ディープラーニングと物理学

4.2 再帰的ニューラルネットワークと誤差逆伝播法

須賀勇貴

茨城大学大学院　理工学研究科　量子線科学専攻　2 年

April 15, 2023

時系列データについて

系列データ

個々の要素が順序付きの集まりとして与えられるデータのこと

(ex)

- 動画データ $\rightarrow$ 順序付きの自然画像データ
- 文章データ $\rightarrow$ 順序付きの文字画像データ
- 会話データ $\rightarrow$ 順序付きの音声データ

長さが T の系列データは以下のように表現できる

$$\begin{pmatrix} x(1) \\ x(2) \\ x(3) \\ \vdots \\ x(T) \end{pmatrix} = |x(t)\rangle \quad (t = 1, 2, 3, \cdots, T)$$

時系列データについて

(ex) ”This is an apple .” という文章データを系列データとして扱う場合

$$
\begin{aligned}
|x(1)\rangle &= |\text{This}\rangle \\
|x(2)\rangle &= |\text{is}\rangle \\
|x(3)\rangle &= |\text{an}\rangle \\
|x(4)\rangle &= |\text{apple}\rangle \\
|x(5)\rangle &= |.\rangle
\end{aligned}
$$

文字データなどは 1-of-K ベクトルなどにより数値ベクトルとして表現される

$$
\begin{array}{cccccccccc}
 & \text{a} & \text{aah} & & \text{applause} & \text{apple} & \text{applet} & & \text{zzz} & \\
 & \downarrow & \downarrow & & \downarrow & \downarrow & \downarrow & & \downarrow & \\
\boldsymbol{x}^{t} = (& 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 &)^{\top}
\end{array}
$$

図: ”apple” の 1-of-k ベクトル表示

再帰的ニューラルネットワーク (RNN) の考え方

これまで、扱ってきたデータはデータ間につながりがないものだった

$$\Downarrow$$

系列データをニューラルネットワークで扱えるようにしたい

$$\Downarrow$$

データ間のつながりを表現できるようなニューラルネットワークを構築すればよい！

再帰的ニューラルネットワーク (RNN) の考え方

素朴な考え方
⇒ 前の時刻の出力を次の時刻の入力に加えるようなニューラルネットワーク

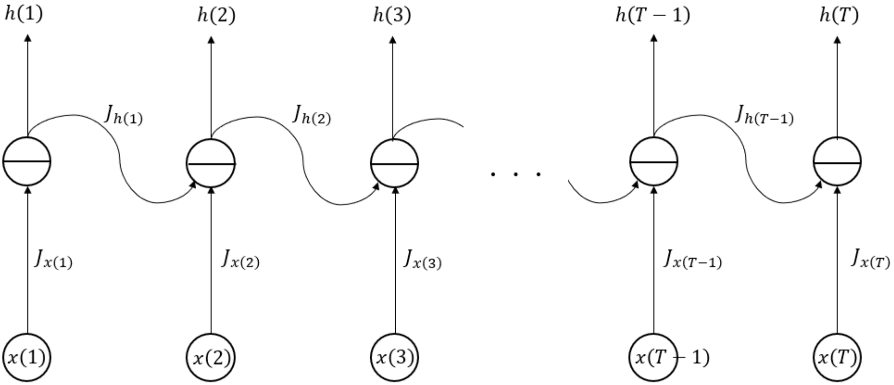
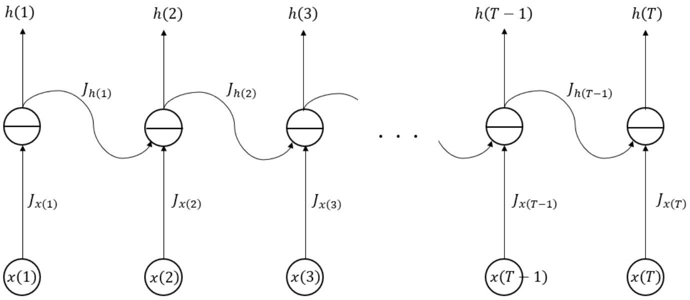


図: 最もシンプルな形の RNN

再帰的ニューラルネットワーク (RNN) の考え方



以下のようにベクトルや行列で表現しておく

$$
\begin{aligned}
|x(t)\rangle &= (x(1), x(2), \cdots, x(T))^\top \\
|h(t)\rangle &= (h(1), h(2), \cdots, h(T))^\top \\
\mathbb{J}_x &= \mathrm{diag}(J_{x(1)}, J_{x(2)}, \cdots, J_{x(T)}) \\
\mathbb{J}_h &= \mathrm{diag}(J_{h(1)}, J_{h(2)}, \cdots, J_{h(T)})
\end{aligned}
$$

