

機械学習原論

2018 年 1 月 24 日

1 確率論の基礎の復習

この章では、機械学習の数学的定式化に必要な確率論の基礎中の基礎を復習する。

目的はあくまで機械学習への応用であるため、細々とした議論は行わず、機械学習の基礎を定式化するために必要な最低限の項目だけ解説する。

ここの内容で対応できるのは 3 章まで。4 章以降の数学に関しては、各自関数解析や確率解析の書物を参照すること

1. 確率空間と確率変数

標本空間 Ω に対し、次を満たす部分集合族 \mathcal{F} を σ 加法族と呼ぶ。

$$1. \phi, \Omega \in \mathcal{F} \quad (1)$$

$$2. A \in \mathcal{F} \rightarrow A^c \in \mathcal{F} \quad (2)$$

$$3. \text{可算個の } \Omega \text{ の部分集合 } A_1, A_2, \dots, \text{があり、任意の } n \text{ に対して } A_n \in \mathcal{F} \text{ なら、} \cup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{F} \quad (3)$$

写像 $P : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ が次を満たすとき、 P を確率測度という。

$$1. P(\Omega) = 1 \quad (4)$$

$$2. \text{互いに素な可算個の集合 } A_1, A_2, \dots, \in \mathcal{F} \text{ に対し、} P(\cup_{n=1}^{\infty} A_n) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n) \quad (5)$$

この (Ω, \mathcal{F}, P) の組を、確率空間と呼ぶ

$\mathcal{B}(\mathbb{R})$ で、 \mathbb{R} の開集合をすべて含む最小の σ 加法族を表し、ボレル集合族と呼ぶ。

写像 $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ が次の条件を満たすとき、(1 次元実) 確率変数であるという

$$\text{任意の } B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}) \text{ に対して、} X^{-1}(B) \in \mathcal{F} \quad (6)$$

ここで、 $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), P \circ X^{-1})$ は確率空間となる

確率変数 X に対して、分布関数 $F_X : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ を次のように定義する

$$F_X(x) := P(X \leq x) \quad (7)$$

今回扱う確率変数は、その確率変数に対応する確率測度 $P \circ X^{-1}$ が \mathbb{R} 上のボレル測度 μ に対して絶対連続であるものとし、ボレル測度とのラドンニコディム導関数を確率密度関数と呼ぶ

すなわち

$$f_X(x) := \frac{d(P \circ X^{-1})(x)}{d\mu(x)} \quad (8)$$

Ω の部分集合族 \mathcal{G} が、 σ 加法族の条件を満たし、さらに $\mathcal{G} \subset \mathcal{F}$ が成り立つなら、 \mathcal{G} を部分 σ 加法族という。
 Ω の部分集合族 \mathcal{H} に対して、 $\sigma(\mathcal{H})$ で \mathcal{H} を含む最小の σ -加法族を表すものとする。
また、確率変数 Y に対して、 $\sigma(Y)$ で Y を可測にする最小の σ -加法族を表すとする。

2. 独立性と条件付き期待値

集合 $A, B \in \mathcal{F}$ が独立であるとは、 $P(A \cup B) = P(A)P(B)$ が成り立つことである。

部分 σ -加法族 $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2$ が独立であるとは、任意の集合 $A_1 (\in \mathcal{G}_1), A_2 (\in \mathcal{G}_2)$ が独立となることである。

確率変数 X, Y が独立であるとは、 σ -加法族 $\sigma(X), \sigma(Y)$ が独立となることである。

集合 $A \in \mathcal{F}$ の、 $B \in \mathcal{F}$ に対する条件付き確率を次のように定義する。(確率論入門は後日書く)

2 機械学習入門

ここからは本格的に機械学習の内容を学んでいく。

工学への応用であるため、数学的な厳密性に関しては数学書に比べればかなり適当なものになるがご容赦願いたい。

1. 問題設定

機械学習のタスクの多くは、次のような問題設定で一般化できる。

「分類」や「回帰」、「次元削減」などの違いについてはこの段階では区別しないのであしからず。

ちなみに、これで書けない機械学習のタスクも、その大半はこの問題設定のわずかな改変で記述できる。

確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) を定義する。

考察に用いたい特徴量の集合を特徴量ベクトル \mathbf{x} 。それに対して教師データを y と表記する。

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &\in \mathbb{R}^d \\ y &\in \mathbb{R}^n\end{aligned}$$

これに対して、 \mathbf{x} と y が紐づけられた m 個のデータ $\mathcal{D} := [X_1, X_2, \dots, X_m] := [(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)]$ が与えられた上で、できるだけ良い分類関数 $\hat{y} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^n$ を見繕いたい。

各 X_i は、確率空間上の独立同分布な確率変数 $X_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$ である。ただし、値域となる空間の σ -加法族はボレル集合族をとるものとする。

