

混沌系工学特論 配布資料 #3

担当：井上 純一 (情報科学研究科棟 8-13)

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

平成 17 年 10 月 31 日

目次

2.6	平均場モデルによる性能評価	29
2.6.1	画像復元問題の確率モデル化再考	30
2.6.2	周辺尤度と自由エネルギー	31
2.7	勾配法による周辺尤度最大化	31
2.8	ハイパーパラメータ推定の平均場理論	32
2.8.1	データ平均化された自由エネルギー	32
2.8.2	ハイパーパラメータ更新式の評価	33
2.8.3	ミクロ変数の平衡状態への緩和とそのマクロな解析	35
2.8.4	解析結果：EM アルゴリズムとの比較	36

2.6 平均場モデルによる性能評価

前節までの結果は、ある特定の画像が劣化された場合、劣化画像を観測データとしたとき、その画像の復元を議論してきた。従って、得られる結果は観測データ、及び、原画像に依存する。例えばシミュレーテッド・アニーリングで得られたビット誤り率の値は、例え伝送路の反転率が同じであっても、毎回の観測毎に揺らぎがともない、得られる結果は観測毎に異なる。原画像としても、強磁性イジングモデルのスナップショットを用いた場合と印鑑の画像を用いた場合ではやはり異なる。また、同じ温度での強磁性イジングモデルのスナップショットであっても、スナップショットを取り出すタイミングにより、様々な模様の画像が得られるので、個々の画像に依存したビット誤り率が得られるはずである。

しかし、異なる 2 つのアルゴリズムを比較する際には、これらの観測データによらない平均的な性能評価を行うことが重要になる。観測データによらない平均性能を議論するには、例えば、様々異なる観測データに関してビット誤り率を計算し、その値の算術平均をとることによって所望の「データ平均値」を得ることができるであろう。しかし、十分に多数回の試行による平均操作を行わない限り、正確な意味での「平均性能」は評価できない。

そこで、本節からは平均場モデルと呼ばれるクラスの確率モデルに対するいくつかの結果/計算技法を紹介する。この平均場モデルに関する解析により、上述の平均性能を数値実験によらずに議論することができるようになる。

以下の講義ノートの内容は比較的面倒な計算を含むが、平均操作/平均性能の評価という考え方をつかんだ後、すぐに解析結果の部分に飛び、評価法の詳細は後から見て行く、という順序でノートを読み進めることもできるであろう。

2.6.1 画像復元問題の確率モデル化再考

基本的には前節までの問題設定と同じだが、再度、我々がここで扱う画像復元のシステムを説明しておく。まずは原画像が次の事前分布で与えられる強磁性イジング模型に関するギブス分布からのスナップショットとする。

$$P_{\beta_s}(\{\xi\}) = \frac{1}{Z_{\beta_s}} e^{\beta_s \sum_{ij} \xi_i \xi_j} \quad (73)$$

ここで、 Z_{β_s} は規格化定数 (分配関数) で

$$Z_{\beta_s} = \text{tr}_{\{\xi\}} e^{\beta_s \sum_{ij} \xi_i \xi_j} \quad (74)$$

で与えられる。ここに、トレース： $\text{tr}_{\{\xi\}}(\dots)$ は状態変数に関する和： $\sum_{\xi_1=\pm 1} \sum_{\xi_2=\pm 1} \dots \sum_{\xi_N=\pm 1}(\dots)$ を表すものとし、以降、画素 $\{\xi\}$, $\{\sigma\}$ に関するトレースは全てこの定義に従うものとする。

そこで、上記の事前分布からのスナップショットを原画像として選ぶとし、このようにして得られる原画像に対して、我々は次のような事前分布を選択する。

$$P_J(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z_J} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j} \quad (75)$$