再帰的ニューラルネットワーク (RNN) の考え方

各時刻での出力は以下のように簡単に求められる

$$
\begin{aligned}
h(1) &= \sigma_\bullet(J_{x(1)}x(1)) \\
h(2) &= \sigma_\bullet(J_{x(2)}x(2) + J_{h(1)}h(1)) \\
&\vdots \\
h(t) &= \sigma_\bullet(J_{x(t)}(t)x(t) + J_{h(t-1)}h(t-1))
\end{aligned}
$$

ブラケット表記より，まとめて以下のように書ける

$$
\begin{aligned}
|h(t)\rangle &= \sigma_\bullet(\mathbb{J}_x |x(t)\rangle + \mathbb{J}_h |h(t-1)\rangle) \\
&= \sum_m |m\rangle \, \sigma_\bullet\Big(\langle m| \mathbb{J}_x |x(t)\rangle + \langle m| \mathbb{J}_h |h(t-1)\rangle \Big)
\end{aligned}
$$

再帰的ニューラルネットワーク (RNN) の考え方

「ループ」のような構造 (=再帰的) を持つニューラルネットワーク
$\Rightarrow$ 再帰的ニューラルネットワーク

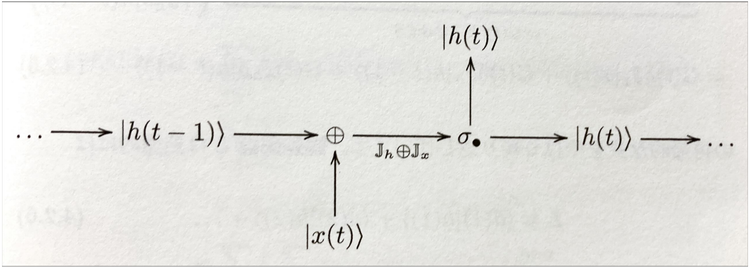


図: 素朴な再帰的ニューラルネットワークの模式図

$$|h(t)\rangle = \sum_m |m\rangle\, \sigma_\bullet\Big(\langle m| \mathbb{J}_x |x(t)\rangle + \langle m| \mathbb{J}_h |h(t-1)\rangle \Big)$$

RNN における誤差逆伝播

誤差関数 L は典型的に以下のようになっているとする

$$L = \langle d(1)|h(1)\rangle + \langle d(2)|h(2)\rangle + \cdots + \langle d(T)|h(T)\rangle = \sum_t \langle d(t)|h(t)\rangle$$

t 番目の変化量に着目 (計算↓)

$$\begin{aligned}
\delta \langle d(t)|h(t)\rangle &= \langle d(t)|\, \delta \,|h(t)\rangle \\
&= \cdots \\
&= \langle \delta_t(t)|\, \delta\mathbb{J}_x \,|x(t)\rangle + \langle \delta_t(t)|\, \delta\mathbb{J}_h \,|h(t-1)\rangle \\
&+ \langle \delta_t(t-1)|\, \delta\mathbb{J}_x \,|x(t-1)\rangle + \langle \delta_t(t-1)|\, \delta\mathbb{J}_h \,|h(t-2)\rangle \\
&+ \cdots \\
&+ \langle \delta_t(1)|\, \delta\mathbb{J}_x \,|x(1)\rangle + \langle \delta_t(1)|\, \delta\mathbb{J}_h \,|h(0)\rangle \\
&= \sum_{\tau \le t} \Big(\langle \delta_t(\tau)|\, \delta\mathbb{J}_x \,|x(\tau)\rangle + \langle \delta_t(\tau)|\, \delta\mathbb{J}_h \,|h(\tau-1)\rangle \Big)
\end{aligned}$$

RNN における誤差逆伝播

ここで，

$$\delta\mathbb{J} = \sum_{m,n} |m\rangle \langle n| \delta J\ mn$$

とすると

$$\begin{aligned}
&\delta \langle d(t)|h(t)\rangle \\
&= \sum_{\tau\leq t} \Big(\langle \delta_t(\tau)| \,\delta\mathbb{J}_x\, |x(\tau)\rangle + \langle \delta_t(\tau)| \,\delta\mathbb{J}_h\, |h(\tau-1)\rangle \Big) \\
&= \sum_{\tau\leq t}\sum_{m,n} \Big(\langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|x(\tau)\rangle \,\delta J_x^{mn} + \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|h(\tau-1)\rangle \,\delta J_h^{mn} \Big) \\
&= \sum_{m,n} \Big(\sum_{\tau\leq t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|x(\tau)\rangle \,\delta J_x^{mn} + \sum_{\tau\leq t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|h(\tau-1)\rangle \,\delta J_h^{mn} \Big)
\end{aligned}$$

