

---

# 自由エネルギー原理の基礎について徹底解説

---

**Masatoshi Yoshida (吉田 正俊)\***  
生理研・認知行動発達  
Department of System Neuroscience  
National Institute for Physiological Sciences  
Okazaki, 444-8585, Japan  
pooneil68@gmail.com

## Abstract

今年の生理研研究会は「認知神経科学の先端脳の理論から身体・世界へ」と題して、自由エネルギー原理 (Free-energy principle, FEP) をテーマに 9/2 に開催する。これに先立つ 8/31-9/1 には「脳の自由エネルギー原理チュートリアル・ワークショップ」というタイトルで FEP 入門のためのレクチャーとハンズオンを行う。これらに向けて FEP 入門の資料を作った。この文書では「自由エネルギー原理とはなにか」について概念的な説明からスタートして、最終的には数式を用いた詳細な理解と批判が可能になるところまでたどり着くことを目的としている。

## 1 自由エネルギー原理を数式無しで説明する

### 1.1 自由エネルギー原理の定義

自由エネルギー原理 (Free energy principle, 以下 FEP と呼ぶ) とはなにか。脳イメージングの解析ソフト SPM の作者として著名な、University College London の研究者 Karl Friston が提案している、知覚と行動と学習の統一原理だ。2005 年の *Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci*. 論文 [1] で最初に提案されてから、現在まで理論的にも進歩を続けている。

Friston 自身の定義を見よう。自由エネルギー原理とは「いかなる自己組織化されたシステムでも、環境内で平衡状態でありつづけるためには、そのシステムの (情動的) 自由エネルギーを最小化しなくてはならない」というものだ。また別の表現では「適応的なシステムが無秩序へ向かう自然的な傾向に抗して持続的に存在しつづけるために必要な条件」[2] とある。

順番に言葉を追っていこう。まず「原理」というだけあって、「もし xx であるなら、yy でなければならない」という形式になっていることがわかる。ベイズ脳仮説のような「仮説」でもなければ、予測符号化理論のような「理論」とも区別した表現になっている。

「いかなる自己組織化されたシステム」とあるけれど、われわれ人間にかぎらず、様々な生物に当てはまるのが想定されている。「システム」とあるので、生物でなくても成り立つけれども、たとえば氷の結晶には当てはまらないだろう。氷の結晶はシステムとして安定する境界を持っていないから。

そうすると「環境内で平衡状態でありつづける」というのは、氷の結晶が氷の結晶であり続ける話ではなくて、生命のあるものが生き続ける条件のことを言っているようだ。

そして「そのシステムの (情動的) 自由エネルギー」というものが定義されるものでなければならぬ。(情動的) 自由エネルギーというのがなんなのかはこれから順番に説明をしてゆくとして、いま知っておくべきは、そのシステムと外界との間での情報のやり取りに関わる概念なので、システムと外界との境界が必要なのだ。

---

\*Use footnote for providing further information about author (webpage, alternative address)—*not* for acknowledging funding agencies.

ではシンプルな例でもっと具体的に表現してみよう。

## 1.2 知覚=現在の外界の状態の推定

図1の例では agent が外界に接している状態が表現されている。先程も書いたようにこの「自己組織化されたシステム」は人間や生物に限らない。そのことを示すために以降「agent」という呼び方で統一する。

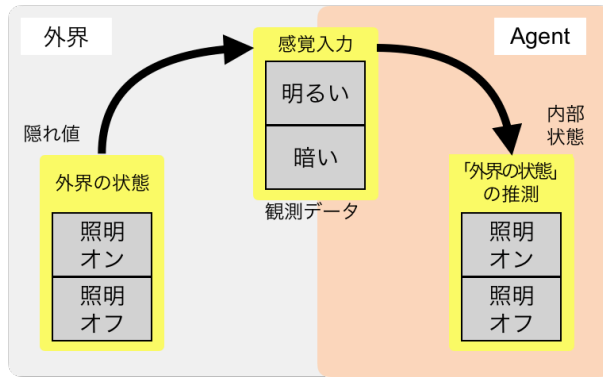


図1: 知覚の例

いま使う説明では、世界自体はわれわれの現実世界とまったく同じものなのだけど、agent が世界を切り分ける能力が低いので「外界の状態」は2つしか区別できない。「照明オン」と「照明オフ」だ。Agent は照明オンかオフについて直接アクセスすることはできない。つまり「外界の状態」は agent にとって隠れ値だ。

Agent は「外界の状態」を推測するために「感覚入力」を用いる。ここでは網膜のような光センサーがあって、照明の明るさに従って「明るい」「暗い」という2つのどちらかの値を時々刻々観測している (agent の識別能力が低いので2つの値しか区別できない)。Agent はこの観測データにだけアクセスできる。いま「感覚入力」と書いたが、「感覚 sensation」と「知覚 perception」を区別するためにこの言葉を使っている。たとえばわれわれが写真を見たとき、網膜の視細胞の活動のようなセンサー値が「感覚入力」だ。そしてその写真になにが写っているか知ることが「知覚」だ。

Agent は「感覚入力」を元にして、「外界の状態」がいまどうなっているかを推定する。これが「知覚」だ。たとえば「感覚入力」が「明るい」を観測したなら、「外界の状態」は「照明オン」である可能性が高いだろう。100%高いとは言えないことはわれわれは経験上知っている。「照明オン」でも「感覚入力」が「暗い」を示すこともありうるだろう (照明とセンサーの間になにか邪魔なものがあるかもしれない)。よってこの設定では、知覚とは、「外界の状態の推定」とは、あくまで確率的に表現される。「外界の状態が照明オンである確率は90%」というように。確率で表すことによって、推定がどのくらい確実かという uncertainty も表現することができる。

でもそもそもなぜ「感覚入力」から「外界の状態」を推定できるかといえば、agent はこれまでの経験から、「外界の状態」がどのように「感覚入力」に影響を与えるか、その因果関係について学習しているからだ。外界におけるこの関係を「生成過程」と呼び、agent が学習したこの関係を「生成モデル」と呼んで区別する。「生成過程」は外界の物理法則そのものだが、「生成モデル」はそれを写し取ったモデルでしかない。ゆえにモデルは間違っている可能性がある。今の場合も3次元の世界で照明からセンサーに光が届く生成過程があるのだけど、それをひとつの光センサーしかもたない agent は生成過程を1点に投射されたものとして生成モデルを獲得している。

## 1.3 行動選択=未来の外界の状態の推定

しかしこのような設定では agent は「桶の中の脳」と同じで、外界の生成過程を正しく生成モデルとして維持する方法がない。ここで行動を考える必要が出てくる。行動を含めた世界設定の図を示す (図2)。

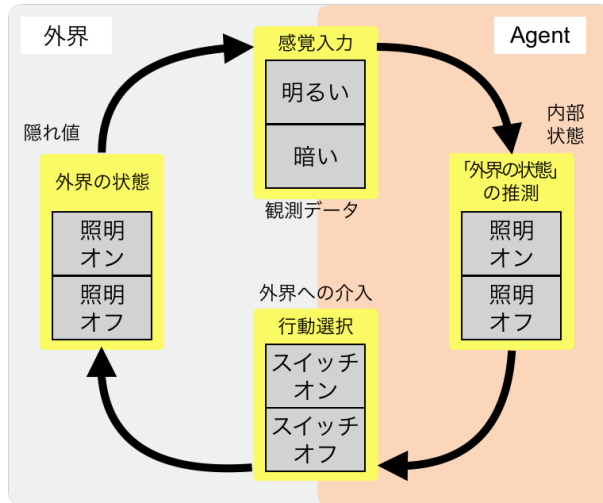


図 2: 感覚運動ループ

ここでは「外界の状態」が「感覚入力」という観測データを生み出し、「外界の状態」を推定する agent の内部状態が「行動選択」という「外界の状態」への介入を行うというループが閉じている。これを感覚運動ループと呼ぶ。

このループを使うことで、agent の「生成モデル」は外界の「生成過程」と整合的であるように維持される。たとえばいま agent は「感覚入力」が「暗い」を観測していて、「外界の状態の推定」(=知覚)として「照明オフ」の確率 90%としている。これを確かめるために、「行動選択」を「スイッチオン」にして、「感覚入力」が「明るい」になれば、現在の「外界の状態」が「照明オン」であるという推定(=知覚)の根拠となった agent の「生成モデル」は正しく機能していることが確認されるので、そのまま維持すればよいということがわかる。

この「行動選択」では、これからする行動(スイッチオン)が「未来の外界の状態」を「照明オン」にして、「未来の感覚入力」が「明るい」になるという推定をしたうえで、別の行動(スイッチオフ)ではなくスイッチオンが選ばれる。つまり「行動選択は未来の外界の状態の推定」に基づいている。

さきほどの知覚の話のときには「知覚とは現在の外界の状態の推定」であると書いた。両者を合わせると、知覚も行動選択も「外界の状態の推定」をいかにうまく行うかが知覚の正確さ、行動選択の正しさを決める。このようにして知覚と行動選択とをまとめて捉えることができる、これが「自由エネルギー原理が知覚と行動選択を統一的に説明できる」ということの内実だ。

ここまで(情動的)自由エネルギーがなにかの説明はしてこなかったが、(情動的)自由エネルギーとは「外界の状態の推定」をするときに agent が(非明示的に)使っている指標だ。Agent が(情動的)自由エネルギーを減らすように(脳や身体といった)内部状態を変化させるとき、知覚は現在の外界の状態を正確に推定できるようになり、行動選択は未来の外界の状態を正確に推定するように選ばれる。

いったんまとめる。

- 知覚: 現在の外界の状態の推定
- 行動選択: 未来の外界の状態の推定(の帰結)

#### 1.4 学習=外界の状態を推定するモデルの更新

冒頭に FEP とは「知覚と行動と学習の統一原理」だと書いた。では「学習」はどこに関わってくるか？

さきほどの例を用いれば、いま agent は「感覚入力」が「暗い」を観測していて、「外界の状態の推定」(=知覚)として「照明オフ」の確率 90%としている。これを確かめるために、「行動選択」を「スイッチオン」にすれば、「感覚入力」が「明るい」になるだろうという予測を

立てて行動選択をする。この予測が正しければ、推定の根拠となった agent の「生成モデル」は正しいのでそのまま維持すればよい。しかしこの予測が裏切られたとき、つまり「スイッチオン」にしたのに「感覚入力」が「暗い」を観測した。このときが「学習」の出番だ。

予想外のことが起きたときのまず最初の対処法は、繰り返しスイッチオン、オフを繰り返して行動選択から予測のサイクルを回す方法だろう。しかしもしこの予想外が続くのであれば、「生成モデル」が間違っている、現在の状況に合わなくなったということなので、生成モデルをアップデートしなければならない。これが学習だ。

発達や老化も同じように捉えることができる。Agent は発達により明るさセンサーの特性が変わると、どういう状況でも「明るい」を観測するようになるかもしれない。このようにして発達においても生成モデルの変更が必要になる。

同じことは進化にもあてはまるだろう。気球規模の変動で新たな環境に対応しなければならなくなった agent は、新たな環境(火山噴火によって照明は常に暗く観測されるかもしれない)に合わせた新しいセンサー特性へのアップデートが必要になるだろう。

このようにして FEP は「知覚と行動と学習」について「生成モデルを元に外界の状態の推定する」という単一の枠組みで統一的に説明することができる(と主張している)。以上をまとめるとこうなる：

- 知覚: 現在の外界の状態の推定
- 行動選択: 未来の外界の状態の推定(の帰結)
- 学習: 生成モデルのアップデート

## 1.5 まとめ、以降の方針

これで FEP とはなにか、ということについて数式を用いない範囲で言えることをだいたいいうことができた。FEP のような原理が本当にあるのかはわからないけど、まずはこの理論について知ってみよう、そのうえで、知覚と行動選択と学習とを統一的に説明できる理論というものがあろうか考えてみたい、これが私の FEP に対する態度だ。

よって以下の説明でも、FEP のような原理はありうるのかという観点から、実際の神経科学的データを説明するために FEP を使うテクニク的なところには入り込まないようにして、なるだけ FEP の本質的なところだけ抜き出して理解することに注力するという方針を取る。

### 余談

ところでこの FEP という考えはずいぶんキャラが立ってる。なんせ、知覚も行動も世界のことを知るためにあり、行動することで世界のことを理解できる、というのだから、これは学者的な世界観ではないだろうか？ われわれは世界のこと全部わかってなくても不安ではないし、わからないなりになんとか生きてるし、わかったからってなんともならんことが多いよと思うわけで。なんてことはどうでもいい。FEP 人生論はここでストップ。

## 2 変分自由エネルギー VFE の定義

このセクションでは、変分自由エネルギー VFE について、教科書的な定義と基礎についてまとめてみた。ちゃんとした説明のためには「パターン認識と機械学習 (PRML)」の 10 章とかの機械学習の教科書を読んでほしい。

だいたい知っている人のためにまとめておくとこのとおり：以降のセクションを読むために理解してほしいことはたった二つだ。(a) 変分推定を使うためには、問題となっている状況の生成モデルがどういう構造になっているかを因果グラフ、因子グラフを用いてきっちり決めてやる必要がある。(b) そのうえで、変分自由エネルギー  $F$  を定義するためには、なにが観測データで、なにが潜在変数を理解して、あとはそれは式 (5) に代入すれば一意に決まる。

