

重み空間における大域的準最適  $H_\infty$  学習の挙動Behaviors of Globally Suboptimized  $H_\infty$ -Learning In Weight Space

西山 清\*, ○落宰 公志\*

Kiyoshi Nishiyama\*, ○Koushi Ochisai\*

\*岩手大学工学部情報システム工学科

\*Dep. of Computer &amp; Infomation Science, Iwate University

キーワード： 学習アルゴリズム (learning algorithm),  $H_\infty$  学習 ( $H_\infty$ -learning),  $H_2$  学習 ( $H_2$ -learning), BP 学習 (BP learning), 重み空間 (weight space)

連絡先： 〒 020-8551 盛岡市上田 4-3-5 岩手大学 工学部 情報システム工学科

西山 清, Tel.: 019-621-6475, Fax.: 019-621-6475, E-mail: nisiyama@cis.iwate-u.ac.jp

## 1. はじめに

ニューラルネットワークにおける学習とは、所望の入出力関係 (写像) を満たすようにニューロン間における結合重みとしきい値を更新する過程といえる。この更新を行うためのアルゴリズムを学習アルゴリズムという。一般に、所望の入出力関係を満たす重みとしきい値の組は一意であるとは限らない。

本研究では、排他的論理和 (XOR) 問題を用いて、大域的に  $H_\infty$  準最適な *global-EHF* (*g-EHF*) 学習アルゴリズムの初期重みの変化に対するロバスト性を、重み空間における挙動から明らかにする。

## 2. 従来の学習アルゴリズム

## 2.1 ニューラルネットワークの構造

図 1 にニューロンの個数がそれぞれ入力層  $N_1$ 、中間層  $N_2$ 、出力層  $N_3$  からなる 3 層ニューラルネット

ワークの構造を示す。本研究ではこのネットワークを  $N_1$ - $N_2$ - $N_3$  ネットワークと呼ぶことにする。

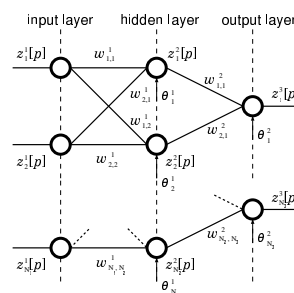


Fig. 1 3層ニューラルネットワークの構造

出力層内の  $m$  番目のニューロンの出力値は次式で表され、 $\{w_{i,j}^1\}, \{w_{j,m}^2\}$  は結合重みを、 $\{\theta_j^1\}, \{\theta_m^2\}$  はしきい値、 $N_p$  は入力パターン数をそれぞれ表している。

$$\hat{z}_m^3[p] = f \left( \sum_{j=1}^{N_2} w_{j,m}^2 f \left( \sum_{i=1}^{N_1} w_{i,j}^1 z_i^1[p] + \theta_j^1 \right) + \theta_m^2 \right),$$

$$p = 1, 2, \dots, N_p, \quad m = 1, 2, \dots, N_3 \quad (1)$$

また、 $f(\cdot)$  はシグモイド関数と呼ばれ、 $f(x) = 1 / (1 + \exp(-\alpha x)) (\alpha > 0)$  で表される ( $\alpha$  は  $f(x)$  の傾きを示す)。

## 2.2 BP 学習

教師信号  $z_m^3[p]$  と出力値  $\hat{z}_m^3[p]$  の 2 乗誤差の総和  $J_{BP} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{N_p} \sum_{m=1}^{N_3} (z_m^3[p] - \hat{z}_m^3[p])^2$  を最小とすようにネットワークの結合重みとしきい値を出力層から入力層に向かって逆方向に更新するアルゴリズムを BP 学習アルゴリズムという。本研究ではモーメントを用いた改良版を用いる。

## 2.3 $H_2$ 学習

拡張カルマンフィルタ<sup>1)</sup>を次のニューラルネットワーク全体を表す状態空間モデル

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k \quad (\text{状態方程式}) \quad (2)$$

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{z}^3[k] + \mathbf{v}_k \quad (\text{観測方程式}) \quad (3)$$

