

ニューラルネットワークにおける学習と緩和の統合

龍谷大学 理工学部 機械システム工学科
堤 一 義 (Kazuyoshi Tsutsumi)

Abstract: We discuss the relationship between the learning and the relaxation in neural networks, exemplifying our two integrated neural network models composed of Backprop. and Hopfield Nets. In the model #1, Hopfield Net works for energy minimization, and two Backprop. Nets put in front and in rear of the Hopfield Net function as mapping networks with learning capability. The input signals from the external space are mapped via one Backprop. Net into the internal space, where Hopfield Net minimizes the total energy according to the warped internal space representation. The output signals of Hopfield Net are mapped again to the external space via the other Backprop. Net with the inverse mapping. If the indirect feedback loop via two Backprop. Nets is used, the constraints are satisfied according to the distance measure in the non-warped external space. The model #2 has a network architecture in which two Hopfield Nets are cross-coupled via multi-layered internetworks. A Lyapunov function for storing one state in each Hopfield net leads the necessity of the delta rule for training two-layered linear internetworks. It is also shown that the generalized delta rule is derived in the case of employing multi-layered internetworks with nonlinear hidden units. Each internetwork is composed of forward and backward subnets with the same connection weights. In the backward subnets, the deltas for connectionistic learning are computed. At the same time, their final outputs and the inputs to them are utilized effectively for network relaxation via extra paths to Hopfield Nets.

1. はじめに

1940年代から始まるとされるニューラルネット研究における1つの中心的話題は、シナプス学習の問題であり、様々なモデルが提案され活発な議論が行われてきた¹⁾。最近では、非線形ユニットによって構成された多層ニューラルネットの学習を可能とする一般化デルタルール(バックプロパゲーションアルゴリズム)が提案され、このアルゴリズムによって学習されたニューラルネットが優れた汎化能力を持つことが明らかにされている²⁾。また、ニューラルネットをダイナミックシステムと捉え、その振舞いを検討する研究も古くから行われている³⁾。生体内で典型的に観測される振動現象(バースト状神経パルス)に関する研究は有名であり、初期視覚(Early Vision)における正則化理論(Regularization Theory)では、緩和に基づく理論から導かれる並列処理構造が網膜の構造と極めて類似していることが指摘されている⁴⁾。緩和ネットの1つであるホップフィールドネットは連想メモリとして提案され、最適化問題などへの応用も多く例示されている。

脳の情報処理のモデルとして見た場合、すでに提案されているこうした人工ニューラルネットワークはいずれも妥当性のある異なる基本概念であるように思われる。例えば、バックプロパゲーションネットワークに代表される写像ネットワークとホップフィールドネットワークに代表される緩和ネットワークを比較してみよう。学習可能な写像ネットワークにおいては、入出力関係を評価する誤差エネルギーが最小化されるようにユニット間の結合強度が修正される。一方、緩和ネットワークにおいては、フィードバックを介したユニット状態の自己調節によって、即ち、ユニットの出力そのものがパラメータとなって熱エネルギーあるいは電力エネルギーが最小化される。これら2種類のネットワークの動作は見掛け上良く似た最小化プロセスに基づいているが、「最小化されるべきもの」も「修正されるべきもの」も異なっている。

では、そのような基本モデルが脳の中に個別に存在し、脳の情報処理機構として別々に機能していると考えられるべきなのか。一つの可能性として、もしこれらの枠組みの何れにも妥当性があるとすれば、その基本原理が矛盾なく統合したより高次のメカニズムが存在することが考えられる。そうした相互関係を探ることは今後の重要課題である。本稿では、筆者の提案している2つのモデルを紹介し、学習と緩和がニューラルネットワークの中でどのように関係付けられ、統合によってどのような機能が生み出され得るかについて論じることにした。

2. 統合モデル I ("Relaxing in a Warped Internal Space" Model)

式(1)によって記述されるフィードバック型アナログネットワークは、図1に示すホップフィールドネットワークとして知られている⁵⁾。

$$-c_i \frac{dU_i}{dt} = \sum_j T_{ij}^+ V_j^+ + \sum_j T_{ij}^- V_j^- + \frac{U_i}{r_i} + I_i \quad (1)$$