ここで、 Z_J は上記事前分布の規格化定数 (分配関数) であり、

$$Z_J = \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j} \quad (76)$$

で与えられる。また、 J がこの確率モデルのハイパーパラメータの一つになる。

一方、尤度は通信路の確率モデルであったので、 h をハイパーパラメータとして、

$$P_h(\{\tau\}|\{\sigma\}) = \frac{1}{Z_h} e^{h \sum_i \tau_i \sigma_i}, \quad Z_h = \text{tr}_{\{\tau\}} e^{h \sum_i \tau_i \sigma_i} \quad (77)$$

で与えられるものとする。ここで、アルゴリズムの平均的な性能を解析的に議論するために真の通信路が誤り確率が $p = e^{\beta_\tau} / 2 \cosh(\beta_\tau)$ である 2 元対称通信路：

$$P_{\beta_\tau}(\{\tau\}|\{\xi\}) = \frac{e^{\beta_\tau \sum_i \tau_i \xi_i}}{[2 \cosh(\beta_\tau)]^N} \quad (78)$$

で与えられることにしておく。また、後に行う平均操作では、この分布： $P(\{\tau\}|\{\xi\})$ で各種物理量の平均を行うわけだが、この平均操作を $[\dots]_{\{\tau\}}$ で定義すると、上の 2 元対称通信路 (BSC) とガウス通信路 (GC) は次のように一括して表現することができることに注意する。

$$[\dots]_{\{\tau\}} = \text{tr}_{\{\tau\}}(\dots) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i d\tau_i (\dots) F^{(\text{BSC}, \text{GC})}(\tau_i) \quad (79)$$

ここで、重み関数 F はそれぞれ

$$F^{(\text{BSC})}(\tau_i) = \frac{1}{2 \cosh(\beta_\tau)} [\delta(\tau_i - 1) + \delta(\tau_i + 1)] \quad (80)$$

$$F^{(\text{GC})}(\tau_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} e^{-\frac{1}{2a^2}(\tau_i^2 + a_0^2)} \quad (81)$$

で定義されるものとする。また、 $\beta_\tau = a_0/a^2$ である (a_0 はガウス分布の中心、 a は標準偏差)。従って、この定義に従えば、尤度関数の規格化因子 Z_h は直ちに

$$Z_h = \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\tau_i F^{(\text{GC})}(\tau_i) e^{h\tau_i \sigma_i} \right]^N = \exp \left[N \left(-\frac{a_0^2}{2a^2} + \frac{a^2 h^2}{2} \right) \right] \quad (82)$$

となる。

2.6.2 周辺尤度と自由エネルギー

これら 2 つの確率分布から周辺尤度関数 \mathcal{L} は、ハイパーパラメータ J, h の関数として次のように与えられる。

$$\begin{aligned} -\mathcal{L}(J, h; \{\tau\}) &= \log \text{tr}_{\{\sigma\}} P_h(\{\tau\} | \{\sigma\}) P_J(\{\sigma\}) \\ &= \log \left[\frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}}{Z_J Z_h} \right] \\ &= \log \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i} - \log \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j} + \frac{Na_0^2}{2a^2} - \frac{Na^2 h^2}{2} \end{aligned} \quad (83)$$

この表式から直ちにこの右辺第 1 項はランダム磁場イジング模型の自由エネルギー、第 2 項は強磁性イジング模型の自由エネルギーであることがわかる。このことから、以下ではこの周辺尤度 \mathcal{L} にマイナスの符号をつけたものを単に自由エネルギーと呼ぶことにする。

2.7 勾配法による周辺尤度最大化

ここでは、この自由エネルギー $-\mathcal{L}$ を、この確率モデルに含まれるハイパーパラメータ J, h で最小化 (周辺尤度は最大化) する条件を課し、そこから得られる決定方程式の解をこれらのパラメータの推定値とする方をとる。そこで、この \mathcal{L} の局値条件を書き下してみると

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial J} = \frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} (\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j) e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}}{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}} - \frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} (\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j) e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j}}{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j}} = 0 \quad (84)$$

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h} = \frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} (\sum_i \tau_i \sigma_i) e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}}{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}} - Na^2 h = 0 \quad (85)$$

