

広がる人工ニューラル・ネットワークの可能性

スパイク時間依存可塑性と動的ボルツマンマシン

人工ニューラル・ネットワークのビジネスへの活用が注目されていますが、特に時系列データを学習の対象とする場合には、大量の計算資源が必要になります。本稿では、時系列データを効率的に学習する人工ニューラル・ネットワーク「動的ボルツマンマシン」について解説します。特に、動的ボルツマンマシンの自然な学習則は、生物の神経回路網の学習則として知られるスパイク時間依存可塑性の性質を持っており、その背景と意義を説明するとともに、動的ボルツマンマシンの活用の可能性について紹介します。

▶▶ 1. 注目される人工ニューラル・ネットワーク

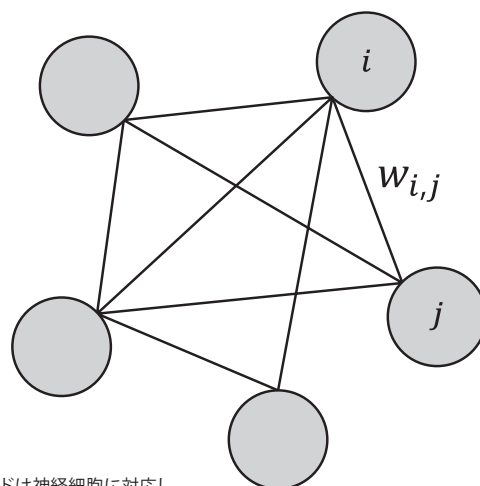
機械学習や人工知能に関する技術のビジネスへの活用に大きな期待が寄せられています。2012年以降に、画像識別や音声認識において、多層の人工ニューラル・ネットワークを用いた手法（深層学習）が驚異的な精度を達成することが示されたことにより、人工ニューラル・ネットワークに関連する技術が特に注目を集めています。

人工ニューラル・ネットワークに関わる研究の歴史は長く、そのきっかけは、生物の神経回路網の学習過程についての仮説として1940年代に提唱された「ヘブ則」にあります（以下、生物の神経回路網を「神経回路網」と呼び、人工の神経回路網を「ニューラル・ネットワーク」と呼びます）。ヘブ則は、2つの神経細胞が同時に発火すると、それらの神経細胞の結合が強まるという法則だと要約できます。強く結合した神経細胞の一方が発火すると、他方の神経細胞も発火する傾向があります。このヘブ則が、記憶の基礎となる現象と考えられています。

単純化して、猫を見たときに発火する神経細胞と、猫という言葉を見たときに発火する神経細胞があるとします。すると、猫を見たときに、猫という言葉を見ると、2つの神経細胞が同時に発火して、それらの結合が強くなります。これが学習・記憶の過程であり、十分に学習した後に猫を見ると、猫という言葉を想起するようになると例えられます。

人工的に神経細胞のネットワークを考えて、ヘブ則のように結合強度を変えていくと、生物のように学習ができるかと期待されます。ところが、神経回路網の学習過程の一面だけを模倣しても、生物と同じようには学習できないばかりか、何も学習できる保証はありません。実際の神経回路網は複雑であり、ヘブ則はその学習過程の重要な側面を捉えているものの、ヘブ則だけですべてを説明できるものではありません。また、ヘブ則は抽象的な現象を述べているに過ぎず、ニューラル・ネットワークの学習においてはそれを具体化する必要があります。

すなわち、神経回路網を模倣したニューラル・ネットワークとそのパラメーター（神経細胞間の結合強度など）



各ノードは神経細胞に対応し、2つの神経細胞 i と j の結合強度が $w_{i,j}$ で表されます。

図1.5 ノードからなるボルツマンマシン

の更新規則を定義するだけでは不十分であり、その更新規則に従ってパラメータを更新していくと学習ができることを数理的に保証する必要があります。そのためには、「学習」とはどのようなことを明確にして、ニューラル・ネットワークが「学習」できるように、そのパラメータの更新規則を導出することが求められます。

