混沌系工学特論 講義ノート

北海道大学 大学院情報科学研究科

井上 純一

この講義ノートについて

この講義ノートは北海道大学 大学院情報科学研究科で過去 10 数年間に渡って開講してきた講義「混沌系工学特論」の講義ノートです. 大学院カリキュラム改訂に際し, ここで「一段落」の意味も込めて今までの講義記録をまとめておくことにしました. その意味で, 一部, 同研究科, 脳科学教育研究センターで開講されている「知性創発発達特論」もその内容に含めてあります. 講義タイトルからはその中身が極めてわかりにくいのですが, 本講義ノートは基本的に「統計力学の境界領域 (情報・社会・経済分野含む) への応用」の事例紹介・解説となっています. なお, 「事例紹介」といっても単なる「概論」ではなく, 個々のトピックについてかなり丁寧な説明を加えたつもりです. 内容の記述に関し, 単純な誤植や各章, 各節間の非整合性はもちろん, 担当者の間違った理解で書かれた部分がある可能性も大いにありますが, それらに関してお気づきの点は随時ご指摘, ご教示頂ければ幸いです. また, いくつか挙げた**課題**は (既に各自が研究課題を持っている) 受講生である大学院生に対して履修単位をだすためのもので, 多くの場合が彼ら/彼女ら自身の研究活動に対し, 過度な負担がかからない程度の現実的な時間内で取り組むことのできる問題となっています. しかし, 誤解を恐れずに言うならば, 「良い例題」「 意味ある練習問題」の作成は新しい研究への第一歩なので, 読者 (利用者) の皆さん各自が時間をかけてそのような例題を考えてみてくださるとこの分野の理解がより一層深まるものと思われます.

なお, 当講義は大学院講義ですから担当者の研究を反映しております. その研究は日々少しずつですが前進しています. 内容にご興味のあるかたは当研究グループのページ:

`http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/major.html#group`

をご覧になってみてください.

平成 26 年 9 月 札幌の研究室にて

井上 純一

目 次

1　確率統計の復習

いきなりこの講義の本題である情報統計力学の解説に入るのではなく, はじめに当講義で用いる確率統計の簡単な復習をしておくことにする. 確率統計に関して十分に学んだ者はこの節を読飛ばしても構わない. その場合にはこの講義ノートのどの節から読み始めてもそれらの理解に問題ないであろう. また, この講義では数学的議論 (解析計算) を多用するので, 初学者は面倒がらずに式変形を追うなどし, 早い段階でそうした傾向に慣れておくと良いであろう.

1.1　標本点と標本空間

簡単のため, 何の作為も無く, フェアに作られた 6 面体サイコロを振ることを考えよう. この「サイコロを振る」という操作をここでは**試行**と呼ぶ. 各試行で 1 ∼ 6 までの目のうちの一つが観測されるが, この目を**標本点**と呼ぶ. また, 観測可能な標本点からなる集合を**標本空間**と呼び, それを Ω と名付けると, 今のサイコロの場合には

$$\Omega \quad = \quad \{1,2,3,4,5,6\} \tag{1.1}$$

である. 標本空間の中から任意の部分集合, 例えば, $\{1,3,5\}$ を選び, 「$1,3,5$ のいずれかの目が出る」というのを一つの集合として $A=\{1\cup 3\cup 5\}$ と書くことにすると, この A は「奇数の目が出る」という**事象**を表すことになる. この他にも, 例えば, 部分集合として 1 を選び, $A=\{1\}$ とすれば, A は「1 の目が出る」という事象を表すことになる.

また, サイコロを 2 つ同時に投げる場合, 標本空間 (集合) Ω の「直積」を考えることができる. すなわち,

$$\Omega\times\Omega\equiv\Omega^2=\{1,2,\cdots,6\}\times\{1,2,\cdots,6\}=\{(1,1),(1,2),\cdots,(6,5),(6,6)\} \tag{1.2}$$

であり, この直積空間 (集合) Ω^2 の要素数は $|\Omega^2|=36$ である.

1.2　ア・プリオリ確率と経験確率

事象 A が起こる確率を $P(A)$ と書く. すると, この確率は次の条件を満たさなければならない.

(i) 任意の $A\in\Omega$ に対し

$$0\le P(A)\le 1 \tag{1.3}$$

(ii) 全ての可能な事象の確率を足したら 1 にならなければならない.

$$\sum_{A\in\Omega}P(A) \quad = \quad 1 \tag{1.4}$$

(iii) 互いに背反な 2 つの事象 $A,B\in\Omega$ に対して, 確率 $P(A\cup B)$ は

$$P(A\cup B) \quad = \quad P(A)+P(B) \tag{1.5}$$

上記 (i)(ii)(iii) に注意し, サイコロの例を再考する. まず, 事象 $A = 1, \cdots, 6$ は互いに背反であるから, 条件 (ii)(iii) より

$$P(A = 1 \cup \cdots \cup A = 6) \underbrace{=}_{\text{(iii) を使った}} P(A = 1) + P(A = 2) + \cdots + P(A = 6) \underbrace{=}_{\text{(ii) を使った}} 1 \quad (1.6)$$

が成り立つ. また, どの目が出るのも**同じくらい確からしい**とすると

$$P(A = 1) = P(A = 2) = \cdots = P(A = 6) = a \quad (1.7)$$

である. ここで (i) より, $0 \leq a \leq 1$ であることに注意する. (1.7) 式を (1.6) 式に代入することで, $a + a + \cdots + a = 6a = 1$, つまり, $a = 1/6$. 従って,

$$P(A = 1) = P(A = 2) = \cdots = P(A = 6) \quad = \quad \frac{1}{6} \quad (1.8)$$

が得られる. これはサイコロを何回も振ることによる「実験」によって調べられた確率ではなく, 上記 3 つの条件 (i)(ii)(iii) (確率の公理) を満たし, かつ, 「どの目が出るのも同程度確からしい」ということを「ア・プリオリ」に認めることで得られた確率 (ここでは**ア・プリオリ確率**と呼ぶ) であることに注意しよう.

この確率を何度もサイコロを投げる「実験」を行うことで求めることもできる. 実際, N 回サイコロを投げ, $A = i \ (i = 1, \cdots, 6)$ の目の出た回数が $n_i(N)$ であったとすれば目の出た頻度

$$P(A = i) \quad = \quad \frac{n_i(N)}{N} \quad (1.9)$$

が確率 (ここでは**経験確率**と呼ぶ) を与え, 特に, 試行回数 $N \to \infty$ のとき

$$P(A = i) = \lim_{N \to \infty} \frac{n_i(N)}{N} = \frac{1}{6} \quad (1.10)$$

となり, ア・プリオリ確率に一致する.

1.3 同時確率

2 つのサイコロを同時に投げることを考える. 一つ目のサイコロの出る目を事象 A, 二つ目の出る目を事象 B とする. このとき, 既に第 1.1 節で見たように, この場合の標本空間は $\Omega = \{1, 2, \cdots, 2\}$ とそれ自身 Ω の直積空間 $\Omega \times \Omega = \Omega^2$ となるから, 以降では $P(A = 1, B = 1)$ などを簡単になど $P(1, 1)$ と書くことにし, $|\Omega^2| = 36$ 通りの目の出方が全て同じ程度に確からしいことを認めれば

$$P(1, 1) = P(1, 2) = \cdots = P(6, 6) = \frac{1}{36} \quad (1.11)$$

となる. この確率分布 $P(A = a, B = b)$ を事象 A と B の**同時確率**と呼び, 2 つのサイコロの間に何も相関がなく, 2 つの事象が独立であれば

$$P(A = a, B = b) = P(A = a)P(B = b) \quad (1.12)$$

が成り立つ. このとき, (1.11) 式の結果を上式 (1.12) の右辺を用いて計算することもできる. 実際, 既に見たように $P(A = 1) = \cdots P(A = 6) = 1/6, P(B = 1) = \cdots P(B = 6) = 1/6$ であるから, $P(A = 1, B = 1) = P(1, 1) = P(A = 1) \times P(B = 1) = 1/36$ 等が得られる.

1.4 積の公式と条件付き確率

事象 A, B が独立でない場合の同時確率 $P(A=a, B=b)$ は次の**積の公式**によって書き直すことができる.

$$P(A=a, B=b) = P(A=a|B=b)P(B=b) = P(B=b|A=a)P(A=a) \tag{1.13}$$

ここで, 右辺の 2 番目の等式は $P(A=a, B=b)$ に対し, $A=a$ と $B=b$ が交換可能であることから得られたことに注意されたい. $P(A=a|B=b)$ または $P(B=b|A=a)$ は**条件付き確率**と呼ばれ, それぞれ, 「二つ目のサイコロの目が b である条件下で一つ目のサイコロの目が a である確率」「二つ目のサイコロの目が a である条件下で一つ目のサイコロの目が b である確率」を意味する.

もし, $B=b$ という観測結果が事象 A に影響を与えない, あるいは, $A=a$ という観測結果が事象 B に影響を与えないならば, つまり, 事象 A, B が独立であれば

$$P(A=a|B=b) = P(A=a) \tag{1.14}$$

$$P(B=b|A=a) = P(B=b) \tag{1.15}$$

であるから, (1.13) 式は

$$P(A=a, B=b) = P(A=a)P(B=b) \tag{1.16}$$

となり, 事象 A, B が独立な場合の積の公式 (1.12) に戻る.

