

研究計画

氏名：徐 宏 坤

研究のテーマ：

非ユークリッド空間の半教師あり学習モデルの扉を開ける

背景：

コンピュータの進化は新しい情報処理を可能にしている。近年では、コンピュータビジョン、自然言語処理、データマイニング、ロボティクスなどの分野において、エンドツーエンド (End-to-End) のディープラーニングをはじめ、さまざまな機械学習アルゴリズムが応用され、驚くべき結果を得た。

とはいえ、一般の画像であれ、オーディオであれ、テキストであれ、いずれ明確なグリッド構造を持つデータである。これらのデータに基づいて構築された機械学習アルゴリズムは、より複雑な構造のデータには適用されていない。3D オブジェクトのポリゴン表現をはじめ、ソーシャルネットワーキング、化合物の分子構造、プログラムのクラス図、人間の脳内機能的結合性ネットワーク (Functional Connectivity Network) [\[1\]](#) などの非ユークリッド構造 (Non Euclidean Structure) データまたは多様体 (Manifold)¹ 構造データの分析及び予測タスクは依然として重要な課題である。これらのデータには不規則な構造があるため、いくつかの基本的な数学演算がこれらのデータに汎用することは不可能である²。さらに、これらのデータは常にスケーラビリティ (Scalability)、即ち規模の拡大可能性を持っている。ソーシャルネットワーキングを例にとると、人々の社交範囲は絶えずに拡大しているので、ソーシャルネットワーキングもいつでも広げられている。これは、新しい

¹ 多様体 (manifold) とは、局所的にはユークリッド空間と見なせるような図形や空間 (位相空間) のことである。多くの論文では、非ユークリッド構造データの一つとして見られる。これからの叙述には、特に指定しない場合、グラフ (graph) と多様体のことをまとめて非ユークリッド構造データと呼ぶ。

² 例えば、畳み込み (convolution) とプーリング (pooling) は直接にグラフに応用できない。

課題をもたらす一方で、この研究の現実的な意味も示している。

また、ほとんどの機械学習において、学習データに現れないデータを予測するためには、モデルに何らかの制約が必要となる。例えば、線形回帰における目的関数の二乗誤差、バイス推定における事前分布、CNN における移動不変性、RNN における長期依存性等々。これらの制約は、これらの学習モデルがそれぞれ異なる応用範囲があることを意味する一方で、新しいシナリオでそれらを用いて新しいモデルを作成することにも大きな挑戦をもたらす。とくに、コネクショニズム(Connectionism)が急速に発展している今は、ニューラルネットワークの限界を再検討することは必要になっている。

次に、教師あり学習モデルは確かに立派な成果を収めた。業界では多くの実用的な製品も実現された。しかし、多くの中小企業に対して、自ら教師あり学習アルゴリズムを用いて一定の精度のモデルまで機械を学習させるのはまだ現実ではない。その理由の一つは、大量のラベル付き訓練標本のコストは高すぎることである。とくに、社内秘密データのみ利用できる場合、転移学習などの手法で機械学習モデルの訓練標本の量に対する依存をいかに減らしても、訓練に利用できるデータの量が少ないという問題を根本的に解決することは不可能である。そして、ラベル付き訓練標本の数が少ないため、訓練済みモデルの汎化能力が低いこともよくある。少数のラベル付き訓練標本と比較して、マークされていないデータの数のほうは、はるかに大きい傾向がある。これらのデータに隠された情報は教師あり学習方法で無視されている。一方、教師なし学習モデルも少数のラベル付き訓練標本の情報を見落としている。

研究方法:

