



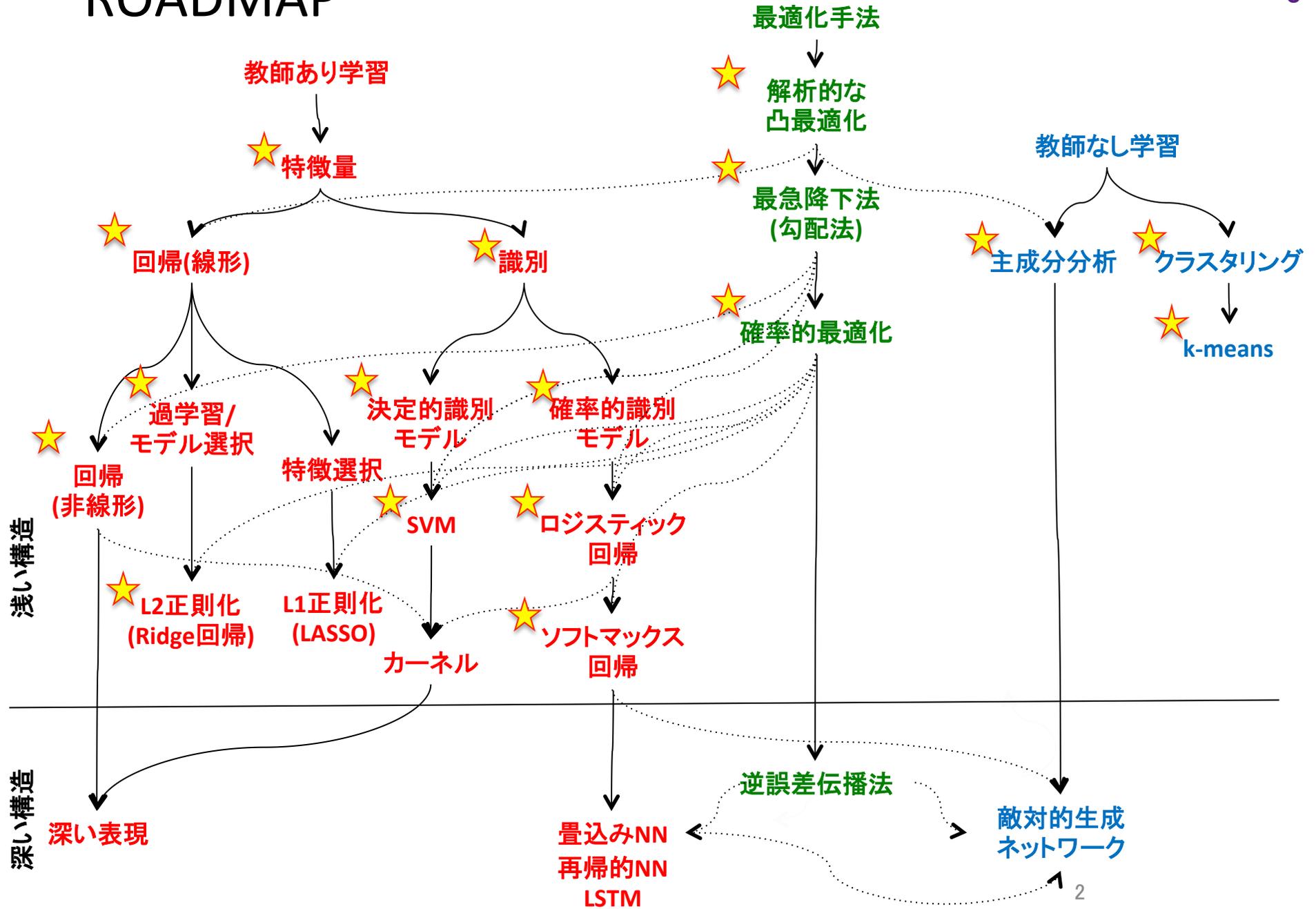
機械学習(9)

ニューラルネットワーク1 基礎とCNN

情報科学類 佐久間 淳



ROADMAP





機械学習から深層学習へ

- これまで機械学習は線形モデル $W^T X$ をベースにしていた
- また機械学習の前提は「よい特徴量が得られること」であった
- 一方で、「どうすればよい特徴量が得られるか」は画像、音声、自然言語など、各領域の人手による工夫に依存していた
- 深層学習では、「どうすればよい特徴量が得られるか」を、学習ベースで獲得するための試みである
- まだ成功を収めてから若い分野でもあり、理論的裏付けが少ない手法であり、「それはなぜか？」に答えられないことも多い...



規模感

- 機械学習

- 数千から数万サンプル
- 通常のCPUで学習時間は<24hrs



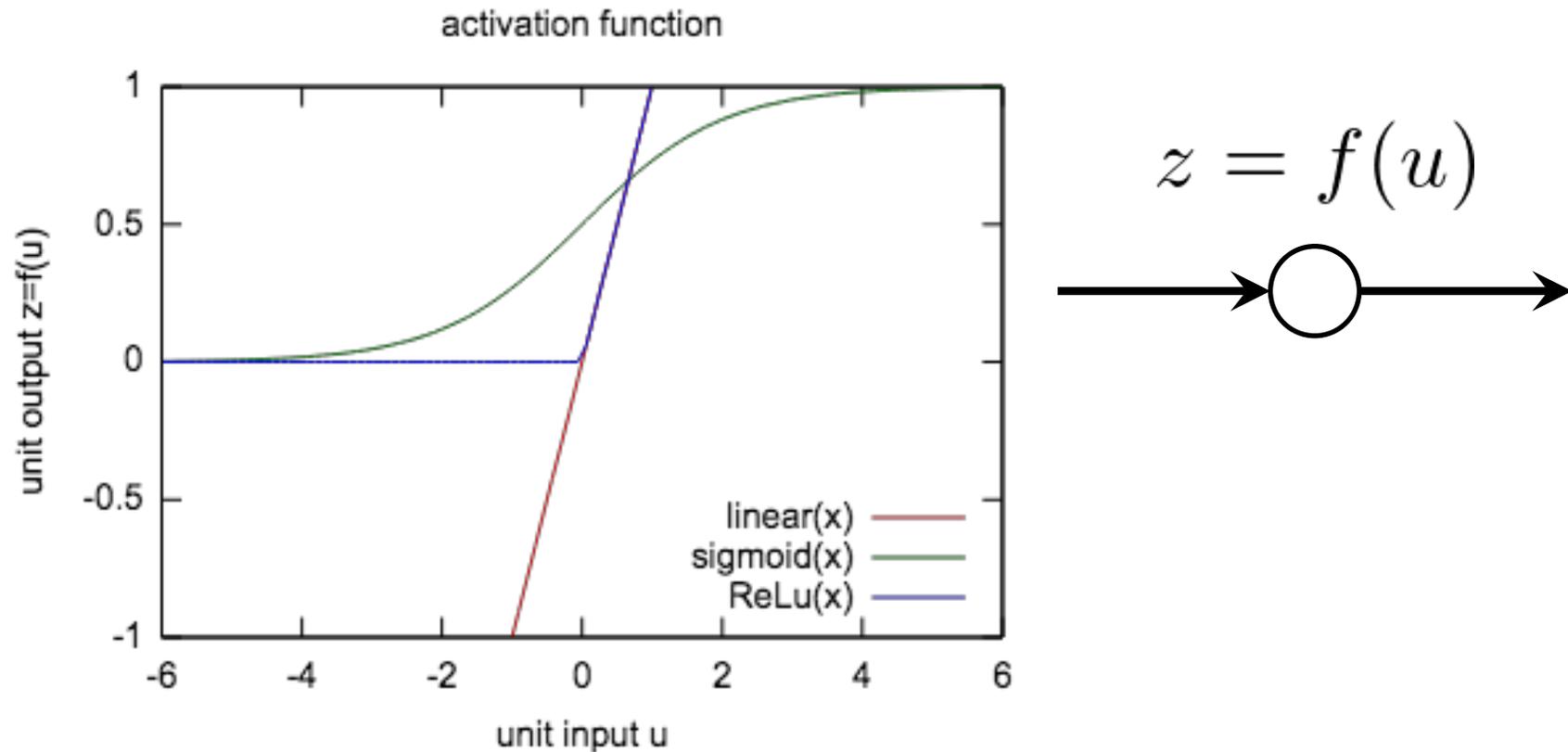
- 深層学習

- 100万サンプル (e.g, 1000クラス、1000枚/クラス)
- GPUを多数使って数時間～数日の学習期間





ユニットと活性化関数



- ユニット: 神経細胞に見立てて、複数の入力信号を受け取り、単一の出力信号を出力する
- 活性化関数: 入力を活性化関数で変換して、その結果を出力する (神経細胞の反応を模倣)



活性化関数

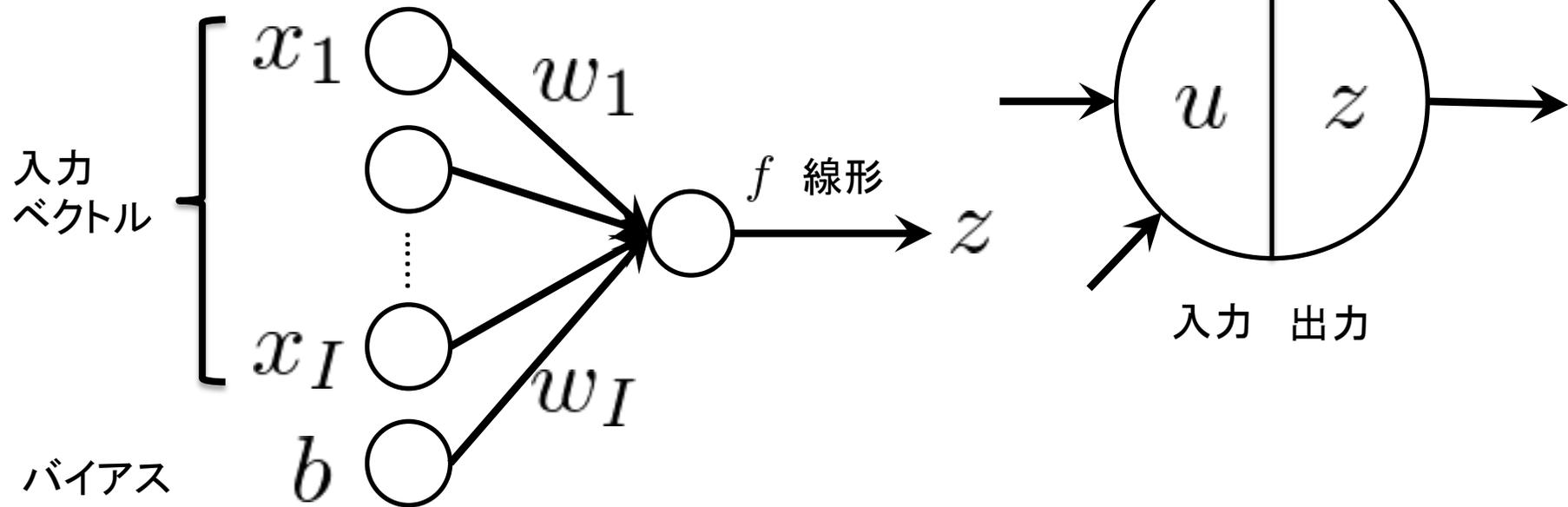
- Linear $f(u) = u$
 - 恒等写像
 - 出力は $[-\infty, \infty]$, 回帰の最終層に使う
- Sigmoid/softmax $f(u) = \frac{1}{1 + e^{-u}}$ $f_k(u) = \frac{e^{u_k}}{\sum_j e^{u_j}}$
 - 微分可能
 - 出力は $[0, 1]$
 - 分類の最終層に使う
- ReLu (rectified liner unit) $f(u) = \max\{0, u\}$
 - 微分不可能点がある
 - 出力は $[0, \infty]$
 - 中間層に使う

活性化関数は非線形であることが重要→why?



