



# 混沌系工学特論 #1

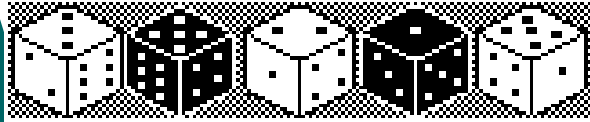
---

情報科学研究科 井上純一

URL : [http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j\\_inoue/](http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/)

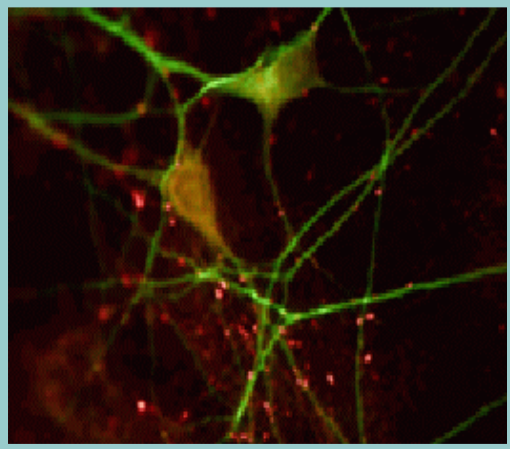
平成17年10月17日 第1回講義

# 確率を用いた柔らかな情報処理

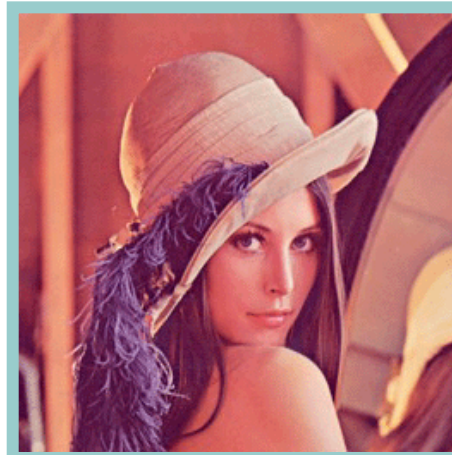


[http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j\\_inoue/](http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/)

