KYOTO UNIVERSITY

統計的モデリング基礎⑥
～ニューラルネットワーク～

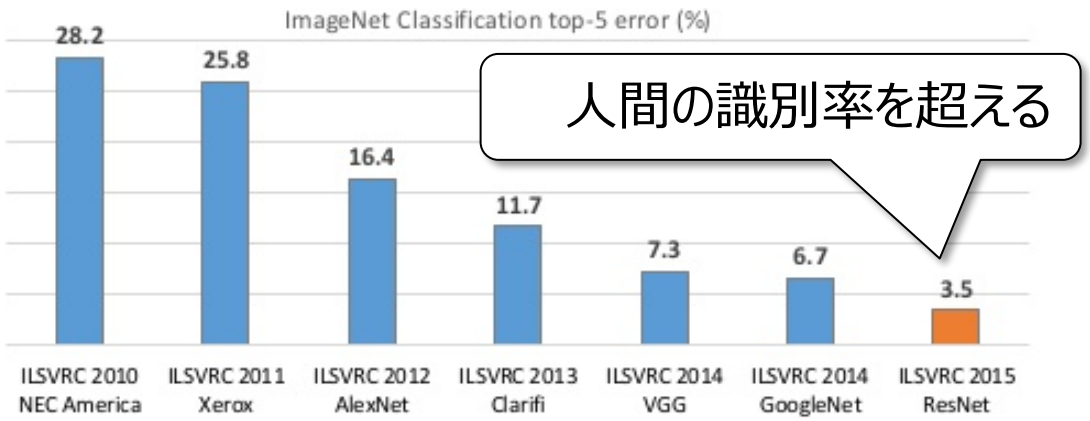
鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE AND TECHNOLOGY

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

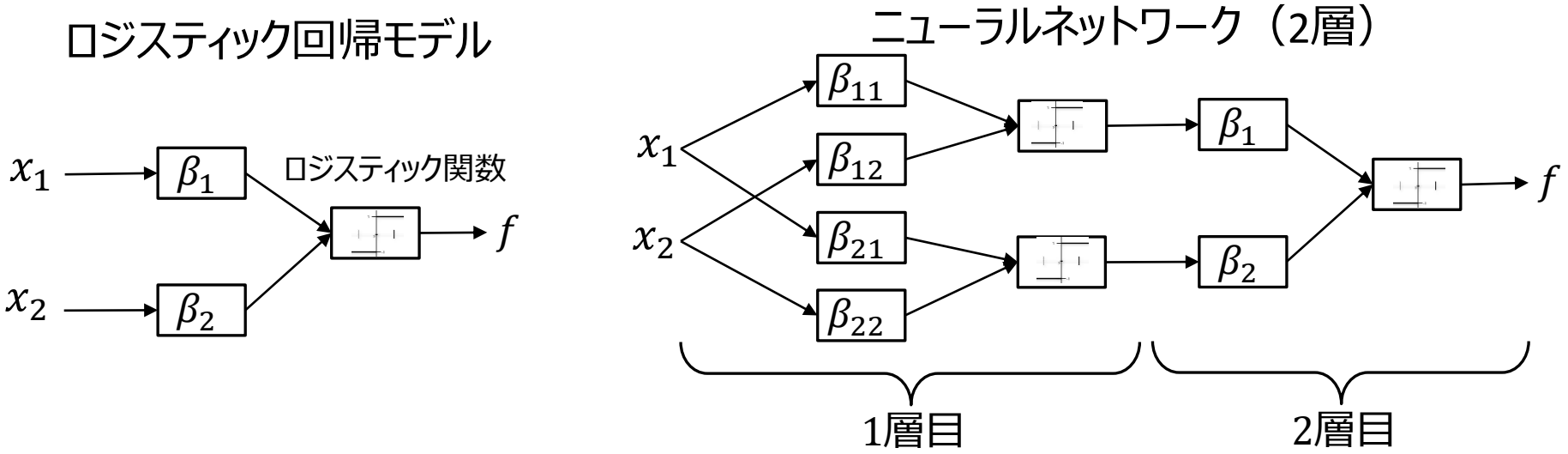
- ニューラルネットワーク：
  1980年代に盛んに研究がされていたがその後下火に
- 画像識別で10%以上の記録更新、一躍注目を浴びる
  → 畳み込みニューラルネットがデファクト・スタンダードに
- GAFAを筆頭に数々の企業が深層学習に大きな投資
- 研究・開発のトレンドも
  深層学習が中心に



