

階層的な生成モデルの自己組織化を目的とする神経回路による独立成分分析の一手法

産業技術総合研究所

一杉裕志

2007-3-16

概要

- 大脳皮質がICAによって、ベイジアンネットで表現された生成モデルを自己組織化するという仮説を提案する。また、筆者が提案する大脳皮質の BESOM モデルと統合可能な具体的なICAアルゴリズムを1つ提案する。

BESOMモデル

BESOMモデル[一杉 2006]

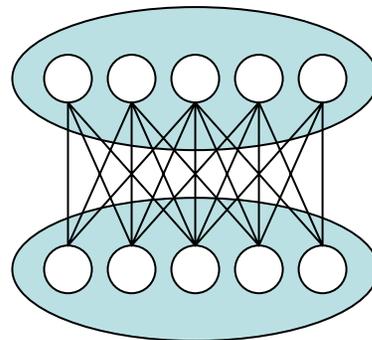
- ベイジアンネットの条件付確率表を自己組織化マップにより獲得し、近似確率伝播アルゴリズムによって外界の状態をベイズ推定する大脳皮質の神経回路モデル。
 - 大脳皮質の解剖学的構造とよく一致。
 - 大規模化が可能。
 - 記憶量 $O(s)$ 、並列計算の計算量 $O(\log s)$ 。
 - 運動野・前頭前野のモデルも構築可能。
- 計算機シミュレーションはまだ。(後述)

自己組織化マップ(SOM)とは

- 競合学習・近傍学習を特徴とする教師なし学習アルゴリズム。
- 高次元の特徴ベクトルを、低次元に圧縮。
- 視覚野の方位選択カラムのモデルを工学的に扱いやすくしたもの。

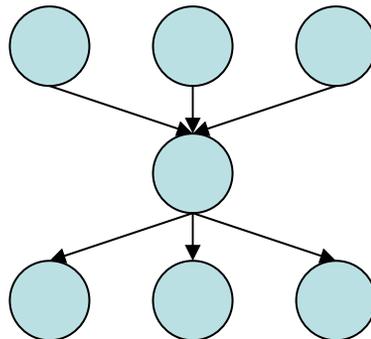
競合層

入力層



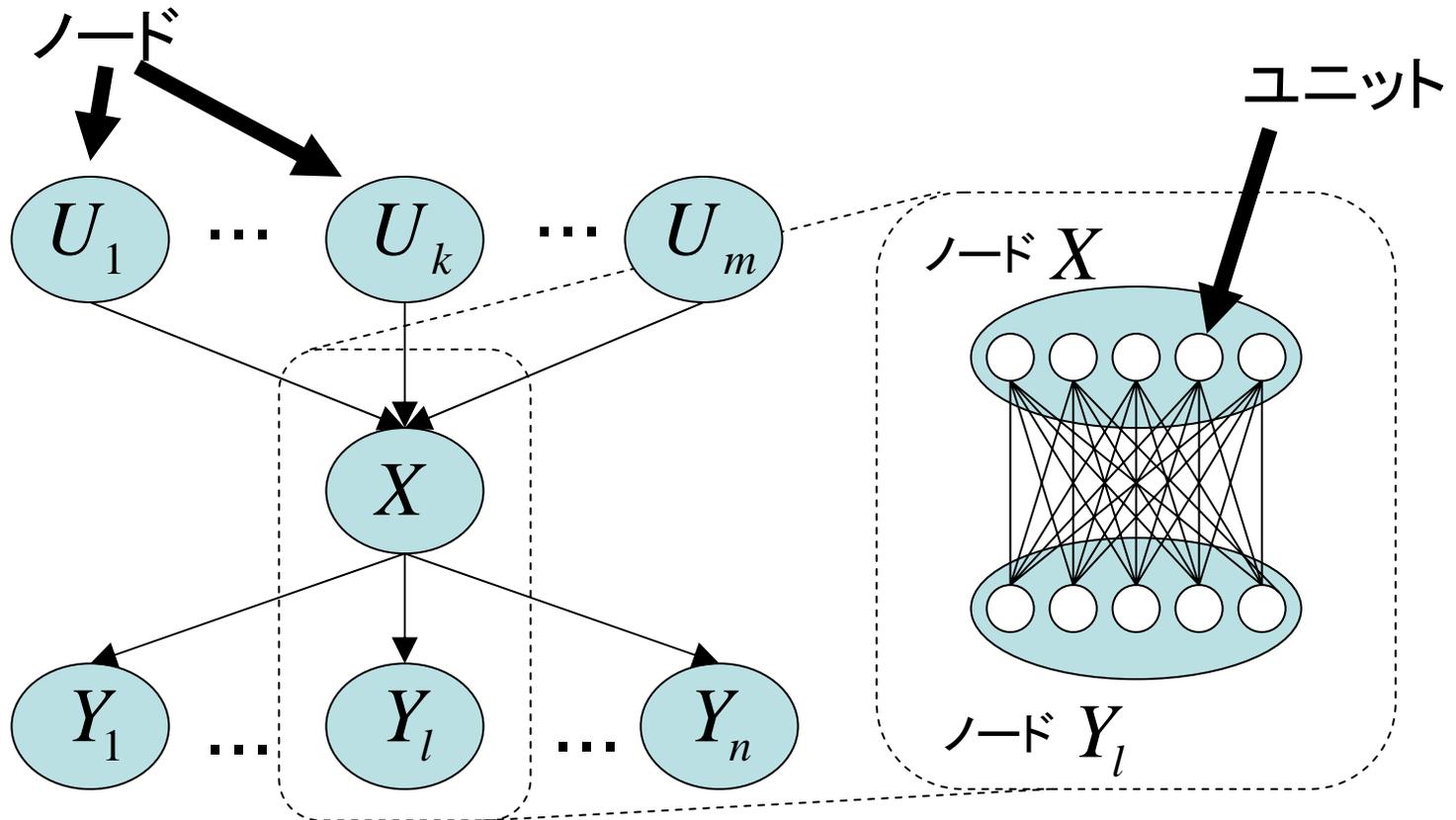
ベイジアンネットとは

- 対象を、確率変数の間の因果関係を表すネットワーク構造で表現したもの。
- 一部の確率変数の観測値が与えられると、条件付確率表を使って、他の確率変数の値をベイズ推定できる。
 - 確率伝播アルゴリズムという効率的な計算方法が使われる。
- ノイズに強いパターン認識。リアルタイム性。



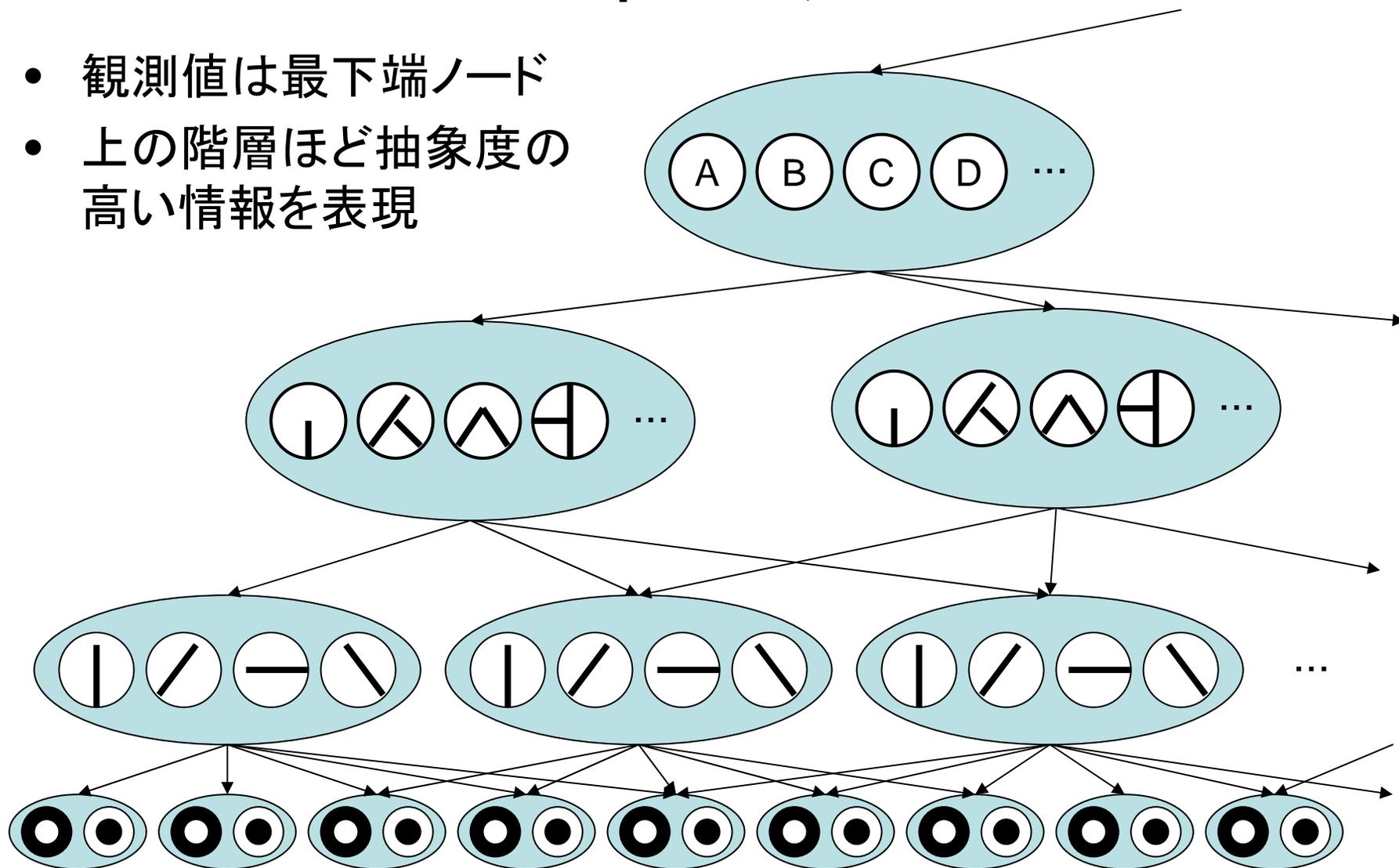
BESOM (Bidirectional SOM)

- ノードは確率変数、ユニットは確率変数の値



BESOMによる階層的なパターン認識 のイメージ

- 観測値は最下端ノード
- 上の階層ほど抽象度の高い情報を表現

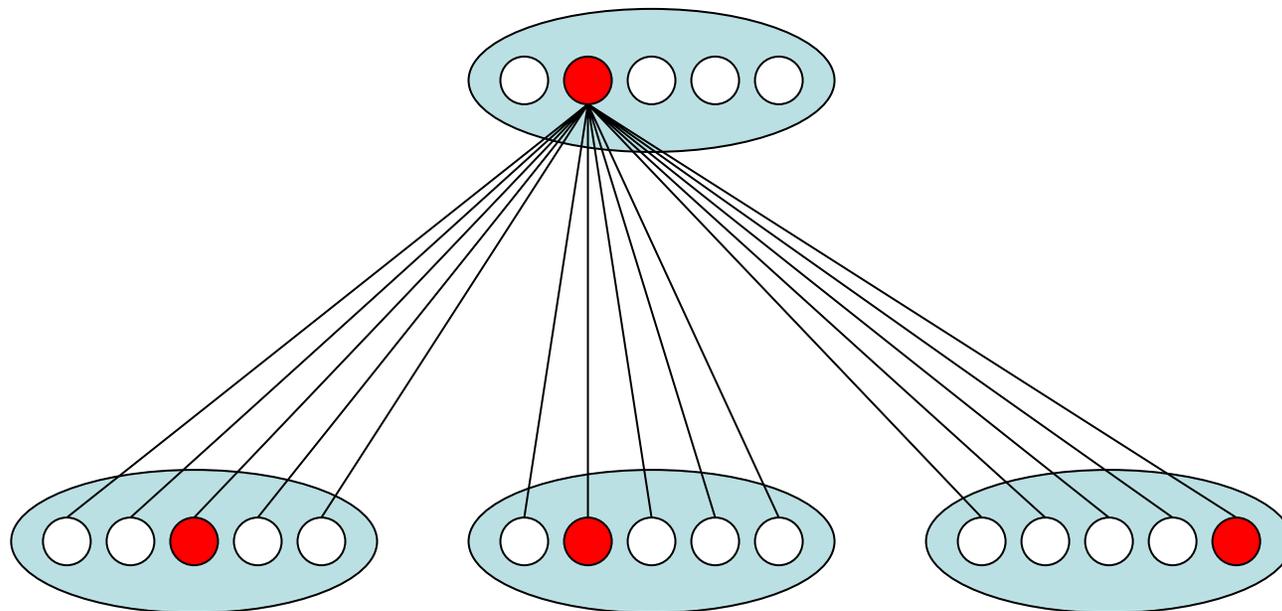


学習ステップと認識ステップ

- BESOMは2つのステップを交互に繰り返す
 - 学習ステップ
 - 各ノードがSOMの競合層として働く。
 - 子ノードから送られる入力をクラスタリングする。
 - 学習結果は条件付確率表を表し、認識ステップで使われる。
 - 認識ステップ
 - ノードのネットワークがベイジアンネットとして働く。
 - 現在の条件付確率表に基づき、近似確率伝播アルゴリズムで各ノードの値をベイズ推定する。
 - 推定結果は、学習ステップでのSOMへの入力に使われる。

