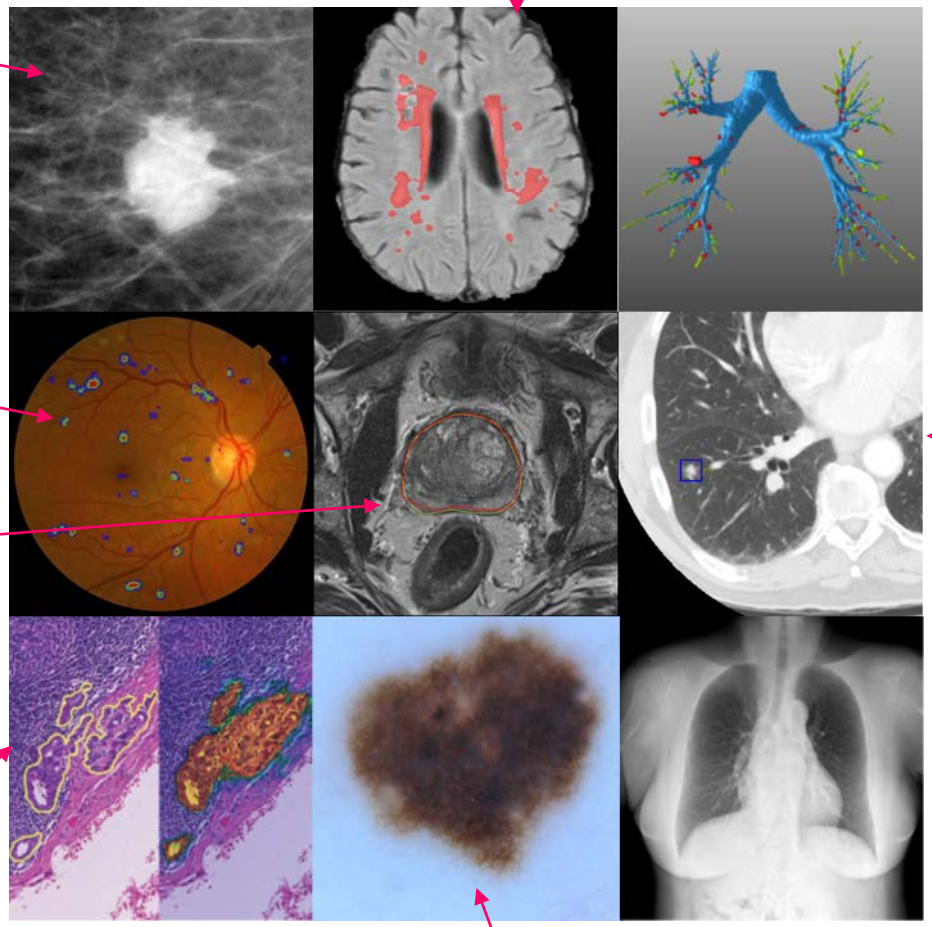
画像診断への応用

マンモグラム分類
[Kooi et al., 2016]

脳損傷セグメンテーション
[Ghafoorian et al., 2016]

気管のセグメンテーションと損傷の検出
[Charbonnier et al., 2017]

糖尿病網膜症分類
[Kaggle, and van Grinsven et al. 2016]



小結節分類
[LUNA16 challenge]

前立腺セグメンテーション
[PROMISE12 challenge]

肺癌転移検出
[CAMELYON16]

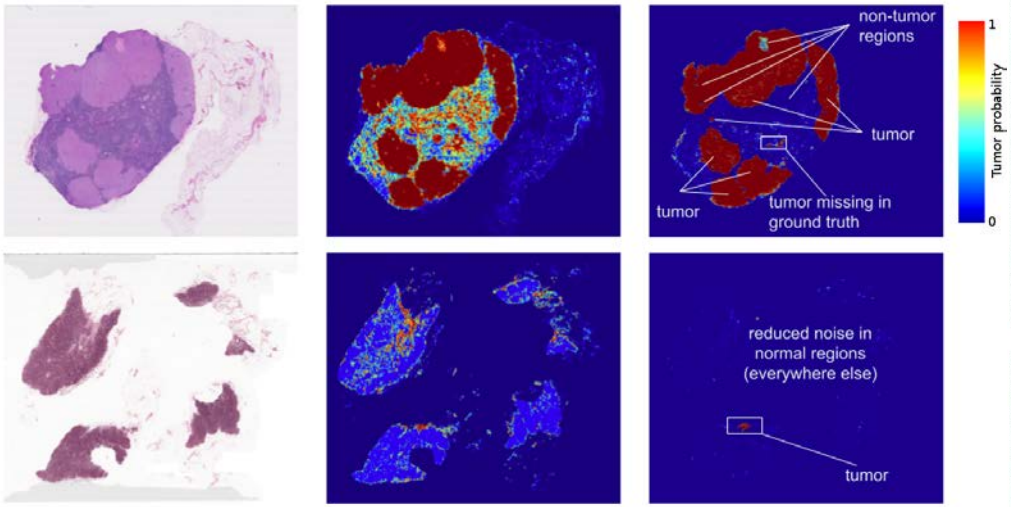
胸部骨減弱処理
[Yang et al., 2016]

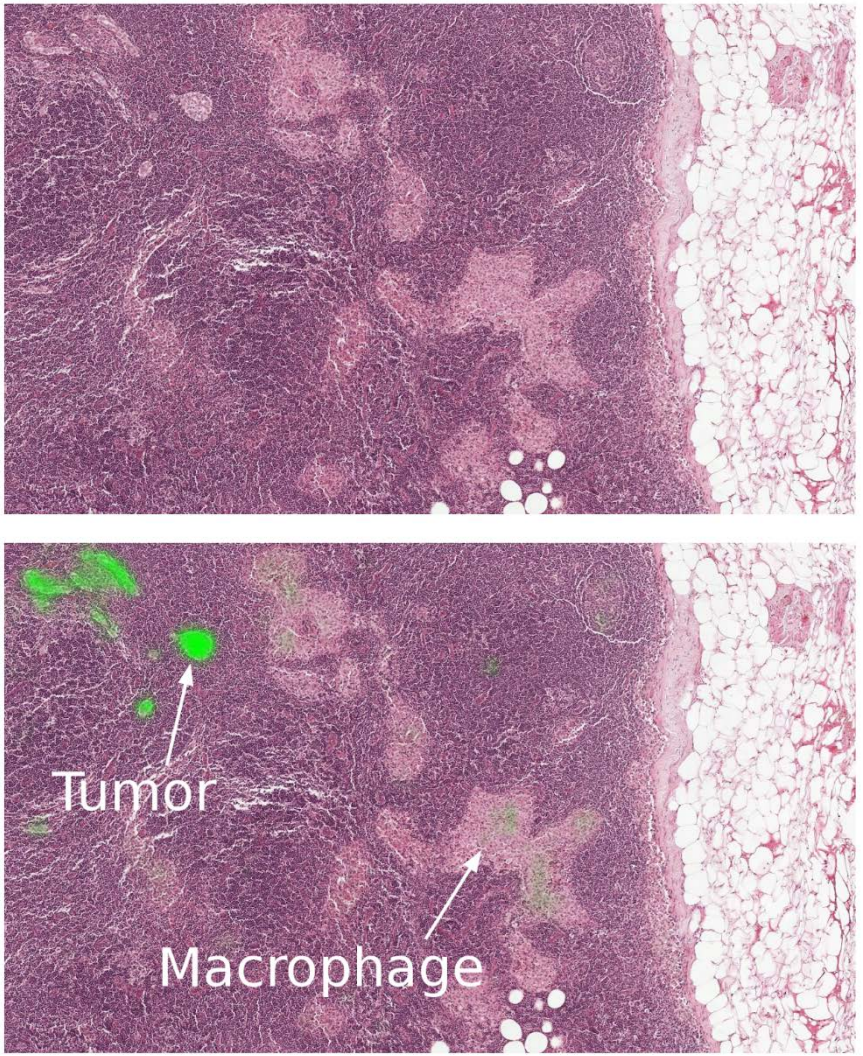
皮膚損傷分類
[Esteva et al., 2017]

画像はLitjens, et al. (2017)より

高精細画像の処理

ギガピクセル画像の認識もできつつある.



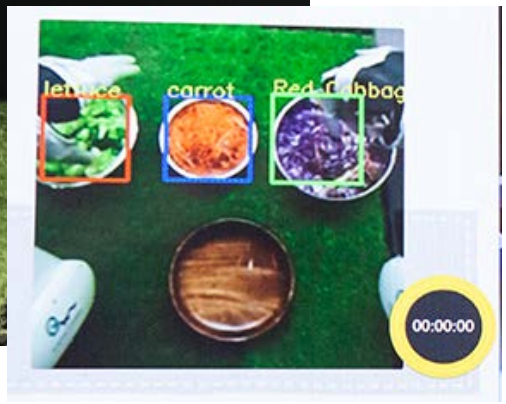


- 人を超える精度
  （FROC73.3% -> 87.3%）
- 悪性腫瘍の場所も特定

[Detecting Cancer Metastases on Gigapixel Pathology Images: Liu et al., arXiv:1703.02442, 2017]

ロボット

[DENSO, 2017]



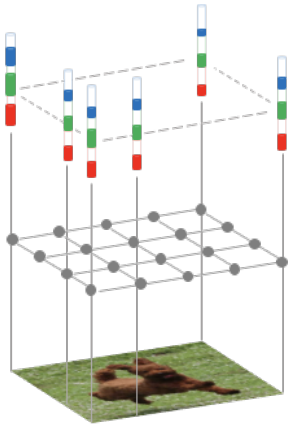
[タオル畳み、サラダ盛り付け　「指動く」ロボット初公開, ITMedia: http://www.itmedia.co.jp/news/articles/1711/30/news089.html]

[【ここまできた！】初公開の「汎用」マルチモーダルAIロボットアームはここが凄い！深層学習と予測学習を使い、VRでティーチング！, ロボスタ: https://robotstart.info/2017/11/29/denso-mmaira.html]

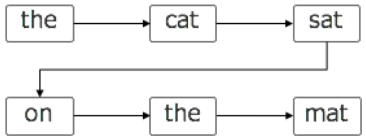
Graph-CNN

- グラフの上に定義されたCNN

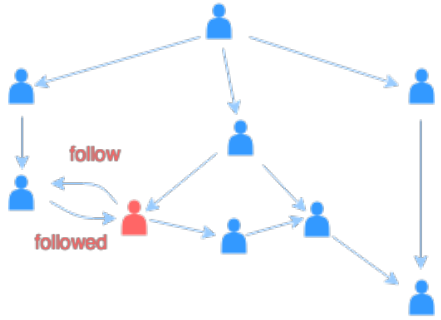
- リンク予測
- 属性判別
- 半教師あり学習



RGB value on each node

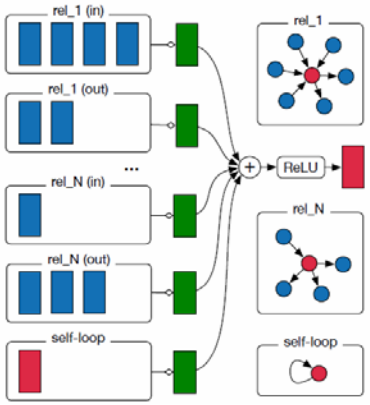


"the cat sat on the mat"



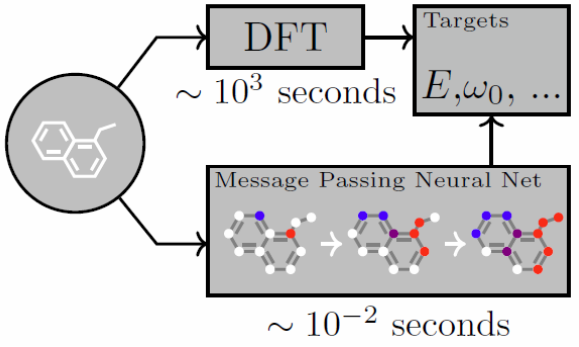
Social Network

$$h_i^{(l+1)} = \sigma\left(\sum_{r\in\mathcal{R}}\sum_{j\in\mathcal{N}_i^r}\frac{1}{c_{i,r}}W_r^{(l)}h_j^{(l)} + W_0^{(l)}h_i^{(l)}\right)$$



[Schlichtkrull et al.: Modeling Relational Data with Graph Convolutional Networks, 2017]

量子化学計算，分子の物性予測



[Niepert, Ahmed&Kutzkov: Learning Convolutional Neural Networks for Graphs, 2016]
[Gilmer et al.: Neural Message Passing for Quantum Chemistry, 2017]
[Faber et al.:Machine learning prediction errors better than DFT accuracy, 2017.]

