NNから述語への変換

大村伸一

平成31年1月26日

目 次

♠は疑問のあるセクション

1　何を書きたいか

1.1　意図

Neural Network(NN) の学習したモデルから述語表現への変換をどうするか。
単純な場合について考える。

2　NN をどうみるか

NN と言っているが、考えているのは CNN。複雑なのはまだ理解不足。

2.1　ことばの定義

$\bar{x}$: データを長さ M のビットベクトルと考える。1 ビットは true ともみなす。たとえば、100×100 の画像なら 10000 ビットのベクトルになる。$\bar{x}$ 全体の集合を $\hat{X}$ と書く。$\bar{x}$ のサイズは M とする。

C_i: 教師データとして与えるカテゴリー。全体は $\hat{C}$ と書く。カテゴリーの数は K とする。

P_i: C_i に対応する述語を P_i と書く。全体は $\hat{P}$ と書く。

$D : \hat{X} \to \hat{C}$: $D(\bar{x}) \in \hat{C}$ は、$\bar{x}$ が C_i であると判定されることと定義する。実際にはこんなに簡単ではない。

$\pi : \hat{X} \times \hat{C} \to Bool$: $\pi(\bar{x}, C_i)$ は、データ $\bar{x}$ が C_i である確率を示す。つまり $\Sigma_{i=1,K}\pi(\bar{x}, C_i) = 1.0$。

手書き文字を'0' から'9' までにカテゴライズする話では、たとえばある画像 n が P_i にも P_j にも高い確率で仕分けされてしまう場合もある。そんなときは $D(n)$ は値を二つ持つので、D は関数ではなく、ただの対応である。

述語の観点からは $D(n) \in C_i$ のとき、$P_i(n)$ が真であると考える。これが Fact になる。[1]

あるいは、τ を閾値として、$P_i(\bar{x}) \iff \pi(\bar{x}, i) \geq \tau$ という定義もありうる。

3　フラグメント

$x \sqsubseteq y \iff x \wedge y = x$ と定義する。
画像の一部のようなフラグメントを取り出す 1 ベクトルを $\bar{f}$ で示す。
$\bar{f} \sqsubseteq \bar{x}$ であり、$\bar{f}(\bar{x}) \iff \bar{f} \wedge \bar{x}$ とする。
$\bar{f}(\bar{b}) \sqsubseteq \bar{b}$ である。
$\bar{a}$ と $\bar{b}$ が与えられた時、
$f(\bar{a}) = f(\bar{(b)})$ ならば、$\bar{a}$ と $\bar{b}$ は f において同じ特徴を持っているといい
$\bar{a} \sim_f \bar{b}$
と書くことにする。

[1]時間まで考えると、Fact は変化する

4　$\wedge$ と $\vee$

あるデータ $\bar{x}$ について、$P_i(\bar{x})$ と $P_j(\bar{x})$ が成り立っている場合、$P_i \wedge P_j$ と $P_i \vee P_j$ を区別できるわけではない。

たとえば、$P_i \wedge P_j$ は、述語記号の一種であり、$\bar{X}$ の部分集合への関数に名前をつけることになる。

すでに定義された $\bar{X}$ の部分集合を組み合わせて新しい集合を作る操作が $\wedge$ や $\vee$ なので、たとえば

$$\forall x(P_i(x) \supset (P_i(x) \vee P_j(x)))$$

や

$$\forall x((P_i(x)P_j(x)) \supset P_i(x))$$

がなりたつことを NN ではどう学習するのか?

そもそも、出力層に P_iP_j などというカテゴリーはないので、教師あり学習ではそのような分類はできない。NN の外側で、論理を扱う仕組みを持つということだろうか。

それがどう役に立つのか、まだ想像がつかない (20181231)

5　中間層の概念

ある層 i のノードが表す何かと、それよりも出力層に近い層 j のノードが表す何かの間の関係も考えられる。

それぞれの層のノードに述語を対応づけられれば、できるだろう。

$P^i_p(x) \supset P^j_q(x)$

のような関係。

しかし、これも難しい。出力層の場合は、カテゴリーが確定しているのでまだ考えられるが中間層は入力も出力も変わっていくのでどう考えればいいのか。

6　成長

NN では、グラフの構造はあらかじめ与えられている。

ノードのリンクは、重みを 0 にすることで切り離すがことができるが、増やすことはできない。

増やすことは、脳の成長に相当すると思う。

勿論、最初から余分にノードを与えておけばシミュレーションできるかもしれない。

生物として、もともと脳は無制限に成長しないので、それでもいいのかもしれないがサイズと機能の関係を整理しないといけないような気がする。

7　場と考える

ある NN のグラフを場の表現と考えたらどうなるか。

8　カテゴリーの逆像

NN のシステムをひとつ考えると、それは次のような対応を与えるシステムである。

$$NN : \bar{X}, \mathcal{C} \to [0,1]$$

$\bar{X}$ が入力データとなるベクトル (画像なら pixcel のベクトル) で、$\mathcal{C}$ は NN のグラフを定義するときに決められた出力層のノードであると同時に、得たいカテゴリの集合である。

$[0,1]$ は確率を想定していて、先に書いたように確率を閾値を決めて、$\mathcal{C} \to \mathcal{P}$ として述語へのマップを定義するかもしれないが、なんらかの方法でこの対応が行われたとする。

このとき

$$P^{-1} = \{\bar{x} | P(\bar{x})\}$$

として、P の入力データ上の逆像を考えると

$$\forall x.P_i^{-1}(x) \equiv \forall x.P_i^{-1}(x) \supset P(x) \tag{1}$$

という式が作れるだろう。これが、$\mathcal{A}$ のルールになるのではないか。

この P^{-1} は、NN の行列計算の逆像になるので、計算は複雑であり、論理式を証明するのは困難だと思う。

このルールの正しさは NN に依存しており、与えられた $\bar{x}$ の個々について NN でカテゴリーを計算する必要があり、必ずしも proved とは言えないのかもしれないが、NN のモデル自体がそれを保証しているということだろう。