## 2.1 ベイズ推定とは

そもそも変分自由エネルギー variational free energy VFE  $F$  とはなにかというと、変分推定を行うときに使われる値だ。変分推定というのはある種間接的な推定法なので、その前にもっと直接的な推定(ベイズ推定)について説明する。ベイズ推定というのは確率論的な推定法だ。

まず問題設定はこうだ。観測データ  $Y(= \{y_1, y_2\})$  ( $y_1$ :窓ガラスが濡れている or  $y_2$ :窓ガラスが濡れていない)と潜在変数  $Z(= \{z_1, z_2\})$  ( $z_1$ :外は雨が降っている or  $z_2$ :外は雨が降っていない)がある。いま窓ガラスが濡れている、を観測した( $Y = y_1$ )。このとき外が雨が降っている確率  $Prob(Z = z_1)$  を推定したい。これだけだと問題の解きようがないから、潜在変数  $Z$  (雨が降っているかどうか)という原因が観測データ  $Y$  (窓ガラスが濡れているかどうか)という結果を引き起こすときの関係を、これまでの経験から、両者の同時確率  $Prob(Z, Y)$  として持っている。この同時確率のことを生成モデル  $p(Z, Y)$  と表記する。

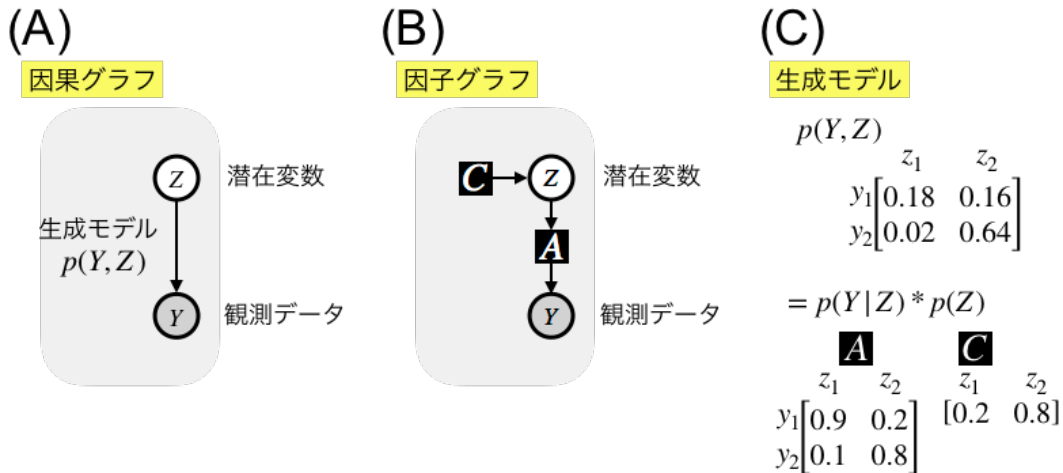


図 3: 窓ガラス  $Y$  から降雨  $Z$  を推測する

このときの潜在変数  $Z$  と観測データ  $Y$  の因果関係を有向グラフで表したのが図3A の因果グラフ。両者をつなぐ関係が生成モデル  $p(Z, Y)$  となっている。生成モデルは同時確率なので、具体的な例としては図3C のような  $2 \times 2$  の行列で表すことができる。同時確率なので、4 つのセルの確率を全部足すと 1 になる。

しかし図3A では生成モデル  $p(Z, Y)$  と  $Z$  および  $Y$  に対する関係がよくわからないので、それを明示したのが図3B の因子グラフ。このような表現にすると、生成モデル  $p(Z, Y)$  は  $Z$  の事前分布である  $C = p(Z)$ 、それから  $Z$  から  $Y$  を生成する観測モデル  $A = p(Y|Z)$  の二つに分解(因子化)することができる。こうすると生成モデルの意味も理解しやすくなる(図3C)。事前分布  $C$  からわかるように、そもそも雨が降る確率は低い( $p(z_1) = 0.2$ )。また、観測モデル  $A$  からわかるように、雨が降ってなくても( $z_2$ )、窓ガラスが濡れている( $y_1$ )という可能性はある( $p(y_1|z_2) = 0.2$ )。

いま知りたいのはある  $Y = y_1$  のときの  $Z$  の確率分布  $p(Z|y_1)$  だから、ベイズの法則が使える。

$$p(Z|y_1) = \frac{p(Z, y_1)}{\sum_Z p(Z, y_1)} \quad (1)$$

このようにして、生成モデル  $p(Z, Y)$  から事後分布(以下 true posterior と呼ぶ)  $p(Z|y_1)$  を計算するのがベイズ推定だった。

(なお、以下のすべての説明で、総和の記号  $\sum$  のみで説明できる状況の話だけをする。積分記号  $\int$  は出てこない。つか積分記号嫌い。)

## 2.2 変分推定とは

しかし、式 (1) は分母で全ての可能な潜在変数  $Z$  で足し算をするという作業が入っている。そんな事できないときもあるし、現実的な場面での応用では生成モデル  $p(Z, Y)$  は変数が多くて計算量的に難しいという事情もある。そこで使われる近似的方法が変分推定だ。

True posterior  $p(Z|y_1)$  を直接計算する代わりに、それを近似する確率分布として推測  $q(Z)$  というものを設定する。推測  $q(Z)$  の分布の形を変えて、true posterior  $p(Z|y_1)$  に一致させることができれば、true posterior  $p(Z|y_1)$  を計算できたのと同じことだ。

### 余談

この文書では  $q$  のことは一貫して「推測」と呼ぶことにする。より正確な表現では approximate posterior と呼ぶべきだろう。この呼び方だと、true posterior と同じ変数が入っているということがわかりやすい。True posterior の変数は潜在変数  $Z$  だから、推測  $q =$  approximate posterior の変数も潜在変数  $Z$  だ。どちらも全ての  $Z$  で和を取れば 1 になる。

それでもここで  $q$  を「推測」と呼ぶのは、今回の説明では近似法 (平均場近似やラプラス近似) を使わない exact な計算だけに話を絞るので、 $q$  を近似によって得られたものと混同しないようにしたいという意図がある。機械学習での変分ベイズとは近似推定であり、exact な計算ができるならこんな回り道をする必要はない。しかし自由エネルギー原理においての変分推定の本質とは、 $q$  という汎関数 functional を操作することにある、というのが私の理解。なのに FEP 論文の説明のほとんどは平均場近似やラプラス近似をしたあとのテクニックに終始していて、FEP の正確な理解が阻まれている、というのが私の現状認識。

## 2.3 KL 距離とは

このために、推測  $q(Z)$  と true posterior  $p(Z|y_1)$  というふたつの確率分布の近似度を計算する指標としてカルバック・ライブラー距離  $D_{KL}$  (以下 KL 距離, KLD と略する) というのを使う。

$$D_{KL}[q(Z)||p(Z|y_1)] = \sum_Z q(Z) \ln \frac{q(Z)}{p(Z|y_1)} \quad (2)$$

$y_1$  はすでに観察されて確定している値で、 $Z$  で総和をとっているから、KL 距離は  $q(Z)$  の分布の形だけによって決まる定数だ。もし推測  $q(Z)$  と true posterior  $p(Z|y_1)$  が完全一致していたら KL 距離は 0 になる。それ以外は  $>0$  となっている<sup>2</sup>。

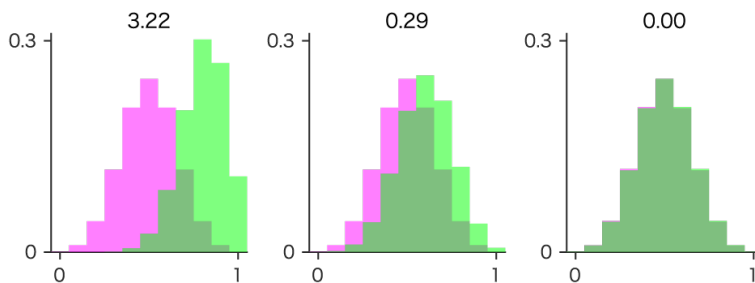


図 4: KL 距離の例

図 4 に KL 距離の例として、二つの確率分布 (二項分布から作成) のヒストグラムを書いて、その KL 距離 (単位は bits) を表示した。離れた分布ほど KL 距離は大きく (図 4 左)、二つの確率分布が完全に一致するときは KL 距離=0 なることがわかる (図 4 右)。

<sup>2</sup>距離とはいうけど逆向きは同じ距離ではない。つまり、 $D_{KL}[q(Z)||p(Z|y_1)] \neq D_{KL}[p(Z|y_1)||q(Z)]$ 。ではここでなぜ前者を使うのかということ、KL 距離と交差エントロピーとの関係から説明できるはずだが、後回しで。

## 2.4 KL 距離の最小化

しかしこの KL 距離が直接計算できるならいいのだが、それができたら直接 true posterior を計算すればいいだけだ。違いはどこに現れてくるかというと、KL 距離を式変形すると、式 3 のようになる。(式変形で  $p(Y, Z) = p(Z|Y)p(Y)$  を使用。)

$$\underbrace{\ln p(y_1)}_{\text{Log evindece}} = \underbrace{-\sum_Z q(Z) \ln \frac{q(Z)}{p(Z, y_1)}}_{\text{ELBO}=-F} + \underbrace{D_{KL}[q(Z)||p(Z|y_1)]}_{\text{KLD}} \quad (3)$$

左辺は観測データ  $Y$  が生成モデル  $p$  のもとでどのくらいの確率であり得るかという evidence  $p(Y) = \sum_Z p(Y, Z)$  の log をとったものなので、log evidence (周辺対数尤度) と呼ぶ。

余談

なお、 $p(Y)$  はただの観測データ  $Y$  の出現確率  $Prob(Y)$  ではないことに注意。 $p(Y)$  はいまある生成モデルに基づいたうえでデータの出現確率だから、尤度 likelihood なのだ。このことは後述の「暗い部屋問題」に関わってくる。

このことを明示するためにこの生成モデルに  $m$  という名前をつけて、 $p(Y|m)$  もしくは  $p_m(Y)$  と表示することもある。ここではその表示は採用しない。そのかわりに、生成モデル  $p()$  とただの確率  $Prob()$  を厳密に分けて表示している。

でもって、この log evidence というやつは log の中身が確率だから、かならず負の値を取る。(実際に観測されたデータがあるのだから、この値は決して  $-\infty$  にはならない。)そして右辺の第 2 項は  $KLD \geq 0$  だから、第 1 項は log evidence よりも必ず小さい。

$$\underbrace{\ln p(y_1)}_{\text{Log evindece}} \leq \underbrace{-\sum_Z q(Z) \ln \frac{q(Z)}{p(Z, y_1)}}_{\text{ELBO}=-F} \quad (4)$$

よって、この第 1 項は log evidence の下限になっている。そこでこの第 1 項は Evidence lower bound, ELBO と呼ばれる。そして変分自由エネルギー  $F$  とは  $F = -\text{ELBO}$  と単に符号逆転させただけのものだ。(ELBO は log evidence よりも小さいのだから、必ず負の値だ。ということは変分自由エネルギー  $F$  はかならず正の値。)

## 2.5 ちょっと整理してみる

ここで整理しておこう。以上のことからわかるのは、以下の (1)-(7) が全部ひとつながりの現象であるという点だ。

- (1) ベイズ推定をする
- (2) true posterior を計算する
- (3) 推測  $q$  を true posterior に一致させる
- (4) KL 距離を 0 にする
- (5) ELBO を最大化する
- (6) 変分自由エネルギー  $F$  を最小化する
- (7) 周辺対数尤度  $\ln p(Y)$  を最大化する

ただし、生物が扱うような複雑な状況においては、これらすべてを完全に実現することはできない。よって、どこかで近似が入ってくることになる。

自由エネルギー原理についての議論で、どれが目的でどれが結果か、どれがなにを近似しているのか、といった問題を理解するためには、この関係について考えればいい。



たとえば暗い部屋問題というのがある。自由エネルギー原理では (6)  $F$  を最小化することが生物の目的だというのが、それだったら、(7') 一番ありうる観測データをサンプルすればいいのだから、暗い部屋にじっとしていればいいじゃん、という議論。でもこれは (7) の解釈が間違っている。(7) は生成モデルの元での尤度なことから、暗い部屋という観測データの出現確率が高い生成モデルをあらかじめ獲得していない限り、これは成り立たない。(だから、冬眠する動物は暗い部屋を選ぶ。我々だって夜は暗い部屋を選ぶ。)

それよりは、ネット言論がタコソポ化することについて当てはめる方がまだ尤もらしいだろう。つまり、我々は自分の持論 (=世界についての生成モデル) を持っていて、それをより補強するデータばかり観測しようとする。だからネット言論ではみな自分が聞きたい意見ばかり集めるようになって、分断はより強調されていく。これは自由エネルギー原理から説明できる。なんだってー！

あと、ベイズ脳と自由エネルギー原理の関係についてもどちらが原因でどちらが結果かは不明でない。

- 議論 A: 「(1) われわれ生物はベイズ的に情報処理をしているんだ」というのが先にあって、そのための近似法として「(6) 自由エネルギー最小化をするように脳と身体を進化せさせてきた」と主張。
- 議論 B: なんらかの生物学的拘束条件から「(6) われわれ生物は自由エネルギー最小化をするようになっていく」が先にあって、その結果として「(1) 行動や知覚でベイズ推定をしているように見えている」と主張。

どちらも議論としてはありえる。Friston 自身は (6) を自由エネルギー「原理」と呼んだうえで、(1) をベイズ脳「仮説」と呼んでいるので、議論 B に基づいていると考えるのが筋が通っていると私は思うのだが、Friston の発言自体はそのつど言っていることがブレているように思う。

