

入力の特徴に適合するモデル選択に必要な適合度定量化手法の調査

2025年7月9日

氏名 芝垣 佳尚
所属 AWL株式会社





発表内容

1. テーマ設定
2. 調査
3. 実験
4. 議論・まとめ



1. テーマ設定



設定したテーマとその内容

■ テーマ

入力の特徴に適合するモデル選択に必要な適合度
定量化手法の調査

■ 設定した理由

- 今回調査した内容をプロフェッショナルスタディへ活用したい

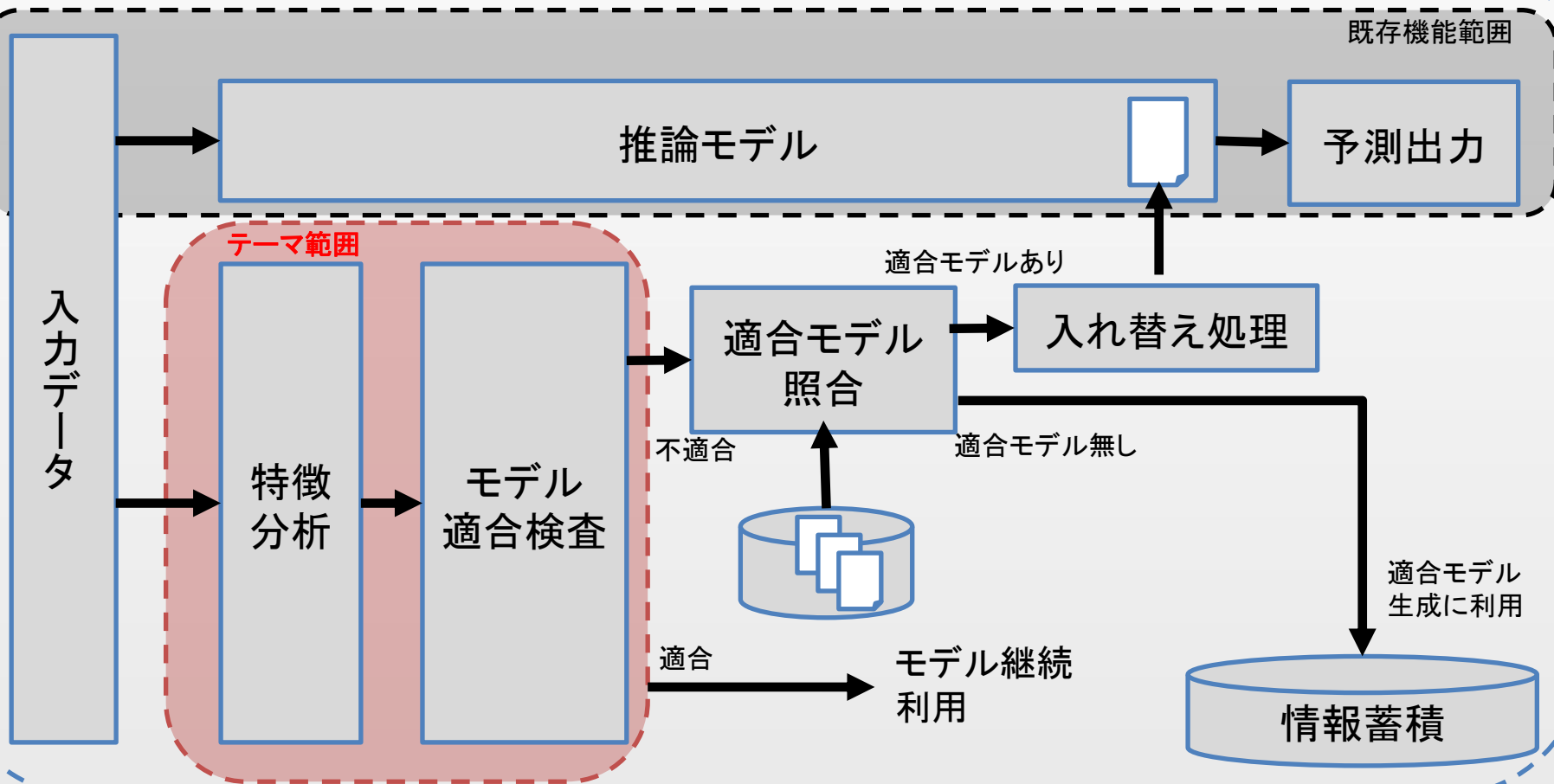
今回のテーマ

- 入力の特徴と推論モデルとの適合度
- 適合した(しない)モデル選択
- 選択したモデルの入れ替え手法
- 運用環境



本テーマ範囲

プロフェッショナルスタディ範囲





2.調査



不確実性定量化手法

- 適合度の定量化に必要な手法として不確実性の利用を検討
 - 例えば、不確実度70といった定量的な出力を加えることで、状況変化等の検出を期待
 - 定量化手法の研究目的で下記論文の調査実施
- 該当論文
 - Aleatoric and epistemic uncertainty in machine learning: an introduction to concepts and methods
