

機械学習を用いた測定と その不確かさ

工学計測標準研究部門
データサイエンス研究グループ
高井絢之介

1

目次

- 測定の不確かさ
- 機械学習
- ニューラルネットワーク
- 機械学習を用いた測定の不確かさ評価
- Gaussian Process Regression
- Monte Carlo Dropout
- モデル評価
- 今後の課題
- まとめ

2

はじめに

測定の不確かさ評価

測定のトレーサビリティや試験所間比較、精密測定などにおいて重要

機械学習

近年発達しているデータ分析法。測定への応用が期待されている

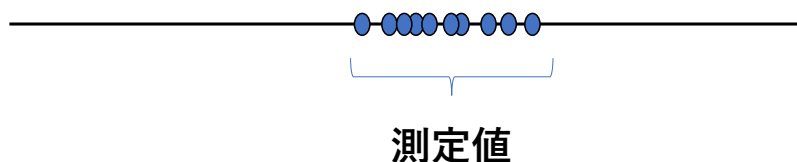
機械学習を用いた測定の不確かさ評価には
課題が存在する

測定の不確かさ

不確かさ

測定値に付随する、
合理的に測定対象量に結び付けられる値の
広がりの特徴づけるパラメータ

「JIS Z 8103 : 2019 計測用語」



測定のトレーサビリティや試験所間比較には
必要不可欠な概念

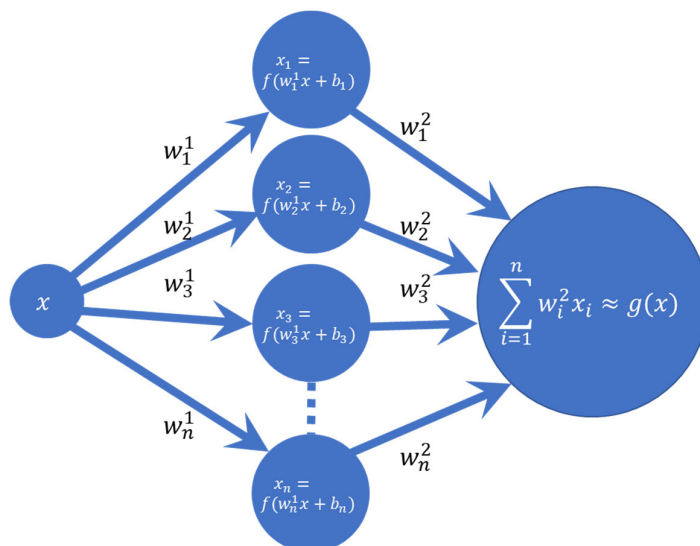
機械学習

機械学習

機械(コンピュータ)に学習能力を与える技術と
その理論的背景を探求する研究領域

「申 吉浩・高井 絢之介他、機械学習アルゴリズム入門 (工学社、2022)」

決められた規則に従って学習されたモデル(関数($g(x)$))を用いて
未知のデータに対する予測を行う



5

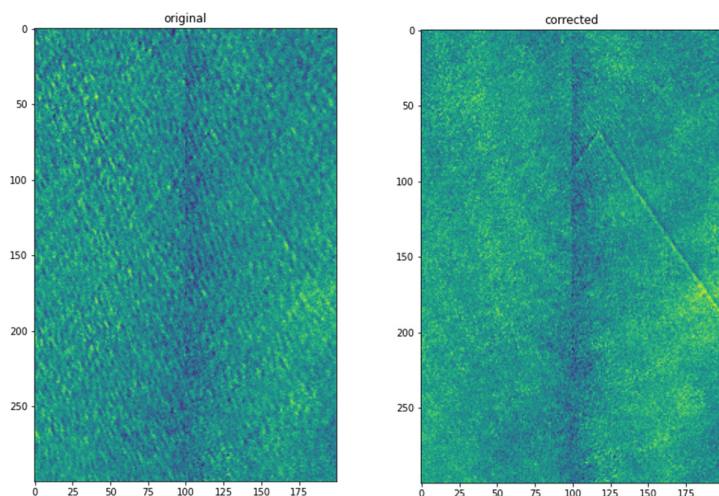
機械学習の応用例

- Appleの顔認識(<https://www.louisbouchard.ai/how-apple-photos-recognizes-people/>)
- DeepL(<https://www.deepl.com/ja/translator?referrer=https%3A%2F%2Fwww.google.com%2F>)
- ChatGPT(<https://openai.com/blog/chatgpt>)
- Alpha Go(<https://www.deepmind.com/research/highlighted-research/alphago>)
- Gato(<https://www.deepmind.com/publications/a-generalist-agent>)

6

機械学習

測定分野にも機械学習の技術が利用され始めている



機械学習による測定画像の修正

- ・ 深層学習を用いた確率的に時間変化する磁場の推定

Khanahmadi, et al.

"Time dependent atomic magnetometry with a recurrent neural network" (2021).

- ・ 深層学習を用いた量子測定によるパラメータ推定

Nolan, et al.

"A machine learning approach to Bayesian parameter estimation" (2021).

- ・ 深層学習を用いた画像によるVickers硬さの測定

Tanaka, et al.

"Automated Vickers hardness measurement using convolutional neural networks" (2020).

物理モデルがわからない、あるいは計算複雑性の高い測定モデルに対して、データから測定モデルを構築していくことを機械学習とここでは呼ぶ。

機械学習

機械学習のアルゴリズム

- ・ ニューラルネットワーク
- ・ サポートベクターマシン
- ・ 決定木

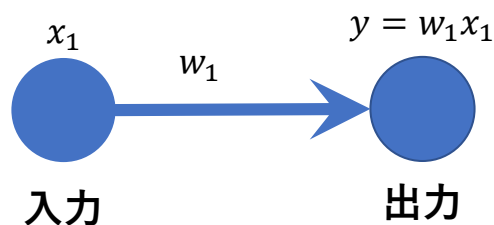
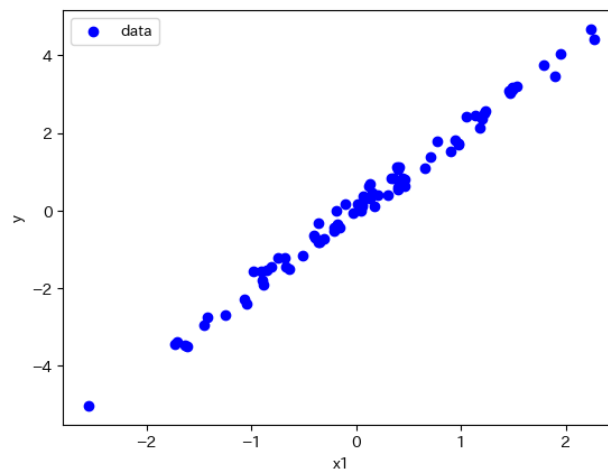
⋮