RNN における誤差逆伝播

以上の結果から誤差関数 L の変化量は

$$\begin{aligned}\delta L &= \sum_t \delta \langle d(t)|h(t)\rangle \\ &= \sum_{m,n}\Bigg(\sum_t \sum_{\tau\le t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|x(\tau)\rangle \,\delta J_x^{mn} \\ &\qquad + \sum_t \sum_{\tau\le t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|h(\tau-1)\rangle \,\delta J_h^{mn}\Bigg)\end{aligned}$$

と表すことができる．この結果より，パラメータ J_x^{mn} と J_h^{mn} はそれぞれ

$$\delta J_x^{mn} = -\epsilon \sum_t \sum_{\tau\le t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|x(\tau)\rangle$$

$$\delta J_h^{mn} = -\epsilon \sum_t \sum_{\tau\le t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|h(\tau-1)\rangle$$

という更新ルールにすれば，誤差関数の値が小さくなるようになる．

RNN における誤差逆伝播

(check)

$$
\begin{aligned}
\delta L = &-\epsilon \sum_{n,m} \\
&\times \underbrace{\left[\left(\sum_t \sum_{\tau \le t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|x(\tau)\rangle\right)^2 + \left(\sum_t \sum_{\tau \le t} \langle \delta_t(\tau)|m\rangle \langle n|h(\tau-1)\rangle\right)^2\right]}_{>0} \\
&< 0
\end{aligned}
$$

今回の場合，逆伝播の式は以下

$$
\begin{aligned}
\langle \delta_t(\tau-1)| &= \langle \delta_t(\tau)| \mathbb{J}_h \mathbb{G}(\tau-1) \\
\langle \delta_t(t)| &= \langle d(t)| \mathbb{G}(t)
\end{aligned}
$$

勾配爆発/勾配消失

ここで考えた再帰的ニューラルネットワークでは勾配爆発か勾配消失のどちらかが起こってしまい，うまく学習することができないという問題がある．

逆伝播のより

$$
\begin{aligned}
\langle \delta_t(1)| &= \langle \delta_t(2)| \mathbb{J}_h \mathbb{G}(1) = \langle \delta_t(3)| \mathbb{J}_h \mathbb{G}(2) \mathbb{J}_h \mathbb{G}(1) \\
&= \cdots \\
&= \langle d(T)| \mathbb{G}(T) \mathbb{J}_h \mathbb{G}(T-1) \cdots \mathbb{J}_h \mathbb{G}(2) \mathbb{J}_h \mathbb{G}(1)
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow \mathbb{J}_h$ が右から $T-1$ 回右から作用することになる

文章データを扱うのであれば T は文章の単語数などに対応する
→1000 単語ある文章を学習するとなるとがほぼ 1000 回かかることになる

勾配爆発/勾配消失

$|\mathbb{J}_h| > 1 : \langle\delta_t(1)|$ が巨大すぎる

$|\mathbb{J}_h| < 1 : \langle\delta_t(1)|$ が小さすぎる

$\delta\,|h(t)\rangle$ の計算

パラメータに依存するのは $\mathbb{J}_{x,h}$ と $|h(t-1)\rangle$ なので

$$
\begin{aligned}
\delta\,|h(t)\rangle &= \underbrace{\sum_m |m\rangle\, \sigma'_\bullet\Big(\langle m|\,\mathbb{J}_x\,|x(t)\rangle + \langle m|\,\mathbb{J}_h\,|h(t-1)\rangle \Big) \langle m|}_{=:\mathbb{G}(t)} \\
&\quad \times \delta\Big(\mathbb{J}_x\,|x(t)\rangle + \mathbb{J}_h\,|h(t-1)\rangle\Big) \\
&= \mathbb{G}(t)\Big(\delta\mathbb{J}_x\,|x(t)\rangle + \delta\mathbb{J}_h\,|h(t-1)\rangle + \mathbb{J}_h\delta\,|h(t-1)\rangle\Big) \\
&= \mathbb{G}(t)\delta\mathbb{J}_x\,|x(t)\rangle + \mathbb{G}(t)\delta\mathbb{J}_h\,|h(t-1)\rangle + \mathbb{G}(t)\mathbb{J}_h\delta\,|h(t-1)\rangle
\end{aligned}
$$