に適用すれば、平均 2 乗誤差  $J_{KF} = E\{(\mathbf{w}_k - \hat{\mathbf{w}}_k)^T (\mathbf{w}_k - \hat{\mathbf{w}}_k) | \mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_k\}$  を最小とする学習アルゴリズムが得られる<sup>2)</sup>。これを、 $g$ -EKF 学習アルゴリズムと呼ぶことにする。

## 3. 大域的準最適 $H_\infty$ 学習

### 3.1 $g$ -EHF 学習アルゴリズム

近年、外乱  $\Sigma_0^{-1/2}(\mathbf{w}_0 - \hat{\mathbf{w}}_0), \{\mathbf{u}_p\}_{p=0}^k, \{\mathbf{v}_p\}_{p=0}^k$  から出力誤差  $\{e_{f,p}\}_{p=0}^k$  までの伝達行列  $\mathbf{T}_k(\mathcal{F}_f)$  の  $H_\infty$  ノルムを最小にする意味で最適な  $H_\infty$  フィルタが注目を集めている。一般に伝達行列  $\mathbf{T}$  の  $H_\infty$  ノルムは 2 ノルムが有界なベクトル  $\mathbf{u}$  を用いて  $J_{HF} = \|\mathbf{T}\|_\infty = \sup_{\mathbf{u} \in l_2, \mathbf{u} \neq 0} \frac{\|\mathbf{T}\mathbf{u}\|_2}{\|\mathbf{u}\|_2}$  のように定義される。ここで、 $\|\mathbf{u}\|_2$  は時系列  $\{\mathbf{u}_k\}$  の 2 ノルムであり、 $\|\cdot\|$  はユークリッドノルムを表す。この最適問題の解である  $H_\infty$  フィルタは準最適問題の解から得られる<sup>1)</sup>。

[準最適  $H_\infty$  学習問題]:  $\gamma_f > 0$  が与えられたとき、

$$J_{HF} = \sup_{\mathbf{w}_0, \{\mathbf{v}_p\}} \frac{\sum_{p=0}^k \|e_{f,p}\|^2}{\|\mathbf{w}_0 - \hat{\mathbf{w}}_0\|_{\Sigma_0^{-1}}^2 + \sum_{p=0}^k \|\mathbf{v}_p\|^2} < \gamma_f^2$$

を満たす準最適  $H_\infty$  推定値  $\hat{z}_{k|k} = \mathcal{F}_f(y_0, y_1, \dots, y_k)$  を求める。この  $H_\infty$  フィルタ  $\mathcal{F}_f$  は、 $\gamma_f$  を出来るだけ小さくすれば、外乱にロバスト(頑強)な学習法となる。式 (2)、(3) を確定的な状態空間モデルと考え、これを線形化した後に  $H_\infty$  フィルタを適用すれば、最終的に図 2 の  $g$ -EHF 学習アルゴリズムが得られる。

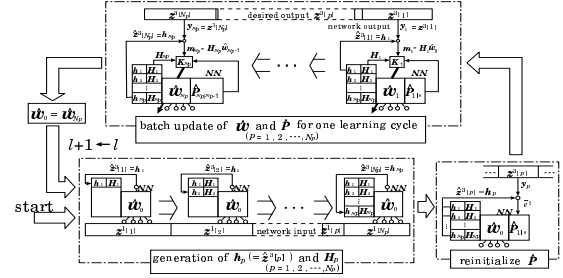


Fig. 2  $g$ -EHF 学習アルゴリズムの動作

### 3.2 排他的論理和問題における学習特性

本研究では、バイナリ問題である線形分離不可能な排他的論理和 (XOR) の学習問題を取り上げる。XOR 学習問題とは、入力パターン  $(z_1^1[p], z_2^1[p])$  に対する所望な出力パターン  $z_1^3[p]$  が、

