はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

コネクショニストアプローチによる数法則の発見

長瀬　永遠

富山県立大学　情報基盤工学講座

June 2, 2023

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

背景

科学的発見を支援するシステムを構築する際にデータから数法則を発見することは中心的な課題である.

目的

既存手法に存在する以下のような問題点を解消した手法を提案.

- 計算量が膨大になる
- 法則に現れる指数の値が整数でないとき，適当な関数をあらかじめ定義する必要がある
- ノイズに弱い

ニューラルネットを用いた数法則の発見1

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

本研究では，数法則の発見をコネクショニストモデル（ニューラルネットワーク）を用いて定式化する．

事例集合：$(\mathbf{x}_1, y_1), \cdots, (\mathbf{x}_m, y_m)$，$\mathbf{x}_t$：$n$ 次元入力ベクトル，y_t：$\mathbf{x}_t$ に対する目標出力値としたとき，本研究では以下のような数法則のクラスについて考える．

$$y_t = c_0 + \sum_{i=1}^{h} c_i x_{t1}^{w_{i1}} \cdots x_{tn}^{w_{in}} \tag{1}$$

c_i，w_{ij}：未知の実数，h：未知の整数

ニューラルネットを用いた数法則の発見 2

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

$\mathbf{c} = (c_0, \cdots, c_h)^T$, $\mathbf{w}_i = (w_{i1}, \cdots, w_{in})^T$ とし，全てのパラメータからなる一つのベクトルを $\mathbf{\Phi} = (\mathbf{c}^T, \mathbf{w}_1^T, \cdots, \mathbf{w}_h^T)^T$, $N (= nh + h + 1)$ を $\mathbf{\Phi}$ の次元（パラメータ数）とする．
$x_{ti} > 0$ を仮定すると式（1）は以下と等価である．

$$y_t = c_0 + \sum_{i=1}^{h} c_i \exp\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij} \ln(x_{tj})\right) \tag{2}$$

式（2）は各中間ユニットの活性化関数が $\exp(s)$ である 3 層ニューラルネットとみなすことができる．

ニューラルネットを用いた数法則の発見3

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

中間ユニット i の出力値を $v_{it} = v_i(\mathbf{x}_t; \mathbf{w}_i) = \exp\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij} \ln(x_{tj})\right)$，出力ユニットの出力値を $z_t = z(\mathbf{x}_t; \mathbf{\Phi}) = c_0 + \sum_{i=1}^{h} c_i v_i(\mathbf{x}_t; \mathbf{w}_i)$ とすると，式（1）を対象とする数法則の発見問題は以下の式（3）を最小化する $\mathbf{\Phi}$ を求めるニューラルネットの学習問題として定式化できる．

$$f(\mathbf{\Phi}) = \frac{1}{2} \sum_{t=1}^{m} (y_t - z(\mathbf{x}_t; \mathbf{\Phi}))^2 \tag{3}$$

準ニュートン法1

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

準ニュートン法とは，多変数関数の極値を求める方法であり，探索の過程で反復により 2 次微分の逆行列 $(\nabla^2 f(\mathbf{\Phi}))^{-1}$ の近似値（$\mathbf{H}$）を各ステップで求めることを特徴とする．

アルゴリズム

1. $\mathbf{\Phi}_1$ を初期化し，$\mathbf{H}_1 = \mathbf{I}, k = 1$ とする
2. 探索方向を求める：$\Delta\mathbf{\Phi}_k = -\mathbf{H}_k \nabla f(\mathbf{\Phi}_k)$
3. 停止条件を満たせば，反復を終了させる
4. $f(\mathbf{\Phi}_k + \lambda\Delta\mathbf{\Phi}_k)$ を最小化する λ_k を求める
5. 結合重みを修正する：$\mathbf{\Phi}_{k+1} = \mathbf{\Phi}_k + \lambda_k\Delta\mathbf{\Phi}_k$
6. $k \equiv 0 \pmod N$ ならば，$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{I}$ とし，それ以外のとき，$\mathbf{H}_{k+1}$ を更新する
7. $k = k + 1$ とし，$Step2$ に戻る

ただし，I は単位行列を表す．

準ニュートン法2

$\mathbf{H}_{k+1}$ の計算

*Step*6 での $\mathbf{H}_{k+1}$ の計算法にはいくつかの提案があるが，本研究では以下のような BFGS 公式を採用する．

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \left(1 + \frac{\mathbf{q}^T\mathbf{H}_k\mathbf{q}}{\mathbf{p}^T\mathbf{q}}\right)\frac{\mathbf{p}\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T\mathbf{q}} - \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}^T\mathbf{H}_k + \mathbf{H}_k\mathbf{q}\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T\mathbf{q}} \tag{4}$$

$\mathbf{p} = \lambda_k\Delta\mathbf{\Phi}_k, \mathbf{q} = \nabla f(\mathbf{\Phi}_{k+1} - \nabla f(\mathbf{\Phi}_k)$ とする．

最適ステップ幅の新計算法 1

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

準ニュートン法の効率は $Step4$ で採用する最適ステップ幅 λ の計算法に大きく依存するため，本研究ではより効率的な新計算法を導出する．

基本計算法

$g(\lambda) = f(\mathbf{\Phi} + \lambda\Delta\mathbf{\Phi})$ としたとき，$g(\lambda)$ の 2 次近似式は

$$g(\lambda) \approx g(0) + g'(0)\lambda + \frac{1}{2}g''(0)\lambda^2 \tag{5}$$

となる．$g'(0) < 0$ かつ $g''(0) > 0$ のとき，式（5）の右辺の最小値は

$$\lambda = -\frac{g'(0)}{g''(0)} \tag{6}$$

で与えられる．

最適ステップ幅の新計算法 2

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

望ましくないケースへの対処

（$g'(0) > 0$ のとき）
その探索方向で目的関数の値を減少させることはできないので，
$\Delta\mathbf{\Phi}_k = -\nabla f(\mathbf{\Phi}_k), \mathbf{H}_k = \mathbf{I}$ に設定する．

（$g'(0) < 0$ かつ $g''(0) \leq 0$ のとき）
式（6）の値は負または無限大になるので，ガウス-ニュートン法を用いる．

実験

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

実験条件

$$y = x^{w_1} + w_2 \tag{7}$$

について，$(w_1, w_2) = (0.4, 0.2)$ で真の法則を与えるとする．入力事例 x_t は $0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ の各要素とし，目標出力値 y_t は式（7）に真のパラメータを代入して各 x_t から計算した．本実験では，標準的な BP，慣性項付き BP，および，BPQ を比較した．

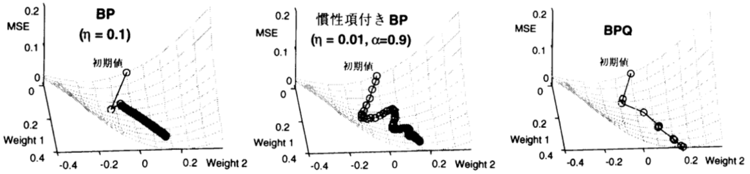

図 1: 学習軌跡

おわりに

はじめに
ニューラルネットを用いた数法則の発見
BPQ アルゴリズム
実験
おわりに

まとめ

数値データから未知の法則を発見するため，コネクショニストアプローチに基づく方法を提案した．

今後の展望

重要ではない結合重みを自動的に枝刈りできるようにする