 - Eyke Hüllermeier & Willem Waegeman
 - Machine Learning (2021) 110:457–506



2種類の不確実性

■ Aleatoric 不確実性

- データが持つ本質的なランダム性、偶然性
 - 例：センサーが持つノイズ、コイン投げ等
 - 多くのデータを収集しても完全には解消できない

■ Epistemic 不確実性

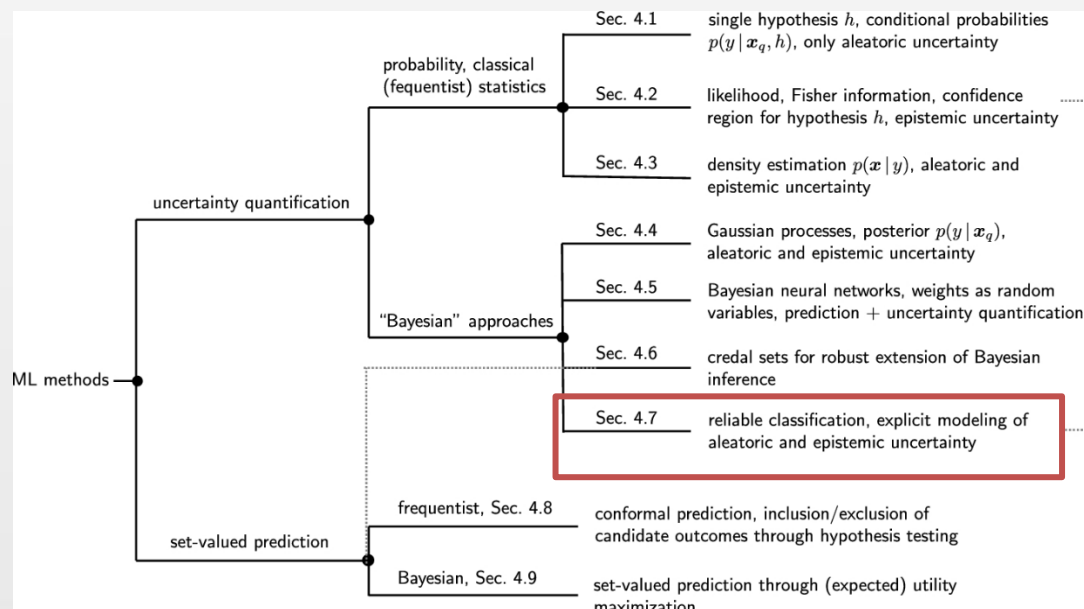
- 知識不足に起因する不確実性
 - 例：画像分類モデルにおいて、「犬」「猫」で訓練されたが「キリン」の画像が入力された
 - 追加のデータを収集することで、減少させることが可能



調査した手法

■ 該当論文から「4.7 Reliable classification」のステップを元に定量化手法の検討

- 下記Density Estimation/Gaussian processともに両不確実性を扱う事も可能だが、今回は分類タスクへの適応のしやすさを期待して選択（補足①で他の手法も記載）

