

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2021年12月16日(16.12.2021)



(10) 国際公開番号

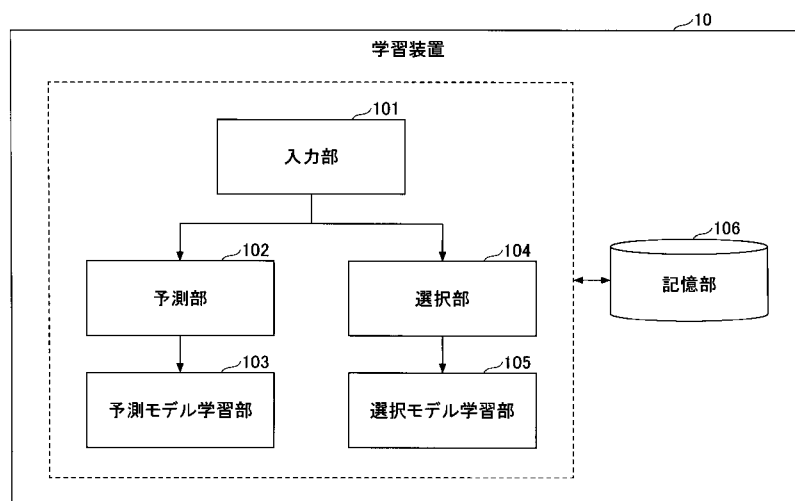
WO 2021/250752 A1

- (51) 国際特許分類:
G06N 3/08 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2020/022566
- (22) 国際出願日: 2020年6月8日(08.06.2020)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (71) 出願人: 日本電信電話株式会社 (**NIPPON TELEGRAPH AND TELEPHONE CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1008116 東京都千代田区大手町一丁目5番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 岩田 具治 (**IWATA, Tomoharu**); 〒1808585 東京都武蔵野市緑町3丁目9-1 NTT知的財産センタ内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 伊東 忠重, 外 (**ITO, Tadashige et al.**); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号 丸の内 M Y P L A Z A (明治安田生命ビル) 16階 Tokyo (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY,

(54) **Title:** TRAINING METHOD, TRAINING DEVICE, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: 学習方法、学習装置及びプログラム

[図1]



- 10 Training device
101 Input unit
102 Prediction unit
103 Prediction model training unit
104 Selection unit
105 Selection model training unit
106 Storage unit

(57) **Abstract:** This training method according to an embodiment is characterized in that a computer executes: an input step for inputting data G_d including examples and labels for the examples; a prediction step for calculating a prediction value of the label for each of the examples included in the data G_d by using parameters for a first neural network and information indicating an example, in which the label is observed, among the examples included in the data G_d ; a selection step for selecting one example from among the examples included in the data G_d by using parameters for a second neural network and the information indicating the example, in which the label is observed, among the examples included in the data G_d ; a first training step for training the parameters for the first neural network by using first errors between the prediction values and respective values of the labels for the examples included in the data G_d ; and a second training step for training the parameters for the

MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ,
NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT,
QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL,
ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG,
US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

- 一 国際調査報告（条約第21条(3)）

second neural network by using the first errors and second errors between the prediction values of the respective labels for the examples and the values of the labels for the examples when the one example is additionally observed.

(57) 要約：一実施形態に係る学習方法は、事例と前記事例に対するラベルとが含まれるデータ G_d を入力する入力手順と、第1のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの予測値を計算する予測手順と、第2のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例のうち、一の事例を選択する選択手順と、前記予測値と前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの値との第1の誤差を用いて、前記第1のニューラルネットワークのパラメータを学習する第1の学習手順と、前記第1の誤差と、前記一の事例が追加で観測された場合における前記各事例に対するラベルの予測値と前記各事例に対するラベルの値との第2の誤差とを用いて、前記第2のニューラルネットワークのパラメータを学習する第2の学習手順と、をコンピュータが実行することを特徴とする。

明 細 書

発明の名称：学習方法、学習装置及びプログラム

技術分野

[0001] 本発明は、学習方法、学習装置及びプログラムに関する。

背景技術

[0002] 一般に、機械学習手法では、ラベルが付与された学習事例数が多いほど高い性能を達成することができる。一方で、多くの学習事例にラベルを付与することは高いコストが掛かるという問題がある。

[0003] この問題を解決するために、予測が不確実な事例にラベルを付与する能動学習法が提案されている（例えば、非特許文献1）。

先行技術文献

非特許文献

[0004] 非特許文献1：Lewis, David D and Gale, William A, "A sequential algorithm for training text classifiers." Proceedings of the 17th Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, pp. 3-12, 1994

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005] しかしながら、既存の能動学習法は直接的に機械学習性能を高めるように事例を選択しないため、十分な性能を達成できないことがあるという問題点がある。

[0006] 本発明の一実施形態は、上記の点に鑑みてなされたもので、高性能な事例選択モデル及びラベル予測モデルを学習することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0007] 上記目的を達成するため、一実施形態に係る学習方法は、事例と前記事例に対するラベルとが含まれるデータ G_d を入力する入力手順と、第1のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前

記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの予測値を計算する予測手順と、第2のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例のうち、一の事例を選択する選択手順と、前記予測値と前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの値との第1の誤差を用いて、前記第1のニューラルネットワークのパラメータを学習する第1の学習手順と、前記第1の誤差と、前記一の事例が追加で観測された場合における前記各事例に対するラベルの予測値と前記各事例に対するラベルの値との第2の誤差とを用いて、前記第2のニューラルネットワークのパラメータを学習する第2の学習手順と、をコンピュータが実行することを特徴とする。

発明の効果

[0008] 高性能な事例選択モデル及びラベル予測モデルを学習することができる。

図面の簡単な説明

[0009] [図1]本実施形態に係る学習装置の機能構成の一例を示す図である。

[図2]本実施形態に係る学習処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[図3]本実施形態に係る予測モデル学習処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[図4]本実施形態に係る選択モデル学習処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[図5]評価結果の一例を示す図である。

[図6]本実施形態に係る学習装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

発明を実施するための形態

[0010] 以下、本発明の一実施形態について説明する。本実施形態では、事例とそのラベルが含まれる複数のデータ集合が与えられたときに、ラベルを付与する事例を選択する事例選択モデル（以下、「選択モデル」という。）と、事例に対するラベルを予測するラベル予測モデル（以下「予測モデル」という。）とを学習する学習装置10について説明する。

[0011] 本実施形態に係る学習装置 10 には、学習時に、入力データとして、D 個のグラフデータで構成されるグラフデータ集合

[0012] [数1]

$$\mathcal{G} = \{\mathbf{G}_d\}_{d=1}^D$$

が与えられるものとする。なお、明細書のテキスト中では、このグラフデータ集合を「G」と表記する。

[0013] ここで、 $\mathbf{G}_d = (\mathbf{A}_d, \mathbf{X}_d, \mathbf{y}_d)$ は d 番目のグラフを表すグラフデータである。ただし、

