

人工ニューラルネットワークにおける満足化を用いた汎化手法

Generalization method with satisficing on ANN

小澤 優太 *¹ 甲野 佑 *¹ 高橋 達二 *²
 Ozawa Yuta Kohno Yu Takahashi Tatsuji

*¹東京電機大学 大学院 *²東京電機大学
 Graduate School of Tokyo Denki University Tokyo Denki University

One of the major problems in machine learning is how to generalize appropriately sacrificing immediate overfitting. There is a tradeoff between prioritizing unknown data yet to come and known data already present. Since animals including humans are considered to flexibly cope with this tradeoff, it is a promising way to study how they or we fit and generalize. We propose a learning method on artificial neural networks using satisficing strategy that reflects some cognitive and environmental properties.

1. はじめに

ニューラルネットワークは画像認識における視覚的応用、音声認識や自然言語処理といった聴覚的応用のように、幅広い分野で活用されている強力な計算モデルである。ニューラルネットワークは人間を含めた動物の脳に見られる神経の情報処理構造をモデル化したものであり、一般には与えられた入力データとそれに対応する教師信号から、理想となる出力を導き出す処理を学習するものである。近年では、ニューラルネットワークの中でも、階層構造を非常に深くすることで強力な表現能力を実現した深層学習が注目されている。深層学習では、抽象的かつ階層的な表現を獲得することで、与えられた入力データから多様な特徴を自立的に獲得している。物体認識においては他の手法と比べ圧倒的な高性能を示した。特に、従来において特徴抽出は人間の介入を必要としていたが、特徴抽出から出力までを総じて行うといった理論的枠組みの変遷は機械学習の分野においても大きな変化である。このような表現獲得技術は、大規模なデータへの応用が可能であったり、人工知能の分野そのものと密接に対応し、さらなる発展が期待されている。しかしながら、ニューラルネットワークはこれらの多くの発展にもかかわらず、表現能力の豊かなモデルに付随する、過剰な適合による過学習が引き起こす汎化の障害が主要な問題となっている。既知のデータへの過学習と未知のデータへの汎化はトレードオフの関係にあり、学習課題によって優先度が変わる。この優先度は、適合の不足と過学習のバランスを最適にすることで、汎化性能を最良にするような最適な調節が存在すると考えられる。不確実な現実世界において、人間を含む動物はこれらのトレードオフに柔軟に対処していると考えられる。近年では、ある基準によって行動の振り舞いを変化させ、その基準を満たす選択肢を見つけるまで探索を行うという満足化という概念を取り入れた手法の有効性が注目されている。

そこで本研究では最も基本的な、入力、中間、出力の3つの層からなる階層型ニューラルネットワークである多層パーセプトロンに着目し、認知的な側面を反映した満足化価値関数を用いることでの人工ニューラルネットワークの中間ユニットのバランスを検証する。

2. 多層パーセプトロン

階層型ネットワークは与えられたデータが入力層へ入力され、ユニット同士が繋がっている結合荷重によって信号を変化させながら順に前進し各ユニットで処理が行われる。そして、最終的に出力層から処理の結果が出力されるようなネットワークである。入力層、中間層、出力層の3つの層からなる多層パーセプトロンのネットワークの様子を図1に示す(結合荷重の実線は見易さのため一部省略してある)。多層パーセプトロンは、与えられた入力データとそれに対応する教師信号から、望んでいる出力に向けてネットワーク間の結合荷重をある手続きに基づいて更新していくことで学習を行う。

