浅(くて広い)層学習

少データでお手軽機械学習　　越智優真

自己紹介

- 千葉大学教育学部附属中学校 3年
  4月から木更津工業高等専門学校情報工学科 1年
- 機械学習
  - Kaggle, SIGNATE Expert
  - 専らデータサイエンスをしてる
- 量子コンピュータ
  - 未経験
  - 量子ビットって何？からはじまった
  - 数理科学の量子コンピュータ特集を買って読んでる（難しい）

アピールポイント

- 機械学習
  - QBoostとNNの融合
  - スパースモデリング
- 実行速度
  - 並列処理
  - スパースモデリング
- 汎用性
  - 数値なら何でもOK
  - ハミルトニアンを書き換える必要なし
- 実用性
  - 重みの可視化が楽
  - 明示的な特徴抽出可
  - 様々なタスクにおいて高い精度を確認済み

作成したモデル（ハミルトニアン）の概要

- NNっぽさ
  - 疑似特徴抽出
  - 拡張可能

- アンサンブル学習っぽさ
  - QBoostの応用
  - n層作って平均化

アンサンブル学習とNNの融合

QBoostとは　（ざっくり）

$$H(w) = \sum_{s=1}^{S} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} w_i h_i(x_{si}) - y_s \right)^2 + \lambda \|w\|_0$$

