

一対比較データと目的変数分布の分位数を用いた 回帰モデルの学習

南部 優太^{1,a)} 幸島 匡宏^{1,b)} 山本 隆二^{1,c)}

概要: 画像や音声の品質評価や感情推定のために収集されたデータ、プライバシー保護のために加工されたアンケート回答データなどは、2つのサンプルの目的変数の順序関係 (画像の品質の高さや被験者の感情の大きさ、アンケート回答者の年収の順序など) を表す一対比較データの形式でしばしば与えられる。このデータから任意のサンプルの大小関係を予測するモデルを学習することが目標である場合、既存の様々なランキング学習の手法を利用することが可能である。しかしながら、データ中に目的変数の値そのものは記録されていないため、これらの手法を用いても目的変数を予測する回帰モデルを学習することはできなかった。そこで本研究は、目的変数の周辺分布の分位数に関する情報が利用可能であるという条件のもと (品質/感情の大きさの5段階評価で、画像全体の50%は評価値3以下、被験者の75%は評価値4以下など)、一対比較データから回帰モデルを学習する新しい手法を提案する。提案手法はランキング学習の損失関数とモデルの出力する目的変数の分布の分位数を用いて計算される正則化項の和を最小化することでモデルのパラメータを推定する。人工データ及び実データを用いた実験により提案手法の有用性を検証した。

Learning of Regression Models from Pairwise Data and Target Variable Quantiles

1. はじめに

品質評価や感情推定のために収集されたデータやプライバシー保護のために加工されたアンケート回答データなどは、一対比較データの形式でしばしば与えられる。一対比較データとは、2つのサンプルの順序関係のみを示すデータ形式であり、AがBより好ましいことは分かるがAとBの具体的な数値は不明なデータを指す。例えば、画像品質の評価において“画像Aと画像Bではどちらの品質が高いと感じるか”という問への回答から、画像Aが画像Bより好ましい (またはその逆) ことは分かるが、AとBそれぞれの評価点は得られない。また、アンケートなどにおいて調査項目が年収などのプライベートな内容を含む場合は、プライバシー保護のために加工の影響により年収の具体的な数値は記録されず各サンプルの順序関係のみが利用できる場合がある。

このような一対比較データからサンプルの順序関係を予

測することが目的の場合、既存の様々なランキング学習手法を利用することが可能である。ランキング学習とは、2つのサンプルが与えられたとき、それらの順序関係を判定させる識別モデルを学習させる手法である。具体的な数値が得られなくとも比較が成立すればモデルを学習させられるため、ランキング学習は品質評価や感情認識の分野で応用されることがある。

しかしながら、既存のランキング学習では順序関係を判定する識別モデルは学習できるが、目的変数そのものを予測可能な回帰モデルを学習することはできない。なぜなら、一対比較データに目的変数の値そのものは記録されていないからである。これは前述の画像の例で言えば、画像Aの方が画像Bより品質が高いことは予測できるが、その評価点は予測できないことを意味する。順序関係だけではなく評価点を推定できれば、通常の統計分析の方法により例えば大規模画像データの品質について分析・解釈することができるようになるため有用であると考えられる。

そこで本研究では、目的変数の周辺分布の分位数に関する情報が利用可能であるという条件のもと一対比較データから回帰モデルを学習する新しい手法を提案する。ここで

¹ 日本電信電話株式会社 NTT 人間情報研究所

^{a)} yuta.nambu.fs@hco.ntt.co.jp

^{b)} masahiro.kohjima.ev@hco.ntt.co.jp

^{c)} ryuji.yamamoto.sv@hco.ntt.co.jp

の“目的変数の周辺分布の分位数”とは、一対比較データがある評価のフレームワークで評価されていると仮定したときに得られるであろう評価値の周辺分布の分位数のことである。例えば、品質/感情の大きさを5段階で評価したとき、画像全体の50%は評価値3以下、被験者の75%は評価値4以下などの情報が該当する。提案手法は、ランキング学習の損失関数と目的変数の周辺分布の分位数を用いて計算される正則化項の和を最小化することでモデルのパラメタを推定する。目的変数の周辺分布の分位数は、一対比較データからは得られないためハイパーパラメタとして与える。分位数をハイパーパラメタとして利用できることと仮定した理由は、分位数は既存知識から類推可能であるからである。例えば、1から5点の評価点をつける5段階評価では1点と5点のサンプル数は少なく3点が多いことが類推可能であり、年収を推定したい場合にはサンプルが全国統計に沿うことが類推可能である。また、人工データセットおよび実データセットを用いて提案手法の有用性を検証する。具体的には、それぞれのデータセットに対して一対比較の正解率と目的変数値のRMSEを算出し評価する。

