

Influence of Weights of Mutual Coupling Part in Supervised Learning of Recurrent Neural Networks using BPWT

Kazuma Yamamoto and Katsunari Shibata, Oita University

Abstract: BPTT is the most popular learning method for recurrent neural networks, but it is so impractical that it has to trace back to the past for learning. BPWT (Back Propagation With Time) is an alternative to solve this problem. By introducing the causality traces that hold past important inputs, learning can be done using the error signals that propagate backward with time without interrupting the flow of time. However, it was observed that the learning performance of BPWT becomes worse when the self-feedback connection weights are decided randomly instead of setting a positive value. Then the two cases were compared referring to the case of BPTT, it was found that the hidden neurons' outputs fluctuate frequently and the traces cannot represent the past input signals appropriately when the self-feedback weights are decided randomly.

1 はじめに

近年、パターン認識の分野を中心に Deep Learning が注目を集めているが、音声認識などの時系列パターンの認識の学習においてはリカレントニューラルネット (RNN) を導入することで、大きな成果を挙げている¹⁾。しかし、RNN の一般的な学習方法の BPTT (Back Propagation Through Time) は時間を遡って学習し、多くの計算量とメモリ量を要求されるため、実用的でない。一方、Force Learning では、ランダム結合の RNN に出力フィードバックを設け、そこに教師信号の情報を載せることで、RNN 内部のフィードバック (FB) 部分の学習を行わず、出力ニューロンへの重み値の学習だけで複雑な時系列パターンの生成を学習することに成功している²⁾。しかしながら、ネットワーク内部で必要となるダイナミクスを作り出すためには、誤差信号を出力からネットワーク内部へ逆伝搬する必要があると筆者らは考えている。

そこで、筆者らのグループでは、各ニューロン単位で、ニューロンの出力の変化が大きいときの入力を取り込み、変化が小さいときにはそれを保持する因果トレースを利用することで過去に遡らずに学習することを提案してきた^{3) 4)}。また、その際、誤差信号の伝搬を FB 結合を通して逆伝搬するものの、時間を遡らずに時間の経過とともに逆伝搬させることを提案してきた⁴⁾。本論文では、これを BPWT (Back Propagation With Time) と名付ける。

われわれはこれまで、RNN の「情報の記憶能力」を重視し、FB 部の相互結合の重み値を 0 にし、セルフ FB の初期重み値のみ誤差信号が消失、発散しないような値に設定してきた⁵⁾。しかしながら、より複雑なダイナミックパターンの学習による生成を容易にするため、FB 部の結合重み値を全てランダムに設定したところ、逐次的に入力する簡単な EXOR 問題でも、BPWT の学習性能が BPTT に比べて極端に落ちることがわかった。そこで、本論文では、BPWT における相互結合部の重み値が学習にどのように影響するのかを、BPTT の場合と比較しながら明らかにする。

2 因果トレースを使用した BPWT

2.1 BPWT

BPTT は学習時に、過去の各ニューロンへの入力を全て記憶し、それと時間を遡って逆伝搬してきた誤差信号を使って学習する。それに対し、BPWT は過去の重要な入力の情報を保持する因果トレースを導入することで、誤差信号を逆伝搬するものの、時間の経過とともに伝搬し、その誤差信号と因果トレースを用いて学習する。

BPTT と BPWT の中間層ニューロン間の誤差信号の伝搬を、静的なニューロンの場合を仮定して説明する。RNN の出力を計算する際の順伝搬では Fig. 1(a) のように時刻 $t - 1$ の中間層ニューロンの出力が、時刻 t の中間層ニューロンの入力となる。BPTT の誤差信号 δ は Fig. 1(b) のように順伝搬と逆の方向に、時刻 t の中間層ニューロンの入力部から出た信号が時刻 $t - 1$ の中間層ニューロンの出力部に入る。一方で、BPWT の誤差信号の伝搬は Fig. 1(c) のように時刻 t の中間層ニューロンの入力側から出た信号が次の時刻 $t + 1$ に中間層ニューロンの出力側から信号が入っている。このことから、BPTT と同様に誤差信号は逆伝搬するが、時間は進み、順伝搬の計算と並行に行うことができる。

ここで、BPWT の具体的な計算法を述べる。本研究では、3 層の RNN を用いているため、中間層ニューロンがある層を h 、出力ニューロンがある層を o と表記する。注目層のニューロン数を N と表す。そして、中間層の誤差信号 $\delta_{j,t}^{(h)}$ を次のように計算する。

$$\begin{aligned} \delta_{j,t}^{(h)} &= \delta_{1,t}^{(o)} w_{1,j}^{(o)} f'(u_{j,t}^{(h)}) \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N^{(h)}} \delta_{k,t-1}^{(h)} w_{k,j}^{(h)} g_{k,j,t}^{(h)} \end{aligned} \quad (1)$$

