情報意味論(5) 神経回路網

理工学部管理工学科
櫻井彰人

誤差逆伝播法

- 基本的な考え方
  - 出力素子における、(実出力 – 目標出力値)^2 を最小化しよう
    - この値、実際には、この値の全データ、全出力素子に関する総和、を E(w) と書こう
  - パラメータは、素子間の結合荷重 w
  - E(w) を w で微分(偏微分です)して0と置こう
    - 得られる w に関する方程式を解けばよい
    - パーセプトロンでは、微分できない
  - 解けない！ 複雑な非線形方程式だから
  - 反復解法を考えよう

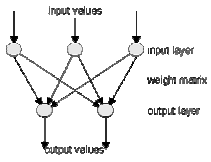
なぜ1980年代まで待ったか？

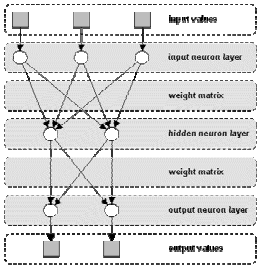
- PDP (Parallel Distributed Computing) という書籍の出版を機に有名になった。しかし、
- 二乗誤差を求め、パラメータで微分し、0と置くのは、もっと前から常識であった。
- では、なぜ、こんなに遅くなったのか？
- 考えられる理由:
  - 反復法で収束するとは思えなかった。
  - 反復法そのものが大変な計算と思われていた。
  - たいして大変でなくても、当時のコンピュータではとても計算できなかった
  - そんなことが脳内で行われているとは思わなかった。

適用するネットワークの形状

- アイデアは基本的なので、いろいろな場合に利用できる。
- 基本的には、
  - 階層型(feedforward)
  - 再帰型(recurrent)

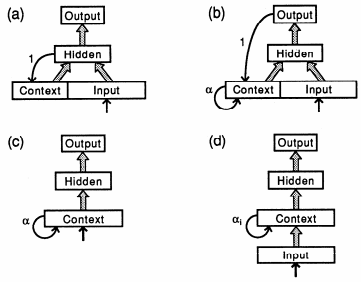
階層型(多層パーセプトロン)





相互結合(recurrent)

- 階層型＋フィードバック(離散時間遅れ)



パーセプトロン学習の欠点

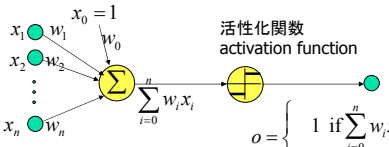
- ノイズに弱い
- 線型分離可能でない時に学習できない
- 多層回路網に拡張できなかった
  - 中間層素子に対する教師信号が特定できない
  - その結果、2ビットの XOR も実現できない
  - パーセプトロン・ブーム終焉の一つの契機
    - 線形閾値素子で代替しようとしていた、計算機用素子が安価で高速になったのも理由

ノイズ・線型分離不能の対策

- 全ての入出力仕様が満足できなくとも、そこそこに満足できればよい
- 「満足程度」(不満足程度)の評価
  - 誤差関数: 目標と現実の差を表現する関数
- 例によって、誤差の自乗和がよく使われる

$$E(W)=\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}(F(W,x_t)-y_t)^2$$

McCullogh-Pitts モデル(1943)

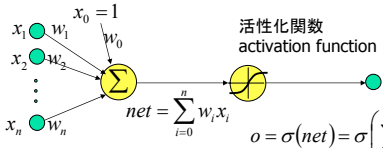


$$o=\begin{cases}1 & \text{if } \sum_{i=0}^{n} w_i x_i > 0\\ 0 & \text{otherwize}\end{cases}$$

$$o=\begin{cases}1 & \text{if } \sum_{i=0}^{n} w_i x_i > 0\\ -1 & \text{otherwize}\end{cases}$$

しばしば Heaviside関数 $H(x)=\begin{cases}1 & \text{if } x>0\\ 0 & \text{otherwize}\end{cases}$ を用いて記述する

シグモイド素子



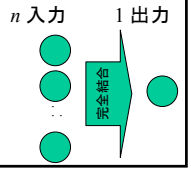
極めて頻繁に使われる σ : $\sigma(x)\equiv\frac{1}{1+e^{-x}}$

または : $\tanh(x)$ or $\tanh\left(\frac{x}{2}\right)\equiv 2\sigma(x)-1=\frac{1-e^{-x}}{1+e^{-x}}$

極めて簡単な例題

- 活性化関数: 恒等関数 $f(x)=x$
  - 素子に入力された値をそのまま出力
  - 線形素子の中で最も単純
- 例: n = 3:

サンプル	入力	出力
1	0 0 0	0
2	1 1 1	1
3	1 0 0	1
4	0 0 1	1



このネットワークの荷重はどう決めるか?