2. 関連研究

提案手法の損失関数には、既存のランキング学習の損失関数が利用できる。ランキング学習には、Support Vector Machine (SVM) などの識別的アプローチにもとづく手法 [1] と生成的アプローチにもとづく手法 [2][3] が存在する。生成的アプローチにもとづく手法の代表例として、RankNet [2] とガウス過程にもとづく手法 [3] が存在する。

RankNet [2] は、任意のニューラルネットワークに対して適用可能な損失関数を用いることで、ランキング学習を実現した。具体的には、2つのサンプル A, B に対して、A が B より好ましい確率をモデル出力 $f(A)$, $f(B)$ の差を入力とするシグモイド関数で表現できるようにモデル f を学習させた。同様にガウス過程にもとづく手法 [3] では、モデル出力の差を入力とするプロビットモデルで表現できるようにモデル f を学習させている。これらは任意のモデルに対して適用可能なため損失関数としての汎用性は高い。ただし、これらは順序関係から順序関係を予測するモデルでありその入力変数 (画像, 被験者属性など) から目的変数 (画像の品質評価値, 被験者の年収など) を推定することはできない。提案手法の損失関数のうち、一対比較データを用いて計算される項はこれらの手法の損失関数を参考に設計した。

提案手法の適用領域としては、ランキング学習と同様に感性に依る品質評価や感情の強度推定が挙げられる。一般に人間の感性・感情は、ground truth が観測できないため絶対評価は困難である。そのため、感性・感情のデータは、Likert scales や SAM(Self-Assessment Manikins) などの多段階評価によって得られることが多い。しかし、これ

らのデータは評価者の主観を多分に含むため、データの信頼性が低い。それに対して、大小や強弱の比較は点数付けや識別に比べ判断が容易かつ評価結果自体の信頼性は高いと考えられる [4]。そのため、品質評価/感情認識の分野では一対比較データによる評価がしばしば用いられる。実際、一対比較データとランキング学習を用いて画像品質を評価した研究 [5][6] や生体情報から感情の強度を推定した研究 [4][7] がある。提案手法は、これらの分野と同様に一対比較データを用いて学習するが、順序関係だけでなく目的変数を推定する手法として適用可能である。

3. 提案手法

提案手法は、一対比較データと目的変数分布の分位数を用いて回帰モデルを学習する手法である。まず一対比較データと目的変数分布などについて定義した後、提案手法について述べる。

3.1 問題設定

入出力を定める真の確率分布: 入力変数の値を表す d 次元実数空間 \mathbb{R}^d 上の確率変数 X と目標変数の値を表す \mathbb{R} 上の確率変数 Y の組 (X, Y) がある確率密度関数 $q(x, y)$ に従うとする。画像品質評価の場合、確率変数 X の実現値 x が画像を表すベクトル、確率変数 Y の実現値 y がその画像の品質評価値などに対応する。以下の式で定義する関数 $g: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$,

$$g(x) = \int yq(y|x)dy,$$

のことを X が与えられた時の Y の (真の) 回帰関数と呼ぶ。 $q(y|x)$ は確率変数 X の値が与えられた時の Y の条件付き確率を表す。また、 $q(x, y)$ を X に関して周辺化した確率密度関数を $u(x)$ 、 Y に関して周辺化した確率密度関数を $\phi(y)$ と書くこととする。すなわち、

$$u(x) = \int q(x, y)dy, \quad \phi(y) = \int q(x, y)dx,$$

である。以後、確率密度関数 $u(x)$ の定める確率分布を入力変数分布、確率密度関数 $\phi(y)$ の定める確率分布を目的変数分布と呼ぶこととする。目的変数分布の累積分布関数を記号 Φ で表す。これは以下のように定義される。

$$\Phi(y) = \int_{-\infty}^y \phi(y)dy. \quad (1)$$

目的変数分布の分位数: 一般に分位数とは、分布をある正の整数 m で m 等分する位置に存在する $m - 1$ 個の数のことを指す。本研究では、目的変数分布 ϕ の分位数 $Q_m = \{q_t\}_{t=1}^{m-1}$ が利用可能であるとする。これは、§ 1 で述べたように目的変数分布の分位数は既存知識から十分に類推可能であるという考えにもとづく。 q_t は第 t m 分位数と呼ばれる量であり、 $\Phi(y) \geq t/m$ となる最小の y の値である。以後累積分布関数 Φ が連続かつ単調増加であると仮定

し^{*1}, $\Phi(q_t) = t/m$ であるとする.