活性化関数

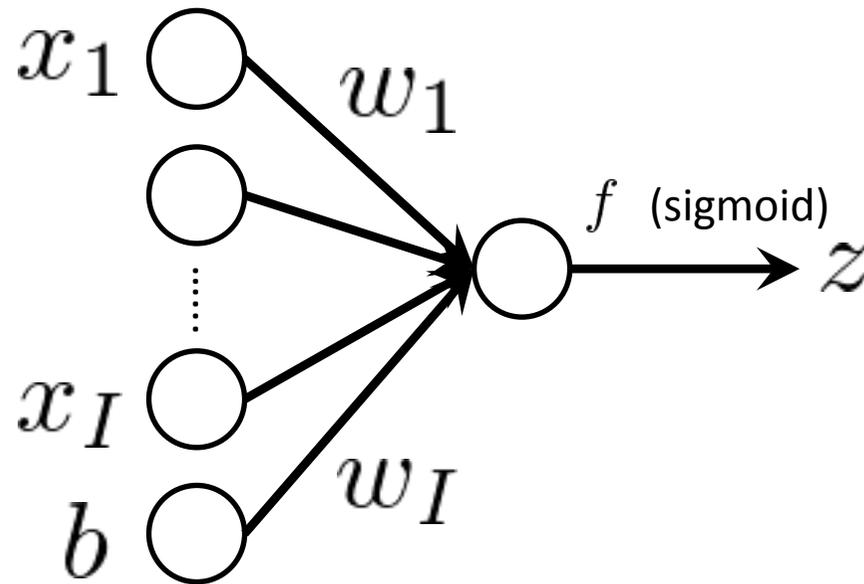
回帰



- 入力 $\mathbf{x}^T = (x_1, \dots, x_I)$
- unit入力 $u = w_1 x_1 + \dots + w_I x_I + b$
- 出力 $z = f(u)$
- 活性化関数 $u = f(u)$



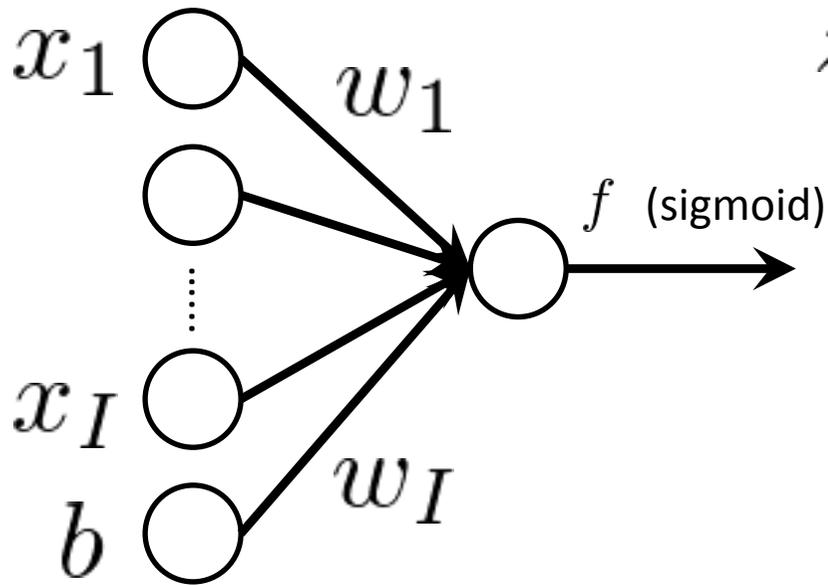
ロジスティック回帰



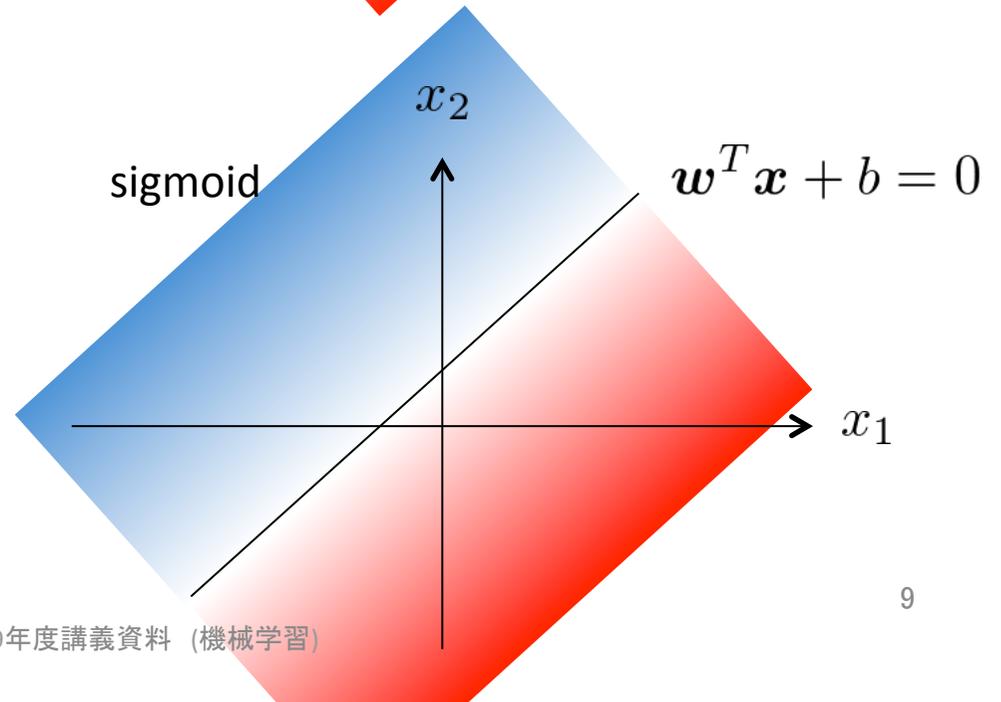
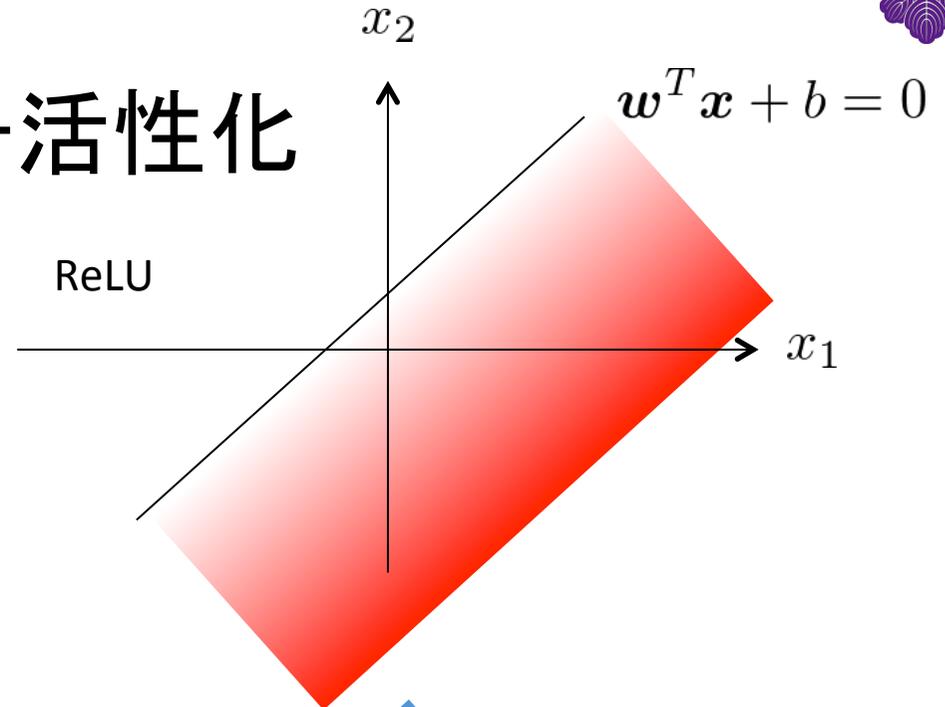
- 入力 $\mathbf{x}^T = (x_1, \dots, x_I)$
- unit入力 $u = w_1 x_1 + \dots + w_I x_I + b$
- 出力 $z = f(u)$
- 活性化関数 $f(u) = \frac{1}{1 + e^{-u}}$



ユニットを通じた信号活性化

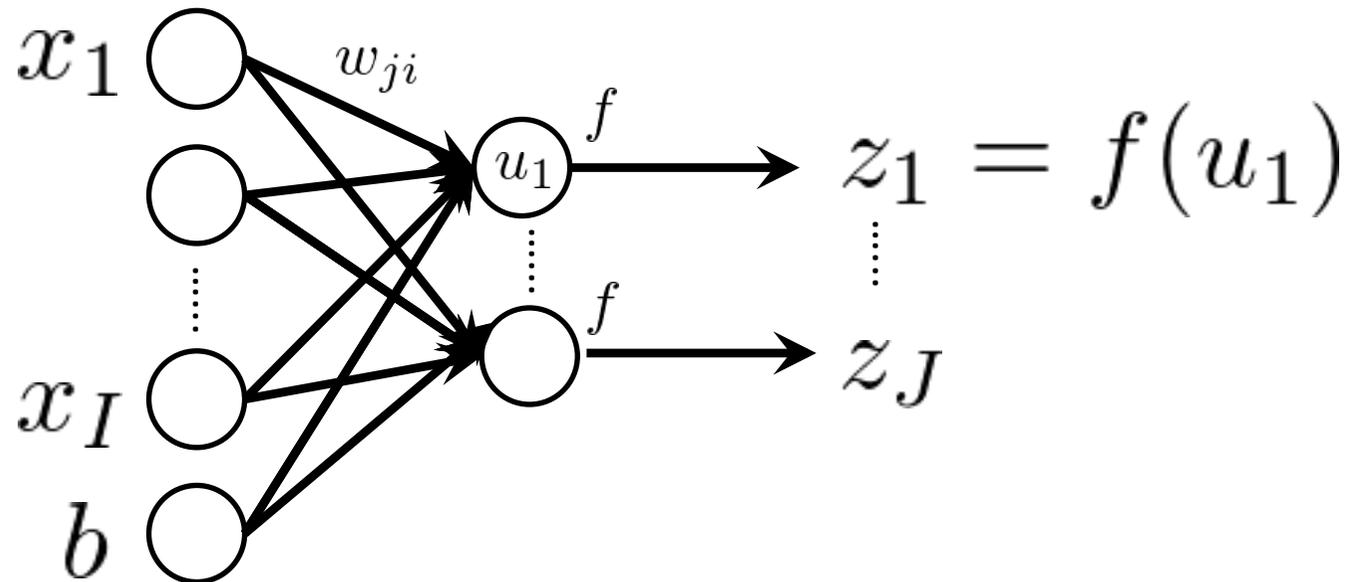


z





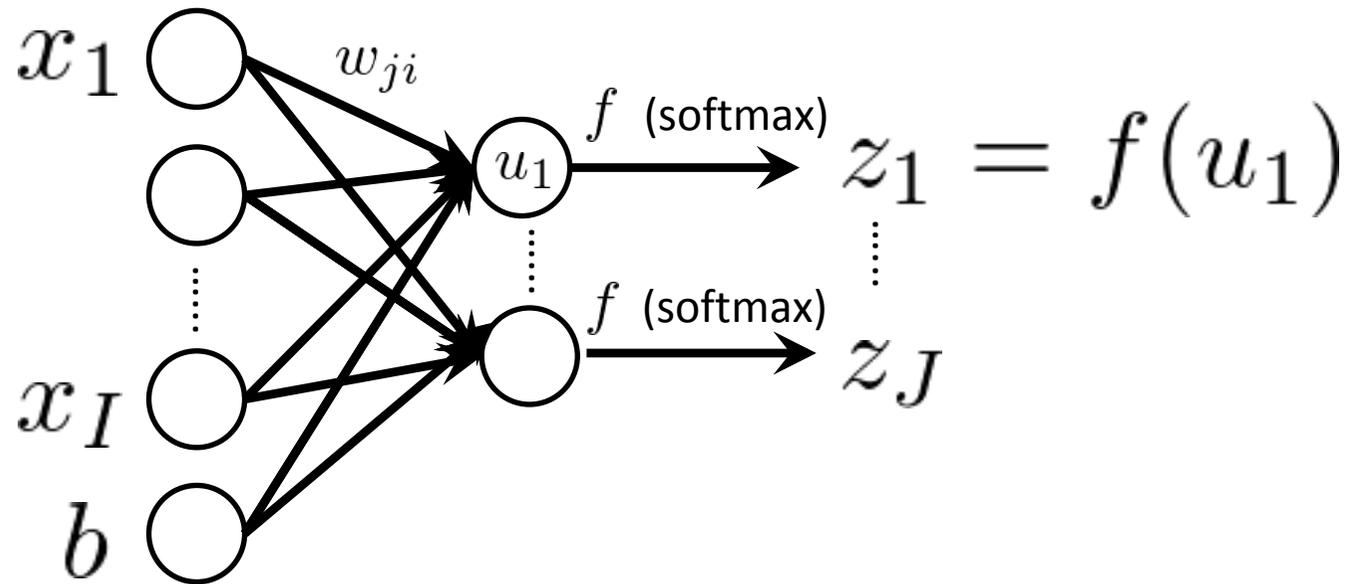
ベクトルを出力するネットワーク



- 入力層第*i*ユニット-第二層第*j*ユニット間の重み w_{ji}
- 第二層の計算 $\mathbf{u} = \mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b}$
- 出力 $\mathbf{z} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$



