2U-05

Energy-based modelを導入した学習則による未知クラス推定確率ニューラルネットの最適化

北原 丈大‡　柏木 僚太‡　迎田 隆幸†‡　島 圭介‡

‡横浜国立大学大学院環境情報研究院　†神奈川県立産業技術総合研究所

1　はじめに

一般的なパターン識別問題において，あらゆるパターンを網羅した学習を行うことは困難であり，学習対象外のパターンが入力された際には，誤識別が発生する．この問題に対し，学習対象クラスに含まれない異常値が属する未知クラスも含めた多クラス分類を実現するオープンセット認識（OSR）手法が数多く提案されている．我々の研究グループでは，複数の確率モデルを内包するニューラルネット型のOSR手法を提案している．しかし，提案手法においても従来のOSR手法と同様に，学習対象クラスの正常サンプルに対する分類精度のみを考慮した学習を採用している．このような学習法では尤度ではなく事後確率のみを評価対象としているため，内包された確率モデルが学習データの分布を正確に表現できることが保証されないという課題がある．そこで，本研究では学習サンプルに対する尤度も考慮可能なEnergy-based modelを応用した新たな学習則を適用し，分類精度の向上や，内包される確率モデルパラメータの推定誤差の低減を実現する．

2　EBM [1] を導入したオープンセット認識

2.1　混合正規分布と混合余事象分布に基づくベイズ識別

まず，我々の研究グループで提案したOSR手法の構造について述べる．NACGMNは学習クラスに対応する正規分布 $g(\mathbf{x};k,m)$ と未知クラスの分布を仮定した余事象分布 $h(\mathbf{x};k,m)$ を内包した識別モデルであり，これらの確率分布を用いて未知クラスを含む各クラスの事後確率を算出する．s_i は i 番目のデータ $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D$ のクラス，p_0 は未知クラスの事前確率，K は学習クラス数，M_k は各クラス ω_k の混合正規分布が含む正規分布の数に相当するコンポーネント数，$\alpha_{k,m},\beta_{k,m}$ は各分布の混合度とする．この時，学習クラス ω_k と未知クラス ω_{unknown} の事後確率はそれぞれ次式によって表される．

$$P(s_i|\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1-p_0}{F(\mathbf{x})} \sum_{m=1}^{M_k} \alpha_{k,m} g(\mathbf{x};k,m) & (s_i = \omega_k) \\ \frac{p_0}{F(\mathbf{x})} \sum_{k'=1}^{K} \sum_{m'=1}^{M'_k} \beta_{k',m'} h(\mathbf{x};k',m') & (s_i = \omega_{\text{unknown}}) \end{cases} \tag{1}$$

ただし，$F(\mathbf{x})$ は正規化項である．各事象が従属であるとき，ベイズ識別により事後確率が最大となるクラスを選択することでオープンセット認識が可能になる．GMMの学習では学習データ $x_n (n = 1,...,N)$ に対して尤度を最大化する平均 $\mu_{k,m}$ や共分散行列 $\Sigma_{k,m}$，混合度 $\alpha_{k,m}$ を求める．ただし，$\Sigma_{k,m}$ は統計的制約が多数存在する．また，混合余事象分布のパラメータである $\varepsilon_{k,m}$ や混合度 $\beta_{k,m}$ に対する学習データは存在せず，最尤推定などの統計的手法に基づく同定が困難である．そこで，Tsujiらが提案した対数線形化 [3] を適用し，モデルのパラメータを内包する重み係数へ変換する．この重み係数は分類結果に対するクロスエントロピー誤差に基づき誤差逆伝播法によって最適化される．ただし，分類精度のみを考慮する学習則の影響で，内包されるGMMが学習データの分布を正しく表現するものになるかどうかは保証できないという課題を有する．次節では上記の課題を解消するための新たな学習則について述べる．

