ディープラーニングの仕組みを知ろう！

第 1 回　人工知能勉強会　数学編

Shion MORISHITA

June 15, 2024

目次

はじめに

目的

- ニューラルネットワークの構造を数理的に理解する
- ニューラルネットワークや、その学習方法について理解するために必要な数学の基礎を復習・理解する

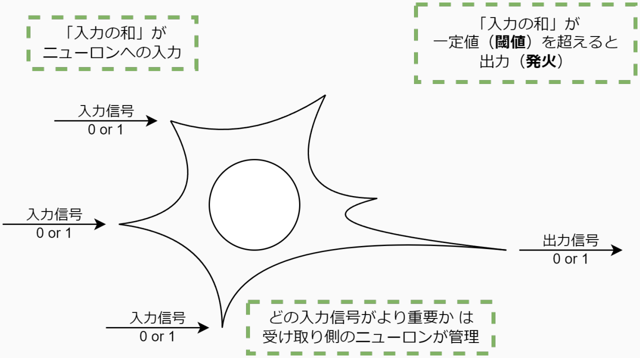
ニューラルネットワークの考え方

ニューラルネットワークの考え方

ニューロン

ニューロン = 神経細胞

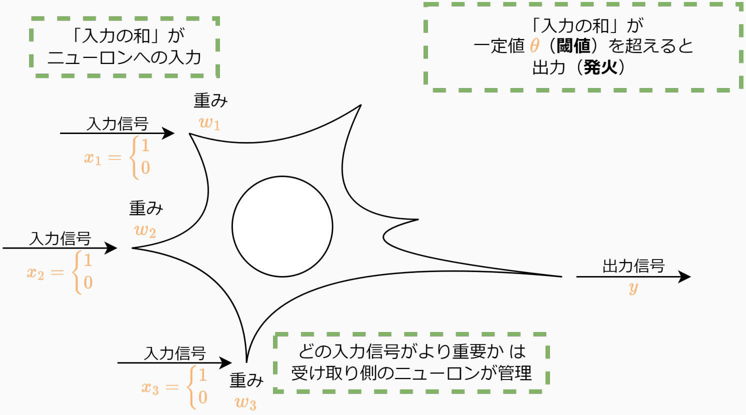
- 互いに結びついてネットワークを構築することで、
  さまざまな処理を行なっている



ニューラルネットワークの考え方

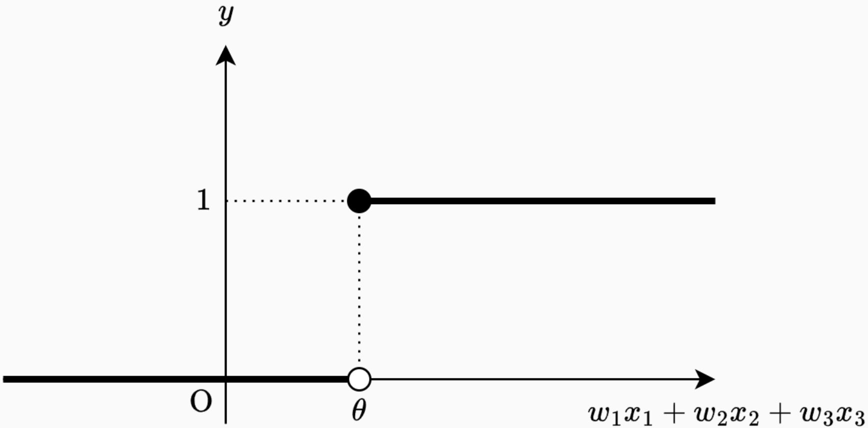
ニューロンの働きの数理的解釈

ニューロンの働きの数理的解釈



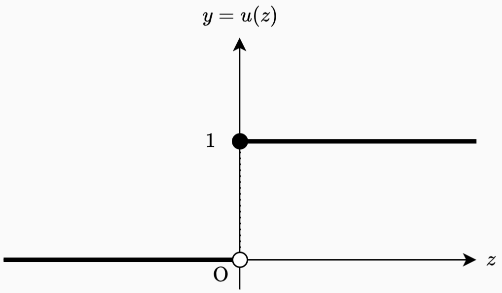
- **出力信号なし**（$y = 0$）：$w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 < \theta$
- **出力信号あり**（$y = 1$）：$w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 \geq \theta$