学習時の入力ベクトルの例

- MAP推定の結果を0と1の値のベクトルで表現



$v = (0, 0, 1, 0, 0,$

$0, 1, 0, 0, 0,$

$0, 0, 0, 0, 1)$

赤いユニットがMAP推定結果の値

学習則

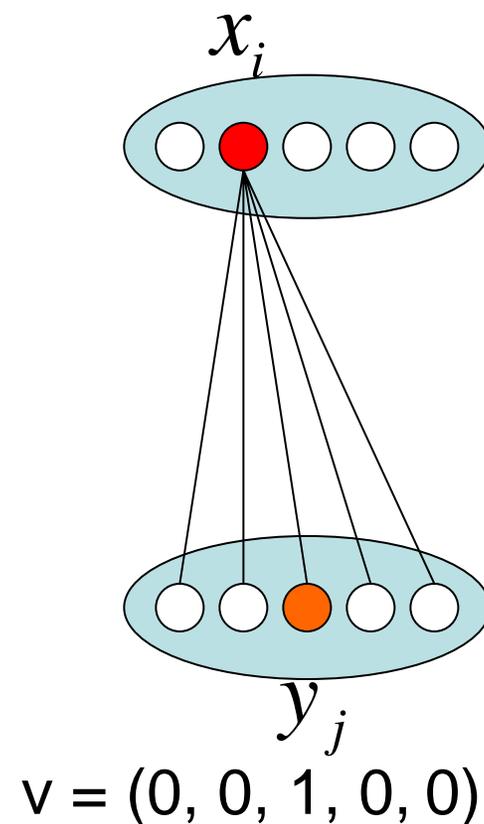
- 勝者ユニットの学習則：
 - 入力ベクトルに参照ベクトルを近づける。

$$w_{ij} \leftarrow (1 - \alpha)w_{ij} + \alpha v_j$$

- w_{ij} は条件付確率になる。

$$w_{ij} = P(Y = y_j | X = x_i)$$

- 適切な近傍関数のもと、近傍学習も行う。



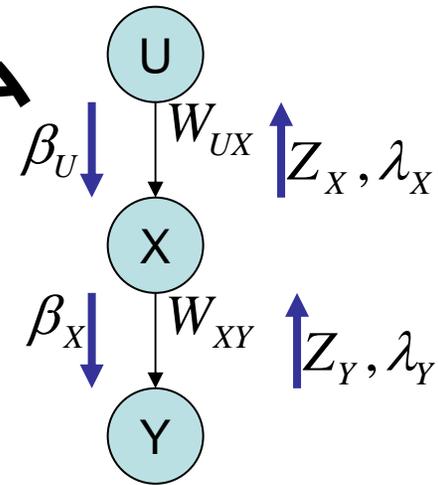
認識ステップ

- 確率伝播アルゴリズム[Pearl 1988]を下記の仮定のもと近似。
 - 仮定1: 条件付確率表が次のように近似できる。
(今後少し修正する予定。定性的には子ノードの状態を親ノードの予測のORで表現したい。)

$$P(X | U_1, \dots, U_m) \approx \sum_{i=1}^m P(X | U_i)$$

- 仮定2: 親ノード、子ノードの数は十分多い。

近似確率伝播アルゴリズム



- 周辺ノードの状態を参照して各ノードの状態を更新する。これを、状態が収束するまで繰り返す。
- W はユニット間の結合行列(固定)、 Z はスカラー値、他は長さ s のベクトル (s はノード内のユニットの数)。
- 観測値を表す最下端ノードの λ の値は固定。他のノードは適当な初期値から始める。

$$\mu_{XY}^{t+1} = \zeta_Y^t + W_{XY} \lambda_Y^t$$

$$\lambda_X^{t+1} = \prod_{Y \in \text{children}(X)} \mu_{XY}^{t+1}$$

$$\kappa_{UX}^{t+1} = W_{UX}^T \beta_U^t$$

$$\pi_X^{t+1} = \sum_{U \in \text{parents}(X)} \kappa_{UX}^{t+1}$$

$$\rho_X^{t+1} = \lambda_X^{t+1} \otimes \pi_X^{t+1}$$

$$Z_X^{t+1} = \sum_i (\rho_X^{t+1})_i \quad (= \|\rho_X^{t+1}\|_1 = \lambda_X^{t+1} \cdot \pi_X^{t+1})$$

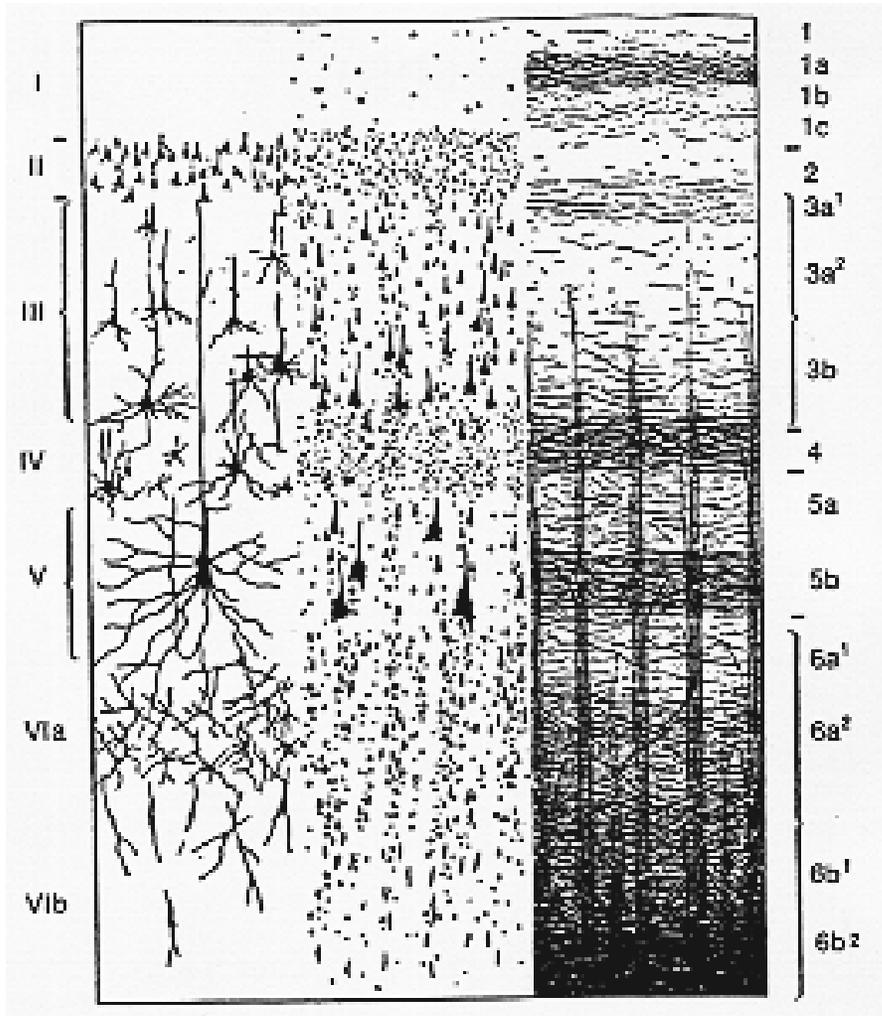
$$\zeta_X^{t+1} = (Z_X^{t+1}, Z_X^{t+1}, \dots, Z_X^{t+1})^T$$

$$\beta_X^{t+1} = (1/Z_X^{t+1}) \rho_X^{t+1}$$

$$\text{ただし、} a \otimes b = (a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_n b_n)^T$$

BESOMと 解剖学的知見との一致

大脳皮質の6層構造



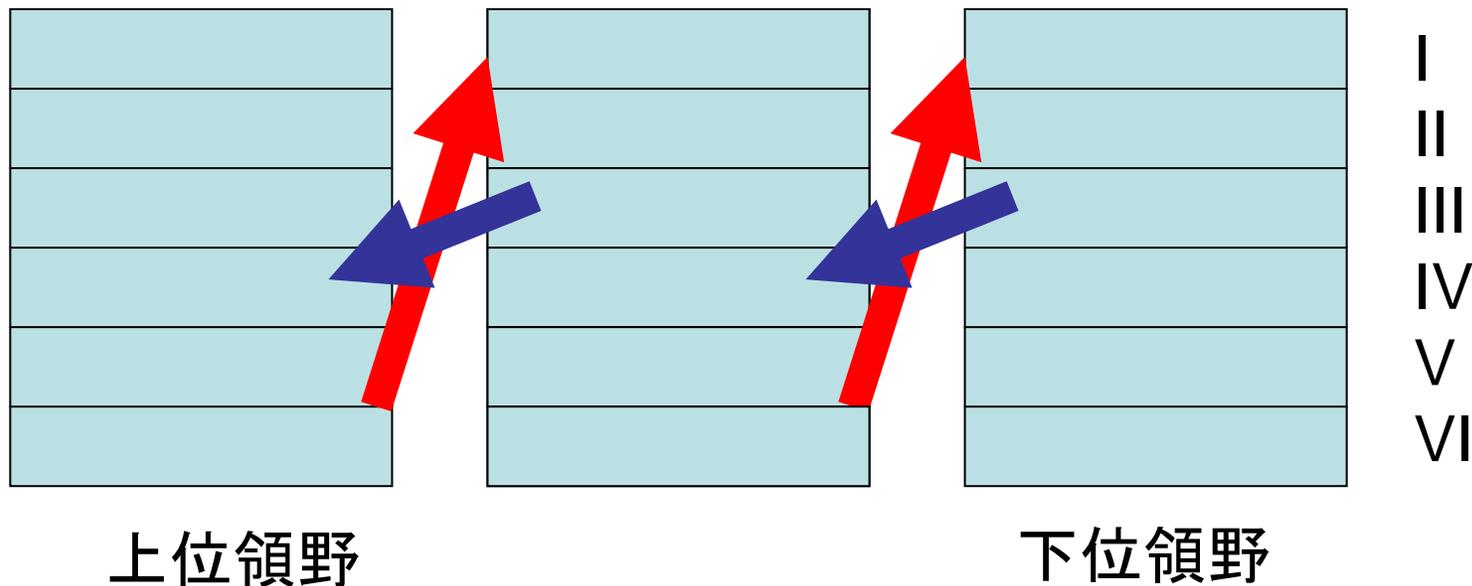
NEUROLOGICAL ANATOMY In Relation to Clinical
Medicine THIRD EDITION Alf Brodal, M.D. New York
Oxford OXFORD UNIVERSITY PRESS 1981