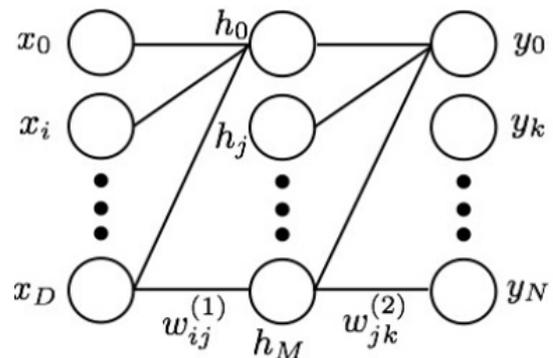


図 1: 3層の多層パーセプトロン

ここで、 x_i は入力層のユニット、 h_j は中間層のユニット、 y_k は出力層のユニット、 $w_{ij}^{(1)}$ はネットワークにおける(1)層目のユニット D からユニット M への結合荷重を表す。また、各層のユニットの0番目はバイアス項であり、ユニットの値は常に1を取る。入力データを x とした時、中間層 M 番目のユニットへの入力 z_j 及びユニットからの出力 h_j は

$$z_j = \sum_{i=0}^D x_i w_{ij} \quad (1)$$

$$h_j = f(z_j) \quad (2)$$

となる。ただし $f(x)$ は活性化関数であり適用する問題に応じてシグモイド関数、ソフトマックス関数などが用いられるが、

本稿では 10 クラス分類を適用するため、中間層では (3) 式のような双曲線正接関数、出力層では (4) 式のようなソフトマックス関数をそれぞれ用いることとする。

$$f_1(x) = \tanh(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)} \quad (3)$$

$$f_2(x) = \frac{\exp(a_i)}{\sum_j^n \exp(a_j)} (i = 1, \dots, n) \quad (4)$$

よって、入力データ x に対するネットワークの各出力 y_k は次のようになる。

$$y_k = f_2\left(\sum_{j=0}^M f_1\left(\sum_{i=0}^D x_i w_{ij}^{(1)} w_{jk}^{(2)}\right)\right) \quad (5)$$

クラス分類において、ネットワークを用いて入力に対する予測結果を得る際には、出力層の活性化関数である Softmax 関数の出力に対して最も値の大きいインデックスを予測クラスとする。よって、予測される分類のクラス c は次のようになる。

$$c = \arg \max_k (y_k) \quad (6)$$

2.1 ネットワークの学習

ネットワークの学習において、多層パーセプトロンの際には誤差逆伝播法によって結合荷重の更新を行う。入力データ x から得られたネットワークの出力 y_k にそれぞれ対応する教師信号 t_k から得られる誤差を、最小にするように誤差関数の最小化を行う。結合荷重と入力パターン x_p に対する誤差の評価は次のようになる。本研究では多クラス分類を扱うため、次のような交差エントロピー誤差関数を最小化する。

$$E(w) = - \sum_{n=1}^N \{t_n \ln y_n + (1 - t_n) \ln(1 - y_n)\} \quad (7)$$

誤差逆伝播法では最急降下法に基づき、中間層と出力層の結合荷重に対して、得られた誤差から次のように更新を行う。

$$w_{jk}^{(2)} \leftarrow w_{ij}^{(2)} - \alpha \delta_k^{(2)} h_j \quad (8)$$

$$w_{ij}^{(1)} \leftarrow w_{ij}^{(1)} - \alpha \delta_j^{(1)} x_i \quad (9)$$

ここで、 α は最急降下法による学習率であり $[0,1]$ の値をとる。 δ は重みに対する誤差の変化量であり、出力層と中間層によりそれぞれ次の式によって計算する。

$$\delta_k^{(2)} = (y_k - t_k) \quad (10)$$

$$\delta_j^{(1)} = (1 - h_j^2) \sum_{k=1}^N \delta_k^{(2)} w_{jk}^{(2)} \quad (11)$$

3. ニューラルネットワークと過学習

ニューラルネットワークを学習する際に、訓練データに対する誤差が小さくなり学習が成立した場合であっても、未知のデータに対する誤差である汎化誤差が大きくなってしまふことがある。この性質は訓練データに内在する規則性や特徴の獲得に影響される。この未知データに対する汎化性によって、学習したモデルの信頼性や応用可能性などに影響が生じる。

