6. 識別 - ニューラルネットワーク -

6.1 識別関数法

- 識別関数法とは
  - 確率の枠組みにはとらわれず、

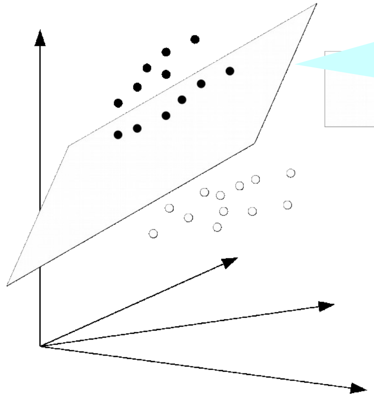
$$f_{Positive}(\boldsymbol{x}) > f_{Negative}(\boldsymbol{x})$$

    ならば $\boldsymbol{x}$ を Positive と判定する関数 f を推定する
  - 単層パーセプトロン

最も単純な識別関数法の実現

    - 識別関数として 1 次式（＝直線・平面）を仮定

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$$



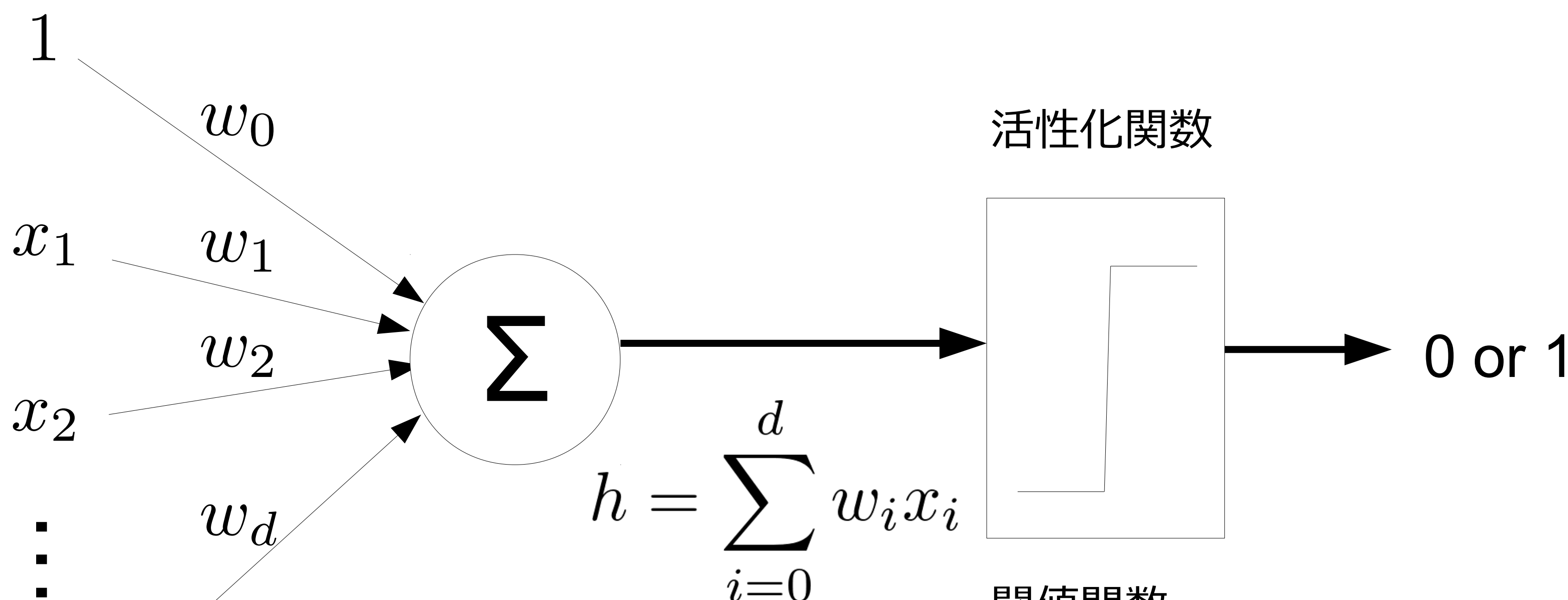
この平面を求めていることになる

6.2 誤り訂正学習

- 単層パーセプトロンの定義

以後、 $\boldsymbol{w}$ は w_0 を含む

  - $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} = 0$ という特徴空間上の超平面を表現



閾値関数

$$f(h) = \begin{cases} 0, & \text{if } h < 0 \\ 1, & \text{if } h >= 0 \end{cases}$$