生成モデル

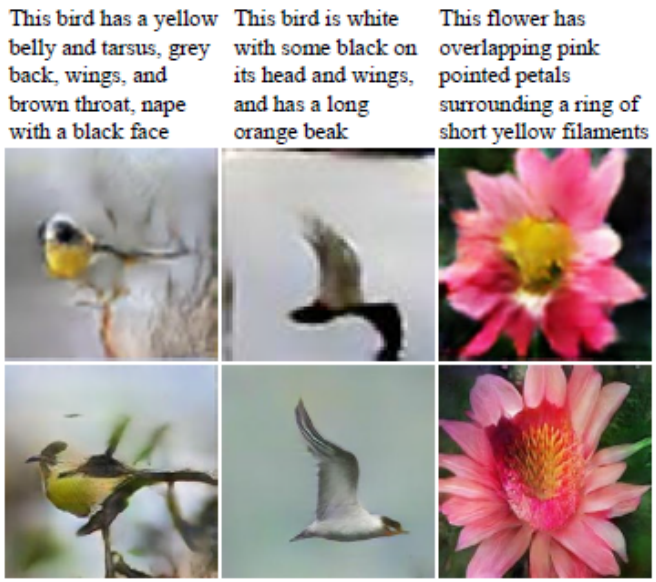
本物らしいデータを生成したい

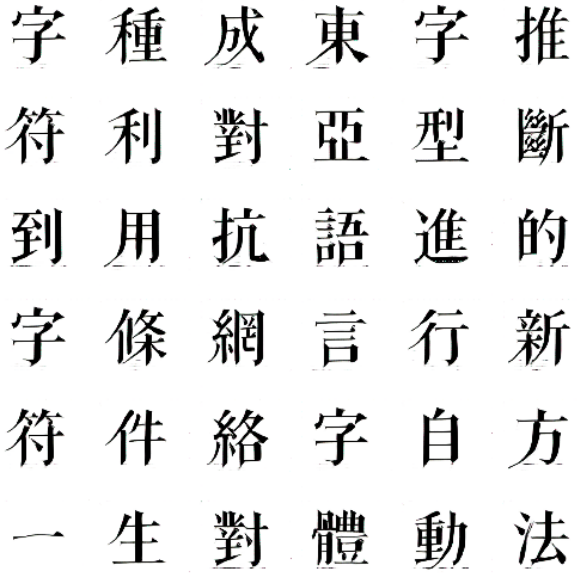
深層学習が生成した画像

生成データ　　訓練データ

(a) Stage-I images

(b) Stage-II images





[Tian: zi2zi, Master Chinese Calligraphy with Conditional Adversarial Networks,2017]

CycleGAN

[Zhu et al.: Unpaired Image-to-Image Translation using Cycle-Consistent Adversarial Networks. 2017]

生成モデル

目標：本物らしい画像を生成したい.

- GAN (Generative Adversarial Network) [Goodfellow+et al., 2014]

2つの構成要素

Generator: $x = G(z)$

Discriminator: $D(x) = P(x\text{が本物})$

G: 画像の素z (乱数) から偽画像xを生成. Dを騙そうとする.
D: 画像xが本物か偽物か判別. Gに騙されないようにする.

最適化問題

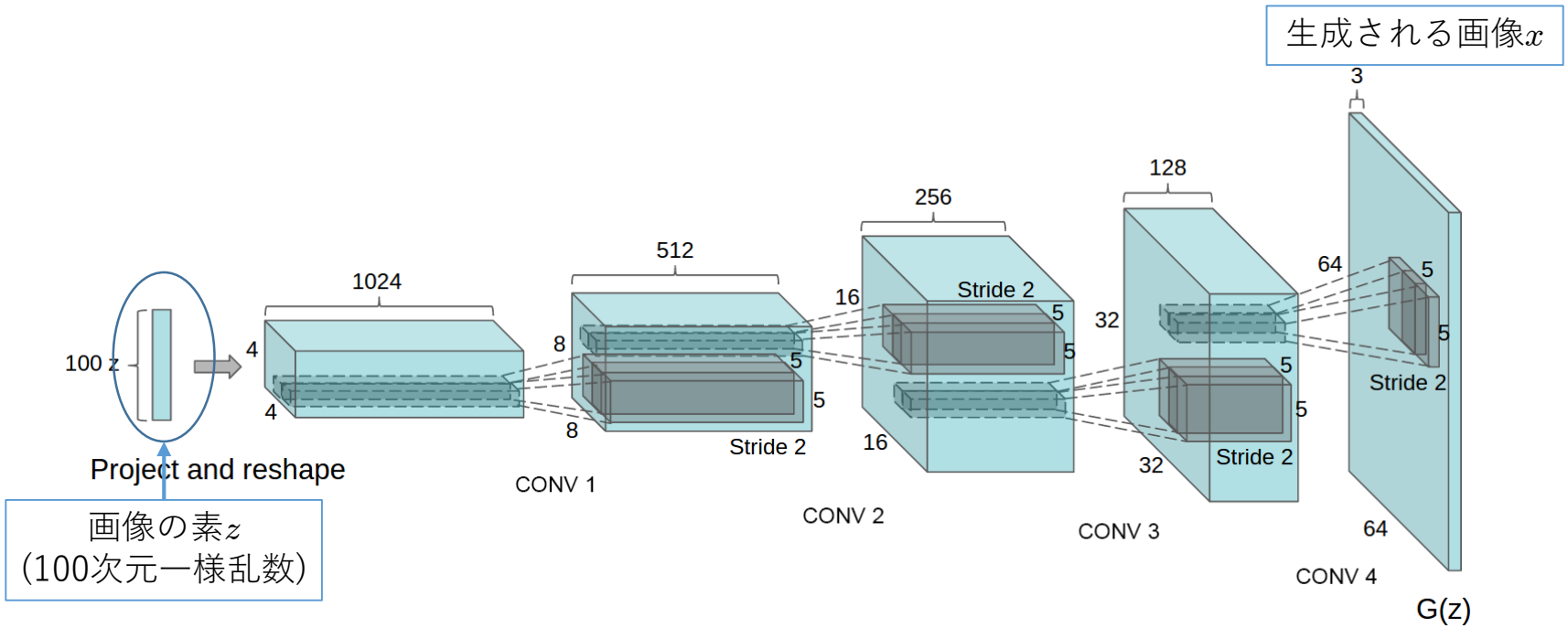
$$\min_G \max_D \mathrm{E}_{x\sim p_{\mathrm{data}}}[\log D(x)] + \mathrm{E}_{z\sim p_x}[\log(1 - D(G(z)))]$$

本当の画像を
本物と判別する確率

偽物の画像を
偽物と判別する確率

2016-2017にかなり流行
GANの変種まとめ：https://github.com/hindupuravinash/the-gan-zoo
※GANの他にもVAE (Variational Auto-Encoder)と呼ばれる方法もよく用いられている.

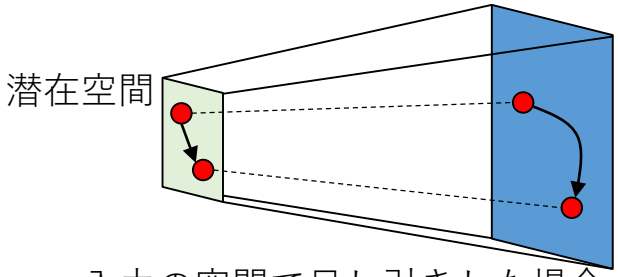
DCGAN (Deep Convolutional GAN)
畳み込みネットを用いたGAN



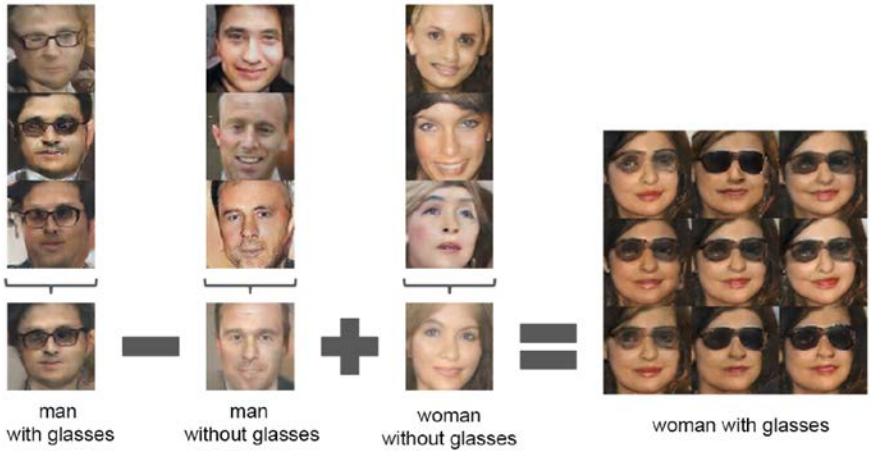
DCGANのGenerator

- 入力zは画像の低次元ベクトル表現にもなっている.
- Discriminatorも畳み込みネットを用いる.

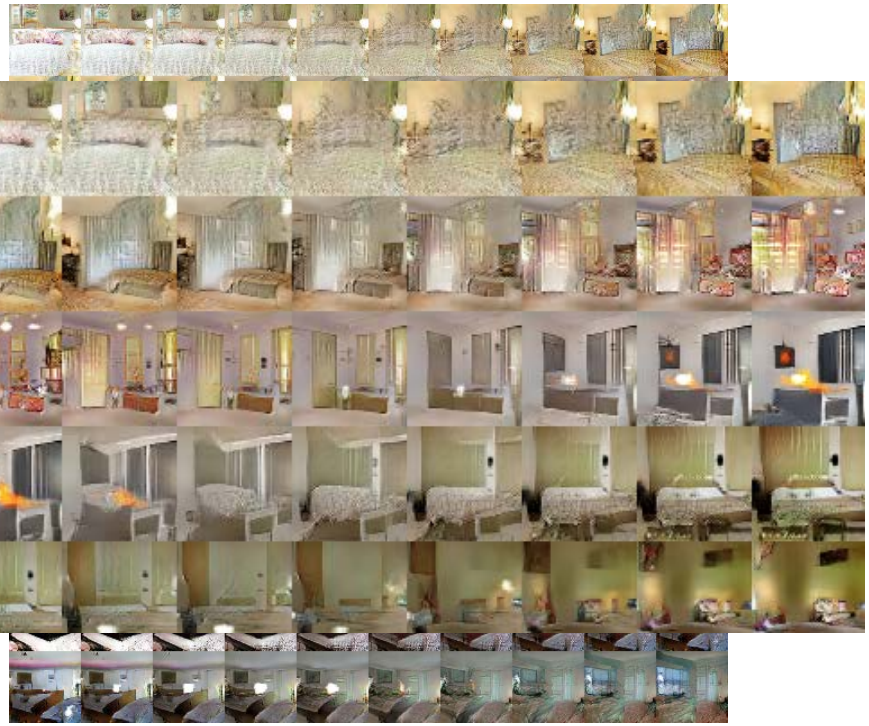
Radford, Metz & Chintala. “Unsupervised representation learning with deep convolutional generative adversarial networks.” ICLR2016.