ニューラルネットワークは複雑なモデルであることから、隠れユニットの数 M によって汎化性を含めた学習の差が発生する。入力ユニットと出力ユニットは、問題とするデータ集合の次元によって定められるが、中間層のユニットの数 M は調節可能である。問題とする学習に対して、ネットワークの制御をする時、この中間層のユニットの数 M によって適合不足または過学習のトレードオフが発生する。しかし、このトレードオフはネットワーク内のパラメータを制御するということから、学習課題とユニット数 M によって優先度が異なり、この適合不足と過学習のバランス最適にするような最適な M の値があると考えられる。一般には、非常に少ないデータから汎化性の良いモデルの獲得であったり、大規模なネットワークの学習を行うときに大きな問題となる。このような過学習に対して、L1 ノルム、L2 ノルムを用いることでモデルの複雑さを制御するような手法や、訓練データ集合に関して定義された誤差関数の増減に着目し、過学習が始まった段階で訓練そのものを停止するというような手法が考えられている。これらは、ネットワークの過学習を制御することによって汎化誤差を小さくすることが目的である。

3.1 ドロップアウト

ドロップアウトとは、ニューラルネットワークにおいて学習の際にユニットの脱落をさせることでの汎化性の改善を目的とした手法である [Nitish 14]。ネットワークを訓練する際に脱落したユニットを削除したネットワークを構成する。ドロップアウト手法において、脱落させるユニットは任意の確率でランダムに選択されるが、典型的な値は 0.5 であり 50% の確率でユニットの脱落を行う。ドロップアウト手法を用いた場合の結合荷重の修正はユニットが削除されたネットワークに対して行われるため、結局小規模化したネットワークを抽出することになる。これは共有されている全ての重みパラメータから、複数のネットワーク集合の訓練を行っているともみることができるとを意味する。ドロップアウトする確率を p と考えた時、ネットワークの出力は次のように計算される。

$$b_i = \text{Bernoulli}(p) \quad (12)$$

$$\tilde{h} = h * b \quad (13)$$

$$y = \tilde{h} * w^{(2)} \quad (14)$$

ここで、 p は各変数が 1 を取る確率、 b は p に従ったベルヌーイ分布の変数から得られたベクトル、 \tilde{h} はドロップアウトが適用された中間層の出力である。また、中間層の 0 番目のユニットであるバイアス項は脱落させないものとする。学習の際には、学習の度に脱落させるユニットを判断するベクトル b を生成し、それをを用いて小規模化されたネットワークに対して誤差逆伝播法を適用する。そして、学習したネットワークから予測する結果を得る際には、ベクトル b は用いずに、全ての中間層を使用かつ重みを p 倍して出力を得る。例えば、ドロップアウトの確率が 0.5 である場合は全ての重みを 0.5 倍した上で全ての重みを用いて予測結果の出力を得る。

4. 提案手法

本稿での提案手法は、中間層のユニットの活用のバランスによって引き起こされる過学習と学習不足のトレードオフに対して、ある振る舞いを実現するような制御方法をユニットそのものに持たせることでの対応を検証することが目的である。

本研究では、不確実な現実世界に柔軟に対応していると考えられている人間に見られる認知バイアスに着目した。そして、その中でも近年バンディット問題などにおいて注目されている、ある基準によって振る舞いを変化させるといった側面を反映した満足化と呼ばれる概念による満足化価値関数をニューラルネットワークに反映させることで中間ユニットの使用バランスの調整と検証を行う。