QBoost

- アンサンブル機械学習
- 2乗誤差
- 正則化項の存在
- QUBO形式

入力と出力が離散値でつながっているため

表現力が低い

（汎用性が低い）

汎用性が低いことに対する

解決策

連続値の表現

- 理想は小数
- 現実は{-1, 1} ←← Ising Poly

重みを平均すれば連続に近くなる

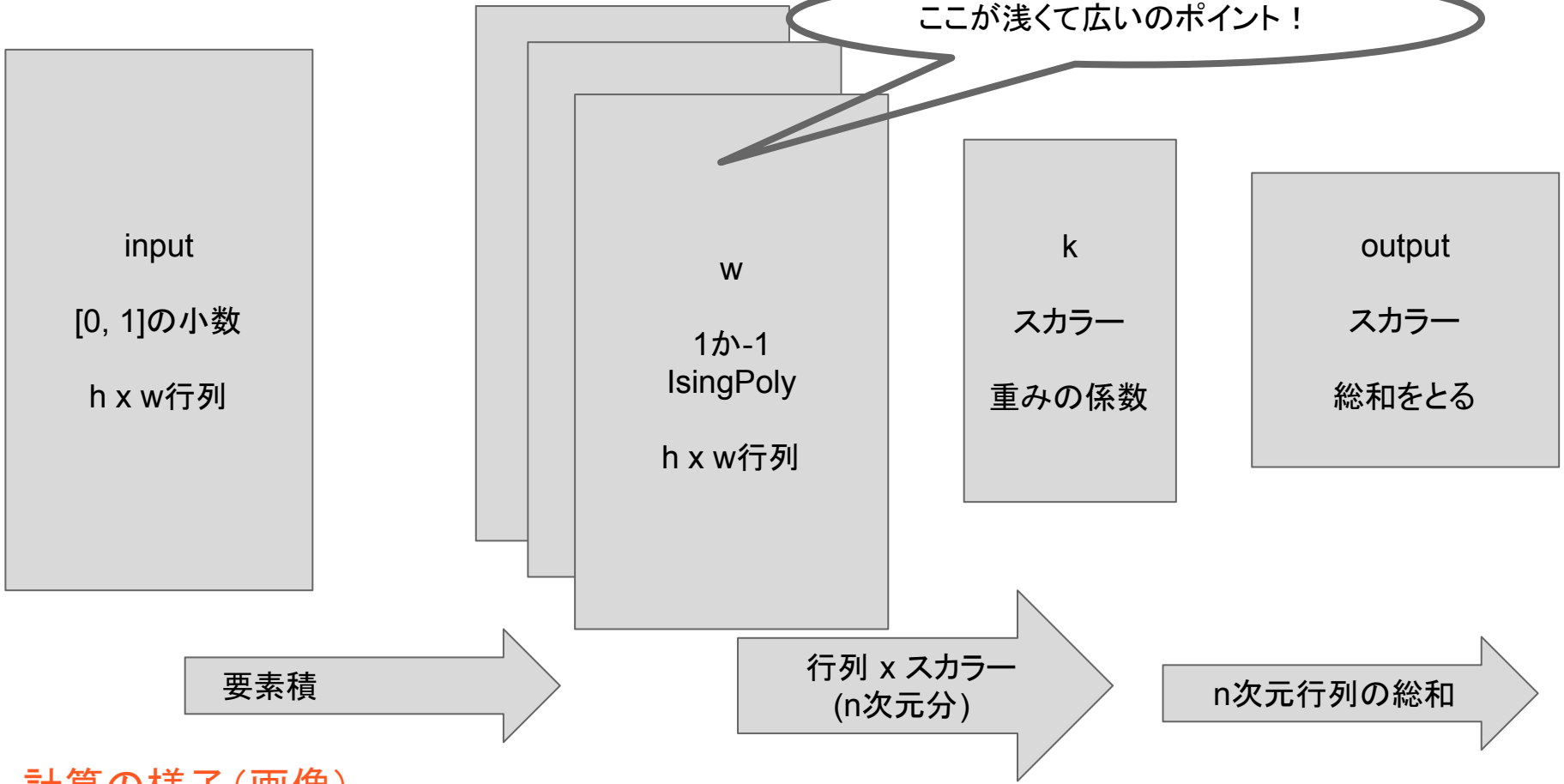
ミニバッチ学習

表現力

- 特徴抽出をしたい
- 二値では表現不可

重みを多層化

QBoostをn個持ってきてn層と言ってるのと同義


ここが浅くて広いのポイント！
input
[0, 1]の小数
h x w行列
w
1か-1
IsingPoly
h x w行列
k
スカラー
重みの係数
output
スカラー
総和をとる
要素積
行列 x スカラー
(n次元分)
n次元行列の総和

計算の様子（画像）

つまりアンサンブルの
アンサンブルです

表現力向上

- 元々は入力も二値にしている
- 現実は小数、整数お構いなし
- QBoostでは入力を{-1, 1}に
  変換している
  - 表現力低下

入力を
正規化だ

データセット

- 量子ビットとの積をとるので
  0以外の数が必要
  - **0の特徴量があると**
    学習不可
- **負が存在しない**ので総和で[-1, 1]に
  計算させるのは難しい
  - ならば負を用意➔➔➔➔➔➔➔➔

0を-1に補完

Binary Poly
➔ Ising Poly

工夫点

1. 抽象、汎用的なコーディング
2. スパースモデリング
3. 並列処理
4. 簡単な重みの可視化

汎用、抽象的なコーディング

意識したこと

- 拡張性
- 汎用性
- 楽なコーディング
  ＆デバッギング
- 楽な実験管理

抽象かつ
汎用的な
コーディング

例：PyTorch Dataset & DataLoader

- ミニバッチ御用
  - iterableなので
- 前処理、augmentationもできる
- 柔軟
- 書きやすい

深層学習用のライブラリでも使える

```
class MyDataset(Dataset):
    def __init__(self, data, label):
        self.data = data
        self.label = label

    def __len__(self):
        return len(self.data)

    def __getitem__(self, idx):
        return self.data[idx, :],
self.label[idx]
ds = MyDataset(df, labels)
dl = DataLoader(ds, batch_size=bs)
```

