第11回全脳アーキテクチャ勉強会

深層学習の 学習過程における相転移

京都大学大学院情報学研究科システム科学専攻
大関　真之

QUANTUM ANNEALING　MACHINE LEARNING

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

自己紹介

- 大関真之
  - 京都大学大学院情報学研究科システム科学専攻助教
    - 理論物理学：統計力学、量子アニーリング
    - 機械学習：深層学習、ボルツマン機械学習

  - 東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻博士課程修了
    - 指導教官：西森秀稔「統計力学、量子アニーリング、etc」
  - ローマ大学物理学科プロジェクト雇用研究員
    - Leader：Giorgio Parisi「統計力学、最適化問題、etc」

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

引用：Google Scholar Citation, 顔 東工大の研究者たち Vol.13 西森秀稔

自己紹介

- 大関真之
  - 京都大学大学院情報学研究科システム科学専攻助教
    - 理論物理学：統計力学、量子アニーリング
    - 機械学習：深層学習、ボルツマン機械学習
  - 基盤研究(B)「量子アニーリングが拓く計算技術と機械学習の新時代」
  - 新学術領域「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」
  - CREST「ビッグデータ時代に向けた革新的アルゴリズム基盤」

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

自己紹介

- 大関真之
  - 京都大学大学院情報学研究科システム科学専攻助教
    - 理論物理学：統計力学、量子アニーリング
    - 機械学習：深層学習、ボルツマン機械学習
  - カンニング大関？！
    - 朝日新聞（H27.1.16）、Newton（H27.2.26）、ケトル（H27.6.15）
    - TBSテレビ「あさチャン！」(H27.1.19)、NHK総合「おはよう日本」（H27.3.27）

昨今では、小型ワイヤレスイヤホンや文具型メッセージ受信機によるカンニングも横行。ちなみに中国では、カンニング防止のため、1200人の生徒たちが学校の校庭でテストを受けさせられたというニュースが話題を呼んだ

京都大学
情報学研究科
大関真之助教

日本最先端のアタマの中身

全世界の学生たちが戦々恐々！

史上初のカンニング検出システム

QUANTUM
ANNEALING

MACHINE
LEARNING

FOCUS　Informatics

カンニングを見破るプログラムを開発

テストの正答データからカンニングの有無を検出

試験を受けて，答えがわからないときに，周りの人たちの答案を覗いてみたいと思うことはないだろうか。本人はバレないと思っていても，経験を積んだ教員が答案をチェックすると，不正が発覚する場合がある。カンニングの検出は，長年，人の勘に頼るところが大きかったが，京都大学大学院情報学研究科の大関真之助教らが，「機械学習」を利用した新しいプログラムを開発した。

採点データからカンニングを検出

人工知能でカンニング検出

京大などが開発

人工知能を使い、試験で他人の答案をのぞき見するなどのカンニングを検出する技術を、京都大などのグループが開発した。これまで教員の経験に頼っていた手法を取り込み、高い精度で自動的に見つけ出せるという。

日本物理学会の月刊誌電子版で発表した。京都大の大関真之助教（システム構成論）らは、「機械学習」と呼ばれる人工知能の技術を使い、試験を受ける人の過去の成績と、試験問題の難易度、クラスメートの回答の重なり具合などを計算するプログラムを作った。カンニングの疑いが低い人を順番に除外して、疑わざるを得ない人を特定する。

30人のクラスで1割が互いに回答をのぞき見するという設定で計算したところ、カンニングした全てのペアを特定できたという。大関さんは「従来の手法は『決めつけ』の恐れがあったが、この技術では回避できる」と話している。（阿部彰芳）

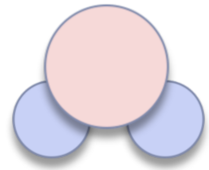
京都大学 KYOTO UNIVERSITY

今日は深層学習と統計力学の話

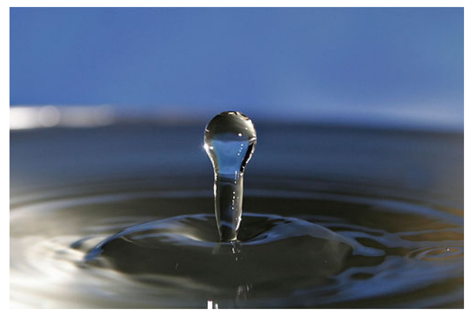
統計力学の話

原子と分子、そして物質

- 物質の構成単位としての原子と分子
  - 微視的には水はH_2O！



  - 巨視的には、温度や圧力が変わると、見た目がガラリと変わる

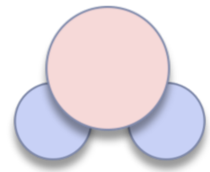


温度

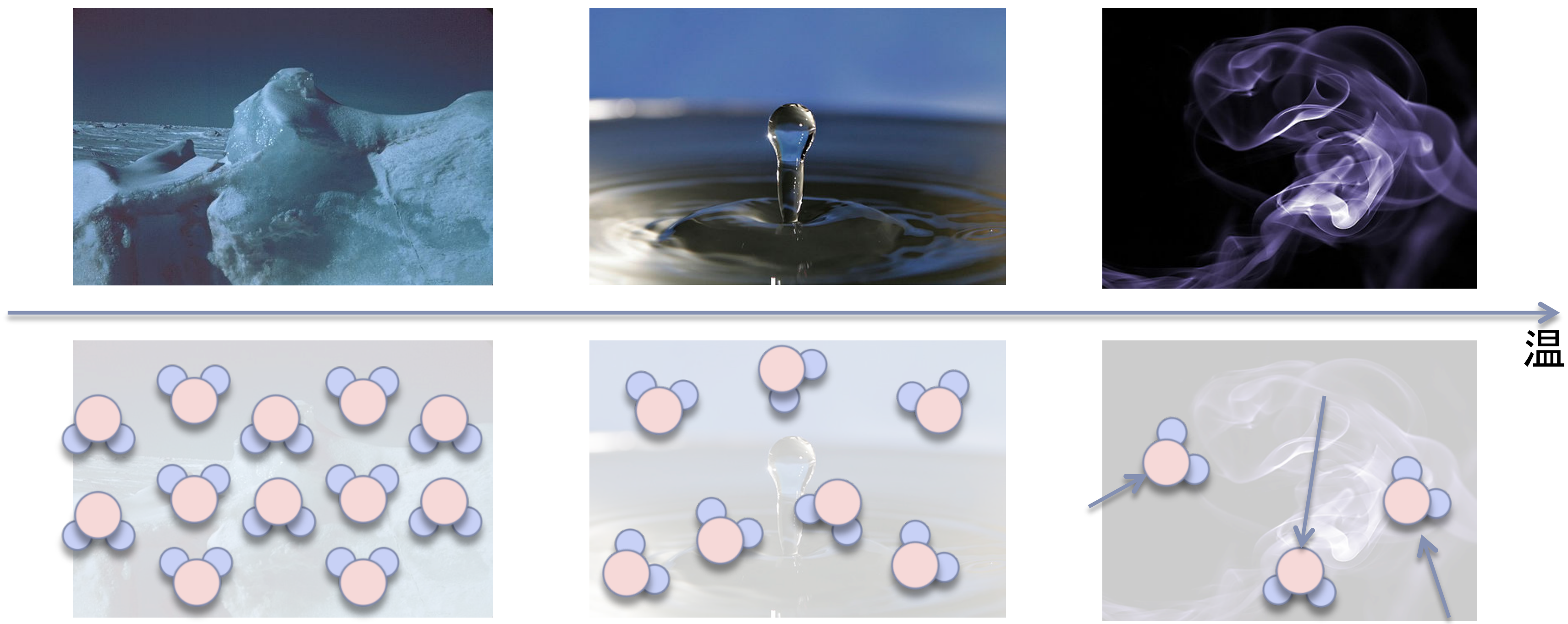
引用: wikipedia

原子と分子、そして物質

- 物質の構成単位としての原子と分子
  - 微視的には水は H_2O！



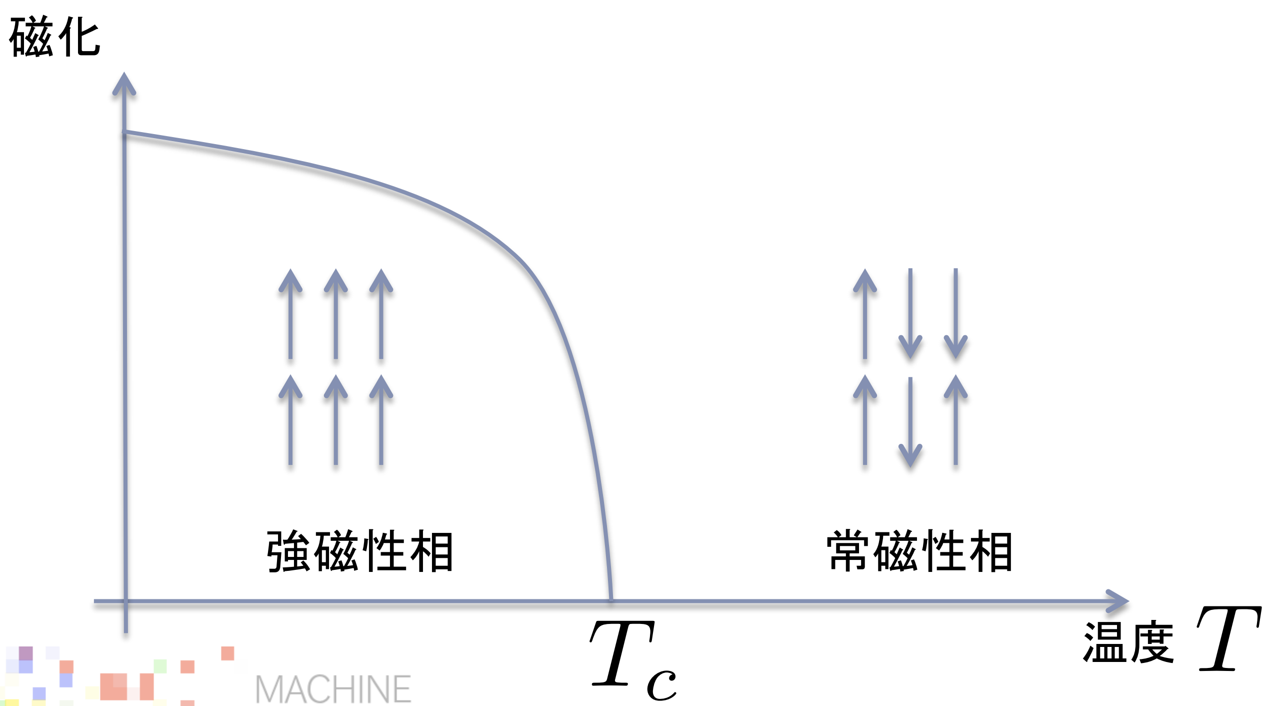
  - 巨視的には、温度や圧力が変わると、見た目がガラリと変わる



引用: wikipedia

原子と分子、そして物質

- 磁石の構成単位：磁気モーメント（スピン）
  - 微視的にはスピンが並ぶ
  - 巨視的には、温度の変化で、相転移が起こる



統計力学的アプローチの出発点

- ミクロな世界とマクロな世界を結ぶ処方箋
  - ハミルトニアン（エネルギー関数：ミクロ世界のルール）
    - 例：調和振動子（バネの運動）

$$H(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}\mathbf{x}^2$$

    - 例：Ising模型（磁性体のモデル）

$$H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} J\mathbf{x}$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学的アプローチの出発点