そこで私は修士課程に進学し、以下の観点からこの三つの課題に取り組みたい。

(1) 既存の手法を統合・拡張する

既存の機械学習モデルをさらに研究するには、さまざまな機械学習モデルを学んで理解するのは正しい道だと知っている。さまざまな機械学習モデルに興味深い私は**グラフネットワーク(Graph Network)**の研究を出発点として、グラフに対する機械学習の研究を繰り返したいと考える。グラフネットワークは、グラフを入力として受け取り、出力として返す。入力グラフには、エッジ(E)、ノード(V)、およびグローバルレベル(u)属性がある。出力グラフの構造は同じであるが、属性は更新された [\[2\]](#)。

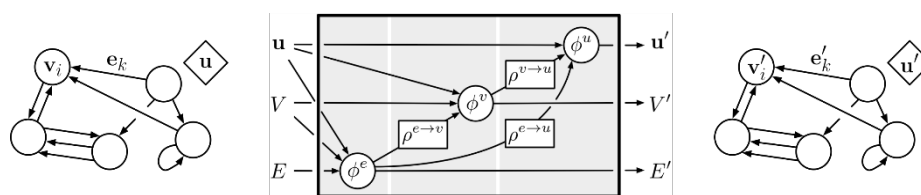


Figure 1 グラフネットワークブロック(Graph Network block, GN block) [\[2\]](#)

グラフネットワークに関する研究は何年も前から始まったが、過去2年間で急速に発展し始めた。世界はオブジェクトとオブジェクト間の関係によって構成されていると思う。これはグラフの構造と一致する。したがって、グラフネットワークは解釈性の高い分析や可視化手法の一つだと思う。そして、ディープラーニングのテクニックと組み合わせることで、さまざまなグラフニューラルネットワーク(Graph Neural Network, GNN)が派生した。これらのニューラルネットワークには、教師あり学習手法もあるし、教師なし学習手法もあるし、半教師あり学習手法もある。[\[3\]](#) [\[4\]](#) [\[5\]](#)。GNNによって、ある程度で、既存の機械学習の研究範囲が拡張された。

しかし、グラフネットワークにも多くの欠点がある。例えば、グラフ上で再帰や制御フローなどを表示することは困難である [\[2\]](#)。特に指摘すべき点は、グラフネットワークから派生したアルゴリズムの時間と空間の計算量は往々にして多い。グラフネットワークの欠点に対して、解決にはまだ長い時間が必要だと思う。それにもかかわらず、グラフネットワークの研究は、私たちに非ユークリッド構造データの分析タスクに良い考えをもたら

した。グラフネットワークに基づく更なる勉強や研究をしたいと思う。

一方で、グラフというデータ構造は、半教師あり学習に適合する。実際、グラフを用いた半教師あり学習の研究は、グラフネットワークの研究よりも早めに始まった。最初のグラフに基づく半教師あり学習(Graph-based methods)は、直接にクラスタリング仮定(Cluster Assumption)に基づいて、学習目標をグラフの最小カット(Mincut)を見つけることと見なす [\[6\]](#)。だが、このアルゴリズムの空間計算量はかなり大きい、サンプルの数は n の場合、グラフを表す接続行列のただ一回の計算量は $O(n^2)$ で、大規模なデータ処理タスクに運用することは困難である。それにもかかわらず、グラフに基づく半教師あり学習アルゴリズムは、まだ深く研究する価値があると思う。これから、グラフの半教師あり学習をはじめ、EM アルゴリズム、半教師あり SVM (Semi-supervised Support Vector Machine, S3VM)、半教師ありクラスタリング(Semi-supervised Clustering)、多様体正則化(Manifold Regularization) [\[7\]](#)、分歧に基づく半教師あり学習 (Disagreement-based Methods) [\[8\]](#) などの半教師あり学習方法を更なる研究し、新しい半教師あり学習アルゴリズムを打ち出すために、私の青春を賭けて努力したいと思う。

