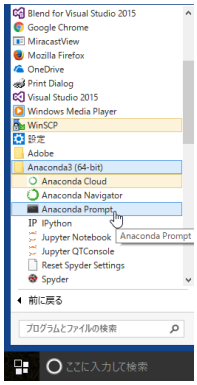
最も簡単なニューラルネットワーク その２

1　目的

- 前回入力したプログラム内部での変数の変化を確認し、動作の仕組みを確認します。
- chainer.Variable、chainer.links、chainer.functions、chainer.optimizers の使い方を確認します。

2　準備

2.1　実行環境の選択



Anaconda Prompt を選択します。

前回作った環境に入ります。

```
activate chenv
cd Lesson
```

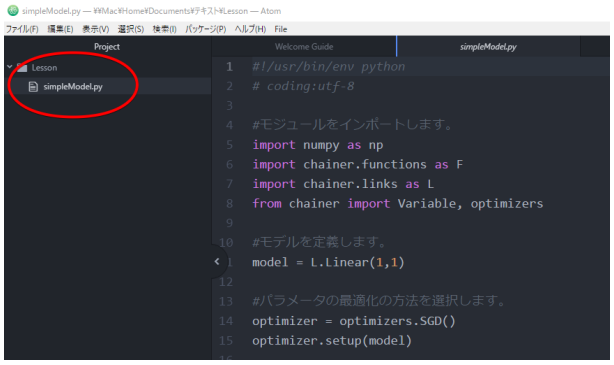
2.2　授業関連ファイルの取得

授業の関連ファイルをダウンロードします。

```
git clone https://github.com/k1nk/ch2.git
```

ch2 フォルダが作成されます。その下に関連ファイルがあります。

2.3 ATOM の起動



ATOM を利用している場合には、画面左の Project の中に Lesson フォルダとそのフォルダに含まれるファイルが表示されます。ファイルを選択すると、ファイルの内容の確認、修正ができます。

3 サンプルコード

以下は、前回入力したプログラムです。

リスト 2.1 lesson/ch2/simpleModel.py

```
1  #!/usr/bin/env python
2  # coding:utf-8
3
4  #モジュールをインポートします。
5  import numpy as np
6  import chainer.functions as F
7  import chainer.links as L
8  from chainer import Variable, optimizers
9
10 #モデルを定義します。
11 model = L.Linear(1,1)
12
13 #パラメータの最適化の方法を選択します。
14 optimizer = optimizers.SGD()
15 optimizer.setup(model)
16
17 #学習の回数を設定します。
18 times = 50
19
20 #入力データ
21 #x = Variable(np.array([[1]],dtype=np.float32))
22 x = Variable(np.array([[1],[2],[7]],dtype=np.float32))
```

```
23
24 #教師データ
25 #t = Variable(np.array([[2]], dtype=np.float32))
26 t = Variable(np.array([[2],[4],[14]], dtype=np.float32))
27
28 #学習を行います。
29 for i in range(0,times):
30     #モデルの勾配データを初期化します。
31     model.cleargrads()
32     #optimizer.zero_grads()
33
34     #予測します。
35     y = model(x)
36
37     #モデルの出力を表示します。
38     print(y.data)
39
40     #予測と答えとの誤差を計算します。
41     loss = F.mean_squared_error(y,t)
42
43     #誤差逆伝搬を行い、勾配を計算します。
44     loss.backward()
45
46     #パラメータの更新を行います。
47     optimizer.update()
48
49 #学習の結果得られたパラメータに基づいて予測を行います。
50 print "result"
51 x = Variable(np.array([[3],[4],[5]], dtype=np.float32))
52 y = model(x)
53 print(y.data)
```