- ミクロな世界とマクロな世界を結ぶ処方箋
  - ハミルトニアン（エネルギー関数：ミクロ世界のルール）
    - 例：調和振動子（バネの運動）

$$H(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}\mathbf{x}^2$$

    - 例：Ising模型（磁性体のモデル）

$$H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} J \mathbf{x}$$

  - 確率分布による記述
    - Gibbs-Boltzmann分布

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{H(\mathbf{x})}{T}\right)$$

    - 分配関数

$$Z = \int d\mathbf{x} \exp\left(-\frac{H(\mathbf{x})}{T}\right)$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学的アプローチの中間層

- 分配関数の計算命!
  - 等エネルギー面にある状態の数を先に勘定する.

$$Z = \int dE \int d\mathbf{x} \delta\left(H(\mathbf{x}) - E\right) \exp\left(-\frac{E}{T}\right)$$

統計力学的アプローチの中間層

- 分配関数の計算命!
  - 等エネルギー面にある状態の数を先に勘定する.

$$Z = \int dE \int d\mathbf{x}\delta\left(H(\mathbf{x}) - E\right)\exp\left(-\frac{E}{T}\right)$$

  - エントロピーの登場 $S(E) = \log \int d\mathbf{x}\delta\left(H(\mathbf{x}) - E\right)$

$$Z = \int dE \exp\left(S(E) - E/T\right)$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

統計力学的アプローチの中間層

- 分配関数の計算命!
  - 等エネルギー面にある状態の数を先に勘定する.

$$Z = \int dE \int d\mathbf{x}\delta\left(H(\mathbf{x}) - E\right)\exp\left(-\frac{E}{T}\right)$$

  - エントロピーの登場 $S(E) = \log \int d\mathbf{x}\delta\left(H(\mathbf{x}) - E\right)$

$$Z = \int dE \exp\left(S(E) - E/T\right)$$

  - とてつもない自由度の数であるということを思い出す. (熱力学的極限)

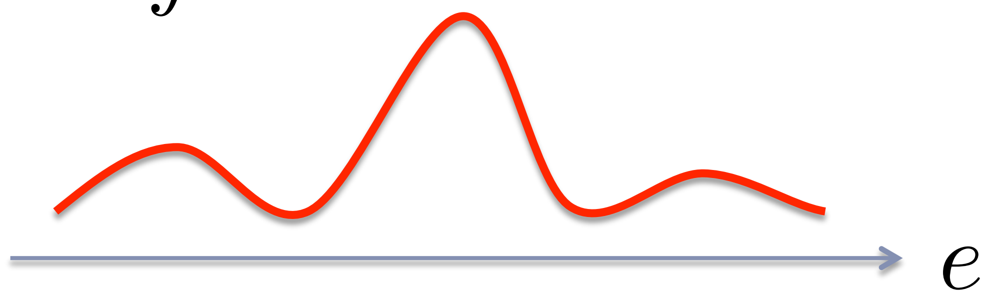
$$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \quad N \to \infty$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学的アプローチの中間層

- 一気にマクロの世界へ!
  - 積分の意味：全領域の足し上げ！

$$Z = N \int de \exp\left\{N\left(s(e) - e/T\right)\right\}$$



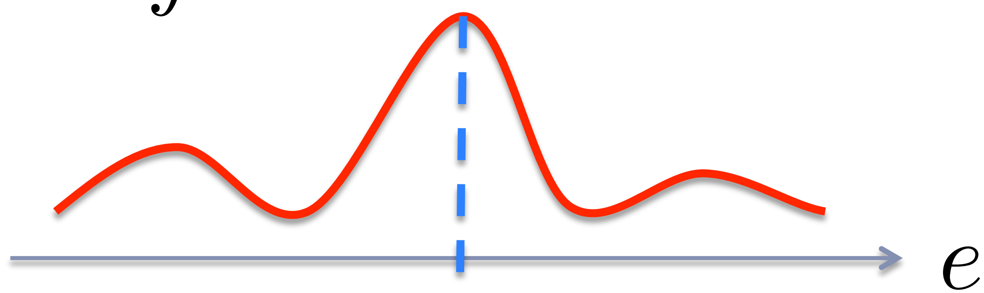
QUANTUM ANNEALING

MACHINE LEARNING

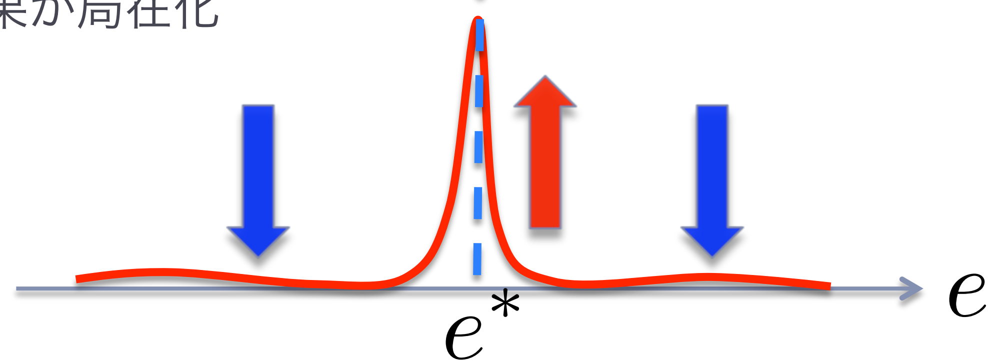
統計力学的アプローチの中間層

- 一気にマクロの世界へ!
  - 積分の意味：全領域の足し上げ！

$$Z = N \int de \exp\left\{N\left(s(e) - e/T\right)\right\}$$



  - Nを大きくすると…効果が局在化



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学的アプローチの終着点

- 一気にマクロの世界へ!
  - 鞍点評価

$$Z \sim \exp\left\{N\left(s(e^*) - e^*/T\right)\right\}$$

  - 自由エネルギーの登場

$$f = -\frac{T}{N}\log Z$$

統計力学的アプローチの終着点

- 一気にマクロの世界へ!
  - 鞍点評価

$$Z \sim \exp\left\{N\left(s(e^*) - e^*/T\right)\right\}$$

  - 自由エネルギーの登場

$$f = -\frac{T}{N}\log Z$$

  - 分配関数の評価を通じて、全ての必要な熱力学量が計算できる！

$$f = e^* - Ts(e^*)$$

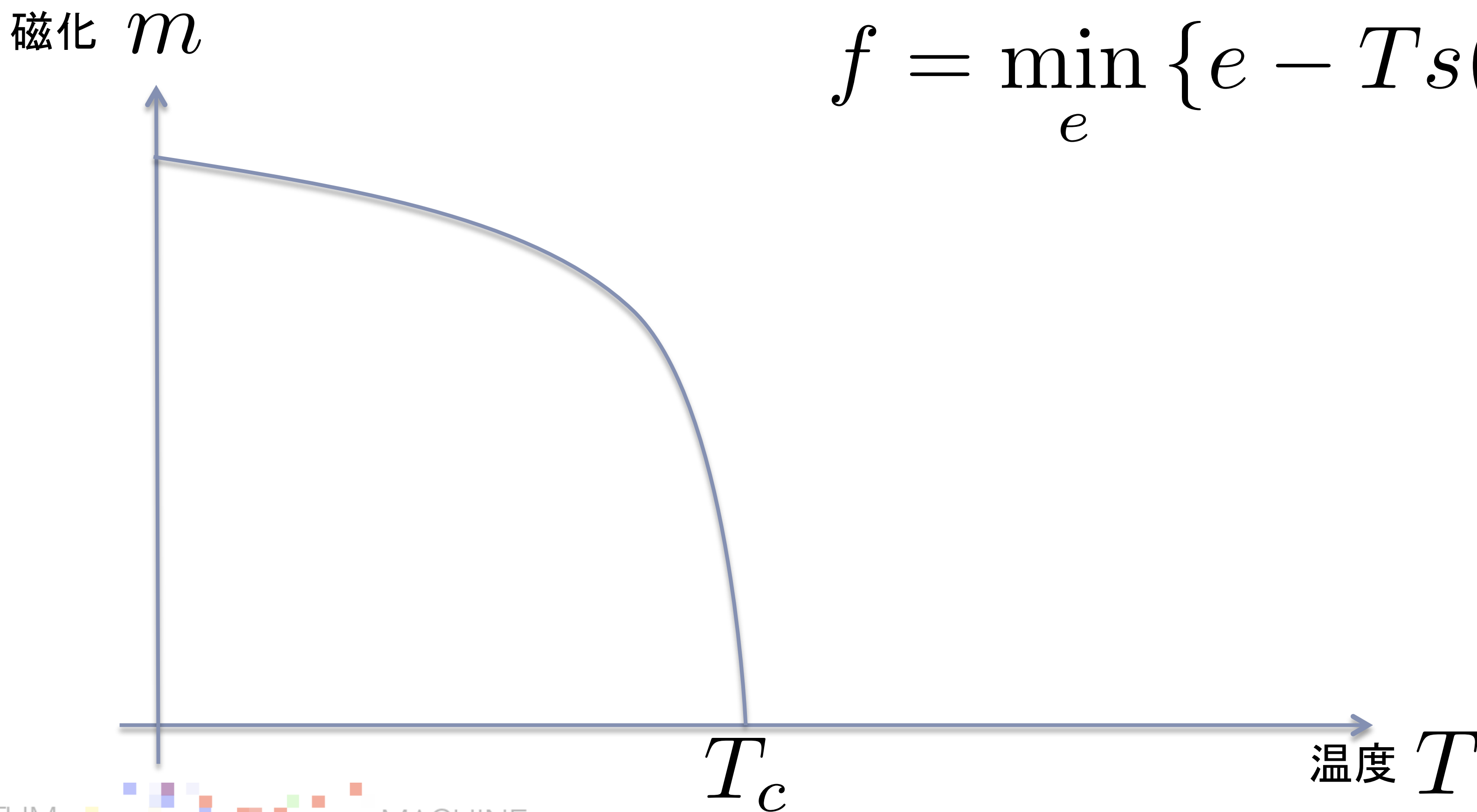
「物質は、エネルギーが低く、エントロピーの大きい、平衡状態を実現する！」

$$f = \min_e \left\{e - Ts(e)\right\}$$

自由エネルギーの形状と相転移

- 磁性体の場合：Ising模型 $H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}J\mathbf{x}$

