KYOTO UNIVERSITY

統計的モデリング基礎⑥
～ニューラルネットワーク～

鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE
AND TECHNOLOGY

ロジスティック回帰

判別問題：
ダミー変数を従属変数として説明（予測）する問題

- データ（ n 組の独立変数と従属変数）
  - 独立変数：$\left(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(n)}\right)$
  - （ダミー）従属変数：$\left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right), y^{(i)} \in \{+1, -1\}$

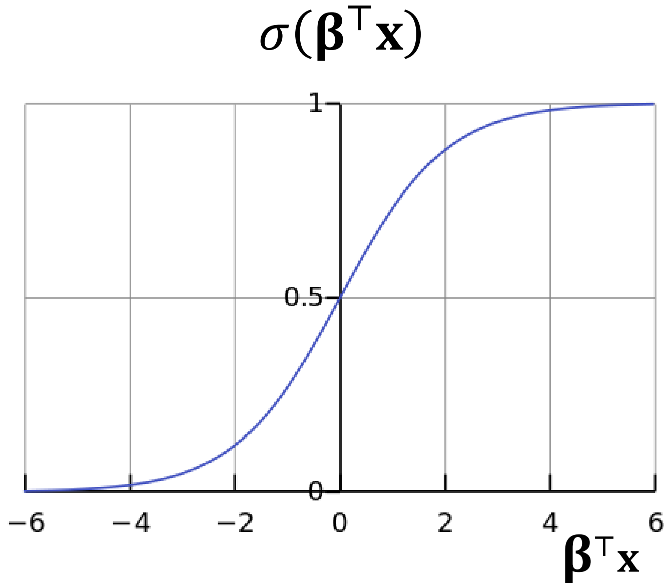
以降、表記上の利便性からダミー従属変数を $\{0,1\}$ でなく $\{+1, -1\}$ と表記する
（本質的な違いはナシ）

ロジスティック回帰：ダミー変数を従属変数とするモデル

- 従属変数の値域が$\{-1, +1\}$となるモデル
- ロジスティック回帰モデルは$Y = +1$となる確率を与える：

$$P(Y = 1|\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{1+\exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})} = \sigma(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$$

- σ：ロジスティック関数（$\sigma: \mathbb{R} \to (0,1)$）
  - 実数を確率に変換する



ロジスティック回帰のパラメータ推定：
パラメータの繰り返し更新によって最適解を求める

- 最尤推定の目的関数（最大化）：

$$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n} \log\left(1 + \exp\left(-y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$$

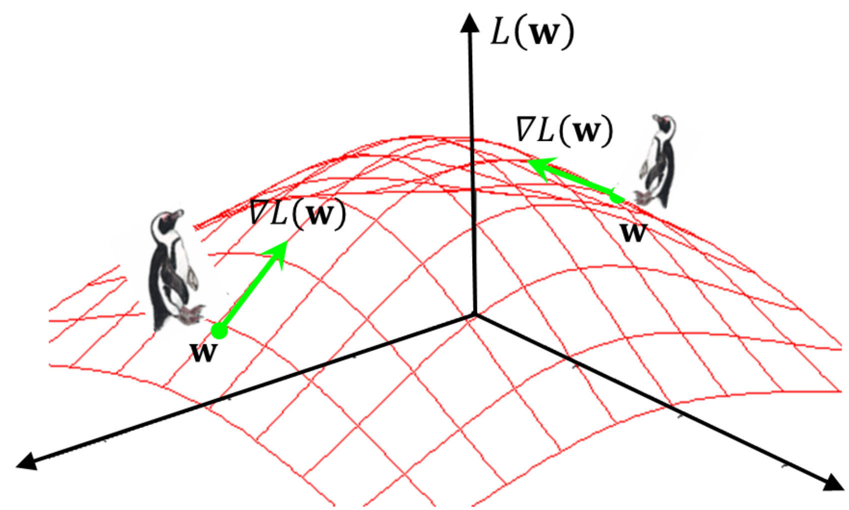
- 数値的な最適化手法によりパラメータを推定する
- パラメータの更新をくりかえす： $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \mathbf{d}$

最急降下法※
最もシンプルな最適化手法

- 最急降下法：

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \eta \nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