6.2 誤り訂正学習

データが線形分離可能な場合はパーセプトロンの学習規則で学習可能

- パーセプトロンの学習規則

1. $\boldsymbol{w}$ の初期値を適当に決める
2. 学習パターンからひとつ$\boldsymbol{x}$ を選び、$g(\boldsymbol{x})$ を計算
3. 誤識別が起きたときのみ、$\boldsymbol{w}$ を修正する

$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} + \rho \boldsymbol{x}$$ （クラス 1 のパターンをクラス 2 と誤ったとき）

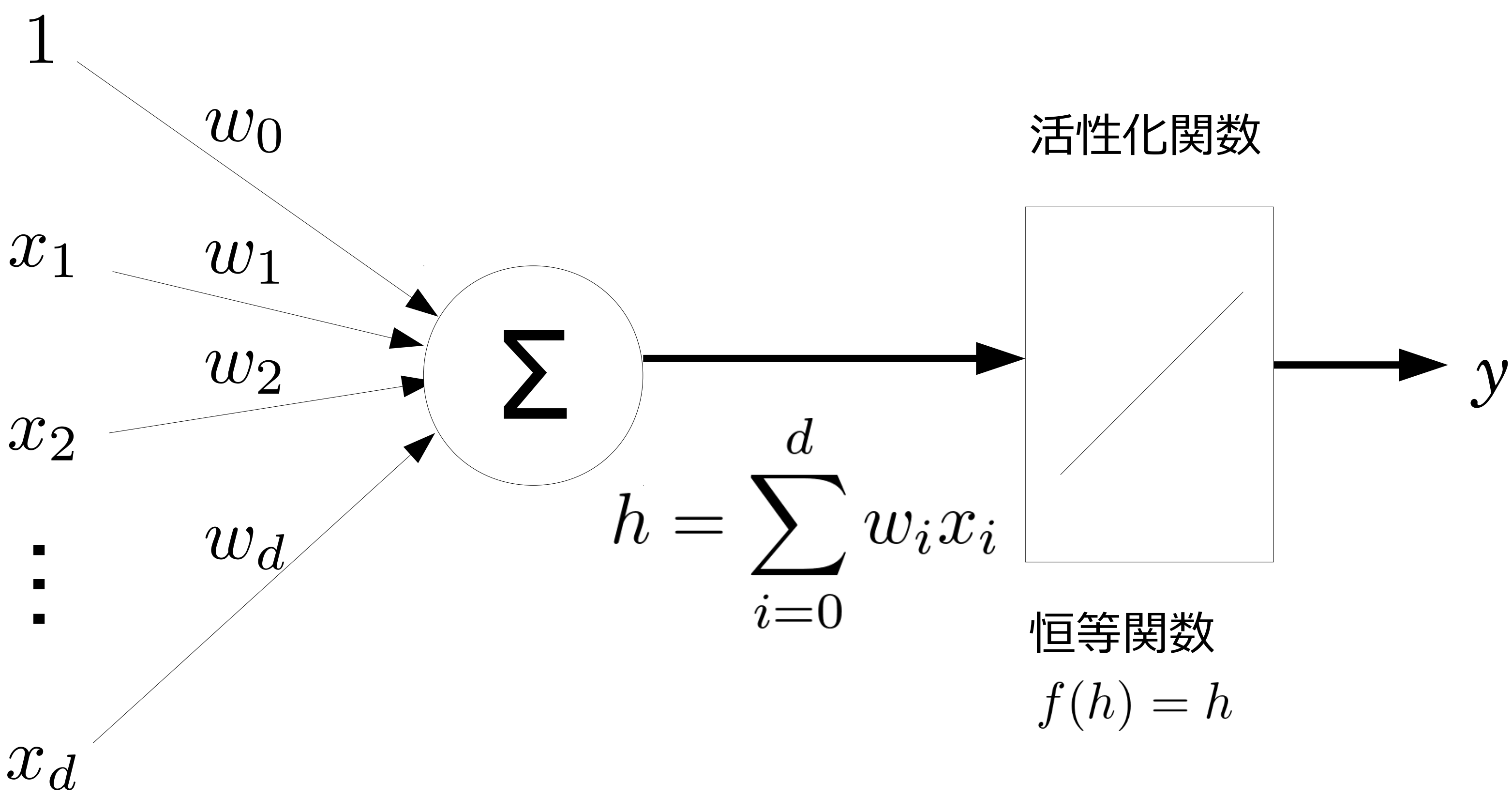
$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \rho \boldsymbol{x}$$ （クラス 2 のパターンをクラス 1 と誤ったとき）

