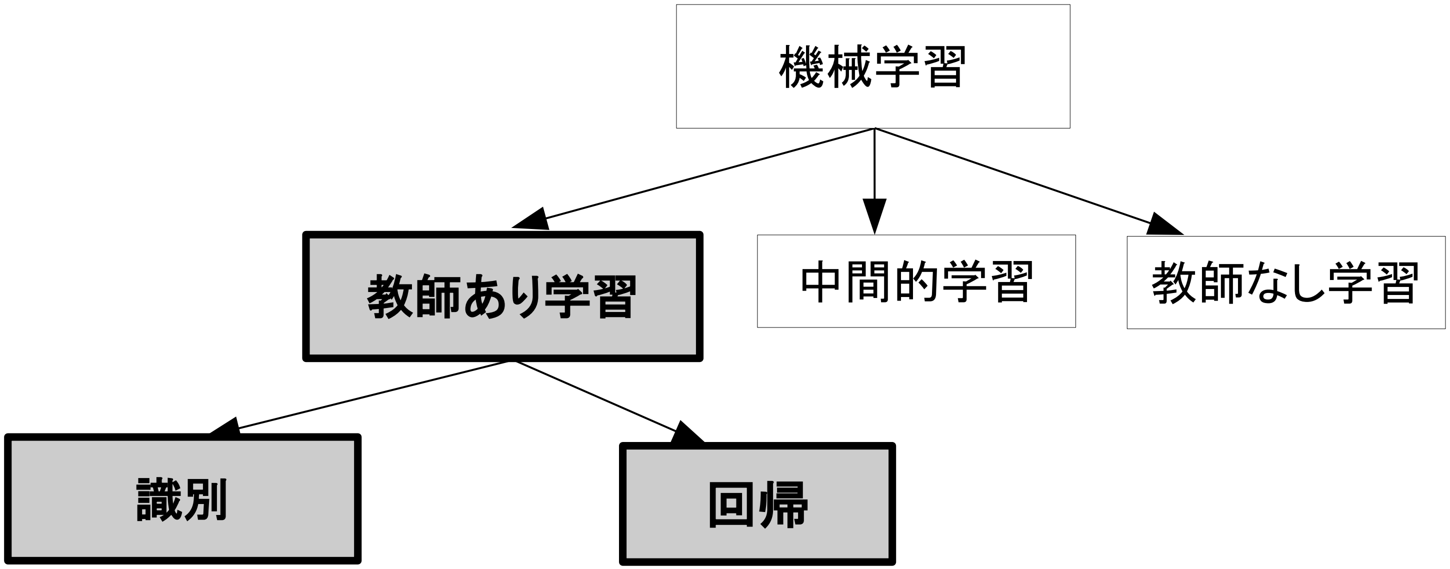
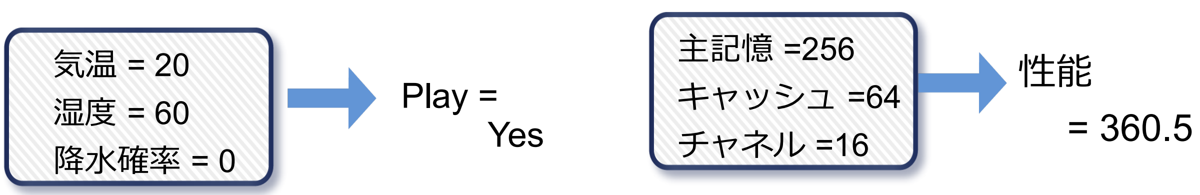
8. ニューラルネットワーク



