

Noisy-OR, AND ゲートを用いた ベイジアンネットワークにおける特徴のプーリング

Feature pooling in a Bayesian network with noisy-OR and noisy-AND gates

佐野崇^{1*} 一杉裕志²
Takashi Sano¹ Yuuji Ichisugi²

¹ 成蹊大学 理工学部 情報科学科

¹ Department of Computer and Information Science, Faculty of Science and Technology,
Seikei University

² 産業技術総合研究所 人工知能研究センター

² National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),
Artificial Intelligence Research Center

Abstract: Bayesian network is a promising model of cerebral cortex. However, in ordinary Bayesian networks, the number of parameters increases exponentially against the number of parent nodes in each conditional probability table (CPT), which prohibits employing a large-scale Bayesian network. Restricting CPTs is an approach for scaling-up Bayesian networks. In this paper, we restrict CPTs to noisy-OR and noisy-AND gates, both of which have $\mathcal{O}(N)$ parameters against the number of parent nodes N . In order to investigate the representational power of this Bayesian network, we construct a network which can pool the features of the input data, by mimicking the early visual cortex. In this model, a gating mechanism is realized by the noisy-AND gates. We show that the model can acquire translation-invariant responses by the standard gradient ascent method.

1 はじめに

脳の計算機構の解明、特に言語処理や思考といった高次機能を司る大脳皮質計算原理の解明は、汎用人工知能実現の近道である。大脳皮質は確率的情報処理を担うと考えられており、確率的因果関係をグラフとして表現し、グラフに沿った局所計算によって推論や学習を行うベイジアンネットワーク [1] によるモデル化が有力である [2, 3, 4]。

ところが、一般に密な接続のあるベイジアンネットワークの推論は難しく、大規模化が困難である。そこで、ベイジアンネットワークに何らかの制限を与え、高速に推論や学習ができ、かつ表現力が損なわれないモデルの構築が重要である。著者らはこれまで、BESOM(Bidirectional Self-Organizing Map) という、大

脳の構造を模倣した制限付きベイジアンネットワークを開発してきた [3, 4]。BESOM バージョン 3 では、条件付き確率表 (CPT) を大きく制限することで、高速な推論を可能にした [5]。一方で、表現力の問題があり、パターン認識の精度が向上しないという欠点もあった。

BESOM の現在開発中のバージョン 4 では、noisy-OR と noisy-AND という 2 種類の CPT を組み合わせる [6, 7]。Noisy-OR、noisy-AND とともに、1 つの CPT のパラメータ数が、親変数の数について線形にしか増大しない。完全な CPT では指数的にパラメータが増大するので、大規模化に向けた CPT モデルである。さらに、神経細胞の樹状突起において、OR や AND のような論理演算の可能性が指摘されており、それとの対応も興味深い [8]。

経験的には、noisy-OR だけでは表現力が不十分であるが、noisy-AND と組み合わせることで表現力が十分なると思われてきた。しかし、このモデルの実際の表現力については未検証な部分も多かった。本研究では、モ

* 連絡先: 成蹊大学理工学部
180-0001 武蔵野市吉祥寺北町 3-3-1
E-mail:tsano@st.seikei.ac.jp

デルの表現力を確認するために、視覚における特徴プーリング機構が、noisy-OR と noisy-AND CPT を組み合わせることで実現可能であることを、具体的なモデルを構築して示す。このモデルでは、複数の特徴をプーリングするノードと、個々の特徴に対応する制御ノードが noisy-AND ゲートで統合されることが特徴である。

2 関連研究

少ないパラメータに依存する制限された CPT は canonical models と呼ばれる [1]。文献 [9] は、canonical models の最近のレビューであり、noisy-AND ゲートの詳しい定式化がある。

BESOM バージョン 4 として、noisy-OR と noisy-AND を組み合わせることは、[6, 7] で提案された。これらの論文では、ベイジアンネットワークを直接扱うのではなく、その定性的な振る舞いを記述する疑似ベイジアン認知回路 (Quasi Bayesian Cognitive circuits: QBC) が用いられた。QBC は、noisy-OR と noisy-AND ゲートで構成されたベイジアンネットワークを簡略化したものであり、CPT をゼロと非ゼロの 2 値のみで表現する。充足可能性問題 (SAT) を解くことでネットワークの可能な状態を判定することができ、どのような推論結果が得られるか推定できる。[6, 7] では、構文解析の問題に対し、QBC は十分な表現力があることが確認された。

本研究では、構文解析とは異なる問題として、視覚系の位置不変性が獲得できるか考察を行う。特に、QBC ではなくベイジアンネットワークを扱い、学習が可能かどうかの検証を行う。著者らの以前の研究 [10] でも並進不変性を持つベイジアンネットワークを構成したが、本研究ではゲート機構を用いた構成を行い、以前の研究とはモデルが異なる。