膜ポテンシャルと出力パルス密度に対応する電圧をそれぞれ U_i と V_i とおくとき、入出力特性が

$$V_i = g(U_i), \quad dg^{-1}(x)/dx \geq 0 \quad (2)$$

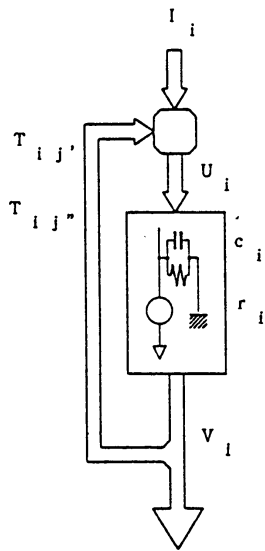
で与えられるニューロン様素子によって構成されている。フィードバック結合の荷重は T_{ij}^+ と T_{ij}^- である。また、 c_i と r_i はそれぞれキャパシタンスと抵抗値である。ここで、以下のエネルギーを定義し、

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij}^+ V_i V_j^+ + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij}^- V_i V_j^- + \sum_i \frac{1}{r_i} \int_0^{V_i} g^{-1}(V) dV + \sum_i I_i V_i \quad (3)$$

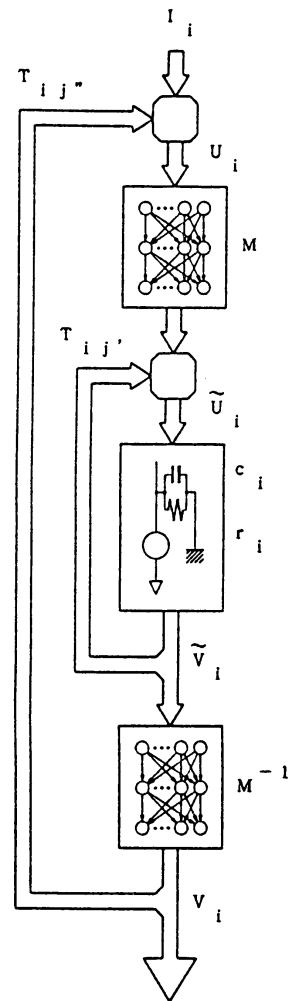
これを時間微分すると、

$$\frac{dE}{dt} = \sum_i \frac{dV_i}{dt} \left[\sum_j T_{ij}^+ V_j^+ + \sum_j T_{ij}^- V_j^- + \frac{U_i}{r_i} + I_i \right] \quad (4)$$

を得る。これに式(1)を代入し式(2)の性質を用いると、 $dE/dt \leq 0$ となる。こうして、ホップフィールドネットワークを用いれば式(3)で定義されたエネルギーを最小化できることが分かる。解



[図1] ホップフィールドネット
のブロック図



[図2] 統合モデル I
("Relaxing in a Warped
Internal Space" Model)
のブロック図

くべき問題をエネルギー最小化問題として定式化しエネルギーを構成すれば、式(3)から式(4)を得る上述の過程を経て結合荷重 T_{ij} を決定することができる。フィードバックループの中に非線形要素が入っていても、それが少なくとも1階微分可能な滑らかな関数として表現できるならば、この枠組みは全く同様に成立する。そのように様々な拘束条件が混在する場合には、非線形演算部を有するループをもう1系統用意し、フィードバックループを2系統にすればよい⁶⁻⁷⁾。

この手法は基本的にエネルギー勾配を単調に下るだけのものであるから、仮に線形のニューロン様素子を用いたとしても、フィードバックループの中に配置した非線形要素の性質によってローカルミニマムに陥る可能性がある。この問題を解決する方法としては様々なものが考え得るが、空間を適当に変形させ、その変形空間における距離測度に従った最短経路に沿ってエネルギーを最小化するという考えも1つの方法と言える。特に緩和の経路を問題とする場合には有効であると思われる。