発火の条件のグラフ表現



発火の式

- 単位ステップ関数

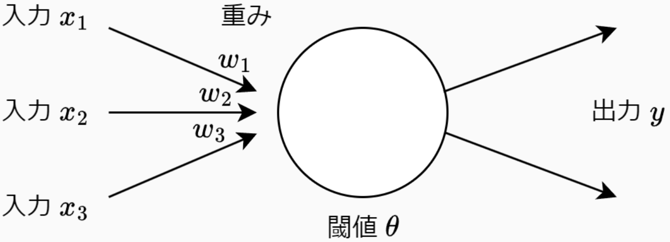


- 発火の式：$y = u(z) = u(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \theta)$
  - $z = w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \theta$ を、そのニューロンに対する**重み付き入力**という

ニューラルネットワークの考え方

ユニット

- 簡略され抽象化されたニューロンを、生物学的なニューロンと区別してユニット（unit）とよぶ



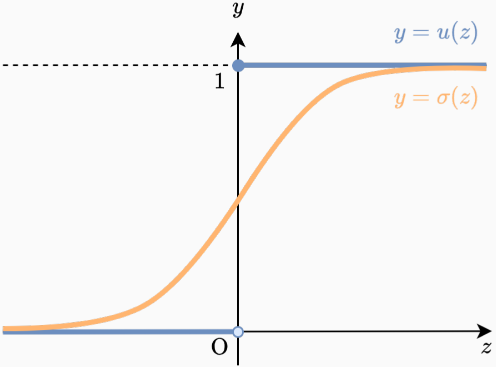
活性化関数

- 発火の式（旧）：$y = u(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \theta)$
  - 単位ステップ関数 u に限定する必要はない
- 発火の式（新）：$y = a(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \theta)$
  - 関数 a を活性化関数（activation function）という
  - この関数 a はモデル作成者がさまざまに定義可能