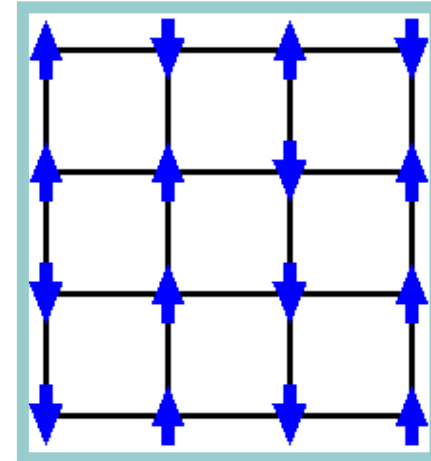
統計力学の方法に基づくアルゴリズムの構築と性能評価



単位：神経細胞  
ネットワーク：脳



単位：画素  
ネットワーク：デジタル画像



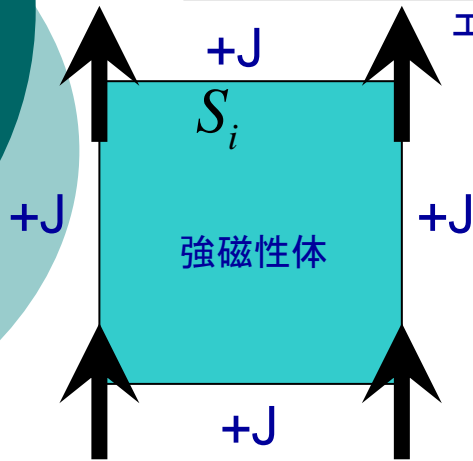
単位：スピン  
ネットワーク：磁石

確率的にふるまう要素がネットワークをなして全体が情報処理系を形成している

そのような題材としては・・・

ニューラルネット(連想記憶、学習)、画像修復 / 誤り訂正符号、最適化問題、スペクトル拡散通信、ゲーム理論、植物ネットワーク、etc・・・

# 共通する数理構造



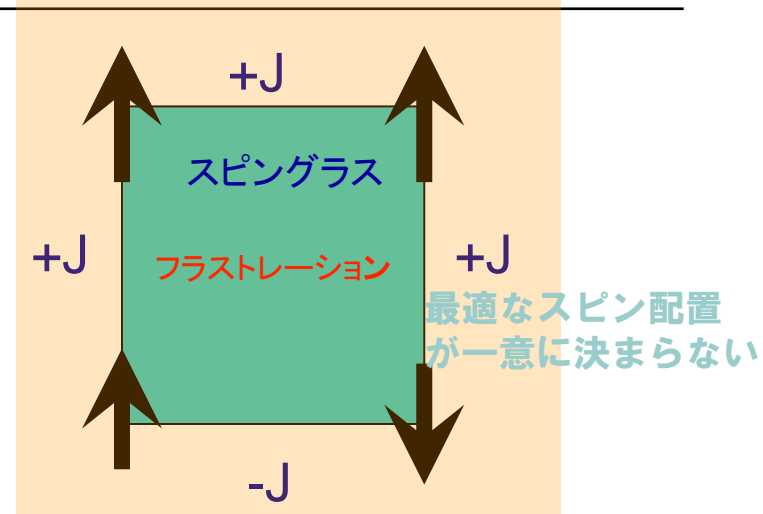
エネルギー関数

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j$$

結合が符号も含めて  
空間的にランダム

**スピングラス**

スピン(小磁石)の「ガラス」



エネルギー関数の多谷構造、熱平衡状態への緩和が遅い、空間的なスピンの「凍結」

多くの特徴的な性質

その解析手法は情報科学をはじめとする様々な問題に用いられつつある

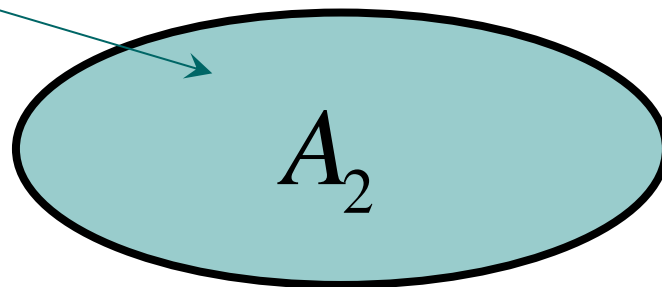
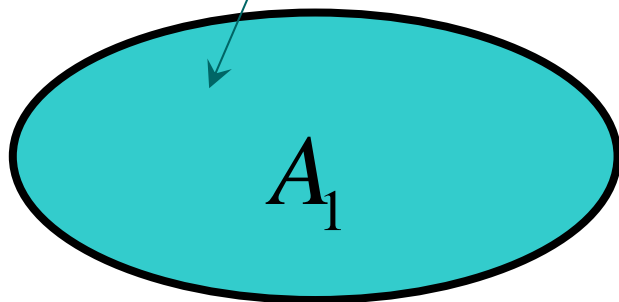
**情報統計力学**

# 組み合わせ最適化問題

2分割問題を例に

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

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

# 4準位エネルギーを持つ2体系の最適化

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

$$\varepsilon_1 = E(1,1) = -J - h_1 - h_2$$

$$\varepsilon_2 = E(1,-1) = J - h_1 + h_2$$

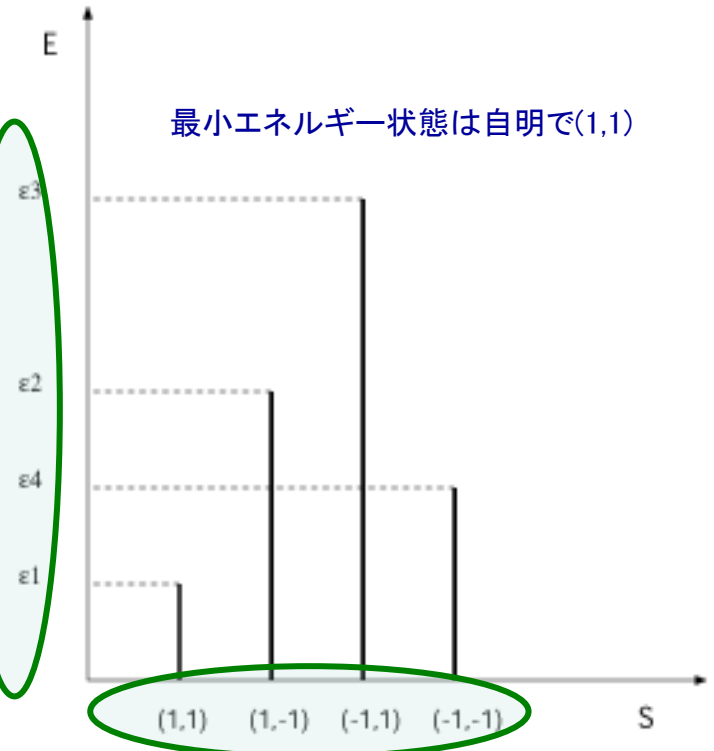
$$\varepsilon_3 = E(-1,1) = J + h_1 - h_2$$

