

実数値 GA を活用した深層学習モデルにおけるパラメータとイン プットデータの重要度の推計

Estimation of importance of parameters and input data in deep learning models using real-coded GA

小畑崇弘¹ 倉橋節也¹
Takahiro Obata¹ Setsuya Kurahashi¹

¹ 筑波大学大学院ビジネス科学研究科
¹ University of Tsukuba

Abstract: 近年、画像解析の分野をはじめとして深層学習モデルへの期待が高まる一方、複雑なブラックボックスモデルであることに対する懸念も指摘されてきており、モデルの解釈性・説明性に関する研究が盛んに行われている。本研究では、深層学習モデルのパラメータ推計に実数値 GA を適用し、実数値 GA の遺伝子の分散を活用した変数選択手法を活かして深層学習モデル内におけるインプットデータの重要度を定量的に評価できる仕組みを構築し、モデルの解釈性向上を目指す。

1 はじめに

近年、様々な分野で機械学習の手法が活用されてきており、中でも画像解析や音声認識といった分野を中心に深層学習モデルの活用が広がっている。一方で、これらのモデルが複雑なブラックボックスモデルであることに対する懸念も指摘されてきており、モデルの解釈性・説明性に関する研究が盛んに行われている [1].

本研究では、深層学習モデルのパラメータ推計に実数値遺伝的アルゴリズム (実数値 GA,RCGA) を適用し、RCGA の遺伝子の分散を活用した変数選択手法を活かして深層学習モデル内におけるインプットデータの重要度を定量的に評価できる仕組みを構築し、モデルの解釈性向上を目指す。

本稿の構成は次の通りである。Section 2 で、関連研究として深層学習モデルにおける各インプットデータの貢献を測る手法の一つである LRP および RCGA の遺伝子の分散を活用した変数選択基準 I 値について概略する。Section 3 では深層学習モデルの解釈性を高める新たな手法を提案する。Section 4 は提案手法を活用することで期待される成果についてである。

2 関連研究

2.1 Layer-Wise Relevance Propagation

深層学習モデルの解釈性・説明性を向上させる研究では、出力から入力を逆に辿ることでモデルの出力に大きな影響を与えるインプットデータを特定する手法

が多く提案されている。代表的な手法の一つに LRP (Layer-Wise Relevance Propagation) がある [2].

LRP は、各層ごとに出力に対する各入力への貢献 (Relevance) の総和を計算してそれを前の層に伝搬させる処理を入力層まで繰り返すことで出力に大きな影響を与えるインプットデータを特定しようとする手法である。

LRP の詳細に入る前に深層学習モデルを定式化から始める。深層学習モデル内のあるノード j からの出力を x_j とし、活性化関数を g で表すとすると、 x_j は次のように表せる。

$$x_j = g\left(\sum_i w_{ij}x_i + b\right) \quad (1)$$

ここで w_{ij} はノード i からノード j に向けた出力に対する深層学習モデル内でのウェイトを表す。入力データセット x が深層学習モデル f を経て出力される結果を $f(x)$ とすると、その出力に対する各入力データ p の貢献は次式のように表せる。

$$f(x) \approx \sum_p R_p^{(1)} \quad (2)$$

次に LRP を定式化する。深層学習モデル内の層 l にあるノード i の貢献は

$$R_i^{(l)} = \sum_j \frac{z_{ij}}{\sum_{i'} z_{i'j}} R_j^{(l+1)} \text{ with } z_{ij} = x_i^l w_{ij}^{(l,l+1)} \quad (3)$$

と表せる。さらにこれを改良した手法も幾つか提案されており、 z の符号ごとに計算する手法が数式 (4) で

ある.

$$R_i^{(l)} = \sum_j \left((1 + \beta) \frac{z_{ij}^+}{\sum_{i'} z_{i'j}^+} - \beta \frac{z_{ij}^-}{\sum_{i'} z_{i'j}^-} \right) R_j^{(l+1)} \quad (4)$$

2.2 RCGA の遺伝子の分散を活用した変数選択基準

遺伝的アルゴリズムは進化計算の一種で、環境に適応した生物が生き残り、適応できなかった生物が死滅する自然淘汰の考え方が取り入れられており [3], (1) 目的関数の微分可能性を仮定する必要がない, (2) 大域的探索が可能, といった特徴を持つ.