そこで、2つの多層ネット M 及び M^{-1} を用意し、これらが互いに式(5)のような逆写像関係

を持つとする。

$$M(M^{-1}(x)) = x \quad (5)$$

そして、図2に示すように緩和ネットを2つの写像ネット M , M^{-1} によって挟み込むことを考える。多層ネットの写像能力によって外部空間を变形内部空間へ写像し、その变形空間内でエネルギー最小化を行なわせようという訳である。しかし、フィードバックループを2つの写像ネットで挟まれた内側だけに配置すると、变形された空間ですべての拘束条件が満たされることになる。变形されていない外部空間において満たさねばならない拘束条件がある場合には、このようなアーキテクチャでは都合が悪い。そこで図2にも示すように、2つの写像ネットの外側にもフィードバックの経路を設けることにする。内部空間表現に従うネットワークパラメータを \tilde{U}_i 及び \tilde{V}_i とおくと次式が成り立つ。

$$\tilde{U}_i = M(U_i), \quad \tilde{V}_i = M(V_i) \quad (6)$$

$$U_i = M^{-1}(\tilde{U}_i), \quad V_i = M^{-1}(\tilde{V}_i)$$

さらに、これらの関係式が電圧だけでなく電流に関しても同様に成り立つとする。このとき、式(1)における拘束条件に関する項のうち、 T_{ij} に関する項のみを变形内部空間で最小化すると仮定すれば、図2に示すネットワークの振舞いは次式によって記述することができる。

$$M^{-1} \left[-ci \frac{d\tilde{U}_i}{dt} - \frac{\tilde{U}_i}{r_i} - \sum_j T_{ij} \tilde{V}_j \right] = \sum_j T_{ij} M^{-1}(\tilde{V}_j) + I_i \quad (7)$$

さらに变形すると、

$$-ci \frac{d\tilde{U}_i}{dt} = \sum_j T_{ij} \tilde{V}_j + \frac{\tilde{U}_i}{r_i} + M \left[\sum_j T_{ij} M^{-1}(\tilde{V}_j) + I_i \right] \quad (8)$$

となる。こうして、ネットワークの振舞いを内部空間のパラメータだけを用いて記述することができる。直接フィードバックループによって処理されるエネルギーは、变形内部空間の距離測度に従って最小化され、 M^{-1} と M を介した間接フィードバックループによって処理されるエネルギーは、变形されていない外部空間における距離測度に従って最小化が行われることになる⁸⁾。

3. 統合モデルII (Cross-Coupled Hopfield Nets)

2種類のネットワークの統合については他の試みも考えられる。例えば、ネットワークダイナミクスと同様に学習を時間変化として取り扱い、両者を含むリアプノフ関数を見出すことである⁹⁾。そこで、式(1)で記述されるホップフィールドネットを2つ用意し、図3に示す概念図に従って、一方の出力が他方の入力に結合されるようお互いをクロス結合したネットワー

クを構成する。そして、クロス結合を介し、各々のホップフィールドネットが互いの状態を想起し合って最小となる以下のようなエネルギーを定義する。

$$\begin{aligned}
 E &= E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(\text{cross})} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij}^{(1)} V_i^{(1)} V_j^{(1)} + \sum_i \frac{1}{r_i^{(1)}} \int_0^{y_i^{(1)}} g^{-1}(V) dV + \sum_i I_i^{(1)} V_i^{(1)} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij}^{(2)} V_i^{(2)} V_j^{(2)} + \sum_i \frac{1}{r_i^{(2)}} \int_0^{y_i^{(2)}} g^{-1}(V) dV + \sum_i I_i^{(2)} V_i^{(2)} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_i (V_i^{(1)} - O_i^{(2)})^2 + \frac{1}{2} \sum_i (V_i^{(2)} - O_i^{(1)})^2 \tag{9}
 \end{aligned}$$

但し、 $O_i^{(1)}$ 、 $O_i^{(2)}$ はクロス結合部の変換出力である。このクロス結合部に線形入力ユニットと線形出力ユニットからなる2層ネットを仮定した場合には、

$$O_i^{(1)} = \sum_j W_{ij}^{(1)} V_j^{(1)}, \quad O_i^{(2)} = \sum_j W_{ij}^{(2)} V_j^{(2)} \tag{10}$$