$$\varepsilon_4 = E(-1,-1) = -J + h_1 + h_2$$

$J = 1.0, h_1 = 0.5, h_2 = 0.1$  と選ぶと

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_4 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$$

エネルギー4準位



# ノイズを利用したアルゴリズム

## ノイズを利用したアルゴリズム

$$E = -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2$$

エネルギーが増加するプロセスもある確率で許す

(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。

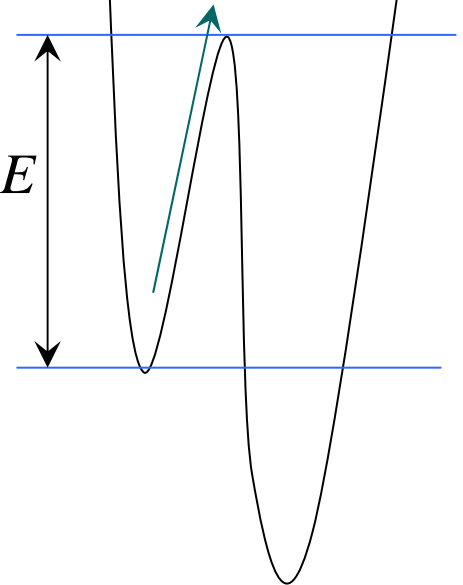
(2) (1)の前後でのエネルギー差:  $\Delta E = E(\vec{s}') - E(\vec{s})$  を計算し、

