隠れ状態とマルコフランダム場演習用資料

科学技術振興事業団川人学習動態脳プロジェクト
岡田真人

0　演習の目的

配布資料に従い，画像修復において隠れ状態が必要であることを演習を通して習得する．プログラミングの手間と計算機パワーを考慮し，ここでは 1 次元系のみを取扱う．

1. 演習 1 では隠れ状態が無いモデルを計算機実験する．滑らかさの拘束条件から，エッジが鈍ってしまうことを学ぶ.
2. 演習 2 では位相を隠れ状態として持つモデルで，適切にパラメータを設定することにより，エッジを保存したまま画像を修復できることを学ぶ． 1 次元系では大局的には 2 種類の解が存在し，その一つが図 11(a) のような局所平衡解であることを確認する．具体的には 2 次元系の計算機実験は行なわないが， 2 次元系ではその局所平衡解が図 11 のように回避できることを実感してほしい． 2 画素からなる系を考え，隠れ状態である位相がどのような働きをするかを学ぶ．また位相を Ising スピンに置き換えたモデルを議論し，配布資料の図 13 について考察する．
3. 演習 3 でも 2 画素からなる系を考える．隠れ変数を導入することにより，系が双安定性を持つことを理論計算で確認する．隠れ状態導入の本質的な意義はこの双安定性にあるので，これを理解しない限りこの演習の本質的な理解はありえない.
4. ここで導入した位相と神経振動子の関係を議論する (青柳先生の配布資料 §3 参照).

1　演習 1

次のエネルギー関数を考える,

$$E(f|d) = \frac{1}{2}\sum_i (f_i - d_i)^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_i (f_{i+1} - f_i)^2. \tag{1}$$

Q1-1 $\dfrac{\partial}{\partial f_i}E(f|d)$ を求めよ.

Q1-1 の答え

$$\frac{\partial}{\partial f_i}E(f|d) = (f_i - d_i) - \lambda(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}). \tag{2}$$

Q1-2 最急降下法,

$$\tau_f \frac{\partial}{\partial t} f_i = -\frac{\partial}{\partial f_i}E(f|d), \tag{3}$$

の意味を考えてみよう．ただし， τ_f は f の時定数である.

Q1-2 の答え 変数 f_i に関してエネルギー $E(f|d)$ が小さくなる方向 $-\dfrac{\partial}{\partial f_i}E(f|d)$ に変数 f_i を変化させる．つまり式 (3) にしたがって， f_i を動かすと $E(f|d)$ は小さくなる.

Q1-3 式 (2) と (3) の微分方程式をオイラー法を用いて離散時間表示せよ．

Q1-3 の答え オイラー法とは，例えば時間微分を求める時に，時間微分を以下のように離散化する方法である，

$$\frac{df}{dt} \leftrightarrow \frac{f(t+\Delta t)-f(t)}{\Delta t}. \tag{4}$$

これを式 (2) と (3) に適応すると以下のようになる，

$$f_i(t+1) = f_i(t) + \varepsilon_f[\lambda(f_{i+1}(t) - 2f_i(t) + f_{i-1}(t)) - (f_i(t) - d_i)], \tag{5}$$

ただし，ε_f は $\Delta t/\tau_f$ に対応する．

Q1-4 式 (3) の f_i をニューロン i の出力だと思い，式 (3) に対応する神経回路モデルを考えてみよう．

Q1-4 のヒント 配布資料の図 5，6，8 を参考にせよ．また **Q1-3** も参考にせよ．

プログラム 1 それでは実際に以下のような条件で計算機実験を行なう．

$$\begin{aligned}
i &= 1, 2, \cdots, 30, && (6)\\
i &= 31 \rightarrow i = 1, \text{周期的境界条件}, && (7)\\
\bar{d}_i &= 0, \quad i = 1, 2, \cdots 10, 21, 22, \cdots, 30, && (8)\\
\bar{d}_i &= 1, \quad i = 11, 12, \cdots, 20, && (9)\\
d_i &= \bar{d}_i + n_i^d, && (10)
\end{aligned}$$