2. ヘブ則とボルツマンマシン

そのようなニューラル・ネットワークに、1980年代に提案されたボルツマンマシンがあります。図1に示すように、ボルツマンマシンは互いに結合した複数のノードから構成されます。各ノード*i*は神経細胞に対応し、神経細胞が発火した(値1)か否(値0)かを表す変数 x_i を持ちます。2つのノードは結合することができ、結合されたノード対*i*と*j*はその結合強度を表すパラメータ $w_{i,j}$ を持ちます。

ボルツマンマシンの変数は情報(パターン)を表します。例えば、いくつかのノードを入力情報に対応させ、別のいくつかのノードを出力情報に対応させることができます。ニューラル・ネットワークが扱う典型的な課題に、入力(例えば動物の画像)と出力(動物の種類)の関係を学習して、入力を与えたときに、対応する出力を返せるようにするというものがあります。ボルツマンマシンは、このような課題を、確率分布(各パターンの出力としての起こりやすさ)を求める問題として扱います。すなわち、ボルツマンマシンは、そのパラメータと入力に依存した確率分布に従って出力を生成しますが、この確率分布が、

$$w_{i,j} \leftarrow w_{i,j} + \eta \left(\underbrace{x_i x_j}_{\text{データが示唆する } i \text{ と } j \text{ の値の積}} - \underbrace{E[X_i X_j]}_{\text{ボルツマンマシンが示唆する } i \text{ と } j \text{ の値の積の期待値}} \right)$$

ノード*i*とノード*j*の結合強度 結合強度の更新量を決める学習率
ノード*i*とノード*j*の結合強度

ノード*i*とノード*j*が同時に発火する($x_i=x_j=1$)すると、結合強度 $w_{i,j}$ が大きくなります。 $E[X_i X_j]$ の項は、更新前のパラメータ値で決まる確率分布において、ノード*i*とノード*j*が同時に発火する確率(すなわちノード*i*の値 X_i とノード*j*の値 X_j の積の期待値)を表しており、すでにノード*i*とノード*j*が同時に発火すると期待されている($E[X_i X_j] \approx 1$)のであれば、データにおいてノード*i*とノード*j*が同時に発火しても、 $w_{i,j}$ の値はあまり更新しないことを意味しています。

図2. ボルツマンマシンの学習規則

学習用に与えられたデータが示唆する確率分布にできるだけ近くなるようにパラメータ値を更新していきます。つまり、これらの2つの確率分布の距離が目的関数(最小化すべき指標)となり、この目的関数値が最小となるようにパラメータ値を更新していくことがボルツマンマシンの学習です。

ニューラル・ネットワークのような複雑なモデルを、大量のデータを用いて学習するときには、すべてのデータを一度に利用してパラメータを更新するのではなく、データを少しずつ見ながら逐次的にパラメータを更新していく確率的勾配法が有効な手段です。ボルツマンマシンの場合も、入力と出力の対をひとつずつ見ながら、目的関数値が小さくなるようにパラメータ値を更新していきます。このときの更新規則(学習則)は、目的関数を微分することで導出できます。

驚くべきことに、そのように数理的に導かれるボルツマンマシンの学習則は、ヘブ則の性質を帯びています。具体的には、ノード対*i*と*j*の結合強度を表すパラメータ $w_{i,j}$ は、図2の規則にしたがって更新されます。図2で $E[X_i X_j]$ の項を無視すると、データにおいてノード*i*とノード*j*が同時に発火している(値が1になっている)のであれば、結合強度 $w_{i,j}$ を学習率 η だけ大きく(強く)します。この規則は、まさに「2つの神経細胞が同時に発火すると、それらの神経細胞の結合が強まる」というヘブ則の性質です。