$\Delta E < 0$  ならば新しい状態を採用

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

(3) (1)(2)を繰り返す

$\Delta E$

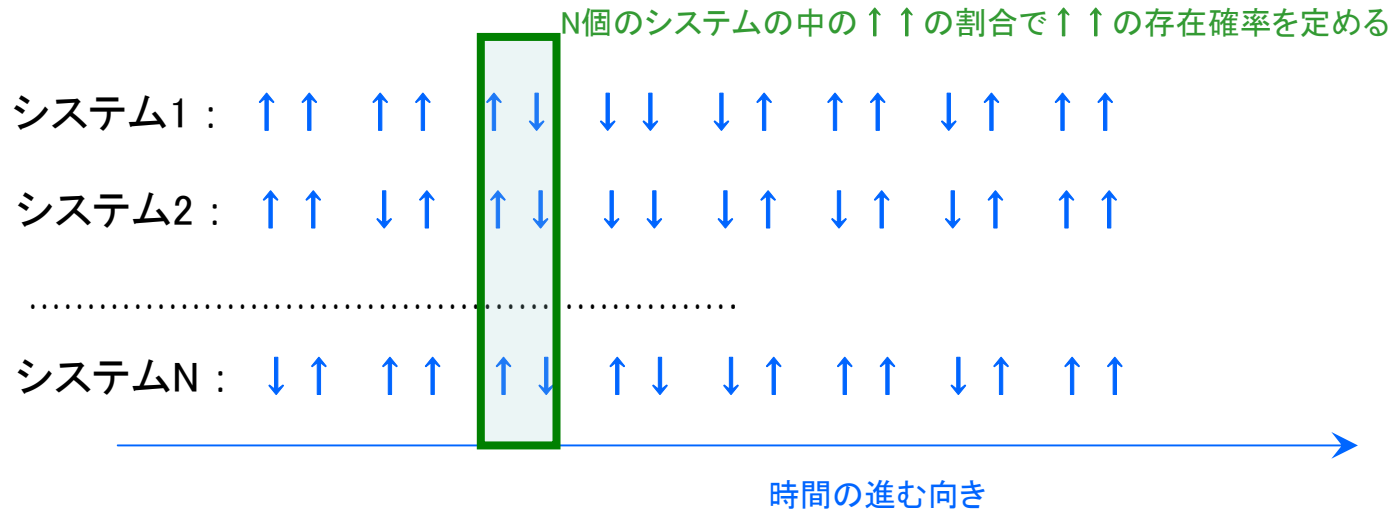


$P(s_1, s_2)$  の時間発展を調べてみる

⇒ 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

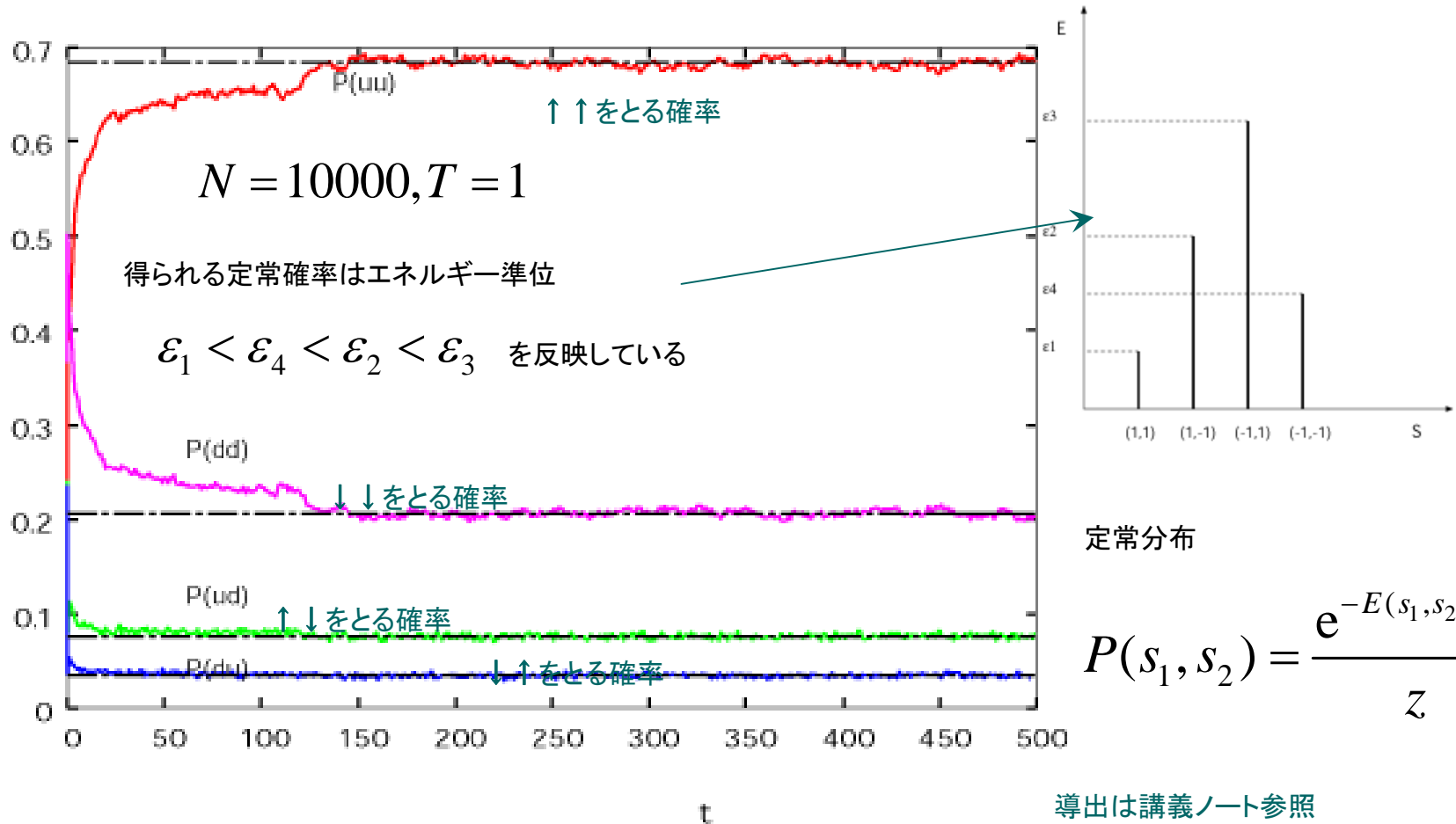
一つのシステムの動きを追うのではなく、同じエネルギー関数をもつ複数のシステム(アンサンブル)の振る舞いを調べる