4.1 RS モデル

人間は「 p ならば q 」という命題が真であった時に、逆の命題である「 q ならば p 」をも同時に推論してしまうという対称性バイアスと、「 p でないならば q でない」を想起してしまう傾向である相互排他性バイアスを持つと言われている。これらの対称性バイアスと相互排他性バイアスを満たすようなモデルとして完全対称性モデル (Rigid Symmetry Model) が考案されており、バンディット問題を通して性能が分析されている [高橋 15]。RS モデルでは、各選択肢の値を相対的に評価し、次式に示されるように参照点 R を導入することで R を基準にして各選択肢の評価を行う。

$$RS(C_i) = N_i(E(C_i) - R) \quad (15)$$

ここで、 N_i はその選択肢を選択した回数であり、 $E(C_i)$ は選択肢 C_i の価値、 R は参照点である。

4.2 RS-Dropout モデル

RS-Dropout モデルはニューラルネットワークのドロップアウト手法におけるユニットの脱落を、ある参照点を基準にした学習状態の予測を RS モデルによって算出して行うものである。RS 値を得るには、選択肢の価値を定義する必要がある。そこで、RS-Dropout モデルでは中間層のニューロンを選択肢として捉え、価値をネットワークの出力と教師信号から定量化する。値を算出するにあたり、ユークリッド距離によって計算された各ニューロンの価値 V_j を参照して RS の値を計算することとした。中間層の j 番目のニューロンの価値を V_j とした時、次式から V_j を計算する。

$$V_j(t+1) \leftarrow V_j(t) + \alpha((-E * s_j) - V_j(t)) \quad (16)$$

$$s_j = \sum_k |\delta_k^{(2)} h_j| \quad (17)$$

ここで、 E はネットワークの出力と教師信号とのユークリッド距離を表す。価値の初期値は $[-1, 1]$ における一様な乱数とする。ネットワークの学習中に、ユークリッド距離によって計算されたニューロンの価値から、各状態でのニューロンの学習状況を推定する。つまり、ニューロンの価値 V_j が高いほど学習できていると仮定し、ニューロンごとの学習状況を予測する。しかしながら、ネットワークの出力と教師信号から得られるユークリッド距離はスカラー量であるため、ネットワークの出力から得られた E 値が全ての h_j に対して同じ値になってしまう。そこで、中間層の各ユニット h_j が E を出力した際の重みとして、結合荷重の修正量の変化量の総和を取った値を乗算することで h_j ごとの価値を決定する。RS モデルの参照点は満足化の振る舞いを左右する値である。もし、ニューロンの価値が低かった場合であっても、参照点 R を下回る場合は試行回数 N_j が少ないニューロンほど RS 値が高くなる。従って、参照点 R を定めることで一定以上の学習ができていると判断できる上位のニューロンと、一定以上の学習ができていないと判断することができる下位のニューロンに分類することができる。よって、ネットワークの中間層におけるニューロンの価値

を評価する際に、指定した上位 $x\%$ を決定づけるような値を参照点 R とすることで、学習できていると判断できるニューロン $x\%$ を区分することが可能になる。この参照点 R は、ニューロンの価値 V_j を用いて次式のように RS の値を求める。

$$RS(V_j) = N_j(V_j - R) \quad (18)$$

RS 値を参照することで学習ができていると判断できるニューロンの中から使用回数が少ないものを優先的使用することが可能となり、中間ユニットごとの偏った学習を弱めることができると考えられる。これは、RS の値を降順にした時、上位のユニットを優先的に使用することで実現できる。これは中間ユニットにおける RS 値の下位 50% をドロップアウトすることと同じである。RS-Dropout モデルを適用するにあたり参照点 R の値を定める必要があるが、この値は中間層のユニットを脱落させる振る舞いを左右させる値であるため、上位 $x\%$ のユニットを決定づけるような割合を変更させることで RS の参照点による中間層のニューロンと学習能力の検証を行う。

5. シミュレーション

シミュレーションとして、最も基本的な多層パーセプトロン、ドロップアウトを組み合わせたもの、そして、RS によるドロップアウトを組み合わせたもの、3つのモデルの比較を行う。比較に用いるデータセットは手書き文字認識実験で広く用いられている MNIST Dataset を用いる。MNIST Dataset による 10 クラス分類と、あらかじめある固定の観測データを除いた状態で学習を行い、除いた観測データを含んだ状態での追加学習を行う。

