



2022年6月20日

深層学習が優位性を発揮する特異データ空間の存在を証明

1. 発表者：

今泉 允聡（東京大学 大学院総合文化研究科 附属先進科学研究機構／同研究科
広域科学専攻 准教授／情報・システム研究機構 統計数理研究所 客員准教授）
福水 健次（情報・システム研究機構 統計数理研究所 教授）

2. 発表のポイント：

- ◆ 深層学習が解析するデータが特異データ空間のある領域に属するとき、深層学習の精度が従来法に優越することを数学的に証明した。
- ◆ 深層学習が従来のデータ解析法に優越する原理を説明できる数学的理論を構築した。
- ◆ 深層学習の性能を解明する理論の発展や、ネットワーク設計などへの工学的応用が期待される。

3. 発表概要：

東京大学大学院総合文化研究科附属先進科学研究機構の今泉允聡准教授、情報・システム研究機構統計数理研究所の福水健次教授による研究チームは、深層学習による回帰問題（教師あり学習の一種）の汎化誤差（注1）を数学的に解析しました。その結果、深層学習が解析するデータがある種の特異性（注2, 図1）を持つ時に、深層構造を持たない従来のデータ解析法（注3）よりも高い性能を発揮することを数学的に証明しました。加えてこのような原理で深層学習を優越させるデータ空間中の領域を、特異性を用いて特定しました（図2）。深層学習が高い性能を発揮する原理は不明な点が多いですが、この成果により数学的に精緻な理論的基礎づけが与えられました。今後は、より具体的な深層学習の理論の発展や、深層学習の高速化につながるアルゴリズムの開発などにつながることを期待されます。

本研究成果は、国際科学雑誌「Journal of Machine Learning Research」にオンライン掲載されました。

本研究は、JST さきがけ「深層学習の高速化にむけた適応ネットワークの数学的発見と学習法開発（課題番号：JPMJPR1852）」、JST 創発「深層学習の原理記述に向けた構造汎化理論スキームの開発（課題番号：JPMJFR216I）」の支援により実施されました。

4. 発表内容：

<研究の背景>

深層学習は従来法に比べて高い性能を発揮するデータ解析法ですが、その原理を記述できる理論は未だ発展途上です。特に既存理論においては、非深層法（深層構造を持たない従来のデータ解析法：注3参照）が十分良い性能を発揮することが数学的に証明されており、深層学習の実際の優位性を理論的に説明することは困難でした。

<研究内容>

東京大学大学院総合文化研究科附属先進科学研究機構の今泉允聡准教授、情報・システム研究機構統計数理研究所の福水健次教授による研究チームは、データがある種の特異性（非滑らかさ：注2参照）を持つ状況に注目し、深層学習の性能を数学的に解析しました。特異性を持つデータとは、例えば物理的な相転移現象のように、わずかな変化が物の性質を質的に大きく変えるような状況を表します。既存理論では特異性を持たないデータが主に調べられてきたため、非深層法の性能を理論的に保証できない可能性がありました。

結果として、データが一定の条件を満たす特異性を持つ場合、深層学習の誤差は非深層法よりも常に小さくなることを数学的に証明しました。具体的には、データ数が増えたときの誤差の減少スピードが、深層学習が理論的な最適速度を達成するが、非深層法は非最適になることを明らかにしました。すなわち、データが相転移現象のような急激な変化を表現する場合、深層学習が常に高い精度を発揮し、非深層法に優越することを示しました。

さらに、この優位性に必要な特異性の性質を調べることで、データ空間（可能なデータの集合）において深層学習を優越させるデータ領域の特定・描画を行いました。すなわち、特異性を持つデータがこの特定された領域に属しているならば、深層学習の優位性が発揮されることを明らかにしました。これにより、解析の上で深層学習が必要になる状況や、非深層法で十分な性能を発揮できる状況を明らかにしました。