各状態の存在確率をこれで評価する

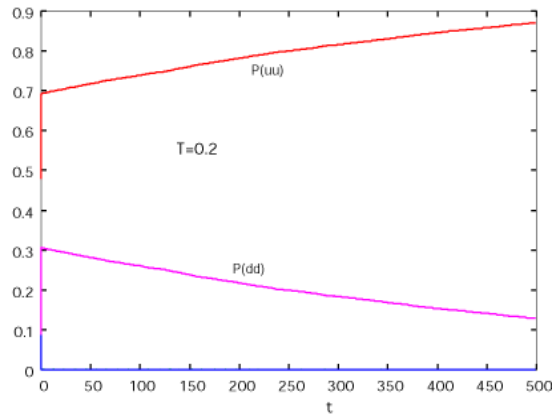
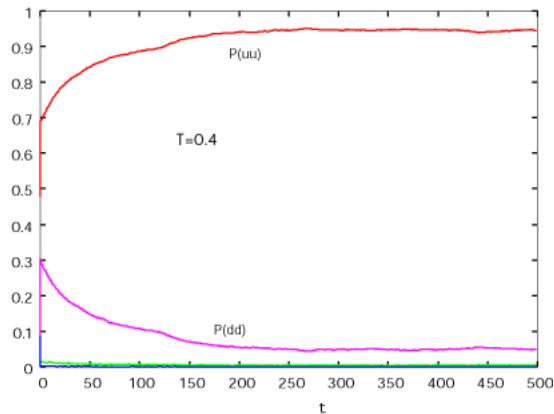
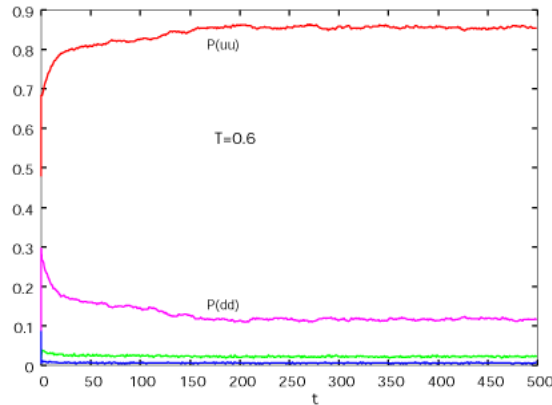
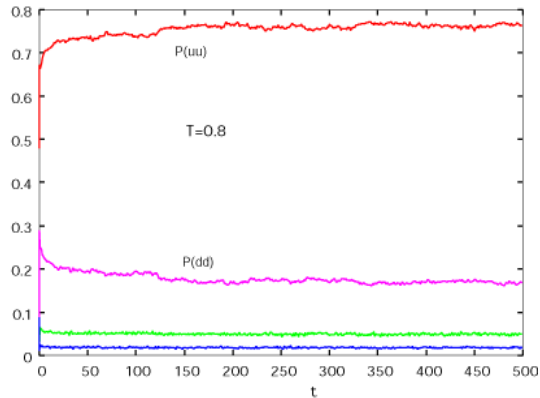
$$P_1 = P(1,1) = \frac{\text{アンサンブルの中で}(1,1)\text{をとるシステムの数}}{\text{アンサンブルを構成するシステムの総数}}$$