Microsoftの発表資料より抜粋

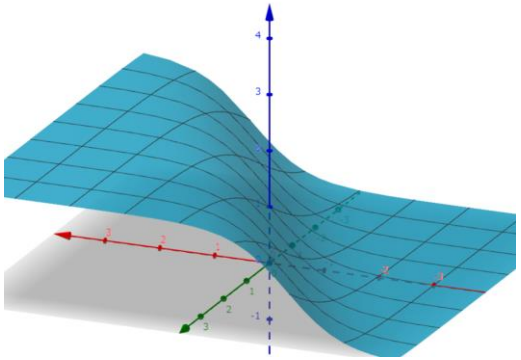
ニューラルネットワーク：（ざっくりいえば）ロジスティック回帰モデルを連結したもの

- 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

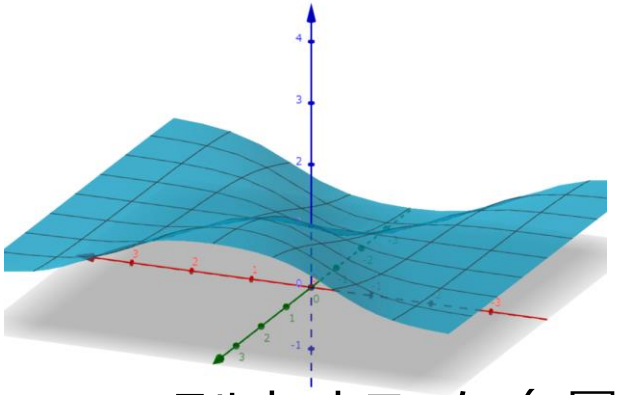


ニューラルネットワークの非線形性の例：ロジスティック回帰を2層積むと非線形分類が可能

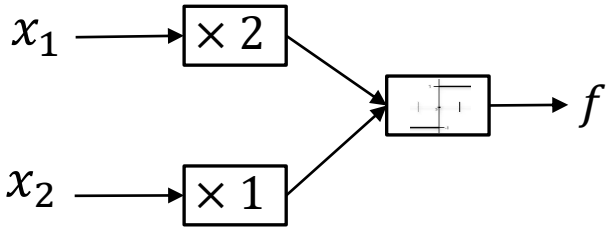
- ロジスティック回帰は1層では線形判別しかできない（AND/OR）
- 2層以上積むことで非線形の表現力を獲得（XOR）

