# 混沌系工学特論 #6

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29日　第6回講義

# ノイズを利用したアルゴリズム

## 先週の復習

ノイズを利用したアルゴリズム

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

(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。

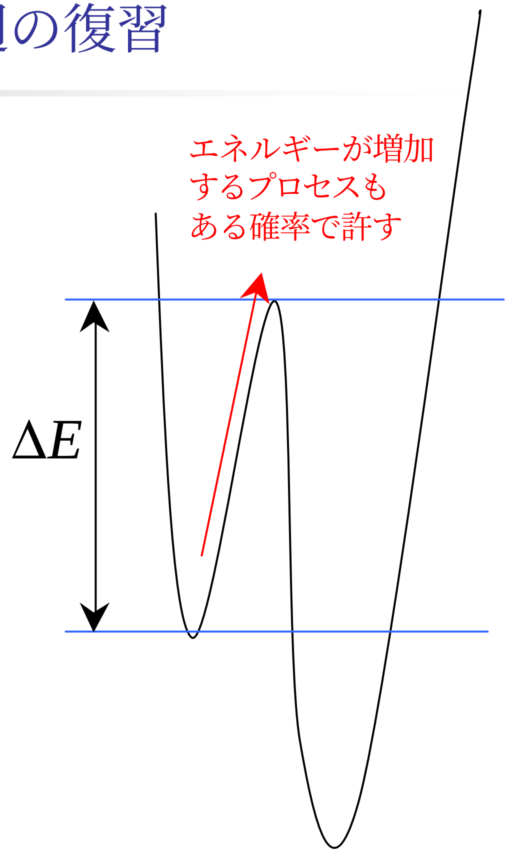
(2) (1)の前後でのエネルギー差： $\Delta E = E(\vec{s}') - E(\vec{s})$ を計算し、

