

演 題	化学と神経回路網情報処理	
発 表 者 (所 属)	青山智夫(宮崎大学), 神部順子(大東文化大), 田島澄恵(ベストシステム株), 長嶋雲兵(AIST)	
連 絡 先	889-2192 宮崎市学園木花台西 1-1 宮崎大学工学部電気電子工学科 青山智夫 FAX: 0985-58-7411, E-mail: t0b217u@cc.miyazaki-u.ac.jp	
キーワード	神経回路網、データ学習、情報抽出、逆問題、補間	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	環境問題などの化学測定データを神経回路網で情報処理する場合の近似関数を自動生成する reconstruction learning に分類される、新しい学習方程式の性質について述べ、開発した A110.for プログラムの結果を示す。	
環 境	適 応 機 種 名	IBM/AT, Sun/WS
	O S 名	Windows 98, Me, 2K, XP, UNIX
	ソ ー ス 言 語	Fortran 77
	周 辺 機 器	none
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ○独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法 連絡先： E-mail: t0b217u@cc.miyazaki-u.ac.jp
	・未定	

1. はじめに

神経回路網は科学のさまざまな分野に応用できる計算アルゴリズムである。その機能は学習方程式により構築される。本論文では階層型神経回路網の Back Propagation 学習方程式(BP 方程式)の拡張として定義される reconstruction learning とその派生形の性質を調べる。

2. 多階層型神経回路網の機能

多階層型神経回路網は観測データ(ベクトル \mathbf{x})から現象の近似表現 \mathbf{Q} を自動的に回路網内部に生成する有用な情報素子である。素子の出力をベクトル \mathbf{y} とすると $\mathbf{y}=\mathbf{Q}\mathbf{x}$ 。ここで \mathbf{Q} は正方行列とは限らない。これは「 \mathbf{x} の存在する空間を \mathbf{y} 空間内のベクトルに対応させること」=「認識の原形」と解釈できる。これが第一の機能である。

\mathbf{Q} の具体的表現は三層の場合 $t=f(\sum W_{xx}x+\theta)$, $y=g(\sum W_{yt}t+\eta)$ と書かれる。ここで θ η は閾値、行列 $W_{xx}W_{yt}$ は各層間の結合の強さ[区間: $-\infty, +\infty$]である。 f, g は各層上の神経細胞の動作をエミュレートする関数で普通 sigmoid function, $1/(1+\exp(x))$ である。ベクトル \mathbf{t} は中間層上の神経細胞の出力である。ここで $\mathbf{E}=\sum(\mathbf{y}-\mathbf{T})^2$ なる量を定義する。ここで \mathbf{T} は神経回路網の出力として期待されるベクトルである。

条件 $\partial \mathbf{E} / \partial W_{xx} = 0$, $\partial \mathbf{E} / \partial W_{yt} = 0$ より W_{xx}, W_{yt} を決定する iteration 方程式を得る。しかしその条件は停留値を与えるものであるから当然最適解の保証はない。

そのとき simulated annealing 法を採用し停留値を脱出する経路を取り入れる。そうして何回かの停留値を歴訪してより良い解に到達する。その annealing の際 $W_x, W_y \rightarrow 0$ となる方向に進み再び BP 学習を行い、また annealing, BP,... と繰り返すと W_x, W_y の中で不必要な成分が淘汰される。これが reconstruction learning である。この学習法は入出力 x, y ベクトル間の重要な関連を示唆する第二の機能がある。

3. 欠損データのための学習方程式

第2節の機能は神経回路網に入力される期待値ベクトルを含めて完全であるときに定義される。しかし化学では欠測データが頻繁に現れる。その場合の神経回路網の学習を考察する。

神経回路網の学習において「データ欠損」を取り入れる方式は：(1)欠損値を一様乱数で置換する、(2)欠損部からの入力を受け持つ神経細胞の動作とその細胞から情報が伝播する経路の変化を凍結する、の二種類が考えられるが、BP 学習方程式を詳細に検討していくと(2)の方法は欠損値=0 と置換した場合と同じ iteration が導出される。従って採用可能な方法は(1)である。

BP 学習方程式は任意の入出力ベクトルに対し無限 iteration のときに $\partial E / \partial W_x = 0, \partial E / \partial W_y = 0$ を与える。従って全ての一様乱数に対し「学習が完了」する。その性質は「欠損値を求める」観点では全く情報を与えないことを意味し、BP 学習が不適當である結論を与える。同様に reconstruction learning も不適當である。

大きな iteration 学習において、一様乱数に対し BP 学習誤差を $O(-1)-O(0)$ の範囲に保ち、それ以外の欠損でないデータに対し BP 学習誤差を $O(-3)$ 以下にする学習 iteration を考察する。その学習は reconstruction learning において annealing $W_x, W_y \rightarrow 0$ を通常よりも数倍のオーダーで頻繁に行うと実現可能である。我々はこの学習を Swayed Reconstruction for Back Propagation learning (SRBP) と呼ぶ。モデルデータ(表 1)を用いた SRBP の BP 学習誤差(最大値, 平均)を図 1 に示す。

<p>表 1 入力データ : $y=a-(x-b)^2, y=c-(x-d)^2, y=x^{0.5}$ の [0,1] 区間の 21 点サンプリング 欠損データ : $y=x^{0.5}$ の 12 番目のサンプリング値 0.74 とする 教師データ(期待値) : $y=x$ の同区間、同一サンプリング annealing: 50 BP iteration 毎に 0.2 消去</p>
--

図 1 より明らかなように SRBP は厳密な意味では完了しない学習である。SRBP の「打ち切り」は BP 学習誤差がある範囲の定常値となることである。その「学習打ち切り」した神経回路網に一様乱数区間の等間隔数列を欠損データ部に入力する。そのときの出力値と期待値 T との差を図 2 に示す。欠損データ値 0.74 を +0.01 の誤差で算出した。

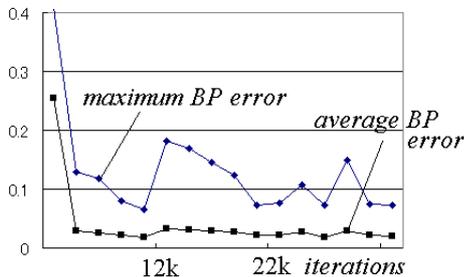


図 1 SRBP 時の BP 学習誤差(最大値, 平均)

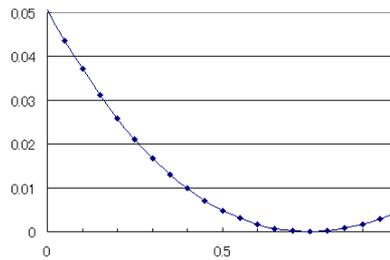


図 2 欠損部に数値を入力したときの差

4. まとめ

欠損データを含む観測の多階層型神経回路網の SRBP を提案した。この学習法より欠損データを求めることが出来る。SRBP は欠損データのみならず分布を示すデータに対しても適用可能な学習法である。