式 (1) の右辺第 1 項は上の層から伝搬してきた誤差信号であり、第 2 項は前の時刻 $t - 1$ の同一層から伝搬してきた誤差信号である。また、 g は過去の $f'(u)$ を保持しているものであり、後の式 (4) のように計算する。

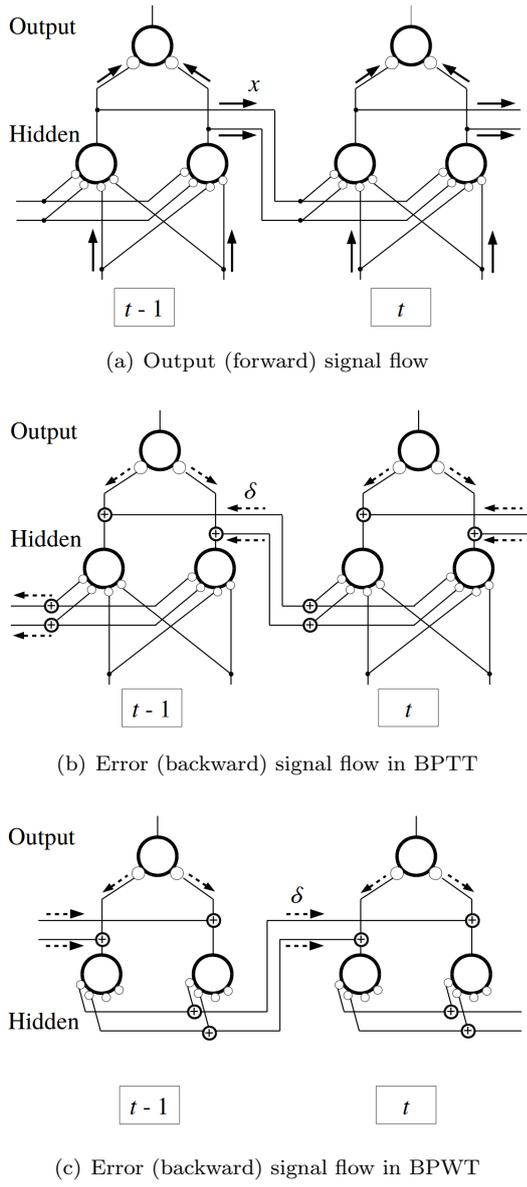


Fig. 1 The difference in propagation of error signal between BPTT and BPWT

2.2 因果トレース

因果トレースは、出力の変化が大きい時を重要なイベントとし、各ニューロン毎にその際の入力を保持する。因果トレース $c_{j,i,t}^{(h)}$ は次のように計算する。

$$c_{j,i,t}^{(h)} = (1 - |\tilde{\Delta}x_{j,t}^{(h)}|) c_{j,i,t-1}^{(l)} + |\tilde{\Delta}x_{j,t}^{(h)}| \frac{(x_{i,t}^{(h-1)} + x_{i,t-1}^{(h-1)})}{2} \quad (2)$$

$$\tilde{\Delta}x_{j,t}^{(h)} = \frac{\Delta x_{j,t}^{(h)}}{(x_{j,max,t}^{(h)} - x_{j,min,t}^{(h)})} \quad (3)$$

ここで、 $\Delta x_{j,t}^{(h)} = x_{j,t}^{(h)} - x_{j,t-1}^{(h)}$ である。式 (2) の右辺第 1 項が過去のトレースの保持、第 2 項が出力の変化の前後

での入力の変化の取り込みを表している。式 (3) は学習初期のニューロンの出力の変化が小さいことを補正するために行う $\Delta x_{j,t}^{(h)}$ の正規化である。 $x_{j,max,t}^{(h)}$ 、 $x_{j,min,t}^{(h)}$ は時刻 t までの j 番目の中間層ニューロンの出力の最大値、最小値である。

誤差伝搬時に用いる $f'(u)$ も過去の値を使うため、 $f'(u)$ 用の因果トレース $g_{j,i,t}^{(h)}$ を用意し、以下のように計算する。そして、式 (1) の誤差信号の伝搬に用いる。

$$g_{j,i,t}^{(h)} = (1 - |\tilde{\Delta}x_{j,t}^{(h)}|) g_{j,i,t-1}^{(h)} + |\tilde{\Delta}x_{j,t}^{(h)}| f'(u_{i,t-1}^{(h)}) \quad (4)$$