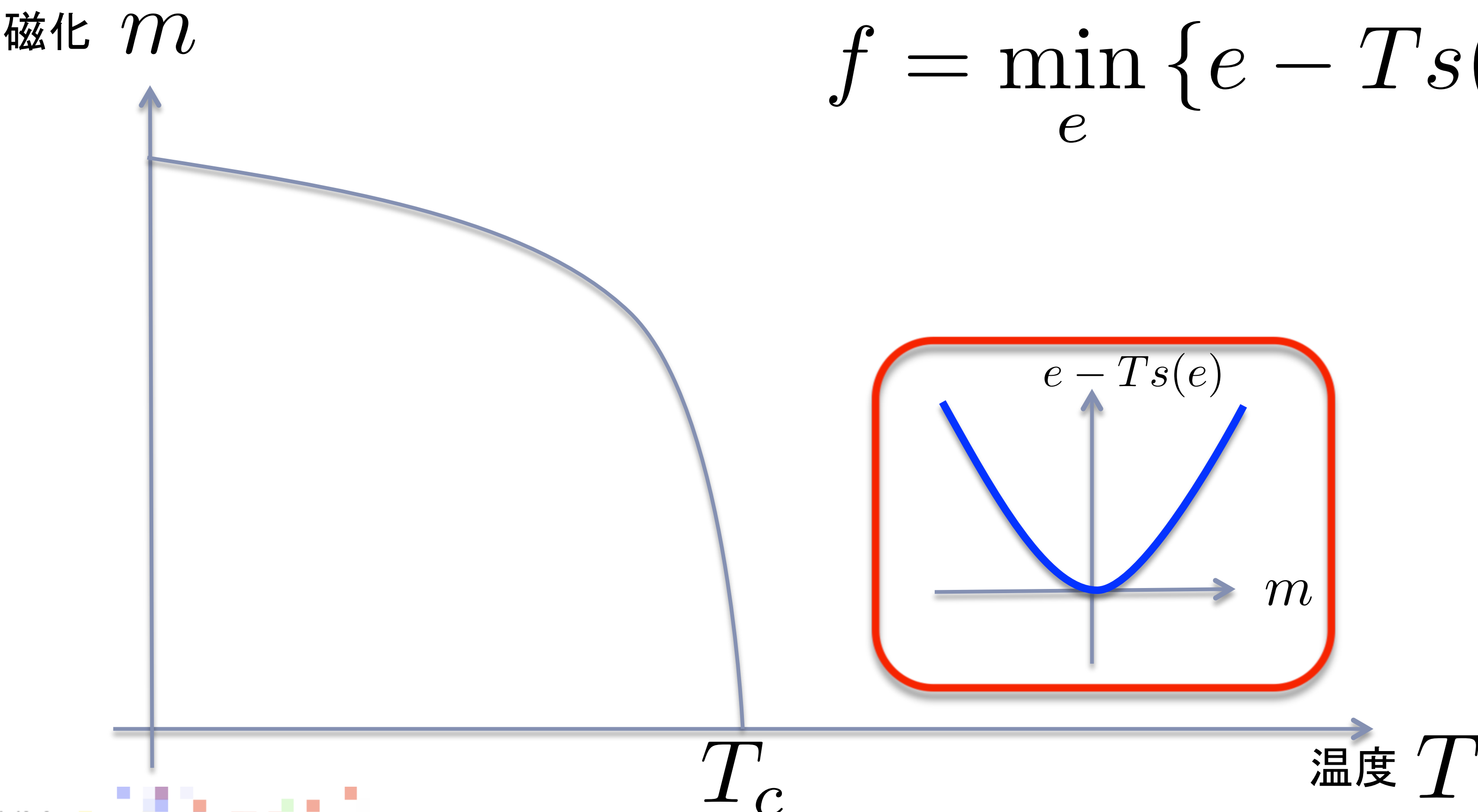
$$f = \min_{e}\{e - Ts(e)\}$$



自由エネルギーの形状と相転移

- 磁性体の場合：Ising模型 $H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} J \mathbf{x}$

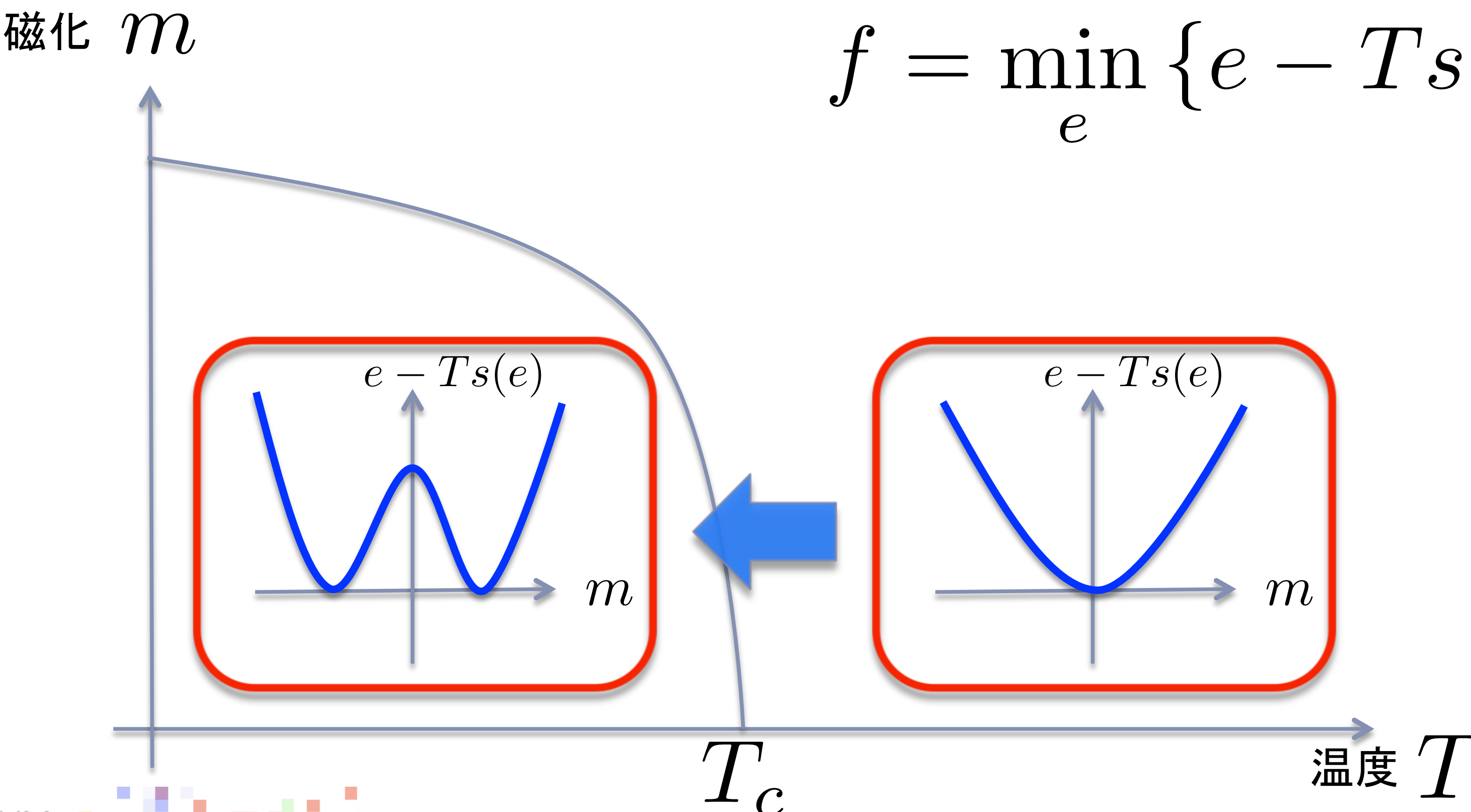
$$f = \min_e \{e - Ts(e)\}$$



自由エネルギーの形状と相転移

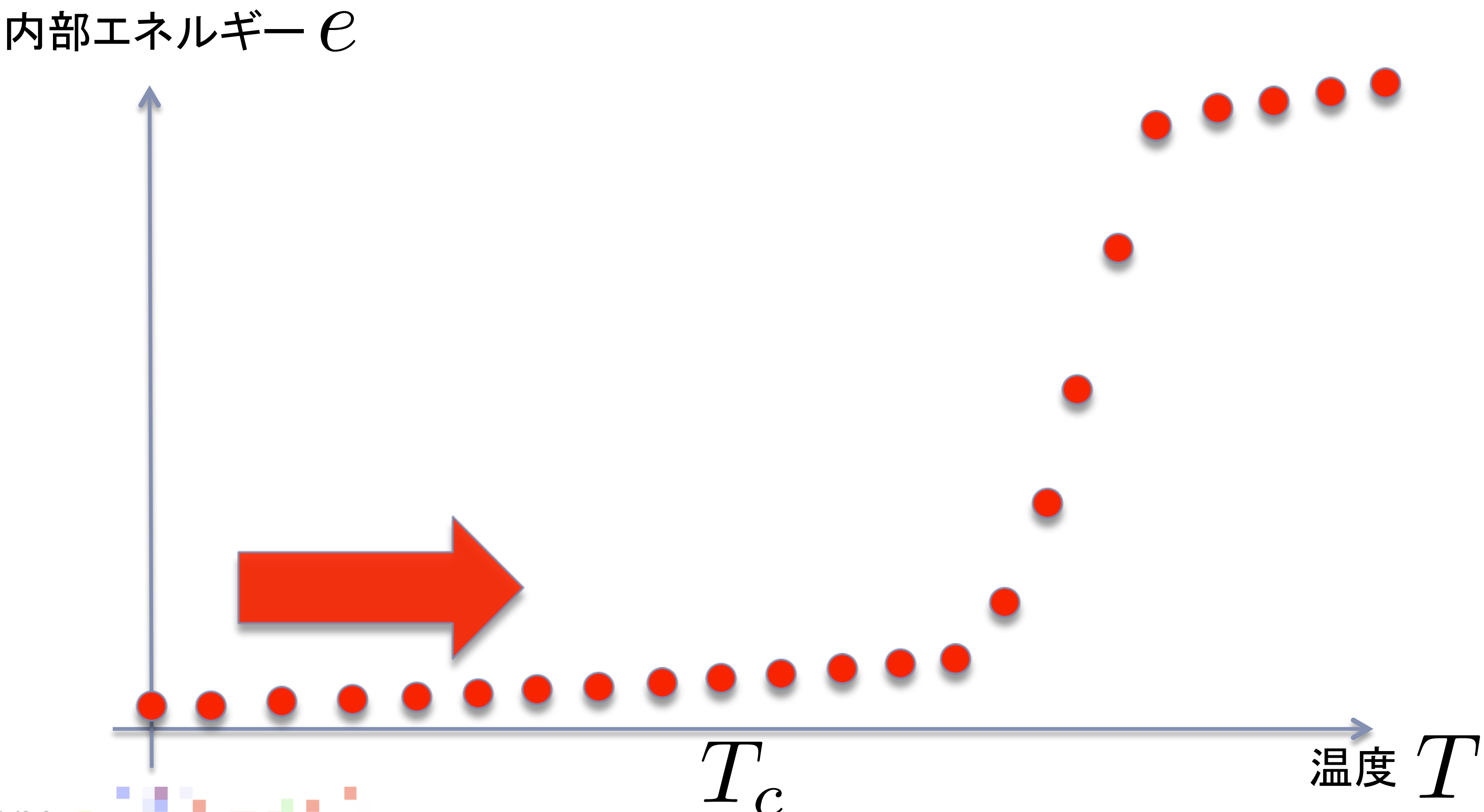
- 磁性体の場合：Ising模型 $H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} J \mathbf{x}$

