6F-2

バックプロパゲーションと隠れユニットの二値化

大野宏司，山崎知彦
(株)豊田中央研究所

1. はじめに

バックプロパゲーション(以下，ＢＰ)を応用する際の問題点のひとつは，隠れユニットの活動パターン(以下，中間表現)の解釈が困難なことである．この問題を解決するためには，隠れユニットの出力値を二値化する必要がある(石川1988)．

本稿では，(1)隠れユニットのウェイトとしきい値の働きを確認し，つぎに(2)実際の応用で重要となる，隠れユニットの二値化法を提案する．

2. ウェイトとしきい値の意味付け

ここでは，ネットワークを１入力１出力の三層構造とする．入力ユニットから隠れユニットへのウェイトをw_i，隠れユニットのしきい値をθ_i，隠れユニットから出力ユニットへのウェイトをv_iとする．隠れユニットへの入力I_iは，

$$I_i = \theta_i + w_i * x \qquad \text{--- (1)}$$

となる．ここでxは入力ユニットの値，iは隠れユニットを示す．出力ユニット，隠れユニットの出力関数はシグモイド状関数であり，

$$f(x) = 1/(1 + \exp(-x)) \qquad \text{--- (2)}$$

とする．出力ユニットへの入力は隠れユニットの出力の総和であるから，ネットワークの出力zは，

$$z = f(\Sigma v_i * f(I_i)) \qquad \text{--- (3)}$$

となる．(3)式は，ネットワークの出力が出力関数(シグモイド状関数)の合成から得られることを示している．二つの出力関数から，単峰性関数を合成することができ，この単峰性関数をいくつか組合わせることにより任意の関数を近似することができる(図１)．たとえば，図２の関数の場合，４個の隠れユニットが必要になる．すなわち，近似される関数の変曲点の個数がわかれば，必要な隠れユニットの個数がわかる．ネットワークが表わす写像関数の変曲点は，(1)式より

$$-\theta_i/w_i \qquad \text{--- (4)}$$

である．ネットワークが多入力の場合にも，同様の議論が成り立つ．

たとえば，$y=0.5+0.4*\sin(3*\pi*x)$ $(0 \leq x \leq 1)$を近似した結果を図３に示す．表１に示すように学習後の(4)の値と変曲点とがほぼ一致していることがわかる．以上のことから，ネットワークは，変曲点に対応したカテゴリイ分けをおこなうと解釈できる．

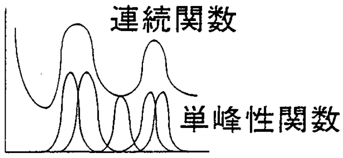

図１．　単峰性関数による近似

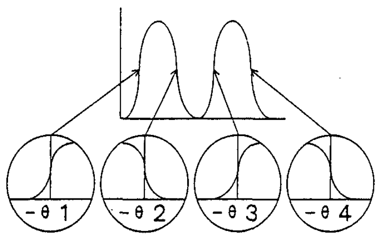

図２．　４個の隠れユニットによる近似

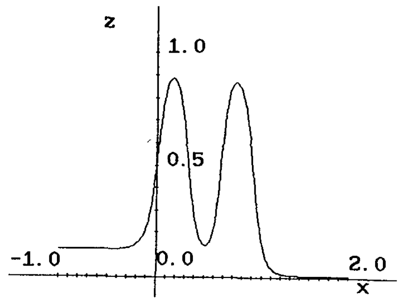

図３．　ネットワークによる近似結果
$\alpha=0.9$，$\eta=0.1$，学習回数35万回

表１．　学習後の(4)式の値

隠れユニット	$-\theta_i/w_i$	変曲点
1	0.68	0.67
2	0.07	0.0
3	1.02	1.0
4	0.28	0.33

Backpropagation with asymptotically two-state hidden units
Hiroshi Ohno and Tomohiko Yamazaki
Toyota Central R&D Labs, Inc.