結合元のニューロンがその出力を変化させやすい状態にあるかどうかによって誤差伝搬を変える必要があるという考えから、結合先のニューロンの出力の変化にしたがって結合元のニューロンの $f'(u)$ を保持している。

2.3 重み値の更新

BPWT によって計算された式 (1) の誤差信号と式 (2) の因果トレースを用いて、重み値を次のように更新する。

$$\Delta w_{j,i}^{(h)} = \eta \delta_{j,t}^{(h)} c_{j,i,t}^{(h)} \quad (5)$$

このように、BPWT では誤差信号を時間とともに伝搬し、過去の入力を保持した因果トレース $c_{j,i,t}^{(h)}$ を用いることで、過去の入力を全て記憶し、学習時に時間を遡る必要がない。出力ニューロンは重み値の更新で過去の入力を記憶する必要がないため、因果トレースは使用せず、誤差信号 $\delta^{(o)}$ と中間層ニューロンの出力 $x^{(h)}$ から計算する。

3 シミュレーション設定

BPTT と BPWT のそれぞれの学習方法を使用し、中間層の FB 部の初期重み値を全てランダムにした場合 (Random) とセルフ FB 部のみを 4.5 にし、他の FB 部はランダムにした場合 (Self FB(+)) で EX-OR を学習させた。セルフ FB 部の初期重み値は、誤差信号が伝搬中に発散、消滅しないように $f'(u)$ の最大値 0.25 から求めた値である 4.0 付近で、学習の成功回数の多かった 4.5 を用いた。

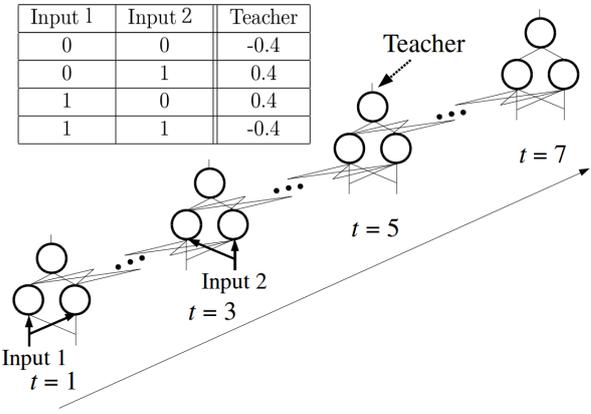


Fig. 2 Learning of sequential EXOR using an RNN

EXOR問題はFig. 2で示したように、時刻 $t = 1$ で入力1、時刻 $t = 3$ で入力2が入り、 $t = 5$ で教師信号を与えて学習する。2つの入力と教師信号を与えるタイミングがずれているため、入力をRNN内部に記憶しておく必要がある。また、BPWTは教師信号を与えたあとの $t = 7$ まで前向きに誤差信号を伝搬する。

4 学習結果

学習に用いたパラメータをTable 1に示す。また、初期重み値に用いる乱数系列を200種類変えて学習させたときの学習成功回数と学習成功までにかかった試行回数の平均をTable 2に示す。Table 1に示したそれぞれの学習係数はTable 2の学習成功回数が高くなるようにある程度最適化した。Table 2の学習成功率は、Fig. 2の $t = 7$ までで1試行とし、2000試行までに教師信号と出力の誤差が4パターンとも0.05以下になれば成功とした。

Table 2を見ると、Self FB部の重み値を大きくした場合では、BPWTの学習成功までの試行回数の平均はBPTTに劣っているが、BPWTの学習成功回数は時間を遡って学習していないにもかかわらず、BPTTに近いことが確認できる。しかし、Self FB部の重み値を大きくしないRandomの場合は、BPWTの学習成功回数はBPTTよりかなり少ないことがわかる。そこで、この理由を調べるため、学習開始時の学習の様子を観察した。

Table 1 Parameters used for learning

		Random	Self FB(+)
number of neurons in each layer		(input) 2-3-1 (output)	
learning rate (hidden output)	BPTT	3.0	10.0
	BPWT	3.0	30.0
learning rate (input hidden)	BPTT	3.0	1.0
	BPWT	5.0	0.1
learning rate (hidden hidden)	BPTT	3.0	0.1
	BPWT	5.0	0.01
initial connection weight (self FB)		rand[-2.0,2.0]	4.5
initial connection weight (the others)		rand[-2.0,2.0]	

Table 2 The comparison of the rate of successful learning and average number of iterations for the success

		Random	Self FB(+)
successful learning	BPTT	129	176
	BPWT	41	173
average number of iterations	BPTT	802	391
	BPWT	1261	704