図は下記ページより

<http://web.sc.itc.keio.ac.jp/anatomy/brodal/chapter12.html>

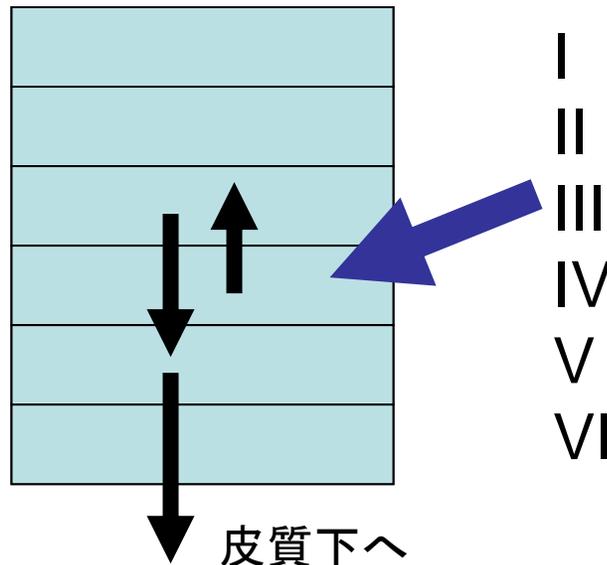
領野間の結合 [Pandya and Yeterian 1985]

- **ボトムアップ**の結合は主に3層から4層、**トップダウン**の結合は主に5・6層から1層へ。

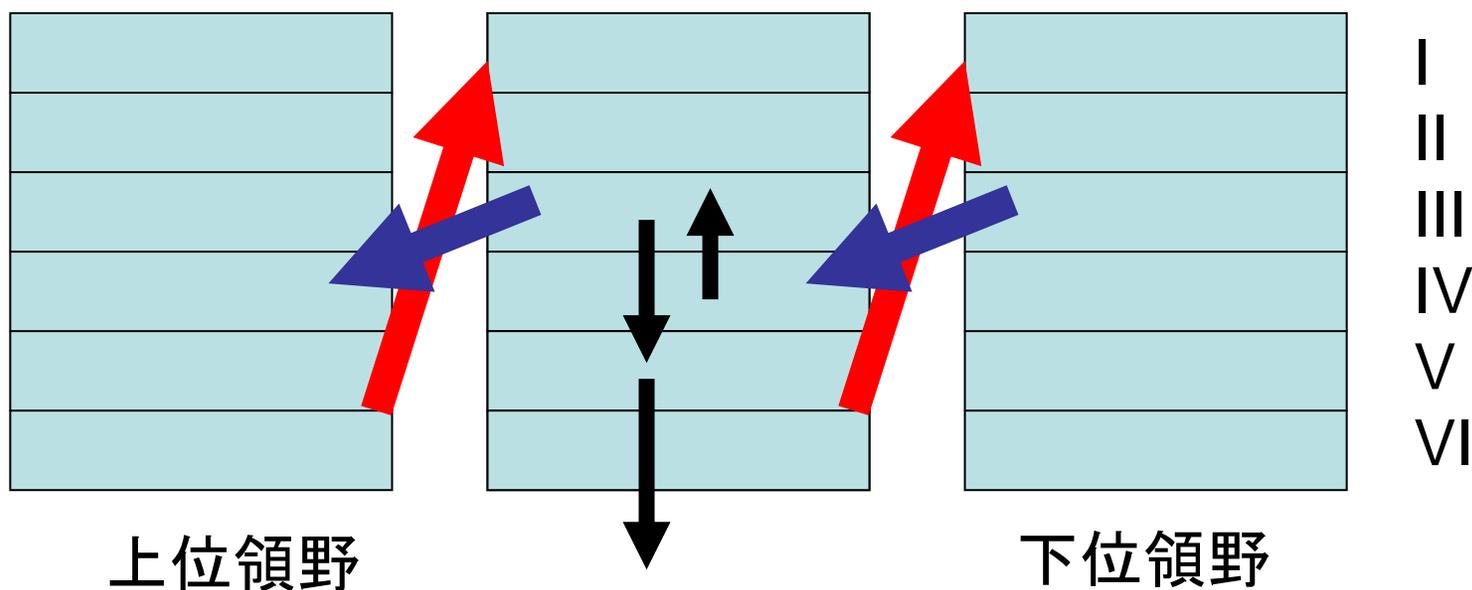


皮質内の情報の流れ [Gilbert 1983]

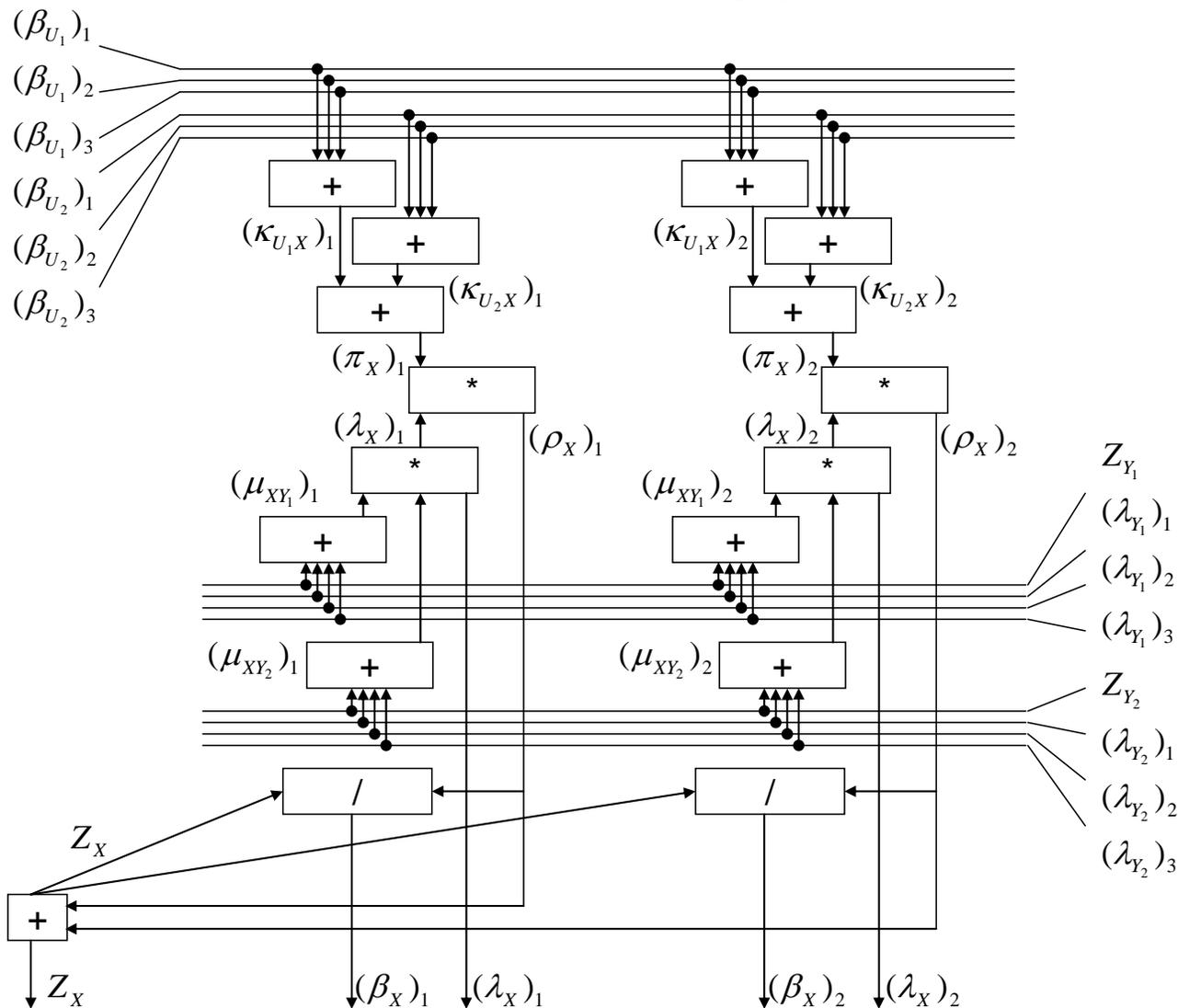
- 下位領野 → 4層 → 2・3層 → 5層 → 皮質下



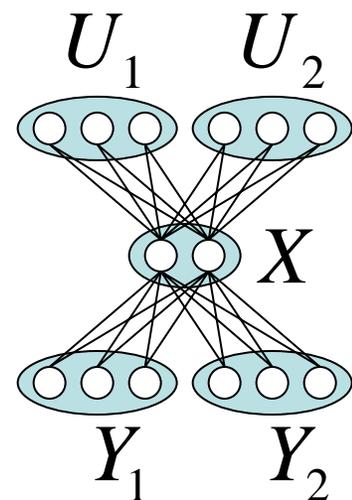
- 情報処理の途中結果の3層の情報が上位領野に送られ、最終結果の5層の情報は下位領野に戻されるという、**とても不思議な構造**をしている。