ただし n_i^d は平均 0 分散 σ_d^2 のガウス分布 $N(0, \sigma_d^2)$ に従う．f_i に関しても式 (5) の周期的境界条件を用いる．$\sigma_d = 0.05$ に固定し，λ を変えた時に f_i がどのように変化するかを観察せよ．λ が大きいほど f_i が滑らかになるので，ノイズが除去されているようにみえる．しかし λ が大きいと $i = 10$ と $i = 11$ や $i = 20$ と $i = 21$ の間の $\bar{d}_i$ の急激な変化が鈍ってしまうのがわかる．この急激な $\bar{d}_i$ の急激な変化を保持したまま，ノイズを除去するにはどうしたら良いだろうか．

2 演習 2

配布資料の式 (5) のエネルギー関数を考える，

$$\begin{aligned}
E(f, \phi|d) &= \frac{1}{2}\sum_i (f_i - d_i)^2 + \frac{\lambda}{4}\sum_i (1 + \boldsymbol{W}_{i+1}\cdot\boldsymbol{W}_i)(f_{i+1} - f_i)^2 - \frac{J^R}{2}\sum_i \boldsymbol{W}_{i+1}\cdot\boldsymbol{W}_i, && (11)\\
\boldsymbol{W}_i &= (\cos\phi_i, \sin\phi_i), \quad 0 \le \phi_i < 2\pi, && (12)
\end{aligned}$$

ただしこの式と配布資料の式 (5) は係数等が若干異なるが演習では，こちらの式を参考にせよ．ベクトル $\boldsymbol{W}_i$ は 2 次元 (XY 平面) 単位円上に存在する．そのため，$\boldsymbol{W}_i$ を XY スピンとよぶことがある．また，2 次元単位円上のベクトルは角度 ϕ_i だけで指定できる．この ϕ_i を位相と呼ぶ．この位相は演習 4 で議論するように，青柳先生の配布資料 §3 の “位相表現” と深く関係している．

Q2-1 式 (11) に式 (12) を代入し，以下の式に変形せよ，

$$\begin{aligned}
E(f, \phi|d) &= \frac{1}{2}\sum_i (f_i - d_i)^2 + \frac{\lambda}{4}\sum_i (1 + \cos(\phi_{i+1} - \phi_i))(f_{i+1} - f_i)^2\\
&\quad - \frac{J^R}{2}\sum_i \cos(\phi_{i+1} - \phi_i). && (13)
\end{aligned}$$

Q2-2 $\Delta\phi_i \equiv \phi_{i+1} - \phi_i = 0$ では，式 (13) の第 2 項は式 (1) の第 2 項と同じになること示せ.

Q2-3 $\Delta\phi_i = \pi$ では，式 (13) の第 2 項は無効になることを示せ.

Q2-4 演習 1 での指摘したエッジの鈍りは次のよう ϕ を固定すると回避できる，

$$\begin{aligned} i &= 1, 2, \cdots, 30, & (14)\\ i &= 31 \to i = 1, \text{周期的境界条件}, & (15)\\ \phi_i &= -\frac{\pi}{2}, \quad i = 1, 2, \cdots 10, 21, 22, \cdots, 30, & (16)\\ \phi_i &= \frac{\pi}{2}, \quad i = 11, 12, \cdots, 20. & (17) \end{aligned}$$

この理由を考えよ.

Q2-5 $\dfrac{\partial}{\partial f_i} E(f, \phi | d)$ を求めよ.

Q2-5 の答え

$$\frac{\partial}{\partial f_i} E(f, \phi | d) = (f_i - d_i) - \frac{\lambda}{2}(1 + \cos(\phi_{i+1} - \phi_i))(f_{i+1} - f_i) - \frac{\lambda}{2}(1 + \cos(\phi_i - \phi_{i-1}))(f_{i-1} - f_i). \quad (18)$$

Q2-6 $\dfrac{\partial}{\partial \phi_i} E(f, \phi | d)$ を求めよ.

Q2-6 の答え

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi_i} E(f, \phi | d) &= -\frac{J_{i,i+1}}{2} \sin(\phi_{i+1} - \phi_i) - \frac{J_{i,i-1}}{2} \sin(\phi_{i-1} - \phi_i) & (19)\\ J_{i,j} &\equiv J^R - \frac{\lambda}{2}(f_j - f_i)^2 & (20) \end{aligned}$$

Q2-7 f_i と ϕ_i に関して最急降下法,

$$\begin{aligned} \tau_f \frac{\partial}{\partial t} f_i &= -\frac{\partial}{\partial f_i} E(f, \phi | d), & (21)\\ \tau_\phi \frac{\partial}{\partial t} \phi_i &= -\frac{\partial}{\partial \phi_i} E(f, \phi | d), & (22) \end{aligned}$$

の意味を考えてみよう．ただし， τ_f と τ_ϕ は f と ϕ の時定数である.

