

ニューラルネット PDP¹

Parallel Distributed Processing

神経細胞の働きを図 1 のようにモデル化したものを考え、ニューロンあるいはユニットと呼びます。

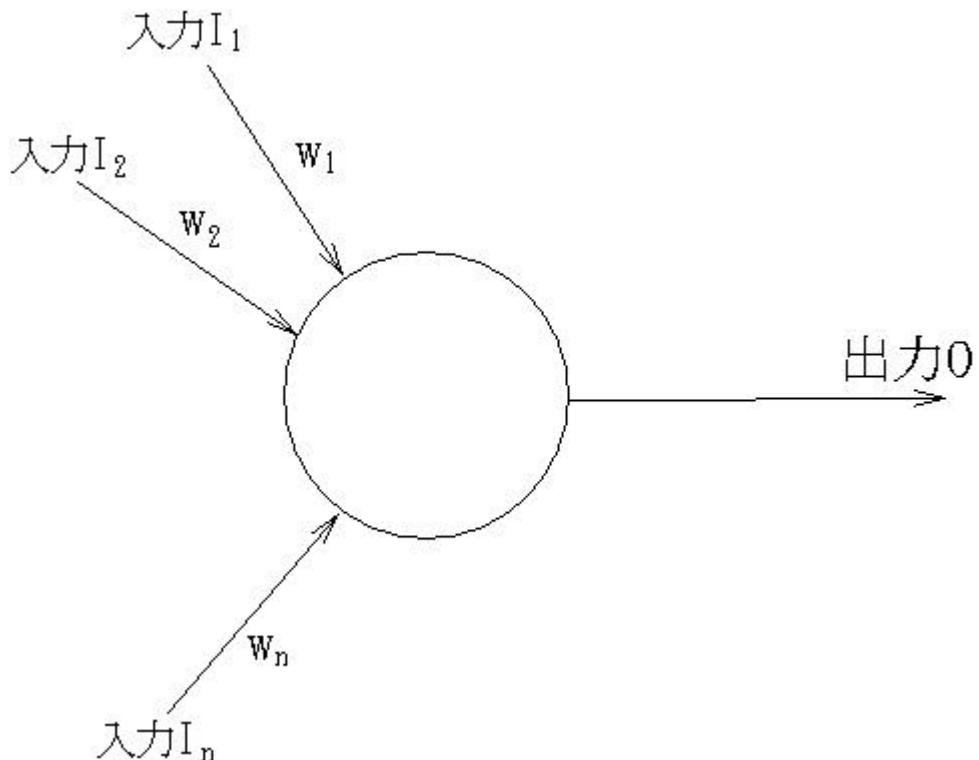


図 1 ニューロン（ユニット）のモデル

ここでのニューロンあるいはユニットという言葉は、生体内の神経細胞そのものではなく、図 1 で表わされるモデルに対して用います。このニューロンあるいはユニットは、単一の神経細胞のモデルである必要はなく、機能的に 1 つにまとめて扱うことができるものを表わしていると考えます。

ニューロンは、いくつかの入力を受けて、それらの重み付き和の値に応じて出力が決まります。

入力、および出力は、0 以上 1 以下の値であるとします。0 に近いほどニューロンの活動レベルは低く、1 に近いほど活動レベルは高いことを表わします。

1 つのニューロン j への入力が b 個あるとき、それらを I_1, \dots, I_b で表わし、それらに対

¹ この解説は、岡本安晴「Delphi でエンジョイプログラミング：心と行動の科学がわかる心理学シミュレーション」C Q 出版社、1999（絶版）の原稿をもとに作成しました。

する重みを w_1, \dots, w_b で表わすと、ニューロン j への入力の重み付き和 net_j は次式で与えられます。

$$net_j = \sum_{i=1}^b w_i I_i$$

入力の重み付き和 net_j に対するニューロン j の出力を与える関数 $f_j(net_j)$ を次のようにおきます。

$$f_j(net_j) = \frac{1}{1 + e^{-(net_j + q_j)}}$$

q_j はニューロン j の閾値に対応するものです。

関数

$$y = f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

は、図 2 のような形のものです。

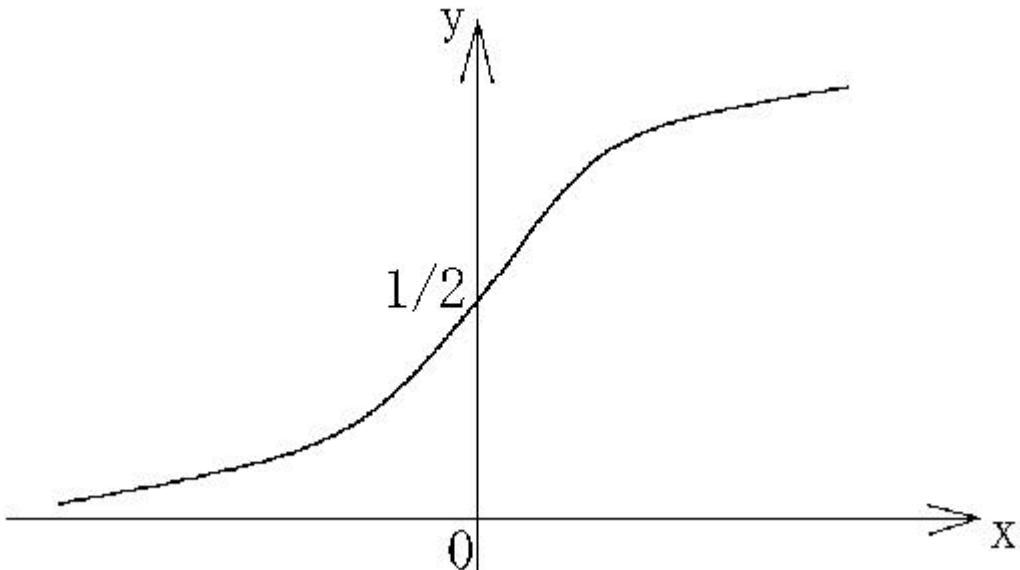


図 2 関数 $y = f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$

Rumelhart ら (1986) のニューラルネット PDP (Parallel Distributed Processing) モデルでは、刺激の入力のためのニューロンの集まり（入力層）と、それらに対する反応を表わすニューロンの集まり（出力層）の 2 つの層の間に、1 つ以上のニューロンの集まり（中間層）を置きます。図 3 は、中間層が 1 層の場合のモデルです。