荷重パラメータ更新の大枠

- 荷重の初期値をランダムに設定

(Incremental/Online weight update)

- 全サンプルについて
  - 一つのサンプルを取り出し、
    - 誤差の計算
    - 当該誤差が大きければ
      - 当該サンプルに対し
        - » 更新規則を用いて、荷重を更新

(Batch weight update)

- 各サンプル毎誤差を求め、その総和を計算
- 当該誤差総和が大きければ
  - 更新規則を用いて、荷重を更新

荷重更新規則#1: デルタ規則

$$\Delta W_s \leftarrow \alpha(t-y)x_s$$
$$W \leftarrow W + \Delta W_s$$

ΔW_s サンプル s に対する荷重の更新量

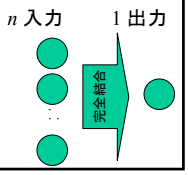
α 学習率 (スカラー, 多くの場合定数)

t 目標値

y 実際の出力値

x_s サンプル s

$y = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$



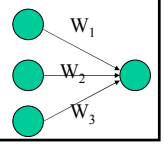
数値例

- W = (W_1, W_2, W_3)
  初期値 W= (.5 .2 .4)
- 学習率 $\alpha = 0.5$

サンプル	入力	目標
1	0 0 0	0
2	1 1 1	1
3	1 0 0	1
4	0 0 1	1

デルタ規則:

$$\Delta W_s = \alpha(t-y)x_s$$



学習過程の1エポック

ステップ	入力	出力目標 (t)	実出力 (y)	開始時の荷重	荷重更新量
1	(0 0 0)	0	0	(.5 .2 .4)	
2	(1 1 1)	1			
3	(1 0 0)	1			
4	(0 0 1)	1			

$$\Delta W_s = \alpha(t-y)x_s \qquad \alpha = 0.5$$

ステップ 1

ステップ	入力	出力目標 (t)	実出力 (y)	開始時の荷重	荷重更新量
1	(0 0 0)	0	0	(.5 .2 .4)	ΔW_1: 0.1(0 – 0)0 ΔW_2: 0.1(0 – 0)0 ΔW_3: 0.1(0 – 0)0

$$\Delta W_s = \alpha(t-y)x_s \qquad \alpha = 0.5$$

ステップ2～4

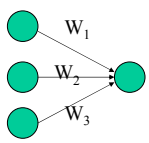
ステップ	入力	出力目標 (t)	実出力 (y)	開始時の荷重	荷重更新量
1	(0 0 0)	0	0	(.5 .2 .4)	(0 0 0)
2	(1 1 1)	1	1.1	(.5 .2 .4)	(-.05 -.05 -.05)
3	(1 0 0)	1	.45	(.45 .15 .35)	(.275 0 0)
4	(0 0 1)	1	.35	(.725 .15 .35)	(0 0 .325)

$$\Delta W_s = \alpha(t-y)x_s \qquad \alpha = 0.5$$

数値例: 続けて計算すると

- 18 エポック後
  - 荷重は
    - W1= 0.990735
    - W2= -0.970018005
    - W3= 0.98147
- この結果は、訓練データをよく表現しているだろうか？

サンプル	入力	出力
1	0 0 0	0
2	1 1 1	1
3	1 0 0	1
4	0 0 1	1



実際の出力値

サンプル	入力	目標	実出力
1	0 0 0	0	0
2	1 1 1	1	1.002187
3	1 0 0	1	0.990735
4	0 0 1	1	0.98147

言い換えれば、この方法により、インクリメンタルに正しい（求めるべき）荷重を近似していくことが分かる。

他に解は？

- 他にも解はある。例えば、
  - W1= 1
  - W2= -1
  - W3= 1
- どちらがよいか？
- なぜ？
- 違いはあるのか？
- あるならどこに？

サンプル	入力	目標	実出力
1	0 0 0	0	
2	1 1 1	1	
3	1 0 0	1	
4	0 0 1	1	

なぜデルタ規則が有効なのか？

- デルタ規則は誤差最小化を実現しているからである
  - ➢ この場合の誤差は二乗誤差. 荷重を二乗誤差が減少するように変更している
- 個々の訓練サンプルに対し、二乗誤差は $E = (t - y)^2$
  - ただし
    t = 希望する出力値
    y = 実際の 出力値

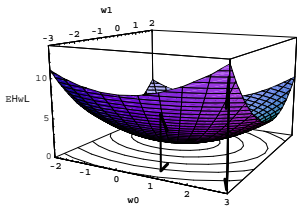
$$y = \sum_{i=1}^{n} x_i w_i$$

ところで、誤差最小化の方法

- 微分して0とおいた方程式を解けばよい！
  本当か？
  - もっとも、まずは、微分できないことには話しにならん
  - つまり、パーセプトロンではだめ。
- 非線形連立方程式になり、到底、解けない
- 反復解法（少しずつ、解を改善していく方法）を考える。すなわち、 $E(W_1) > E(W_2) > E(W_3) > \cdots$
  となる $W_1, W_2, W_3 \cdots$を求める方法を考える

反復最小化法

- 様々な方法が提案されている。
- 中でも最も単純なものが、最急降下法
  - 最大値を求めるなら、最急上昇法（あまり使わない）。



最急降下方向と等高線とのなす角度に注目！

最急降下法の計算式

- 実際の計算はどうすればよいか？
- 微係数は、最急上昇方向であった！
- そこで、

$$\Delta W = \alpha\left(-\frac{\partial E}{\partial W}\right)$$

$$W \leftarrow W + \Delta W$$

とする。α は学習係数（上手に決めないといけない定数）

学部生に戻って

$$E = (t-y)^2 \qquad y = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$$

$$\frac{\partial E}{\partial W} = 2(t-y)\underbrace{\frac{\partial (t-y)}{\partial W}} \qquad \text{くどいですが} \quad \frac{d}{dx}[f(x)]^2 = 2f(x)\frac{d}{dx}f(x)$$

$$= -2(t-y)x$$

$$\frac{\partial (t-y)}{\partial W} = -\frac{\partial y}{\partial W} \quad \text{(t は目標値であり、W に依存しない)}$$

$$= -\frac{\partial \left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i \right)}{\partial W}$$

$$= -x \quad \text{(x はベクトルです)}$$

もう少し

$$W \leftarrow W + \alpha\left(-\frac{\partial E}{\partial W}\right) \quad \text{かつ} \quad \frac{\partial E}{\partial W} = -2(t-y)x$$

