

勾配の応用 -機械学習から-

蒲谷祐一

2017 年度後期 解析学 I 演習第 15 回 (2018 年 2 月 5 日)

機械学習の基本的な問題

入力 $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^k$ に対して、出力 $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_\ell \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^\ell$ をあらかじめ得られているデータから予想する。 (supervised machine learning, 教師あり学習)

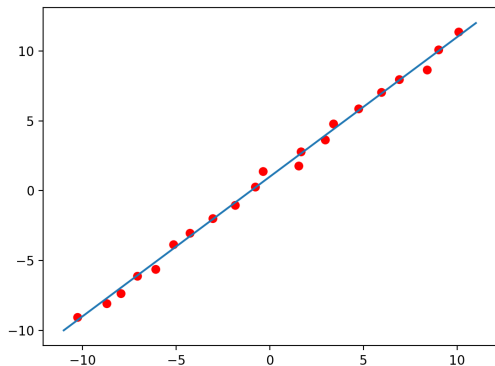
つまり関数 $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$ をあらかじめ得られているデータから予想する。

あらかじめ得られているデータ (入力: \mathbf{x}_i , 出力: \mathbf{y}_i):

$$\mathbf{x}_1 \mapsto \mathbf{y}_1, \quad \mathbf{x}_2 \mapsto \mathbf{y}_2, \quad \dots, \quad \mathbf{x}_N \mapsto \mathbf{y}_N$$

「予想した関数 f の出力 $f(\mathbf{x}_i)$ 」と「あらかじめ得られている出力 \mathbf{y}_i 」
ができるだけ近くなる、関数 f を見つけたい。

簡単な例 (簡単すぎる例)



$$(x_1, y_1) = (-11.0, -10.0)$$

$$(x_2, y_2) = (-9.9, -8.9)$$

$$(x_3, y_3) = (-8.8, -7.8)$$

⋮

$$(x_{20}, y_{20}) = (9.9, 10.9)$$

$$(x_{21}, y_{21}) = (11.0, 12.0)$$

これらのデータを一次関数

$$y = ax + b$$

で表したい。(定数 a, b を決定すれば良い.)

* この場合は「最小二乗法」という、(ある意味で) 最良の方法がある。

分類問題 (Classification)

重量, 色 (RGB), 直径, etc. から, 果物の種類を予想する:
いちご, りんご, バナナ, レモン

簡単のため果物の種類は固定しておき, 番号付けしておく:

c_1 : いちご, c_2 : りんご, c_3 : バナナ, c_4 : レモン

重量などのパラメータも文字で表すことにする:

x_1 = 重量, x_2 = 赤色 (の強さ), x_3 = 緑色, x_4 = 青色, x_5 = 直径

関数 $f: \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}^4$ で $f \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_4 \end{pmatrix}$ とするとき, y_i がもっとも大きく

なる i が, 対応する果物 c_i になるような関数 f を見つければ良い.

(y_1 は「いちご度」, y_2 は「りんご度」, etc. と考えられる.)

分類問題 (Classification)

関数 $f: \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}^4$ で $f \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_4 \end{pmatrix}$ とするとき、 y_i がもっとも大きくなる i が、対応する果物 c_i になるような関数 f を見つければ良い。
(y_1 は「いちご度」、 y_2 は「りんご度」、etc. と考えられる.)

ここで y_1, \dots, y_4 が

$$0 \leq y_i \leq 1 \quad \text{かつ} \quad y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$$

となるように整えて置けば y_1 を「いちごである確率」のように解釈できるので便利。次の関数を f と合成すれば良い。

Softmax 関数

$$\sigma(y_1, \dots, y_\ell) = \left(\frac{e^{y_1}}{\sum_{i=1}^{\ell} e^{y_i}}, \dots, \frac{e^{y_\ell}}{\sum_{i=1}^{\ell} e^{y_i}} \right), \quad \sigma: \mathbb{R}^\ell \rightarrow (0, 1)^\ell$$

分類問題の具体例 (MNIST data set)

関数 $f: \mathbb{R}^{784} \rightarrow \mathbb{R}^{10}$ を構成したい。

例えば線形関数

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) = W\mathbf{x} + b$$

($W: 10 \times 784$ 行列 (weight), $b: 10$ 次元ベクトル (bias))

を用いる。 $W = (w_{ij})$ と $b = (b_i)$ の値を調整して、

$$\sigma(f(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{y}_i$$

のずれを小さくしたい。「ずれ」の大きさを測るために例えば、ベクトルの差の長さの2乗の和、

$$L(W, b) = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{k=1}^{10} (\sigma(f(\mathbf{x}_i)))_k - (\mathbf{y}_i)_k)^2 \right)$$

を考える。 L は損失 (loss) 関数と呼ばれる。

* 実際には cross entropy 関数というものを使った方が都合が良い。

分類問題の具体例 (MNIST data set)

W (10×784 行列) と b (10 次元ベクトル) を動かして、「ずれ」の大きさ

$$L(W, b) = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{k=1}^{10} (\sigma(f(\mathbf{x}_i)))_k - (\mathbf{y}_i)_k)^2 \right)$$

を最小にしたい。これは $10 \times 784 + 10 = 7850$ 変数関数の極値問題。

極値を求めるために、関数 L がもっとも減る方向、つまり勾配の逆向き $-\text{grad } L$ の方向に W と b を動かしていく。

他にも色々なテクニックを使うが、これだけで約 90% の数字の認識率が得られる。

さらに良い結果を得るためには、線形関数と非線形関数を何重にも合成して f を作る (deep learning, 深層学習)。

まとめ

機械学習とは、損失関数 L が小さくなるように、関数のパラメータ (ここでは W と b) を決定すること。そのために勾配 $-\text{grad } L$ を用いる。