混沌系工学特論 #5

情報科学研究科　井上純一

URL : http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/

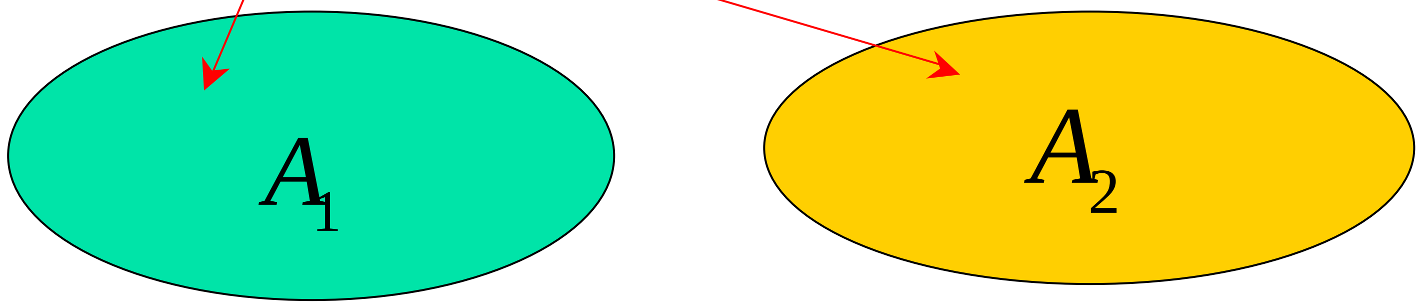
平成16年11月22日　第5回講義

組み合わせ最適化問題

2分割問題を例に

$$\{a_1, a_2, \ldots\ldots, a_j, \ldots, a_N\} = \{1.5, 7.5, 10, \ldots, 2.3, \ldots, 19\}$$

各アイテムをアイテム価値の総和が等しくなるように2つのグループに分ける



次のエネルギー関数を最小化：

$$E = \left| \sum_{a_j \in A_1} a_j - \sum_{a_j \in A_2} a_j \right| = \left| \sum_{j=1}^{N} a_j s_j \right|$$

エネルギー関数が最小となるように

$$s_j \in \{-1, 1\}$$

を割り当てる

アイテム数の増加とともに解候補が組み合わせ論的に増大する

ノイズゼロのアルゴリズムとエネルギー関数
前回の復習

ノイズゼロでの非同期ダイナミックス：

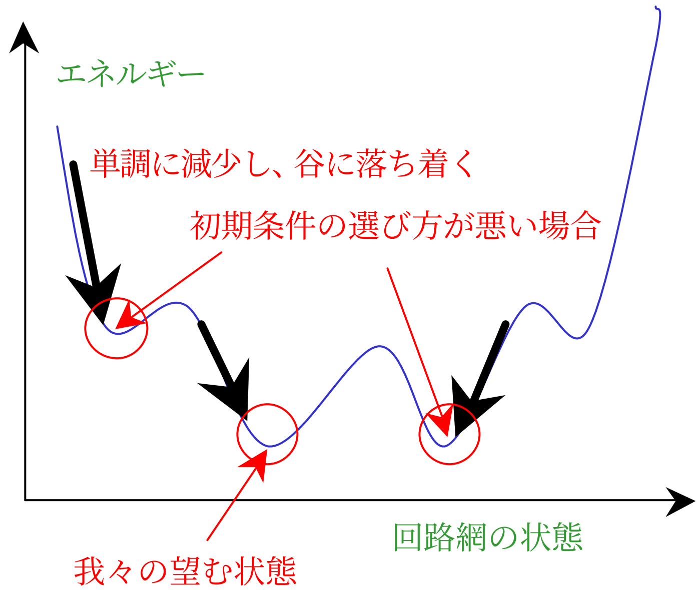
ある時刻に $S_1^{'} = \mathrm{sgn}\left(\sum_{k=2}^{N} w_{1k} S_k\right)$ と更新したとすると