であるから、2α を α と書き換えれば

$$W \leftarrow W + \Delta W \quad \text{かつ} \quad \Delta W = \alpha(t-y)x$$

Perceptron 学習則との関係

- しかし、学習則だけみてみると, perceptron 学習則

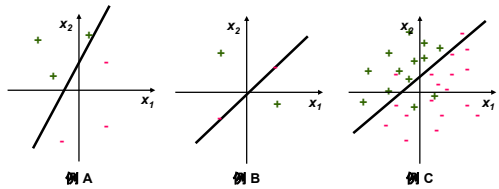
$$W \leftarrow W + \Delta W \quad \text{かつ} \quad \Delta W = \begin{cases} x & \text{if } t \neq y \text{ and } t = 1 \\ -x & \text{if } t \neq y \text{ and } t = -1 \\ 0 & \text{if } t = y \end{cases}$$

は, 下記において, $t = \pm 1, y = \pm 1$ という状況で、α=1 /2 とおいたもの

$$W \leftarrow W + \Delta W \quad \text{かつ} \quad \Delta W = \alpha(t-y)x$$

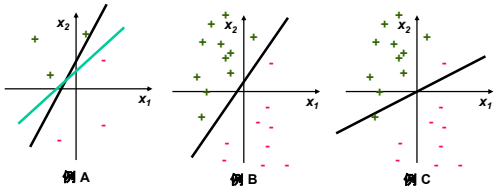
- しかし閾値関数は微分不能なため、perceptron 学習則の妥当性は、二乗誤差最小化では説明できない。

デルタ規則とperceptron学習則
シグモイド素子と閾値素子



- 線型分離可能: 完全な分類ができる
  - 例 A: パーセプトロン学習アルゴリズムが収束
- 線型分離不能: 近似できるのみ
  - 例 B: 線型分離不能; デルタ規則は収束, しかし3個正解よりはよくならない
  - 例 C: 線型分離不能; デルタ規則でよい結果

デルタ規則とPerceptron学習則
線形素子と閾値素子



- 線型分離可能: 同じ分類をする
  - 例 A: パーセプトロン学習則もデルタ規則(線形素子)も同じ分類をする
    ただし、結果は異なるので、未知入力に対する動作は異なる可能性あり
- 線型分離可能: 異なる分類をする。線形素子の場合、全体のバランスをとる
  - 例 B: 線型分離可能; Perceptron学習則は正解通り分類
  - 例 C: 線型分離不能; デルタ規則は正解通りは分類しない。バランスはよい？

活性化関数が恒等関数以外のとき

$$\Delta W_s \leftarrow \alpha(t-y)f'(y_{in})x_s$$
$$W \leftarrow W + \Delta W_s$$

ΔW_s サンプル s に対する荷重の更新量

α 学習率 (スカラー, 多くの場合定数)

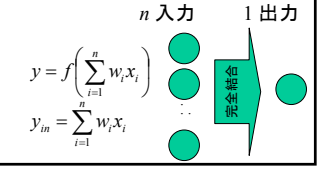
t 目標値

x_s サンプル s

$y_{in} = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$

f 微分可能な関数

$y = f(y_{in})$ 実際の出力値



もう一度

$$E = (t-y)^2 \qquad y = f(y_{in}),\ y_{in} = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$$

$$\frac{\partial E}{\partial W} = 2(t-y)\underbrace{\frac{\partial (t-y)}{\partial W}}$$

$$= -2(t-y) f'(y_{in}) x$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (t-y)}{\partial W} &= -\frac{\partial y}{\partial W} \\
&= -\frac{\partial f(y_{in})}{\partial W} \\
&= -\frac{\partial f(y_{in})}{\partial y_{in}} \frac{\partial y_{in}}{\partial W} \\
&= -f'(y_{in}) \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i \right)}{\partial W} \\
&= -f'(y_{in}) x \quad \text{(x はベクトルです)}
\end{aligned}$$

前と全く同様に

$$W \leftarrow W + \alpha \left(-\frac{\partial E}{\partial W} \right) \quad \text{かつ} \quad \frac{\partial E}{\partial W} = -2(t-y) f'(y_{in}) x$$

であるから、2α を α と書き換えれば

$$W \leftarrow W + \Delta W \quad \text{かつ} \quad \Delta W = \alpha (t-y) f'(y_{in}) x$$

ところで

- これまでは、サンプルが一個与えられたときの、荷重更新を考えてきた。
- しかし、これは、おかしい。
- なぜなら、誤差というものは、与えられたサンプル全体の誤差を考えないと意味がない
- なぜなら、あるサンプル x_1 に関する誤差を減少させた結果、他のサンプル x_2 に対する誤差が増加してしまい、結果として、全体誤差は増加してしまう可能性があるからである
- であるから、

$E = (t-y)^2$ ではなく $E = \sum_s (t_s - y_s)^2$

そして、

$W \leftarrow W + \Delta W$ かつ $\Delta W = \alpha \sum_s (t_s - y_s) f'(y_{in,s}) x_s$

であるべき（これを batch mode という（vs. online mode））

正しい議論か？

- 完全に正しい。そしてこの時、α が定数でなく、学習ステップを繰り返す間に、適度な速度で $\alpha \to 0$ となるなら、

$W \leftarrow W + \Delta W$ かつ $\Delta W = \alpha \sum_s (t_s - y_s) f'(y_{in,s}) x_s$