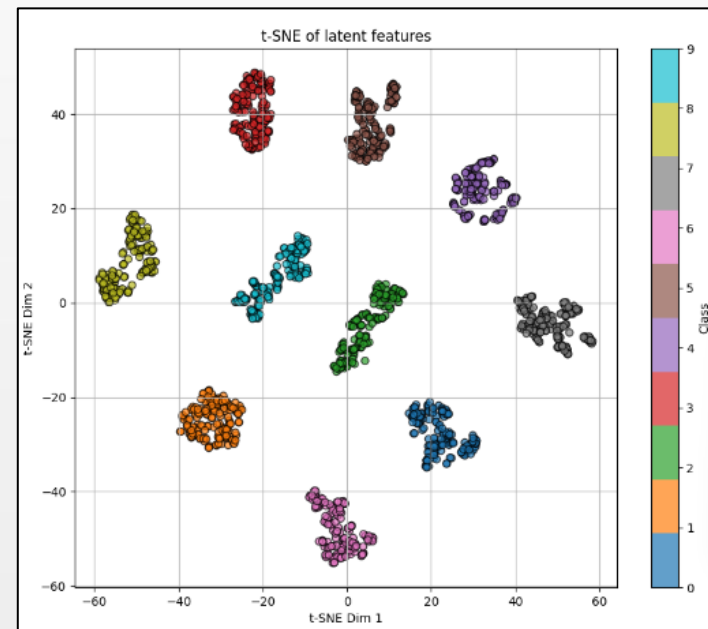


Aleatoric and epistemic uncertainty in machine learning: an introduction to concepts and methods Fig. 11

不確実性の定量化ステップ

■ 事前

1. 学習済みモデルからクラスごとの特徴ベクトルを抽出
2. 抽出した特徴ベクトルから平均と共分散を計算
3. 平均と共分散をもとに多次元正規分布を生成
4. 3で生成した分布をクラス分布として保存



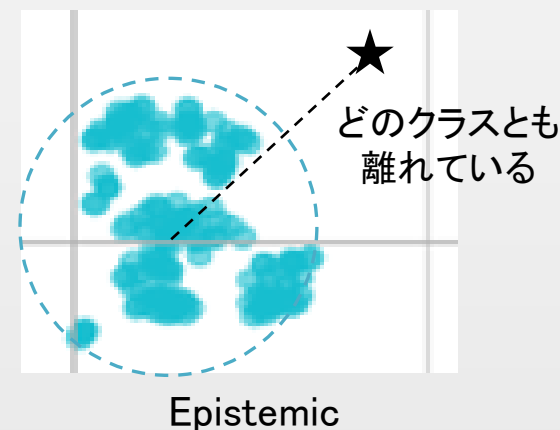
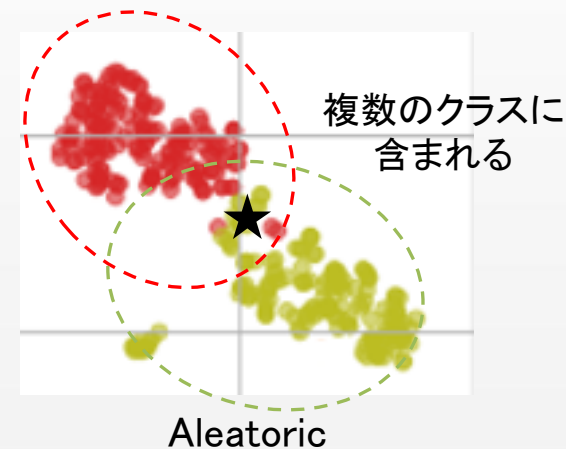
特徴ベクトルのイメージ