$$\{(0,0),0\}, \{(0,1),1\}, \{(1,0),1\}, \{(1,1),0\}$$

で与えられる入出力関係の組を学習する問題である。図 3 に入出力関係の表とネットワークの構成を示す。

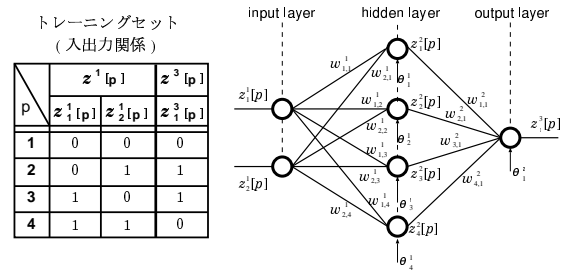


Fig. 3 XOR 問題の入出力関係とネットワーク

この 2-4-1 ネットワークにおける重みベクトル  $\mathbf{w}$  を次のように定義する。

$$\mathbf{w} = [\theta_1^1, w_{1,1}^1, w_{2,1}^1, \theta_2^1, w_{1,2}^1, w_{2,2}^1, \theta_3^1, w_{1,3}^1, w_{2,3}^1,$$

$$\theta_4^1, w_{1,4}^1, w_{2,4}^1, \theta_1^2, w_{1,1}^2, w_{2,1}^2, w_{3,1}^2, w_{4,1}^2]^T \in \mathcal{R}^{N_w}$$

重みベクトル  $\mathbf{w}$  の次元の数はネットワークにおける結合重みとしきい値の数と等しく、次式で与

Table 1 各アルゴリズムの学習回数の分布

アルゴリズム	BP ( $\eta=0.8$ $\beta=0.8$ )	$g$ -EKF	$g$ -EHF ( $\gamma_f=1.7$ )
最大値	9044	389	40
最小値	57	19	16
平均値	121.004	47.147	23.851
分散	10751.769	541.269	10.123
正規化分散	0.734	0.244	0.018

えられる。

$$N_w = (N_1 + 1) \times N_2 + (N_2 + 1) \times N_3$$

この例では重みベクトルは17次元となる。このネットワークに対して、乱数により(-0.1~0.1)の範囲で初期化された $10^4$ 個の異なる重みベクトル $\mathbf{w}^{[i]} (i = 1, 2, 3, \dots, 10^4)$ を用いて、BP、 $g$ -EKFおよび、 $g$ -EHF学習アルゴリズムを評価する。

学習は全パターンに対する出力誤差の2乗和

$$J = \sum_{p=1}^{N_p} (z_1^3[p] - \hat{z}_1^3[p])^2 \quad (4)$$

がある値以下となるまで繰り返される。このときの誤差の2乗和を学習打ち切り誤差 $J$ とする。各学習アルゴリズムに用いられるパラメータは良く調整され、最も良い結果を与えた値を採用した。表1に各学習アルゴリズムの学習結果を、図4に学習回数、および初期100回の試行に対する学習曲線を示す。

この結果より、 $g$ -EHF学習アルゴリズムはBP、 $g$ -EKF学習アルゴリズムに見られる初期重みによる学習回数のばらつきが抑えられ、平均値も $g$ -EKFのほぼ半分となった。この初期値の変化に対するロバスト性を重み空間における $g$ -EHFの挙動から検証する。