## 2.6 変分自由エネルギーとは

そういうわけで、変分自由エネルギー variational free energy VFE  $F$  は式5のとおり定義される<sup>3</sup>。

$$\begin{aligned}
 F &= \mathbb{E}_{q(Z)}[\ln q(Z) - \ln p(Y, Z)] & (5) \\
 &= \underbrace{D_{KL}[q(Z) \| p(Z|Y)]}_{\text{KLD}} + \underbrace{-\ln p(Y)}_{\text{Surprisal}} & (6)
 \end{aligned}$$

式5では期待値の記号として  $\mathbb{E}$  を使っている。下付き文字の期待値で重み付けして、その期待値の変数  $Z$  で和をとる。たとえば  $\mathbb{E}_{q(Z)}p(Z) = \sum_Z q(Z)p(Z)$  というふうに。

第2項は (sensory) surprisal と呼んでいる。この値は log evidence の符号逆転で、必ず正の値になっている<sup>4</sup>。得られた観測データが現在の生成モデルに基づいて予想外であれば、 $p(Y)$  はより小さくなるので、surprisal は大きくなる。Surprisal はシャノンの self information と呼ばれる。これを surprise と呼ぶこともあるが、次に出てくる Bayesian surprise との区別のために、この文書では surprisal という言葉で統一させてもらう。

## 2.7 Bayesian surprise とは

$F$  は式変形によって式7の形でも表現できる。(  $p(Y, Z) = p(Y|Z)p(Z)$  を使用。 )

<sup>3</sup> ここまでは観測データには具体例での  $y_1$  を使ってきた。しかしもちろんこの式は  $y_2$  でも成り立つわけで、ここからは観測データは  $Y (= \{y_1, y_2\})$  を使って表示する。しかしこれまでのことからわかるように、 $Y$  はすでに確定した一つのデータであり、一方で  $Z$  はとりうる値が全部並んだ変数になっている。同じ変数みたいに見えてべつものなのだ。慣れた人にとっては当たり前だろうけど、私はこれが馴染むまで相当時間がかかった。この違いを明示するために  $p(Z|y)$  や  $p(Z|Y=y)$  のように表示するのが正確だと思うが、式が長くグロくなるので、短く書ける場所以外ではその表記はしてない。

<sup>4</sup> ここで surprisal が必ず正になるのは離散分布を考慮しているからで、連続分布のときは成り立たない。



$$F = \underbrace{D_{KL}[q(Z)||p(Z)]}_{\text{Bayesian surprise}} + \underbrace{-\mathbb{E}_{q(Z)} \ln p(Y|Z)}_{\text{Uncertainty}} \quad (7)$$

第1項の *Bayesian surprise* は、現在の推測  $q$  と生成モデルにおける事前分布  $p$  との間の距離なので、推測  $q$  が観測データによってアップデートされると、より大きくなる。つまり、情報獲得の大きさと捉えることができる。

第2項の *Uncertainty* は、Friston の表記では  $-Accuracy$  となるが、*Accuracy* は必ず負なので、ここではわかりやすさ優先で、必ず正となる *Uncertainty* という表記を採用している。この項については後回しで<sup>5</sup>。

第1項の意味は、次の近似(いまこの文書で初めて近似を使った!)を考えるとさらに具体的になる。もし推測  $q(Z)$  を true posterior  $p(Z|Y)$  に完全に一致させることができた場合には、式9が成り立つ。

$$F = \underbrace{D_{KL}[q(Z)||p(Z)]}_{\text{Bayesian surprise}} + \underbrace{-\mathbb{E}_{q(Z)} \ln p(Y|Z)}_{\text{Uncertainty}} \quad (8)$$

$$\approx \underbrace{D_{KL}[p(Z|Y)||p(Z)]}_{\text{BS}'}} + \underbrace{-\mathbb{E}_{q(Z)} \ln p(Y|Z)}_{\text{Uncertainty}} \quad (9)$$

この第1項 *BS'* は、式10にあるように観測データの期待値  $p(Y)$  をかけてやると、観測データ  $Y$  と潜在変数  $Z$  の間の相互情報量 *MI* になっている(式11)。このことから、*Bayesian surprise* が情報獲得に関わっているということがわかるかと思う。

$$\mathbb{E}_{p(Y)} \text{BS}' = \mathbb{E}_{p(Y)} D_{KL}[p(Z|Y)||p(Z)] \quad (10)$$

$$= \text{MI}(p(Z|Y), p(Z)) \quad (11)$$

なお式9は後ほど出てくる期待自由エネルギー *EFE*  $G$  での *epistemic value* と同じ形になっている(ただし *epistemic value* では  $p$  ではなくて  $q$  だが)。これについては再訪する。

## 2.8 実例で変分自由エネルギーの最小化を試みる

それでは、図3に出した例を使って、推測  $q$  を変化させながら変分自由エネルギー  $F$  の最小化をシミュレーションしてみよう。まず、先に正解をカンニングしてしまうと、図3の生成モデル  $p$  から true posterior を直接計算して、

$$p(Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} | Y = [y_1 \ y_2]) = \begin{bmatrix} 0.529 & 0.030 \\ 0.470 & 0.969 \end{bmatrix}$$

となる。よって、 $Y = y_1$  (窓ガラスが濡れている) のとき、 $Z = z_1$  (雨が降っている) の確率は  $p(Z = z_1 | Y = y_1) = 0.529$  とわかった。事前分布  $p(Z = z_1) = 0.2$  であったことを考えると、窓ガラスが濡れている、という観察は *informative* であったことがわかる。

では  $q(Z)$  を変化させてみよう。ここで  $q(Z)$  の形を変えと言ったが、実のところ、 $q(Z = z_1)$  が決まれば、 $q(Z = z_2) = 1 - q(Z = z_1)$  も決まる。そこでパラメーター  $\phi = q(Z = z_1)$  を  $0 - 1$  の範囲で動かして *VFE*, *KLD*, *Surprisal* を計算してプロットしてやる。すると図5Aのとおりになった。

$q(Z)$  の初期状態は事前分布  $p(Z) = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.8 \end{bmatrix}$  と等しいと考えてやれば、 $\phi = 0.2$  からスタートするのが妥当だろう。このとき、

<sup>5</sup>なお、ここでの *uncertainty* は推定  $q$  の分散とは別ものであることに注意。現在の例では推定  $q$  は点推定をしているので、分散ではないことはわかると思う。今回の文書では推定の分散があるような例は扱わない。

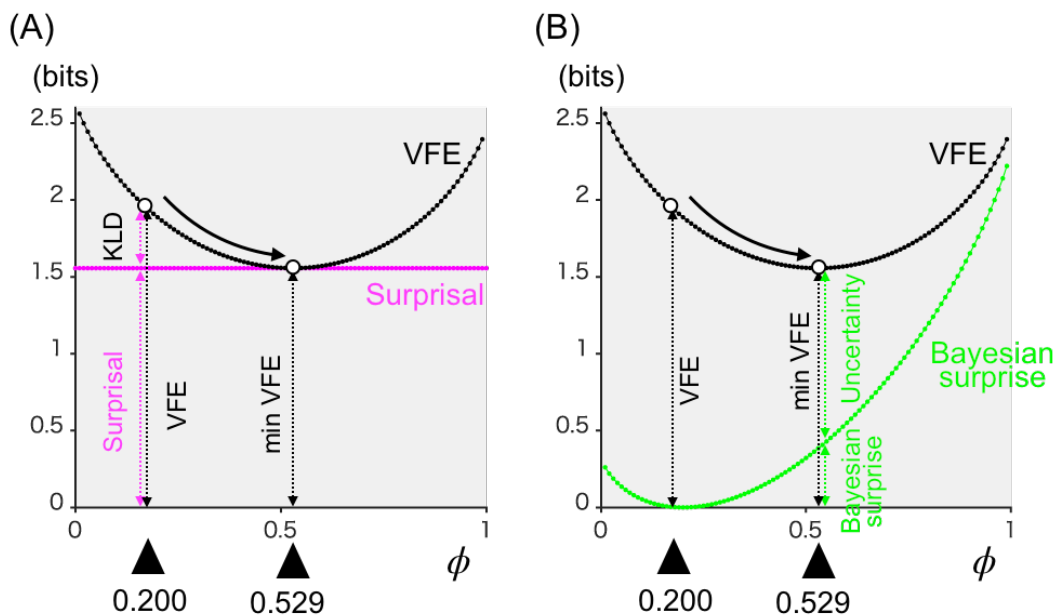


図 5: 変分自由エネルギー VFE の最小化

$$\begin{aligned}
 VFE &= 1.8879 \\
 KLD &= 0.3315 \\
 Surprisal &= 1.5564 \text{ (bits)}
 \end{aligned}$$

となっている。ここから  $VFE$  が小さくなる方に  $\phi$  を動かしていくと、 $\phi = 0.529$  で

$$\begin{aligned}
 VFE &= 1.5564 \\
 KLD &= 0 \\
 Surprisal &= 1.5564 \text{ (bits)}
 \end{aligned}$$

となる。 $KLD = 0$  で  $VFE$  が最小化された状態では、 $VFE = Surprisal$  となっている。この  $\phi = 0.529$  は直接 true posterior を計算した結果の  $p(Z = z_1 | Y = y_1) = 0.529$  と同じになっていることが確認できた。

そういうわけで、変分自由エネルギーを最小化することで、true posterior を近似できるということが確認できた。自由エネルギー原理では、脳はこのようなやり方で観察データ (感覚入力) から潜在変数 (外界の状態) を推定していると考えられる。以降のセクションでは、より知覚や行動に似せた状況での生成モデルを構築して、どのように  $VFE$  が計算されるかを見てゆく。

なお、図5から想像がつくように、もし  $VFE$  の曲線が local minimum を持っていたら、そこで停まってしまって、正しい true posterior が計算できないであろうことも想像がつく。そして、もっと複雑な生成モデルではそのようなことはいかにも起こりそうだ。

## 2.9 変分自由エネルギーの最小化を Bayesian surprise から見てみる

図5A では式 (5)  $F = KLD + Surprisal$  に基づいて、 $\phi$  を 0.2 から 0.529 に動かして、そのときに  $KLD = 0$  となり、 $F$  が最小化されるのを見た。では同じものを式 (6)  $F = Bayesian\ surprise + Uncertainty$  に基づいて表示してみよう (図5B)。

Bayesian surprise は  $q(Z)$  の初期状態  $\phi = 0.2$  では 0 になっていることがわかる。これは  $q(Z)$  の初期状態 =  $Z$  の事前分布  $q(Z) = p(Z)$  を採用したのが理由だ。まだこの段階では観察データ  $y_1$  から獲得した情報がゼロということ。

$$\begin{aligned} \text{VFE} &= 1.8879 \\ \text{Bayesian surprise} &= 0 \\ \text{Uncertainty} &= 1.8879(\text{bits}) \end{aligned}$$

$\phi$  は正負どちらに動かそうが、Bayesian surprise は増える。現状よりもちがうというだけで情報獲得なので。ということで、Bayesian surprise だけ見ても、VFE を下げることはできないということがわかる。

そして、 $\phi$  を 0.2 から 0.529 に動かして VFE を最小化したとき、Bayesian surprise が増えていることが確認できる。

$$\begin{aligned} \text{VFE} &= 1.5564 \\ \text{Bayesian surprise} &= 0.3845 \\ \text{Uncertainty} &= 1.1719(\text{bits}) \end{aligned}$$

図5B のプロットを見ると、 $\phi = 0.529$  は Bayesian surprise を最大化する場所ではないこともわかる。

## 2.10 変分自由エネルギーを微分して解析的に解いてみる

最後に変分自由エネルギー VFE  $F$  を  $\phi$  で微分して、自由エネルギーの最小化について解析的に解いてみることにしよう。ここで必要な数学的知識は高校数学 III まででいける。 $f'(z)$  は  $z$  の関数  $f(z)$  を  $z$  で微分したものを意味するとしうえで、 $(f(z)*g(z))' = f'(z)*g(z) + f(z)*g'(z)$  と  $(\ln z)' = \frac{1}{z}$  の二つだけ知っていれば解ける。

式6に  $Y = y_1, q(Z = z_1) = \phi, q(Z = z_2) = 1 - \phi$  を代入する。生成モデルから  $p(Y = y_1, Z = z_1) = 0.18, p(Y = y_1, Z = z_2) = 0.16$  も入れておく。

$$\begin{aligned} F &= \mathbb{E}_{q(Z)}[\ln q(Z) - \ln p(Y, Z)] \\ &= \sum_Z q(Z) * [\ln q(Z) - \ln p(Y, Z)] \\ &= q(Z = z_1) * [\ln q(Z = z_1) - \ln p(Y = y_1, Z = z_1)] \\ &\quad + q(Z = z_2) * [\ln q(Z = z_2) - \ln p(Y = y_1, Z = z_2)] \\ &= \phi * [\ln \phi - \ln 0.18] + (1 - \phi) * [\ln(1 - \phi) - \ln 0.16] \\ &= \phi \ln \phi - \phi \ln 0.18 + \ln(1 - \phi) - \phi \ln(1 - \phi) \\ &\quad - \ln 0.16 + \phi \ln 0.16 \\ &= \phi \ln \phi + \ln(1 - \phi) - \phi \ln(1 - \phi) \\ &\quad + \phi \ln \frac{0.16}{0.18} - \ln 0.16 \\ &= \phi(\ln \phi + \ln \frac{0.16}{0.18}) + (1 - \phi) \ln(1 - \phi) - \ln 0.16 \end{aligned}$$