一対比較データ: 一対比較データは, 評価対象である入力変数値 (サンプル) の集合 $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{n_x}$ から, (任意の方法で取り出した)2つのサンプルに関する順序を評価することで作成されたとする. n_x はサンプルの総数を表し, \mathbf{x}_i は d 次元実数空間のベクトル $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ である. 一対比較データを記号 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_k^+, \mathbf{x}_k^-)\}_{k=1}^{n_k}$ で定義する. $(\mathbf{x}_k^+, \mathbf{x}_k^-)$ は順序評価されたサンプルの組 ($\mathbf{x}_k^+ \in \mathcal{X}$ かつ $\mathbf{x}_k^- \in \mathcal{X}$) であり, \mathbf{x}_k^- より \mathbf{x}_k^+ のほうが好ましいと評価されたことを示す. 本研究では, このデータの順序関係は以下のように定まると考える. 2つの入力変数 \mathbf{x}, \mathbf{x}' が与えられているとする. \mathbf{x} に対応する出力値 y は確率密度関数 $q(y|\mathbf{x})$, \mathbf{x}' に対応する出力値 y' は確率密度関数 $q(y'|\mathbf{x}')$ に従い (確率的に) 決定する. もし $y' > y$ であるならば, \mathbf{x}' が \mathbf{x} よりも好ましいと評価されることとする. 逆も同様である.

補足: ランキング学習においても上記のように一対比較データの生成過程を考えることでモデルを構築していると見なすことができる. なぜならば, 確率密度関数 $q(y|\mathbf{x})$ が平均 $g(\mathbf{x})$, 分散 σ^2 の正規分布ならば, y が y' より値が大きくなる確率は文献 [3] のように回帰関数の値の差 $g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x}')$ を入力とするプロビットモデルで表現される. $q(y|\mathbf{x})$ がガンベル分布で表現される場合, 確率は文献 [2] のようにロジスティックシグモイド関数で表現される.

回帰モデル: パラメタ θ を持つ回帰モデル $f(\mathbf{x})$ を用いて回帰関数 $g(\mathbf{x})$ を推定する. 回帰モデルには, 線形モデルやニューラルネットワークモデルなど任意のモデルが利用できる.

モデル出力分布: ある入力変数の集合 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{n_b}$ が与えられた時, 各入力に対応するモデルの出力の値 $\hat{y}_i = f(\mathbf{x}_i)$ の集合 $\{\hat{y}_i\}_{i=1}^{n_b}$ から作られる (経験) 累積分布関数を記号 Ψ で次のように定義する.

$$\Psi(y) = \frac{1}{n_b} \sum_{i=1}^{n_b} \mathbb{I}(\hat{y}_i \leq y). \quad (2)$$

ただし, $\mathbb{I}(\cdot)$ は入力が真ならば 1, そうでなければ 0 を返す指示関数である. 以後関数 $\Psi(y)$ をモデル出力の累積分布関数と呼ぶ.

3.2 損失関数の設計

一対比較データ \mathcal{D} と目的変数分布の分位点 \mathcal{Q}_m を用いて回帰モデル f を学習するための損失関数を設計する. 損失関数は, ランキング学習と同様に一対比較データを用いて計算される順序に関する項と, モデル出力の累積分布と目的変数分布の分位数を用いて計算される正則化項の2つの項の和からなる. モデル出力の累積分布と目的変数分布の累積分布が類似するほど値が小さくなるように正則化項を設計することで回帰関数を推定することを可能としている

*1 この仮定は ϕ が連続型の確率分布であれば通常成り立つ.

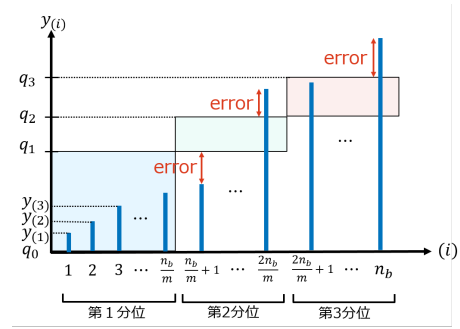


図 1: 提案正則化手法 Ω の例

Fig. 1 Proposed regularization method Ω example

る. 本手法の新規性はこの正則化項にあり, この項についてまず説明を行う.

