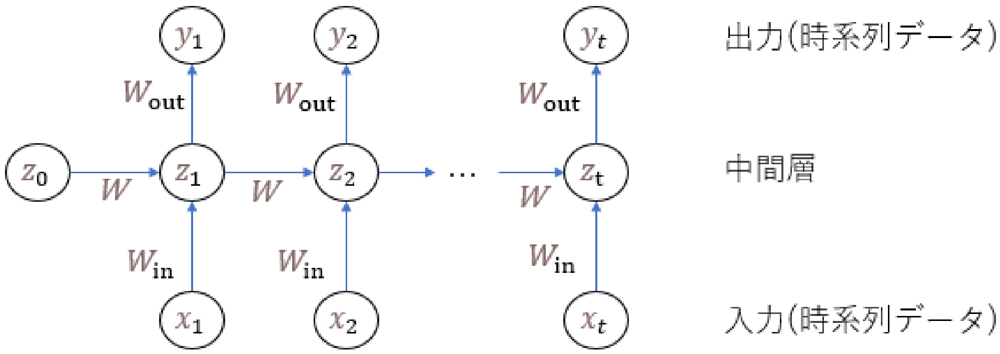
Section1: 再帰型ニューラルネットワークの概念

1. 要点まとめ

RNN(Recurrent Newral Network)とは、時系列データに対応可能なニューラルネットワークである。時系列データとは、時間的順序を追って一定間隔毎に観察され、相互に統計的依存関係が認められるデータ系列であり、例えば、音声データや自然言語などである。

RNNの構造は下図。時刻毎に入力x_t、中間層z_t、出力y_tがあり、中間層z_tは1つ前の時刻の中間層z_{t-1}とつながりがあることがRNNの大きな特徴である。これにより、時間的なつながりも特徴量として抽出できるようになる。重みは以下3つがあり、これが学習の調整対象となる。重みは全時刻共通である。

- 入力と中間層の間の重みW_{in}
- 中間層と出力の間の重みW_{out}
- 現在の中間層と１つ前の中間層の間の重みW



この構造を数式で表すと下式 (b,c: バイアス、f(), g(): 活性化関数）。

- $u_t = W_{in}x_t + Wz_{t-1} + b$
- $z_t = f(u_t)$
- $v_t = W_{out}z_t + c = W_{out}f(u_t) + c$
- $y_t = g(v_t)$

学習の際は、誤差逆伝播の派生版であるBPTT(Back Propagation Through Time)で重みを調整する。 調整量を表す、誤差Eを重みやバイアスで微分した式は以下。

- $\frac{dE}{dW_{in}} = \sum_t \delta_t x_t \quad ※\delta_t = \frac{dE}{du_t}$
- $\frac{dE}{dW_{out}} = \sum_t \delta_{out,t} z_t \quad ※\delta_{out,t} = \frac{dE}{dv_t}$
- $\frac{dE}{dW} = \sum_t \delta_t z_{t-1}$
- $\frac{dE}{db} = \sum_t \delta_t$
- $\frac{dE}{dc} = \sum_t \delta_{out,t}$

上式で現れる$\delta_t, \delta_{out,t}$（誤差Eを活性化関数前の中間出力u_t, v_tで微分した値）の算出式は以下。

- $\delta_{out,t} = \frac{dE}{dy_t} g'(v_t)$
- $\delta_t = \delta_{out,t} \frac{dv_t}{du_t} = \delta_{out,t} W_{out} f'(u_t)$
- $\delta_{t-1} = \delta_t \frac{du_t}{du_{t-1}} = \delta_t W f'(u_{t-1})$

2. 実装演習

3_1_simple_RNN.ipynbのRNNのコードにおいて、下表No.1, No.2, No.3の重みの初期化方法＆中間層の活性化関数の組み合わせを試行し、学習結果を元コードと比較する。

	重みの初期化	中間層の活性化関数
No.1	Xavier	シグモイド関数
No.2	Xavier	tanh関数
No.3	He	ReLU関数
元コード	標準正規分布	シグモイド関数

```
import numpy as np
from common import functions
import matplotlib.pyplot as plt


def d_tanh(x):
    return 1/(np.cosh(x) ** 2)

# データを用意
# 2進数の桁数
binary_dim = 8
# 最大値 + 1
largest_number = pow(2, binary_dim)
# largest_numberまで2進数を用意
binary = np.unpackbits(np.array([range(largest_number)],dtype=np.uint8).T,axis=1)

input_layer_size = 2
hidden_layer_size = 16
output_layer_size = 1

weight_init_std = 1
learning_rate = 0.1

iters_num = 10000
plot_interval = 100

# 試行パターン
trial_pattern = 3

# ウェイト初期化 (バイアスは簡単のため省略)
if trial_pattern == 0:
  trial_weight_initializer = "std"
  W_in = weight_init_std * np.random.randn(input_layer_size, hidden_layer_size)
  W_out = weight_init_std * np.random.randn(hidden_layer_size, output_layer_size)
  W = weight_init_std * np.random.randn(hidden_layer_size, hidden_layer_size)
elif trial_pattern == 1 or trial_pattern == 2:
  # Xavier
```