これを  $\phi$  で微分する。

$$\begin{aligned}
F' &= \frac{dF}{d\phi} = [\phi(\ln \phi + \ln \frac{0.16}{0.18}) + (1 - \phi) \ln(1 - \phi) - \ln 0.16]' \\
&= \phi'(\ln \phi + \ln \frac{0.16}{0.18}) + \phi(\ln \phi + \ln \frac{0.16}{0.18})' \\
&\quad + (1 - \phi)' \ln(1 - \phi) + (1 - \phi) \ln(1 - \phi)' \\
&= \ln \phi + \ln \frac{0.16}{0.18} + \phi(\frac{1}{\phi}) \\
&\quad - \ln(1 - \phi) - (1 - \phi) \frac{1}{1 - \phi} \\
&= \ln \phi + \ln \frac{0.16}{0.18} - \ln(1 - \phi) \\
&= \ln \frac{0.16}{0.18} - \ln \frac{1 - \phi}{\phi}
\end{aligned}$$

$F' = 0$  と置くと  $\phi$  が求まった。

$$\begin{aligned}
0 &= \ln \frac{0.16}{0.18} - \ln \frac{1 - \phi}{\phi} \\
\ln \frac{1 - \phi}{\phi} &= \ln \frac{0.16}{0.18} \\
\frac{1 - \phi}{\phi} &= \frac{0.16}{0.18} \\
\frac{1}{\phi} &= 1 + \frac{0.16}{0.18} \\
\phi &= \frac{0.18}{0.18 + 0.16} \\
\phi &= 0.529
\end{aligned}$$

たしかに、 $\phi = 0.529$  で  $F$  が最小化するのを確認できた。

これでなにがわかったかという、われわれ生物が  $F$  を下げてゆくためには、

$$F \Leftarrow F + \alpha * F' \tag{12}$$

という更新ルール ( $\alpha$  は更新のスピードを決めるパラメーター) と  $F'$  を持っていればいい。そうすると  $F'$  が計算可能でないといけないわけだけど、確認のため、式 (11) に元に記号を入れて戻してやると、

$$\begin{aligned}
F' &= \frac{dF}{d\phi} = \ln \frac{0.16}{0.18} - \ln \frac{1 - \phi}{\phi} \\
&= \ln \frac{p(Y = y_1, Z = z_2)}{p(Y = y_1, Z = z_1)} - \ln \frac{q(Z = z_2)}{q(Z = z_1)} \\
&= \ln \frac{p(Y = y_1 | Z = z_2)p(Z = z_2)}{p(Y = y_1 | Z = z_1)p(Z = z_1)} - \ln \frac{q(Z = z_2)}{q(Z = z_1)}
\end{aligned}$$

となるので、第 1 項は生成モデルの  $A$  と  $C$  (図 3C 参照) さえあれば計算できる。True posterior を計算する必要はない。そしてこの第 1 項は、二つの対立仮説 ( $Z = z_1$  vs.  $Z = z_2$ ) での観察データ  $y_1$  についての対数尤度比になっている。これと第 2 項の現在の推測  $q$  による対数尤度比との差が  $F'$  の正体だった。

われわれ生物は (すくなくとも) このような単純な環境では、尤度比検定をすることによって認識・推論の過程を最適化している、というのが自由エネルギー原理の世界観だということになる。

## 2.11 このセクションで言いたかったこと

長々と書いてきたが、以降のセクションを読むために理解してほしいことはたった二つだ。(a) 変分推定を使うためには、問題となっている状況の生成モデルがどういう構造になっているかを因果グラフ、因子グラフを用いてきっちり決めてやる必要がある。(b) そのうえで、変分自由エネルギー  $F$  を定義するためには、なにが観測データで、なにが潜在変数を理解して、あとはそれは式 (5) に代入すれば一意に決まる。

ではこのセクションのおさらいを兼ねて、新しい生成モデルでこの二つの作業をやってみよう。図6A ではさきほどの図3の状況にひとつだけ要素が加わっている。図3A では、観測データ  $Y$  「窓ガラスが濡れているか」、潜在変数  $Z$  「雨が降っているか」の二つの要素だけがあった。図6A ではこれに加えて、潜在変数  $X$  として「スプリンクラーが動作しているかどうか」がある。この図ではスプリンクラーの動作は雨が降るかどうかとは無関係にしてある。(もし、雨が降ったときはスプリンクラーは動かさない、という因果関係を設定した場合には、 $Z$  から  $X$  への矢印も必要になる。)

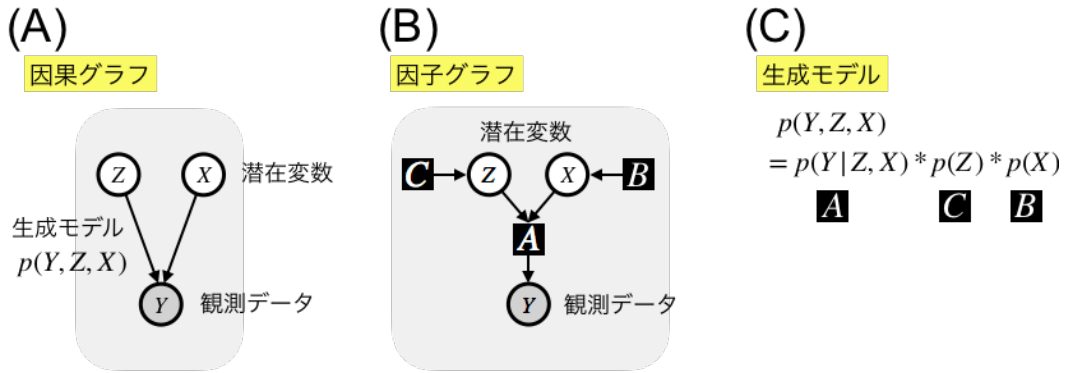


図 6: 窓ガラス  $Y$  から降雨  $Z$  とスプリンクラーの動作  $X$  を推測する

このような関係を因子グラフにすると図6Bになる。観察モデル  $A$  は二つの入力を受けて一つの出力を出すように変わった。ゆえに、雨が降っているかいないか  $\{z_1, z_2\}$  とスプリンクラーが動作しているかいないか  $\{x_1, x_2\}$  の4通りの組み合わせ  $\{(z_1, x_1), (z_1, x_2), (z_2, x_1), (z_2, x_2)\}$  について、窓ガラスが濡れているかどうか  $\{y_1, y_2\}$  の確率を知っている、これが観察モデル  $A$  だ(図6C)。

するとこのときの VFE  $F$  を計算するためには、観察データ  $Y$  と潜在変数  $Z, X$  を式 (5) の中に入れてやればよい。

$$F = \mathbb{E}_{q(Z)}[\ln q(Z, X) - \ln p(Y, Z, X)] \quad (13)$$

$$= \underbrace{D_{KL}[q(Z, X) \| p(Z, X|Y)]}_{\text{KLD}} + \underbrace{-\ln p(Y)}_{\text{Surprisal}} \quad (14)$$

$$= \underbrace{D_{KL}[q(Z, X) \| p(Z, X)]}_{\text{Bayesian surprise}} + \underbrace{-\mathbb{E}_{q(Z, X)} \ln p(Y|Z, X)}_{\text{Uncertainty}} \quad (15)$$

その結果が式15だ。つまり、式 (1-5) で  $Z$  だったところが、 $Z, X$  になっているだけ。つまり、複数の変数は同時確率として扱われるので、カンマつけて並べておけばいい。

## 3 自由エネルギー原理の前提、世界設定

### 3.1 前置き

さてこれからがいよいよ本番、自由エネルギー原理 (Free energy principle, FEP) についての説明を行ってゆく。FEP は 2005 年の Philo Trans R Soc Lond B Biol Sci. 論文 [2] から始まって、現在まで理論的にも進歩を続けている。このうちの最新バージョンが Friston et. al. Cogn Neurosci. 2015[3] で提案されるようになったものだ。

この最新バージョンでは、自由エネルギー原理 FEP はこれまでに用いられてきた連続的な時間での表現とは別に、部分観測マルコフ決定過程 POMDP にもとづいた離散的な時間で表現されるようになった。これによって FEP によれば、われわれ agent は「現在の外界の状態を推測する際の (情報理論的) 変分自由エネルギー  $F$  (variational free energy VFE) を最小化するように知覚する」だけでなく「未来の外界の状態を推測する際の (情報理論的) 期待自由エネルギー  $G$  (expected free energy EFE) を最小化する行動を選択する」というように、我々の知覚と行動が定式化されるようになった。

この文書の以下のパートでは、この期待自由エネルギー  $G$  をどのように導いているのかについて、以下の論文を参考にまとめてみた。Friston の論文では省略されているような、式の導出における前提について、なるだけ詳しくまとめてある。これだけ詳しいものはないのではないかとこの自負はあるが、それゆえに独自解釈になっている可能性もある。いったんこの文書を理解したならば次は原著論文の方に当たっていただきたい。

- Friston et. al. Cogn Neurosci. 2015[3] EFE の初出。
- Friston et. al. [Neural Comput. 2017][4] EFE についてのスタンダードな記述。
- Schwöbel et. al. [Neural Comput. 2018][5] Predicted free energy の概念の提案。
- Parr and Friston bioRxiv 2018[6] Generalized free energy の概念の提案。
- Gershman arXiv 2019[7] VFE と EFE についての的確な整理。
- Katahira et. al. PsyArXiv 2019[8] 単純な例による EFE の計算と retrospective surprise の概念の提案。

### 3.2 自由エネルギー原理における世界設定

この説明では、単純化した世界設定を用いるが、式変形においてはなるだけ近似は使わない (近似の導入をなるだけ遅らせる) という方針で行く。記号は私の以前の発表スライド [11] にあるものを踏襲する<sup>6</sup>。

本説明ではどのように  $F$  および  $G$  を計算するのだけを取り扱う。じっさいに生物が  $F$  および  $G$  を下げてゆく過程 (微分方程式が必要な部分) については sec.1 の最後で少々言及したが、以降は扱わない。

まず基本的な設定から説明しよう。

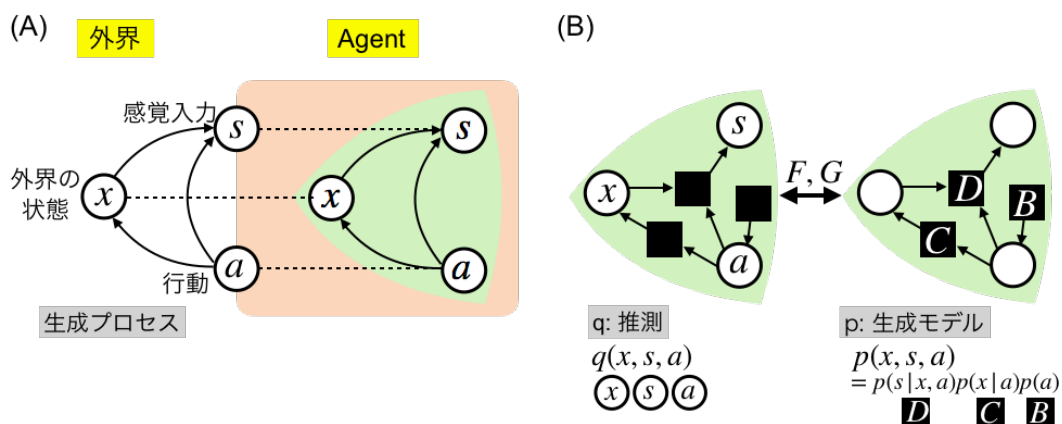


図 7: 基本的な設定

われわれ agent は外界の中に存在していて、感覚入力  $s$  と行動  $a$  を通して外界とつながっている (図7A)。現在観察している感覚入力  $s$  は世界の状態  $x$  から因果的に引き起こされる。Agent は世界の状態  $x$  には直接アクセスすることができない。Agent は行動  $a$  によってこの  $s$  を変えることができるし、 $x$  を変えて、その変化を  $s$  への変化として観測することもできる。このようにして、外界のうち、agent との相互作用に関わっている部分が「生成プロセス」だ。

<sup>6</sup>マルコフ意思決定プロセスで使われる observation  $o$  と state  $s$  や機械学習で使われる observed variable  $x$  と hidden variable  $z$  ではないので、置き換えて読んでほしい。

### 3.3 生成モデル $p$ と推測 $q$

Agentはこの生成プロセスを持っているのではなく、それを経験から学習した「生成モデル」 $p(x, s, a)$ を持っている。生成モデルは外界にある生成プロセスと同様に  $x, s, a$  の間での因果関係のグラフ構造として表現される。このグラフ構造は

$$p(x, s, a) = p(s|x, a)p(x|a)p(a) \quad (16)$$

と条件付き確率の掛け算として書くことができる。図7Aにある矢印の関係ををより明確にするために、図7Bでは因子グラフ (factor graph) を使って黒四角で表示している。つまり生成モデルの本体とはこのような変換器  $B, C, D$  であり、中に入っている変数  $x, s, a$  はまだ特定されていない<sup>78</sup>。