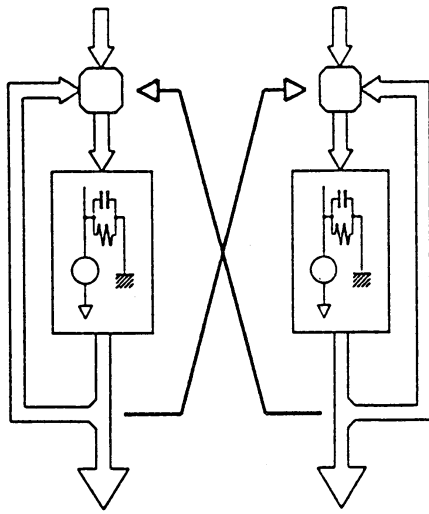
となる。これを式(9)に代入して時間微分すると、

$$\begin{aligned}
 \frac{dE}{dt} &= \sum_i \frac{dV_i^{(1)}}{dt} \left[\sum_j T_{ij}^{(1)} V_j^{(1)} + \frac{U_i^{(1)}}{r_i^{(1)}} + I_i^{(1)} \right. \\
 &\quad \left. + (V_i^{(1)} - \sum_j W_{ij}^{(2)} V_j^{(2)}) - \sum_j W_{ji}^{(1)} (V_j^{(2)} - \sum_k W_{jk}^{(1)} V_k^{(1)}) \right] \\
 &\quad + \sum_i \frac{dV_i^{(2)}}{dt} \left[\sum_j T_{ij}^{(2)} V_j^{(2)} + \frac{U_i^{(2)}}{r_i^{(2)}} + I_i^{(2)} \right. \\
 &\quad \left. + (V_i^{(2)} - \sum_j W_{ij}^{(1)} V_j^{(1)}) - \sum_j W_{ji}^{(2)} (V_j^{(1)} - \sum_k W_{jk}^{(2)} V_k^{(2)}) \right] \\
 &\quad + \sum_i \sum_j \frac{dW_{ij}^{(1)}}{dt} \left[V_j^{(1)} (V_i^{(2)} - \sum_k W_{ik}^{(1)} V_k^{(1)}) \right] \\
 &\quad + \sum_i \sum_j \frac{dW_{ij}^{(2)}}{dt} \left[V_j^{(2)} (V_i^{(1)} - \sum_k W_{ik}^{(2)} V_k^{(2)}) \right] \tag{11}
 \end{aligned}$$

を得る。式(12)で記述されるネットワークを構成し、

$$-c_i^{(1)} \frac{dU_i^{(1)}}{dt} = \sum_j T_{ij}^{(1)} V_j^{(1)} + \frac{U_i^{(1)}}{r_i^{(1)}} + I_i^{(1)} + (V_i^{(1)} - O_i^{(2)}) - \sum_j W_{ji}^{(1)} \delta_j^{(1)} \tag{12}$$

$$-c_i^{(2)} \frac{dU_i^{(2)}}{dt} = \sum_j T_{ij}^{(2)} V_j^{(2)} + \frac{U_i^{(2)}}{r_i^{(2)}} + I_i^{(2)} + (V_i^{(2)} - O_i^{(1)}) - \sum_j W_{ji}^{(2)} \delta_j^{(2)}$$



[図3] クロス結合
ホップフィールドネット
の概念図

そのインターネット部の結合荷重 $W_{ij}^{(1)}$, $W_{ij}^{(2)}$ を式(13)に示す学習ルール、即ち、デルタルールで学習すると仮定すれば、

$$\eta^{(1)} \frac{dW_{ij}^{(1)}}{dt} = V_j^{(1)} \delta_i^{(1)} \quad (13)$$

$$\eta^{(2)} \frac{dW_{ij}^{(2)}}{dt} = V_j^{(2)} \delta_i^{(2)}$$

これらを式(10)に代入することによって、 $dE/dt \leq 0$ となる。但し、

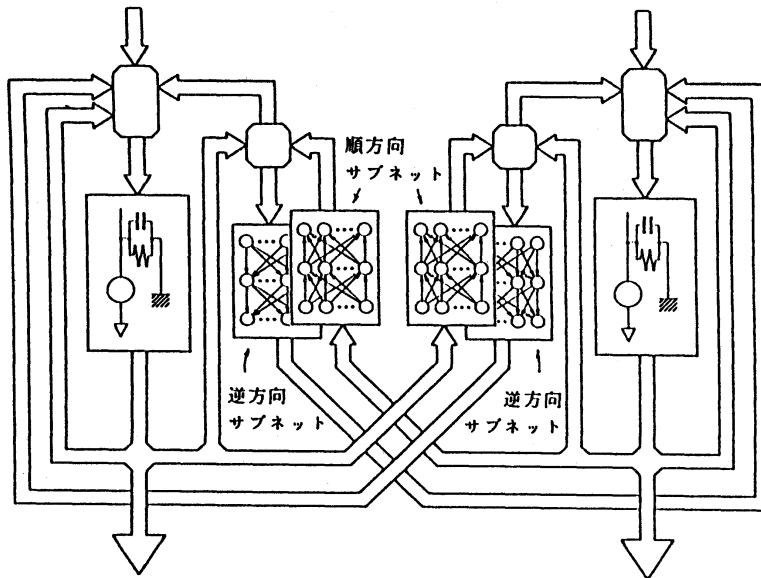
$$\delta_i^{(1)} = V_i^{(2)} - \sum_j W_{ij}^{(1)} V_j^{(1)} \quad (14)$$