3 Noisy-OR, Noisy-AND ゲート

確率変数 $X \in \{0, 1\}$, $\mathbf{Z} = \{Z_1, \dots, Z_N\} \in \{0, 1\}^N$ に対して、条件付き確率分布 $P(X|\mathbf{Z})$ を考える。次の形の条件付き確率分布を、noisy-OR ゲートという [1]。

$$P_{\text{OR}}(X = 1|\mathbf{Z}) = 1 - (1 - \mu_0) \prod_{i=1}^N (1 - \mu_i)^{Z_i} \quad (1)$$

$$P_{\text{OR}}(X = 0|\mathbf{Z}) = 1 - P_{\text{OR}}(X = 1|\mathbf{Z}) \quad (2)$$

パラメータ $\mu_i \in [0, 1] (i = 1, \dots, N)$ は親変数 Z_i の寄与の大きさを表している。 μ_0 はリーク確率を表し、親変数の状態に関わらず X が活性化する確率に対応する。

Noisy-AND ゲートは次のように定義される [1, 9]。

$$P_{\text{AND}}(X = 1|\mathbf{Z}) = (1 - \nu_0) \prod_{i=1}^N (1 - \nu_i)^{1-Z_i} \quad (3)$$

$$P_{\text{AND}}(X = 0|\mathbf{Z}) = 1 - P_{\text{AND}}(X = 1|\mathbf{Z}) \quad (4)$$

$\nu_i \in [0, 1]$ はパラメータである。Noisy-OR ゲートとは、 $X = 0, 1$ の確率と \mathbf{Z} の真偽値が反転した関係になっている ($1 - Z_i$ は Z_i の否定である)。この双対関係は、論理 OR と論理 AND の間のド・モルガンの法則と対応している。

Noisy-OR, noisy-AND ゲートはどちらも、親変数の個数 N に対して $N + 1$ 個のパラメータを持つ。これは、完全な CPT が $\mathcal{O}(2^N)$ 個のパラメータを必要とすることと対照的である。さらに、 $N + 1$ 個のパラメータの解釈も容易である。すなわち、 N 個のパラメータはそれぞれ、 N 個の親変数から子変数 X へ引かれた矢印に対応し、子変数の状態決定にどの程度寄与するかを表している。残る 1 個のパラメータは、親変数に依存しないバイアスパラメータである。

4 特徴プーリング

識別モデルに期待される機能の一つとして、特徴のプーリングがある。大脳皮質の 1 次視覚野には、線分の位置に強く依存して応答する単純型細胞と、線分の位置にはあまり依存しない複雑型細胞があることが知られている [11]。これは、いくつかの単純型細胞がとらえた特徴が複雑型細胞にプーリングされ、並進不変性が獲得されていると解釈することができる。ネオコグニトロン [12] をはじめとする工学的モデルは、このような視覚系の構造を模しており、最先端の画像認識モデルとなっている。このことから、脳のモデルとして妥当であり、かつ工学的にも有用な認識モデルとしてのベイジアンネットワークは、並進不変性に代表される特徴プーリングが可能である必要がある。

Noisy-OR と noisy-AND CPT を組み合わせ、簡略化した視覚系を模したネットワークを図 1 に示した。このネットワークは、 2×2 ピクセルの入力変数 \mathbf{X} 、位置によらず縦線分と横線分にそれぞれ応答する 2 つの親変数 $\mathbf{U} = (U_V, U_H)$ 、4 つの制御変数 \mathbf{C} 、8 つのゲート変数 \mathbf{G} を含む。制御変数は、 $\mathbf{C}_V = (C_{V1}, C_{V2})$ はそれぞれ左、右の縦線分に相当し、 $\mathbf{C}_H = (C_{H1}, C_{H2})$ はそれぞれ上、下の横線分に相当する。ゲート変数が 8 個あるのは、縦横 (V, H) の 2 種の特徴と、4 つの入力変数の数に対応している。

このベイジアンネットワークの同時確率分布は次のよ

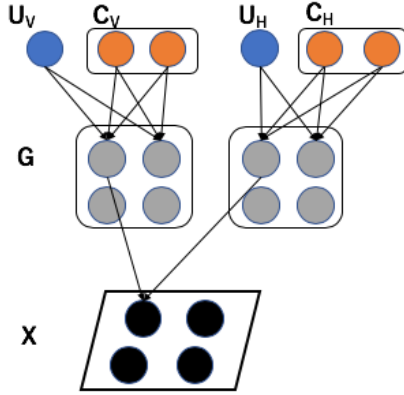


図 1 位置不変な特徴をプーリングするベイジアンネットワーク

うになる。

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{X}, \mathbf{U}, \mathbf{C}, \mathbf{G}) &= \prod_i P_{\text{OR}}(X_i | G_{i,V}, G_{i,H}) \\
 &\times \prod_{i,F=\{V,H\}} P_{\text{AND}}(G_{i,F} | U_F, C_F) \\
 &\times P(\mathbf{C})P(\mathbf{U})
 \end{aligned} \quad (5)$$