1.5 周辺化と周辺確率

(1.13) 式で $B=b \in \Omega = \{1,2,3,4,5,6\}$ について和をとると, その結果は $A=a$ のみによる確率:

$$\begin{aligned}
P(A=a) &= \sum_{b\in\Omega} P(A=a, B=b) \\
&= P(A=a, B=1) + \cdots + P(A=a, B=6) \\
&= \sum_{b\in\Omega} P(A=a|B=b)P(B=b) \\
&= P(A=a|B=1)P(B=1) + \cdots + P(A=a|B=6)P(B=6) \\
&= \sum_{b\in\Omega} P(B=b|A=a)P(A=a) \\
&= P(B=1|A=a)P(A=a) + \cdots + P(B=6|A=a)P(A=a) \qquad (1.17)
\end{aligned}$$

を**周辺確率**, 上記の操作を**周辺化**とそれぞれ呼ぶ. 標本空間 Ω の大きさ $|\Omega|$ が大きくなるにつれ, 上記の操作で必要な計算量は増えて行くことに注意.

1.6 ベイズの公式

(1.13) 式を $P(B=b|A=a)$ について解くと

$$P(B=b|A=a) = \frac{P(A=a|B=b)P(B=b)}{P(A=a)} = \frac{P(A=a|B=b)P(B=b)}{\sum_{b\in\Omega} P(A=a|B=b)P(B=b)} \tag{1.18}$$

が得られる．ここで, 2 番目の等式では分母に周辺化確率の定義:

$$P(A=a) \quad = \quad \sum_{b\in\Omega} P(A=a|B=b)P(B=b) \tag{1.19}$$

を用いたことに注意されたい．この (1.18) 式を**ベイズの公式**と呼ぶ.

このベイズの公式の意味と使い方に慣れるために, 次の例題を見ておこう[1].

例題: A さんは 1 年間に渡って藻岩山に雲がかかった翌日に札幌市内に雨 (または雪) が振った回数を数えた．その結果は雨 (または雪) が降った総日数 100 に対して前日に雲がかかっていた日数は 60 日あり, 前日に雲がかかっていないのにも関わらず雨が振ったのは 40 日であった．つまり,

$$P(\text{雨が降る} \mid \text{雲がかかる}) \quad = \quad \frac{3}{5} \tag{1.20}$$

$$P(\text{雨が降る} \mid \text{雲がかからない}) \quad = \quad \frac{2}{5} \tag{1.21}$$

であった．このとき, 札幌から遠く離れた東京に住む B さんは毎日の天気予報で「札幌に雨が降った」という情報を得ることができるが, 前日に藻岩山に雲がかかっていたかどうかという情報は手に入れることはできない．このとき, B さんが藻岩山に雲がかかっていたパーセンテージを割り出すにはどうしたらよいか.

B さんは A さんの実測データからの知見: (1.20) (1.21) 式を用いることで, $P(\text{雲がかかる} \mid \text{雨が降る})$ をベイズ公式 (1.18) を使って割り出すことを考えた．つまり

$$\begin{aligned} & P(\text{雲がかかる} \mid \text{雨が降る}) \\ = \quad & \frac{P(\text{雨が降る} \mid \text{雲がかかる})P(\text{雲がかかる})}{P(\text{雨が降る} \mid \text{雲がかかる})P(\text{雲がかかる}) + P(\text{雨が降る} \mid \text{雲がかからない})P(\text{雲がかからない})} \\ = \quad & \frac{\frac{3}{5} \times P(\text{雲がかかる})}{\frac{3}{5} \times P(\text{雲がかかる}) + \frac{2}{5} \times P(\text{雲がかからない})} \end{aligned} \tag{1.22}$$

を使って前日の藻岩山上空の雲の様子を推測する.

ここで, $P(\text{雲がかかる}), P(\text{雲がかからない})$ は恐らく, 藻岩山の高さ (標高 600 メートル前後), 札幌市内, 藻岩山周辺の地形などによって決まるが, B さんにはそれに関する知識が全くないので, まずは, $P(\text{雲がかかる}) = P(\text{雲がかからない}) = 1/2$ としてみた．すると, (1.22) 式から

$$P(\text{雲がかかる} \mid \text{雨が降る}) \quad = \quad \frac{3}{5} = P(\text{雨が降る} \mid \text{雲がかかる}) \tag{1.23}$$

となり, これは「A さんの測定したデータに忠実に」雲がかかった確率を割り出すことに相当する．つまり, 雲がかかった翌日は 60 パーセントの確率で雨がふるわけだから, 逆に雨が降ったならば 60 パーセントの確率で雲がかかっていたはずである, と予測する.

しかし, 実際には標高 600 メートルの藻岩山に雲がかかること自体がめったに無いことなのかもしれないし, 逆によくあることなのかもしれない．そこで, $P(\text{雲がかかる}) = a, P(\text{雲がかからない}) = 1-a$ とおいて, (1.22) 式を書き直すと

$$P(\text{雲がかかる} \mid \text{雨が降る}) \quad = \quad \frac{3a}{a+2} \tag{1.24}$$

が得られる．これを a の関数として図 1 にプロットする．この図からわかるのは

[1] これはこの「例題」のために適当に与えた数字であり, 実際の統計データでないことに注意.

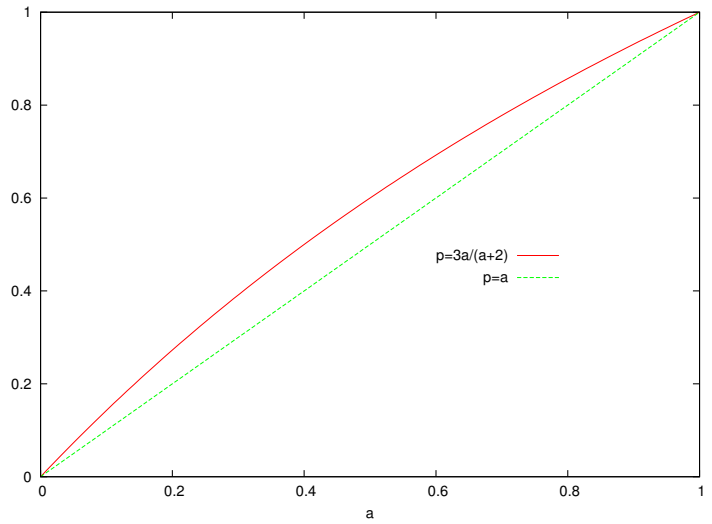


図 1: 事後確率 P(雲がかかる | 雨が降る) の事前確率 P(雲がかかる) $= a$ 依存性.

- $a = 1/2$ を除いて P(雲がかかる | 雨が降る) は P(雨が降る | 雲がかかる) と異なる.
- $a > 1/2$ で P(雲がかかる | 雨が降る) $>$ P(雨が降る | 雲がかかる) $= 0.6$, 逆に, $a < 1/2$ で P(雲がかかる | 雨が降る) $<$ P(雨が降る | 雲がかかる) $= 0.6$.
- $a = 0, 1$ を除いて P(雲がかかる) $<$ P(雲がかかる | 雨が降る) である.

などである. ここで, ベイズ公式 (1.18) における $P(A = a|B = b)$, あるいは, 上の例での条件付き確率 P(雨が降る | 雲がかかる) を**尤度**と呼び, これは実測データから得られる「証拠」を表すことになる. 一方, ベイズ公式 (1.18) における $P(B = b)$ または, 上の例での P(雲がかかる) は推定する際の事前知識を表し, **事前確率**と呼ばれる. 一方, ベイズ公式 (1.18) 左辺の $P(B = b|A = a)$, もしくは, 上の例で B さんが割り出した P(雲がかかる | 雨が降る) を**事後確率**と呼ぶ.

もし, A さんによる測定結果がなければ, B さんは「ヤマカン」で自分の事前知識に基づき雲がかかった確率を割り出さなければならない. これは P(雲がかかる) $= a$ である. しかし, A さんによる測定結果を用いることで, この P(雲がかかる) が尤度の分だけ修正されて P(雲がかかる | 雨が降る) $\propto$ P(雨が降る | 雲がかかる)P(雲がかかる) が得られることになる. この両者は図 1 より, 点 $a = 0, 1$ を除いて異なる確率を与えている (有限の幅で補正されている).

逆に, A さんの測定結果のみを重視し, 事前知識を何も与えない場合には, 既に述べたように, 尤度を所望の確率として雲がかかったパーセンテージを割り出すことになる. A さんの測定が何十年にも渡った精密なものであり, 十分に信頼できるのであれば, この方法が適切であるかもしれない. しかし, 測定/観測に誤差が含まれる場合, あるいは, また, 地形や海との近さや気温と雲の発生の頻度に関し, B さんがその筋の専門家であり, 適切な事前知識を持っているのであれば, 事前知識をある程度考慮した方法が良い場合もありえる.

この講義では, 符号や画像など, 標本空間が非常に大きい場合 (画素/ビット数 N に対し, $|\Omega| \sim 2^N$ 程度), しかもそれが雑音により乱された状況下で原信号や画素を推定する方法をこのベイズの公式を用いて構築する具体例を見て行くことになる.

2　ベイジアンネットと確率推論の基礎

前回は確率統計の簡単な基礎とベイズ公式について復習した. 今回はそれらの概念や計算方法を使って, 簡単な確率推論ができることを例に基づいて学んで行く.

2.1　簡単な例における確率推論

ここで考える事例は以下の通りである.