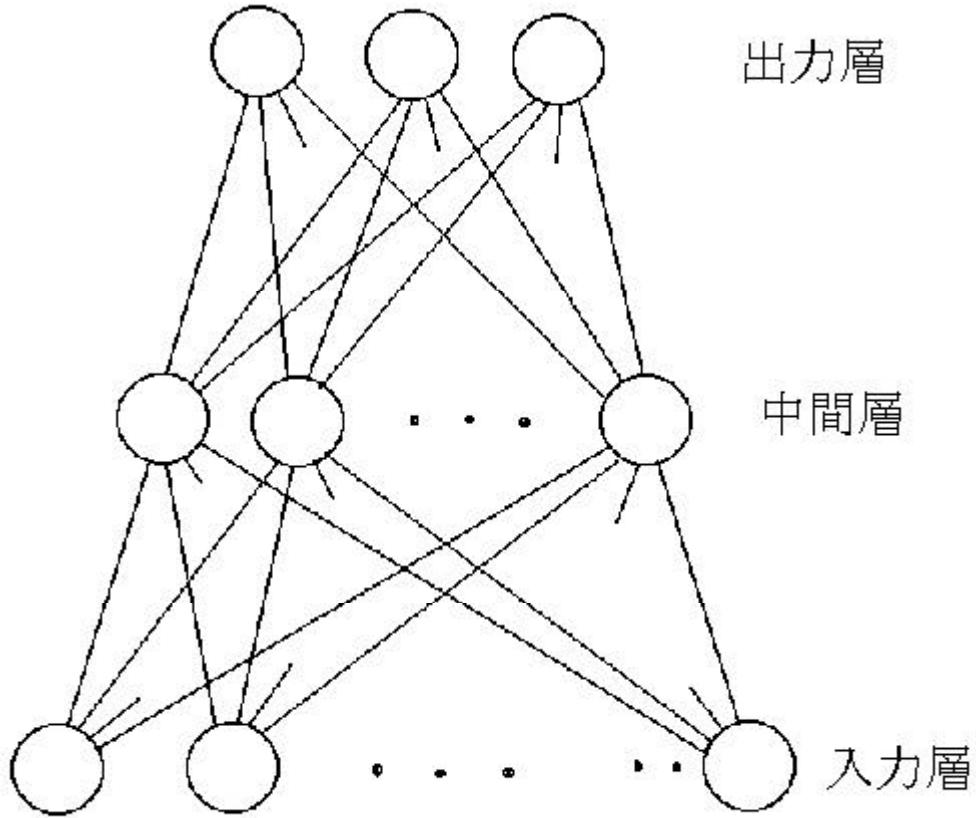


図3 PDP モデルの例

入力層に刺激パターンを与えたとき、出力層からの反応が、予め正しい反応パターンとして設定されているものになるように、重み w_i を変化させます。PDP モデルでは、このための方法として誤差逆伝播法と呼ばれている次のような方法が用いられています。

刺激パターン p を入力層に与えたときの出力層のユニット j の出力を o_{pj} で表わします。このパターン p に対して出力ユニット j が出力するべき反応量を t_{pj} で表わします。この t_{pj} は、ニューラルネットに、入力パターン p に対する反応パターンとして学習させる出力なので、教師信号と呼ばれています。

ニューラルネットの学習は、誤差量として与えられる次の目的関数

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_j (t_{pj} - o_{pj})^2 \quad (1)$$

が最小になるように、ニューロン i から j への重み w_{ji} などを変えていくことによって行われます。 E_p の添え字 p は、パターン p に対する誤差量であることを表わします。

E_p を最小化する w_{ji} の値は、最急降下法の考え方で求めます。すなわち、 w_{ji} の値を $-\frac{\partial E_p}{\partial w_{ji}}$ の方向に変化させます。

まず、

$$\frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{W}_{ji}} = \frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{net}_{pj}} \cdot \frac{\mathbb{net}_{pj}}{\mathbb{W}_{ji}} \quad (2)$$

と变形します。ここで、 \mathbb{net}_{pj} はパターン p に対するニューロン j への入力の重み付き和

$$\mathbb{net}_{pj} = \sum_i w_{ji} o_{pi}$$

です。上式の Σ 記号における i は、ニューロン j への入力ニューロン i として接続されているすべてのニューロン i についての和であることを表わします。 o_{pi} はニューロン i のパターン p に対する出力です。

$$d_{pj} = -\frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{net}_{pj}}$$

とおきます。

d_{pj} を次のように変形します。

$$d_{pj} = -\frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{net}_{pj}} = -\frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{o}_{pj}} \cdot \frac{\mathbb{o}_{pj}}{\mathbb{net}_{pj}} \quad (3)$$

ここで、

$$o_{pj} = f_j(\mathbb{net}_{pj})$$

なので、

$$\frac{\mathbb{o}_{pj}}{\mathbb{net}_{pj}} = f'_j(\mathbb{net}_{pj})$$

となります。

また、

$$f_j(x) = \frac{1}{1 + e^{-(x+q_j)}}$$

より、

$$\begin{aligned} f'_j(x) &= -\frac{1}{(1 + e^{-(x+q_j)})^2} \cdot (-e^{-(x+q_j)}) \\ &= \frac{e^{-(x+q_j)}}{(1 + e^{-(x+q_j)})^2} \end{aligned}$$

となります。

ここで、次式

$$\begin{aligned} 1 - f_j(x) &= 1 - \frac{1}{1 + e^{-(x+q_j)}} \\ &= \frac{e^{-(x+q_j)}}{1 + e^{-(x+q_j)}} \end{aligned}$$

が成り立つので、

$$f_j'(x) = (1 - f_j(x)) \cdot f_j(x)$$

となります。

ゆえに、

$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{I}o_{pj}}{\mathbb{I}net_{pj}} &= f_j'(net_{pj}) \\ &= (1 - f_j(net_{pj})) \cdot f_j(net_{pj}) \\ &= (1 - o_{pj}) \cdot o_{pj} \end{aligned} \quad (4)$$

となります。

式(2)~(4)より、

$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{I}E_p}{\mathbb{I}w_{ji}} &= -d_{pj} \cdot \frac{\mathbb{I}net_{pj}}{\mathbb{I}w_{ji}} \\ &= -\frac{\mathbb{I}E_p}{\mathbb{I}o_{pj}} \cdot \frac{\mathbb{I}o_{pj}}{\mathbb{I}net_{pj}} \cdot \frac{\mathbb{I}net_{pj}}{\mathbb{I}w_{ji}} \\ &= -\frac{\mathbb{I}E_p}{\mathbb{I}o_{pj}} \cdot (1 - o_{pj}) \cdot o_{pj} \cdot \frac{\mathbb{I}net_{pj}}{\mathbb{I}w_{ji}} \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{I}net_{pj}}{\mathbb{I}w_{ji}} &= \frac{\mathbb{I}}{\mathbb{I}w_{ji}} \sum_h w_{jh} o_{ph} \\ &= o_{pi} \end{aligned} \quad (5)$$

