6R-2

Online/batch ハイブリット型準ニュートン法による ニューラルネットワークの学習アルゴリズム

阿倍俊和[†]　坂下義彦[‡]　二宮洋[‡]
湘南工科大学大学院工学研究科電気情報工学専攻[†]
湘南工科大学工学部情報処理工学科[‡]

1. はじめに

ニューラルネットワーク(NN)の学習問題に対する最も有効な解法の１つに準ニュートン法(BFGS)に基づく勾配法を用いた学習アルゴリズムがある．この手法に関する研究の１つに, 学習時のデータの与え方とネットワークの重みの更新に着目したオンライン学習法及びバッチ学習に関する研究がある[1]．これらの手法の特徴としては以下の点が挙げられる．バッチ学習では，すべての，学習データセットをネットワークの入力した後に重みを更新するため, 収束は速いが計算時間が膨大となってしまう問題がある．一方，オンライン学習の収束は遅いが，計算量が少なく局所解を抜け出す能力を有する．しかし，オンライン準ニュートン法(oBFGS)をそのまま応用しただけでは，学習が困難な入出力パターンの学習を考えた場合, 局所最適解から抜け出すことはできなかった. この問題を克服する為, 改良型オンライン準ニュートン法(ioBFGS)が提案された[2]．この手法は，学習データの与え方を改良することで, 学習初期段階ではオンライン学習で局所解の回りを探索し，最終的にバッチ学習に切り替えていく手法である．一方，ioBFGS における学習データの与え方の改良手法を１つのパラメータにより表現することが考えられたパラメータ化オンライン準ニュートン法(poBFGS)が提案された[3]. poBFGS ではオンラインとバッチ学習の勾配をパラメータで関連付けることでオンラインからバッチ学習へとアルゴリズムを変化させていく手法である. 本研究では, 学習データ数を単純に増やしていく ioBFGS とパラメータを調整することで ioBFGS の学習データを改良した手法を実現した poBFGS，それぞれの特徴を結合することでよりロバスト性を持たせたアルゴリズム(hBFGS)を提案する．提案手法では，ioBFGS 及び poBFGS と比較して，オンライン学習からバッチ学習の切り替わりをよりスムーズにする. 最後にベンチマーク問題に対してコンピュータシミュレーションを行い，提案手法の有効性を示す.

2. バッチ学習とオンライン学習

本研究では入出力関係として(1)の関係を持つ階層型ニューラルネットワーク(LNN)を考える．

$$\mathbf{o}_p = f_{\mathrm{NN}}(\mathbf{w}, \mathbf{x}_p) \quad (1)$$

ここで，$\mathbf{x}_p$はp番目の入力ベクトルを，$\mathbf{o}_p$は$\mathbf{x}_p$に対する LNN の出力ベクトルを示す．また，LNN の重みベクトルを$\mathbf{w}$とする．中間層のニューロンの入出力関係はシグモイド関数とする．ここで, $\mathbf{x}_p$に対する教師信号ベクトルを$\mathbf{d}_p$とすると，誤差関数は(2)と定義できる．

Robust Training of the Feedforward Neural Networks using hybrid quasi-Newton Training Algorithm
Shonan Institute of Technology[†‡]
Toshikazu Abe[†] Yoshihiko Sakashita[‡] and Hiroshi Ninomiya[‡]

$$\mathrm{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{\mathrm{P}_{\mathrm{T}_r}} \sum_{p \in \mathrm{T}_r} \mathrm{E}_p(\mathbf{w}) = \frac{1}{\mathrm{P}_{\mathrm{T}_r}} \sum_{p \in \mathrm{T}_r} \frac{1}{2} \left\| \mathbf{d}_p - \mathbf{o}_p \right\|^2 \quad (2)$$

ここで，T_rは学習データセット$\{\mathbf{x}_p, \mathbf{d}_p \text{ and } p \in \mathrm{T}_r\}$を示し，データ数は$\mathrm{P}_{\mathrm{T}_r}$とする．学習は LNN の重み$\mathbf{w}$に関して(2)を勾配法を用いて解くことになる.