対称結合とする

神経系のエネルギー関数： $E = -\sum_{ij} w_{ij} S_i S_j$ は

$$\boxed{E(S_1^{'}) - E(S_1) = \Delta E \leq 0}$$

エネルギーは単調減少



⇒ エネルギー複数の谷が複数ある場合には最小値が必ずしも得られない

ノイズゼロの単調なエネルギーの減少でなく、ある種のノイズも必要ではないか？

4準位エネルギーを持つ2体系の最適化

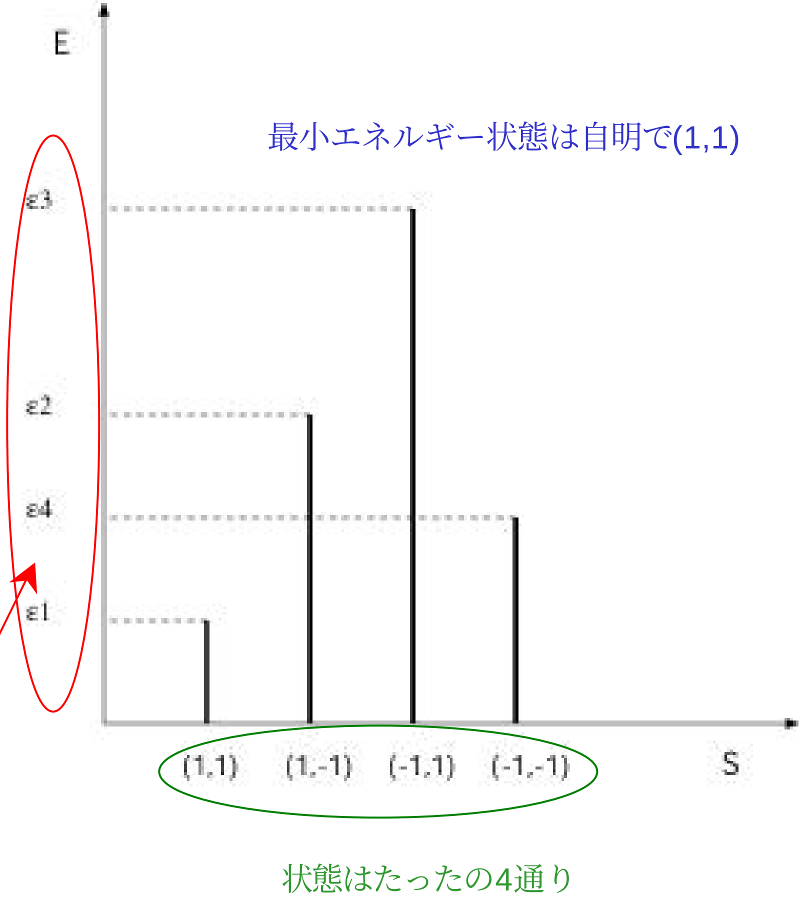
$$E(s_1, s_2) = -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2$$

$$e_1 = E(1,1) = -J - h_1 - h_2$$
$$e_2 = E(1,-1) = J - h_1 + h_2$$
$$e_3 = E(-1,1) = J + h_1 - h_2$$
$$e_4 = E(-1,-1) = -J + h_1 + h_2$$

$J = 1.0, h_1 = 0.5, h_2 = 0.1$ と選ぶと

$$e_1 < e_4 < e_2 < e_3$$

エネルギー4準位



ノイズを利用したアルゴリズム

$$E = -Js_1 s_2 - h_1 s_1 - h_2 s_2$$

ノイズを利用したアルゴリズム

(1) 各時刻で任意に s_1, s_2 の1つを選び、その符号を変える

この前後の状態を $\vec{s}, \vec{s}'$ と書く

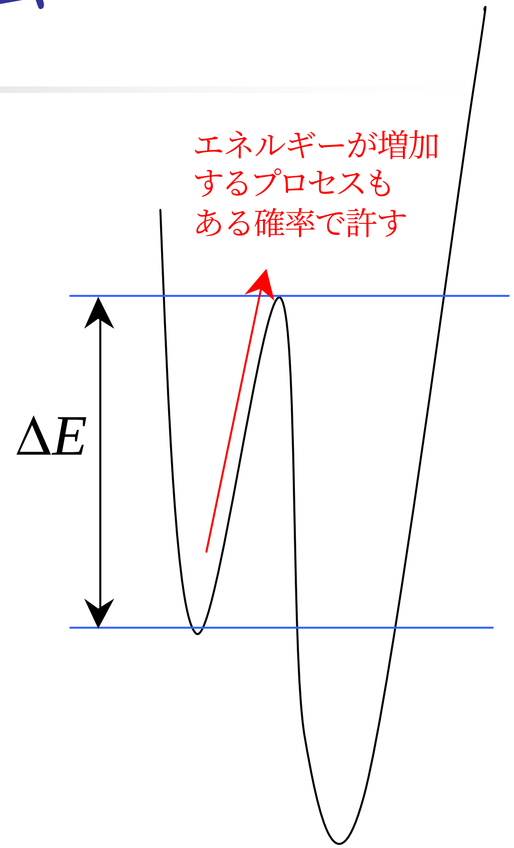
(2) (1)の前後でのエネルギー差：$\Delta E = E(\vec{s}') - E(\vec{s})$ を計算し、