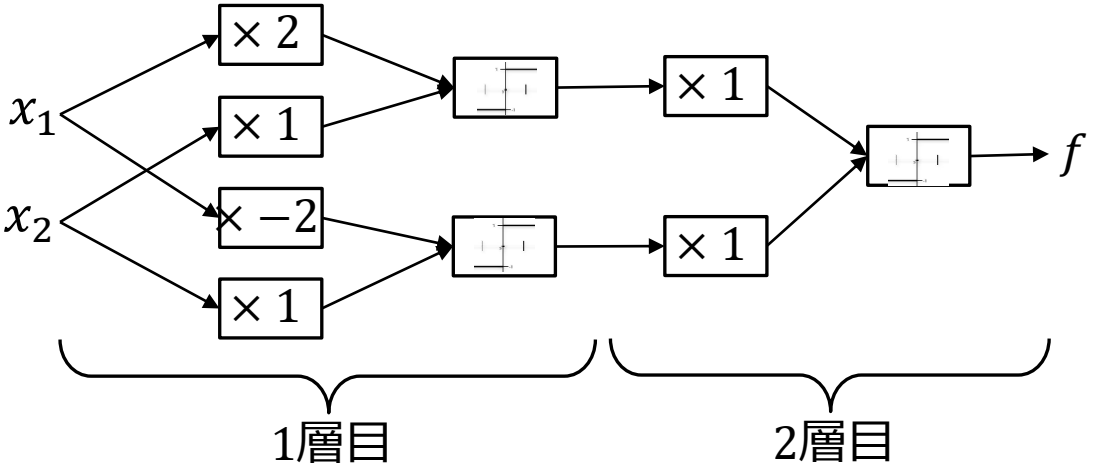


ロジスティック回帰モデル



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）

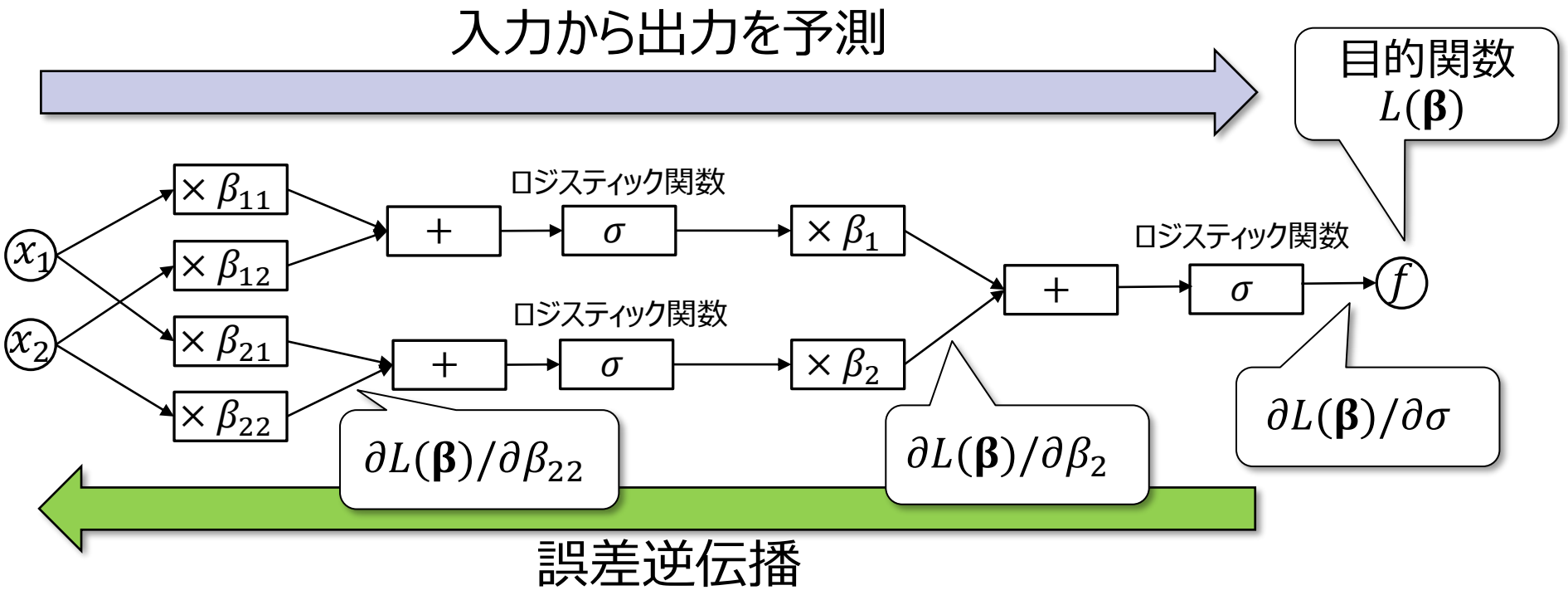
- 勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$が計算できれば最急降下法を適用できる：

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

  - 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$L(\boldsymbol{\beta})$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