今回の主題は実測値から機械学習モデルで求めたい値を回帰するということが線形回帰から初めて深層学習まで

線形回帰

実測値(ex.質量)から
最終的に求めたい回帰値
(ex.ばねの伸び)を出力するような
モデルを作りたい

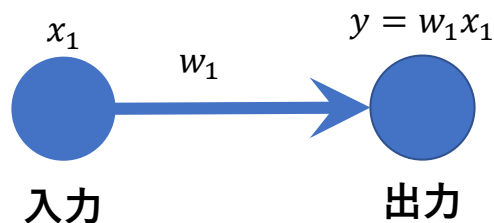
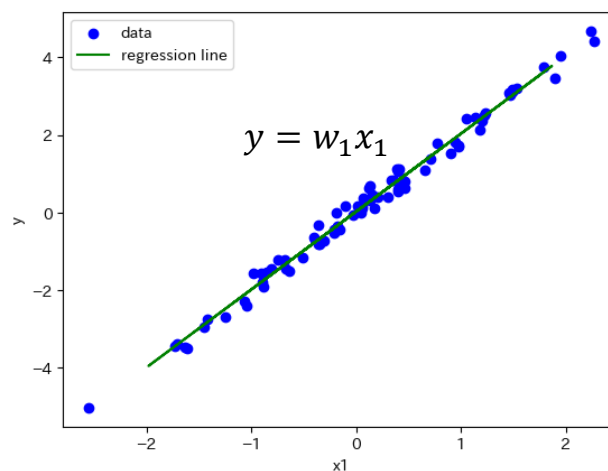
x_1	y
1.76	3.90
0.40	0.53
0.97	1.70
...	...



線形回帰

まずはシンプルに入出力関係が
線形な関数を用いて表されると
仮定する。

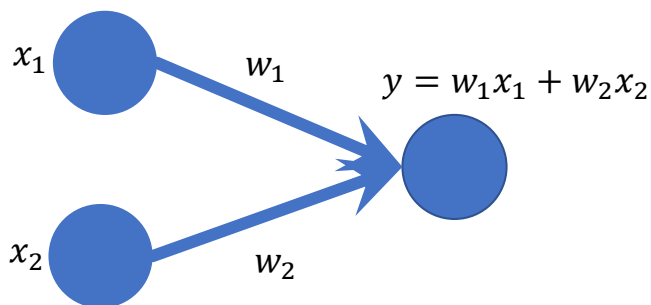
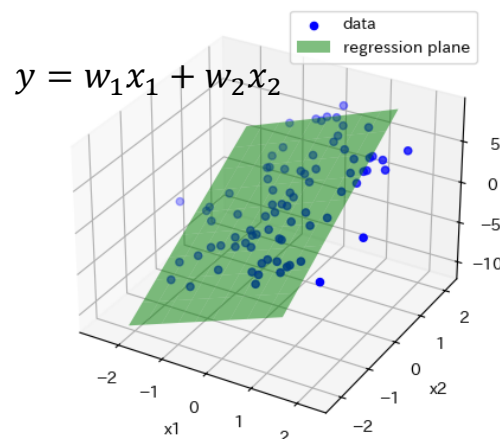
x_1	y
1.76	3.90
0.40	0.53
0.97	1.70
...	...



線形回帰

もちろん入力が多変数であっても
同様のことが可能

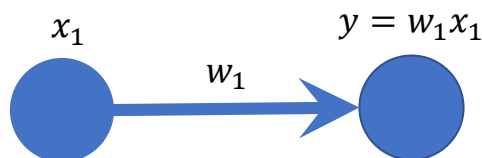
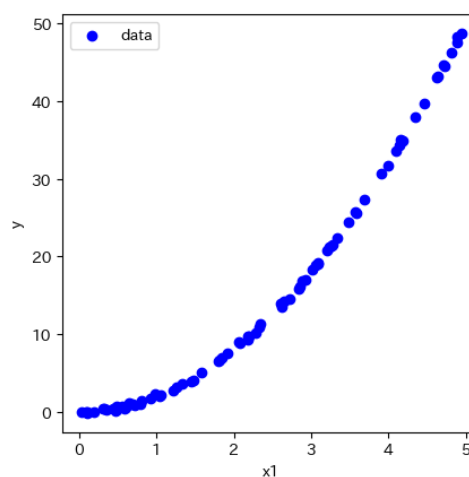
x_1	x_2	y
1.76	1.88	9.10
0.40	-1.34	-3.29
0.97	-1.27	-1.63
...



変数変換

もし入出力関係が非線形だったら？
例えば $y = 2x_1^2$ のような
データに対する回帰

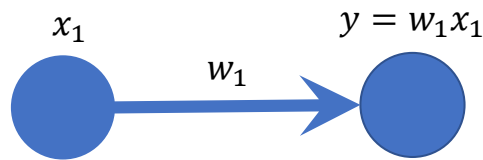
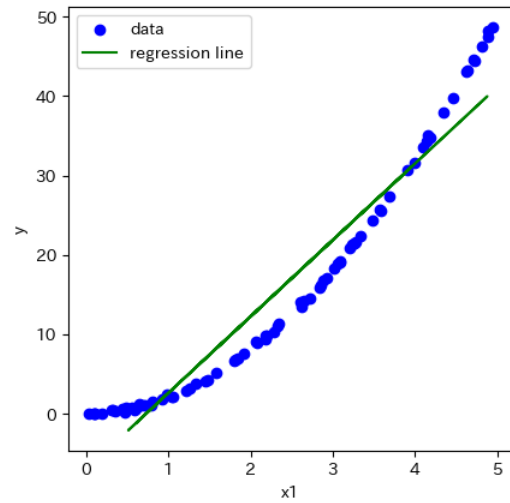
x_1	y
2.74	14.8
3.57	25.7
3.01	18.2
...	...