[0014] [数2]

$$\mathbf{A}_d \in \{0, 1\}^{N_d \times N_d}$$

は d 番目のグラフの隣接行列、 N_d は d 番目のグラフのノード数である。また、

[0015] [数3]

$$\mathbf{X}_d = (\mathbf{x}_{dn})_{n=1}^{N_d} \in \mathbb{R}^{N_d \times J_d}$$

は d 番目のグラフの特徴量データ、

[0016] [数4]

$$\mathbf{x}_{dn} \in \mathbb{R}^{J_d}$$

は d 番目のグラフにおける n 番目のノードの特徴量であり、 J_d は d 番目のグラフの特徴量の次元数である。また、

[0017] [数5]

$$\mathbf{y}_d = (y_{dn})_{n=1}^{N_d} \in \mathbb{R}^{N_d}$$

は d 番目のグラフの各特徴量のラベル集合である。 y_{dn} は d 番目のグラフにおける n 番目のノードの特徴量 x_{dn} に対するラベル（言い換えれば、 d 番目のグラフにおける n 番目のノードに対するラベル）を表す。すなわち、各特徴量 x_{dn} （つまり、 d 番目のグラフの各ノード）はラベルが付与された事例に相当する。

[0018] なお、本実施形態では、一例として、グラフデータが与えられるものとするが、グラフデータ以外の任意のデータ（例えば、任意のベクトルデータ、画像データ、系列データ等）が与えられた場合についても同様に適用可能である。

[0019] テスト時（又は、予測モデル及び選択モデルの運用時等）には、ラベルが未知のグラフデータ $G^* = (A^*, X^*)$ が与えられるものとする。このとき、なるべく少ないラベルの付与で（つまり、ラベルの付与対象として選択するノード（事例）数なるべく少なく）、与えられたグラフ内のノードのラベルをより高い精度で予測することができる選択モデル及び予測モデルを学習することが学習装置 10 の目標である。そのために、本実施形態に係る学習装置 10 は、まず予測モデルを学習した後、学習済みの予測モデルを用いて選択モデルを学習するものとする。ただし、これは一例であって、例えば、予測モデルと選択モデルとを同時に学習してもよいし、又は予測モデルと選択モデルとを交互に学習してもよい。

[0020] なお、テスト時にはグラフ内の全てのノードのラベルが未知のグラフデータ $G^* = (A^*, X^*)$ が与えられる場合を想定するが、グラフ内の一部のノード

ドにラベルが付与されていてもよい（つまり、少数のノードに対するラベルが与えられていてもよい。）。

[0021] <予測モデル及び選択モデル>

予測モデル及び選択モデルは、与えられたグラフの各ノードの特徴量と、観測されているラベルと、どの事例のラベルが観測されているかを表す情報とを入力し、それらの情報を統合して出力するものであれば、任意のニューラルネットワークを用いることができる。

[0022] 例えば、ニューラルネットワークへの入力としては、以下の式（１）に示す $\mathbf{z}_{dn}^{(0)}$ を用いることができる。

[0023] [数6]

$$\mathbf{z}_{dn}^{(0)} = [\mathbf{x}_{dn}, \bar{y}_{dn}, m_{dn}] \quad (1)$$

ここで、

[0024] [数7]

$$\mathbf{m}_d \in \{0, 1\}^{N_d}$$

は d 番目のグラフにおいてどの事例のラベルが観測されているかを表すマスクベクトルであり、n 番目の事例のラベルが観測されていれば n 番目の要素は $m_{dn} = 1$ 、そうでなければ $m_{dn} = 0$ である。なお、以降では、ラベルが観測されている事例を「観測事例」とも表す。つまり、マスクベクトル $\mathbf{m}_d$ は d 番目のグラフの観測事例を表すベクトルである。

[0025] また、

[0026]

[数8]

$$\bar{y}_d$$

は d 番目のグラフにおいて観測されているラベルを表すベクトルであり、 m_d
 $n = 1$ であれば n 番目の要素は

[0027] [数9]

$$\bar{y}_{dn} = y_{dn}$$

、そうでなければ

[0028] [数10]

$$\bar{y}_{dn} = 0$$

となる。なお、明細書のテキスト中では、d 番目のグラフにおいて観測されているラベルを表すベクトル及びその要素をそれぞれ「 $\bar{y}_d$ 」及び「 $\bar{y}_{dn}$ 」と表記する。

[0029] 予測モデル及び選択モデルのニューラルネットワークとしては、例えば、グラフ畳み込みニューラルネットワークを用いることができる。グラフ畳み込みニューラルネットワークを用いることにより、全事例の情報をグラフに応じて統合することができる。

[0030] ニューラルネットワークを f として、予測モデルは、以下の式 (2) で表すことができる。

[0031]

[数11]

$$\hat{\mathbf{y}}_d = f(\mathbf{G}_d, \mathbf{m}_d; \Phi) \quad (2)$$

ここで、 Φ はニューラルネットワーク f のパラメータ、

[0032] [数12]

$$\hat{\mathbf{y}}_d \in \mathbb{R}^{N_d}$$

は予測値を表す。なお、上記の式（2）に示す f では、入力された $\mathbf{G}_d$ 及び $\mathbf{m}_d$ から上記の式（1）に示す $z_{dn}^{(0)}$ が作成され、これらの $z_{dn}^{(0)}$ がグラフ畳み込みニューラルネットワークに入力される。すなわち、より正確には、上記の式（2）に示す f は、 $\mathbf{G}_d$ 及び $\mathbf{m}_d$ から各 $z_{dn}^{(0)}$ を作成する関数と、パラメータ Φ を持つグラフ畳み込みニューラルネットワークとで構成される。

[0033] また、ニューラルネットワークを g として、選択モデルは、以下の式（3）で表すことができる。

[0034] [数13]

$$\mathbf{s}_d = g(\mathbf{G}_d, \mathbf{m}_d; \Theta) \quad (3)$$

ここで、 Θ はニューラルネットワーク g のパラメータ、

[0035] [数14]

$$\mathbf{s}_d = (s_{dn})_{n=1}^{N_d} \in \mathbb{R}^{N_d}$$

は d 番目のグラフにおけるスコアベクトルであり、 s_{dn} は n 番目の事例が選択されるスコアを表す。なお、上記の式 (3) に示す g も同様に、入力された G_d 及び m_d から上記の式 (1) に示す $z_{dn}^{(0)}$ が作成され、これらの $z_{dn}^{(0)}$ がグラフ畳み込みニューラルネットワークに入力される。すなわち、より正確には、上記の式 (3) に示す g は、 G_d 及び m_d から各 $z_{dn}^{(0)}$ を作成する関数と、パラメータ Θ を持つグラフ畳み込みニューラルネットワークとで構成される。

[0036] <機能構成>

まず、本実施形態に係る学習装置 10 の機能構成について、図 1 を参照しながら説明する。図 1 は、本実施形態に係る学習装置 10 の機能構成の一例を示す図である。

[0037] 図 1 に示すように、本実施形態に係る学習装置 10 は、入力部 101 と、予測部 102 と、予測モデル学習部 103 と、選択部 104 と、選択モデル学習部 105 と、記憶部 106 とを有する。

[0038] 記憶部 106 には、グラフデータ集合 G や学習対象となるパラメータ Φ 及び Θ 等が記憶されている。

[0039] 入力部 101 は、学習時に、記憶部 106 に記憶されているグラフデータ集合 G を入力する。なお、テスト時には、入力部 101 は、ラベルが未知のグラフデータ G^* を入力する。