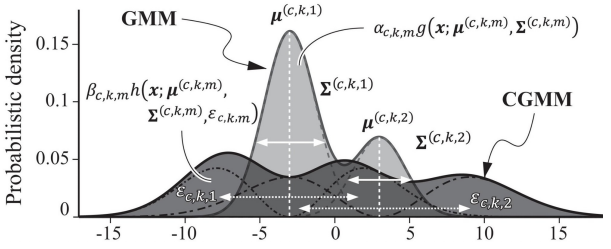

図 1: The structure of GMM and CGMM [2]

2.2　Energy-Based Model に基づく生成モデル

エネルギーベースモデル (EBM) [1] は，確率密度関数をエネルギー関数を用いて表現する確率モデリング手法である．ここで，θ をパラメータ，$E_\theta(x)$ を任意のデータ点 x に対するエネルギー関数，$Z(\theta) = \int \exp(-E_\theta(x))\,dx$ を正規化定数としたとき，EBMの任意の確率密度関数 $p_\theta(x)$ は次式のように表現される．

$$p_\theta(x) = \frac{\exp(-E_\theta(x))}{Z(\theta)} \tag{2}$$

対数尤度のパラメータ勾配をエネルギー関数と期待値から次式で表す．

$$\nabla_\theta \log p_\theta(x) = -\nabla_\theta E_\theta(x) + \mathbb{E}_{p_\theta(x)}[\nabla_\theta E_\theta(x)] \tag{3}$$

しかし，正規化定数 $Z(\theta)$ の計算が困難であるため，確率密度関数に基づく期待値をサンプリングにより近似的に計算する．Grathwohlらの先行研究 [1] では，x をデータ，y をラベルとしたときの結合分布 $p(x,y)$ を最適化する手法を提案している．この手法では，生成モデル $p(x)$ を活用しつつ，分類器 $p(y|x)$ を効率的に最適化することで結合分布を学習する．あるクラス k，そのクラスのGMMに含まれるあるコンポーネント m における対数尤度を $f(x)[k][m]$ としたとき，エネルギー関数 E_θ を次式

A novel optimization algorithm of probabilistic open-set recognition method with the Energy-based model

Hiroto KITAHARA‡, Ryota KASHIWAGI‡, Takayuki MUKAEDA†‡,and Keisuke SHIMA‡

Copyright ©2025 Information Processing Society of Japan.
All Rights Reserved.

で表す.

$$E_\theta = -\log \sum_{m=1}^{M_k} \exp f(x)[k][m] \tag{4}$$

これを基に結合分布 $p(x,k)$ を導出し，式 (3) を適用することで，前節で導出した重み係数が GMM が教師データの分布に適合するように学習可能となる.

2.3 NACGMN と CNN を統合した OSR 手法の学習

学習則に EBM を導入することで，従来の分類精度のみを評価基準とした手法と異なり，NACGMN は他のネットワークと結合可能となり，中間層出力の分布に適合するように混合正規分布および混合余事象分布のパラメータを最適化することが可能となる．以下に本学習則の流れを示す．学習はクラスごとに行う.

手順 1 学習クラスのデータを用い，式 (4) で表されるエネルギー関数である対数尤度を算出する.

手順 2 式 (3) の期待値を近似するため，現在得られている学習クラスの識別領域に対応する正規分布からサンプリングを実施し，そのサンプルデータに対する対数尤度を算出する.

手順 3 式 (3) を適用することで，手順 1 により算出された学習データの対数尤度を高く，手順 2 により算出されたサンプルデータの対数尤度を低くする方向に，NACGMN の重み係数を更新する.

手順 4 手順 1〜3 を実行した後，クロスエントロピー誤差を基に CNN と NACGMN の統合モデル全体を学習する.

従来の NACGMN の学習則における課題に対し，本研究で提案する学習則を適用することで，ガウス分布の平均および共分散を動的に更新することが可能となる．この更新により，教師データの分布に適合した識別領域の構築に加え，未知クラスのデータが GMM に包含されることを防ぎ，CGMM に包含されるような制御を実現する.

