

熱力学的選択ルールを用いた CNN 構造の自動最適化

1 はじめに

近年、画像認識技術は著しい進化を遂げている。画像認識に広く用いられる技術の一つとして、畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network: CNN) がある。CNN は、畳み込み層、プーリング層、全結合層の 3 種類の層と、活性化関数からなり、それらの組み合わせ方が識別精度を左右する。しかし、現代の CNN の構造は、問題の高度化に伴い複雑になる一方である。数ある構造の中から最適なものを探し出すことは困難な組み合わせ最適化問題であり、更にそれを人手で行うことは難しい。そこで、様々な問題を最適化する効果的な手法である遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) を CNN の構造探索に用いる、gaCNN が提案されている。しかし、この手法においては、GA の選択ルールに対する十分な検討がなされていない。

そこで、本実験では、GA の選択ルールを熱力学的選択ルールとする、熱力学的遺伝アルゴリズム (Thermodynamical Genetic Algorithm: TDGA) を用いて CNN 構造を最適化する、tdgaCNN を提案する。ベンチマークデータセットを用いてその性能を評価し、従来手法との比較を行い、その優位性を確かめる。

2 要素技術

2.1 gaCNN

gaCNN は、GA によって CNN の構造を自動最適化する手法である。FashionMNIST・MNIST で検証した結果、競合 16 手法のうち 12 手法の精度を上回ったほか、従来は数日以上かかっていた最適化を 1 日以内に圧縮することに成功したことが報告されている。

2.2 熱力学的選択ルール

温度 T において熱平衡状態にあるシステムでは、状態の定常分布は自由エネルギー

$$F = \langle E \rangle - HT \quad (1)$$

を最小にする分布になることが知られている。ここで、 $\langle E \rangle$ はシステムの平均エネルギー、 H はエントロピーである。(1) 式の右辺第一項は、系がエネルギー最小化という本来の目的を追求する項、第 2 項は系の状態の多様性を維持する項と解釈することができる。つまり、同一個体が多い状態よりも、様々な個体が存在している状態のほうが乱雑であり、エントロピーが高いと考える。そして、これらを温度 T で調和させた状態が実現されているものとする。この考え方のもと、温度 T を適切に設定することで、GA における探索初期に個体の多様性が失われるという、初期収束問題を解決することができる。

ここで、(1) 式におけるエントロピー H について、個体群中の個体の遺伝子型についてのエントロピー H^{ALL} は、

$$H^{\text{ALL}} = - \sum_x p_x \log p_x \quad (2)$$

と表すことができる。ここで、 p_x は遺伝子型 x の存在確率である。(2) 式で表されるエントロピー H^{ALL} は、最も自然な表現であるが、遺伝子型として可能な状態 $x \in \mathcal{F}$ のうち各個体がとりうる値は高々個体数 N_p 程度であり、 $|\mathcal{F}|$ に比べて極めて小さくなる。このため、遺伝子型空間における多様性が低い状態でも、エントロピーが高くなってしまったり、同じエントロピー評価を持つ分布が大量に生じてしまう問題が生じる。そこで、次式のように各遺伝子座ごとにエントロピーを評価する方法を採用する。

$$H^1 = \sum_{k=1}^M H_k^1, \quad H_k^1 = - \sum_{j \in \{0,1\}} P_j^k \log P_j^k \quad (3)$$

(3) 式において、 M は遺伝子長、 H_k^1 は個体群の遺伝子座 k の遺伝子に関するエントロピーを、 P_j^k は遺伝子座 k における対立遺伝子 j の存在確率を表す。実際の計算においては、存在確率を直接求めることは不可能であるので、その推定値として、 P_j^k には個体群での遺伝子座 k における対立遺伝子 j の存在割合を用いる。

2.3 tdgaCNN

熱力学的選択ルールでは、(3) 式に則って個体の選択を行うが、(3) 式は、すべての個体の遺伝子長

M が等しいという条件のもとで成り立つ式で、遺伝子長が個体によって異なる gaCNN にそのまま適用することはできない。よって本実験では、(3) 式に代わる多様性指標を以下の式で定義した。

$$H = H_D, \quad H_D = \frac{\sum_{s \in S \setminus p} L(p, s)}{|S|} \quad (4)$$

ここで、 p は新たに選択する個体、 S は選択済みの個体集合に p を加えた集合、 $L(x, y)$ は、個体 x と個体 y における遺伝子配列の層に対する Levenshtein 距離である。 H_D の値が大きいほど、個体群内の各個体間の類似度が小さいということになり、それは即ち、個体には多様性があるということを意味する。