出力ニューロンとの重み値が最も大きな2つ目の中間層ニューロンに注目した。Fig. 3に、BPTTとBPWTの学習開始時の入力パターン[1,1]での1試行中のセルフFBの重み値の更新量 $\Delta w_{2,2}^{(h)}$ の時間変化を(a)中間層のFB部の初期重み値が全てランダムな場合(Random)と(b)Self FB部のみ4.5に他のFB部はランダムにした場合(Self FB(+))で示す。Fig. 3は、学習係数の違いによる重み値の更新量の違いから、(a)、(b)のBPTT、(b)のBPWTのそれぞれでy軸のスケールが異なっている。BPTTでは教師信号が与えられ誤差信号を時間を遡って伝搬していくため、時刻 $t = 5$ から $t = 0$ まで、BPWTでは時間前向きに伝搬していくため、時刻 $t = 5$ から $t = 7$ までのみプロットしている。Fig. 3(a)では、教師信号が与えられた $t = 5$ での重み値の更新量はBPTTとBPWTでほぼ同じであるが、一度伝搬すると、BPTTでは $t = 4$ (図中の \ominus)で負に更新されているのに対し、BPWTでは $t = 6$ (図中の \boxtimes)で正に更新されている。Fig. 3(b)では、学習係数の違いでBPTTとBPWTで重み値の更新量の大きさに差はあるが、符号の違いは見られない。

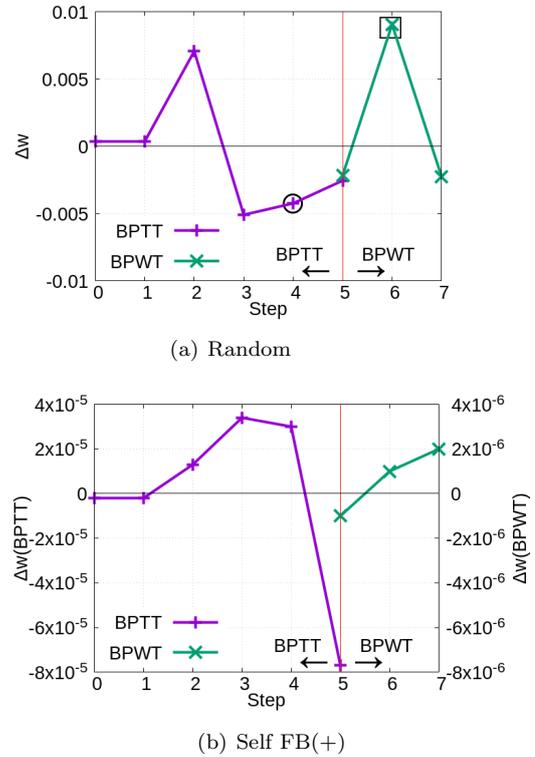


Fig. 3 The change of $\Delta w_{2,2}^{(h)}$ for the input pattern [1, 1] in the 1st episode

そこで、FB部の初期重み値が全てランダムな場合のBPTTとBPWTでの重み値の更新量の符号の違いを探る。まず、更新に用いる誤差信号をFig. 4に示す。教師信号が与えられた $t = 5$ を中心にBPTTでは時間を後ろ向きに、BPWTでは前向きに変化を追ってみると、2つで似たような誤差信号の伝搬を行っている。このことから、重み値の更新の違いは誤差信号によるものではないとわかる。

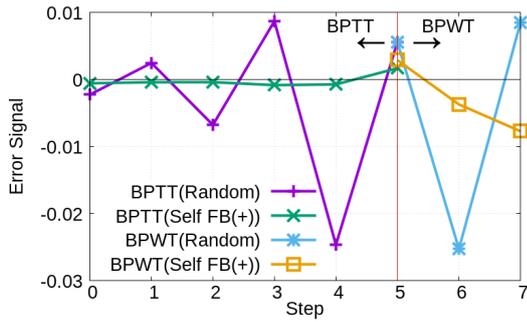
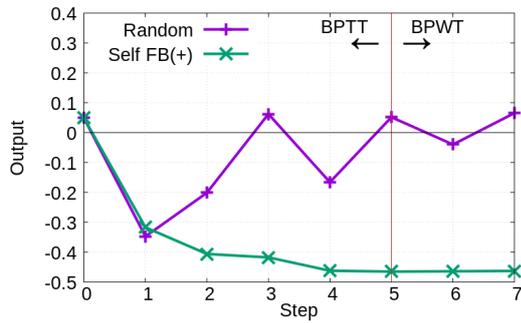
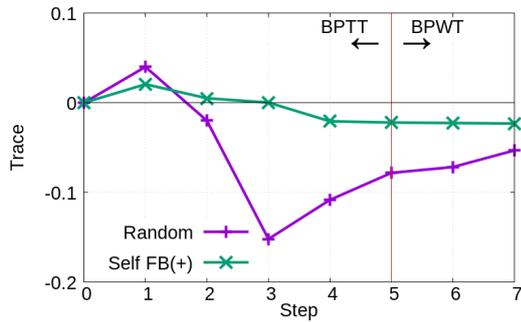