A さんは札幌に住み始めてから初めての冬を迎えることになったが, 札幌では気温が氷点下 5 度以下になることがしばしばあり, そのような夜には「水抜き」と呼ばれる, 就寝前に水道管の水を抜く作業が必要となることを知った. A さんの住むマンションには「自動水抜き装置」が備え付けられてはいるが, それは完全ではなく, しばしば誤作動を起こす. また, 2 階に住む A さんの階下の住民は水道管修理業を営んでおり, 氷点下 5 度以下の夜には水道管破裂などの修理のため, 深夜であっても, しばしば部屋の暖房をつけずに不在にすることが多い. その結果, マンション建物内の温度が予想以上に低下し, これが水道管の冷却を促進することで, 水道管破損につながる可能性もある. このような状況下で実際に水漏れ事故が起こった際, それは「自動水抜き装置の誤作動」によるものか, あるいは「階下の住民が不在」であったためのものかを合理的に判断せよ.

これは 4 つの事象からなるシステムであり, それぞれに名前を付けて

$$
\begin{aligned}
A_1 &= \{\text{ 気温が氷点下 5 度以下 }\}, \\
A_2 &= \{\text{ 自動水抜き装置が誤作動 }\}, \\
A_3 &= \{\text{ 階下の住民が不在 }\}, \\
A_4 &= \{\text{ 水漏れ事故 }\}
\end{aligned}
$$

としておこう. それぞれの事象の標本点は $a_1 = \{0, 1\}$ の 2 つであり, 「1」はその事象が実際に起こる (「真」) であり, 「0」はその逆 (「偽」) を表すものとする. 従って, 例えば, $a_1 = 1$ とは「気温が氷点下 5 度以下であった」ことを意味する.

さて, このような問題設定のとき, 確率的な状況判断を行う際に必要なのは条件付き確率: $P(A_2 = a_2|A_4 = a_4), P(A_3 = a_3|A_4 = a_4)$ であり, 特に次の確率が重要である.

$$p_1 \equiv P(A_2 = 1|A_4 = 1) \quad \text{(水漏れ事故が起こった条件下で装置が誤作動した)} \tag{2.1}$$

$$p_2 \equiv P(A_3 = 1|A_4 = 1) \quad \text{(水漏れ事故が起こった条件下で階下住民が不在であった)} \tag{2.2}$$

従って,

$$p_1 > p_2 \tag{2.3}$$

であれば, 「 水漏れ事故の原因は自動水抜き装置の誤作動であった」と結論つけるのが合理的であると言える. 後は具体的にこの確率を計算していくことになる.

2.2 同時確率の分解とそのグラフィカル表現

このシステムを特徴つけるのは同時確率: $P(A_1 = a_1, A_2 = a_2, A_3 = a_3, A_4 = a_4)$ であるが, これは前回学んだ「積の公式」によって次のように分解できる.

$$\begin{aligned} P(A_1 = a_1, A_2 = a_2, A_3 = a_3, A_4 = a_4) &= P(A_4 = a_4 | A_1 = a_1, A_2 = a_2, A_3 = a_3) \\ &\times P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1, A_2 = a_2) \\ &\times P(A_2 = a_2 | A_1 = a_1) P(A_1 = a_1) \end{aligned} \tag{2.4}$$

ここで, **上記分解は一意ではない**ことに注意されたい. 実際, 各事象間の「独立性」「従属性」などを考慮し, どのような分解が考える問題の状況を最も適切に記述しているのかを常に考える必要がある.

例えば, 「水漏れ事故が生じる」ということと気温の間に <u>直接的</u> な関係がないとすると

$$P(A_4 = a_4 | A_1 = a_1, A_2 = a_2, A_3 = a_3) = P(A_4 = a_4 | A_2 = a_2, A_3 = a_3) \tag{2.5}$$

と書き直すことができるし ($A_1 = a_1$ が外れる), 「水抜き装置が誤作動」と「階下の住民が不在」の間に直接的な関係がないとすれば

$$P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1, A_2 = a_2) = P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1) \tag{2.6}$$

となる ($A_2 = a_2$ が外れる). 従って, このもとで同時確率 (2.4) は

$$\begin{aligned} P(A_1 = a_1, A_2 = a_2, A_3 = a_3, A_4 = a_4) &= P(A_4 = a_4 | A_2 = a_2, A_3 = a_3) \\ &\times P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1) \\ &\times P(A_2 = a_2 | A_1 = a_1) P(A_1 = a_1) \end{aligned} \tag{2.7}$$

と書きかえられる.

ここで, 各事象を「点」とし, 上式右辺に現れる条件付き確率の因果関係に従って, 各点を矢印で結ぶことによってできる有向グラフは図 2(左) のようになる. ちなみに, $P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1, A_2 = a_2) = P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1)$ とせず, 「水抜き装置の誤動作」も「階下の住人の不在」を決める要因になるのであれば, この図の左側のような有向グラフとなる. このように, 独立な事象間のリンクは切れており, 矢印の方向がその因果関係 (今の場合「時間的順序」と考えても良い) を表している. その因果関係の強さが次節でみるように「条件付き確率」として与えられることになる.

2.3 条件付き確率表

(2.7) 式右辺に現れる条件付き確率はどれも統計データとして利用可能か, あるいは, 長期間に渡る測定から利用が可能である. これを表にしたものを確率表として下記に挙げる. 例えば, $P(A_2 = a_2 | A_1 = a_1)$ は表 1 で与えられる. この表は $P(A_2 = 1 | A_1 = 1) = 0.1$, つまり, 「気温が氷点下 5 度以下のとき, 水抜き装置が誤動作する確率は 0.1 である」と読む.

同様に, 確率 $P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1)$ の確率表を表 2 に与える. また, 条件付き確率 $P(A_4 = a_4 | A_2 = a_2, A_3 = a_3)$ の確率表を表 3 に与える.

あとは $P(A_1 = 1), P(A_1 = 0)$ を決める必要があるが, ここでは最低気温が多くの場合に就寝時間帯に達せられることに着目し, 過去 10 年間の札幌冬期期間 (11 月から 3 月) に何回, 氷点下 5 度

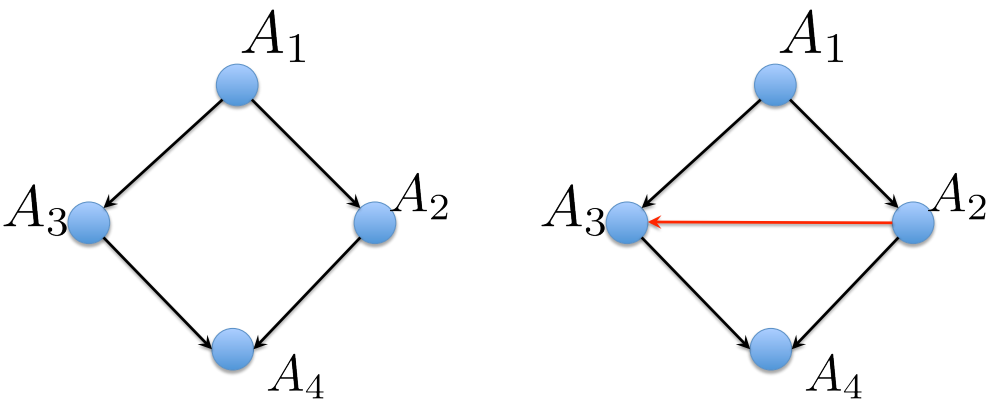


図 2: 同時確率 (2.7) のグラフィカル表現 (左). 右は $P(A_4 = a_4|A_2 = a_2, A_3 = a_3)P(A_3 = a_3|A_1 = a_1, A_2 = a_2)P(A_2 = a_2|A_1 = a_1)P(A_1 = a_1)$ と分解した場合の表現.

$A_2 \backslash A_1$	$a_1 = 1$	$a_1 = 0$
$a_2 = 1$	0.1	0.1
$a_2 = 0$	0.9	0.9

表 1: 条件付き確率 $P(A_2 = a_2|A_1 = a_1)$ の確率表.

を下回ったのかの「頻度」を利用する. その結果, $P(A_1 = 1) = P(A_1 = 0) = 0.5$ として以下の議論を進める[2].

2.4 周辺確率の計算

積の公式から, 求めたい確率は

$$P(A_2 = 1|A_4 = 1) = \frac{P(A_2 = 1, A_4 = 1)}{P(A_4 = 1)} \tag{2.8}$$

$$P(A_3 = 1|A_4 = 1) = \frac{P(A_3 = 1, A_4 = 1)}{P(A_4 = 1)} \tag{2.9}$$

[2] もちろん, これらはこの授業での問題を扱いやすくし, 説明しやすくするために勝手に選んだ数値であり, 正しい統計データではないことに注意. 当然, 「A さん」や「階下の水道管修理業者」なども架空の人物である.

$A_3 \backslash A_1$	$a_1 = 1$	$a_1 = 0$
$a_2 = 1$	0.6	0.5
$a_2 = 0$	0.4	0.5

表 2: 条件付き確率 $P(A_3 = a_3 | A_1 = a_1)$ の確率表.

$A_4 \backslash \{A_2, A_3\}$	$\{a_2 = 1, a_3 = 1\}$	$\{a_2 = 1, a_3 = 0\}$	$\{a_2 = 0, a_3 = 1\}$	$\{a_2 = 0, a_3 = 0\}$
$a_4 = 1$	0.95	0.8	0.7	0
$a_4 = 0$	0.05	0.2	0.3	1

表 3: 条件付き確率 $P(A_4 = a_4 | A_2 = a_2, A_3 = a_3)$ の確率表.