- によって、$E = \sum_s (t_s - y_s)^2$ は（局所）最小値となることが示される
- では、batch mode の方がいいのか？
- 話はそう簡単ではない。
- 実は、online mode の方が, 一般に, より小さい E を得ることが経験上知られている。

出力素子が複数個のとき

$$\begin{aligned}
\Delta W_{s,j} &\leftarrow \alpha (t_j - y_j) f'(y_{in,j}) x_s \\
W_j &\leftarrow W_j + \Delta W_{s,j}
\end{aligned}$$

$\Delta W_{s,j}$ サンプル s に対する第j出力素子への荷重の更新量

α 学習率 (スカラー, 多くの場合定数)

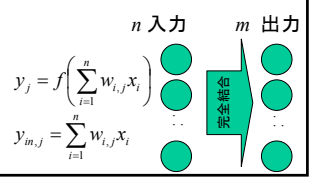
t_j 第j出力素子の目標値

x_s サンプル s

$y_{in,j} = \sum_{i=1}^{n} w_{i,j} x_i$

f 微分可能な関数

$y_j = f(y_{in,j})$ 実際の出力値



前と全く同様に

$$W_j \leftarrow W_j + \alpha \left(-\frac{\partial E}{\partial W_j} \right) \quad \text{かつ} \quad \frac{\partial E}{\partial W_j} = -2(t_j - y_j) f'(y_{in,j}) x$$

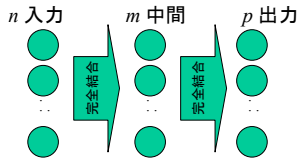
であるから、2α を α と書き換えれば

$$W_j \leftarrow W_j + \Delta W_j \quad \text{かつ} \quad \Delta W_j = \alpha (t_j - y_j) f'(y_{in,j}) x$$

多層のネットワークでは?

- 各中間素子での荷重更新量をどうやって求めればよいか
- perceptron 学習則やデルタ規則を見れば分かるが、荷重の更新量を求めるためには、誤差が必要である、そのためには、目標出力値が必要である。
- ところが、中間素子には、目標出力値がない（与えられていない！）
  - 実出力値は、勿論、ある
- つまり、ネットワーク全体では（従って、出力素子では）誤差が定義できるが、個々の中間素子における誤差は定義できない、すなわち、全体誤差の中間素子への割り振り方が分からない。
- このように、ある系全体での利得や損失が分かったとき、その貢献・負担を各構成員にどのように分配すべきかという問題は、いろいろな場面で発生する。
- この問題は、credit assignment の問題といわれる。
- 中間層があるNNで、credit assignment 問題が発生したのである

Credit Assignment 問題



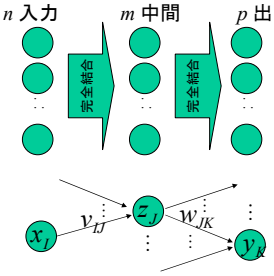
- このように、ある系全体での利得や損失が分かったとき、その貢献・負担を各構成員にどのように分配すべきかという問題は、いろいろな場面で発生する。
- この問題は、credit assignment の問題といわれる。
- 中間層があるNNで、credit assignment 問題が発生したのである

シグモイド素子を使えば

- しかし、シグモイド素子のように、微分可能な活性化関数を持つ場合には、別の考え方があり、それに従えば自動的に credit assignment の問題は解消する
- すなわち、デルタ規則のときと全く同様に、

$$E = \sum_s (t_s - y_s)^2$$

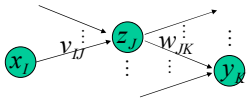
とおき、例えば、最急降下法を適用すればよい



以前は, $E = (t - y)^2$ ただし: t 目標出力, y 実出力

今回は、p 出力を考える。ただし、サンプル数は1個としておく:

$$E = \sum_{k=1}^{p} [t_k - y_k]^2$$



$$E = \sum_{k=1}^{p} [t_k - y_k]^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial v_{IJ}} = -2 \sum_{k=1}^{p} \left\{ [t_k - y_k] \frac{\partial y_k}{\partial v_{IJ}} \right\}$$

$$\frac{\partial y_K}{\partial v_{IJ}} = \frac{\partial f(y_{in,K})}{\partial v_{IJ}} = \frac{\partial f(y_{in,K})}{\partial y_{in,K}} \frac{\partial y_{in,K}}{\partial v_{IJ}} = f'(y_{in,K}) \frac{\partial y_{in,K}}{\partial v_{IJ}}$$

$$= -2 \sum_{k=1}^{p} \left\{ [t_k - y_k] f'(y_{in,k}) \frac{\partial y_{in,k}}{\partial v_{IJ}} \right\}$$

表記を簡潔にするため, $\delta_k = [t_k - y_k] f'(y_{in,k})$

$$= -2 \sum_{k=1}^{p} \left\{ \delta_k \frac{\partial y_{in,k}}{\partial v_{IJ}} \right\}$$

(これは直接計算する)

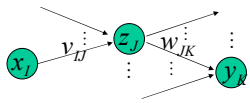
$$\frac{\partial E}{\partial v_{IJ}} = -2 \sum_{k=1}^{p} \left\{ \delta_k \frac{\partial y_{in,k}}{\partial v_{IJ}} \right\}$$

$$E = \sum_{k=1}^{p} [t_k - y_k]^2$$

$$\delta_k = [t_k - y_k] f'(y_{in,k})$$

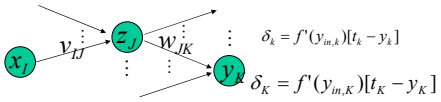
$$\frac{\partial y_{in,K}}{\partial v_{IJ}} = \frac{\partial \sum_{j=1}^{m} z_j w_{jK}}{\partial v_{IJ}} = w_{JK} \frac{\partial z_J}{\partial v_{IJ}}$$