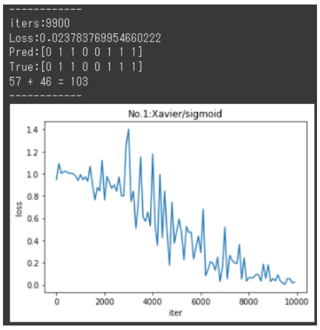
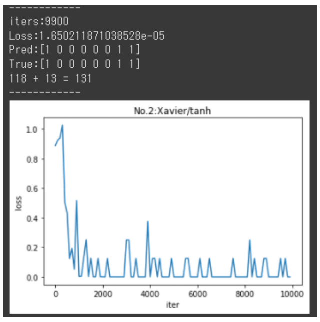
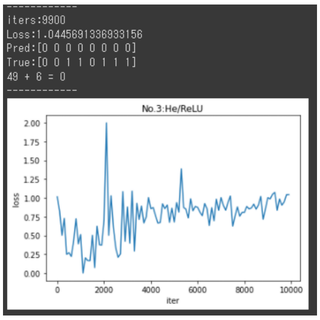
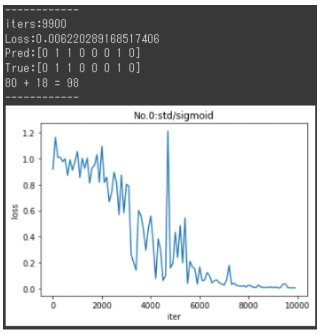
```
    trial_weight_initializer = "Xavier"
    W_in = np.random.randn(input_layer_size, hidden_layer_size) /
(np.sqrt(input_layer_size))
    W_out = np.random.randn(hidden_layer_size, output_layer_size) /
(np.sqrt(hidden_layer_size))
    W = np.random.randn(hidden_layer_size, hidden_layer_size) /
(np.sqrt(hidden_layer_size))
else:
    # He
    trial_weight_initializer = "He"
    W_in = np.random.randn(input_layer_size, hidden_layer_size) /
(np.sqrt(input_layer_size)) * np.sqrt(2)
    W_out = np.random.randn(hidden_layer_size, output_layer_size) /
(np.sqrt(hidden_layer_size)) * np.sqrt(2)
    W = np.random.randn(hidden_layer_size, hidden_layer_size) /
(np.sqrt(hidden_layer_size)) * np.sqrt(2)

# 活性化関数
func_activate   = [functions.sigmoid,   functions.sigmoid,   np.tanh,
functions.relu]
func_d_activate = [functions.d_sigmoid, functions.d_sigmoid, d_tanh,
functions.d_relu]

if trial_pattern == 0 or trial_pattern == 1:
    trial_activation = "sigmoid"
elif trial_pattern == 2:
    trial_activation = "tanh"
else:
    trial_activation = "ReLU"

# 勾配
W_in_grad = np.zeros_like(W_in)
W_out_grad = np.zeros_like(W_out)
W_grad = np.zeros_like(W)

u = np.zeros((hidden_layer_size, binary_dim + 1))
z = np.zeros((hidden_layer_size, binary_dim + 1))
y = np.zeros((output_layer_size, binary_dim))

delta_out = np.zeros((output_layer_size, binary_dim))
delta = np.zeros((hidden_layer_size, binary_dim + 1))

all_losses = []

for i in range(iters_num):

    # A, B初期化 (a + b = d)
    a_int = np.random.randint(largest_number/2)
    a_bin = binary[a_int] # binary encoding
    b_int = np.random.randint(largest_number/2)
    b_bin = binary[b_int] # binary encoding

    # 正解データ
    d_int = a_int + b_int
```

```
    d_bin = binary[d_int]

    # 出力バイナリ
    out_bin = np.zeros_like(d_bin)

    # 時系列全体の誤差
    all_loss = 0

    # 順伝播
    for t in range(binary_dim):
        # 入力値
        X = np.array([a_bin[ - t - 1], b_bin[ - t - 1]]).reshape(1, -1)

        # 時刻tにおける正解データ
        dd = np.array([d_bin[binary_dim - t - 1]])

        u[:,t+1] = np.dot(X, W_in) + np.dot(z[:,t].reshape(1, -1), W)
        z[:,t+1] = func_activate[trial_pattern](u[:,t+1])
        y[:,t] = functions.sigmoid(np.dot(z[:,t+1].reshape(1, -1), W_out))

        #誤差
        loss = functions.mean_squared_error(dd, y[:,t])

        delta_out[:,t] = functions.d_mean_squared_error(dd, y[:,t]) *
functions.d_sigmoid(y[:,t])

        all_loss += loss

        out_bin[binary_dim - t - 1] = np.round(y[:,t])

    # 逆伝播(BPTT)
    for t in range(binary_dim)[::-1]:
        X = np.array([a_bin[-t-1],b_bin[-t-1]]).reshape(1, -1)

        delta[:,t] = (np.dot(delta[:,t+1].T, W.T) + np.dot(delta_out[:,t].T,
W_out.T)) * func_d_activate[trial_pattern](u[:,t+1])

        # 勾配更新
        W_out_grad += np.dot(z[:,t+1].reshape(-1,1), delta_out[:,t].reshape(-1,1))
        W_grad += np.dot(z[:,t].reshape(-1,1), delta[:,t].reshape(1,-1))
        W_in_grad += np.dot(X.T, delta[:,t].reshape(1,-1))

    # 勾配適用
    W_in -= learning_rate * W_in_grad
    W_out -= learning_rate * W_out_grad
    W -= learning_rate * W_grad

    W_in_grad *= 0
    W_out_grad *= 0
    W_grad *= 0

    if(i % plot_interval == 0):
        all_losses.append(all_loss)
        print("iters:" + str(i))
```

