研究成果報告書 科学研究費助成事業

今和 4 年 5 月 2 6 日現在

機関番号: 12601 研究種目: 若手研究 研究期間: 2018~2021

課題番号: 18K18121

研究課題名(和文)パラメータ再定義法による自然勾配法実現を通した複雑な深層ネットワーク学習の効率化

研究課題名(英文)Ehanced training of complex deep neural networks via netural gradient learning realized with reparametrization techniques

研究代表者

木脇 太一(Kiwaki, Taichi)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・特任助教

研究者番号:70786011

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3.200,000円

研究成果の概要(和文):本研究では緑内障と呼ばれる眼病データの分析を応用分野とし、ニューラルネットワークと呼ばれる機械学習手法の改善を試みた。特にこの応用領域では(1)利用可能なデータが少数に限られる問題へ対処する必要があり、また(2)医学的な立場から結果を説明することが非常に重要である。これを受けて本研究では、学習器が小規模データからも適切な知識を獲得できる手法を開発し、また構築した手法の動作を説明 して医学的な見知と照らし合わせ、更には医学分野で認知され得る形で手法の有効性を検証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義 緑内障は失明の可能性もある進行性の眼病であるが、治療によって進行を遅らせることが出来るため、その進行 予測ならびに症状診断は非常に重要である。しかし症状診断と進行予測の両方に不可欠とされて来た眼の視野感 度試験は、計測コストが高くまた計測毎のばらつきから来る信頼性にも問題がある。本研究で開発した手法は機 械学習手法を利用してこの問題に対処するものであり、社会的な意義は非常に高い。

研究成果の概要(英文): In this research project, we improved training of neural networks, which are commonly used machine learning models, for ophthalmology dataset on glaucoma, which is one of the most serious eye disease. In this application field, we need to (1) tackle a problem of limited availability of data, and (2) explain the result in a medical perspective. Upon these points, this project developed a method to train a model so that it can attain meaningful knowledge from small sized datasets, explained the behavior of a trained model from a medical point of view, and verified the effectiveness of the developed methods in a form which can be accepted by medical communities.

研究分野: 機械学習

キーワード:機械学習 眼科学 ニューラルネットワーク

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等に ついては、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1.研究開始当初の背景

画像認識や自然言語処理での応用を中心として深層のニューラルネットワーク(Neural Network, NN)が大きな注目を集めている[1]。一方でこれら深層 NN(Deep NN, DNN)は、学習の不安性に起因する困難も古くから知られていた。この問題へ対処する方法としては自然勾配法[2,3]や、近年提案されたバッチ正規化[4]をはじめとするパラメータ再定義に基づく方法がある。自然勾配法は大規模 DNN において厳密な実装は困難であるものの、理論的な背景はしっかりしている。一方でパラメータ再定義に基づく方法は大規模 DNN においても実装は簡単であり効果的であるが、申請当時はヒューリスティックとしての側面が強く、動作原理には不明点が多かった。パラメータ再定義法の動作原理を明らかにすることは学術的に興味深い問題であるだけでなく、実験的にパラメータ再定義法による学習安定化が難しいとされた再帰ニューラルネットワークなど、多層パーセプトロン以外の NN アーキテクチャへの応用を考える上でも重要であった。

2.研究の目的

申請者は研究開始以前に進めていたパラメータ再定義法と自然勾配法の関係に着目した研究を進めていた。これを背景として本研究では

- (1) パラメータ再定義法の動作原理を近似的な自然勾配法として理論的に理解すること、
- (2) (1)で得られた知見に基づき、パラメータ再定義法を種々の NN アーキテクチャへ適用すること、
- (3) NN の学習効率化の実験的実証と実データ分析を対象とした応用研究の実施を目標としていた。