変数変換

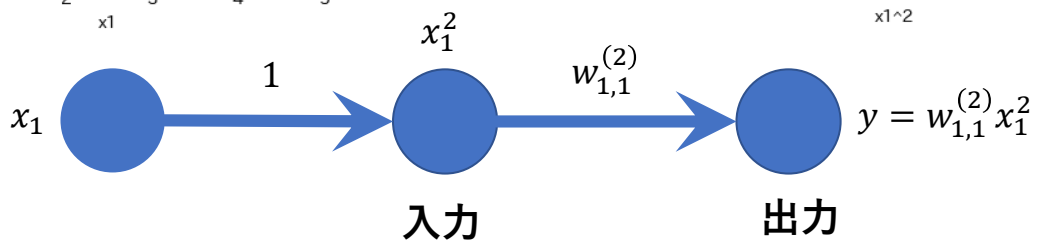
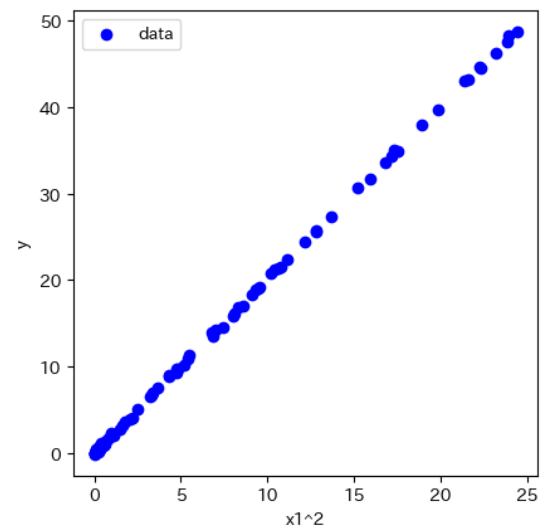
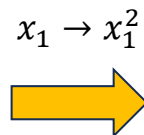
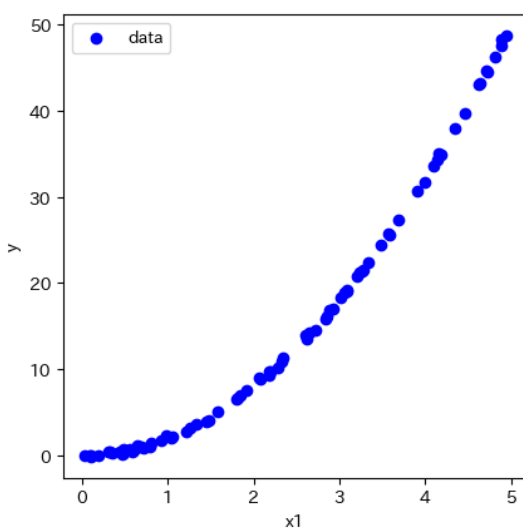
線形関係を仮定したようなモデルでは
うまく回帰できない

x_1	y
2.74	14.8
3.57	25.7
3.01	18.2
...	...