近似確率伝播アルゴリズムを実行する神経回路

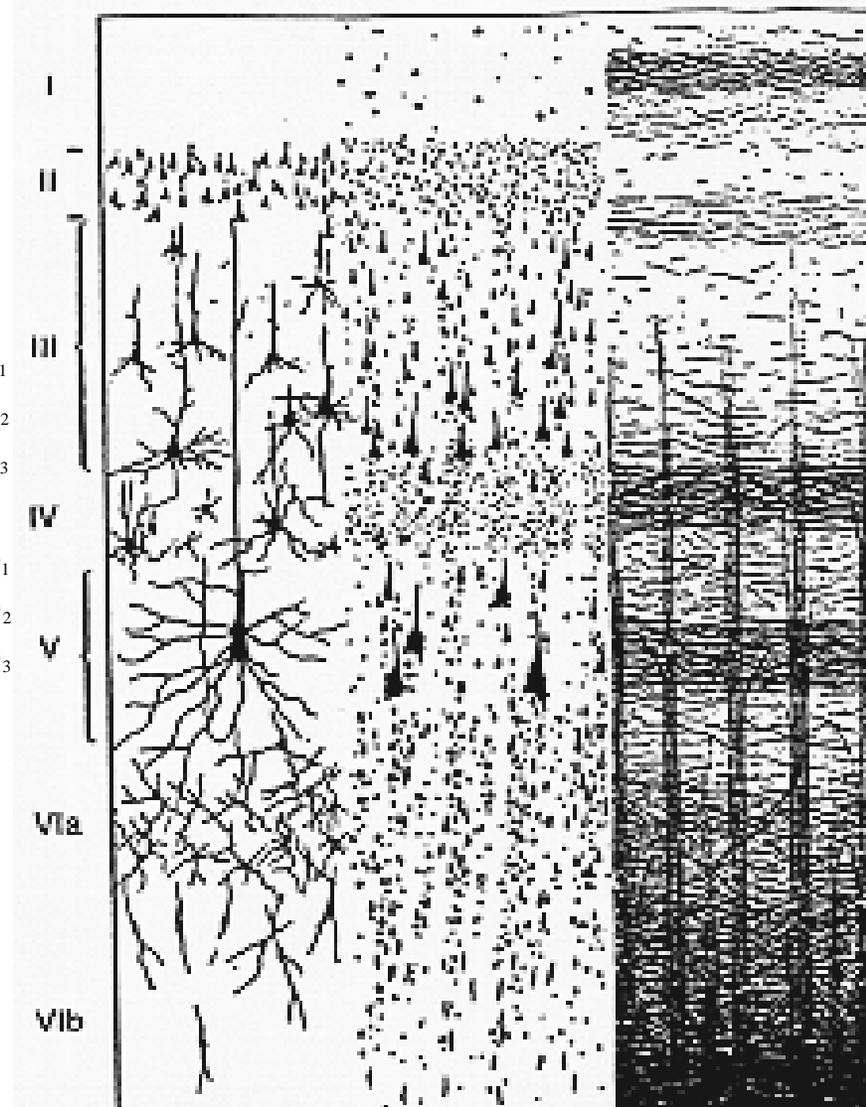
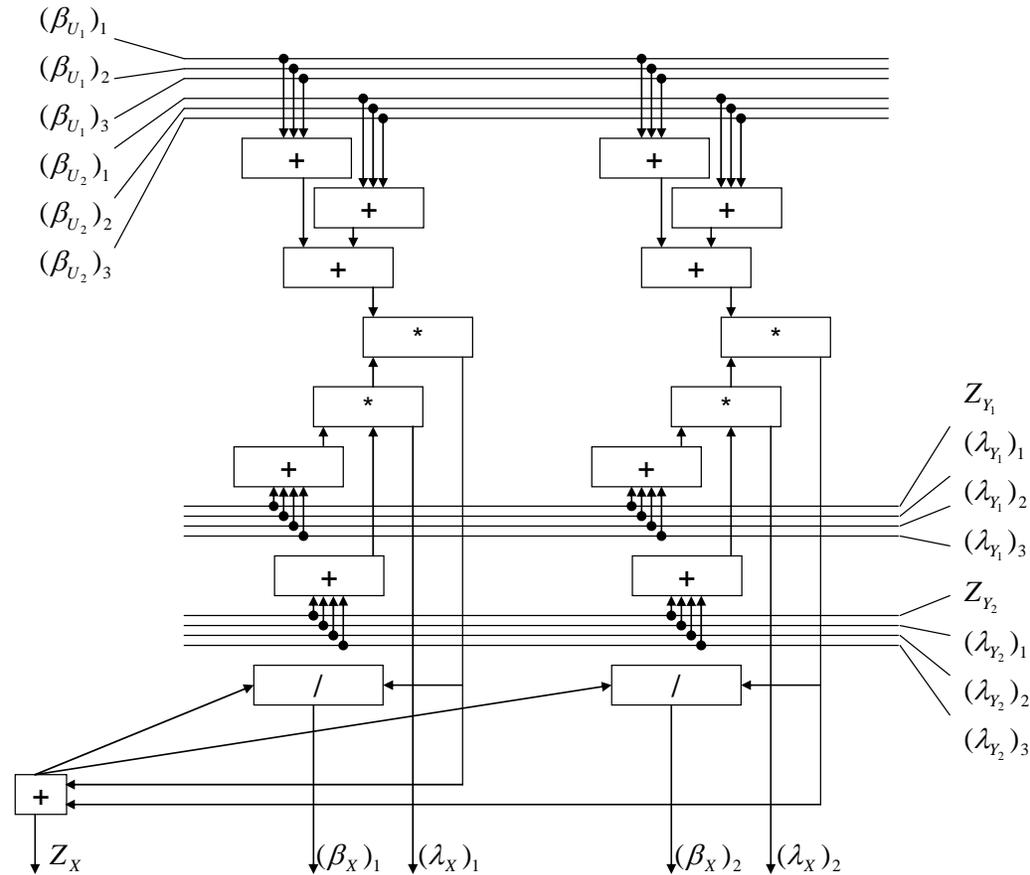


I
II
III
IV
V
VI



左図は、上記 BESOM ネットワークのノード X の計算を実行する神経回路

BESOMモデルと6層構造の一致



解剖学的構造との一致点のまとめ

- ボトムアップには主に3層から4層、トップダウンには主に5・6層から1層に結合。
- コラム内では垂直方向だけでほとんどの情報処理が行われる。主に入力→4層→2・3層→5層→出力。
- 1層および4層の水平線維。
- 2層および4層の星状細胞。

BESOMとコラムの機能との一致

- コラム=SOMのユニット。
- V1の4層に多く存在する単純型細胞は、LGNからの入力の線形和。複雑性細胞は非線形。
- コラム内では深さによらず同じような情報が表現されている。
 - 学習収束後は観測と予測が一致するので、どの層のニューロンも同じような応答をするはず。

BESOMモデルのまとめ

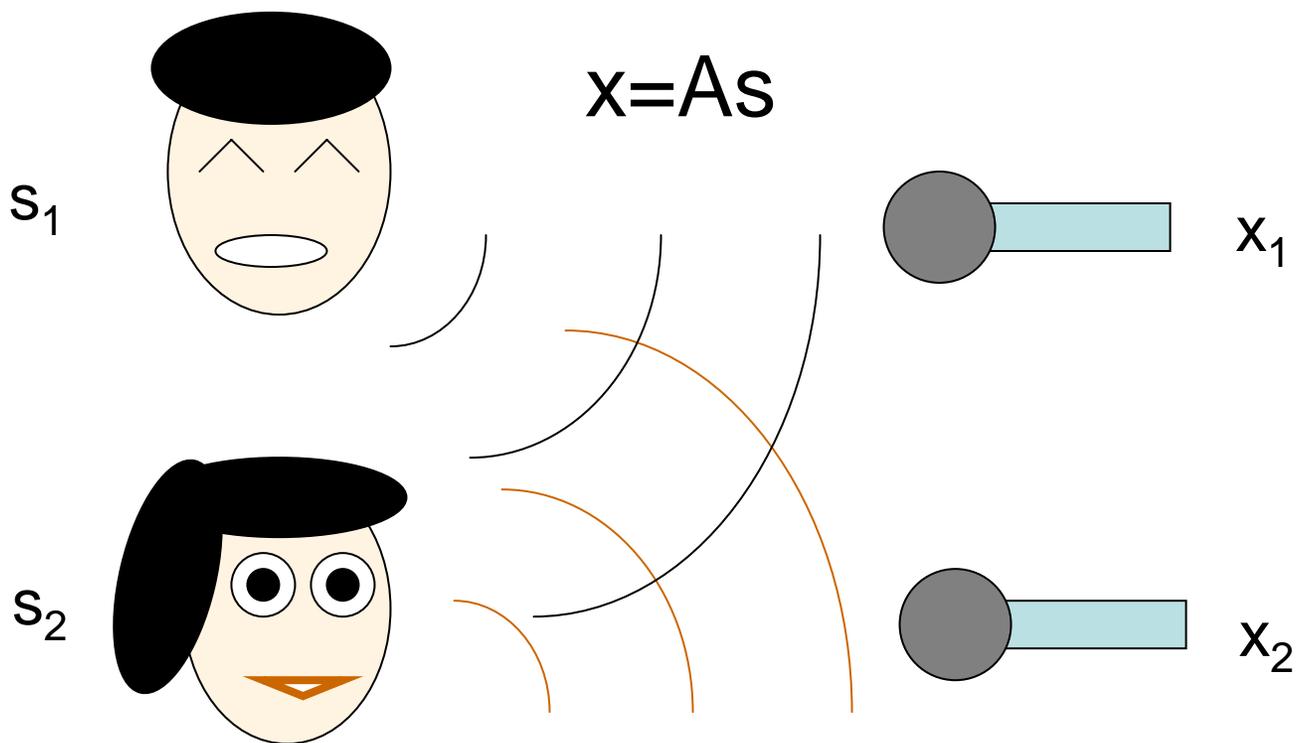
- BESOM モデルは大脳皮質の主要な解剖学的特徴とよく一致している。
→ 大脳皮質の主要な機能を再現するモデルだと期待できる。
- 脳の機能の計算機上での再現に向けた大きな前進と言えるのではないだろうか？

BESOMモデルの これまでの問題点

- ネットワーク構造の獲得の機構について述べていない。
- 兄弟ノードどうしを独立にする機構が分からない。独立でないと正しいベイジアンネットではない。
→ 正しい計算機シミュレーションができない。
- BESOMにICAの機構を統合することでこれらの問題が解決できる見込みが出てきた。

独立成分分析(ICA)とは

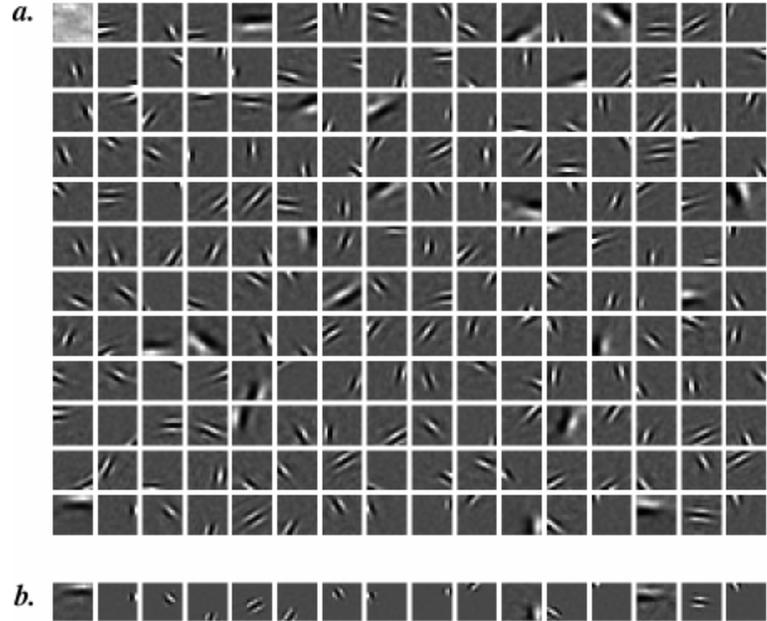
- 混合された入力信号 x のみから、もとの信号 s および混合方法 A を推定する一種の「教師なし学習」



大脳皮質がICAを行っているらしい証拠

一次視覚野の単純型細胞の特性 の再現 [Olshausen and Field 1996]

- 右図は自然画像に対してスパース符号化によるICAを行って得られた基底。
- 自然画像を少ない基底関数の線形和で効率的に表現可能。



“Emergence of simple-cell receptive field properties by learning a sparse code for natural images”.
Bruno A. Olshausen and David J. Field
Nature, 381:607-609 (1996)

図は下記ページより

<http://watanabe-www.pi.titech.ac.jp/~shiga/ppt/ICA.ppt>

一次運動野のニューロン

- [Kakei et al. 1999]
 - 筋肉活動を表現するニューロンと、運動の方向を表現するニューロンが存在する。

Kakei S, Hoffman DS and Strick PL,
Muscle and movement representations in the primary motor cortex,
Science 285 (5436): 2136-2139, Sep 24 1999.