[0040] ここで、予測モデルの学習時には、予測モデル学習部 103 によってグラフデータ集合 G からグラフデータ G_d がサンプリングされた上で、このグラフデータ G_d のノード集合 $\{1, \dots, N_d\}$ から観測事例がサンプリングされる。同様に、選択モデルの学習時でも、選択モデル学習部 105 によってグラフデータ集合 G からグラフデータ G_d がサンプリングされた上で、このグラフデータ G_d のノード集合 $\{1, \dots, N_d\}$ から観測事例が順次サンプリングされる。

[0041] 予測部 102 は、予測モデル学習部 103 によってサンプリングされたグラフデータ G_d と、このグラフデータ G_d からサンプリングされた観測事例を

表すマスクベクトル $\mathbf{m}_d$ と、パラメータ Φ とを用いて、上記の式（２）により予測値（つまり、当該グラフデータ G_d が表すグラフの各ノードに対するラベルの値）を計算する。

[0042] なお、テスト時には、予測部 102 は、グラフデータ G^* と、このグラフデータ G^* の観測事例を表すマスクベクトル $\mathbf{m}^*$ と、学習済みの予測モデルのパラメータとを用いて、上記の式（２）により予測値（つまり、当該グラフデータ G^* が表すグラフの各ノードに対するラベルの値）を計算する。

[0043] 予測モデル学習部 103 は、入力部 101 によって入力されたグラフデータ集合 G からグラフデータ G_d をサンプリングした上で、このグラフデータ G_d のノード集合 $\{1, \dots, N_d\}$ から N_s 個の観測事例をサンプリングする。なお、サンプリングする観測事例数 N_s は予め設定される。また、サンプリングする際、予測モデル学習部 103 は、ランダムにサンプリングを行ってもよいし、予め設定された何等かの分布に従ってサンプリングを行ってもよい。

[0044] そして、予測モデル学習部 103 は、グラフデータ集合 G からサンプリングしたグラフデータ G_d に含まれるラベル集合 y_d と、予測部 102 によって計算された予測値との誤差を用いて、この誤差が小さくなるように学習対象のパラメータ Φ を更新（学習）する。

[0045] 例えば、予測モデル学習部 103 は、以下の式（４）に示す期待予測誤差を最小化するように学習対象のパラメータ Φ を更新すればよい。

[0046] [数15]

$$\mathbb{E}_{G_d}[\mathbb{E}_{\mathbf{m}_d}[L(\mathbf{G}_d, \mathbf{m}_d; \Phi)]] \quad (4)$$

ここで、 E は期待値、 L は以下の式（５）に示す予測誤差を表す。

[0047]

[数16]

$$L(\mathbf{G}_d, \mathbf{m}_d; \Phi) = \frac{1}{\sum_{n=1}^{N_d} (1 - m_{dn})} \sum_{n=1}^{N_d} (1 - m_{dn}) \| y_{dn} - f_n(\mathbf{G}_d, \mathbf{m}_d; \Phi) \|^2 \quad (5)$$

なお、 f_n は上記の式(2)に示す f の n 番目の要素(つまり、予測値の n 番目の要素)である。

[0048] ただし、 L として予測誤差ではなく、予測の誤りを表す任意の指標(例えば、負の対数尤度等)が用いられてもよい。

[0049] 選択部104は、選択モデル学習部105によってサンプリングされたグラフデータ G_d と、このグラフデータ G_d からサンプリングされた観測事例を表すマスクベクトル m_d と、パラメータ Θ とを用いて、上記の式(3)によりスコアベクトルを計算する。

[0050] なお、テスト時には、選択部104は、グラフデータ G^* と、このグラフデータ G^* の観測事例を表すマスクベクトル m^* と、学習済みの選択モデルのパラメータとを用いて、上記の式(3)によりスコアベクトルを計算する。スコアベクトルが計算されることにより、ノード(事例)をラベル付与対象として選択することができる。なお、ラベル付与対象とするノードの選択方法としては、例えば、スコアベクトルの要素のうち最も値が高い要素に対応するノードを選択すればよい。これ以外にも、例えば、スコアベクトルの要素のうちその値が高い順に所定の個数の要素を選択し、これら選択された要素に対応するノードをラベル付与対象として選択してもよいし、スコアベクトルの要素のうち所定の閾値以上の値の要素に対応するノードをラベル付与対象として選択してもよい。

[0051] 選択モデル学習部105は、入力部101によって入力されたグラフデータ集合 G からグラフデータ G_d をサンプリングした上で、このグラフデータ G_d のノード集合 $\{1, \dots, N_d\}$ から N_A 個の観測事例を順次サンプリング

する。なお、サンプリングされる最大観測事例数 N_A は予め設定される。また、グラフデータ G_d をサンプリングする際、選択モデル学習部 105 は、ランダムにサンプリングを行ってもよいし、予め設定された何等かの分布に従ってサンプリングを行ってもよい。一方で、観測事例をサンプリングする際には、選択モデル学習部 105 は、後述する選択分布に従ってサンプリングを行う。

[0052] ここで、選択モデル学習部 105 は、事例を選択したときの予測性能が向上するようにパラメータ θ を学習する。例えば、選択モデル学習部 105 は、予測性能向上の指標として、以下の式 (6) に示す予測誤差削減率を用いることができる。

[0053] [数17]

$$R(G_d, m_d, n) = \frac{L(G_d, m_d; \hat{\Phi}) - L(G_d, m_d^{(+n)}; \hat{\Phi})}{L(G_d, m_d; \hat{\Phi})} \quad (6)$$

上記の式 (6) に示す予測誤差削減率は、事例を追加で選択したときの予測誤差の削減率を表している。ここで、 $\hat{\Phi}$ (正確には、ハット「 $\hat{\cdot}$ 」は Φ の真上に表記) は予測モデルのニューラルネットワーク f の学習済みパラメータである。また、 n は d 番目のグラフにおいて新たに観測されたノード (事例) を表し、 $m_d^{(+n)}$ は d 番目のグラフにおける n 番目のノード (事例) が追加で観測された場合のマスクベクトル m_d 、つまり $n' = n$ であれば $m_{d, n'}^{(+n)} = 1$ 、そうでなければ $m_{d, n'}^{(+n)} = m_{d, n'}$ である。

[0054] 選択モデルを学習する際の目的関数としては、上記の式 (6) に示す予測誤差削減率を用いて、例えば、以下の式 (7) に示す期待誤差削減率を用いることができる。

[0055]

[数18]

$$\mathbb{E}_{\mathbf{G}_d} [\mathbb{E}_{(\mathbf{m}, n) \sim \pi(\Theta)} [R(\mathbf{G}_d, \mathbf{m}, n)]] \quad (7)$$

すなわち、上記の式（7）に示す期待誤差削減率を最大化するように学習対象のパラメータ Θ を更新すればよい。ここで、 $\pi(\Theta)$ は選択モデルに基づく選択分布（ノード（事例）を選択するための分布）であり、 $\pi_d = \pi_d(\Theta)$ の n 番目の要素 π_{dn} は以下の式（8）で表される。

[0056] [数19]

$$\pi_{dn} = \frac{\exp(s'_{dn})}{\sum_{m=1}^{N_d} \exp(s'_{dm})} \quad (8)$$

ここで、 s'_{dn} は、 $m_{dn} = 0$ の場合は $s'_{dn} = s_{dn}$ 、それ以外の場合は $s'_{dn} = -\infty$ である。これにより、既に観測されている事例は選択されなくなる。