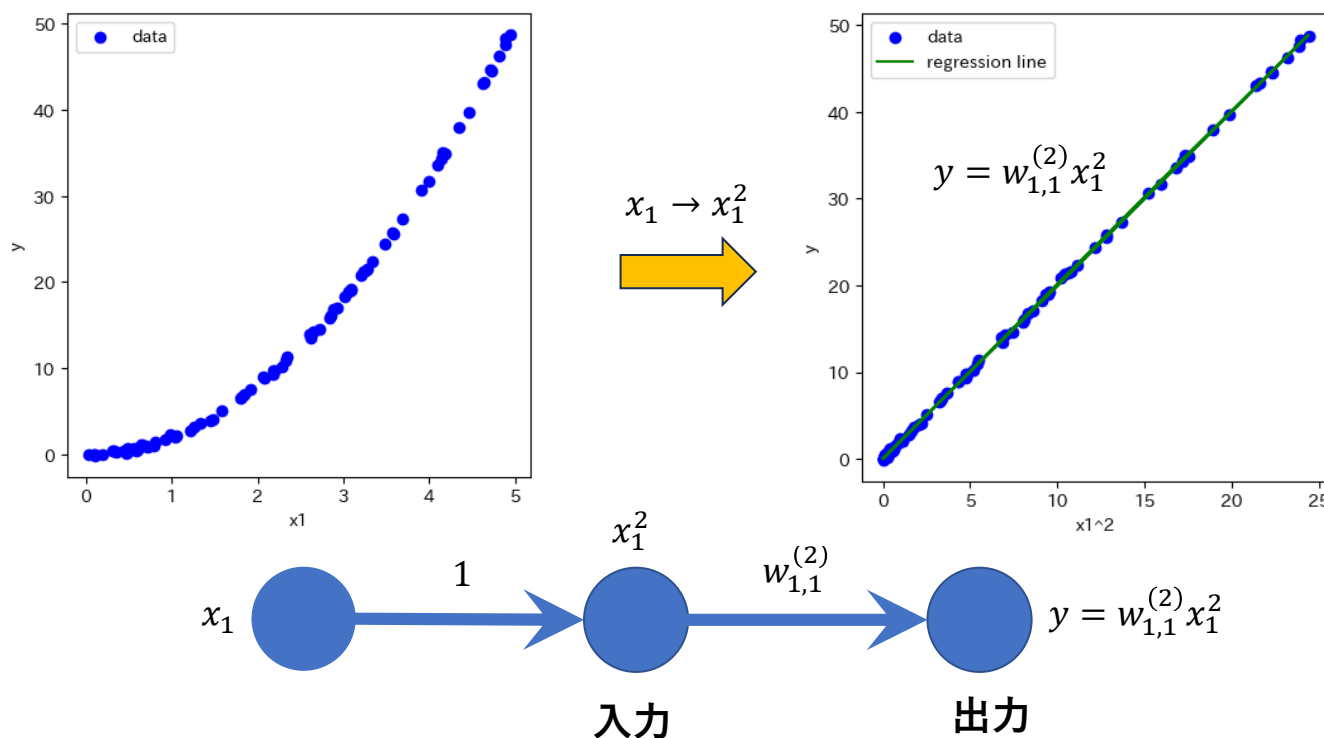
変数変換

入力変数を非線形変換することで
非線形なデータも回帰可能



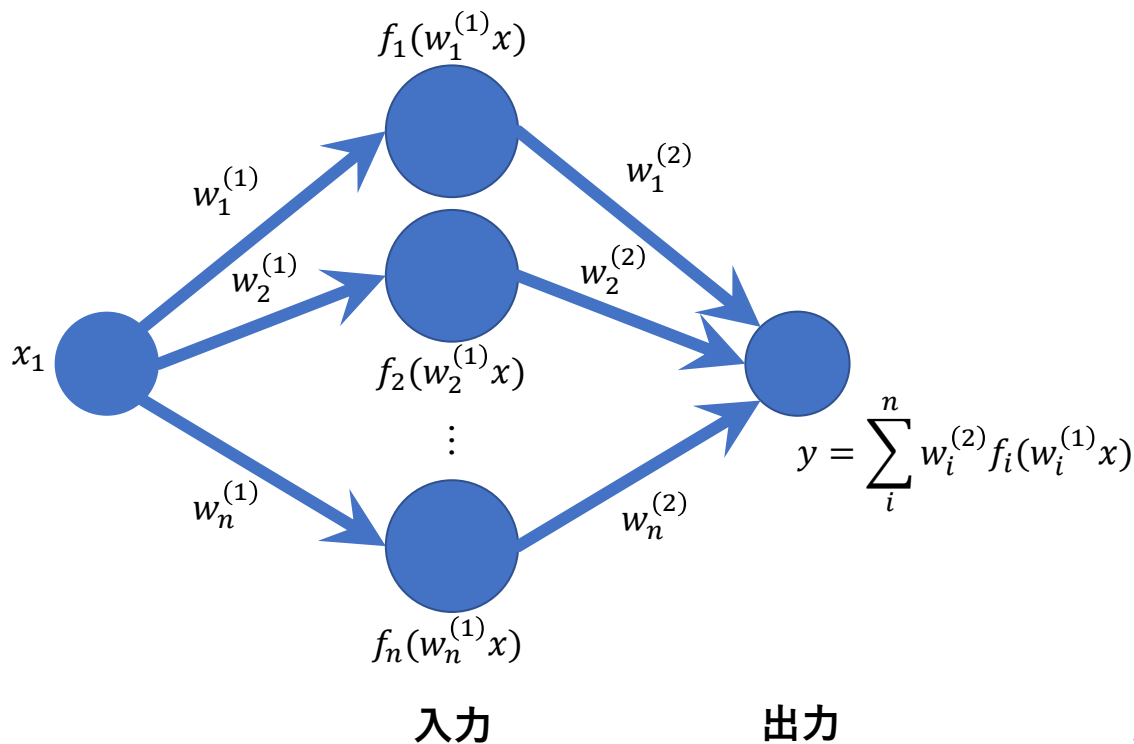
変数変換

入力変数を非線形変換することで
非線形なデータも回帰可能



複雑な関数への回帰

変換する変数を増やすことで
より複雑な関数を回帰



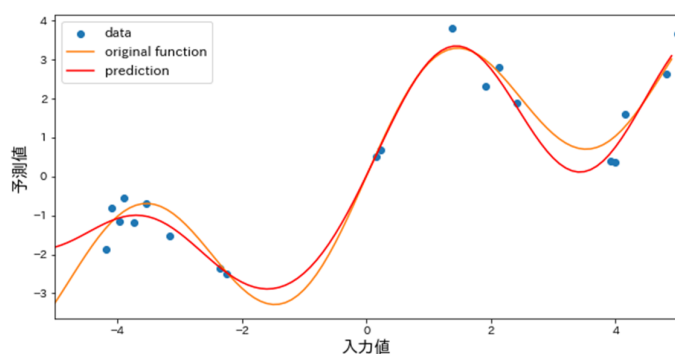
複雑な関数への回帰

$f_i(x)$ を適切に選べば
任意の連続関数に任意に近似可能($n \rightarrow \infty$ で収束)

$$y = \sum_i^n w_i^{(2)} f_i(w_i^{(1)} x)$$

問題点： n を増やせばそれだけ計算コストが高くなる。

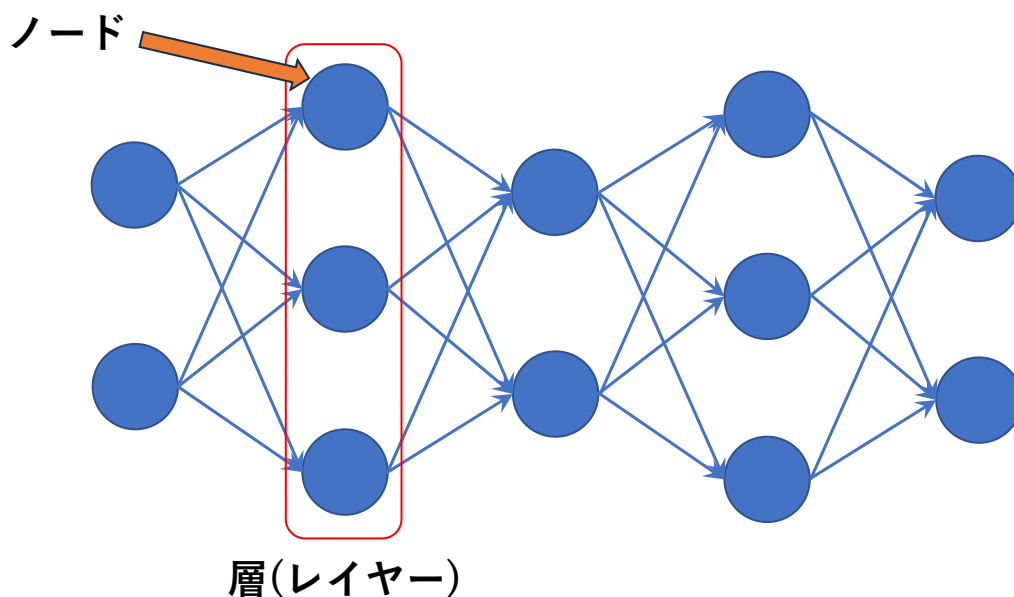
解決法1： n によらずに計算できる手法
(カーネル法：Gaussian Processなど)。



計算量はデータ数依存

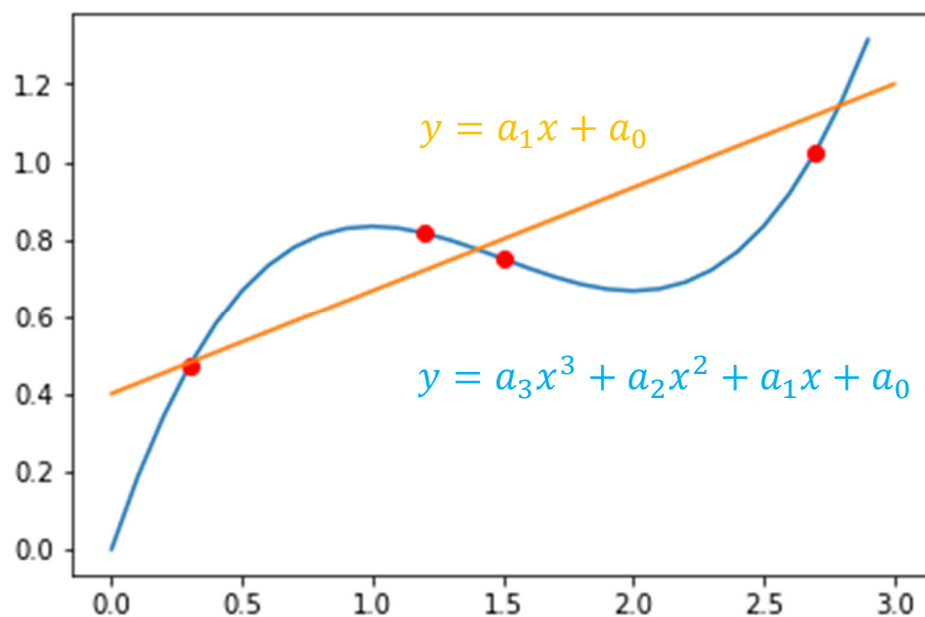
Deep Neural Network

解決法2：層を増やすことによって、
複雑な問題が比較的少ないノード数で解ける (Deep Neural Network)