5.1 MNIST Dataset

MNIST Dataset は $28 * 28$ ピクセルの手書き数字画像データである。MNIST Dataset の画像の例を図 2 に示す。

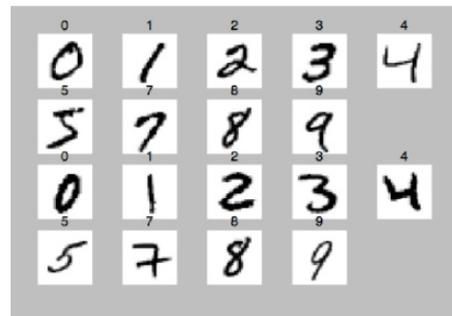


図 2: MNIST Dataset の例

各ピクセルの値は 8 ビットのグレースケール値であり、ネットワークの学習段階では $\{0, \dots, 1\}$ の値に正規化した上でネットワークに入力を行い、学習を行う。MNIST における訓練データを 60000、テストデータを 10000 とした。

5.2 シミュレーション設定

シミュレーションでは、RS 値によるドロップアウトによって中間ユニットの使用回数及び学習後の正解率がどのように変動するのかを確認するため、通常の 10 クラス分類に加えて 9 クラス分類の訓練データで学習し、その後未知クラスのデータとして 1 クラス加え、継続して 10 クラス分類を学習するような追加学習タスクを行った。中間層のユニット数を 1000 とし、学習回数を 5000, 10000, 50000 として学習を行い、正解率を結果とした。

6. 結果

MNIST Dataset における通常の 10 クラス分類での学習回数を 5000 回, 10000 回, 50000 回としたシミュレーション結果として, 正解率を次の表 1 に示す. RS-Dropout モデルにおいては, 式 16 によって計算されたニューロンの学習状態の価値 V_j を上位 $x\%$ にするようなしきい値 x を 0.0 から 0.5 まで変動させ, それぞれの結果を出力した. ニューロンの価値 V_j を計算するにあたり, 学習率 α を 0.9 とした.

表 1: 10 クラス分類におけるモデルの比較

手法	学習回数		
	5000	10000	50000
MLP	0.86	0.88	0.93
MLP+Dropout	0.87	0.90	0.93
MLP+RS(0.0)-Dropout	0.87	0.90	0.92
MLP+RS(0.1)-Dropout	0.87	0.88	0.93
MLP+RS(0.2)-Dropout	0.85	0.88	0.93
MLP+RS(0.3)-Dropout	0.87	0.88	0.93
MLP+RS(0.4)-Dropout	0.85	0.86	0.92
MLP+RS(0.5)-Dropout	0.85	0.87	0.93

また, 追加学習タスクにおけるシミュレーションの結果を表 2 に示す. 結果の値は, 左の値が 9 クラス分類として学習回数 N 回学習を行った際のテストデータの正解率であり, 右の値が未知の 1 クラスを追加し, 再度 N 回学習を行った上でのテストデータの正解率である.

表 2: 追加学習タスクにおけるモデルの比較

手法	学習回数		
	5000	10000	50000
MLP	0.86, 0.89	0.87, 0.90	0.93, 0.94
MLP+Dropout	0.84, 0.87	0.88, 0.89	0.92, 0.93
MLP+RS-D(0.0)	0.88, 0.89	0.90, 0.89	0.93, 0.93
MLP+RS-D(0.1)	0.87, 0.88	0.89, 0.90	0.92, 0.93
MLP+RS-D(0.2)	0.86, 0.88	0.90, 0.90	0.94, 0.94
MLP+RS-D(0.3)	0.85, 0.88	0.88, 0.89	0.92, 0.93
MLP+RS-D(0.4)	0.86, 0.87	0.89, 0.89	0.92, 0.94
MLP+RS-D(0.5)	0.85, 0.87	0.88, 0.90	0.93, 0.95

そしてニューロンの価値上位 $x\%$ ごとでの中間層の使用回数の変動を調べるため, 学習回数を 5000 とし, 上位 0%, 上位 25%, 上位 50% とした際の中間層のユニットの使用回数の比較を行った.