$\Delta E < 0$ ならば無条件に新しい状態を採用

$\Delta E > 0$ でも確率 $\mathrm{e}^{-\Delta E/T}$ で新しい状態を採用

ノイズの効果はここで入る

(3) (1)(2)を繰り返す



$P(s_1, s_2)$ の時間発展を調べてみる

⇒ 定常状態が存在するか？存在するならどのような分布か？

アンサンブルという考え方

一つのシステムの動きを追うのではなく同じエネルギー関数をもつ複数のシステム（アンサンブル）の振る舞いを調べる

N個のシステムの中の↑↑の割合で↑↑の存在確率を定める

システム1：↑↑　↑↑　↑↓　↓↓　↓↑　↑↑　↓↑　↑↑

システム2：↑↑　↓↑　↑↓　↓↓　↓↑　↓↑　↓↑　↑↑

…………………………………………………………………

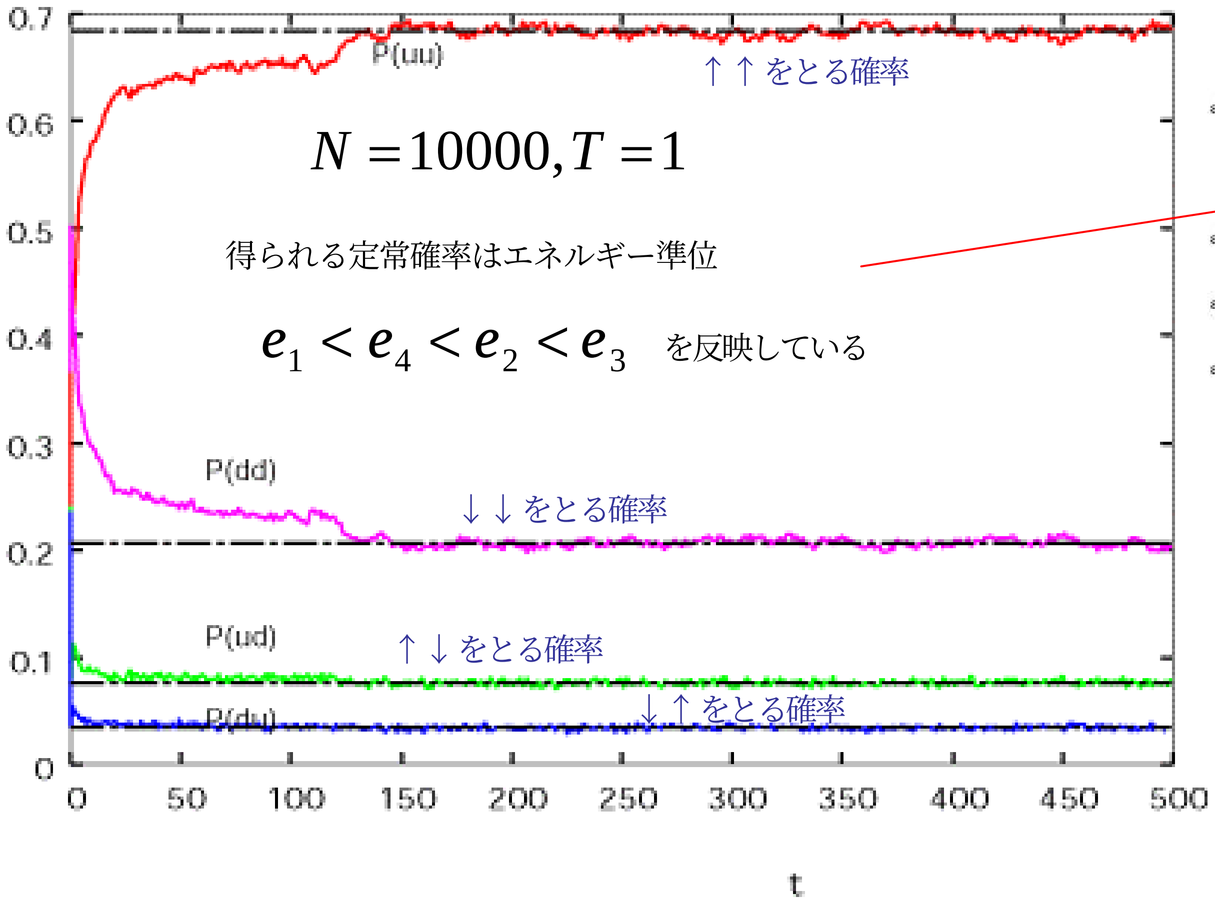
システムN：↓↑　↑↑　↑↓　↑↓　↓↑　↑↑　↓↑　↑↑

時間の進む向き

各状態の存在確率をこれで評価する

$$P_1 = P(1,1) = \frac{\text{アンサンブルの中で(1,1)をとるシステムの数}}{\text{アンサンブルを構成するシステムの総数}}$$