となる. 前回学んだ「周辺化」「周辺確率」の定義から, (2.8) 右辺の分子分母は

$$\begin{aligned} P(A_2 = 1, A_4 = 1) &= \sum_{a_1=0,1} \sum_{a_3=0,1} P(A_1 = a_1, A_2 = 1, A_3 = a_3, A_4 = 1) \\ &= \sum_{a_1=0,1} \sum_{a_3=0,1} P(A_4 = 1 | A_2 = 1, A_3 = a_3) P(A_2 = 1 | A_1 = a_1) P(A_1 = a_1) \end{aligned} \tag{2.10}$$

$$P(A_4 = 1) = \sum_{a_1=0,1} \sum_{a_2=0,1} \sum_{a_3=0,1} P(A_1 = a_1, A_2 = a_2, A_3 = a_3, A_4 = 1) \tag{2.11}$$

$$= \sum_{a_1=0,1} \sum_{a_2=0,1} \sum_{a_3=0,1} P(A_4 = 1 | A_2 = a_2, A_3 = a_3) P(A_2 = a_2 | A_1 = a_1) P(A_1 = a_1) \tag{2.12}$$

と書けるから, 確率表から右辺の各確率を拾い上げて該当箇所に代入して行くと

$$\begin{aligned} P(A_2 = 1, A_4 = 1) &= P(A_4 = 1 | A_2 = 1, A_3 = 0) P(A_2 = 1 | A_1 = 0) P(A_1 = 0) \\ &+ P(A_4 = 1 | A_2 = 1, A_3 = 1) P(A_2 = 1 | A_1 = 0) P(A_1 = 0) \\ &+ P(A_4 = 1 | A_2 = 1, A_3 = 0) P(A_2 = 1 | A_1 = 1) P(A_1 = 1) \\ &+ P(A_4 = 1 | A_2 = 1, A_3 = 1) P(A_2 = 1 | A_1 = 1) P(A_1 = 1) \\ &= 0.8 \times 0.1 \times 0.5 + 0.95 \times 0.1 \times 0.5 + 0.8 \times 0.1 \times 0.5 + 0.95 \times 0.1 \times 0.5 \\ &= 0.175 \end{aligned} \tag{2.13}$$

$$
\begin{aligned}
P(A_4=1) &= P(A_4=1|A_2=0,A_3=0)P(A_2=0|A_1=0)P(A_1=0) \\
&+ P(A_4=1|A_2=0,A_3=1)P(A_2=0|A_1=0)P(A_1=0) \\
&+ P(A_4=1|A_2=1,A_3=0)P(A_2=1|A_1=0)P(A_1=0) \\
&+ P(A_4=1|A_2=0,A_3=0)P(A_2=0|A_1=1)P(A_1=1) \\
&+ P(A_4=1|A_2=0,A_3=1)P(A_2=0|A_1=1)P(A_1=1) \\
&+ P(A_4=1|A_2=1,A_3=1)P(A_2=1|A_1=0)P(A_1=0) \\
&+ P(A_4=1|A_2=1,A_3=0)P(A_2=1|A_1=1)P(A_1=1) \\
&+ P(A_4=1|A_2=1,A_3=1)P(A_2=1|A_1=1)P(A_1=1) \\
&= 0\times 0.9\times 0.5 + 0.7\times 0.9\times 0.5 + 0.8\times 0.1\times 0.5 + 0\times 0.9\times 0.5 \\
&+ 0.7\times 0.9\times 0.5 + 0.95\times 0.1\times 0.5 + 0.8\times 0.1\times 0.5 + 0.95\times 0.1\times 0.5 \\
&= 0.238
\end{aligned}
\tag{2.14}
$$

となる. 従って, (2.8) 式から $P(A_2=1|A_4=1)$ は

$$
P(A_2=1|A_4=1) = \frac{P(A_2=1,A_4=1)}{P(A_4=1)} = \frac{0.175}{0.238} \simeq 0.735 \tag{2.15}
$$

同様に, (2.9) 式分子である $P(A_3=1,A_4=1)$ を周辺化を実行することで計算すると

$$
\begin{aligned}
P(A_3=1,A_4=1) &= \sum_{a_1=0,1}\sum_{a_2=0,1} P(A_1=a_1,A_2=a_2,A_3=1,A_4=1) \\
&= \sum_{a_1=0,1}\sum_{a_2=0,1} P(A_4=1|A_2=a_2,A_3=1)P(A_2=a_2|A_1=a_1)P(A_1=a_1) \\
&= P(A_4=1|A_2=0,A_3=1)P(A_2=0|A_1=0)P(A_1=0) \\
&+ P(A_4=1|A_2=0,A_3=1)P(A_2=0|A_1=1)P(A_1=1) \\
&+ P(A_4=1|A_2=1,A_3=1)P(A_2=1|A_1=0)P(A_1=0) \\
&+ P(A_4=1|A_2=1,A_3=1)P(A_2=1|A_1=1)P(A_1=1) \\
&= 0.7\times 0.9\times 0.5 + 0.7\times 0.9\times 0.5 + 0.95\times 0.1\times 0.5 + 0.95\times 0.1\times 0.5 \\
&= 0.178
\end{aligned}
\tag{2.16}
$$

であるから, (2.9)(2.14)(2.16) 式から

$$
P(A_3=1|A_4=1) = \frac{P(A_3=1,A_4=1)}{P(A_4=1)} = \frac{0.178}{0.238} \simeq 0.748 \tag{2.17}
$$

が得られる.

2.5 得られた「結果」に対する「原因」の推論

計算結果として $p_1 < p_2$ が得られたのであるから, この場合, 水漏れが起こったのは「階下の住民が留守であったため」と結論つけるのが合理的な判断である.

ここでみた例のように, 多少複雑な問題であっても, 全体がいくつかの事象間の関係性で記述できると考え, それを事象間の因果関係の有向グラフで表現し, その因果関係とその強さを実データ, もしくは長期に渡る観測から得られる条件付き確率表として与えることで, 目前につきつけられた「結果」から考えうる (時間を遡っての)「原因」について推測/推論することができる. もちろん, 多くの複合的事象が複雑なグラフ構造のもとで絡み合っているような場合, 推論に必要な (条件付き) 確率を求める際の周辺化手続きがひどく厄介になるが, そのような計算コストの低減法としては様々な工夫やアルゴリズムが提案されている.

課題 1：身近な事例に対し, ここで取り上げた例を参考にして, 事象間のグラフィカル表現を考え, 実際に確率推論を行い, その結果についてまとめよ. (とりあげる例はどのようなものであってもよい).

3　確率分布

前回は確率統計の簡単な基礎とベイズ公式や周辺確率の計算方法を使って, 簡単な確率推論ができることを例に基づいて学んだ. これまで考えた例では全て「イエス」「ノー」, あるいは「サイコロの目」など, その事象が確率変数として $X = 0, 1$, $X = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ など「離散値」をとるものばかりであったが, 現実には「ロボットが前方に 0.25 メートル進む確率」「円/ドル為替レートが過去 1 年間の間に 87 円から 88 円の値をとる確率」のように連続的な確率変数扱う場合も多い. この場合, 事象 X が実数値 x をとる確率を

$$P(X = x) \quad = \quad p(x) \tag{3.1}$$

と書き, これを確率変数 x の**確率分布 (確率密度関数)** と呼ぶ. この確率分布は第 1 回にみた「確率の公理」をみたす. 特に, 確率の規格化に関しては

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx \quad = \quad 1 \tag{3.2}$$

となる. また, この確率分布に対して, 平均 m と分散 σ^2 は

$$m \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} xp(x)dx \tag{3.3}$$

$$\sigma^2 \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} (x-m)^2 p(x)dx \tag{3.4}$$

で定義される.

3.1　ガウス分布

そのような確率分布のなかで最も頻繁に使われるものとして, ガウス分布が知られており, 一変数の場合のガウス分布は平均を m, 分散を σ^2 とすると

$$p(x) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right] \tag{3.5}$$

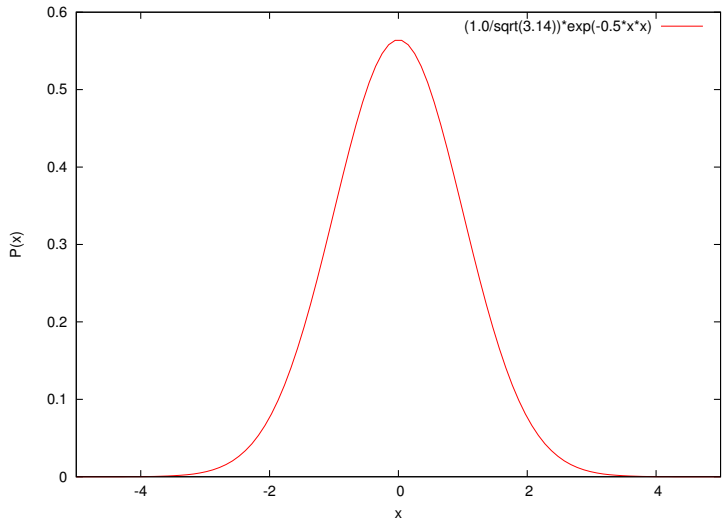


図 3: ガウス分布. $m = 0$, $\sigma = 1$ の場合.

で与えられる (図 3 参照). (3.5) 式の右辺の係数 $1/\sqrt{2\pi}\sigma$ は規格化の条件 (3.1) をみたすためのものであり, これを示すためには次の積分の公式が役に立つ.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-Ax^2} dx \quad = \quad \sqrt{\frac{\pi}{A}} \tag{3.6}$$

また, (3.6) 式を用いると次の公式も示すことができる (これはすぐ後に使う).