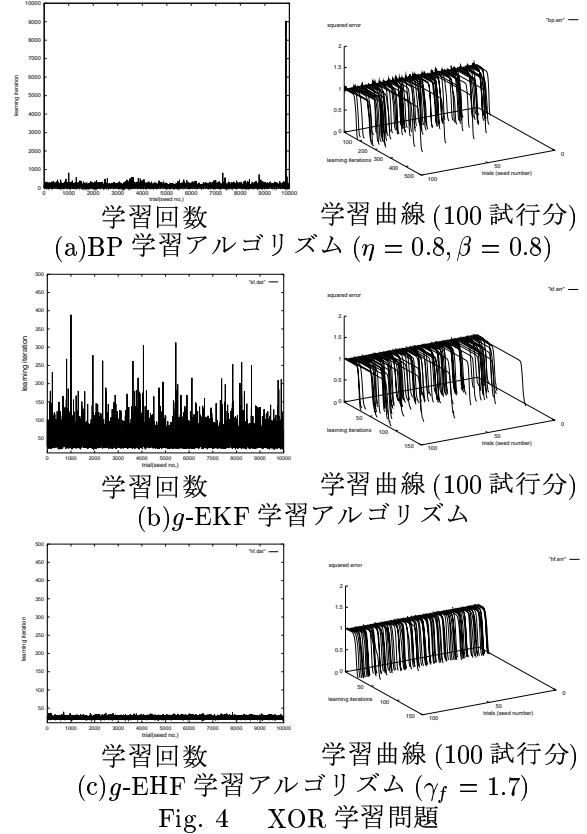


Fig. 4 XOR 学習問題

## 4. 重み空間における $H_\infty$ 学習の解析

### 4.1 解の非一意性

3.2節で示した $10^4$ 個の重みベクトルの学習過程において、互いの距離がどの程度近くなるか、また一致する重みベクトルの組が存在するか調査した。この調査は、式(5)によって試行 $i$ と試行 $j$ の重みベクトルのユークリッド距離を求め、その値が $10^{-1}$ 以下となる組を選出するという方法を用いた。

$$\begin{aligned} d(\mathbf{w}^{[i]}, \mathbf{w}^{[j]}) &= \sqrt{(\mathbf{w}^{[i]} - \mathbf{w}^{[j]})^T (\mathbf{w}^{[i]} - \mathbf{w}^{[j]})} \leq 10^{-1} \quad (5) \end{aligned}$$

表2、3に学習打ち切り誤差 $J$ を小さくしていった場合の結果を $g$ -EKF、 $g$ -EHF学習アルゴリズム毎について示す。

いずれの学習アルゴリズムにおいても重みベクトルが一致する組は一つも発見されなかった。これは所望の解を得るような重みベクトルは無数

Table 2  $g$ -EKF による学習後の重みベクトル

$J$	距離の近い組の数		最小値
	2つの組	3つの組	
$10^{-2}$	4	0	0.08530
$10^{-4}$	12	0	0.04156
$10^{-9}$	77	2	0.03102

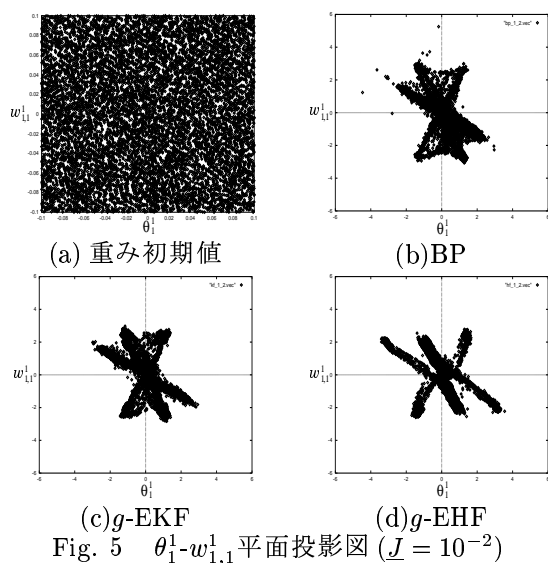
Table 3  $g$ -EHF による学習後の重みベクトル

$J$	距離の近い組の数		最小値
	2つの組	3つの組	
$10^{-2}$	13	0	0.04843
$10^{-4}$	11	0	0.04491
$10^{-9}$	122	4	0.01167

に存在するという意味を意味する。それでも打ち切り誤差を厳しくするに従い、距離の近い組の数が増加して行き、最も近い組の距離も小さくなっていった。これより、解を満たすような重みベクトルは無数に存在しつつも、学習の精度を上げていくに従い重み空間内のある領域に集中して行くことがわかる。

## 4.2 重みベクトルの2次元投影面の分布

重みベクトルの中から選んだ2つの要素を座標とする2次元平面へ $10^4$ 個の重みベクトルを投影した。図5には第一要素 $\theta_1^1$ と第二要素 $w_{1,1}^1$ を座標として選出した場合の初期値と学習アルゴリズム毎の投影図を示す。