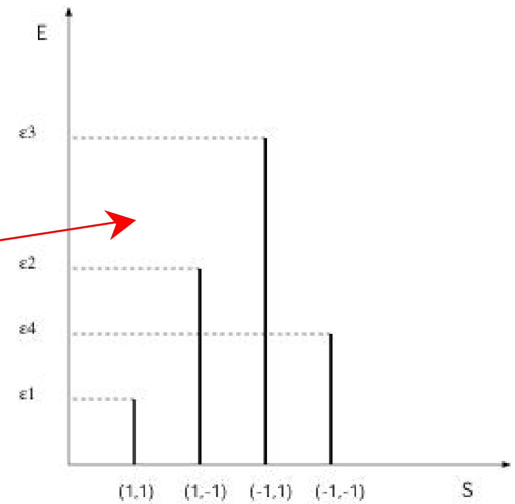
計算機シミュレーションで感じをつかむ



$$N = 10000, T = 1$$

得られる定常確率はエネルギー準位

$e_1 < e_4 < e_2 < e_3$ を反映している

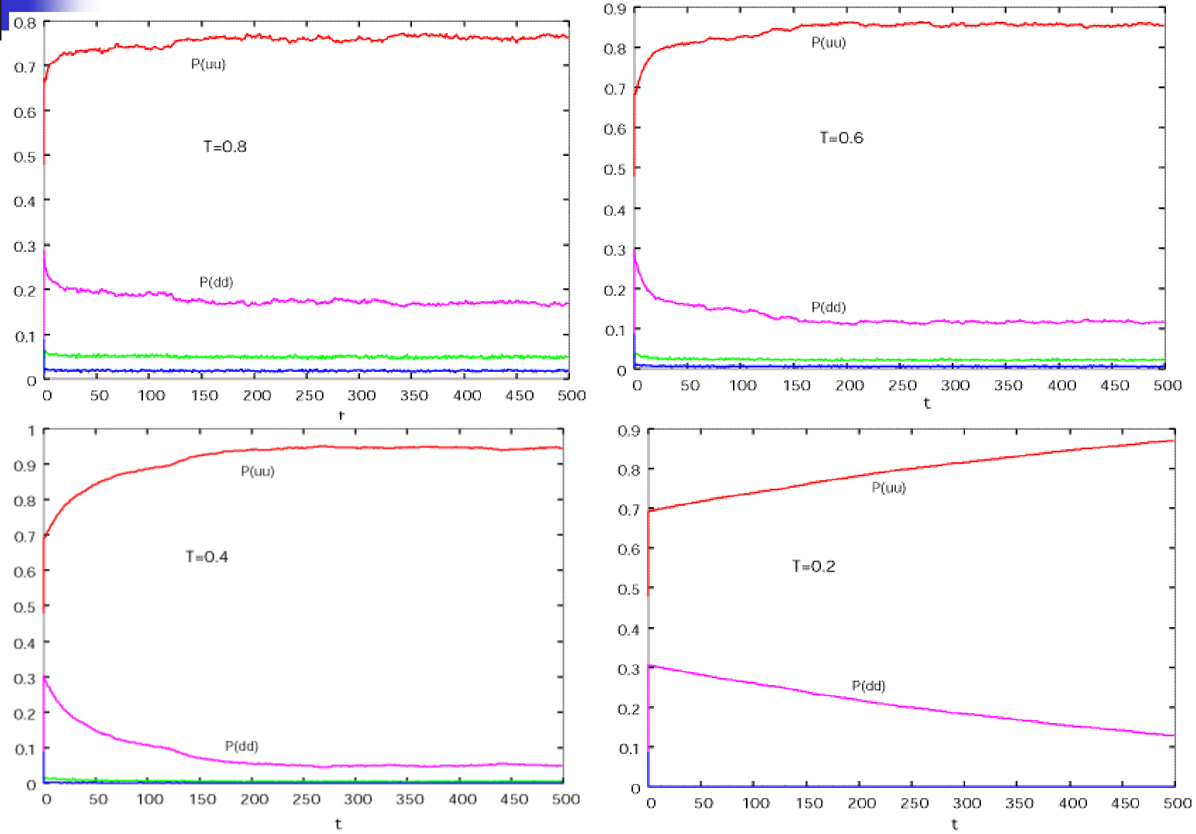


定常分布 (ボルツマン分布)