複雑な関数を表現できるようになる一方で、
過学習しやすい

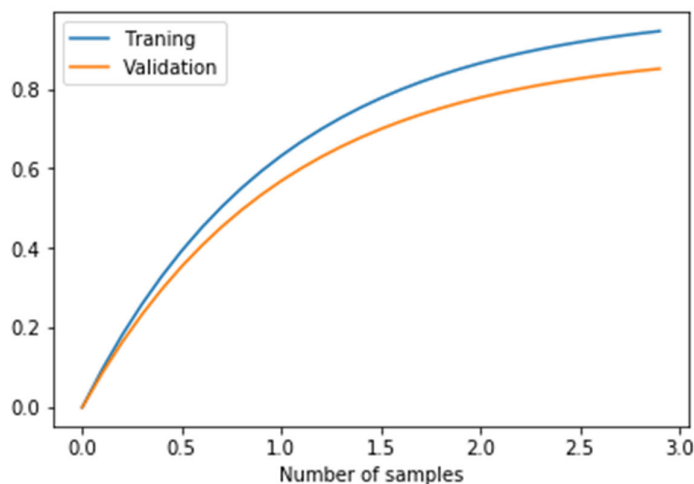
過学習



赤点 : 4個の測定データ

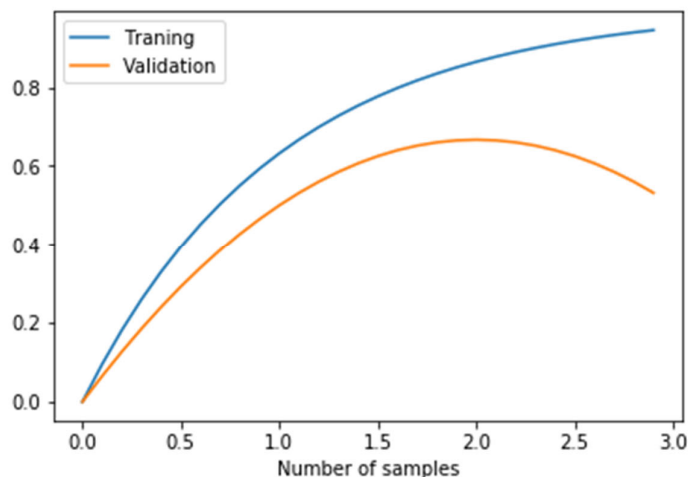
青曲線 : 三次曲線 = 4個のパラメータ = 誤差 0

橙直線 : 線形回帰 = 2個のパラメータ = 測定誤差を考慮



過学習がない時
訓練データの正答率と
テストデータの正答率は
ともに上がっている

過学習がある時
訓練データの正答率は
上がっているが
テストデータ正答率は
下がっている



正則化(過学習を防ぐ方法)

モデルが複雑になりすぎると
過学習が起きやすいので、
よりシンプルなモデルを学習させる手段

L_2 正則化

元のコスト関数

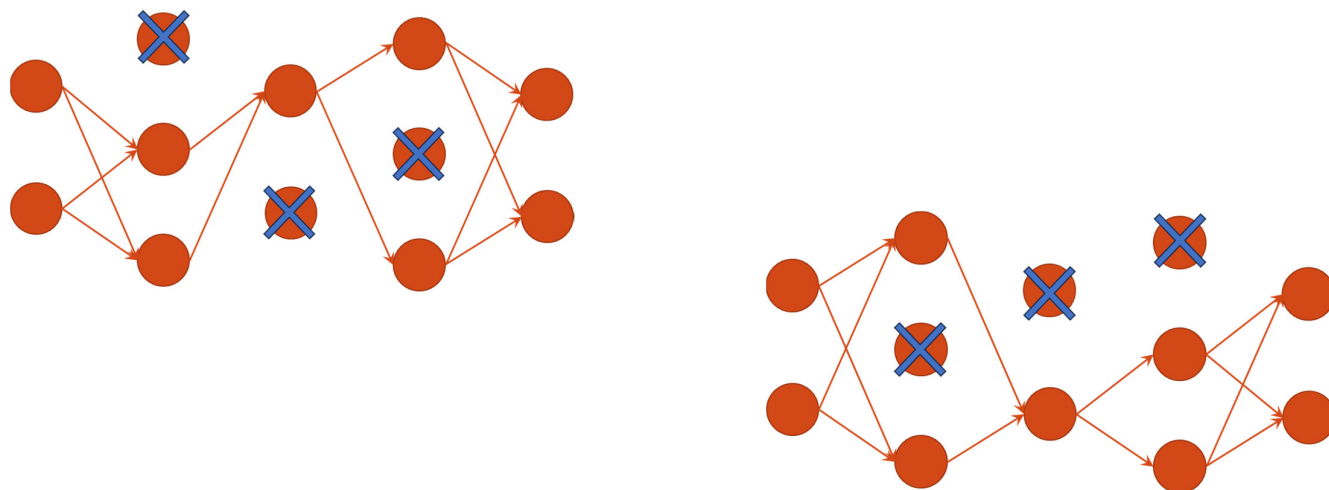
$$C(y|t) = C_0(y|t) + \lambda \sum_{i=1}^n w_i^2$$