Q2-7 の答え 変数 f_i と ϕ_i に関してエネルギー $E(f, \phi | d)$ が小さくなる方向 $-\dfrac{\partial}{\partial f_i} E(f, \phi | d)$ と $-\dfrac{\partial}{\partial \phi_i} E(f, \phi | d)$ にそれぞれ変数 f_i と ϕ を変化させる．つまり式 (21) と (22) にしたがって， f_i と ϕ_i を動かすと $E(f, \phi | d)$ は小さくなる.

Q2-8 式 (19) から (21) の微分方程式をオイラー法を用いて離散時間表示せよ.

Q2-8 の答え

$$
\begin{aligned}
f_i(t+1) &= f_i(t) \\
&\quad + \varepsilon_f[\lambda\{c_{i+1,i}(f_{i+1}(t)-f_i(t)) + c_{i-1,i}(f_{i-1}(t)-f_i(t))\} - (f_i(t)-d_i)], \quad (23)\\
c_{i,j} &= \frac{1+\cos(\phi_i-\phi_j)}{2}, \quad (24)\\
\phi_i(t+1) &= \phi_i(t) \\
&\quad - \varepsilon_\phi[\frac{J_{i,i+1}}{2}\sin(\phi_{i+1}(t)-\phi_i(t)) + \frac{J_{i,i-1}}{2}\sin(\phi_{i-1}(t)-\phi_i(t))\} \quad (25)
\end{aligned}
$$

ただし，ε_f は $\Delta t/\tau_f$ に対応し，ε_ϕ は $\Delta t/\tau_\phi$ に対応する．

Q2-9 式 (21) の f_i と (22) の ϕ_i をそれぞれニューロン i とラベルをあらわす位相だと思い，式 (21) と (22) に対応する神経回路モデルを考えてみよう．

Q2-9 配布資料の図 5，6，8 を参考にせよ．また **Q2-8** も参考にせよ．

プログラム 2-1 それでは実際に以下のような条件で計算機実験を行なう．観測データ d_i に関しては式 (4) から (8) の条件を用いる．f_i と ϕ_i に関しても式 (5) の周期的境界条件を用いる．まず式 (14) から (17) のように ϕ_i を設定し，式 (25) の ε_ϕ を $\varepsilon_\phi = 0$ としよう．つまり，式 (14) から (17) のように ϕ_i を設定し，それ以降 ϕ_i を変化させない場合を議論する．**Q2-4** で考察したようにエッジの鈍りを回避ながら，それ以外の部分のノイズが除去できることがわかる．

しかし式 (14) から (17) の条件は都合の良い設定である．式 (14) から (17) のように入力を分割できることを知っていなければ，式 (14) から (17) のような条件を設定することは出来ない．重要なことは以下のように ϕ_i に関して均一な初期条件,

$$
\begin{aligned}
i &= 1, 2, \cdots, 30, \quad (26)\\
i &= 31 \rightarrow i = 1, \text{周期的境界条件}, \quad (27)\\
\phi_i &= n_i^\phi, \quad (28)
\end{aligned}
$$

から，式 (21) と (22) の最急降下法を用いて，式 (14) から (17) のように ϕ_i に収束することが重要である．ただし，n_i^ϕ は -0.2π から 0.2π までの一様乱数である．後の演習でわかるように，収束させることは可能である．さらに，簡単な 2 画素の系でそのことを定性的に理解しよう．

Q2-10 周期的境界条件を仮定すると，2 画素系は下記のように書けることを確認せよ,

$$
E(f,\phi|d) = \sum_{i=1}^{2}\frac{1}{2}(f_i-d_i)^2 + \frac{\lambda}{2}(f_1-f_2)^2 - (J^R - \frac{\lambda}{2}(f_1-f_2)^2)\cos(\phi_1-\phi_2). \quad (29)
$$