入力の空間で足し引きした場合



ピクセルごとに足し引きした場合



生成されたベッドルーム画像

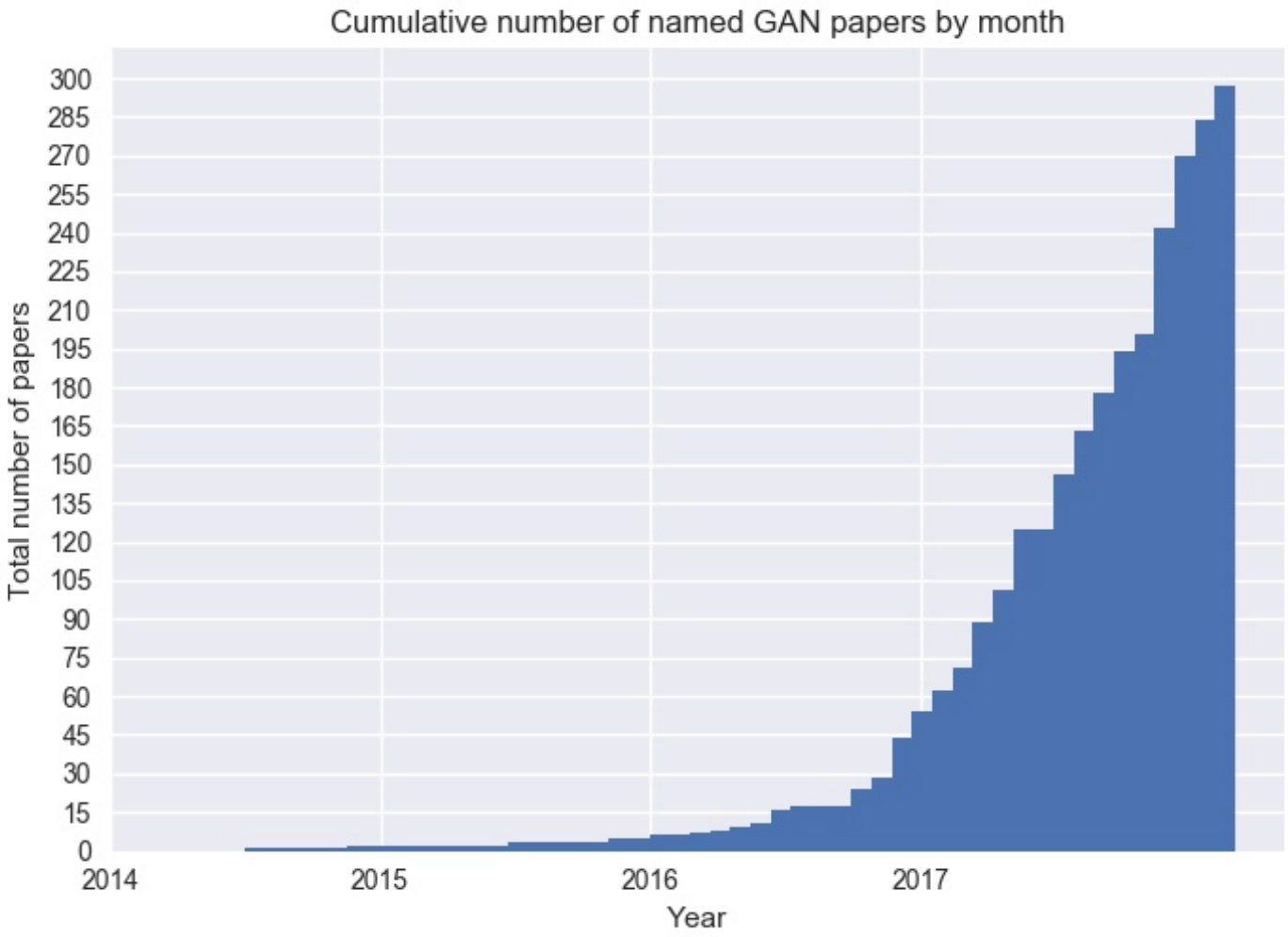
生成されたベッドルーム画像
入力zの凸結合で中間的画像が得られる.

入力zを足し引きすることで意味の足し引きが実現されている.
cf. word2vec.

Radford, Metz & Chintala. “Unsupervised representation learning with deep convolutional generative adversarial networks.” ICLR2016.

GAN Zoo

「○○-GAN」



[https://github.com/hindupuravinash/the-gan-zoo]

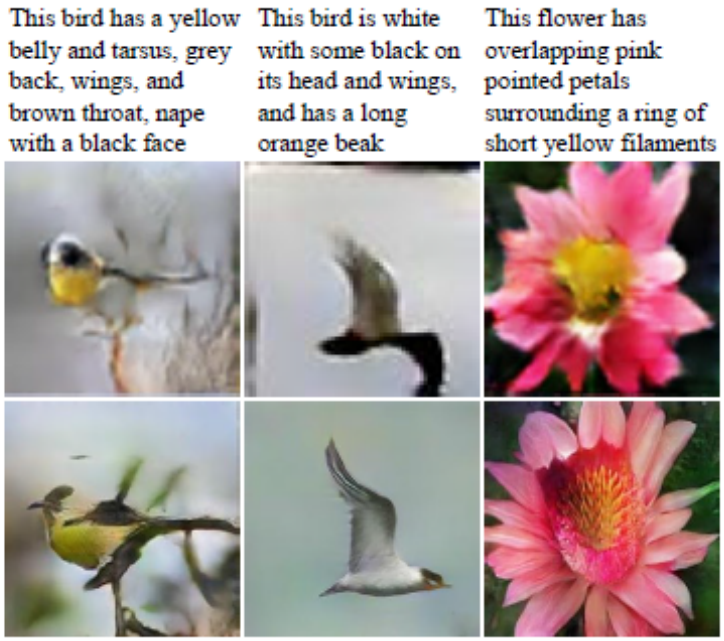
StackGAN

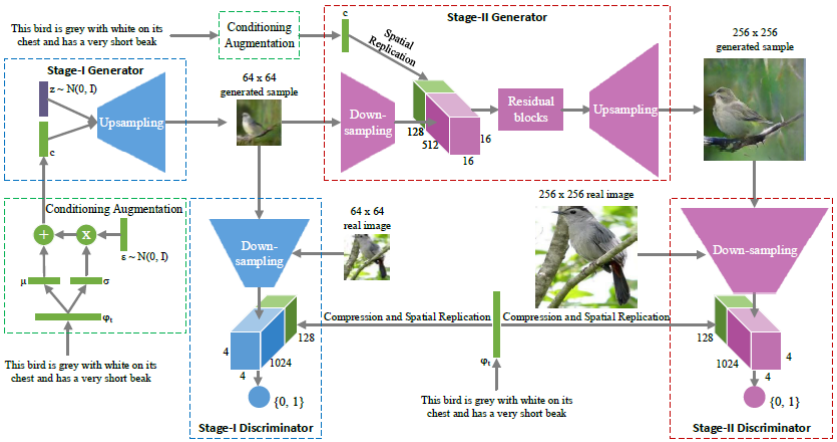
StackGAN [Zhang+etal.2016]　荒い画像を生成してからそれを高精細に修正（超解像）

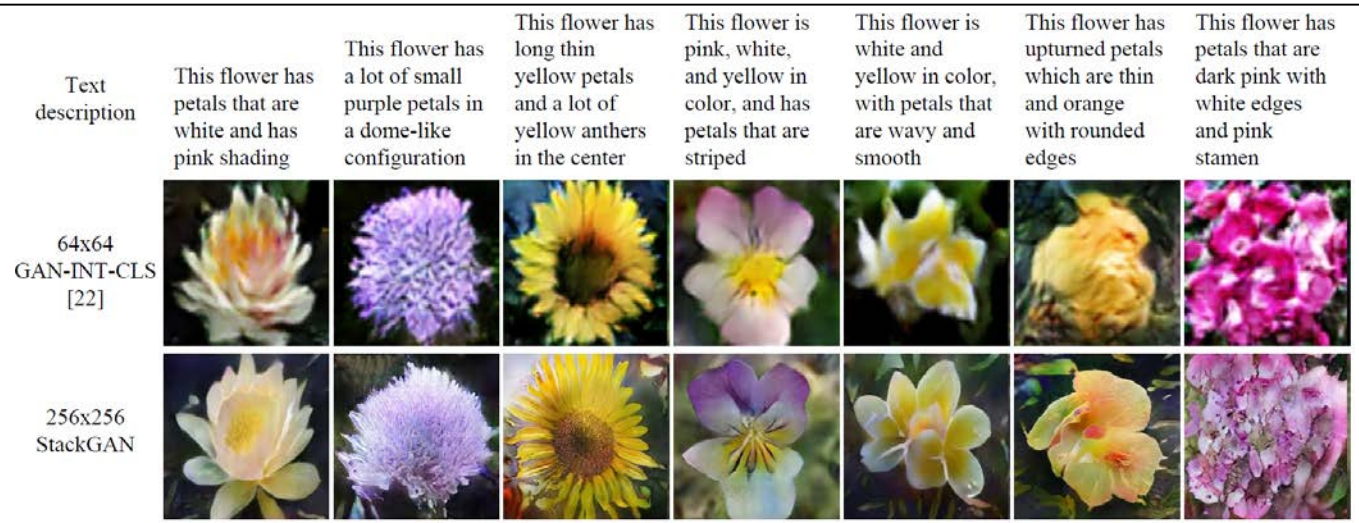
入力文章

荒い画像を生成

さらにこうなる





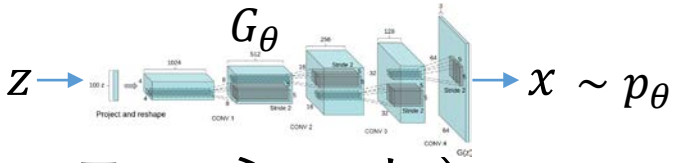


既存手法

StackGAN

GANの仕組み

- z: 乱数（一様分布など）
- $x = G_\theta(z)$　（変数変換 by ニューラルネット）



適当な乱数を変数変換して目的の乱数（画像など）を生成

xの分布p_θ ⟷（近づけたい）真の分布q

f-divergenceの最小化

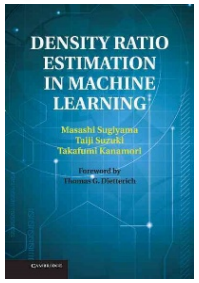
f-divergence:
分布の距離(のようなもの)

$$\int q(x) f\left(\frac{p_\theta(x)}{q(x)}\right) \mathrm{d}x$$

GANはJensen-Shannon divergenceに対応

f-GAN [Nowozin, Cseke, Tomioka, 2016]

双対の関係



密度比推定の方法論

密度比$p_\theta(x)/q(x)$を1に近づける

Bregman-divergence:

$$\mathrm{BR}_f(\hat{r}) = \int q(x)\{f'(\hat{r}(x)) - f(\hat{r}(x)) + f(r_\theta(x))\}\mathrm{d}x - \int p_\theta(x) f'(\hat{r}(x))\mathrm{d}x$$

真の密度比とのBregman-divergenceを最小化して密度比を推定

B-GAN [Uehara+et al., 2016]

[Sugiyama, Suzuki, Kanamori: Density ratio matching. 2012.]