学習係数

4. 2,3 を全ての学習パターンについて繰り返す
5. すべて識別できたら終了。そうでなければ 2 へ

6.3 最小二乗法による学習

- 最小二乗法に用いる計算ユニット
  - $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$ の値を計算

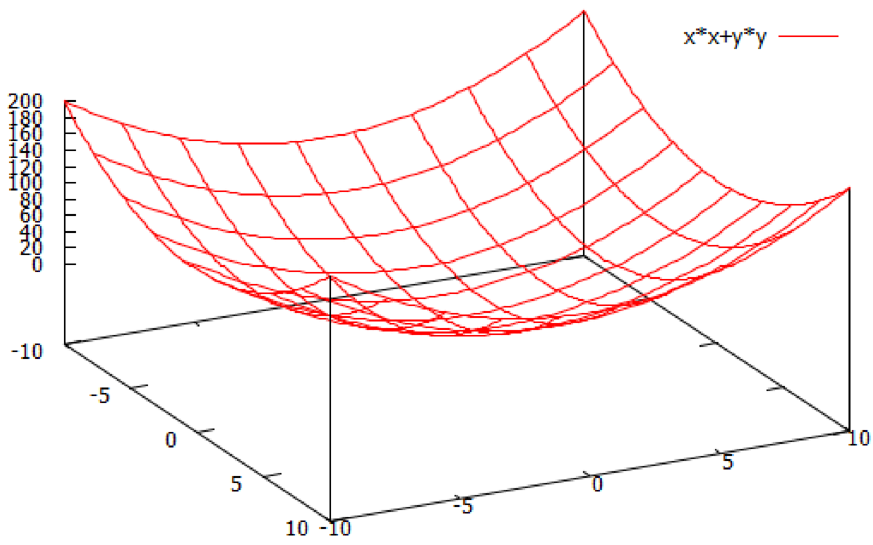


6.3 最小二乗法による学習

- エラーの定義
  - 二乗誤差 $$J(\boldsymbol{w}) \equiv \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{x}_i \in D}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i)^2$$

全データに対する正解と関数の出力との差の２乗和

  - J は $\boldsymbol{w}$ の関数
    - $\boldsymbol{w}$ を J の勾配方向へ一定量だけ動かすことを繰り返して、最適解へ収束させる（→最急降下法）