  - 勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta})$ は最も急な（目的関数が最も増加する）向き
  - 学習率 η は線形探索で求める：



※ 最急降下法の名前は、最小化問題を想定しているが、ここでは最大化問題としているので
降下じゃなくて上昇しているが、便宜上こう呼ぶことにする

ロジスティック回帰の勾配計算：比較的簡単に計算可能

- 対数尤度：$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n} \ln\left(1 + \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$

- $$\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{1+\exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)} \frac{\partial\left(1+\exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{1+\exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)} \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right) y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

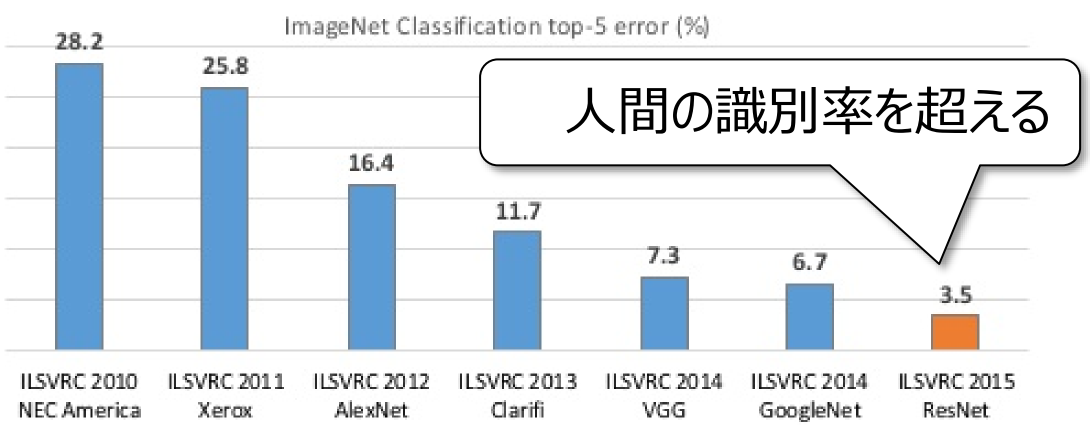
$$= \sum_{i=1}^{n} \left(1 - f\left(y^{(i)} \middle| \mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\beta}\right)\right) y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

現在のパラメータでのモデルが与える確率

ニューラルネットワーク

深層学習（ディープラーニング）の出現：
機械による認識の大幅な精度向上

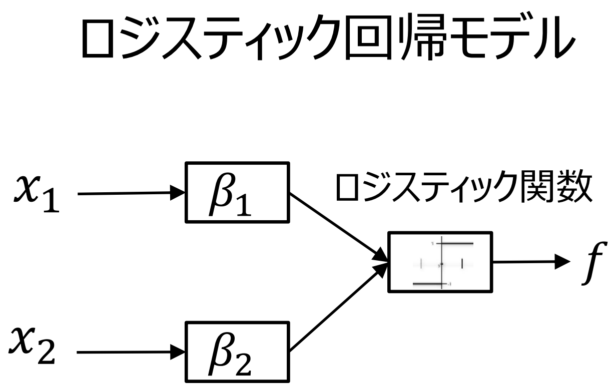
- ニューラルネットワーク：
  1980年代に盛んに研究がされていたがその後下火に
- 画像識別で10%以上の記録更新、一躍注目を浴びる
  → 畳み込みニューラルネットがデファクト・スタンダードに
- GAFAを筆頭に数々の企業が深層学習に大きな投資
- 研究・開発のトレンドも
  深層学習が中心に