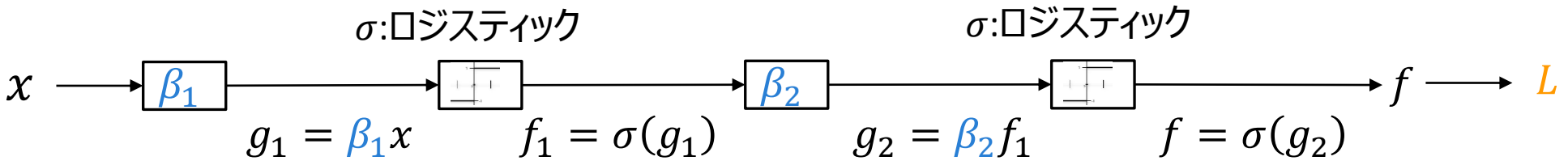
誤差逆伝播法：勾配を再帰的に効率的に計算できる

- 誤差逆伝播法：$L(\boldsymbol{\beta})$の勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$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）
  - $\dfrac{\partial L}{\partial \beta_2} = \dfrac{\partial L}{\partial f} \cdot \dfrac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \dfrac{\partial g_2}{\partial \beta_2}$
  - $\dfrac{\partial L}{\partial \beta_1} = \dfrac{\partial L}{\partial f} \cdot \dfrac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \dfrac{\partial g_2}{\partial f_1} \cdot \dfrac{\partial f_1}{\partial g_1} \cdot \dfrac{\partial g_1}{\partial \beta_1}$

共通なので層をまたいで使いまわし可能

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



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

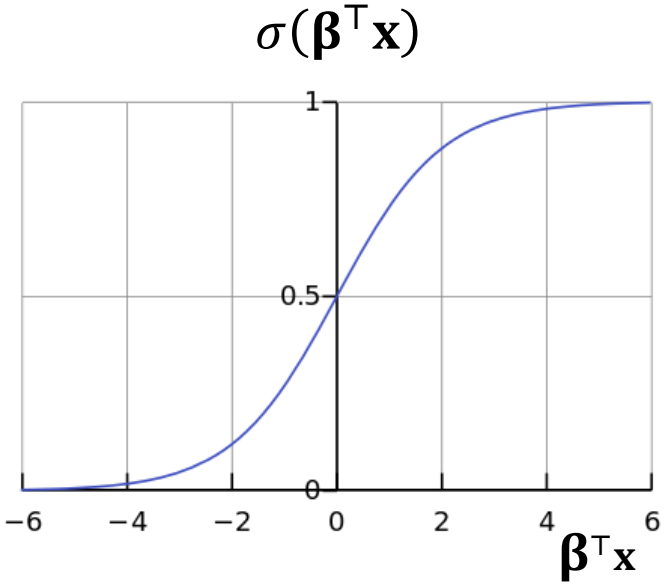
計算グラフと自動微分

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

- 以前、重回帰モデルでダミー変数を従属変数とすると、厳密には少しおかしいという話だった → もっときちんと扱いたい
  - 重回帰モデル$y = \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$の従属変数の値域は実数全体
- 従属変数の値域が$\{-1, +1\}$もしくは$(0,1)$（$Y = +1$となる確率）となるようにしたい
- ロジスティック回帰モデル：

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

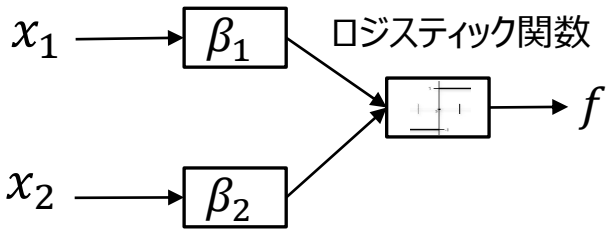
  - σ：ロジスティック関数（$\sigma: \mathbb{R} \to (0,1)$）



