

3E-6

学習曲面における ローカルミニマムの十分条件

山口 智 板倉 秀清

千葉工業大学

1. はじめに

多層のニューラルネットワーク(以下NNと略)を用いたバックプロパゲーション学習法(以下BPと略)におけるローカルミニマムの問題は、問題に含まれる非線形性のため理論的な考察が難しい。そこで本稿では、有界閉集合上の連続関数のNNによる近似的実現において、中間層から出力層への変換を有界閉集合上の連続関数が作るベクトル空間の要素の有限次元部分空間への射影とみることにより、荷重空間上の一点がローカルミニマムとなるための十分条件を導いた。得られた条件は、Baldiら^[1]が線形ユニットからなるNNについて導いた条件の拡張になっている。そこで、Baldiの結果を利用して以前に提案した学習アルゴリズム^[2]を非線形ユニットを持つNNに適用し、シミュレーションを行ったところ従来のBPよりよい結果が得られた。

2. 3層NNと直交関数系

入力パターンの集合Xをn次元ユークリッド空間内の有界閉集合、fをXから実数空間RへのX上で二乗可積分な連続関数とする。また、入力層ユニット数n個、中間層ユニット数p個、出力層ユニット数1個とし、入力層ユニットおよび出力層ユニットの入出力関数は線形、中間層ユニットの入出力関数を非線形で二乗可積分な関数とする3層NNが与える入出力関数を $N: X \rightarrow R$ で表す。このとき、BP学習の目的は所望の関数fとNの二乗誤差

$$E = \int_X \| f(x) - N(x) \|^2 dx \quad (1)$$

が最小となるN(x)を与える3層NNを作り出すことである。

入力層に $x \in X$ が与えられたときの中間層ユニットのそれぞれの出力値を $\phi_1(x), \dots, \phi_p(x)$ とすると、Nは $\phi_1(x)$ の線形結合

$$N(x) = w_1 \phi_1(x) + \dots + w_p \phi_p(x) \quad (2)$$

として表すことができる。ここで、 $\phi_1(x)$ は二乗可積

分な関数である。

関数 $\phi_1(x)$ を固定して考えると、(2)式による関数f(x)の近似は、 $\phi_1(x), \dots, \phi_p(x)$ を説明変数としてxに関する非線形回帰となり、(1)式の最小値を与えるN(x)は、X上の連続関数からなるベクトル空間の要素f(x)を $\phi_1(x), \dots, \phi_p(x)$ が張るq($\leq p$)次元部分空間への射影したものである。また、 $\phi_1(x), \dots, \phi_p(x)$ がp次元空間の正規直交基底となっていれば、 w_1, \dots, w_p は ϕ_1 を含む直交関数系によるf(x)のフーリエ展開の係数となる。

3層NNとBP学習を中間層と出力層の間の関係に注目して見ると、NNの入出力関数は中間層ユニットから得られるp個の関数が張る部分空間へのf(x)の射影であることがわかる。このとき、入力層と中間層の間では、最も損失が少なくなるような部分空間を張る $\phi_1(x), \dots, \phi_p(x)$ を求めているものと考えられる。

3. ローカルミニマムの十分条件

ここでは、NNの結合荷重が作る荷重空間の一点が(1)式により形成される学習曲面のローカルミニマムであるための十分条件について考える。

[定理]

$\psi_i(x)$ ($i=1, \dots$) を完全直交関数系とし、NNによって近似しようとする関数f(x)が

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \psi_i(x)$$

と表せるとする。このとき、入出力関数N(x)が $\alpha_1 \psi_1(x)$ ($i=1, \dots$) の部分列の和

$$N(x) = \sum_{i=1}^P \alpha_{k_i} \psi_{k_i}(x) \quad (3)$$

となるような3層NNが得られたならば(1)式における評価関数Eのgradientは0となる。このときのEの値は

$$E = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i^2 - \sum_{i=1}^P \alpha_{k_i}^2 \quad (4)$$

となる。(4)式の最小値を与えずに(3)式を満たす

A Sufficient Condition for Local Minima on a Learning Surface

Satoshi YAMAGUCHI, Hidekiyo ITAKURA

Chiba Institute of Technology

ような結合荷重を与える荷重空間上の点はEが作る学習曲面のローカルミニマムを与える。

(証明は略)

