

tdgaCNN における適応度評価手法の検討

1 はじめに

近年、機械学習を用いた画像認識が注目を集めている。その一つに畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network: CNN) がある。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が、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ための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 [1] が提案されたが、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。適切な選択ルールを用いないと、探索初期に個体の多様性が失われる、初期収束が問題となる。そこで、先行研究においては、GA の選択ルールに熱力学的選択ルールを採用した、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 が提案され、従来手法との比較を行なった結果、その優位性が確認された。

先行研究では、tdgaCNN の探索フェーズにおける適応度を、各個体を 1 エポックだけ学習させたときの精度として評価していた。そこで、本実験では、最終的により良い個体を得ることを目的とし、様々なエポック数で個体を学習させ、適応度の評価方法を検討する。

2 要素技術

2.1 畳み込みニューラルネットワーク

画像認識分野では、さまざまな深層学習手法が提案されてきているが、畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network: CNN) はその中でも特に顕著な成功を収めている手法である。CNN のアーキテクチャは、畳み込み層、プーリング層、全結合層の 3 種類の層と、それに伴う活性化関数から構成され、それらの組み合わせ、そして各種パラメータが識別精度を左右する。

2.2 遺伝的アルゴリズム

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) は、生物の進化からヒントを得た最適化手法で、問題の解を個体とみなし、その遺伝子を表現する配列に、交叉、突然変異、選択といった操作を繰り返し適用する。そして、ある個体がどの程度優れているかの指標である適応度を、各個体について計算し、高いものを次世代に残し、低いものを淘汰する。これを複数世代繰り返すことによって、最終的に良い解を得ようとする。

2.3 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。

2.4 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。

また、(1) 式中の H は、以下の式で表される。

$$H = H_D, \quad H_D = \frac{\sum_{s \in S \setminus p} L(p, s)}{S_S} \quad (2)$$

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、 S_S は、集合 S の要素数である。 H_D の値が大きいほど、個体群内の各個体間の類似度が低いということになる。つまり、個体には多様性があるということを意味する。

2.5 TDGA

熱力学的遺伝アルゴリズム (Thermodynamical Genetic Algorithm: TDGA) は、個体の多様性維持を目的として、GA の選択ルールに熱力学的選択ルールを採用した手法である。先行研究において、従来手法よりも優れた CNN アーキテクチャの獲得が報告されている。

3 提案手法

3.1 tdgaCNN

TDGA を用いて CNN のアーキテクチャを探索する手法が tdgaCNN である。tdgaCNN の流れを以下に示す。

1. 遺伝子初期化戦略に基づき個体を生成し、初期母集団とする。
2. 母集団の個体の適応度を評価する。
3. 母集団から個体を母集団の一定割合選択し、集合 S を形成する。
4. S からランダムに選択した 2 個体に交叉操作を適用し、集合 C に加えるという操作を C の大きさが母集団の一定割合になるまで繰り返す。
5. S と C からランダムに選択した個体に突然変異操作を適用し集合 M に加えるという操作を M の大きさが一定割合になるまで繰り返す。
6. $S + C + M$ を次世代の母集団とする。
7. 2 から 6 を世代回数だけ反復する。
8. 最終世代で最も適応度が高い個体を本学習する。

3.2 遺伝子符号化

個体の遺伝子配列は CNN の層の順番に対応し、遺伝子座は層と活性化関数の組を保持する。層の候補は、畳み込み層、プーリング層、全結合層の 3 つで、活性化関数の候補は ReLU, tanh, Sigmoid 関数の 3 つである。また、層の種類に応じた複数のパラメータ値を持つ。

3.3 遺伝子初期化戦略

層数、全結合層の最小数及び最大数を事前に定め、以下のように遺伝子を初期化する。

1. 層数の大きさを持つ空の遺伝子配列を用意する。また、全結合層の数を最大数と最小数の範囲からランダムに決定する。
2. 先頭に畳み込み層とランダムな活性化関数のペアを追加する。
3. ランダムな層とランダムな活性化関数のペアを追加する。ただし、前の層が全結合層である場合は、追加する層の種類は全結合層とする。
4. 遺伝子長が最大層数、あるいは全結合層の数が所定の数に達するまで 3. を繰り返す。

3.4 適応度評価

本学習フェーズの学習データを全て探索フェーズの学習データとして使用し、学習データに対する所定のエポック数だけの分類精度を適応度とする。先行研究では、エポック数を 1 として適応度を評価していた。また、生成されたモデルが無効である場合は、致死個体として、適応度を 0 とする。

3.5 選択

熱力学的選択ルールを採用する。

3.6 交叉

選択された 2 個体について、同じ種類の層を持つ遺伝子座を前から順に交換することで新たな 2 個体を生成する。このとき、活性化関数も同時に交換する。対になるものがない遺伝子座はそのまま維持する。

3.7 突然変異

以下の4種類の操作から1つを等確率で適用する。

- 層と活性化関数のランダムなペアをランダムな位置に追加
- ランダムな位置にある遺伝子座を削除
- ランダムな遺伝子座の層パラメータすべてと活性化関数をランダムに変更
- ランダムな位置に畳み込み層、ReLU、プーリング層のブロックを追加

4 実験概要

tdgaCNNの先行研究では、GAでの探索フェーズで、CNNを1エポックのみ学習させて、適応度を算出していたが、本実験では、適応度算出のためのエポック数が n_i である世代の数を g_i 、 c を定数としたとき、

$$\sum_i n_i g_i = c \quad (3)$$

となるような、様々な世代数とエポック数の組み合わせでtdgaCNNを実行した場合、最終的な最良個体の精度にどのような影響を及ぼすか変化があるかを検証した。式(3)に従うことで、各試行において、計算量をほとんど一定に保って実験することができる。本実験では、 $c = 80$ として実験した。

