

## Kullback-Leibler Importance Estimation Procedure を用いた Restricted Boltzmann Machine の学習アルゴリズム

桜井 哲治

東北大学大学院 情報科学研究科 応用情報科学専攻

Deep Belief Network (DBN) は Hinton らによって、その学習アルゴリズムとともに提案された階層構造をもつベイジアンネットワークモデルである。Greedy な学習アルゴリズムの存在やそこでの推論が容易であることを背景に次元圧縮器やパターン認識問題などへの応用が期待されている。

DBN の学習は各層間の結合確率を Restricted Boltzmann Machine (RBM) とよばれる特別な構造をもつボルツマンマシンと考えて各層間のパラメータ  $\Theta = \{a, b, w\}$  を学習する。RBM は可視素子  $\mathbf{v} = \{0, 1\}^{|V|}$  層と隠れ素子  $\mathbf{h} = \{0, 1\}^{|H|}$  層の 2 層からなる 2 部グラフの構造をもっている。RBM の状態は次のボルツマン分布であらわされる。

$$P_{\text{RBM}}(\mathbf{v}, \mathbf{h} | \Theta) = \frac{1}{Z_{\text{RBM}}(\Theta)} \exp(-E(\mathbf{v}, \mathbf{h} | \Theta)) \quad (1)$$

ここで  $Z_{\text{RBM}}(\Theta)$  は規格化定数であり、

$$E(\mathbf{v}, \mathbf{h} | \Theta) = - \sum_{i \in V} a_i v_i - \sum_{j \in H} b_j h_j - \sum_{i \in V} \sum_{j \in H} w_{ij} v_i h_j \quad (2)$$

と定義されている。  $V, H$  はそれぞれ、可視素子、隠れ素子のラベルの集合であり、  $\mathbf{a} = \{a_i | i \in V\}$ ,  $\mathbf{b} = \{b_j | j \in H\}$  はそれぞれ可視素子、隠れ素子のバイアスパラメータ、  $\mathbf{w} = \{w_{ij} | i \in V, j \in H\}$  は可視素子と隠れ素子との間の結合パラメータである。

DBN の学習はその構成要素である RBM の学習を逐次的に進めていくことによりおこなわれる。したがって DBN のよりよい学習を得るためには各層をなしている RBM のよりよい学習アルゴリズムを設計する必要がある。

RBM を用いた学習では観測データを生成する分布が RBM であると仮定し、観測データに応じてパラメータ推定問題を解くことになる。しかしながら RBM の厳密な学習アルゴリズムは素子数に対して指数的に増加する計算量をもっているため一般には NP-hard のクラスに属し、計算が困難である。これは、RBM の学習はデータの経験分布とモデル分布との間のカルバック・ライブラー (Kullback-Leibler:KL) 情報量最小化 (尤度最大化) を基本としており、その勾配計算には RBM における統計量の計算が必要となるからである。そこで実装においては何らかの近似的手段に頼らざるを得ないこととなる。

Roux and Bengio は DBN の学習に対して有効な方法 (Variational Bound の最適化法) として従来とは異なる RBM の学習基準を提案した [1]。

彼らは観測データの経験分布  $P_D(\mathbf{v})$  と RBM の周辺分布  $P_V(\mathbf{v} | \Theta)$  との間の KL 情報量最小化の基準の変わりにデータの経験分布  $P_D(\mathbf{v})$  と分布

$$P_V^D(\mathbf{v} | \Theta) \equiv \sum_{\mathbf{h}, \mathbf{v}^0} P_{V|H}(\mathbf{v} | \mathbf{h}, \mathbf{a}, \mathbf{w}) P_{H|V}(\mathbf{h} | \mathbf{v}^0, \mathbf{b}, \mathbf{w}) P_D(\mathbf{v}^0) \quad (3)$$

との間のKL 情報量最小化をRBMの学習の基準とした：

$$\hat{\Theta} = \arg \min_{\Theta} \text{KL}(P_D || P_V^D) \quad (4)$$

分布  $P_V^D(\mathbf{v} | \Theta)$  は観測データ点の経験分布から分布  $P_{H|V}(\mathbf{h} | \mathbf{v}, \mathbf{b}, \mathbf{w})$  にしたがって隠れ素子の状態をつくり，それを用いて分布  $P_{V|H}(\mathbf{v} | \mathbf{h}, \mathbf{a}, \mathbf{w})$  にしたがって可視素子の状態分布を再構成した分布であると解釈できる．

この基準による学習アルゴリズムを用いると3層のDBNの場合，システムが観測データ点の経験分布を十分に表現し得るものであるならば，Greedy 学習により最適なDBNを学習できることが示されている [1]．しかしながら彼らの学習基準によるRBMの学習アルゴリズムもやはり計算コストの問題を抱えており，それを解決する近似アルゴリズムの開発が必要とされている．

本発表ではSugiyama等 [2] によって提案されたKullback-Leibler Importance Estimation Procedure と呼ばれる近似手法をRoux and Bengioの学習基準による学習アルゴリズムに適用することにより，実装に耐え得る性能のよい新しいRBMの近似学習アルゴリズムを提案する．さらに，人工データに対する数値実験を行い，提案アルゴリズムがRoux and Bengioの基準による学習アルゴリズムに対するよい近似となっており，かつ高速化が実現できていることを示す (図1)．実験ではデータ生成・学習ともに  $|V| = 4$ ， $|H| = 4$  のRBMを用いる．生成モデルのパラメータはそれぞれガウス分布  $N(0, 0.2^2)$  からランダムに発生させた値を用いる．

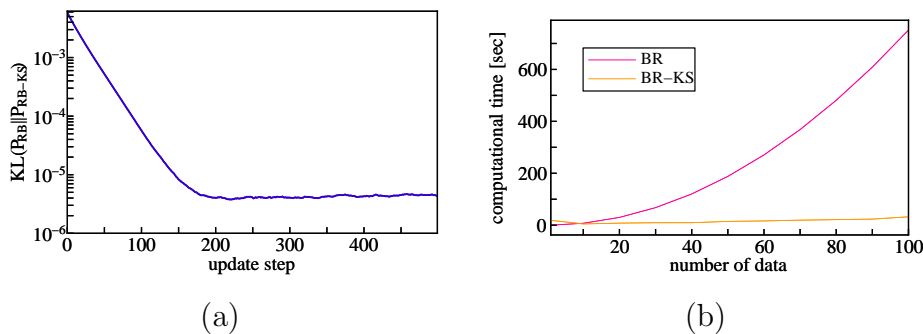


図1: Roux and Bengioの基準による学習アルゴリズム (BR) と提案アルゴリズム (BR-KS) との比較実験結果．学習データ数  $M = 100$  でBRとBR-KSそれぞれで学習したRBMの分布の間のKL 情報量の試行回数100回の平均値のパラメータ更新ステップに対するプロット (a) とBRとBR-KSそれぞれの学習に要した計算時間の試行回数10回の平均値の学習データ数  $M$  に対するプロット (b) ．

## 参考文献

- [1] N. Le Roux and Y. Bengio: Representational Power of Restricted Boltzmann Machines and Deep Belief Networks. *Neural Computation*, Vol.20, No.6, pp.1631-1649, 2008.
- [2] M. Sugiyama, S. Nakajima, H. Kashima, P. von Bünau, and M. Kawanabe: Direct Importance Estimation with Model Selection and Its Application to Covariate Shift Adaptation. In J. C. Platt, D. Koller, Y. Singer, and S. Roweis (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems 20*, pp.1433-1440, 2008.