- 数値特徴

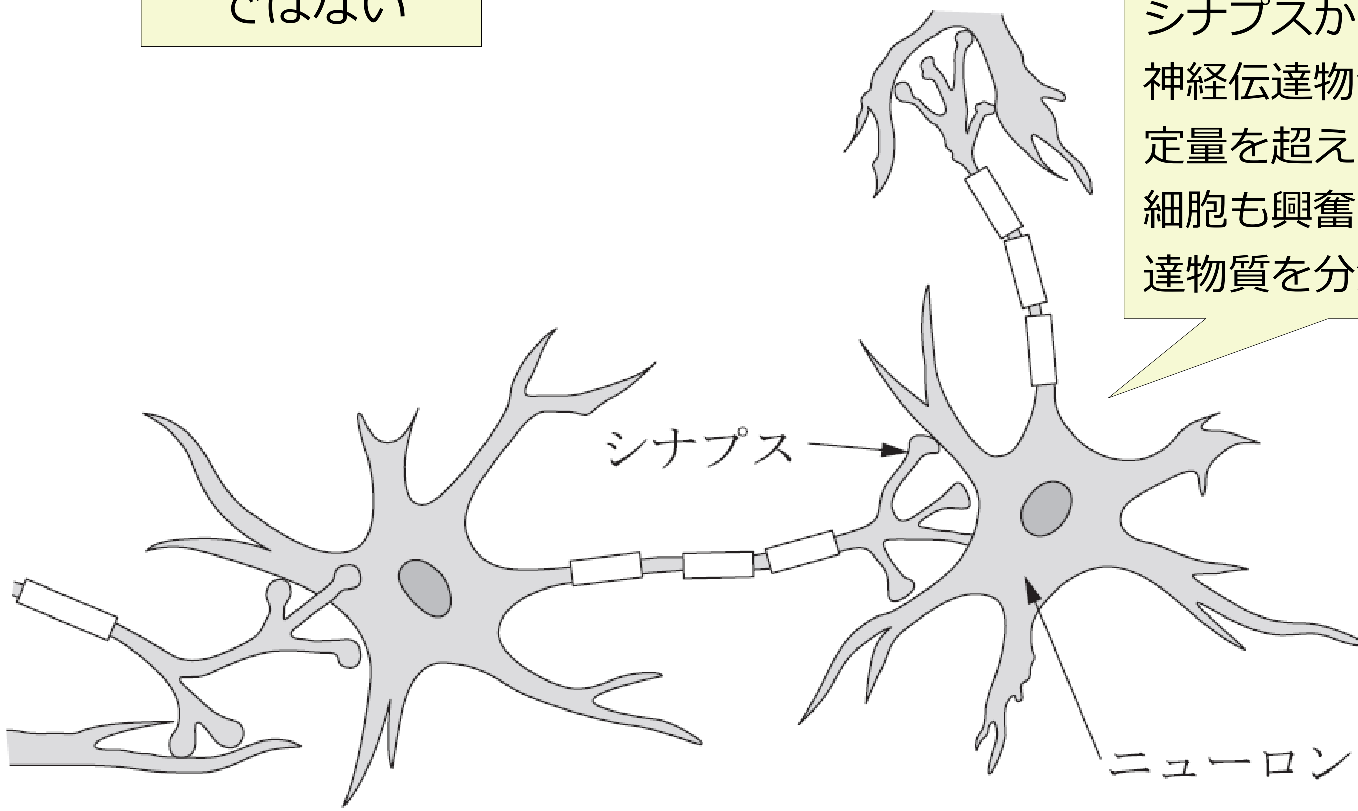


8. ニューラルネットワーク

- 神経細胞の情報伝達メカニズムを単純にモデル化

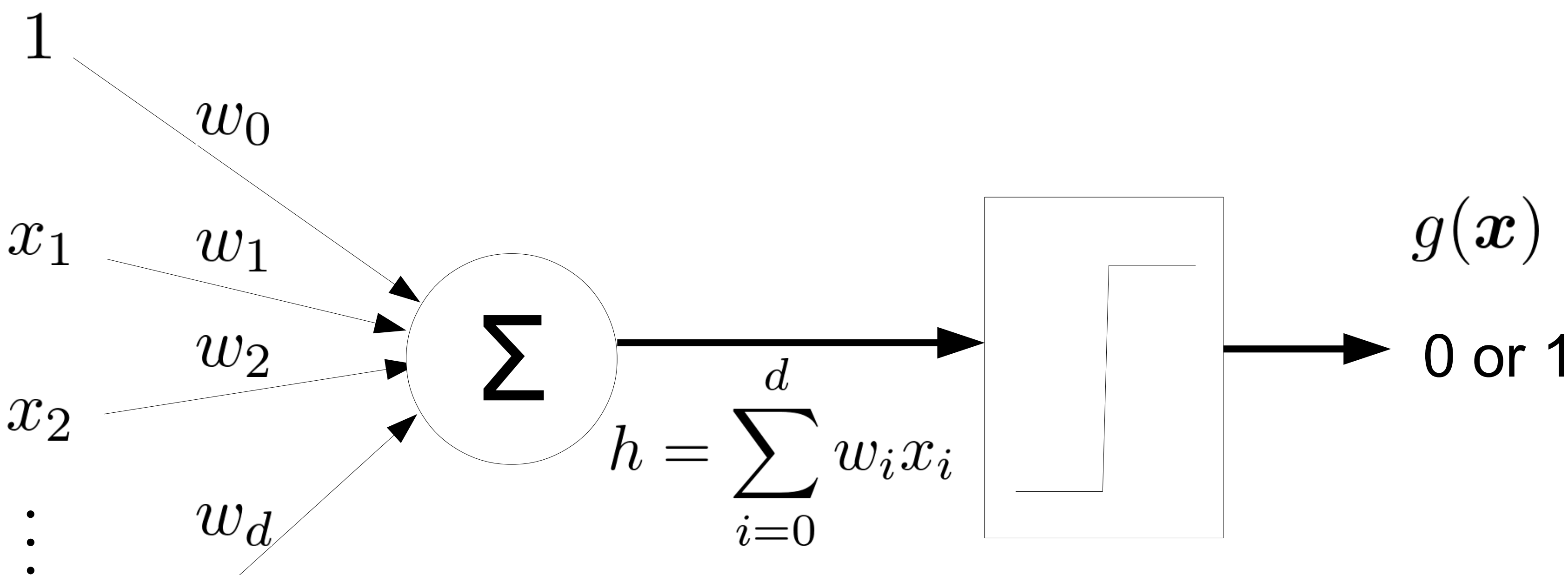
脳のモデル化
ではない

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
  - 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識別面を表現