が成り立ちます。上式の \sum 記号における h は、ニューロン j に接続されている入力ニューロン h にわたる和であることを表わします。

したがって、

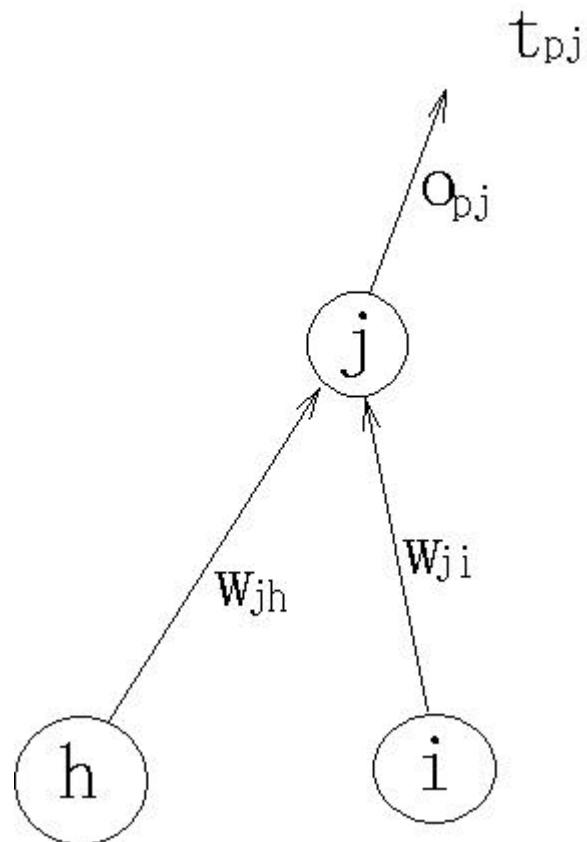
$$\frac{\mathbb{I}E_p}{\mathbb{I}w_{ji}} = -\frac{\mathbb{I}E_p}{\mathbb{I}o_{pj}} \cdot (1 - o_{pj}) \cdot o_{pj} \cdot o_{pi}$$

となります。

いま、ニューロン j が出力層のもの(図4)であるとすると、

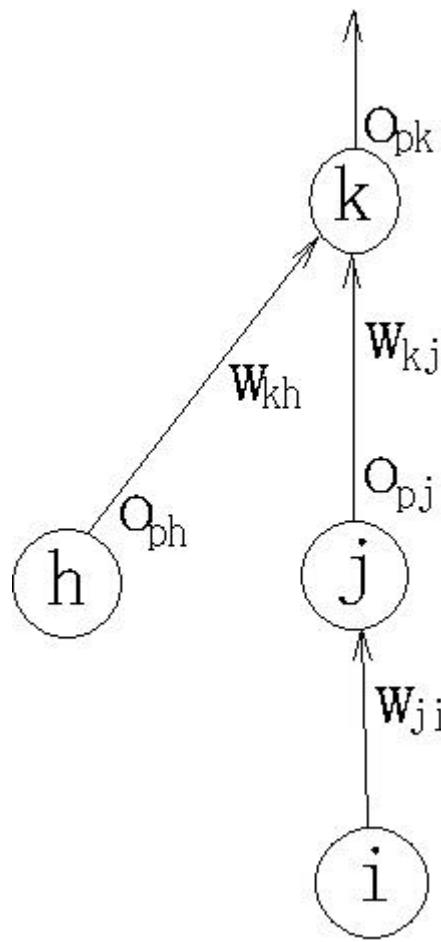
$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{I}E_p}{\mathbb{I}o_{pj}} &= \frac{\mathbb{I}}{\mathbb{I}o_{pj}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_k (t_{pk} - o_{pk})^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot (t_{pj} - o_{pj}) \cdot (-1) \\ &= -(t_{pj} - o_{pj}) \end{aligned}$$

となります。上式の Σ 記号における k は、出力層のニューロン k すべてにわたる和であることを表わします。

図4 ユニット j が出力層に属するとき

したがって、出力層のニューロン j への入力の重み w_{ji} については、次式を得ます。

$$\frac{\nabla E_p}{\nabla w_{ji}} = (t_{pj} - o_{pj})(1 - o_{pj})o_{pj}o_{pi}$$

図5 ニューロン j が出力層に属さないとき

ニューロン j が出力層のものではないときは、ニューロン j の出力 o_{pj} は、より上位のニューロン k を経由して出力層の出力に反映されます。したがって、

$$\frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{o}_{pj}} = \sum_k \frac{\mathbb{E}_p}{\mathbb{net}_{pk}} \cdot \frac{\mathbb{net}_{pk}}{\mathbb{o}_{pj}} \quad (6)$$

となります。ここで、 Σ 記号における k は、ニューロン j の出力 o_{pj} を直接受け取っているニューロン k すべてにわたる和であることを表わします。

また、

$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{net}_{pk}}{\mathbb{o}_{pj}} &= \frac{\mathbb{I}}{\mathbb{o}_{pj}} \sum_h w_{kh} o_{ph} \\ &= w_{kj} \end{aligned}$$

です。ここで、 Σ 記号における h は、ニューロン k への入力ニューロン h 全体にわたる和であることを表わします。

式(3)の記法に合わせて、

$$\mathbf{d}_{pk} = -\frac{\nabla E_p}{\nabla net_{pk}}$$

とおけば、式(6)は次のように書けます。

$$\frac{\nabla E_p}{\nabla o_{pj}} = \sum_k (-\mathbf{d}_{pk}) \cdot w_{kj}$$

よって、式(3)(4)より、

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{pj} &= -\frac{\nabla E_p}{\nabla o_{pj}} \cdot \frac{\nabla o_{pj}}{\nabla net_{pj}} \\ &= -\left\{ \sum_k (-\mathbf{d}_{pk}) \cdot w_{kj} \right\} (1 - o_{pj}) o_{pj} \\ &= (1 - o_{pj}) o_{pj} \cdot \left\{ \sum_k \mathbf{d}_{pk} w_{kj} \right\} \end{aligned} \quad (7)$$

上式において、 \mathbf{d}_{pj} の値は、より上位のニューロンkの \mathbf{d}_{pk} を用いて求められています。すなわち、 \mathbf{d}_{pk} の値が、信号 o_{pj} の流れと逆の方向に伝わっています。このことから、式(7)による方法は誤差逆伝播法 (Error Back Propagation) と呼ばれています。

式(7) および式(2)(3)(5)より、

$$\begin{aligned} \frac{\nabla E_p}{\nabla w_{ji}} &= -\mathbf{d}_{pj} \cdot \frac{\nabla net_{pj}}{\nabla w_{ji}} \\ &= -(1 - o_{pj}) o_{pj} \left\{ \sum_k \mathbf{d}_{pk} w_{kj} \right\} o_{pi} \end{aligned}$$

となります。

E_p を小さくするための w_{ji} の変化量を $-\frac{\nabla E_p}{\nabla w_{ji}}$ の方向にとるととき、その変化量 $\Delta_p w_{ji}$ を次のようにおきます。

$$\Delta_p w_{ji} = h \left(-\frac{\nabla E_p}{\nabla w_{ji}} \right) \quad (8)$$

h の値は、Rumelhart ら (1986, p.334) では

$$h = 0.25$$

となっています。

Δ_p の p は、パターン p に関する最小化を表わしています。すなわち、式(8)による最小化は、パターンごとに行います。

これに対して、学習パターン全てにわたって同時に最小化を行う方法（一括学習法）もあります。豊田 (1996) におけるニューラルネットによるデータ分析では、一括学習法が使われています。

式(8)による最小化をより効果的に行うために、慣性法と呼ばれている次式によって w_{ji}

の値を変えます。

$$\Delta_p w_{ji}(n+1) = h \cdot \left(-\frac{\nabla E_p}{\nabla w_{ji}} \right) + a \cdot \Delta_p w_{ji}(n) \quad (9)$$