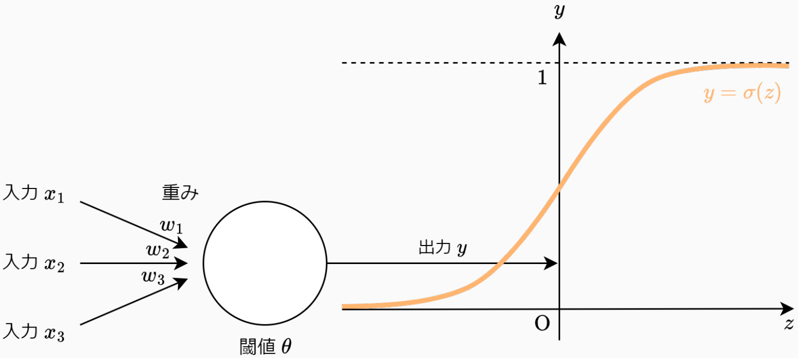
活性化関数の代表例

シグモイド関数（Sigmoid function）

$$\sigma(z) \triangleq \frac{1}{1+e^{-z}} \quad (e = 2.71828\cdots)$$



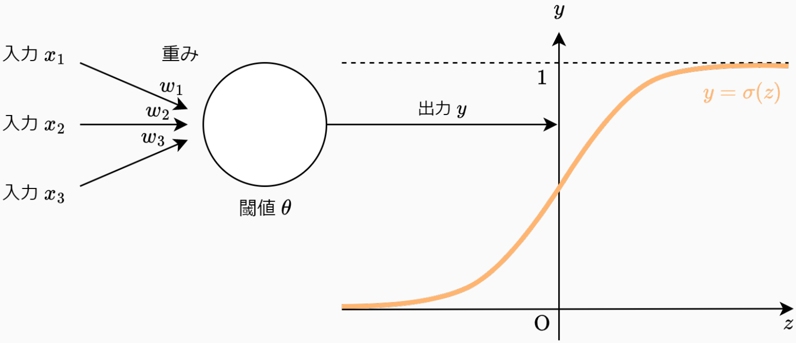
「発火の有無」から「興奮度」へ



ユニットの興奮度：小

$$y = \sigma(w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 - \theta)$$

「発火の有無」から「興奮度」へ



ユニットの興奮度：大

$$y = \sigma(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \theta)$$

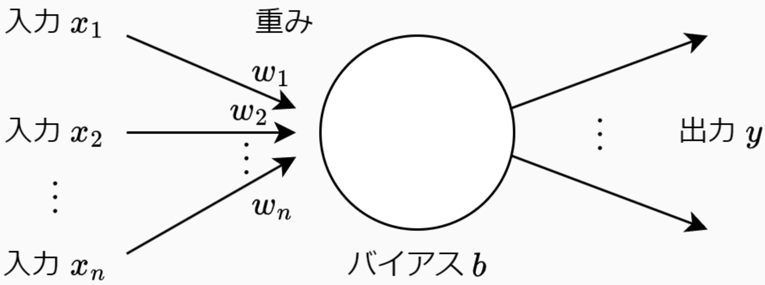
バイアス

$$\cancel{y = a(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \theta)}$$

$$y = a(w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + b)$$

- $-\theta \longrightarrow +b$ に表記を変更
- すべて足し算に統一することで計算しやすくなる

ユニットのまとめ



重み付き入力： $z = w_1 x_1 + w_2 x_2 \cdots + w_n x_n + b$

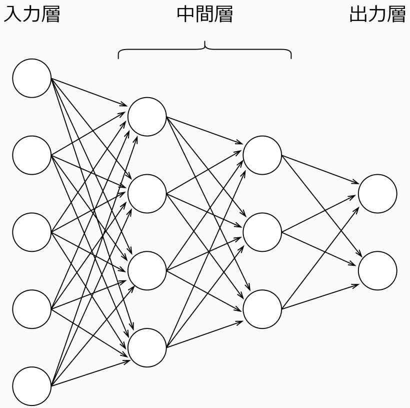
出力： $y = \sigma(z)$

ニューラルネットワークの考え方

ニューラルネットワーク

ニューラルネットワーク（Neural Network; NN）

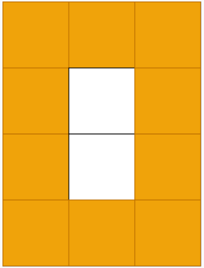
- ユニットをネットワーク状に結合したもの



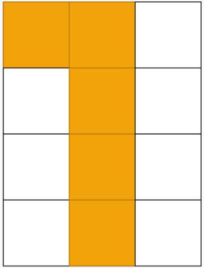
ニューラルネットワークを用いた問題の具体例

例題

4×3 画素からなる画像で読み取られた手書きの数字「0」「1」を識別するニューラルネットワークを作成せよ。ただし、学習データは 64 枚の画像とし、画素はモノクロ 2 階調とする。