本研究では勾配アルゴリズムとして準ニュートン法を用いる．従来，準ニュートン法に基づく学習では(2)の勾配を用いたバッチ学習であった. 特に BFGS 公式に基づく準ニュートン法は現在の無制約非線計画法の中では最も有効な手法の１つである．これに対して，BFGS の苦手とする機械学習のようなパターン数が膨大な問題に対して，オンライン準ニュートン法(oBFGS)が提案された[1]. oBFGS では, 重み$\mathbf{w}$の更新は学習データ毎の更新のみではなく, 全学習データの部分集合毎の誤差関数の勾配を用いて更新する手法に拡張された．oBFGS をより複雑な入出力特性を持つ問題の学習が可能なアルゴリズムへ改良したものに, 改良型オンライン準ニュートン法(ioBFGS)が提案された[2]．ioBFGS の学習初期段階ではオンライン学習(oBFGS)と同様に部分集合毎に重みを更新していき，徐々に部分集合内の学習データ数を増加し続けていくことで，最終的にバッチ学習(BFGS)となる．この単純な操作により, オンラインもしくはバッチ学習のみの勾配学習アルゴリズムと比較して非常に高い収束性が得られた．一方，オンラインからバッチ学習へとアルゴリズムを変化させるメカニズムを数値的に実証したパラメータ化オンライン準ニュートン法(poBFGS)が提案された[3]．poBFGS では，ioBFGS で提案したオンライン学習からバッチ学習へとアルゴリズムを変化させるメカニズムを, パラメータを用いて表現されている.

3. ハイブリット型準ニュートン法

オンラインからバッチ学習に切り替えていく手法として，学習データの数を徐々に増加させていくことで, オンラインからバッチ学習に切り替わる ioBFGS，オンラインとバッチ学習の勾配を 1 つのパラメータμで関連付けることでアルゴリズムを構築した poBFGS などがあり，BFGS 及び oBFGS と比較して良い結果が得られている[2][3]．本研究では ioBFGS 及び poBFGS のオンライン学習からバッチ学習の変化を発展させ, よりスムーズに変化させる新たな手法を提案する．提案手法では ioBFGS で提案されている 1 回の反復に用いる学習データ数を徐々に増加させる手法を poBFGS に適用する．つまり，poBFGS のバッチ学習の勾配を，ioBFGS の勾配に切り替えることでオンライン学習からバッチ学習への変化を実現する手法である. 提案手法ではある一定間隔で学習データを用いて誤差を評価するため，その初期値(seg)に定義する．この関数を学習が変化につれて，狭める

ことで誤差評価の為の学習データ数を増加させ，バッチ学習へ変化させていることを考える．この手続きをc回行った場合の学習データセットT_rは

$$T_r^{\mathrm{hBFGS}<c>} = \left\{\mathrm{T}_{r\_[(seg/c)\times i]} \middle| i = 0,1,\cdots,\left(\mathrm{P}_{T_r}/seg\right)\times \mathrm{c}-1\right\} \quad (3)$$

となる．提案手法の誤差関数は

$$E_\mathrm{h} = (1-\mu)E_\mathrm{m}(\mathbf{w}_k) + \mu E_{p(k)}(\mathbf{w}_k) \quad (4)$$

と定義する．ここで$E_m(\mathbf{w}_k)$は以下のようになる．

$$E_m(\mathbf{w}) = \frac{1}{\left(\mathrm{P}_{T_r}/seg\right)\times \mathrm{c}}\sum_{p\epsilon T_r^{\mathrm{hBFGS(c)}}} \mathrm{E}_p(\mathbf{w}) \quad (5)$$