ここで、 $\Delta_p w_{ji}(m)$ は、最小化のm番目のステップにおける w_{ji} の変化量を表わします。式(9)は、ステップ $n+1$ における変化量に、直前のステップ n における変化量を momentum term として少し加えておくことを表わしています。 a の値は、Rumelhart ら(1986, p.330)では、0.9 がよく用いられたものとなっています。

PDP モデルのプログラム例が PPDP.dpr です。

メインユニット UPDP.pas のフォーム Form1 は、プログラミング時に図 6 のように用意されています。

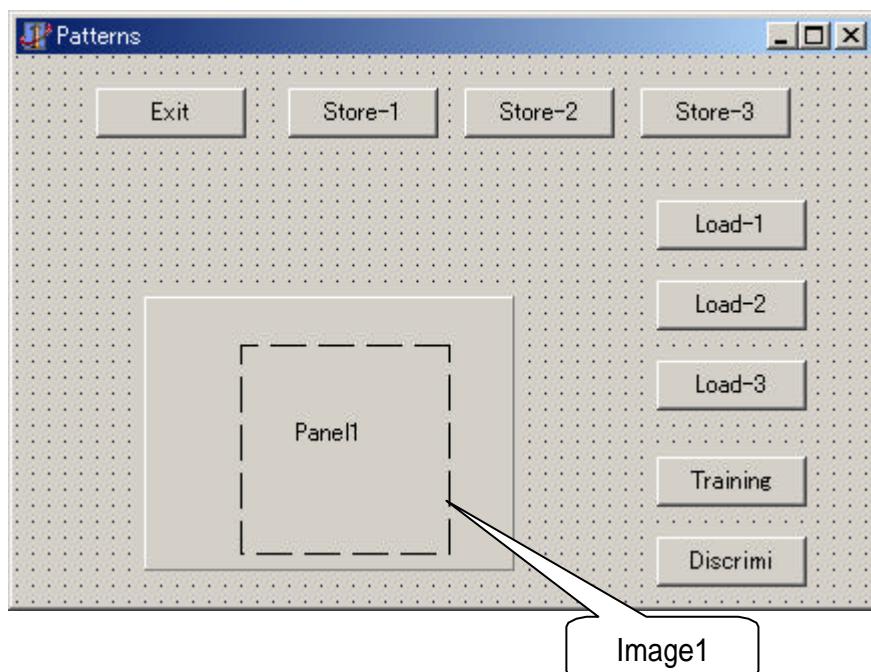


図 6 メインユニットのフォーム Form1

Panel1 上の Image1 は学習用刺激パターンの設定に用います。

刺激パターンの弁別学習を行うためのユニット Ulearning.pas のフォーム LForm は、プログラミング時に図 7 のように用意されています。

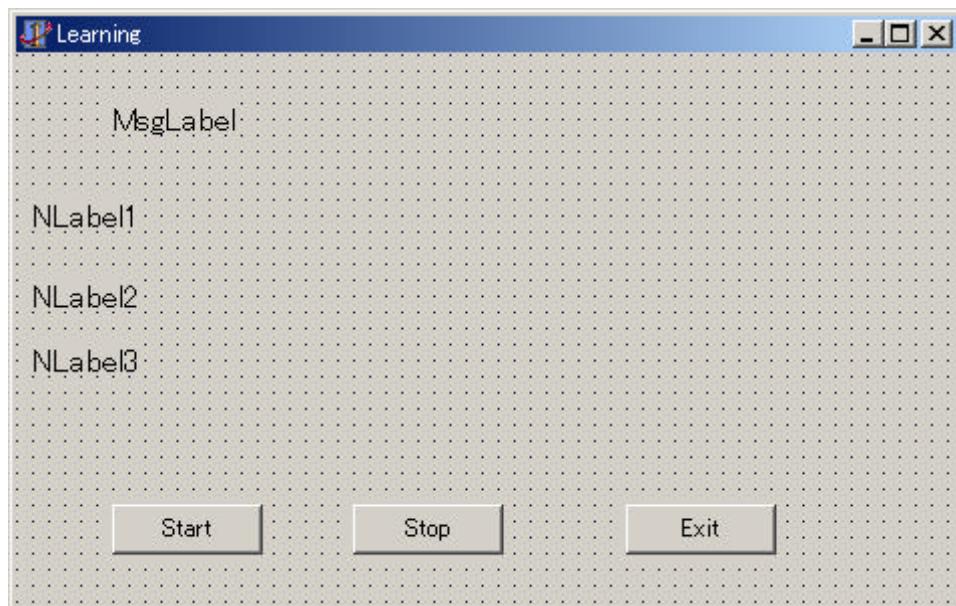


図 7 弁別学習のユニット Ulearning.pas のフォーム LForm

弁別テストを行うためのユニット UDiscrimi.pas のフォーム FDiscrimi は、プログラミング時に図 8 のように用意されています。

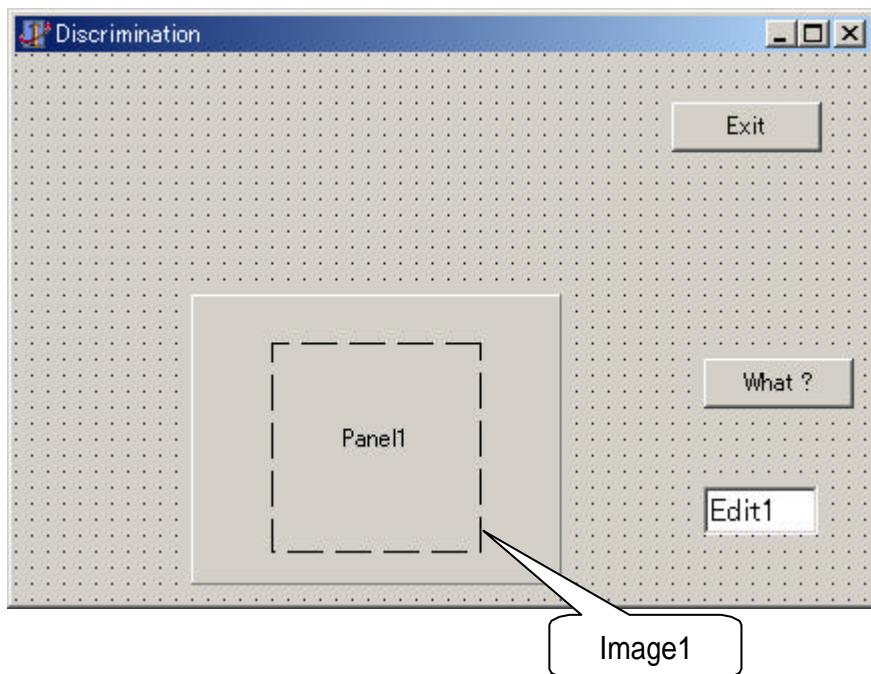


図 8 弁別テストのユニット UDiscrimi.pas のユニット FDiscrimi