となる。

さて、問題は上記の事後分布での平均と事前分布での平均、及び J, h の更新をどのように行うかであるが、ここでは J, h に関する微分方程式：

$$c_J \frac{dJ}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial J} = \frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} (\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j) e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}}{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}} - \frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} (\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j) e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j}}{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j}} \quad (86)$$

$$c_h \frac{dh}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h} = \frac{\text{tr}_{\{\sigma\}} (\sum_i \tau_i \sigma_i) e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}}{\text{tr}_{\{\sigma\}} e^{J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}} - Na^2 h \quad (87)$$

に直し (c_J, c_h は時定数)、この連立微分方程式をオイラー法で解く際、時間 t を $t + dt$ に動かす度に、上 2 式の右辺に含まれる、事後分布、事前分布での平均をそれが収束するまで MCMC 法によるモンテカルロシミュレーションで計算する方法を考える。つまり、MCMC 法を用いたシミュレーションで事後分布、事前分布での期待値を求め、上記微分方程式でハイパーパラメータ J, h を更新し、再び、更新された事後、事前分布での平均操作をシミュレーションによって行う..... という一連の作業により、 \mathcal{L} を最小化し、その収束点として最適なハイパーパラメータを得ようというわけである。

しかし、この方法には問題点がある。それは、MCMC 法でシミュレーションをする際に、オイラー法の各ステップで平衡状態に至るまで待っているわけではなく、現実的には有限で打ち切る必要があるのだが、このとき、この「打ち切り」の影響がどの程度、最終的な結果に効いてくるのかは慎重な吟味が必要となる。また、上記の連立微分方程式のオイラー法での時間刻みの大きさ dt も重要な要素になる。打ち切り回数が

少なく、時間刻みが大きいと、ハイパーパラメータ J, h の時間発展が収束に向かった後でも J, h の時間 t に対する曲線は MCMC 法の「熱揺らぎ」のために収束点のまわりで凸凹する。逆に、刻みが小さく打ち切り回数も大きいと、凸凹が少ない代わりに収束に向かうまでに必要なモンテカルロステップ数が非常に大きくなる。そこで、次節では可解である平均場モデルを導入し、具体的に \mathcal{L} をハイパーパラメータ及び自発磁化 m を用いて計算することにより、シミュレーションでの平均操作なしでの微分方程式を導出することにする。なお、ハイパーパラメータに関する微分方程式の各ステップで、系が熱平衡状態に漸近する様子は自発磁化の時間発展によって、すっきりとした形で議論することができる。

2.8 ハイパーパラメータ推定の平均場理論

ここからは、前節で導入した系の平均場モデルを用いて、具体的に自由エネルギーを計算し、その巨視的パラメータに関する微分操作を行なうことにより、ハイパーパラメータの決定方程式を導くことにする。平均場モデルは画素対の長距離相互作用も許す全結合の確率モデルであるが、ビット誤り率等の系の巨視的な振る舞いを調べるためにはとても有用な確率モデルである。

2.8.1 データ平均化された自由エネルギー

まず、我々がこの平均場モデルに関して計算しなくてはならないのは

$$-\mathcal{L}(J, h; \{\tau\}) = \log \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{\frac{J}{2N} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i} + \log \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{\frac{J}{2N} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j} + \frac{Na_0^2}{2a^2} - \frac{Na^2 h^2}{2} \quad (88)$$

の $\{\tau, \xi\}$ による平均¹、つまり

$$-[\mathcal{L}(J, h; \{\tau\})]_{\{\tau, \xi\}} = [\log \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{\frac{J}{2N} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}]_{\{\tau, \xi\}} - \log \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{\frac{J}{2N} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j} + \frac{Na_0^2}{2a^2} - \frac{Na^2 h^2}{2} \quad (89)$$