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}A} \mathrm{e}^{-\frac{(x-By)^2}{2A^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}C} \mathrm{e}^{-\frac{(y-D)^2}{2C^2}} dy \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{A^2+B^2C^2}} \mathrm{e}^{-\frac{(x-BD)^2}{2(A^2+B^2C^2)}} \tag{3.7}$$

課題 2: (3.6) 式を用いて (3.7) 式を示せ.

3.2 連続変数の確率推論

ここでは連続変数に関する確率推論, 特にガウス分布の性質を使って巧くかつ簡便な推論形式ができる例として, 一次元時系列データに対するカルマンフィルタを用いた確率推論について詳しくみておく.

3.3 時系列の推定

そのために, まずは次のような時系列:

$$x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n, \cdots \tag{3.8}$$

を考える. ここで, x_t: $t = 0, \cdots$ としては一次元上を動くロボットの位置でもよいし, 金融商品の価格でもよい. ここでは, 簡単にこの時系列が次の漸化式に従って生成されるものとする.

$$x_t \quad = \quad a_t x_{t-1} + b_t u_t + \epsilon_t \tag{3.9}$$

ここに, a_t, b_t は時間に依存する変数であり, u_t は外部からの時変入力であり, 例えば, ロボットなど対象として考えるときには時刻 t での制御入力であると考えれば良い. ϵ_t はノイズである.

さて, このような状態 x_t: $t = 0, \cdots$ は観測者によって測定されるが, その測定においてもノイズなどの影響により, x_t そのものが測定されるわけではなく, 次のような観測系列:

$$z_0, z_1, z_2, \cdots, z_n, \cdots \tag{3.10}$$

が測定されるとしよう. ここでは, このような「観測過程」もモデル化できてシステムの状態 x_t と測定値 z_t との間の関係が

$$z_t \quad = \quad c_t x_t + \delta_t \tag{3.11}$$

で与えられるものとする. δ_t はノイズであり, c_t は時刻に依存する変数である. そのような状態 x_t, 観測値 z_t の時間変化の例を図 4 に載せる. ここでの我々の問題は z_t のみが与えられたとき, x_t を推定することである.

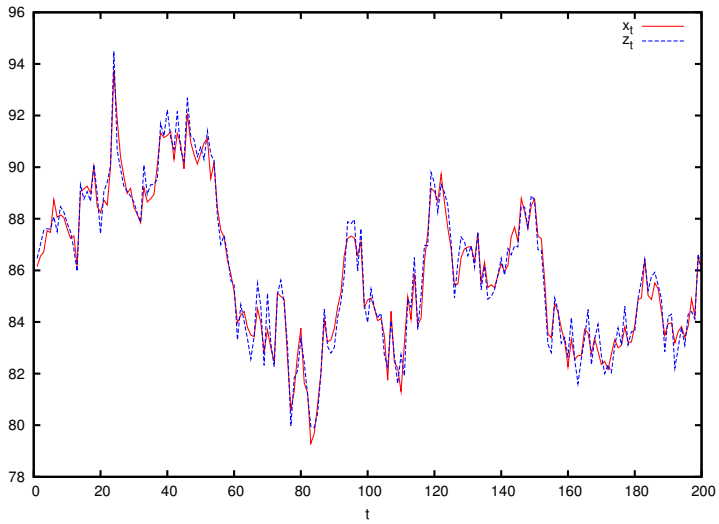


図 4: (3.9)(3.11) 式に従う, 状態変数 x_t と測定値 z_t の時間変化. $a_t = c_t = 1$, $b_t = 0$, ϵ_t, δ_t は各時刻で独立なガウス分布から生成した加法的ノイズである. 観測可能なのは時系列 z_t. この系列から状態系列 x_t を推定するのがここでの問題.

このモデルによって記述される問題では, 状態変数 x_t そのものは利用可能ではなく, ある種の「隠れ変数」になっていることに注意されたい. 従って, このような確率モデルを一般的に**隠れマルコフモデル**と呼ぶ. この確率モデルを前回学んだ確率推論のグラフィカル表現で描いてみると図 5 のようになる.

3.4 信念と推論

我々のここでの目標は状態 x_t の推定であるから, 次の条件付き確率が重要である.

$$b(x_t) \quad \equiv \quad p(x_t | z_t) \tag{3.12}$$

これは, 時刻 t での観測データ z_t が与えられた条件下で, システムの状態が x_t である確率を与える. しかし, 実際には時間の順序から考えて, 時刻 $t-1$ までの観測データが与えられたときにシス

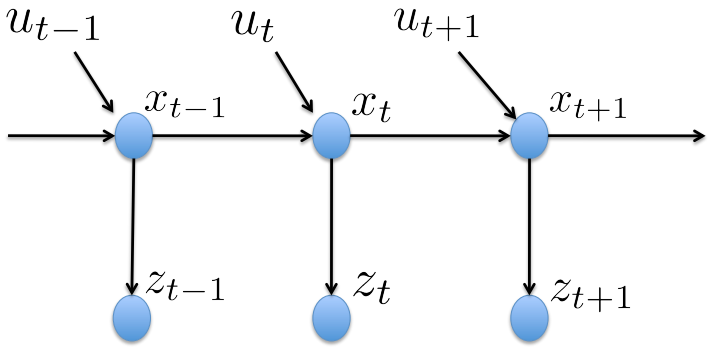


図 5: ここで考えるシステムのグラフィカル表現. 状態系列 $x_0, x_1, \cdots, x_n, \cdots$, 観測系列 $z_0, z_1, \cdots, z_n, \cdots$, そして制御入力 $u_0, u_1, \cdots, u_n, \cdots$. 制御入力は観測可能でも不可能でもよいが, 不可能な場合には状態系列に含めて考える.

テムの状態に言及する方が自然であり, ここではこれを

$$\bar{b}(x_t) \quad \equiv \quad p(x_t|z_{t-1}) \tag{3.13}$$

と書くことにする. 条件付き確率 (3.12)(3.13) はともに**信念**と呼ばれるが, ここでは両者を区別し, 条件付き確率 (3.12) を **(事後) 信念**, (3.13) を**推論**と呼ぶことにする.

x_t は確率変数であるから, その分布が特定できればその平均値や分散などの所望の統計量を計算することができる. その意味で, (3.13) を用いることで過去の観測 z_{t-1} から未来 x_t を推論することになるが, 当然, 時刻 t での観測値 z_t が得られた段階で, その推論結果は修正されるべきである. よって, 推論 (3.13) の結果を踏まえて z_t が計測後の事後信念 (3.12) によってそれが修正され, その修正結果を踏まえて次の時刻 $t+1$ での推論が求められ, さらにその結果は計測結果 z_{t+1} に基づく事後信念によって修正され $\cdots$ を繰り返すことで, 時系列 $x_0, x_1, \cdots, x_n, \cdots$ が逐次的に推定/修正されていくことが期待できる.

さて, そのような理屈はわかったけれども, それを実行する際には問題が生じる. 各時刻で分布 (3.12)(3.13) 式を求めるためには, 何回かの試行によりサンプルを蓄積し, そこからヒストグラムを計算することで「経験分布」を導出していかなければならない. これは極めて厄介である. しかし, (3.12)(3.13) 式がともに平均値と分散だけで特定できるガウス分布であるという仮定を入れることで, その平均/分散に関する簡単な漸化式が導出され, これを用いて推論形式を陽に構築することができる. これは**カルマンフィルタ**と呼ばれる確率推論法である. 次節ではその導出を詳しく見ていく.

3.5 カルマンフィルタ

以下では細かな議論や式変形が続くが, ここでのゴールは**それぞれがガウス分布に従う** $b(x_t)$, $\bar{b}(x_t)$ **の時刻** $t-1$ **と** t **における平均値と分散に関する関係式 (漸化式) をつじつまが合うように求める**ことであり, これを念頭に以下を読むと良い.

まずは前回までに学んだ積の公式と周辺化の手続きを思い出し, 今は連続変数を扱う確率分布を例としていることを考慮すると, 時刻 t での推論 $\bar{b}(x_t)$ は時刻 $t-1$ における事後信念 $b(x_{t-1})$ から次のように求めることができる.

$$\bar{b}(x_t) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} K(x_t|x_{t-1}) b(x_{t-1}) dx_{t-1} \tag{3.14}$$

ここで, $K(x_t|x_{t-1})$ は状態 x_{t-1} から x_t への遷移確率であり, (3.9) 式から, ϵ_t が各時刻で独立に平均ゼロ, 分散 r_t^2 のガウス分布に従うとすれば, この状態遷移確率は

$$K(x_t|x_{t-1}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}r_t}\exp\left[-\frac{\epsilon_t^2}{2r_t^2}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}r_t}\exp\left[-\frac{(x_t - a_t x_{t-1} - b_t u_t)^2}{2r_t^2}\right] \tag{3.15}$$

と書ける.