$\Delta E < 0$ ならば無条件で新しい状態を採用

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

この部分でノイズが入る

(3) (1)(2)を繰り返す



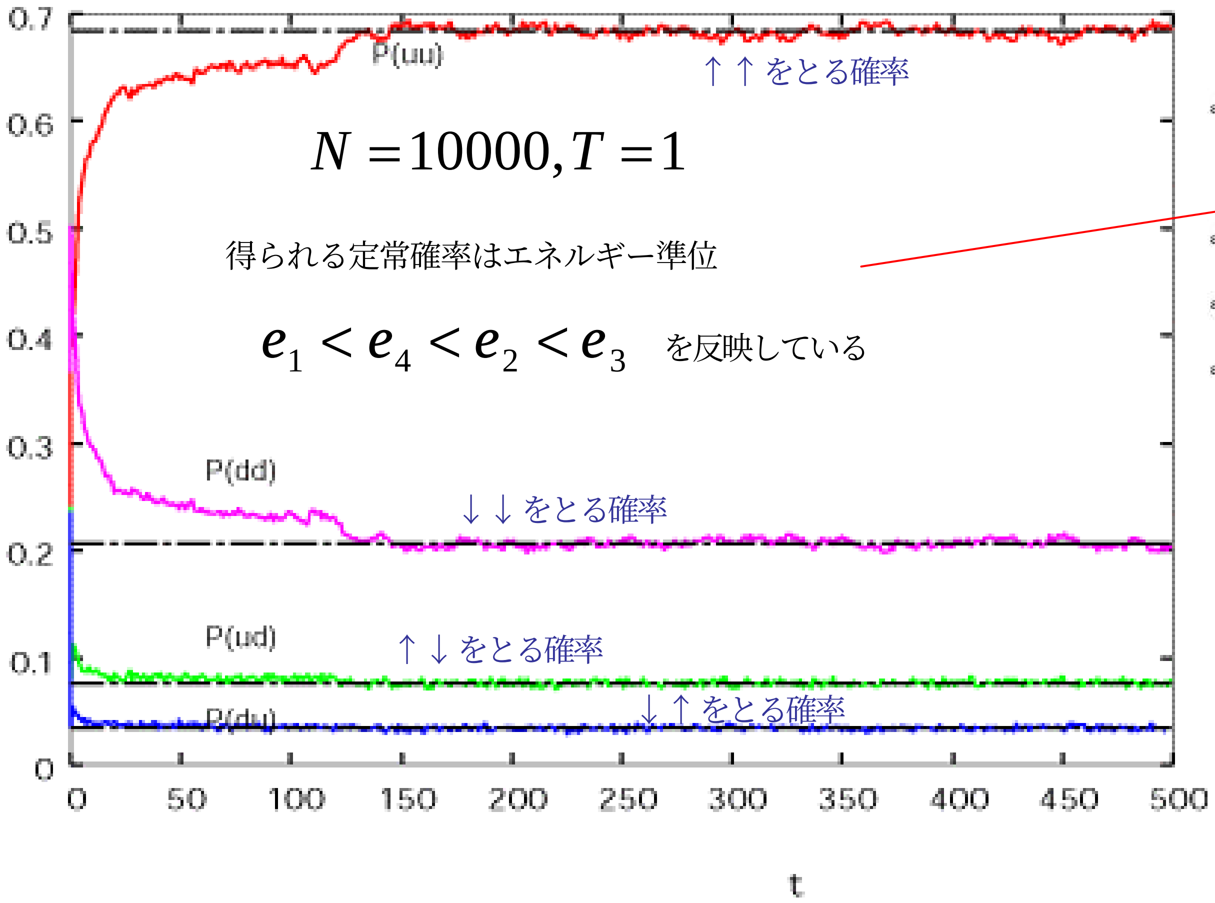

$P(s_1, s_2)$ の時間発展を調べてみる

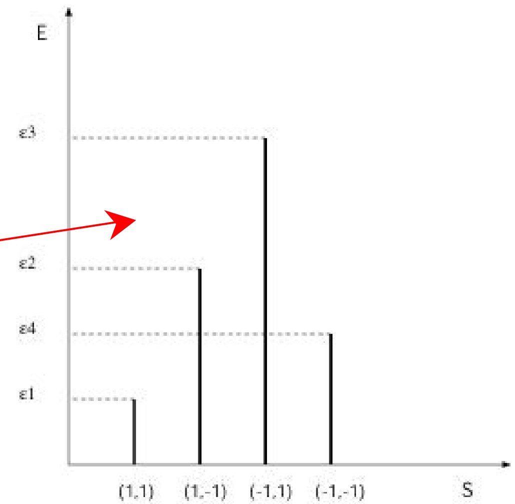
平衡分布はボルツマン分布となる

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

# 計算機シミュレーションで感じをつかむ

## 先週の復習




定常分布

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

導出は講義ノート参照

# 平衡状態と物理量の期待値
## 先週の復習

[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ト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

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

# 統計力学の方法の具体的適用例

## 神経系の連想記憶への適用

ターゲットパターンを　$\vec{x}^{1} = (1,\ldots,1)$　　記憶するパターン数がオーダ1とする

$$E\left(S_1,\ldots,S_N\right) = \frac{1}{N}\sum_{ij}\sum_{m=1}^{p} x_i^{m} x_j^{m} S_i S_j = \underbrace{-\frac{1}{2N}\left(\sum_i S_i\right)^2}_{\text{オーダNの量}} + O(1)$$

システムの分配関数 :

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1} \mathrm{e}^{-bE(S_1,\ldots,S_N)} = \sum_{S_1=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1} \mathrm{e}^{\left(\sqrt{\frac{b}{2N}}\sum_i S_i\right)^2}$$