その他のアプローチ

- 分布間の距離が定義できれば何を用いても良い

- Wasserstein GAN (Metz et al., 2016)
  - Wasserstein距離を利用
  - 二つの分布のサポートがずれていてもwell-defined
  - 安定した学習

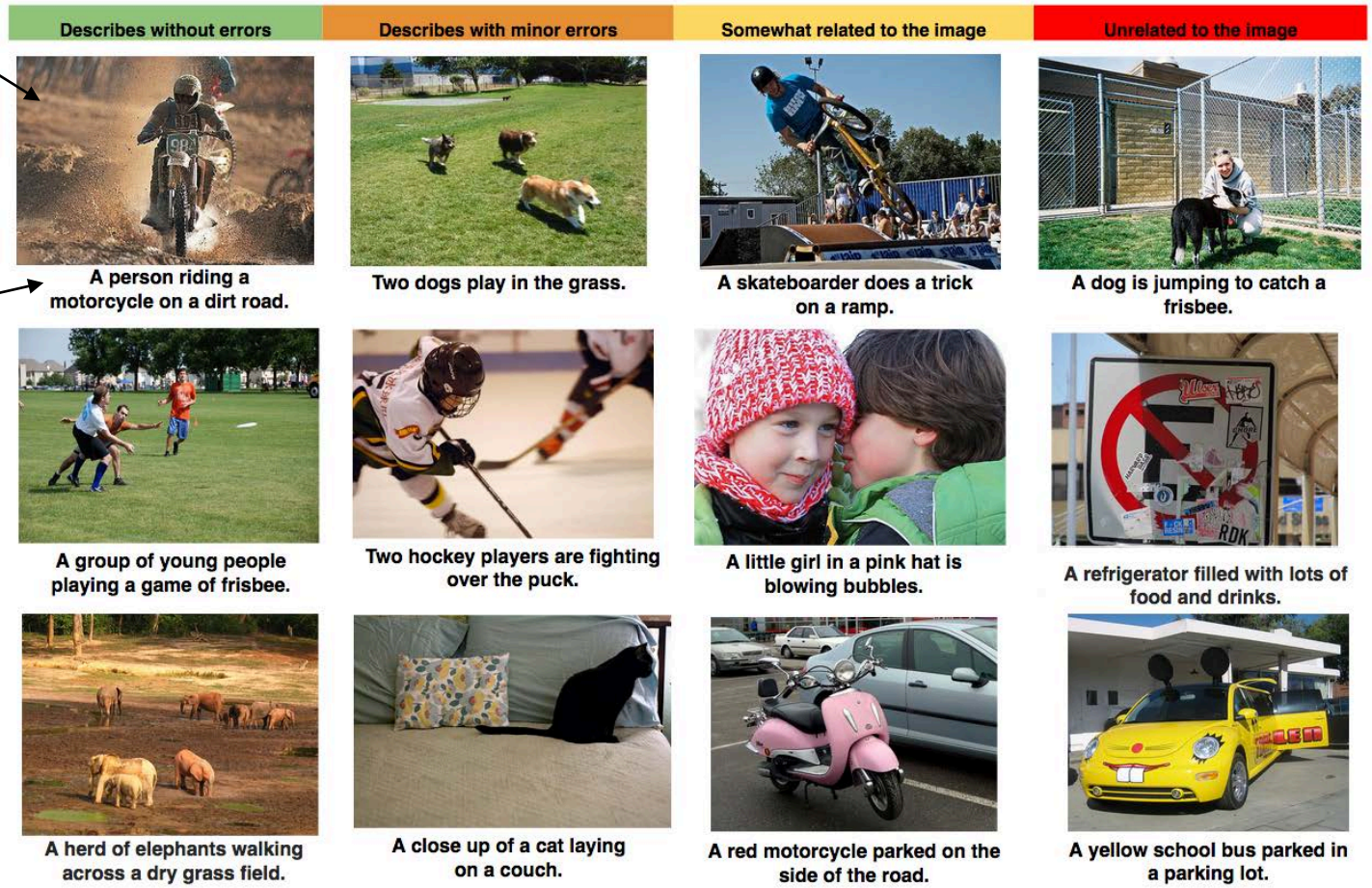
- MMD GAN (Li et al., 2017)
  - カーネル法による分布間距離 (Maximum Mean Discrepancy) を利用

自然言語処理

キャプション生成

入力画像

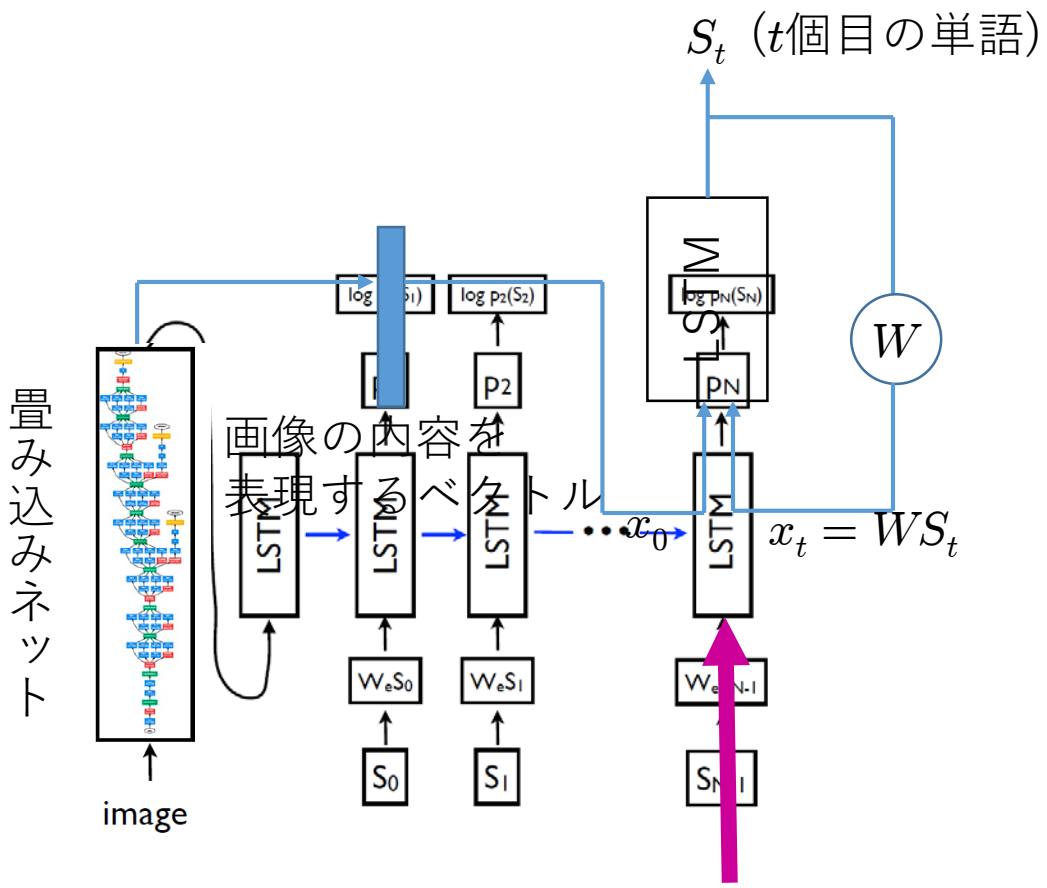
自動生成された説明文



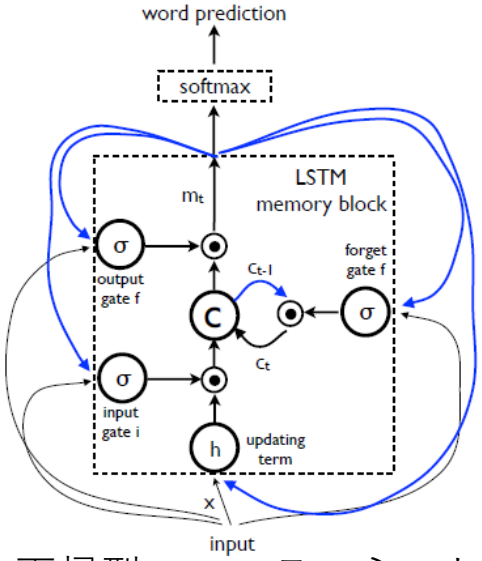
Google による画像説明文章の自動生成

[Vinyals et al., Show and tell: A neural image caption generator. CVPR, 2015]

深層学習を用いたキャプション生成モデル



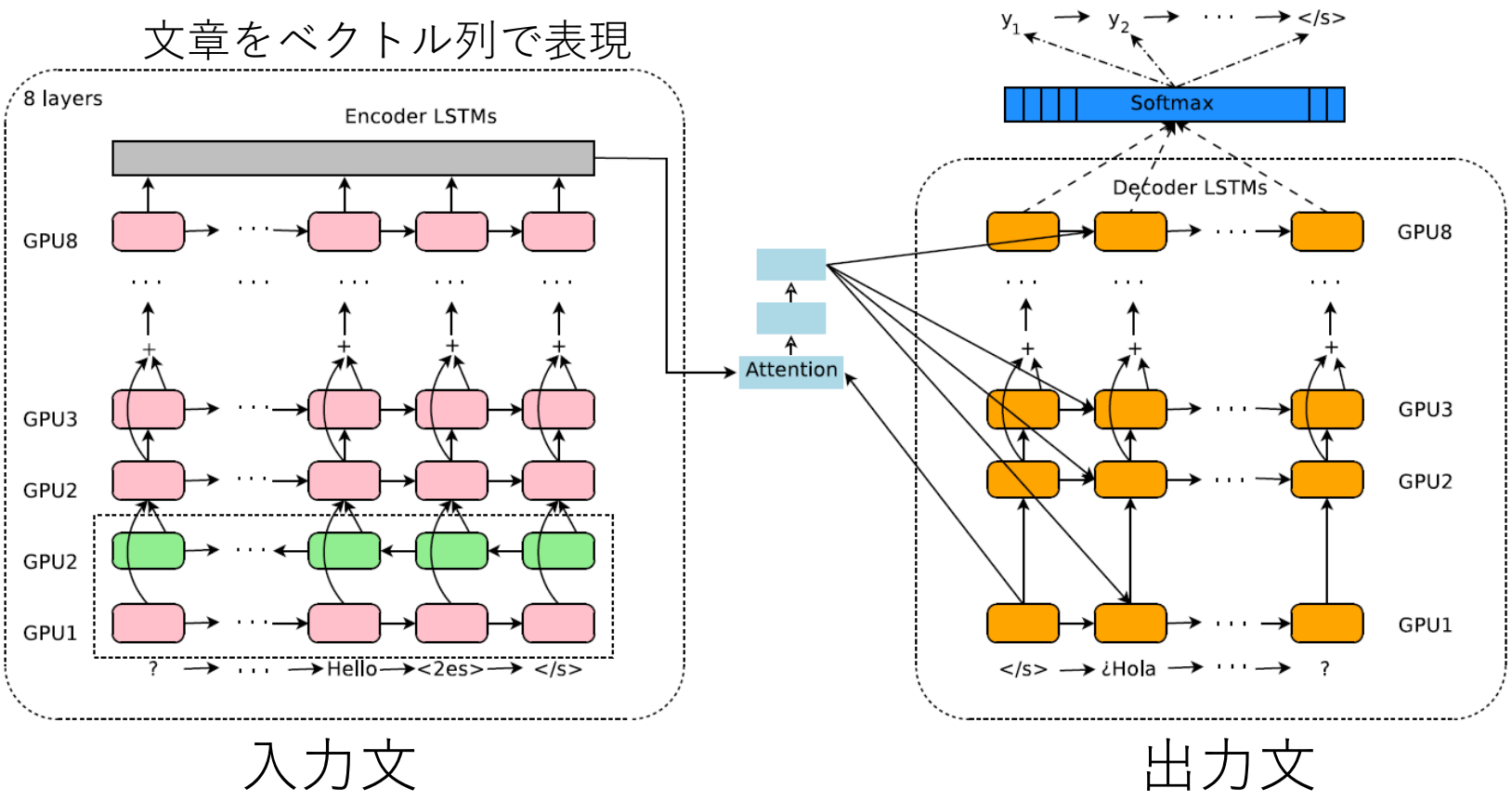
LSTM
(Long Short Term Memory)



- 再帰型ニューラルネット
- 言葉の列等を生成できる
- 内部状態，前の出力，今の入力で次の出力が決まる

- 最初の時刻だけ画像を表現するベクトルを入力
- 次の時刻からは前の時刻に自分の生成した単語を入力
- 画像の意味をベクトルで表すことが本質的

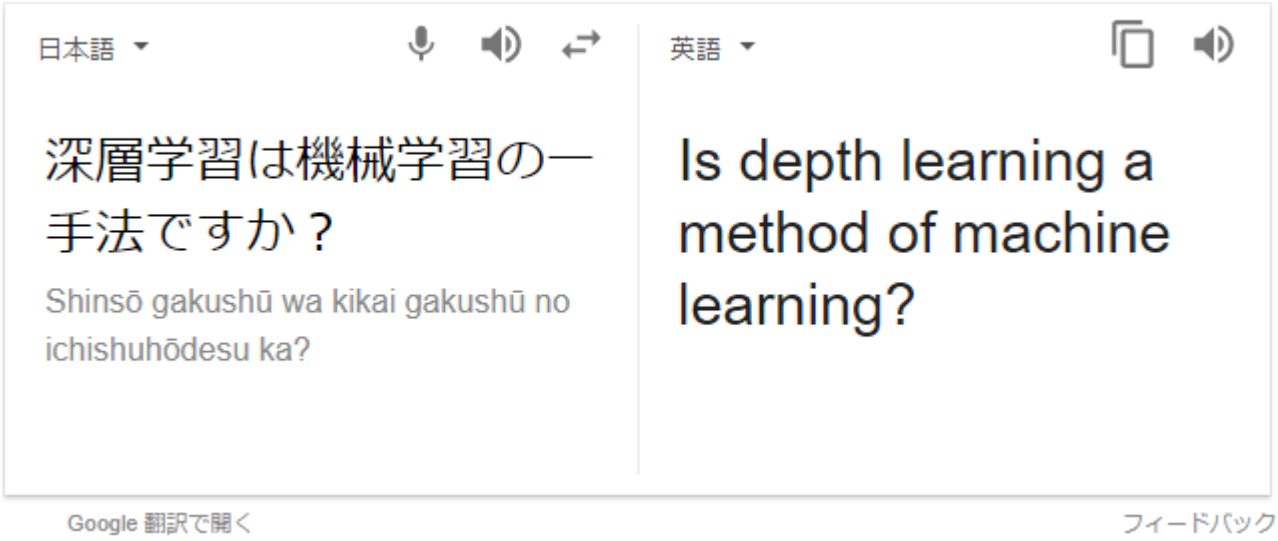
翻訳



Googleの翻訳システム

- 深層学習（再帰型ニューラルネットワーク）を利用
- 複数言語にも対応
- 「データのない言語対」の翻訳も可能に

翻訳の例



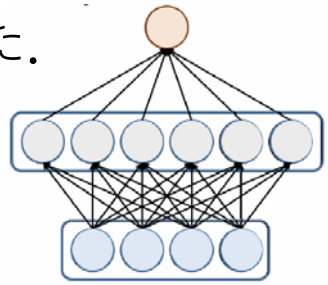
この先生きのこるにはどうすればよいのか 編集	How can I make this teacher mushrooms

この先，生きのこるにはどうすればよいのか 編集	How can we live ahead?