正則化項

ニューラルネットにおいては
ドロップアウトなどの確率的正則化も用いられる

ドロップアウト

ニューラルネットの学習時に
ランダムにノードを落とす(使わないようにする)
ことでよりシンプルなモデルを作る手法



後に触れるMonte Carlo Dropout
にも用いられる

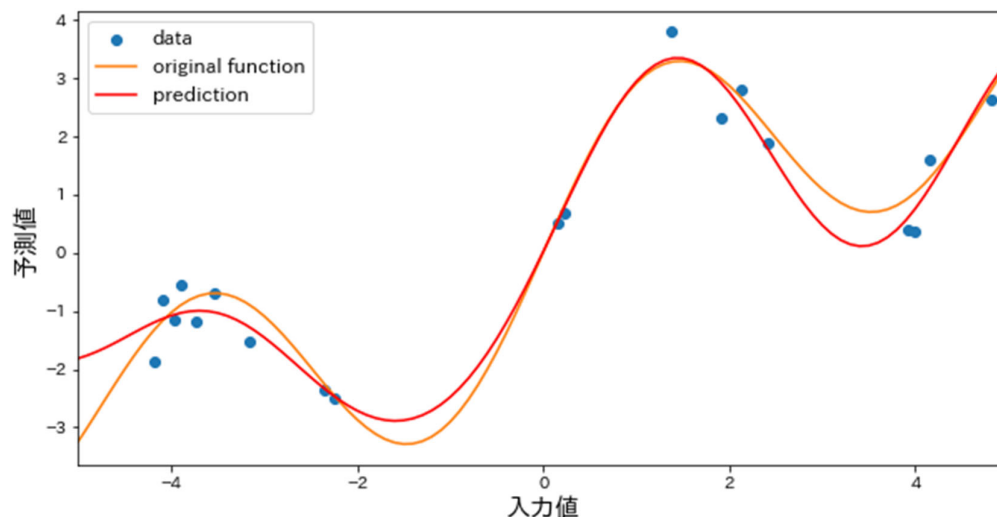
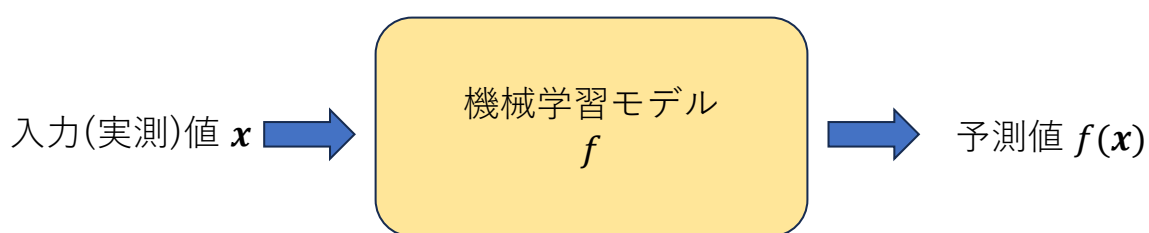
深層学習を利用したモデル

深層学習を利用したモデルは様々存在する

- ・ 画像入力に対応したConvolutional Neural Network
- ・ 時系列データに対応したRecurrent Neural Network
 - ・ 自然言語処理に強いTransformer など

複雑な測定モデルや、画像による測定などにおいて
機械学習を応用することが可能ではないか？

機械学習を用いた測定の不確かさ評価



機械学習を用いた測定の不確かさ評価

機械学習を用いて測定を行った場合、
その測定結果の不確かさ評価はどのように行えばよいだろうか



学習したモデル自身がどの程度測定対象量を表現できているかを
定量的に評価することが難しい

25

機械学習を用いた測定の不確かさ評価

機械学習を用いた測定における二つの不確かさ

Epistemic Uncertainty

モデルの不確かさ

Aleatoric Uncertainty

ランダム効果に代表される、問題固有の不確かさ

Thompson, et al.

"Uncertainty evaluation for machine learning." (2021).

epistemic : 認識的な (<https://eow.alc.co.jp/search?q=epistemic>)

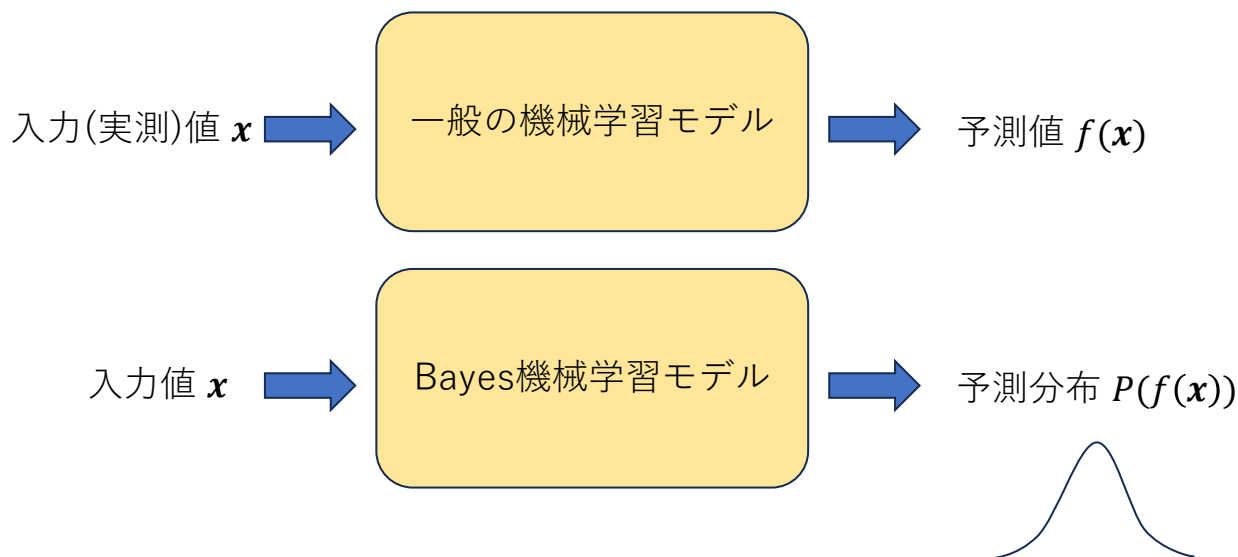
aleatoric : 偶然による (<https://eow.alc.co.jp/search?q=aleatory>)

26

機械学習を用いた測定の不確かさ評価

Bayes機械学習

一般の機械学習と比べてモデルパラメータの分布を推定することでモデルそのものが持つ不確かさ (epistemic uncertainty) を含めた予測を行うことができる



27

機械学習を用いた測定の不確かさ評価

Bayes機械学習

一般の機械学習と比べてモデルパラメータの分布を推定することでモデルそのものが持つ不確かさ (epistemic uncertainty) を含めた予測を行うことができる



計算の途中で積分計算を行う必要があり、
解析的にまたは計算量的に学習が難しい

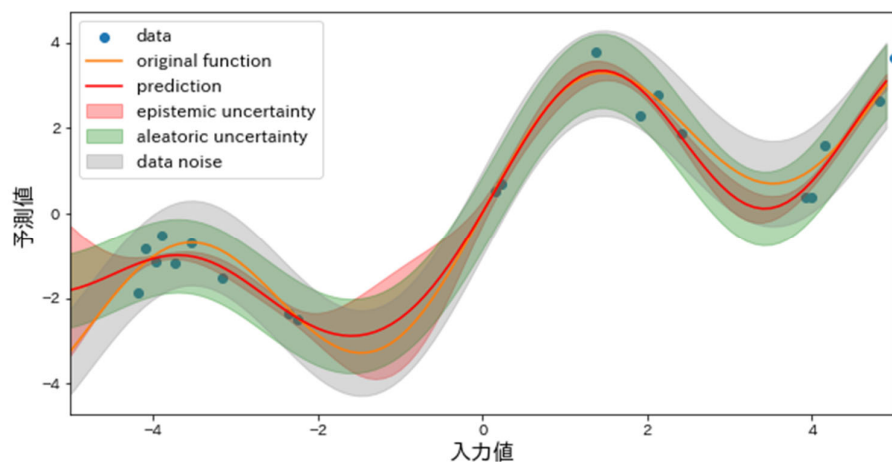
二つの代表的な手法

Gaussian Process Regression (GPR)
Monte Carlo Dropout (MCDO)