である。ここで、データ変数 $\{\tau, \xi\}$ と J, h での微分操作が可換であると仮定した。つまり

$$-\frac{\partial [\mathcal{L}(J, h; \{\tau\})]_{\{\tau, \xi\}}}{\partial J} = -\left[\frac{\partial \mathcal{L}(J, h; \{\tau\})}{\partial J} \right]_{\{\tau, \xi\}} \quad (90)$$

$$-\frac{\partial [\mathcal{L}(J, h; \{\tau\})]_{\{\tau, \xi\}}}{\partial h} = -\left[\frac{\partial \mathcal{L}(J, h; \{\tau\})}{\partial h} \right]_{\{\tau, \xi\}} \quad (91)$$

等と仮定する。そこで、この更新式を評価する際に厄介な (88) 式の右辺第 1 項の対数の中身である非一様な系の分配関数を次のように書き直しておく。

$$\begin{aligned} Z &= \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{(\sqrt{J/2N} \sum_i \sigma_i)^2 + h \sum_i \tau_i \sigma_i} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/NJ}} \text{tr}_{\{\sigma\}} e^{-\frac{NJ}{2} m^2 + Jm \sum_i \sigma_i + h \sum_i \tau_i \sigma_i} \end{aligned} \quad (92)$$

この時点で各サイトごとに独立に σ に関する和を実行することができるので

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/NJ}} e^{-\frac{NJ}{2} m^2} (\text{tr}_{\sigma_1} e^{Jm\sigma_1 + h\tau_1\sigma_1}) \dots (\text{tr}_{\sigma_N} e^{Jm\sigma_N + h\tau_N\sigma_N}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/NJ}} e^{N \left\{ -\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \cosh(Jm + h\tau_i) \right\}} \\ &\simeq e^{N \left\{ -\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \cosh(Jm + h\tau_i) \right\}} \end{aligned} \quad (93)$$

¹ 周辺尤度は $\{\tau\}$ を介して $\{\xi\}$ にも依存することに注意。

と評価できる. ただし, m に関する積分は $N \rightarrow \infty$ の極限での鞍点で評価したので, m は方程式:

$$\frac{\partial}{\partial m} \left\{ -\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \cosh(Jm + h\tau_i) \right\} = 0 \quad (94)$$

すなわち

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tanh(Jm + h\tau_i) \quad (95)$$

を満たさなければならない. この右辺は大数の法則から $N \rightarrow \infty$ の極限で, $\{\tau, \xi\}$ に関する平均値に一致する. つまり

$$\begin{aligned} m &= \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{1}{2a^2}(\tau - a_0 \xi)^2} \tanh(Jm + h\tau) \\ &= \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0 \xi) \end{aligned} \quad (96)$$

となる (ここで, $\tau - a_0 \xi = ax$ と変換した). 同様にして, (93) 式より

$$\begin{aligned} \frac{\log Z}{N} &= -\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \cosh(Jm + h\tau_i) \\ &= -\frac{Jm^2}{2} + \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \log \cosh(Jm + hax + ha_0 \xi) \end{aligned} \quad (97)$$

となり, 非一様系の自由エネルギーが得られる. これが (88) 式の右辺第 1 項に相当する.

2.8.2 ハイパーパラメータ更新式の評価

データによる平均操作を施した周辺尤度: $-\mathcal{L}(J, h; \{\tau\})_{\{\tau, \xi\}}$ のハイパーパラメータ J, h に関する微分は

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{L}(J, h; \{\tau\})_{\{\tau, \xi\}}}{\partial J} &= -\frac{m^2}{2} + m \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0 \xi) \\ &\quad + \frac{m_1^2}{2} - m_1 \tanh(m_1 J) \end{aligned} \quad (98)$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{L}(J, h; \{\tau\})_{\{\tau, \xi\}}}{\partial h} &= \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx (ax + a_0 \xi) \tanh(Jm + hax + ha_0 \xi) \\ &\quad - a^2 h \end{aligned} \quad (99)$$

と直ちに計算できる (我々は (90), (91) の仮定をしたことを思い出す).