3.研究の方法

申請時の計画では2で述べた目的を達成するためにまずは理論研究を実施し、その後で理論面での成果を踏まえて応用研究も実施する予定であった。しかしながら研究開始後に、理論面で研究を実施する上での見通しの悪さが判明し、こちらでの研究計画遂行は遅れることとなった。加えて研究期間初年度に新たに発表された他研究者の研究[5]により、当研究計画のメインテーマであったパラメータ再定義法による DNN の学習安定化が理論的に明らかとされてしまい、研究計画の大きな見直しを余儀なくされた。

以上の事情を受け、ドメインとしては申請者が以前より取り組んでいた緑内障に関わる眼科データ分析を中心としつつ、研究目的(3)の DNN の学習改善による実データ分析への応用研究を主に取り組む形へ計画を変更した。ここで取った具体的な研究方法としては、

- (1) 機械学習における新たな正則化手法の提案、
- (2) DNN の複雑性による過学習の問題を抑えるアーキテクチャの提案、
- (3) 説明可能性の向上、
- (4) 新たなマルチタスク学習の方法の提案、
- (5) 外部データを利用した提案手法の医学的な検証

である。それぞれに関しては次節にて代表的な研究成果を挙げつつ説明する。

4.研究成果

4.1 緑内障と先行研究に関して

緑内障は失明の可能性もある進行性の眼病であるが、治療によって進行を遅らせることが出来るため、その進行予測ならびに症状診断は非常に重要である。しかし症状診断と進行予測の両方に不可欠とされて来た眼の視野感度試験は、計測コストが高くまた計測毎のばらつきから来る信頼性にも問題がある。この問題に関してこれまで、少ない視野感度計測値から将来の緑内障進行を高精度に予測する研究[6]や、計測コストの低いOCT(Optical Coherence Tomography)という計測から DNN を利用して視野感度を推定することで症状診断に役立てる研究[7]が知られていた。

4.2 パターン正則化学習の提案

パターン正則化学習は Sugiura et al., 2018 で申請者らが提案した、OCT からの視野感度推定問題を対象とした学習器の正則化手法である(研究方法(1))。これは高次元の推定対象である視野感度が、高次元空間中のある限られたパターン(より具体的には低次元アフィン部分空間など)で良く近似できることに着目して、DNN の学習を正則化し過学習を抑制するものである。具体的にはまず、OCT とは対となっていない豊富に利用可能な視野感度データに対して非負値行列分解や、主成分分析、auto-encoder などの教師無し学習手法を利用して、視野感度が示す特徴的なパターンを抽出する。そして DNN の学習時には、前段で抽出されたパターンと DNN の出力の乖離を小さくする様な正則化項を付け加えることで、DNN の出力が典型的な視野感度パターンから大きく外れることを防ぎ、結果として推定精度の向上を実現できた。

また Sugiura et al., 2018 では非負値行列分解によって抽出された相関の大きな視野点集合に着目し、関係の多きい視野点の推定において DNN のパラメータが共有される様にアーキテクチャを構築することで過学習が抑制され得ることも示した(研究方法(2))。

更に Sugiura et al., 2018 では DNN の説明可能性を考える上でも、データの示すパターンを活用することが有意義であることも示している。具体的には、学習済みの DNN の勾配を視野感度および OCT のパターンへ射影することで、DNN の挙動を人間にとって解釈しやすい形で表示することができた。またこの方法を用いて表示した DNN の挙動は医学的な見地とも矛盾が無いことも確認した(研究方法(3))。

なお Sugiura et al., 2018 では手法の有効性は内部検証に留まっていた。内部検証は情報分野では主流であるが、医学分野では広く受け入れられていない。これを受けて Hashimoto et al., 2020 で申請者らは外部データを利用して、パターン正則化学習の有効性を医学分野においても受け入れられる形で検証した(研究方法(5))。

4.3 テンソル回帰モデルの提案

テンソル回帰モデルは Xu et al., 2020で申請者らが提案した手法であり、これも 4.2 と同様に OCT からの視野感度推定問題を対象としたものである。具体的には DNN の学習において過学習の要因となりやすいネットワークの最終層に着目し、3次元のパラメータテンソルを複数の 1次元テンソルの線形和として記述することでパラメータ数、ひいては DNN の複雑性を削減し、過学習を防ぐ方法である(研究方法(2))。