- なぜ同じ領野に異なる情報が表現されるのか？
- 「筋肉活動」と「運動の方向」という独立成分が自己組織化されたと考えれば、この現象は理解できる。

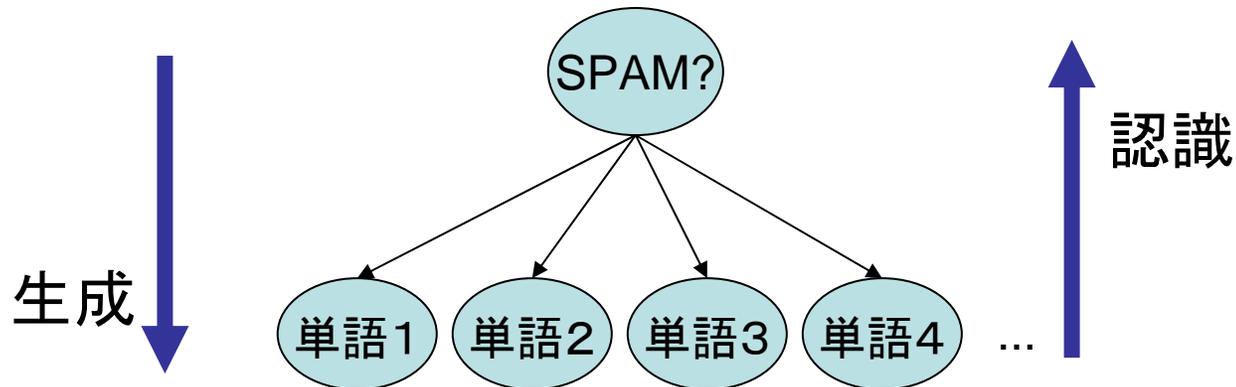
脳がICAする利点

- 特徴抽出、データ圧縮、ノイズ除去
- **生成モデルの獲得**
 - 信号源から観測データを生成する過程を推定
- 仮説：脳は、ベイジアンネットで表現された外界の生成モデルをICAで獲得しているのではないだろうか？

生成モデルとは？

- 信号源から観測データが生成される過程を表現するモデル。ベイジアンネットで表現可能。
- 生成モデルをパターン認識に用いることも可能。

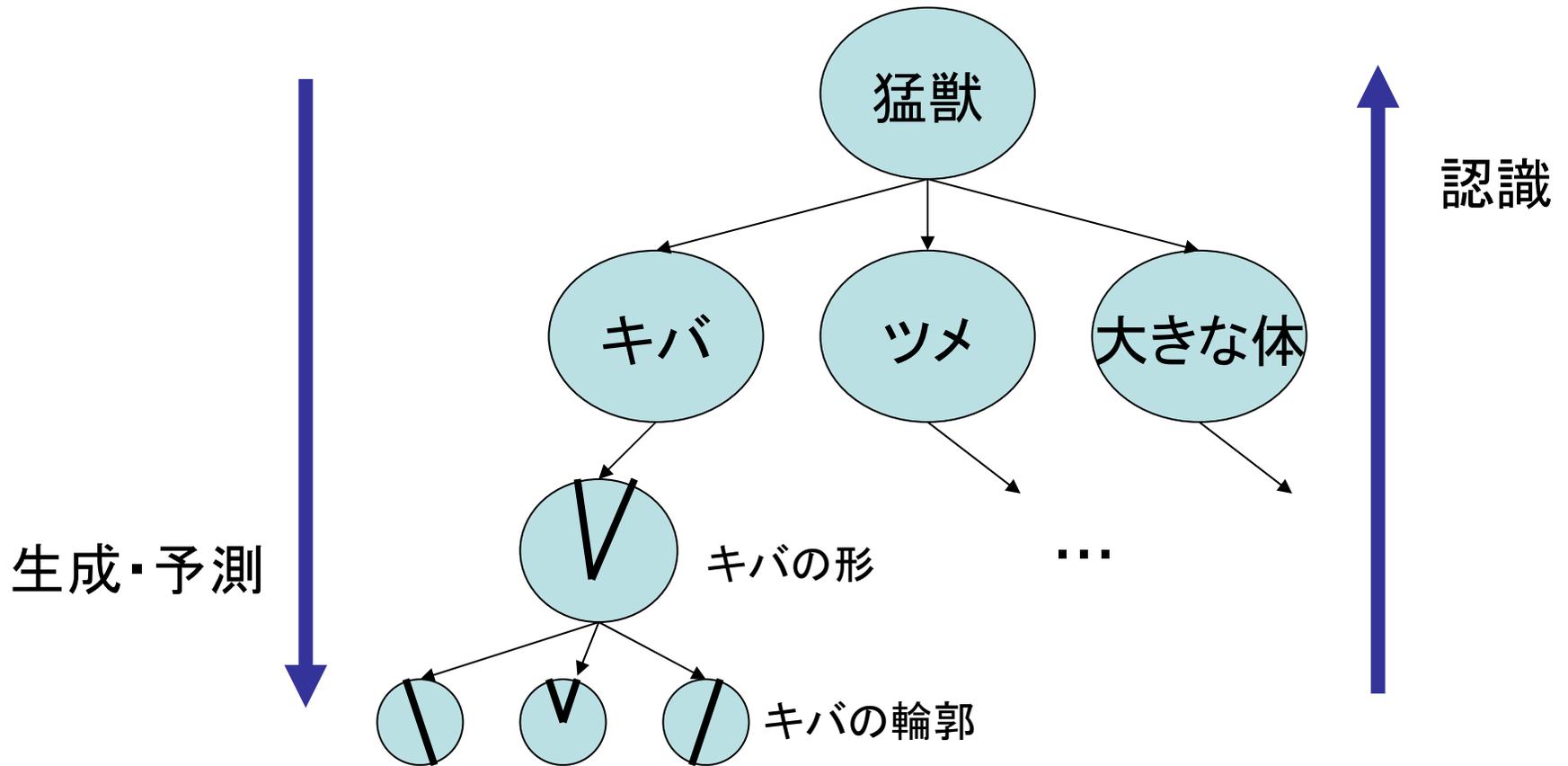
例 スпамメール



スパムメールは高い確率で単語1を含む。

単語1を含むメールは高い確率でスパムメールである。

視覚野にある生成モデル？

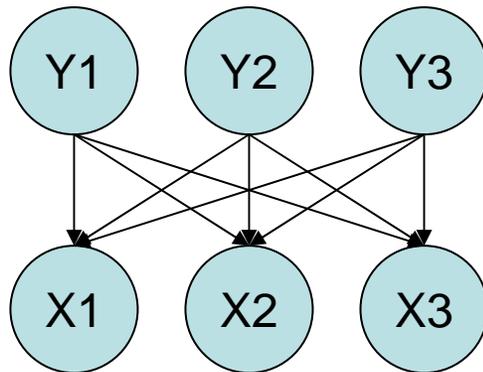


目の前に猛獣がいれば高い確率でキバが見えている。

キバが見えていれば、高い確率で目の前に猛獣がいる。

ICAによる生成モデルの獲得

- ICAは $x=As$ における混合行列Aと信号源sを推定する。
→ すなわち2層の生成モデルを獲得する。

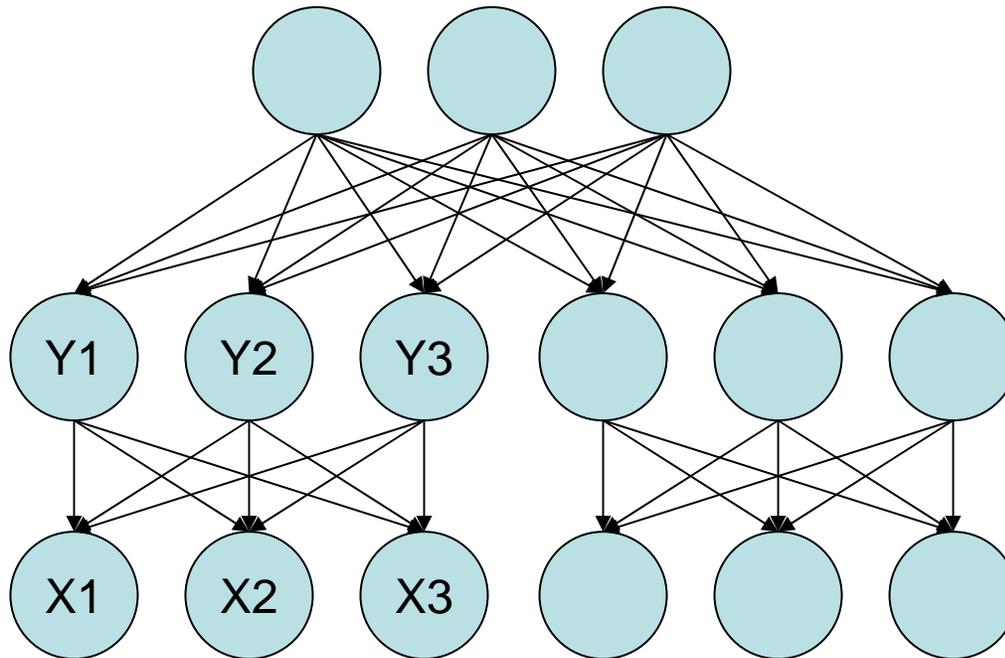


ICAで推定された信号源

観測データ

階層的な生成モデルの獲得

- 推定された信号源をさらにICAすることで、階層的な生成モデルが獲得できるのではないか？

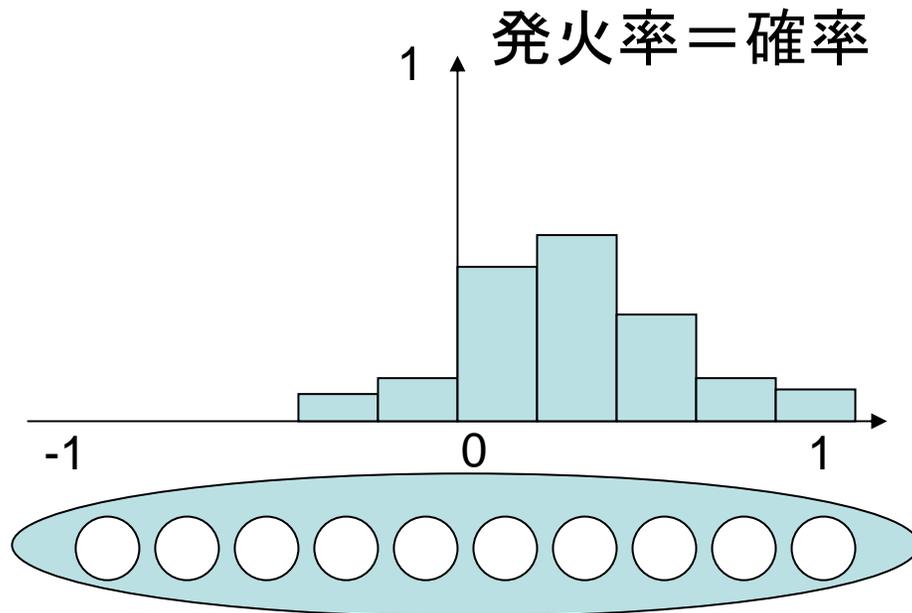


BESOMへのICAの統合の問題

- BESOM による生成モデルの獲得を実証したい。
- しかし、BESOMにICAの機構を統合する方法は自明ではない。
 - x, y が値ではなく、値の確率分布で表現されている。
 - 混合行列 A は、条件付確率表として表現されている。
- BESOMと統合可能なICAアルゴリズムを1つ提案する。