ここで、データ観測前の所持情報を \mathcal{F}_0 、データ観測後の所持情報を \mathcal{F}_1 と置く。これはどちらも \mathcal{F} の部分 σ -加法族で、 $\mathcal{F}_0 \subset \mathcal{F}_1$ であれば、これらは増大情報系の条件を満たし、次のように記述できる。

$$\mathcal{F}_1 = \mathcal{F}_0 \vee \sigma([X_i]_{i=1}^m) \quad (9)$$

写像 $\hat{y} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^n$ の満たす集合を Y とおく。 Y の位相は後述の F を連続関数にする最弱の位相と定義する。

入力データ \mathcal{D} に対して、最適な写像 \hat{y} を導き出したい。

ただし、 Y の任意の元を取ってこれるかと言えばそうではなく、ある程度制約をつけなければ役に立たない。

選択されたモデル M (詳細は後述) に対して、 $Y_M (\subset Y)$ でモデルに対応する関数の集合とし、この上で最適化を行っていく。

$$\tilde{y} := \operatorname{argmax}_{y \in Y_M} [F_{\mathcal{D}}(y)] \quad (10)$$

ただし、 $F_{\mathcal{D}}$ はモデルと入力データから定まる $F_{\mathcal{D}} : Y \rightarrow \mathbb{R}$ の汎関数である。

そして、後述の様々な技法の中から使用されるものを「選択されたモデル M 」と呼ぶものとする。 $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^n, \mathcal{D}, M)$ の組を「汎化機械学習問題」と呼び、そこから導き出された最適な写像 \hat{y} を、「汎化機械学習問題の解」と呼ぶ。

2. モデル設定

ここでは、バイズとサポートベクターマシンとニューラルネットワークを除いたモデルについて解説していく。(サポートベクターマシンとニューラルネットワークが絡むと、絡んでいない場合と比べて数学的な議論が圧倒的に濃くなるため。バイズは浅い範囲に限っても語る内容が多い)

「これ機械学習じゃなくて普通の統計学じゃないか」と思われるであろう要素を多分に含んでいるが、そもそも機械学習と統計学の明確な線引きは不可能であることに留意していただきたい。

1. 線形識別 (2 クラス)

特徴量ベクトルの空間 \mathbb{R}^d を 2 つに分類する。教師データの集合は $\mathbb{R}^n, n = 1$ として、 Y_M を次のように定義する。

$$Y_M := \{\tilde{y} \in Y | A^t x + b = 0 \text{ を満たすアフィン部分空間が } d-1 \text{ 次元になる } A \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^n\} \quad (11)$$

また、これらの関数の評価関数はこのように定義できる。

$$\begin{aligned} F_D(\tilde{y}) &:= \{ \text{各データの、上述のアフィン部分空間までの距離の和} \} \\ &= -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |X_i - \rho(X_i)|^2 \end{aligned} \quad (12)$$

ただし、 $\rho(X)$ で、 X のアフィン部分空間への射影であるとする。

こうして求められた最適な A, b に対して、 $Ax + b > 0$ か $Ax + b < 0$ かでデータを二つのクラスに分類する

2. ロジスティック回帰

基本的には 2 クラスの線形識別と同じく、 \mathbb{R}^d を 2 つにわけののだが、今回はすっぱりと分けてしまうわけではなく、片方のクラスに属する「確率」を求める。

線形回帰は $\tilde{y}(x) := Ax + b$ の A, b はすべて定数倍に対して同値だったが、今回はそうもいかない。 Y_M は前回と同じでいいが、評価関数が大きく変わる。

$$\begin{aligned} z_i &:= \tilde{y}(x_i) \\ \sigma(z) &:= \frac{1}{1 + \exp(-z)} \\ g(y) &:= 1_{y>0} \\ F_D(\tilde{y}) &:= \{ \text{交差エントロピー} \} \\ &:= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m - (g(y_i) \log(\sigma(z_i)) + (1 - g(y_i)) \log(1 - \sigma(z_i))) \end{aligned} \quad (13)$$

これによって、未知のデータ x に対して、それに対応する $y > 0$ である確率が $\sigma(\tilde{y}(x))$ で求められる。

3. 線形識別 (多クラス)

基本的には 2 クラスの線形識別と同じだが、 $n = 1$ ではなく、分類したいクラスの数 m なら、 $m \leq 2^n$ となるように n を取り、 n 個のアフィン部分空間を生成する。

4. 決定木

基本的には多クラス線形識別と同じだが、 n はあらかじめ決めておかず、必要に応じて増やしていく。
ということかという、

5. ランダムフォレスト

決定木の改良である。データ \mathcal{D} からランダムに部分集合をいくつも取り出し（重複はもちろん可）、それぞれに決定木学習を行う。

そして最後に、各点に対して部分集合ごとの結果を多数決もしくは平均値をとることで、学習結果とする。

6. 主成分分析

別名、次元削減。後述のオートエンコーダと数学的には同値である。

超高次元のデータに対して、いきなり機械学習的な分析を行うのは計算量や精度の問題からなかなか無謀な話であり、いったんこの手法で前処理をして次元を削減してから分析を行うことが多い。

