目次

- ニューラルネットワーク

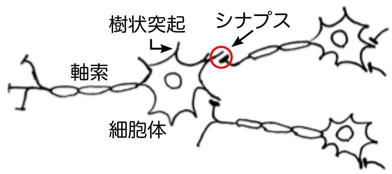
★ 13　パターン認識と機械学習 (4) — ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークは，元々は脳における情報処理のモデルとして提案されたものであるが，現在では機械学習の手法として幅広く応用されている．

★ 13.1　ニューラルネットワークって？

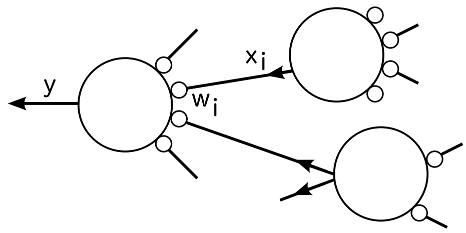
★ 13.1.1　神経細胞とそのモデル

ヒトの脳には数百億の**ニューロン**（**神経細胞**, neuron）が存在している．ニューロンは信号を伝達する機能をもっており，多数のニューロンが相互につながりあって多様な情報処理を行なっている．生命維持から感情，思考にいたるまでの脳機能は，主にこれらニューロンの集団が担っているものと考えられている．



ニューロンのふるまいを思い切って単純化すると，次のようにまとめることができる．

1. 他のニューロンの出力を受け取る．ただし，そのまま受け取るのではなく，ニューロン間のつながりの強さに応じて重みづけされた値を受け取る．
2. それらの和を求める
3. その値に応じて自身の出力を決める



このようなニューロンのふるまいは，次式のようにモデル化できる (☆ 1)．

$$y = \sigma\left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i + \theta\right) \tag{1}$$

ただし， x_i はこのニューロンに信号を伝達する n 個のニューロンのうち i 番目のものの出力であり，w_i は x_i の**結合重み** (☆ 2) を表すパラメータである．また，θ は**しきい値** (☆ 3) と呼ばれるパラメータである．関数 $\sigma(s)$ は**活性化関数** (☆ 4) と呼ばれるものであり，以下に示す**ステップ関数** (☆ 5) や**シグモイド関数** (☆ 6)，**Rectified Linear 関数** (☆ 7) などがよく用いられる．ニューロンの入力と出力の関係は一般に非線形であり，これらはその性質をモデル化したものとなっている．

☆ 1) 1940 年代に McCulloch と Pitts が提案した．ただし，彼らのモデルではニューロンの出力は $0, 1$ の二値である．

☆ 2) 結合重み: connection weight.

☆ 3) しきい値: threshold value.

☆ 4) 活性化関数: activation function.

☆ 5) ステップ関数: step function.

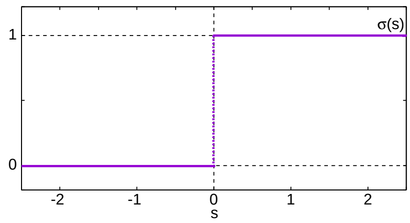
☆ 6) シグモイド関数: sigmoid function.

☆ 7) ランプ関数ということもある．

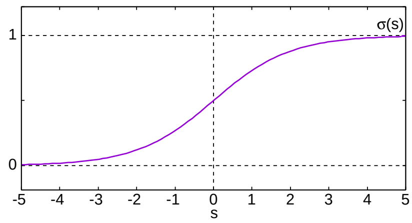
$$\text{ステップ関数} \quad \sigma(s) = \begin{cases} 1 & s \geq 0 \\ 0 & otherwise \end{cases} \tag{2}$$

$$\text{シグモイド関数} \quad \sigma(s) = \frac{1}{1+e^{-s}} \tag{3}$$

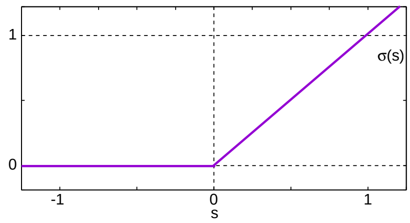
$$\text{Rectified Linear} \quad \sigma(s) = \begin{cases} s & s \geq 0 \\ 0 & otherwise \end{cases} \tag{4}$$