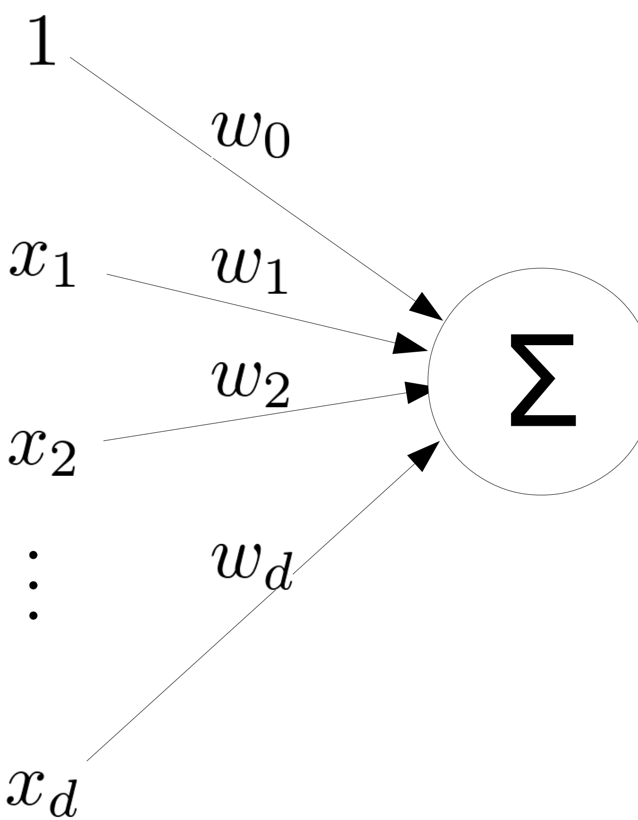
閾値関数

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

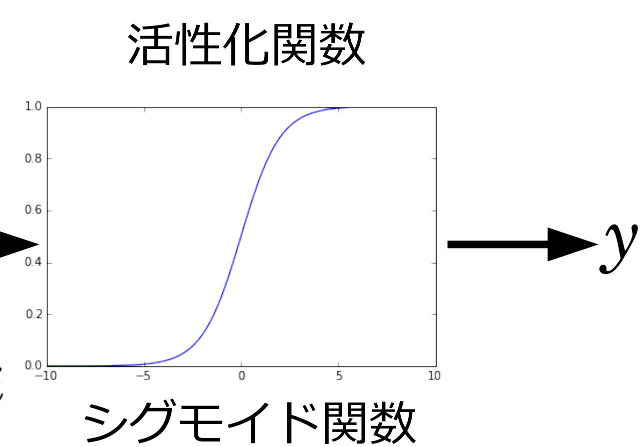
8.1 ニューラルネットワークの計算ユニット

- 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



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

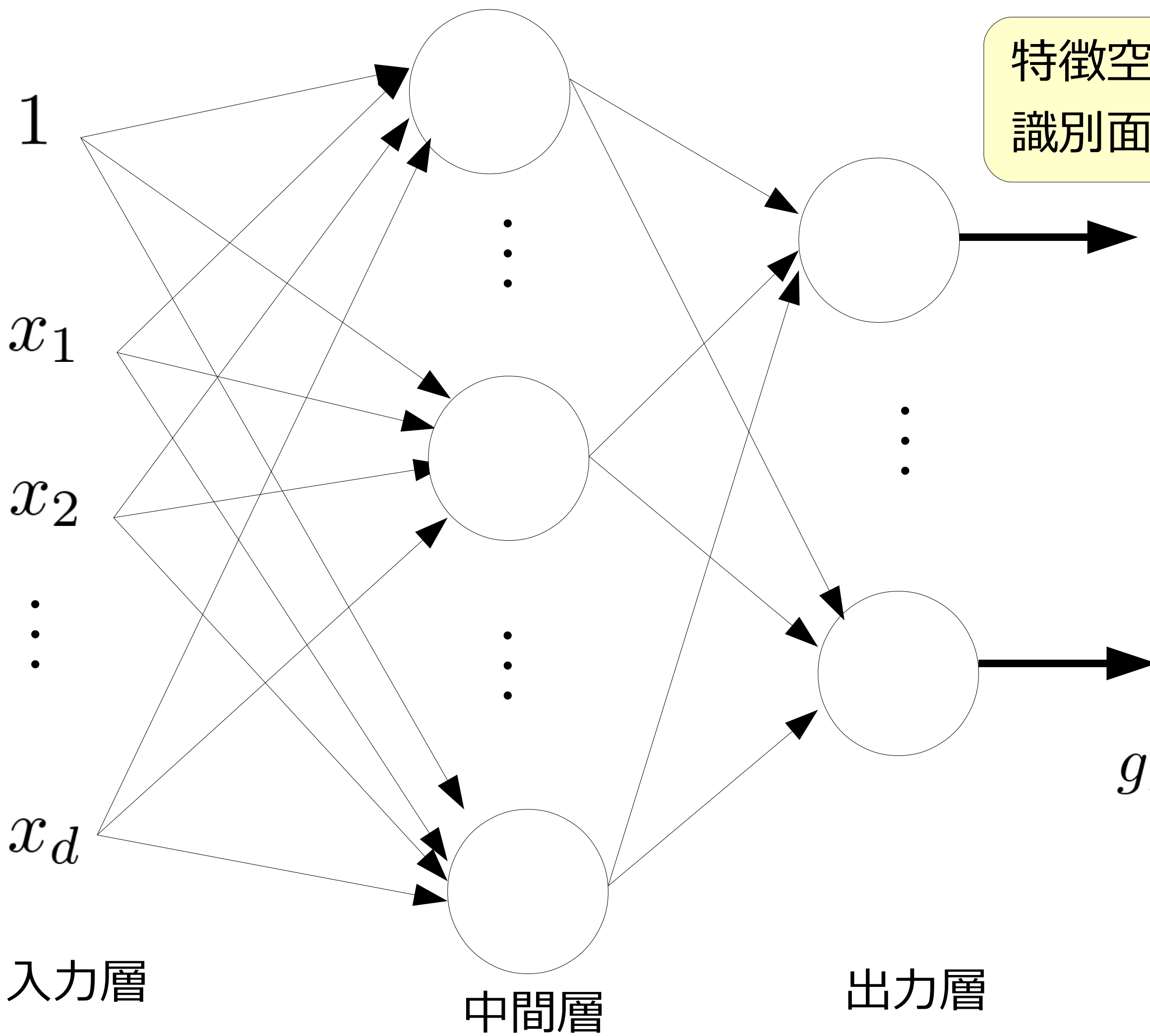


$$\sigma(h) = \frac{1}{1 + e^{-h}}$$