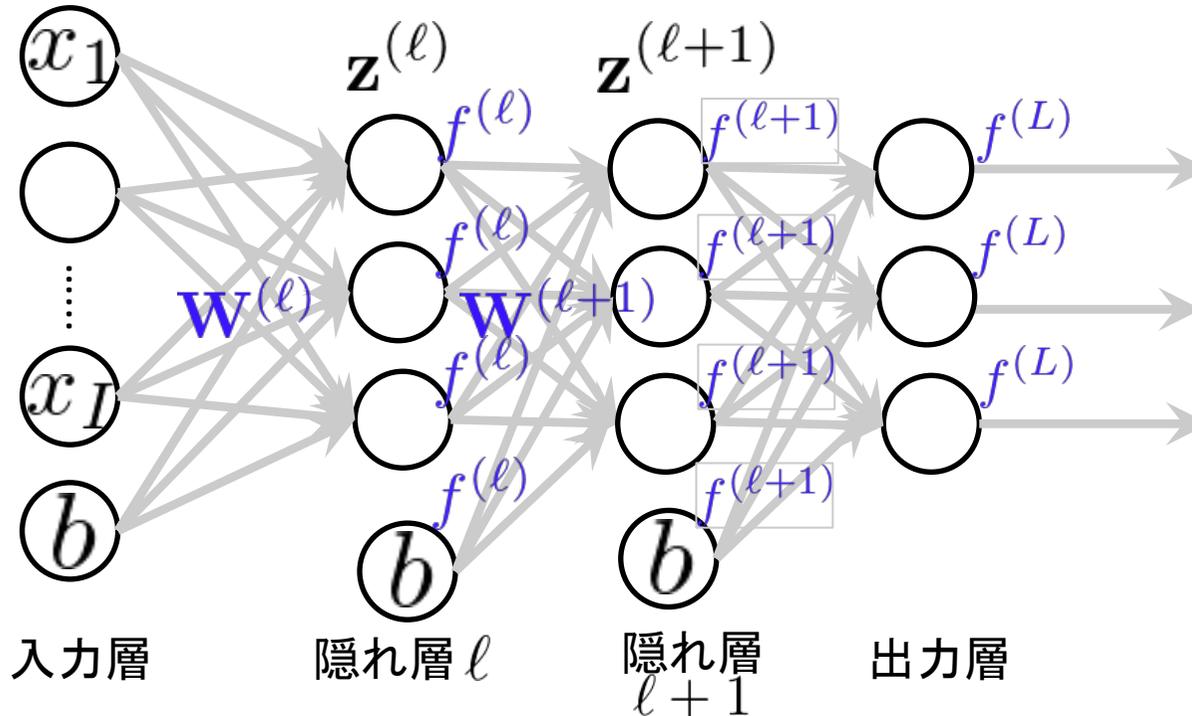
ソフトマックス回帰



- 入力層第*i*ユニット-第二層第*j*ユニット間の重み w_{ji}
- 第二層の計算 $\mathbf{u} = \mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b}$
- 出力 $\mathbf{z} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ $f_k(u) = \frac{e^{u_k}}{\sum_j e^{u_j}}$

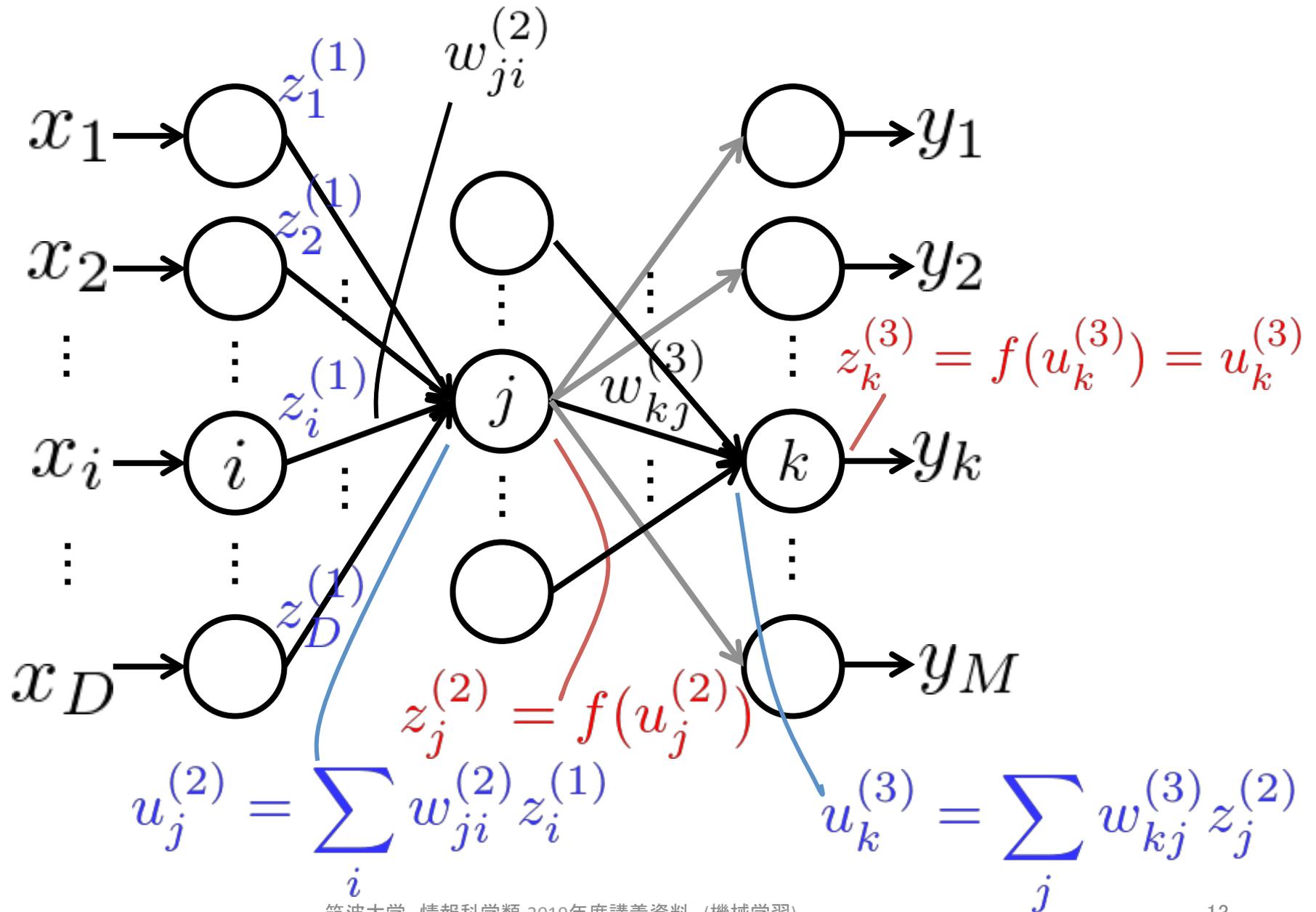


多層ニューラルネットワーク



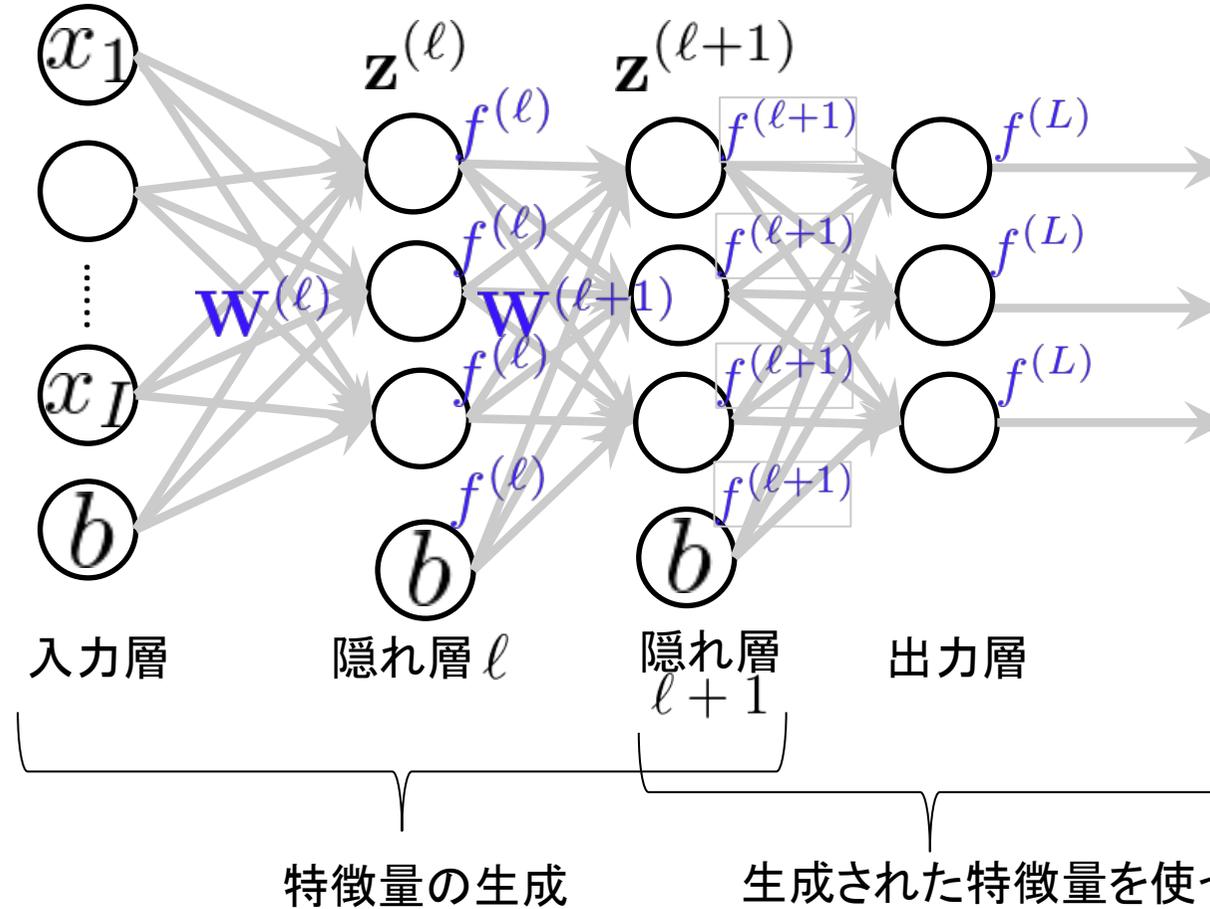
- 入力層($l = 1$), 隠れ層($l = 2 \dots L - 1$), 出力層($l = L$)
- 第 l 層の重み行列 $\mathbf{W}^{(l)}$
- 第 $l - 1$ 層ノード i と第 l 層ノード j 間の重み $w_{ji}^{(l)}$
- 順伝播: 入力層から出力層に向けて、各層に信号を順方向に伝播させ、**非線形活性化関数**を適用し、出力信号を得る

$$\mathbf{z}^{(l+1)} = f(\mathbf{W}^{(l+1)} \mathbf{z}^{(l)} + \mathbf{b}^{l+1})$$





多層ニューラルネットワークの構造



- 第一層から最終層手前までは特徴量生成関数
- 最後の一層だけ切り取ると、回帰やsoftmax回帰(分類)



なぜ多層に？

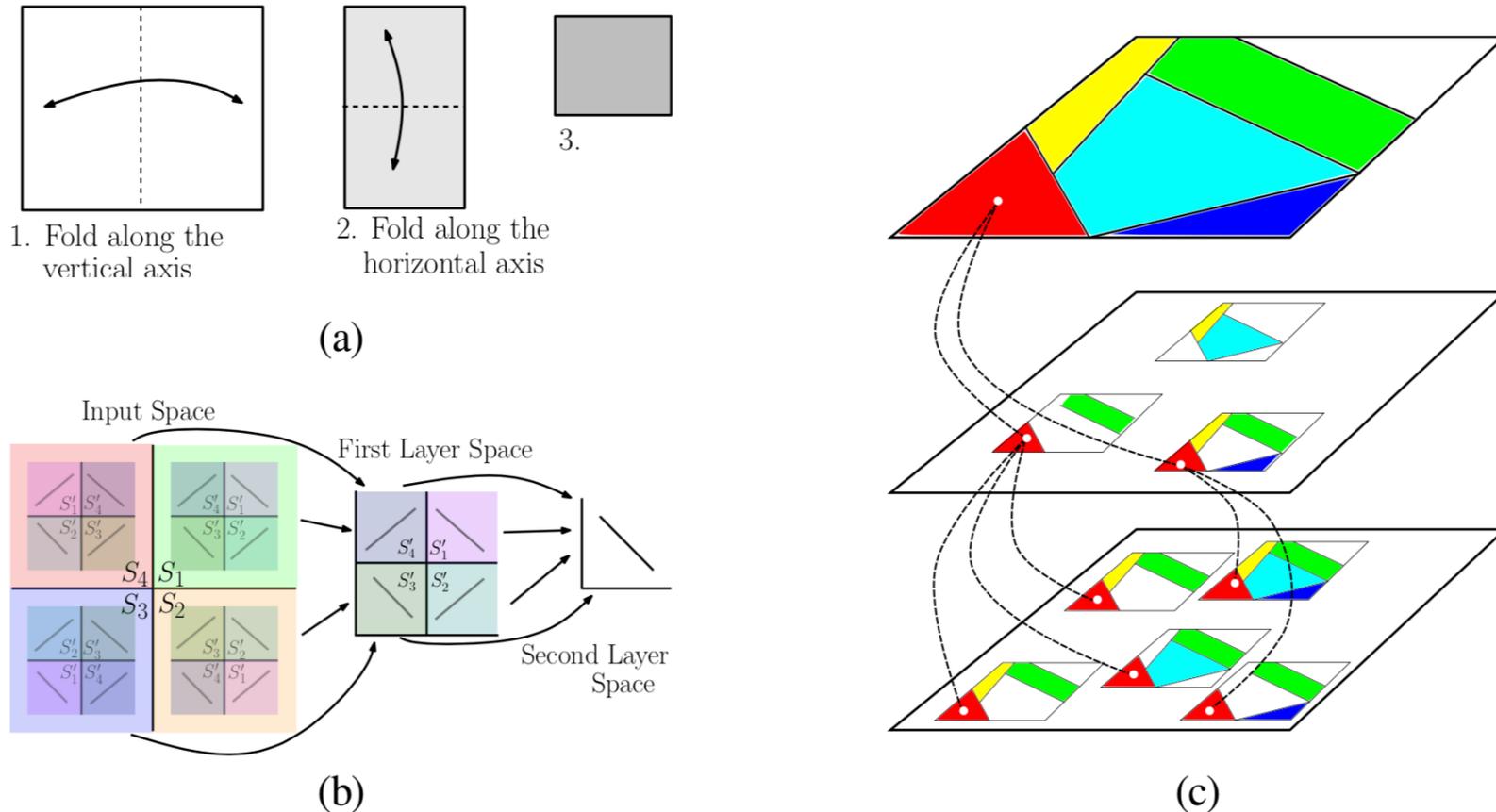


Figure 2: (a) Space folding of 2-D Euclidean space along the two coordinate axes. (b) An illustration of how the top-level partitioning (on the right) is replicated to the original input space (left). (c) Identification of regions across the layers of a deep model.