3つのフォーム（図 6,7,8）の親子関係は、図 9 のようになっています。

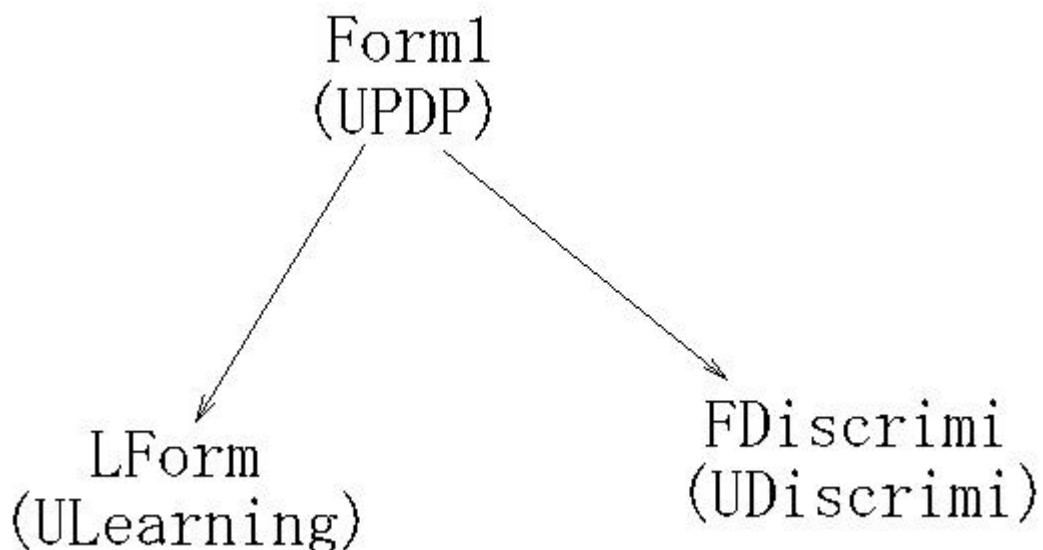


図9 フォームの親子関係。

矢印の根元の方のフォームのユニットにおいて、矢印の先の方のフォームが生成されます。

ユニットの uses 節による関係は、図 10 のようになっています。矢印の根元の方のユニットの uses 節において、矢印の先の方のユニットの使用が宣言されています。

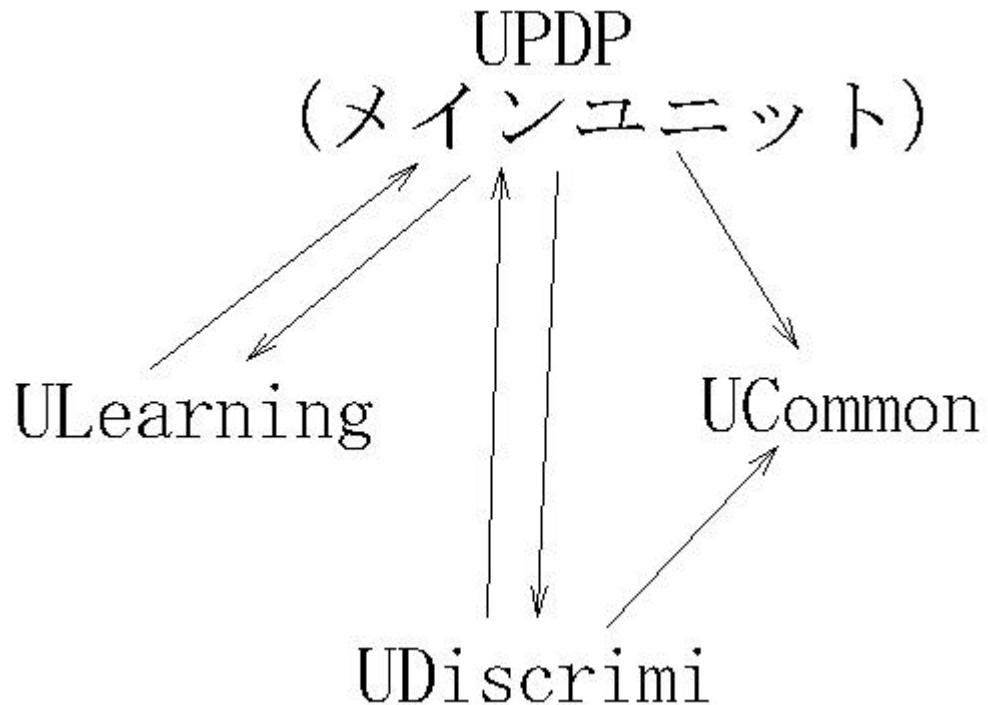


図10 ユニットの関係。

PDP モデルは、クラス型 TSubject として構成されています。TSubject 型によって生成されたオブジェクトは、クラス型変数 Subject で表わされています。TSubject 型によって表わされている PDP モデルは、入力層、出力層と 1 つの中間層からなるニューラルネットです。入力層 InputNeurons は 100 個のニューロン、中間層 HiddenNeurons は 10 個のニューロン、出力層 OutputNeurons は 3 個のニューロンで構成されています（図 11）。

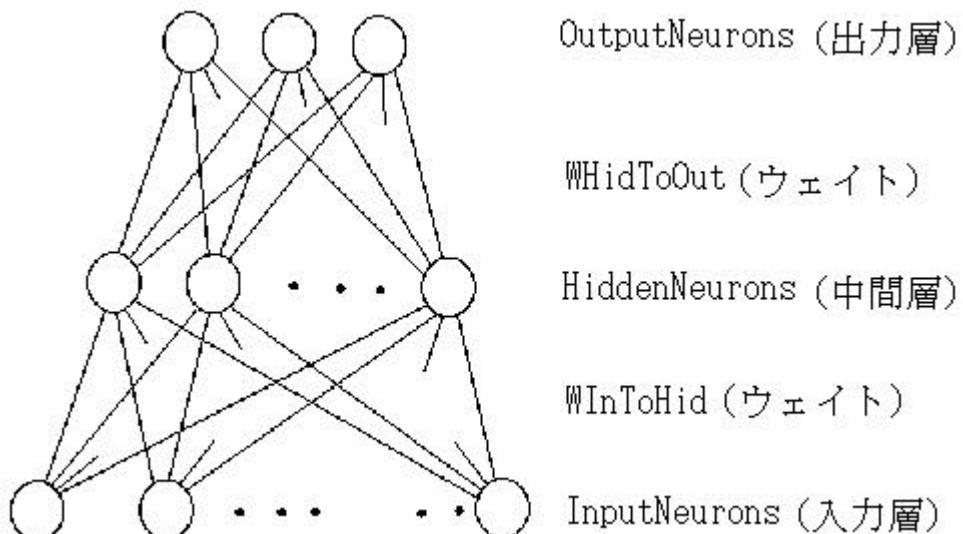


図 11 TSubject 型でのニューラルネット

TSubject 型のオブジェクトは、コンストラクタ Create で生成します。刺激パターンの学習はメソッド StudyPattern、弁別はメソッド Discriminate で行っています。