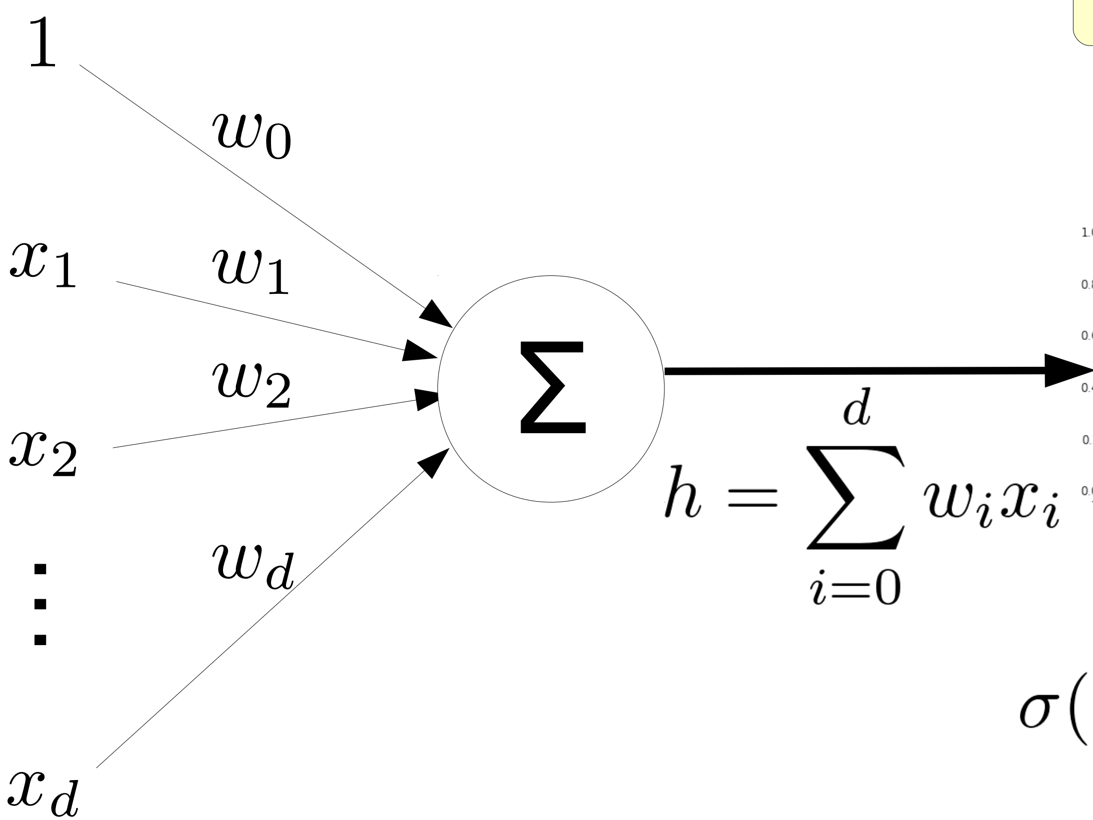


$$\boldsymbol{w}' = \boldsymbol{w} - \rho\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{w}}$$
$$= \boldsymbol{w} - \rho\sum_{p=1}^{n}(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_p - b_p)\boldsymbol{x}_p$$

6.3 最小二乗法による学習

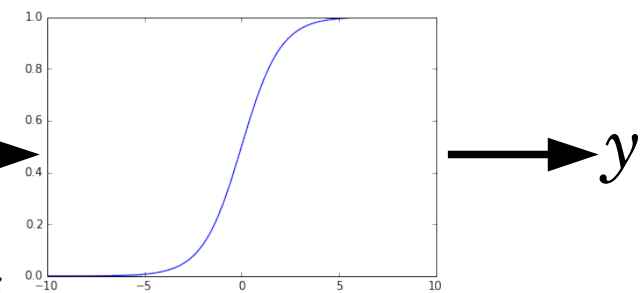
- シグモイド関数の適用
  - 多層の誤差修正に対応するために、勾配計算の際に微分可能な活性化関数を用いる