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

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

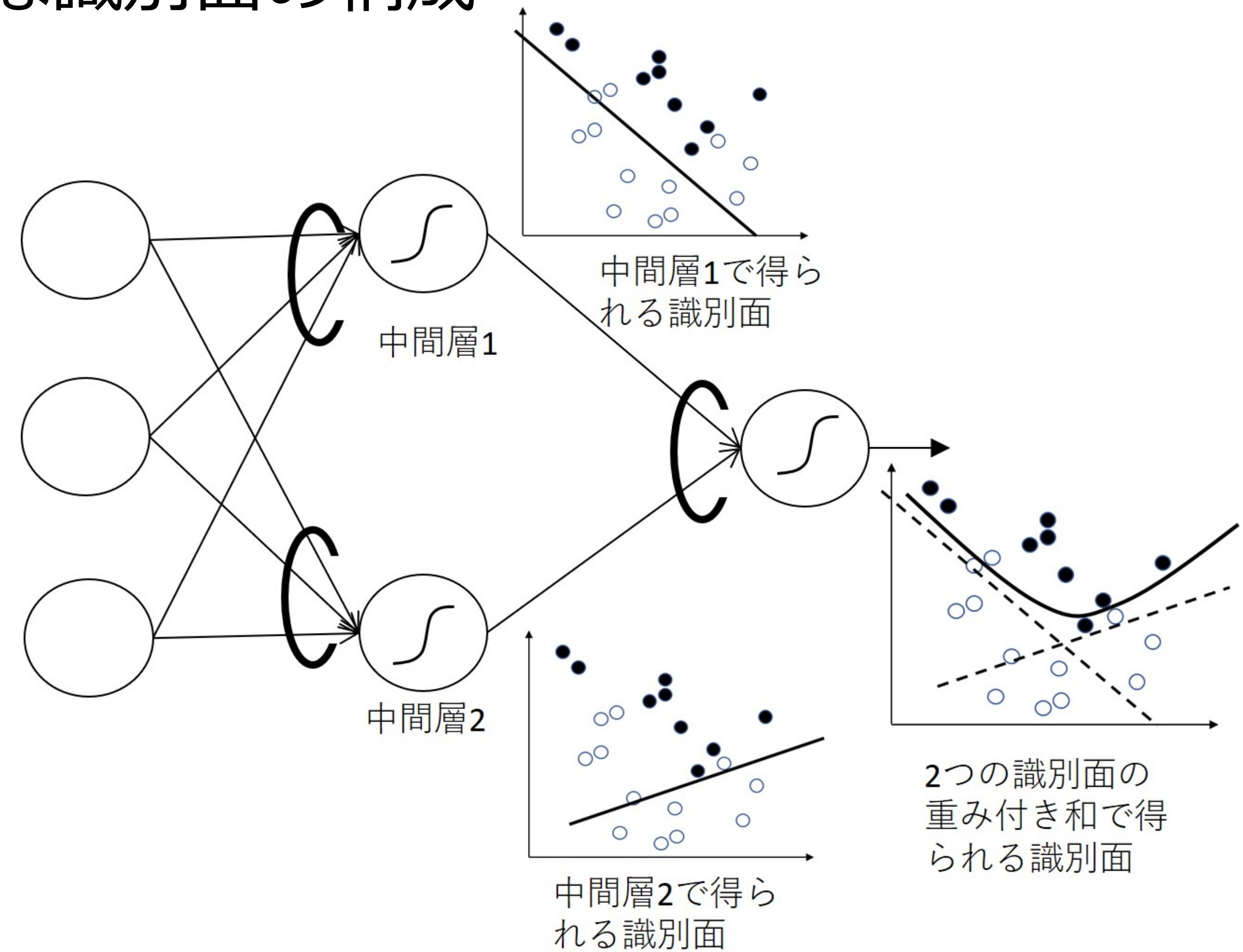
多クラス識別の出力層には活性化関数として以下の softmax 関数を用いる

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

2 クラスの場合はシグモイド関数と同じ

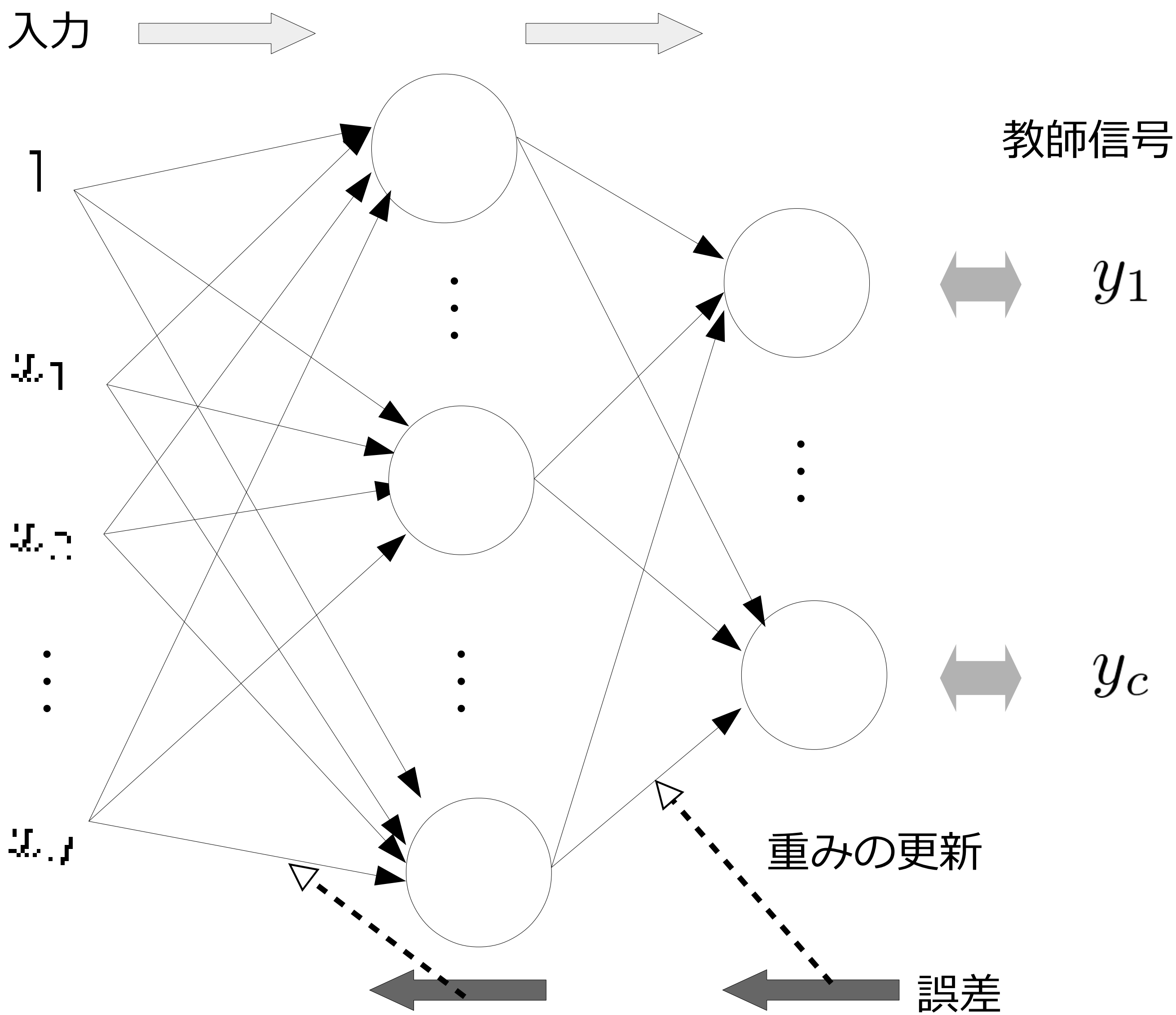
8.2 フィードフォワードネットワーク

- 複雑な識別面の構成