一方, 時刻 $t-1$ での事後信念 $b(x_{t-1})$ は平均が μ_{t-1}, 分散 σ_{t-1}^2 のガウス分布に従うと仮定すると,

$$b(x_{t-1}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-1}}\exp\left[-\frac{(x_{t-1} - \mu_{t-1})^2}{2\sigma_{t-1}^2}\right] \tag{3.16}$$

で与えられる. (3.15)(3.16) 式を (3.14) 式に代入し, **課題 2** である公式 (3.7) を用いて x_{t-1} についての積分を計算すると ((3.7) 式との対応関係は $x \to x_t - b_t u_t, B \to a_t, A \to r_t, D \to \mu_{t-1}, C \to \sigma_{t-1}$)

$$\begin{aligned}\overline{b}(x_t) &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}r_t}\exp\left[-\frac{(x_t - a_t x_{t-1} - b_t u_t)^2}{2r_t^2}\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{t-1}}\exp\left[-\frac{(x_{t-1} - \mu_{t-1})^2}{2\sigma_{t-1}^2}\right]dx_{t-1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{r_t^2 + a_t^2\sigma_{t-1}^2}}\exp\left[-\frac{(x_t - a_t\mu_{t-1} - b_t u_t)^2}{2(r_t^2 + a_t^2\sigma_{t-1}^2)}\right] \end{aligned}\tag{3.17}$$

が得られる. 従って, 推論 $\overline{b}(x_t)$ もまたガウス分布に従い, その平均を $\overline{\mu}_t$, 分散を $\overline{\sigma}_t^2$ とおくと

$$\overline{b}(x_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\overline{\sigma}_t}\exp\left[-\frac{(x_t - \overline{\mu}_t)^2}{2\overline{\sigma}_t^2}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{r_t^2 + a_t^2\sigma_{t-1}^2}}\exp\left[-\frac{(x_t - a_t\mu_{t-1} - b_t u_t)^2}{2(r_t^2 + a_t^2\sigma_{t-1}^2)}\right] \tag{3.18}$$

が成り立つべきだから, この両辺を比較することで

$$\overline{\mu}_t = a_t\mu_{t-1} + b_t u_t \tag{3.19}$$

$$\overline{\sigma}_t^2 = a_t^2\sigma_{t-1}^2 + r_t^2 \tag{3.20}$$

が成り立つ.

一方, 事後信念 $b(x_t) = p(x_t|z_t)$ はベイズの公式から

$$b(x_t) = p(x_t|z_t) = \frac{p(z_t|x_t)p(x_t)}{\int_{-\infty}^{\infty}dx_t p(z_t|x_t)p(x_t)} = \frac{p(z_t|x_t)\overline{b}(x_t)}{\int_{-\infty}^{\infty}dx_t p(z_t|x_t)\overline{b}(x_t)} \propto p(z_t|x_t)\overline{b}(x_t) \tag{3.21}$$

と書ける[3]. 従って, (3.11) 式で δ_t が各時刻で独立に平均ゼロ, 分散 q_t のガウス分布に従うとすると

$$p(z_t|x_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}q_t}\exp\left[-\frac{\delta_t^2}{2q_t^2}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}q_t}\exp\left[-\frac{(z_t - c_t x_t)^2}{2q_t^2}\right] \tag{3.22}$$

であり, 推論 $\overline{b}(x_t)$ は先ほど平均 $\overline{\mu}_t$, 分散 $\overline{\sigma}_t^2$ のガウス分布:

$$\overline{b}(x_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\overline{\sigma}_t}\exp\left[-\frac{(x_t - \overline{\mu}_t)^2}{2\overline{\sigma}_t^2}\right] \tag{3.23}$$

に従うとしたので, これらを (3.21) 式に代入すると

$$b(x_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}q_t}\exp\left[-\frac{(z_t - c_t x_t)^2}{2q_t^2}\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}\overline{\sigma}_t}\exp\left[-\frac{(x_t - \overline{\mu}_t)^2}{2\overline{\sigma}_t^2}\right] \equiv \exp[\mathcal{B}(x_t)] \tag{3.24}$$

[3] (3.14)(3.21) 式を用いた推論形式を一般に**ベイズフィルタ**と呼ぶ.

ここに

$$\mathcal{B}(x_t) \equiv -\frac{(z_t - c_t x_t)^2}{2q_t^2} - \frac{(x_t - \overline{\mu}_t)^2}{2\overline{\sigma}_t^2} - \log(\sqrt{2\pi} q_t) - \log(\sqrt{2\pi}\overline{\sigma}_t) \tag{3.25}$$

で定義したことに注意されたい.

さて, $b(x_t)$ は 2 つのガウス分布の積で与えられているので, それ自体もガウス分布である. ガウス分布の定義 (3.5) から, この分布は平均と分散の 2 つのパラメータで特徴つけられるので, (3.24) 式を平均と分散のわかる形まで変形して行けばよい. しかし, (3.5) 式からわかるように, ガウス分布 $b(x_t)$ の分散は $\{-\partial^2\mathcal{B}(x_t)/\partial x_t^2\}^{-1}$ で与えられるから

$$\sigma_t^2 = \frac{1}{2}\left\{-\frac{\partial^2\mathcal{B}(x_t)}{\partial x_t^2}\right\}^{-1} = \frac{q_t^2\overline{\sigma}_t^2}{q_t^2 + c_t^2\overline{\sigma}_t^2} = \overline{\sigma}_t^2 - \frac{c_t^2\overline{\sigma}_t^4}{q_t^2 + c_t^2\overline{\sigma}_t^2} \tag{3.26}$$

となる.

一方の平均は

$$\frac{\partial\mathcal{B}(x_t)}{\partial x_t} = 0 \tag{3.27}$$

を x_t について解いたものとして与えられるので, 実際にを計算してみると

$$\left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t x_t) = \frac{x_t - \overline{\mu}_t}{\overline{\sigma}_t^2} \tag{3.28}$$

が得られる. 上式左辺はやや技巧的ではあるが

$$\left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t x_t) = \left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t x_t + c_t\overline{\mu}_t - c_t\overline{\mu}_t) = \left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t\overline{\mu}_t) - \left(\frac{c_t^2}{q_t^2}\right)(x_t - \overline{\mu}_t)$$

と書きかえられるから, (3.28) 式は

$$(\sigma_t^2)^{-1}(x_t - \overline{\mu}_t) = \left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t x_t) \tag{3.29}$$

と書き直すことができる. (3.29) の解 x_t を μ_t とおくと

$$\mu_t = \overline{\mu}_t + \sigma_t^2\left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t\overline{\mu}_t) = \overline{\mu}_t + K(z_t - c_t\overline{\mu}_t) \tag{3.30}$$

が得られる. ここで

$$K \equiv \sigma_t^2\left(\frac{c_t}{q_t^2}\right) = \frac{c_t\overline{\sigma}_t^2}{q_t^2 + c_t^2\overline{\sigma}_t^2} \tag{3.31}$$

は**カルマンゲイン**と呼ばれる量である. よって, (3.30) 式の形から明らかに, 平均値 μ_t は観測値 z_t が得られるごとにカルマンゲイン K と $(z_t - c_t\overline{\mu}_t)$ (式 (3.11) を参照されたい) の積の分だけ予測値 $\overline{\mu}_t$ から修正される.

従って, (3.26) 式から, 推論の分散はカルマンゲイン K を用いて

$$\sigma_t^2 = \overline{\sigma}_t^2\left(1 - Kc_t\overline{\sigma}_t^2\right) \tag{3.32}$$

となる. よって, (3.32) 式の形から明らかに, 分散値 σ_t は観測値 z_t が得られるごとに $-Kc_t\overline{\sigma}_t^2$ の分だけ予測値 $\overline{\sigma}_t^2$ から修正される. これでここでの目標が達せられた.

初期の推論を平均 μ_0, 分散 σ_0^2 のガウス分布:

$$b(x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0}\exp\left[-\frac{(x_0-\mu_0)^2}{2\sigma_0^2}\right] \tag{3.33}$$

とすると, カルマンフィルタは初期値を μ_0, σ_0^2 とする次の漸化式で与えられる.

$$\overline{\mu}_t = a_t\mu_{t-1} + b_t u_t \tag{3.34}$$

$$\overline{\sigma}_t^2 = a_t^2\sigma_{t-1}^2 + r_t^2 \tag{3.35}$$

$$\mu_t = \overline{\mu}_t + \sigma_t^2\left(\frac{c_t}{q_t^2}\right)(z_t - c_t\overline{\mu}_t) = \overline{\mu}_t + K(z_t - c_t\overline{\mu}_t) \tag{3.36}$$

$$\sigma_t^2 = \overline{\sigma}_t^2\left(1 - Kc_t\overline{\sigma}_t^2\right) \tag{3.37}$$

$$K = \frac{c_t\overline{\sigma}_t^2}{q_t^2 + c_t^2\overline{\sigma}_t^2} \tag{3.38}$$

カルマンフィルタ (3.34)-(3.38) を動作させるためには, 状態の生成過程, および, その観測過程を特徴つけるパラメータ a_t, b_t, c_t, q_t, r_t を前もって決めなければならないが, 通常はこれらのパラメータを決めるためのデータを別途用意しておき, それらデータを用いてオフラインで予めこれらパラメータを決めた上でカルマンフィルタを動作させる. カルマンフィルタへの入力は初期値 μ_0, σ_0^2, 各時刻での測定データ $z_0, z_1, \cdots, z_n, \cdots$ であり, 出力は $\{\mu_t, \sigma_t^2\}$, および, $\{\overline{\mu}_t, \overline{\sigma}_t^2\}$ である.

カルマンフィルタの動作を具体的に調べるために, 次の例を課題とする.