4.4 DNN と線形回帰の組み合わせによる緑内障進行予測の提案

Zheng et al.,2019 にて申請者らは、視野感度の計測時系列に加えて OCT の計測時系列も利用可能な状況下において、OCT 計測系列も有効活用しつつ緑内障の進行予想の精度を高める手法を提案した。緑内障の進行予想問題にて従来有効性が確かめられていた線形予測器と、OCT からの視野感度推定で有効性が確かめられていた DNN を組み合わせることで、適度なモデル複雑性を実現し精度向上を実現した(研究方法(2))

また 4.2 と同様、Zheng et al., 2019 も医学的な有効性を主張するには内部検証の問題があったため、Xu et al., 2021a では外部データを利用して、医学分野で受け入れられる形として手法の有効性を再検証した (研究方法(5))

4.5 緑内障進行予測と視野推定問題の組み合わせによるマルチタスク学習

Xu et al. 2021bで申請者らは、4.2 や 4.3 で取り組んだ OCT から視野感度の推定問題と、4.4 で取り組んだ OCT 計測系列と視野感度計測系列からの緑内障進行予測問題を、マルチタスク学習の枠組みで同時に解くことが有効であることを示した。具体的には両方の問題を同時に扱うことのできる単一のモデルを設計することにより、片方のドメインで得られた知識をもう片方のドメインでも生かすことが可能となり、結果として個別に問題を解いていた場合に比べて両方の場合で精度が向上した(研究方法(4))。

また Xu et al. 2021b も 4.2 や 4.4 と同様に内部検証で有効性を確かめていたため、Asaoka et al., 2021 では外部データを利用して手法の有効性を再検証した(研究方法(5))。

参考文献

- [1] LeCun et l al., Nature, pp. 436-444, **521**, 2015
- [2] Amari, Neural Comp., pp. 251-276, **10**, 1998
- [3] Designations et al., Neurips '15
- [4] Ioffe and Szegedy, ICML '15
- [5] Santurkar et al. Neurips '18
- [6] Maya et al., BigData '14
- [7] Uesaka et al., KDD '17

5 . 主な発表論文等

「雑誌論文 〕 計6件(うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件)

〔雑誌論文〕 計6件(うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件)	
1 . 著者名 Xu, Asaoka, Murata, Kiwaki, Zheng, Matsuura, Fujino, Tanito, Mori, Ikeda, Kanamoto, Yamanishi	4.巻 4
2 . 論文標題 Improving visual field trend analysis with optical coherence tomography and deeply-reg¥ ularized latent-space linear regression	5 . 発行年 2021年
3.雑誌名 Ophthalmology Glaucoma	6.最初と最後の頁 78-88
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ogla.2020.08.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著
1.著者名 Hashimoto, Asaoka, Kiwaki, Sugiura, Asano, Murata, Matsuura, Miki, Mori, Ikeda, anamoto, Yamagami, Inoue, Tanito, Yamanishi	4.巻 105
2 . 論文標題 Deep learning model to predict visual field in central 1¥ 0 degrees from optical coherence tomography measurement in glaucoma	5 . 発行年 2020年
3.雑誌名 the British Journal of Ophthalmolog	6.最初と最後の頁 507-513
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1136/bjophthalmoI-2019-315600	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著
1 . 著者名 Xu Linchuan、Asaoka Ryo、Kiwaki Taichi、Murata Hiroshi、Fujino Yuri、Matsuura Masato、Hashimoto Yohei、Asano Shotaro、Miki Atsuya、Mori Kazuhiko、Ikeda Yoko、Kanamoto Takashi、Yamagami Junkichi、Inoue Kenji、Tanito Masaki、Yamanishi Kenji	4.巻 218
2 . 論文標題 Predicting the Glaucomatous Central 10-Degree Visual Field From Optical Coherence Tomography Using Deep Learning and Tensor Regression	5 . 発行年 2020年
3.雑誌名 American Journal of Ophthalmology	6.最初と最後の頁 304~313
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ajo.2020.04.037	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著
1 . 著者名 Asaoka Ryo、Xu Linchuan、Murata Hiroshi、Kiwaki Taichi、Matsuura Masato、Fujino Yuri、Tanito Masaki、Mori Kazuhiko、Ikeda Yoko、Kanamoto Takashi、Inoue Kenji、Yamagami Jukichi、Yamanishi Kenji	4.巻 1
2 . 論文標題 A Joint Multitask Learning Model for Cross-sectional and Longitudinal Predictions of Visual Field Using OCT	5 . 発行年 2021年
3.雑誌名 Ophthalmology Science	6.最初と最後の頁 100055~100055
掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1016/j.xops.2021.100055	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著