深層学習の理論

万能近似能力

ニューラルネットの関数近似能力は80年代に盛んに研究された.



$$f(x) = \sum_{j=1}^{m} v_j h(w_j^\top x + b_j)$$

なる関数が$m \to \infty$で任意の関数を任意の精度で近似できるか？

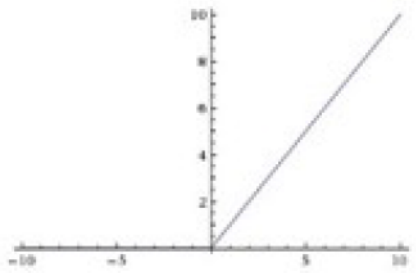
（「任意の関数」や「任意の精度」の意味はどのような関数空間を考えるかに依存）

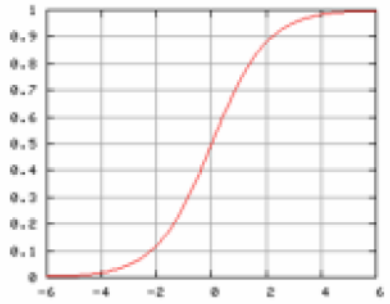
hがシグモイド関数やReLUなら万能性を有する.

年		基底関数	空間

Activation functions:

ReLU: $\eta(u) = \max\{u, 0\}$ **Sigmoid:** $\eta(u) = \frac{1}{1+\exp(-u)}$





Kは任意のコンパクト集合

参考：園田, “ニューラルネットの 積分表現理論”, 2015.

積分表現

有限和近似（３層NN）

$$\hat{f}(x) = \sum_{j=1}^{m} v_j \eta(w_j^\top x + b_j)$$

$\simeq$

真の関数

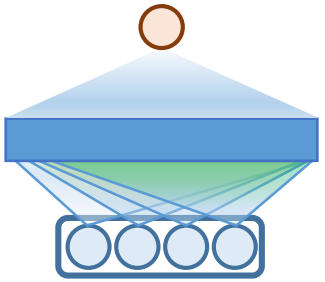
$$f^{\circ}(x) = \int h^{\circ}(w, b)\eta(w^\top x + b)\mathrm{d}w\mathrm{d}b$$

(Sonoda & Murata, 2015)

- Ridgelet変換による解析（Fourier変換の親戚）
- ３層NNはridgelet変換で双対空間（中間層）に行ってから戻ってくる（出力層）イメージ

三層ニューラルネットの汎化誤差

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{iw^\top x} \tilde{f}(w) \mathrm{d}w$$ (Fourier変換)



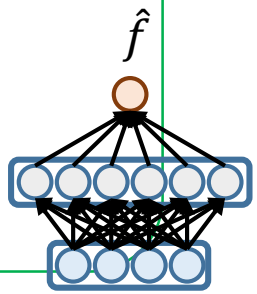
仮定： $$\int_{\mathbb{R}^d} \|w\| |\tilde{f}(w)| \mathrm{d}w < \infty$$

$(x_i, y_i)_{i=1}^n$: i.i.d.　　$f(x) = \mathrm{E}[Y|X=x]$　　(例：$y_i = f(x_i) + \epsilon_i$)

三層ニューラルネットワークの汎化誤差 (Barron 1991, 1993)

三層ニューラルネットワークのある種の正則化推定量$\hat{f}$が存在して次を満たす：

$$\mathrm{E}\left[\|\hat{f} - f\|^2_{L_2(P(X))}\right] \leq O\left(\sqrt{\frac{d \log(n)}{n}}\right)$$



活性化関数の条件： $\eta(-z) = 1 - \eta(z)$

$\|\eta'\|_\infty < \infty$

$\lim_{z \to -\infty} \sup \eta(z)/|z|^p < \infty$

(MDL, PAC-Bayes的解析)

理論より三層パーセプトロンでも中間層のユニット数を
無限に増やせば任意の関数を任意の精度で近似できる.

歴史的には後にSVMの理論に繋がってゆく.

(例：Gaussian kernelの万能性)

Q：ではなぜ深い方が良いのか？

A：深さに対して**指数的に表現力が増大**するから.

表現力と層の数

NNの“表現力”：領域を何個の多面体に分けられるか？

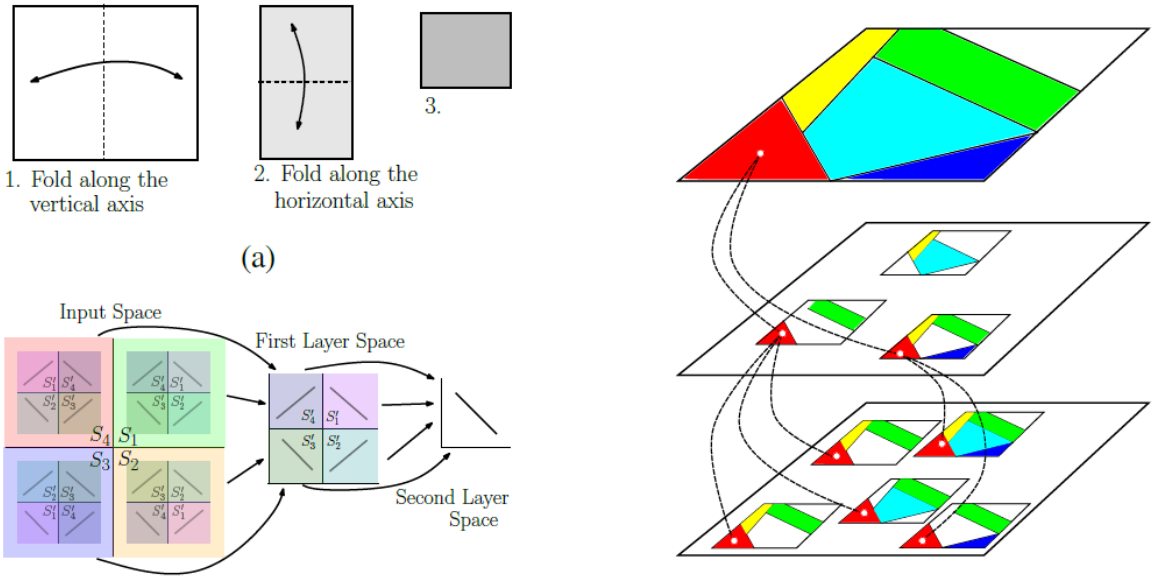
- 層の数に対して表現力は**指数的**に上がる.

$$\left(\frac{n}{n_0}\right)^{L-1}\sum_{j=0}^{n_0}\binom{n}{j}$$

- 中間層のユニット数 (横幅) に対しては**多項式的**.

$$\sum_{j=0}^{n_0}\binom{n}{j}$$

L：層の数
n：中間層の横幅
n_0：入力の次元



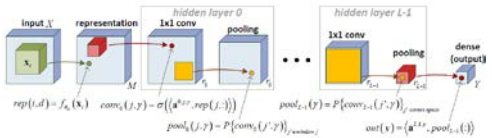
折り紙のイメージ

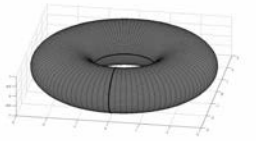
Montufar, Guido F., et al. "On the number of linear regions of deep neural networks." 2014.

多層で得する理由

他にも同様の結論を出している論文多数

- **多項式展開，テンソル解析** [Cohen et al., 2016; Cohen & Shashua, 2016]
  単項式の次数
- **代数トポロジー** [Bianchini & Scarselli, 2014]
  ベッチ数(Pfaffian)
- **リーマン幾何 + 平均場理論** [Poole et al., 2016]
  埋め込み曲率

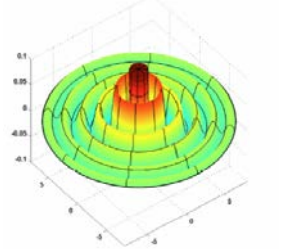




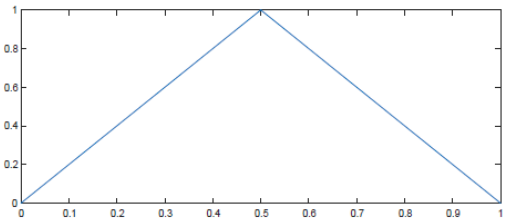
対称性の高い関数は，特に層を深くすることで得をする．

$$h(x) = \begin{cases} 2x & (0 \le x \le 1/2) \\ 2(1-x) & (1/2 \le x \le 1) \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

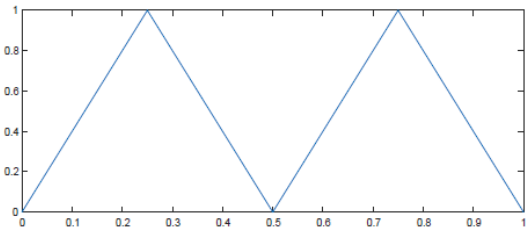
多層が得する例



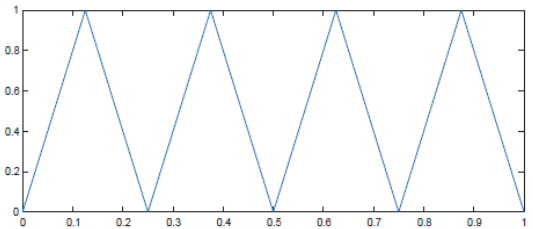
[Eldan,Shamir,ALT2016]