無視した $E[X_i X_j]$ の項は、ヘブ則とは直接関係しません。が、ボルツマンマシンの学習において重要な役割を果た

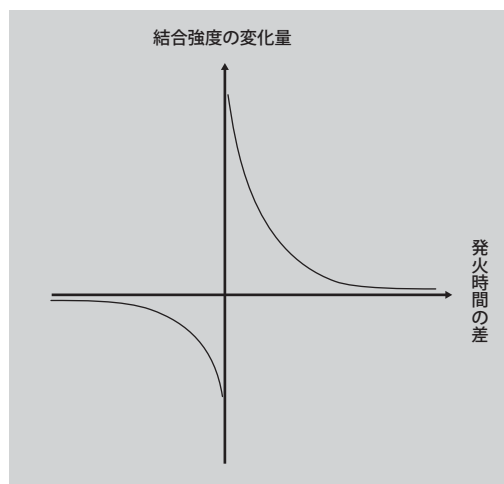


図3. 2つの神経細胞の発火時間の差に依存して結合強度の変化量が決まるスパイク時間依存可塑性

します。この項がないとボルツマンマシンの学習は発散して(いくつかのパラメーターの値がいつまでも大きくなり続けて)しまい、単純にヘブ則を模倣するのではボルツマンマシンをうまく学習できないことが分かります。このことから、単純に神経回路網を模倣してニューラル・ネットワークを学習するのではなく、適切に定めた目的関数からその学習則を導出することの重要性が確認できます。

▶▶ 3. スパイク時間依存可塑性と動的ボルツマンマシン

現在の神経科学においては、1940年代に提唱されたヘブ則だけでは、神経回路網の学習を十分に説明できないと言われています。ヘブ則を補足する学習則として、スパイク時間依存可塑性が1990年代に提唱され、生物実験でも確認されてきました。スパイク時間依存可塑性は、**図3**に示すように、結合強度の変化量が2つの神経細胞が発火する時間の差に依存します。具体的には、神経細胞*i*が発火した後に神経細胞*j*が発火すると、*i*から*j*への結合強度が大きくなりますが、*i*と*j*の発火時間の差が大きいくほど、この結合強度の変化量は小さくなります。また、神経細胞*i*から神経細胞*j*に発火スパイクが伝わるという関係がある場合に、*j*が発火した後に*i*が発火すると、*i*から*j*への結合強度が小さくなり、このときの結合強度の変化量も*i*と*j*の発火時間の差に依存します。

神経科学で提唱されたスパイク時間依存可塑性に、ニューラル・ネットワークの研究者も注目するようになりました。これまでのヘブ則に基づくニューラル・ネッ

トワークでは学習できなかったことが、スパイク時間依存可塑性に基づくニューラル・ネットワークで学習できるようになると期待されました。ところが、神経回路網の学習過程の一面を単純に模倣しても、生物と同じように学習できないばかりか、何も学習できる保証がないのは、これまでに議論してきたとおりです。スパイク時間依存可塑性の有効な活用のためには、意味のある目的関数から導出される学習則がスパイク時間依存可塑性の性質を持つようなニューラル・ネットワークの設計が必要です。

このような背景からIBM東京基礎研究所が2015年に提案したのが、動的ボルツマンマシンです[1][2][3]。**図4**に示すように、動的ボルツマンマシンとスパイク時間依存可塑性の関係は、ボルツマンマシンとヘブ則の関係に対応します。ボルツマンマシンから導かれる学習規則がヘブ則の性質を持っていることを示すことができますが、動的ボルツマンマシンから導かれる学習規則はスパイク時間依存可塑性の性質を持っていることが示されます。

図5に示すように、動的ボルツマンマシンは、神経細胞に対応するノードがネットワーク状に連結したものです。各ノードは、発火した(値1)か否(値0)かの値をとる変数を持ちますが、この値は時間とともに変化していき、また隣のノードに向かってその値が伝わり、隣のノードが発火する過程に影響を与えます。動的ボルツマンマシンの変数は時間変化するので、時系列のパターンを表すことができます。動的ボルツマンマシンもノード間の結合強度を表すパラメーターを持ちますが、このパ