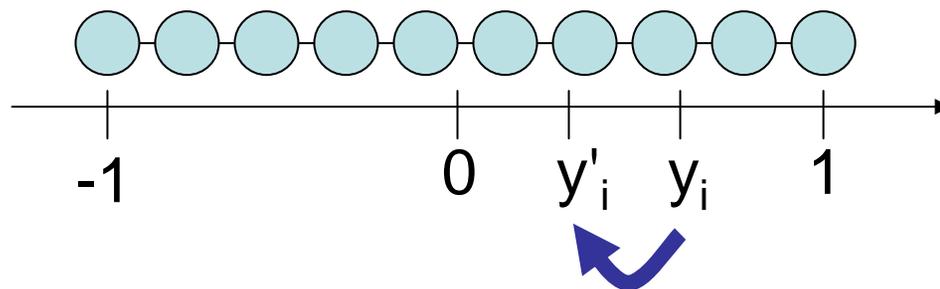
入出力を確率分布で表現

- 1つのSOMが、1つの信号源の値の確率分布を表すものとする。
- 入力も同様に値の確率分布で表現。



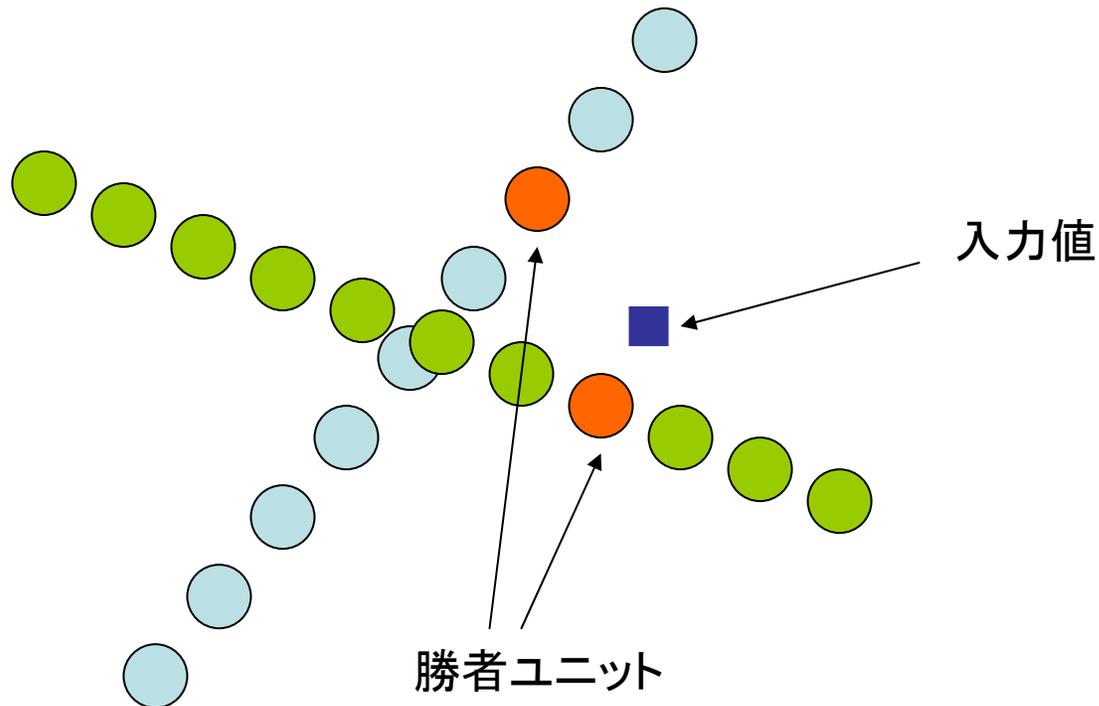
提案する手法：勝者修正法

- SOMが表現する値が大きすぎる場合、競合学習の勝者を中心側にずらす。



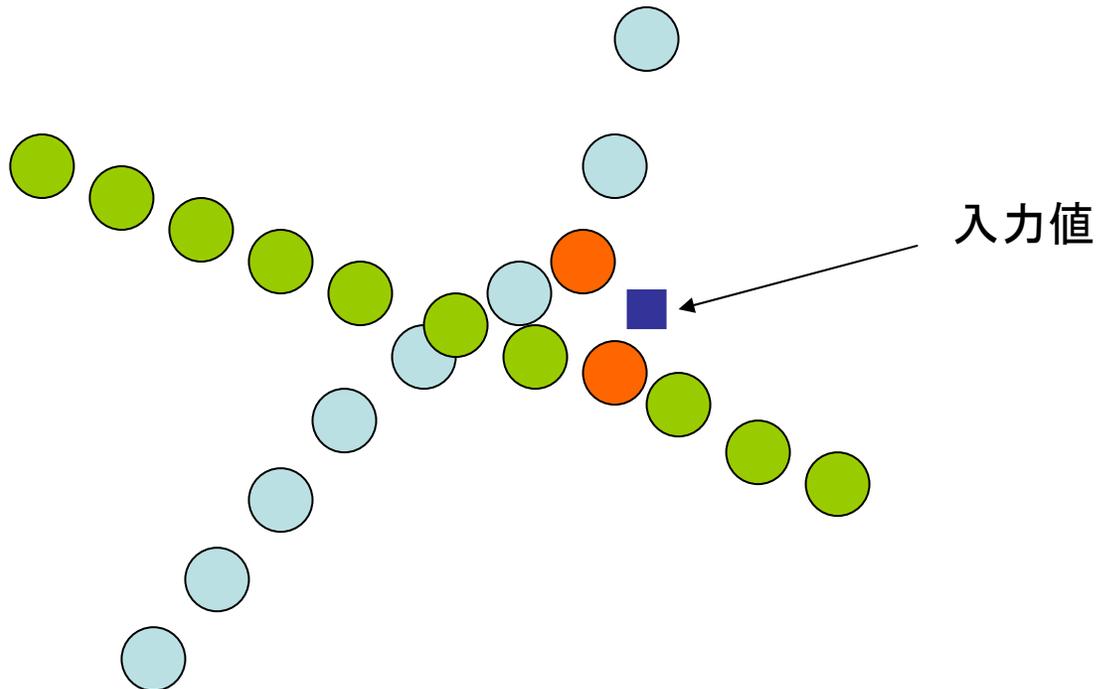
勝者修正なし

- 2つのSOMが表現する軸がどちらも入力値に近づけられる。



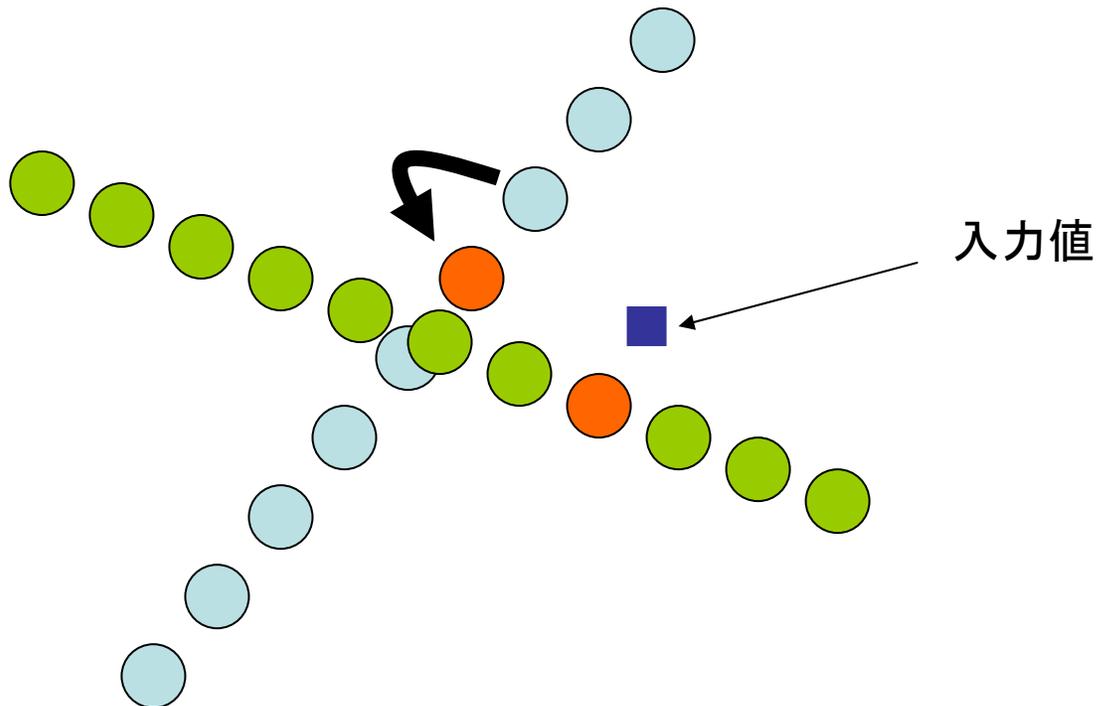
勝者修正なし

- 2つのSOMが表現する軸がどちらも入力値に近づけられる。
→ やがて2つのSOMは1つに重なってしまう。



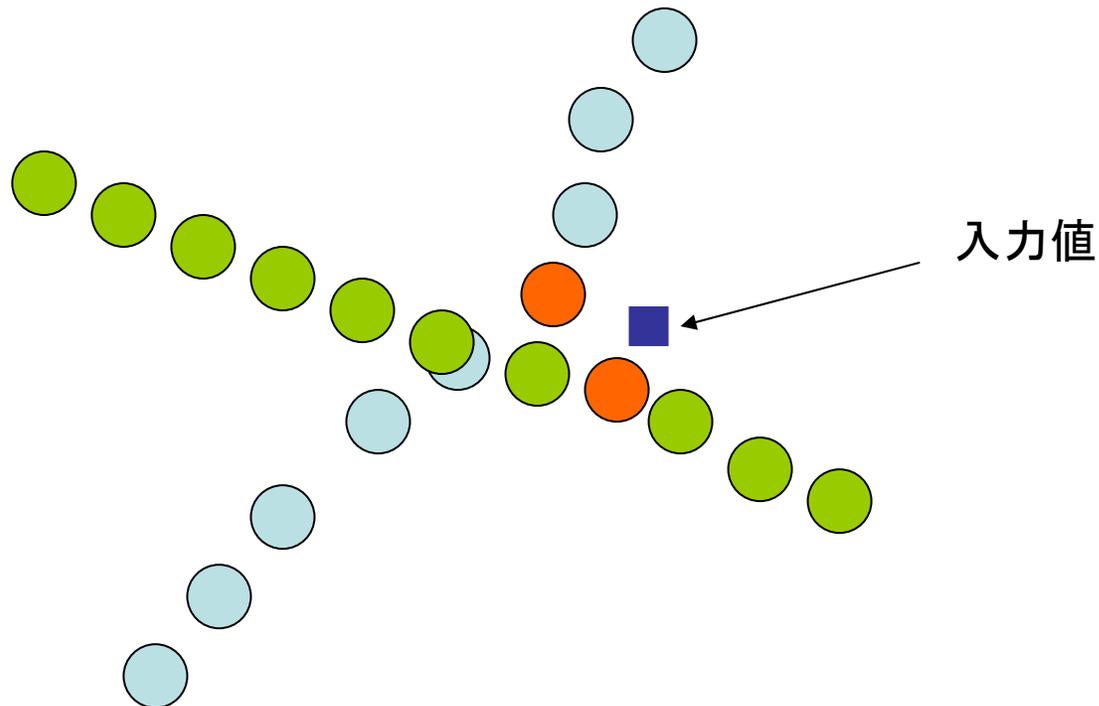
勝者修正あり

- 2つのSOMが無相関になるように、片方のSOMの勝者を中心側にずらす。



勝者修正あり

- 2つのSOMが無相関になるように、片方のSOMの勝者を中心側にずらす。(軸を傾ける効果を弱める。)



具体的なアルゴリズム

- 各軸の間の分散共分散行列の学習。
- SOMどうしを独立に。

$$S_{ij} \leftarrow (1 - \alpha) S_{ij} + \alpha y_i y_j$$

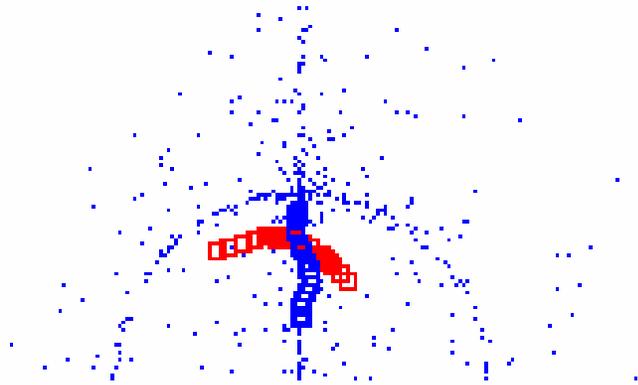
$$y'_i = y_i - \beta \sum_j \frac{S_{ij}}{\sqrt{S_{ii} S_{jj}}} y_j - \gamma \text{sign}(y_i)$$