[0057] <学習処理の流れ>

次に、本実施形態に係る学習装置10が実行する学習処理の流れについて、図2を参照しながら説明する。図2は、本実施形態に係る学習処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[0058] まず、入力部101は、記憶部106に記憶されているグラフデータ集合Gを入力する（ステップS101）。

[0059] 次に、学習装置10は、予測モデル学習処理を実行し、予測モデルのパラメータ ϕ を学習する（ステップS102）。続いて、学習装置10は、選択モデル学習処理を実行し、選択モデルのパラメータ Θ を学習する（ステップS103）。なお、予測モデル学習処理及び選択モデル学習処理の詳細な流れについては後述する。

[0060] 以上により、本実施形態に係る学習装置 10 は、予測部 102 で実現される予測モデルのパラメータ Φ と選択部 104 で実現される選択モデルのパラメータ Θ とを学習することができる。なお、テスト時には、予測部 102 は、グラフデータ G^* と、このグラフデータ G^* の観測事例を表すマスクベクトル m^* と、学習済みのパラメータ $\hat{\Phi}$ とを用いて、上記の式 (2) により予測値を計算する。同様に、テスト時には、選択部 104 は、グラフデータ G^* と、このグラフデータ G^* の観測事例を表すマスクベクトル m^* と、学習済みのパラメータ $\hat{\Theta}$ とを用いて、上記の式 (3) によりスコアベクトルを計算する。マスクベクトル m^* の各要素の値は、グラフデータ G^* が表すグラフの n 番目のノードに対するラベルが観測されていれば $m_n = 1$ 、そうでなければ $m_n = 0$ となる。

[0061] また、テスト時における学習装置 10 は予測モデル学習部 103 及び選択モデル学習部 105 を有していなくてもよく、例えば、「ラベル予測装置」や「事例選択装置」等と称されてもよい。

[0062] 《予測モデル学習処理》

次に、上記のステップ S102 の予測モデル学習処理の流れについて、図 3 を参照しながら説明する。図 3 は、本実施形態に係る予測モデル学習処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[0063] まず、予測モデル学習部 103 は、予測モデルのパラメータ Φ を初期化する (ステップ S201)。パラメータ Φ は、例えば、ランダムに初期化されてもよいし、或る分布に従うように初期化されてもよい。

[0064] 以降のステップ S202～ステップ S207 は所定の終了条件を満たすまで繰り返し実行される。所定の終了条件としては、例えば、学習対象のパラメータ Φ が収束したこと、当該繰り返しが所定の回数実行されたこと等が挙げられる。

[0065] 予測モデル学習部 103 は、図 2 のステップ S101 で入力されたグラフデータ集合 G からグラフデータ G_d をサンプリングする (ステップ S202)。

[0066] 次に、予測モデル学習部103は、上記のステップS202でサンプリングされたグラフデータ G_d のノード集合 $\{1, \dots, N_d\}$ から N_s 個の観測事例をサンプリングする（ステップS203）。これら N_s 個の観測事例の集合を S とする。

[0067] 次に、予測モデル学習部103は、マスクベクトル m_d の各要素の値を、 $n \in S$ ならば $m_{d,n} = 1$ 、そうでなければ $m_{d,n} = 0$ と設定する（ステップS204）。

[0068] 次に、予測部102は、グラフデータ G_d とマスクベクトル m_d とパラメータ Φ とを用いて、上記の式（2）により予測値 $\hat{y}_d$ を計算する（ステップS205）。

[0069] 続いて、予測モデル学習部103は、グラフデータ G_d とマスクベクトル m_d と上記のステップS205で計算された予測値 $\hat{y}_d$ とパラメータ Φ とを用いて、上記の式（5）により誤差 L とそのパラメータ Φ に関する勾配とを計算する（ステップS206）。なお、勾配は、例えば、誤差逆伝播法等の既知の手法により計算すればよい。

[0070] そして、予測モデル学習部103は、上記のステップS206で計算した誤差 L 及びその勾配を用いて、学習対象のパラメータ Φ を更新する（ステップS207）。なお、予測モデル学習部103は、既知の更新式等により学習対象のパラメータ Φ を更新すればよい。

[0071] 《選択モデル学習処理》

次に、上記のステップS103の選択モデル学習処理の流れについて、図4を参照しながら説明する。図4は、本実施形態に係る選択モデル学習処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[0072] まず、選択モデル学習部105は、選択モデルのパラメータ Θ を初期化する（ステップS301）。パラメータ Θ は、例えば、ランダムに初期化されてもよいし、或る分布に従うように初期化されてもよい。

[0073] 以降のステップS302～ステップS304は所定の終了条件を満たすまで繰り返し実行される。所定の終了条件としては、例えば、学習対象のパラ

メータ Θ が収束したこと、当該繰り返しが所定の回数実行されたこと等が挙げられる。

[0074] 選択モデル学習部105は、図2のステップS101で入力されたグラフデータ集合Gからグラフデータ G_d をサンプリングする（ステップS302）。

[0075] 次に、選択モデル学習部105は、マスクベクトル $m_d = 0$ と初期化（つまり、マスクベクトル m_d の各要素の値を0に初期化）する（ステップS303）。

[0076] 続いて、学習装置10は、 $s = 1, \dots, N_A$ に対して以下のステップS311～ステップS318を繰り返し実行する（ステップS304）。すなわち、学習装置10は、以下のステップS311～ステップS318を N_A 回繰り返し実行する。なお、 N_A は最大観測事例数である。

[0077] 選択部104は、グラフデータ G_d とマスクベクトル m_d とパラメータ Θ を用いて、上記の式（3）によりスコアベクトル s_d を計算する（ステップS311）。

[0078] 次に、選択モデル学習部105は、上記の式（8）により選択分布 π_d を計算する（ステップS312）。

[0079] 次に、選択モデル学習部105は、上記のステップS312で計算された選択分布 π_d に従って、グラフデータ G_d のノード集合 $\{1, \dots, N_d\}$ から観測事例 n を選択する（ステップS313）。

[0080] 次に、選択モデル学習部105は、上記の式（6）により予測誤差削減率 $R(G_d, m_d, n)$ を計算する（ステップS314）。

[0081] 続いて、選択モデル学習部105は、上記のステップS314で計算された予測誤差削減率 $R(G_d, m_d, n)$ と、上記のステップS312で計算された選択分布 π_d とを用いて、パラメータ Θ を更新する（ステップS315）。選択モデル学習部105は、例えば、 $\Theta \leftarrow \Theta + \alpha R(G_d, m_d, n) \nabla_{\Theta} \log \pi_{d,n}$ によりパラメータ Θ を更新すればよい。ここで、 α は学習係数、 ∇_{Θ} はパラメータ Θ に関する勾配を表す。なお、一例として、強化学習の方策勾

配法によってパラメータ θ を更新しているが、これに限られず、強化学習の他の手法によりパラメータ θ が更新されてもよい。

[0082] そして、選択モデル学習部105は、上記のステップS313で選択した観測事例 n に応じてマスクベクトル m_d を更新する（ステップS316）。すなわち、選択モデル学習部105は、上記のステップS313で選択した観測事例 n に対応する要素 $m_{d,n}$ を1に更新（つまり、 $m_{d,n}=1$ に更新）する。

[0083] <評価結果>

次に、本実施形態に係る学習装置10によって学習された選択モデル及び予測モデルの評価結果について説明する。本実施形態では、一例として、グラフデータの1つである交通データを用いて評価した。その評価結果を図5に示す。