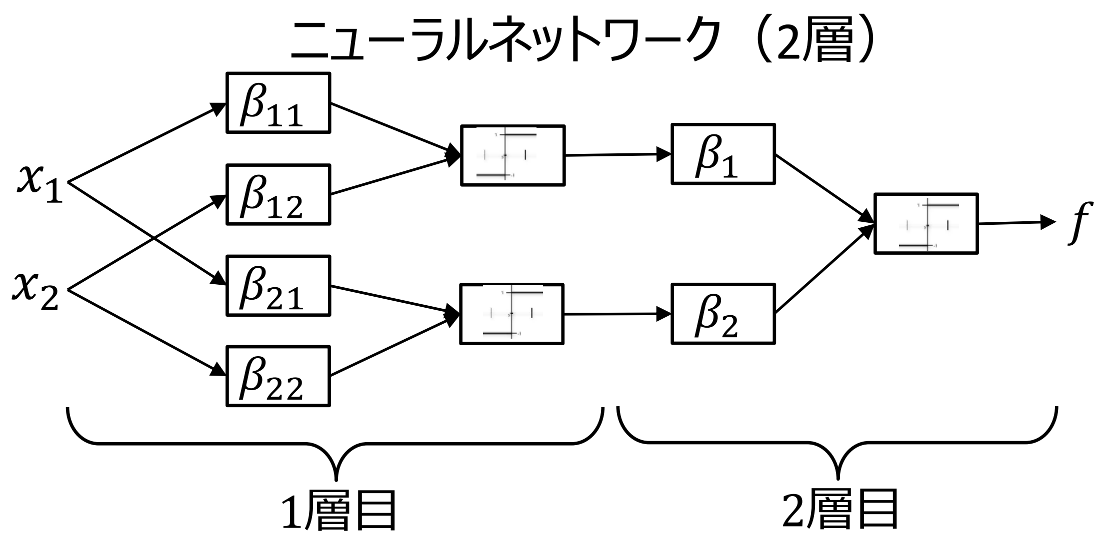


Microsoftの発表資料より抜粋

ニューラルネットワーク：（ざっくりいえば）ロジスティック回帰モデルを連結したもの

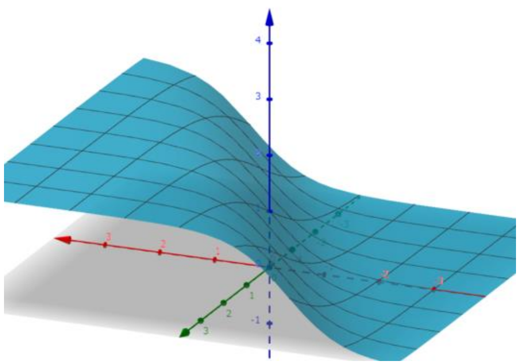
- ニューラルネットワークはロジスティック回帰モデルを連結したもの
  - 複数のロジスティック回帰モデルの出力が、別のロジスティック回帰モデルの入力になる
  - ロジスティック関数（非線形）によりモデルに非線形性を導入
  - 両者ともに、$y = +1$である確率$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$を出力するモデル



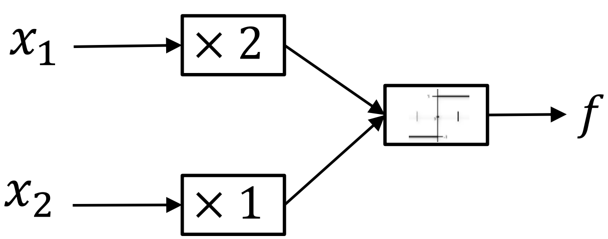


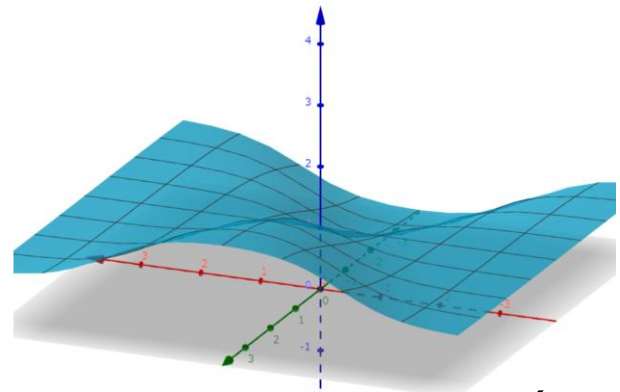
ニューラルネットワークの非線形性の例：
ロジスティック回帰を2層積むと非線形分類が可能