ロジスティック識別



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

活性化関数



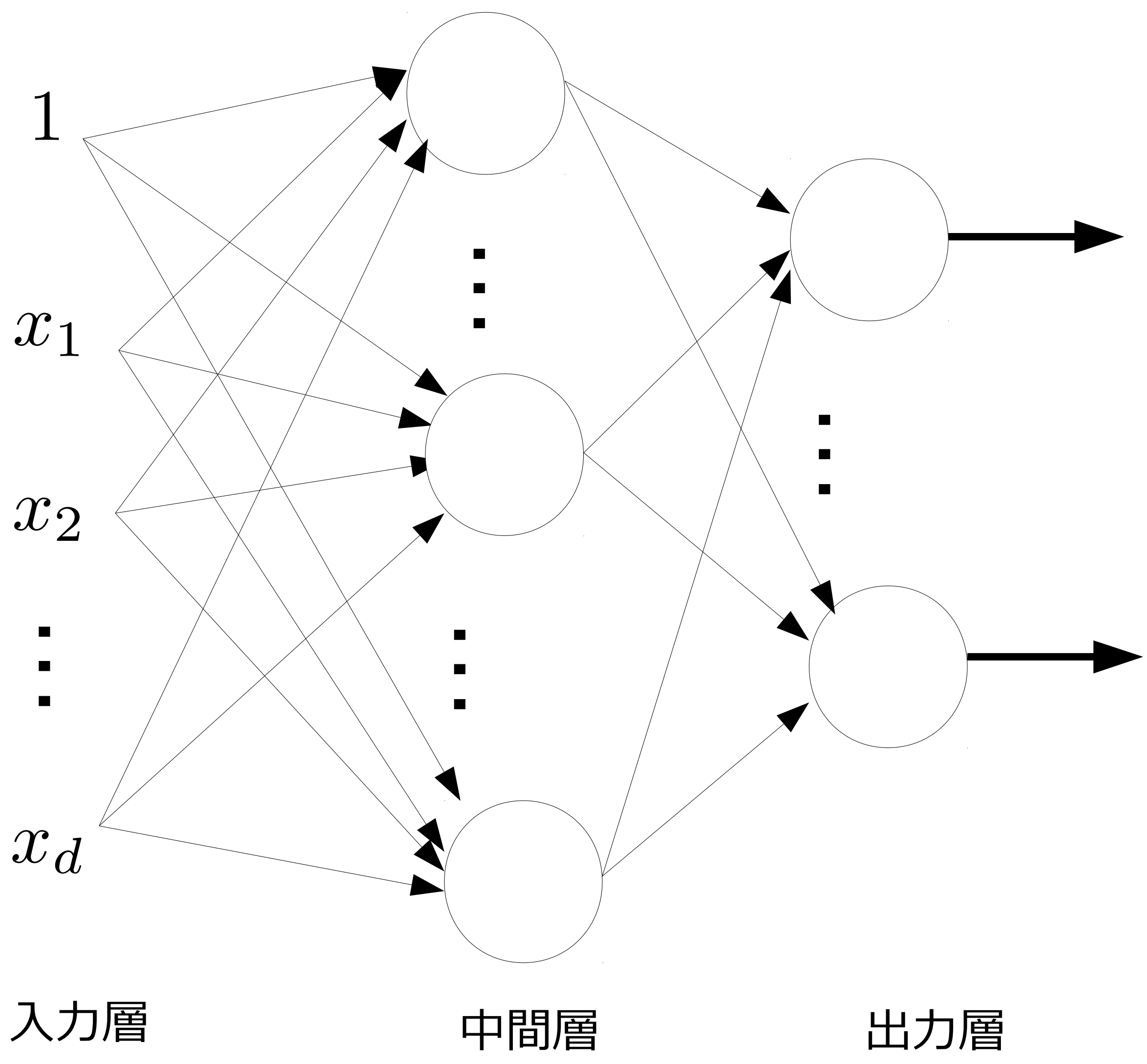
シグモイド関数

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

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