[0084] 図5では横軸が観測事例数、縦軸が予測誤差を表している。また、Randomはランダムに事例を選択する手法、Varianceは予測分散が最大の事例を選択する手法、Entropyはエントロピーが最大の事例を選択する手法、MIは相互情報量が最大の事例を選択する手法である。また、NNは、本実施形態に係る学習装置10によって学習される選択モデル及び予測モデルとしてフィードフォワードネットワークを用いた場合である。一方で、Oursは、本実施形態に係る学習装置10によって学習される選択モデル及び予測モデルとしてグラフ畳み込みニューラルネットワークを用いた場合である。

[0085] 図5に示すように、Oursでは他の手法と比較して低い予測誤差が達成されており、高性能な予測モデルが得られていることがわかる。

[0086] <ハードウェア構成>

最後に、本実施形態に係る学習装置10のハードウェア構成について、図6を参照しながら説明する。図6は、本実施形態に係る学習装置10のハードウェア構成の一例を示す図である。

[0087] 図6に示すように、本実施形態に係る学習装置10は一般的なコンピュータ又はコンピュータシステムで実現され、入力装置201と、表示装置202と、外部I/F203と、通信I/F204と、プロセッサ205と、メ

メモリ装置206とを有する。これら各ハードウェアは、それぞれがバス207を介して通信可能に接続されている。

[0088] 入力装置201は、例えば、キーボードやマウス、タッチパネル等である。表示装置202は、例えば、ディスプレイ等である。なお、学習装置10は、入力装置201及び表示装置202のうちの少なくとも一方を有していなくてもよい。

[0089] 外部I/F203は、記録媒体203a等の外部装置とのインタフェースである。学習装置10は、外部I/F203を介して、記録媒体203aの読み取りや書き込み等を行うことができる。記録媒体203aには、例えば、学習装置10が有する各機能部（入力部101、予測部102、予測モデル学習部103、選択部104及び選択モデル学習部105）を実現する1以上のプログラムが格納されていてもよい。なお、記録媒体203aには、例えば、CD（Compact Disc）、DVD（Digital Versatile Disk）、SDメモリカード（Secure Digital memory card）、USB（Universal Serial Bus）メモリカード等がある。

[0090] 通信I/F204は、学習装置10を通信ネットワークに接続するためのインタフェースである。なお、学習装置10が有する各機能部を実現する1以上のプログラムは、通信I/F204を介して、所定のサーバ装置等から取得（ダウンロード）されてもよい。

[0091] プロセッサ205は、例えば、CPU（Central Processing Unit）やGPU（Graphics Processing Unit）等の各種演算装置である。学習装置10が有する各機能部は、例えば、メモリ装置206に格納されている1以上のプログラムがプロセッサ205に実行させる処理により実現される。

[0092] メモリ装置206は、例えば、HDD（Hard Disk Drive）やSSD（Solid State Drive）、RAM（Random Access Memory）、ROM（Read Only Memory）、フラッシュメモリ等の各種記憶装置である。学習装置10が有する記憶部106は、例えば、メモリ装置206により実現される。ただし、当該記憶部106は、例えば、学習装置10と通信ネットワークを介して接続

される記憶装置（例えば、データベースサーバ等）により実現されていてもよい。

[0093] 本実施形態に係る学習装置１０は、図６に示すハードウェア構成を有することにより、上述した学習処理を実現することができる。なお、図６に示すハードウェア構成は一例であって、学習装置１０は、他のハードウェア構成を有していてもよい。例えば、学習装置１０は、複数のプロセッサ２０５を有していてもよいし、複数のメモリ装置２０６を有していてもよい。

[0094] 本発明は、具体的に開示された上記の実施形態に限定されるものではなく、請求の範囲の記載から逸脱することなく、種々の変形や変更、既知の技術との組み合わせ等が可能である。

符号の説明

[0095]	１０	学習装置
	１０１	入力部
	１０２	予測部
	１０３	予測モデル学習部
	１０４	選択部
	１０５	選択モデル学習部
	１０６	記憶部
	２０１	入力装置
	２０２	表示装置
	２０３	外部Ｉ／Ｆ
	２０３ a	記録媒体
	２０４	通信Ｉ／Ｆ
	２０５	プロセッサ
	２０６	メモリ装置
	２０７	バス

請求の範囲

- [請求項1] 事例と前記事例に対するラベルとが含まれるデータ G_d を入力する入力手順と、
- 第1のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの予測値を計算する予測手順と、
- 第2のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例のうち、一の事例を選択する選択手順と、
- 前記予測値と前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの値との第1の誤差を用いて、前記第1のニューラルネットワークのパラメータを学習する第1の学習手順と、
- 前記第1の誤差と、前記一の事例が追加で観測された場合における前記各事例に対するラベルの予測値と前記各事例に対するラベルの値との第2の誤差とを用いて、前記第2のニューラルネットワークのパラメータを学習する第2の学習手順と、
- をコンピュータが実行することを特徴とする学習方法。
- [請求項2] 前記第2の学習手順は、
- 前記第1の誤差に対する前記第2の誤差の削減率が最大となるように前記第2のニューラルネットワークのパラメータを学習する、ことを特徴とする請求項1に記載の学習方法。
- [請求項3] 前記選択手順は、
- 前記一の事例を選択するためのスコアを計算し、前記スコアに基づく分布に従って前記一の事例を選択する、ことを特徴とする請求項1又は2に記載の学習方法。
- [請求項4] 前記データ G_d は、事例をノードとするグラフ形式で表されたデー

タであり、

前記第1のニューラルネットワーク及び第2のニューラルネットワークは、グラフ畳み込みニューラルネットワークである、ことを特徴とする請求項1乃至3の何れか一項に記載の学習方法。

[請求項5]

事例と前記事例に対するラベルとが含まれるデータ G_d を入力する入力部と、

第1のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの予測値を計算する予測部と、

第2のニューラルネットワークのパラメータと、前記データ G_d に含まれる各事例のうち前記ラベルが観測されている事例を表す情報とを用いて、前記データ G_d に含まれる各事例のうち、一の事例を選択する選択部と、