- ロジスティック回帰は1層では線形判別しかできない（AND/OR）
- 2層以上積むことで非線形の表現力を獲得（XOR）

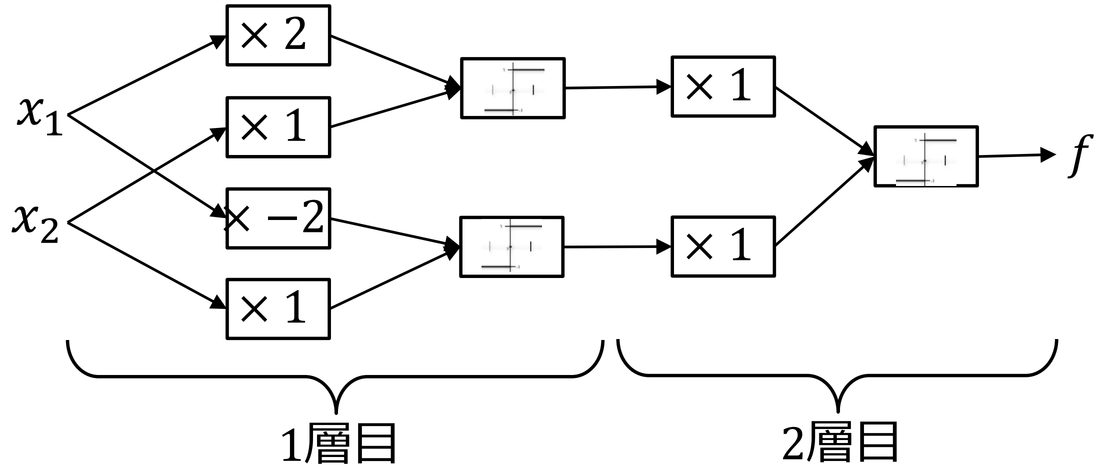


ロジスティック回帰モデル





ニューラルネットワーク（2層）



ニューラルネットワークのパラメータ推定：最急降下法を適用するために勾配の計算が必要

- 対数尤度関数$L(\boldsymbol{\beta})$を最大化するパラメータ$\boldsymbol{\beta}$を求める：

$$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n}\left(\delta\left(y^{(i)} = 1\right)\log f\left(x^{(i)}\right) + \delta\left(y^{(i)} = -1\right)\log\left(1 - f\left(x^{(i)}\right)\right)\right)$$

  - $f\left(x^{(i)}\right)$は$x^{(i)}$に対するニューラルネットの出力
    （$y^{(i)} = 1$である確率）

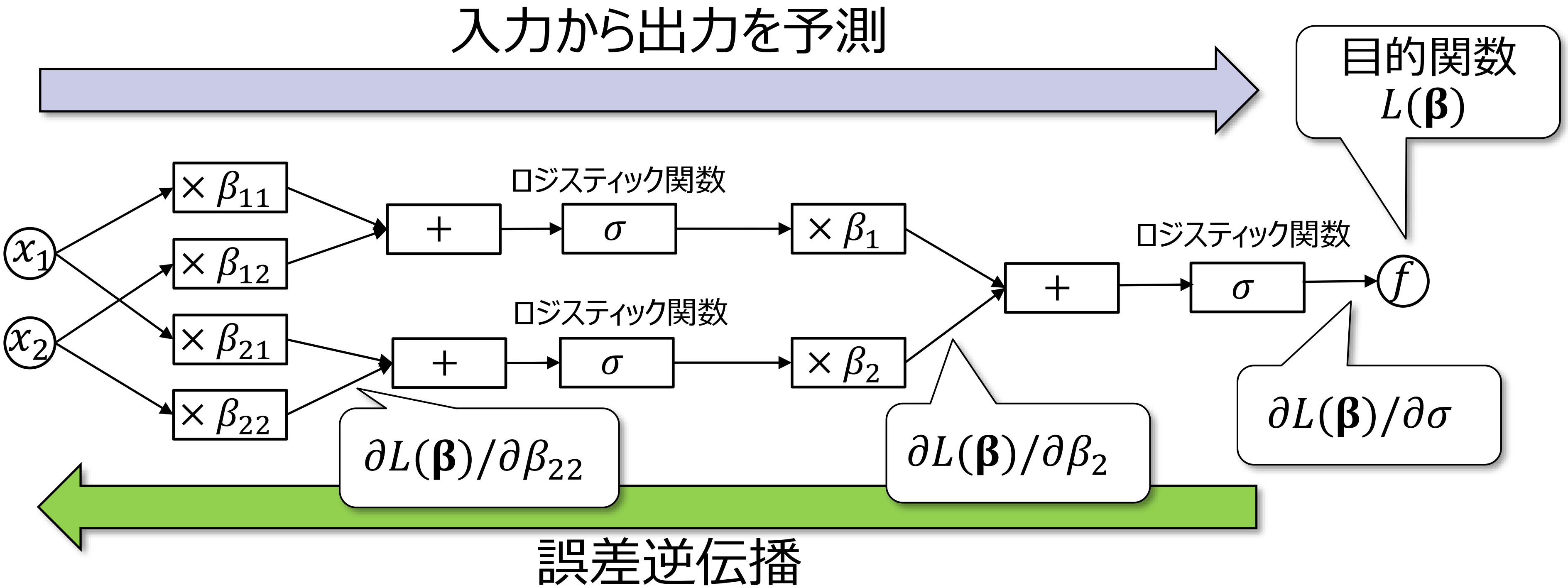
- 勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$が計算できれば最急降下法を適用できる：