ステップ



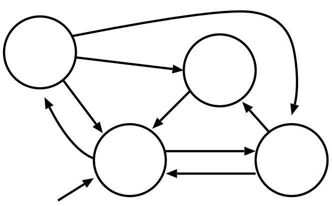
シグモイド

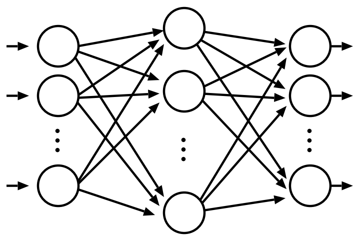


Rectified Linear

★ 13.1.2　ニューラルネットワーク，多層パーセプトロン

上記のようなニューロンモデルを複数つなぎあわせたものを**ニューラルネットワーク** (☆ 8) という．様々なつながり方のものが考えられるが，図右のようにニューロンが層を成し，層間のニューロンのみに単方向のつながりがあるタイプのものを**多層パーセプトロン** (☆ 9) と呼ぶ．



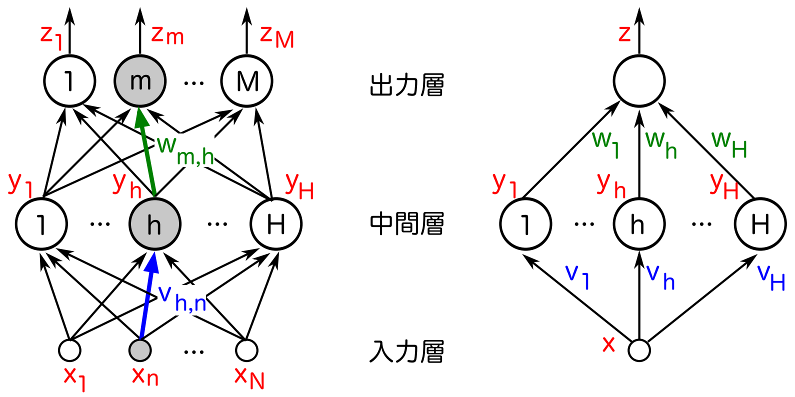


☆ 8) ニューラルネットワーク: neural network，神経回路網とも．

☆ 9) 多層パーセプトロン: Multi-Layer Perceptron, MLP.

★13.2 多層パーセプトロンとその学習

下図に，2 種類のニューラルネットを示す．左右の図のいずれも，大きめの丸一つが一つのニューロンを表している．左のものは入力が直接出力とつながった構造をしている．一方，右の方は，入力と出力の間に「隠れた」ニューロンの層（これを「隠れ層」または「中間層」という）を有している．一般に,「多層」パーセプトロンという時は，このような隠れ層を 1 層以上有するものを指す．



図右の多層パーセプトロン（以下 MLP と略記する）の入出力は，次のような式で表される．

$$y_h = \sigma\left(v_{h,0} + \sum_{d=1}^{D} v_{h,d}x_d\right) \qquad (h = 1, 2, \ldots, H) \tag{5}$$

$$z_m = \sigma\left(w_{m,0} + \sum_{h=1}^{H} w_{m,h}y_h\right) \qquad (m = 1, 2, \ldots, M) \tag{6}$$

ここで，y_h は隠れ層の h 番目のニューロンの値であり，$v_{h,d}$ はこのニューロンと入力の d 番目の要素との間の結合重みである．同様に，z_m は出力層の m 番目のニューロンの値であり，$w_{m,h}$ はこのニューロンと隠れ層の h 番目のニューロンとの間の結合重みである．関数 $\sigma(s)$ は前述の活性化関数である．

MLP の特徴は，上述のように隠れ層を有することである．隠れ層ニューロンの活性化関数にシグモイドのように非線形なものを用いると，MLP 全体の入出力も非線形関数となる．そのため，入力と出力の間に複雑な関係があるようなデータの場合でも，うまく学習できると期待される．