前記予測値と前記データ G_d に含まれる各事例に対するラベルの値との第1の誤差を用いて、前記第1のニューラルネットワークのパラメータを学習する第1の学習部と、

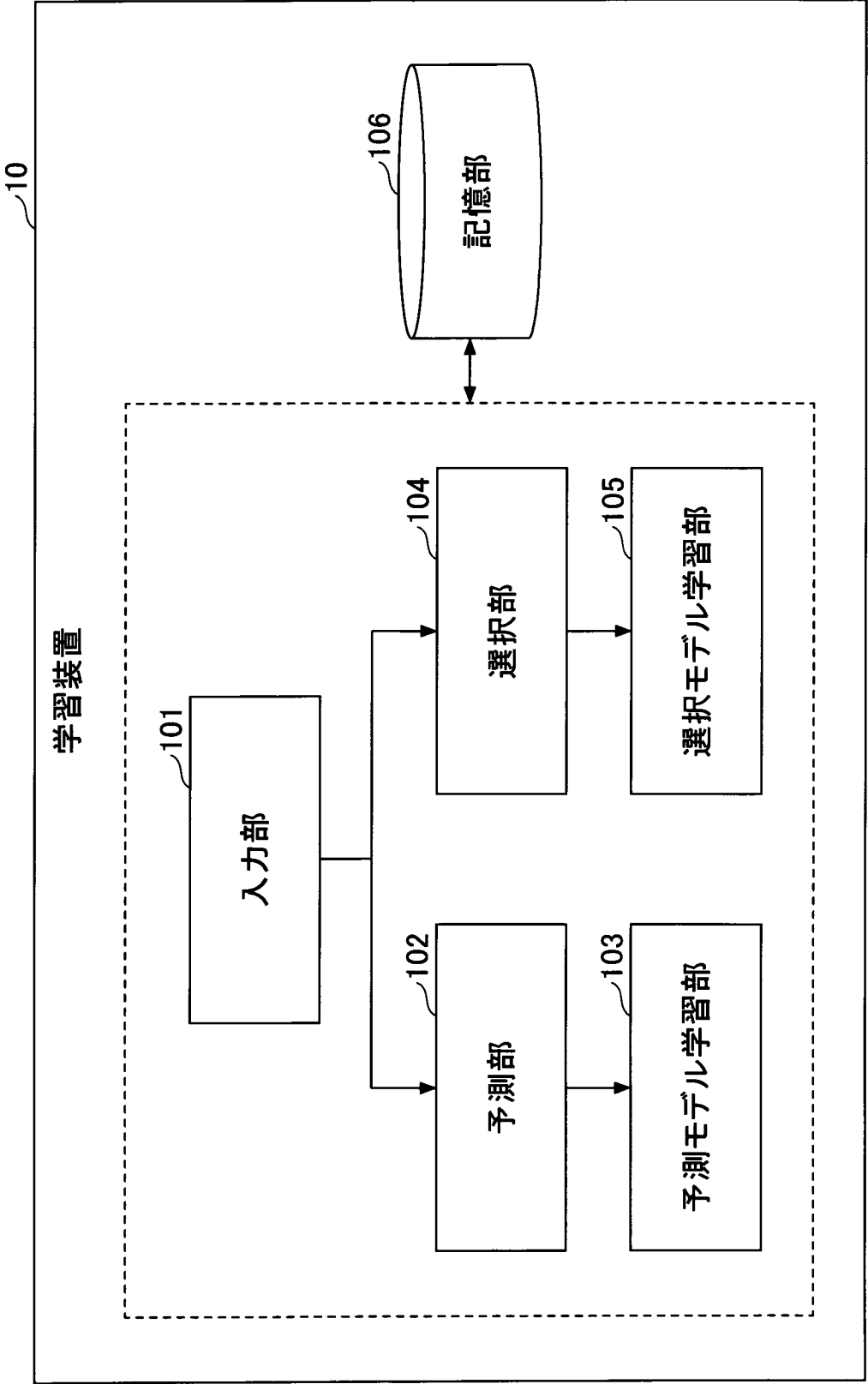
前記第1の誤差と、前記一の事例が追加で観測された場合における前記各事例に対するラベルの予測値と前記各事例に対するラベルの値との第2の誤差とを用いて、前記第2のニューラルネットワークのパラメータを学習する第2の学習部と、

を有することを特徴とする学習装置。

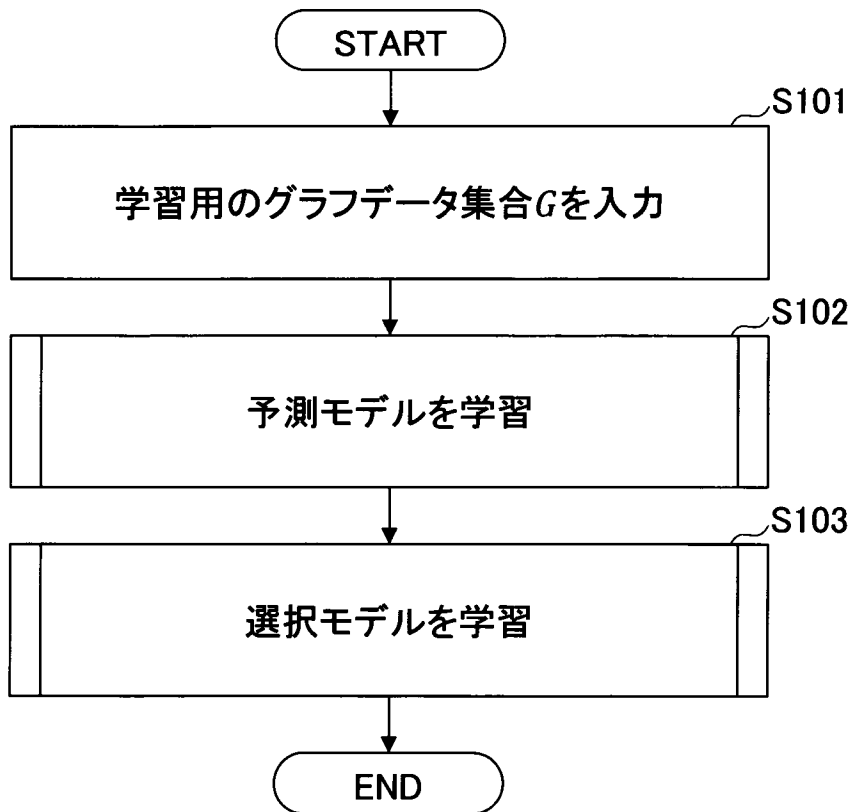
[請求項6]

コンピュータに、請求項1乃至4の何れか一項に記載の学習方法を実行させるプログラム。

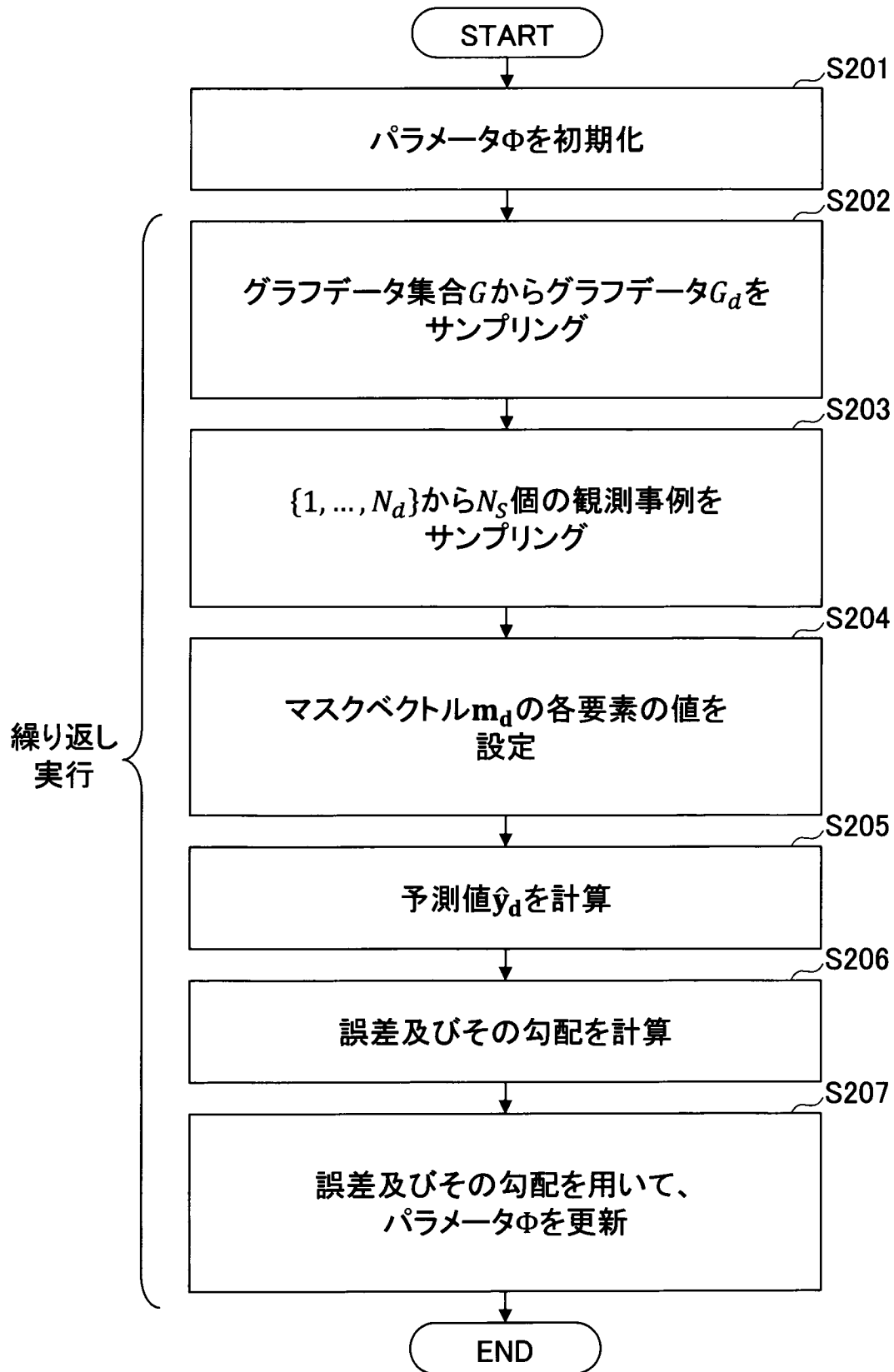
[図1]