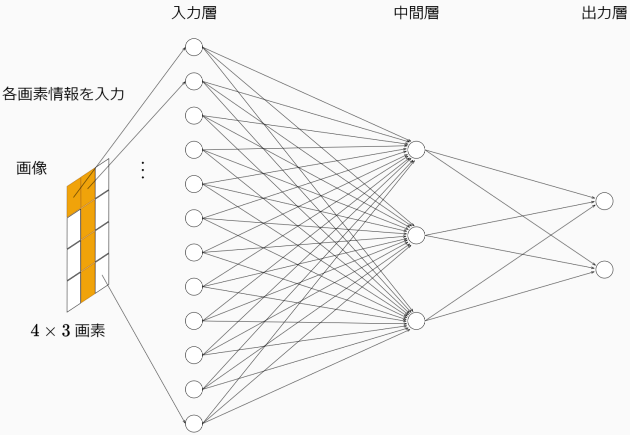
「0」の画像の例



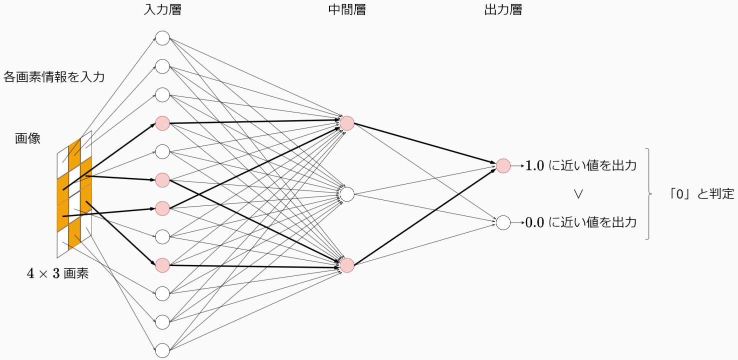
「1」の画像の例

ニューラルネットワークを用いた問題の具体例

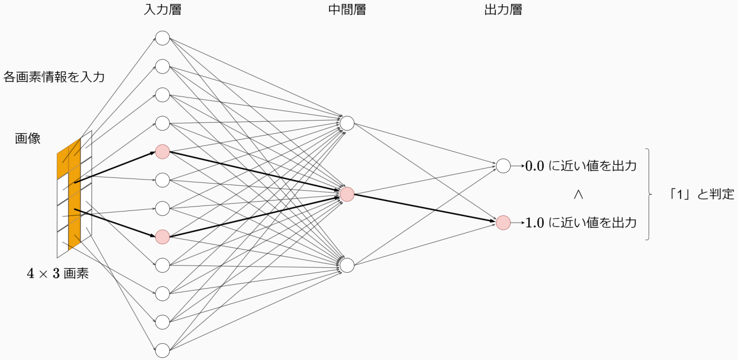
解答例



ニューラルネットワークの反応例



ニューラルネットワークの反応例



数学の基礎

数学の基礎

ニューラルネットワークのための数学

数列の意味

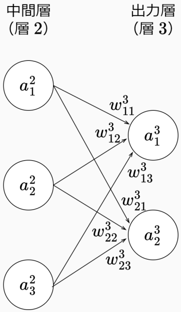
- 数列：数の列
  - 項：並べられたひとつひとつの数
  - 初項：1 番目の項
  - 第 n 項：n 番目の項
  - 有限数列：有限個の項数を持つ数列
  - 末項：有限数列において、数列の最後の項
  - 一般項：数列の n 番目にある数で、通常 a_n などと表現する

ニューラルネットワークにおいて、ユニットの重み付き入力やその出力は数列と考えられる

例　a_j^l：l 層 j 番目のユニットの出力値

数列と漸化式

- **漸化式**：初項 a_1 と、隣り合う 2 つの項 $a_n,\ a_{n+1}$ の関係式
- **連立漸化式**：複数の数列がいくつかの関係式で結び付けられているもの
  - ニューラルネットワークにおいて、ユニットの入力と出力は連立漸化式で結ばれている



$$a_1^3 = \sigma(w_{11}^3 a_1^2 + w_{12}^3 a_2^2 + w_{13}^3 a_3^2 + b_1^3)$$
$$a_2^3 = \sigma(w_{21}^3 a_1^2 + w_{22}^3 a_2^2 + w_{23}^3 a_3^2 + b_2^3)$$

公式

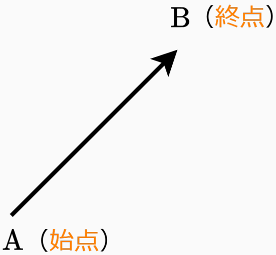
(I) $\displaystyle\sum_{k=1}^{n} a_k = a_1 + a_2 + \cdots + a_{n-1} + a_n$