再掲

交互作用項を持つ多項式特徴量

- 2次元2次多項式特徴量

$$\phi(\mathbf{x})^T = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1 x_2)$$

- 2次元3次多項式特徴量

$$\phi(\mathbf{x})^T = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1 x_2, x_1^3, x_2^3, x_1^2 x_2, x_1 x_2^2)$$

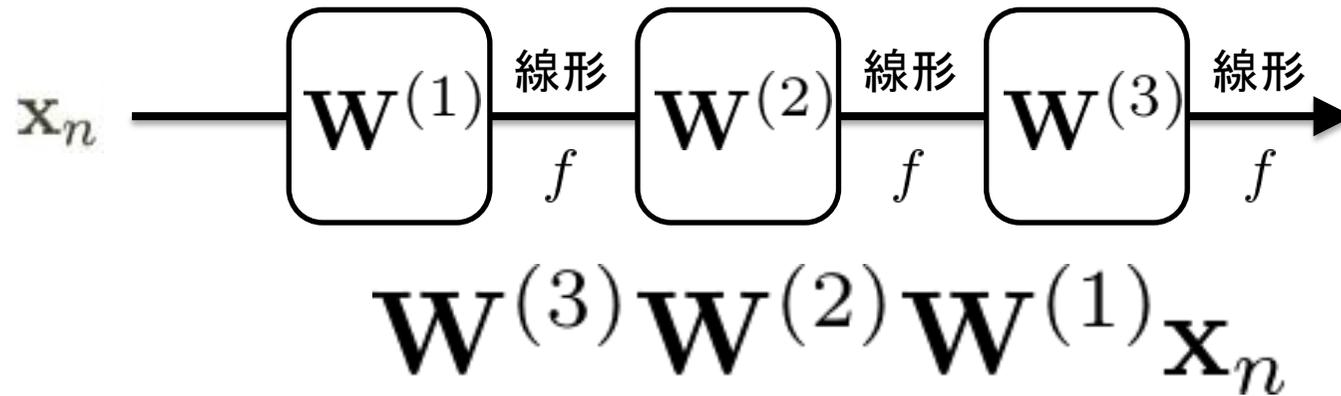
- 3次元2次多項式特徴量

$$\phi(\mathbf{x})^T = (1, x_1, x_2, x_3, x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_1 x_2, x_2 x_3, x_1 x_3)$$

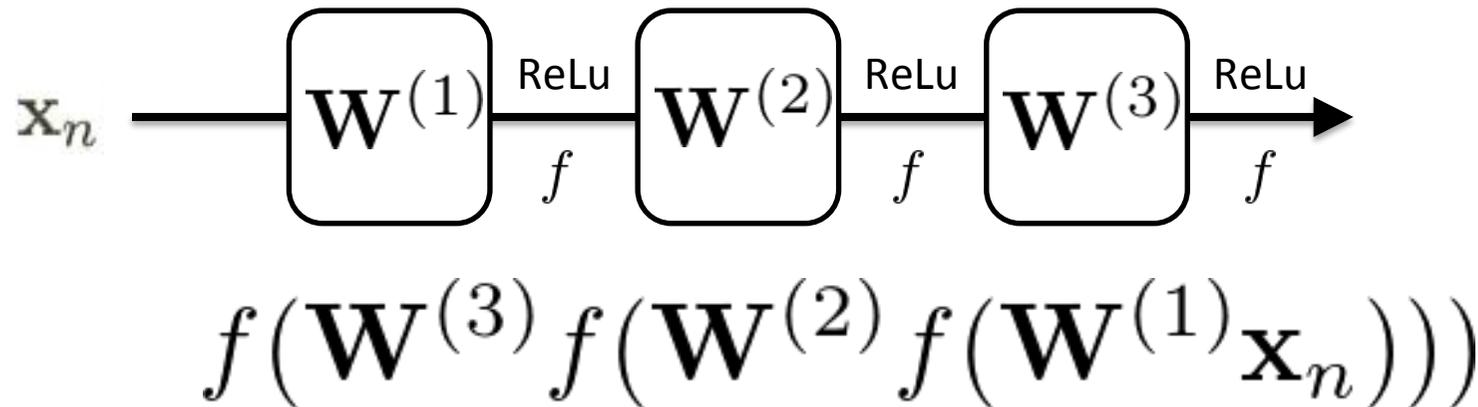
- 特徴量同士の積(交互作用項)が含まれることに注意



なぜ非線形な活性化関数?



結局表現されるのは線形関数

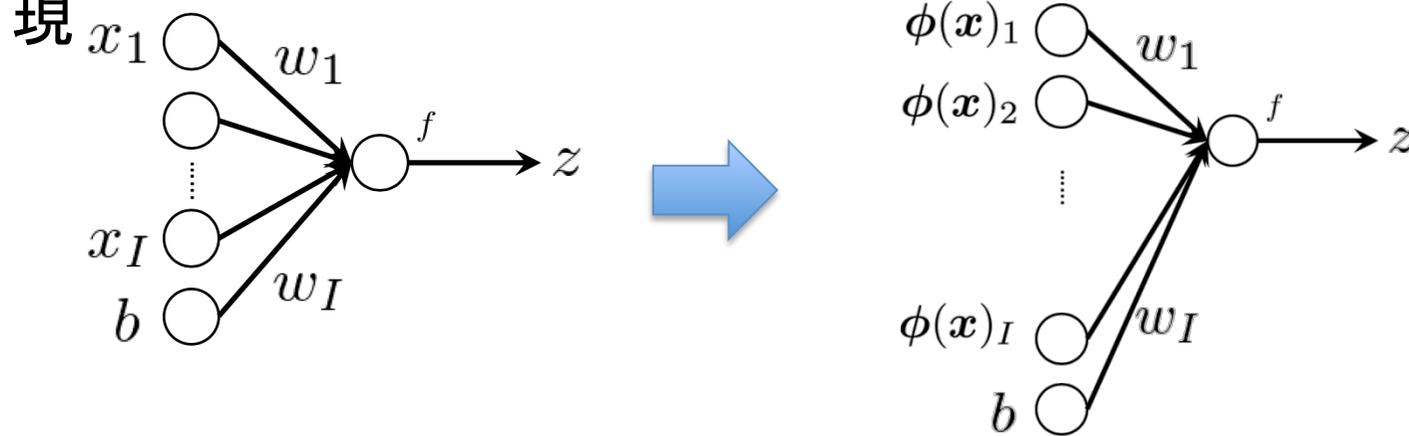


層を増すごとに複雑な関数を表現

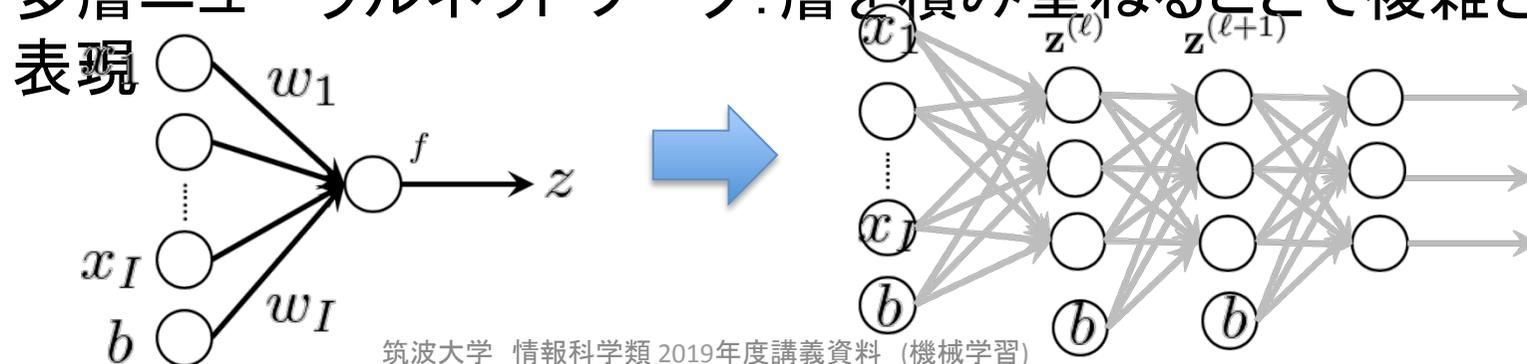


従来の特徴量と多層NNの違い

- 従来の特徴量: 特徴次元数を高次元化することで複雑さを表現

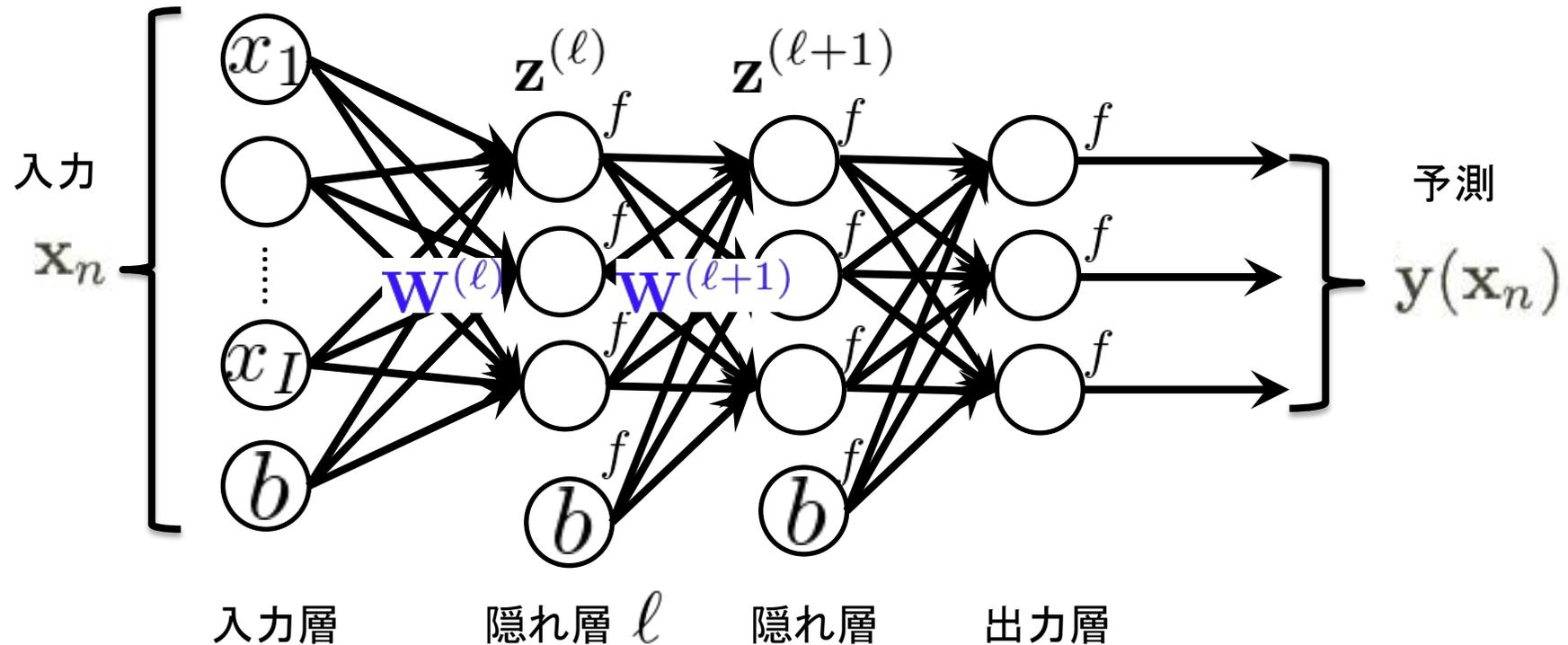


- 多層ニューラルネットワーク: 層を積み重ねることで複雑さを表現





多層ニューラルネットの損失関数



- 訓練データ (x, y) と出力 $y(x)$ について, 損失関数 $\text{loss}(y, y(x))$ を最小化するように、各層の W を学習
- 損失関数 (学習対象)
 - 訓練誤差としての二乗誤差、クロスエントロピー、ヒンジ損失、etc
- 評価関数 (性能評価、必ずしも学習対象と一致しない)
 - 訓練誤差あるいはテスト誤差としての二乗誤差、分類の正解率、など