3．隠れユニットの二値化

実問題への応用を考えた場合には，ウェイトやしきい値の値からネットワークの動作を解釈することの他に，テストデータを与えたときにどのような中間表現があらわれるかを調べることも重要である．しかし，隠れユニットの出力値が連続値であるため，このままでは扱いにくい．そこで，隠れユニットの出力値を二値化し中間表現の解釈を容易にすることを考える．

二値化の方法としてここでは，出力関数 f に焼き鈍し法の温度に対応するパラメータ g を導入する．

$$f(x,g) = 1/(1 + \exp(-g*x)) \quad --- (5)$$

g パラメータの増加により，出力関数が，ステップ関数に漸近する性質を利用して，隠れユニットの出力値を二値化する．隠れユニットのウェイトの更新値 Δw_{ij} は，

$$\Delta w_{ij}(t+1) = \alpha * \Delta w_{ij}(t) + \eta * \delta_i * O_j \quad --- (6)$$

$$\delta_i = g * O_i * (1 - O_i) * \Sigma \delta_k * w_{ki} \quad --- (7)$$

となる．ここで α，η は，モーメント項，学習定数である．t は学習回数，O_i はユニットの出力値，δ_k は後段からの誤差である．シミュレーションでは，出力関数の最小，最大値を0.1，0.9に制限した．g パラメータと出力関数の関係を図４に示す．また出力関数の微分値 f' は，f'<0.09のとき f'=0 とした(大野1987)．

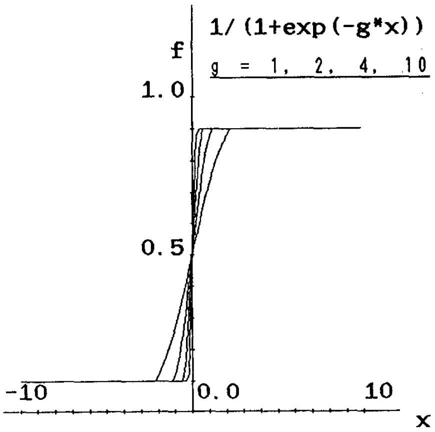

図４．　g パラメータと出力関数

3.1 シミュレーション

例題として２入力ＸＯＲ問題を取り上げた．ネットワークを，２入力１出力，隠れユニット３個の三層構造とした．従来のＢＰ(ユニットの出力値に制限を加えた)によるシミュレーション結果と二値化をおこなった結果を表２に示す．この結果から，隠れユニットが１個余分であることがわかる．ただし初期値によっては，表３に示すような中間表現になり，隠れユニットの最適化ができない場合も生じる．

シミュレーションにおける g パラメータの調整は，ローカルミニマムに落ち込むのを避けるためにはじめは小さくとり，学習とともに大きくする．今回は，g=1で学習をおこない，学習が進んだ段階でg=10に急激に大きくした．このように急激に大きくすると学習が不安定になることがあるため，学習の進み具合いにより g パラメータを調整することが今後の課題である．

4．まとめ

本稿では，(a)隠れユニットが近似される関数の変曲点の情報を獲得していることを示し，(b)出力関数に g パラメータを導入した隠れユニットの二値化法を提案した．

参考文献

(1) 石川　他：構造的ｺﾈｸｼｮﾆｽﾄﾓﾃﾞﾙの試み，日本認知科学会第５回大会(1988)

(2) 大野　他：ﾆｭｰﾗﾙﾈｯﾄﾜｰｸ学習-ﾃｷｽﾄ/音素変換を例として-，情報処理学会第35回全国大会，pp.1851-1852

表２．　隠れユニットの二値化結果(α=0.9，η=0.4)

入力値		隠れユニットの出力値 二値化前 学習回数 2500回			隠れユニットの出力値 二値化後 2000回(g=1)，500回(g=10)		
0	0	0.9	0.23	0.44	0.9	0.1	0.1
0	1	0.1	0.1	0.27	0.1	0.1	0.1
1	0	0.9	0.85	0.1	0.9	0.9	0.1
1	1	0.9	0.11	0.1	0.9	0.1	0.1

表３．　初期値を変えた場合

隠れユニットの出力値		
0.9	0.1	0.1
0.1	0.1	0.1
0.1	0.9	0.1
0.1	0.1	0.9