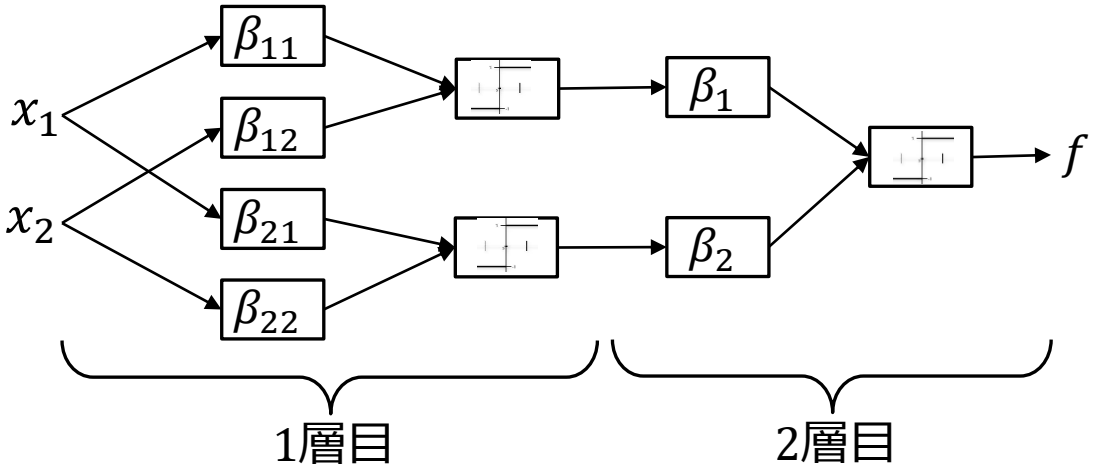
ニューラルネットワーク：（ざっくりいえば）ロジスティック回帰モデルを連結したもの

- 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

ロジスティック回帰モデル

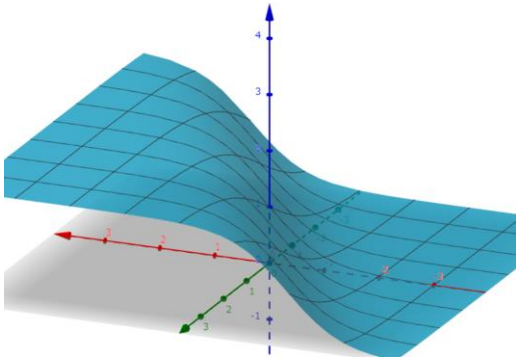


ニューラルネットワーク（2層）

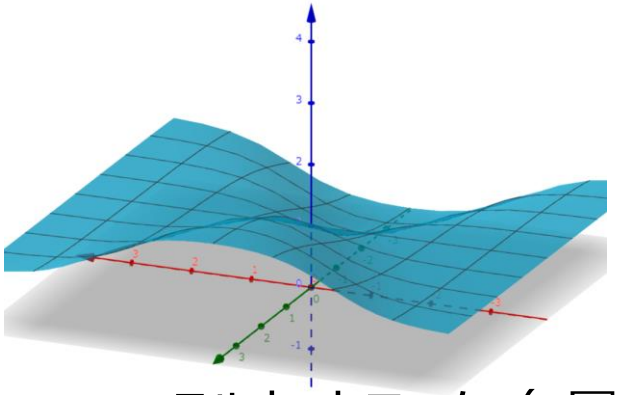


ニューラルネットワークの非線形性の例：ロジスティック回帰を2層積むと非線形分類が可能

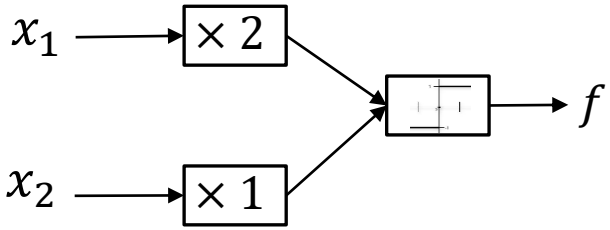
- ロジスティック回帰は1層では線形判別しかできない（AND/OR）
- 2層以上積むことで非線形の表現力を獲得（XOR）