# 計算機シミュレーションで感じをつかむ





# 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

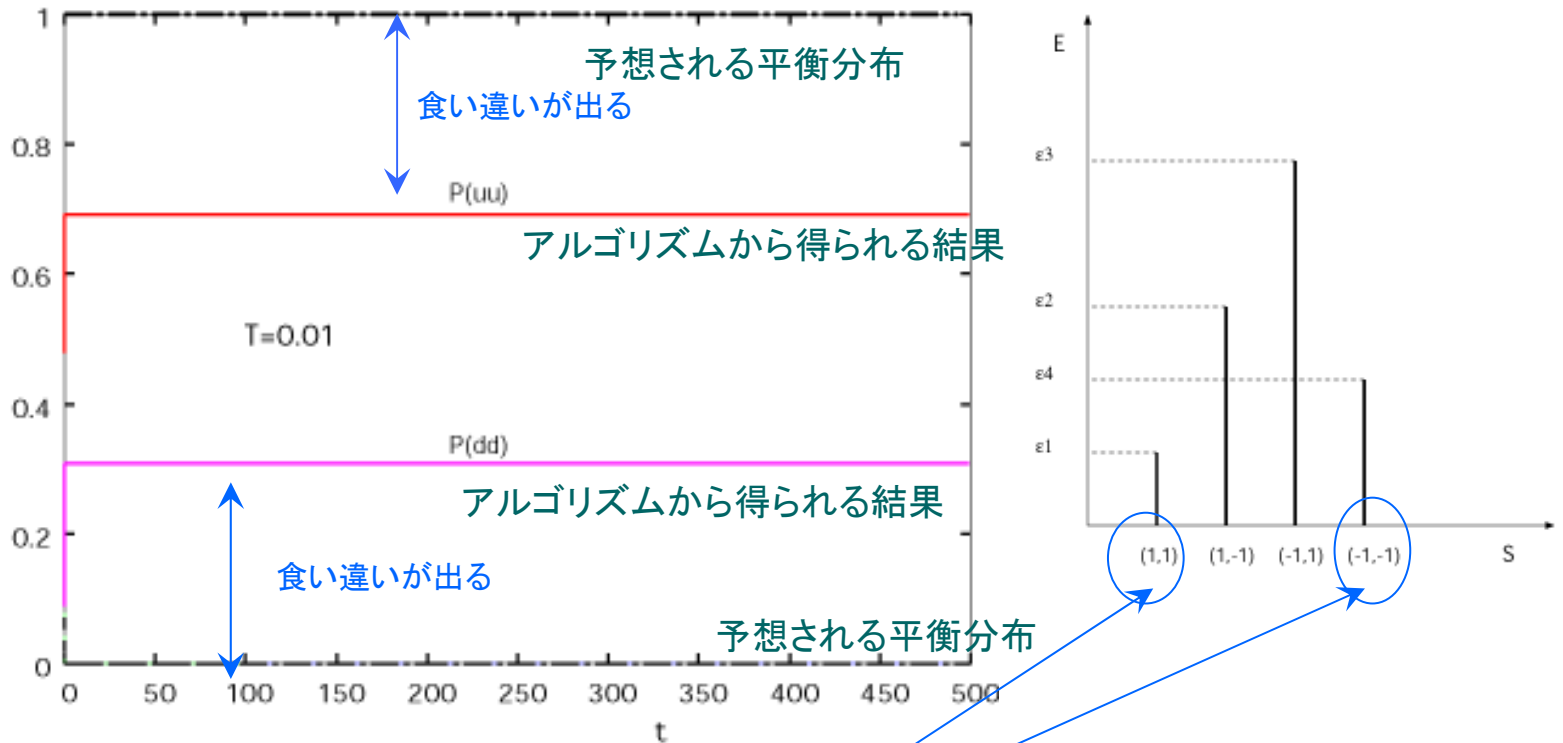
$$P(uu) = P_1 = 1$$

となればOK

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

$T = 0$  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

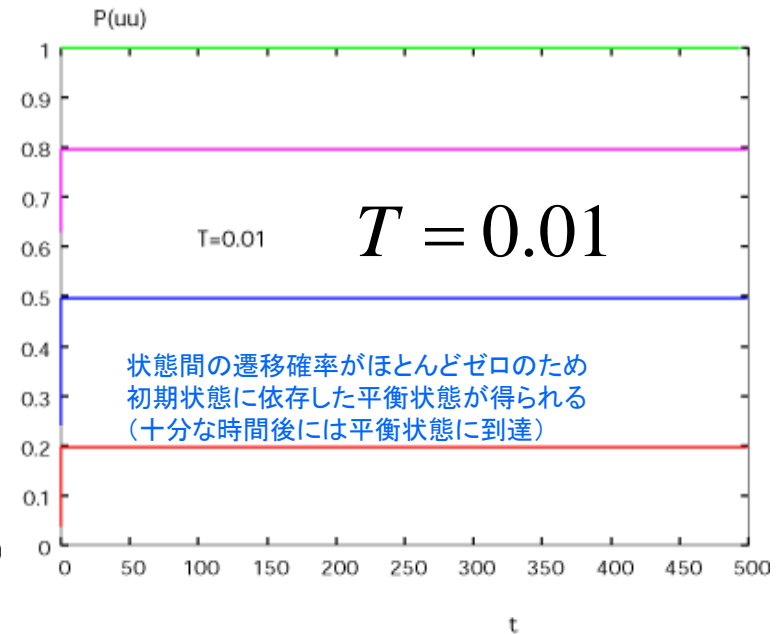
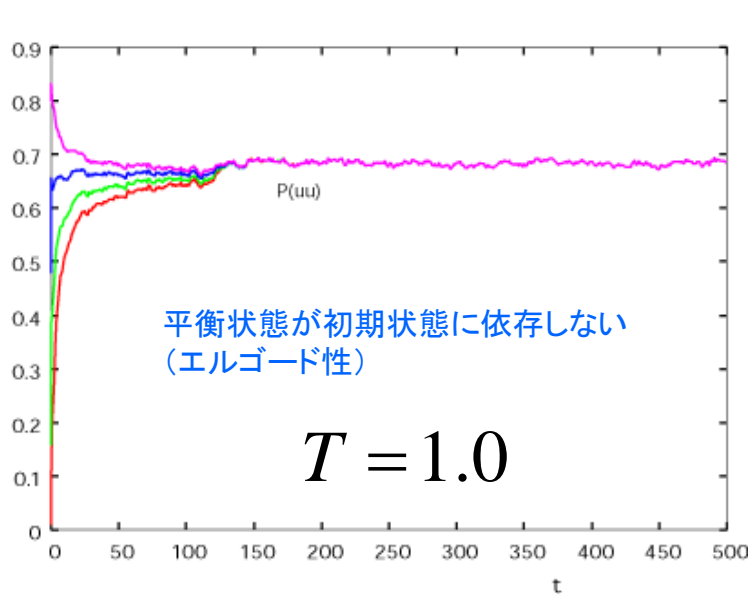