損失・評価関数セッティング例 (Keras)

損失関数

```
from keras import losses
```

```
→ model.compile(loss=losses.mean_squared_error, optimizer='sgd')
```

mean_squared_error = 平均二乗損失

評価関数

```
from keras import metrics
```

```
model.compile(loss='mean_squared_error',  
              optimizer='sgd',  
              → metrics=[metrics.mae, metrics.categorical_accuracy])
```

mae=mean absolute error (L1誤差)、categorical accuracy (正解率)



ニューラルネットワークの最適化

- 損失関数の(劣)勾配による最適化

$$\mathbf{w}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{w}^{(t)} - \eta \nabla E(\mathbf{w}^{(t)})$$

- 確率的(劣)勾配降下法

$$\nabla E_w = \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \text{loss}(\mathbf{y}_n, \mathbf{y}(\mathbf{x}_n))$$

- ミニバッチ

$$\nabla E_w = \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \sum_{n \in D} \text{loss}(\mathbf{y}_n, \mathbf{y}(\mathbf{x}_n))$$

- (劣)勾配の計算 → 逆誤差伝播法 (あとで)



確率的勾配降下法

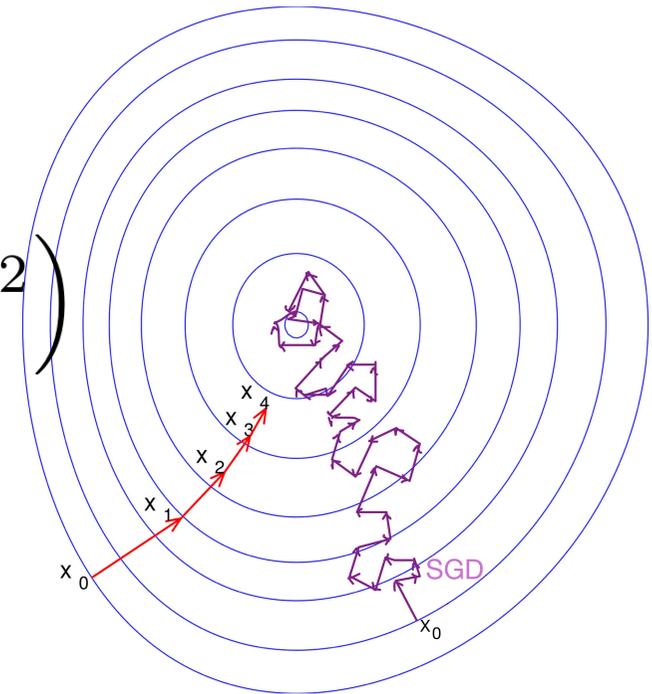
(stochastic gradient method, SGD)

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{(t+1)} &\leftarrow \mathbf{w}^{(t)} - \eta \nabla E(\mathbf{w}^{(t)}) \\ t &\leftarrow t + 1 \text{ until convergence} \end{aligned}$$

- ランダムに選んだ一つの事例の訓練誤差について勾配を計算

$$\nabla E(\mathbf{w}^{(t)}) = \nabla \left((\mathbf{w}^{(t)})^T \mathbf{x}_n - t_n \right)^2$$

- $E(\mathbf{w})$ の勾配という意味では近似的だが、更新あたりの計算量はサンプル数 N について $O(1)$
- 全データに対する勾配との乖離があり、最適化の過程は不安定(訓練誤差は単調減少しない)





再掲

ミニバッチ

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{(t+1)} &\leftarrow \mathbf{w}^{(t)} - \eta \nabla E(\mathbf{w}^{(t)}) \\ t &\leftarrow t + 1 \text{ until convergence} \end{aligned}$$

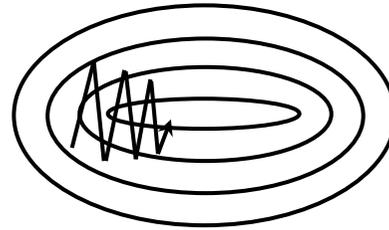
- ミニバッチ D_t
 - 全データから比較的少数のデータをランダムに選んだ集合
- **ランダムに**選んだミニバッチの予測誤差について勾配計算

$$\nabla E(\mathbf{w}^{(t)}) = \nabla \left(\sum_{(\mathbf{x}, t) \in D_t} [(\mathbf{w}^{(t)})^T \mathbf{x} - t]^2 \right)$$

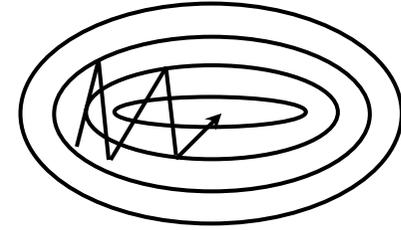
- 更新あたりの計算量はミニバッチサイズに比例
- 勾配はミニバッチについて計算するためSGDほど不安定ではない
- 並列計算器資源の有効活用
 - バッチごとに独立に勾配を計算



モメンタム



Momentumが無いSGD



Momentumが有るSGD

- ridge付近で最適化が停滞しやすい
- モメンタムのアイデア
 - パラメータ更新量に、前回の更新量の成分を少しブレンド

前回と今回のパラメータ差 $\Delta \mathbf{w}^{(t-1)} \leftarrow \mathbf{w}^{(t-1)} - \mathbf{w}^{(t-2)}$

更新式 $\mathbf{w}^{(t+1)} \leftarrow \underbrace{\mathbf{w}^{(t)} - \eta \nabla E_n}_{\text{ここまでは普通の勾配法}} + \mu \Delta \mathbf{w}^{(t-1)}$

– μ はハイパーパラメータ(要調整)



正則化/重み減衰

- 正則化の考え方はこれまでのモデルと同じ
- 損失関数 + 正則化項

$$E_t(\mathbf{w}) \equiv \frac{1}{N_t} \sum_{n \in \mathcal{D}_t} E_n(\mathbf{w}) + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

- 勾配法

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} - \epsilon \left(\frac{1}{N_t} \sum \nabla E_n + \underbrace{\lambda \mathbf{w}^{(t)}} \right)$$

この項が、重みの大きな変化を抑制する効果があることから、**重み減衰** (weight decay)とも呼ばれる



最適化Setting例 (Keras)

```
from keras import optimizers

model = Sequential()
model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform', input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax'))

sgd = optimizers.SGD(lr=0.01, decay=1e-6, momentum=0.9, nesterov=True)
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer=sgd)
```

sgd=確率的勾配降下法(stochastic gradient descent)

Lr: 学習率(learning rate=ステップサイズパラメータ)

decay: 重み減衰 (weight decay=正則化パラメータ)

momentum: モメンタムのパラメータ

nesterov: ネステロフの加速法を使うかどうか (授業では扱いません)

その他の最適化

RMSProp, Adagrad,

Adadelta, Adam,

Adamax, Nadam



AdaGrad: ステップサイズパラメータの調整

- (劣)勾配法 $w_i^{(t+1)} \leftarrow w_i^{(t)} - \eta \nabla E_i^{(t)}$
 - i番目のパラメータの更新に着目
- ステップサイズパラメータの決め方は難しい
 - 大きい η 少ない更新回数で大きく改善するが精度が出ない
 - 小さい η 多数の更新を要するが精度が出る
- 初めは大きくし、徐々に小さくすればよいのでは？
 - 例えば $\eta^t \leftarrow \eta^t / \alpha t$ (Robbins-Monro)
 - α のチューニングは必要なことが多い
- AdaGrad[Duchi+11], NNの最適化によく使われている

$$w_i^{(t+1)} \leftarrow w_i^{(t)} - \frac{\eta}{\sqrt{\sum_{t'=1}^t \nabla E_i^{(t')} + \epsilon}} \nabla E_i^{(t)}$$

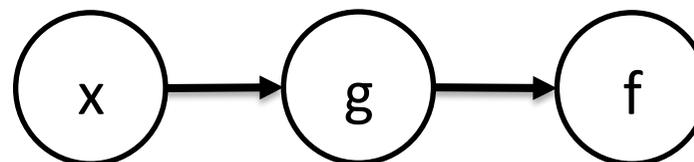
過去の勾配の総和で大きさを調整
これまで更新が少なかったパラメータに
大きな学習率を与える
層ごとに学習の進捗が異なるNNの最適
化に向いている



連鎖率

- 微分法の連鎖律 $\frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df(g(x))}{dg(x)} \frac{dg(x)}{dx}$
- 多変数関数でも連鎖律は成り立つ

$$\frac{\partial f(g(\mathbf{x}))}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial f(g(\mathbf{x}))}{\partial g(\mathbf{x})} \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$$

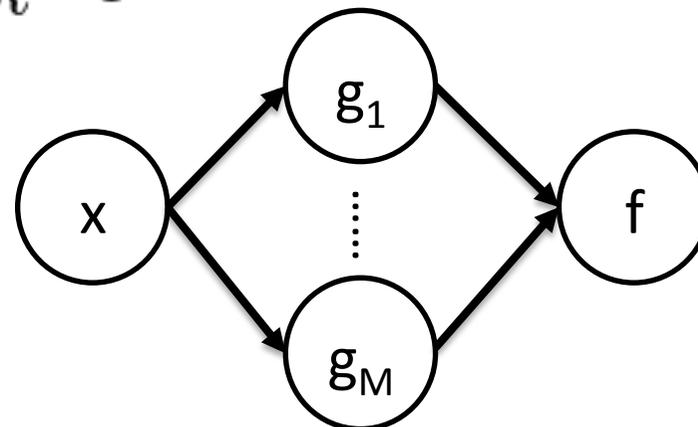


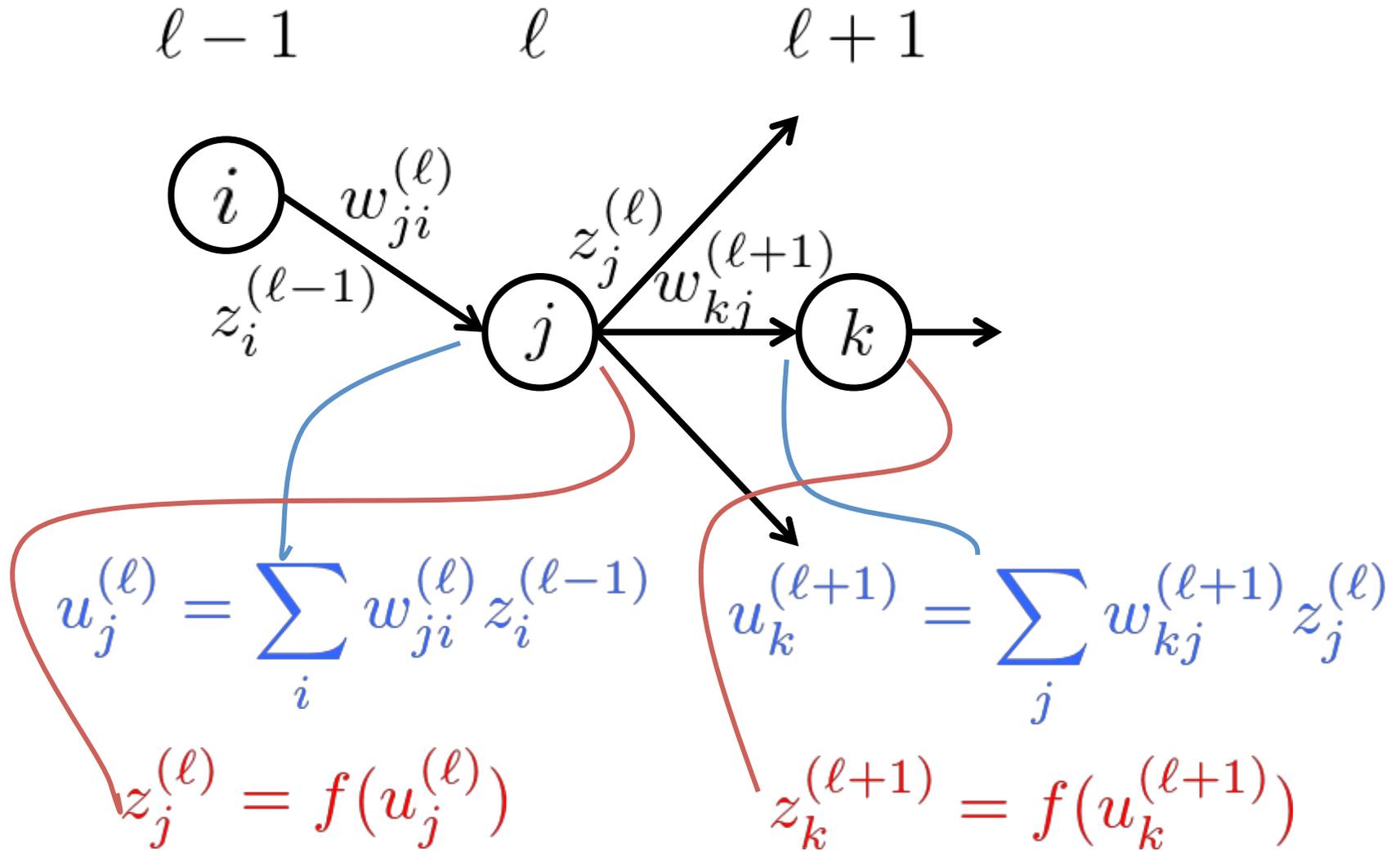


多変数関数の連鎖率

- 多変数関数 $f(\mathbf{g}) = f(g_1, g_2, \dots, g_M)$
- 各 g_k は x の関数 $g_k(x), k \in \{1, \dots, M\}$
- このとき