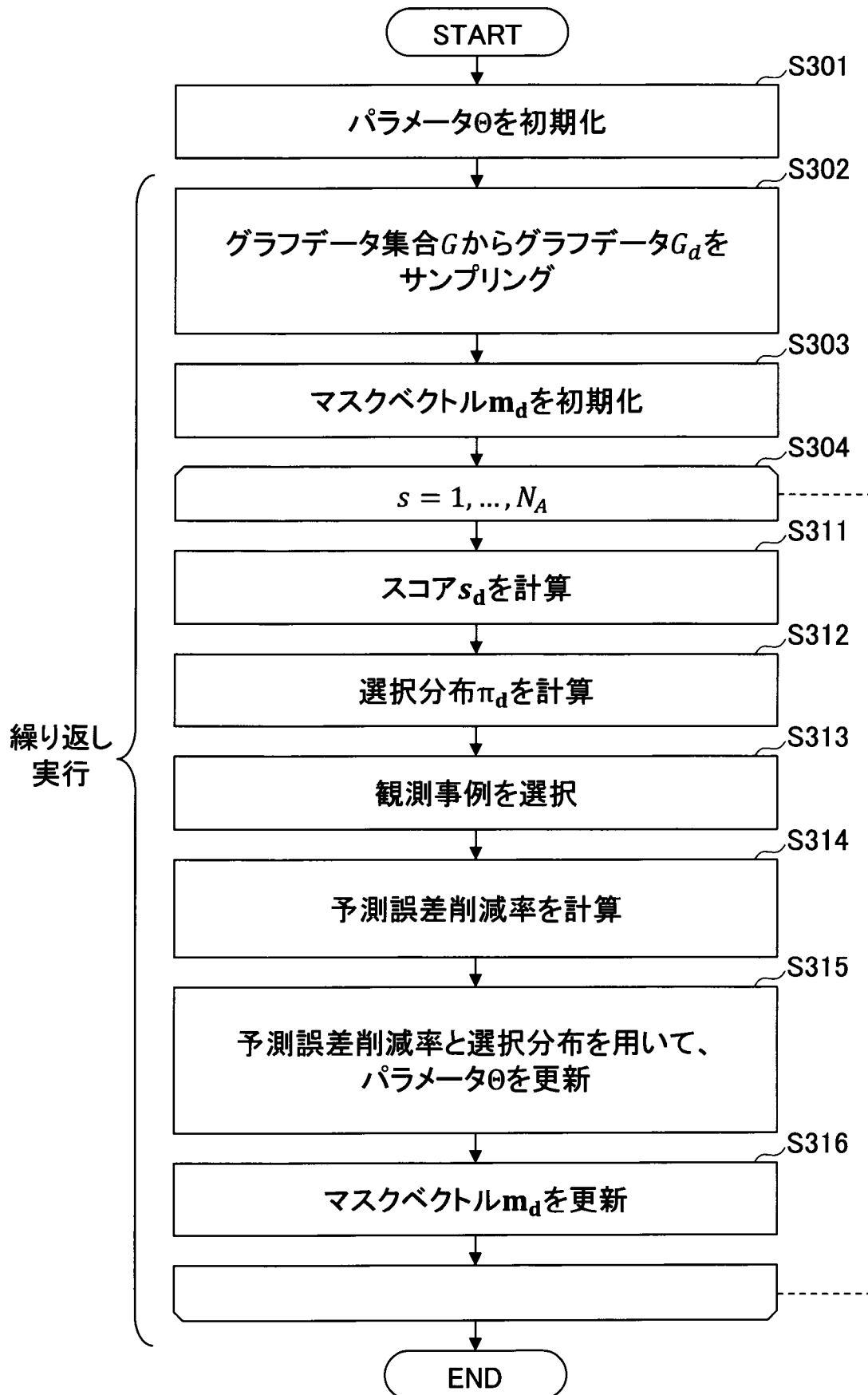
[図2]