<社会的影響>

深層学習は高い性能を発揮できるデータ解析手法ですが、その原理は未だ不明な点が多く、また計算コストの大きさや解釈性の低さといった実用上の問題点が多く残っています。本研究の成果は、深層学習の原理を解明するといった理論の試みに貢献するとともに、ニューラルネットワーク設計や学習を効率化するアルゴリズムなどの工学的応用につながると考えられます。

本研究は、JST さきがけ「深層学習の高速化にむけた適応ネットワークの数学的発見と学習法開発（課題番号：JPMJPR1852）」、JST 創発「深層学習の原理記述に向けた構造汎化理論スキームの開発（課題番号：JPMJFR216I）」の支援により実施されました。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「Journal of Machine Learning Research」（オンライン版：2022年2月）
論文タイトル：Advantage of Deep Neural Networks for Estimating Functions with Singularity on Hypersurfaces
著者：Masaaki Imaizumi, Kenji Fukumizu

6. 問い合わせ先：

東京大学 大学院総合文化研究科 附属先進科学研究機構 准教授
情報・システム研究機構 統計数理研究所 客員准教授
理化学研究所 革新知能統合研究センター 客員研究員
科学技術振興機構 創発研究者（兼任）
今泉 允聡（いまいずみ まさあき）

7. 用語解説：

(注1) 汎化誤差：

データをもとに構成した予測手法の損失（誤りの大きさ）の期待値。データ解析手法の性能の尺度の一つとして用いられる。

(注2) 特異性：

教師あり学習のためのデータを入力と出力（教師データ）をつなぐ関数を用いて表現したときの、その関数が持つ非滑らかさ。

(注3) 従来のデータ解析法：

ここでは、非深層法（多くの層を重ねずにデータを解析する手法）を表している。例えばカーネル法やフーリエ法といった手法が挙げられる。

8. 添付資料：

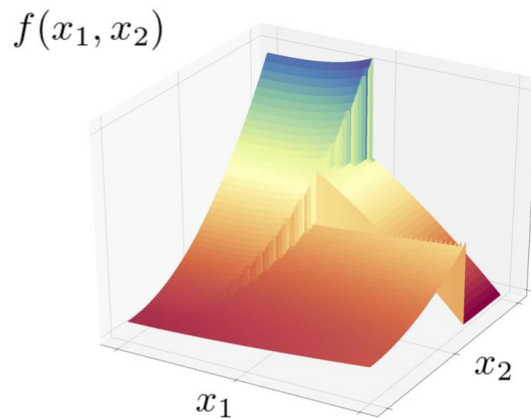


図1：データに内在する特異性の例。この図は2次元入力データ (x_1, x_2) と1次元出力データ $f(x_1, x_2)$ の関係性を表現する関数 f をプロットしたもの。 f はいくつかの特異性（非滑らかさ）を持つ。相転移現象を表すデータなどは、このような関数を用いて記述される。

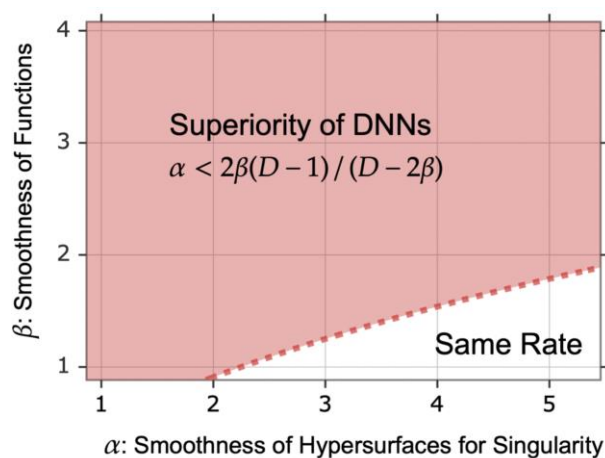


図2：データ空間と、その中にある深層学習を優越されるデータ領域（赤部分）。縦軸はデータを記述する関数の全体的な滑らかさの尺度 β 、横軸はその関数が持つ特異性の形状パラメータ α である。 (α, β) が赤い領域に含まれるとき、深層学習の優位性が保証される。