\mathbb{R}^d 上のデータに対してこれを \tilde{d} 次元まで削減したいとする。

まず次のような 1 次元アフィン部分空間 A_1 を考える。

$$A_1 := \{x \in \mathbb{R}^d : \hat{y}_1(x) = 0\} \quad (14)$$

$$\hat{y}_1(x) := a_1 \cdot x + b_1 (a_1, b_1 \in \mathbb{R}^d) \quad (15)$$

評価関数は

$$F_D^1(\tilde{y}_1) := \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \rho_1(X_i)^2 - \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \rho_1(X_i) \right)^2 \quad (16)$$

ただし、 ρ_1 は A_1 への射影である。

評価関数を最大化するということは、「データの射影の分散が最大となるような 1 次元アフィン部分空間を求める」ということである。（分散が大きいとなぜいいか。それは、分散が大きいほど元のデータの情報を残していると考えられるためである）

この射影ベクトルを「第一主成分」と呼ぶ。

次に、任意の元が A_1 と直交するような線形部分空間 A_2 を考える。評価関数や定義の仕方は上記と同じ。

これを何度も $A_{\tilde{d}}$ が計算できるまで繰り返す。

元の情報をこのアフィン部分空間の族がどの程度残しているかについて測る指標が「累積寄与率」と呼ばれる数値である。多くの場合、 \tilde{d} 次元までの主成分分析でこれが 80 % を超えれば、それなりにいい近似であるとされる。

3. モデル評価について

過学習、正則化、交差検証、バイアス-バリエンス分解

3 ベイズ学習

ベイズ統計に深入りすると一生機械学習の話に戻れなくなるので、とりあえず機械学習の場でよく使われるパラメトリックな統計的学習理論の入り口を簡単に解説する。

ノンパラベイズは魔境なのでそれなりの覚悟を持って臨むこと。本書では解説しない。

1. ベイズ学習とは

2章のモデル設定で、入力データを独立同分布な確率変数として扱ったが、その確率変数の分布をデータから推定するのがベイズ学習である。

真の確率密度関数を $f(x)$ とおき、データを元に構成したその推定量を $\hat{f}_{\mathcal{D}}(x)$ と書く。任意の x に対して、なるべく真の値 $f(x)$ に近い \mathcal{F}_1 -可測な推定量 $\hat{f}_{\mathcal{D}}(x)$ (これを予測分布と呼ぶ) を見繕いたい。

パラメータを θ 、 Θ をパラメータが取りうる値の集合であるとする。これにより、分布を求めたい確率変数 X から生成される確率測度の族 $\{P_{\theta}^X\}_{\theta \in \Theta}$ を考えることができる。

それぞれの θ に対して、ボレル測度とのラドンニコディム導関数を $f^{\theta}(x)$ と置き、これを「確率モデル」と呼ぶ。

また、 θ 自体の確率密度関数を $\phi(\theta)$ とおき、これを「事前分布」と呼ぶ。($\phi(\theta)$ の値を \mathcal{F}_0 -可測な確率変数とみることもある。詳しくは「階層ベイズ」で検索)

ここで初学者は $f^{\theta}(x)$ と $\phi(\theta)$ はどうやって持ってくるのか疑問に思われるであろうが、言ってしまうればこれはなんでもいい。だが当然この選び方に優劣は存在する。

2. モデル評価について

4 サポートベクターマシン

ニューラルネットワークと同様、数学的に濃い領域である。

基本的には線形識別（2クラス）の拡張と言ってしまってもいいのだが、マージン最大化やカーネル法といった独特の手法があるため、別個の章で解説することにした。

ここでは常に $m = 1$ とする。

1. マージン最大化と高次元空間での線形分離

SVMの手法で特徴的なもののひとつに、マージン最大化というものがある。

これは、完璧な線形分離可能な問題を例に挙げると、正しい分離境界面は無数にあるわけだが、汎化性能の確保のために、その中で「境界との距離の最小値を最大化する」ようにアフィン部分空間を生成するというものである

有限個のデータは、たとえどんなに複雑であっても無限次元空間に連続に埋め込んでしまえば完璧に線形分離できる。その引き戻しは元の特徴量空間の曲線で書ける。

このような強引すぎる手法で線形分離をしてしまうのが、SVMのやり方である。もはや線形分離に対する執念すら感じる。しかしこのような強硬手法が実際に結果を残しているのだから不可思議なものだ。