1.著者名 Hashimoto Yohei、Kiwaki Taichi、Sugiura Hiroki、Asano Shotaro、Murata Hiroshi、Fujino Yuri、 Matsuura Masato、Miki Atsuya、Mori Kazuhiko、Ikeda Yoko、Kanamoto Takashi、Yamagami Junkichi、 Inoue Kenji、Tanito Masaki、Yamanishi Kenji、Asaoka Ryo	4.巻 10
2.論文標題 Predicting 10-2 Visual Field From Optical Coherence Tomography in Glaucoma Using Deep Learning	5 . 発行年 2021年
Corrected With 24-2/30-2 Visual Field 3.雑誌名 Translational Vision Science & Technology	6 . 最初と最後の頁 28~28
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1167/tvst.10.13.28	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著

1.著者名	4 . 巻
Yousefi Siamak, Kiwaki Taichi, Zheng Yuhui, Sugiura Hiroki, Asaoka Ryo, Murata Hiroshi, Lemij	193
Hans, Yamanishi Kenji	
2.論文標題	5 . 発行年
Detection of Longitudinal Visual Field Progression in Glaucoma Using Machine Learning	2018年
	·
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
American Journal of Ophthalmology	71 ~ 79
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1016/j.ajo.2018.06.007	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	-

〔学会発表〕 計3件(うち招待講演 0件/うち国際学会 3件)

1.発表者名

Yuhui Zheng, Linchuan Xu, Taichi Kiwaki, Jing Wang, Hiroshi Murata, Ryo Asaoka, Kenji Yamanishi

2 . 発表標題

Glaucoma Progression Prediction Using Retinal Thickness via Latent Space Linear Regression

3 . 学会等名

25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining (国際学会)

4.発表年

2019年

1.発表者名

Suigura, Kiwaki, Yousefi, Murata, Asaoka, and Yamanishi

2 . 発表標題

Estimating Glaucomatous Visual Sensitivity from Retinal Thickness with Pattern-Based Regularization and Visualization

3 . 学会等名

24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining (国際学会)

4 . 発表年

2018年

1.発表者名
L. Xu, R. Asaoka, T. Kiwaki, H. Murata, Y. Fujino, and K. Yamanishi
2.発表標題
PAMI: A Computational Module for Joint Estimation and Progression Prediction of Glaucoma
The state of the s
3.学会等名
26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining (国際学会)
4.発表年
2021年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称	発明者	権利者
情報処理装置、情報処理方法、及びプログラム	山西健司、木脇太	同左
	一、許林川、王晶、	
	鄭宇輝、朝岡亮、村	
産業財産権の種類、番号	出願年	国内・外国の別
特許、2019-114984	2019年	国内

〔取得〕 計1件

産業財産権の名称	発明者	権利者
情報処理装置、機械学習データの製造方法、及びプログラム	山西健司、木脇太 一、杉浦宏樹、朝岡 亮、村田博史	同左
産業財産権の種類、番号	取得年	国内・外国の別
特許、2018-036595	2021年	国内

〔その他〕

6 研究組織

6	3.研光組織		
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7.科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	University of Tennessee			
中国		The Hong Kong Polytechnic University		