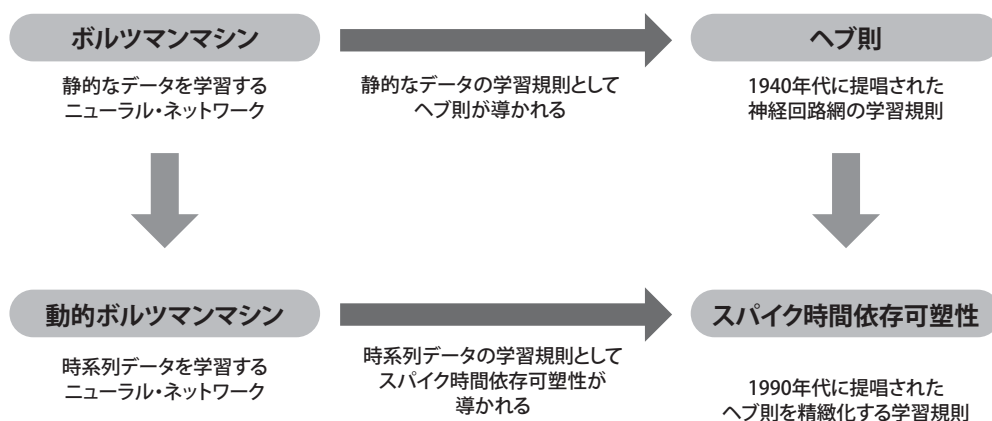


図4. ボルツマンマシン、動的ボルツマンマシン、ヘブ則、スパイク時間依存可塑性の関係

ラメータ値に応じて動的ボルツマンマシンの生成する時系列パターンの確率分布が決まります。

すなわち、ボルツマンマシンのパラメータ値を定めると静的なパターンの確率分布が決まるのに対して、動的ボルツマンマシンのパラメータ値を定めると時系列パターンの確率分布が決まります。従って、ボルツマンマシンが静的なパターンの集合を学習データとするのに対して、動的ボルツマンマシンは時系列パターンを学習データとします。すなわち、動的ボルツマンマシンは時系列パターンの確率分布（過去の系列を所与としたときに次のパターンの生成確率の分布）を学習します。このとき、動的ボルツマンマシンが定める時系列パターンの確率分布と、学習データの時系列パターンが示唆する確率分布との間の距離を目的関数とするのが自然です。この目的関数を微分することで、動的ボルツマンマシンの学習則を導出することができます。

驚くべきことに、そのように導出された学習則がスパイク時間依存可塑性の性質を帯びています。具体的には、ノード*i*から*j*への結合強度を表すパラメータ $w_{i,j}$ の更新規則の一つは図6で与えられます。図6において $E[X_j^{[t]}]$ を無視すると、時点*t*においてノード*j*が発火する($x_j^{[t]}=1$)と $w_{i,j}$ の値が $\eta \alpha_{i,j}^{[t-1]}$ だけ大きくなるのが分かります。この結合強度の変化量は $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ に比例しますが、どれだけ最近、またどれだけ頻繁に*i*から*j*に発火スパイクが伝わったかを $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ が表しています。従って、*i*の発火スパイクが*j*に伝わった直後に*j*が発火すると、 $w_{i,j}$ の値は大きく増加します。一方、発火スパイクが伝わ

てから時間が経って*j*が発火した場合には、その遅れ時間が長いほど $w_{i,j}$ の増加する量が小さくなります。これはまさに図3に示すスパイク時間依存可塑性の一部(図3の右側)の性質を持っているということです。動的ボルツマンマシンのもう一つの更新規則は、図3の左側に示す性質を持っています。

無視した $E[X_j^{[t]}]$ の項は、スパイク時間依存可塑性とは直接関係ないものの、動的ボルツマンマシンの学習で重要な役割を果たします。この項がないと動的ボルツマンマシンの学習は発散してしまうことから、単純にスパイク時間依存可塑性を模倣しても意味のある学習ができないことが分かります。

なお、2015年に提案された動的ボルツマンマシンは2値のパターンの時系列データを対象としていましたが、現在では、実数値の時系列パターン[4][5]や連続空間上の時系列パターン[6]も取り扱えるように拡張されています。

▶▶ 4. 動的ボルツマンマシンの可能性

動的ボルツマンマシンは、スパイク時間依存可塑性に理論的な基礎付けを与え、ニューラル・ネットワークにおけるスパイク時間依存可塑性の具体的な活用方法についての理解を深めます。これまで、スパイク時間依存可塑性が工学的に活用されていなかった要因の一つに、このような理論的な基礎付けが欠けていたことがありました。これは、ヘブ則が提唱された当初のニューラル・ネットワークの研究の状況と類似しています。図7に示すように、ヘブ則に動機付けられてニューラル・ネットワー