$$P(s_1, s_2) = \frac{e^{-E(s_1,s_2)/T}}{Z}$$

導出は講義ノート参照

いくつかのノイズレベルでの発展と定常状態



最適化問題の立場からは

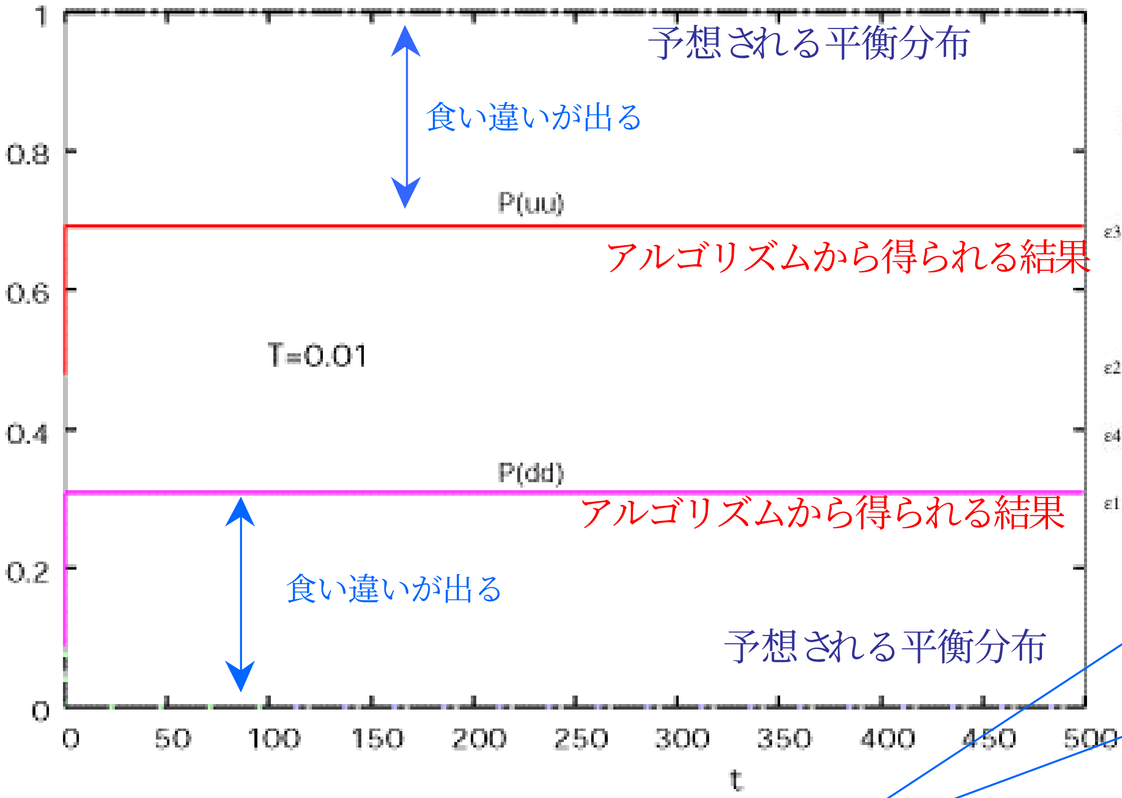
$$\boxed{P(uu) = P_1 = 1}$$

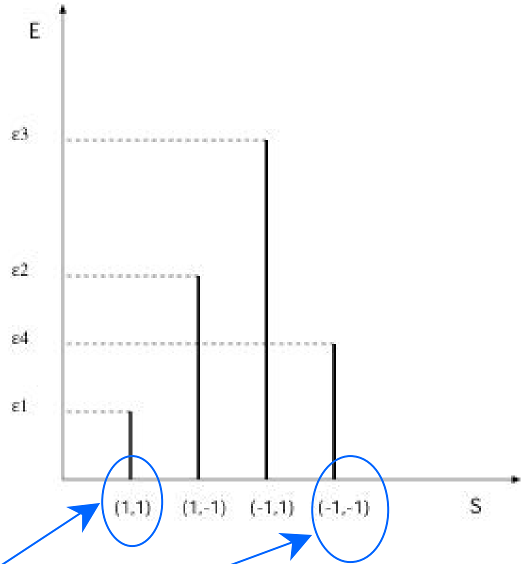
となればOK