6.4 ニューラルネットワーク

- 3 層のフィードフォワードネットワーク



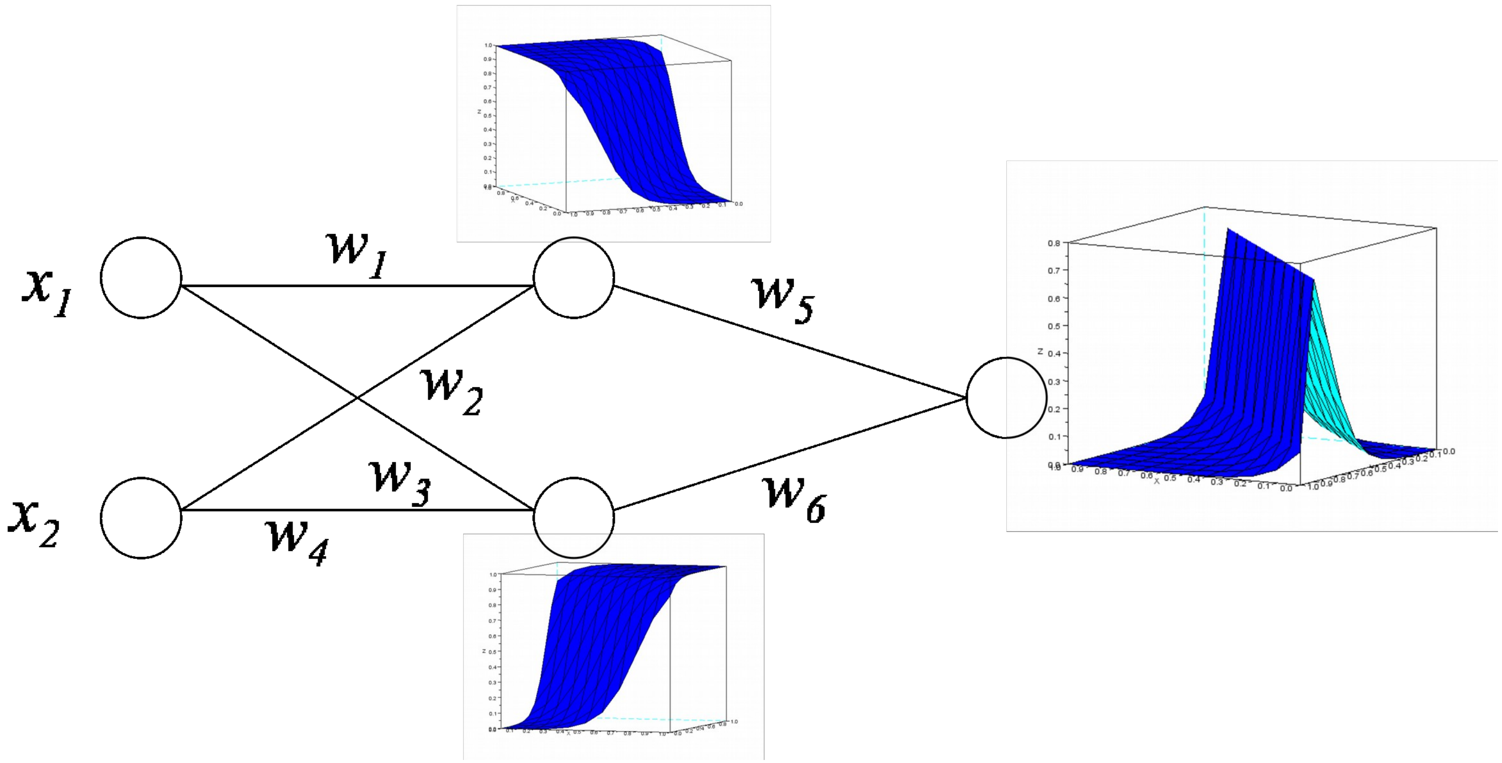
6.4 ニューラルネットワーク

- フィードフォワードネットワークのユニット
  - 中間層の活性化関数：シグモイド関数
  - 出力層の活性化関数：シグモイド関数または
    softmax 関数