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \sum_{k=1}^M \frac{\partial f}{\partial g_k} \frac{\partial g_k}{\partial x}$$







逆誤差伝播法

- 入力: 訓練サンプル \mathbf{x}_n および目標ベクトル \mathbf{d}_n
- 出力: $\partial E / \partial w_{ji}^{(\ell)}$
- 1. ネットワークへの入力を $\mathbf{z}^{(1)} = \mathbf{x}_n$ とし、各層のユニット入出力を計算 (順伝播)
- 2. 出力層において、 $\delta_j^{(L)} = z_j - d_j$ を求める
- 3. 中間層において、 $\ell = L - 1, L - 2, \dots, 2$ の順に

$$\delta_j^{(\ell)} = \sum_k \delta_k^{(\ell+1)} \left(w_{kj}^{(\ell+1)} f'(u_j^{(\ell)}) \right) \quad \text{(逆伝播)}$$

$$\frac{\partial E_n}{\partial w_{ji}^{(\ell)}} = \delta_j^{(\ell)} z_i^{(\ell-1)}$$



9.1 3層 NN の逆誤差伝播法の導出

訓練サンプル (\mathbf{x}, \mathbf{d}) に対する二乗誤差は以下の通りである。

$$E(\mathbf{W}) = \|\mathbf{y}(\mathbf{x}) - \mathbf{d}\|_2^2 \quad (12)$$

ここでは、このニューラルネットワークの確率的勾配降下法を行うために必要な勾配 $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(2)}}$ および $\frac{\partial E}{\partial w_{kj}^{(3)}}$ を逆誤差伝播法によって求める。

1. $\frac{\partial E}{\partial w_{kj}^{(3)}}$ を求めよ
2. $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(2)}}$ を求めよ



9.2 一般的な NN の逆誤差伝播法の導出

訓練サンプルに対する二乗誤差は以下の通りである。

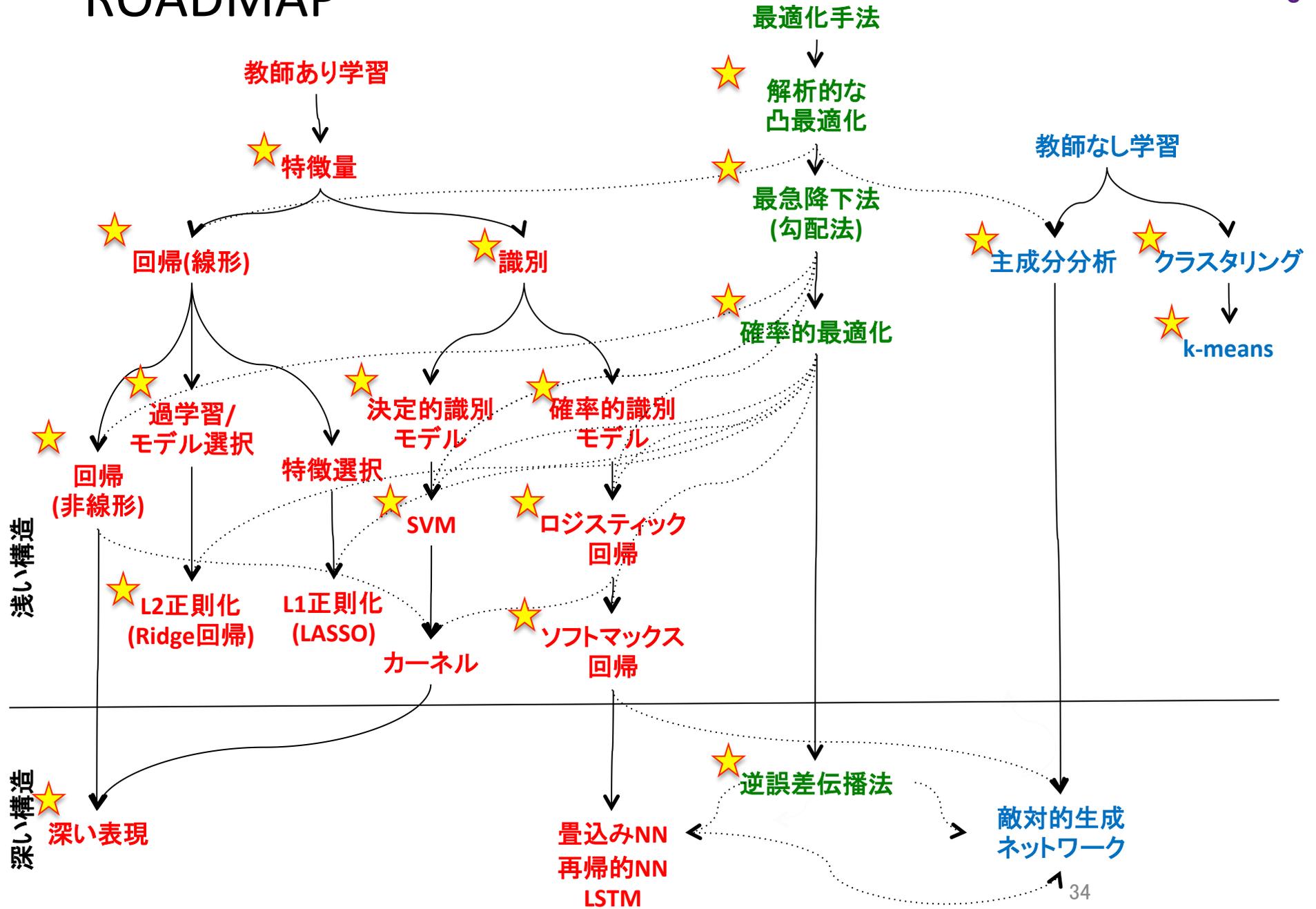
$$E(\mathbf{W}) = \|\mathbf{y}(\mathbf{x}) - \mathbf{d}\|_2^2 \quad (13)$$

ここでは、このニューラルネットワークの確率的勾配降下法を行うために必要な勾配 $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(L)}}$ および $\frac{\partial E}{\partial w_{kj}^{(\ell)}}$ を求める。

1. $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(L)}}$ を求めよ
2. $\frac{\partial E}{\partial u_j^{(\ell)}} \equiv \delta_j^{(\ell)}$ とする。 $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(\ell)}}$ を $\delta_k^{(\ell+1)}$, $k = 1, 2, \dots$, の式で求めよ



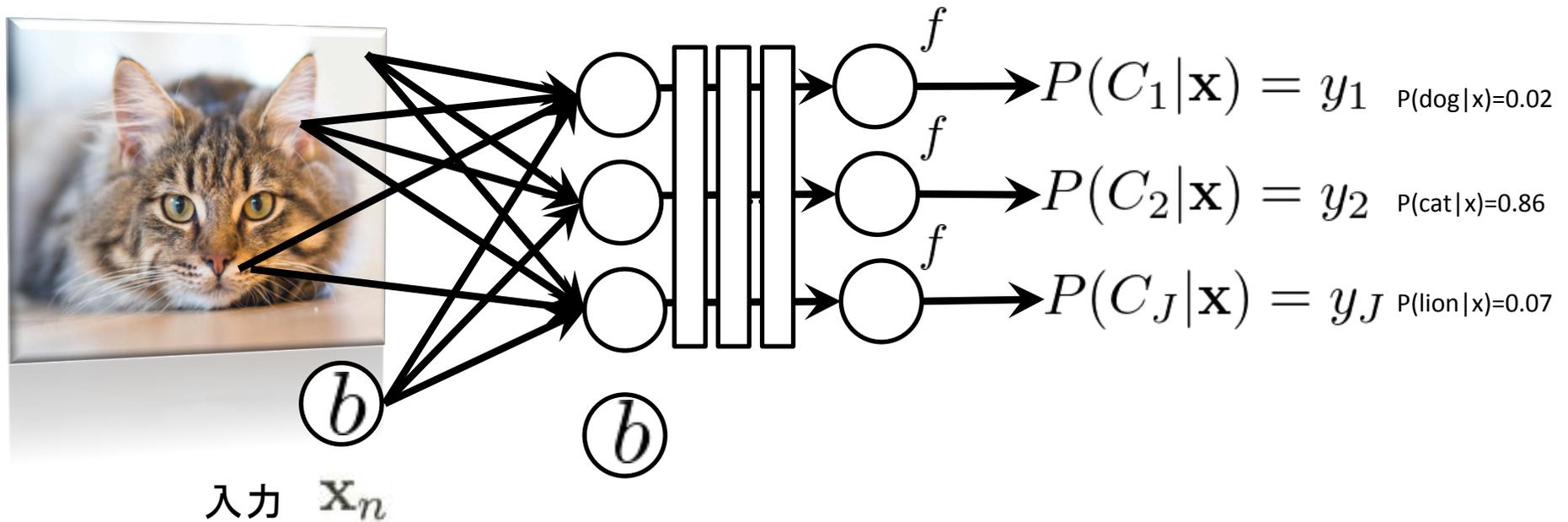
ROADMAP





畳み込みNNによる画像認識

200*200の画像、40Kユニット
→2Bパラメータ



- 実際の画像認識には局所的な理解で足るはず
 - 目があって、耳があって、ヒゲがあって...
- 全結合は不要
- 画像理解に役立つネットワークの構造を考える



一般物体認識

猫



バナナ

オレンジ

犬



⇒ 猫



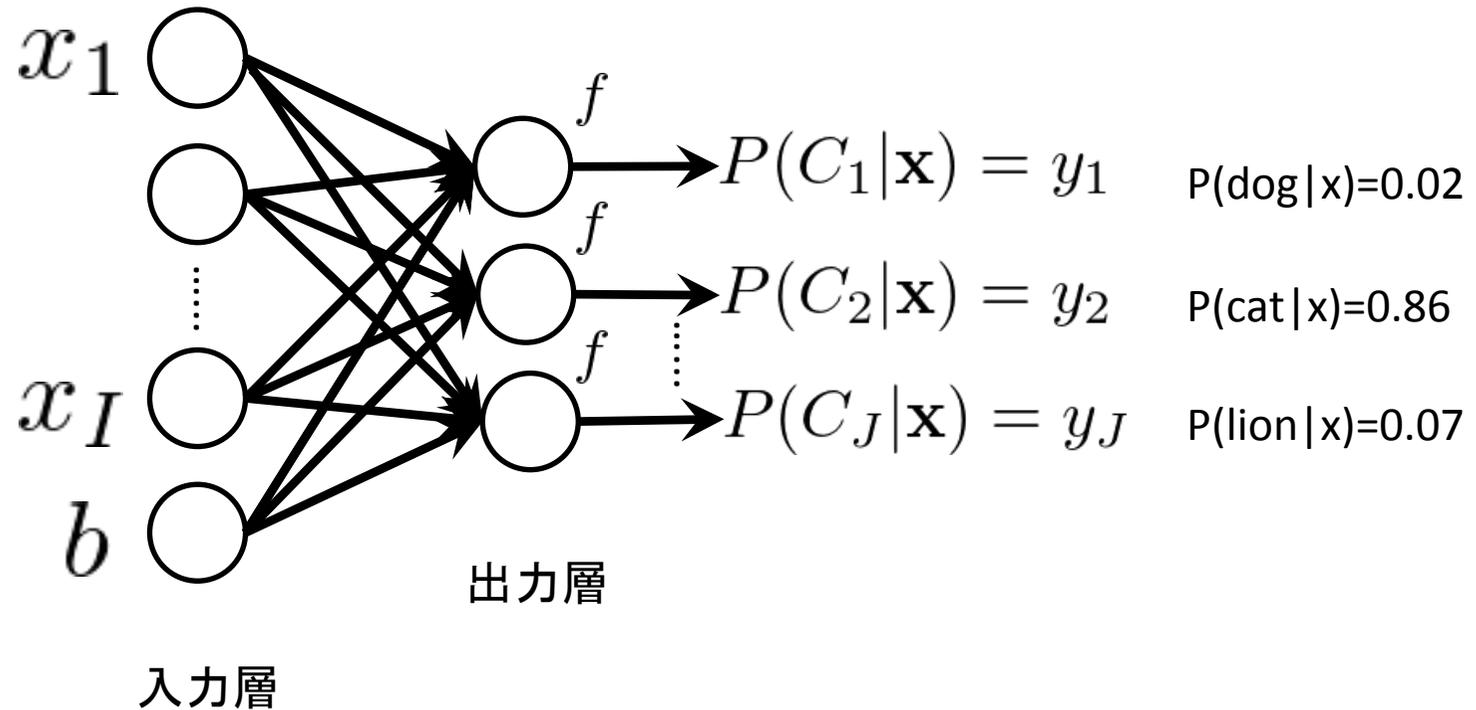
⇒きのこ

- そこに写っているものが何かを当てる
 1. 領域の切り分け
 2. 各領域の物体認識
 3. シーンの理解
- かなり複雑なタスク(水草だけみても何かわからない)
- ここでは2だけ考える→とてもクラス数の多い分類