$$P(s_1, s_2) = \frac{e^{-E(s_1, s_2)/T}}{Z}$$

$T = 0$ 近くに固定してアルゴリズムを動作させたらどうか？

ノイズがほとんどゼロのアルゴリズム



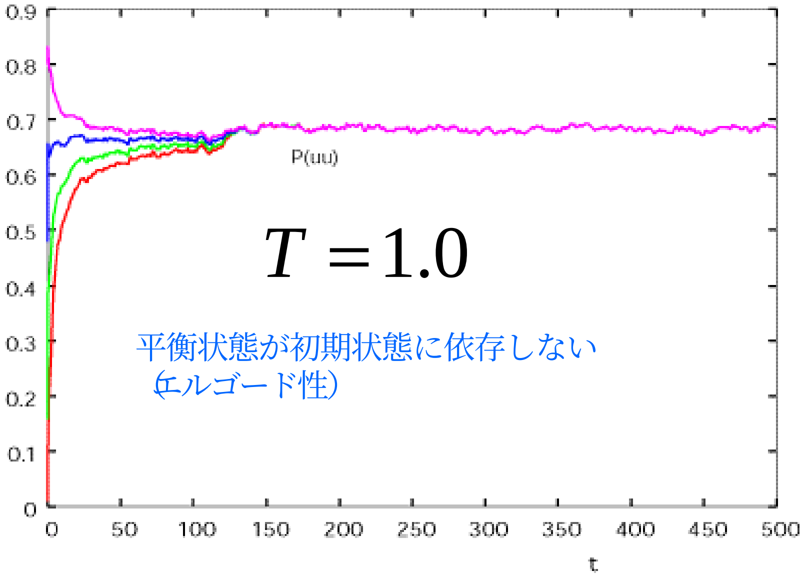


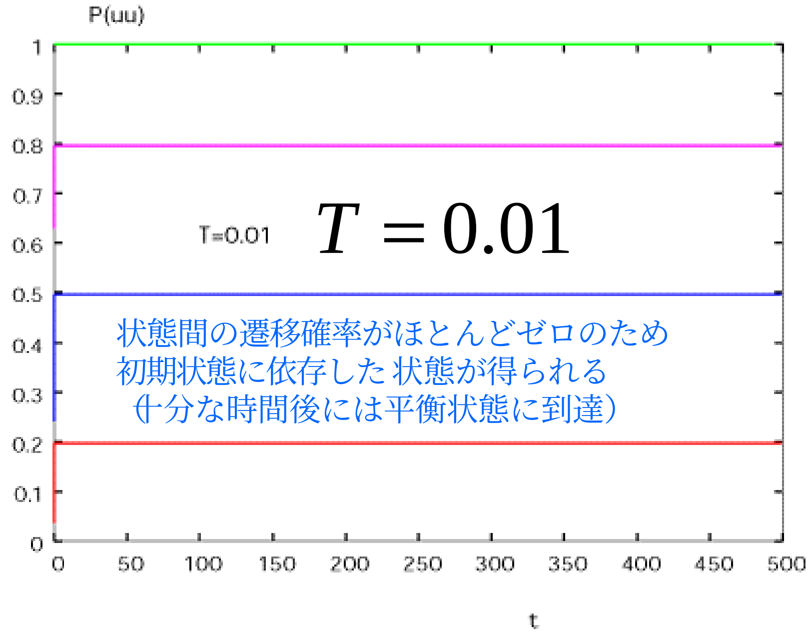
(-1,-1)から(1,1)に移るには必ず(-1.1)を経由しなければならない。