(II) $\displaystyle\sum_{k=1}^{n}(a_k + b_k) = \sum_{k=1}^{n} a_k + \sum_{k=1}^{n} b_k$

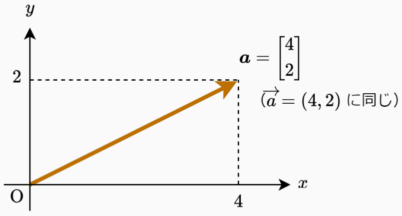
(III) $\displaystyle\sum_{k=1}^{n} ca_k = c\sum_{k=1}^{n} a_k$ （c：定数）

有向線分とベクトル

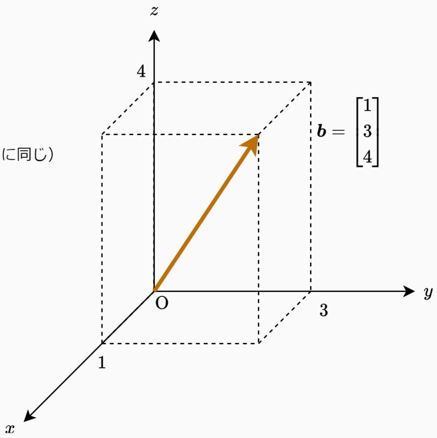
- 有向線分：向きを持つ線分
    - （始点の）位置
    - （線分の始点から終点への）向き
    - （線分の）大きさ
- ベクトル：有向線分から位置の属性を抜いたもの
    - （線分の始点から終点への）向き
    - （線分の）大きさ



ベクトルの成分表示



y
2
$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}$
$(\overrightarrow{a} = (4, 2)$ に同じ)
O
4
x



z
4
$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$
O
3
y
1
x

ベクトルの基本公式

ベクトル $\boldsymbol{a}$ の大きさ $\|\boldsymbol{a}\|$

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \text{のとき、} \|\boldsymbol{a}\| \triangleq \sqrt{a_1^2 + \cdots + a_n^2} = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} a_k^2} \geq 0.$$

例　$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}$ のとき、$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{(-1)^2 + 2^2} = 1 + 4 = 5.$

ベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ の内積 $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle$

- ベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ のなす角を θ とすると、$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle \triangleq \|\boldsymbol{a}\| \|\boldsymbol{b}\| \cos\theta$.
- $\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$ とすると、$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle \triangleq a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n = \sum_{k=1}^{n} a_k b_k$.

例　$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \end{bmatrix}$ のとき、$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = 2 \cdot 5 + 3 \cdot 1 = 13$.

コーシー・シュワルツの不等式

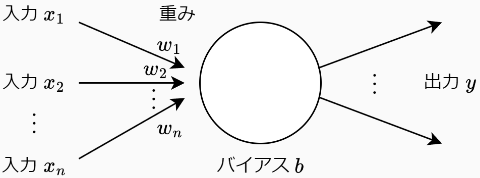
ベクトル a, b に対して、

$$-\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \leq \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle \leq \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|$$

が成り立つ。

コラム：ベクトルがどう役に立つ？

ニューラルネットワークの出力 y



$$y = \sigma(w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n + b) = \sigma\left(\left\langle \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \right\rangle + b \right) = \sigma(\langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{x} \rangle + b).$$

行列とは

数を縦と横に矩形上に配列したもの

$$\mathbf{A} = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 3 & 1 & 4 \\ 1 & 5 & 9 \\ 2 & 6 & 5 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} \text{行} \\ \text{行} \\ \text{行} \end{array} \\ \begin{array}{ccc} \text{列} & \text{列} & \text{列} \end{array} & \end{array}$$

ベクトルも行列の一部

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$ は 3 行 1 列の行列とみなせる

行列同士の演算

行列の和

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} p & q \\ r & s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a+p & b+q \\ c+r & d+s \end{bmatrix}$$