4 プログラムの動作の仕組み

4.1 変数の作成

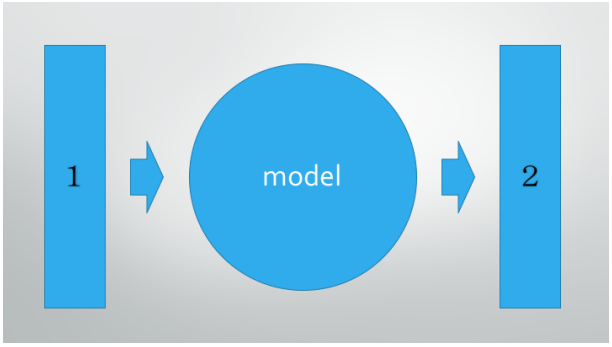
Chainer では、外部からの入力データや正解データを扱うのに chainer.Variable を使います。プログラムの最初で、

```
8 from chainer import Variable, optimizers
```

として、インポートしているので、プログラムの中では、「chainer.Variable」を単に「Variable」として参照できます。

入力データや教師データは、以下のようにして作成できます。

```
#入力データ
x = Variable(np.array([[1],[2],[7]],dtype=np.float32))
#教師データ
t = Variable(np.array([[2],[4],[14]], dtype=np.float32))
```



この例では、入力が [1] のときの答えは [2]、入力が [2] のときの答えは [4]、入力が [7] のときの答えは [14] という 3 つのバッチデータを与えています。この例では入力と答えはサイズが 1 のベクトルになっています。

chainer.Variable が通常のいわゆる変数と異なる点は、変数の値 (data) だけでなく、勾配 (grad) を保持しているということです。

chainer.Variable の詳細

https://docs.chainer.org/en/stable/reference/core/generated/chainer.Variable.html#chainer.Variable

4.2 モデルの作成

```
10 #モデルを定義します。
11 model = L.Linear(1,1)
```

プログラムの最初で、

```
7 import chainer.links as L
```

として、インポートしているので、プログラムの中では、「chainer.links」を単に「L」として参照できます。

「chainer.links.Linear」は、

$$y = Wx + b \tag{1}$$

というレイヤーを表します。ここで W はウエイトを b はバイアスを表します。x が入力ベクトル、y が出力ベクトルです。入力のすべての要素（ノード）が出力のすべての要素（ノード）にウエイト W を通じて繋がっているため、全結合層 (fully-connected layer) とも言います。

model = L.Linear(＜入力ベクトルのサイズ＞, ＜出力ベクトルのサイズ＞) としてモデルを作成します。この例では、入力・出力ともに、サイズが 1 のベクトルとなっています。そのため、先の入力データも [1] や [2] というサイズが 1 のベクトルで作成しています。

後に、 optimizer.update() を使って、W や b のパラメータを更新することにより、このモデルを最適化していきます。W や b のようなモデルのパラメータも Variable と同様に、その値である data だけでなく、勾配 grad を保持しています。

W は平均 0 、標準偏差

$$\sqrt{\frac{1}{\text{入力ベクトルのサイズ}}} \tag{2}$$

の正規分布に従った値で初期化されます。b はゼロで初期化されます。この値を初期値としてパラメータの更新を行っていきます。

「chainer.links」は、W や b のような更新可能なパラメータを持った関数（レイヤー）の集まりです。chainer.links.Linear 以外にも、よく使うレイヤーが chainer.links に多く定義されています。これらの定義されたレイヤーと使うことにより、モデルの定義が簡単になります。

chainer.links.Linear の詳細

`https://docs.chainer.org/en/stable/reference/generated/chainer.links.Linear.html`

chainer.links の詳細

`https://docs.chainer.org/en/stable/reference/links.html#module-chainer.links`

```
13 #パラメータの最適化の方法を選択します。
14 optimizer = optimizers.SGD()
15 optimizer.setup(model)
```

モデルのパラメータを最適化する方法を選択し、作成したモデルと関連づけておきます。

4.3 学習の開始

```
28 #学習を行います。
29 for i in range(0,times):
```

パラメータの更新を繰り返すことにより、学習を行います。この例では５０回行います。
勾配の初期化　→　予測・誤差の計算　→　勾配の計算　→　パラメータの更新
というステップを繰り返すことにより、誤差が小さくなるようにパラメータを更新していきます。

