

マージン最大化学習によるロバストな連想記憶の ソフトマージンについての考察

Consideration of Soft Margin on Robust Associative Memory
Using Maximal Margin Learning

篠田 北斗[†]
Hokuto Shinoda

服部 元信[‡]
Motonobu Hattori

1. はじめに

耐雑音性を高めるために提案されたマージン最大化学習を用いる連想記憶について考察する。連想記憶の構成要素は線形結合を持った形式ニューロンと捉えられる。しかしニューロンの重みをマージン最大化によって求める際、結合の対称性から個々のニューロンを独立したSVM(Support Vector Machine)と捉えることはできない。ここでは、これらの観点からマージン最大化学習を用いる連想記憶を再度定式化し、耐雑音性の向上がニューロンごとに導入したソフトマージンによるところが大きいことを示す。計算機実験では本手法による耐雑音性の向上と記憶容量の関係、また得られたマージンについて考察する。

2. マージン最大化連想記憶

2.1 既存研究

連想記憶はあらかじめ記憶させておいた情報を、その劣化した情報から連想によって復元する相互結合型ネットワークである。最も初期に考案された相関学習は記憶容量が極めて低いことが問題とされていたが、擬似緩和学習法は連想記憶の理論的な最大記憶容量を実現した[1]。また、耐雑音性を考慮した学習モデルとして、秋本らはSVM(Support Vector Machine)の理論を応用した学習を定式化した[2]。すなわち、個々のニューロンに着目したときに、学習パターンを分断する超平面と学習パターンとの距離(マージン)を確保することが耐雑音性の向上につながると仮定した。計算機実験により、マージンを確保した連想記憶は他のモデルより優れた耐雑音性を持つことが明らかとなった。

そこで本研究では、マージン最大化学習の定式化をもう一度見直し、記憶容量と耐雑音性を制御可能な連想記憶を提案する。これは、最適化の際に制約条件を緩めるソフトマージンを導入することで実現される。

2.2 問題定式化

n 個のニューロンから構成される連想記憶に学習させるパターンを $\mathbf{x}^k = (x_1, x_2, \dots, x_n), k = 1, \dots, m$ とし、 i 番目から j 番目のニューロンの結合荷重を w_{ij} と表す。ここで、 i 番目のニューロンの結合総和 f_i は次のようになる。

$$f_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n w_{ij}x_j + b_i \quad (1)$$

b_i は閾値である。さて、任意の i 番目のニューロンを線形識別器と捉えれば、次式で表されるマージン γ_i が定義できる。

$$\gamma_i = \min_{k=1, \dots, m} \frac{|f_i(\mathbf{x}^{(k)})|}{\sqrt{\sum_{j=1}^n w_{ij}^2}} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2)$$

ここで、「広いマージンを持つニューロンによって構成される連想記憶は高い耐雑音性を持つ」という仮定のもと、次の最適化を考える。

$$\text{maximize } \gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_n \quad (3)$$

ここで、次のような制約条件を問題に課す。

$$\min_{k=1, \dots, m} |f_i(\mathbf{x}^{(k)})| = 1 \quad (i = 1, \dots, n) \quad (4)$$

この制約条件は、重みのスケールを固定する役割を担い、簡潔な最適化問題を導く。しかしながら、個々のニューロンは共有する重みを持つため、1つのニューロンの最適化結果は他のニューロンに影響することとなり、単純に、全てのニューロンで同じスケールに固定することは、本質的に正しくない仮定を置いていることになる。そこで、本研究では次式で設計する2次計画問題の制約条件を工夫することで、この問題をある程度緩和する。

$$\begin{aligned} &\text{minimize } \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij}^2 \\ &\text{subject to } x_i^{(k)} f_i(\mathbf{x}^{(k)}) > 1 - \pi_i, \\ &w_{ij} = w_{ji}, w_{ii} = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

制約条件には、超平面への内側に入り込むことを許可する π_i が加えられている。この制約条件緩和のための項は、ニューロンごとに導入されており、式(4)で与えられたスケールの固定を緩和する役割がある。また、これはソフトマージンとしての役割もあるため、小さなマージンを持つニューロンを無視し、広いマージンを持つニューロンの最適化を優先する効果がある。

式(5)で表される最適化問題の主問題のラグランジュ

[†]山梨大学大学院医学工学総合教育部

[‡]山梨大学大学院医学工学総合研究部

関数を次式で示す.

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^n w_{ij}^2 + \frac{C}{2} \sum_i \pi_i^2 - \sum_k^m \sum_i^n \alpha_i^{(k)} \{x_i^{(k)} f_i(x^{(k)}) - 1 + \pi_i\} \quad (6)$$

ここで, $\alpha_i^{(k)} \geq 0, i = 1, \dots, n, k = 1, \dots, m$ はラグランジュの未定乗数である. C はソフトマージンを制御するパラメータとなる. これを, 制約条件 $w_{ij} = w_{ji}, w_{ii} = 0$ のもと双対問題に変換すると次式が得られる.

$$W(\alpha) = \sum_k^m \sum_i^n \alpha_i^{(k)} - \frac{1}{2C} \sum_i^n \sum_{k,l}^m \alpha_i^{(k)} \alpha_i^{(l)} - \frac{1}{4} \sum_{k,l}^m \sum_{i,j}^{\text{上三角}} (\alpha_i^{(k)} + \alpha_j^{(k)}) (\alpha_i^{(l)} + \alpha_j^{(l)}) x_i^{(k)} x_j^{(k)} x_i^{(l)} x_j^{(l)} \quad (7)$$

なお, ここで $\sum_{i,j}^{\text{上三角}}$ とは, 行列の対角成分を除く上三角成分のみで i, j のループを回すことを意味する.