28

Gaussian Process Regression

パラメータの事前分布をGauss分布にすることで
行列計算を行うだけで解析的な学習が可能(カーネル法の一つ)



original function : 元の関数

data: 関数にノイズを足して
生成したデータ

data noise : dataのばらつき

prediction : modelの予測値

epistemic uncertainty :
modelの不確かさ

aleatoric uncertainty :
data noiseの予測値

非常に滑らかな非線形回帰と
真にBayes的な分布予測が可能

29

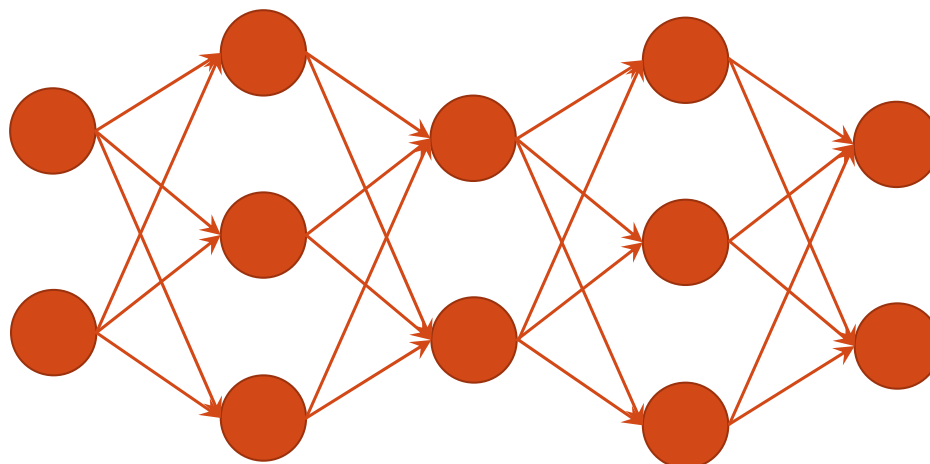
Monte Carlo Dropout

Neural Network(NN)

入力データの非線形変換を繰り返すことで、
非常に複雑な関数を回帰することができる手法

Bayesian Neural Network(BNN)

NNをBayes化することによって出力が確率分布となる

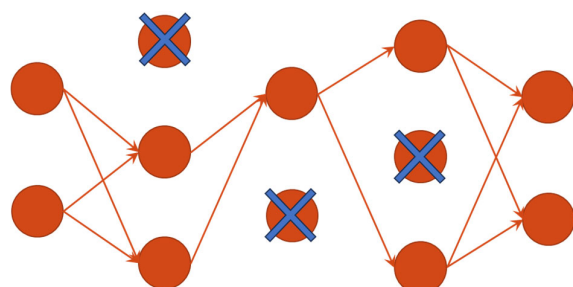


30

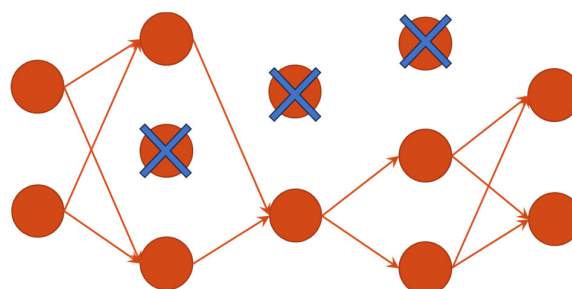
Monte Carlo Dropout

Monte Carlo Dropout(MCDO)

通常のNNにDropoutという正則化(overfittingを防ぐ)を組み合わせることでBNNの近似を行う



それぞれの出力のばらつきが epistemic uncertaintyを表している



複雑で大量なデータに対してもBayesの手法を使用することが可能

31

モデル評価

GPとMCDOを5つの指標に基づいて
評価を行う

Thompson, et al.

"Uncertainty evaluation for machine learning." (2021).

1. Random effect

Aleatoric uncertaintyを正しく評価しているか

2. Insufficient data

データの少ない領域でepistemic uncertaintyを大きく評価しているか

3. Propagation of uncertainty

入力量の不確かさを考慮しているか

32

モデル評価

モデルに関する以下の5つの指標に基づいて
モデルの評価を行う

4. Scalability

大規模データに対して現実的な計算量であるか

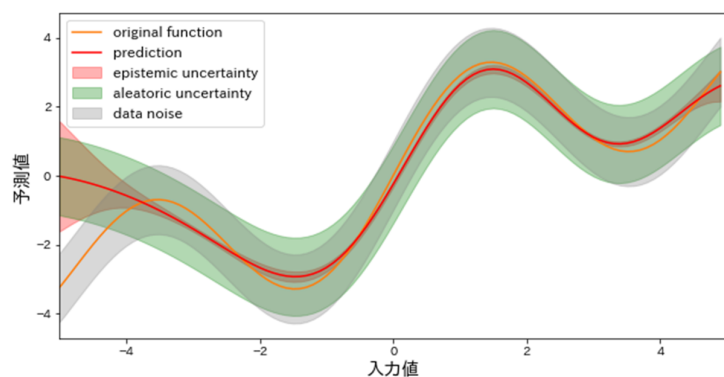
5. Principled approaches

原理原則を守った不確かさ評価であるか

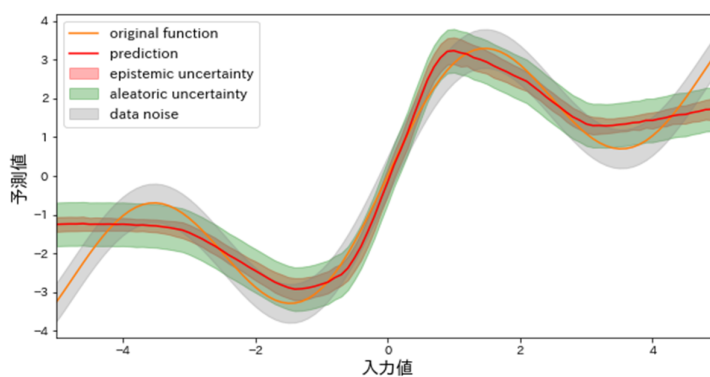
モデル評価

模擬的なデータで行ったテスト実験の結果を踏まえて、
これらの指標で二つのモデルを評価する

グラフは
Thompson, et al.
"Uncertainty evaluation for machine learning." (2021).
を基に計算したもの