SOMが表す値どうしを
無相関に

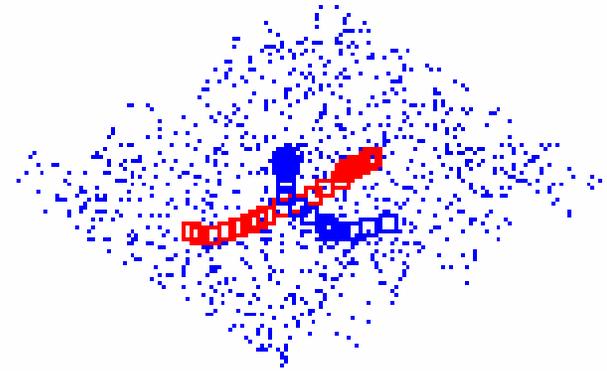
SOMが表す値を
スパースに

実験

- 20ユニットのSOM2つに2つの混合信号を入力



a. スパースな分布の信号2つを
非線形に混合



b. 一様な分布の信号2つを
線形に混合

このICAの方法の特長

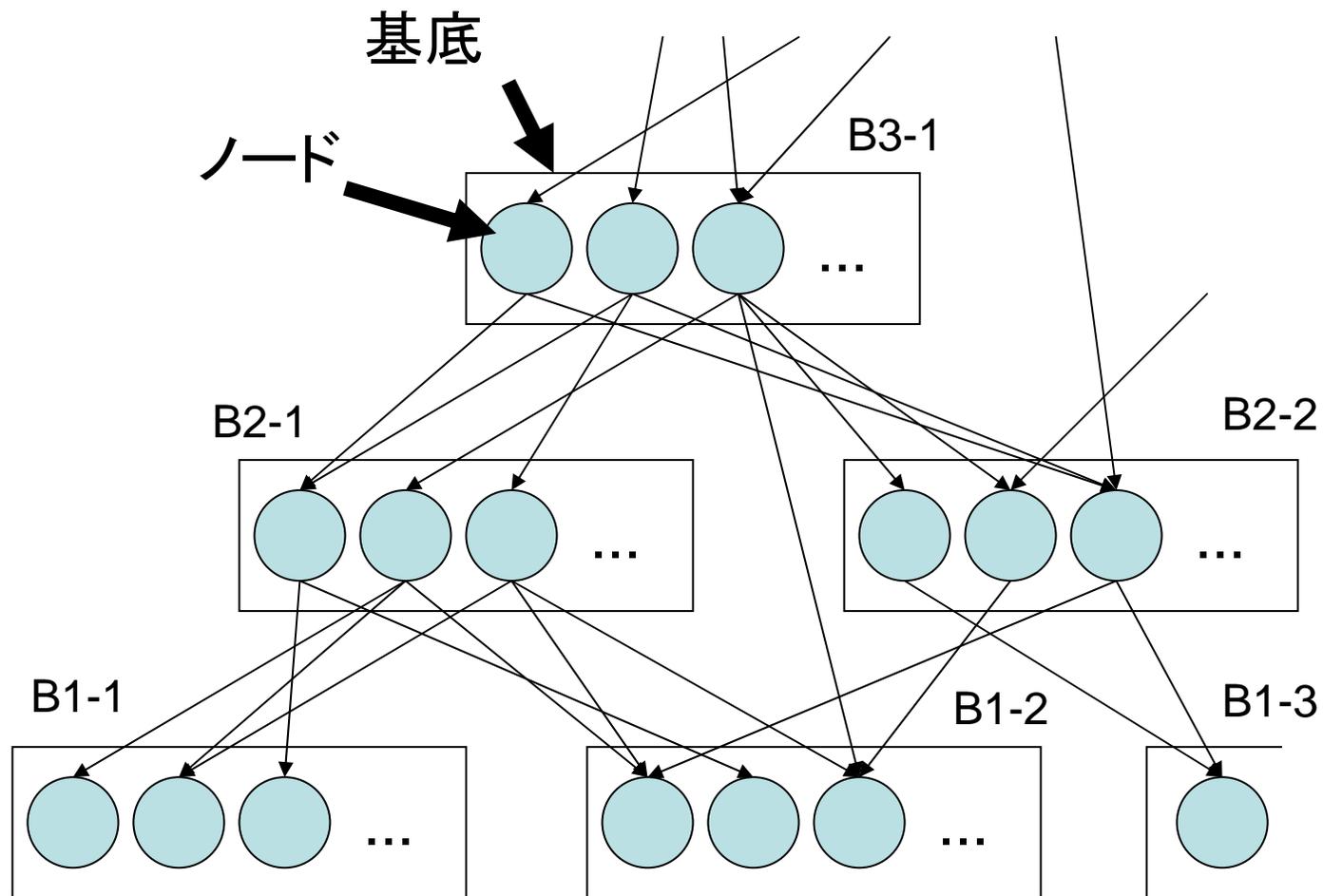
- SOMの数 n に対して $O(n^2)$ の記憶量と計算量(1ステップあたり)が必要。
 - 脳の場合は $n=10000$ くらいか？
- 前処理(平均値0、白色化)の必要がない。
- 多少非線形な混合でもだいじょうぶ。

この方法の問題点

- まだ動作が不安定。
- 学習結果が正確な条件付確率表にならない。
- 今後もアルゴリズムの改良を続ける。

議論

大脳皮質が獲得する生成モデル の模式図



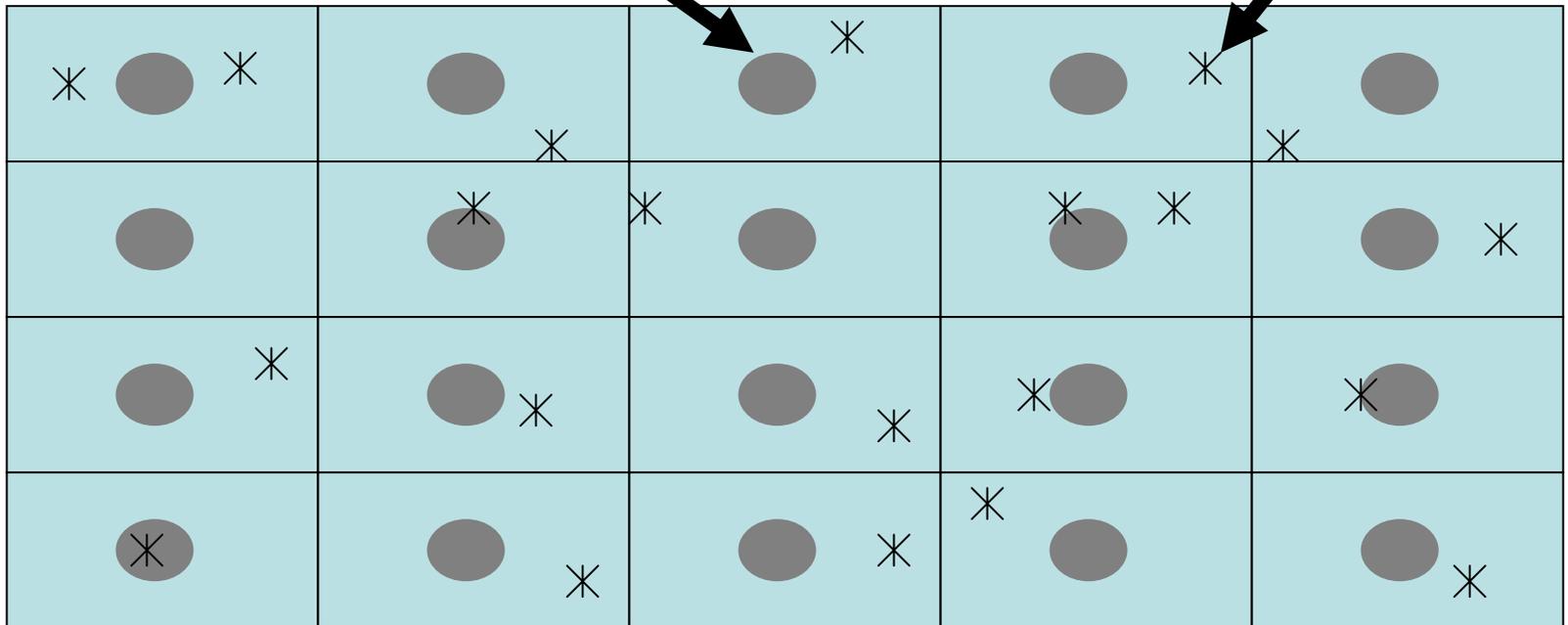
基底の階層は、領野の階層に対応する。ただし基底＝領野というわけではない。

大脳皮質上のSOMの模式図

- 一次視覚野のブロブは規則的に並ぶ2次元SOMの中心なのではないか？

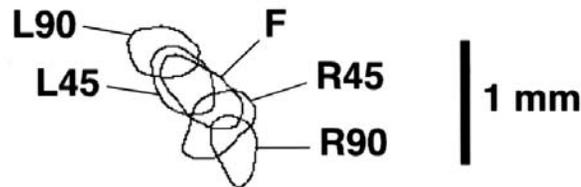
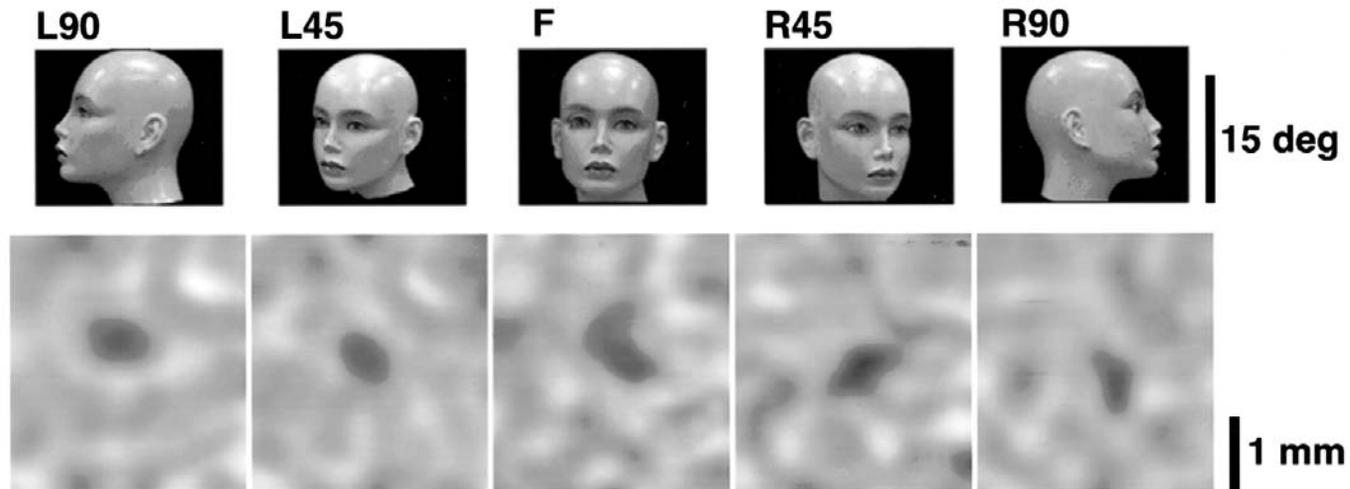
ブロブの位置は規則的

ピンホイールの位置は
ブロブと無相関



TE野の顔の向きに応答するコラ

ム [Wang et al. 1996]

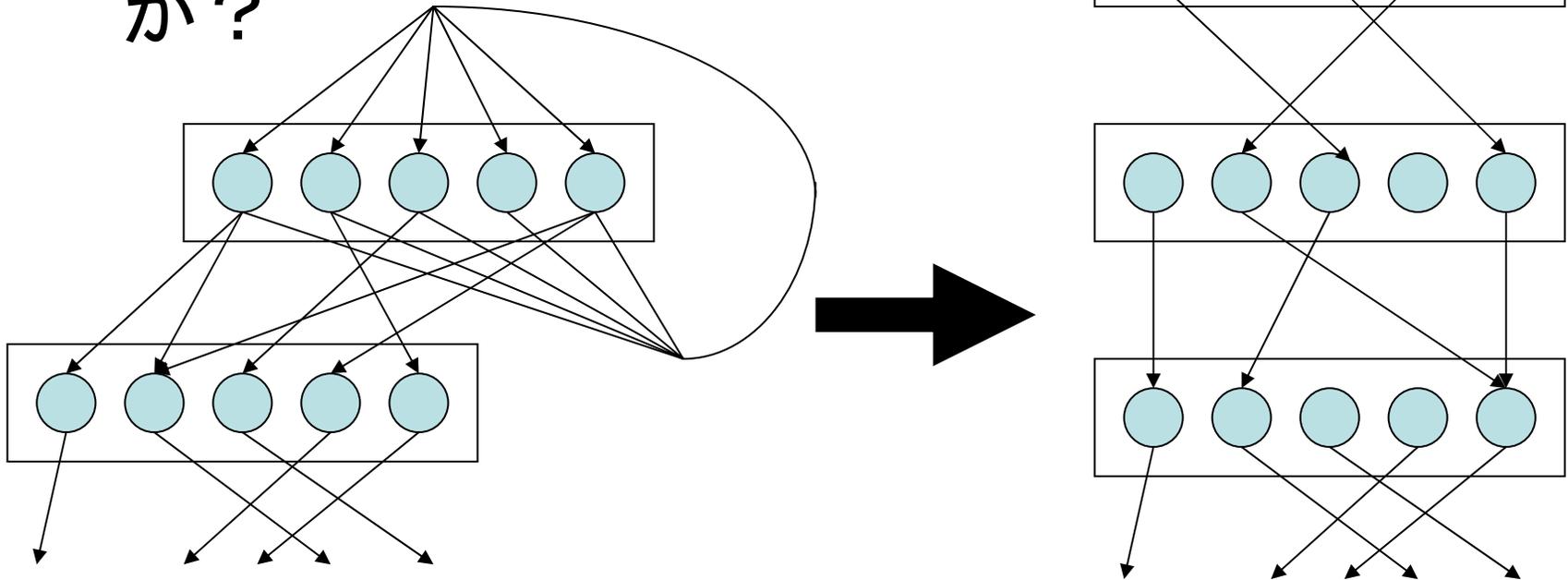


Wang G, Tanaka K and Tanifuji M,
Optical imaging of functional organization in the
monkey inferotemporal cortex
SCIENCE 272 (5268): 1665-1668 JUN 14 1996.