行列の積

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p & q \\ r & s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ap+br & aq+bs \\ cp+dr & cq+ds \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{ccc} & & \begin{array}{cc} \textcircled{1} & \textcircled{2} \end{array} \\ \begin{array}{c} \textcircled{1} \\ \textcircled{2} \end{array} & \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} p & q \\ r & s \end{bmatrix} \end{array} = \begin{bmatrix} \textcircled{1} \cdot \textcircled{1} & \textcircled{1} \cdot \textcircled{2} \\ \textcircled{2} \cdot \textcircled{1} & \textcircled{2} \cdot \textcircled{2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} ap+br & aq+bs \\ cp+dr & cq+ds \end{bmatrix}$$

行列とベクトルの演算

$$
\begin{bmatrix} 3 & 1 & 4 \\ 1 & 5 & 9 \\ 2 & 6 & 5 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 3x + 1y + 4z \\ 1x + 5y + 9z \\ 2x + 6y + 5z \end{bmatrix}
$$

数学の基礎

勾配降下法のための数学

微分の定義

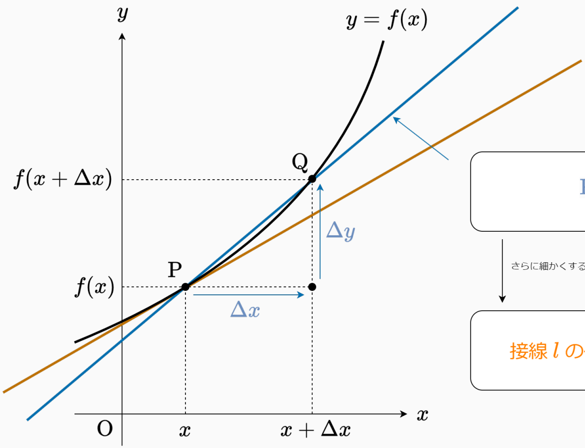
関数 $y = f(x)$ 対して導関数 $f'(x)$ は次のように定義される：

$$f'(x) \triangleq \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

※「$\lim\limits_{\Delta x \to 0} (\Delta x$ の式$)$」は「数 Δx を限りなく 0 に近づけたとき、$(\Delta x$ の式$)$ の近づく値」を意味する

関数 $f(x)$ の導関数 $f'(x)$ を求めることを「関数 $f(x)$ を微分する」という

導関数の意味



PQ の傾き $\dfrac{\Delta y}{\Delta x} = \dfrac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$

さらに細かくすると...

接線 l の傾き $f'(x) = \dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \lim\limits_{\Delta x \to 0} \dfrac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$

関数の微分公式（抜粋）

x を変数、c を定数とする。e はネイピア数という定数で、$e \simeq 2.71828\ldots$

- $\dfrac{\mathrm{d}(c)}{\mathrm{d}x} = 0$
- $\dfrac{\mathrm{d}(x)}{\mathrm{d}x} = 1$
- $\dfrac{\mathrm{d}(x^2)}{\mathrm{d}x} = 2x$
- $\dfrac{\mathrm{d}(e^x)}{\mathrm{d}x} = e^x$
- $\dfrac{\mathrm{d}(e^{-x})}{\mathrm{d}x} = -e^{-x}$

微分の性質

- $\{f(x)+g(x)\}' = f'(x)+g'(x)$
- $\{cf(x)\}' = cf'(x)$（c：定数）

<u>例</u>

$C=(2-y)^2$（y：変数）のとき、

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}y} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}C = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}(4-4y+y^2) = \frac{\mathrm{d}(4)}{\mathrm{d}y} - \frac{\mathrm{d}(4y)}{\mathrm{d}y} + \frac{\mathrm{d}(y^2)}{\mathrm{d}y} = 0-4+2y = -4+2y.$$