(2) 3次元世界タスクへの応用

理論の研究が実践と結びついてはじめて、理論中に見落された不備を見つけることが出来る。これは私が実際の仕事でつくづく実感した真理である。非ユークリッド空間の部分集合として、グラフ畳み込みネットワーク(Graph Convolutional Network, GCN)を含む様々な機械学習アルゴリズムを用いて、理論の研究結果を3次元世界タスクへ応用したいと思う。 [\[9\]](#) [\[10\]](#)

機械学習が画像やビデオなどの分野で広く応用されたように、3D オブジェクトに対す

る応用も重要な研究方向であると思う。CAE(Computer Aided Engineering)と xR(VR、AR、MR)などなどの産業の成長とともに、3D オブジェクトに関する研究も無限大の未来があると信じている。仮想世界の 3D オブジェクトは、もともと現実世界の 3D オブジェクトを模倣するように設計されたものである。例えば、物体の形状を模倣するためのポリゴンメッシュ(Polygon Mesh)、スタイルを模倣するためのマテリアル(Material)とマップ(Map)、生物の動きを模倣するためのスケルトン(Skeleton)、物理的な動きを模倣するための物理エンジン等々。3D オブジェクトに対して考えるべき要素はかなり多い。したがって、画像への応用より 3D オブジェクトへの応用のほうがかなり難しい。しかし、より多くの面白い応用ができるはずである。

- Tシャツを丸めると、Tシャツであるか、それともズボンであるか？
- どのようにスケルトンのない鳥のモデルを人類のように運動させるか？
- 現実世界の法則に従い、どうすれば存在しないモデルが生成できるか？

多くの機械学習の応用と同じように、3D オブジェクトに対する主な応用は分類と認識である。それは点群(Point cloud)またはポリゴンメッシュによって行うことができる。多様体の内部構造を学習させることで、3D オブジェクトの分類を実現する [\[11\]](#)。現実世界と違い、仮想世界では、3D オブジェクトの全てのプロパティが制御できる。この点から考えると、現実世界では解決できない問題でも、仮想世界では解決できるかもしれない。例えば、上記の三つの問題。3D オブジェクトの問題において良い結果を達成したい場合、位相幾何学(Topology)の知識が必要だと思う。もしチャンスがあれば、どんな数学の知識であっても、精一杯勉強して研究したいと思っている。

(3) さらなる考える

近年、創造的な新しい機械学習アーキテクチャが急速に開発された。多くの場合、基本

的な構造を持っているブロックを構成する設計パターンに従って、より複雑で深い計算階層とグラフが形成している。ネットワーク構造が深くなるにつれて、過適合(Overfitting)を防ぐことが難しくなるだけでなく、モデルの制御にさらなる難題をもたらす。ベイジアンネットワーク(Bayesian network)を発展させたジューディア・パール(Judea Pearl)氏は、今ほとんどのディープラーニングアルゴリズムは一つの曲線を当てはめるに過ぎないだと指摘して、因果革命(The Causal Revolution)と構造的因果モデル(Structural Causal Models)を提出した。[\[12\]](#)これが正しいかどうかは、異なる人は異なる答えを持つだろうが、私は統計的因果推論に興味深いので、もっと詳しく研究したいと思う。

最初に述べたとおり、多くの機械学習アルゴリズムの実際のパフォーマンスは、データの量と構造によって制限される。しかし、1 回限りの学習プロセスによって得られたテストデータにおいて精度が 100%に近づく機械学習モデルは本当に完璧な結果だろうか。私の意見では、それはそうではないと思う。データ構造への依存関係を取り除くことができなくとも、機械学習は、同じ構造のデータに対する学習の拡張性を持つべきだと思う。言い換えれば、**将来の機械学習モデルは自分自身の学習行為を学習できる能力を持つべきだと思う**。これは、ニューラルネットワークに反映すれば、局所的なニューロン(ノード)と重み(エッジ)を更新する能力であると考ええる。学習済みのモデルから特徴量を抽出する転移学習と、学習済みモデルのいくつかのレイヤーの重みを固定して再学習させるファインチューニングと違って、コンピュータは「レイヤー」の概念を超えて新しいデータに対して特定のニューロン(ノード)と重み(エッジ)を更新する能力を持つべきだと思う。ディープラーニングはよく判断理由が示せないブラックボックス型の人工知能であると言われる。これはコンピュータが自動的に抽出した特徴量が人間は理解できないからだと思う。コンピュータ自体の構造のため、抽出した特徴量が人間は理解できないのは当然