中間層ユニットの入出力関数として、よく用いられているsigmoid関数を利用した場合、第2層のユニットで直交関数系を形成することは期待できない。しかしながら、中間層にsigmoid関数を用いた3層NNは任意の連続関数を近似することが知られている^[3]。そこで図1のように、出力層の前に線形ユニットを持つ層をいれた4層NNを考へ、第3層に直交関数系が現れていると考えればよい。

4. シミュレーション

前節の結果は文献[1]におけるBaldiの結果の非線形への拡張である。我々はBaldiの結果を用いて、すべてのユニットが線形の入出力関数である3層NNの場合、学習途中で中間層ユニット数を増やすことにより、学習が早く収束することを示した^[2]。この方法の論理的根拠は、ローカルミニマムの個数が中間層の個数pに依存していることにある。前節のようにNNが非線形ユニットを持つ場合、ローカルミニマムの数はpの値にかかわらず無限に存在するが、f(x)が少ない直交関数系の部分列で十分に近似できると仮定すると、この学習法も有効に働くことが期待できる。このことをシミュレーションによって示す。

通常のBP学習法と、中間層ユニットを学習途中に増やす方法を用いて閉区間[-a, a]上の関数f(x)

$$f(x) = \begin{cases} x+a & (x < 0) \\ -x+a & (x \geq 0) \end{cases}$$

を近似する学習を行い収束の様子を比較した。図2は入力層ユニット1個、中間層ユニット6個、出力層ユニット1個の3層NNを用いた学習であり、図3は入力層ユニット1個、出力層ユニット1個、中間層ユニットの個数を1個から学習途中で徐々に増やして学習を行ったときの学習の収束の様子である。後者はユニットが増えるごとに一時的に誤差が増加するが、その後急激に収束していることがわかる。この結果を見ると、非線形ユニットが入ったNNに対しても、我々の提案した学習が有効であると思われる。

5. おわりに

NNが近似しようとする関数を直交関数系で近似することにより、多層NNの荷重曲面上にできるローカルミ

ニマムの十分条件について考察した。また、BP学習の高速化をはかるアルゴリズムを提案し、簡単なシミュレーションによりその効果を確認した。

参考文献

- [1] Baldi, Horkin: "Neural Networks and Principal Component Analysis: Learning from Examples without Local Minima", Neural Networks, pp.53-58, vol. 2 (1988)
- [2] 山口, 板倉: "ニューラルネットにおけるBP学習と中間層ユニット数の関係" 1990信学秋期全大, D-11 (1990)
- [3] 船橋: "ニューラルネットワークのcapabilityについて", 信学技法, MBE 88-52 (1988)

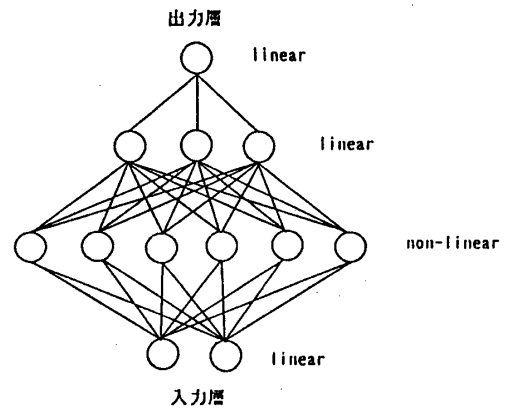


図1

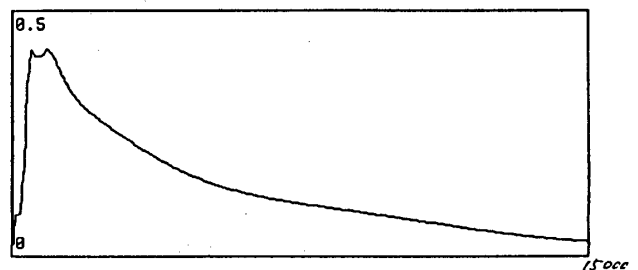


図2

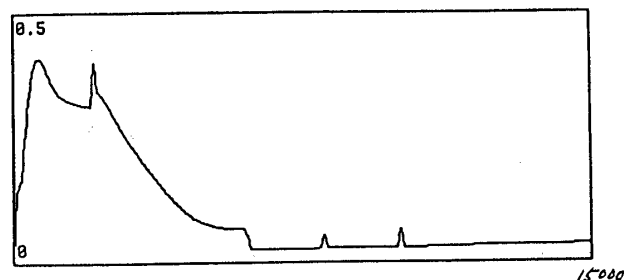


図3