図は下記論文より
Keiji Tanaka
Columns for Complex Visual Object Features in the Inferotemporal Cortex:
Clustering of Cells with Similar but Slightly Different Stimulus Selectivities
Cerebral Cortex, Vol. 13, No. 1, 90-99, January 2003

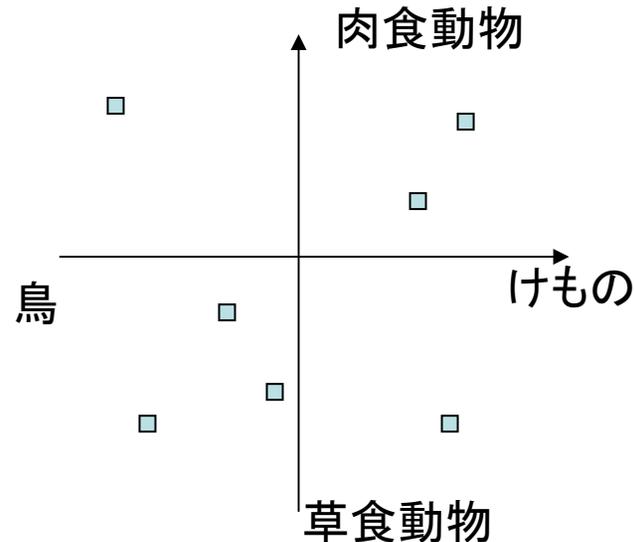
事実上無限の階層の実現

- 最上位の層をリカレントにすることで、階層の数の上限をなくせるのではないか？



抽象概念の獲得

- 個々のSOMが抽象概念を表すのではないか？
 - 例：動物の分類



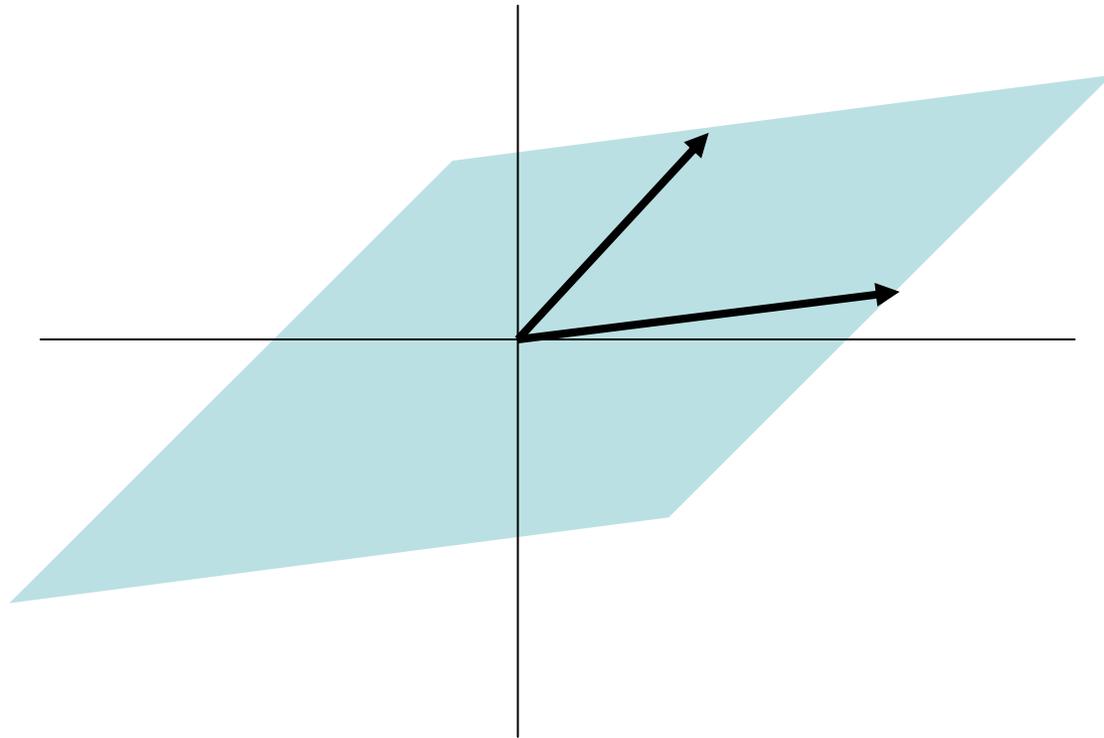
まとめと今後

- ベイジアンネットと自己組織化マップと強化学習の機構を併せ持つ BESOM モデルに、さらにICAの機構を統合することにより、生成モデル獲得の問題の解決の目処がたった。
- BESOM の大規模計算機シミュレーションの目処がたった。今後もICAアルゴリズムの改良を続ける。

補足スライド

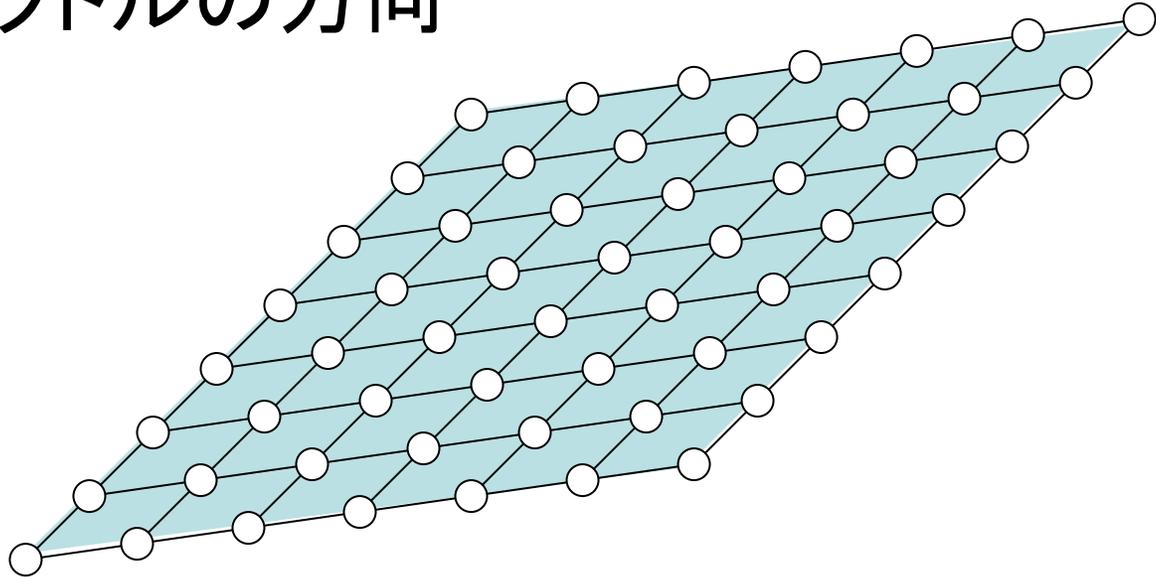
SOMによるICA(1/3)

- 平行四辺形の形をした一様分布



SOMによるICA(2/3)

- 2次元SOMによる学習結果: 2辺の方向が基底ベクトルの方向

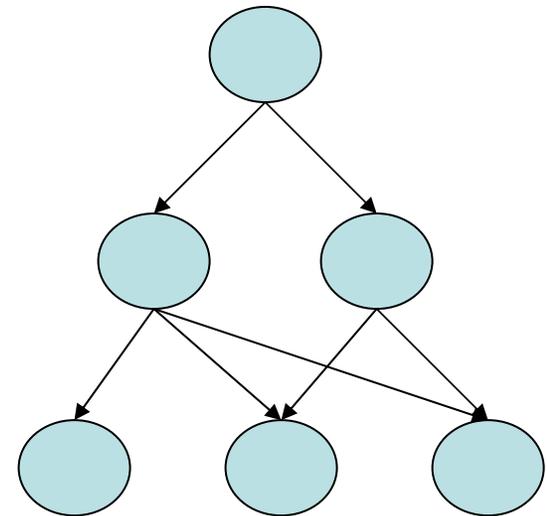
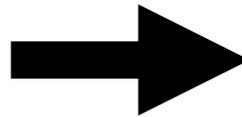
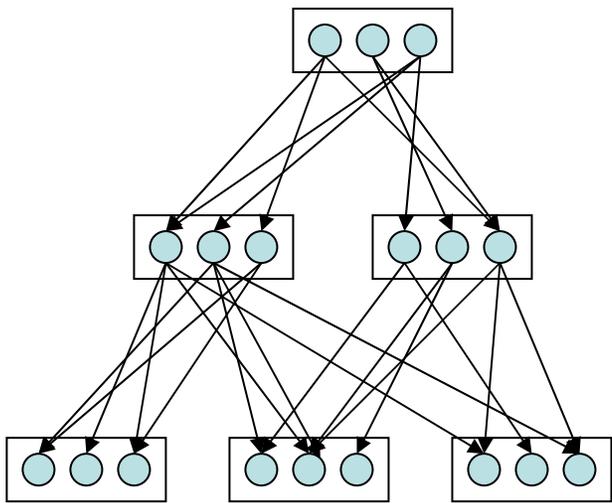


SOMによるICA(3/3)

- 利点：
 - 多少非線形な混合に対しても信号源を分離可能
- 欠点：
 - 信号源の数 n に対してユニットの数 $O(2^n)$
 - 劣ガウスな分布に対してしか使えない。
- [Oshiro and Kurata 2005]の方法
 - n 個のSOMを使ったPCA/ICA
 - ユニット数 $O(ns)$ 、 s は1つのSOMのユニット数
 - シナプス数 (= 記憶量・計算量) $O(n^2s^2)$

領野とノードの関係(1/2)

- 領野内のノードの状態の直積を状態として持つノードに置き換えたベイジアンネットを考えることができる。



条件付確率表の近似の妥当性

- 近似確率伝播アルゴリズムの導出に、下記の仮定を置いた。

$$P(X | U_1, \dots, U_m) \approx \sum_{i=1}^m P(X | U_i)$$

- 式を少し修正する予定。重要そうなポイント：
 - 親ノードのSOMの勝者は子ノードからの入力で決まるので $P(U_1, U_2 | X) = P(U_1 | X)P(U_2 | X)$ が成り立つ。
 - ICAにより $P(U_1, U_2) = P(U_1)P(U_2)$ が成り立つ。
 - SOMの性質により $P(X) \doteq 1/s$ が成り立つ。ただし s はユニットの数。
 - 条件付確率表のスミージングが行われる。