$$f(h_i) = \frac{\exp(h_i)}{\sum_{j=1}^{c} \exp(h_j)}$$

6.4 ニューラルネットワーク

- 識別面の複雑さ
  - 中間層ユニットの個数に関係する
  - シグモイド関数(非線形)を任意の重み・方向で足し合わせることで複雑な非線形識別面を構成



6.4 ニューラルネットワーク

- 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 $\boldsymbol{o}_i$ を計算

   a)出力層の k 番目のユニットに対してエラー量 δ 計算

   $$\delta_k \leftarrow o_k(1 - o_k)(y_k - o_k)$$

   b)中間層の h 番目のユニットに対してエラー量 δ 計算

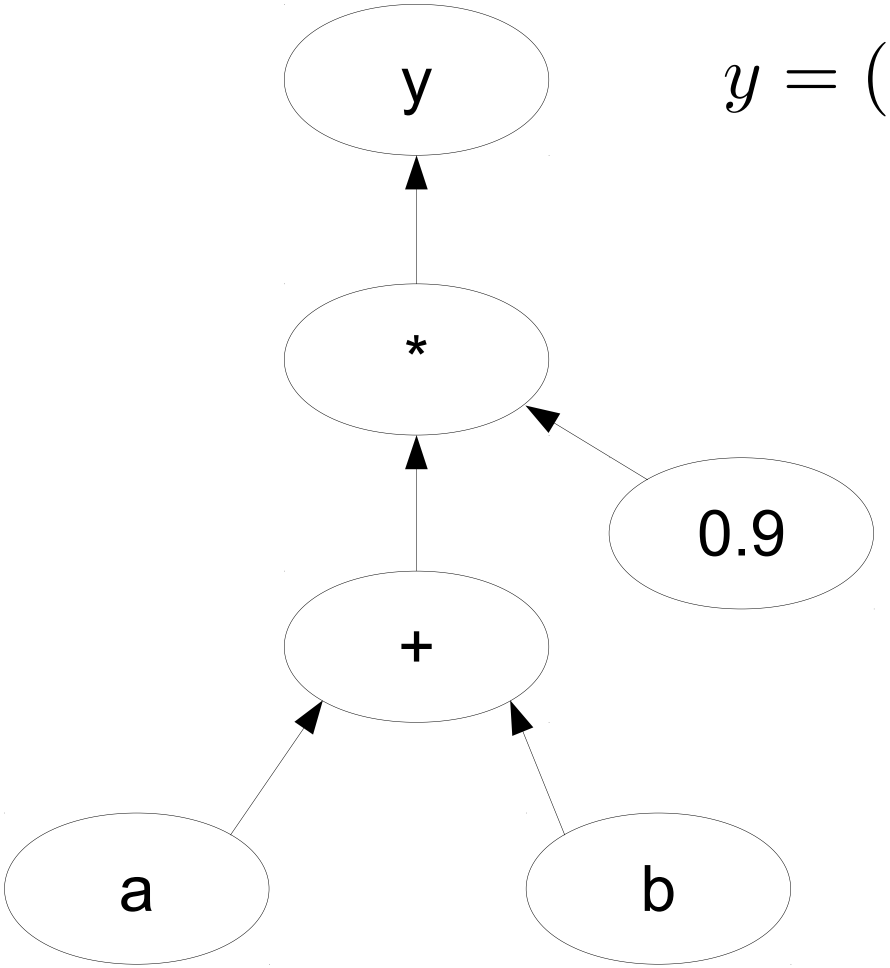
   $$\delta_k \leftarrow o_k(1 - o_k) \sum_{k \in outputs} w_{kh}\delta_k$$