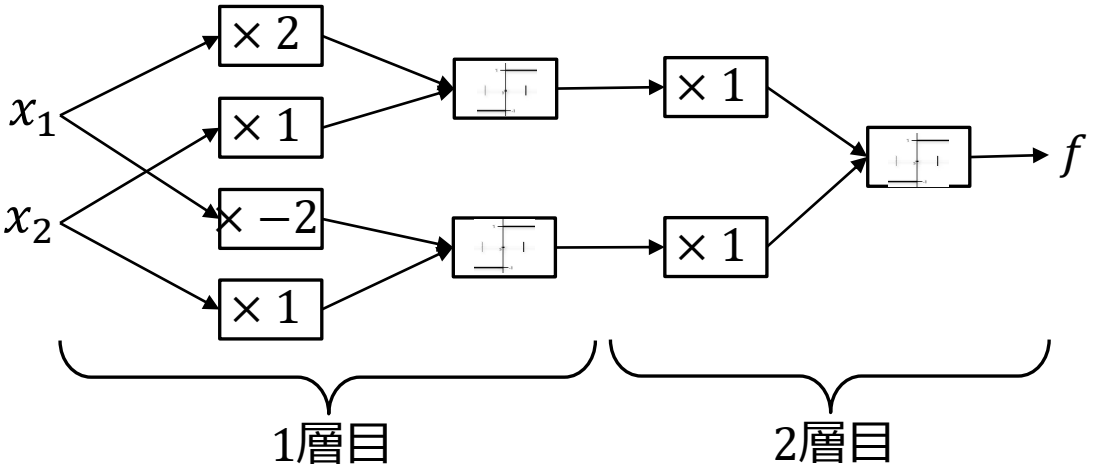


ロジスティック回帰モデル



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）

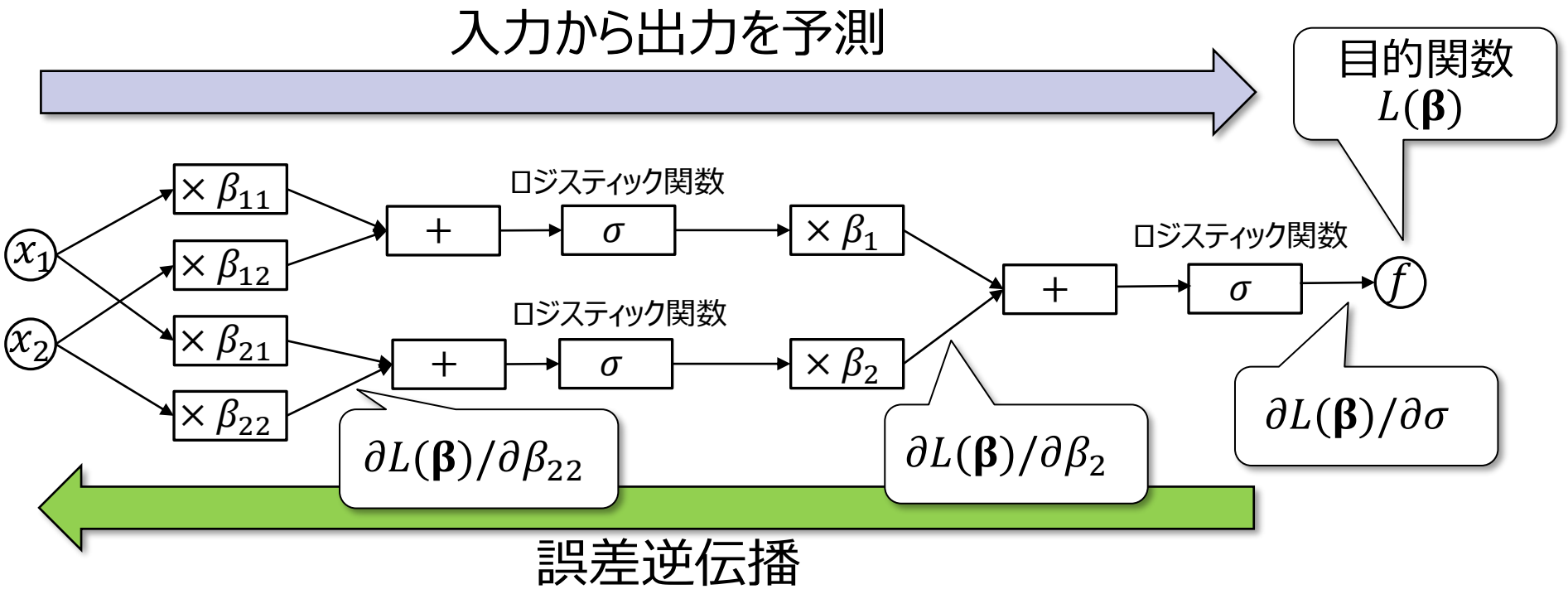
- 勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$が計算できれば最急降下法を適用できる：

