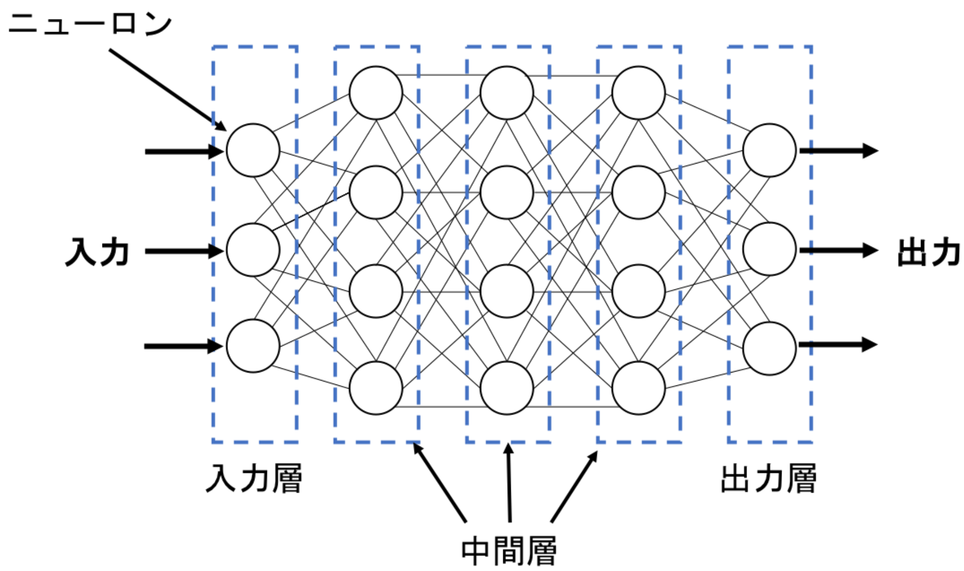
4.3 ニューロンのネットワーク化

- ニューロンを複数接続しネットワーク化することで，ニューラルネットワークが構築される．
- ニューラルネットワークでは，ニューロンを次のように層状に並べる：

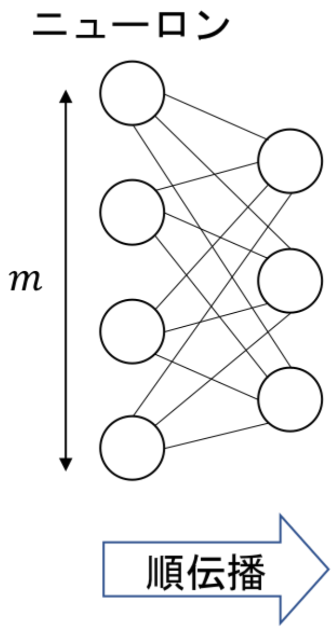


□ニューラルネットワーク

- ニューラルネットワークにおける層は，入力層，中間層（隠れ層），出力層の３つに分類することができる．
- 入力層はニューラルネットワーク全体の入力を受け取り，出力層はネットワーク全体の出力を出力する．
- ニューロンの演算がおこなわれるのは，中間層と出力層のみで，入力層は受け取った入力を中間層に渡すのみ．

- ニューラルネットワークにおいて，入力から出力に向けて情報が伝わっていくことを順伝播という．
- 逆に，出力から入力に向けて情報が遡っていくことを逆伝播という．

- ここからは，２つの層の順伝播を数式化する．
- 前の層のニューロンの数を m，次の層のニューロンの数を n とすると，2つの層の間には $m \times n$ 個の重みがあることになる．2層間の接続を次に図示する：



□2層間の接続

- 重みの数は入力の数と等しいので，上の層のニューロン数を m とすると，下の層のニューロンは1つあたり m 個の重みを持つことになる.
- 例えば，上の層の1番目のニューロンから，下の層の2番目のニューロンへの入力の重みは w_{12} と表す.

- 以下のような $m \times n$ の行列に，下の層のすべての重みを格納することができる． $\mathbf{W}$ は重みを表す行列：

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \cdots & w_{mn} \end{bmatrix}.$$

- また，上の層の出力（=下の層の入力）はベクトルで表すことができる.
- i を上の層の添字，j を下の層の添字とし，$\mathbf{y}_i$ を上の層の出力を表すベクトル，$\mathbf{x}_j$ を下の層への入力を表すベクトルとすると，次のような表記が可能：

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_j = \left[x_1, x_2, \cdots, x_m\right].$$

- 上の層の出力は，下の層の入力と等しくなる.
- バイアスもベクトルで表記することが可能.
- バイアスの数は，下の層のニューロンの数に等しく，下の層のニューロンの数は n なので，バイアス $\mathbf{b}_j$ は次のように表すことができる：

$$\mathbf{b}_j = \left[b_1, b_2, \cdots, b_n\right].$$

- 以上より，各ニューロンにおける入力と重みの積の総和は，次のように求めることができる：

$$\mathbf{x}_j \mathbf{W} = \left[x_1, x_2, \cdots, x_m \right] \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \cdots & w_{mn} \end{bmatrix}.$$

- 行列積の結果は要素数 n のベクトルとなる.
- このベクトルの各要素は，下の層の各ニューロンにおける重みと入力の積の総和になっている.
- これにバイアス $\mathbf{b}_j$ を加えたものを $\mathbf{u}_j$ とすると，$\mathbf{u}_j$ は次のように求めることができる：

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_j &= \mathbf{x}_j \mathbf{W} + \mathbf{b}_j \\ &= \left[x_1, x_2, \cdots, x_m \right] \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{m1} & w_{m2} & \cdots & w_{mn} \end{bmatrix} + \left[b_1, b_2, \cdots, b_n \right] \\ &= \left[\textstyle\sum_{k=1}^m x_k w_{k1} + b_1, \sum_{k=1}^m x_k w_{k2} + b_2, \cdots, \sum_{k=1}^m x_k w_{kn} + b_n \right]. \end{aligned}$$

- $\mathbf{u}_j$ の各要素は，重みと入力の積の総和にバイアスを足したものになっている.
- なお，$\mathbf{u}_j$ はNumPyのdot関数を用いて以下のように計算することができる：

```
u = np.dot(x, w) + b
```

- 次に，活性化関数を使用する.
- ベクトル $\mathbf{u}_j$ の各要素を活性化関数に入れて処理し，下の層の出力を表すベクトル $\mathbf{y}_j$ を得る：

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_j &= \left[y_1, y_2, \cdots, y_n \right] \\ &= f(\mathbf{u}_j) \\ &= f(\mathbf{x}_j \mathbf{W} + \mathbf{b}_j) \\ &= \left[f(\textstyle\sum_{k=1}^m x_k w_{k1} + b_1), f(\sum_{k=1}^m x_k w_{k2} + b_2), \cdots, f(\sum_{k=1}^m x_k w_{kn} + b_n) \right]. \end{aligned} \tag{1}$$

- $\mathbf{y}_j$ の要素数は，下の層のニューロンの数と同じ n になる.

- ニューロンを層として扱うことで，2つの層間の情報の伝播を数式にまとめることができた.
- 層の数が3つ以上になっても，式(1)を用いて層から層へ次々に情報を順伝播することができる.
- ニューラルネットワークは，層の数が増えて規模が大きくなれば，より柔軟な認識・判断能力を持つことが可能となる.
- そのためには，各ニューロンの重みとバイアスを自動で調整する仕組みが必要になる.