$(-1,-1)$ から $(1,1)$ に移るには必ず $(-1,1)$ を経由しなければならない。

$(-1,-1)$ 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

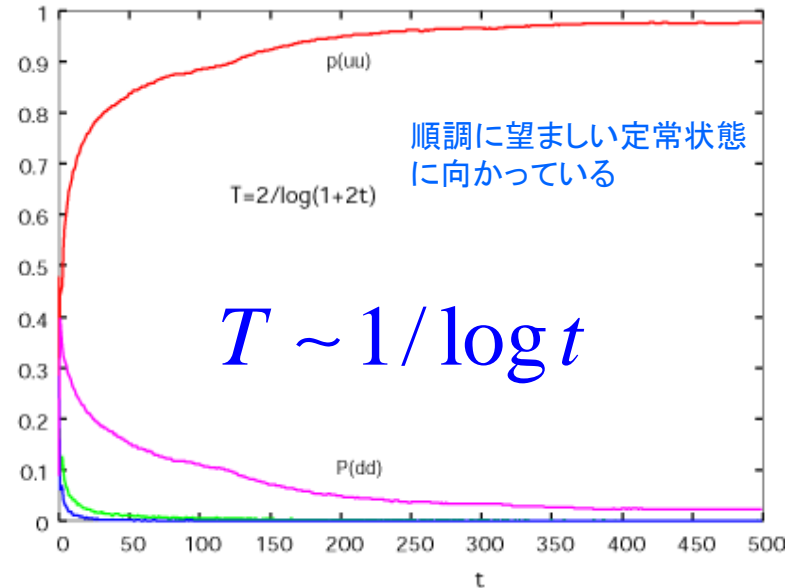
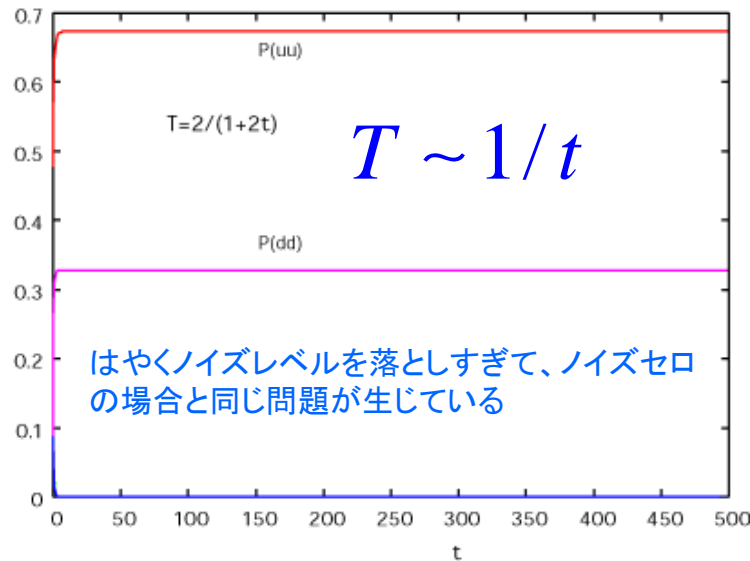