Fig. 4 The temporal change of error signal $\delta_{2,t}^{(h)}$ for the input pattern [1, 1] in the 1st episode



(a) output $x_{2,t}^{(h)}$



(b) causality trace $c_{2,4,t}^{(h)}$

Fig. 5 The temporal change of output $x_{2,t}^{(h)}$, causality trace $c_{2,4,t}^{(h)}$ for the input pattern [1, 1] in the 1st episode

次に、誤差信号と同様に BPTT の重み値の更新に用いる中間層出力とそれを取り込んで BPWT の重み値の更新に用いる因果トレースのグラフを Fig. 5 に示す。Fig. 5(b) の因果トレースの Random と Self FB(+) のそれぞれは、Fig. 5(a) の Random と Self FB(+) のそれぞれの出力の時刻 $t-1$ での値を取り込む。

まず、Random の場合について BPTT と BPWT を比較する。Fig. 3(a) で注目した時間 (BPTT: $t=4$, BPWT: $t=6$) での重み値の更新に用いた入力と因果トレースを見ると、Fig. 5(a) の Random の $t=3$ では正であるが、Fig. 5(b) の Random の $t=6$ で因果トレースは負となっ

ている。このため、Fig. 3(a) で見られた重み値の更新量の符号の違いが生じていた。Fig. 5(a) の Random を見ると、 $t=2$ 以降の出力が 1step 毎に符号が変わり続けているが、Fig. 5(b) の Random では、因果トレースは最初正の値をとり、 $t=2$ 以降は負である。入力がこのように大きく変動してしまうと因果トレースでは過去の入力の情報を有効に記憶することが難しくなる。また、このような出力では、教師信号の時間を可変にすると BPTT でも学習が難しくなると考えられる。

次に、Self FB(+) の場合について BPTT と BPWT を比較する。BPTT は Fig. 5(a) の Self FB(+) の $t=3$ では負の入力、BPWT は Fig. 5(b) の Self FB(+) の $t=6$ を見ると、因果トレースが負であるため、Fig. 3(b) でも符号の違いは見られなかった。Self FB 部の重み値を大きくした場合は、Fig. 5(a) の Self FB(+) のように出力は緩やかに変化するため、Fig. 5(b) のように因果トレースは出力の変化を追うように入力を取り込むことができている。

5 結論

本論文では、2つの相互結合部の初期重み値の設定で BPWT と BPTT の学習の様子を比較し、生じる問題を示した。相互結合部の初期重み値が完全にランダムな値だと 1step 毎にニューロンの出力の符号が変化してしまうことで、因果トレースが有効に入力を記憶することができず、BPWT では学習が困難であった。それに対し、セルフ FB の初期重み値が大きな設定ではニューロンの出力が緩やかなため、BPWT でも簡単な問題で BPTT に近い学習成功回数を記録することができた。

しかし、セルフ FB 部の重み値が大きいと、相互結合間の学習による複雑なダイナミクスの獲得は難しいと考えられるため、今後はニューロンの出力の変化が緩やかな動的なニューロンを RNN に導入し、BPWT を使用した学習で相互結合間の学習ができるか検討していく。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 (15K00360) の補助を受けた

参考文献

- 1) Hannun, A., Case, C. and Gasper, J. et al. : Deep-Speech: Scaling up end-to-end speech recognition, arXiv:1412.5567, 2014
- 2) Sussillo, D. and Abot, L. F. : Generating Coherent Patterns of Activity from Chaotic Neural Networks, *Neurons* 63 544-557, 2009
- 3) Samsudin, M.F. et al. : Practical Recurrent Learning (PRL) in the Discrete Time Domain, *Neural Information Processing, LNCS*, 4984 : 228-237, 2007
- 4) Shibata, K. : Causality Traces for Retrospective Learning in Neural Networks - Introduction of Parallel and Subjective Time Scales, *Proc. of IJCNN 2014*, pp.2268-2275, 2014
- 5) Shibata, K. and Utsunomiya, H. : Discovery of Pattern Meaning from Delayed Rewards by Reinforce-

ment Learning with a Recurrent Neural Network,
Proc. of IJCNN2011, 1445-1452, 2011 など