$h(x)$



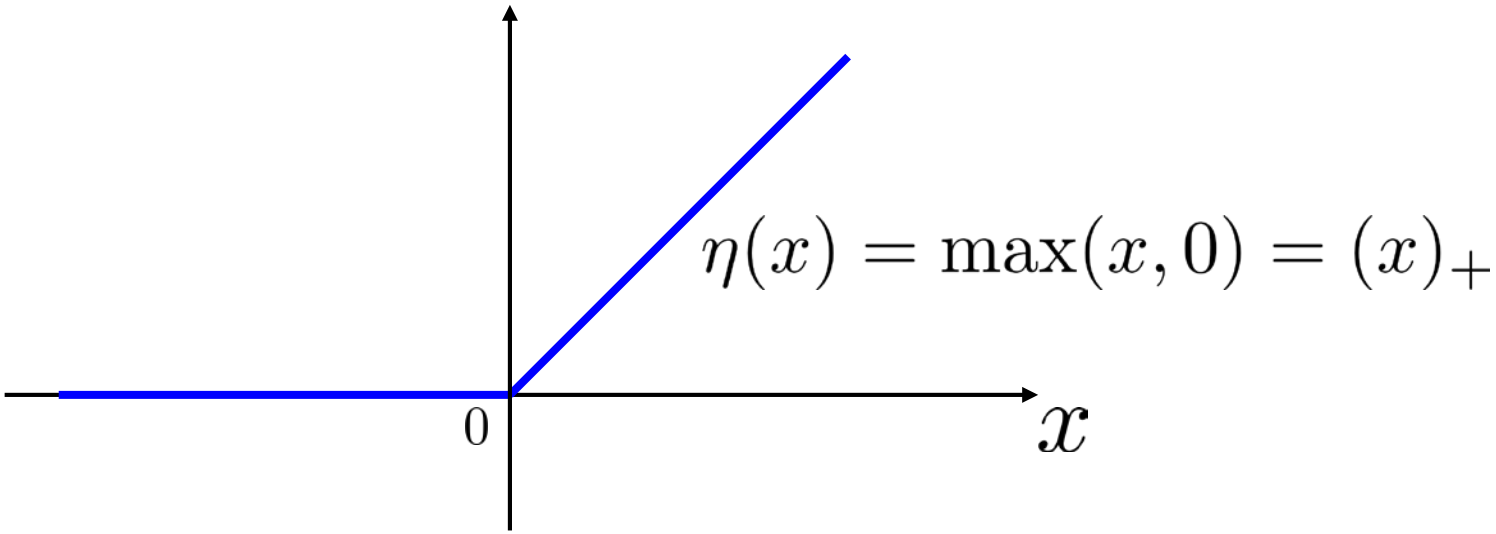
$h \circ h(x)$



$h \circ h \circ h(x)$

ReLUの表現力

- ReLU活性化関数



- 現在広く使われている
(LeakyReLUなどの亜種もあるがかなりスタンダード)

- 統計的性質も解明されつつある
  - 万能近似能力あり
  - (区分的) 滑らかな関数の推定
  - 区分線形関数の表現
  - 有理関数の表現
  - 関数のテンソル積，合成関数の表現

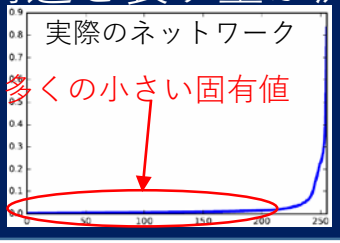
深層学習の汎化誤差理論

[T. Suzuki. Fast learning rate of deep learning via a kernel perspective. arXiv:1705.10182, 2017.]

深層学習のネットワーク構造を決定する指針はないか？

- 「自由度」という深層ネットワークの構造を表す量が汎化誤差に影響

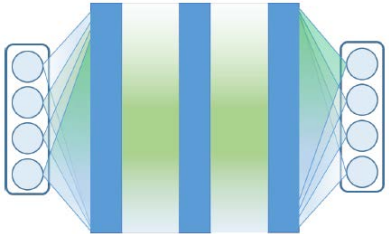
「自由度」は中間層の出力の分散共分散行列の固有値に対応して決まる



小さい固有値が多ければ横幅は狭くて良い

深層学習の汎化誤差を決める要素は何か？
→**自由度**が重要

深層NNの積分表現（真の関数）

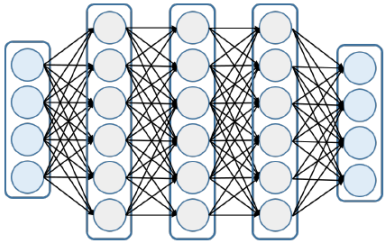


$$F_\ell(\tau,x)=\int_{\mathcal{T}_\ell} \underbrace{h_\ell^o(\tau,\tau')}_{\text{Weight}}\eta(F_{\ell-1}(\tau',x))\mathrm{d}Q_\ell(\tau')+\underbrace{b_\ell^o(\tau)}_{\text{Bias}}$$

有限近似

求積法の理論

有限次元モデル



汎化誤差=真の関数とモデルのずれ（バイアス）＋モデルの複雑さ（バリアンス）

・真の関数を表すために積分表現を導入
・積分表現から各層に再生核ヒルベルト空間を定義
・空間に付随した「自由度」を定義

自由度 $N_\ell(\lambda)=\sum_{j=1}^{\infty}\frac{\mu_j^{(\ell)}}{\mu_j^{(\ell)}+\lambda}$

ただし$\mu_j^{(\ell)}$は各層に対応するカーネルの固有値

（各層の実質的次元）

定理 第ℓ層の横幅m_ℓが$m_\ell \geq N_\ell(\lambda_\ell)$ならば

$$\|\hat{f}-f^*\|_{L^2}^2 \leq 2(\hat{\delta}^2+\epsilon_n^2)$$

バイアス $\hat{\delta}=\sum_{\ell=2}^{L}2\sqrt{\hat{c}_\delta^{L-\ell-1}R^{L-\ell}\sqrt{\lambda_\ell}}$

バリアンス $\epsilon_n=C\sigma\sqrt{\frac{\sum_{\ell=1}^{L}m_{\ell+1}m_\ell}{n}\log(n)}$.

一般の深層NN $\sum_{\ell=1}^{L}n^{-\frac{1}{1+2s_\ell}}\log(n)$

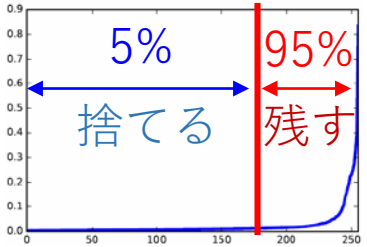
3深NN（カーネル法） $n^{-\frac{1}{1+s_1}}\log(n)$

理論の応用

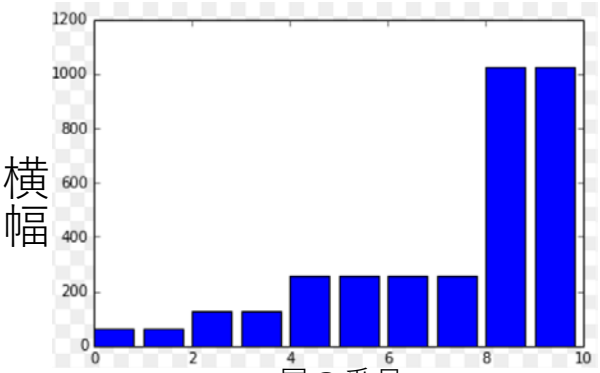
- **構造の自動決定**：各レイヤーの横幅をデータから決定できる.
  →**ネットワークの圧縮に利用：予測値計算の高速化+メモリ効率化**

構造の自動決定：各層の横幅（チャネル数）

VGG13:
よく使われるモデル



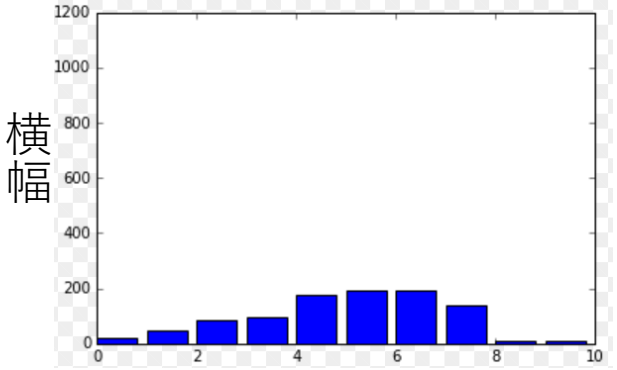
64,64,128, 128,256,256,256,256,1024,1024