ノイズを各ノイズレベルでの平衡状態を保ちつつ徐々にゼロに制御すれば、初期状態の設定は直前に生成された平衡分布のそれを用いることになるので、うまくいくのではないかと？

エネルギー準位を反映した

$$P_1 > P_4 > P_2 > P_3 \quad \text{は各ノイズレベルで保たれる}$$

# 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）：

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

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：

$$P(s_1, s_2) = \frac{e^{(Js_1s_2 + h_1s_1 + h_2s_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{(Js_1s_2 + h_1s_1 + h_2s_2)/T}} = \frac{e^{-E(\vec{s})/T}}{\sum_{\vec{s}=\pm 1} e^{-E(\vec{s})/T}}$$

$$E(\vec{s}) = -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2$$

ボルツマン分布

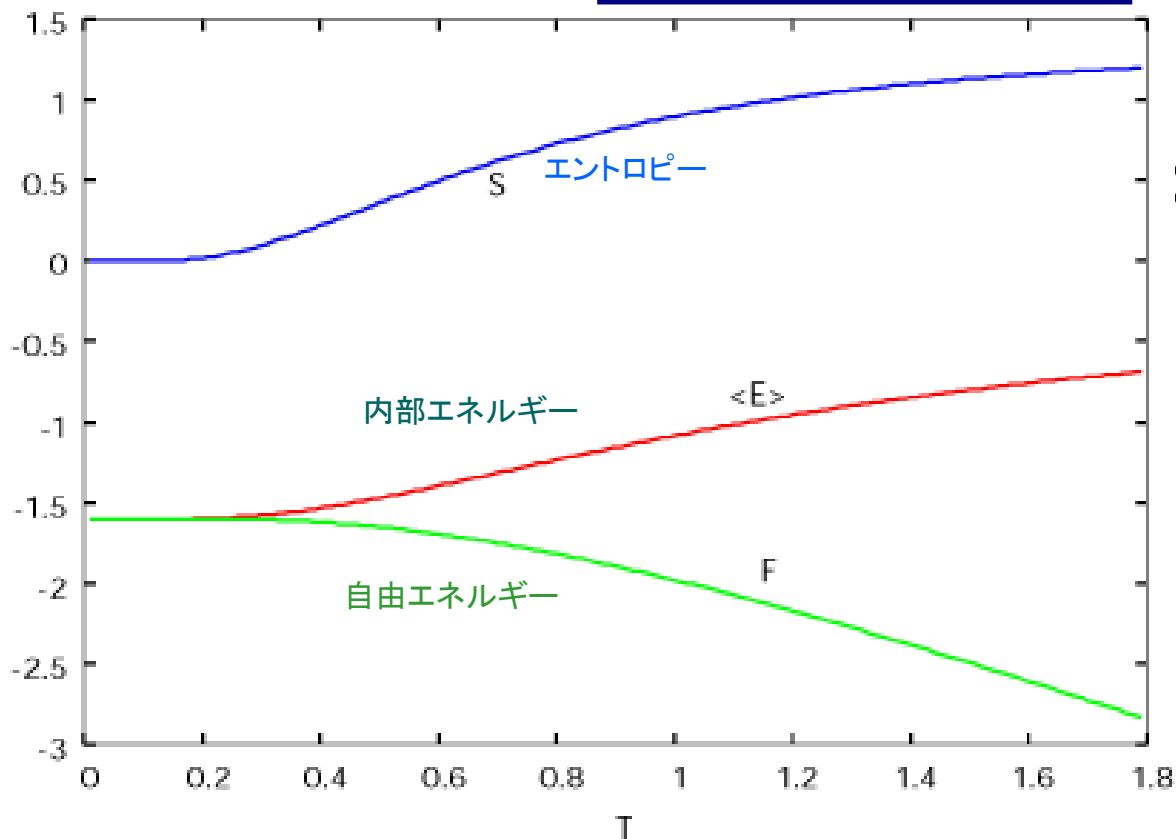
が得られる。1つのシステムの長時間平均はエルゴード性が満たされる条件下で上記平衡分布でのアンサンブル平均で置き換えることができる

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

# 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 :  $F = -T \log \left( \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{\beta(Js_1s_2+h_1s_2+h_2s_2)} \right)$



内部エネルギー等は

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

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