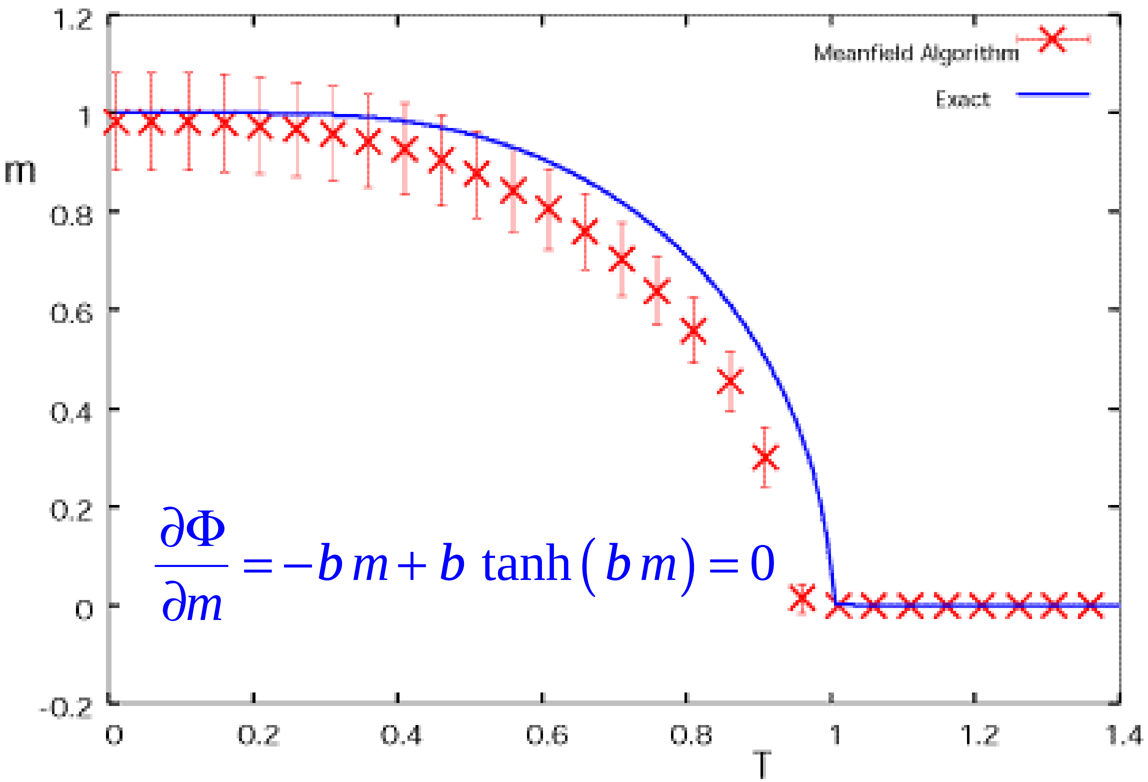
$$= \sum_{S_1=\pm 1}\cdots\sum_{S_N=\pm 1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dm}{\sqrt{2p/bN}}\mathrm{e}^{-\frac{N}{2}bm^2 + bm\sum_i S_i}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dm}{\sqrt{2p/bN}}\mathrm{e}^{-\frac{N}{2}bm^2}\left\{\sum_{S_1=\pm 1}\mathrm{e}^{bmS_1}\right\}\cdots\left\{\sum_{S_N=\pm}\mathrm{e}^{bmS_N}\right\}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dm}{\sqrt{2p/bN}}\mathrm{e}^{-\frac{N}{2}bm^2 + N\log 2\cosh(bm)} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dm}{\sqrt{2p/bN}}\mathrm{e}^{N\Phi(m)}$$