精度：0.9374

提案手法でサイズを自動決定
結果的に大きくサイズを圧縮

37,58,114,117, 229,236,234,201, 10,10

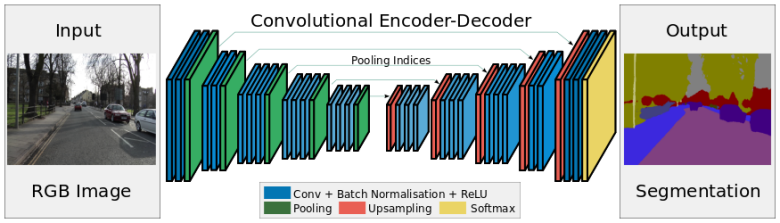


精度：0.9375

データ：cifar10

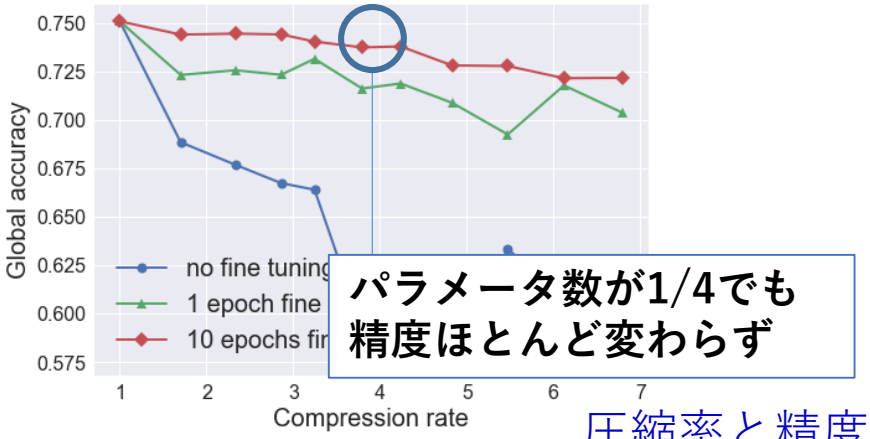
モデルを圧縮しても精度は損なわず

SegNet(-Basic)の圧縮



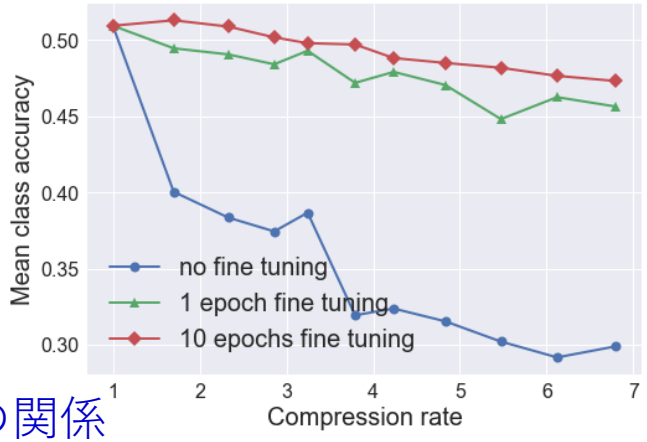
SegNet-Basicに応用

Global Accuracy



パラメータ数が1/4でも
精度ほとんど変わらず

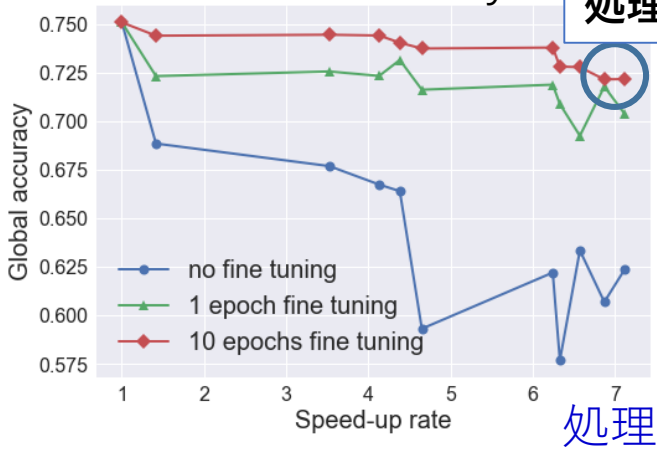
Mean Class Accuracy



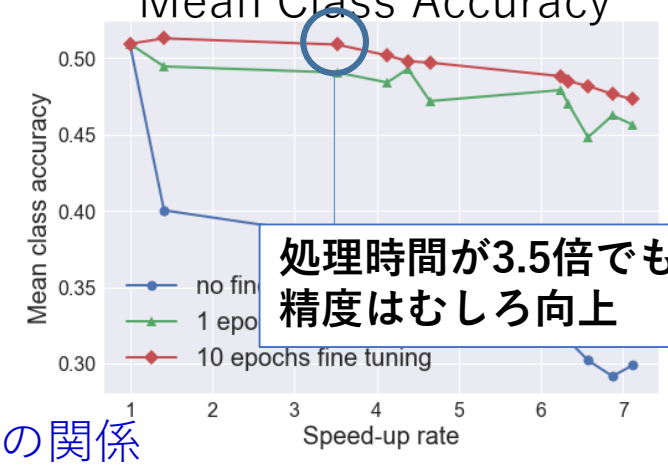
圧縮率と精度の関係

Global Accuracy

処理時間7倍



Mean Class Accuracy

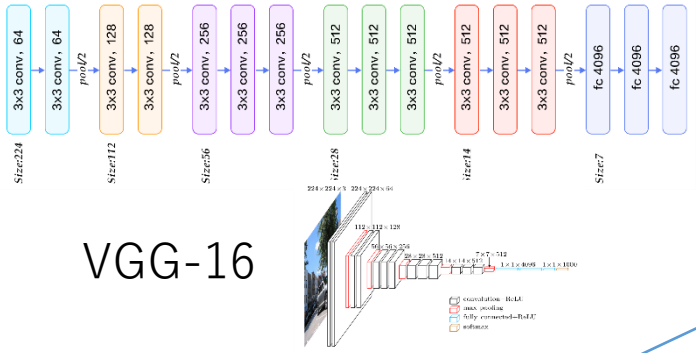


処理時間が3.5倍でも
精度はむしろ向上

処理時間と精度の関係

ImageNetデータセットでの実験

- 1,300万枚の訓練画像
- 1,000クラスへの分類



VGG-16

VGG-16ネットワークの圧縮

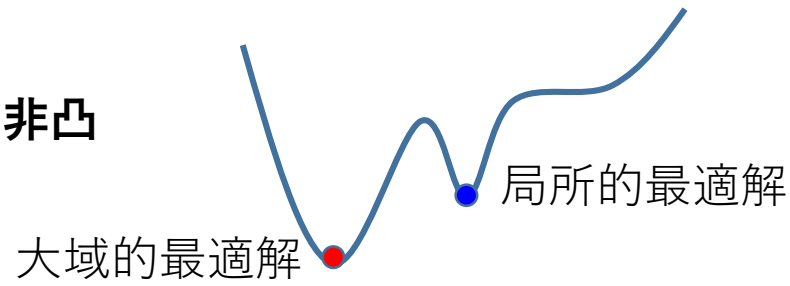
Model	Top-1	Top-5	# Param.	FLOPs
Original VGG	68.34%	88.44%	138.34M	30.94B
SqueezeNet	57.67%	80.39%	1.24M	1.72B
ThiNet-Conv	69.80%	89.53%	131.44M	9.58B
ThiNet-GAP	67.34%	87.92%	8.32M	9.34B
ThiNet-Tiny	59.34%	81.97%	1.32M	2.01B
Ours-Conv1	72.23%	91.17%	132.75M	22.41B
Ours-Conv2	69.61%	89.34%	113.92M	9.71B
Ours-Conv-FC	68.66%	88.90%	45.77M	9.58B
Ours-GAP	67.09%	87.90%	8.40M	12.5B
Ours-Tiny	60.10%	82.89%	2.31M	2.07B

精度向上

元モデルの1/3程度のサイズでむしろ精度向上　我々の提案手法

局所最適性

深層学習の目的関数は非凸



- 深層NNの局所的最適解は全て大域的最適解：
  Kawaguchi, 2016; Lu&Kawaguchi, 2017.

  ※ただし対象は<u>線形NN</u>のみ.

  → 臨界点が大域的最適解であることの条件も出されている
  (Yun, Sra&Jadbabaie, 2018)

- 低ランク行列補完の局所的最適解は全て大域的最適解：
  Ge, Lee&Ma, 2016; Bhojanapalli, Neyshabur&Srebro, 2016.

$$\min_{U \in \mathbb{R}^{M \times k}} \sum_{(i,j) \in E} (Y_{i,j} - (UU^\top)_{i,j})^2$$

3層NN-非線形活性化関数-

二層目の重みを固定する設定

(Tian, 2017; Brutzkus and Globerson, 2017; Li and Yuan, 2017; Soltanolkotabi, 2017; Soltanolkotabi et al., 2017; Shalev-Shwartz et al., 2017; Brutzkus et al., 2018)

固定 こちらのみ動かす

$$y = \sum_{j=1}^{k} v_j \eta(w_j^\top x + b_j)$$

- Li and Yuan (2017): ReLU，入力はガウス分布を仮定
  - SGDは多項式時間で大域的最適解に収束
  - 学習のダイナミクスは2段階
    → 最適解の近傍へ近づく段階 + 近傍での凸最適化的段階
- Soltanolkotabi (2017): ReLU，入力はガウス分布を仮定
  - 過完備（横幅>サンプルサイズ）なら勾配法で最適解に線形収束
    (Soltanolkotabi et al. (2017)は二乗活性化関数でより強い帰結)
- Brutzkus et al. (2018): ReLU
  - 線形分離可能なデータなら過完備ネットワークで動かしたSGDは大域的最適解に有限回で収束し，過学習しない．
    (線形パーセプトロンの理論にかなり依存)

Li and Yuan (2017): Convergence Analysis of Two-layer Neural Networks with ReLU Activation.
Soltanolkotabi (2017): Learning ReLUs via Gradient Descent.
Brutzkus, Globerson, Malach and Shalev-Shwartz (2018): SGD learns over parameterized networks that provably generalized on linearly separable data.

3層NN-非線形活性化関数-

二層目の重みも動かす設定

両方動かす

$$y = \sum_{j=1}^{k} v_j \eta(w_j^\top x + b_j)$$

※細かい強い仮定が置かれているので文章から結果を鵜呑みにできないことに注意.

- Du et al. (2017): CNNを解析
  - **勾配法は局所最適解があっても非ゼロの確率で回避可能**
    → ランダム初期化を複数回行えば高い確率で大域解へ
  - ガウス入力を仮定
- Du, Lee & Tian (2018): CNN, vj固定だが非ガウス入力で大域的最適解への収束を保証.

学習ダイナミクスとセットで議論

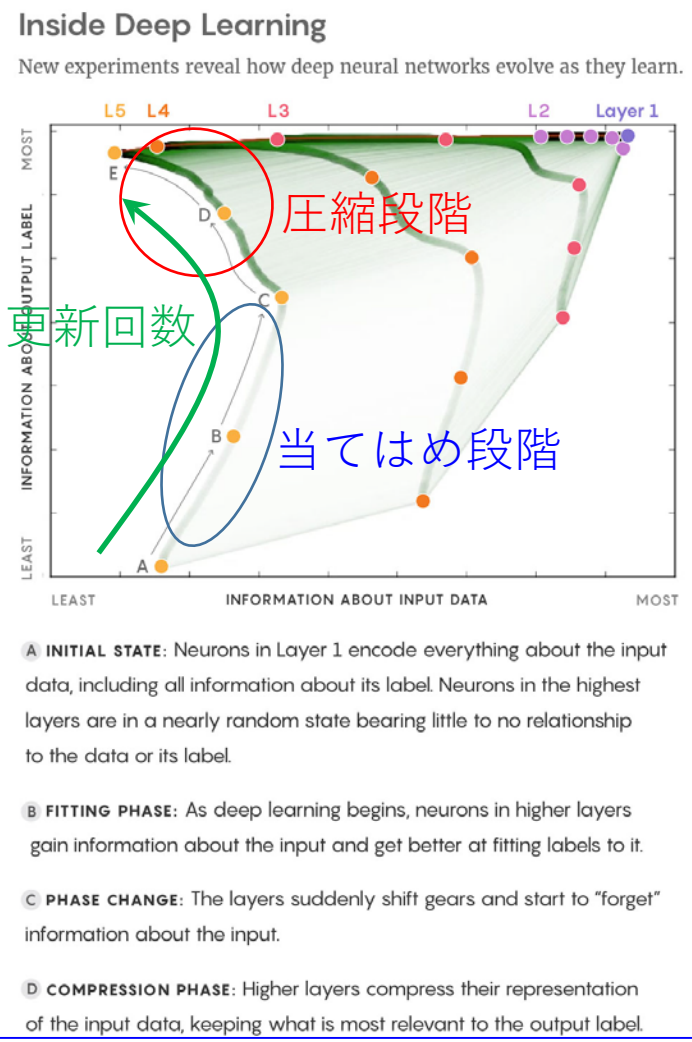
その他のアプローチ

- テンソル分解を用いた大域的最適性の議論: Ge, Lee & Ma (2018).
- カーネル法的解釈+Frank-Wolfe法による最適化：Bach (2017).

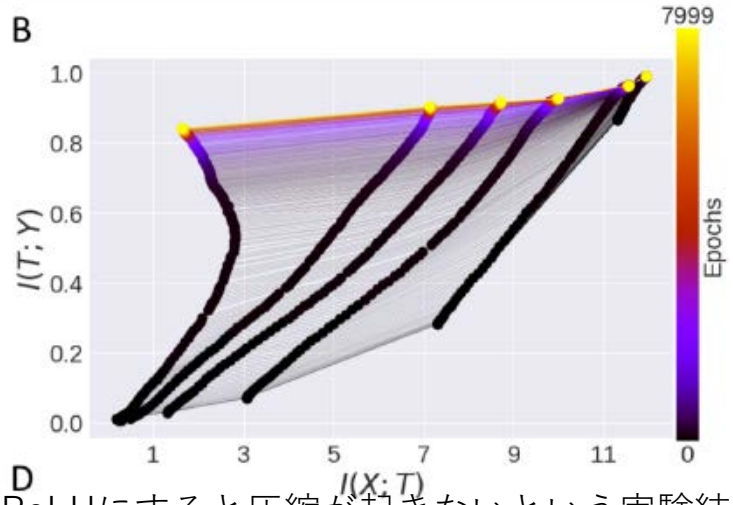
Du, Lee, Tian, Poczos & Singh (2017): Gradient Descent Learns One-hidden-layer CNN: Don't be Afraid of Spurious Local Minima.
Du, Lee, Tian (2018): When is a convolutional filter easy to learn?
Ge, Lee & Ma (2018): Learning one-hidden-layer neural networks with landscape design.
Bach (2017): Breaking the Curse of Dimensionality with Convex Neural Networks.