課題 3:
「真の時系列」と「真の観測データ」を

$$x_t = x_{t-1} + \epsilon_t$$
$$z_t = x_t + \delta_t$$

とする. ϵ_t は各時刻で独立な平均がゼロ, 分散 1 の正規分布. δ_t は各時刻で独立な平均がゼロ, 分散 0.5 の正規分布に選ぶ. このとき, カルマンフィルタ (3.34)-(3.38) を用いて, 各時刻で x_t を推定せよ. 具体的には横軸を t, 縦軸を μ_t とし, これを真のデータ x_t と同じグラフにプロットし, 比較せよ. このとき, σ_t^2 を用いて各点のエラーバーをつけてプロットすること. 予測値 $\{\overline{\mu}_t, \overline{\sigma}_t^2\}$ に対しても同様の手続きでプロットを作成する. a_t, b_t, c_t, q_t, r_t などは「真の値」を用いてもよいが, これからのズレを考慮して選んだ結果を考察してもよい. カルマンフィルタの初期値 μ_0, σ_0^2 は各自が適当に選べ.

以上で確率的情報処理, 情報統計力学, 経済物理を学んで行くためのウォーミングアップをひとまず終える.

4　統計力学 — 最適化問題からの入門 —

ここからは情報の問題として馴染み深い最適化問題の側面から統計力学について見ていく.

4.1　ノイズの効果を利用したアルゴリズム

エネルギー関数が複数の谷を持つ場合には最急降下法などで見つけ出したその解が最小であるという保障はない. この意味で, こうした局所的最小を回避するようなメカニズムをアルゴリズムの中に組み込む必要がある. そこで, 非常に簡単なシステムを考えることにより, この点を詳しく見て行こう.

4.1.1　エネルギー 4 準位を持つ 2 体系の最適化

いきなり, 多体系のエネルギー関数を扱うのではなく, まずは簡単な問題を選びたい. 次のような 2 体系のエネルギー関数の最小値を探す問題を考える.

$$E(\boldsymbol{s}) \quad = \quad -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2 \tag{4.1}$$

ここで, $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2)$ であり, それぞれの成分は ± 1 をとるものとする. この問題は簡単である. なぜならば, 全ての状態 $\boldsymbol{s}$ の組み合わせは

$$(s_1, s_2) = (1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)$$

の計 4 つしかない. 従って, それぞれに対応するエネルギーの値が簡単に求まって

$$\varepsilon_1 \quad \equiv \quad E(1,1) = -J - h_1 - h_2 \tag{4.2}$$

$$\varepsilon_2 \quad \equiv \quad E(1,-1) = J - h_1 + h_2 \tag{4.3}$$

$$\varepsilon_3 \quad \equiv \quad E(-1,1) = J + h_1 - h_2 \tag{4.4}$$

$$\varepsilon_4 \quad \equiv \quad E(-1,-1) = -J + h_1 + h_2 \tag{4.5}$$

がそれらの値である. 従って, $J > h_1 > h_2$, 例えば, $J = 1, h_1 = 0.5, h_2 = 0.1$ のように J_1, h_1, h_2 を決めれば, $\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_4$ はその大きさで順序付けられて

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_4 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3 \tag{4.6}$$

がそのエネルギー準位となる. これを模式的に描くと図 6 のようになる. さて, ここでノイズを利用したアルゴリズムを次のように構成する.

ノイズを利用したアルゴリズム：

(i) 各時刻で任意に s_1, s_2 のどちらか 1 つを選び, その符号を変える. 符号を変える前後の状態を $\boldsymbol{s}, \boldsymbol{s}'$ と書こう.

(ii) (i) の前後でのエネルギー差：$\Delta E = E(\boldsymbol{s}') - E(\boldsymbol{s})$ を計算し, $\Delta E < 0$, つまり, (i) の操作でエネルギーが下がるのであれば, 新しい状態として $\boldsymbol{s}'$ を採用し, $\Delta E > 0$, **つまり, エネルギーが増加してしまった場合でも** $\mathrm{e}^{-\Delta E/T}$ **の確率で新しい状態** $\boldsymbol{s}'$ **を採用する**.

(iii) 上記 (i)(ii) を繰り返す.

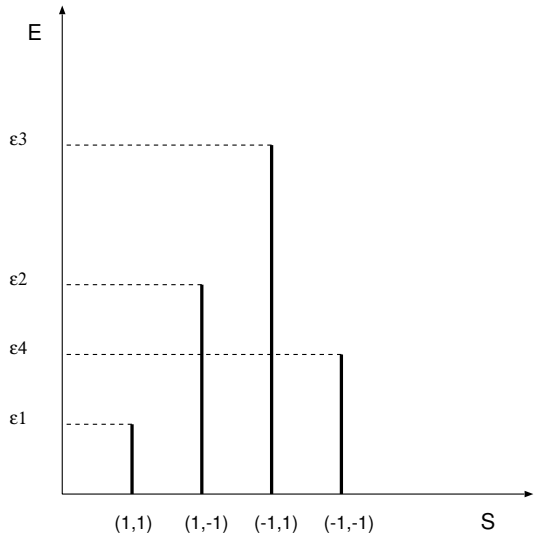


図 6: エネルギー 4 準位.

このアルゴリズムは今後 [**ノイズを利用したアルゴリズム**] として本稿に現れ, 今回の内容の中心となるのでよく覚えておいてほしい. 上記の**太字**で書いた部分がノイズによる効果であり, そのノイズの大きさは T でコントロールされる. この効果により, エネルギーは単調には減少せず, ときどき増加することになる. このアルゴリズムを実際に計算機上で実行しょう. その際, 各時刻で状態が $(s_1, s_2) = (1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)$ の 4 つのそれぞれをとる確率 : P_1, P_2, P_3, P_4 を各ステップで評価するために, 同じエネルギー関数 (4.1) 式を持つ複数の系 (**アンサンブル**) を用意し, (**システムの中でその状態をとる数**)/(**アンサンブルのシステム総数**) をもって, 各確率を評価することにしょう. この評価では例えば P_1 は

$$P_1 \quad = \quad \frac{\textbf{状態 } (1,1) \textbf{ をとるシステムの数}}{\textbf{アンサンブルを構成するシステムの総数}} \tag{4.7}$$

として見積もられることになる. 大して長いプログラムではないので, 下記に上記アルゴリズムのプログラム例を載せておく. これは過去に開講した**混沌系工学特論**のホームページ :

http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~ j_inoue/konton2010/konton2010.html

からダウンロードできるので, 各自が必要とあらばこれを適時書き換えて実行してみると良いと思う.

```
/*****************************************************/
/*          Algorithm for 2-spin problem           */
/*                        J.Inoue                  */
/*****************************************************/
/*****************************************************/
#include<math.h>
#include<stdio.h>
```

```
#include<stdlib.h>
/**************************************************/
/*--------Definitions of Parameters--------------*/
/**************************************************/
#define N 10000    /* アンサンブルのシステム総数 */
#define p 0.7    /* s1 の初期状態を選ぶための確率 */
#define pp 0.7   /* s2 の初期状態を選ぶための確率 */
#define tmax 500  /* アルゴリズムをまわす回数の上限 */
#define T 1.01   /* ノイズレベル．アニーリングする場合にはこれをコメントアウト */
#define Z (exp((J+h1+h2)/T)+exp((-J+h1-h2)/T)+exp((-J-h1+h2)/T)+exp((J-h1-h2)/T))
#define uu0 (exp((J+h1+h2)/T)/Z) /* e1 をとる定常状態確率 */
#define ud0 (exp((-J+h1-h2)/T)/Z) /* e2 をとる定常状態確率 */
#define du0 (exp((-J+h2-h1)/T)/Z) /* e3 をとる定常状態確率 */
#define dd0 (exp((J-h1-h2)/T)/Z)  /* e4 をとる定常状態確率 */
#define J 1.0
#define h1 0.5
#define h2 0.1
/*****************************************************************/
/*------ "Seeds" of rundomnumbers appearing in this program -----*/
/*****************************************************************/
#define SEEDNOISE 121
#define SEEDNOISE2 142
#define SEEDNOISE3 132
#define SEEDNOISE4 45
#define SEEDNOISE5 92
/*****************************************************************/
int s1[N];
int s2[N];
double uu;
double ud;
double du;
double dd;
// double T; /* アニールする場合にはこのコメントをはずす */
/*******************************************************/
/*     Function of generating randomnumber             */
/*       by Numerical recepies in C  ran3             */
/*******************************************************/
#define MBIG 1000000000
#define MSEED 161803398
#define MZ 0
#define FAC (1.0/MBIG)

float ran3(long *idum)
```

```
{
static int inext,inextp;
static long ma[56];
static int iff=0;
long mj,mk;
int i,ii,k;

if (*idum < 0 || iff == 0) {
iff=1;
mj=MSEED-(*idum < 0 ? -*idum : *idum);
mj %= MBIG;
ma[55]=mj;
mk=1;
for (i=1;i<=54;i++) {
ii=(21*i) % 55;
ma[ii]=mk;
mk=mj-mk;
if (mk < MZ) mk += MBIG;
mj=ma[ii];
}
for (k=1;k<=4;k++)
for (i=1;i<=55;i++) {
ma[i] -= ma[1+(i+30) % 55];
if (ma[i] < MZ) ma[i] += MBIG;
}
inext=0;
inextp=31;
*idum= 1;
}
if (++inext == 56) inext=1;
if (++inextp == 56) inextp=1;
mj=ma[inext]-ma[inextp];
if (mj < MZ) mj += MBIG;
ma[inext]=mj;
return mj*FAC;
}
#undef MBIG
#undef MSEED
#undef MZ
#undef FAC
/* (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software 1+5-5i. */

/* s1 の初期値を確率的に選ぶ */
```

```
void set_initial()
{
        long idum=(-SEEDNOISE2);
        int x;
for(x = 0; x < N-1;  x++){
  if(p > ran3(&idum)){
    s1[x] = 1;
  }else{
    s1[x] = -1;
  }
}
}

/* s2 の初期値を確率的に選ぶ */
void set_initial2()
{
        long idum=(-SEEDNOISE3);
        int x;
for(x = 0; x < N-1;  x++){
  if(p > ran3(&idum)){
    s2[x] = 1;
  }else{
    s2[x] = -1;
  }
}
}

/* 状態更新部分 */
void metro(int k)
{
        long idum=(-SEEDNOISE+k);
        long idum2=(-SEEDNOISE5+k);
        int x;
        double r;
           for(x = 0; x < N-1; x++){
              r = ran3(&idum2);
                if((r <= 0.5) && (ran3(&idum)
                  < exp(-(2.0*J*s1[x]*s2[x]+2.0*h1*s1[x])/T))){
       s1[x] = -s1[x];}else{
 s1[x]= s1[x];}
      if((r > 0.5) && (ran3(&idum)
                  < exp(-(2.0*J*s1[x]*s2[x]+2.0*h2*s2[x])/T))){
       s2[x] = -s2[x];}else{
```

```
 s2[x]= s2[x];}
   }
}
/*****************************************************/
/*                Main Program                       */
/*****************************************************/
main()
{
FILE *pt;
int i,t;
  set_initial();
  set_initial2();
          if((pt = fopen("result.dat", "wt")) != NULL){
    for(i=1,uu=0.0,ud=0.0,du=0.0,dd=0.0;i < N-1; i++){
      if((s1[i]==1) && (s2[i]==1)){uu = uu + 1.0/N;}
      if((s1[i]==1) && (s2[i]==-1)){ud = ud + 1.0/N;}
      if((s1[i]==-1) && (s2[i]==1)){du = du + 1.0/N;}
      if((s1[i]==-1) && (s2[i]==-1)){dd = dd + 1.0/N;}
    }
    fprintf(pt,"%d %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf\n",
    0,uu,ud,du,dd,uu0,ud0,du0,dd0);
    for(t=0; t < tmax; t=t+1){
      /* アニールする場合には下記コメントをはずす */
      // T = 2.0/(log(1.0+2.0*t));
      // T = 2.0/(1.0+2.0*t);
      metro(t);
      for(i=1,uu=0.0,ud=0.0,du=0.0,dd=0.0; i < N-1; i++){
      if((s1[i]==1) && (s2[i]==1)){uu = uu + 1.0/N;}
      if((s1[i]==1) && (s2[i]==-1)){ud = ud + 1.0/N;}
      if((s1[i]==-1) && (s2[i]==1)){du = du + 1.0/N;}
      if((s1[i]==-1) && (s2[i]==-1)){dd = dd + 1.0/N;}
      }
       fprintf(pt,"%d %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf %lf\n",
       t,uu,ud,du,dd,uu0,ud0,du0,dd0);
    }
  }
             fclose(pt);
}
```