この投影図から、学習後の重みベクトルがあ

る特定の領域内に集中して分布していることがわかる。しかもその領域、つまり解の存在領域は学習アルゴリズムによらずほぼ同一の形状をしている。すなわち、この分布の形状は学習対象のみに依存するものと思われる。また、中間層の重みとしきい値、出力層の重みとしきい値など要素の選び方によって、13パターンの特有の形状が現れることがわかった。表4、5、6にその $g$ -EHF学習アルゴリズムに対する投影パターンのすべてを示す。

Table 4 入力層-中間層間の重みの投影パターン

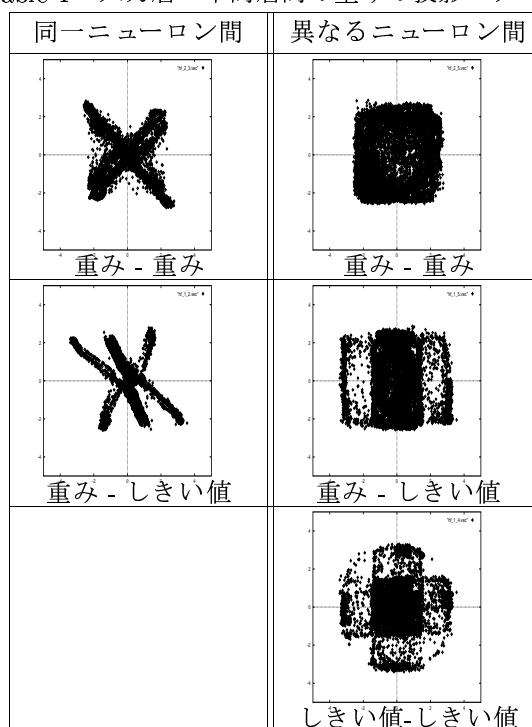
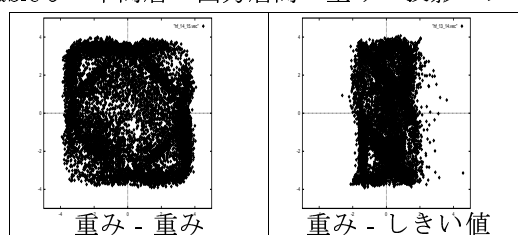


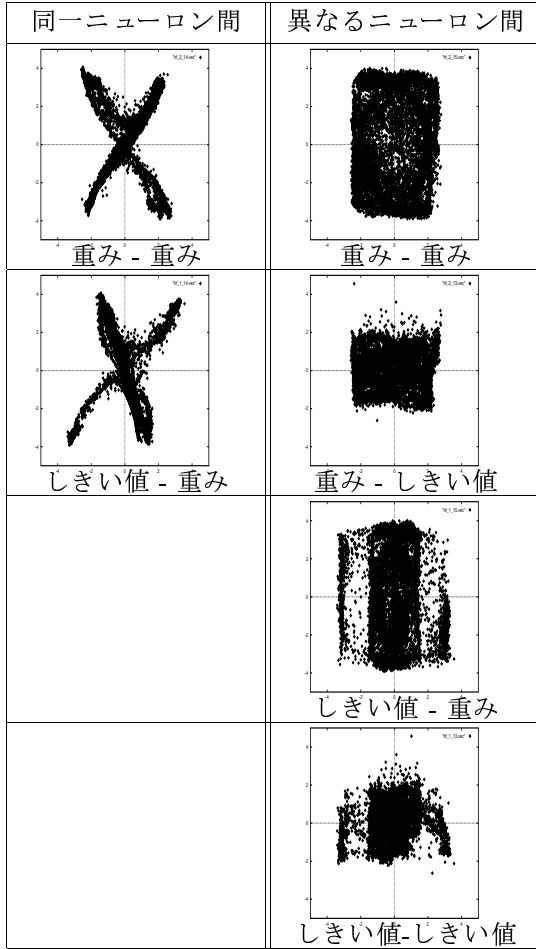
Table 5 中間層-出力層間の重みの投影パターン



## 4.3 誤差曲面上における学習の軌跡

$g$ -EKF と  $g$ -EHF 学習アルゴリズムにおいて、同じ初期重みベクトルから学習を開始し、その後どのような軌跡をとるか比較を行う。そのため、 $g$ -EKF において最も学習回数の多かった1003試行目に着目し、2次元投影面上の学習の軌跡を追