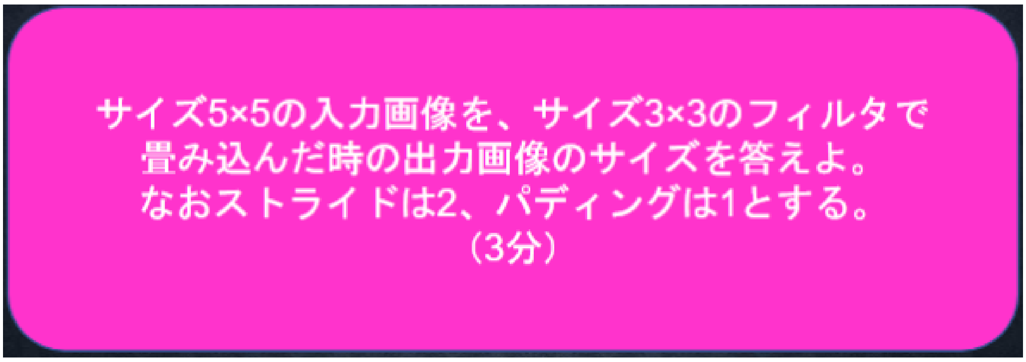
```
        print("Loss:" + str(all_loss))
        print("Pred:" + str(out_bin))
        print("True:" + str(d_bin))

        # out_binを10進数に直す→out_int
        out_int = 0
        for index,x in enumerate(reversed(out_bin)):
            out_int += x * pow(2, index)
        print(str(a_int) + " + " + str(b_int) + " = " + str(out_int))
        print("------------")

lists = range(0, iters_num, plot_interval)
plt.title("No."+str(trial_pattern)+":"+trial_weight_initializer + "/" +
trial_activation)
plt.xlabel("iter")
plt.ylabel("loss")
plt.plot(lists, all_losses, label="loss")
plt.show()
```

実行結果は以下

- 学習終了時に誤差(loss)が一番小さかったのはNo.2(Xavier＆tanh)で、収束も早い
- No.1(Xavier＆シグモイド)は、誤差が元コードと同等まで小さくなったものの、収束がやや遅め
- No.3(He＆ReLU)は、
  - 誤差が減少しておらず、学習できていない。
  - 何回か動作させると、出力層のシグモイド関数がNaN(0割り)を返しエラー停止することがある。
  - 0割り(NaN)発生時は、勾配爆発が起きていると考えられる。