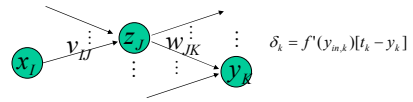
$$\frac{\partial z_J}{\partial v_{IJ}} = \frac{\partial f(z_{in,j})}{\partial v_{IJ}} = f'(z_{in,j}) \frac{\partial z_{in,J}}{\partial v_{IJ}} = f'(z_{in,j}) \frac{\partial \sum_{i=1}^{n} x_i v_{iJ}}{\partial v_{IJ}} = f'(z_{in,j}) x_I$$



$$E = \sum_{k=1}^{p} [t_k - y_k]^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial v_{IJ}} = -2\sum_{k=1}^{p}\left\{\delta_k \frac{\partial y_{in,k}}{\partial v_{IJ}}\right\}$$
$$= -2\sum_{k=1}^{p}\left\{\delta_k w_{Jk} \frac{\partial z_J}{\partial v_{IJ}}\right\}$$
$$= -2\sum_{k=1}^{p}\{\delta_k w_{Jk} f'(z_{in,J}) x_I\}$$
$$= -2\sum_{k=1}^{p}\{\delta_k w_{Jk}\} f'(z_{in,J}) x_I$$
$$= (-2)(x_I)(f'(z_{in,J}))\left(\sum_{k=1}^{p} w_{Jk}\delta_k\right)$$





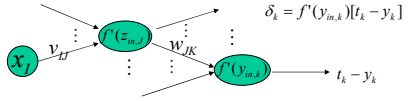
$$\frac{\partial E}{\partial v_{IJ}} = (-2)(x_I)(f'(z_{in,J}))\left(\sum_{k=1}^{p} w_{Jk}\delta_k\right)$$

$$\Delta v_{IJ} = -\alpha \frac{\partial E}{\partial v_{IJ}}$$

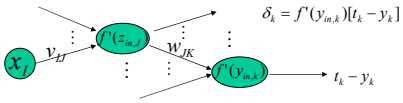
最急降下: $v_{IJ} \leftarrow v_{IJ} + \Delta v_{IJ}$

2αをαと書き換えると

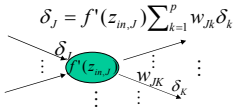
$$\Delta v_{IJ} = \alpha(x_I)(f'(z_{in,J}))\left(\sum_{k=1}^{p} w_{Jk}\delta_k\right)$$



$$\Delta v_{IJ} = \alpha(x_I)(f'(z_{in,J}))\left(\sum_{k=1}^{p} w_{Jk}\delta_k\right)$$

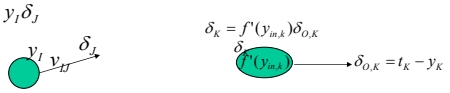


$$\delta_J = f'(z_{in,J})\sum_{k=1}^{p} w_{Jk}\delta_k$$



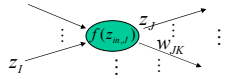
$$\Delta v_{IJ} = \alpha\, y_I \delta_J$$

$$\delta_K = f'(y_{in,k})\delta_{O,K}$$



$$\sum_{i=1}^{n} z_i \rightarrow z_{in,J},\ f(z_{in,J}) \rightarrow z_J$$

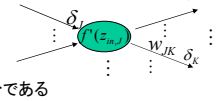
forward propagation



z が当該素子の出力である

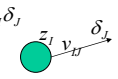
$$\delta_J \leftarrow f'(z_{in,J})\sum_{k=1}^{p} w_{Jk}\delta_k$$

backword propagation

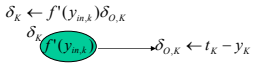


δ が誤差への貢献(?)分である

$$\Delta v_{IJ} = \alpha\, z_I \delta_J$$



$$\delta_K \leftarrow f'(y_{in,k})\delta_{O,K}$$



まとめ1: 教師付き学習

- 結合荷重の求め方
  - 学習データを $\{(x_t, y_t) | 1 \le t \le N\}$ とする
  - またネットワークの入出力関係を $y = F(W, x)$
  - 誤差関数を設定する。通常は、

$$E(W) = \frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}(F(W, x_t) - y_t)^2$$

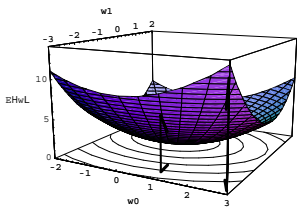
  - この*E*を最小化する*W*を求めればよい

まとめ2: 誤差最小化の方法

- 微分して0とおいた方程式を解けばよい！本当か？
  - まずは、微分できないことには話しにならん
  - パーセプトロンではだめ。
- 非線形連立方程式になり、到底、解けない
- 反復解法（少しずつ、解を改善していく方法）を考える。すなわち、 $E(W_1) > E(W_2) > E(W_3) > \cdots$ となる $W_1, W_2, W_3 \cdots$ を求める方法を考える