写像 $\Phi: \mathcal{X} \rightarrow H_k$ を考える。 \mathcal{X} は特徴量空間、 H_k は後述の再生核ヒルベルト空間である。

いい感じの Φ 及び H_k を具体的に求めるのは困難である。しかし、カーネル関数 $k: \mathcal{X}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ が先に存在し、それを再生核とする再生核ヒルベルト空間への写像を定義すれば、現実的な計算量で解析することが不可能ではなくなる。これがカーネルトリックと呼ばれる手法であり、この章のメインとなる。

2. 再生核ヒルベルト空間

定義 4-1: 再生核ヒルベルト空間

ヒルベルト空間 \mathcal{H} に対して、カーネル関数 $k: \mathcal{X}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ が存在し、

$$k(x, \cdot) \in \mathcal{H} \quad (17)$$

$$\text{任意の } h \in \mathcal{H} \text{ に対して、} \langle h, k(x, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}} = h(x) \quad (18)$$

が成り立つとき、これを再生核ヒルベルト空間といい、 $k(\cdot, \cdot)$ を再生核という

ただし、 k は、非負定置性を満たすとする。つまり、任意の $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}, c_1, \dots, c_n \in \mathbb{R}$ に対して、 $\sum_i \sum_j c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$ を満たすものとする。

再生核とそれに対応する再生核ヒルベルト空間があると、写像 $\Phi: \mathcal{X} \rightarrow H_k$ が存在し、次が成り立つ。

$$\langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle_{H_k} = k(x_1, x_2) \quad (19)$$

つまり、再生核さえ決めてしまえば、埋め込むヒルベルト空間や、埋め込み写像を具体的に考えることなく、埋め込み後のヒルベルト空間における内積を計算できてしまうのである。（厳密には、その計算ができるようなヒルベルト空間に埋め込む）

定義 4-2: グラム行列

n 個のデータに対して、 $Gr := (k(x_i, x_j))_{ij}$ で定義される n 次正方行列をグラム行列という。

4. カーネル平均

確率空間上で定義された、 \mathcal{X} に値を取る確率変数 X を考える。ただし、 X に対して $E[k(X, X)] < \infty$ であるとする。

次のようにカーネル平均 m_X を定義する

$$\text{任意の } f \in H_k \text{ に対して、} \langle f, m_X \rangle = E[f(X)] \quad (20)$$

このような $m_X \in H_k$ の存在と一意性はリースの表現定理より言える。

定義 4: Cameron-martin 部分空間

定義 4: 抽象 Wiener 空間

5 ニューラルネットワーク

本書のメインである。この章では、中間層が一つの場合を扱う。

1. ニューラルネットワークとは

入力 $x \in \mathbb{R}^d$ から、出力 $g(x) \in \mathbb{C}$ を出力する機構である。実際には出力が多次元の場合もあるが、とりあえず1次元で理論を展開し、多次元出力への対応方法はのちに解説する。

ニューラルネットでは、このようにして計算が行われている。

$$g(x) = \sum_{j=1}^J C_j \eta(a_j \cdot x - b_j) \quad (21)$$

ただし、 J は中間層のノード数と呼ばれ、 $C_j \in \mathbb{C}, a \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}$ であるとする。今後、 (a, b) のとりうる値の空間を $\mathbb{Y}^{d+1}(= \mathbb{R}^{d+1})$ と表記する。

$g(x)$ が正しい関数 $f(x)$ に近づくように、 a, b, c の値をいじっていくのがニューラルネットの学習である。

2. 学習の実装について

例によって python とその主要ライブラリは使えるものとして、tensorflow での学習について簡単に説明する。

3. ニューラルネットワークの積分表現理論

前々項で解説したニューラルネットの Σ を用いた表現について掘り下げてみよう。これに対して中間層のノード数を無限に増やすとどうなるか。これは積分を用いて表記することができる。

$$g(x) = \int_{\mathbb{Y}^{d+1}} T(a, b) \eta(a \cdot x - b) da db \quad (22)$$

このようなニューラルネットワークを「積分的ニューラルネットワーク」と呼び、そのパラメータは後述の「リッジレット変換」により解析的に決定することができる。

もちろん、実際にニューラルネットワークを実装する場合は中間層のノード数を実数濃度にするわけにはいかないで、有限個のノードで近似する。この近似に用いるべき (a, b) は、後述の「 \dagger オラクルサンプリング \dagger 」により決定するとい値を取り出せる確率が高い。

重みづけの初期値を、この \dagger オラクルサンプリング \dagger とリッジレット変換により決定すると、誤差逆伝播を使わなくとも初期状態で非常に高い精度を出せる。局所解にもまずハマらない。

こういった「機械学習で行うことを連続化して、解析的に答えを求める。そしてその解析解やその離散化を初期値として学習を行うことで、通常よりも圧倒的に早い収束が見込める」という手法は、機械学習全般において数学の専門知識を活かしアルゴリズムの改善を行うにあたって極めて基本的な考え方になっていくと思われる。