分位点を利用した正則化項設計の難しさ: もっともナイーブな正則化項の定義として目的変数の累積分布関数 Φ (式 (1)) とモデル出力の累積分布関数 Ψ (式 (2)) の L_1 距離を利用することが考えられる. 目的変数の分布の分位数 \mathcal{Q}_m が利用可能であるため, この分位数における誤差

$$\bar{\Omega}(f; \mathcal{Q}_m) = \sum_{t=1}^{m-1} |\Phi(q_t) - \Psi(q_t)| = \sum_{t=1}^{m-1} \left| \frac{t}{m} - \Psi(q_t) \right|$$

は計算可能な量である. しかしながら, 関数 Ψ は式 (2) のように指示関数を用いた数え上げ処理によって得られており, 一般に誤差逆伝播ができないという課題がある.

提案する正則化項: 上記課題を鑑み, 誤差逆伝播可能な正則化項を構築した. モデル出力値の集合 $\{\hat{y}_i\}_{i=1}^{n_b}$ を昇順ソートしたものを $\mathbf{y} = \{y_{(i)}\}_{i=1}^{n_b}$ で表す. 昇順ソート済みのモデル出力 \mathbf{y} のうち第 $t+1$ 分位に属する $\frac{1}{m}$ 個の要素が, q_t から q_{t+1} の範囲に含まれるよう正則化項 Ω を定める. これにより, $\Psi(q_t) \rightarrow \frac{t}{m}$ を実現する. 正則化項を式 (3) に示す.

$$\Omega(\mathbf{y}, \mathcal{Q}_m) = \sum_{i=1}^{n_b} d(y_{(i)}, \mathcal{Q}_m). \quad (3)$$

$$d(y_{(i)}, \mathcal{Q}_m) = \begin{cases} q_t - y_{(i)} & (y_{(i)} < q_t) \\ 0 & (q_t \leq y_{(i)} \leq q_{t+1}) \\ y_{(i)} - q_{t+1} & (q_{t+1} < y_{(i)}) \end{cases}$$

ここで, q_0, q_m は目的変数の上限と下限を示す任意のハイパーパラメタであり t は $t = \lfloor \frac{mi}{n_b+1} \rfloor$ で算出される. この正則化項 Ω は, モデル出力 \mathbf{y} の第 tm 分位数と第 $(t+1)m$ 分位数に挟まれる要素 $y_{(i)}$ に対し, $y_{(i)}$ が区間 $[q_t, q_{t+1}]$ に属する場合には 0 を, $y_{(i)}$ が q_t より小さい場合には q_t との差, $y_{(i)}$ が q_{t+1} より大きい場合には q_{t+1} との差を出力する. 例えば, 図 1 のように横軸に \mathbf{y} の要素のインデックス (i) を縦軸にその値 $y_{(i)}$ をとるとき, $y_{(n_b/m + 1)}$ は第 2 分位つまり区間 $[q_1, q_2]$ に存在することが期待されるが, q_1 を下回っている. よって, その差 $q_1 - y_{(n_b/m + 1)}$ が損失に加算される. また $y_{(n_b)}$ のように, 区間 $[q_2, q_3]$ に存在することが期待されるケースにおいてそれを上回っている場合にも,

$y_{(\frac{n_b}{m}+1)} - q_3$ が損失に加算される。この正則化項は、モデル出力の累積分布と目的変数の累積分布が等しければ 0 になることがわかる。

3.3 損失関数

損失関数は、一対比較データ \mathcal{D} を用いて計算される各サンプルの順序関係に関する損失項 \mathcal{E} とモデルの出力を分位数で制限する正則化項 Ω から構成される。

$$\mathcal{L}(\theta; \mathcal{D}, \mathcal{Q}_m) = \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n_k} \mathcal{E}(f(x_i^+) - f(x_i^-)) \quad (4)$$

$$+ \frac{\lambda}{2n_k} \Omega(\{f(x_k^+)\}_{k=1}^{n_k} \cup \{f(x_k^-)\}_{k=1}^{n_k}, \mathcal{Q}_m).$$