【重要】シグモイド関数 σ の微分公式

$\sigma(z) = \dfrac{1}{1+e^{-z}}$ （z：変数）のとき、

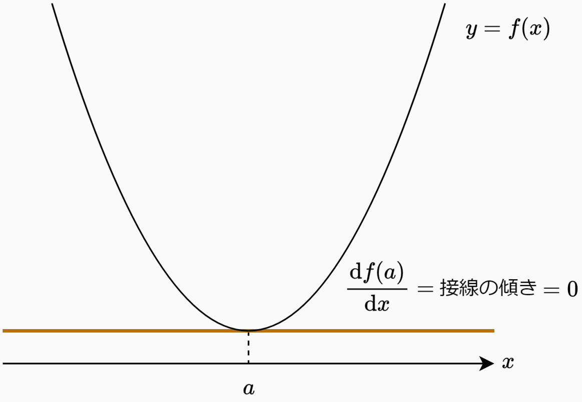
$$\frac{\mathrm{d}\sigma(z)}{\mathrm{d}z} = \sigma(z)(1-\sigma(z))$$

ポイント

- 導関数の値が欲しいときに、微分計算をせずに済む！
    - つまり、計算機でも微分の値を容易に計算できる！

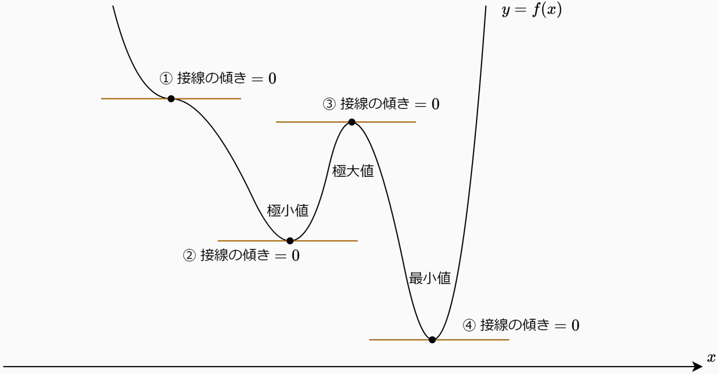
【重要】関数の最小値の条件

関数 $f(x)$ が $x = a$ で最小値を取るとき、$\dfrac{\mathrm{d}f(a)}{\mathrm{d}x} = 0$



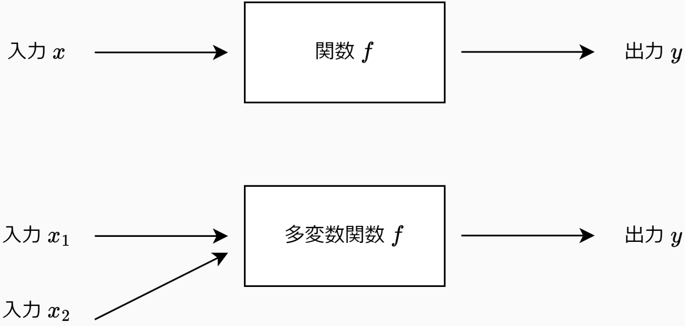
【重要】関数の最小値の条件

$f'(a) = 0$ は関数 $f(x)$ が $x = a$ で最小値になるための必要条件である。



多変数関数

入力が 2 つ以上ある関数を多変数関数という。



偏微分

ある特定の変数について微分することを**偏微分**（partial derivative）という。

$y = f(x)$ を x について微分する場合：

- $\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$

$z = f(x, y)$ を x について偏微分する場合：

- $\dfrac{\partial f(x, y)}{\partial x}$

例　$z = wx + b$ のとき、$\dfrac{\partial z}{\partial x} = w,\ \dfrac{\partial z}{\partial w} = x,\ \dfrac{\partial z}{\partial b} = 1$

【重要】多変数関数の最小条件

関数 $z = f(x, y)$ が最小になる必要条件は、$\dfrac{\partial f}{\partial x} = 0$ かつ $\dfrac{\partial f}{\partial y} = 0$

ポイント

どの成分から見ても傾きが 0 なら、最小値の可能性あり！

関数の近似公式

1 変数関数の場合

$$f(x+\Delta x) \simeq f(x) + f'(x)\Delta x$$

2 変数関数の場合

$$f(x+\Delta x,\ y+\Delta y) \simeq f(x,y) + \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\Delta y$$

※ Δx や Δy は十分小さな数とする。

【重要】関数の近似公式　簡潔 ver.