さらに agent は、時々刻々変化する  $x, s, a$  についてその時その時の推測  $q(x, s, a)$  を同時確率として持っている<sup>9</sup>。つまり点推定ではなく、不確定性込みで確率的な表現をしている。推測  $q$  はただの同時確率であり、生成モデル  $p$  のような因果的グラフ構造は持っていない。

$$q(x, s, a) \quad (17)$$

この表現は外界にある  $x, s, a$  とは別に agent が  $x, s, a$  についての推測を持っているということを表している。実際には Sec.1 でも書いたように、推測  $q$  とは true posterior を推定する approximate posterior であるので、 $q$  の中身は潜在変数が入る。よってじっさいの  $q$  の変数は、生成モデルのうちなにが潜在変数であり、なにが観測データであるかによって決まる。

#### コメント

話を少々先取りしておく、のちほど 3-2-1 で示すように、agent は外界の状態  $x$  についての推測をアップデートしてゆくが、それは実際には  $q(x)$  という確率分布の形を時々刻々アップデートすることであり、agent の内部状態を表すパラメーター  $\phi$  によって、 $q(x|\phi)$  と表す。また、4-4-2' に詳しく記したが、agent が  $s$  についての推定を持つとは、 $q(x, s) = q(s|x)q(x) = p(s|x)q(x)$  というように、生成モデルのうち、観察モデル  $p(s|x)$  を使って  $x$  についての推測  $q(x)$  からの計算をする、というのが本当のところ。よって正確に言うならば「agent は  $q(x, s, a)$  を推測している」というよりは「agent は  $q(x)$  を推測している」もしくは「内部状態として  $x$  についての推測のみを持っている」というほうが正しい。この点について将来的には、予測符号化のニューラルネットワークの単純なモデルとその説明のサブセクションを作成して、そこで詳しく説明する予定。

#### 未完了コメント

ここで FEP は予測符号化のニューラルネットワークでの計算を前提としている。つまり、予測符号化のニューラルネットワークで、「実際の  $s$  を観測したセンサー」と、「推測  $q(x)$  を表現しているニューロン」があるものを思い浮かべてほしい。さらにこの2つから入力を受けている「感覚入力  $s$  についての予測誤差ニューロン」がある。推測  $q(x)$  を表現しているニューロンは実際の  $s$  の予測として、 $q(x, s) = p(s|x)q(x)$  を前提としている。これらについては適切な場所にちゃんと書く必要があるが、未完了。

Agent はイマココの潜在変数 ( $x, s, a$  のどれか) を推測するように その同時分布 (=推測  $q$ ) を時々刻々アップデートさせてゆく。

このようにして、脳の中で行っていること (図7A) を生成モデル  $p$  と推測  $q$  とに分けたうえで (図7B)、その間で定義される変分自由エネルギー  $F$  と期待自由エネルギー  $G$  を最小化するように  $q(x, s, a)$  の分布の形をアップデートさせることが知覚 ( $x$  の推定) であり、行動選択 ( $a$  の

<sup>7</sup>このことを明示するためには  $p(X, S, A) = p(S|X, A)p(X|A)p(A)$  と大文字  $X = \{x_1, x_2, \dots\}$  で表記して、特定された値と区別することもできる。ここでは式 (1) の表記を使う。

<sup>8</sup> $p()$  は生成モデルのことを指し、一般的な確率  $Prob()$  はべつものとして表記する。

<sup>9</sup>POMDP などの強化学習の文脈では、 $q$  を信念 belief と呼ぶけれど、ここでは知覚も含めるので「推定」と呼ぶことにする。



推定)である、というのが自由エネルギー原理だ。ではどうやって  $F, G$  を定義するか。これがこの文書のメインピックなので、これから順を追って説明してゆく。

なお、推測  $q$  だけでなく生成モデル  $p$  を変えることによって自由エネルギーを下げることはできるが、ここでは考慮しない。つまり生成モデル  $p$  は時間によっては変化しないものとする。本当は学習などによって変化しうるけど、話を簡単にしておきたいので。

### 3.4 観測データ、潜在変数、パラメーターの区別

変分自由エネルギー VFE を計算する際には、観測データ、潜在変数、パラメーターを区別することが重要になる。観測データ、潜在変数についてはすでに sec.1 で言及したので、パラメーターについて説明を加えておく。

以下の図8Aに、Sec.1の図3Bで示した因子グラフを再掲した。ここで生成モデルのうち  $Z$  の事前分布を  $C(=p(Z))$ 、観測モデルを  $A(=p(Y|Z))$  と分けて(因子化して)、黒四角で示したのが因子グラフだった。 $C, A$  の実体は行列だった。この行列が生成モデルを特定する「パラメーター」となっている。このパラメーターの部分を外に追い出して白四角で表現したのが図8Bだ。

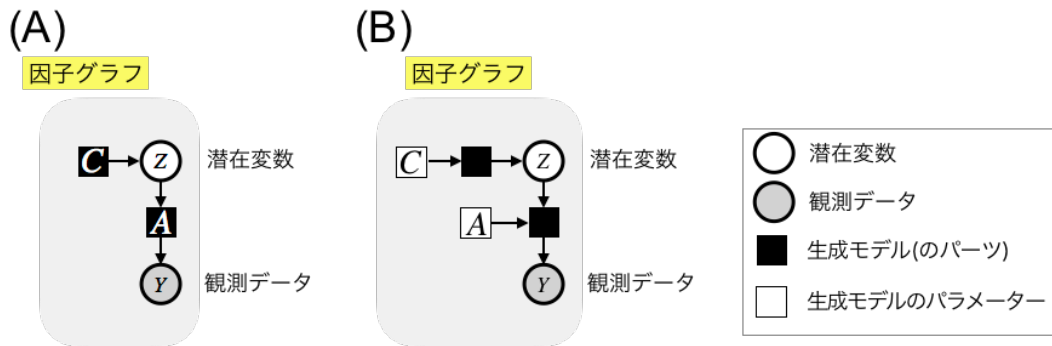


図 8: 時間を考慮した生成モデル

こうしてやると、生成モデルのパーツである黒四角とは、変数やパラメーターが入力されるまではなんの具体性もない、無時間的な箱であり、変換器であるということがわかる。これらのパラメーターは現在の説明では固定としている。つまり生成モデルは学習済みであり、変化しないものとしている。

しかし、学習などのモデルを作るに当たっては、これらの行列  $A, C$  を変化しうるものとすることも可能だ。この場合、行列  $A, C$  は潜在変数として扱われる。たとえば  $C$  を潜在変数として扱われるようになると、生成モデルは  $p(Y, Z, C)$  となり、可能な範囲の  $C$  をすべて考慮する必要が出てくる。つまり、 $p(Y, Z) = \sum_C p(Y, Z, C)$  のような周辺化ができるようになる。いっぽうで、元々の設定では  $C$  はパラメーターだったわけだが、この場合は可能な範囲の  $C$  などというものはないし、現在設定されている  $C$  に対してただひとつの生成モデルがあるだけだ。このことを明示するためには、生成モデルを  $p_C(Y, Z)$  のように表示する(後で出てくる)。

パラメーターであるか、潜在変数であるかの違いは、のちほど行動  $a$  の扱いのところで重要な役割を果たす。というか、私はこの違いが理解できなくて、期待自由エネルギーの導出に2週間ほどハマリました。(島崎さんの助けでそこから抜け出すことができました。Thanks!) そういうわけで、読者の皆様にも注意を喚起しておきたい。

### 3.5 いま書いたことの含意

脱線、というかある意味こちらが本題なのだが、いま書いたことの含意についてコメントしておきたい。

図7Aでは、外界が因果グラフであるかのように表示したが、正確を期すならば、「生成プロセス」がこのような因果グラフであるわけではない。あくまで agent が認識によって外界を切り分けて、因果で繋いだものを「生成モデル」(not 生成プロセス)として持っているだけだ。外界はもっと多様であり、その中で agent が生成モデルとして切り分けることができたものを

外界に投射し直したものが生成プロセスである、というほうが正しいだろう。人間には人間の、カエルにはカエルの生成モデルがある。

そういう目で見ると、推測  $q$  と生成モデル  $p$  というのは、外界を  $x, s, a$  といった「表象もしくは state」を切り分けてきたのが推測  $q$  であり、 $x, s, a$  を繋ぐ「変換もしくは process」を切り分けてきたのが生成モデル  $p$  である、という整理ができる (図7B)。

つまり、推測  $q$  には因果グラフの矢印はないし、生成モデル  $p$  は逆に矢印だけがあって、推測  $q$  が決まるまでは空っぽだ。とくに図8Bのように生成モデルのパラメーターも追い出してしまえば、生成モデルの実体とは、どの state を入力して、どのようにその入力を組み合わせた演算をして、どの state を出力するか、という矢印の結節点という「関係」だけが残る。生成モデル  $p$  とは、無時間的な空っぽの箱であることがよく分かる。

言い方を変えるならば、生成モデル  $p$  が関数であり、推測  $q$  がそこに代入される変数だと言える。たとえば生成モデルとして決定論的な1次関数  $y = ax + b$  を考えた場合、推測  $q$  とは  $x$  や  $y$  のことだ。そして生成モデルのパラメーターは  $a$  や  $b$  のことだ。

世界をモデル化、形式化する際には、このような state と process の対が出てくる。この対とは、以前私が書いたブログ記事 [9] での、ペイトソン (さらにデビッド・マー) がいう「表象」と「プロセス」そのものであることがわかる。表象だけでも不十分だし、プロセスだけでも不十分で、両者が組み合わせなくてはじめてこの計算は実現する。

以前私は神経回路学会誌の解説論文「自由エネルギー原理と視覚的意識」[10] において、agent が内部に外界を構成する (弱い意味での表象) をする際には、推測  $q$  と生成モデル  $p$  の両方が、リアルタイムで必要だ、という議論をした。いまの書いたこともこの議論を補強するだろう。つまり、推測  $q$  とはイマココの state についての推測であり、生成モデル  $p$  とは (無時間的な) process であるが、両者が組み合わせることによってはじめて、イマココでの知覚が実現するのだ。

以上。それでは話を本題に戻す。

### 3.6 この文章の最終目標: 現在、過去、未来を統一的に捉えた説明

図7に示した生成モデルには時間が入っていなかった。生物の知覚と行動をモデル化するためには時間を考慮した生成モデルが必要だろう。そこで図9には現在、過去、未来を入れた最小限の生成モデルを考えてみる。(それでも複雑なので、ここでは因子グラフではなくて、因果グラフで表示してある。)

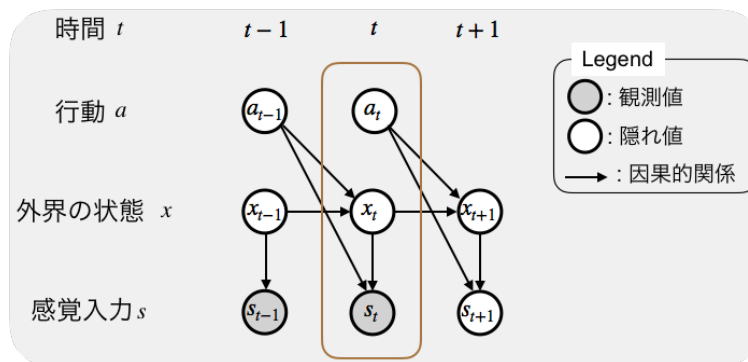


図9: 時間を考慮した生成モデル

話を簡単にするために、現在  $t$ 、過去  $t-1$ 、未来  $t+1$  の3つの時点だけを考える。部分観測マルコフ決定過程 POMDP を仮定しているのだから、離散的な時間で、直前の状態のみから現在の状態が決まる。そして現在及び過去の感覚入力  $s_t, s_{t-1}$  だけが観察データ (灰色丸で表示)、あとはみな潜在変数 (白丸で表示) として推定する必要がある。

現在観察している感覚入力  $s_t$  に基づいてその原因となる外界の状態  $x_t$  は直前の状態  $x_{t-1}$  と以前の行動  $a_{t-1}$  から決まる。つまり自分の state というものを持っている。それに対して感覚

入力  $s_t$  はそのときの外界の状態  $x_t$  と直前の行動  $a_{t-1}$  によってそのつど因果的に決まる。つまり感覚入力  $s$  は自分の state を持っていない<sup>10</sup>。

この文書の最終目的は、このような現在、過去、未来を統一的に扱う自由エネルギー原理の式を導出することだ。たとえばそれは Schwöbel et. al. の Neural Comput. 2018[5] で扱われている。でもいきなりでは難しいので、次のセクション3では、この生成モデルのうち、部分部分を切り取ったうえで、それぞれどのようにモデル化してゆくかを順番に見ていくことにする。

## 4 実例を元に variational FE の定式化について考える

### 4.1 蝶と蛾の認識の例：世界設定

ふたたび実例を用いてイメージしやすい形を説明をしてゆくことにしよう。私の以前の発表スライド [11] で使った、蝶と蛾の認識の例を使って説明してゆく。こういう例だ。左下を見ていたら右上になにかあるので目を向けてみたら蝶がいた (図10A)。認識とは他の可能性を排除することだ。この場合、目を向けたら蛾がいる可能性もあったけど、そうではなかった。

この世界は図10B のように単純で、感覚入力  $s$  は3通り、これらの感覚入力をサンプルする行動  $a$  は2通り、そこから推定される外界の状態  $x$  は2通りだけになっている。