よって, ハイパーパラメータの決定方程式は $c_J = c_J/N$, $c_h = c_h/N$ を緩和時間として

$$\begin{aligned} c_J \frac{dJ}{dt} &= -\frac{m^2}{2} + m \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0 \xi) \\ &\quad + \frac{m_1^2}{2} - m_1 \tanh(m_1 J) \end{aligned} \quad (100)$$

$$\begin{aligned} c_h \frac{dh}{dt} &= \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx (ax + a_0 \xi) \tanh(Jm + hax + ha_0 \xi) \\ &\quad - a^2 h \end{aligned} \quad (101)$$

となる.

一方、画素の平衡状態への緩和はマクロな物理量、つまり、この場合は自発磁化 m, m_1 の時間発展で与えられるが、これもやはり、平均場モデルでは解析解を求めることができ

$$c_m \frac{dm}{dt} = -m + \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0 \xi) \quad (102)$$

$$c_{m_1} \frac{dm_1}{dt} = -m_1 + \tanh(Jm_1) \quad (103)$$

となる。

このとき、上記の連立微分方程式の解 $(J(t), h(t), m(t))$ に対して、画像復元のパフォーマンスは次の重なり
の時間変化により評価される。

$$\begin{aligned} M(t) &= \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2 \cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \text{sgn}[J(t)m(t) + h(t)ax + h(t)a_0 \xi] \\ &= 1 - \frac{e^{\beta_s m_0}}{\cosh(\beta_s m_0)} H\left(\frac{J(t)m(t) + h(t)a_0}{h(t)a}\right) - \frac{e^{-\beta_s m_0}}{\cosh(\beta_s m_0)} H\left(\frac{J(t)m(t) - h(t)a_0}{h(t)a}\right) \end{aligned} \quad (104)$$

ここで、 $H(x)$ は次で定義される補誤差関数である。

$$H(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_x^\infty dy \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (105)$$

また、この重なりとビット誤り率 P_b の間には次の関係があることに注意しよう。

$$P_b(t) = \frac{1}{2}(1 - M(t)) \quad (106)$$

この P_b の平衡状態: $t \rightarrow \infty$ での値 P_b の $1/J$ 依存性は例えば次の図のように与えられる。ここで、ミクロ

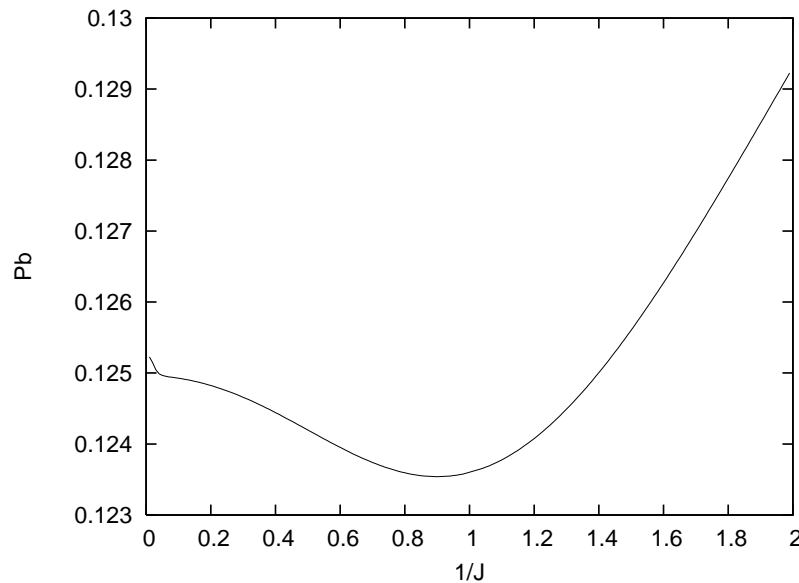


図 19: ビット誤り率: P_b の $1/J$ 依存性. ノイズレベル h の真の値を h_* として、 $h = h_* J$ と置いている。

なパラメータ (画素) の有限温度での推定 (MPM 推定), とハイパーパラメータの推定を同時に行ない、上記 4 本の連立微分方程式の解がその時点での重なり (あるいはビット誤り率) を与えることになる。