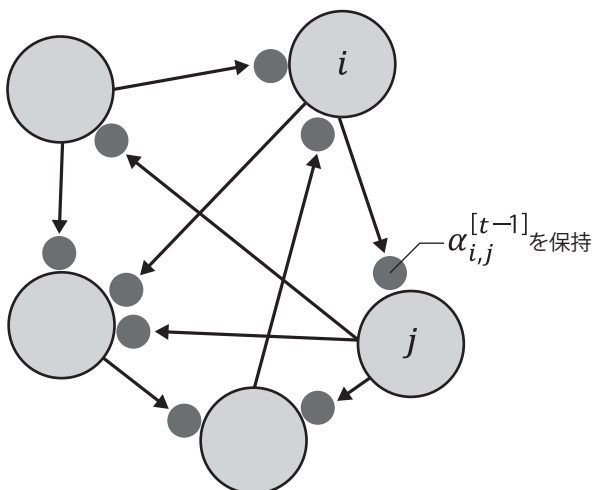


図5. 5ノードからなる動的ボルツマンマシン

$$w_{i,j} \leftarrow w_{i,j} + \eta \alpha_{i,j}^{[t-1]} \left(x_j^{[t]} - E[X_j^{[t]}] \right)$$

ノード*i*とノード*j*の結合強度
結合強度の更新量を決める学習率
データが示唆する次の*j*の値
 $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ を保持
 $x_j^{[t]}$
 $E[X_j^{[t]}]$
*i*から*j*に最近どれだけ発火スパイクが伝わったかを表す
動的ボルツマンマシンが示唆する次の*j*の値の期待値

時点*t*においてノード*j*が発火する($x_j^{[t]}=1$)と結合強度 $w_{i,j}$ が大きくなります。結合強度の変化量は $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ に依存しますが、 $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ は図5に示すノード*i*をノード*j*につなぐ接合部位(シナプス)で逐次更新される量です。ノード*i*から*j*に発火スパイク(値1)が伝わると、 $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ の値は増加し、そうでないときには $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ の値は減衰します。 $E[X_j]$ の項は、更新前のパラメータ値で決まる確率分布において、時点*t*においてノード*j*が発火する確率(ノード*j*の値 X_j の期待値)を表しており、すでにノード*j*が発火すると期待されている($E[X_j] \approx 1$)のであれば、データにおいてノード*j*が発火しても、 $w_{i,j}$ の値はあまり更新しないことを意味しています。

図6. 動的ボルツマンマシンの学習規則

クの研究が始まりましたが、ボルツマンマシンなどによるヘブ則に対する理論的な基礎付けが、今日の深層学習に代表されるニューラル・ネットワークの成功への重要な節目となっています。動的ボルツマンマシンによって理論的な基礎付けが与えられたことで、ニューラル・ネットワークにおけるスパイク時間依存可塑性の活用について、新しい道が開かれました。

実際に、動的ボルツマンマシンの自然な学習則がスパイク時間依存可塑性の性質を持つことは、科学的に興味深いだけでなく、工学的にも重要な意味を持っています。すなわち、神経回路網の学習則であることから、各神経細胞や結合部位は、そのときにそこにある情報だけを使って、関連する変数やパラメーターの値を更新します。このように時間的にも空間的にも局所的な学習則は、時系列データをリアルタイムに学習するのに適しています。つまり、各時点において、そのときに得られるパターンとそのときの動的ボルツマンマシンの内部状態に基づいて、パラメーターを効率的に更新していくことができます。従来のニューラル・ネットワークも、再帰的な構造を持たせることで、時系列データを学習することができますが、その際には通時的誤差逆伝播という手法で学習され、リアルタイムでの学習は困難になります。