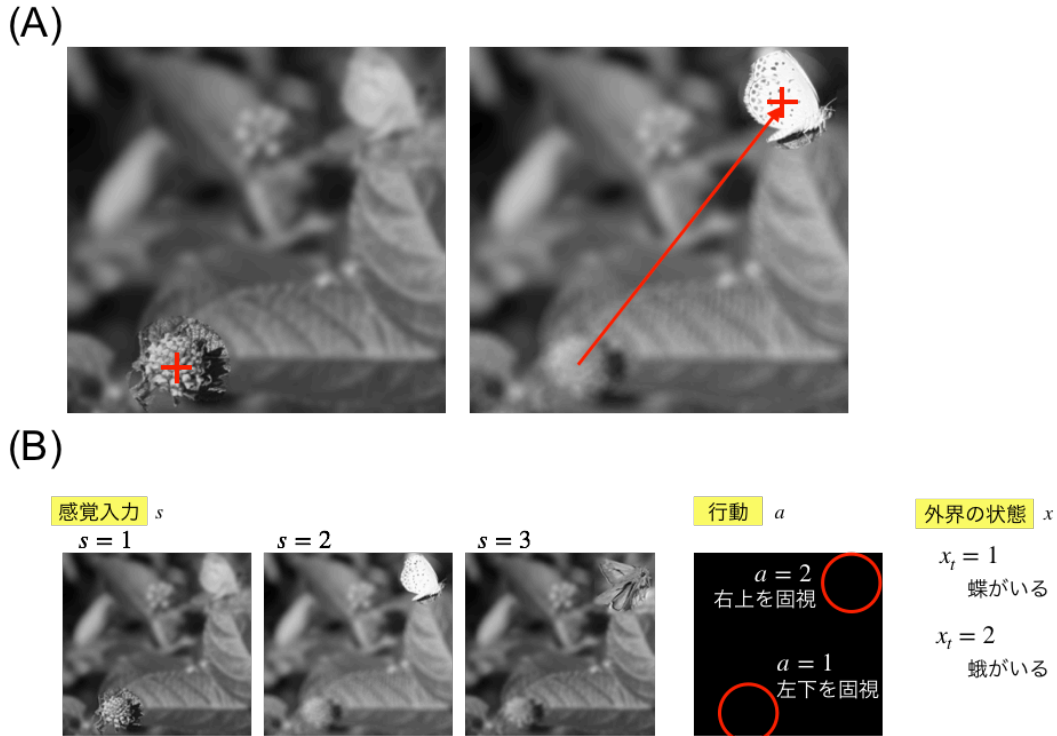


図 10: 蝶と蛾の認識の例：世界設定

### 4.2 行動なし、現在の状態 $x_t$ の推定

#### 4.2.1 生成モデル $p$ と推測 $q$ の設定

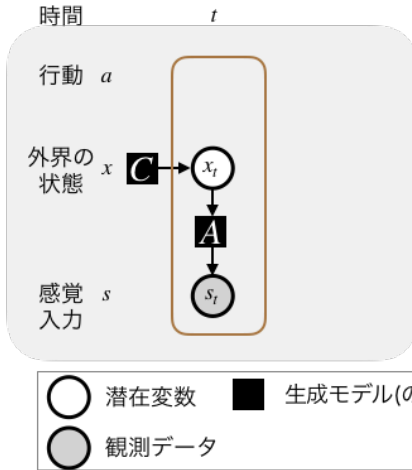
では図8のうち、行動  $a$  なし、時間は現在だけ、という生成モデル  $p$  を考えてみよう。このときの生成モデルは因子グラフを用いて表現すると以下の通りになる (図 11A)。

このとき生成モデル  $p$  のグラフ構造を考慮した式は以下の通り。

<sup>10</sup>なんだか仏教の知覚感を模しているかのようだ。

(A)

因子グラフ



(B)

生成モデル  $p(x_t, s_t)$   
 $= p(s_t|x_t)p(x_t)$

**A** **C**

生成モデルpを特定するパラメーター

**C** 事前分布  $p(x_t) = [0.52 \quad 0.48]$   
 $x_t = 1 \quad 2$

**A** 観察モデル  $p(s_t|x_t) = \begin{bmatrix} 0.23 & 0.69 & 0.07 \\ 0.16 & 0.08 & 0.75 \end{bmatrix}$   $x_t = 1$   
 $s_t = 1 \quad 2 \quad 3$   $x_t = 2$

図 11: 行動なし、時間は現在だけ

$$p(x_t, s_t) = p(s_t|x_t)p(x_t) \quad (18)$$

図 11B に現在の設定での生成モデルのパラメーターを表示した。事前分布  $C$  からすると、視野の中には蝶がいる確率 ( $p(x=1) = 0.52$ ) が蛾がいる確率 ( $p(x=2) = 0.48$ ) よりもちよつと高くなっている。また、観察モデル  $A$  によると、蝶がいる場合は  $s=2$  の感覚入力をサンプルしている可能性が一番大きい。蛾がいる場合は  $s=3$  の感覚入力をサンプルしている可能性が一番大きい。感覚入力  $s=1$  のときは蝶なのか蛾なのか曖昧っぽい。でもこれについては true posterior  $p(x|s=1)$  を計算してみないとわからないが。

つぎに推測  $q$  について考える。潜在変数は  $x_t$  のみだから、推測は  $q(x_t)$  となる。ここから推測  $q(x)$  の形を変えることで VFE  $F$  を下げることを定式化してゆくんだけど、 $q(x)$  の形を変えるというのは汎関数 (functional) の概念が入ってきてややこしいので、 $q(x_t)$  という確率分布の形を決めるパラメータ  $\phi_x$  を使って表記することにする。

$$q(x_t) = q(x_t|\phi_x) \quad (19)$$

つまり、 $q(x_t=1) = \phi_x$  としておけばもう片方の  $q(x_t=2) = 1 - \phi_x$  も決まるので、 $q(x_t)$  の分布の形  $\phi_x$  ひとつで表現できる。この  $\phi_x$  を 0-1 の範囲で動かしてみる。

#### 4.2.2 変分自由エネルギー $F$ の設定

では図 11 の設定の場合の  $F$  の式はどう書くか。これは sec.1 で用いたものと同じ構造だ。Sec.1 の式 (5) に、観測データ=現在の感覚入力  $s_t$  と潜在変数=現在の外界の状態  $x_t$  を当てはめてみれば、 $F$  は以下のように定義できる。

$$F(\phi_{x_t}) = \mathbb{E}_{q(x_t|\phi_{x_t})} [\ln q(x_t|\phi_{x_t}) - \ln p(x_t, s_t)] \quad (20)$$

$$= \underbrace{D_{KL}(q(x_t|\phi_{x_t})||p(x_t|s_t))}_{\text{KLD}(\phi_{x_t})} + \underbrace{-\ln p(s_t)}_{\text{Surprisal}} \quad (21)$$

$$= \underbrace{D_{KL}(q(x_t|\phi_{x_t})||p(x_t))}_{\text{Bayesian surprise}(\phi_{x_t})} + \underbrace{-\mathbb{E}_{q(x_t|\phi_{x_t})} \ln p(x_t|s_t)}_{\text{Uncertainty}(\phi_{x_t})} \quad (22)$$

今の段階では行動  $a$  のことを考えていないので、 $s$  を変えることはできない。だから  $F$  は  $\phi_{x_t}$  のみの関数で、Surprisal は定数だ。

### 4.2.3 $F$ の最小化

Agent は  $\phi_{x_t}$  を変えることによって  $F(\phi_{x_t})$  を下げることができる。今の例では  $\phi_{x_t}$  を 0-1 まで変化させることによって、すべての可能な  $q(x_t|\phi_{x_t})$  を網羅できる。それでは Sec.1 の図 1-3 と同じ要領で、VFE, KLD, Surprisal, Bayesian surprise をプロットしてみよう<sup>11</sup>。

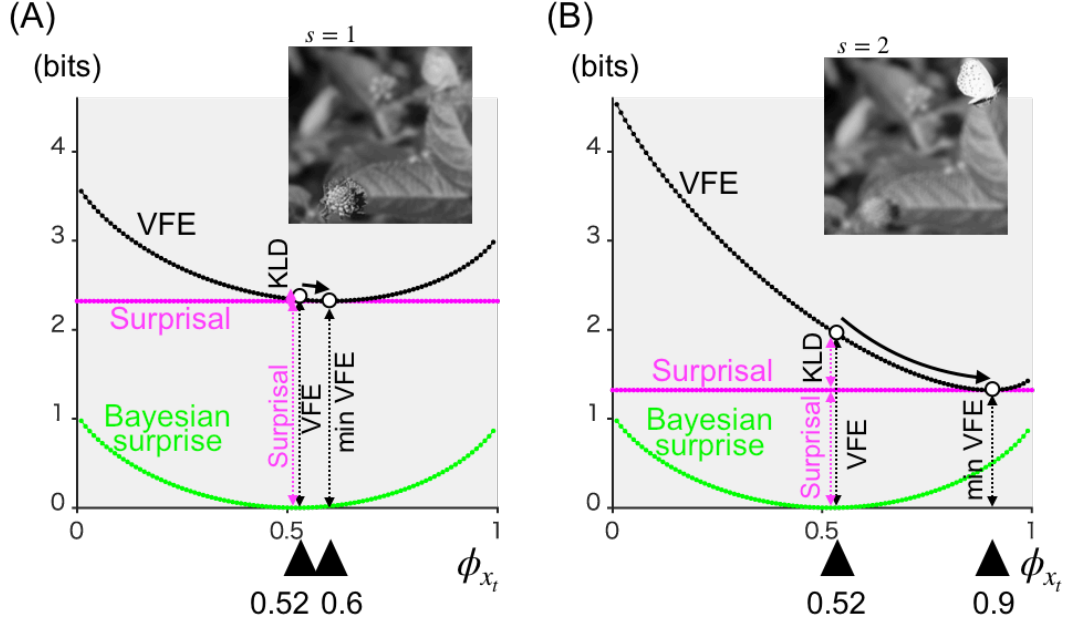


図 12: 行動なし、時間は現在だけの場合の VFE の最小化

図 12A は感覚入力 (観察データ) が  $s = 1$  だった場合、図 12B は感覚入力 (観察データ) が  $s = 2$  だった場合を示す。 ( $s = 3$  は省略するが、どういう形になるかは想像がつくだろう。)

図 12A,B どちらともに、 $q(x_t|\phi_{x_t})$  の初期状態として

$$p(x_t = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}) = \begin{bmatrix} 0.52 \\ 0.48 \end{bmatrix}$$

を用いている。そこからそれぞれ  $KLD = 0$  になる値へと向かっている。感覚入力  $s_1$  の場合、 $\phi_{x_t} = 0.6$  で  $KLD=0$  となり、VFE が最小化する (2.32 bits)。感覚入力  $s_2$  の場合、 $\phi_{x_t} = 0.9$  で  $KLD=0$  となり、VFE が最小化する (1.32 bits)。これらはそれぞれ true posterior  $p(x_t|s_t)$  を正しく推定できている。

直接計算による true posterior はそれぞれ以下の通り。

$$p(x_t = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} | s_t = [1 \quad 2 \quad 3]) = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.9 & 0.1 \\ 0.4 & 0.1 & 0.9 \end{bmatrix}$$

### 4.2.4 $F$ の最小化ができたときの近似

式 (3-3) において  $KLD = 0$  となるような  $\phi_{x_t} = \phi_{x_t}^*$  を見つけることができたとき、

$$F(\phi_{x_t}^*) = -\ln p(s_t) \quad (23)$$

<sup>11</sup>Sec.1 で使った matlab のコードを多少改変すればこの図を作ることができる。練習問題としてやってみるとよい。



が成り立つ。繰り返すが、 $s_t$  は観察データなのでこれを変えることはできない。将来的に行動によって、サンプルされる感覚入力  $s_{t+1}$  を変えることはできるが、そのときは  $KLD(\phi_x)$  もゼロでなくなってしまう。よってこの式だけから行動について考えることはできない。ではどうすればいいかという、そこで期待自由エネルギー  $G$  が出てくる。その話はまた後ほど。

変分推定はふつう近似をするために用いられるものだが、今は原理的な話をするために、推測  $q()$  を好きに変えることができることにした。つまり得られるものは true posterior を直接計算するのと同じだが、それを  $F$  を下げるという回り道をして計算していることになる [7]。