ただし、 λ は正則化項の重みを決定するハイパーパラメタである。なお、ここでは一対比較データ \mathcal{D} 全てを利用する場合の損失関数を記述しているが、 $n_b \leq n_k$ 個のサンプルを抜き出したミニバッチデータに対して計算する場合も同様である。 $\mathcal{E}(z_k)$ には、一対比較データの順序関係を満たすとき低下する任意の損失関数を用いることが可能である。実験では文献 [3] と同様に以下のプロビットモデル (正規分布の累積分布関数) の負の対数尤度 $\mathcal{E}(z_k) = -\log \int_{-\infty}^{z_k} \mathcal{N}(\gamma; 0, 1) d\gamma$ を用いた。文献 [2] のようにシグモイド関数を利用することもできる。損失関数 (式 (4)) の最小化には、(確率的) 勾配法やニュートン法、Adam [8] など任意の最適化手法が利用できる。

4. 実験

本章では、提案手法を人工データセットと実データセットの双方に適用することでその有用性を評価する。実験として 5 分割交差検証を行い、一対比較データに対する正解率と目的変数値に対する RMSE を計測した。それぞれの実験の詳細と得られた結果について述べる。

4.1 データセット

提案手法の評価のためには、モデルが一対比較データに応じて正しく順序関係を学習しているだけでなく、正しく回帰関数を学習できているか評価する必要がある。そのため、用いるデータセットは一対比較データだけでなく目的変数値そのものを保持している必要がある。そこで、本実験では目的変数値を持つデータセットから一対比較データを生成し、一対比較データのみで学習した後に出力値と目的変数値の誤差を計測することで評価する。対象とするデータセットは人工データセットと実データセット “Appliances energy prediction Data Set” [9] の 2 つである。ここでは、各データセットの詳細について述べる。

人工データセット: 人間の感情強度を評価した先行研究 [4] を参考に、入力変数 $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i | \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^2\}_{i=1}^{n_x}$ と一対比較データ $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_k^+, \mathbf{x}_k^-)\}_{k=1}^{n_k}$ を生成した。入力変数が 2 次元であるのは、グラフとして容易に可視化・比較可能なため

ある。これにより、人工データセットの生成関数と学習によって得られる関数を 3 次元グラフとして目視で比較可能となる。データ生成関数は、1 つの隠れ層を持つニューラルネットワーク $h(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_2 \cdot \sigma(\mathbf{w}_1 \mathbf{x} + \mathbf{b}_1) + \mathbf{b}_2$ であり、その隠れ層は 2 つのシグモイドニューロンを持つ。各層の重みは先行研究 [4] を参考に $\mathbf{w}_1 = ((2.0, -1.5), (1.5, -2.0))$, $\mathbf{b}_1 = (0.5, -0.5)$, $\mathbf{w}_2 = (2.0, -2.0)$ とした。

入力となる \mathcal{X} は区間 $[-1, 1]$ 内から一様分布によって生成される 2000 (= n_x) 個のサンプルである。 \mathcal{X} を生成関数に入力することで目的変数値の集合 $\mathcal{Y} = \{y_i | y_i \in \mathbb{R}\}_{i=1}^{n_x}$ を得る。さらに文献 [4] と同じく、 \mathcal{Y} をランダムに 20 個のグループに分割し、各グループごとに異なるノイズを付与する。このノイズは区間 $[0.0, 0.3]$ から一様分布によりランダムにサンプルされる。最後に、 \mathcal{Y} から 2 サンプルを無作為に抽出・比較する操作により一対比較データの集合 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_k^+, \mathbf{x}_k^-)\}_{k=1}^{n_k}$ を生成する。

Appliances energy prediction Data Set [9]: このデータセットは、ある家庭の電力消費量および室内外の温度や湿度といった環境情報を 10 分おきに 4.5 ヶ月分記録した時系列データセットである。サンプル数は 19736 個であり、各サンプルは 28 次元の値を持つ。うち 1 次元は、目的変数である全家電の消費電力の和である。残りの 27 次元は、各部屋の温度と湿度など環境情報で構成されている。

このデータは時系列データのため、推定に用いるモデルは時系列モデルを用いることが妥当だと考えられる。そこで、ある時刻 $i (i \geq 2)$ のサンプルと時刻 $i - 1$ のサンプルをまとめて $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{2 \times 27}$ とし、そのときの目的変数値を $y_i \in \mathbb{R}$ とする。これにより、入力値の集合として $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i | \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{2 \times 27}\}_{i=2}^{n_x=19735}$ と目的変数値の集合 $\mathcal{Y} = \{y_i | y_i \in \mathbb{R}\}_{i=2}^{n_x=19735}$ を得る。最後に、 \mathcal{Y} から 2 サンプルを無作為に抽出・比較する操作により一対比較データの集合 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_k^+, \mathbf{x}_k^-)\}_{k=1}^{n_k}$ を生成する。