$$\delta_i^{(2)} = V_i^{(1)} - \sum_j W_{ij}^{(2)} V_j^{(2)}$$

である。式(12)で記述されるネットワークと式(13)のデルタルールを用いることによって、式(9)で定義されたエネルギーを最小化できることが分かる。

以上の結果は線形ユニットのみからなる2層ネットを仮定した場合の結果であるが、インターネット部に非線形隠れユニットを有する多層ネットを仮定した場合には、同様な計算を経てインターネット部の学習ルールとして一般化デルタルールが導出される。図4に示すブロック図はこうして得られたネットワークアーキテクチャを示している。

導出されたネットワークは基本的にはクロス結合であるが、詳細において図3に示した概念図とは異なる。各インターネットは順方向のサブネットと逆方向のサブネットからなり、それらは同じ結合荷重強度を持つ。一般化デルタルールの通常の適用においては、デルタ（逆伝播させる誤差）の計算はネットワークを仮定せず仮想的に行なわれる。ネットワークを実在させることも可能であるが、仮にそのようなネットワークを仮定したとしてもそれ以上の意味を持



[図4]
統合モデルⅡ
(Cross-Coupled
Hopfield Nets)
のブロック図

たない。しかしながら、ここで得られたアーキテクチャでは、デルタを計算するための逆方向サブネットの最終出力がネットワークの緩和に重要な役割を果たしており、一般化デルタルールの通常の適用では必要のない逆方向サブネットが「実在」しなければならないことが導かれる。誤差逆伝播のための逆方向サブネットの最終出力が、2つの緩和ネットの振舞いに深く関与していることは注目すべき点である¹⁰⁾。

式(9)の各エネルギー項の重み付け、学習速度を決定する定数 η 、緩和速度を決定する c や r などによってネットワークの振舞いは異なることになるが、一般的な動作に関して次のことが言える。即ち、各ホップフィールドネットの持つ安定平衡点は、クロスに配置されたインターネットによって相互に連想的関係付けが行なわれ、この関係付けの結果として、各平衡点間を順に滑らかに推移して行くようなネットワーク出力を得ることができる。

4. おわりに

これらのモデルでは、緩和ネットに記録された状態（平衡点）の想起が可能であると同時に、その状態に至る過程（経路）を生成することができる。平衡点に関わる情報はすべて緩和ネットが受け持ち、時間方向の補間、即ち、時間変化の滑らかさを緩和ネットがすべて処理するという点は両方のモデルに共通である。一方、写像ネットは、その空間的写像能力によって、モデルⅠでは平衡点に至る経路をコントロールし、モデルⅡでは各平衡点間の連想的構造を決定するよう機能する。「緩和ネットの記録に必要な情報」と「写像ネットの学習対象となるべき情報」を区別し、写像ネットと緩和ネットは統合モデルの中でそれぞれの役割に徹することになっている。緩和ネットの結合部を学習によって獲得させるアルゴリズムの研究も進められているが¹¹⁾、仮にそれを導入する場合においても、すべての情報を学習の対象として一緒に取り扱うということにはならない。

より高次の機能が矛盾なく引き出されるという点に加え、統合によって新しい事実が導き出されるという点が重要である。例えば、モデルⅠの2つの写像ネットの学習については、 M への入力パターンは M^{-1} におけるターゲットパターンであり、 M におけるターゲットパターンは M^{-1} への入力パターンとなる。従って、入力とターゲットからなる学習セットは1組で良い。これは「逆伝播する誤差」と「アーキテクチャ」との関係付けを考える上で非常に示唆的であるように見える。