### 4.3 行動なし、現在と過去の状態 $x_{t-1}, x_t$ の推定

#### 4.3.1 生成モデル $p$ と推測 $q$ の設定

つぎはこの行動なしのモデルで、時間を 1 ステップ進めてみよう。現在は  $t+1$  になった。このときの生成モデルの因子グラフは図13A のようになる。

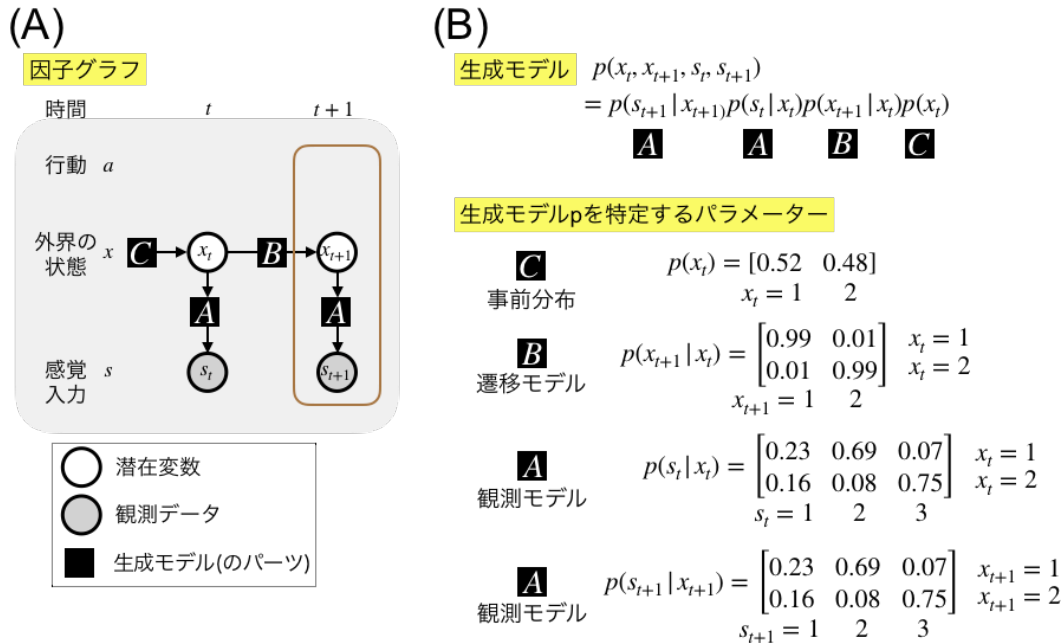


図 13: 行動なし、時間は  $t$  から  $t+1$  に進んだ

新たに観測値  $s_{t+1}$  が追加された(灰色丸で表示)。外界の状態  $x_{t+1}$  は直前の状態  $x_t$  から影響を受ける。これは生成モデルのうち、 $B$  の遷移モデルとして記述されている(図13B)。これはもし  $x_t = 1$  なら、 $x_{t+1} = 1$  だし、もし  $x_t = 2$  なら、 $x_{t+1} = 2$  だという、外界の状態の恒常性のモデルになっている<sup>12</sup>。

時点  $t+1$  における観測モデル  $A = p(s_{t+1} | x_{t+1})$  は時点  $t$  における観測モデル  $A = p(s_t | x_t)$  と同じにしてある。同じ過程については時間に依存しないのが自然だろう。

よって、生成モデルは式15のとおりとなる。

$$p(x_t, x_{t+1}, s_t, s_{t+1}) = p(s_{t+1} | x_{t+1}) p(s_t | x_t) p(x_{t+1} | x_t) p(x_t) \quad (24)$$

推測  $q$  はあらたに  $x_{t+1}$  も推測する必要があるので、潜在変数二つを推測することになる。

<sup>12</sup>完全に単位行列にしていないのは、計算上 0 が入ると KL 距離が無限大になったりしてややこしいからだ。本当は KL 距離においては、分母が 0 なら分子が 0 になっていないといけなのだが、それは現状では守られていないので、場当たりの処置をしている。自然は真空を嫌うらしいが、KL 距離は 0 を嫌う。

$$q(x_t, x_{t+1} | \phi_{x_t, x_{t+1}}) \quad (25)$$

となる。ここで  $q(x_{t+1} | \phi_{x_{t+1}})$  ではないことに注意。あらたな観測値  $s_{t+1}$  によって過去の状態  $x_t$  もアップデートすること (post-diction) を想定しているからだ。

あと、推測  $q$  のパラメーター  $\phi_{x_t, x_{t+1}}$  は以下のように3つのパラメーターからなっている。

$$\phi_{x_t, x_{t+1}} = \{\phi_1 = q(x_t = 1, x_{t+1} = 1), \quad (26)$$

$$\phi_2 = q(x_t = 1, x_{t+1} = 2), \quad (27)$$

$$\phi_3 = q(x_t = 2, x_{t+1} = 1)\} \quad (28)$$

あり得る  $(x_t, x_{t+1})$  の全ての組み合わせ4通りのうち、3つのパラメーターを決めれば、合計で1になるので、残りの一つは自動的に決まる<sup>13</sup>。

### 4.3.2 変分自由エネルギー $F$ の設定

それではこのときの  $F$  を定義してみよう。観測データ=過去と現在の感覚入力  $s_t, s_{t+1}$  と潜在変数=過去と現在の世界の状態  $x_t, x_{t+1}$  を当てはめてみれば、以下の通りとなる。

$$F(\phi_{x_t, x_{t+1}}) = \mathbb{E}_{q(x_t, x_{t+1} | \phi_{x_t, x_{t+1}})} [\ln q(x_t, x_{t+1} | \phi_{x_t, x_{t+1}}) \quad (29)$$

$$- \ln p(x_t, x_{t+1}, s_t, s_{t+1})] \quad (30)$$

$$= \underbrace{D_{KL}[q(x_t, x_{t+1} | \phi_{x_t, x_{t+1}}) || p(x_t, x_{t+1} | s_t, s_{t+1})]}_{KLD} \quad (31)$$

$$+ \underbrace{- \ln p(s_t, s_{t+1})}_{\text{Surprisal}} \quad (32)$$

うわあ、なんだか凄いことになっちゃったぞ。今回は KL 距離の変数部分が  $x_t, x_{t+1}$  の同時確率になっているので、 $\{x_t, x_{t+1}\}$  がとりうるすべての組み合わせ(4通り)について和を取っている<sup>14</sup>。

### 4.3.3 $F$ の最小化

それでは蝶と蛾の例で、 $t$  に感覚入力  $s = 1$  をサンプルして、 $t+1$  に感覚入力  $s = 2$  をサンプルした場合について考えてみよう。本当はこの  $t$  から  $t+1$  の時間の間にサッカードをして、外界の状態の恒常性を保ったまま、違った感覚入力をサンプルしたことになるのだけど、行動については後ほど行う。

まず比較のために、[3-2] でモデル化したように、時点  $t$  に感覚入力  $s = 1$  をサンプルして外界の状態  $x_t$  を推定したもの、そしてそれとは独立に時点  $t+1$  に感覚入力  $s = 2$  をサンプルして外界の状態  $x_{t+1}$  を推定したものを図示してみる (図 14)。

時点  $t$  での「蝶がいる」 $x_t = 1$  の確率 (true posterior  $p(x_t = 1 | s_t = 1)$ ) は 0.6 だったが、時点  $t+1$  では「蝶がいる」 $x_{t+1} = 1$  の確率 (true posterior  $p(x_{t+1} = 1 | s_{t+1} = 2)$ ) は 0.9 になった。 $t+1$  でより informative な感覚入力  $s = 2$  をサンプルしたことによって推定がアップデートされたわけだ。

では、今回のモデル (図13) で現在と過去の状態を推定するものではどうなるだろうか (図15)。

<sup>13</sup>  $\phi_{x_t, x_{t+1}} \neq \{\phi_{x_t}, \phi_{x_{t+1}}\}$  であることにも注意。  $\{\phi_{x_t}, \phi_{x_{t+1}}\}$  という表記は  $\phi_{x_t}$  と  $\phi_{x_{t+1}}$  が独立して動かせることになってしまう。それは平均場近似  $q(x_t, x_{t+1} | \phi_{x_t, x_{t+1}}) = q(x_t | \phi_{x_t})q(x_{t+1} | \phi_{x_{t+1}})$  を仮定していることになるのでここではやらない。いまの説明ではなるべく exact な方法を行う。われわれが扱っているのは気体じゃないんだから、平均場近似が使える保証はなんてない。最近では Friston のグループからもグラフィカルモデルの因子間での相関を扱えるベータ近似を使う論文が出てきている。

<sup>14</sup>  $x_t$  で和をとってから  $x_{t+1}$  で和をとったりするのも、平均場近似の仮定を使っていることになるのでそれはやらない。



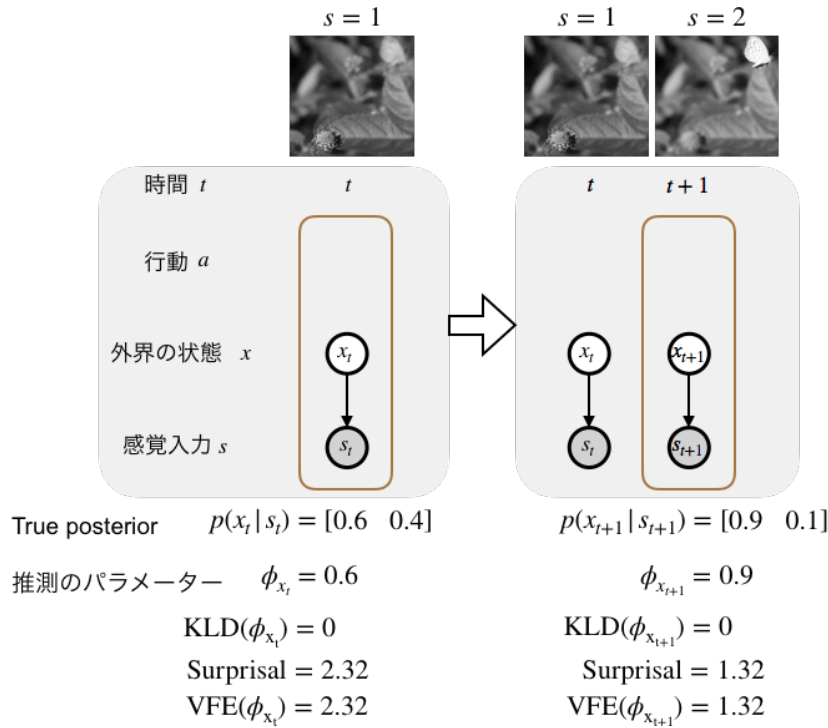


図 14: 時間  $t$  と  $t+1$  で別々に推定

時点  $t$  での「蝶がいる」 $x_t = x_1$  の確率 (true posterior  $p(x_t = 1 | s_t = 1)$ ) が 0.6 であるのに対して、時点  $t+1$  では「蝶がいる」 $x_{t+1} = 1$  の確率 (true posterior  $p(x_{t+1} = 1 | s_t = 1, s_{t+1} = 2)$ ) は 0.92 になった。さっきよりも少々大きくなっている。情報の蓄積の効果があるということだ。

でもそれだけではない。 $t+1$  で感覚入力  $s_2$  をサンプルしたことによって時点  $t$  での「蝶がいる」 $x_t = 1$  の確率 (true posterior  $p(x_t = 1 | s_t = 1, s_{t+1} = 2)$ ) も 0.92 になった。つまり、過去にさかのぼって、当時の認識をアップデートさせたのだ。しかもその当時の推定は 0.6 だったのに。つまり、postdiction をモデル化することができるというわけだ。

この説明でわかるように、これは FEP の手柄ではなくて、ベイズのグラフィカルモデルを採用したことによる。グラフィカルモデルで true posterior を exact に計算する方法において、このように因果グラフを  $x_{t+1}$  から  $x_t$  へと逆向きに情報が伝搬してゆくことを計算できる。これが確率伝搬 belief propagation というものだ。

確率伝搬の過程は因子グラフで計算されたそれぞれの変数の確率が互いに影響を与えながら収束してゆく過程であり、この生成モデルの同時確率が収束する過程は自由エネルギーの最小化として表すことができる。あーそーゆーことね 完全に理解した (<-わかってない)<sup>15</sup>

#### 4.3.4 $F$ の最小化ができたときの近似

こうして agent は  $\phi_{x_t, x_{t+1}}$  をアップデートすることによって  $F(\phi_{x_t, x_{t+1}})$  を最小化することができる。 $KLD = 0$  となるような  $\phi_{x_t, x_{t+1}} = \phi_{x_t, x_{t+1}}^*$  が見つかるとき、

<sup>15</sup>調べてみた。確率伝搬での自由エネルギーはベータ自由エネルギーといって、変分自由エネルギーとはべつものだった。Friston グループの論文では de Vries and Friston 2017[12] が active inference の因子グラフについて議論している。そこで belief propagation についてのベータ自由エネルギーの最小化を、active inference とは別の自由エネルギーの定式化として言及している。両者の数学的な関係については何も言っていない。ベータ自由エネルギーのほうは  $F = U - H$  と書いたうえで、 $U$  が内部エネルギーとして意味のある形になっているので、物理的な自由エネルギーとの対応という意味では、こちらのほうが大事っぽい。