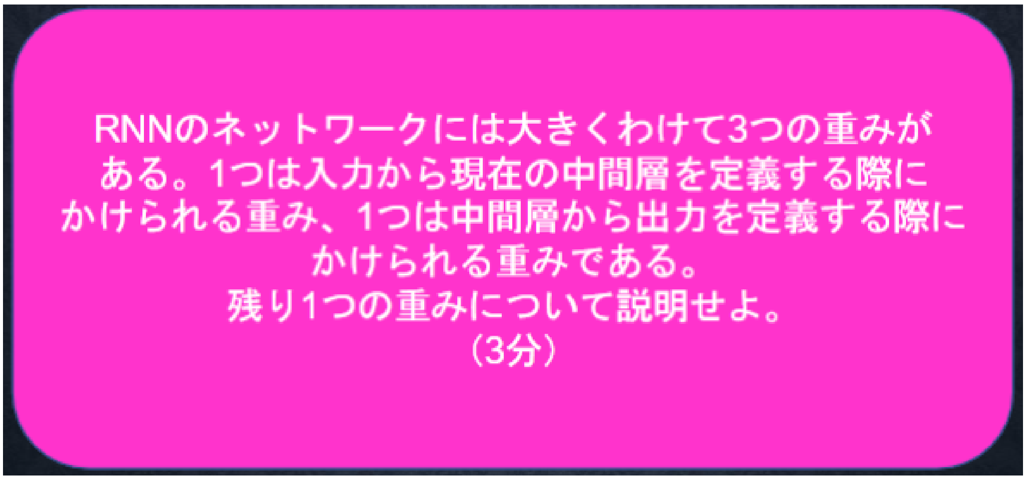
	重みの初期化	**中間層の活性化関数**	**結果(loss)**	**結果(グラフ)**
No.1	Xavier	シグモイド関数	0.02378	
No.2	Xavier	tanh関数	0.00001	
No.3	He	ReLU関数	1.04456	
元コード	標準正規分布	シグモイド関数	0.00622	

3. 確認テスト



3x3

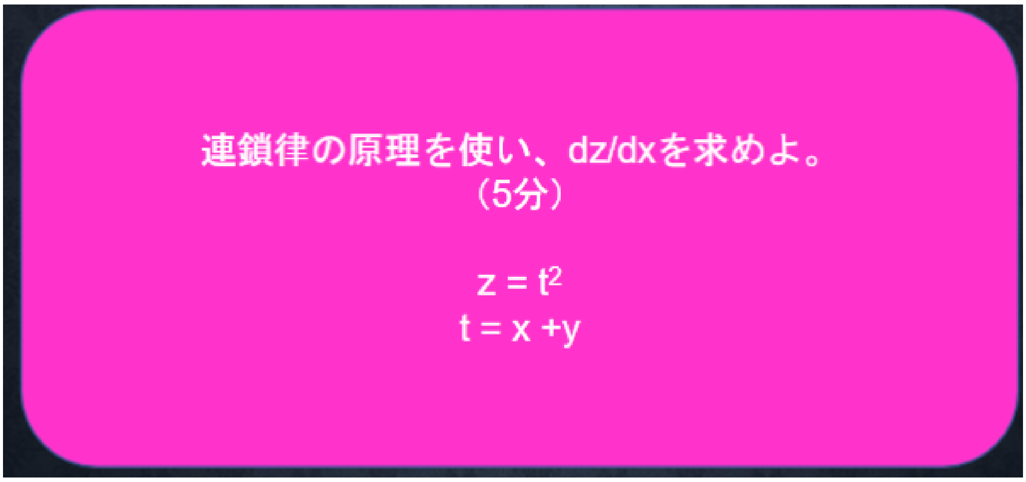
※動画では、2x2が正解、とあったが、これはフィルタサイズ5x5の場合の結果。フィルタサイズ3x3の場合は、出力画像3x3が正しい。