MLP においては，ニューロン間の結合の強さを表す値が，学習すべきパラメータとなる．式 (5) と (6) で表される MLP の場合，入力—隠れ層のニューロン間の結合を表す値 $v_{h,d}$ と，隠れ層ー出力層のニューロン間の結合を表す値 $w_{m,h}$ がパラメータである．それらの学習には，ロジスティック回帰の場合と同様に，勾配法／最急降下法を用いることが多い．目的関数としては，出力の正解と実際の出力との間の二乗誤差（最小二乗法で説明した誤差関数と同じ形のもの，次節も参照）や交差エントロピー（前回資料参照）などを用いることができる．いずれの場合も，上記パラメータに関する微分が計算できるので，パラメータを適当な初期値から逐次修正していく形の学習アルゴリズムを構成することができる．

★ 13.3 多層パーセプトロンの応用例

多層パーセプトロン (MLP) は，教師データと目的関数の与え方次第で，回帰／識別どちらの問題にも適用することができる．回帰の場合，通常は二乗誤差を目的関数とする．一方，識別の場合，交差エントロピーを用いることが多い．以下，回帰と識別それぞれの応用例を示す．

★ 13.3.1 非線形回帰

最も単純な形の MLP として，上の図および式 (5) と (6) で $D = M = 1$ とした場合，つまり入力も出力も 1 つの場合を考える．出力層ニューロンの活性化関数は恒等関数（$\sigma(s) = s$）とする (☆ 10) このとき，入力 x に対するこの MLP の出力 z は，次式のようになる．

☆ 10) シグモイドと違って出力が $(0, 1)$ に限定されないので，この問題のような回帰／関数近似では出力の活性化関数としてよく用いられる．

$$y_h = s(v_{h,0} + v_{h,1}x) \qquad (h = 1, 2, \ldots, H) \tag{7}$$

$$z = \sum_{h=1}^{H} w_h y_h \tag{8}$$

この MLP に対して，入力と出力の正解のペア N 個から成る学習データ $\{(x_n, \tilde{z}_n) | n = 1, 2, \ldots, N\}$ を与え，x_n に対する MLP 出力 z_n と正解 $\tilde{z}_n$ との間の二乗誤差の和

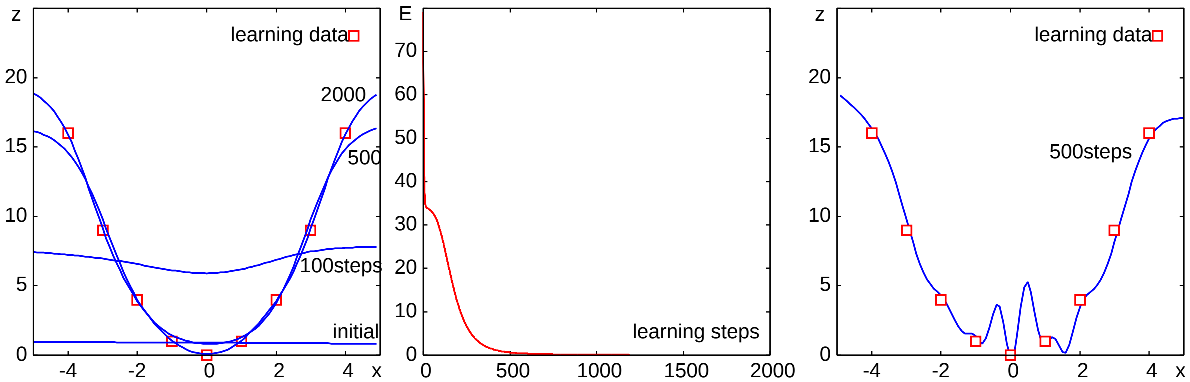
$$E = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(\tilde{z}_n - z_n)^2 \tag{9}$$