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \eta \nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

  - 実際は確率的最適化やミニバッチを用いることも多い

ニューラルネットワークのパラメータ推定法：
誤差逆伝播法（自動微分）による勾配法でパラメータ推定

- 対数尤度$L(\mathbf{\beta})$ をパラメータで微分できれば勾配法で推定できる
- 誤差逆伝播法（自動微分）：層を遡って微分計算



誤差逆伝播法：
勾配を再帰的に効率的に計算できる

- 誤差逆伝播法：$L(\boldsymbol{\beta})$の勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$を計算する方法

- 1次元の場合の例：
  - fから「後ろ向きに」遡っていく計算（微分の連鎖率）
  - $\frac{\partial L}{\partial \beta_2} = \frac{\partial L}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \frac{\partial g_2}{\partial \beta_2}$
  - $\frac{\partial L}{\partial \beta_1} = \frac{\partial L}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \frac{\partial g_2}{\partial f_1} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial g_1} \cdot \frac{\partial g_1}{\partial \beta_1}$

共通なので層をまたいで使いまわし可能

$$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n}\Big(\delta\big(y^{(i)} = 1\big)\log f\big(x^{(i)}\big) + \delta\big(y^{(i)} = -1\big)\log\Big(1 - f\big(x^{(i)}\big)\Big)\Big)$$

σ:ロジスティック　　σ:ロジスティック

$$x \longrightarrow \boxed{\beta_1} \xrightarrow{g_1 = \beta_1 x} \boxed{\sigma} \xrightarrow{f_1 = \sigma(g_1)} \boxed{\beta_2} \xrightarrow{g_2 = \beta_2 f_1} \boxed{\sigma} \xrightarrow{f = \sigma(g_2)} f \longrightarrow L$$

まとめ：
ロジスティック回帰とニューラルネットワーク

- ロジスティック回帰：
  - ダミー変数$y \in \{+1, -1\}$を従属変数とするモデル
    - $y = +1$である確率を出力する
  - 最尤推定の対数尤度は、大域解をもつが、解析解をもたない
  - 非線形最適化法によって、最適解を求める
    - ニュートン法、再急降下法、確率的勾配法、…
- ニューラルネットワーク：
  - （乱暴にいえば）ロジスティック回帰の多層化
  - （ロジスティック回帰と異なり）非線形の識別が可能
  - 誤差逆伝播法によって、効率的に勾配が計算可能