$$f = \min_{e} \{e - Ts(e)\}$$



自由エネルギーの形状と相転移

- 変わった磁性体の場合：Potts模型 $f = \min_{e} \{e - Ts(e)\}$

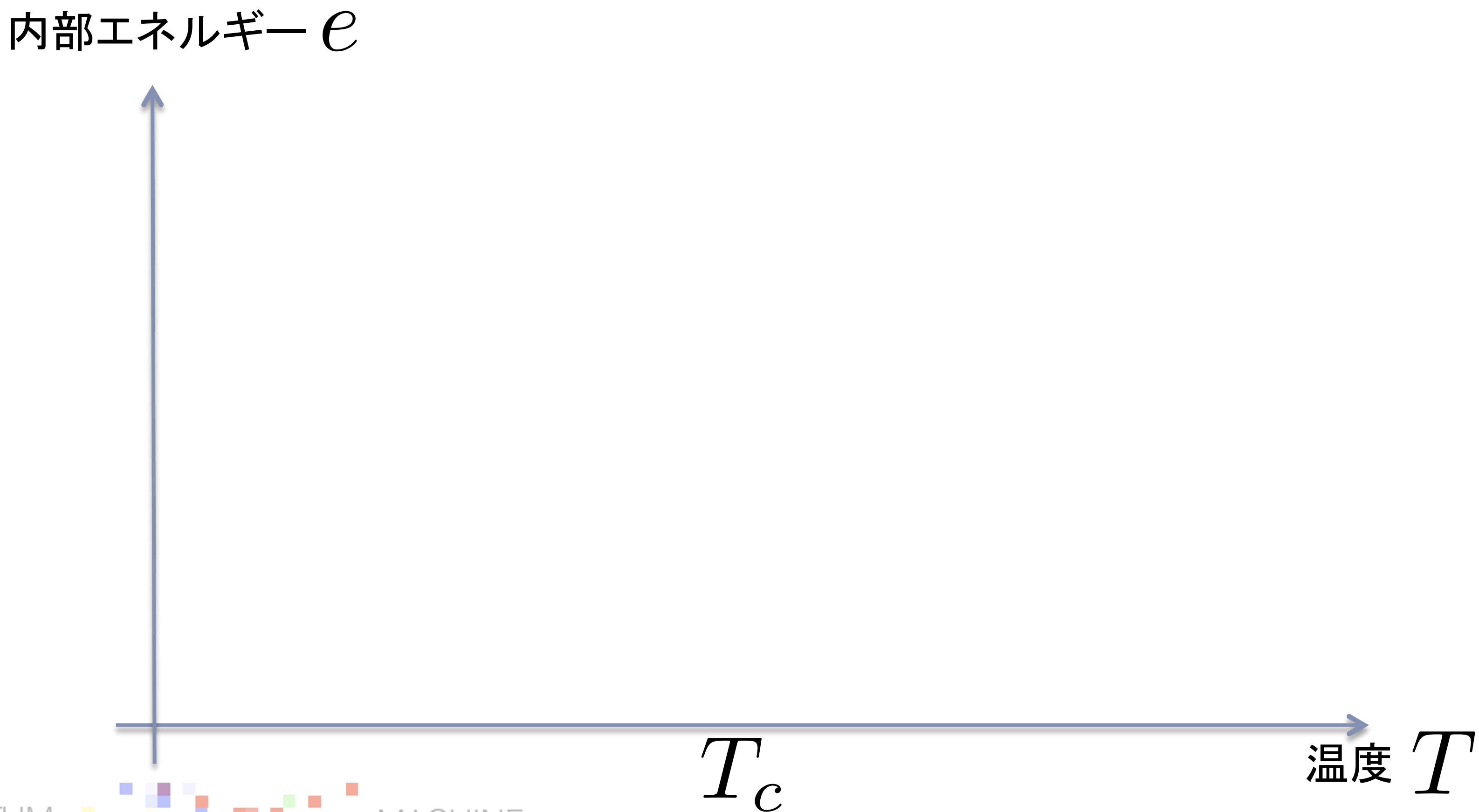


QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

自由エネルギーの形状と相転移

- 変わった磁性体の場合：Potts模型

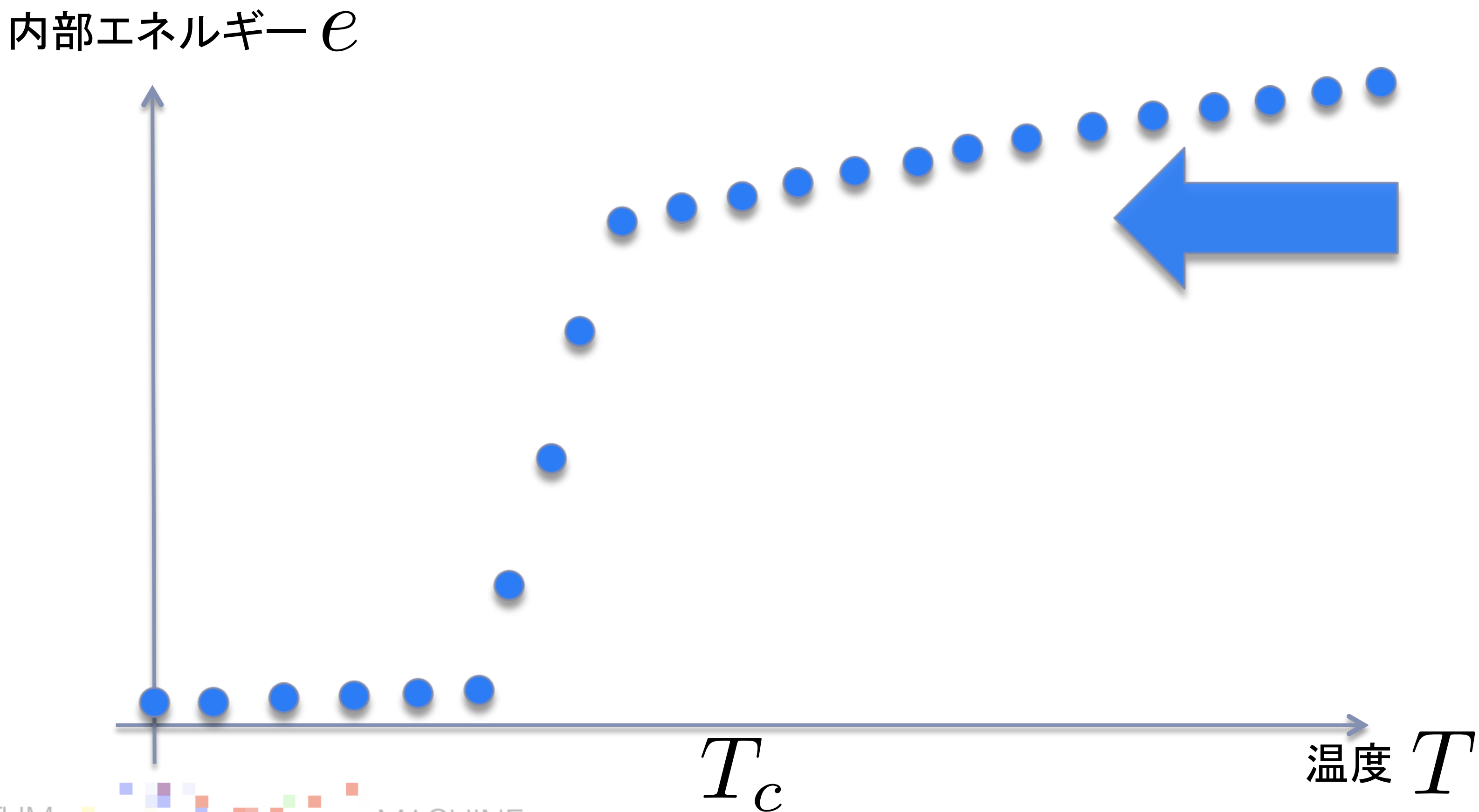
$$f = \min_{e} \{ e - Ts(e) \}$$



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

自由エネルギーの形状と相転移

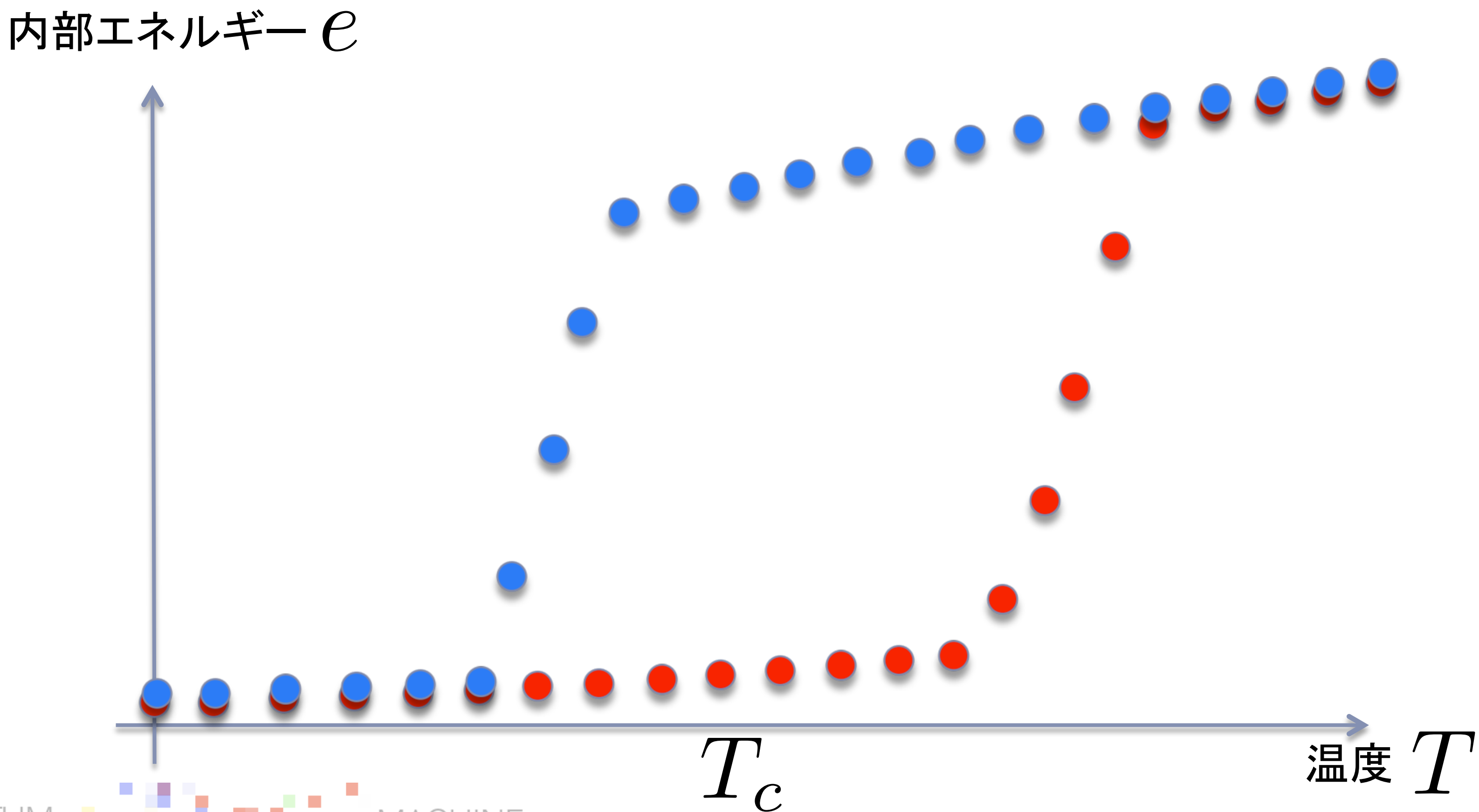
- 変わった磁性体の場合：Potts模型 $f = \min_e \{e - Ts(e)\}$