を目的関数として学習させる．これは，入出力がともに 1 変数の場合の回帰問題への MLP の適用例となっている．MLP を用いると，非線形な活性化関数をもった隠れ層のおかげで複雑な曲線を当てはめることができる．

以下に，実際に学習を行なった実験の結果を示す．二次関数 $z = x^2$ を近似することを目標に，学習データを $(-4, 16), (-3, 9), \ldots, (4, 16)$ の $N = 9$ 個とした．また，中間層のニューロン数は $H = 10$ と $H = 100$ の二通りとした．

下図左は，$H = 10$ の場合の学習過程における MLP 出力の変化を示している．学習が進むにつれてうまく学習データを近似できるようになっていることがわかる．このことは，下図中に示した二乗誤差 E の変化の様子からもわかる．

一方，下図右は，$H = 100$ とした場合の学習結果の一例を示している．この場合，学習データに対する二乗誤差 E はほぼ 0 になっており，MLP 出力の曲線は全ての学習データ点を通っているが，その形は近似対象である放物線とはほど遠いものとなっている．このような現象は**過学習**と呼ばれている．



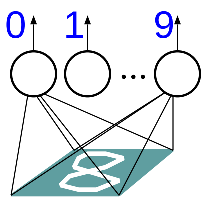
★ 13.3.2　手書き数字の識別

多層パーセプトロン (MLP) を識別問題に用いる例として，MNIST 手書き数字データセット で実験を行ってみる．このデータセットは，28×28 画素の'0' から'9' までの手書き数字のグレイスケール画像 7 万枚（学習用 6 万枚+テスト用 1 万枚）から成るものであり，機械学習の練習問題としてよく用いられている．入力の次元数 $D = 28 \times 28 = 784$ であり，クラス数 $K = 10$ である．

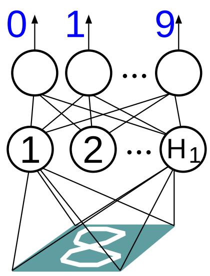
☆ 11) `http://yann.lecun.com/exdb/mnist/`

ここでは，ロジスティック回帰（logistic と表記，前回登場のものをクラス数が 3 以上に一般化したもの），それに隠れ層を 1 つ追加した MLP（MLP2 と表記），さらにもう 1 つ追加した MLP（MLP3）の 3 通り（下図参照）で実験を行った．隠れ層のニューロン数は $H_1 = 500$ (MLP2) および $H_1 = H_2 = 500$ (MLP3) とし，隠れ層ニューロンの活性化関数は全て Rectified Linear とした．

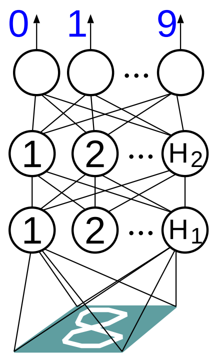

MNIST データの例



logistic



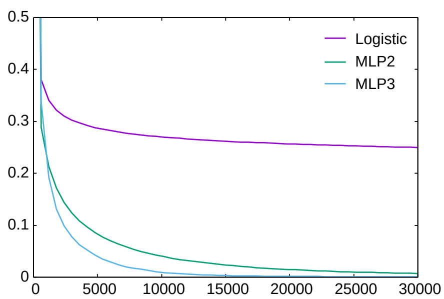
MLP2



MLP3

左下の表に，3 万回の学習（詳しい条件は説明を省略する）を行った後の MLP を用いて測った誤識別率（MLP が出力したクラスが誤りだった割合）を示す．ロジスティック回帰も MLP も，パラメータの初期値が異なれば異なる結果が得られるので，ここでは初期値を 5 通りずつ変えて得られた誤識別率の平均を示している．また，右下のグラフに学習の進行の様子の例を示す．横軸は学習回数，縦軸は学習データに対する交差エントロピーの平均である．

	logistic	MLP2	MLP3
学習データの誤識別率 [%]	6.9	0.036	0.0
テストデータの誤識別率 [%]	7.5	1.9	1.9



★ 宿題

この授業のウェブページ参照．