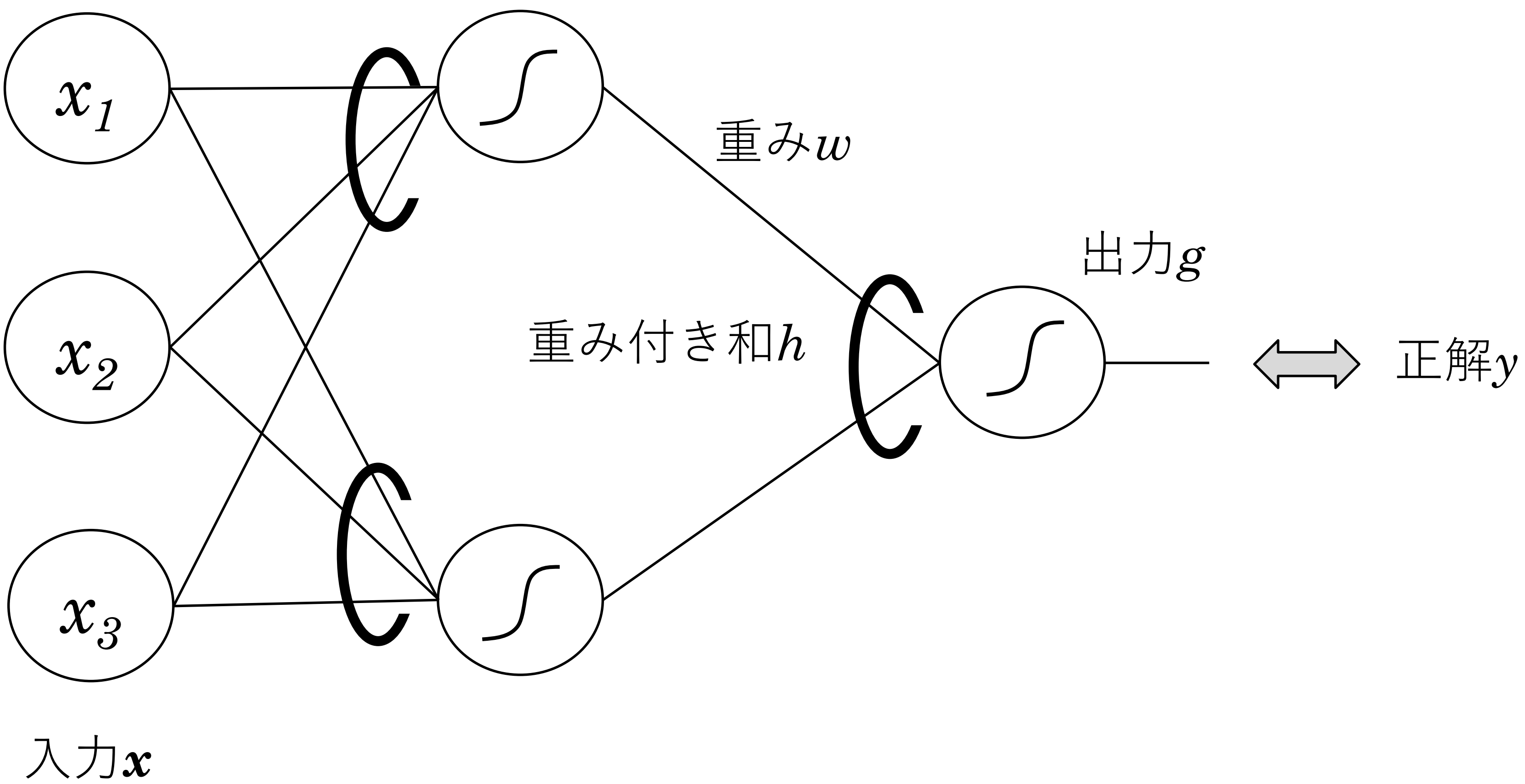
8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- 誤差逆伝播法



8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- 以下の構造を持つニューラルネットワークを仮定



8.2.2 誤差逆伝播法による学習

- データ集合

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

- 誤差関数（二乗誤差）

$$E(\boldsymbol{w}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in D} (g_i - y_i)^2$$