$P(\mathbf{C}), P(\mathbf{U})$ は事前分布である。

線分が生成される仕組みを考えると、このモデルの特徴プーリング機構が理解できる。例えば $U_V = 1$ であるとする。このとき、制御変数 $C_{V1} = 1, C_{V2} = 0$ であれば、この 3 つの状態が noisy-AND ゲートで統合され、左側縦線分、すなわち X_1, X_3 に対応するゲート変数 $G_{1,V}, G_{3,V}$ を活性化する。 X_i の状態は、 $G_{i,V}$ と $G_{i,H}$ の OR で決まる。このように、個々の特徴に対応する制御変数 \mathbf{C} と、親変数 \mathbf{U} が同時に活性化することで、noisy-AND ゲートを通じて画像 \mathbf{X} を生成する機構になっている。このような同時確率分布を用いると、認識時にも親変数 \mathbf{U} が特徴をプーリングするよう応答すると期待できる。

このモデルアーキテクチャの構築には、QBC[6, 7] によるプロトタイピングを活用した。プロトタイピングでは、変数 U_V, U_H はそれぞれ入力された縦線分、横線分に対して位置不変に応答することが確認できた。

5 数値実験

前節で提案されたベイジアンネットワークを用いて、実際に横線分、縦線分をそれぞれプーリングすることが可能であるか、そのようなパラメータの学習が可能か、検証実験を行った。

提案モデルのパラメータ数は 60 個程度であるが、それらの勾配を計算することは容易ではない。そのため、ニューラルネットワーク向けのフレームワーク

表 1 $P_{\text{OR}}(X|G)$ の例

	$G_{1,V}$	$G_{1,H}$
X_1	0.9934	0.9931

表 2 $P_{\text{AND}}(G|U, C)$ の例

	U_V	C_{V1}	C_{V2}
$G_{1,V}$	0.9686	0.9948	0.0070
$G_{2,V}$	0.9737	0.0020	0.9956
$G_{3,V}$	0.9812	0.9935	0.0049
$G_{4,V}$	0.9805	0.0081	0.9943

表 3 認識結果: $\text{argmax}_{\mathbf{U}} P(\mathbf{U}|\mathbf{X})$

	左縦	右縦	上横	下横	すべて 1	すべて 0
U_V	1	1	0	0	0	1
U_H	0	0	1	1	0	1

PyTorch*¹ を用いて自動微分機能によって勾配を計算して最適化を行った。

学習時には、線分に対応する 4 通りの可視変数 \mathbf{X} の状態を与え、それに対応する教師信号として、 \mathbf{U}, \mathbf{C} の状態を与えた。目的関数は、次の対数尤度である。

$$\begin{aligned}
 l &= \sum_{\mathbf{X}, \mathbf{U}, \mathbf{C} \in \text{batch}} \ln P(\mathbf{X}, \mathbf{U}, \mathbf{C}) \\
 &= \sum_{\mathbf{X}, \mathbf{U}, \mathbf{C} \in \text{batch}} \ln \sum_{\mathbf{G}} P(\mathbf{X}, \mathbf{G}, \mathbf{U}, \mathbf{C})
 \end{aligned} \quad (6)$$

学習するパラメータは各 CPT の μ_i, ν_i であり、事前分布は一様分布に固定した。ゲート変数 \mathbf{G} による和がこの学習において最もコストのかかる計算であり、隠れ変数 8 個に対して 256 個の状態の和を取る必要がある。

学習によって得られた重みの例を表 1, 2 に示す。重みはほぼ 1 または 0 に収束した。表 1 のように、noisy-OR ゲートの重みはほぼ 1 に収束した。また、noisy-AND ゲートの重み (表 2) を見ると、例えば $G_{1,V}$ は、 U_V と C_{V1} に強く依存し、 C_{V2} とはほぼ無関係であることが理解できる。すなわち、 $U_V = 1, C_{V1} = 1$ の組み合わせは $G_{1,V} = 1$ を導くが、 $U_V = 1, C_{V1} = 0$ のときは $G_{1,V} = 0$ の確率を大きくする。また、 C_{V2} の状態は、 $G_{1,V}$ の状態にはほぼ影響を与えない。これは、前節で述べた線分生成機構を再現しており、期待された重みが学習できたことになる。