Nが十分大きなとき
積分は指数の肩の極大（鞍点）
で支配される

# 鞍点方程式と自由エネルギー




$$\frac{\partial \Phi}{\partial m} = -b\,m + b\,\tanh\left(b\,m\right) = 0$$

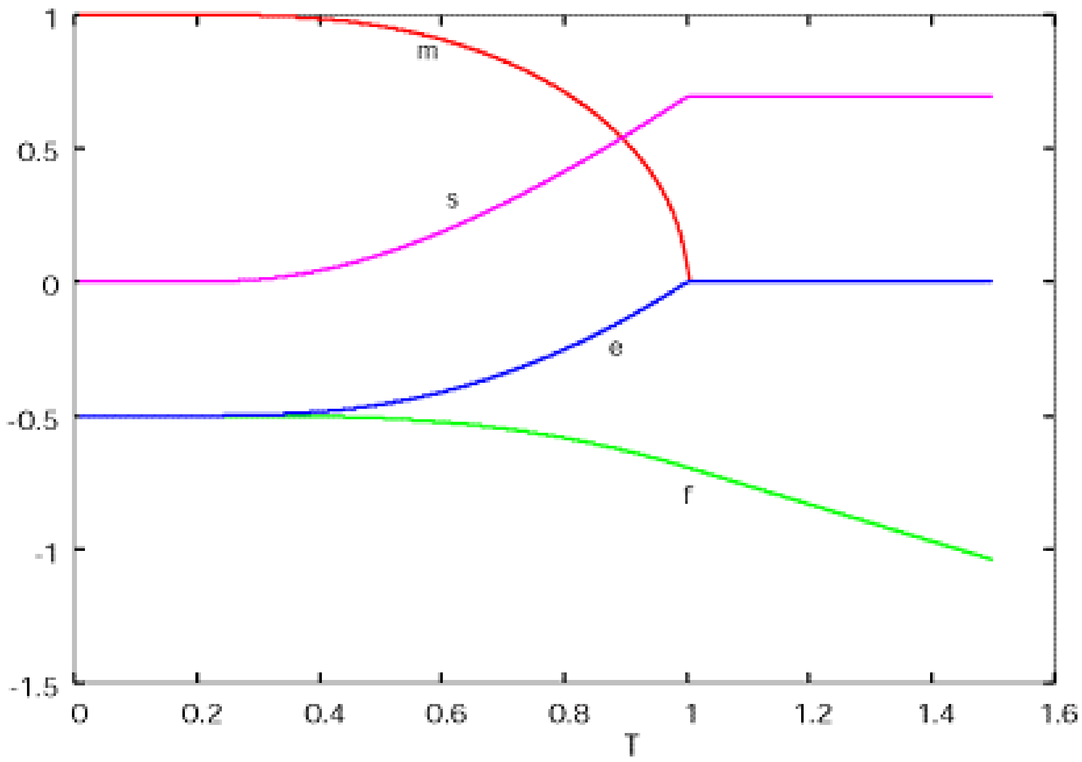
$$Z = \mathrm{e}^{N\Phi(m)}$$

1神経素子あたりの自由エネルギー

$$\frac{F}{N} = f = -\frac{1}{b}\Phi\left(m\right)$$

$$= \frac{m^2}{2} - \frac{1}{b}\log 2\cosh(b\,m)$$