学習パターンの設定は、プログラムの実行開始時に表示されるフォーム（図 12）上で行います。図 12 のフォームは、プログラムの実行開始時に表示されるものです

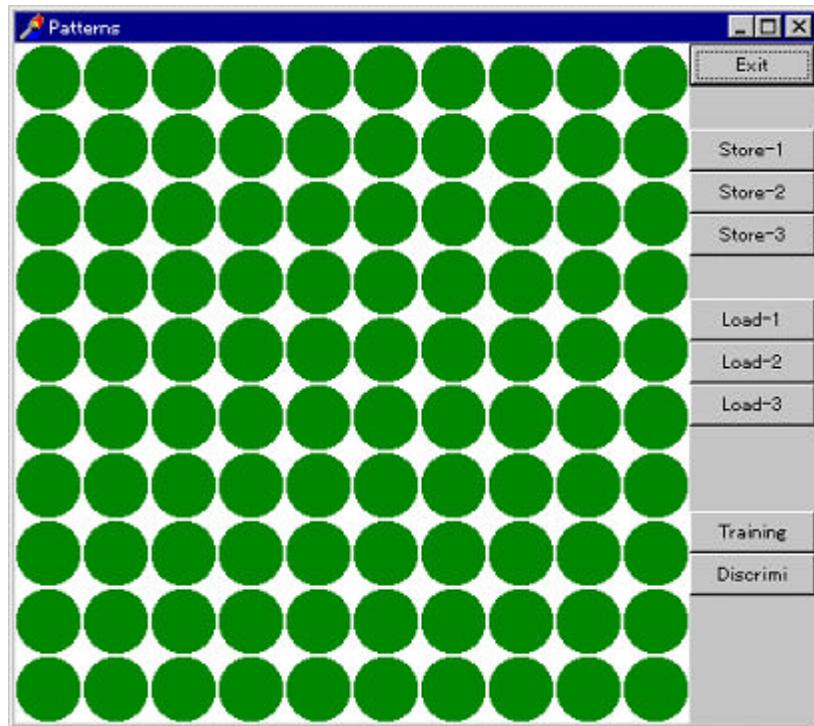


図 1 2 プログラムの実行開始時に表示されるフォーム

フォームの小円を左ボタンでクリックする、あるいは、左ボタンを押したまま小円の上でマウスの矢印を動かすと、その小円の色が赤に変わります。右ボタンによるクリック、あるいは右ボタンを押した状態でのマウスの移動のときは、緑色に変わります。

クラス型 TSubject は、3つのパターンの弁別を学習するものです。学習は、出力層 OutNeurons の反応パターンが、学習されるべき反応パターン Target にできるだけ近くなるように行われます。3つの刺激パターンは Pattern1、Pattern2、Pattern3 に設定され、学習反応パターン（教師信号 t_{pj} ）は Target で与えられます。K 番目のパターン PatternK に対しては Target[K]のみが 1 に設定されます。

学習用の弁別パターンは、例えば図 13～15 のように設定してから、Store-1 をクリックすると Pattern1 に、Store-2 をクリックすると Pattern2 に、Store-3 をクリックすると Pattern3 に格納されます。赤い小円が 1、緑の小円が 0 として格納されます。入力層に与えられたパターンは、入力層の赤の小円に対応する部位のニューロンが刺激されて興奮していると解釈します。