多クラス分類(softmax回帰)

- Softmax関数 (cf sigmoid関数) = $\frac{\exp(u_k)}{\sum_{j=1}^K \exp(u_j)}$





再掲

softmax回帰

- 訓練データの目標値
 - E.g. 手書き数字 0,1,...,9 の10クラス
 - 1-of-k表記 (1 hot vector) $\mathbf{t}_n = [0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]^T$
- 予測 $\hat{t}_{nk} = \Pr(k|\mathbf{x}_n) = \frac{\exp(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_n)}{\sum_{k=1}^K \exp(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_n)}$

- 訓練データ集合に対する尤度

$$L(\mathbf{w}) = \prod_{n=1}^N \prod_{k=1}^K \Pr(k|\mathbf{x}_n)^{t_{n,k}} = \prod_{n=1}^N \prod_{k=1}^K (\hat{t}_{n,k})^{t_{n,k}}$$

- 誤差関数(負の対数尤度)は交差エントロピー

$$E(\mathbf{w}) = -\ln L(\mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K t_{nk} \ln \hat{t}_{nk}$$



再掲

Softmax回帰と交差エントロピー

- 2クラス分類の場合 ロジスティック回帰 $\hat{t}_n = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)$

$$E(\mathbf{w}) = -\ln L(\mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^N \{t_n \ln \hat{t}_n + (1 - t_n) \ln(1 - \hat{t}_n)\}$$

- Kクラス分類の場合 同様にニュートン法などで最小化する

$$E(\mathbf{w}) = -\ln L(\mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K t_{nk} \ln \hat{t}_{nk}$$

softmax回帰

$$\hat{t}_{nk} = \Pr(k|\mathbf{x}_n) = \frac{\exp(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_n)}{\sum_{k=1}^K \exp(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_n)}$$



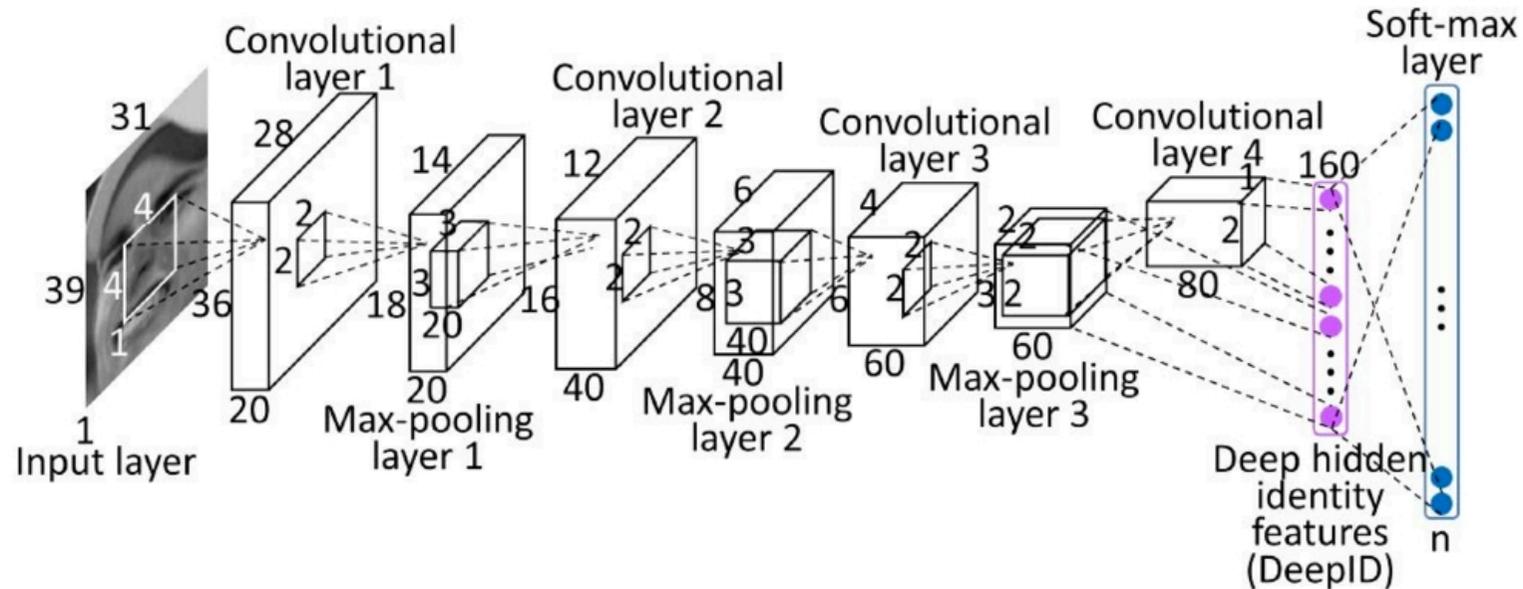
画像

- 画像サイズ $W * H$
- チャンネル
 - モノクロ画像 1チャンネル
 - カラー画像 3チャンネル (RGB)





Convolutional Neural Net



- 畳み込み層(conv)、プーリング層(pool)、全結合層(FC)からなる(後述)
- 用語
 - フィルタ or カーネル: 画像内で検出対象となる局所的なパターン
 - 特徴マップ: 画像内の局所領域の、特定のフィルタに対する活性度



畳み込み層 (conv)

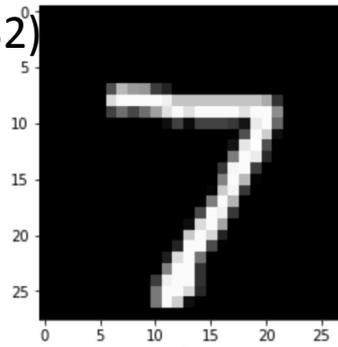


- フィルタが表すパターンが、入力特徴マップのどこにあるかを検出し出力特徴マップに表す
- 畳み込みの計算
 - H: フィルタサイズ
 - s: スライド
$$u_{ij} = \sum_{p=0}^{H-1} \sum_{q=0}^{H-1} x_{si+p, sj+q} h_{pq}$$
- 畳み込み後、特徴マップは縮小する
- フィルタ自身が学習対象

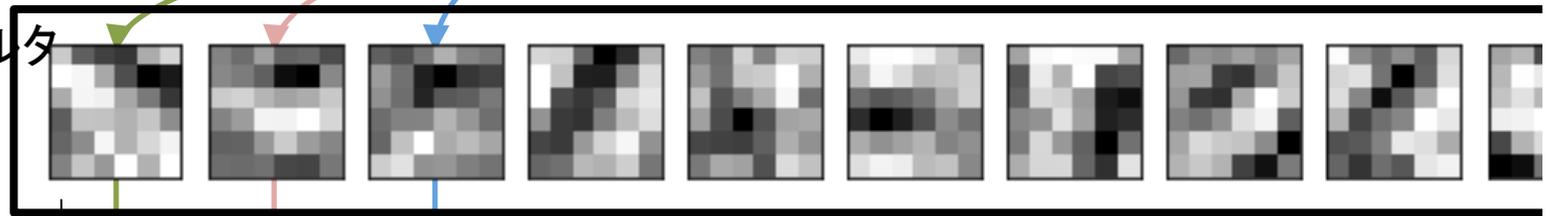


畳み込み層の処理(conv2d_1 (6, 6, 1, 32))

入力画像
28*28



畳み込みフィルタ
Conv filter
6*6



32 filters

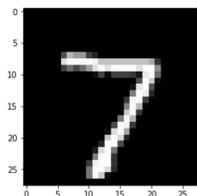
特徴マップ
Feature map
23*23



32 feature maps

畳み込み層の処理(conv2d_2 (6, 6, 32, 64))

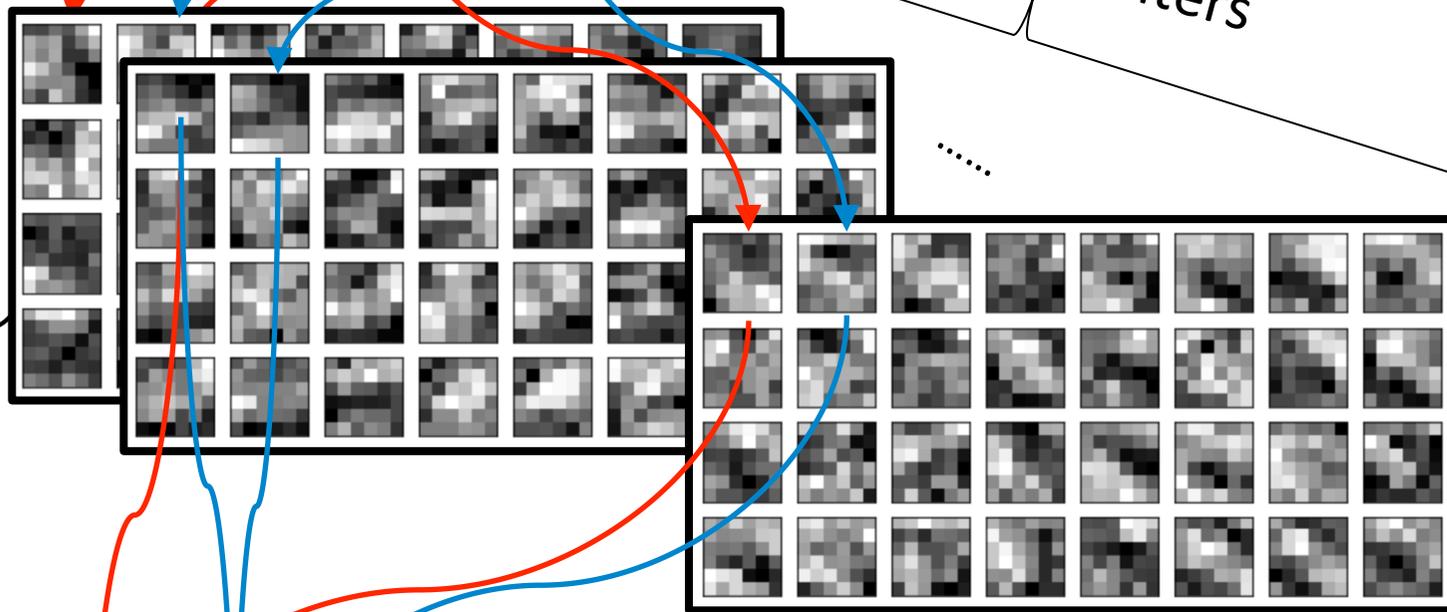
32 feature maps



First layer



特徴マップ
Feature map
23*23*32



64 filters

畳み込みフィル
Conv filter
6*6*32*64

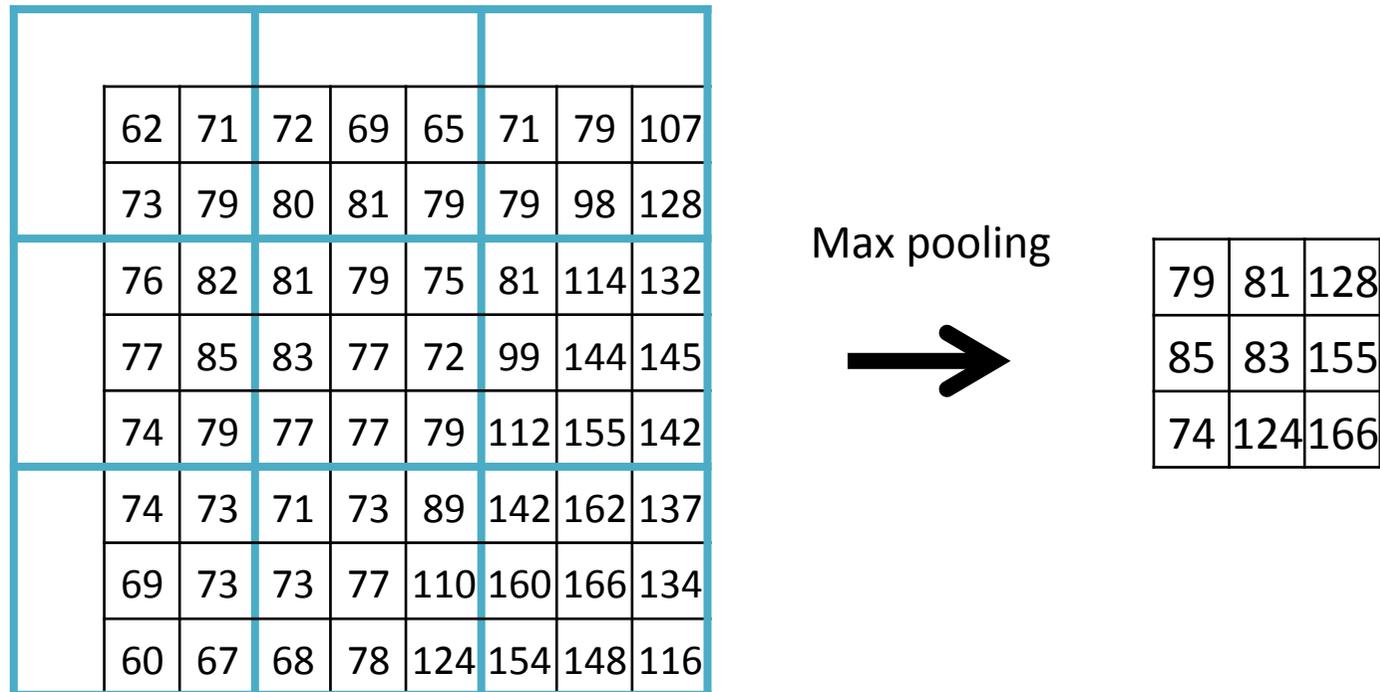
64 feature maps

特徴マップ
Feature map
18*18*64





プーリング層(pool)