不確実性の定量化ステップ

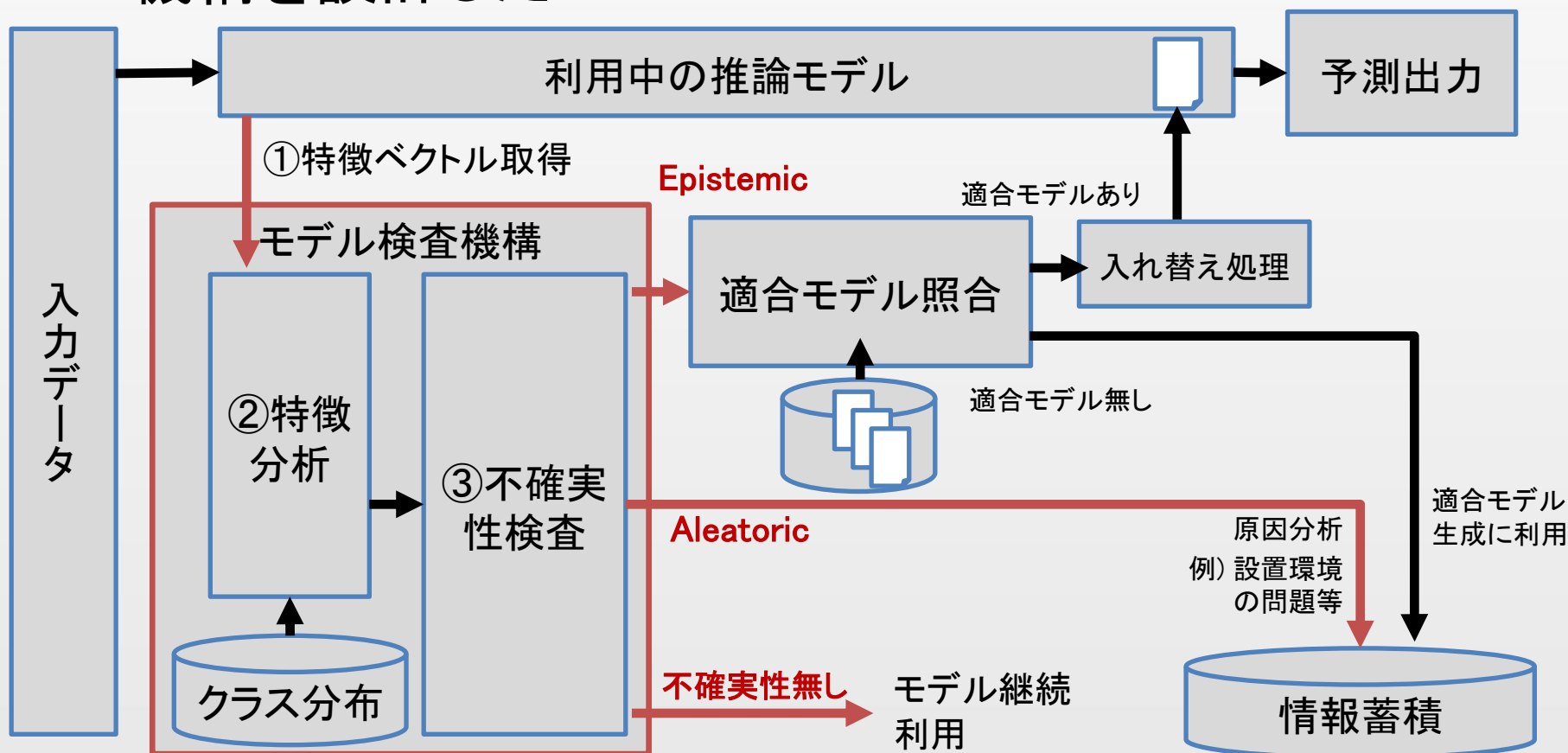
■ 推論時

1. 入力画像の特徴ベクトルを取得
2. 上記1で取得した特徴ベクトルと事前計算済みのクラス分布の尤度を計算
3. 2で計算した尤度をスコアに変換しAleatoricとEpistemicを評価