Table 6 中間層の前後の重みに関する投影パターン



跡した結果を図6に示した。図中の点の分布は図5における  $g$ -EKF の投影図と同一のものである。

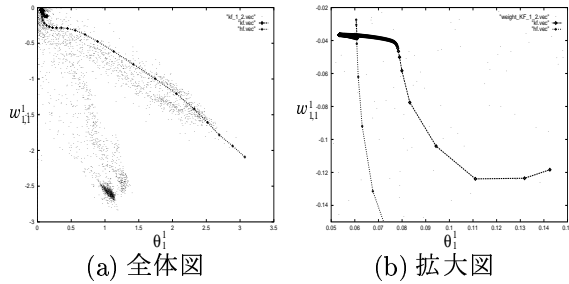


Fig. 6 1003 試行目の学習軌跡 ( $\theta_1$ - $w_{1,1}$  平面投影図)

学習回数:  $g$ -EKF 389回,  $g$ -EHF 27回

図6(a)から、この投影面での  $g$ -EKF 学習アルゴリズムによる学習軌跡はほとんど変化が見られなかった。また、同図(b)から1回目の更新で既に  $g$ -EKF と  $g$ -EHF 学習アルゴリズムによる重みベクトルが全く違い、最終的な収束点も大きく異なっていることがわかる。

**学習曲線の比較**  $g$ -EKF、 $g$ -EHF 学習アルゴリズムにおける学習毎の出力誤差の推移を表した学習曲線を図7に示す。この図から  $g$ -EKF 学習アルゴリズムは誤差が長い間一定の状態が続き、そして急激に減少しているのに対し、 $g$ -EHF 学習アルゴリズムでは誤差が一度増加し、留まることなく急激に減少している。すなわち、 $g$ -EHF 学習アルゴリズムは誤差曲面上で大胆な山登りができることを示している。

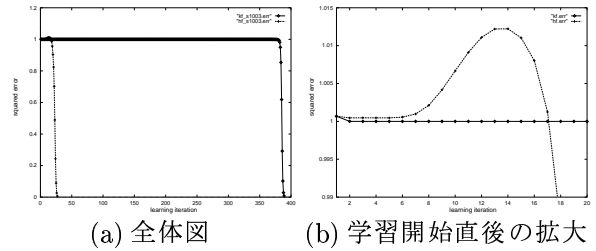


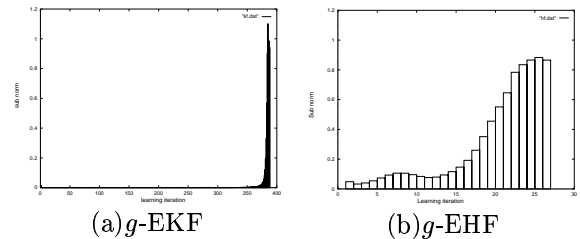
Fig. 7 1003 試行目の  $g$ -EKF、 $g$ -EHF の学習曲線; 学習回数:  $g$ -EKF 389回,  $g$ -EHF 27回

**学習毎の更新量の比較** ある試行  $i$  において学習開始 ( $k=1$ ) から学習終了 ( $k=k_{end}$ ) までの更新毎の重みベクトルの差分ノルム  $d_k^{[i]}$  およびそのノルムの総和  $S_d^{[i]}$  を

$$d_k^{[i]} = \sqrt{(\hat{w}_k^{[i]} - \hat{w}_{k-1}^{[i]})^T (\hat{w}_k^{[i]} - \hat{w}_{k-1}^{[i]})} \quad (6)$$

$$S_d^{[i]} = \sum_{k=1}^{k_{end}} d_k^{[i]} \quad (7)$$

と定義し、前学習からどれだけの量に変化したかを求めた。ここで、 $\hat{w}_k^{[1003]}$  は1003 試行目における  $k$  回目の学習更新で得られた重みベクトルであり、 $\hat{w}_0^{[1003]}$  は重みベクトルの初期値を表す。



