

# 線形・2次関数で学習した 畳み込みニューラルネットワークによる3次関数の相関

奥谷文徳<sup>†</sup> 川原圭博<sup>†</sup> 浅見徹<sup>†</sup>  
 東京大学 大学院情報理工学系研究科<sup>†</sup>

## 1 はじめに

データマイニングにおいて相関係数は非常によく使われる指標である。従来使われてきた方式に Pearson の相関係数があるが、Pearson の相関係数は線形な相関を評価する指標であるため、放物線状のような非線形な相関がある変数の組に対して正しい評価が不可能であった。人間が散布図を見ることで相関を判断できる一方、機械による変数間の関係の正しい評価は難しい。

人間にしかできなかった視覚を使うタスクには、文字判別や画像認識がある [1]。これらのタスクでは (Convolutional Neural Network, 以下 CNN) が広く用いられ、高い精度を達成することが知られている。そこで、線形な関係と相関係数で学習した CNN が、非線形な関係に対しても相関係数を出力できるのではないかと考えた。まず線形な関係のヒートマップ (28 × 28 画素) を入力すると相関係数を出力する CNN を構築し、線形な関係と相関係数で学習した。この学習した CNN を用いて 2 次関数の相関係数の自乗誤差の平均は 0.5 近くとなり、有用な指標とはならなかった。我々はこの結果から非線形な相関係数は、線形なデータとその相関係数のみでは学習不可能であると解釈した。そこで、CNN の学習データに線形なデータと非線形なデータを含めることで、より次数の高い非線形なデータの相関係数を計算できるのではと考えた。そして、線形なデータと 2 次関数の関係を入力すると相関係数を出力できるよう学習した CNN を試したところ、3 次関数の相関係数の自乗誤差を 0.03 程度に抑えられた。

## 2 データセット

本稿では 2 変数の間の相関係数を扱う。 $n$  個の  $[0, 1]$  の一様乱数を  $\text{rand}(n)$ 、 $n$  個の標準正規分布に従う乱数

を  $\mathcal{N}(n)$  とし、線形なデータを

$$\begin{aligned} \mathbf{s} &= \text{rand}(1000), & \mathbf{x} &= \mathbf{s} + \mathbf{r}_s \mathcal{N}(1000) \\ \mathbf{r}_s &= \mathcal{N}(1), & \mathbf{y} &= \mathbf{s} + \underbrace{\mathbf{r}_s \mathcal{N}(1000)}_{\mathbf{r}} \end{aligned}$$

2 次・3 次関数の関係を

$$\begin{aligned} (2 \text{ 次}) \quad \begin{cases} \mathbf{x} &= \mathbf{s} + \mathbf{r}_s \mathcal{N}(1000) \\ \mathbf{y} &= \mathbf{s}^2 + \mathcal{N}(1)\mathbf{s} + \underbrace{\mathbf{r}_s \mathcal{N}(1000)}_{\mathbf{r}} \end{cases} \\ (3 \text{ 次}) \quad \begin{cases} \mathbf{x} &= \mathbf{s} + \mathbf{r}_s \mathcal{N}(1000) \\ \mathbf{y} &= \mathbf{s}^3 + \mathcal{N}(1)\mathbf{s}^2 + \mathcal{N}(1)\mathbf{s} + \underbrace{\mathbf{r}_s \mathcal{N}(1000)}_{\mathbf{r}} \end{cases} \end{aligned}$$

とし、値域が  $[0, 1]$  となるように正規化した。 $\mathbf{r}_s$  は誤差の大きさで、その絶対値が大きいほどノイズの影響が大きく相関係数が小さくなる傾向にある。Pearson の積率相関係数は  $-1$  から  $+1$  であるが、学習に用いる相関係数は  $\mathbf{y} = \mathbf{s} + \mathbf{r}$  とした場合の相関係数の絶対値とする。この相関係数は、「関係が線形であった場合のその誤差による相関係数の絶対値」として作成した。この相関係数が 0 から 1 まで 10 等分した各区間で 1000 個のデータを用意し学習が偏らないように混ぜ合わせ、相関係数の偏りを軽減した。更に、線形な関係と 2 次関数で学習する場合などはそのデータ同士でも混ぜ合わせた。そして画像として入力するためにこれを  $28 \times 28$  の格子で区切り、それぞれの区間に含まれるデータの数を画素値とした。例を図 1 に示す。

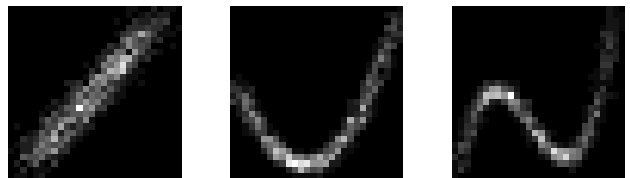


図 1: 相関係数が 0.9 から 1 であるデータの散布図。  
 $y = x, y = 1.34x^2 + 0.43x, y = 1.18x^3 + 0.26x^2 - 0.68x$

Correlation Coefficient of Cubic Function Learnt from Linear/Parabolic Functions using Convolutional Neural Network