3 MNIST を利用した検証実験

3.1 方法

本実験では，手書き数字認識を目的として MNIST データセットを使用した．MNIST は 28 × 28 ピクセルのグレースケール画像で構成され，0〜9 の 10 クラスの手書き数字を含む．訓練データ 60000 枚のうち，学習クラスとして 6 クラスを設定し，その 10% に相当する 6000 枚を使用して少数データ環境での性能を評価した．全データは [0, 1] の範囲に正規化した．テストデータは学習クラス 6 クラスと未知クラス 4 クラスを含む 10000 枚を用い，元のクラス分布を維持した 7 クラス構成で評価した．さらに，学習クラスと未知クラスの組み合わせを学習対象動作の組み合わせを下記のように変更し，交差検証を実施した.

1. 学習クラス: 1，2，3，4，5，6 / 未知クラス: 7，8，9，0
2. 学習クラス: 4，5，6，7，8，9 / 未知クラス: 1，2，3，0

NACGMN モデルの入力として，MNIST データセットの画像データを事前学習済みの畳み込みニューラルネットワーク（CNN）に入力し，高次元特徴量から 16 次元のロジットを使用した．クロスエントロピー誤差を基に学習を行う CNN と NACGMN の統合モデルとエネルギーベースモデルを導入した統合モデルの性能を比較することで，エネルギーベースモデルの導入が識別性能および識別領域の適切性に与える影響を評価した．ただし，前者のモデルでは初期クラスタリングが実施される.

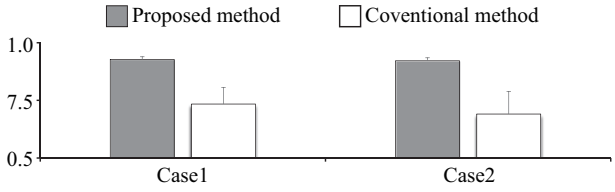

図 2: Comparison of f1-scores averaged across all classes: proposed method and conventional method

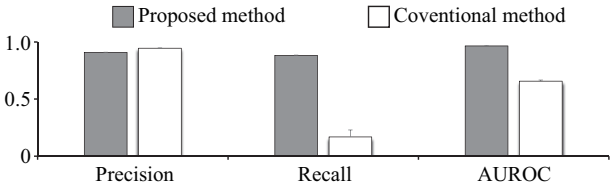

図 3: Evaluation of proposed and conventional methods, averaged across all cases, focusing on unknown class

3.2 結果と考察

図 2 は CNN と NACGMN を統合したモデルの学習時に得られた F1 スコアを示し，図 3 は未知クラスにおける適合度，再現率，および AUROC を示している．これらの図から，従
来法では学習クラスの識別領域が広がり，未知クラスのデータが識別領域内に含まれる状況が生じたため，全クラスの F1 スコア，未知クラスの再現率，および AUROC が低下する結果となったと考えられる．一方，提案法では学習クラスのデータ分布に適合した識別領域を構築できたことにより，これらの指標が向上し，未知クラスの分類性能の向上に寄与したと考えられる．さらに，提案法ではすべての性能指標が十分に高く，初期クラスタリングを必要としない学習則の有効性が示された.

4 おわりに

本稿では，学習サンプルに対する尤度も考慮可能な Energy-based model を応用した学習則を提案した．これにより，教師データの分布に適合した混合正規分布と混合余事象分布を同時に獲得することを可能とした．今後の課題として，統合モデル内の CNN を事前学習を要さずに，NACGMN と統合的に学習可能な学習則の開発が求められる.

参考文献

[1] W. Grathwohl, K.-C. Wang, J.-H. Jacobsen, D. Duvenaud, M. Norouzi, and K. Swersky: "Your classifier is secretly an energy-based model and you should treat it like one," Proceedings of ICLR 2020 Conference, 20 Dec 2019, Last Modified: 22 Oct 2023.

[2] 迎田隆幸, 島圭介.：混合余事象分布に基づく未学習クラス推定確率ニューラルネット. 計測自動制御学会論文集, Vol. 56, No. 12, pp. 532–540, 2020.

[3] T. Tsuji, N. Bu, O. Fukuda, and M. Kaneko, "A Recurrent Log-Linearized Gaussian Mixture Network," IEEE Transactions on Neural Networks, 14–2, pp. 304316, 2003

Copyright ©2025 Information Processing Society of Japan.
All Rights Reserved.