り前の結果だと思うが、コンピュータを自分の学習プロセスに介入させるにはどのようにすればいいのかを考え込まれるべきだと思う。そして、自分自身の学習行為を学習できる機械学習モデルが本当に実現できれば、このような機械学習モデルをどのように評価すればいいのかも考えるべき課題である。

機械学習分野でまだ解決していない未知がたくさんある。重い扉を押し開けたら、暗い道が続いているかもしれない。自分の答えを探し出すまで、めげずにその先の知らなかった世界を歩いて行こうと思う。

達成したい成果：

1. 関連分野で一生懸命研究を行っている人達と出会って、研究開発を共同で推進し、世界を広げる。
2. 最先端の機械学習アルゴリズム研究の難点と重点に対して、自分の意見や見解を述べる論文を発表する。
3. 研究の結果と組み合わせて、3D オブジェクトなどの分野で適切な応用を行う。
4. 3D オブジェクトの処理で実りある結果が得られた場合、ブロックチェーン (Blockchain) の理念と WebGL や JavaScript など技術を用いて、誰もこの技術を楽しんで体験できるウェブサイトをつくる。
5. 教育者なりの能力を持つ。

参考文献:

1. **Competition and cooperation among brain networks: Interactions between the default mode network and working memory network.** Hideya KOSHINO, Mariko OSAKA and Naoyuki OSAKA. *Japanese Psychological Review*. Vol.56. No.3, 376-391. 2013
2. **Relational Inductive Biases, Deep Learning, and Graph Networks.** Peter W. Battaglia, Jessica B. Hamrick, Victor Bapst, Alvaro Sanchez-Gonzalez, Vinicius Zambaldi, Mateusz Malinowski, Andrea Tacchetti, David Raposo, Adam Santoro, Ryan Faulkner, Caglar Gulcehre, Francis Song, Andrew Ballard and others. 2018.
3. **A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks.** Zonghan Wu, Shirui Pan, Fengwen Chen, Guodong Long, Chengqi Zhang, Philip S. Yu. 2019.
4. **A new model for learning in graph domains.** Marco Gori, Gabriele Monfardini, Franco Scarselli. IJCNN 2005.
5. **Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications.** Jie Zhou, Ganqu Cui, Zhengyan Zhang, Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Maosong Sun. 2018.
6. **Learning from Labeled and Unlabeled Data using Graph Mincuts.** Avrim Blum, Shuchi Chawla. ICML 2001
7. **Manifold Regularization: A Geometric Framework for Learning from Labeled and Unlabeled Examples.** Mikhail Belkin, Partha Niyogi, Vikas Sindhwani. 2006.
8. **Semi-Supervised Learning by Disagreement.** Zhihua Zhou, Ming Li. 2010.
9. **Geometric Deep Learning: Going beyond Euclidean data.** Michael M. Bronstein, Joan Bruna, Yann LeCun, Arthur Szlam, Pierre Vandergheynst. IEEE SPM 2017.
10. **Deep Convolutional Networks on Graph-Structured Data.** Mikael Henaff, Joan Bruna, Yann LeCun. 2015.
11. **Dynamic Graph CNN for Learning on Point Clouds.** Yue Wang, Yongbin Sun, Ziwei Liu, Sanjay E. Sarma, Michael M. Bronstein, Justin M. Solomon. CVPR 2018.
12. **Theoretical Impediments to Machine Learning with Seven Sparks from the Causal Revolution.** Judea Pearl. 2018