   c)重みの更新

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

6.4 ニューラルネットワーク

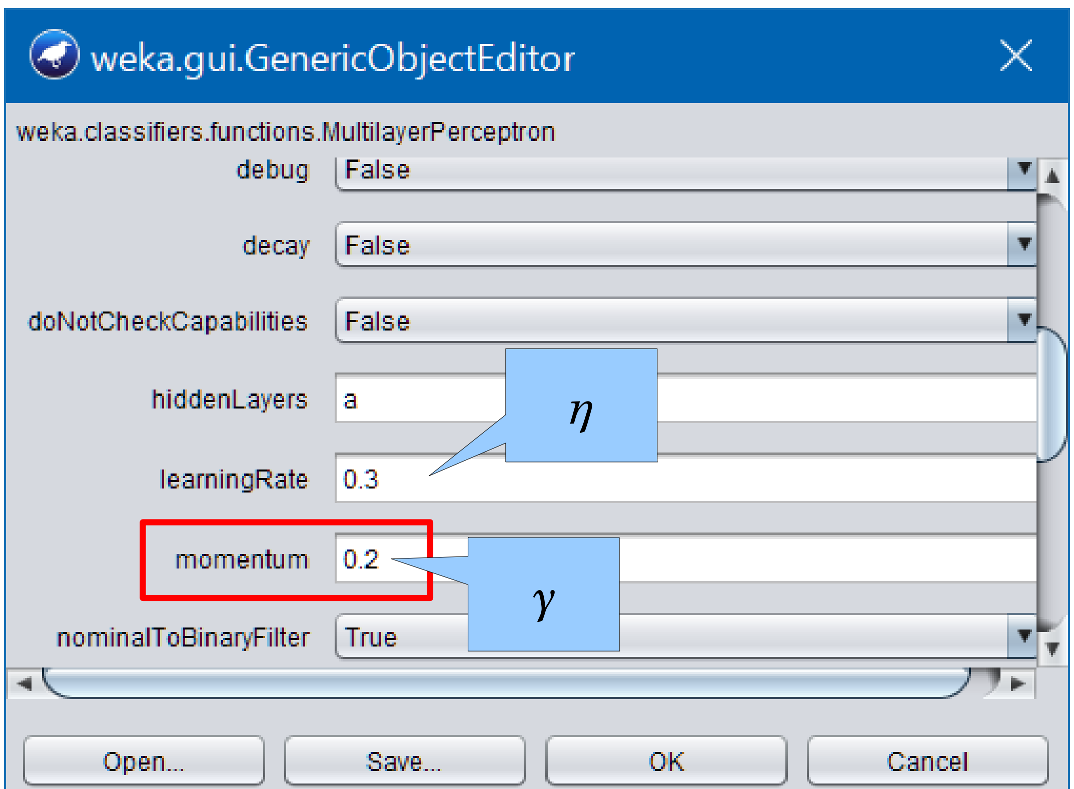
- 計算グラフによる表現
  - 参考サイト） http://postd.cc/2015-08-backprop/



$$y = (a + b) * 0.9$$

6.4 ニューラルネットワーク

- Weka でのパラメータ調整
  - モーメンタム（慣性） $\boldsymbol{v}$
    - 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



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

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

6.4 ニューラルネットワーク

- sklearn の学習パラメータ (1/2)

MLPClassifier(
activation='relu', alpha=0.0001, batch_size='auto', beta_1=0.9,
beta_2=0.999, early_stopping=False, epsilon=1e-08,
hidden_layer_sizes=(100,), learning_rate='constant',
learning_rate_init=0.001, max_iter=200, momentum=0.9,
nesterovs_momentum=True, power_t=0.5, random_state=None,
shuffle=True, solver='adam', tol=0.0001, validation_fraction=0.1,
verbose=False, warm_start=False)

- activation: 活性化関数
  - ‘identity’: 同一値関数 f(x) = x
  - ‘logistic’: シグモイド関数 f(x) = 1 / (1 + exp(-x))
  - ‘tanh’: 双曲線正接 f(x) = tanh(x)
  - ‘relu’: ランプ関数 f(x) = max(0, x)

6.4 ニューラルネットワーク

- sklearn の学習パラメータ (2/2)
- solver: 最適化手法
  - ‘lbfgs’ : 準ニュートン法
    - 2 次微分を更新式に加える
  - ‘sgd’ : 確率的最急降下法
  - ‘adam’ : Adaptive Moment Estimation
    - モーメントの改良：直前の値だけではなく、これまでの指数平滑移動平均を用いる
    - 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

データ数が多いときは adam 、少ないときは lbfgs が勧められている