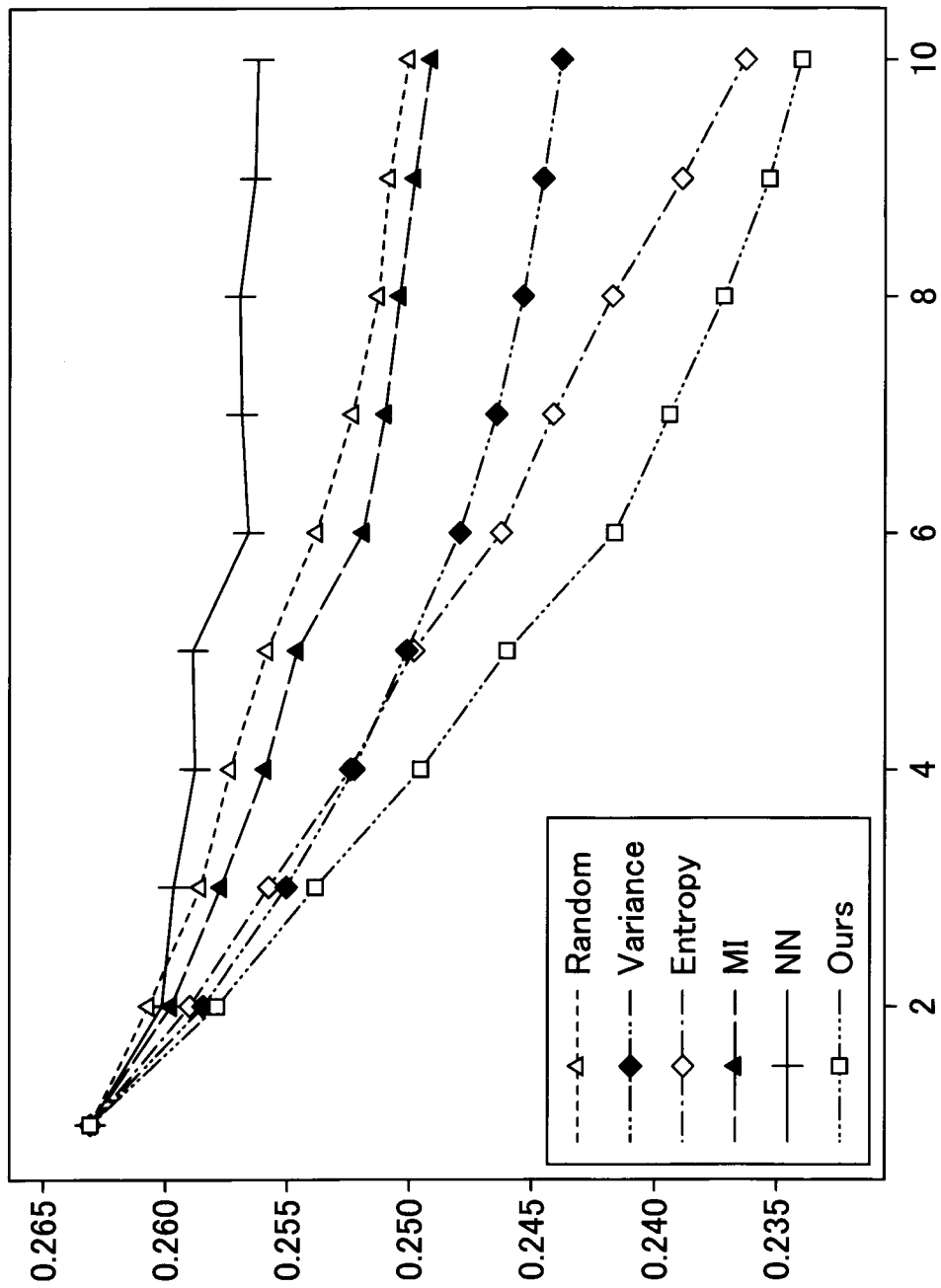
[図3]



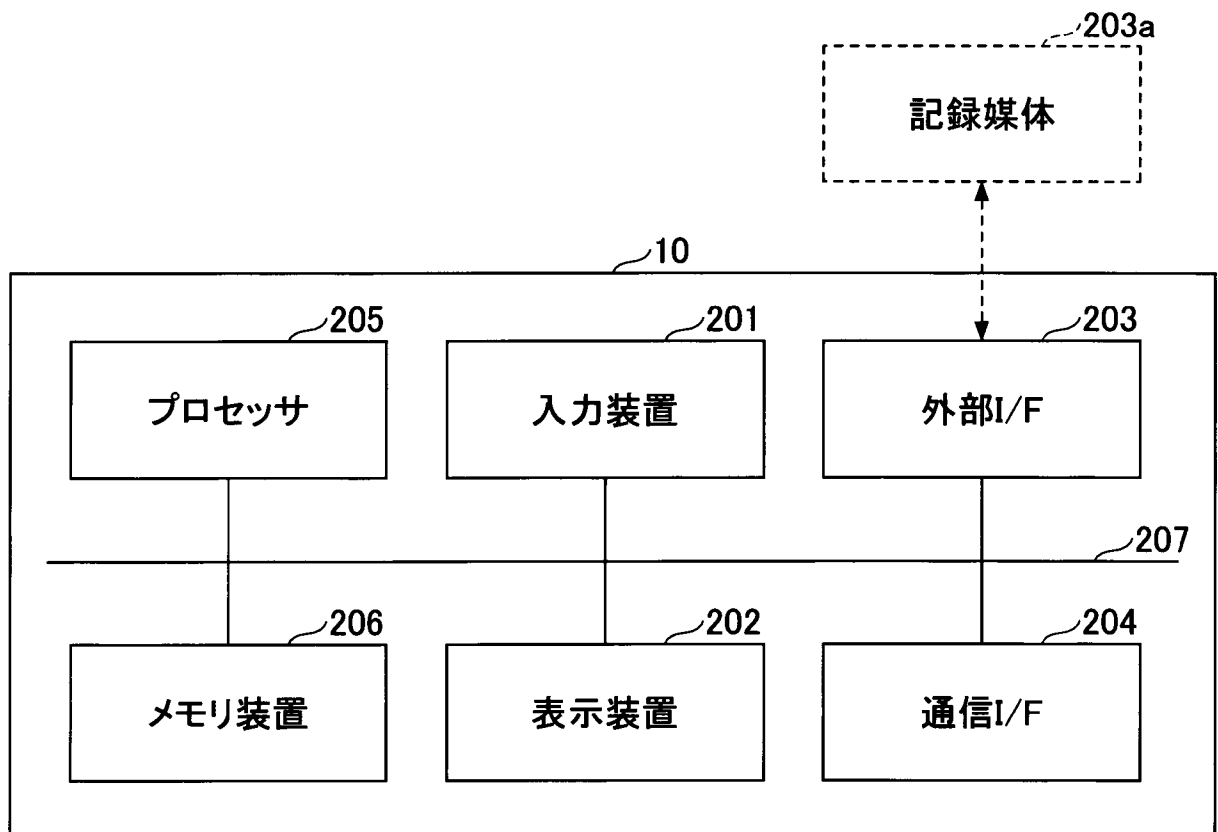
[図4]



[図5]



[図6]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2020/022566

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int. Cl. G06N3/08 (2006.01) i

FI: G06N3/08

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int. Cl. G06N3/08

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996

Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2020

Registered utility model specifications of Japan 1996-2020

Published registered utility model applications of Japan 1994-2020

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	CAI, Hongyun, et al. "Active Learning for Graph Embedding", arXiv, [online], 15 May 2017, [retrieved on 11 November 2020], Internet: URL:https://arxiv.org/abs/1705.05085, entire text, all drawings	1-6

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
10.11.2020

Date of mailing of the international search report
24.11.2020

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G06N 3/08(2006.01)i FI: G06N3/08										
B. 調査を行った分野										
調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G06N3/08										
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの										
<table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2020年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2020年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2020年</td> </tr> </table>			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2020年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2020年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2020年
日本国実用新案公報	1922 - 1996年									
日本国公開実用新案公報	1971 - 2020年									
日本国実用新案登録公報	1996 - 2020年									
日本国登録実用新案公報	1994 - 2020年									
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）										
C. 関連すると認められる文献										
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号								
A	CAI, Hongyun, 外2名, "Active Learning for Graph Embedding", arXiv, [online], 2017.05.15, [検索日 2020.11.11], インターネット:<URL: https://arxiv.org/abs/1705.05085> 全文、全図	1-6								
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。										
<table border="0"> <tr> <td style="vertical-align: top;"> * 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 </td> <td style="vertical-align: top;"> “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献 </td> </tr> </table>			* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献						
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献									
国際調査を完了した日 10.11.2020	国際調査報告の発送日 24.11.2020									
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 杉浦 孝光 5B 4808 電話番号 03-3581-1101 内線 3545									