これにより，(5)の$\mathbf{w}_k$に関する勾配は

$$\frac{\partial E_h(\mathbf{w}_k)}{\partial \mathbf{w}_k} = (1-\mu)\frac{\partial E_\mathrm{m}(\mathbf{w}_k)}{\partial \mathbf{w}_k} + \mu\frac{\partial E_{p(k)}(\mathbf{w}_k)}{\partial \mathbf{w}_k} \quad (6)$$

となる．(6)の勾配学習は，$\mu = 1$の時，オンライン学習となり，$\mu = 0$の時，改良型オンライン学習となる．つまり，μの初期値は1として，μをkの増加に伴って緩やかに0に近づけていくことを考える．これを実現する為に，パラメータμを，SAと同様にj番目のメトロポリスループT^jを用いて次式のように表現する．

$$\mu^j = \exp\left(\frac{\mathrm{E_{best}}(\mathbf{w}) - \mathrm{E_{worst}}(\mathbf{w})}{\mathrm{E_{best}}(\mathbf{w})}\cdot\frac{1}{T^j}\right) \quad (7)$$

ここで，同一のメトロポリスループ内では温度T^jは変化しない．従って，μ^jも変化しないとする．また，$\mathrm{E_{best}}(\mathbf{w})$，及び，$\mathrm{E_{worst}}(\mathbf{w})$は，それぞれ，同一メトロポリスループ内の誤差関数$E(\mathbf{w})$の最小値，及び，最大値とする．以上より，$T^j$が大きいときは$\mu^j$は1となり，アルゴリズムはオンライン学習となる．また，徐々にT^jを下げていくことにより，μ^jは0に近づき改良型オンライン学習となる．hBFGSでは，クーリングスケジュールは，一般的なSAと同様に，クーリングメラメータρを用いて

$$T^j = \rho^j \times T^1 \quad (8)$$

とする．さらに，j番目のメトロポリスループ内のwの更新回数N^jは

$$\mathrm{N}^j = \left(\mathrm{P_{T_r}}/\left(\mathrm{P_{T_r}}-10\right)\right)^{\mathrm{j}} \times \mathrm{P_{T_r}} \quad (9)$$

とする．以上より，提案手法(hBFGS)は学習初期では，全学習データを用いてオンライン学習を実行し，バッチ学習へ移行した時には，全学習データの部分集合を用いて学習を行う．このオンライン($\mu = 1$)からバッチ($\mu = 0$)への変化を何度も繰り返し実行していく内に，バッチ学習で用いる学習データ数を増加させていく手法である．これにより，オンラインからバッチの変化をより滑らかに実行できたことになる．つまり，poBFGSがSAを模した手法であるならば，より滑らかにクーリングスケジュールを実行できているのではないかと考えられる．

4.シミュレーション

本章では3層のLNN(3LNN)を用いてBFGS，ioBFGS及びpoBFGSに対してhBFGSの有効性をシミュレーションにより示す．例題には，関数近似問題のベンチマーク(10)-(12)を用いる[3].

$$\mathrm{y}(x_1,x_2) = 1.9(1.35 + \mathrm{e}^{x_1}\mathrm{e}^{-x_2} \sin(13(x_1-0.6)^2)\sin(7x_2)) \quad (10)$$

$$\mathrm{y}(x_1,x_2) = 1.33356(1.5(1-x_1) + e^{2x_1-1}\sin(3\pi(x_1-0.6)^2)) + e^{3x_2-0.5}\sin(4\pi(x_2-0.9)^2)) \quad (11)$$