リアルタイムでの学習においては、あらかじめ蓄えられているデータをまとめて用いるのではなく、逐次的に得られるデータを用います。すべてのデータを蓄えるこ

とができて、また、新しいデータが得られたときに全てのデータを用いて再学習できるのであれば、リアルタイムであることを意識する必要はありません。ところが、小さな記憶容量しか持たないデバイスで学習したい場合や、データの量が大きい場合には、すべてのデータをまとめて学習に用いることが困難になります。また、データの特徴が変化していく場合には、常に新しいデータを用いて学習し続けることが望ましいでしょう。

ところが、時系列データを学習するということは、過去のデータと未来のデータとの関係を明らかにすることであり、時系列データをリアルタイムに学習するのは簡単ではありません。すなわち、新しいデータを用いて学習するときに、過去のデータに関する情報がなければ、新しいデータと過去のデータとの関係を知ることができません。通常、時間的に離れた関係性を学習したい場合には、その時間の分だけの記憶容量や計算時間が必要になります。

動的ボルツマンマシンの場合、**図5**の黒丸に、ノード*i*からノード*j*に最近どれだけ発火スパイクが伝わったかを示す量 $\alpha_{i,j}^{[t-1]}$ を保持しています。この量を用いることで、新しく得られたデータと過去のデータとの関係を効率的に学習することを可能にしています。特に、時系列データが長くなっても、動的ボルツマンマシンの学習規則(**図6**)の計算時間は増えません。

時系列データの学習技術は、多岐に渡る応用の可能性

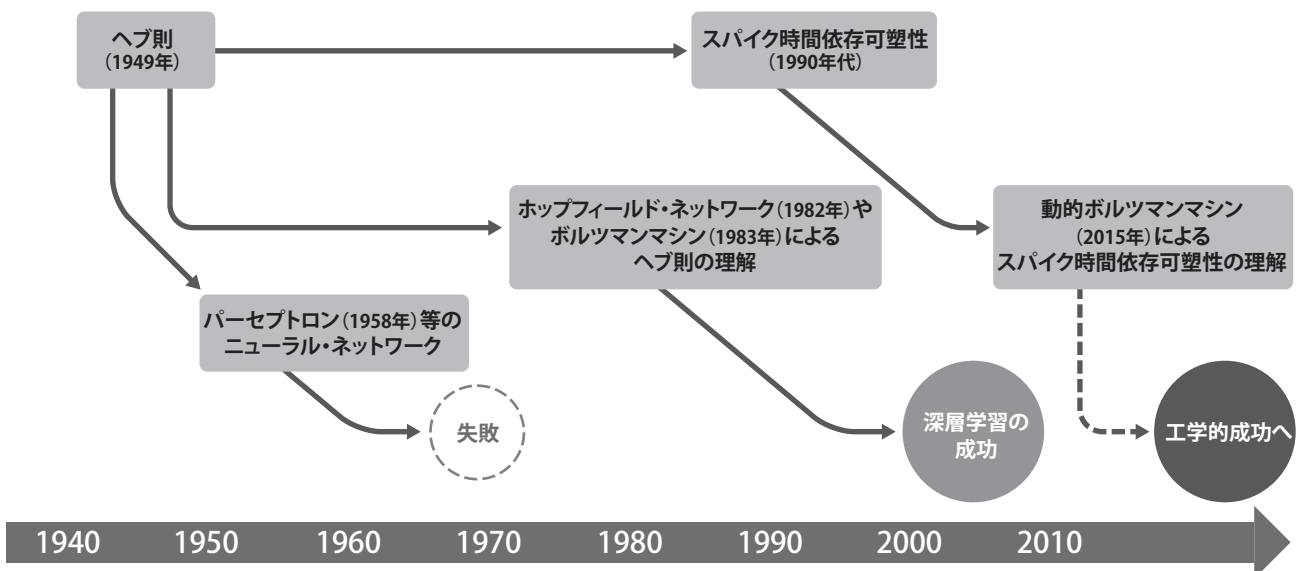


図7. ヘブ則とスパイク時間依存可塑性のニューラル・ネットワークへの活用の歴史

を持っています。過去の時系列パターンから将来のパターンを予測できれば、予測値をさまざまな意思決定に生かすことができます。また、うまく予測できなかったパターンを異常なパターンとみなすことで、動的なシステムの異常検知に利用することができます。時系列データを分類したり、所望の性質を持った時系列パターンを生成したりすることもできます。