自由エネルギーの形状と相転移

- 変わった磁性体の場合：Potts模型

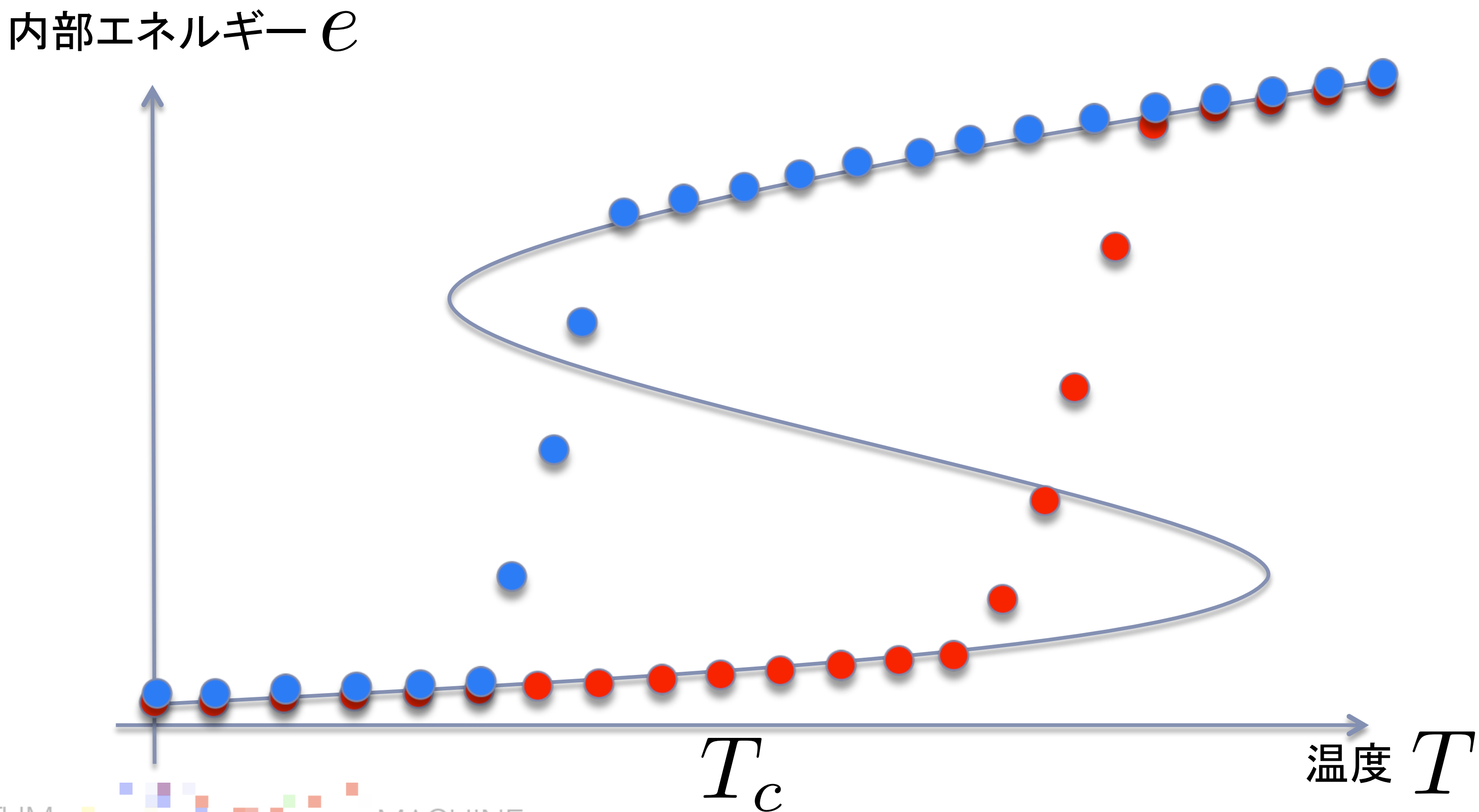
$$f = \min_{e} \{e - Ts(e)\}$$



自由エネルギーの形状と相転移

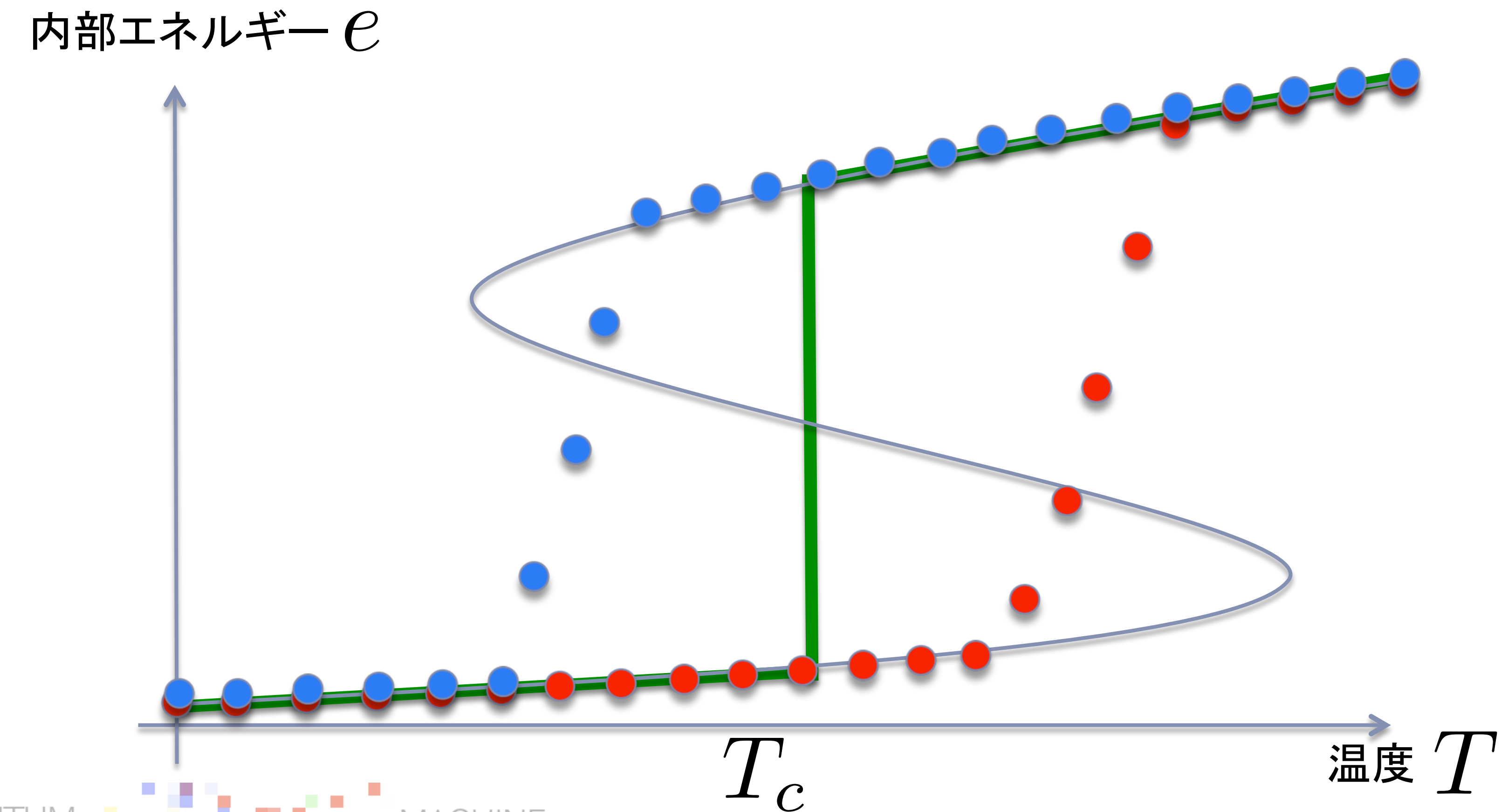
- 変わった磁性体の場合：Potts模型

$$f = \min_e \{e - Ts(e)\}$$



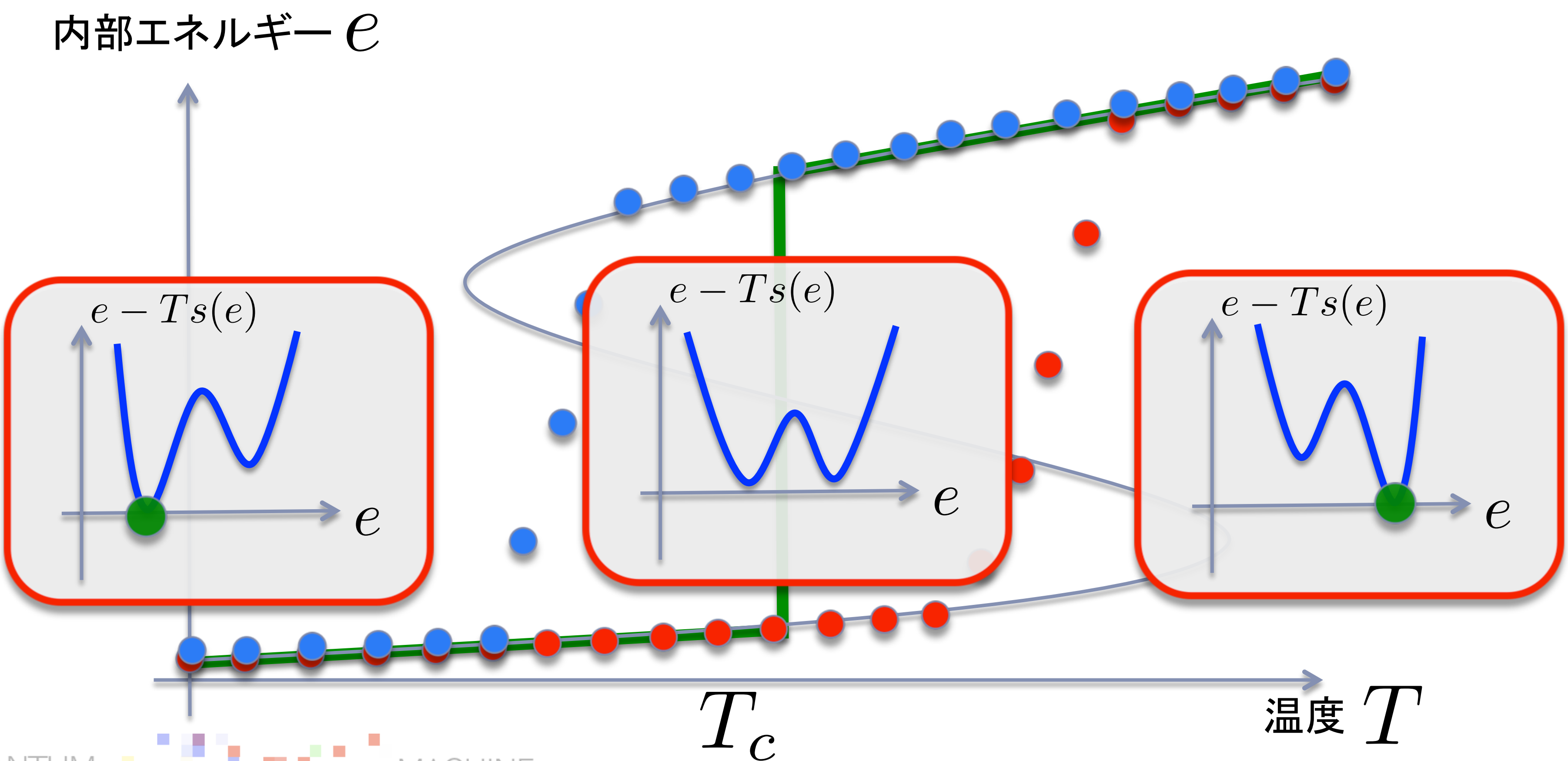
自由エネルギーの形状と相転移

- 変わった磁性体の場合：Potts模型 $f = \min_{e} \{e - Ts(e)\}$



自由エネルギーの形状と相転移

- 変わった磁性体の場合：Potts模型 $f = \min_e \{e - Ts(e)\}$



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

統計力学と機械学習？

- なぜ統計力学者が機械学習に興味を持つか？
  - ボルツマン機械学習=統計力学

$$P(\mathbf{x}|J,\mathbf{h}) = \frac{1}{Z(J,\mathbf{h})}\exp\left(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}J\mathbf{x} + \mathbf{h}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)$$

  - 最尤法（尤度最大化）＝自由エネルギーの最小化

$$\{J^*,\mathbf{h}^*\} = \arg\max_{J,\mathbf{h}} \frac{1}{D}\sum_{d=1}^{D}\log P(\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(d)}|J,\mathbf{h})$$

統計力学と機械学習の関係

- 最尤法
  - 分配関数の計算、熱期待値の計算が命
    - 平均場近似法、信念伝搬法(Belief Propagation)

$$P(\mathbf{x}|J,h) \approx \prod_{i=1}^{N} P(x_i|\{J_{ij}\},h_i)$$

    - マルコフ連鎖モンテカルロ法
      - ランダムな初期点からの真面目な計算

$$P(\mathbf{x}|J,h) \approx \prod_{t=0}^{T-1} \{P(\mathbf{x}_{t+1}|\mathbf{x}_t)\} P(\mathbf{x}_0)$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学と機械学習の関係

- 最尤法
  - 分配関数の計算、熱期待値の計算が命
    - 平均場近似法、信念伝搬法(Belief Propagation)

$$P(\mathbf{x}|J,h) \approx \prod_{i=1}^{N} P(x_i|\{J_{ij}\},h_i)$$

    - マルコフ連鎖モンテカルロ法
      - ランダムな初期点からの真面目な計算

$$P(\mathbf{x}|J,h) \approx \prod_{t=0}^{T-1} \{P(\mathbf{x}_{t+1}|\mathbf{x}_t)\} P(\mathbf{x}_0)$$

    - コントラスティヴ・ダイヴァージェンス法 [G. Hinton (2002)]
      - データ点からのちょっと真面目な計算