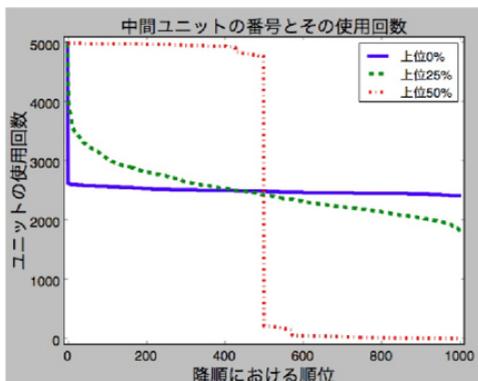


図 3: 上位の各割合における中間ユニットの使用回数

7. 考察

通常の学習タスクにおいては, 学習上位のニューロンの割合を小さくするほど, 学習回数が少ない段階での正解率が高くなっていることが確認できる. これは, 学習できているニューロンの使用を少なくし, 学習回数が少ないようなニューロンを優先的に学習させることで, ドロップアウトによって構成される小規模なネットワークの偏った学習を弱めたことが原因ではないかと考えられる. 追加学習の正解率を見てみると, ニューロンの学習状態の上位の割合が小さくなるほど, 前半の学習と後半の学習で, 正解率の差が小さくなっていることを確認することができた. 図 3 の結果より, 中間層の学習上位のニューロンの使用割合を変化させることでの中間層のニューロンの使用回数の変化が起きているということが示唆された. 学習ニューロンの上位 0% では, 学習できているニューロンを用いずに参照点 R 以下のニューロンを優先的に使用するため, 必然的に使用回数が少ないニューロンが優先されることになる. よって, 全体的に使用回数が均等になったのではないかと考えられる. 学習ニューロンの上位 25% では, 学習しているニューロンと使用回数が少ないニューロンが同じ割合で学習に用いられることで, 学習傾向にあるニューロンと学習不足にあるニューロンが均等に使用されたということが考えられる. そして学習ニューロンの上位 50% では使用回数が少ないニューロンは考慮されず, ニューロンの価値 V_j が高いもののみを参照するため, 早い段階で使用するユニットが局所化してしまったことで, 使用回数に大きな偏りが発生してしまったということが考えられる. 全体の結果から, 中間ユニットの数による正解率の大きな差を確認することはできなかった. これは学習する問題の複雑さと中間ユニットの数の関係性が弱すぎたことによると考えられる. 従って, 問題の複雑さに合わせた上で中間ユニットの範囲を定め, その問題と中間ユニットの数による正解率の変化を検証していく必要がある.

8. 結論

本研究では階層型ネットワークの最も基本的なネットワークである多層パーセプトロンに着目し, 中間ユニットの調節とそれによる正解率の変化を確認した. 中間層の数による過学習と学習不足のトレードオフを調節するために, ニューロン単位での価値を定めることで学習状態を定量化し, 認知的側面である満足化の概念を取り入れたドロップアウトの手法を提案した. その結果, 中間ユニットの変化を任意の上位ユニットに分類するような値を設定することで, 学習の際における中間ユニットの使用回数を変更することができるという結果を得ることができた. 今後として, 満足化モデルとニューロン間のバランス調節における詳細な分析が課題である.

参考文献

- [Nitish 14] Nitish, S., Geoffrey, H., Alex, K., Ilya, S., Ruslan, S., Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting, *Journal of Machine Learning Research* 15, 1929-1958 (2014).
- [高橋 15] 高橋 達二, 大用 庫智, 甲野 佑, 横須賀 聡, 不確実性の下での満足化を通じた最適化, *JSAI 2015 (2015 年度人工知能学会全国大会 (第 29 回)) 予稿集*, 2D1-OS-12a-4in (2015).