$\Delta z \triangleq f(x_1 + \Delta x_1,\ x_2 + \Delta x_2) - f(x_1,\ x_2)$ とすると、

$$\Delta z \simeq \frac{\partial z}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial z}{\partial x_2}\Delta x_2.$$

$\nabla z \triangleq \begin{bmatrix} \dfrac{\partial z}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial z}{\partial x_2} \end{bmatrix},\ \Delta \boldsymbol{x} \triangleq \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{bmatrix}$ とすると、

$$\Delta z \simeq \langle \nabla z,\ \Delta \boldsymbol{x} \rangle .$$

ポイント

関数の値の変化 Δz は、偏微分を集めたベクトル ∇z と、小さい値を集めたベクトル $\Delta \boldsymbol{x}$ で表される。

数学の基礎

誤差逆伝播法のための数学

合成関数

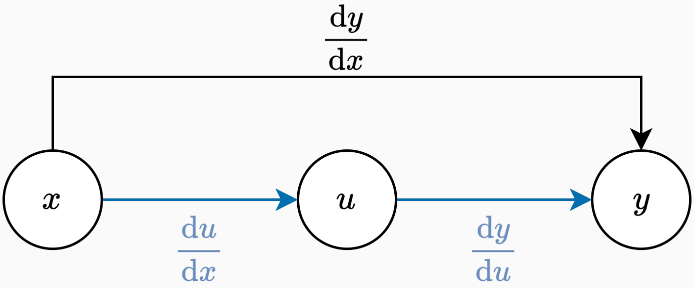
入れ子構造の関数 $f(g(x))$ を、関数 f と g の合成関数という。

$$
\begin{tikzcd}
x \arrow[r, "g"'] \arrow[rr, bend left, "f \circ g"] & u = g(x) \arrow[r, "f"'] & y = f(u) = f(g(x))
\end{tikzcd}
$$

1 変数関数の連鎖律

1 変数関数 $y = f(u)$ があり、その u が 1 変数関数 $u = g(x)$ と表されるとき、合成関数 $f(g(x))$ の導関数は次のように求められる：

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}u} \cdot \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$$



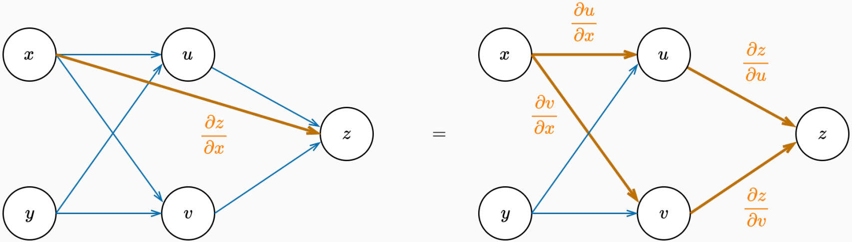
1 変数関数の連鎖律の例

$y = u^2,\ u = 2 - x$ のとき、y を x で微分すると、

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}u}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}(u^2)}{\mathrm{d}u}\frac{\mathrm{d}(2-x)}{\mathrm{d}x} = 2u \cdot (-1) = -2u = -2(2-x) = -4 + 2x.$$

2 変数関数 $z = f(u, v)$ があり、その u, v が 2 変数関数 $u = g_1(x, y)$, $v = g_2(x, y)$ と表されるとき、

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial v} \cdot \frac{\partial v}{\partial x}$$



2 変数関数の連鎖律の例

$z = u^2 + v^2,\ u = ax + by,\ v = px + qy$（$a, b, p, q$：定数）のとき、

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial x} = 2u \cdot a + 2v \cdot p = 2a(ax + by) + 2p(px + qy).$$