2種類の不確実性を利用した検査機構

- 調査した定量化ステップをもとに、下記モデル検査機構を設計した



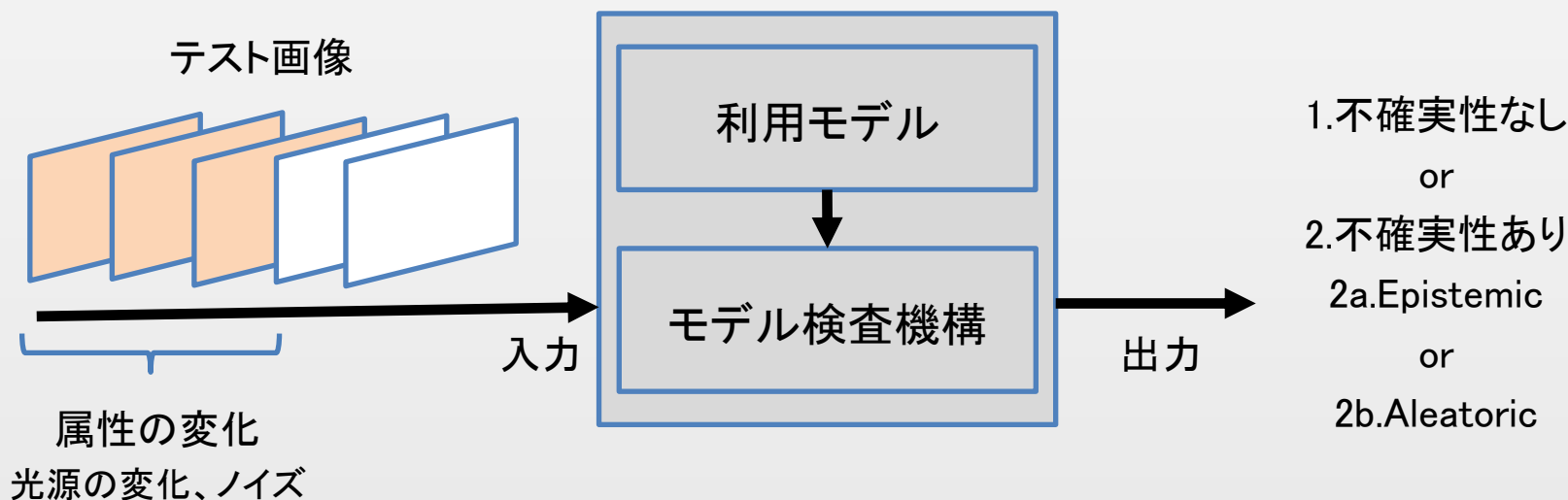


3.実験

実験

- 本手法を使ってモデル検査機構の実現可否性を検証した

■ 実験シナリオ



準備したモデル/テスト画像

■ 利用モデル

- Daiso-10(補足②)のデータセットを使って、画像分類用に用意したCNN(補足③)に学習した
- 学習に使用した画像は、照明室内灯画像1600枚

■ テスト画像

- 照明の属性5種類(室内灯、スポットライト、赤、緑、青)を各200枚利用した
- 上記属性5種類に加えて、室内灯画像にノイズを入れた画像も200枚利用



実験結果

入力画像	期待値	判定 (平均スコア)		結果
		Aleatoric	Epistemic	
室内灯	不確実性無し	0.00	0.01	不確実性無し
スポットライト	Epistemicのみ	0.00	0.13	Epistemicのみ
赤	Epistemicのみ	0.00	1.00	Epistemicのみ
緑	Epistemicのみ	0.00	1.00	Epistemicのみ
青	Epistemicのみ	0.00	1.00	Epistemicのみ
ノイズ	Aleatoricのみ	0.00	1.00	Epistemicのみ

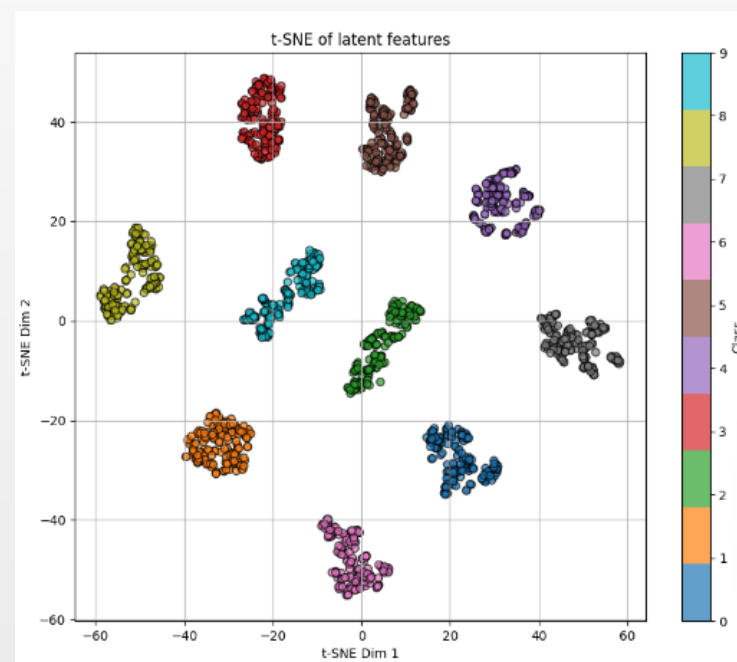
- 学習した室内灯は不確実性を検知しなかった
- 照明の変化はEpistemicと判定
- ノイズ画像はAleatoricを期待したがEpistemicと判定