例：Config管理

- コードは抽象、configは具体
  - スッキリ
  - ライブラリとしても機能
- 読み/使い　やすい
  - 汎用的

```yaml
base:
  api_key_path: "token/token.json"
  train_path: "../data/train_400.csv"
  seed: 67

dataset:
  img_size: 20
  features: 400  # 特徴量の数
  val_size: 300  # validationに使うデータ数
  target: 5  # ラベル

model:
  timeout: 3000  # ms  計算時間
  # 訓練に使うデータは(batch_size * n_iter)個
  batch_size: 20  # バッチサイズ
  n_iter: 5  # ループ数
  l: 2  # 正則化項
  each_weight: 1  # 重み係数
  length_weight: 3  # 重みの層の数
  multiprocessing: true
```

スパースモデリング

少データで高精度、狙えます

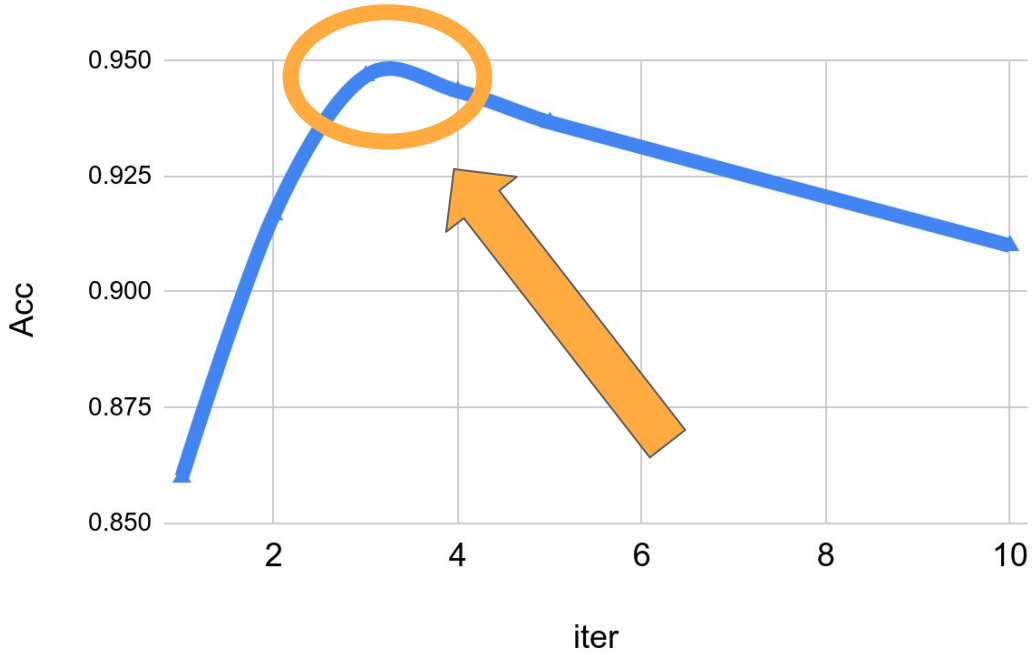
お気持ち

シンプルに。よりシンプルに、
本質を抽出せよ。

同様のデータを説明する仮説が二つある場合、より単純な方の仮説を選択せよ。

オッカムの剃刀

Batch Size = 10で実験



Bestはたったの

30〜40データ

MNISTの0ラベル　検証用データ300枚
重み係数1で3層　iterのみ変更させた　データ数は bs x iter

並列処理

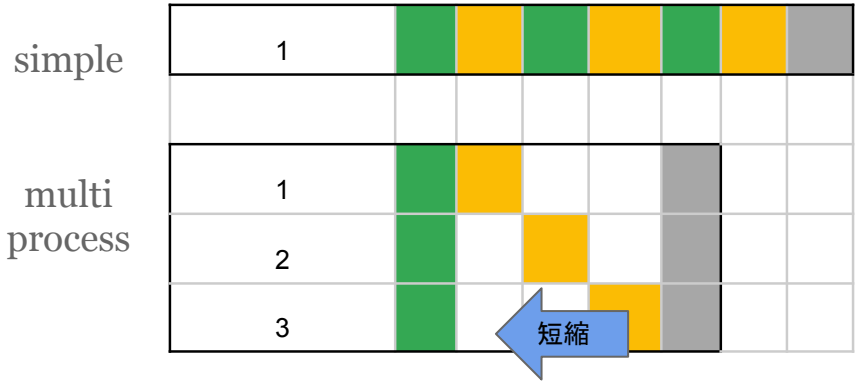
並列処理

- **プロセス番号： CPUのコア数が最大**
- **前処理： solverの定義**
- **メイン： 計算(solve)**

solver定義はローカル実行
➔ 非同期処理可

solveはクラウド実行
➔ 同期処理

MNISTだと緑1ブロックに
5～30秒かかる（データサイズと相関有）

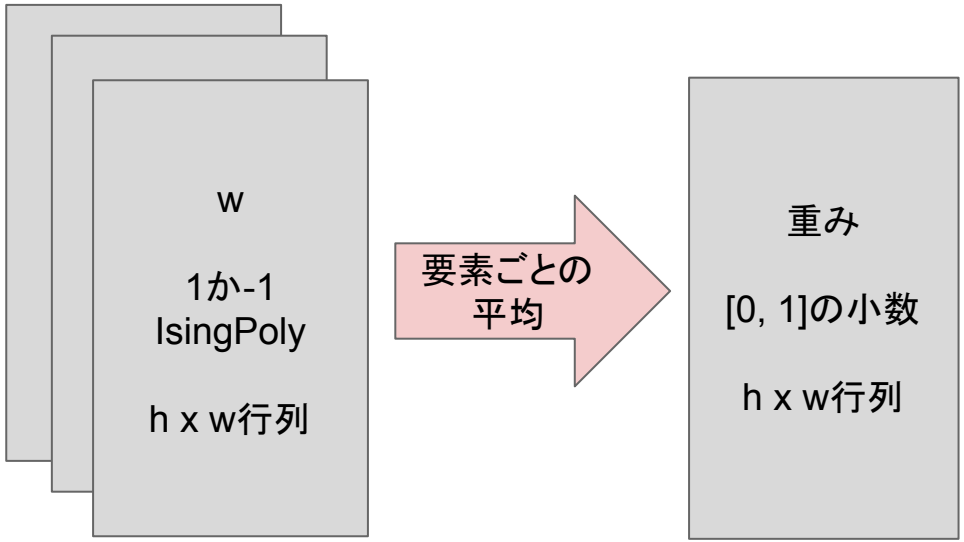