Information Bottleneck

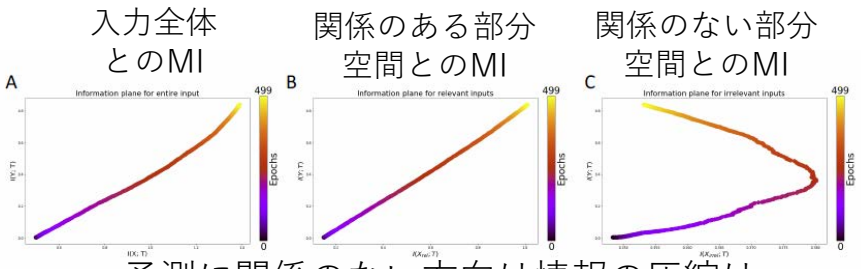
中間層と入力および出力との相互情報量



SGDによる最適化の間，まずデータへの当てはまりを良くしてから，無駄な情報の圧縮が始まる，という説



ReLUにすると圧縮が起きないという実験結果も．

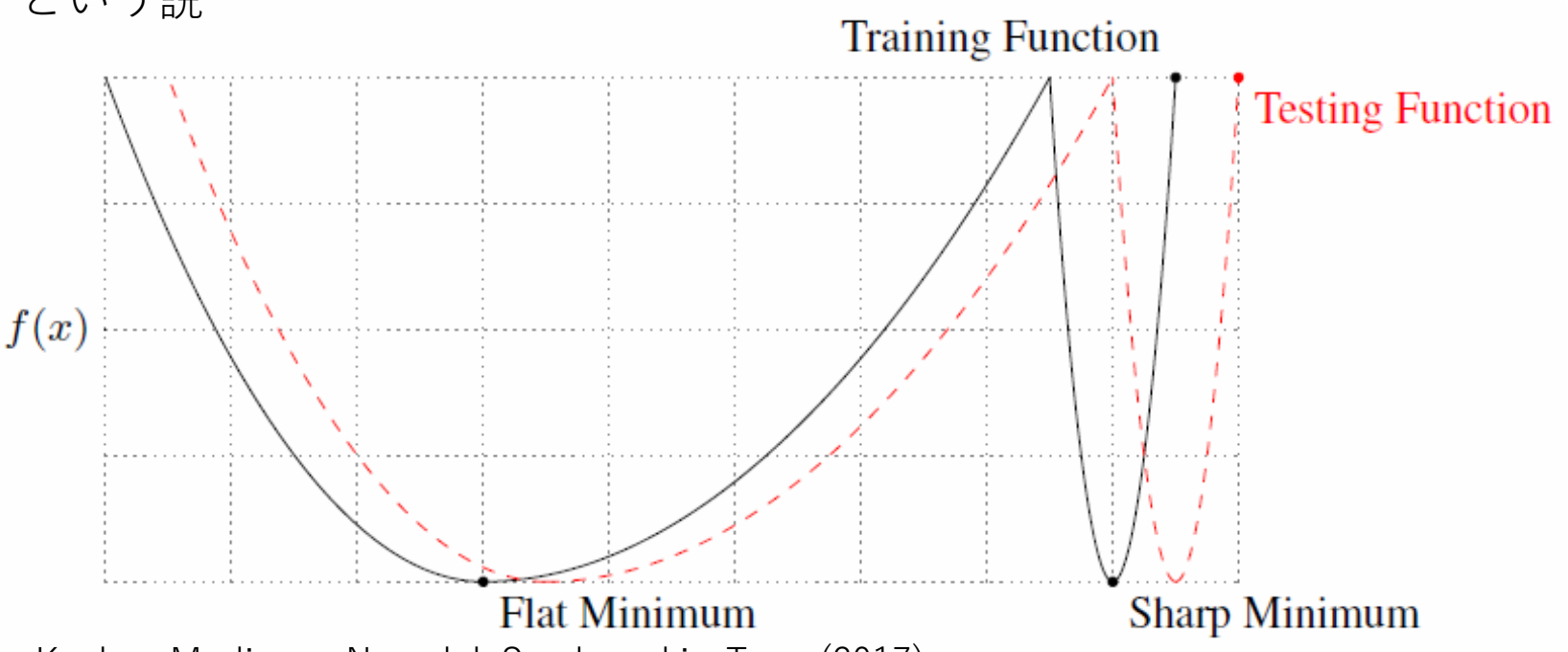


予測に関係のない方向は情報の圧縮は進んでいるという実験結果．

Tishby, Pereira, Bialek (2000): The information bottleneck method.
Tishby, Zaslavsky (2015): Deep learning and the information bottleneck principle.
Schwartz-iv, Tishby (2017): Opening the black box of Deep Neural Networks via Information.
Saxe, Bansal, Dapello, Advani, Kolchinsky, Tracey, Cox (2018): On the information bottleneck theory of deep learning.

Sharp minima vs flat minima

SGDは「フラットな局所最適解」に落ちやすい→良い汎化性能を示す
という説



Keskar, Mudigere, Nocedal, Smelyanskiy, Tang (2017):
On large-batch training for deep learning: generalization gap and sharp minima.

$$\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha_b \underbrace{\left(\frac{1}{b} \sum_{j=1}^{b} \nabla_\theta \ell(z_{i_j}; \theta) \right)}_{\cong \text{正規分布}}$$

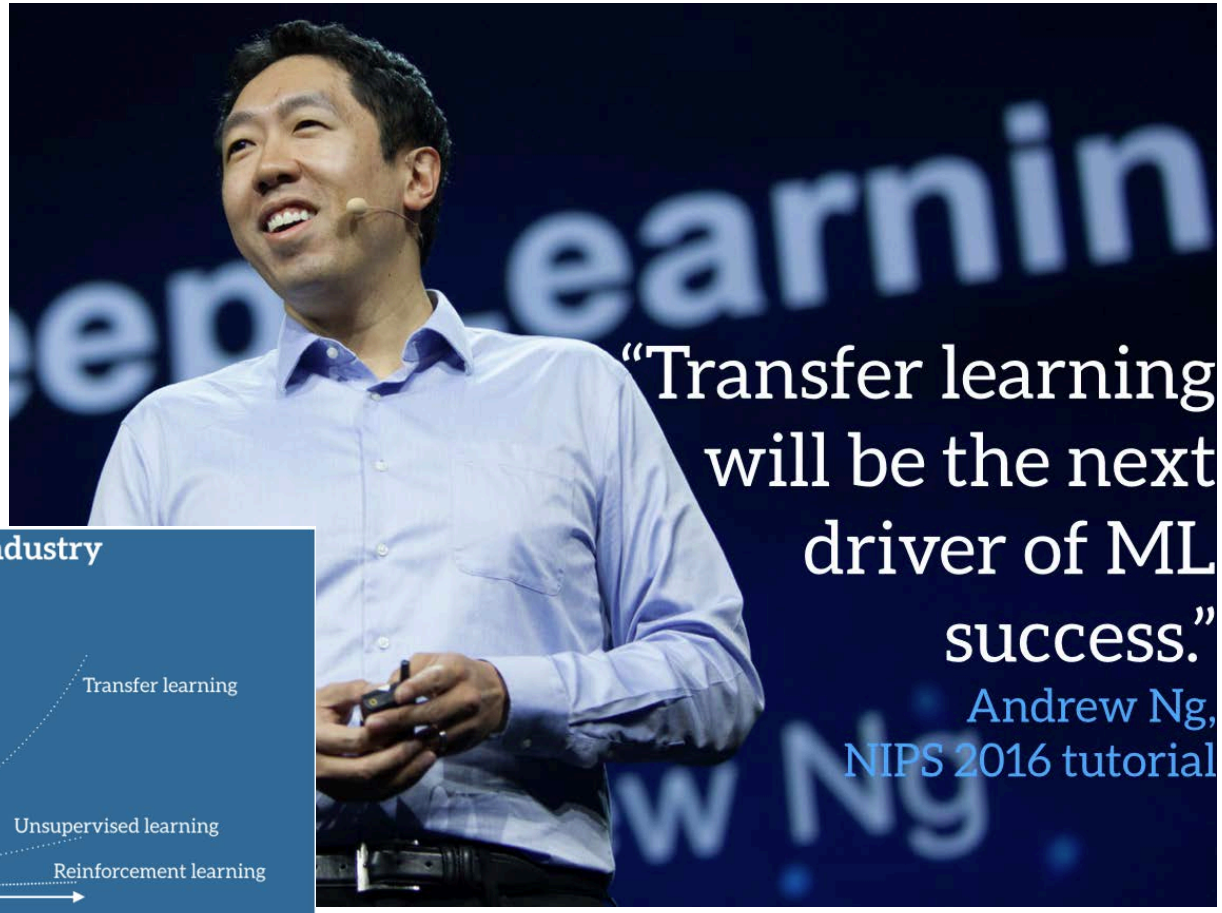
→ランダムウォークはフラットな領域にとどまりやすい

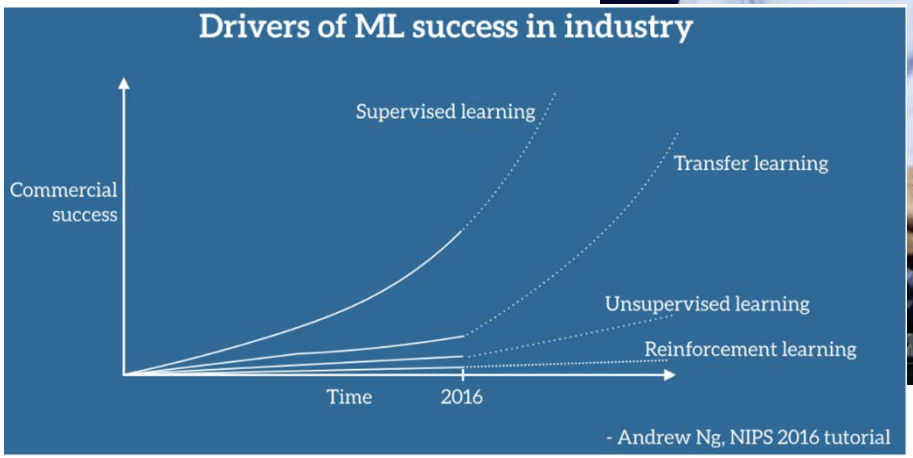
- 「フラット」という概念は座標系の取り方によるから意味がないという批判. (Dinh et al., 2017)
- PAC-Bayesによる解析 (Dziugaite, Roy, 2017)

転移学習・メタ学習

いかに少ないデータで学習するか？
大量のデータで学習しておき，興味のある問題にその知識を「転移」させる．

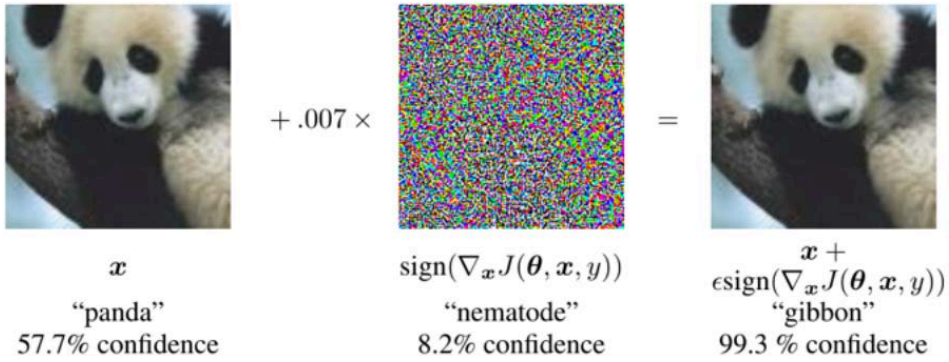
転移学習
教師無し学習
メタ学習
ワンショット学習
Learn-to-learn





深層学習の脆さ

- Adversarial example



少し作為的ノイズを入れただけでパンダをテナガザルと間違える.
しかもかなり強い自信をもって間違える.

[Szegedy et al.: Intriguing properties of neural networks. ICLR2014.]

標識をハックすることで誤認識を誘発.

「STOP」を「スピード制限時速45mile」と誤認識

[Evtimov et al.: Robust Physical-World Attacks on Machine Learning Models. 2017]

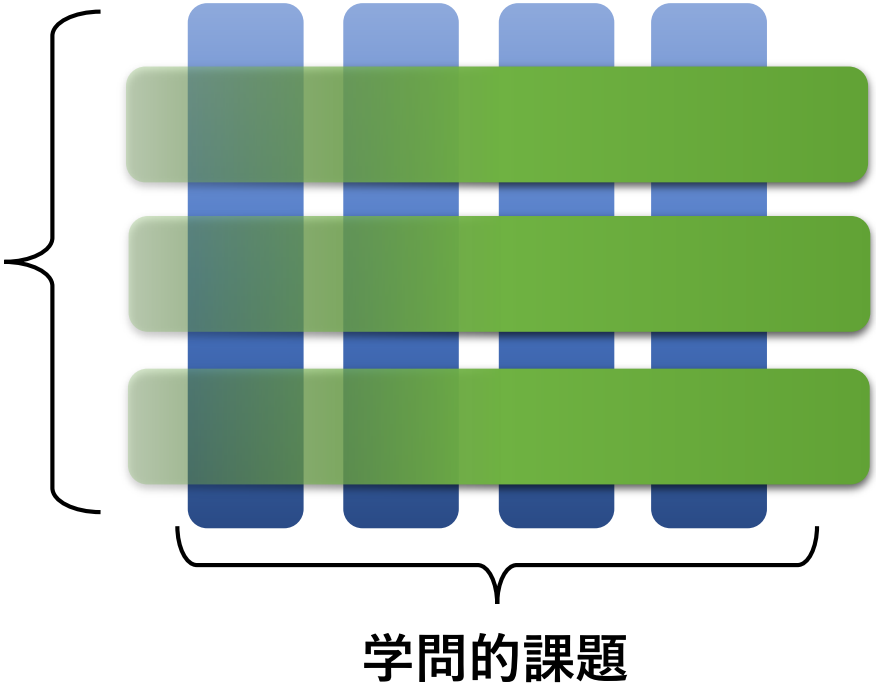
敵対的入力 (adversarial example) に関する研究は現在盛り上がってる.
様々な対処法 (dropoutやVirtual Adversarial Trainingなど) も提案されている.
しかし，深層学習の信頼性評価はまだ難しい

最後に

- 機械学習基礎研究による各種方法論の正しい理解
- 社会のニーズに応える産業界と時代によらない普遍的価値を求めるアカデミアの交流

「機械学習は両業界の距離が近い」

横糸と縦糸の関係



ご清聴ありがとうございました.