計算グラフと自動微分

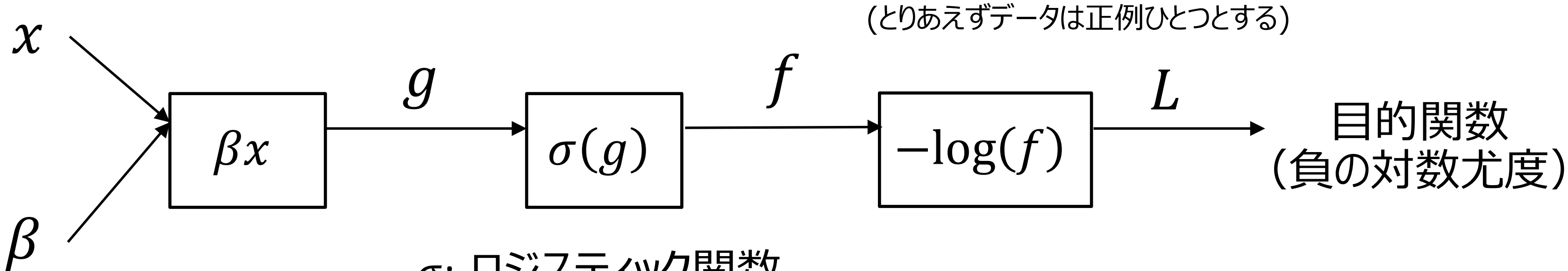
計算グラフ：
ニューラルネットの入力から出力までの計算を図示

- 計算グラフ：関数の入出力の間の関係を、単純な計算ユニットをつないで表したもの

- 計算グラフをたどりながら、入力に順番に単純な操作（重み付き和やロジスティック関数の適用など）を適用していくと、出力が得られる

- ロジスティック回帰の計算グラフ：

ロジスティック回帰の出力： $f = \sigma(\beta x)$
最適化問題の目的関数：$L = -\log f$
(とりあえずデータは正例ひとつとする)



σ: ロジスティック関数

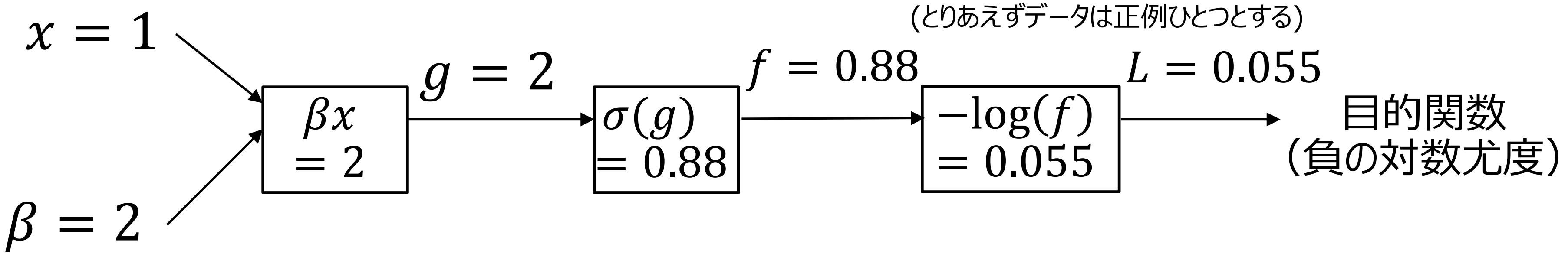
計算グラフ：
ニューラルネットの入力から出力までの計算を図示

- 計算グラフ：関数の入出力の間の関係を、単純な計算ユニットをつないで表したもの

- 計算グラフをたどりながら、入力に順番に単純な操作（重み付き和やロジスティック関数の適用など）を適用していくと、出力が得られる

- ロジスティック回帰の計算グラフ：

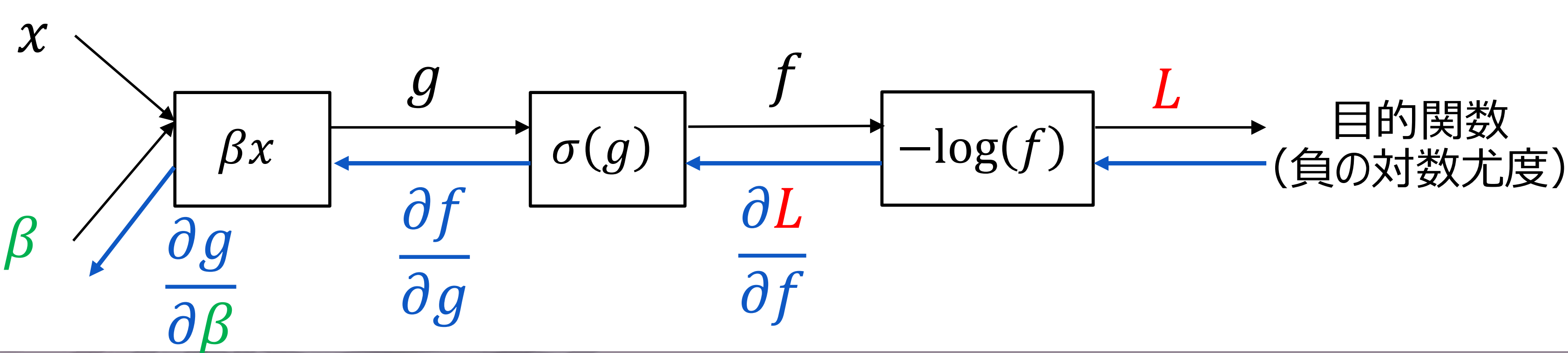
ロジスティック回帰の出力： $f = \sigma(\beta x)$
最適化問題の目的関数：$L = -\log f$
(とりあえずデータは正例ひとつとする)