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

  - 実際は確率的最適化やミニバッチを用いることも多い

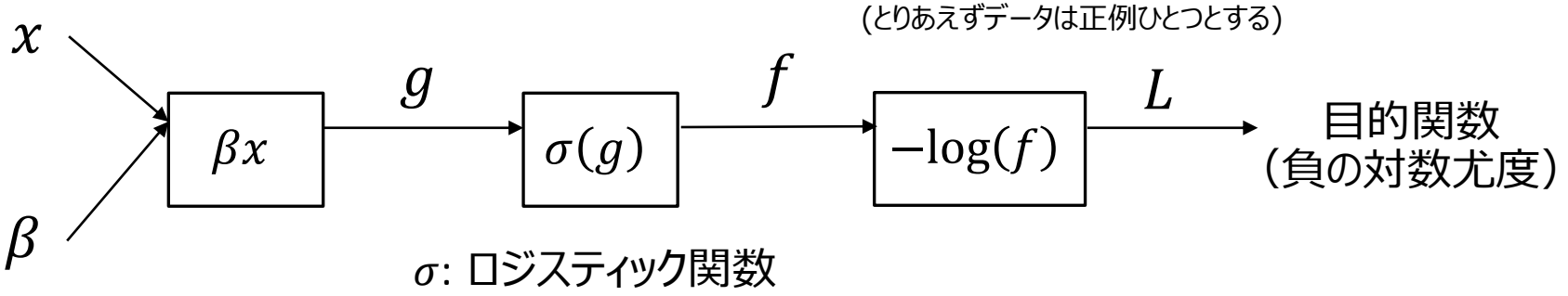
ニューラルネットワークのパラメータ推定法：
誤差逆伝播法による勾配法で効率的にパラメータ推定

- 対数尤度$L(\boldsymbol{\beta})$をパラメータで微分したい
- 誤差逆伝播法（自動微分）：
  層を遡って再帰的に微分計算する効率的な計算法



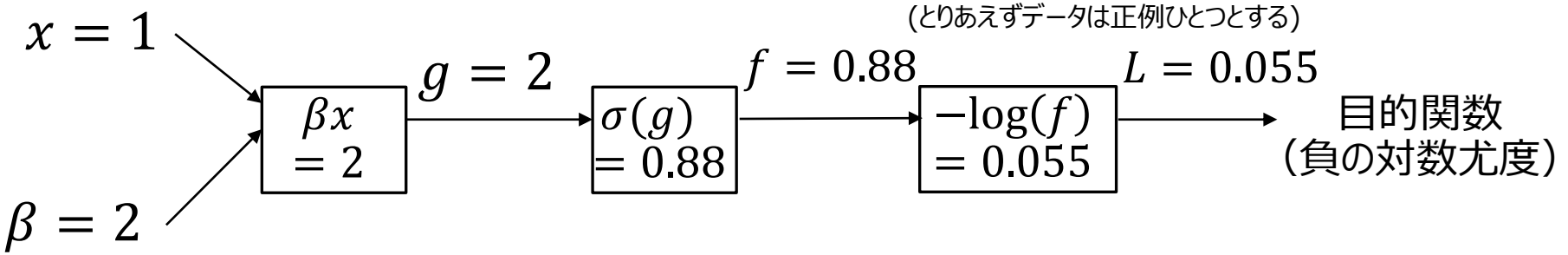
計算グラフ：
ニューラルネットの入力から出力までの計算を図示

- 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)