4.2 実験設定

正則化の効果およびハイパーパラメタの影響を調べるため、正則化項の重み $\lambda \cdot$ 分位数の数 $m \cdot$ バッチサイズ n_b をそれぞれ変化させ精度を評価した。評価指標として、テスト用のデータセット \mathcal{D}_{test} に対する一対比較データの正解率およびモデル出力と目的変数値との RMSE を採用した。その理由は、モデル出力が一対比較データが示す順序関係と大きく矛盾せずに、回帰モデルとして出力値が目的変数値と近いことを検証するためである。 \mathcal{D}_{test} に対する正解率 ACC と \mathcal{Y} に対する RMSE は、 $ACC = \frac{1}{|\mathcal{D}_{test}|} |\{(\mathbf{x}_k^+, \mathbf{x}_k^-) \in \mathcal{D}_{test} | f(\mathbf{x}_k^+) > f(\mathbf{x}_k^-)\}|$, $RMSE = \sqrt{\frac{1}{n_{test}} \sum_{i=1}^{n_{test}} (y_i - f(\mathbf{x}_i))^2}$ で算出する。ただし、 n_{test} はテストデータの総数を表す。また、Appliances energy prediction データセットにおいては時

系列データの目的変数値とモデル予測値の折れ線グラフを比較する。実験方法は5分割交差検証とした。これは、一対比較データ D を無作為に5分割し、うち4つを用いて学習させ残った1つに対して検証する操作を検証に用いるデータを変えながら5回行う方法である。

学習させるモデルは、人工データセットと Appliances energy prediction データセットと異なる。人工データセットの実験においては、学習させるモデルを生成関数と同じく1つの隠れ層を持つニューラルネットワークとした。この隠れ層も同様に2つのシグモイドニューロンから構成した。Appliances energy prediction データセットの実験においては、対象データが時系列データのため学習させるモデルは時系列解析モデルとして代表的な LSTM [10] とした。LSTM の隠れ層のユニット数は2に設定した。最適化手法として Adam [8] を用いた。

正則化項の重み λ は、 $\lambda = 0$ つまり正則化なしの場合をベースラインとして、 10^{-3} から 10^3 まで指数的に変化させた。このベースラインは、通常のランキング学習に相当する。分位の数 m は、最小単位である $m = 2$ から $m = 5$ まで変化させた。バッチサイズ n_b は、人工データセットにおいては $n_b = 2^6$ から $n_b = 2^{10}$ まで Appliances energy prediction データセットにおいては $n_b = 2^6$ から $n_b = 2^{12}$ まで指数的に変化させた。一対比較データ D の要素数はそれぞれ 2^{10} と 2^{12} のため、バッチサイズを変化範囲の最大まで大きくしたときバッチ数1となる。それぞれのパラメータを変化させるとき対象以外のパラメータは、学習率を0.001、重み λ を0、分位の数 m を3、バッチサイズ n_b を 2^8 とし、エポック数は人工データセットで64、Appliances energy prediction データセットで256とした。正則化に用いる分位数 Q_m は目的変数値の集合 \mathcal{Y} より算出し、ハイパーパラメータとして与えた。

4.3 実験結果

人工データセット: 正則化項の変化に伴う ACC および RMSE の変化を図 2(a) に示した。この図では、RMSE と ACC の関係を分かりやすくするため 1-ACC つまり不正解率をプロットしている。この結果から、正則化項の重みを適切な値に設定することでベースラインに比べ RMSE は減少することが分かった。また、重みを大きくすることで不正解率が上昇することが分かった。 $\lambda = 10^{-1}$ のとき RMSE と 1-ACC が交差することから $\lambda = 10^{-1}$ が順序関係の学習と目的変数の近似においてバランスの良い値であると考えられる。

次に、分位の数の変化に伴う ACC および RMSE の変化を図 2(b) に示した。この結果から、分位の数の増加に伴い RMSE は減少する傾向が見られた。しかし、この傾向は弱く分位の数の変化による大きな精度変化は認められなかった。また、バッチサイズの変化に伴う ACC および RMSE