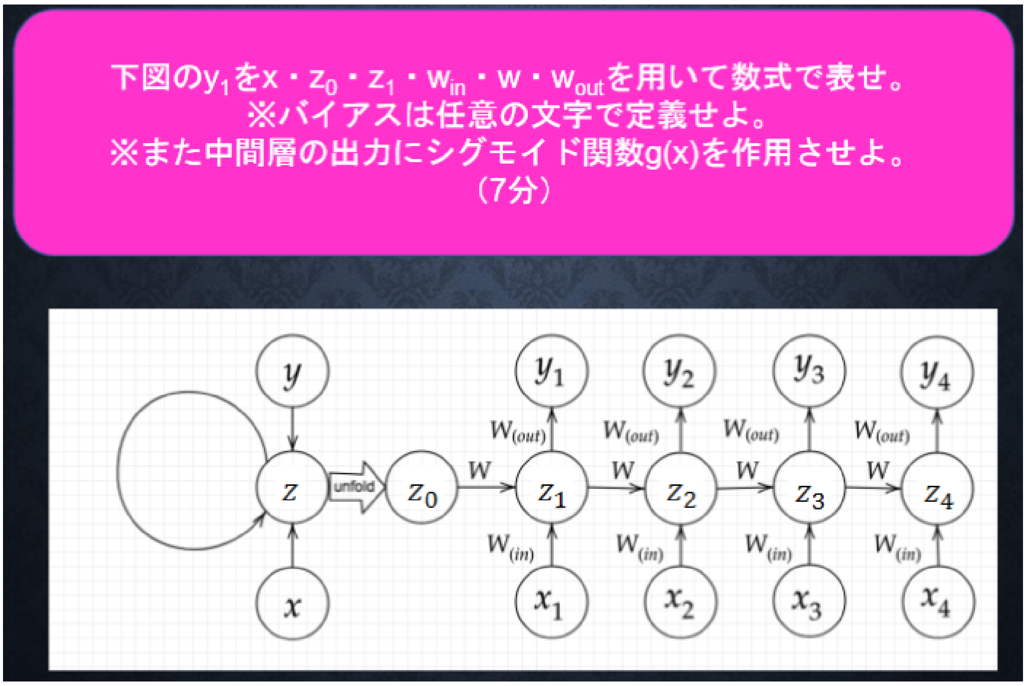
過去の中間層から現在の中間層を定義する際にかけられる重み。

(2) W.dot(np.concatenate([left, right]))

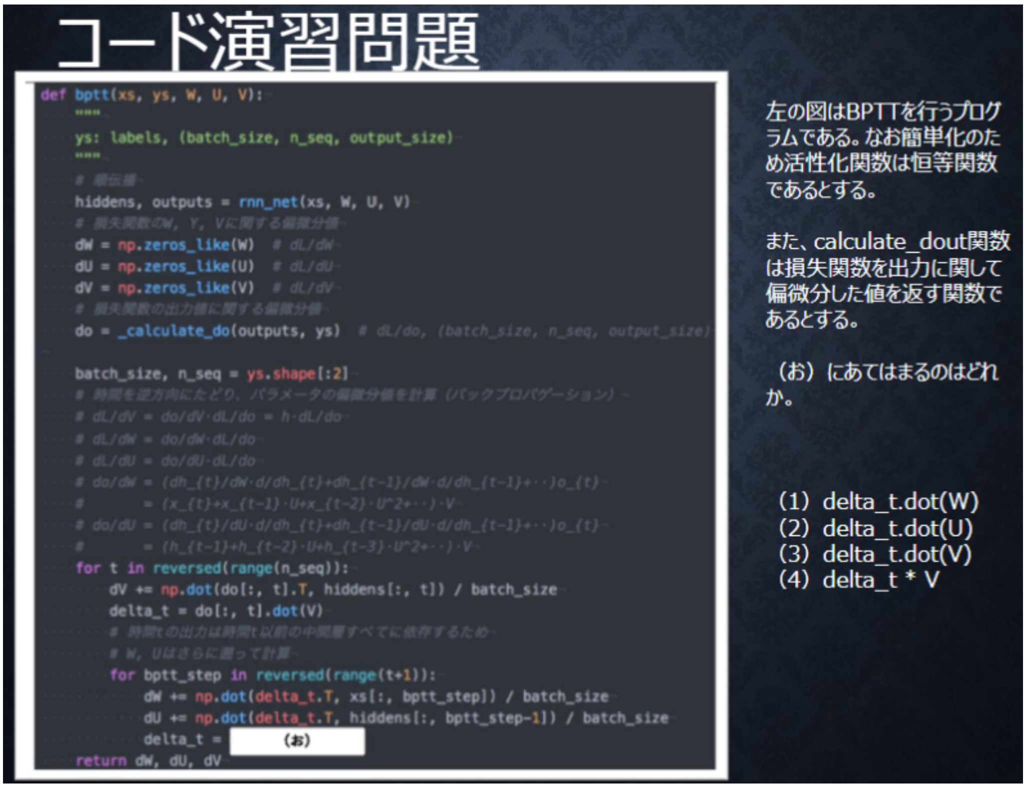
traverseは再帰的に文全体の表現ベクトルを得る関数のため、 left, rightの数値を保ったまま（四則演算等をしないで）結合する必要がある。よって、(2)が正解。



$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{dt} \cdot \frac{dt}{dx} = 2t \cdot 1 = 2(x + y)$$



- $y_1 = g(W_{(out)} z_1 + c)$
- $z_1 = f(W_{in} x_1 + W z_0 + b)$



（お）は、以下漸化式を実装した箇所となる。

- $\delta_{t-1} = \delta_t \frac{du_t}{du_{t-1}}$

$\frac{du_t}{du_{t-1}} = U$ であるため、正解は「(2) delta_t.dot(U)」である。