σ: シグモイド関数

計算グラフ上での自動微分：
計算グラフを出力から逆向きにたどることで勾配計算

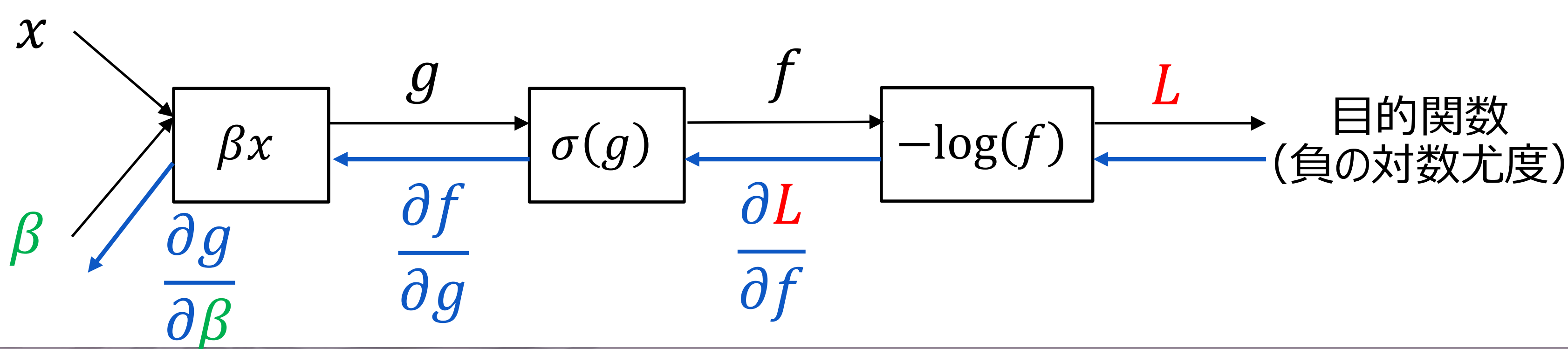
- 勾配計算：$\partial L/\partial \beta$を求めたい
- 計算グラフ上でLとβは遠い
- 計算グラフを逆向きにたどりながら、微分を計算する
  - ロジスティック回帰の場合： $\dfrac{\partial L}{\partial \beta} = \dfrac{\partial g}{\partial \beta} \cdot \dfrac{\partial f}{\partial g} \cdot \dfrac{\partial L}{\partial f}$



自動微分のポイント：
微分可能な計算ユニット

- 自動微分：計算グラフを逆向きにたどりながら（微分の連鎖律によって）微分を計算する

- 各ユニットは、入力について微分可能である必要がある
  - $\frac{\partial f}{\partial g} = \frac{\partial \sigma(g)}{\partial g} = \sigma(g)\big(1 - \sigma(g)\big)$ （ロジスティック関数の微分）
  - $\frac{\partial g}{\partial \beta} = \frac{\partial \beta x}{\partial \beta} = x$



ニューラルネットワーク推定のポイント：
微分可能なユニットを組みあわせて自動微分にまかせる

- ニューラルネット推定法の汎用性

1. ネットワークを「計算グラフ」で記述する
   – 各ユニットはパラメータや入力について微分可能とする
2. 誤差逆伝播で自動的に勾配が計算できる（自動微分）