4. 議論・まとめ

Aleatoricの判定

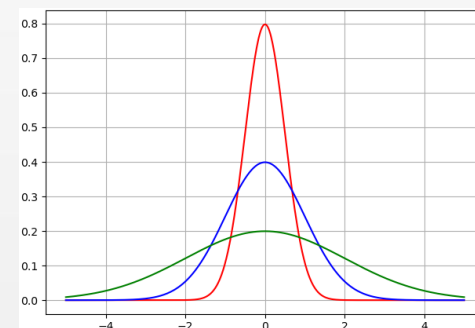
- ノイズ画像について、Aleatoricの判定を得る事が出来なかった
- モデル性能に対して、実験で設定した分類タスクが容易すぎた可能性あり
- 各クラスの分布が明確に分離されており、Aleatoricを判定する領域が存在しなかった
- データセットを変更した追実験は実施予定



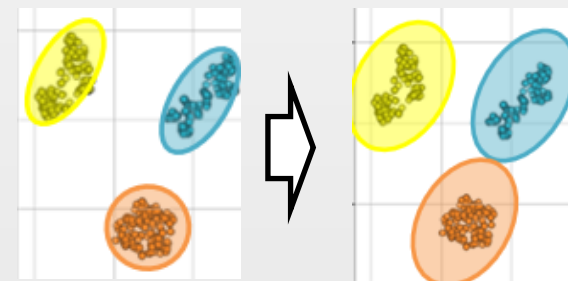
クラス分布

感度調整の必要性

- 今回の実験結果から多くのサンプルにおいて Epistemic のスコアが0もしくは最大値の1.00
 - クラス分布と比較して入力画像から取得した特徴ベクトルが一致しない場合、ほぼ1.00と最大の値が出力されたと考える
 - Epistemic感度調整のため、平均と共分散を多次元正規分布へ生成時に勾配を調整したが、うまくコントロールができなかった
 - 例えば、感度調整に必要なパラメータ自体を学習して求めるなど調整の手法確立は今後の課題