関数 $f \in L^1(\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C})$ を、活性化関数 $\eta \in L^\infty(\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C})$ を持つニューラルネットワークで近似することを考える。

定義 5-1：リッジレット変換

f のリッジレット関数 $\psi \in L^\infty(\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C})$ によるリッジレット変換は、次のように定義される。

$$(\mathcal{R}_\psi f)(a, b) := \int_{\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) \overline{\psi(a \cdot \mathbf{x} - b)} |a|^s d\mathbf{x} \quad (23)$$

ただし、 s は非負実数。0 か 1 を使うことが多い。

実際に学習させるにあたって、リッジレット関数をどのように選ばばいいのかは次項にて解説する。

定義 5-2: 双対リッジレット変換

関数 $T \in L^1(\mathbb{Y}^{+d} \rightarrow \mathbb{C}; |a|^{-s} da db)$ の、活性化関数 $\eta \in L^\infty(\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C})$ による双対リッジレット変換は次のように定義される。

$$(\mathcal{R}_\psi^* T)(x) := \int_{\mathbb{Y}} T(a, b) \eta(a \cdot x - b) |a|^{-s} da db \quad (24)$$

定義 5-3: 許容条件

関数 g に対して、 \hat{g} で g のフーリエ変換を表すとする。

次の積分 $K_{\eta, \psi}$ が収束し、かつ 0 でないとき、この活性化関数とリッジレット関数の組 (η, ψ) は許容的であるという。

$$K_{\eta, \psi} := (2\pi)^{d-1} \int_{\mathbb{R}} \frac{\hat{\psi}(\xi) \overline{\hat{\eta}(\xi)}}{|\xi|^d} d\xi \quad (25)$$

定理 5-4: 再構成公式

$f, \hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C})$ で、 (η, ψ) は許容的な組み合わせであるとする。このときほとんどいたるところ

$$\mathcal{R}_\eta^* \mathcal{R}_\psi f(x) = K_{\eta, \psi} f(x) \quad (26)$$

これにより、積分的ニューラルネットワークは、学習結果がいきなり解析的に計算できることがわかった。しかし、実際に機械学習の実装を行ったことがあり、かつ解析学にそれなりに明るい人はこう思ったことだろう。「活性化関数は L^∞ って言ってるけどさ。じゃあ ReLU(ランプ関数) $\eta(x) := \max(0, x)$ みたいな、よく使われてるけどどう見ても L^∞ じゃない関数はどうすればいいのか」と。上記の理論はフーリエ変換を用いており、そう簡単に定義域を制限できない。

これを解決するためには、ここまで解説してきた古典的リッジレット解析ではなく、現代的リッジレット解析(超関数空間まで拡張したリッジレット解析)が必要になる。

ランプ関数を含む最もわかりやすい関数空間は、緩増加超関数空間である。活性化関数の使える範囲を緩増加超関数空間まで拡張すると、リッジレット関数の使える範囲は急減少関数空間まで縮小される。(ここにはトレードオフの関係がある。詳細は [3])

ここからは、 $\psi, \eta \in L^\infty$ で展開された上記の理論と同様に、 $\psi \in \mathcal{S}, \eta \in \mathcal{S}'$ でも再構成公式が任意のフーリエ変換とともに可積分な f に対して成り立つことを見る。また、最後にはこれを L^2 にも拡張する。

定義 5-5: リッジレット変換の一般的な表記

$u := a/|a|, \alpha := 1/|a|, \beta := b/|a|$ とおく。

関数 f の、 $\psi \in \mathcal{S}$ によるリッジレット変換は次のように定義される。

$$(\mathcal{R}_\psi f)(u, \alpha, \beta) := ((Rf)(u, \cdot) * \tilde{\psi}_\alpha)(\beta) \quad (27)$$

ただし、 $\psi_\alpha(p) := \psi(p/\alpha)/\alpha$ とおく。R はラドン変換

これはあくまで広い定義であり、 $\psi \in \mathcal{S}$ である限りは先ほどと同じであるという認識でよい。問題は次である

定義 5-6: 双対リッジレット変換の一般的な表記

$T \in L^\infty$ (さきほどリッジレット関数は急減少関数に限っている)ので、実際にはもっと狭いところで成り立てば今回使う分には十分) に対して、活性化関数 $\eta \in \mathcal{S}'$ による双対リッジレット変換は次のように定義される。

$$(\mathcal{R}_\psi^* T)(x) := \lim_{\delta \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{S}} \int_{\epsilon}^{\delta} \int_{\mathcal{R}} T(u, \alpha, u \cdot x - \alpha z) \eta(z) \frac{dz d\alpha du}{\alpha^d} \quad (28)$$