# 自由エネルギー、内部エネルギー、エントロピー




内部エネルギー

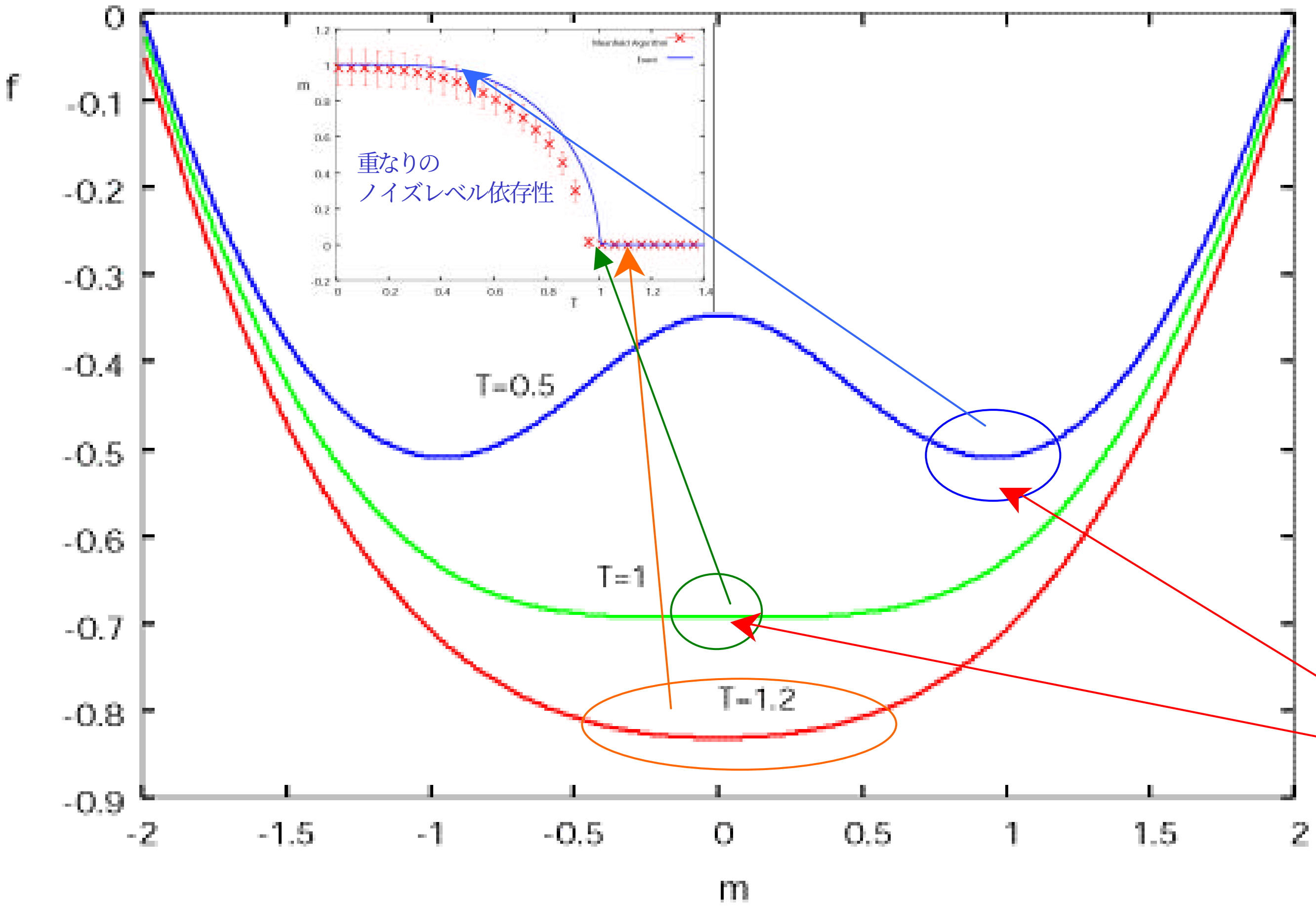
$$e = \frac{\partial}{\partial b}(b\,f) = \frac{m^2}{2} - m\tanh(b\,m)$$

エントロピー

$$s = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right) = \log 2\cosh(b\,m) - b\,m\tanh(b\,m)$$
$$= b(e - f)$$