4.3.1 勾配の初期化

```
30     #モデルの勾配データを初期化します。
31     model.cleargrads()
```

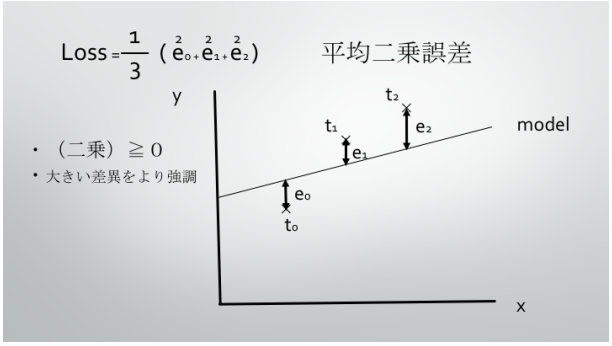
Chaier では、勾配を計算して、アップデートする際に、以前の値に上書きされるのでなく、蓄積される仕様になっています。そのために、勾配の計算を行う前に、勾配の値を初期化しておく必要があります。

4.3.2 予測・誤差の計算

```
34     #予測します。
35     y = model(x)
```

```
36
37      #モデルの出力を表示します。
38      print(y.data)
39
40      #予測と答えとの誤差を計算します。
41      loss = F.mean_squared_error(y,t)
```

現在のモデルのパラメータの値を使って、入力データから出力データを予測します。そして、予測と答えとの誤差を計算します。誤差の計算方法として、ここでは平均二乗誤差を用いています。

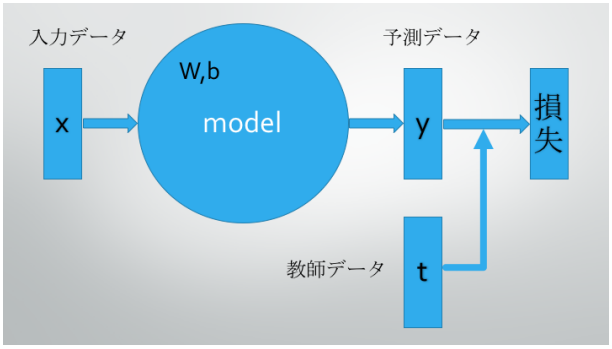


平均二乗誤差は、二乗して誤差を求めるので、差がプラスであってもマイナスであっても、誤差は0以上となります。また、二乗して誤差を求めるので、より大きい誤差が強調されます。

平均平均二乗誤差は、Chainer では、chainer.functions.mean_squared_error で定義されています。プログラムの最初で、

```
6  import chainer.functions as F
```

として、インポートしているので、プログラムの中では、「chainer.functions」を単に「F」として参照できます。chainer.functions は、更新可能なパラメータを持たない関数の集まりです。



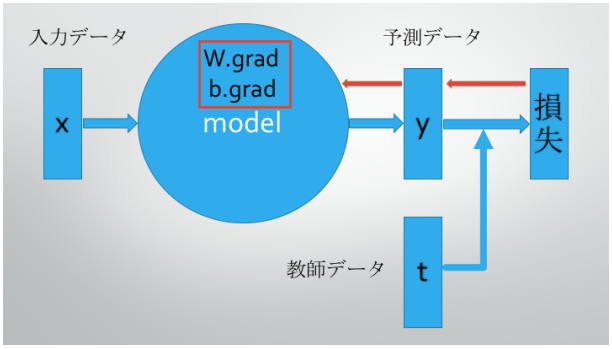
ここで loss を定義することにより、入力データから loss までが、1つのチェーンのようにつながります。

chaienr.functions.mean_squared_error の詳細
https://docs.chainer.org/en/stable/reference/generated/chainer.functions.mean_squared_error.html

4.3.3 勾配の計算

```
43      #誤差逆伝搬を行い、勾配を計算します。
44      loss.backward()
```

先に求めた、loss を起点として、パラメータの勾配を計算します。パラメータの勾配とは、他の値は変化させずに、それぞれのパラメータの値を 1 単位変化させたときに、loss がどの程度増減するかを表す値です。パラメータの勾配を求める際に、予測を行ったときとは逆方向に計算を行っていきます。これを誤算逆伝搬法（Backpropagation）と言います。
これにより、モデルのバラメータの勾配である、W.grad,b.grad が求まります。

