

# 研究報告書

## 「弱い教師データに基づく低分散なリスク推定方法の開発」

研究期間：2018年10月～2020年3月  
研究者番号：50178  
研究者：包含

### 1. 研究のねらい

教師付き分類において不均衡データなどの現実的なデータを扱う際には、分類正答率は必ずしも適切な評価指標であるとは限らないため、AUC や F 値などのより精緻な評価指標で代替されてきた。しかし、分類正答率以外の評価指標は最適化が容易でないことが多く、評価指標ごとにアドホックに学習方法が考案されてきた。本研究においては、評価指標をある程度一般化して統一的に最適化を行う枠組みを考案することを目的とする。

### 2. 研究成果

#### (1) 概要

教師付き分類で用いられている評価指標を一般化した線形分数形と呼ばれる評価指標のクラスを考え、このクラスに含まれる評価指標を近似する surrogate utility を呼ばれる目的関数を構成した。ここで構成した surrogate utility は最大化の計算効率がよく、また surrogate utility の最大化が本来の評価指標の最大化を誘導する性質を持つ。この提案手法は教師付き分類において既存法よりも良い実験的性能を達成するだけでなく、画像セグメンテーションのような応用先でも良い性能を達成することを確認した。

#### (2) 詳細

##### 研究テーマ A 「一般化評価指標に対する最適化手法の構成と理論保証」

分類問題には多種多様な評価指標が存在するが、(一般化)線形分数形、すなわち分子と分母の両方が真陽性率と偽陽性率の線形変換でかけるような形で多くの指標を統一的に表すことができる。たとえば F 値や Jaccard 指標がこのクラスの評価指標に含まれる。既存研究ではコスト考慮型学習やクラス事後確率の推定を途中段階とする比直接的な最適化を行っているが、計算コストが重かったりサンプル効率性がよくなかったりなどのデメリットが存在した。

本研究では評価指標を直接近似する surrogate utility と呼ばれる目的関数を構成した。ここで構成した surrogate utility は準凹関数であるため、比較的効率的に最大化することができる。また、surrogate utility の最大化が本来の目的であった評価指標の最大化を誘導する、適合性と呼ばれる理論保証も与えることに成功した。適合性の保証は、線形分数形の評価指標に対してはこの研究が初めて与えた。

##### 研究テーマ B 「一般化評価指標に対する最適化手法の実応用」

研究テーマ A で提案した surrogate utility に基づく評価指標の最大化は本来分類問題を解

くことを目的にしたものだったが、他の問題に対しても応用することが可能である。この研究では、一つの応用として画像セグメンテーションに対する応用を行った。特に深層学習を用いた医療画像のセグメンテーションでは Dice 指標(注:F 値と同じ)が評価指標としてしばしば用いられており、学習時には交差エントロピーや soft Dice と呼ばれる損失関数が用いられてきた。しかし、これらの目的関数は本来の評価指標である Dice 指標に対して適合的であるかどうか不明であった。この研究では、研究テーマ A で提案した適合的な surrogate utility を用いて Dice 指標を直接最大化し、既存の損失関数よりも性能が向上することを確認した。

### 3. 今後の展開

現実で用いられている評価指標を直接最適化することは一般的には困難であったが、本研究によって情報検索の分野でよく用いられる F 値や画像処理でよく用いられる Jaccard 指標を含む一定数の評価指標を直接最適化することが可能になった。これによって、評価指標が定まればそれに対して適切な分類器の学習方法を導出することができる。

一方で、現実世界では適切な評価指標自体が不明なことも多い。その際に評価指標に対する不確実性を残したまま分類器を学習できるかどうかは今後の課題となる。

### 4. 自己評価

#### ・研究目的の達成状況

分類正答率以外も含む一般的な評価指標の直接最適化を行う手法を提案し、その理論保証を与えたという点では一定の成果を収めたと言える。一方で、最適化の計算効率を上げたり、理論保証において陽に収束レートを与えるなどの改善の余地はまだあるため、これらは今後の課題であるといえる。

#### ・研究の進め方

研究期間中にミシガン大学に滞在し、滞在先の教授と理論解析に関する詳細な議論を行うことができた。また、関連研究を行っているイリノイ大学のグループでも議論を行うことができた。

#### ・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

本研究内容は前述したような情報検索から画像処理など、教師付き分類を基盤とした様々な実問題に応用できる可能性を秘めている。研究期間中には画像セグメンテーションに対する応用に関する研究を行ったが、他の応用へ広げていく余地がまだ残っている。

#### ・研究課題の独創性・挑戦性

本研究において最も挑戦的な点の一つは、surrogate utility の適合性の理論保証を与えた点である。線形分数形の評価指標はその形のために従来は理論解析が困難だったが、一定の形で解決を与えた本研究の貢献は大きいといえる。

## 5. 主な研究成果リスト

### (1) 論文(原著論文)発表

1. **Bao, H.**, Scott, H. & Sugiyama, M. Calibrated Surrogate Losses for Adversarially Robust Classification. In *Proceedings of 33rd Annual Conference on Learning Theory (COLT2020)*, PMLR xx:xx-xx, Graz, Austria, Jul. 9–12, 2020. (to appear)
2. **Bao, H.** & Sugiyama, M. Calibrated Surrogate Maximization of Linear–fractional Utility in Binary Classification. In *Proceedings of 23rd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS2020)*, PMLR xx:xx-xx, Sicily, Italy, Jun. 3–5, 2020.
3. Wu, Y.-H., Charoenphakdee, N., **Bao, H.**, Tangkaratt, V., & Sugiyama, M. Imitation Learning from Imperfect Demonstration. In *Proceedings of 36th International Conference on Machine Learning (ICML2019)*, PMLR 97:6818–6827, Long Beach, CA, USA, Jun. 9–15, 2019.
4. Kuroki, S., Charoenphakdee, N., **Bao, H.**, Honda, J., Sato, I., & Sugiyama, M. Unsupervised Domain Adaptation Based on Source–guided Discrepancy. In *Proceedings of 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2019)*, 33 01:4122–4129, Honolulu, HI, USA, Jan. 27–Feb. 1, 2019.

### (2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

### (3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

#### 受賞 1: 学生優秀プレゼンテーション賞

**Bao, H.** & Sugiyama, M.

Calibrated Surrogate Maximization of Linear–fractional Utility in Binary Classification.

Presented at *22nd Information–Based Induction Sciences Workshop (IBIS2019)*, Nagoya, Japan, Nov. 20–23, 2019.

#### 受賞 2: Best Poster Award

**Bao, H.**, Niu, G., & Sugiyama, M.

Classification from Pairwise Similarity and Unlabeled Data.

Presented at *1st Japan–Israel Machine Learning Meeting (JIML–2018)*, Tel–Aviv, Israel, Nov. 19–20, 2018.