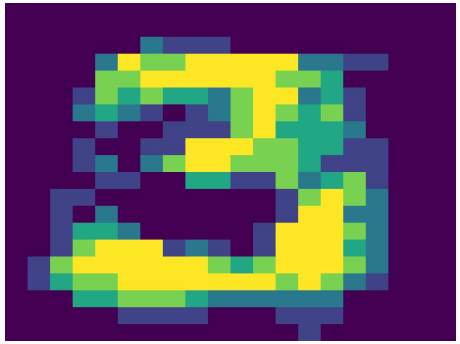
時間がかかる
前処理が爆速に

簡単な重みの可視化

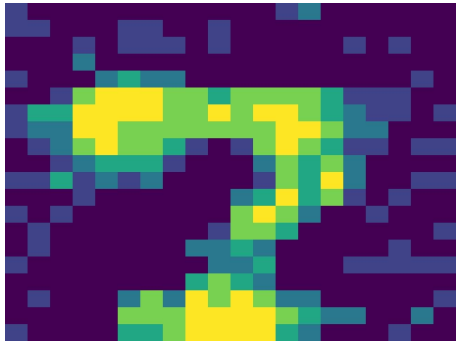
方法

1. 学習
2. 学習済みの重みを取得
3. 要素ごとの平均
4. 以上

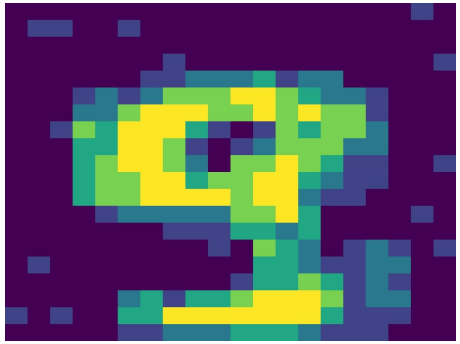




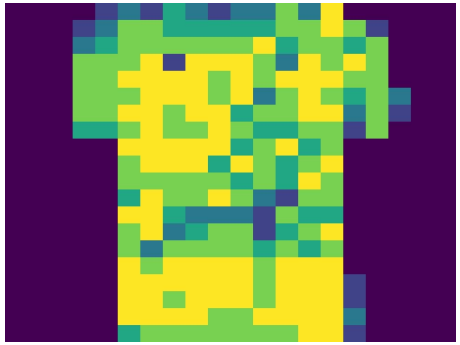
3



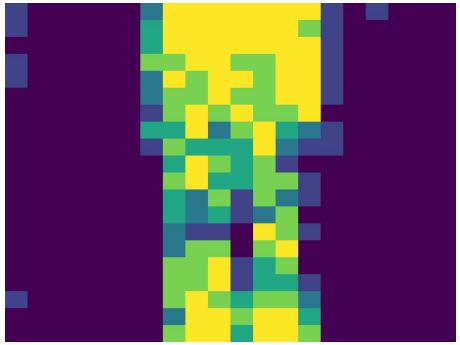
7



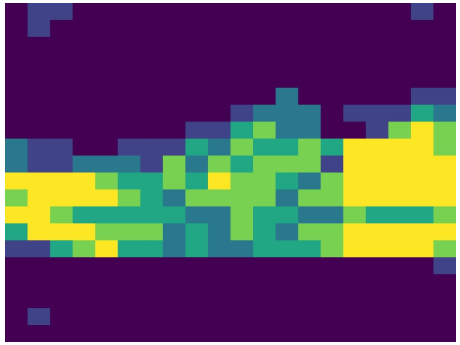
9



Tシャツ



ズボン



スニーカー

重み可視化の例

役に立つこと

- 人に説明できる
  - DNNの欠点は説明が難しいこと
  - 実用的
- 何で 上手くいく / いかない かがわかる
  - フィードバック可
  - 指標＋重みをみてモデルを評価できる

どんだけすごいの？

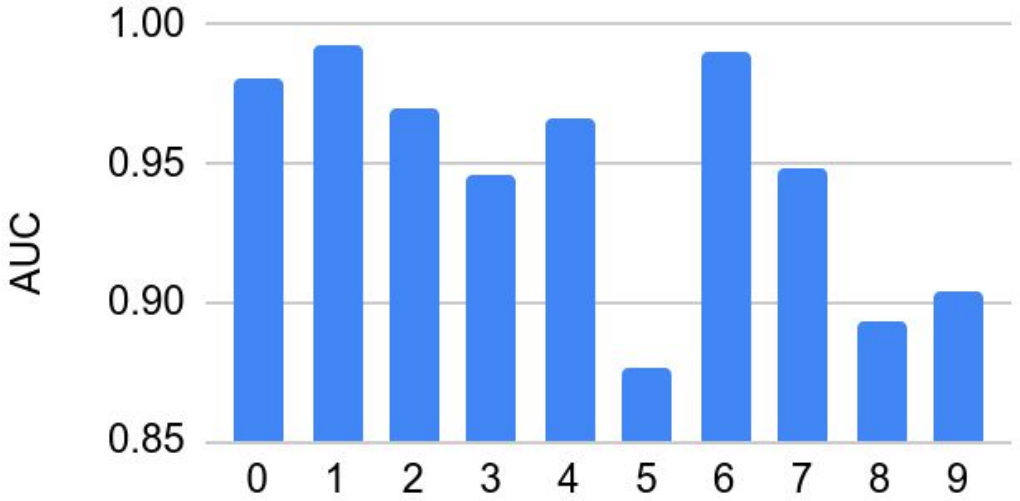
0.946

MNISTのサンプルのAUC score

サンプル実装

- データ
  - MNIST
  - 20 x 20 pixels
  - 訓練100枚
  - 検証300枚
- モデル(QBoost)
  - 重み: 3層
  - 重みの係数: 1
  - 正則化係数λ: 2
- 結果
  - ラベルごとの平均AUC: 0.946
  - シンプルな数字程良い性能

申し分ない性能



0と5の
重みを可視化させたもの

タスクごとのAUC　学習は150データのみ

- MNIST
  - 手書き数字画像、400 pixels
  - **0.946**
- Fashion-MNIST
  - 服や靴の画像、400 pixels
  - **0.946**
- EMNIST
  - 手書き英文字画像、400 pixels
  - **0.865**
- otto
  - Kaggle多クラス分類コンペ　特徴量 93個のテーブルデータ
  - **0.879**

どんなデータでもOK

ハミルトニアンを
いじる必要なし

お手軽AI爆誕！

解決

- 幅広いデータを受け入れる
  - 0以外の数値なら何でも
- 並列処理
  - 環境にもよるが最高で5倍高速化
- 多層化
  - 層の数と精度の関係
    - データが多い：相関高
    - データが少ない：相関低
- スパースモデリング
  - うまくいった
  - 層は多すぎると過学習しやすい

これから

- 自動特徴抽出
  - n次多項式
  - 畳み込み
- 小さなバグ
  - 重みを正規化するときにInf, NaNになることがたまにある
- パラメータのチューニング
  - NNの勾配降下法っぽいことをしてうまくやりたい
- 異常検知系タスク
  - 特徴抽出次第だが期待大

以上です

ありがとうございました

これより後ろに補足を
書いてあるので時間があれば
目を通してもらえればと
思います！

$$H(w) = \sum_{s=1}^{S}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{l=1}^{L} k w_{li}\right)x_{si} - y_s\right)^2 + \lambda \sum_{l=1}^{L}\sum_{i=1}^{N} w_{li}$$

- データ数S、特徴量数Nの入力x、出力y
- 重みは係数k、L層のw
- 正則化係数λ

$$w_{li} \in \{-1, 1\}$$
$$y_s \in \{0, 1\}$$
$$x_{si} \in [0, 1]$$
$$\lambda \in \mathbb{R}$$