モデルⅡでは、「逆伝播する誤差」は、実在する逆方向サブネットを通してネットワークのダイナミクスに直接関与している。これまで一般化デルタルールにおいて仮想的に考えられてきた「逆伝播する誤差」に対して、この結果は1つの解釈を与えている。さらにモデルⅡでは、エネルギーの構成の仕方、特にクロス結合に関わるエネルギーの設定の仕方次第で、通常的一般化デルタルールとは異なる学習アルゴリズムが導出できる可能性もある。誤差逆伝播のためのアーキテクチャを考える際にも様々な材料を提供してくれるのではないかと考えている。

筆者は、これらのモデルをロボットマニピュレータの軌道計画や姿勢の連想などに適用している¹²⁻¹³⁾。そうした問題の解決がこれらのアーキテクチャを導く動機付けになっているという面もある。工学の諸問題は生体の機能と深い関わりがあるものであり、具体的な問題が基礎的な理論展開に対して示唆を与えることがあってもそれは極めて自然であると言える。提案している2つのモデルはそれぞれに統合の形が異なっている。従って、両者を統合することでさらに複雑な情報処理が可能となる。筆者は、学習可能な写像ネットとして一般化デルタルールによる多層ネット、緩和ネットとしてホップフィールドネットを取り上げ統合を試みているが、それぞれ独立に議論されている基本原理はこれのみに留まらない。その意味で、今後調べなければならない選択枝は極めて多いと言える。

脳の情報処理メカニズムを総合的に理解するためには、プリミティブとなる基本原理の解明が重要である。そしてそのことに加え、それらの関係付けが必要であろうというのが筆者の立場である。単に「複数のネットワークを組み合わせる」という意味で「統合」という表現を用いているのではない。統合という過程を経て、より高次の情報処理機能を導き出し、個々の議論では分からなかった基本原理の問題点を明らかにできる可能性が大いにあるということである。

[参考文献]

- 1) M. L. Minsky and S. A. Papert: Perceptrons (Expanded Edition), The MIT Press (1988)
- 2) D. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. Williams: Learning Internal Representation by Error Propagation, Parallel Distributed Processing Vol. 1, The MIT Press, pp. 318-362, 1986
- 3) R. M. J. Cotterill: Computer Simulation in Brain Science, Cambridge University Press, 1988
- 4) T. Poggio: Early Vision: From Computational Structure to Algorithms and Parallel Hardware, Computer Vision, Graphics, and Image Processing, 31, pp. 139-155, 1985

- 5) J.J.Hopfield: 'Neural' Computation of Decisions in Optimization Problem, Biological Cybernetics, **52**, pp.141-152, 1985
- 6) D.W.Tank and J.J.Hopfield: Simple 'Neural' Optimization Networks: An A/D Converter, Signal Decision Circuit, and a Linear Programming Circuit, IEEE Trans. on CAS, **33-5**, pp.533-541, 1986
- 7) K.Tsutsumi and H.Matsumoto: Neural Computation and Learning Strategy for Manipulator Position Control, Proc. of IEEE International Conference on Neural Networks (ICNN-87) Vol.IV, pp.525-534, 1987
- 8) K.Tsutsumi: A Multi-Layered Neural Network Composed of Backprop. and Hopfield Nets and Internal Space Representation, Proc. of International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN-89 at Washington-DC) Vol.I, pp.365-371, 1989
- 9) P.K.Simpson: Artificial Neural Systems, Pergamon Press, 1990
- 10) K.Tsutsumi: Cross-Coupled Hopfield Nets via Generalized-Delta-Rule-Based Internetworks, Proc. of IJCNN-90 at San Diego Vol.II, pp.259-265, 1990
- 11) J.Barhen, D.G.Gulati, and M.Zak: Neural Learning of Constrained Nonlinear Transformations, IEEE Computer, **22-6**, pp.67-76, 1989
- 12) K.Tsutsumi: K.Katayama, and H.Matsumoto: Neural Computation for Controlling the Configuration of 2-Dimensional Truss Structure, Proc. of ICNN-88 Vol.II, pp.575-586, 1988
- 13) K.Tsutsumi: A Neural Network for Controlling the Configuration of Frame Structure with Elastic Members, Proc. of NASA Conference on Space Telerobotics Vol.II, pp.373-382, 1989