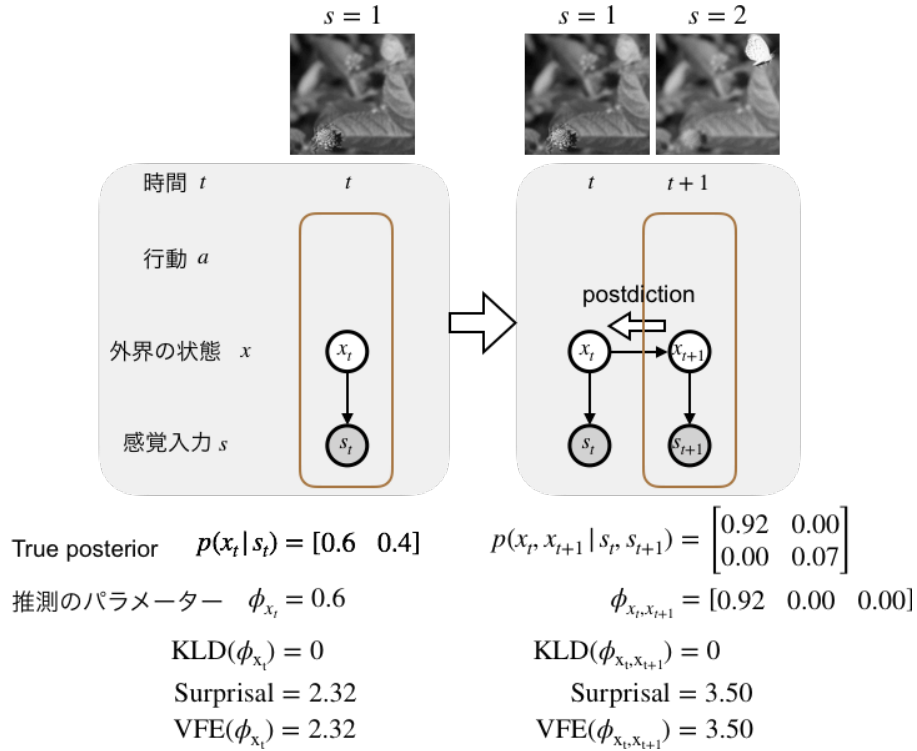


図 15: 時間  $t$  と  $t+1$  を繋げて推定

$$F(\phi_{x_t, x_{t+1}}^*) = -\ln p(s_t, s_{t+1}) \quad (33)$$

が成り立つ。これを時刻  $t$  のときの値と比較してみよう。

$$F(\phi_{x_t}^*) = -\ln p(s_t) \quad (34)$$

式 (c3) を変形して式 (6) を代入すると、

$$F(\phi_{x_t, x_{t+1}}^*) = -\ln p(s_t, s_{t+1}) \quad (35)$$

$$= -\ln(p(s_{t+1}|s_t)p(s_t)) \quad (36)$$

$$= -\ln p(s_{t+1}|s_t) - \ln p(s_t) \quad (37)$$

$$= F(\phi_{x_t}^*) - \ln p(s_{t+1}|s_t) \quad (38)$$

となる。つまり、 $p(s_{t+1}|s_t) = 1$  でないかぎり、 $F(\phi_{x_t, x_{t+1}}^*) > F(\phi_{x_t}^*)$  が成り立つ。

図15の例を見直してみれば、たしかに、surprisal は時点  $t$  から  $t+1$  で 2.32 から 3.50 に増えていた。単純な例ではあるけど「FEP に従うと  $F$  はどんどん小さくなる、そして最終的には完全平衡状態、つまり死に至るのだ」なんてことは無いということがわかる。時間経過に伴って観察データの数が増えてゆくので、過去の推測も加味した場合の  $F$  は増えてゆく一方だ。むしろ、最適な perception をすることによって  $F$  の増加を食い止めている、というのが実情だといえよう。なお、いまの単純なモデルでは忘却を考慮に入れてないので surprisal の項は増えてゆく一方だが、完全な記憶が無い場合には、surprisal の項は時間的になんらか定常状態になることが想像できる。

#### 4.4 行動のモデルの一手手前：推測 $q$ の代わりに感覚入力 $s$ を変える

サブセクション4.3.4では、時刻  $t$  に感覚入力  $s = 1$ 、時刻  $t+1$  に感覚入力  $s = 2$  が与えられるという状況だったが、これがすでに行動のモデルの一手手前まで来ている。図 3-5 で扱った、時刻  $t$  と時刻  $t+1$  を独立した扱うもの (post-diction なし版) についてもう一度考えてみよう。

時刻  $t$  では感覚入力  $s = 1$  (右上になにかあるっぽい画像) が与えられて、そのとき外界の状態の推定 ( $q(x_t)$ ) は「蝶がいる」 $q(x_t = 1) = 0.6$  で「蛾がいる」 $q(x_t = 2) = 0.4$  だった (図 3-3A)。次に時刻  $t+1$  では感覚入力  $s = 2$  (右上に蝶がくっきり見える画像) が与えられて、そのとき外界の状態の推定 ( $q(x_{t+1})$ ) は「蝶がいる」 $q(x_{t+1} = 1) = 0.9$  で「蛾がいる」 $q(x_{t+1} = 2) = 0.1$  だった (図 3-3B)。このシークエンスを時刻  $t$  から時刻  $t+1$  で視線を右上に動かした結果として捉えて直してみる。

式 (3-3) の  $F$  の式は  $\phi_{x_t}$  のみの関数だった。これは感覚入力  $s_t = 1$  がすでに与えられた観察データであり定数であるからだった。でも未来の感覚入力  $s_{t+1}$  なら行動 (視線を右上に動かす) によって変えることができる。そのように考えて  $F$  の式を未来の感覚入力  $s_{t+1}$  の関数と捉えてみると式 (3-13) のように書ける。

$$F(s_{t+1}, \phi_{x_t}) = \underbrace{D_{KL}(q(x_{t+1}|\phi_{x_{t+1}})||p(x_{t+1}|s_{t+1}))}_{KLD(s_{t+1}, \phi_{x_{t+1}})} + \underbrace{-\ln p(s_{t+1})}_{\text{Surprisal}(s_{t+1})} \quad (39)$$

$$= \underbrace{D_{KL}(q(x_{t+1}|\phi_{x_{t+1}})||p(x_{t+1}))}_{\text{Bayesian surprise}(\phi_{x_{t+1}})} + \underbrace{-\mathbb{E}_{q(x_{t+1}|\phi_{x_{t+1}})} \ln p(s_{t+1}|x_{t+1})}_{\text{Uncertainty}(s_{t+1}, \phi_{x_{t+1}})} \quad (40)$$

これで  $F$  を下げるためには  $\phi_{x_t}$  を変えるだけでなく、行動によって未来の  $s_{t+1}$  を変える方策もできた。図 3-7A にあるように、時刻  $t$  では感覚入力として  $s_t = 1$  が与えられている状態で、 $\phi_{x_t} = q(x_t = 1)$  を 0.52 から 0.60 に動かすことで  $DKL = 0$  になって  $F$  を最小化した (1)。そこからさらに  $F$  を下げるためには  $\phi_{x_t}$  を固定して、 $s_{t+1}$  を変える方策がある。もし  $s = 2$  をサンプルした場合には (2) のように  $F$  を下げることができて、さらに (3) のように  $\phi_{x_t}$  を 0.9 まで動かすことによって  $F$  を下げることができる。

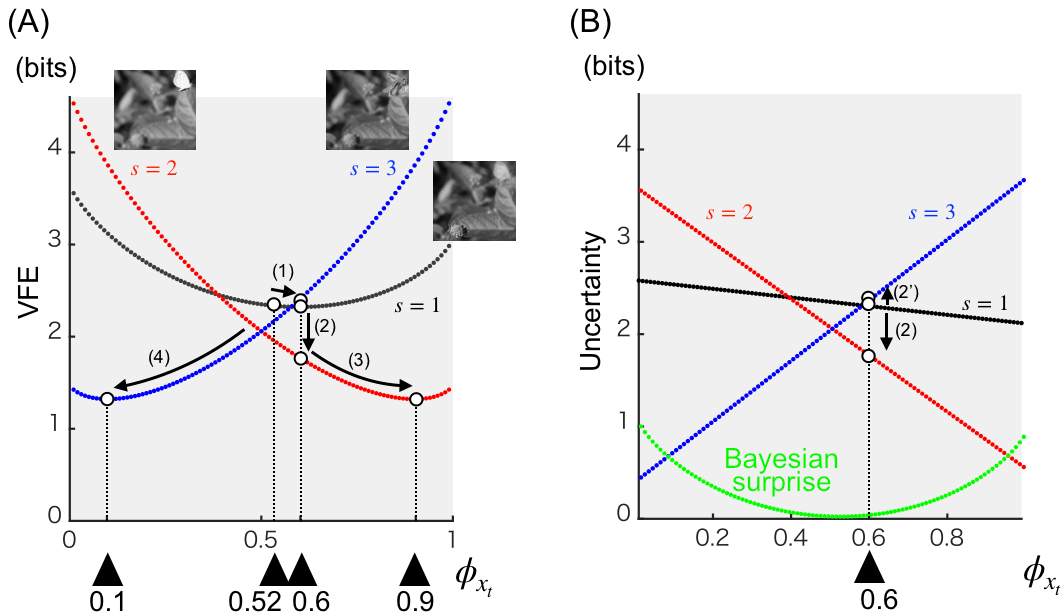


図 16: 感覚入力  $s$  を変えることで  $F$  を下げる

しかし agent ができることは正確には  $s_{t+1}$  を変えることではなくて現在の行動選択  $a_t = 1$  (左下を固視) または  $a_t = 2$  (右上を固視) なので、 $s_{t+1} = 2, 3$  の両方の可能性がある。もし  $s = 3$  をサンプルした場合にはわずかではあるが  $F$  は大きくなってしまふ。(最終的には (4) によって  $F$  を下げることはできるのだが。)

(2) でなにをやっているかももう少し説明してみよう。  $KLD = 0$  になったから surprisal を下げるような  $s_{t+1}$  を選択すれば良いと思うかもしれないが、そうはいかない。なぜなら式40のとおり、  $KLD$  も  $s_{t+1}$  の関数なので、  $KLD = 0$  を保ったまま Surprisal を下げることはできないから。

そこで代わりに下の Bayesian surprise + Uncertainty の式を使う。 Bayesian surprise は  $s_{t+1}$  に依存しないので、 Uncertainty が下がるように  $s_{t+1}$  を変えてやれば、現在の  $F$  をさらに低くすることができる。

このことは、  $s_{t+1} = 1, 2, 3$  について Uncertainty をプロットしてみるとより明確になる (図16B)。  $\phi_{x_t} = 0.6$  を固定して、  $s_{t+1}$  を変えると、  $s_{t+1} = 2$  では Uncertainty が下がるが、  $s_{t+1} = 3$  では上がる。 Bayesian surprise (緑) は  $s_{t+1}$  に依存しないので、  $F$  の違いは Uncertainty の違いに等しい。

以上の考察から、VFE の枠組みでは、行動選択は未来の Uncertainty の値の評価によって決まららしいということがわかる。このことがのちほど 4-4-10 で議論する期待自由エネルギー  $G$  の見直しという点に関わってくる。

このサブセクションでは、行動  $a$  をモデルに組み込む一歩手前の簡易的な説明を行った。行動とは感覚入力を変えることであるという直感から、VFE の式でも行動の説明ができそうだと示した。行動についてのより正確な取り扱いは次の Sec.4 で行う。

#### 4.5 編集履歴

- 2019/5/3 完成版 html 作成
- 2019/5/4 式 (4-34)、図 4-15 関連部分の修正。図 1-3 と関連部分の修正。図 4-2 と関連部分の修正。
- 2019/5/17 島崎秀昭さん (京大) のコメントを元に修正多数。(島崎さん、ありがとうございます!)
- 2019/8/23 不完全版 LaTeX 作成

#### 4.6 ToDo

- Bogacz の二項分布バージョンを 2-2 あたりに入れる。これによって、脳が持っているものが事前分布と観察モデルだけであること、true posterior は持っていないこと、 $q(s)$  や  $q(a)$  は持っていないで、たんに  $q(x_t)$ 、 $q(x_{t+1})$  から生成モデルを使って変換しているだけだけであること、の説明が可能となる。
- $t = 0$  での状況を作っておく。暗い部屋にいて、今照明がついてないと推測した。ではスイッチをオンするか。こうするともっと矛盾が明確になる。
- サッカーとサリエンシーのモデル

#### 参考文献

- [1] Friston K. (2005) A theory of cortical responses. Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci. 360(1456):815–36.
- [2] Friston, K. (2010). The free-energy principle: a unified brain theory? Nature Reviews Neuroscience, 11(2), 127–138.
- [3] Friston K, Rigoli F, Ognibene D, Mathys C, Fitzgerald T, Pezzulo G. (2015) Active inference and epistemic value. Cogn Neurosci. 6(4):187–214. doi: 10.1080/17588928.2015.1020053.
- [4] Friston K, FitzGerald T, Rigoli F, Schwartenbeck P, Pezzulo G. (2017) Active Inference: A Process Theory. Neural Comput. 2017 Jan;29(1):1–49.
- [5] Schwöbel S, Kiebel S, Marković D. (2018) Active Inference, Belief Propagation, and the Bethe Approximation. Neural Comput. 30(9):2530–2567. doi: 10.1162/neco\_a\_01108.
- [6] Thomas Parr, Karl J Friston. Generalised free energy and active inference: can the future cause the past? bioRxiv 304782; doi: <https://doi.org/10.1101/304782>
- [7] Gershman, Samuel J. What does the free energy principle tell us about the brain? arXiv:1901.07945

- [8] Katahira, Kentaro, Yoshihiko Kunisato, Tsukasa Okimura, and Yuichi Yamashita. 2019. “Retrospective Surprise: A Computational Component for Active Inference.” PsyArXiv. March 23. doi:10.31234/osf.io/jtnqg.
- [9] 吉田個人ブログ記事「Marr の representation と process をベイトソン流に解釈する (2)」(2010/3/17 作成) <http://pooneil.sakura.ne.jp/archives/permalink/001282.php>
- [10] 吉田 正俊, 田口 茂, 自由エネルギー原理と視覚的意識, 日本神経回路学会誌, 2018, 25 巻, 3 号, p. 53-70, 公開日 2018/10/31, Online ISSN 1883-0455, Print ISSN 1340-766X, <https://doi.org/10.3902/jnns.25.53>
- [11] 吉田正俊 シンギュラリティサロン発表スライド「自由エネルギー原理と視覚的意識 2019-06-08」  
<https://speakerdeck.com/pooneil68/zi-you-enerugiyuan-li-toshi-jue-de-yi-shi-2019-06-08?slide=40>
- [12] de Vries B, Friston KJ. (2017) A Factor Graph Description of Deep Temporal Active Inference. *Front Comput Neurosci.* 11:95. doi: 10.3389/fncom.2017.00095.