4.1 実験用初期個体群の作成

1度のtdgaCNN実行にかかる時間を短縮するために、後に行う実験の初期個体群として、tdgaCNNによってある程度適応度の平均を高めた個体群を作成した。作成の際は、ランダムな100個体を、1エポックの学習での精度を適応度として、20世代探索を行なった。

4.2 実験1

探索フェーズにおいて、エポック数を固定して実験を行った。つまり、式(3)において、 $i = 1$ のみとして、80世代1エポック、40世代2エポック、20世代4エポック、16世代5エポック、10世代8エポック、8世代10エポックの計6パターンでtdgaCNNを実行した。

4.3 実験2

実験1では、探索フェーズでのエポック数を固定して実験したが、実験2では、探索フェーズの序盤から終盤にかけて、表1のように、エポック数 n を増加させた場合と、減少させた場合の2パターンにおいて実験した。

表1: 実験2の条件

(a) n を増加させる場合

i	g_i	n_i
1	16	1
2	8	2
3	4	4
4	2	8
5	1	16

(b) n を減少させる場合

i	g_i	n_i
1	1	16
2	2	8
3	4	4
4	8	2
5	16	1

4.4 データセット

データセットには、FashionMNISTを用いた。図1のように7万枚の画像を、初期母集団作成時の探索フェーズでの訓練データ3万枚、実験1, 2の探索フェーズでの訓練データ3万枚、そしてテストデータ1万枚に分割して使用した。

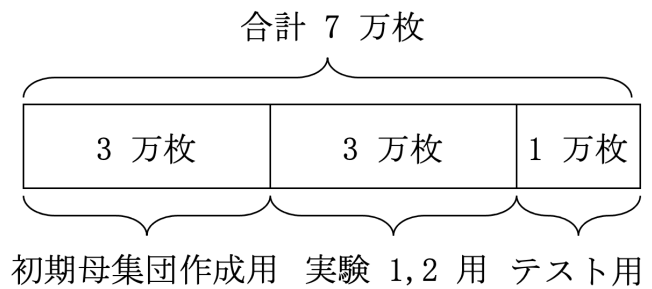


図1: データセットの分割

5 実験結果

5.1 実験用初期個体群の作成

探索前の個体群の適応度の平均値は63.26%で、20世代探索後の個体群の適応度の平均値は、85.64%となっており、上昇していることがわかり、当初

表 2: 実験 1, 2 において共通の実験条件

個体数	100
層数	10
最小全結合層数	1
最大全結合数	3
選択割合	40
交叉割合	40
突然変異割合	20
本学習エポック数	100
探索バッチサイズ	24
本学習バッチサイズ	16
学習率	1e-4
最適化手法	Adam
温度	0.04

の、後の実験の時間短縮という目的の達成が見込まれる。よって以下の実験 1, 2 では、ここで作成した個体群を初期個体群として採用した。

5.2 実験 1 の結果

作成した初期母集団を用いて、 $gn = 80$ として実験を行った結果を表 3 に示す。表 3 の値は、各試行の最終世代において最も適応度が高かったものを 100 エポック本学習させたときの最良識別精度である。表 3 より、エポック数 n と世代数 g の組 (n, g) が、 $(80, 1)$, $(40, 2)$, $(20, 4)$, と、 n が増えるにつれて識別精度が良くなり、 $(n, g) = (16, 5)$ の時にピークを迎え、その後は識別精度は悪化していったことが読み取れる。

表 3: 実験 1 の結果

世代数	エポック数	識別精度 [%]
80	1	92.04
40	2	92.13
20	4	92.26
16	5	93.09
10	8	90.00
8	10	92.29

5.3 実験 2 の結果

実験 2 の結果を表 4 に示す。表 4 から、探索フェーズ終盤にエポック数を大きくした方が、より良い個体を得ることができるということがわかる。

表 4: 実験 2 の結果

条件	1 回目 [%]	2 回目 [%]	平均値 [%]
n 増加	91.91	92.39	92.15
n 減少	91.34	91.96	91.65

6 まとめと今後の課題

本実験では、tdgaCNN における適応度評価を様々な方法で行い、それが得られる CNN の精度にどのような影響を及ぼすかを実験した。その結果として、1 エポックのみ学習させた時の精度を適応度としたときよりも、適切なエポック数を定め、そのエポック数で学習させた時の精度を適応度とした時の方が良い個体が見られるということがわかった。また、探索序盤よりも、探索終盤に適応度評価のための学習エポック数を増やす方が、より良い個体が見られるということもわかった。

今後の課題として、まずは、試行回数を増やすことで、結果をより信憑性のあるものにすることが挙げられる。また、本実験で、適応度評価のための学習エポック数を変化させると、得られる個体の良し悪しに影響を及ぼすということはわかったが、そのエポック数をどのように最適化するかということについては解明できていない。様々な実験状況下で、エポック数を最適化する方法を考案することも、今後の課題である。

参考文献

- [1] Raphael de Lima Mendes, Alexandre Henrick da Silva Alves, Matheus de Souza Gomes, Pedro Luiz Lima Bertarini, and Laurence Rodrigues do Amaral. gacnn: Composing cnns and gas to build an optimized hybrid classification architecture. In *2021 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, pp. 79–86, 2021.