まとめ3: 反復最小化法

- 様々な方法が提案されている。
- 中でも最も単純なものが、最急降下法
  - 最大値を求めるなら、最急上昇法（あまり使わない）。



最急降下方向と等高線とのなす角度に注目！

まとめ4: 反復最小化方法の計算式

- 実際の計算はどうすればよいか？
- 微係数は、最急上昇方向であった！
- そこで、 $\Delta w_i^j = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial w_i^j}(W)$

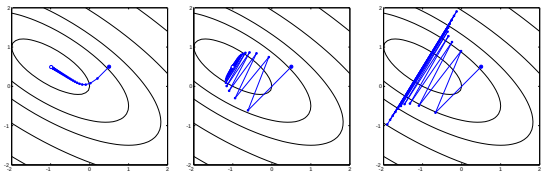
$$w_i^{j,new} = w_i^j + \Delta w_i^j$$

とする。η は学習係数（上手に決めないといけない定数）

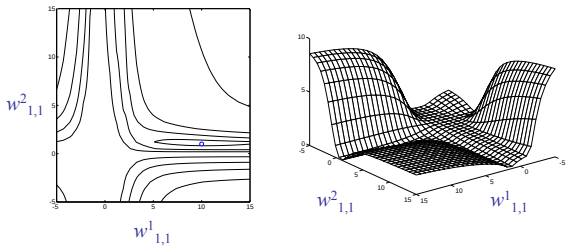
誤差逆伝播法の収束

- 大域的な最適解への収束は保証されない
  - 比較: パーセプトロンの収束 (最適な $h \in H$ に, 但し $h \in H$ なる条件下; i.e., 線型分離可能)
  - ある局所最適解 (まあ大域的最適解ではなかろう) へ近づいて行く
  - backprop (BP) に対する改善(かもしれない)
    - 慣性項 (荷重更新規則を多少変更): 浅い局所最小解はスキップするかも
      - $\Delta W^{new} \leftarrow \Delta W + \alpha \Delta W^{new}$; 加速係数 α は1より小さい定数
    - 確率的最急降下 stochastic gradient descent : 局所解に捕まる確率が低下
    - 複数個のネットを異なる荷重値で初期化; うまく混合する
  - フィードフォワードネットワークの改善
    - ANNs のベイズ学習 Bayesian learning (e.g., simulated annealing)
- 収束過程
  - 0に近い初期値, i.e., 線型に近いネットワークから開始, 徐々に非線形ネットワークへ: 未解明
- プラトーと収束速度
  - プラトーの解消: 自然勾配法 natural gradient [Amari, 1998]

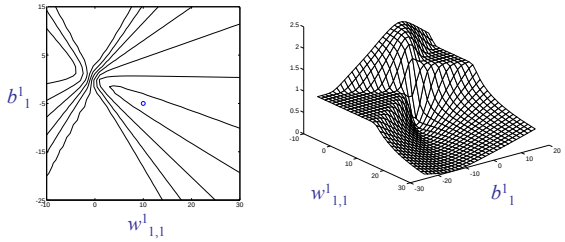
学習パラメータによる違い



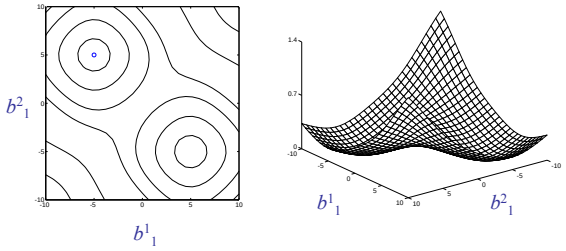
二乗誤差 vs. $w^1_{1,1}$ と $w^2_{1,1}$



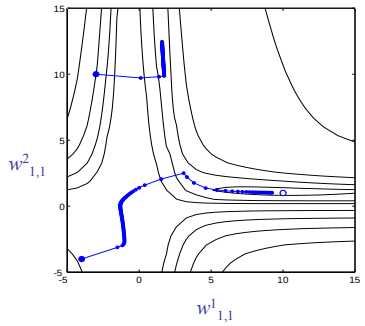
二乗誤差 vs. $w^1_{1,1}$ と b^1_1



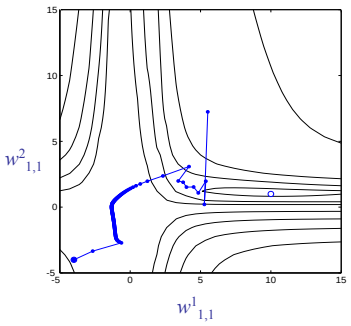
二乗誤差 vs. b^1_1 と b^1_2



収束過程の例



学習係数が大きすぎる場合

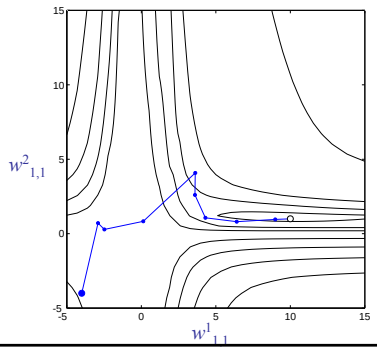


BP法で満足か？

- とんでもない！
- "最適化法" でできることがわかってしまえば、最急降下法よりよい（よさそうな）ものは、いくらでもある。
- 様々な方法が試みられた
- それなりにうまくはいくのだが、目を見張るほどではない
  - 特に問題なのは計算時間
    - 高速な手法は、|W|*|W| (|W|は荷重の個数) の行列の逆行列の計算が必要とするから
    - 逆行列を、荷重の逐次更新とともに、逐次近似する方法が用いられる
  - それに見合うだけの、成功率と局所解回避率が得られない
  - Neural Networks は単純な形のようだが、結構性質が悪い。特に「特異点」があって、収束を遅くしたり、行列が特異になったりする
- 私が調べ・試みた中で最良のものは、Levenberg-Marquardt 法

Timothy Masters, Advanced Algorithms for Neural Networks: A C++ Sourcebook, John Wiley & Sons (1995).