勾配を緩やかに

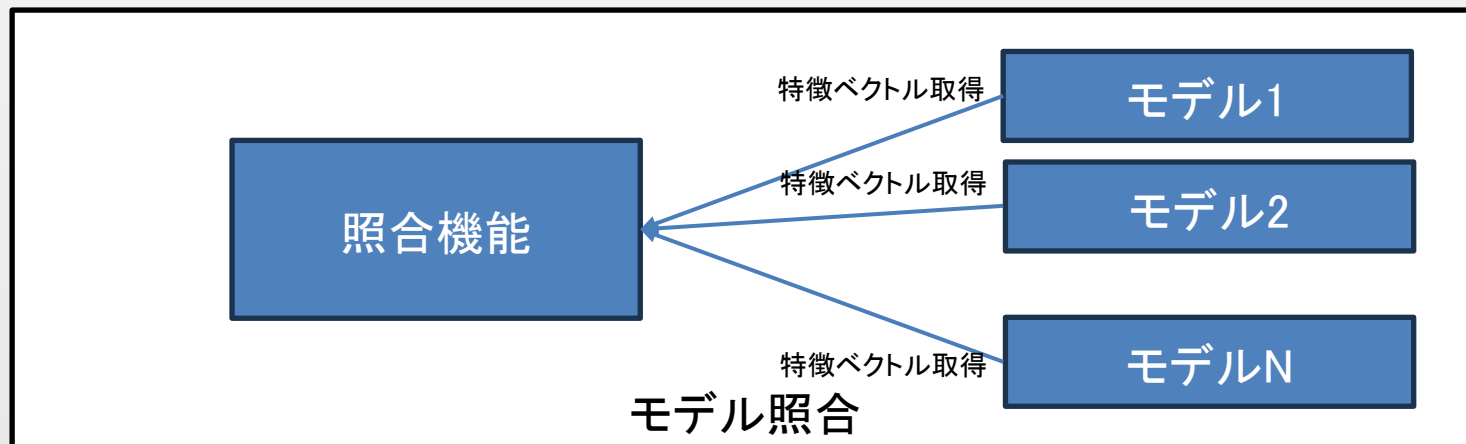


分布を広く

感度調整のイメージ図

処理速度

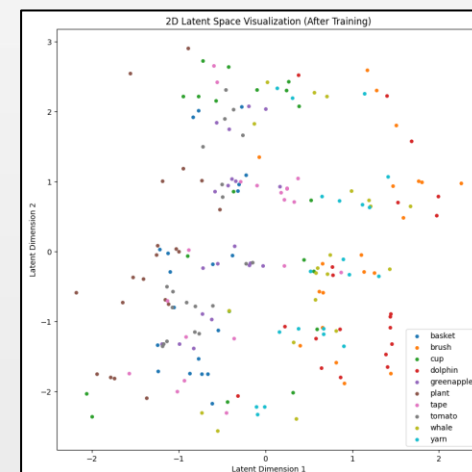
- 本研究では、モデル適合度の定量化手法に焦点を当てたが、運用環境を想定した処理速度の検証は今後の課題である
- 特に今回調査した手法では、特徴ベクトル取得の度にモデルの推論が必要なため、照合処理の速度検証は実施予定





他の定量化手法

- 該当論文「4.3 Generative models」で言及された Auto-encoder を用いることで、入力画像から得られる潜在空間を分布として表現する事は可能
- 今回の手法と比較すると、利用する推論モデルから取得する特徴ベクトルの方が、適合モデルの照合は容易と予想される
- ただ、手法の比較実験は今後の重要なステップと考える



Variational Autoencoder (VAE)
から取得したクラス分布



まとめ

- 2つの不確実性AleatoricとEpistemicの定量化手法について調査した
- 調査した手法を利用してモデル適合検査機構が実現可否を確認した
 - Epistemicの検出は確認、Aleatoricは確認ができなかった
 - 実験で設定した分類タスクが容易すぎた可能性あり、より実用上の想定に近づけて追試験を行う
- 本結果をベンチマークとして他の手法についても比較検討を行う予定



ありがとうございました

補足①

■ 該当論文で言及された代表的な手法

セクション	代表的な手法	不確実性の表現	内容
4.1 Probability estimation via scoring, calibration, and ensembling	Scoring Rules Calibration Methods Ensembling	Aleatoric	確率を用いた古典的な手法 スコアリング: ロスの大小でスコアをつける キャリブレーション: スコアを確率に変換して扱う
4.2 Maximum likelihood estimation and Fisher information	Maximum likelihood estimation Fisher Information	Epistemic	フィッシャー情報量 情報量が多い: パラメータの推定が「鋭く」なる(ばらつきが小さい) 情報量が少ない: 推定が「ぼやける」(ばらつきが大きい)
4.3 Generative models	Isolation Forests(Lui et al.2009) Auto-encoders (Goodfellow et al. 2016)	Aleatoric / Epistemic	密度分布を利用してAleatoricとEpistemicに対応する手法 領域の重なり: Aleatoric、密度の低い領域: Epistemic
4.4 Gaussian processes	Gaussian Process(GP)	Aleatoric / Epistemic	予測と同時に不確実性も提供。理論的にはパラメーターを決定することで、AleatoricとEpistemicの原因を分離することは可能だが容易ではない
4.5 Deep neural networks	Bayesian Neural Networks (BNNs) Dropout Variational Inference (Gal & Ghahramani, 2016) Ensemble Learning(Lakshminarayanan et al., 2017)	予測 + Epistemic	重みを確率分布として扱い予測+ばらつき(Epistemic)で出力
4.6 Credal sets and classifiers	Credal Sets, Credal Classifiers	集合	単一の確率分布ではなく、確率分布の集合で不確実性を表現
4.7 Reliable classification	Reliable classification	Aleatoric / Epistemic	Sengeら(2013)が提案した予測の尤もらしさを定量的にモデル化する手法。AleatoricとEpistemicを明示的に扱う
4.8 Conformal prediction	Conformal Prediction	集合	予測の信頼度を制御、保証する方法。仮説検定を行う
4.9 Set-valued prediction based on utility maximization	Utility-based Set-valued Prediction	集合	Unity functionに基づいて、正解を含む最も役に立つ予測集合を選択