ただし、 \mathbb{S}^{d-1} は $d-1$ 次元の単位球面であるとする。この積分は必ずしもルベグ積分ではなく、超関数の作用としてとらえなければならない場合もあるが、今回は η は ReLU の場合を想定するので現時点ではルベグ積分という認識で困らない。

定義 5-7: 一般化された許容条件

この超関数的なリッジレット解析に対しても、許容条件を定義したい。

$\psi \in \mathcal{S}, \eta \in \mathcal{S}'$ に対して、ある $\{0\}$ 近傍 Ω が存在し、 $\hat{\eta}$ が $\Omega/\{0\}$ 上で局所可積分で、さらに次の値が 0 でない値に収束するとき、この関数組は許容条件を満たすという

$$K_{\eta, \psi} := (2\pi)^{d-1} \left(\int_{\Omega/0} + \int_{\mathbb{R}/\Omega} \right) \frac{\overline{\hat{\psi}(\xi)} \hat{\eta}(\xi)}{|\xi|^d} d\xi \quad (29)$$

これでようやく活性化関数が超関数の場合の再構成公式が書ける。

定理 5-8: 超関数に対する再構成公式

$\psi \in \mathcal{S}, \eta \in \mathcal{S}'$ は許容条件を満たし、 $f, \hat{f} \in L^1$ であるとする。このときほとんどいたるところ次が成り立つ。

$$\mathcal{R}_\eta^* \mathcal{R}_\psi f(x) = K_{\eta, \psi} f(x) \quad (30)$$

定理 5-9: リッジレット変換の L^2 拡張と等距離性

$\psi \in \mathcal{S}$ に対して、 $K_{\psi, \psi}$ は有限かつ非零とする。(これを自己許容的という)。ここでは単純化のために $K_{\psi, \psi} = 1$ とする。

このとき、 $L^1 \cap L^2$ 上のリッジレット変換は L^2 上に拡張でき、また次が成り立つ。

$$\|\mathcal{R}_\psi f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2} \quad (31)$$

適当な条件を付けくわえれば、 L^2 上でも再構成公式が成り立つ。詳細は [3] 参照

4. 積分表現理論を応用した学習高速化

応用数学には予言性が必要である。

2 章は著者自ら行った定式化だが、「別の学問のこういう話を数式で書けた」「解析的に計算できた」だけでは、その研究に学術的な意義はない。応用先の学問に新しい結果をもたらさなければ、せいぜい「数学徒がその学問に入門しやすくなる」以上の意味はないのである。(カタストロフィー理論はそれができずに廃れた)

機械学習で言うと、新しい結果とは大雑把に言えば「高速化ができた」「精度が上がった」「学習がうまくいくことを数学的に厳密に証明した」の 3 つに分けられる。

この項で解説するのは、 \dagger オラクルサンプリング \dagger とリッジレット解析を用いた学習の具体的なアルゴリズムである。離散化に伴いもちろん値はズれるので学習が必要だが、答えの近くから始められるので圧倒的に速

い収束が見込める。その速さたるや、もはやバックプロパゲーションが必要ないまでである。

定義:辞書

\mathbb{Y}^{d+1} の部分集合 D を辞書と呼ぶ。

4. ボルツマンマシン

非常に名前がかっこいい機構である。本書では、ボルツマンマシンのうち、最もよく使われている「制限ボルツマンマシン」について解説する。

6 強化学習

近年、Deep Zen GO などの、

7 ニューラルネットワークの数値解析への応用

ここでは、強化学習による BSDE（後退確率微分方程式）の確率制御問題や、それをさらに PDEs（放物型偏微分方程式）の境界値問題への数値計算に応用する手法について解説する。PDE の数値解析理論は、現状空間が 4 次元以上だと誤差がひどいことになってしまう。量子の世界に踏み込まない物理学や工学ならそれでもいいかもしれないが、株式の銘柄の数だけ次元が増えるファイナンスや 11 次元の物理学、その他 SDE や PDE の応用分野の多くではこれが大いに問題になる

今回扱う半線形放物型 PDE の境界値問題は次のような形をしている

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{1}{2}(\Delta_x u)(t, x) + f(u(t, x), (\nabla_x u)(t, x)) = 0 \quad (32)$$

$$u(T, x) = g(x) \quad (33)$$

ただし、 x の取りうる空間は \mathbb{R}^d , $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ は既知の連続関数であるとし、 $u : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ は $C^{1,2}$ 級とする。

非線形ファインマンカットの公式

W を d 次元標準ブラウン運動。確率空間をそこから生成されるものとし、 Y, Z は適合過程で、 f, g は先ほどと同じで、 $\xi \in \mathbb{R}^d$ とする。

$$Y_t = g(t, \xi + W_T) + \int_t^T f(Y_s, Z_s) ds - \int_t^T \langle Z_t, dW_t \rangle \quad (34)$$