Levenberg-Marquardt 法

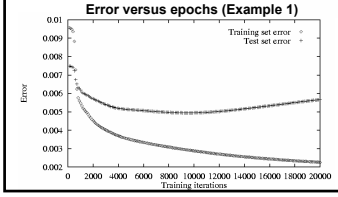


Feedforward ANNs: 表現力とバイアス

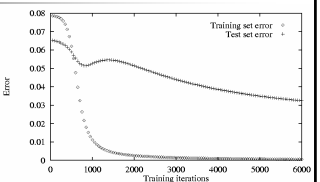
- 表現力
  - 隠れ層1のfeedforward ANN
    - 任意の Boolean function が実現できる("できる" ことは自明. AND-OR ネットワークを真似)
    - 任意の 有界連続関数 bounded continuous function (任意精度で近似) [Funahashi, 1989; Cybenko, 1989; Hornik *et al*, 1989]
  - シグモイド関数（でなくともよい）: 基底関数 basis functions; （ほぼ）局所的な和で関数近似
  - ANNs が近似容易な関数: Network Efficiently Representable Functions (NERFs) - 特徴づけはできていない [Russell and Norvig, 1995]
- ANNs の帰納バイアス
  - *n*-次元ユークリッド空間 (結合荷重の空間 weight space)
  - 連続関数 (荷重パラメータに関して連続)
  - 選択バイアス: 訓練事例の "滑らかな内挿"
  - よくは分かっていない

ANNs の過学習

- 復習: 過学習の定義
  - h' は h と比較して, worse on D_{train}, better
- 過学習: ある型
  - 繰り返し過ぎ
  - 回避: 停止条件
    (cross-validation: holdout, k-fold)
  - 回避策: weight decay



Error versus epochs (Example 1)



Error versus epochs (Example 2)

ANNs の過学習

- 過学習の考えられる他の原因
  - 予め設定する隠れ素子数の個数
  - 少なすぎると, 十分に学習できない ("underfitting")
    - 成長不足
    - 連想: 連立方程式で、式(NNモデル)の個数(自由度)より変数(真の概念)の個数が多い
  - 多すぎると過学習
    - 枝刈りされていない
    - 連想: 2次多項式をより高次の多項式で近似する
- 解
  - 予防: 属性部分集合選択 attribute subset selection (pre-filter または wrapper)
  - 回避
    - cross-validation (CV)
    - Weight decay: エポックごとに荷重を一定値で(絶対値を)減少させる
  - 発見/回復: random restarts: 初期値をランダムにかえて, 荷重や素子の addition and deletion
- 過学習は存在しない(非常に小さい確率でのみ存在する)という議論がある

S. Amari, N. Murata, K.-R. Muller, M Finke and H. H. Yang, Asymptotic Statistical Theory of Overtraining and Cross-Validation, IEEE Transactions on Neural Networks, Vol. 8, No. 5, pp. 985-996, 1997.

他の誤差関数

- 大きな荷重にペナルティを

$$E(\vec{w}) \equiv \sum_{d \in D} \sum_{k \in outputs} \left(t_{k,d} - o_{k,d}\right)^2 + \gamma \sum_{i,j} w_{j,i}^{\ 2}$$

- 関数の傾きも学習対象

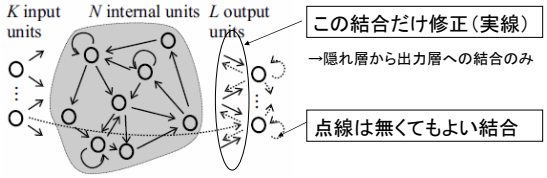
$$E(\vec{w}) \equiv \sum_{d \in D} \sum_{k \in outputs} \left[\left(t_{k,d} - o_{k,d}\right)^2 + \mu \sum_{j \in inputs} \left(\frac{\partial t_{k,d}}{\partial x_d^j} - \frac{\partial o_{k,d}}{\partial x_d^j} \right)^2 \right]$$

そのほかのニューロンモデル

- 状態をもったニューロン
  - Neuroids [Valiant, 1994]
  - それぞれの基本素子が状態をもつ
  - それぞれの更新規則は異なってもよい (または 状態に基づく異なった計算)
  - 適応的なネットワークモデル
    - ランダムグラフの構造
    - 基本素子は学習過程の一部として意味も受取る
- パルス・コーディング
  - スパイク・ニューロン spiking neurons [Maass and Schmitt, 1997]
  - 活動度が出力の表現ではない
  - 発火の列間の相のずれが意味をもつ
    - 古い時間コーディング temporal coding では rate coding が用いられ、それは活動度で表現可能
- 新しい更新規則
  - 非加算的更新 [Stein and Meredith, 1993; Seguin, 1998]
  - スパイク・ニューロン・モデル spiking neuron model

ESN: 少し変わったNN

ESN: Echo State Network
Jaeger H. and Haas, H. Harnessing nonlinearity: Predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication. Science, 304:78-80, 2004.