(-1,-1)の滞在時間： $1/e^{-2(J-h_2)/T} = e^{180}$

事実上、(-1.-1)に落ち込んだら最後、脱出することはできない

ノイズレベルと初期状態依存性



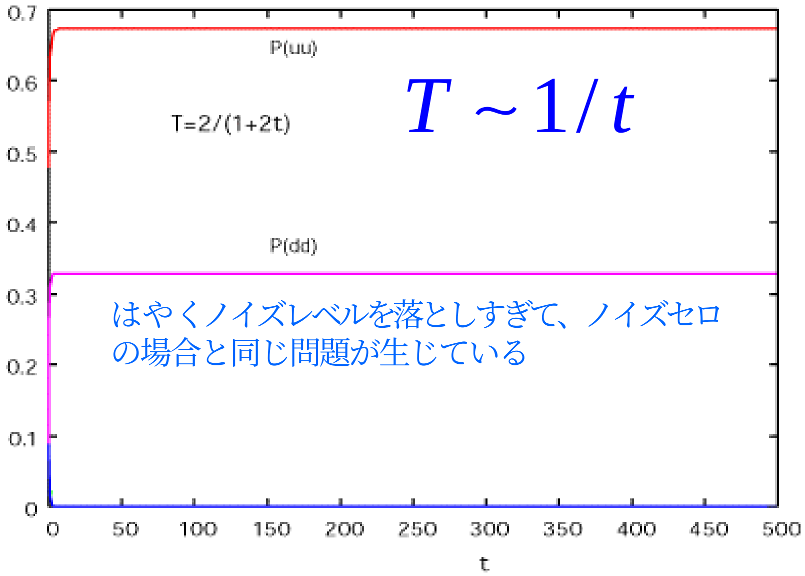


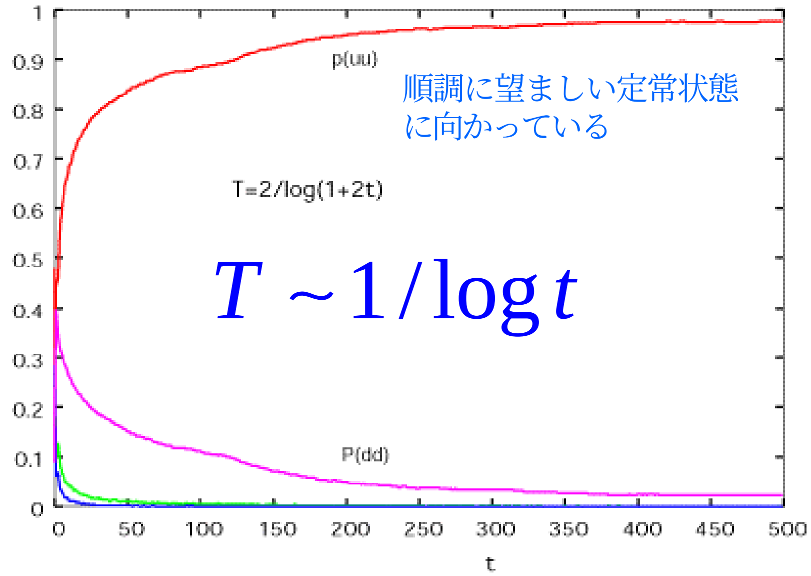
ノイズを各ノイズレベルでの平衡状態を保ちつつ徐々にゼロに制御すれば、初期状態の設定は直前に生成された平衡分布のそれを用いることになるので、うまくいくのではないか？

エネルギー準位を反映した

$P_1 > P_4 > P_2 > P_3$ は各ノイズレベルで保たれる

アニーリングの効果





最適なノイズのスケジューリング（導出は講義ノート）：

$$\boxed{T_{opt} \sim 1/\log t}$$

これよりもゆっくりとノイズを下げれば、十分な時間の後、確率1で最小エネルギー状態が求まる

平衡状態と物理量の期待値

[ノイズを用いたアルゴリズム]を動作させることで、平衡分布　：

ボルツマン分布

$$P(s_1, s_2) = \frac{e^{(Js_1s_2 + h_1s_1 + h_2s_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} e^{(Js_1s_2 + h_1s_1 + h_2s_2)/T}} = \frac{e^{-E(\vec{s})/T}}{\sum_{\vec{s}=\pm1} e^{-E(\vec{s})/T}}$$