は、上記の半線形熱方程式終端値問題の解 u に対して次を満たす

$$Y_t = u(t, X_t), Z_t = \nabla_x u(t, X_t) \quad (35)$$

ただし、 $X_t := \xi + W_t$

このブラウン運動は、学習の反復 1 回ごとにオイラー丸山法で実装する。

今回、このニューラルネットワークを用いた強化学習で学習させる対象は、写像 $Z_t = F_t(X_t)$

通常の強化学習での評価関数にあたるものは $Y_t = Q(t, Z_t)$ と定義される。

そしてこの評価関数は、終端時刻 T にて、

$$\psi(\theta) = \|Y_T - g(X_T)\|^2 \quad (36)$$

で評価され、通常の強化学習と同じく更新されていく。

つまり、時刻が N 分割の場合、「毎回 N 回の行動をとった後に一度だけ報酬が与えられる状況での強化学習」と見なして、 X_t に対する最適戦略 Z_t と Y_t を導き出して、それを偏微分方程式の数値解析結果にするという考えである。

通常の Q-学習と違い、状態 X_{t_n} と方策 Z_{t_n} と前時刻での評価 $Y_{t_{n-1}}$ から一意的にこの式で Y_{t_n} が定まるため、その意味では楽だといえる。

$$Y_{t_{n+1}} \approx Y_{t_n} - f(Y_{t_n}, (\nabla_x u)(t_n, \xi + W_{t_n}))(t_{n+1} - t_n) + \langle (\nabla_x u)(t_n, \xi + W_{t_n}), W_{t_{n+1}} - W_{t_n} \rangle \quad (37)$$

ニューラルネットは各時刻で用意する。つまりこれは RNN ではなく、単純に N 個のニューラルネットが存在するのみである。時刻が違う中間層同士のつながりはない。

損失関数 $\psi(\theta)$ で計算された結果から、新たなパラメータを決定する。すなわち、学習 m 回目のパラメータを Θ_m とおくと

$$\Theta_{m+1} := \Theta_m - \nabla_{\theta} \psi(\Theta_m) \quad (38)$$

これは要するに確率的勾配法による学習で、ニューラルネットワークに偏微分方程式の正しい関数を近似させようとする取り組みだ。

ただし、普通の確率的勾配法はデータの集合 \mathcal{D} 上の一様測度の元で行われていたが、今回は $C([0, T])$ 上の Wiener 測度の下で確率的勾配法を行っているのである。

「ならば Adam 法などをこの手法に適用してはどうか」「ということは確率過程になるので、抽象 Wiener 空間上の解析を離散化したものと捉えて収束証明ができるのではないか」「カメロン-マルティン部分空間が絡んでくるのではないか」という当然の疑問が浮かんでくる読者もいるだろうが、それは今後の課題である。

8 ディープラーニング

いよいよここから、第三次人工知能ブームを巻き起こしたとして巷で話題の深層学習に入り込んでいく。これまでの知識を湯水のごとく使っていくので、平行して開くのを推奨。

1. 深層学習とは

これまでの章で扱ったニューラルネットワークは、入力層と隠れ層と出力層が1つずつであったが、ここからは隠れ層が2つ以上のもの、つまり n 層パーセプトロン ($n > 3$) を扱っていく

近年、結果をあげている深層学習アルゴリズムの層数は圧倒的に深くなっている。数年前は結果を出しているのはせいぜい8層、22層程度だったが、2015年に某大会で152層のニューラルネットワークが成果を上げたのを皮切りに、現在では1000層を超えるネットワークも使われている。

2. 残差学習

なぜそのような超深層学習が可能になったのか、そのカギを握るのは。残差学習という概念だ。

3章を読んでもらえばわかる通り、通常のニューラルネットワークは入力 x に対して、学習させたい写像 $H(x)$ を直接学習させる。

しかしこの手法は3~6層程度のパーセプトロンなら有効だが、層の数が劇的に増えてくると意味をなさなくなってくる（勾配消失・発散）。それを突破するためにいろいろな方法が考えられたが、どれも中間層の数が数百、数千層単位になる超深層学習には対応できなかった

そこで登場するのが残差学習である。学習させる対象は、 $H(x)$ ではなく、残差 $F(x) := H(x) - x$ 、これを学習させ、そこに x を加えた値を次の層の入力とする。