各種物理量は自由エネルギー経由で求めることができる

# 自由エネルギーと2次相転移



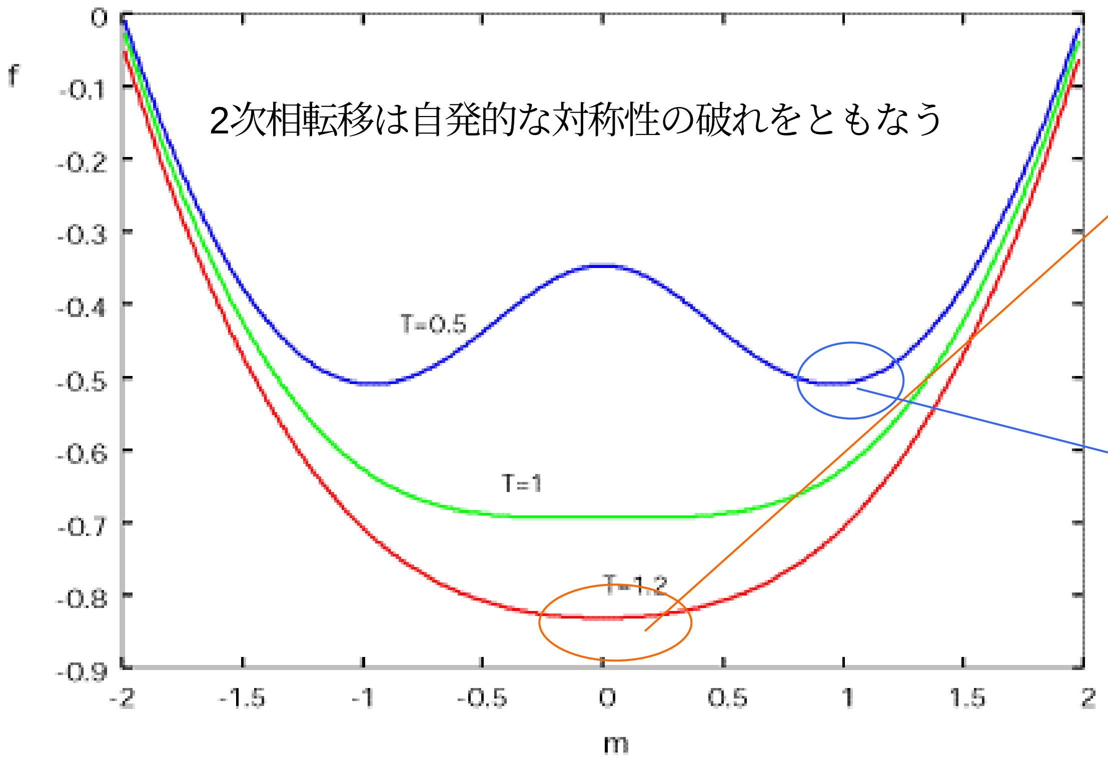

システムのとりうる状態
は自由エネルギーの
極小 最小)である

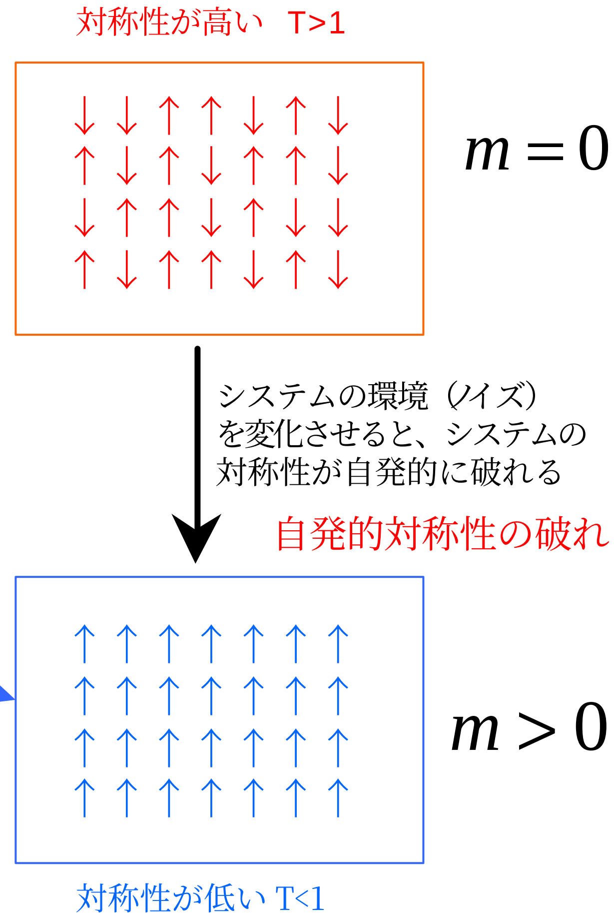
$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0$$