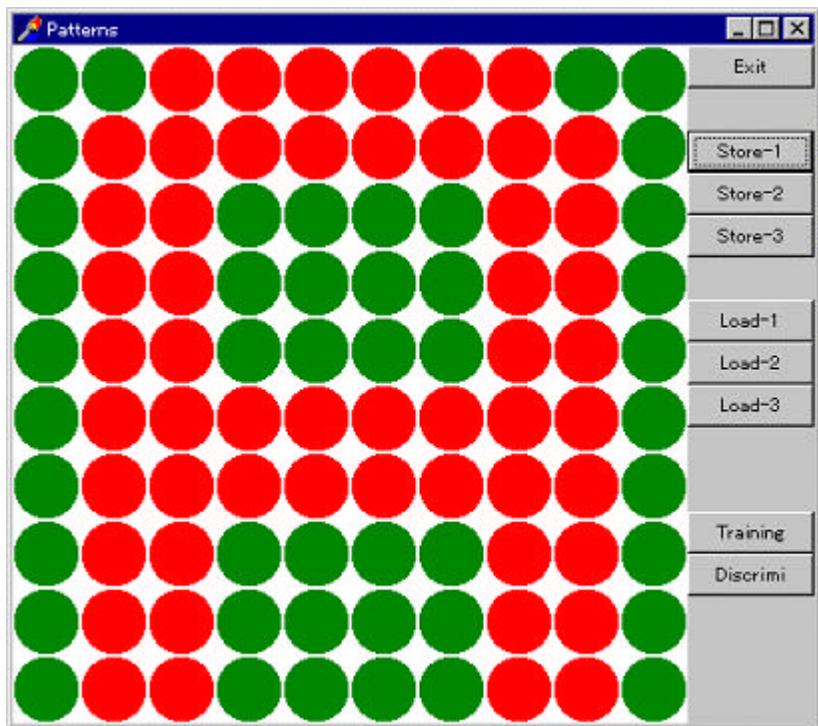


図13 パターン1の設定。設定後、Store-1ボタンを押す。

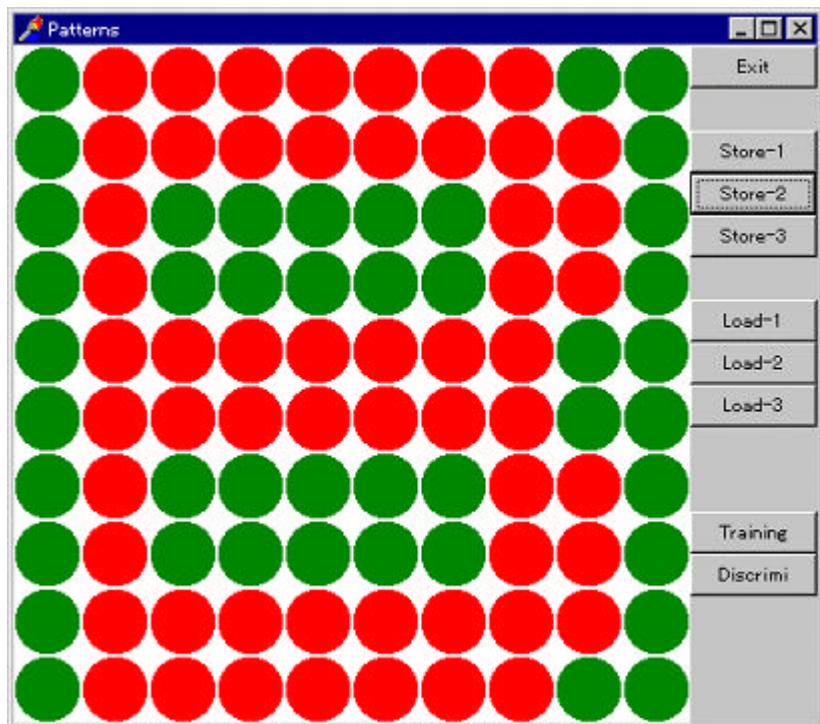


図14 パターン2の設定。設定後、Store-2ボタンを押す。

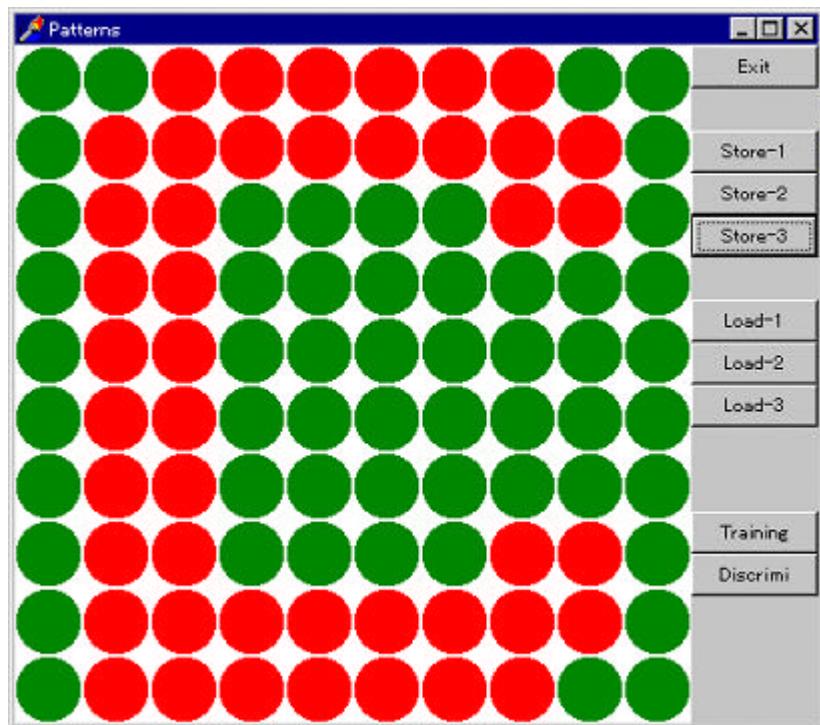


図 15 パターン 3 の設定。設定後、Store-3 ボタンを押す

Pattern1 ~ Pattern3 に設定されているパターンは、Load-1 ~ Load-3 ボタンのクリックによって表示して確認することができます。

3 つの弁別パターンの設定後、Training ボタンをクリックすると、図 16 のようなフォームが表示されます。



図 16 Training ボタンのクリックで表示されるフォーム

Start ボタンをクリックすると学習が始まります。

学習は、StudyPattern メソッドによる 3 つの刺激パターンの学習、および、それに続く分別テストとその成績の表示の繰り返しによって行われています。学習されるべき入力パターンとして与えられている 3 つのパターンそれぞれについての 20 回分の正答率が、フォームの上部に表示されます（図 17）。

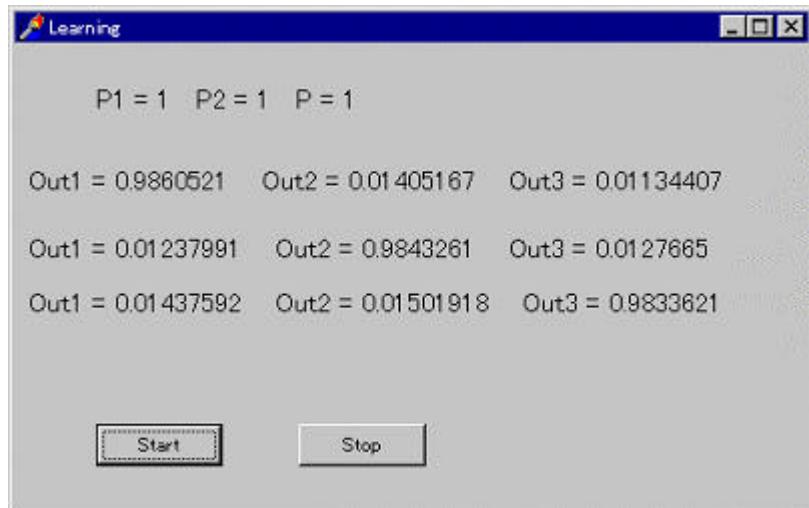


図 17 学習中のフォーム

その下に、 3×3 の形式で出力ユニットの値が表示されます。 i 行目の j 列目の値は、パターン i に対する j 番目の出力ユニットの値です。対角線上の値が 1 に近く、それ以外の値は 0 に近くなるまで学習を進めます。十分に 1、あるいは 0 に近くなったところで、Stop ボタンをクリックして学習を止めます。

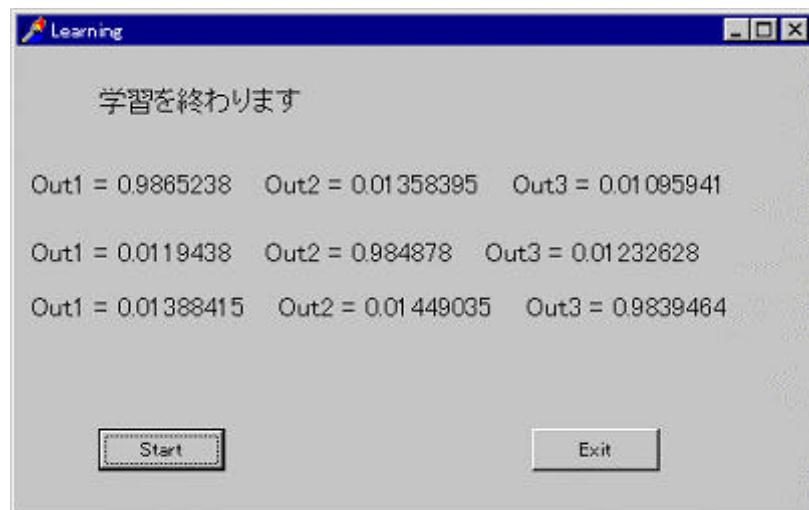


図 18 学習の終了

図 18 は、対角線上の値が 0.98 以上、それ以外の値が 0.02 以下になったところで Stop ボタンをクリックしたものです。Exit ボタンのクリックでメインフォームに戻ります（図 19）。