2.8.3 ミクロ変数の平衡状態への緩和とそのマクロな解析

ここでは前小節で説明なしに用いた式 (102) を導出しておく。まず、ギブス分布 (ボルツマン分布) を平衡分布にもつような遷移確率, つまり, 状態: $\{\sigma\} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_N)$ の配列中の k 番目のピクセル σ_k が $\sigma_k \rightarrow -\sigma_k$ とその符号を変える確率は

$$w_k(\{\sigma\}) = \frac{1}{2}[1 - \sigma_k \tanh[h_k(\{\sigma\})]] \quad (107)$$

与えられる。ただし, 局所磁場, つまり, 画素 σ_i に作用する磁場を

$$h_k(\{\sigma\}) = \frac{J}{N} \sum_j \sigma_j + h\tau_k \quad (108)$$

で定義した。ここで, エネルギー関数と上記の局所磁場との間の関係は

$$E = - \sum_k h_k(\{\sigma\})\sigma_k = -\frac{J}{N} \sum_j \sum_k \sigma_j \sigma_k - h \sum_k \tau_k \sigma_k \quad (109)$$

となっていることに注意しよう。

先に我々は, ギブス分布を生成させるためには, 「ノイズを利用したアルゴリズム」を動作させればよいことを学んだ。つまり, エネルギー関数を作り, このエネルギー関数を構成するミクロな変数 (この場合ならば σ_i) を任意に一つ選び, その符号を反転させ, 反転前後でのエネルギー差 ΔE を計算し, この値が負ならば, 反転後の新しい状態を採用し, 正の場合でも $e^{-\Delta E/T}$ の確率で反転させる, という操作を数多く繰り返すことにより, このような繰り返しから生成される状態 $\{\sigma\}$ のヒストグラムはギブス分布に従うのであった。しかし, この節で述べたやり方でも, やはりギブス分布を実現することができる。実際に, ギブス分布の作り方は一意ではなく, ある条件を満たしさえすれば, 任意に選ぶことができる。「ノイズを利用したアルゴリズム」の方法をメトロポリス法, この節で述べた方法を熱浴法と呼ぶ。

さて, このとき, 「確率の保存」を表すマスター方程式は

$$\frac{dP_t(\{\sigma\})}{dt} = \sum_{k=1}^N [P_t(F_k\{\sigma\})w_k(F_k\{\sigma\}) - P_t(\{\sigma\})w_k(\{\sigma\})] \quad (110)$$

与えられる。ここで, F_k は k 番目の画素を反転させる演算子であり, 具体的には, 状態 $\{\sigma\}$ に対して $F_k(\{\sigma\} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_N)) = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_k, \dots, \sigma_N)$ のように作用する。従って, 上式右辺の第 1 項は状態 $\{\sigma\}$ 以外の全ての状態から状態 $\{\sigma\}$ に入ってくる確率の流れを, 第 2 項は逆に, 状態 $\{\sigma\}$ から他の状態へ流れ出て行く確率の流れを表しており, このマスター方程式はこれら 2 種類の確率の流れの差が状態 $\{\sigma\}$ の出現する確率の変化率を決めるという意味を持っている。

ここで, マクロな物理量として

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i, \quad \hat{a} = \frac{1}{N} \sum_i \tau_i \sigma_i \quad (111)$$

を選ぶ。見ての通り, m (ハイパーパラメータ J の共役量) は「画素がどれくらい白 (あるいは黒) 色に揃っているか」を表し, \hat{a} (ハイパーパラメータ h の共役量) は「各画素が観測データである劣化画像 $\{\tau\}$ の方向にどれくらい揃っているのか」を表す物理量である。ここでは, これら 2 つのマクロ物理量に関する分布を

$$\mathcal{P}_t(m, \hat{a}) = \sum_{\{\sigma\}} P_t(\{\sigma\}) \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \quad (112)$$