- 最急勾配法による重みの更新

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

この項を求める

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
ユニットの出力
中間層なら

$$h = \sum_i w_i x_i$$

から x が得られる

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

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 $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$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 k 番目のユニットに対してエラー量 ε 計算

$$\epsilon_k \leftarrow g_k(1 - g_k)(g_k - y_k)$$

   b)中間層の h 番目のユニットに対してエラー量 ε 計算

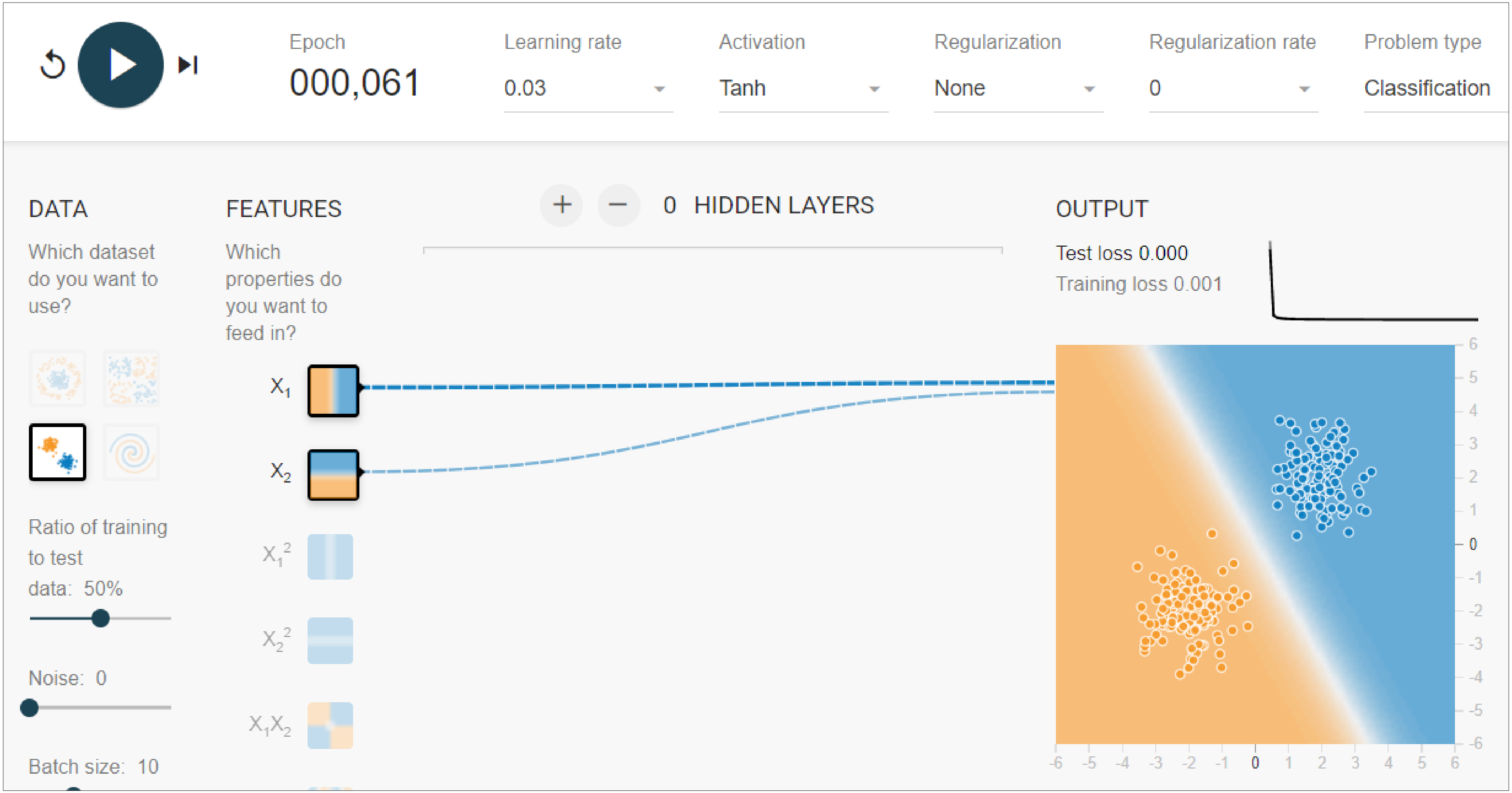
$$\epsilon_h \leftarrow g_h(1 - g_h) \sum_{k \in outputs} w_{kh}\epsilon_k$$

   c)重みの更新

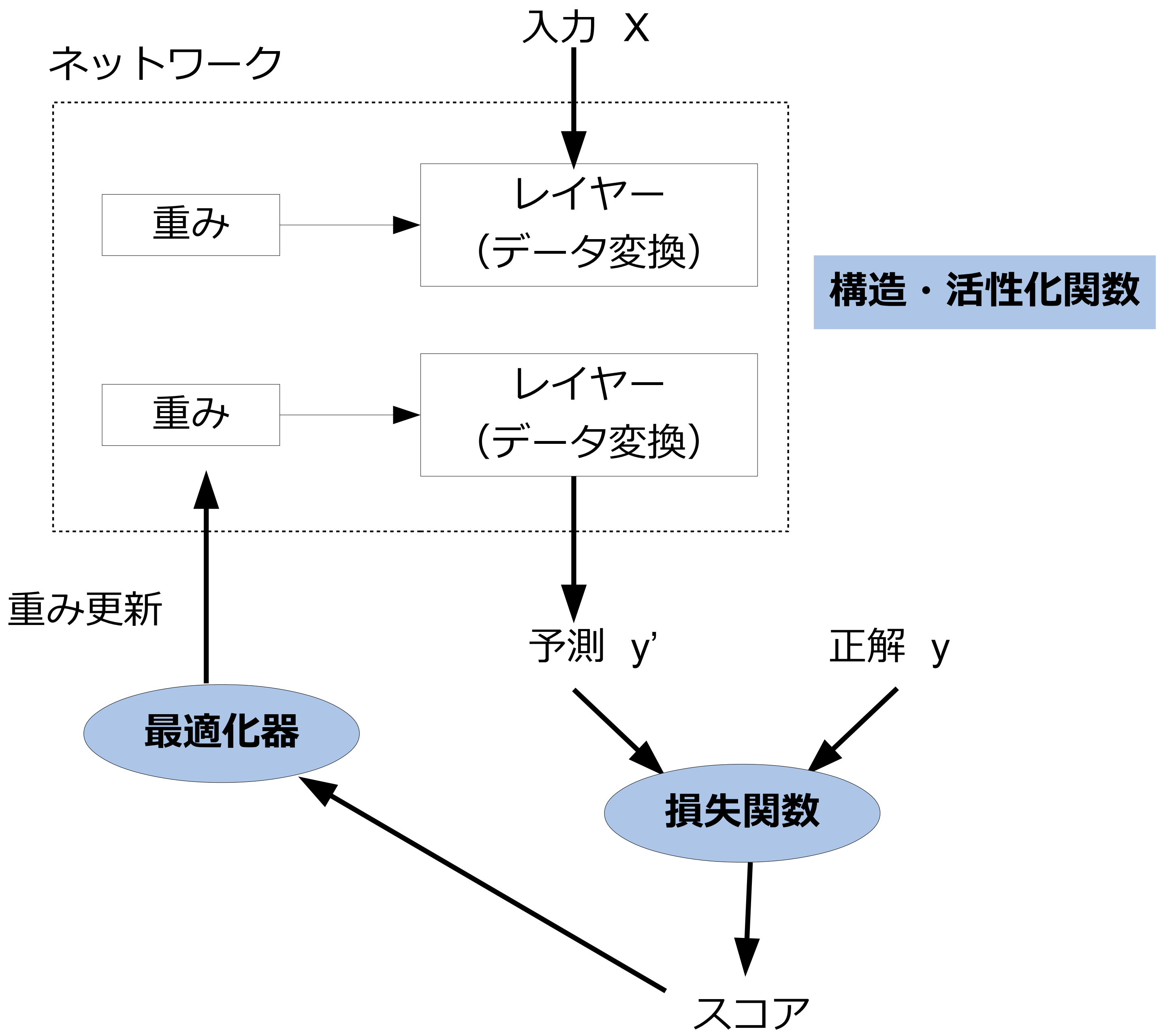
$$w'_{ji} \leftarrow w_{ji} + \eta\epsilon_j x_{ji}$$