の変化を図 2(c) に示した。この結果から、バッチサイズを増加させると RMSE は減少し、1-ACC は増加する傾向が見られた。また、 $n_b = 2^9$ のとき RMSE は最小となり、 $n_b = 2^9$ に比べ $n_b = 2^{10}$ では RMSE は増加した。

Appliances energy prediction データセット: 正則化項の変化に伴う ACC および RMSE の変化を図 3(a) に示した。Appliances energy prediction データセットにおいても、正則化項の重みを適切な値に設定することでベースラインに比べ RMSE は減少することが分かった。また、同様の傾向として重みを大きくすることで不正解率は上昇した。 $\lambda \geq 10^0$ のとき、RMSE の減少傾向は鈍化し標準偏差も小さな値を取った。 $\lambda = 10^{-1}$ のとき RMSE と 1-ACC が交差することから $\lambda = 10^{-1}$ が順序関係の学習と目的変数の近似においてバランスの良い値であると考えられる。

次に、分位の数の変化に伴う ACC および RMSE の変化を図 3(b) に示した。こちらでも、分位の数の増加に伴い RMSE は減少する傾向が見られた。また、バッチサイズの変化に伴う ACC および RMSE の変化を図 3(c) に示した。このデータセットにおいても同様にバッチサイズを増加させると RMSE は減少し、1-ACC は増加した。また、 $n_b = 2^{11}$ のとき RMSE は最小となり、 $n_b = 2^{11}$ に比べ $n_b = 2^{12}$ では RMSE は増加した。

考察: 図 2, 図 3 の結果から目的変数の周辺分布の分位数を用いてモデル出力に制限を加えることで、目的変数値により近い値を出力させることがわかった。これにより、分位数による正則化を用いた提案手法の有効性が確かめられた。ただし、正則化項の重みが大きくなるに従い、一対比較データに対する順序関係の正解率は低下するというトレードオフが存在することも分かった。本来 RMSE が十分に小さいときモデル出力は目的変数値と近似するため、一対比較データの正解率も高くなるはずである。しかし、提案した正則化項はあくまで出力の分布を制限しただけであり出力値を細かく調整できるわけではない。また、モデルの値域が制限されるため各サンプル同士が類似した値を取りやすくなる。そのため、正則化項の重みが大きくなると分布への制限が強くなると同時に、順序関係を学習する損失関数の出力が相対的に弱まったため、正解率が減少したものと考えられる。どちらを重視するかによって正則化項の重みをチューニングすることが重要となる。図 2(a), 図 3(a) に縦方向の波線で示したように RMSE と 1-ACC の値が交差する λ を選択することで比較的バランスの良い結果が得られると考えられる。

図 2(b), 図 3(b) の結果から、人工データセットに比べ Appliances energy prediction データセットの方が効果が大きいことが分かった。その理由として、分布の偏りの大きさに伴って偏った分位数を得られたことが要因だと考えられる。分布の偏りが小さいデータの場合、2分位数を与えるだけで良い結果を得られる可能性がある。しかし、分

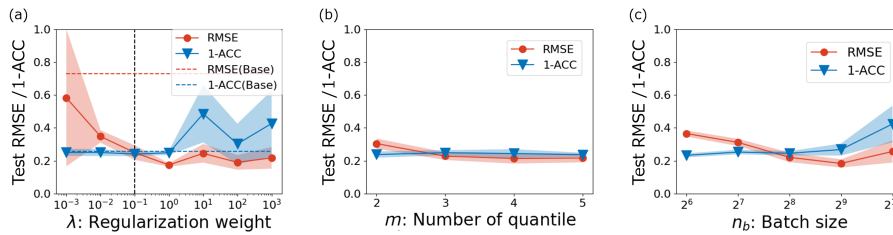


図 2: (a) 正則化項 λ (b) 分位の数 m (c) バッチサイズ n_b の変化に伴う人工データセット \mathcal{D}_{test} に対する RMSE と 1-ACC. 実線はそれぞれ 5 分割交差検証における結果の平均値である. 塗潰し範囲は標準偏差の範囲である. (a) ではベースラインとして $\lambda = 0$ の評価指標を横破線で示した. RMSE と ACC が交差する箇所より大きくかつ最小の λ を縦波線で示した.

Fig. 2 RMSE and 1-ACC performance on the synthetic data set varying (a) regularization weight λ (b) number of quantile m (c) batch size n_b .