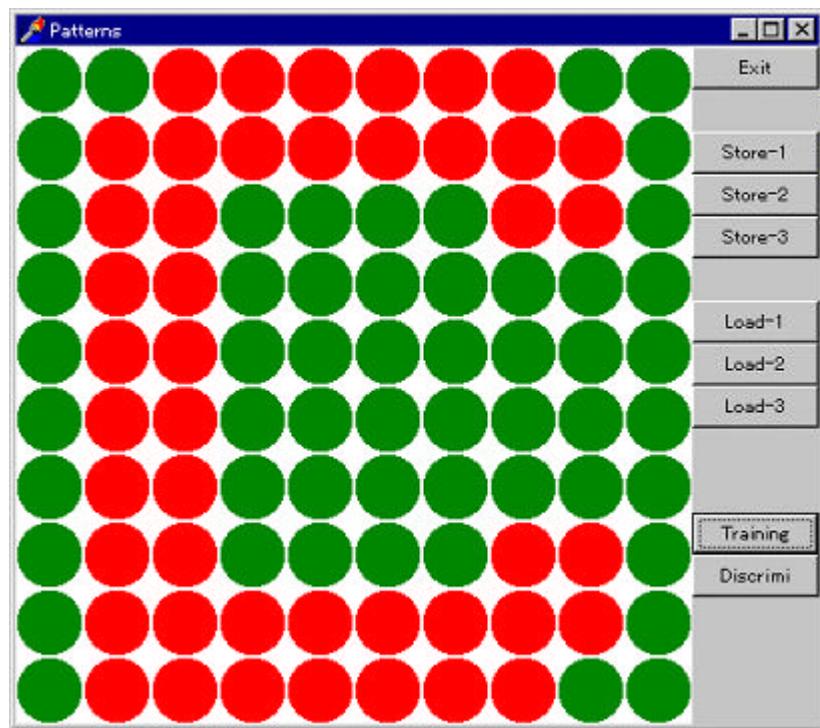


図 19 メインフォームに戻る

図 19 のフォームの Discrimi ボタンをクリックすると、弁別テスト用のフォーム FDiscrimi が生成・表示されます(図 20)。

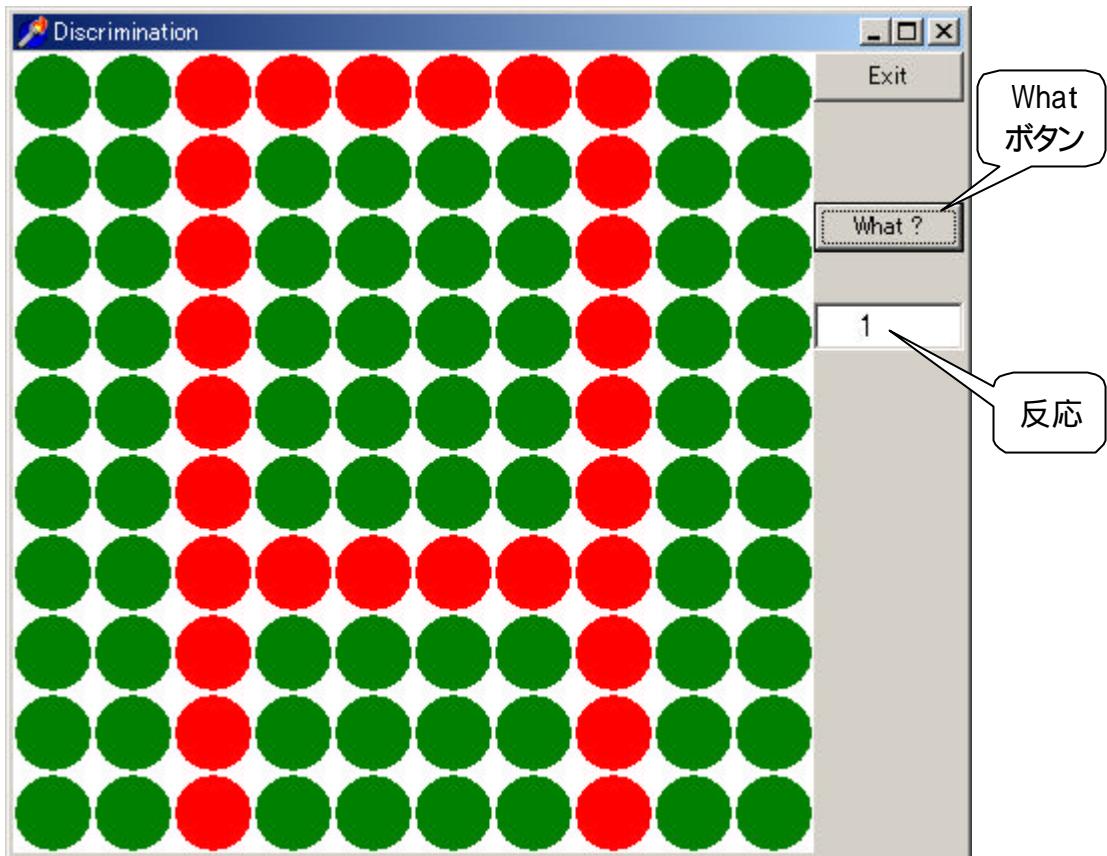


図 20 パターンに対する弁別反応。パターンを設定して、「What?」ボタンを押す。

弁別テスト用パターンを適当に設定して、「What?」ボタンをクリックすると、手続き WButtonClick が呼び出され、設定されたパターンに対する出力の一番大きい出力ユニットの番号が、弁別反応として Edit コンポーネントに表示されます。出力の一番大きい出力ユニットは、メソッド MaxID によって求められています。

弁別テスト用パターンの設定は、学習用パターンの設定と同じ方法で行います。弁別テスト用パターンは、学習パターンと全く同じものでなくとも、それに近いものであれば、その近い学習パターンに対する反応が、弁別テスト用パターンに対する反応として Edit コンポーネントに表示されることが多いと思います。いろいろ試してみて下さい。

図 20 のフォームで Exit ボタンをクリックすると、図 21 のメインフォームに戻ります。このフォームの Exit ボタンのクリックで、プログラムは終了します。

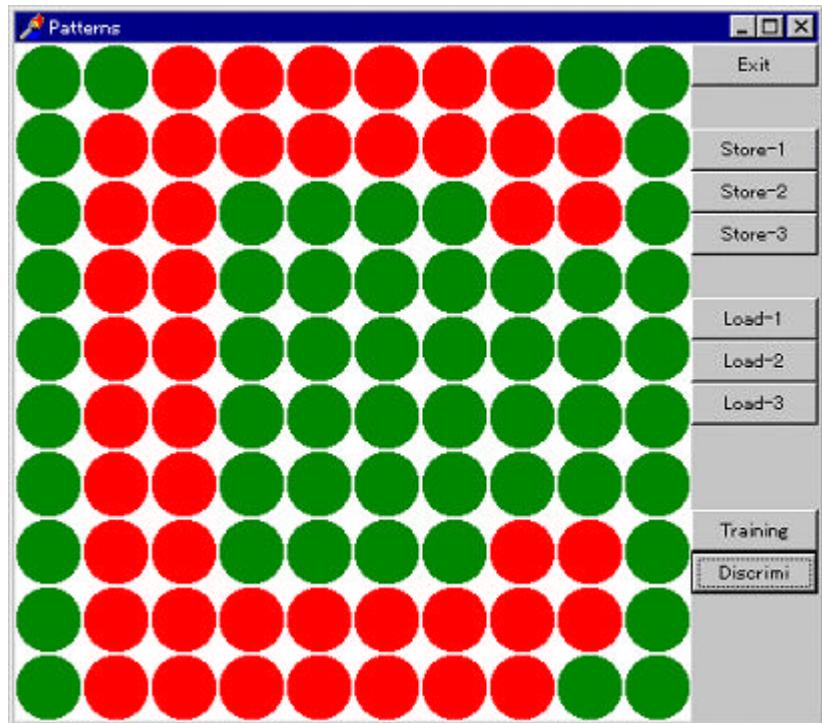


図21 メインフォームの Exit ボタンのクリックでプログラムは終了する。

参 考 文 献

- (1)Rumelhart,D.E., McClelland,J.L. and the PDP Research Group (1986) *Parallel distributed processing: Explorations in the microstructure of cognition.* Vol.1,2. The MIT Press.
- (2)豊田秀樹 (1996) 非線形多変量解析：ニューラルネットによるアプローチ . 朝倉書店