ここで、この残差関数 F の、 n 番目の層での値を $F(t_n, \cdot)$ と表記する。また、 n 番目の層の入力を x_{t_n} と表記する。

すると、この残差学習はこう書ける。

$$x_{t_{n+1}} = x_{t_n} + F(t_n, x_{t_n}) \quad (39)$$

これまで数学を学んできた読者ならすでにお気づきだろう。

そう。これは常微分方程式のオイラー近似に他ならない。

すなわち、残差学習による超深層学習で行われていることは、常微分方程式の離散近似なのである。

近年の主な超深層学習と常微分方程式数値計算の関係を簡単にまとめると

$$ResNet - \text{前進オイラー法} \quad (40)$$

$$RevNet - \text{後退オイラー法} \quad (41)$$

$$PolyNet - \text{前進オイラー法 (連立常微分方程式)} \quad (42)$$

$$FractalNet - \text{2次ルンゲクッタ法} \quad (43)$$

さらに [5] の著者は、別の常微分方程式の数値計算技法を使うことで、さらなる計算の高速化及び精度の向上を可能にした。

2. 確率的超深層学習と確率微分方程式

ここまで書かれたのは、決定論的な超深層学習である。ここにノイズ付加やドロップアウトなどの確率要素を加えると、必然これらの議論は確率微分方程式の話に突入する。

9 なぜ深層にする意味があるのか (独自研究)

ディープラーニングについて勉強していて、こう思ったことがある人は多いだろう。「なんで深層にする必要があるんですか? (正論)」と。

この章では、本書の締めとして、この疑問の解明の糸口になるかもしれない考察を記述する。ここからは、著者および大阪大学機械学習研究会の独自成果や考察が大半であることをご了承願いたい。

決定論的ニューラルネットワークと確率的ニューラルネットワークに分けて考察を行う。

1. 深層学習で近似可能な関数

1. 三層パーセプトロンの限界

まず、ディープでないニューラルネットワークでどこまで再構成公式が成り立つのかを、今一度考察しなおす。

5章での考察を思い出してみよう。再構成公式が成り立つようなリッジレット関数が存在すると証明されているのは、以下のいずれかに当てはまる場合だった。

・ L^1 かつそのフーリエ変換も L^1

・ L^2

まず証明するのは次の定理である。

定理 9-1: 再構成公式の範囲の特定

L^1 かつそのフーリエ変換も L^1 になる関数は二乗可積分

証明:

ステップ 1 : $f, \hat{f} \in L^1$ なら、 \hat{f} は有界連続関数

連続性はフーリエ変換の定義より明らか。リーマン・ルベーグの定理より、 $\hat{f}(\xi) \rightarrow 0 (|\xi| \rightarrow \infty)$ が成り立つ。よって有界性も言える。

ステップ 2: $f, \hat{f} \in L^1$ なら、 f に対してある有界連続関数が存在し、 f と a.e で一致する

「a.e. で有界連続」とは少し異なる。勘違いしやすいので注意

$\hat{f} \in L^1$ と定義しているのだから、 $\hat{f}(-\xi)$ は自明に L^1 である。このフーリエ変換はステップ 1 の議論により有界連続であり $\hat{f}(\xi)$ のフーリエ逆変換と等しい。そのため $\check{\hat{f}}$ が有界連続なので、 $f, \hat{f} \in L^1$ である場合になりたつ等式 $\check{\hat{f}} = f$ a.e. より、ステップ 2 の主張は満たされる。

ステップ 3: $f \in L^1$ かつ有界連続なら、 $f \in L^2$

有界連続なので、ある実数 M が存在し $\sup_x |f(x)| = M$ と書ける。

$f^*(x) := |f(x)|/M$ とおくと任意の x に対して $0 \leq f^*(x) \leq 1$

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx \leq M^2 \int_{\mathbb{R}} f^*(x)^2 dx \leq M^2 \int_{\mathbb{R}} f^*(x) dx = M \int_{\mathbb{R}} |f(x)| dx < \infty \quad (44)$$

これによって、既存の再構成公式が成り立つ関数の限界は L^2 にまとめて語れることが判明した。

L^2 関数同士の合成関数は L^2 とは限らない。ここでは具体例を構成する。

そもそも関数の合成が welldef ではない

2. 深層ボルツマンマシンと Wiener-Caos 展開

参考文献

- [1] 確率論 (実教理工学全書), 西尾真紀子 (1978)
- [2] Machine Learning: A Probabilistic Perspective (Adaptive Computation and Machine Learning series), Kevin.P.Murphy (2012)
- [3] 統計的学習理論, 金森敬文 (2015)
- [4] 深層ニューラルネットの積分表現理論, 園田翔 (2017)
- [5] Deep learning-based numerical methods for high-dimensional parabolic partial differential equations and backward stochastic differential equations, Weinan E, Jiequn Han, Arnulf Jentzen (2017)
- [6] BEYOND FINITE LAYER NEURAL NETWORKS: BRIDGING DEEP ARCHITECTURES AND NUMERICAL DIFFERENTIAL EQUATIONS, Yiping Lu, Aoxiao Zhong, Quanzheng Li (2017)
- [7] カーネル法の新展開—その理論と応用—, 福水健次 (2012)