<sup>†</sup>Fuminori Okuya, Yoshihiro Kawahara, Tohru Asami

<sup>†</sup>Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo

### 3 CNNの構造

今回のCNNはデータセットの章で説明する手法で生成した $28 \times 28$ の画像を入力とし、相関係数を出力するように学習させる。図2のように

- $28 \times 28$  要素に対し 32 個の  $5 \times 5$  の畳込み層
- $2 \times 2$  の最大値を取り出す max プーリング層
- $14 \times 14 \times 32$  要素に対し、64 個の  $5 \times 5$  の畳込み層
- $2 \times 2$  の最大値を取り出す max プーリング層
- 3136 要素から 1024 要素への全結合層
- 1024 要素から 1 要素への全結合層

を通し、1 要素の浮動小数点数を相関係数として出力する CNN を構成した。活性化関数は ReLU 関数  $=\max(0, x)$  とし定数項も与えた。50 データごとに自乗誤差を減少させる学習を 10000 回行い、10000 個のデータが 50 回ずつ学習に用いられる。この CNN は文字判別タスクの MNIST で高い正答率を達成し、相関係数についても良い結果が得られると考えた。

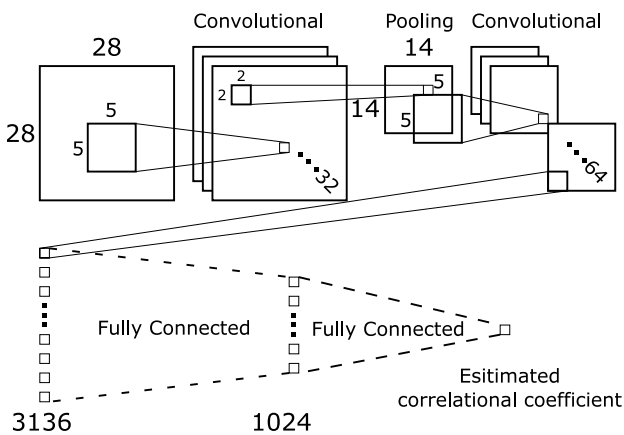


図 2: 関係性評価に用いた CNN の構成

### 4 実験と結果

上記のデータセットについて、 $(1 \rightarrow 1)$  線形なデータで学習し線形な関係の相関係数・ $(1 \rightarrow 2)$  線形なデータで学習し 2 次のデータの相関係数・ $(2 \rightarrow 2)$  2 次のデータで学習し 2 次のデータの相関係数・ $(12 \rightarrow 3)$  線形と 2 次のデータで学習し 3 次のデータの相関係数の実験を行った。また線形と 2 次のデータでの学習の寄与を見るために  $(12 \rightarrow 1)$  線形と 2 次のデータで学習し線形

なデータの相関係数・ $(12 \rightarrow 2)$  線形と 2 次で学習し 2 次のデータの相関係数の実験を行った。3 次のデータの相関係数の学習の寄与の考察のため、 $(1 \rightarrow 3)$  線形なデータで学習し 3 次のデータの相関係数・ $(2 \rightarrow 3)$  2 次のデータで学習し 3 次のデータの相関係数の実験も行った。この実験をそれぞれ 10 回繰り返した結果、平均自乗誤差・変動係数は表 1 となった。

表 1: 学習した後の平均自乗誤差 RMSE と変動係数

学習	1 → 1	1 → 2	2 → 2	12 → 3
RMSE	0.004	0.491	0.022	0.029
変動係数	0.001	0.293	0.001	0.003

学習	12 → 1	12 → 2	1 → 3	2 → 3
RMSE	0.013	0.025	0.770	0.224
変動係数	0.003	0.003	0.613	0.190

この結果の  $1 \rightarrow 1 \cdot 1 \rightarrow 2 \cdot 1 \rightarrow 3$  より、CNN によって線形な関係の相関係数のみで学習した場合には 2 次以上の関係の平均自乗誤差は大きくなり、線形な関係のみの評価は難しいことがわかる。 $12 \rightarrow 1 \cdot 12 \rightarrow 2 \cdot 12 \rightarrow 3$  より線形な関係と 2 次の関係で学習した相関係数は、線形な関係の結果と 2 次の関係の結果と比べ遜色なく、変動係数が小さいことから安定して学習できていることがわかる。更に  $1 \rightarrow 3 \cdot 2 \rightarrow 3$  の結果より 3 次の関係は線形な関係と 2 次の関係のどちらかのみでの学習がほぼ不可能であることもわかる。

### 5 おわりに

本稿では人間の視覚システムを模倣し、CNN を用いることで 2 次・3 次関数の相関係数の計算を実験した。その結果線形な相関データから 2 次以上の相関係数の計算が困難であり、線形な相関と 2 次の関係の片方だけでも 3 次の相関係数の計算が困難であるが、その両方で学習することで 3 次の相関の計算に成功した。

### 6 謝辞

本研究は JST Erato 川原万有情報網プロジェクトの一環として実施された。

### 参考文献

[1] LeCun, Y., Cortes, C., Burges, C. J.: The MNIST database of handwritten digits, (1998).