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

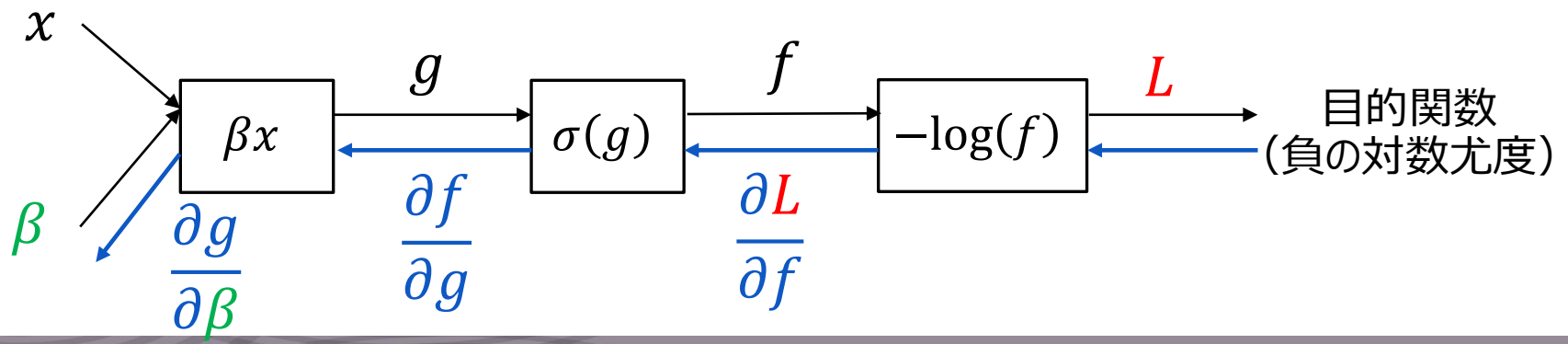
- 計算グラフ：関数の入出力の間の関係を、単純な計算ユニットをつないで表したもの
- 計算グラフをたどりながら、入力に順番に単純な操作（重み付き和やロジスティック関数の適用など）を適用していくと、出力が得られる
- ロジスティック回帰の計算グラフ：ロジスティック回帰の出力： $f = \sigma(\beta x)$
  最適化問題の目的関数：$L = -\log f$
  (とりあえずデータは正例ひとつとする)



σ: シグモイド関数

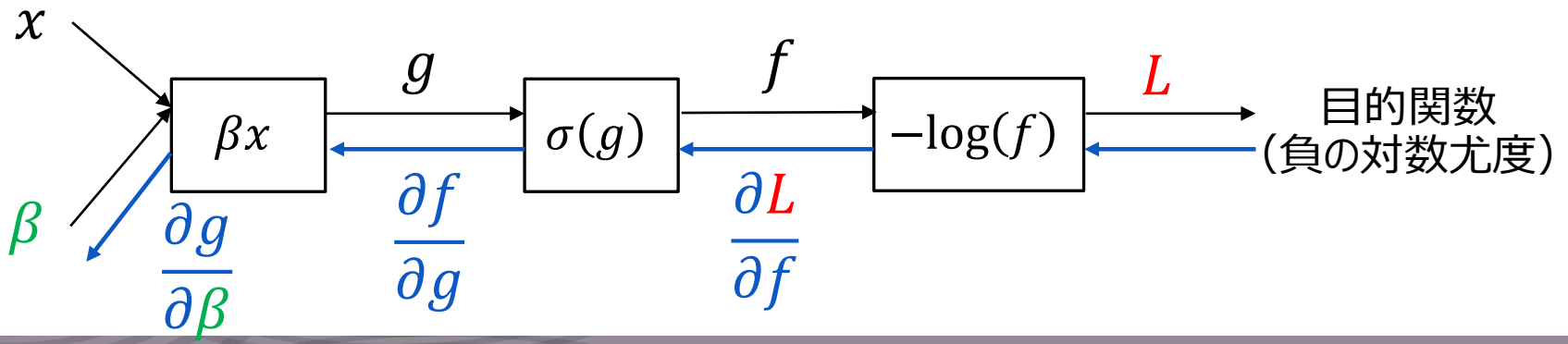
計算グラフ上での自動微分：
計算グラフを出力から逆向きにたどることで勾配計算

- 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）