$$P(\mathbf{x}|J,h) \approx \prod_{t=0}^{T-1} \{P(\mathbf{x}_{t+1}|\mathbf{x}_t)\} \delta\left(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^{(d)}\right)$$

- 疑似最尤法
  - 分配関数の近似計算、熱期待値の近似計算
    - データを利用して尤度を近似 [J. Besag (1975)]

$$P(\mathbf{x}|J,h) \approx \prod_{i=1}^{N} P(x_i|\mathbf{x}_{/i},\{J_{ij}\},h_i)$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

鍵はデータ利用

深層学習解体

- 深層学習前史
  - 多層ニューラルネットワークに対する期待
  - 誤差逆伝搬法の成功と失敗（勾配消失問題）

- 深層学習のアーキテクチャ
  - 大量の教師無しデータによるPretraining
    - 自己符号化器(auto encoder)等の利用
    - 学習の結果出力された結果を更に教師無しデータとして採用

  - 少量の教師ありデータによるFine Tuning

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

鍵はデータ利用

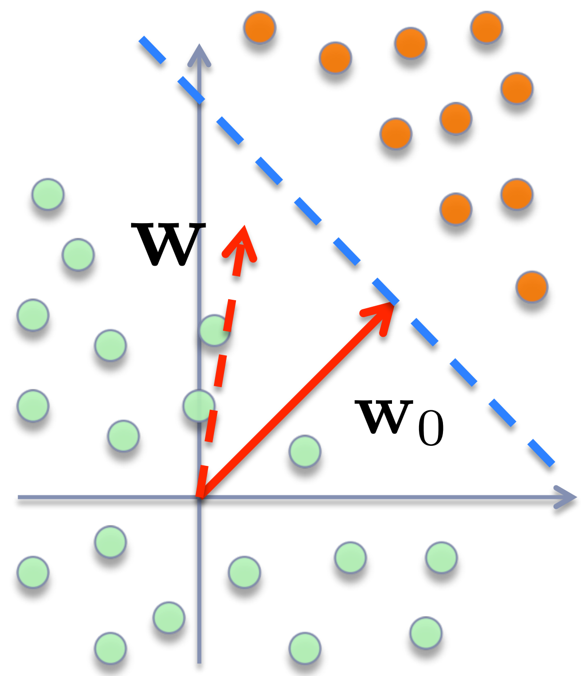
統計力学的アプローチ

M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003

- 教師無し学習と教師有り学習の効果を見る
  - 手で解析できるように極端に単純化
    - 単純パーセプトロン＋大量の高次元データ
  - 入力データには構造がある
    - 教師無し学習でも意味がある情報利得を仮定

$$P(\mathbf{x}_\mu, y_\mu|\mathbf{w}) \propto \Theta\left(\frac{y_\mu}{\sqrt{N}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - h\right)$$

$$P(\mathbf{x}_\mu|\mathbf{w}) \propto \sum_{y_\mu}\Theta\left(\frac{y_\mu}{\sqrt{N}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - h\right)$$



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

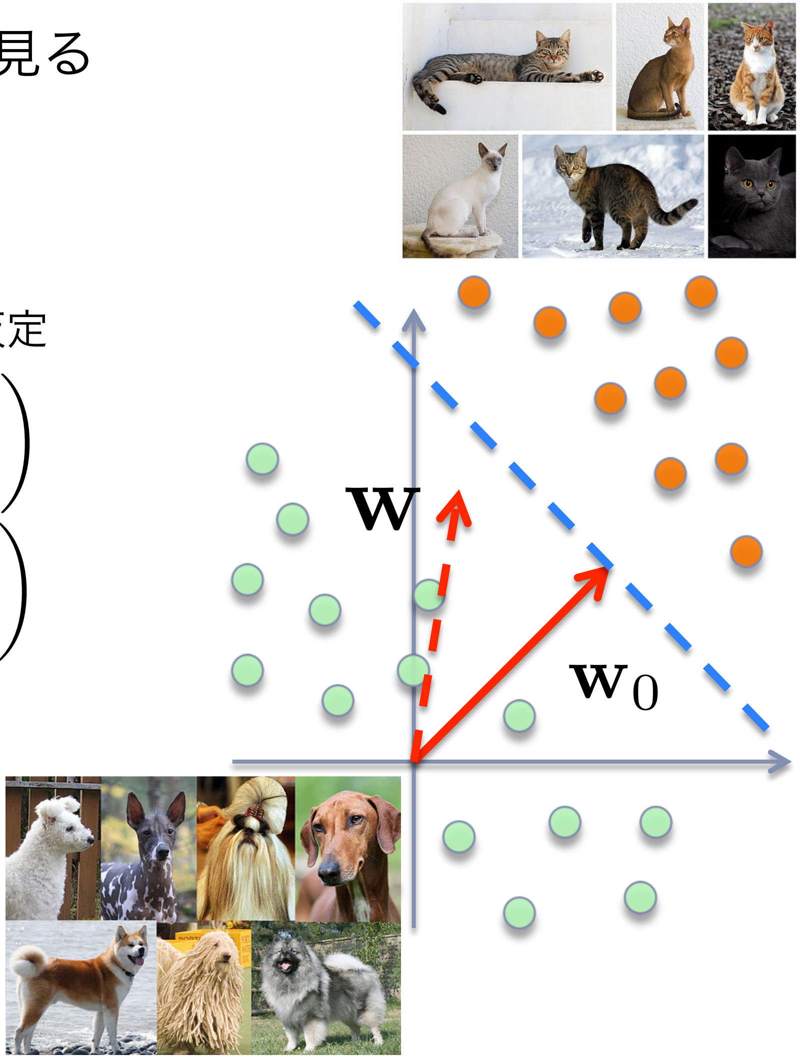
統計力学的アプローチ

M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003

- 教師無し学習と教師有り学習の効果を見る
  - 手で解析できるように極端に単純化
    - 単純パーセプトロン＋大量の高次元データ
  - 入力データには構造がある
    - 教師無し学習でも意味がある情報利得を仮定

$$P(\mathbf{x}_\mu, y_\mu|\mathbf{w}) \propto \Theta\left(\frac{y_\mu}{\sqrt{N}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - h\right)$$

$$P(\mathbf{x}_\mu|\mathbf{w}) \propto \sum_{y_\mu}\Theta\left(\frac{y_\mu}{\sqrt{N}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - h\right)$$