$$\mathrm{y}(x) = 1 + (x+2x^2)\sin(-x^2) \quad (12)$$

ここで，(10)，(11)に対しては[4]と同様に$0 \le \mathrm{x_i} \le 1, \forall \mathrm{i}$として学習データを与える．従って，(10)，(11)の学習データ数$\mathrm{P}_{\mathrm{T}_r}$は440となり，中間層のニューロン数(**H**)を16，5とした．(12)に対して[2]と同様に$-4 \le \mathrm{x_i} \le 4, \forall \mathrm{i}$として学習データを与える．従って，学習データ数は$\mathrm{P}_{\mathrm{T}_r} = 400$となり，$\mathbf{H} = 7$とした．アルゴリズムのパラメータは，(10)-(12)に対して，最大反復回数(k_{max})は2×10^5とする．poBFGS及びhBFGSにおけるクーリングパラメータρとhBFGS及びioBFGSの学習データ分割におけるパラメータ$seg(P_{T_{r_s}} = P_{T_r}/seg)$を表1のように設定する．各手法は50回のシミュレーションを実行し，(2)に示す学習誤差の平均値(Ave$\times 10^3$)及び最小値(Best$\times 10^3$)を用いて評価する．シミュレーション結果を表1に示す．表1より，提案手法は，BFGS，ioBFGS及びpoBFGSと比較して最も小さな学習誤差が得られていることが分かる．一方，提案手法ではAveが小さいことから初期値によらず，最適解が得られている手法であることが分かる．これには，オンライン学習からバッチ学習を緩やかに切り替えることで局所最適解から抜け出す能力が高いと考えられる．しかしオンライン学習からバッチ学習に切り替えていくには，$P_{T_{r_s}}$とk_{max}とクーリングパラメータρの値による温度T^jに影響があり，最適な値に設定することでioBFGSやpoBFGSと比較してオンライン学習からバッチ学習へとスムーズに切り替えることができ，局所最適解から抜け出す能力が高い手法であると考えられる．

表1 シミュレーション結果

		Ex(10)		Ex(11)		Ex(12)
	$\mathrm{P}_{\mathrm{T}_{r\_s}}/\rho$	Ave/Best	$\mathrm{P}_{\mathrm{T}_{r\_s}}$	Ave/Best	$\mathrm{P}_{\mathrm{T}_{r\_s}}$	Ave/Best
BFGS	―/―	7.91/5.34		2.89/0.609	―	1.39/0.186
ioBFGS	88/―	0.839/0.50	88	2.83/0.602	80	3.69/0.186
	10/―	0.750/0.515	10	2.22/0.609	10	1.86/0.234
poBFGS	―/0.7	0.846/0.541		1.98/0.609	―	1.04/0.186
hBFGS	88/0.4	0.827/0.551	88	1.82/0.609	80	0.925/0.186
	10/0.4	1.33/0.759	10	3.54/0.424	10	0.574/0.186
	88/0.2	0.957/0.504	88	2.24/0.602	80	0.982/0.186
	10/0.2	0.753/0.501	10	2.11/0.602	10	1.11/0.186

5. まとめ

本研究では，ニューラルネットワークの学習法として，オンライン学習からバッチ学習に切り替わる手法，ハイブリット型準ニュートン法(hBFGS)を提案した．hBFGSでは，学習データの与え方を改良することで，oBFGSの収束性を大幅に向上させたioBFGSとioBFGSのオンラインからバッチ学習に切り替わる手法を1つのパラメータで関連付けたpoBFGS，それぞれの有効性に着目したアルゴリズムを構築した．提案手法の有効性をBFGS，ioBFGS及びpoBFGSとシミュレーションによる比較を用いて示した．今後の課題として，パラメータの設定の決定法に関する研究が挙げられる．

参考文献

[1] Nicol N. Schraudolph，Jin Yu，and Simon Gunter，”A stochastic quasi-Newton method for online convex optimization”， In Proc. 11th Intl.Conf. Artificial Intelligence and Statistics(AIstats), San Juan, Puerto Rico, March 2007.

[2] 二宮 洋，”改良型 online 準ニュートン法によるニューラルネットワークの学習”， 信学技報，vol.109，no.269，NLP2009-115，pp.187-192，2009年11月

[3] H. Ninomiya:"Parameterized Online quasi-Newton Training for High-Nonlinearity Function Approximation using Multilayer Neural Networks",*proc. IEE&INNS/IJCNN'11*,pp.2770-2777,Juhy,2011