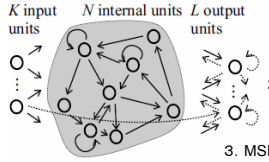
結合加重
隠れ層と出力層: 可変
その他: ランダムに決定し、以降固定

内部ユニットの出力

$$x(n+1) = f(W^{in}u(n+1) + Wx(n) + W^{back}y(n))$$

ESNの学習例

入力: $u(n) = \sin(n/5)$ →10πの間隔で入力・教師データを取得
出力: $y(n)_{teach} = 1/2\sin^7(n/5)$



1. データ入力
2. 教師データとのMSEを計算
3. MSEを最小化する結合加重を計算

結合加重
隠れ層内部: 0 +0.4 -0.4に0.95 0.025 0.025の確率で決定
入力層と隠れ層: 1 -1に等確率で決定
フィードバック結合: 1 -1に等確率で決定

ESNの学習例:
The Mackey Glass system

- Chaotic attractorの学習・・・dynamical system の学習のためのテスト.ポピュラーだが難しい

$$\dot{y}(t) = \alpha y(t-\tau)/(1+y(t-\tau)^{\beta}) - \gamma y(t)$$

・パラメータは以下のように設定

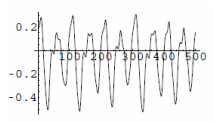
$$\alpha = 0.2, \beta = 10, \gamma = 0.1$$

・Mildな動き $\tau = 17$　・Wildな動き $\tau = 30$

→離散化

$$y(n+1) = y(n) + \delta\left(\frac{0.2y(n-\tau/\delta)}{1+y(n-\tau/\delta)^{10}} - 0.1y(n)\right)$$

学習するデータ例



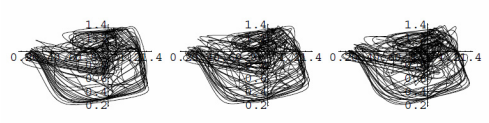
・Mildな動き $\tau = 17$　・Wildな動き $\tau = 30$

内部ユニットの出力:ノイズ入り

$$x(n+1) =$$

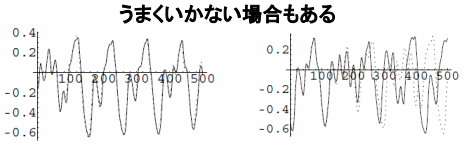
$$(1-\delta Ca)x(n) + \delta C(f(W^{in}u(n+1) + Wx(n) + W^{back}y(n) + v(n)))$$

学習結果(Wildな動き) $\tau = 30$

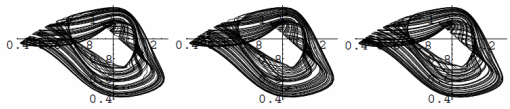


オリジナル　21000step学習　3000step学習

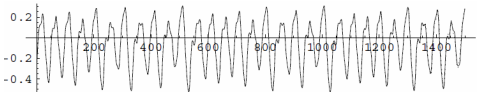
うまくいかない場合もある



学習結果(Mildな動き) $\tau = 17$



オリジナル　21000step学習　3000step学習



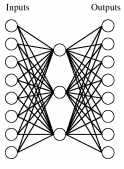
→かなりうまくいっている

補足: 中間層に発現する表現

- 中間層には、プログラマが意図しなかった内部表現が発生する(ことがある)
- よくよく見ると「意味深い」表現であったりする
- 実は、オンライン逐次学習法を用いるとBayes学習的なことがおこり、「情報の圧縮」すなわち、「意味抽出」が行われうることが示せる

中間層での表現

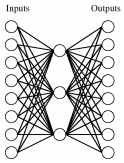
- これは学習できるか？



Input		Output
10000000	→	10000000
01000000	→	01000000
00100000	→	00100000
00010000	→	00010000
00001000	→	00001000
00000100	→	00000100
00000010	→	00000010
00000001	→	00000001

中間層での表現(2)

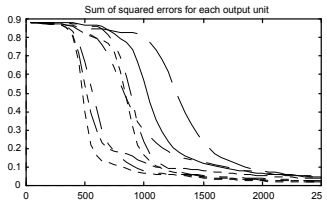
- 学習結果



Input						Output
10000000	→	.89	.04	.08	→	10000000
01000000	→	.01	.11	.88	→	01000000
00100000	→	.01	.97	.27	→	00100000
00010000	→	.99	.97	.71	→	00010000
00001000	→	.03	.05	.02	→	00001000
00000100	→	.22	.99	.99	→	00000100
00000010	→	.80	.01	.98	→	00000010
00000001	→	.60	.94	.01	→	00000001

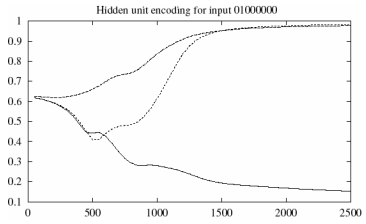
隠れ層での表現(3)

- 学習の進行の様子



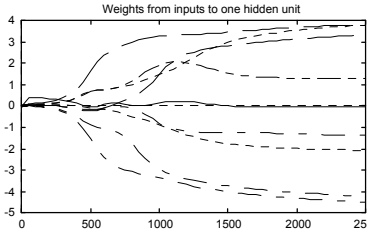
隠れ層での表現(4)

- 学習の進行の様子(2)

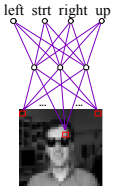


隠れ層での表現(5)

- 学習の進行の様子(3)



古い例: 顔画像の学習

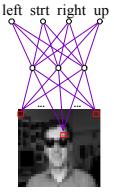


30 x 32

- 顔画像の例

顔画像の学習

- 学習後の荷重



30 x 32