$k_{end}=389; S_d^{[1003]}=6.671$   $k_{end}=27; S_d^{[1003]}=7.936$   
Fig. 8  $g$ -EKF、 $g$ -EHF における学習毎の更新量

$g$ -EKF 学習アルゴリズムの更新量は学習開始からしばらくの間ほぼゼロに等しく、重みベクトルは動いていないことがわかる。しかし、350回を越

えると急激に増加し、学習全体の更新量は  $g$ -EHF 学習アルゴリズムとほぼ等しくなっている。

以上の結果から  $g$ -EKF、 $g$ -EHF 学習アルゴリズムが所望の解を得るまでの誤差曲面上の挙動を 3次元空間において模擬的に表したものを図 9に示す。

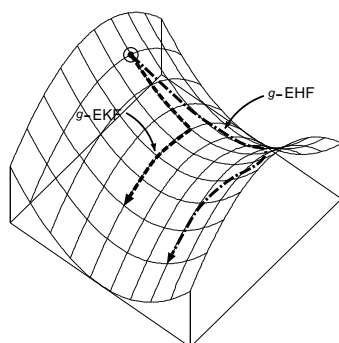


Fig. 9  $g$ -EKF, $g$ -EHF の誤差曲面上の挙動

これより、 $g$ -EHF 学習アルゴリズムは誤差曲面上の鞍点 (saddle point) をたくみに攻略している様子がわかる。これが結果的に  $g$ -EHF 学習アルゴリズムの初期重みに対するロバスト性として現れる。 $g$ -EKF 学習アルゴリズムでは、この鞍点からの脱出に 300 回以上の学習回数を費している。BP ではこの脱出がさらに困難となる。

## 5. まとめ

大域的に準最適な解を与える  $g$ -EKF と  $g$ -EHF 学習アルゴリズムを XOR 問題に適用し、 $10^4$ 個の異なる初期結合重みとしきい値の組に関して様々な解析を行った。その結果、学習打ち切り誤差を厳しくするに従い、 $g$ -EKF、 $g$ -EHF 両学習アルゴリズム共に重みベクトルの近い組が増加していくことがわかった。しかし、学習後の  $10^4$ 個の重みベクトル中で一致するものは一つも発見されず、所望の解を得るような重みベクトルは無数に存在することが明らかになった。また、重みベクトルを 2次元座標平面上へ投影し、ある領域内に集中して分布することを明らかにした。さらに、その領域の概形は学習アルゴリズムによらず、学習対象

に依存することを示し、役割が同じ重みの組み合わせに対して同様な分布形状が見られるという興味深い結果も得られた。

一方、2次元投影面上での学習軌跡を追跡することで、 $g$ -EKF と  $g$ -EHF 学習アルゴリズムでは解の存在領域がほぼ一致しているにもかかわらず、初期値から学習終了へ至るまでの重みベクトルの挙動は全く異なることが明らかとなった。その挙動の過程で見られた  $g$ -EHF の出力誤差の増加、いわゆる誤差曲面上の鞍点の攻略における大胆な「山登り現象」は  $g$ -EKF 学習アルゴリズムには見られない注目すべき点であった。この鞍点の攻略こそが  $g$ -EHF 学習アルゴリズムの初期重みに対するロバスト性を実現している。

今後の課題として、1) 重み空間の解の存在領域についての詳細な解析、2)  $g$ -EHF 学習アルゴリズムの重みベクトルの挙動について、特に誤差が増加する「山登り現象」についての説明、この 2 点が挙げられる。

## 参考文献

- 1) 西山 清: "最適フィルタリング", 培風館 (2001).
- 2) K. Nishiyama and K. Suzuki: "H<sub>∞</sub>-Learning of Layered Neural Networks", IEEE Trans. Neural Networks, 12, 6, pp.1265-1277 (2001).