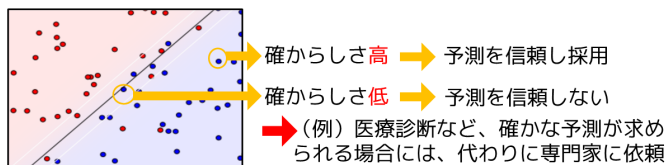


複数のAIがどう寄れば文殊の知恵？

どんな研究	機械学習を用いた予測の際、予測値に加えてその 確からしさ の評価が重要になる場合があります。確からしさの評価は、例えば予測が信頼できるのかの判断基準や、意思決定問題などで広く活用されています。本研究では 複数の学習モデル を使って、ニューラルネットワークなどの複雑なモデルで確からしさを効率良く計算する手法を考案しました。
どこが凄い	これまでも複数のモデルを用いた予測の確からしさの評価は機械学習で広く行われてきましたが、 どのように複数のモデルを用意すればよいのか は理論的に不明でした。本研究では、特に未知のデータに対する予測の確からしさを複数のモデルを用いて表現するための学習方法を理論的に導出しました。
めざす未来	予測の確からしさは、 機械学習を安全に用いる指針 を与える他、 実験計画法 でのより有用なデータ収集に活用されるなど自然科学分野等で重要な役割を果たします。本研究を発展させることで、複数のモデルによる確からしさの評価をより簡単に実現できるようにし、より機械学習の適用範囲を広げることをめざします。

機械学習における予測の「確からしさ」

機械学習の応用時に、予測の「値」だけでなくその予測がどれくらい正しいかという「**確からしさ**」が役に立つ場合があります。



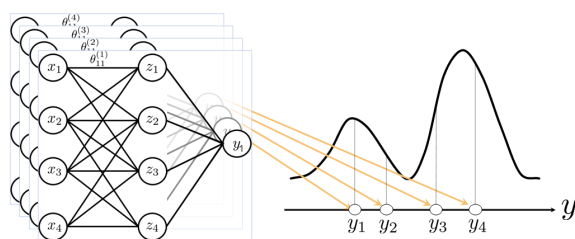
確からしさが使われる応用例

- 学習データを集める際に学習に特に有用なデータを集める、実験計画法
- 次にどのような行動を行うかを決定する意思決定問題

- ✓ 確からしさを得る手法として「**バイズ推論**」により予測値の**分布**を得ることが広く行われます。
- ✓ ニューラルネットのような大きなモデルではバイズ推論の実行には**近似**が必要になります。

既存研究：複数のモデルのばらつき

複数のニューラルネットを用意して、その出力のばらつきを分布とみなして確からしさを表現します。



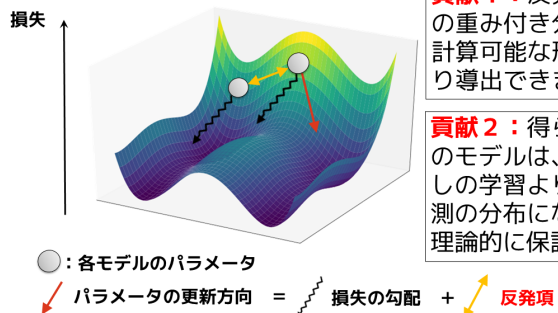
課題

- ✓ 同じ学習のさせ方をすると、同じ学習結果になる可能性があります。
- ✓ どうやって複数のニューラルネットを用意すればよいのでしょうか？

提案手法：複数のモデルの用意の仕方

複数のモデルを用意し、**モデルのパラメータが互いに異なるようになる「反発項」**を学習のための目的関数に取り入れます。

勾配降下の際の学習のイメージ

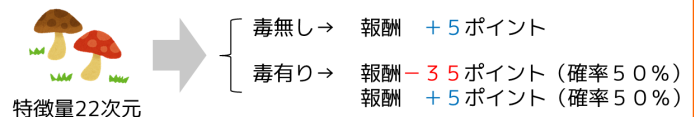


貢献1：反発項は予測の重み付き分散として計算可能な形で理論より導出できます。

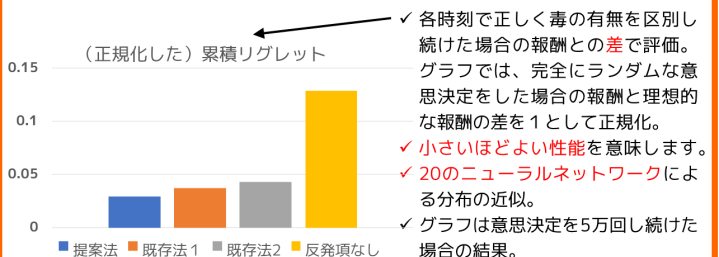
貢献2：得られた複数のモデルは、反発項なしの学習より優れた予測の分布になることが理論的に保証されます。

実験：確からしさを活用する意思決定問題

- ✓ 各時刻で与えられるキノコの特徴量をもとに、食べるかどうかの**意思決定**を繰り返し行います。
- ✓ 毒の有無によって得られる報酬が異なり、**トータル報酬の最大化が目標**です。報酬の情報のみが学習の手がかりです（分類問題のようにラベルは与えられません）。



- ✓ 確からしさの情報から、色々と**試行錯誤して情報を集めつつも**、より報酬をもらえそうな行動をとっていくトレードオフの制御が必要です。



関連文献

[1] F. Futami, T. Iwata, N. Ueda, I. Sato, M. Sugiyama, “Loss function based second-order Jensen inequality and its application to particle variational inference,” in *Proc. Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 2021.

連絡先

二見 太 (Futoshi Futami) 上田特別研究室
 Email: cs-openhouse-ml@hco.ntt.co.jp