GA では遺伝子型として古くから 0 と 1 によるビットコーディングが使われてきたが, 実数値を扱う最適化問題では解探索に無駄が生じる可能性が指摘されてきた. こうした指摘に対応したのが, 遺伝子型として実数値ベクトルを扱う RCGA である [4].

RCGA でパラメータ推定を行う際に, RCGA の遺伝子の分散を変数選択に活用する方法を検討した研究に [5] がある. [5] では, (5) 式で表される I 値を提案し, I 値が線形重回帰モデルにおける T 値の 2 乗に比例することを確認した.

$$I_i = \frac{\nu_i^2}{V_{gi}} \quad (5)$$

I_i は分析モデル内のあるパラメータ a_i に対する I 値である. ν_i はパラメータ a_i の推定値, V_{gi} は同一世代内の個体のパラメータ a_i に対応する遺伝子の分散を表す.

3 分析方法

本稿では研究の端緒として, 回帰予測を行う深層学習モデルを扱う.

まず, RCGA により深層学習モデルの各層をつなぐネットワークのウェイトを推定する. 次に, 一定世代数 RCGA を進めるごとに前述の LRP と I 値を組み合わせた (6) 式または (7) 式の値を計算する.

$$R_i^{(l)} = \sum_j \frac{I_{ij} z_{ij}}{\sum_{i'} z_{i'j}} R_j^{(l+1)} \quad (6)$$

$$R_i^{(l)} = \sum_j I_{ij} \left((1 + \beta) \frac{z_{ij}^+}{\sum_{i'} z_{i'j}^+} - \beta \frac{z_{ij}^-}{\sum_{i'} z_{i'j}^-} \right) R_j^{(l+1)} \quad (7)$$

RCGA が終了した時点で改めてこの 2 種類の値を計算し, 出力に対する入力データの貢献を評価する.

なお, 本稿では RCGA の世代交代モデルとして Just Generation Gap (JGG) を, 交叉モデルとして AREX を用いた [6][7][8]. JGG と AREX の組み合わせは解の探索能力に優れた代表的な組み合わせである.

4 期待される成果

本稿で提案した手法によって, 深層学習モデル内のネットワークを通じて伝わる値の大きさだけでなく, その有意性を加味して出力に対する各入力データの貢献を評価できるようになると考えられる. 提案手法により, 機械学習における解釈性向上とともに説明の信頼性を高める効果も期待できる.

今後は LRP と I 値を組み合わせる方法で別のやり方を検討するとともに, LRP 以外の深層学習モデル解釈手法との組み合わせも検討していきたいと考えている.

参考文献

- [1] 原聡 : 機械学習における解釈性, 人工知能学会誌 33(3), pp. 366–369, (2018)
- [2] Alexander Binder et al: *Layer-Wise Relevance Propagation for Deep Neural Network Architectures*, Information Science and Applications (ICISA) pp. 913-922 (2016)
- [3] David E. Goldberg : *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison Wesley Longman Publishing Co. Inc., (1989)
- [4] Alden H. Wright : *Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization*, Foundations of Genetic Algorithms, pp. 205-218 (1991)
- [5] Takahiro Obata and Setsuya Kurahashi: *A Study of Variable Selection within A Framework of Real-coded Genetic Algorithm*, 2018 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (IEEE SMC 2018)
- [6] 秋本洋平, 羽佐田理恵, 佐久間淳, 小野功, 小林重信 : 多親を用いた実数値 GA のための世代交代モデル ~ *Just Generation Gap (JGG)* の提案と評価 ~, SICE 第 19 回自律分散システムシンポジウム資料, pp. 341-346 (2007)
- [7] 秋本洋平, 羽佐田理恵, 佐久間淳, 小野功, 小林重信 : 適応的実数値交叉 AREX の提案と評価, 人工知能学会誌 24(6), pp. 446–458, (2009)
- [8] Youhei Akimoto, Jun Sakuma, Isao Ono, and Shigenobu Kobayashi : *Adaptation of expansion rate for real-coded crossovers*, Proc. of the 11th Annual Conf. on Genetic and Evolutionary Computation (GECCO'09), pp. 739-746 (2009)