また、将来に得られる利得を考慮して、逐次的に意思決定をするための学習技術に強化学習があります。標準的な強化学習においては、各時点で、そのときの状態に基づいて、最適な意思決定を行えるように学習をします。動的ボルツマンマシンは時系列を取り扱えることから、各時点で、そのときまでに観測された情報の系列に基づいて、最適な意思決定を行うための強化学習に用いることができます。強化学習においては、適切に状態を定めるのがしばしば困難です。適切に状態が定められないと、重要な情報を考慮できないために、良い意思決定ができません。動的ボルツマンマシンは、観測された情報の系列を利用するため、状態を決める必要がありません。過去に観測された情報に必要な情報が含まれていれば、良い意思決定方策を求められる可能性があります。

また、動的ボルツマンマシンを強化学習に用いると、多数の行動の組み合わせを効率的に最適化することができます。例えば、多数の主体を協調して行動させたい場合には、それぞれの主体の行動を最適化するのでは不十分で、すべての主体の行動の組み合わせを最適化する必要があります。標準的な強化学習の手法では、全ての可能な行動の組み合わせの良さを評価して、それらの評価値に基づいて、次の行動の組み合わせを選択していきます。そのために行動の組み合わせの数が多いと、計算が困難になってしまいます。動的ボルツマンマシンは、評価値の高い行動の組み合わせを効率的に選び出すことができます。これにより、複数の主体が協調するように逐次的に行動を選んでいくことができます。

神経回路網で知られるスパイク時間依存可塑性の特徴をもつ規則に基づいて、動的ボルツマンマシンは時系列データを学習することを解説してきました。生物が効率的に学習しているように、動的ボルツマンマシンはリアルタイムで時系列データを効率的に学習することができ

ます。また、多数の主体に協調して逐次的に意思決定させるための強化学習にも、動的ボルツマンマシンが有効である可能性について解説しました。動的ボルツマンマシンの具体的な応用例については、本号のコラム「サイエンスがもたらすコグニティブ時代のソリューション」[7]を参照してください。

謝辞

動的ボルツマンマシンの研究はJST、CREST(グラント番号JPMJCR1304)の支援を受けたものです。

[参考文献]

- [1] Takayuki Osogami, Makoto Otsuka: Seven neurons memorizing sequences of alphabetical images via spike-timing dependent plasticity, *Scientific Reports*, Vol. 5, 14149 (2015).
- [2] 恐神貴行, 大塚誠: スパイク時間依存シナプス可塑性により文字画像の列を記憶する7つの神経細胞, 月刊「画像ラボ」, 2017年1月号, pp. 41-48 (2017).
- [3] 恐神貴行, 大塚誠: 時系列データを認識するニューラルネットワーク「動的ボルツマンマシン」, *機能材料*, 2016年3月号, Vol. 36, No. 3, pp. 51-58 (2016).
- [4] Sakyasingha Dasgupta, Takayuki Osogami: Nonlinear dynamic Boltzmann machines for time-series prediction: Proceedings of the 31st AAAI Conference on Artificial Intelligence, pp. 1833-1839 (2017).
- [5] Takayuki Osogami, Hiroshi Kajino, Taro Sekiyama: Bidirectional learning for time-series models with hidden units, *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning* (2017).
- [6] Hiroshi Kajino: A functional dynamic Boltzmann machine, *Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence* (2017).
- [7] 吉住貴幸, 趙コン, “サイエンスがもたらすコグニティブ時代のソリューション,” *ProVISION*, Vol. 92, pp. 40-45 (2017).



日本アイ・ビー・エム株式会社
東京基礎研究所
ソリューション&サービス、数理科学
シニア・リサーチ・スタッフ・メンバー

恐神 貴行
Takayuki Osogami

1998年日本IBM入社。以来、東京基礎研究所において、最適化・機械学習・意思決定を中心とした数理科学に関わる研究開発に従事。現在、動的ボルツマンマシンに関わる研究開発プロジェクトをリード。IBMアカデミーメンバー。米国学術博士。