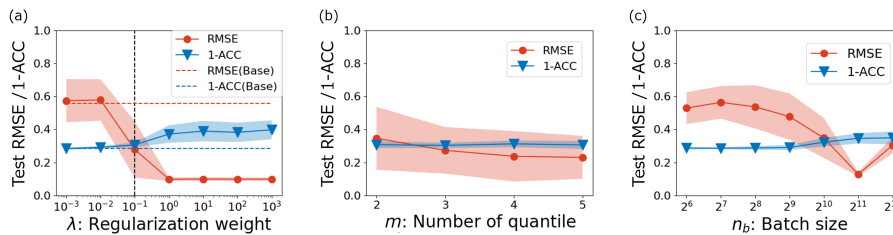


図 3: (a) 正則化項 λ (b) 分位の数 m (c) バッチサイズ n_b の変化に伴う Energy データセット \mathcal{D}_{test} への RMSE と 1-ACC.

Fig. 3 RMSE and 1-ACC performance on the appliances energy prediction data set \mathcal{D}_{test} varying (a) lambda λ (b) number of quantile m (c) batch size n_b .

布の偏りが大きいデータの場合、2 分位数だけでは分布の偏りを把握ことができず十分な結果を得られない可能性が高い。このことから、分布に偏りがあるデータほど分位数を増やすことによる効果が大きいことが示唆された。

図 2(c), 図 3(c) の結果から、バッチサイズは大きい方が正則化の効果は大きくなるが、バッチサイズがサンプル数と一致するとき精度は低下することが分かった。これは、バッチサイズが小さいとサンプリングに偏りが生じてしまい、計算した正則化項が本来意図したものとならない可能性が高いためだと考えられる。ただし、バッチサイズとサンプル数が一致するときは双方のデータセットにおいて精度が低下した。この要因として、バッチ数が 1 になってしまったことで局所解に陥った可能性が考えられる。

5. まとめ

本論文では、分位数を用いることで一対比較データから目的変数を推定可能な回帰モデルを学習する手法を提案した。この提案手法は、ランキング学習モデルの損失関数に目的変数の周辺分布の分位数とモデル出力分布の分位数が一致するとき小さくなる誤差を出力する正則化項を加えることで実現した。提案手法を人工データセットおよび時系列データセットに適用した結果、一対比較データが示す順序関係を大きく損なうことなく、目的変数値との誤差を低減することが可能であった。今後は、目的変数値が得られず一対比較データのみが与えられるデータセットに対して適用することによる有用性の検証を検討している。

参考文献

- [1] Joachims, T.: Optimizing search engines using click-through data, *KDD*, pp. 133–142 (2002).
- [2] Burges, C., Shaked, T., Renshaw, E., Lazier, A., Deeds, M., Hamilton, N. and Hullender, G.: Learning to rank using gradient descent, *ICML*, pp. 89–96 (2005).
- [3] Chu, W. and Ghahramani, Z.: Preference learning with Gaussian processes, *ICML*, pp. 137–144 (2005).
- [4] Martinez, H. P., Yannakakis, G. N. and Hallam, J.: Don't Classify Ratings of Affect; Rank Them!, *IEEE Transactions on Affective Computing*, Vol. 5, No. 3, pp. 314–326 (2014).
- [5] Abe, T., Okatani, T. and Deguchi, K.: Recognizing surface qualities from natural images based on learning to rank, *ICPR*, pp. 3712–3715 (2012).
- [6] Gao, F., Tao, D., Gao, X. and Li, X.: Learning to rank for blind image quality assessment, *IEEE transactions on neural networks and learning systems*, Vol. 26, No. 10, pp. 2275–2290 (2015).
- [7] Balouchian, P., Safaei, M., Cao, X. and Foroosh, H.: An Unsupervised Subspace Ranking Method for Continuous Emotions in Face Images, *BMVC* (2019).
- [8] Kingma, D. P. and Ba, J.: Adam: A Method for Stochastic Optimization, *3rd International Conference on Learning Representations, ICLR 2015, San Diego, CA, USA, May 7-9, 2015, Conference Track Proceedings* (2015).
- [9] Candanedo, L. M., Feldheim, V. and Deramaix, D.: Data driven prediction models of energy use of appliances in a low-energy house, *Energy and Buildings*, Vol. 140, pp. 81–97 (2017).
- [10] Hochreiter, S. and Schmidhuber, J.: Long Short-Term Memory, *Neural Computation*, Vol. 9, No. 8, pp. 1735–1780 (1997).