補足②

■ DAISO-10

- Sunagawa, Taro, 2021, “DAISO-10”,
- <https://doi.org/10.7910/DVN/QYEVQV>, Harvard Dataverse, V1
- クラス: 10種類
- 属性
 - 照明: 5種類 (室内灯、スポットライト、赤、緑、青)
 - 雑貨の配置: 2種類
 - 雑貨の角度: 20通り
 - カメラの角度: 5通り

補足②

■ DAISO-10

■ Class: 10種類

例:



補足②

■ DAISO-10

■ 属性

- 照明：5種類（室内灯、スポットライト、赤、緑、青）

例:



室内灯



スポットライト



赤



緑



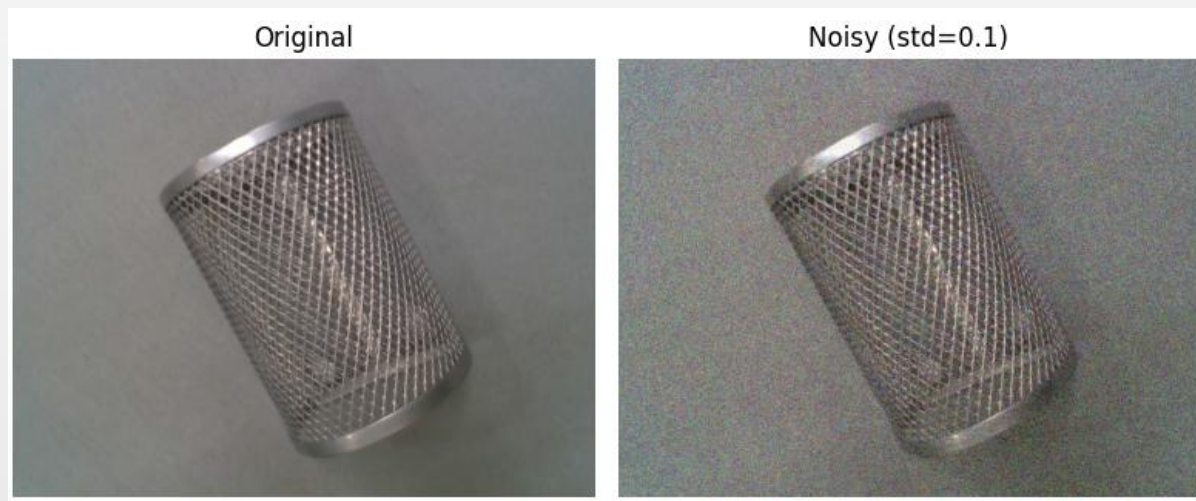
青

補足②

■ ノイズ画像

- 正規分布からランダムにサンプリングされた値を用いて室内灯画像にノイズを導入

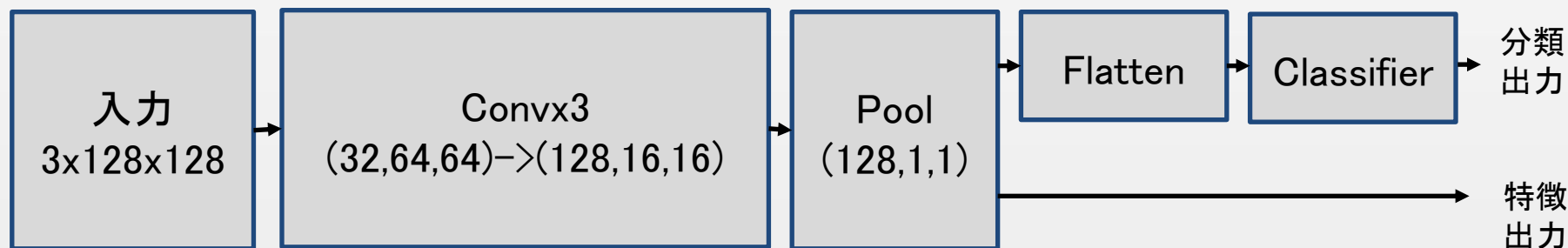
例:





補足③

- 実験用に準備したCNNモデル
 - 3層畳み込みにより次元圧縮
 - 特徴出力用にインターフェース実装



補足③

■ 学習後のF1スコア

テスト画像 (200枚)	F1スコア
室内灯	1.00
スポットライト	0.95
赤	0.16
緑	0.20
青	0.17