$w_{ij} (i \neq j)$ と, π_i の導出式を次式に示す.

$$w_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m (\alpha_i^{(k)} + \alpha_j^{(k)}) x_i^{(k)} x_j^{(k)} \quad (8)$$

$$\pi_i = \frac{1}{C} \sum_{k=1}^m \alpha_i^{(k)} \quad (9)$$

結果的に, 式(5)での問題設計より, 式(7)の双対問題が文献[2]とはやや異なったものとなっている.

なお, 任意の最適化手法で有限時間内に式(7)の最適化が完了したとしても, ソフトマージンを導入しているために, 全ての学習パターンの完全な想起が保証されないことに注意する必要がある. この場合, 本手法では $\forall \pi_i < 1$ であることを調べれば, 学習パターンが完全に記録されたことを事前に確認できる. しかし, 文献[2]の手法ではこうした判断はできなかった. また, 式(9)から, π_i は i についてのラグランジュ乗数の総和であり, 識別が困難なニューロンほど超平面の内側へ多く入り込むことを示唆する.

3 計算機シミュレーション

まずは, 耐雑音性を調査するためニューロン数 $n = 26$ に設定し, 20個のランダムパターンを記憶させた. 学習パターンの各要素 $\{1, -1\}$ をノイズレベル(確率)によって反転させたものを初期状態として生成し, その後, 実際に正しい想起が行えるかどうか確かめた. これを100試行行い, 正しい想起が行えた割合を想起率とした. 比較手法として, 擬似緩和法[1]を $\lambda = 1.7, \xi = 10.0$ に設定して比較した結果を図1に示す.

結果から, パラメータ C が小さいこと, すなわち超平面へ入り込むことをより許可する方が, 耐雑音性が向上

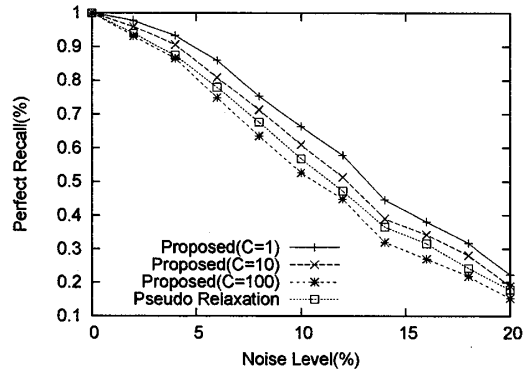


図1: C を変化させたときの耐雑音性の変化

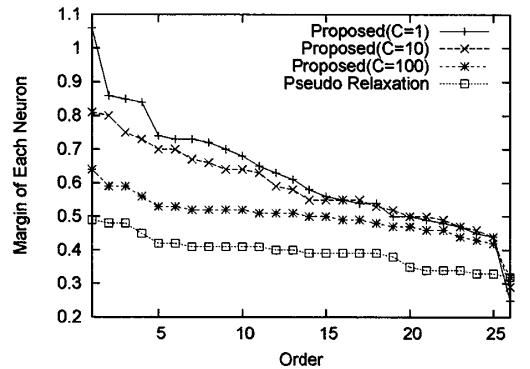


図2: ニューロンごとのマージン

するのがわかる. また, それぞれの手法におけるニューロンごとのマージンを降順に並べたものを図2に示す. 結果より, C を小さくした場合には, 大きなマージンを持つニューロンの最適化が優先され, 全体的により大きなマージンを獲得できている様子がわかる.

なお, このときの平均記憶容量は, 提案法で $C = 1, 10, 100$ のときにそれぞれ 29.9, 31.7, 32.5, 擬似緩和法では 36.8 個となった. また C を十分大きくしたときには, 擬似緩和法とほぼ同程度の 35.7 個を記憶できた. このことから, 記憶容量と耐雑音性はトレードオフの関係にあり, 望ましい記憶容量を実現できる範囲で C を設定する必要があることがわかる.

4. まとめ

本研究では, ニューロンごとにソフトマージンを導入したマージン最大化による連想記憶を提案した. 計算機実験により, パラメータ C を変化させることで耐雑音性と記憶容量を調整できることを示した.

参考文献

[1] H.Oh and S.C.Kothari, "A new learning approach to enhance the storage capacity of the Hopfield model," IJCNN, Singapore, pp.2056-2062, Nov.18-22, 1991.
 [2] 秋本 仁志, 服部 元信, "マージン最大化学習による Hopfield モデル," 信学技報, Vol.106, No.588, NC2006-140, pp.133-138, 2007.