Q2-11 式 (29) の第 3 項に注目しよう．cos の前の係数 $J_{1,2} = J^R - \dfrac{\lambda}{2}(f_1-f_2)^2$ は $(f_1-f_2)^2$ の大きさによって符号を変える．$(f_1-f_2)^2$ が小さければ $J_{1,2} > 0$ のままであり，$(f_1-f_2)^2$ が大きければ符号が反転して $J_{1,2} < 0$ となる．$J_{1,2} > 0$ の時，$\cos(\phi_1-\phi_2) = 1$ がエネルギーが小さくなり，$J_{1,2} < 0$ の時，$\cos(\phi_1-\phi_2) = -1$ がエネルギーが小さくなることを確認せよ．

これらの考察から，f と ϕ が一方向的な相互作用でなく，双方向的な相互作用をすることが分かる．つまり，f の滑らかさの拘束条件は ϕ によって制御されており，逆に ϕ を決める方程式のなかには f の滑らかさの度合を表す，$(f_1-f_2)^2$ が入っている．

プログラム 2-2 それでは，式 (26) から (28) の初期条件から，はたして式 (14) から (17) のような状態へ系が収束していくかを計算機実験してみよう．計算機実験から，式 (14) から (17) のような状態へ系が収束していく場合もあるが，配布資料の図 11(a) のような状態へ収束する場合もあることがわかる．これは図と地の分離という意味では，誤った解である．図 11(a) を例に説明すると，真中の部分は同じ位相 ϕ を取る必要があるが，図の左側の位相 ϕ は負の値を取り，図の左側の位相 ϕ は正の値を取っている．ここで演習している 1 次元系では，この誤った解で計算は終了するが，2 次元系では図 11(b) の中間状態を経由し，図 10(c) のような "正しい" 解に収束する．

つぎに，位相を Ising スピンに置き換えたモデルを議論し，配布資料の図 13 について考察する．

Q2-12 式 (11)(12) の XY スピン $\boldsymbol{W}_i$ を Ising スピン $S_i = \pm 1$ に変更した系を考え，式 (29) に対応する 2 画素系のエネルギーを導出せよ．

Q2-12 の答え

$$E(f, S|d) = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2}(f_i - d_i)^2 + \frac{\lambda}{2}(f_1 - f_2)^2 - (J^R - \frac{\lambda}{2}(f_1 - f_2)^2)S_1 S_2. \tag{30}$$

Q2-13 式 (30) の第 3 項に注目しよう． S_1S_2 の前の係数 $J_{1,2} = J^R - \frac{\lambda}{2}(f_1 - f_2)^2$ は $(f_1 - f_2)^2$ の大きさによって符号を変える． $(f_1 - f_2)^2$ が小さければ $J_{1,2} > 0$ のままであり， $(f_1 - f_2)^2$ が大きければ符号が反転して $J_{1,2} < 0$ となる． $J_{1,2} > 0$ の時， $S_1S_2 = +1$(S_1 と S_2 が同符号) がエネルギーが小さくなり， $J_{1,2} < 0$ の時， $S_1S_2 = -1$(S_1 と S_2 が異符号) がエネルギーが小さくなることを確認せよ．

Q2-14 Q2-10 と **Q2-12** から，配布資料図 13 の Ising スピンと XY スピンの違いを考察せよ．

3 演習 3

演習 3 では演習 2 で述べた計算機実験のメカニズムを探るために，式 (29) の 2 画素系を詳しく議論する．

Q3-1 式 (29) に最急降下法を適用し，

$$\tau_f \frac{\partial}{\partial t} f_i = -\frac{\partial}{\partial f_i} E(f, \phi|d), \quad i = 1, 2, \tag{31}$$

$$\tau_\phi \frac{\partial}{\partial t} \phi_i = -\frac{\partial}{\partial \phi_i} E(f, \phi|d). \quad i = 1, 2, \tag{32}$$

を求めよ．

Q3-2 式 (31) と (32) から， $\Delta f \equiv f_2 - f_1$, $\Delta d \equiv d_2 - d_1$, $\Delta\phi \equiv= \phi_2 - \phi_1$ の微分方程式を求めよ．

Q3-2 の答え

$$\tau_f \frac{\partial}{\partial t} \Delta f = -(1 + 2\lambda(1 + \cos(\Delta\phi)))\Delta f + \Delta d \tag{33}$$

$$\tau_\phi \frac{\partial}{\partial t} \Delta\phi = -(2J - \lambda(\Delta f)^2)\sin(\Delta\phi). \tag{34}$$

これ以降，簡単のために $\lambda = 2J$ とする．この場合，式 (34) の sin の前の係数は $2J(1-(\Delta f)^2)$ となり， sin の前の係数は $|\Delta f| = 1$ をさかいめに正から負への符号を変える．