表 3 に、学習を行ったモデルの認識結果を示した。縦線分、横線分それぞれに対して、 U_V, U_H が位置不変に応答し、特徴のプーリングが行われていることが確認できた。一方で、線分とは異なる入力に対して、 \mathbf{U} が応答

*¹ <https://pytorch.org/>

する例も確認できた。これを改善する方法については、まとめて考察する。

6 まとめ

Noisy-OR と noisy-AND ゲートを組み合わせたベイジアンネットワークにおいて、視覚系を模したモデルで、特徴のプーリングが可能であることを示した。このことは、この2種類のCPTを組み合わせた制限付きベイジアンネットワークが、大脳皮質のモデルとして十分な表現力を持っていることを示唆し、工学的にも有用な認知モデルが構成できることが期待できる。

Noisy-OR, noisy-AND ゲートはどちらも、親変数の数に対して線形にしかパラメータが増大しない。この性質は大規模化に適している。ただし、実際に大規模化するためには、隠れ変数の取り扱いに近似が必要である。このモデルの場合、ループあり確率伝播法 [13] や、ニューラルネットワークを用いた変分法 [14] が有効であると予想できる。

最後に、本論文で扱ったモデルでは、非線分入力に対しても、複雑型細胞に相当する変数が応答するという現象が確認された。この変数が線分にのみ応答するよう改善する方法はいくつか考えられる。簡単な方法としては、変数やパラメータに事前分布を与え正規化することが挙げられる。また、ネットワークの構造を変更することも有効である。本来の入力を反転させたものを付加的な入力とし、新しい隠れ変数とパラメータを追加したネットワークを用いると、線分刺激に対して排他的にUが応答するよう重みを構成できることが、QBCのレベルでは確認できている。ただし、隠れ変数の数が増加するため、近似することなく学習を行うことは難しい。このような拡張したモデルや、視覚系以外のモデルに対し、近似法を使って学習を試みるのは今後の課題である。

謝辞

産総研の高橋直人氏、中田秀基氏との議論に深く感謝いたします。

本研究はJSPS 科研費 18K18117, 18K11488 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] J. Pearl. *Probabilistic reasoning in intelligent systems: networks of plausible inference*. Morgan Kaufmann, 2 edition, 1988.
- [2] T. S. Lee and D. Mumford. Hierarchical Bayesian inference in the visual cortex. *Journal of the Optical Society of America A*, Vol. 20, No. 7, pp. 1434–1448, 2003.
- [3] Y. Ichisugi. A Cerebral Cortex Model that Self-Organizes Conditional Probability Tables and Executes Belief Propagation. In *International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, 2007.
- [4] 一杉裕志. 解説:大脳皮質とベイジアンネット. 日本ロボット学会誌, Vol. 29.5, pp. 412–415, 2011.
- [5] Y. Ichisugi and N. Takahashi. An Efficient Recognition Algorithm for Restricted Bayesian Networks. In *International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, 2015.
- [6] 一杉裕志. 疑似ベイジアンネットを用いた認知モデルのプロトタイピング手法の提案. 第4回人工知能学会 汎用人工知能研究会 (SIG-AGI), 2016.
- [7] N. Takahashi and Y. Ichisugi. Restricted Quasi Bayesian Networks as a Prototyping Tool. In *The Third Workshop on Advanced Methodologies for Bayesian Networks (AMBN)*, 2017.
- [8] C. Koch, T. Poggio, and V. Torres. Retinal Ganglion Cells : A Functional Interpretation of Dendritic Morphology. *Philosophical transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological sciences*, Vol. 298, No. 1090, pp. 227–263, 1982.
- [9] F. J. Diez and M. J. Druzdzel. Canonical Probabilistic Models for Knowledge Engineering. *Technical Report CISIAD-06-01*, 2006.
- [10] T. Sano and Y. Ichisugi. Translation-Invariant Neural Responses as Variational Messages in a Bayesian Network Model. In *The 26th International Conference on Artificial Neural Networks.*, 2017.
- [11] E. Kandel, J. Schwartz, T. Jessell, S. Siegelbaum, and A. Hudspeth. *Principles of Neural Science*. McGraw-Hill Professional, 5 edition, 2012.
- [12] K. Fukushima. Neocognitron: A self-organizing neural network model for a mechanism of pattern recognition unaffected by shift in position. *Biological Cybernetics*, Vol. 36, No. 4, pp. 193–202, 1980.
- [13] K. Murphy, Y. Weiss, and M. Jordan. Loopy-belief Propagation for Approximate Inference: An Empirical Study. In *Uncertainty in Artificial Intelligence*, 1999.
- [14] A. Mnih and K. Gregor. Neural Variational Inference and Learning in Belief Networks. In *International Conference on Machine Learning*, 2014.