引用: wikipedia

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学的アプローチ

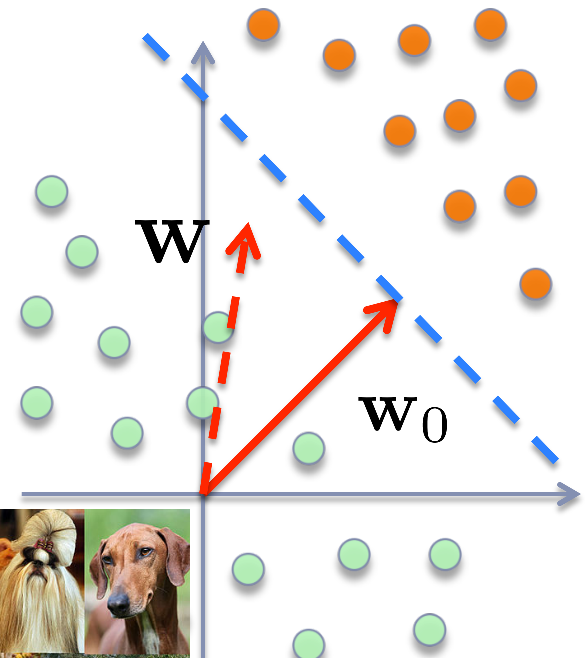
M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003

- 教師無し学習と教師有り学習の効果を見る
  - 手で解析できるように極端に単純化
    - 単純パーセプトロン＋大量の高次元データ
  - 入力データには構造がある
    - 教師無し学習でも意味がある情報利得を仮定

$$P(\mathbf{x}_\mu, y_\mu|\mathbf{w}) \propto \Theta\left(\frac{y_\mu}{\sqrt{N}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - h\right)$$

$$P(\mathbf{x}_\mu|\mathbf{w}) \propto \sum_{y_\mu}\Theta\left(\frac{y_\mu}{\sqrt{N}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - h\right)$$

  - 自由エネルギーを計算して調べてみよう！



引用: wikipedia

統計力学的アプローチ

M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003

- 自由エネルギーを計算しよう！
  - ベイズの定理より事後確率を計算

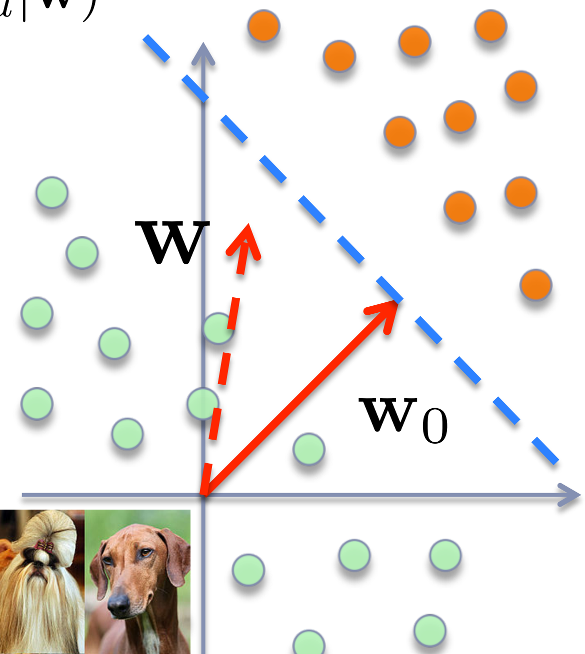
$$P(\mathbf{w}|X,\mathbf{y}) = \frac{1}{Z}\prod_{\mu=1}^{L} P(\mathbf{x}_\mu, y_\mu|\mathbf{w}) \prod_{\mu=L+1}^{L+U} P(\mathbf{x}_\mu|\mathbf{w})$$

  - 学習により獲得した識別性能を見る

$$m = \frac{1}{N}\left(\mathbf{w}_0\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{w}$$

  - スピングラス理論のレプリカ法を援用

$$-f = \frac{T}{N}\left[\log Z(X,\mathbf{y})\right]_{X,\mathbf{y}}$$



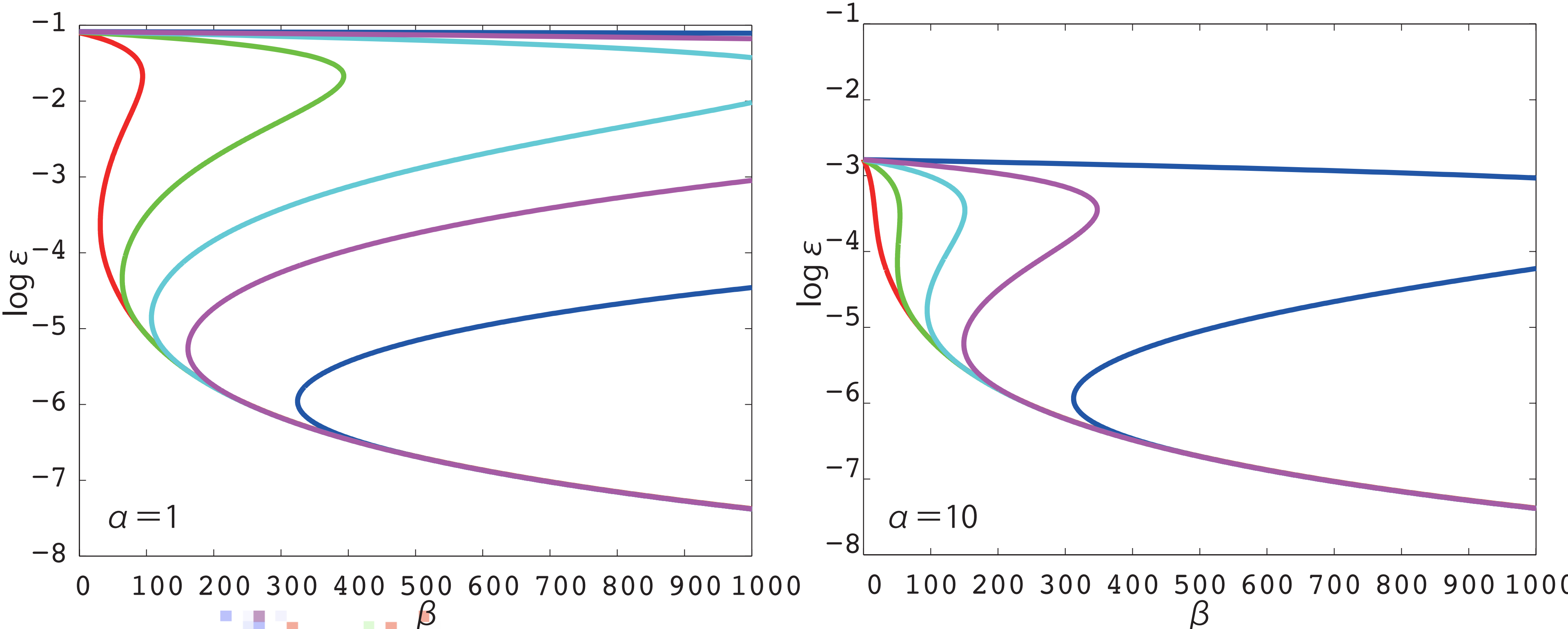
引用: wikipedia

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

統計力学的アプローチ

M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003

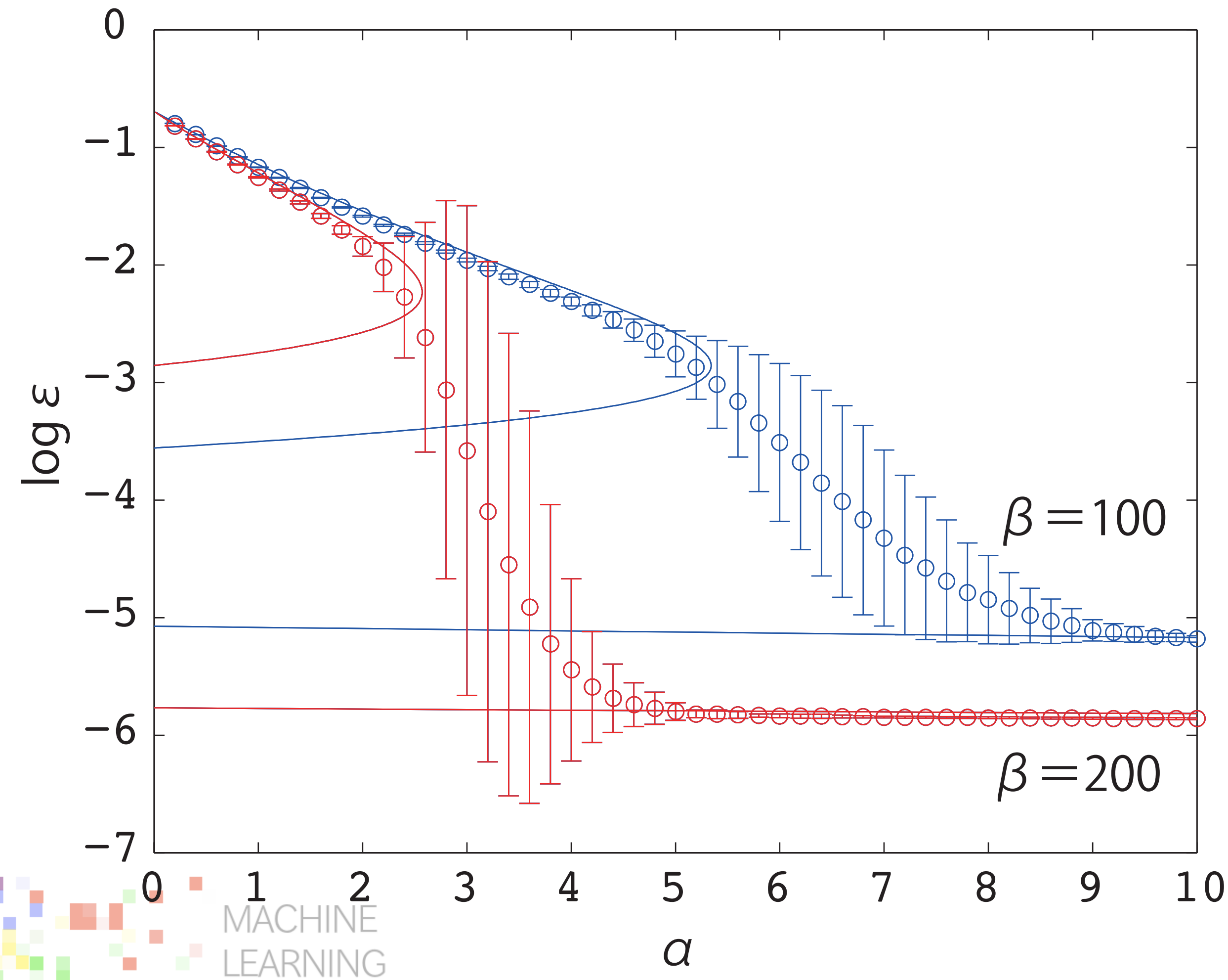
- 最尤法で学習できた場合の性能評価
  - 汎化誤差の解析結果
    - 赤，緑、水、紫、青とマージンが小さくなり識別が難しい場合を検討