学習のシミュレーションサイト

https://playground.tensorflow.org/

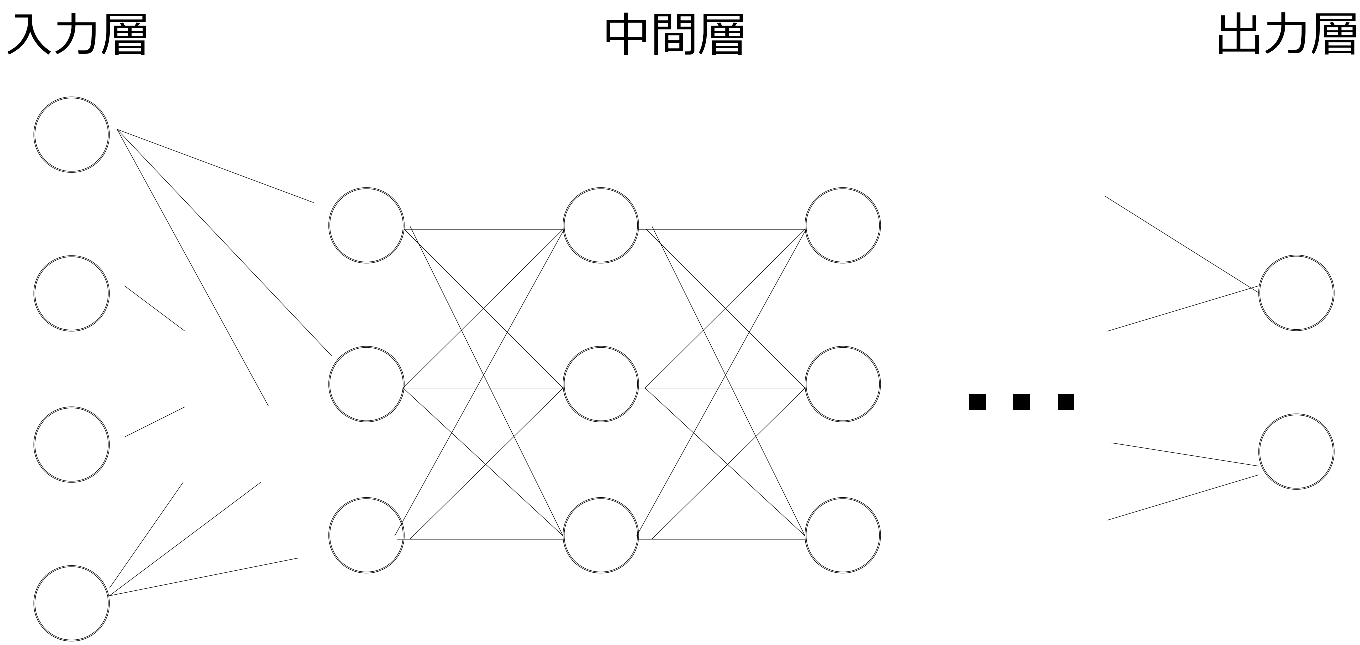


ニューラルネットワークによる学習の枠組み



8.3 ニューラルネットワークの深層化

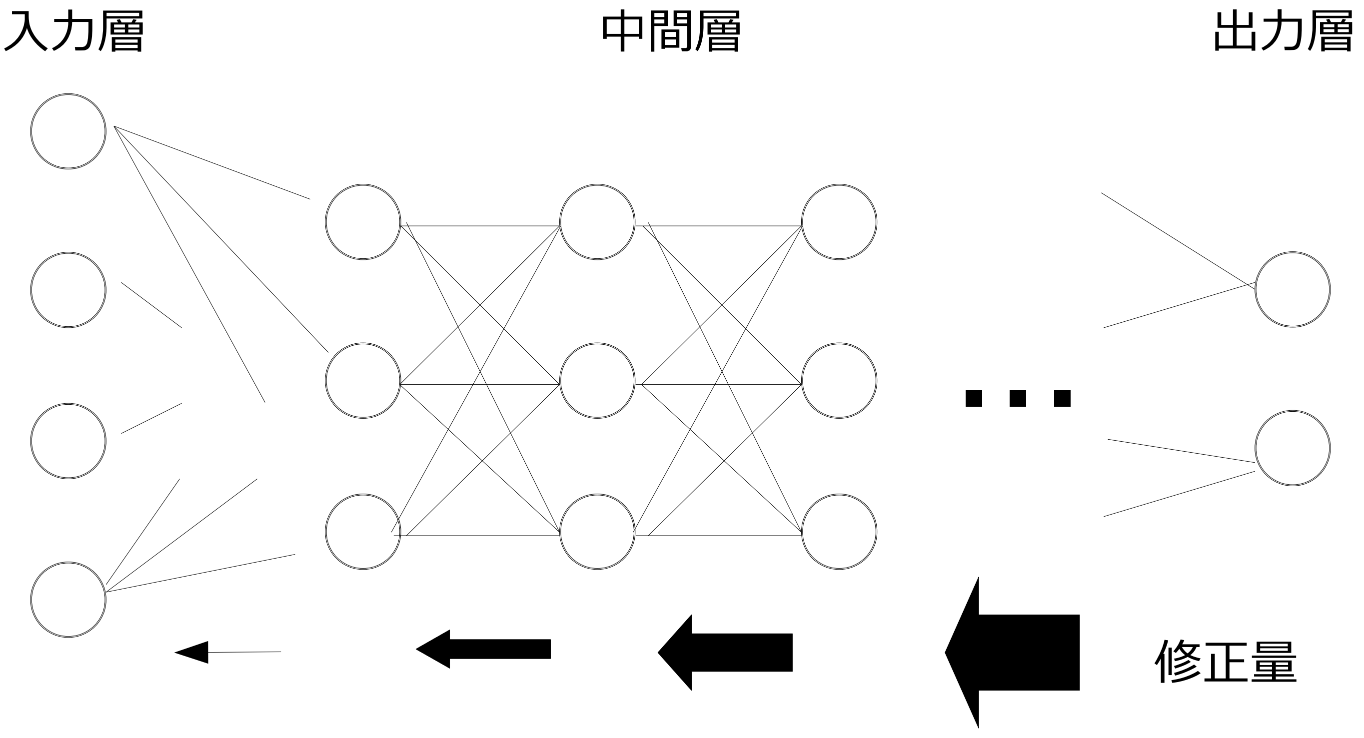
- ニューラルネットワークの構造の決定
  - 中間層の数：その層で実現される非線形変換の複雑さ
  - 階層数：低次の特徴表現から高次の特徴表現への段階的な変換を実現



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

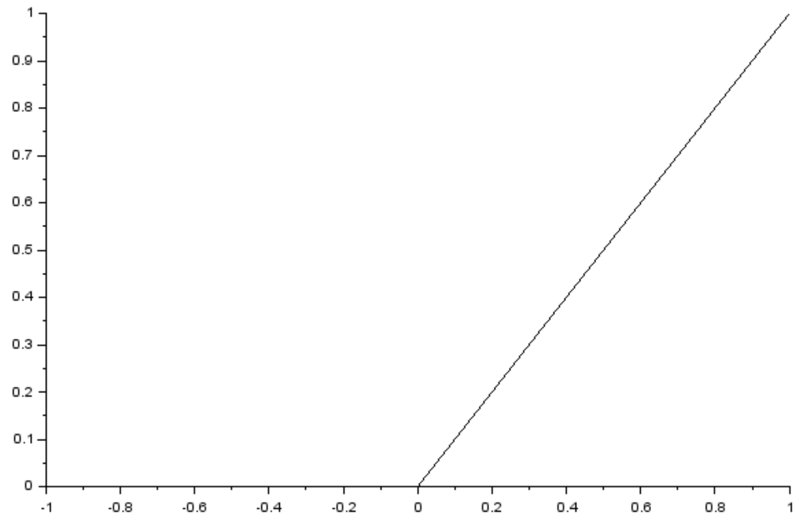
順方向：非線形　　逆方向：線形



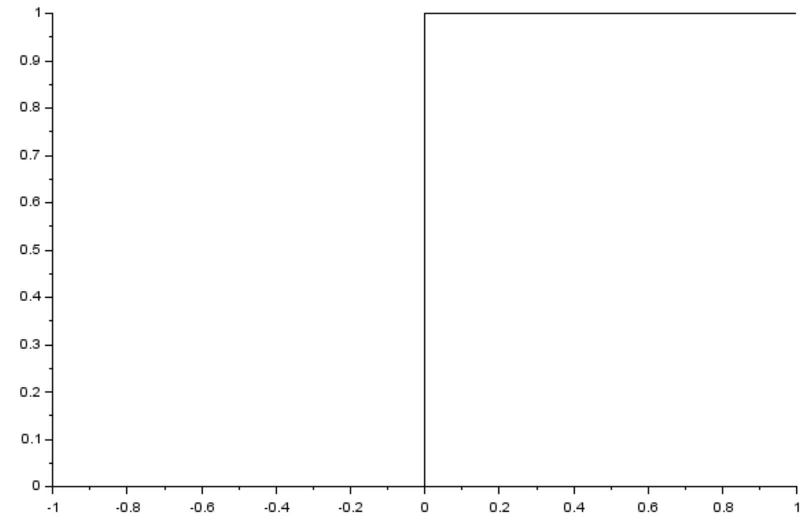
8.3.2 様々な活性化関数

- 活性化関数を rectified linear 関数に ➡ RELU

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



(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

損失関数

- 回帰問題
  - 二乗誤差
  - 外れ値の影響を小さくする場合は 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

- 準ニュートン法
  - 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

まとめ

- Scikit-learn デモ
  - digits データ： 数字画像の認識（ML8-4)
  - MLPClassifier
- ニューラルネットワーク
  - 複雑な非線形識別面を確率的最急降下法で学習
  - 多階層で学習できる誤差逆伝播法には勾配消失という問題点があったが、活性化関数の工夫で克服