- conv層で検出した特徴の位置依存性を低下させ、検出をロバストにする
- 単に対象領域の最大値を取るだけ $u_{ijk} = \max_{(p,q) \in P_{ij}} z_{pqk}$
- バイアスだけが学習対象となる



MaxPooling層の処理

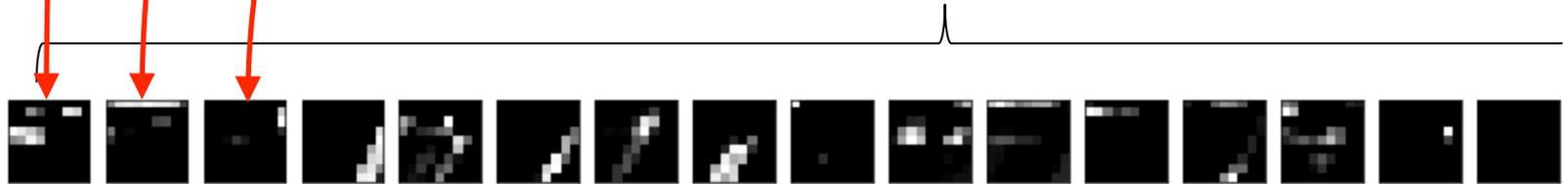
64 feature maps

特徴マップ
Feature map
18*18*64



64 feature maps

特徴マップ
Feature map
9*9*64





conv+pool

- Conv
 - 各フィルタに特徴付けられた特徴を検出
- Pool
 - 位置の微小変化に左右されない普遍性
- Conv+pool
 - 局所的な変異に依存しない安定した特徴抽出

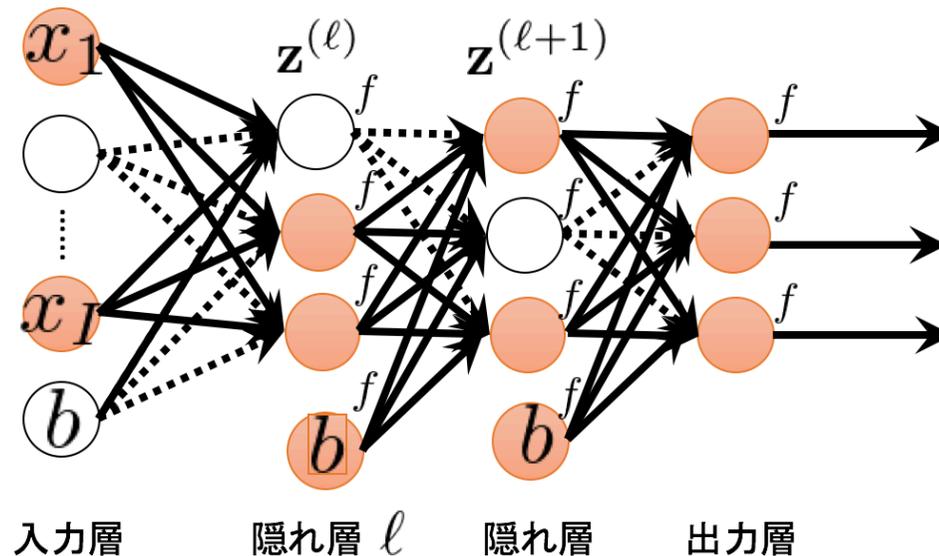




過学習の緩和 Dropout

- 学習時

1. 入力、中間ノードを確率 p でランダムに選択
2. 選択されたノードだけで重みを更新

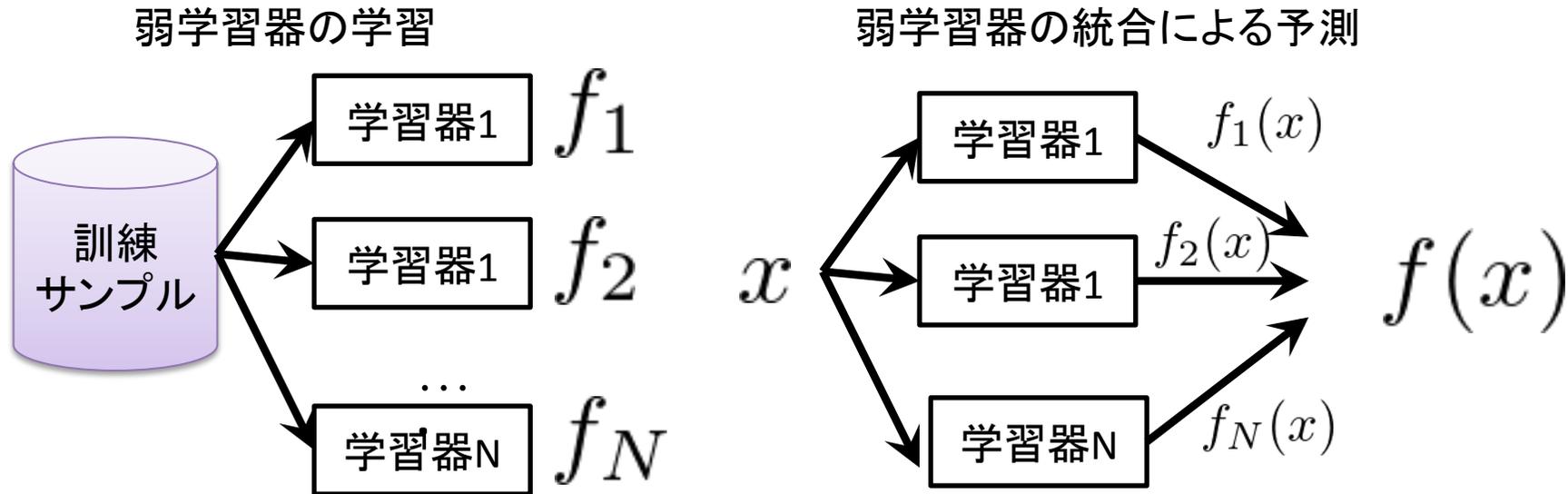


- 予測時

- 各重みを p 倍して順伝播し、dropoutで割り引かれた分を補償する



アンサンブル学習とdropout



- アンサンブル学習(e.g., boosting, bagging)
 - 複数の異なる弱学習器を同一サンプルから学習
 - それぞれの予測結果を統合(強学習器)
 - 予測結果は単一の弱学習器よりも良いことが多い
- Dropout
 - 複数の異なる構造を持つNNを学習
 - 予測値はそれぞれの構造での確率的平均
 - Dropoutでの学習はアンサンブル学習に類似し、過学習を防ぎ、汎化誤差が改善されると言われる



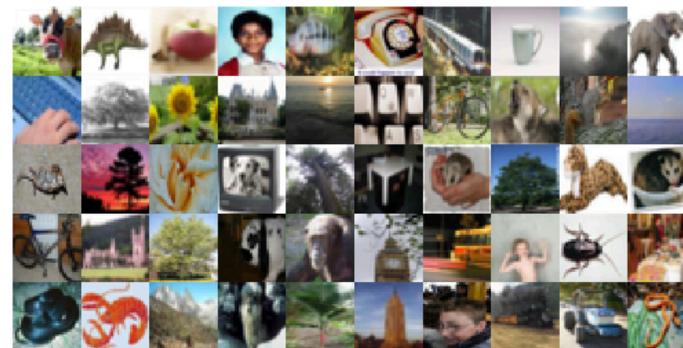
CNNモデルSetting例 (Keras)

```
model = Sequential()
model.add(Conv2D(32, kernel_size=(6, 6), //6*6フィルタ, 32チャンネル
                activation='relu',
                input_shape=input_shape))
model.add(Conv2D(64, (3, 3), activation='relu')) //3*3フィルタ, 64チャンネル
model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2))) //2*2 max pooling
model.add(Dropout(0.25)) //dropout, λ=0.25
model.add(Flatten()) //テンソルからベクトルへ
model.add(Dense(128, activation='relu')) //128次元密結合
model.add(Dropout(0.5)) //dropout, λ=0.5
model.add(Dense(num_classes, activation='softmax'))

model.compile(loss=keras.losses.categorical_crossentropy,
              optimizer=keras.optimizers.Adadelta(),
              metrics=['accuracy'])
model.save_weights(WEIGHTS_FNAME)
model.summary()
```


演習9.4

CIFAR100データセット



- 100クラス画像分類用データセット
 - サイズ32x32, 3チャンネル(RGB)
 - 100クラス、各クラス600画像
 - 20の上位クラス、各上位クラスに5の下位クラス

Superclass

aquatic mammals

fish

flowers

food containers

fruit and vegetables

household electrical devices

household furniture

insects

.....

Classes

beaver, dolphin, otter, seal, whale

aquarium fish, flatfish, ray, shark, trout

orchids, poppies, roses, sunflowers, tulips

bottles, bowls, cans, cups, plates

apples, mushrooms, oranges, pears, sweet peppers

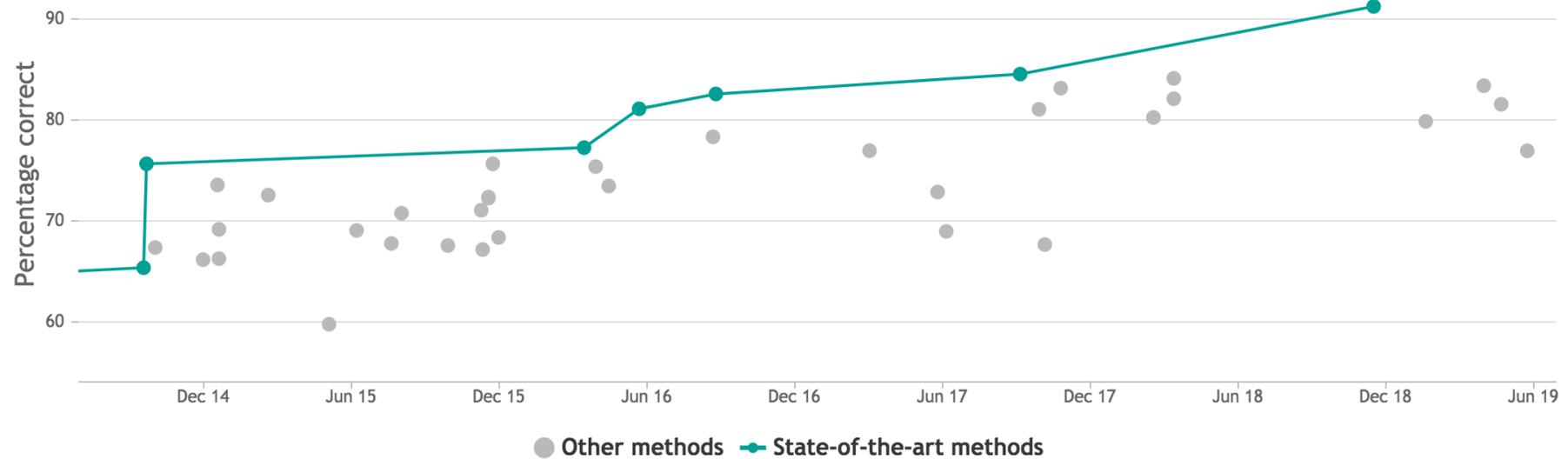
clock, computer keyboard, lamp, telephone, television

bed, chair, couch, table, wardrobe

bee, beetle, butterfly, caterpillar, cockroach



Image Classification on CIFAR-100





まとめ

- 多層NN
 - 情報の線型結合と非線形活性化関数の繰り返しによる特徴生成
 - 生成された特徴量を回帰・分類
- 多層NNの学習
 - 確率的勾配降下法(ミニバッチ)
 - 勾配は逆誤差伝播法で求める
- CNN=画像分類のための多層NN
 - 畳み込み層、max-poolingの繰り返し(特徴生成)
 - Softmax回帰(分類)



ROADMAP