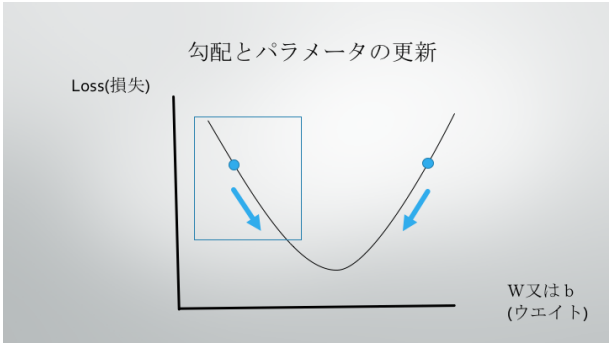


loss を起点として、パラメータの勾配を計算します。これにより、モデルのバラメータの勾配である、W.grad,b.grad が求まります。

4.3.4 パラメータの更新

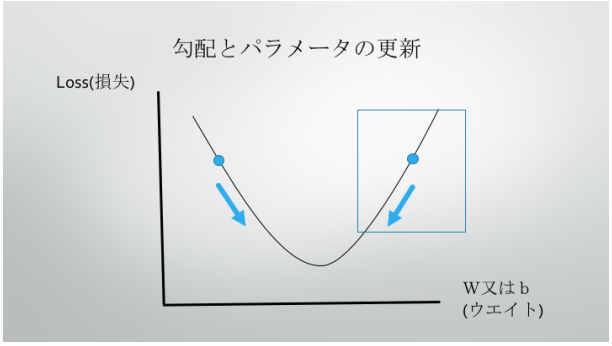
```
46      #パラメータの更新を行います。
47      optimizer.update()
```

パラメータの勾配とは、他の値は変化させずに、それぞれのパラメータの値を 1 単位変化させたときに、loss がどの程度増減するかを表す値でした。グラフのように、パラメータの勾配がマイナスの場合、パラメータの値を増やしたほうが、loss の値が少なくなることになります。



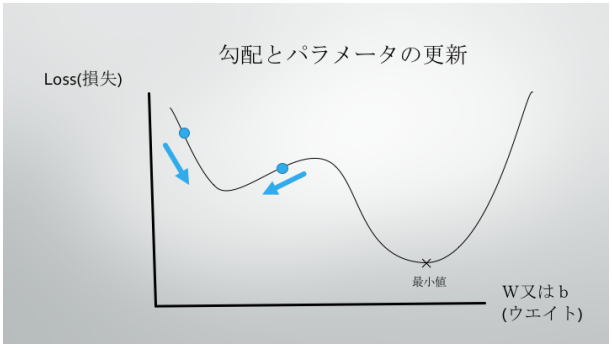
パラメータの勾配がマイナスの場合、パラメータの値を増やしたほうが、loss の値が少なくなる

一方、パラメータの勾配がプラスの場合、パラメータの値を減らしたほうが、loss の値が少なくなります。



パラメータの勾配がマイナスの場合、パラメータの値を増やしたほうが、loss の値が少なくなる

しかし、実際は、パラメータの変化は、loss の変化に対して下の図のようになることもあります。このように loss が局所的には極小となる部分を local minimum(ローカルミニマム) と言います。ローカルミニマムが、全体として最小となる部分 (global minimum) になるとは限らないため、基本的には上記の考え方によりながらも、パラメータの値の更新方法としていくつかの方法が提案されています。また、パラメータの初期値がその収束結果に影響を与えることもわかると思います。



ローカルミニマムが、全体として最小となる部分になるとは限らない。そのため、パラメータの更新方法にはいくつかの方法がある。こ

のプログラムでは、上記のパラメータの更新を訓練データごとに繰返し行う、確率的勾配降下法（stochastic gradient descent, SGD）を用いています。