転移点を境にして
$m = 0$
が不安定化し
$m \neq 0$
が安定となる

# 自発的対称性の破れと2次相転移

重なり $m = \frac{1}{N}\sum_i S_i$ はシステムの対称性を反映する



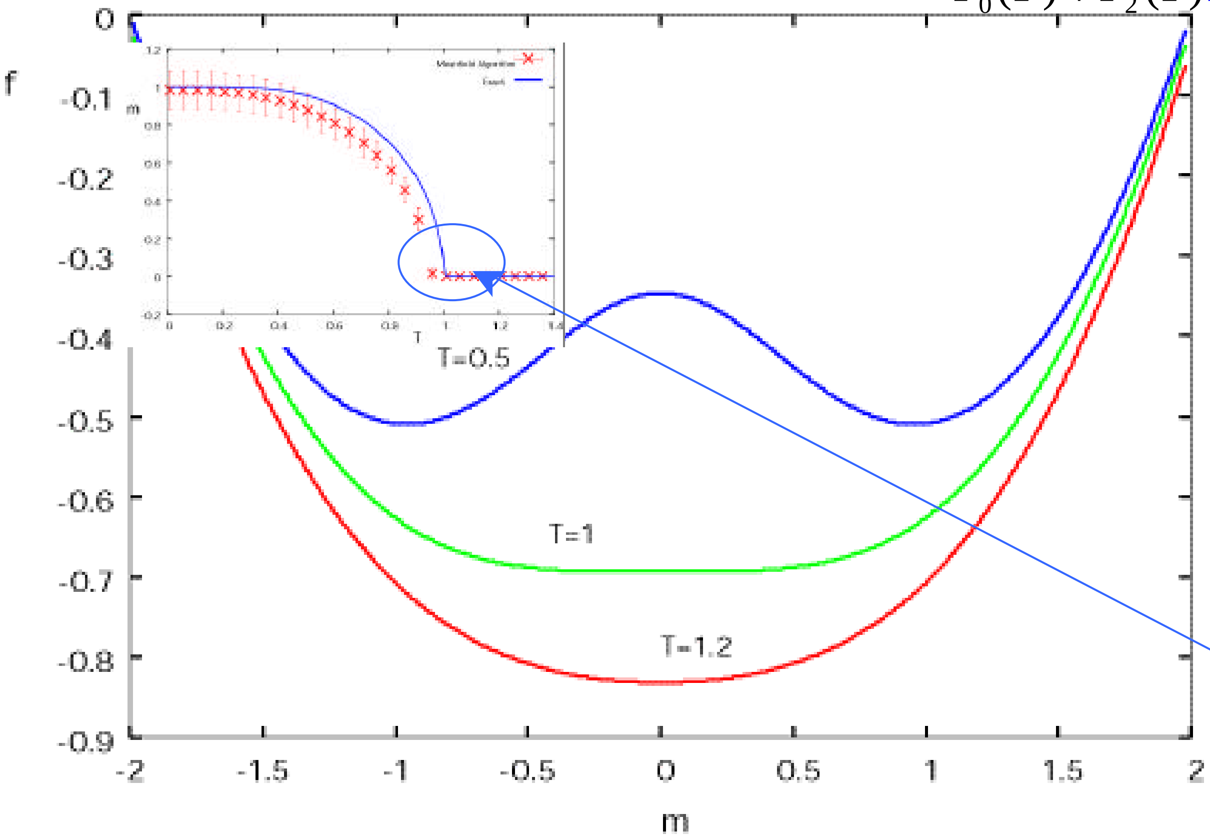



# 自由エネルギーの秩序変数での展開

自由エネルギーを $m \simeq 0$ で展開する

$$f = -T\log 2 + \left(\frac{T-1}{2T}\right)m^2 + \frac{1}{12T^3}m^4 + O(m^6)$$

$$= F_0(T) + F_2(T)m^2 + F_4(T)m^4$$




相転移が生じるノイズレベル

$$F_2(T) = 0$$

$$T = 1$$

転移点近傍での秩序変数の振る舞い

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0, m = \left\{-\frac{F_4(T)}{2F_2(T)}\right\}^{1/2}$$

$$m = (1-T)^{1/2}$$

# 2分割問題の統計力学

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

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

$$A_1 \qquad\qquad A_2$$

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

# いくつかの簡単な場合の考察

$A_1, A_2$　どちらか一方がアイテムを独り占めする場合　$m = \frac{1}{N}\sum_i s_i = 1$

$$E = \left|\sum_j a_j s_j\right| = \left|\sum_j a_j\right| = N \cdot \frac{1}{N}\sum_j a_j = N\int_0^1 a\,da = \frac{N}{2}$$

$2^N$

個の準位

$m = \frac{1}{N}\sum_i s_i$　による制約が無い場合

$\sqrt{N}$

$$\left|\sum_j a_j s_j\right| = \left|a_1 s_1 + \cdots + a_N s_N\right| \le O(2^{-N}\sqrt{N}) < O(\sqrt{N})$$

$m = \frac{1}{N}\sum_i s_i$　による制約がある場合（感度分析）、統計力学による解析が有効

$2^{-N}\sqrt{N}$

次回（2/20)に詳しくみて行く