Q3-3 式 (34) の sin の係数が正である時，式 (34) の安定な平衡解 $\frac{\partial}{\partial t}\Delta\phi = 0$ は， $\Delta\phi = 0$ であることを実感せよ．その意味は以下の通りである． $\Delta\phi = \pi$ も $\frac{\partial}{\partial t}\Delta\phi = 0$ を満たすが，そこから少しでも $\Delta\phi$ がずれと，そのずれは増幅されてしまう．つまり不安定である．一方 $\Delta\phi = 0$ の時は，そこから少しぐらい $\Delta\phi$ がずれても， $\Delta\phi = 0$ の状態に戻って来る．つまり安定である．

Q3-4 式 (34) の sin の係数が負である時，式 (34) の安定な平衡解 $\frac{\partial}{\partial t}\Delta\phi = 0$ は， $\Delta\phi = \pi$ であることを実感せよ．

Q3-5 式 (33) の平衡解 $\frac{\partial}{\partial t}\Delta f = 0$ が，次のように $\Delta\phi$ の値に依存することを示せ，

$$\Delta f = \frac{\Delta d}{1+4\lambda}, \quad \Delta\phi = 0, \tag{35}$$

$$\Delta f = \Delta d, \qquad \Delta\phi = \pi. \tag{36}$$

繰り返しになるが，位相差が $\Delta\phi = \pi$ である時は， f_1 と f_2 は互いに相互作用しないので， $\Delta f = \Delta d$ となる．

Q3-6 式 (35) と (36) の二つの解は，どのような条件で切り替わるかを以下に従い理解せよ． **Q3-4** で議論したように， $\Delta f = 1$ をさかいめに $\Delta\phi$ の平衡解は 0 から π に変化する (簡単のために $\Delta f = -1$ は考えない)． Δd が小さい場合を考えよう．その場合は Δf も小さいことが予想されるので， $\Delta\phi = 0$ が安定な平衡解である．つまり Δd が小さい時は， Δf は式 (35) に従う．しかし， $\Delta f = \frac{\Delta d}{1+4\lambda} = 1$ をさかいめに， $\Delta\phi$ の平衡解は 0 から π に変化する．つまり式 (35) の条件は成り立たなくなる．一方， Δd が大きい場合は Δf も大きいので， $\Delta\phi = \pi$ が安定な平衡解である． Δd が大きい時は， Δf は式 (36) に従う．しかし， $\Delta f = \Delta d = 1$ をさかいめに， $\Delta\phi$ の平衡解は π から 0 に変化し，式 (35) の条件は成り立たなくなる．これらの考察から，

$$\Delta f = \frac{\Delta d}{1+4\lambda}, \quad 0 \le \Delta d \le 1+4\lambda, \tag{37}$$

$$\Delta f = \Delta d, \qquad \Delta d \ge 1, \tag{38}$$

をえる． $\lambda > 0$ だから， $1 \le \Delta d \le 1+4\lambda$ で， Δf は $\Delta\phi = 0,\ \pi$ に応じて二種類の解を持つ．この性質を双安定性と呼ぶ．双安定性が文脈依存性の本質である．何故なら，文脈依存性とは，同じ入力 (差)Δd でありながら，条件の違いにより見え (の差)Δf が違うことであるからである．

また，演習 3 の 2 画素系の議論で，各々の画素を高次領野と低次領野のニューロンだと思うと， $\Delta\phi$ の違いにより，相互作用 λ が有効的に制御されていることがわかる．

4 演習 4

式 (19)， (20) と (22) を用いると，式 (22) は一般に以下のような形に表される，

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \sum_j J_{i,j}\sin(\phi_j - \phi_i). \tag{39}$$

この式と青柳先生の配布の資料の式 (8),

$$\frac{d\psi_i}{dt} = \omega_i + \sum_j J_{i,j} \sin(\psi_j - \psi_i + \beta_{ij}), \tag{40}$$

の関係を議論しよう．

Q4-1 式 (40) の ω_i に i 依存性が無いとし ($\omega_i = \omega$)， $\psi_i = \omega t + \phi_i$ とおくことにより，式 (39) を導出せよ．ただし， $\beta_{ij} = 0$ とする．

ここでの議論から，これまで議論した位相を神経細胞の発火のタイミングと考える妥当性が理解できる．