統計力学的アプローチ

M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003

- 教師無し学習(β)と教師あり学習(α)の問題数における相転移



QUANTUM ANNEALING

MACHINE LEARNING

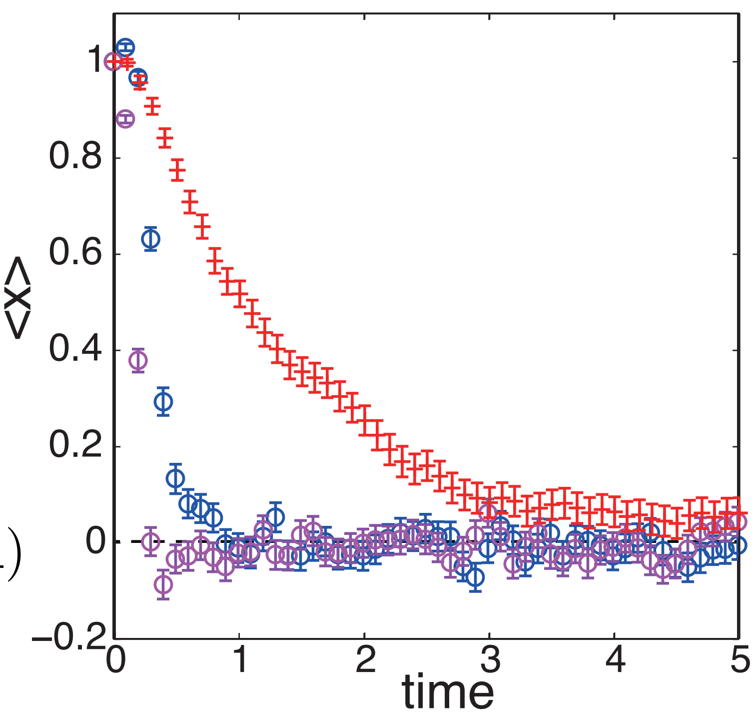
統計力学と機械学習

- マルコフ連鎖モンテカルロ法の加速研究
  - 詳細釣り合いの破れ
    - そもそも詳細釣り合い条件は十分条件

$$\frac{P(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})}{P(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)} = \frac{P(\mathbf{x}_t|J,\mathbf{h})}{P(\mathbf{x}_{t-1}|J,\mathbf{h})}$$

    - 破ってもよい．但し釣り合い条件は満たす．

$$\sum_{\mathbf{x}_{t-1}} P(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})P(\mathbf{x}_{t-1}|J,\mathbf{h}) = P(\mathbf{x}_t|J,\mathbf{h})$$



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

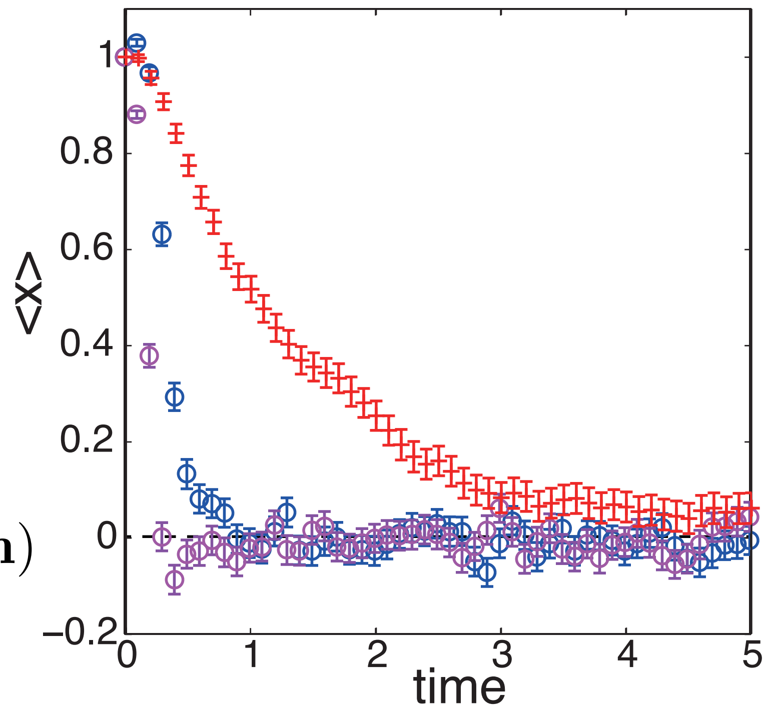
統計力学と機械学習

- マルコフ連鎖モンテカルロ法の加速研究
  - 詳細釣り合いの破れ
    - そもそも詳細釣り合い条件は十分条件

$$\frac{P(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})}{P(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)} = \frac{P(\mathbf{x}_t|J,\mathbf{h})}{P(\mathbf{x}_{t-1}|J,\mathbf{h})}$$

    - 破ってもよい．但し釣り合い条件は満たす．

$$\sum_{\mathbf{x}_{t-1}} P(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})P(\mathbf{x}_{t-1}|J,\mathbf{h}) = P(\mathbf{x}_t|J,\mathbf{h})$$



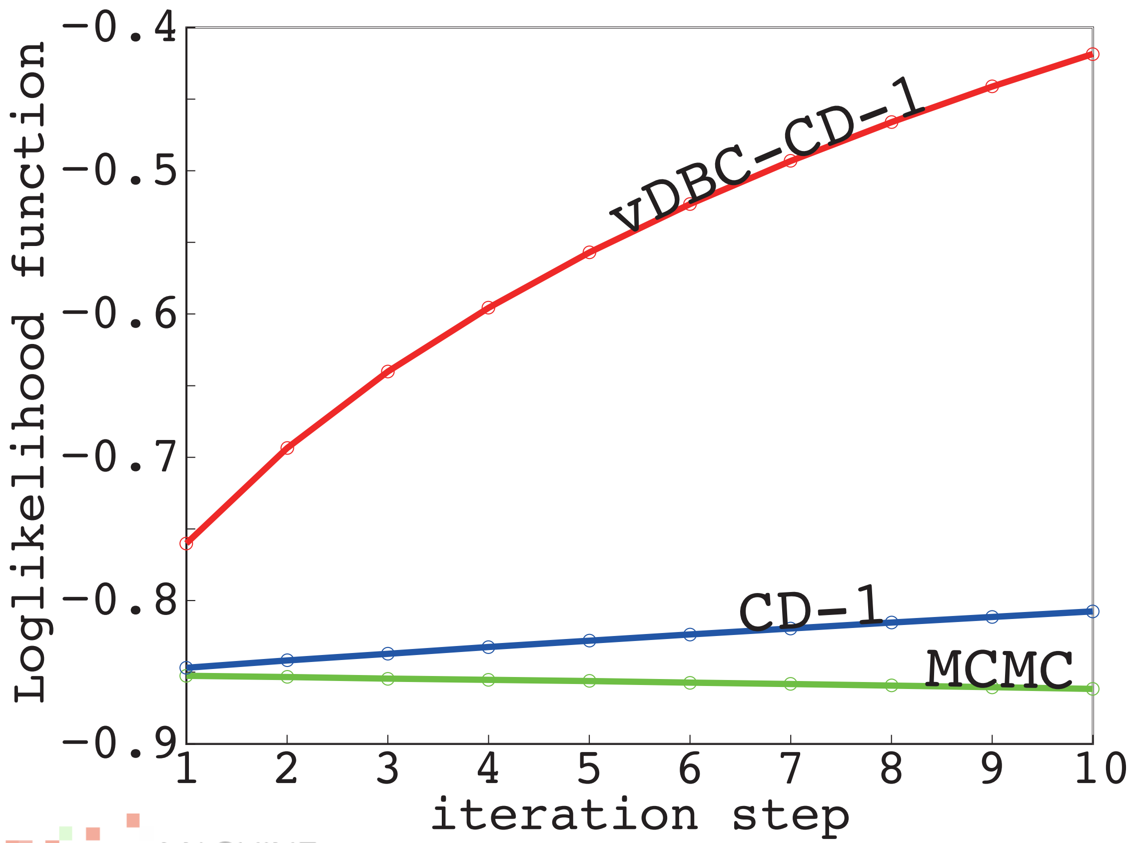
  - 詳細釣り合いの破れを伴う確率過程
    - 諏訪藤堂法（離散変数のMCMC）[H. Suwa and S. Todo (2010)]
    - ひねり詳細釣り合い条件（離散変数のMCMC）[K. S. Turitsyn (2011)]
    - 大関=一木法（連続変数のLangevin dynamics＋離散変数のMCMC）[MO and A. Ichiki (2015)]

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

計算技術と機械学習の新時代

M. Ohzeki, A. Ichiki and M. Yasuda: to appear soon

- コントラスティヴ・ダイヴァージェンスの加速
  - 詳細釣り合いの破れたMCMCの採用による劇的な加速

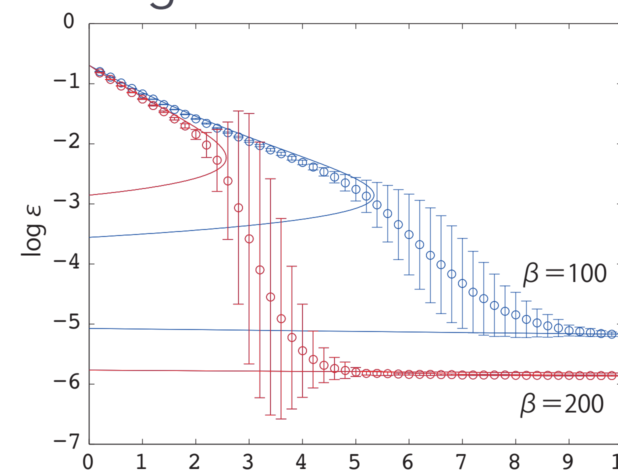


QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

まとめ

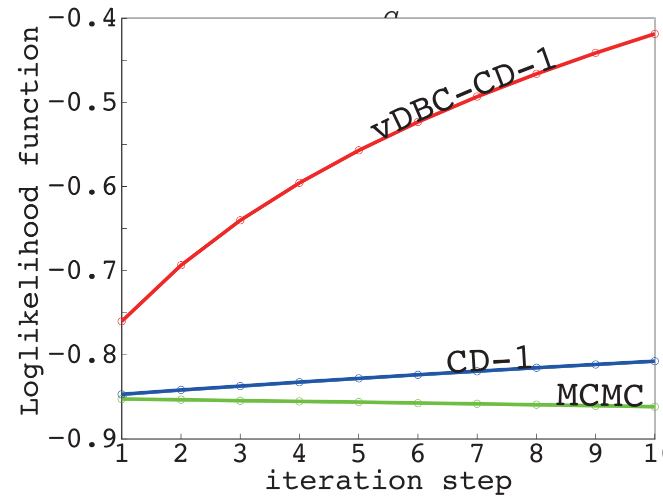
- 統計力学と機械学習の協奏
  - 深層学習のアーキテクチャ：PretrainingとFine Tuning
    - 教師無し学習は、ポテンシャルを引き上げる
    - 教師あり学習は、ポテンシャルへ到達させる

[M. Ohzeki:J. Phys. Soc. Jpn., 84, (2015) 034003]



  - 深層学習の学習法：Contrastive divergence
    - 加速された確率過程の利用：詳細釣り合いの破れ
    - より効率よい最尤法の実践が可能となる

[M. Ohzeki, A. Ichiki and M. Yasuda: to appear soon]



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING