# 8. ニューラルネットワーク

- 本章の説明手順

一部、第9章の内容が入ります

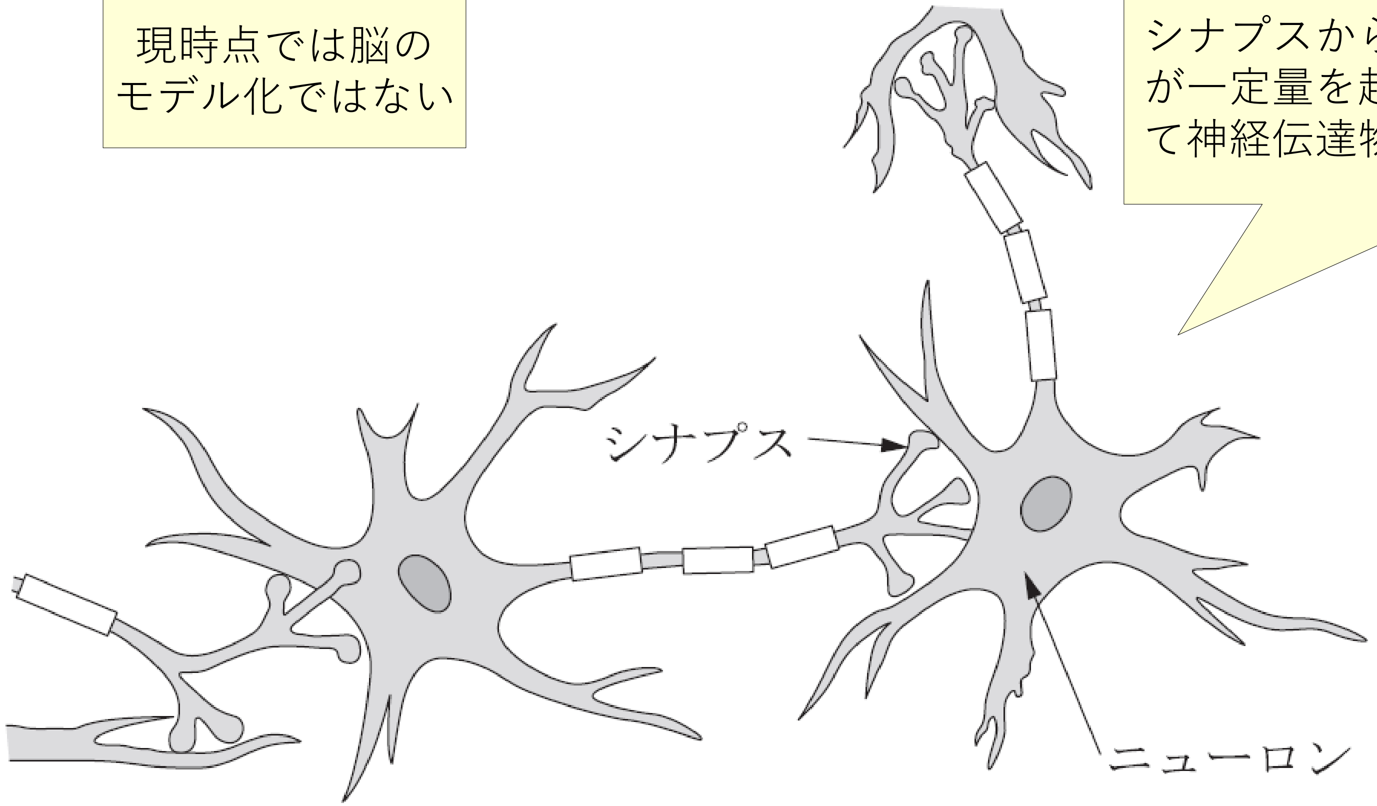
1. ニューラルネットワークによる非線形識別面の実現
2. ニューラルネットワークにおける学習＝誤差逆伝播法
3. ニューラルネットワークにおける学習の枠組み
    - kerasプログラミング
4. 多階層ニューラルネットワークにおける学習

# 8. ニューラルネットワーク

- ニューラルネットワークとは
  - ◆ 神経細胞の情報伝達メカニズムを単純化したモデル

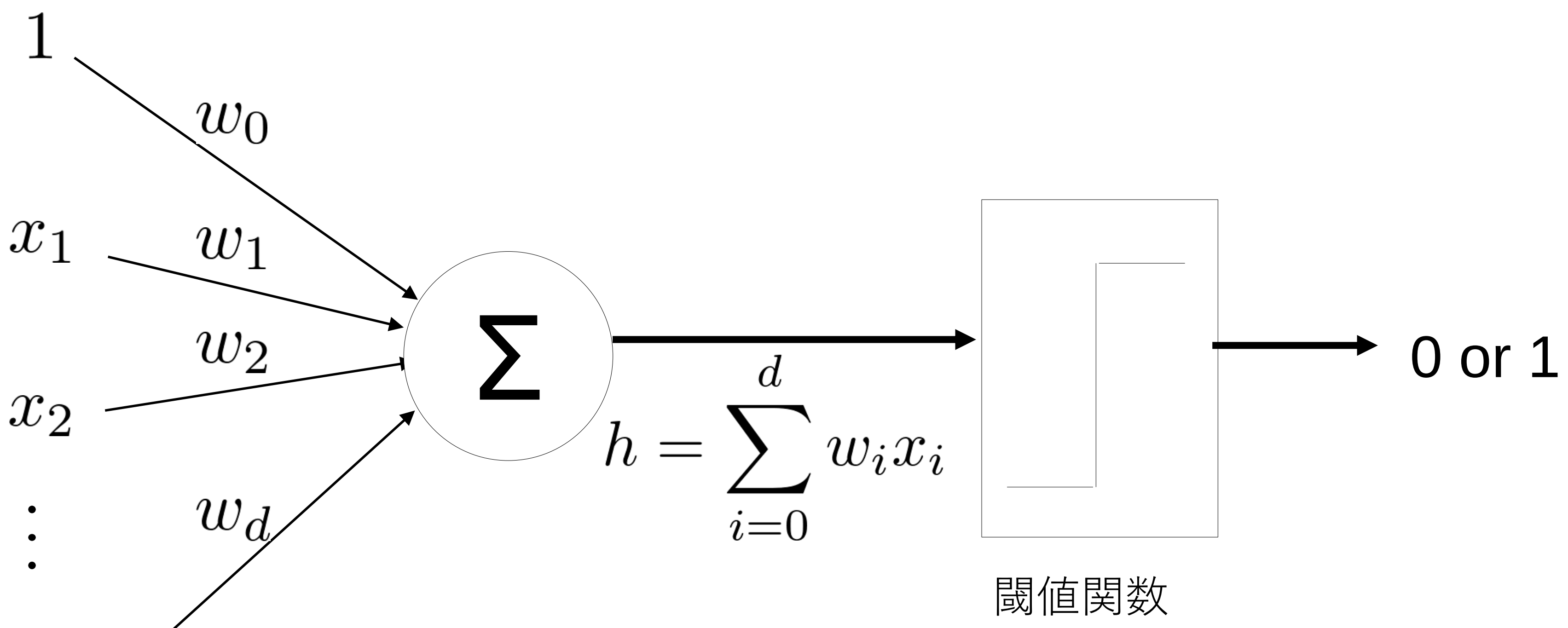
現時点では脳の
モデル化ではない

シナプスから受け取る神経伝達物質の量が一定量を超えると、その細胞も興奮して神経伝達物質を分泌する



# 8.1 ニューラルネットワークの計算ユニット

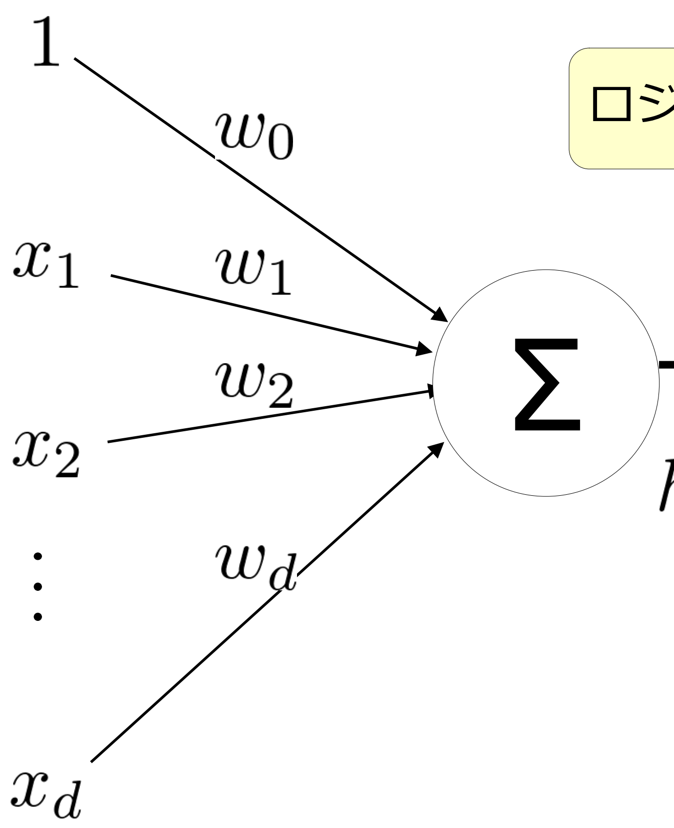
- 初期のニューロンモデル（McCulloch&Pittsモデル）
  - ◆ 活性化関数に閾値関数を用いたパーセプトロン
  - ◆ $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} = 0$ という特徴空間上の線形識別面を表現




$$f(h) = \begin{cases} 0 & (h < 0) \\ 1 & (h \geq 0) \end{cases}$$

# 8.1 ニューラルネットワークの計算ユニット

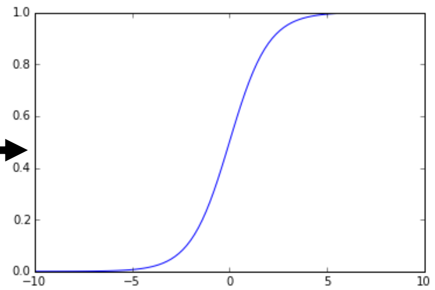
- 多階層で学習可能なユニットへ
  - ◆ 活性化関数に微分可能なシグモイド関数を用いる




ロジスティック識別と同じ

$$h = \sum_{i=0}^{d} w_i x_i$$

活性化関数




シグモイド関数

$g$

$0 \leq g \leq 1$

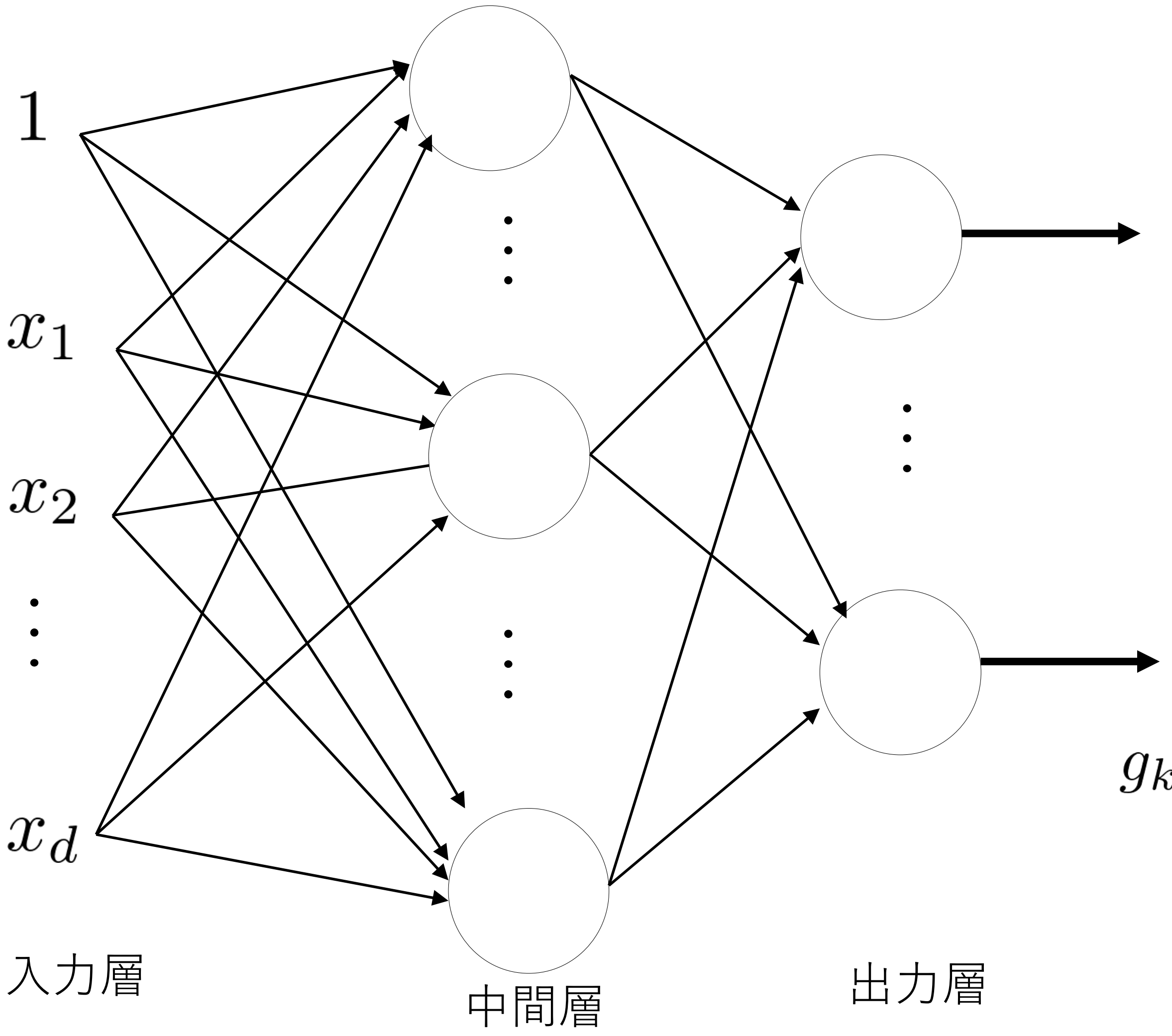
$$\sigma(h) = \frac{1}{1 + e^{-h}}$$

$$\sigma'(h) = \sigma(h) \cdot (1 - \sigma(h))$$

# 8.2フィードフォワードネットワーク

- フィードフォワード型
  - ◆ 非線形関数ユニットの階層的組み合わせ

特徴空間上で複雑な非線形識別面が実現できる



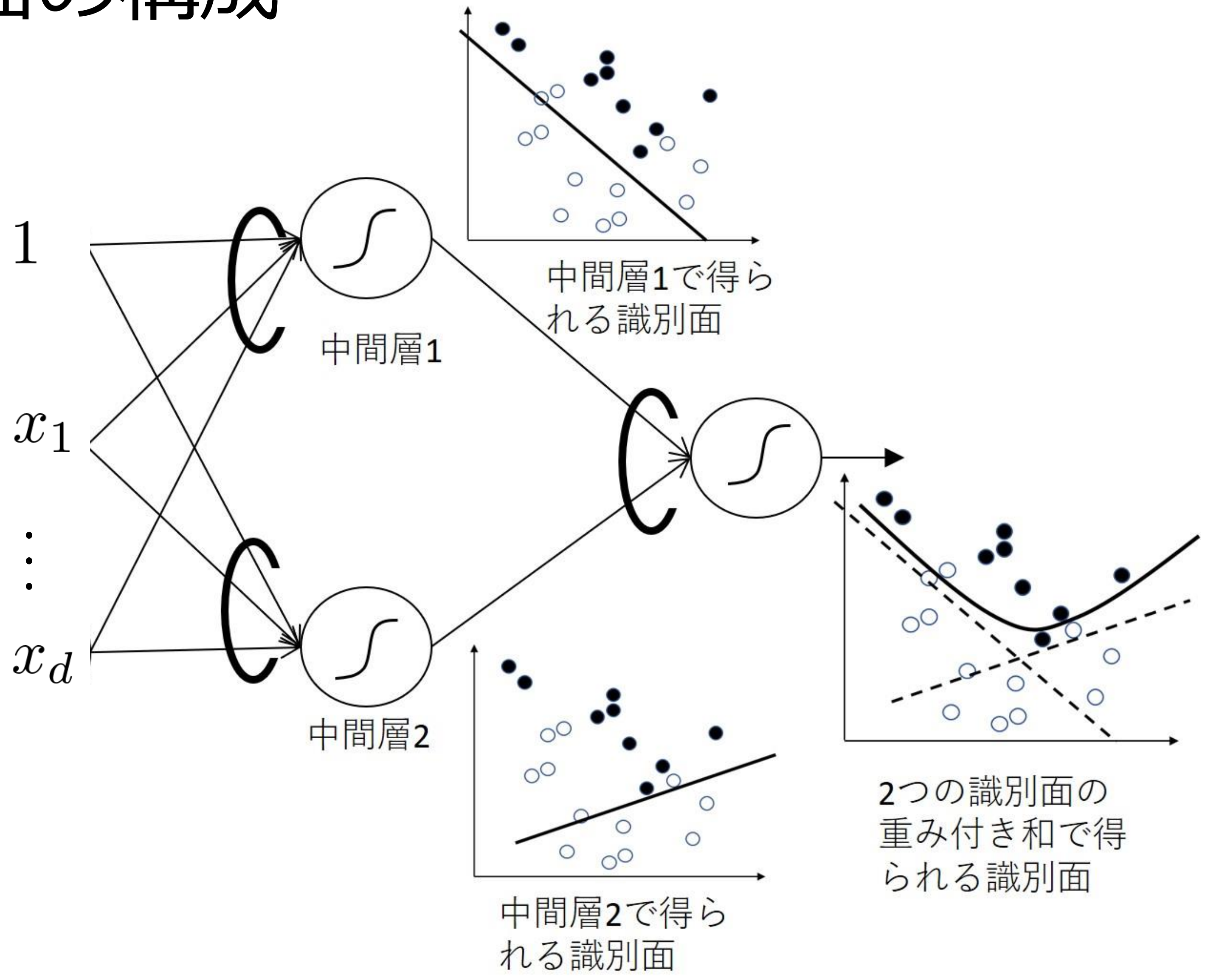

多クラス識別の出力層には活性化関数として以下のsoftmax関数を用いる

$$g_k = \frac{\exp(h_k)}{\sum_{j=1}^{c} \exp(h_j)}$$

2クラスの場合はシグモイド関数と同じ

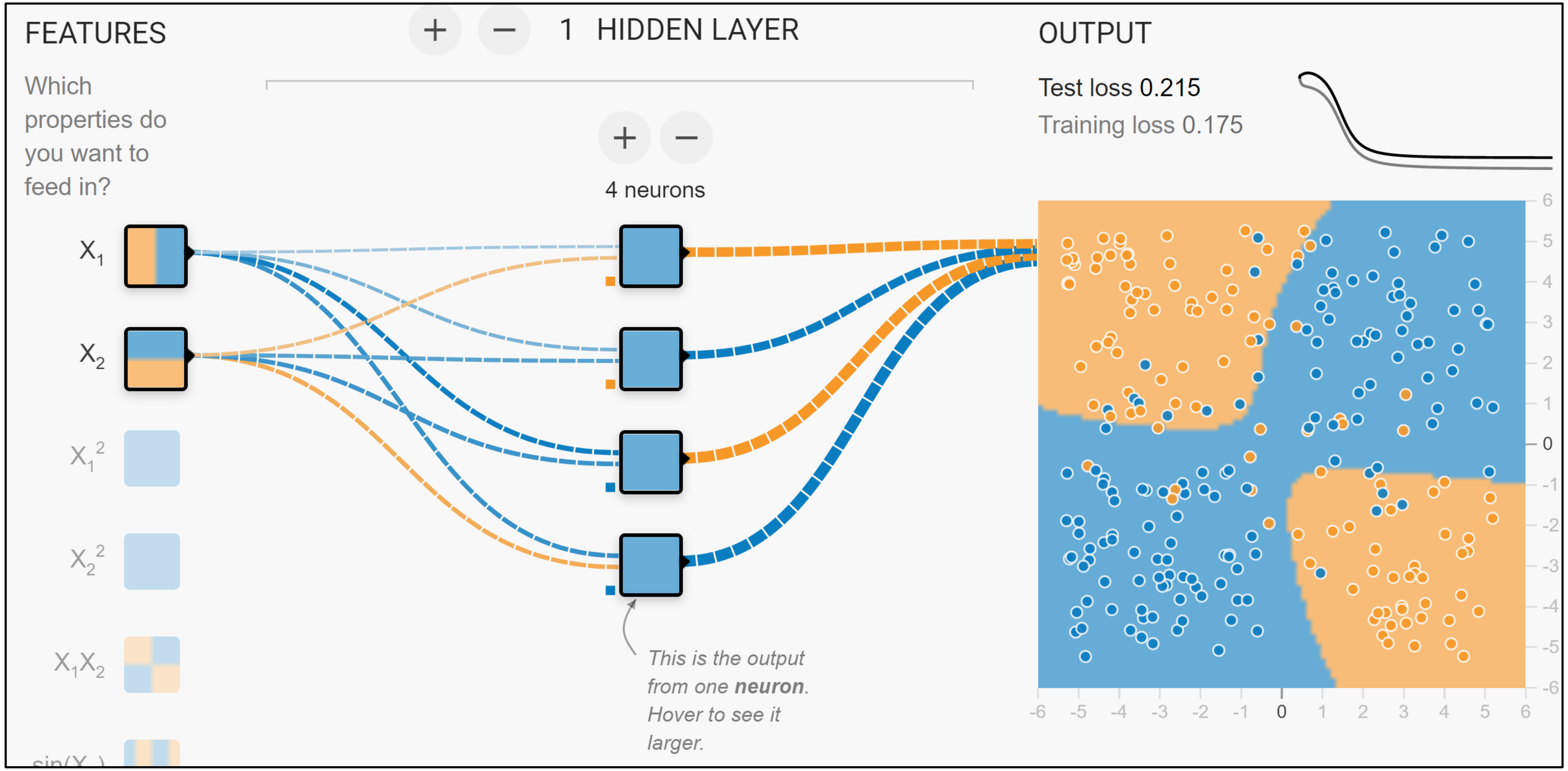
# 8.2フィードフォワードネットワーク

- 複雑な識別面の構成



# 8.2フィードフォワードネットワーク

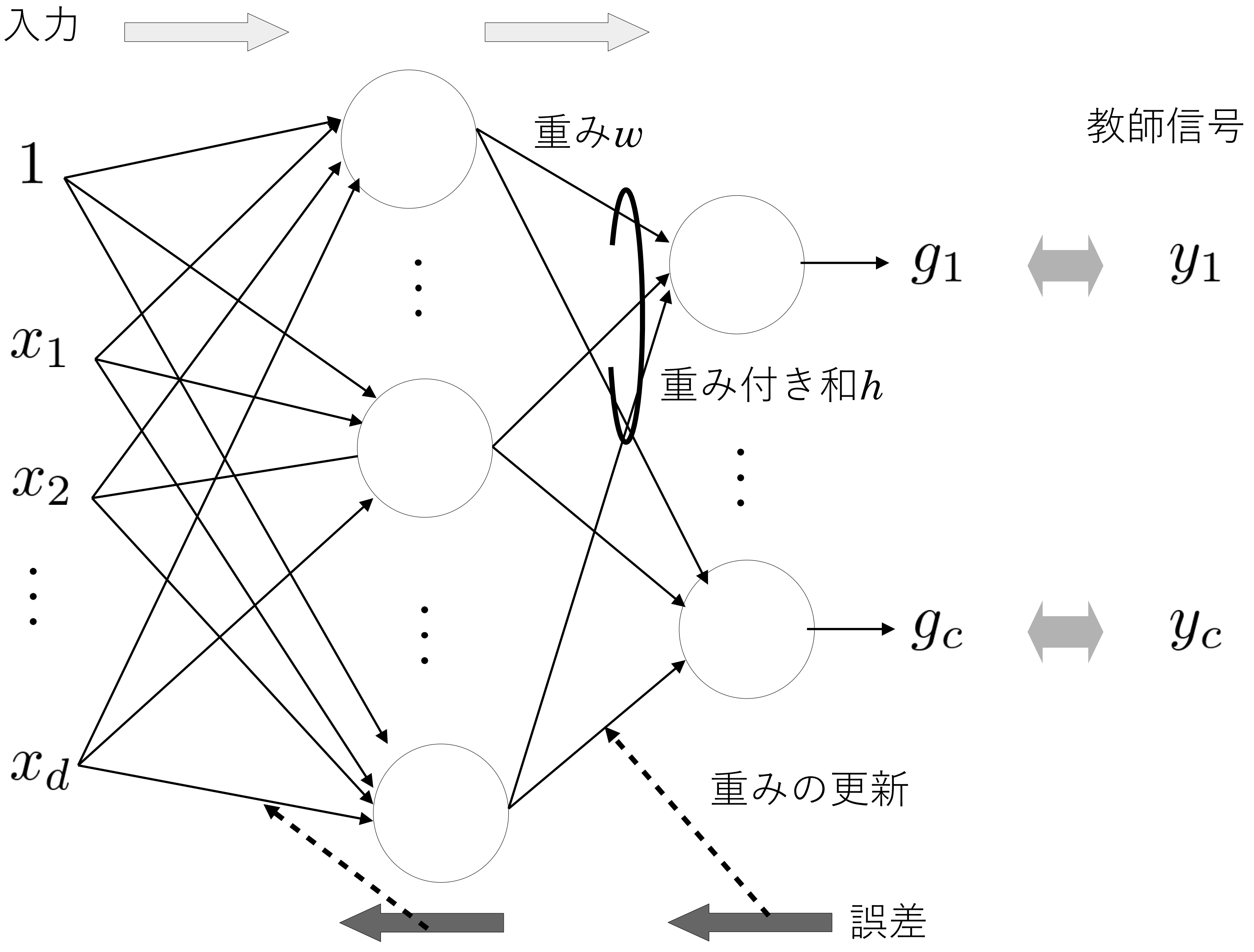
- 複雑な識別面の構成




http://playground.tensorflow.org/

# 8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- フィードフォワード型ネットワークの学習



# 8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- データ集合 $D$

$$\{(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_i)\} \quad (i = 1, \ldots, N)$$

$\boldsymbol{y}_i$: $c$次元のone-hotベクトル
$c$: クラス数

- 特定のデータ $\boldsymbol{x}$ に対する二乗誤差

$$E(\boldsymbol{w}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{c} (g_j - y_j)^2$$

- 確率的最急勾配法による重み $\boldsymbol{w}$ の更新

$$w' \leftarrow w - \eta \frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial w}$$

# 8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- 合成微分の公式の適用

$$\frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial w} = \frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial h}\frac{\partial h}{\partial w}$$

重み$w$で接続しているユニットの入力 $g_{in}$
中間層の場合は、

$$h = \sum_i w_i x_i$$

から$x$が得られる

$$\epsilon = \frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial h} = \frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial g}\frac{\partial g}{\partial h}$$

$g$は$w$で結合しているユニットの出力

活性化関数の微分
$g(1-g)$

出力層の場合 $$\frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial g} = g - y$$

$j$は出力層のユニット

中間層の場合 $$\frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial g} = \sum_j \frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial h_j}\frac{\partial h_j}{\partial g} = \sum_j \epsilon_j w_j$$

# 8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- 誤差逆伝播法
  1. リンクの重みを小さな初期値に設定
  2. 個々の学習データ $(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_i)$ に対して以下繰り返し
     - 入力 $\boldsymbol{x}_i$ に対するネットワークの出力 $\boldsymbol{g}_i$ を計算

     a. 出力層の $j$ 番目のユニットに対してエラー量 $\varepsilon_j$ 計算

     $$\epsilon_j \leftarrow g_j(1-g_j)(g_j-y_j)$$

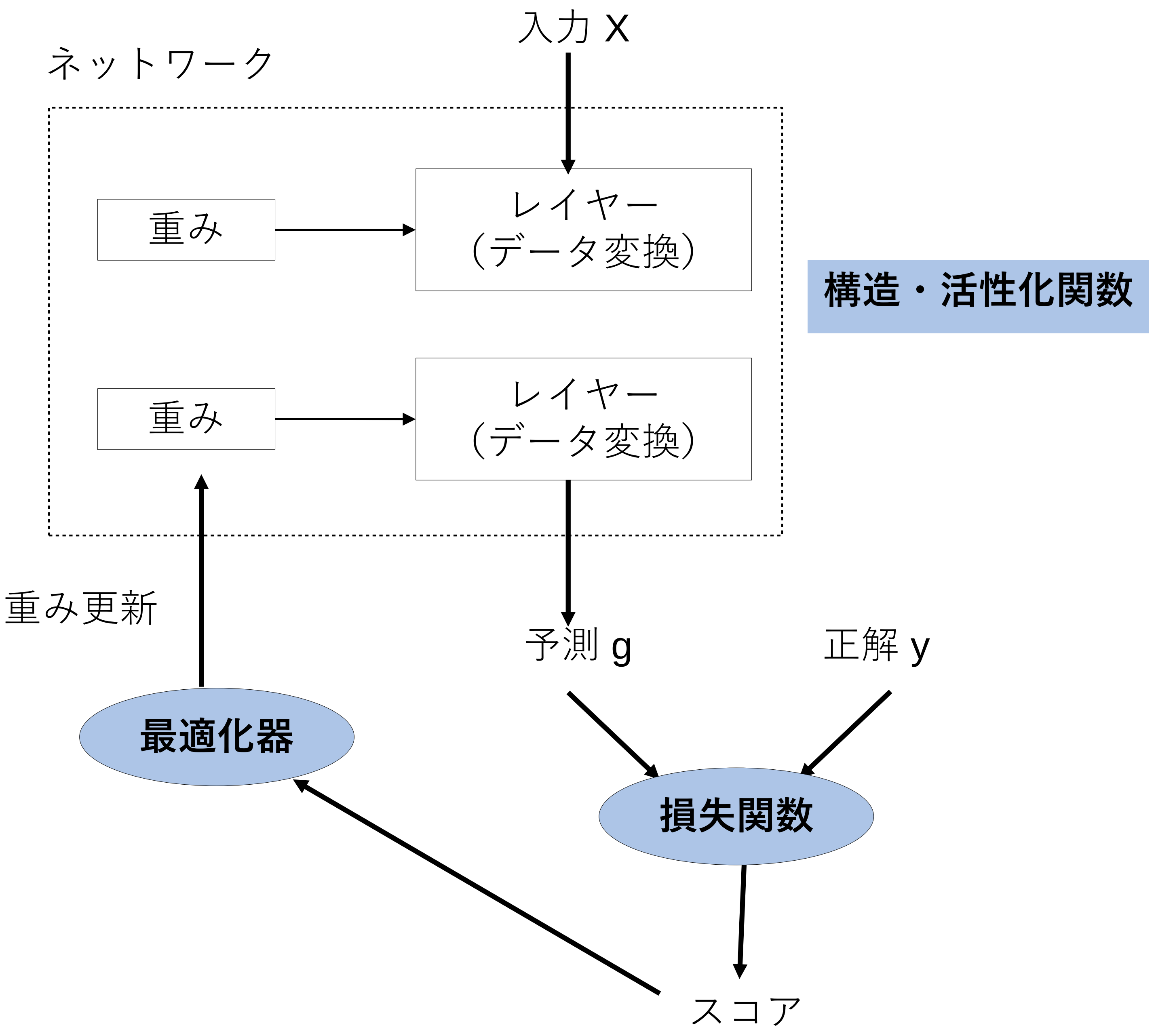
     b. 中間層の $k$ 番目のユニットに対してエラー量 $\varepsilon_k$ 計算

     $$\epsilon_k \leftarrow g_k(1-g_k)\sum_{j=1}^{c} w_{kj}\epsilon_j$$

     c. 重みの更新

     $$w' \leftarrow w - \eta\epsilon g_{in}$$

# ニューラルネットワークによる学習の枠組み



# 損失関数

- 回帰問題
  - ◆ 二乗誤差
  - ◆ 外れ値の影響を小さくしたい場合はHuber損失
    - 一定の範囲内は二乗誤差、範囲外は線形損失
- 識別問題
  - ◆ クロスエントロピー

$$E(\boldsymbol{w}) \equiv -\sum_{\boldsymbol{x}_i \in D} y_i \log(g_i)$$

理論的には確率分布$y$と確率分布$g$の近さ

# 最適化器

- 最急勾配法
  - ◆ モーメンタム（慣性）の導入
    - 更新の方向に勢いを付けることで収束を早め、振動を抑制する

$$\boldsymbol{v}_t = \gamma \boldsymbol{v}_{t-1} + \eta \frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{w}}$$

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \boldsymbol{v}_t$$

# 最適化器

データ数が多いときは Adam、
少ないときは L-BFGS が勧められている

- 準ニュートン法(L-BFGS)
  - ◆ 2次微分（近似）を更新式に加える
- AdaGrad
  - ◆ 学習回数と勾配の2乗を用いた学習係数の自動調整
- RMSProp
  - ◆ 学習係数調整の改良：勾配の2乗の指数平滑移動平均を用いることで直近の変化量を反映
- Adam:Adaptive Moment Estimation
  - ◆ モーメントの拡張：分散に関するモーメントも用いる
  - ◆ まれに観測される特徴軸に対して大きく更新する効果

# kerasのコーディング

- NNの構造と活性化関数の指定

```
model = Sequential([
    Dense(512, input_shape=(784,)),
    Activation('sigmoid'),
    Dense(10),
    Activation('softmax')])
```

*最初の層のみ、ユニット数と入力の次元数の指定が必要*

2*階層目以上はユニット数の指定のみ*

- Dense: 密結合層
  - 隣接する層間のすべてのユニット間で結合をもつ
- Activation: 活性化関数
  - ‘softmax’: ソフトマックス関数
  - ‘sigmoid’: シグモイド関数 $f(x) = 1 / (1 + \exp(-x))$
  - ‘tanh’: 双曲線正接 $f(x) = \tanh(x)$
  - ‘relu’: rectified linear関数$f(x) = \max(0, x)$

# kerasのコーディング

- modelのコンパイル

```
model.compile(loss='categorical_crossentropy',
                            optimizer='adam', metrics=['acc'])
```

- ◆ 損失関数、最適化器、評価指標（複数可）を指定
- ◆ optimizer: 最適化手法
  - ‘sgd’：確率的最急降下法
  - ‘adam’：Adaptive Moment Estimation
- ◆ metrics: 評価指標
  - ‘acc’：正解率
  - ‘mae’：平均二乗誤差

# kerasのコーディング

- 学習

```
model.fit(X_train, y_train, batch_size=200, epochs=3)
```

  - ミニバッチのサイズと繰り返し数を指定
  - 繰り返し毎に損失関数の値とmetricsで指定した値が表示される

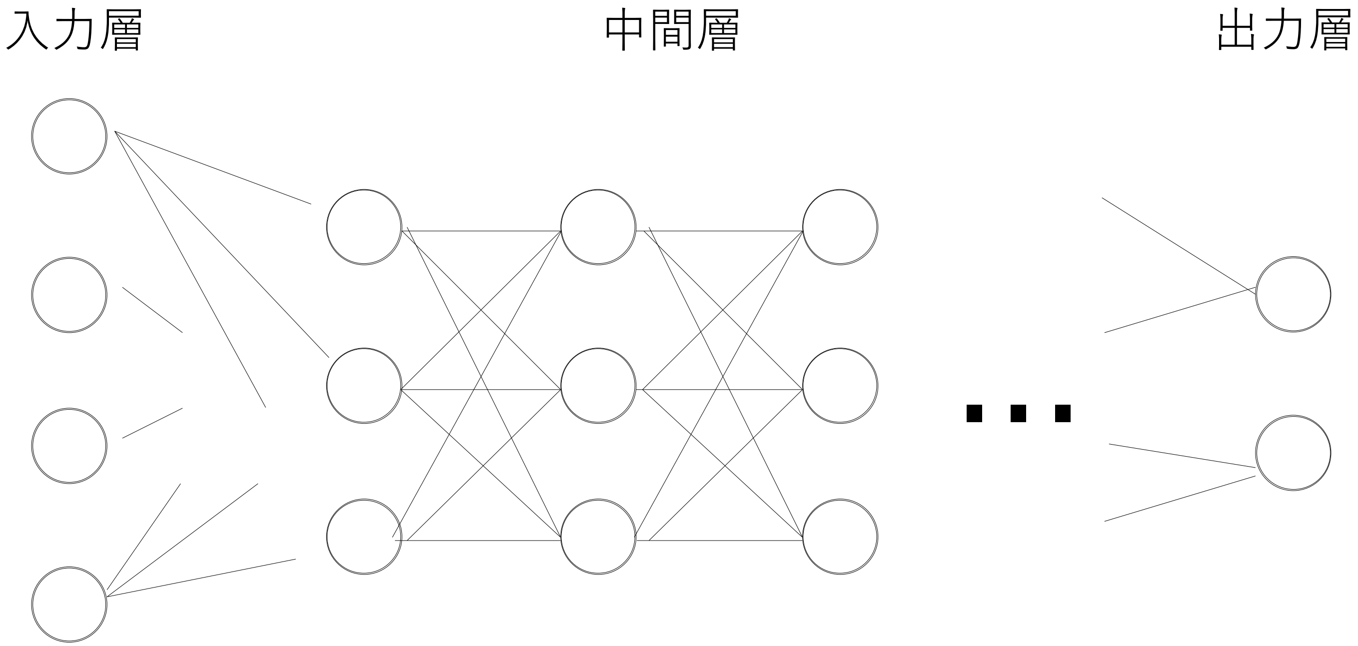
- 評価

```
score = model.evaluate(X_test, y_test)
```

  - score[0]は損失関数の値
  - score[1]以降はmetricsで指定したもの

# 8.3 ニューラルネットワークの深層化

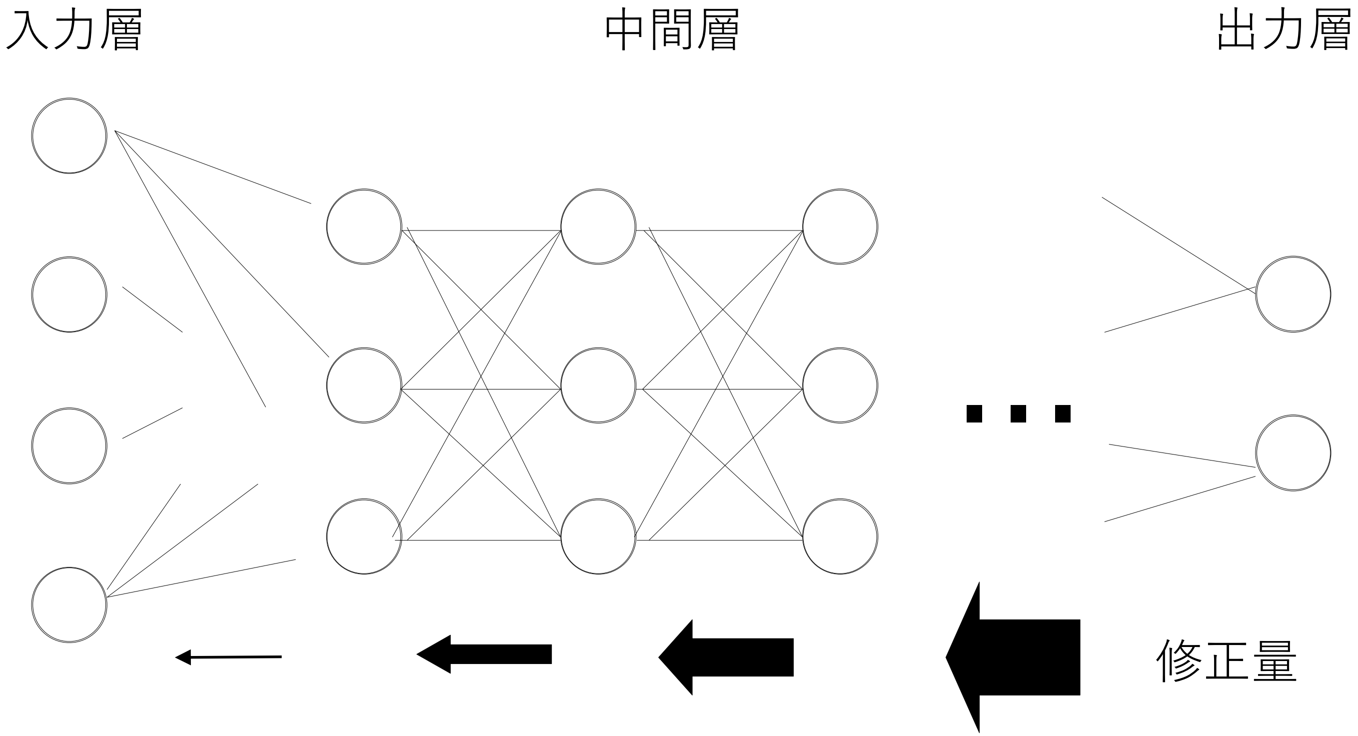
- ニューラルネットワークの構造の決定
  - ◆ 中間層の数：その層で実現される非線形変換の複雑さ
  - ◆ 階層数：低次の特徴表現から高次の特徴表現への段階的な変換を実現



# 8.3.1 勾配消失問題

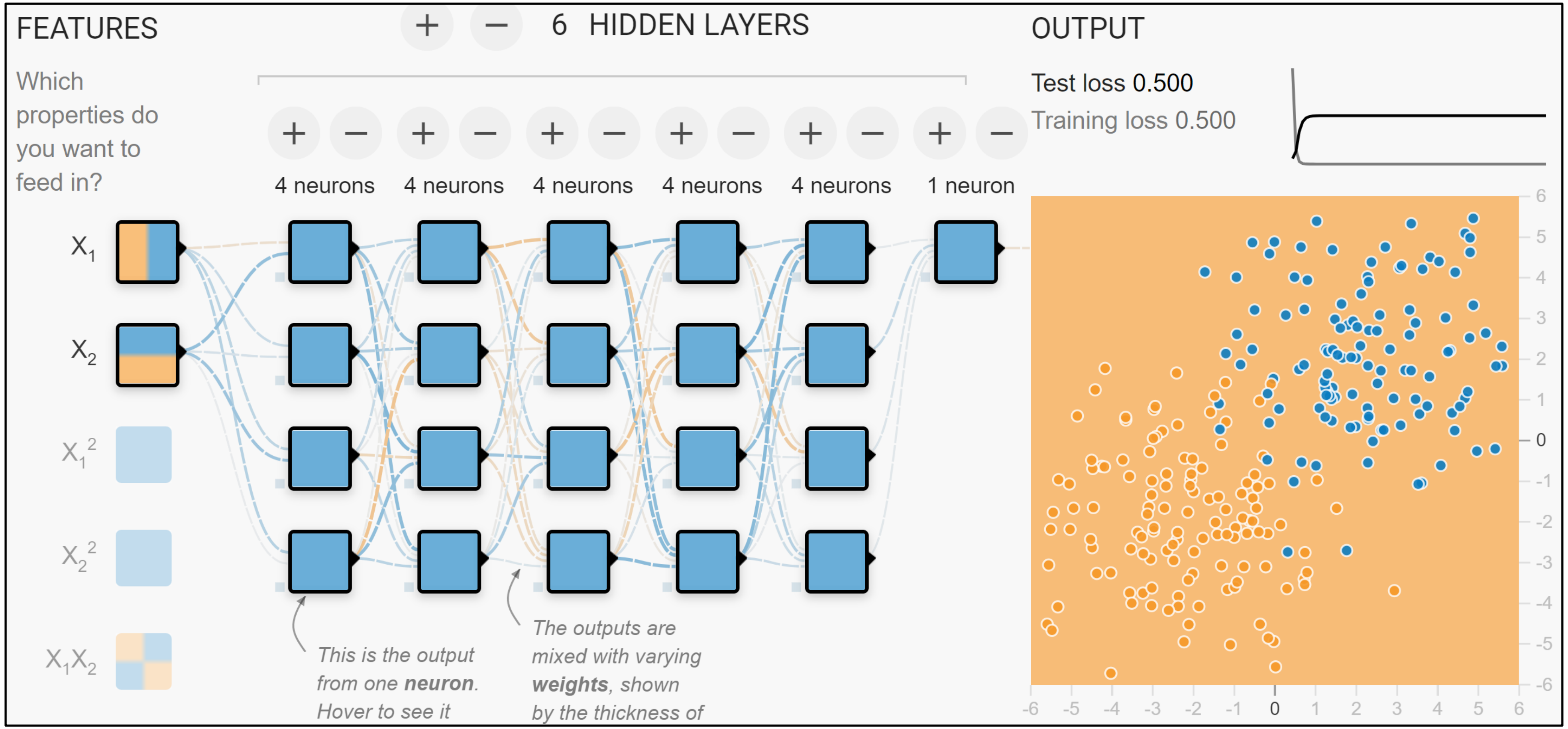
- 多階層における誤差逆伝播法の問題点
  - ◆ 修正量が消失／発散する

順方向：非線形　　逆方向：線形



# 8.3.1 勾配消失問題

- 多階層での学習

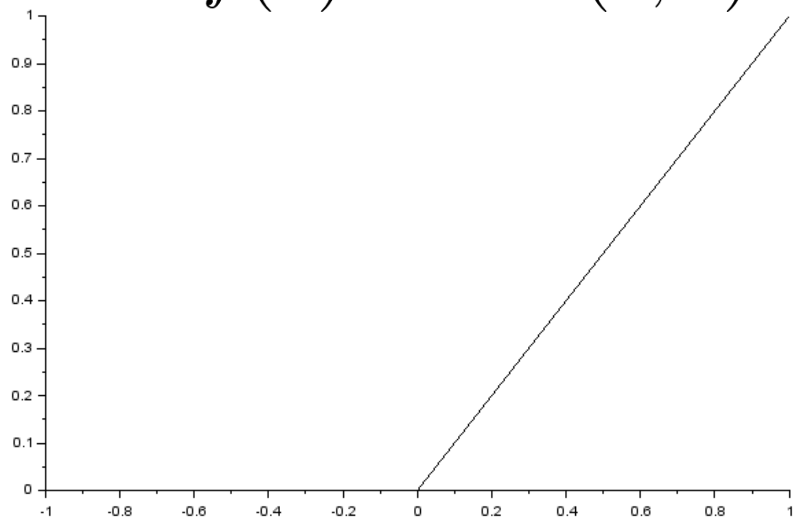



http://playground.tensorflow.org/

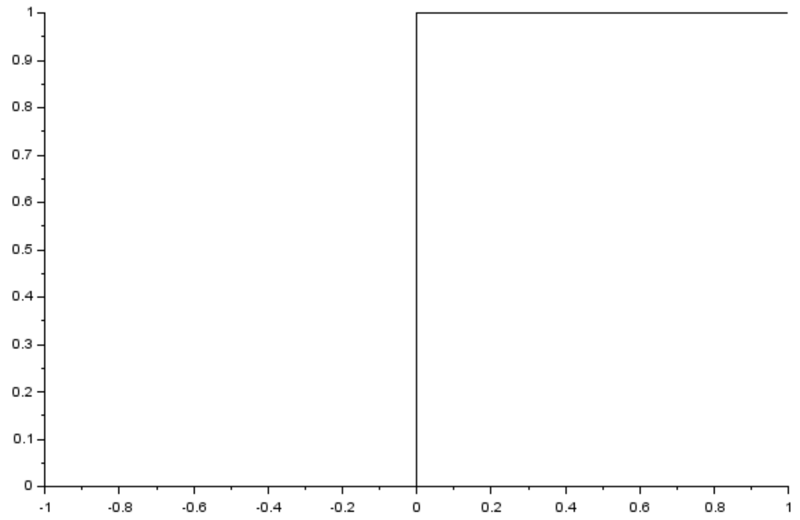
# 8.3.2 様々な活性化関数

- 活性化関数をrectified linear関数 (ReLU) に

$$f(x) = \max(0, x)$$




(a) rectified linear 関数



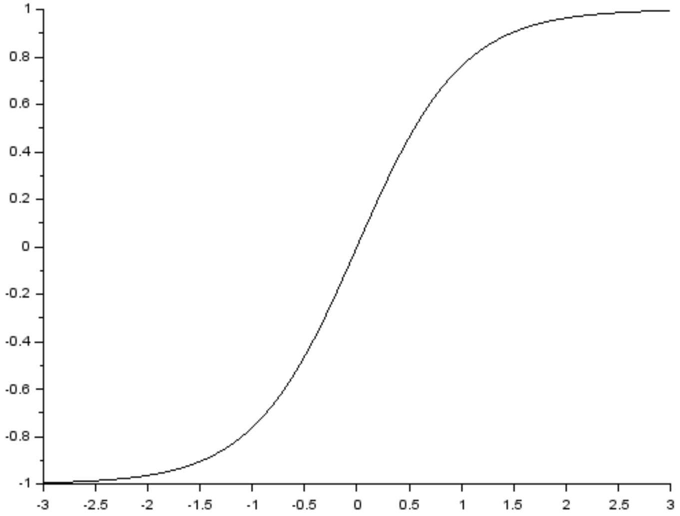

(b) (a)の導関数

- ReLUの利点
  - ◆ 誤差消失が起こりにくい
  - ◆ 0を出力するユニットが多くなる

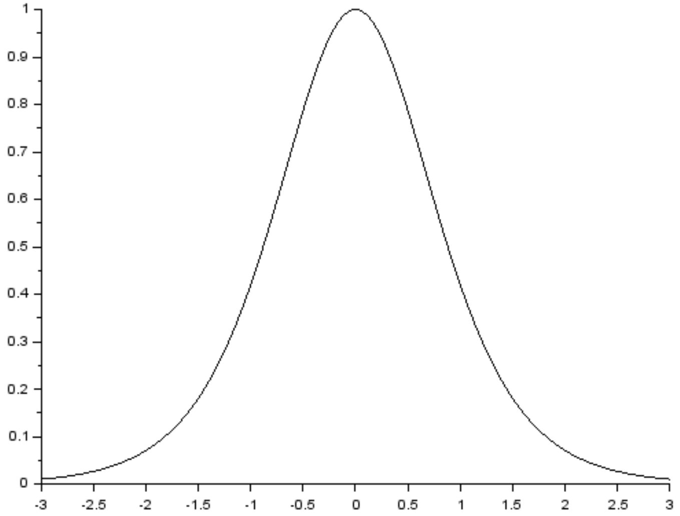
# 8.3.2 様々な活性化関数

- 活性化関数を双曲線正接tanh関数に

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^{-x} + e^x}$$




(a) tanh 関数




(b) (a)の導関数

- tanhの利点
  - ◆ 誤差消失が起こりにくい
    - cf) sigmoidは微分係数の最大値が0.25

# まとめ

- ニューラルネットは、ロジスティック識別を多段階にしたもので、非線形識別面を実現している
- ニューラルネットは誤差逆伝播法で学習する
- kerasを用いたニューラルネットのコーディング
- 多階層ニューラルネットの学習は、勾配消失が問題であったが、活性化関数の工夫によって回避可能