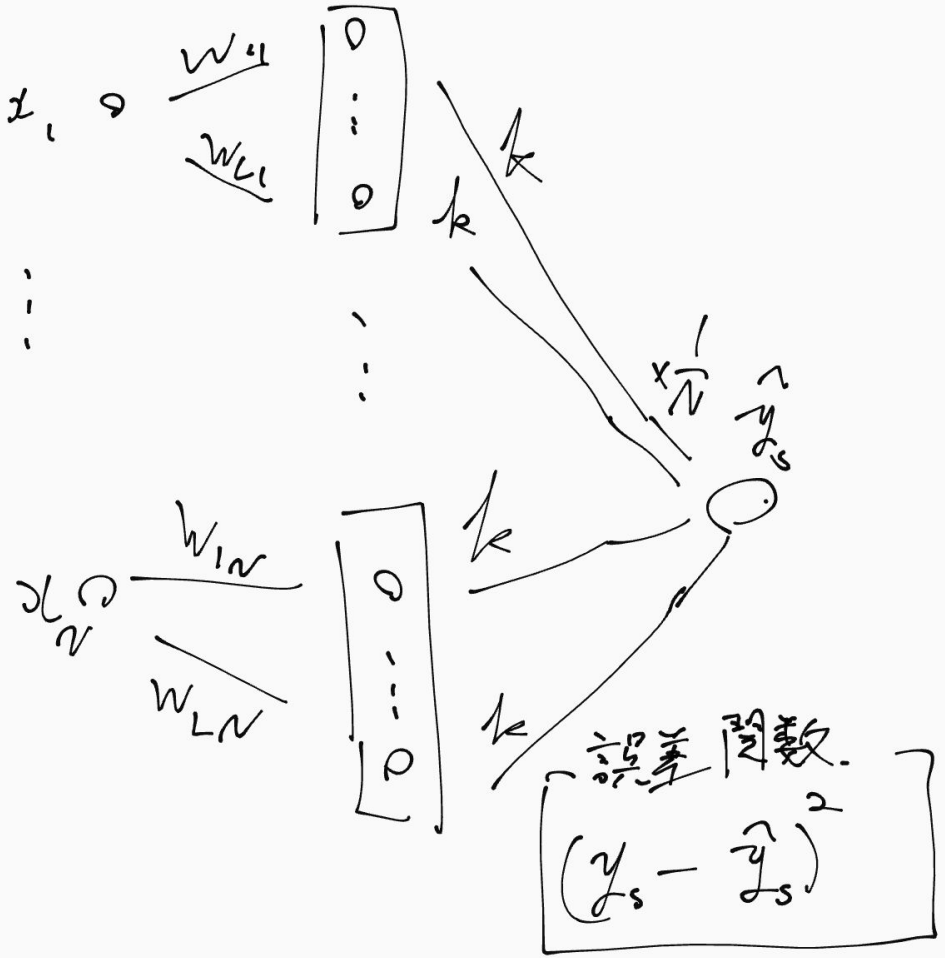
作成したハミルトニアン

重み L 層

入力 $X_s = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$

出力 y_s

重み $W = \begin{pmatrix} w_{11} & \cdots & w_{L1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1N} & \cdots & w_{LN} \end{pmatrix}$



重み計算

自作データセットで試す方法

1. データのパスを記載
2. カラムを指定して説明変数と従属変数にわける
3. （必要ならば）前処理等を行う
4. パラメータを設定
5. 実行！

```
base:
  train_path: "ここ.csv"
```

```
# 特徴量、ラベル
train_ds = MyDataset(train[:, 1:], train[:, 0])
valid_ds = MyDataset(val[:, 1:], val[:, 0])
```

```
model:
  timeout: 3000  # ms  計算時間
  # 訓練に使うデータは(batch_size * n_iter)個
  batch_size: 20  # バッチサイズ
  n_iter: 5  # ループ数
  l: 2  # 正則化項
  each_weight: 1  # 重み係数
  length_weight: 3  # 重みの層の数
  multiprocessing: true:], val[:, 0])
```

正則化項

正則化風項

- 重みの和
- -1と1のバランスを良くする

思いつきだがノイズが軽減され、
スコアも上がった

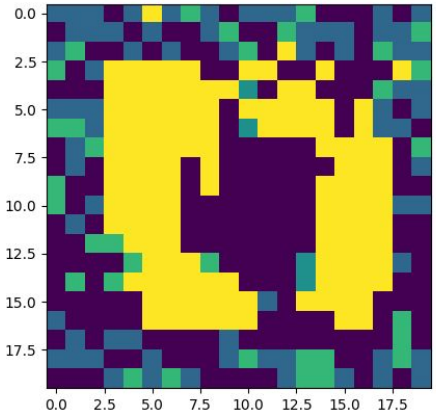
$$\lambda \sum_{l=1}^{L} \sum_{i=1}^{N} w_{li}$$

正則化風項の力

- 重みの和で表される
- 係数λが大きいほど1の重みは少なくなる

下はMNISTの0のラベルをλのみを変えて学習させた後の重みを可視化させたもの

λ = 0 score 0.87



λ = 2 score 0.95