と仮定する. このとき, この式の両辺を時間 t で微分してマスター方程式を代入すると, やや長くなるが

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{P}_t(m, \hat{a})}{dt} &= \sum_{\{\sigma\}} \frac{dP_t(\{\sigma\})}{dt} \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \\
&= \sum_{\{\sigma\}} \sum_k [P_t(F_k\{\sigma\})w_k(F_k\{\sigma\}) - P_t(\{\sigma\})w_k(\{\sigma\})] \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \\
&= \sum_{\{\sigma\}} \sum_k P_t(\{\sigma\})w_k(\{\sigma\}) \left\{ \delta\left(m - m(\{\sigma\}) - \frac{2\sigma_k}{N}\right) \delta\left(\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\}) - \frac{2\tau_k\sigma_k}{N}\right) \right. \\
&\quad \left. - \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \right\} \\
&= \frac{\partial}{\partial m} \sum_{\{\sigma\}} P_t(\{\sigma\}) \left\{ \frac{1}{N} \sum_k [1 - \sigma_k \tanh(h_k(\{\sigma\}))] \sigma_k \right\} \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial \hat{a}} \sum_{\{\sigma\}} P_t(\{\sigma\}) \left\{ \frac{1}{N} \sum_k [1 - \sigma_k \tanh(h_k(\{\sigma\}))] \tau_k \sigma_k \right\} \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \\
&= \frac{\partial}{\partial m} \{P_t(m, \hat{a})m\} + \frac{\partial}{\partial \hat{a}} \{P_t(m, \hat{a})\hat{a}\} \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial m} \left\{ P_t(m, \hat{a}) \frac{1}{N} \sum_k \tanh\left(\frac{J}{N} \sum_j \sigma_j + h\tau_k\right) \right\} \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial \hat{a}} \left\{ P_t(m, \hat{a}) \frac{1}{N} \sum_k \tau_k \tanh\left(\frac{J}{N} \sum_j \sigma_j + h\tau_k\right) \right\} \\
&= \frac{\partial}{\partial m} \{P_t(m, \hat{a})m\} + \frac{\partial}{\partial \hat{a}} \{P_t(m, \hat{a})\hat{a}\} \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial m} \left\{ P_t(m, \hat{a}) \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2\cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \right\} \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial \hat{a}} \left\{ P_t(m, \hat{a}) \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2\cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx (ax + a_0\xi) \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \right\} \quad (113)
\end{aligned}$$

が得られる. 最後に

$$\mathcal{P}_t(m, \hat{a}) = \delta[m - m(\{\sigma\})] \delta[\hat{a} - \hat{a}(\{\sigma\})] \quad (114)$$

を上式に代入して, m, \hat{a} をそれぞれ両辺にかけて, m, \hat{a} に関してそれぞれ部分積分を行うと直ちに

$$\frac{dm}{dt} = -m + \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2\cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \quad (115)$$

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = -\hat{a} + \frac{\text{tr}_\xi e^{\beta_s m_0 \xi}}{2\cosh(\beta_s m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx (ax + a_0\xi) \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \quad (116)$$

が得られる. \hat{a} は m が決まれば決まる量なので, 従属変数である. 従って, 我々がここで扱った平均場モデルでは, ミクロな変数 $\{\sigma\}$ の平衡状態への緩和はマクロな変数 m の時間発展のみによって完全に決まることになる. よって式 (102) が得られた.