$$E(\vec{s}) = -Js_1s_2 - h_1s_2 - h_2s_2$$

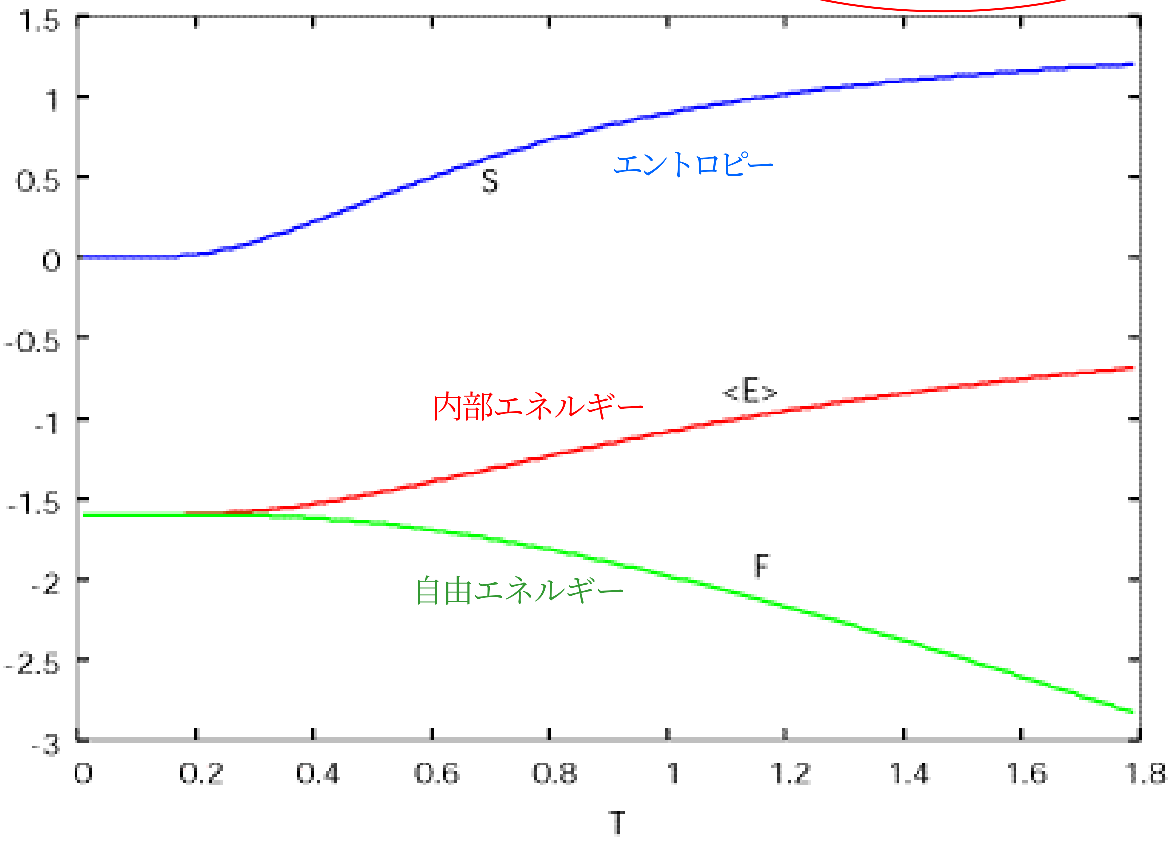
が得られる。 1つのシステムの長時間平均はエルゴード性が満たされる条件下で上記平衡分布でのアンサンブル平均で置き換えることができる

$$\overline{A} = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\sum_{t=0}^{t} A_t = \sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} A(s_1, s_2)P(s_1, s_2) = \langle A \rangle$$

自由エネルギーと期待値

分配関数と呼ばれる平衡分布の規格化因子

自由エネルギー　：$F = -T \log\left(\sum_{s_1=\pm} \sum_{s_2=\pm 1} e^{b\,(J s_1 s_2 + h_1 s_2 + h_2 s_2)} \right)$



内部エネルギー等は

$$\langle E \rangle = \frac{\partial}{\partial b}(b\,F)$$

のように自由エネルギー
経由で求めることができる

詳細は講義ノート