GPR



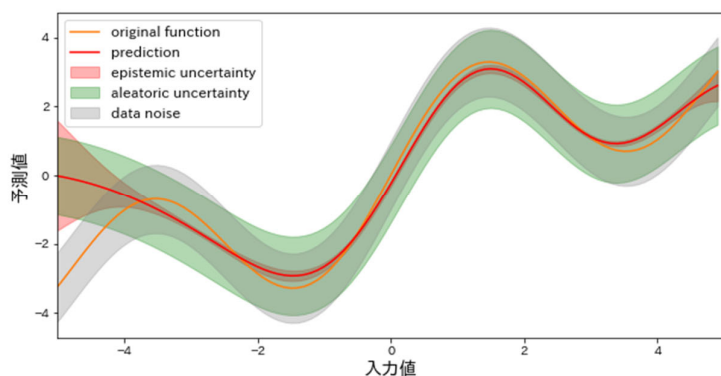
MCDO

モデル評価

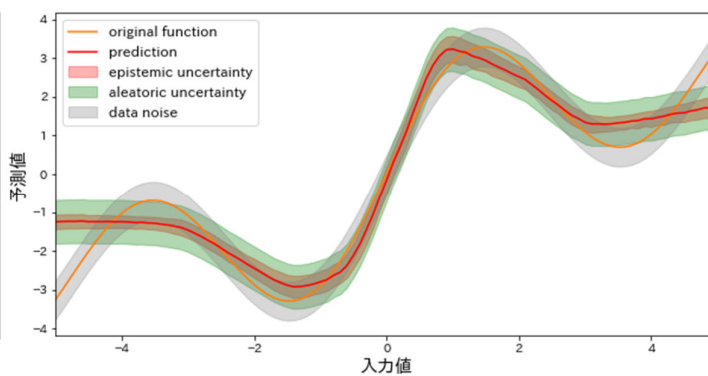
Thompson, et al.

"Uncertainty evaluation for machine learning." (2021).

指標	Gaussian Process Regression	Monte Carlo Dropout
Random effect	等分散であれば正確な推定	Aleatoric uncertaintyの評価の信頼性は低い
Insufficient data	データの少ない領域でepistemic uncertaintyを正しく評価	テスト実験ではepistemic uncertaintyを過小評価



GPR



MCDO

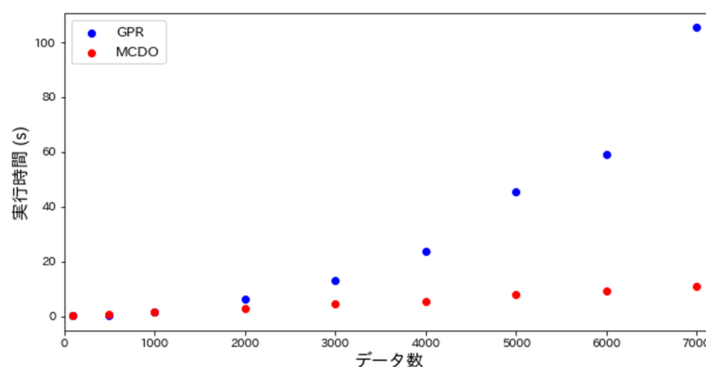
モデル評価

Thompson, et al.

"Uncertainty evaluation for machine learning." (2021).

指標	Gaussian Process Regression	Monte Carlo Dropout
Scalability	データ数Nに対して $O(N^3)$ なので大規模データには対応不可	通常のNNと同様にデータに対して線形な計算時間

データ数に対する計算実行時間の変化

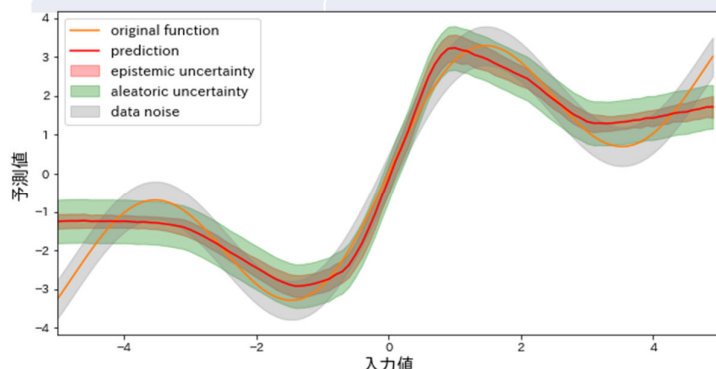


モデル評価

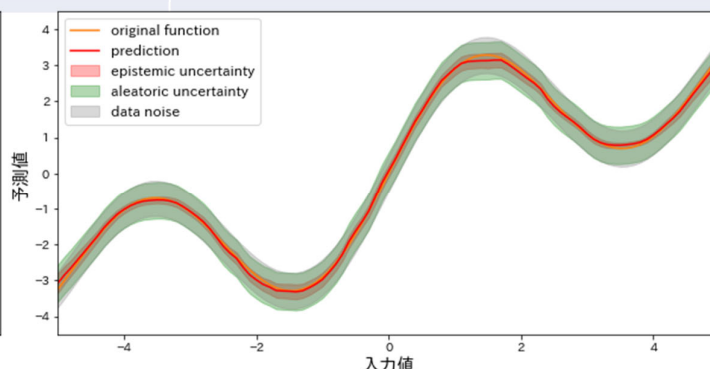
Thompson, et al.

"Uncertainty evaluation for machine learning." (2021).

指標	Gaussian Process Regression	Monte Carlo Dropout
Propagation of uncertainty	標準的なGPRでは入力量の不確かさは評価不可(評価手法自体は提案されている)	標準的なMCDOでは入力量の不確かさは評価不可(評価手法自体は提案されている)
Principled approaches	Bayesの原理的なアプローチを実行している	多くの近似や仮定の下で成り立っているため真に原理的ではない



$n = 80$



$n = 7000$

MCDOのデータ数に対する変化

37

今後の課題

- 原理的でscalabilityのある手法の開発
- 入力量の不確かさを考慮した手法の調査

指標	GPR	MCDO
Random effect	○	△
Insufficient data	○	△
Propagation of uncertainty	×	×
Scalability	×	○
Principled approaches	○	×

38

まとめ

- 様々な応用がみられる機械学習は測定にも応用され始めている
- 機械学習のモデル構造
- 機械学習を用いた測定に対する不確かさ評価には

「epistemic uncertaintyとaleatoric uncertaintyを分けるのが難しい」

という課題がある

- 課題解決のための二つの手法(GPR、MCDO)
- 五つの指針による二つの手法の評価
- 評価を踏まえた今後の課題