2.8.4 解析結果：EM アルゴリズムとの比較

結果のいくつかを下図 20 に載せておこう. 比較のため, EM アルゴリズムの動的性質を同様の解析手法により調べたものを図 20(右) に示す. この図より, 例えば EM アルゴリズムの収束速度が勾配法を上回っ

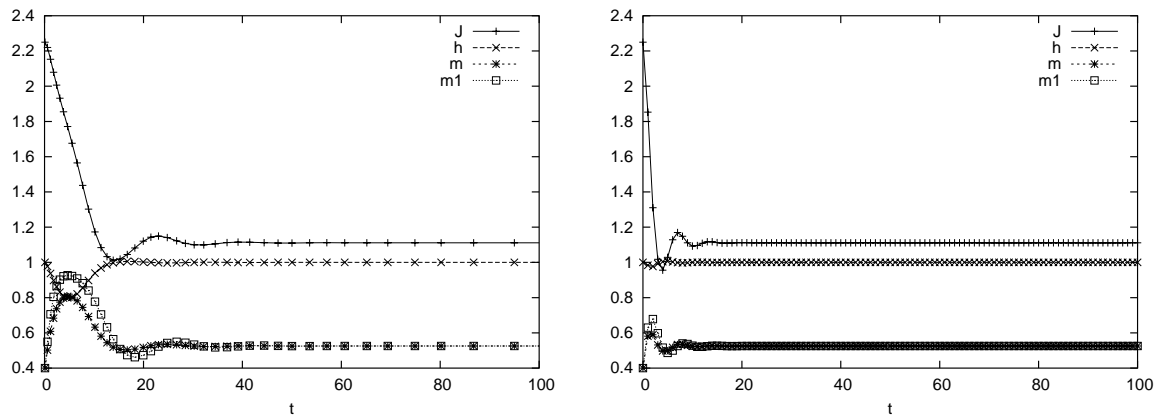


図 20: ここで説明した周辺尤度の勾配法による結果 (左) と EM アルゴリズムによる結果 (右). いずれも, J, h, m , および, m_1 の時間変化をプロットしてある. 各パラメータの初期値は勾配法, EM アルゴリズム共に同じ値を選んである. 勾配法の緩和時間は $c_J = c_h = c_m = c_{m_1} = 1$.

ていることがわかる. また, ハイパーパラメータが上記の 2 つの方法で, 相空間内のどのような経路を経てから解に収束するのかについても, 次の図に示すように解析的にすっきりした形で示すことができる. もっと

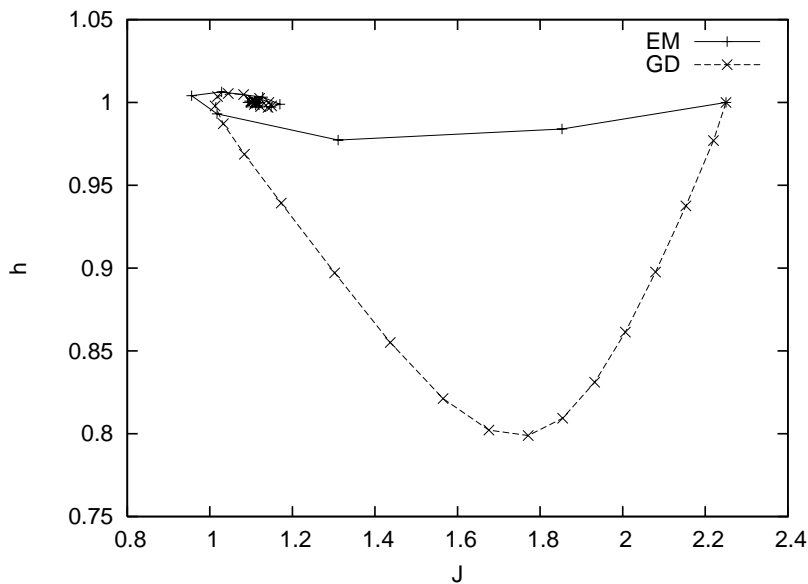


図 21: 勾配法と EM アルゴリズムの相空間内での軌道.

とも, 扱う画像や劣化のされかたによっては勾配法の収束や精度が良くなる場合もあるであろうが, ここでの結果はそうした特定のデータに関する性能比較ではなく, よりフェアな全てのデータに関して平均操作 — 解析的な評価 — を行った場合の優劣であることに再度注意しておこう.