4.4 予測

モデルのパラメータの更新が終ったところで、学習後のパラメータの基づいて予測を行います。

```
49 #学習の結果得られたパラメータに基づいて予測を行います。
50 print "result"
51 x = Variable(np.array([[3],[4],[5]], dtype=np.float32))
52 y = model(x)
53 print(y.data)
```

データとして、[3],[4],[5] というバッチデータを、chainer.Variable として作成します。そして、モデルに入力し予測を行います。そして、その予測した結果を表示します。

4.5 動作の確認

4.5.1 勾配の計算

それでは、勾配の計算とパラメータの更新の状態を実際に確認してみましょう。まず、勾配の計算の前後で、実際に勾配の値が変化していることを確認してみましょう。loss.backward() の前後で、W および b の勾配の値を確認します。W の勾配の値は、model.W.grad で確認できます。

```
43      #誤差逆伝搬を行い、勾配を計算します。
44      print "model.W.grad␣before␣backward:", model.W.grad
45      loss.backward()
46      print "model.W.grad␣after␣backward:", model.W.grad
```

プロプラムを修正したら、修正後のプログラムを実行し、結果を確認します。

```
python simpleModel.py

model.W.grad before backward: None
model.W.grad after backward: [[-0.03739944]]
```

model.cleargrads() でモデルの勾配が None に設定されます。したがって、loss.backward() を呼ぶ前は勾配の値は None となります。backward() を呼ぶことにより、勾配に値が設定されていることがわかります。
また、この例の場合、勾配の値は負になっています。

4.5.2 パラメータの更新

次に optimizer.update() の前後で、パラメータの更新が行われているか確認してみましょう。モデルのパラメータ W の値は、m odel.W.data で確認できます。

```
46      #パラメータの更新を行います。
47      print "model.W.data␣before␣update:", model.W.data
48      optimizer.update()
49      print "model.W.data␣after␣update:", model.W.data
```

プロプラムを修正したら、修正後のプログラムを実行し、結果を確認します。

```
python simpleModel.py

model.W.grad before backward: None
model.W.grad after backward: [[-0.03557223]]
model.W.data before update: [[ 1.95189846]]
model.W.data after update: [[ 1.95225418]]
```

この例では、W の勾配は、「-0.03557223」と負になっています。勾配が負であるので、W の値は、update() により、1.95189846 から、1.95225418 へと増加していることがわかります。

バイアスの勾配 model.b.grad および、バイアスの値 model.b.data についても同様に値を確認してみましょう。

最後に、パラメータの更新によりモデルがどのように変化しているか、確認してみましょう。モデルのグラフを描くプログラムを追加します。

```
8  from chainer import Variable, optimizers
9  import matplotlib.pyplot as plt
10
11 def plotmodel(model):
12   x_for_plot = Variable(np.array([[1],[2],[7]],dtype=np.float32))
13   y_for_plot = model(x_for_plot)
14   plt.plot(x_for_plot.data,y_for_plot.data,"r-")
```

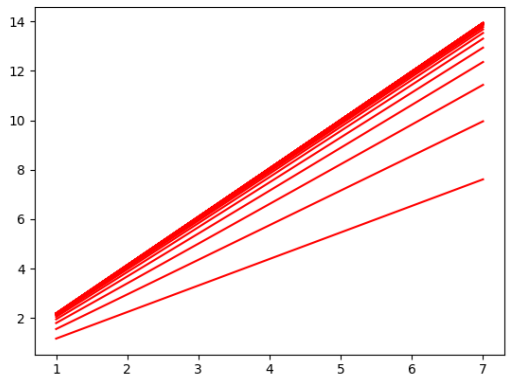
update の後に、モデルをプロットします。

```
46     #パラメータの更新を行います。
47     print "model.W.data␣before␣update:", model.W.data
48     optimizer.update()
49     print "model.W.data␣after␣update:", model.W.data
50     plotmodel(model)
```

最後にグラフを表示します。

```
52 y = model(x)
53 print(y.data)
54 plt.show()
```

プロプラムを修正したら、修正後のプログラムを実行し、結果を確認します。



W と b の値が更新されることにより、入力データの倍の値を出力するモデルに近づいている様子か確認できます。