結果の一例を図 7 に載せる．この図より, 十分に時間が経過すると, それぞれの状態をとる確率が定常値に収束していく様子がわかる．なお, この定常値への収束が初期値に依存するかどうかを見るために, s_1, s_2 の初期値を各アンサンブルで変えて $(s_1, s_2) = (1, 1)$ となる確率 P_1(グラフ中では $P(\mathsf{uu})$ と表記) の時間変化をプロットしたものが図 8 である．この図から明らかに定常確率 (分布)

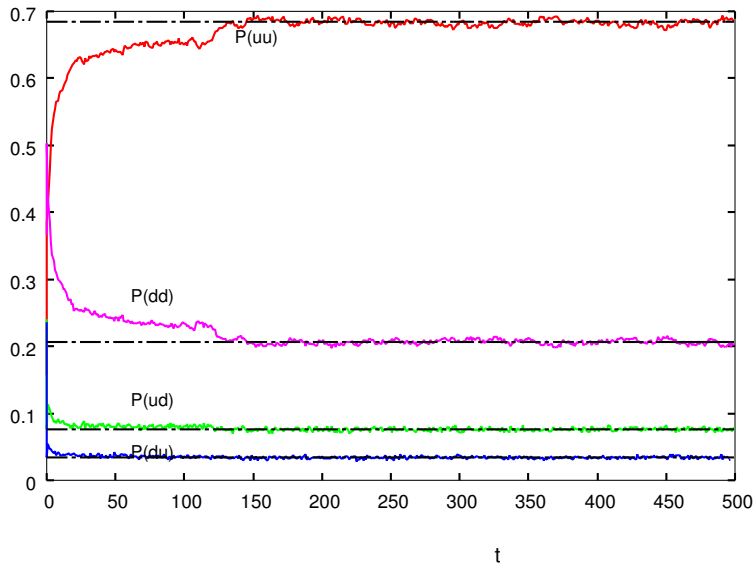


図 7: $(s_1, s_2) = (1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)$ をとる確率 $P(\mathsf{uu}) = P_1\,(E = \varepsilon_1), P(\mathsf{ud}) = P_2\,(E = \varepsilon_2), P(\mathsf{du}) = P_3\,(E = \varepsilon_3), P(\mathsf{dd}) = P_4\,(E = \varepsilon_4)$ の時間変化. アンサンブルのシステム総数 $N = 10000$, ノイズレベル $T = 1$. 横に引かれた破線はマスター方程式：(4.10)(4.11)(4.12)(4.13) の定常解である平衡分布 (確率). これらの定常確率はエネルギー 4 準位を反映している. つまり, $\varepsilon_1 < \varepsilon_4 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$ の順に $P_1 > P_4 > P_2 > P_3$ となっている.

は初期状態の選び方に依らないことがわかる. この性質, つまり, 定常分布が初期状態に依らない性質を**エルゴード性**と呼び, この性質が満たされていれば, そのシステムの物理量 A_t の長時間平均は定常分布を作るアンサンブルでの平均 $\langle A \rangle$ に等しくなる. つまり, 式で書けば

$$\langle A \rangle \quad = \quad \lim_{\mathcal{T}\to\infty} \frac{1}{\mathcal{T}} \sum_{t=0}^{\mathcal{T}} A_t \tag{4.8}$$

が成り立つ. 従って, 定常分布さえ書き下すことができれば, 後は学部で習った確率・統計の知識を用いて, その分布での期待値を計算することにより, 注目する一つのアンサンブルの物理量に関する長時間平均が計算できるということになる[4]. 具体例は後に見ることにして, 次に, ここでの計算機シミュレーションで得られた定常分布が解析的に得られないかどうかを検討することにしよう.

4.1.2　マスター方程式とその定常解

図 7 で得られた計算機シミュレーションでの定常分布が解析的に得られれば何かと都合が良いであろう. そこで, これを調べるために「確率の保存式」である**マスター方程式**を用いる. これは一般的に

$$\frac{dP(\boldsymbol{s})}{dt} \quad = \quad \sum_{\boldsymbol{s}'\neq\boldsymbol{s}} w(\boldsymbol{s}' \to \boldsymbol{s})P(\boldsymbol{s}') - \sum_{\boldsymbol{s}\neq\boldsymbol{s}'} w(\boldsymbol{s} \to \boldsymbol{s}')P(\boldsymbol{s}) \tag{4.9}$$

と書ける. ここで, $w(\boldsymbol{s}' \to \boldsymbol{s})$ は状態 $\boldsymbol{s}'$ から状態 $\boldsymbol{s}$ への**遷移確率**を表す. 従って, 上式 (4.9) の右辺第 1 項は $\boldsymbol{s}$ 以外の全ての状態 $\boldsymbol{s}'$ から状態 $\boldsymbol{s}$ に流入する確率の流れを, また, 第 2 項は状態 $\boldsymbol{s}$ から,

[4] 式 (4.8) で長時間平均を計算する際にはサンプリング ((4.8) 式中の和) の開始時刻をアルゴリズムのスタート時刻 $t = 0$ ではなく, システムが平衡状態に落ち込んだ時刻 $t = t_0$ とする場合がある. $\mathcal{T}$ の大きさが十分に大きければ平衡状態へ落ち込むまでのサンプリング点の効果はほとんど結果に効かないであろうと予想できるが, 現実の計算機シミュレーションでは $\mathcal{T}$ を有限値で置き換えるので, この t_0 の設定は重要になってくる場合がある.

ここは 31 ページ目

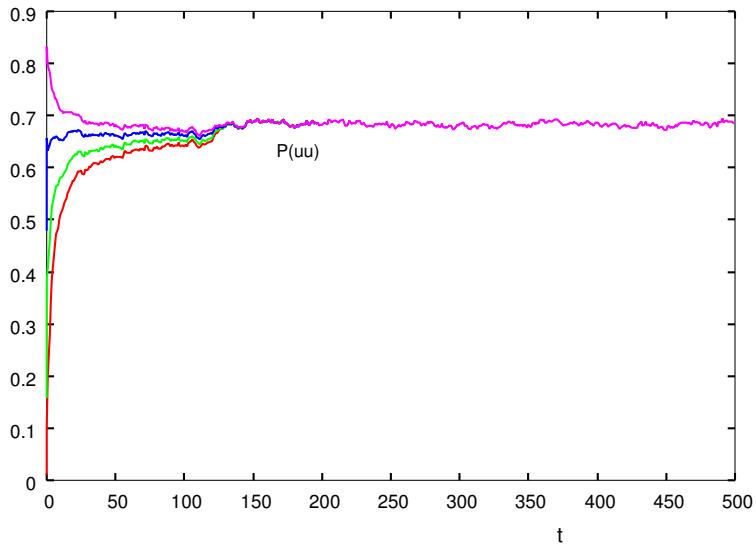


図 8: $(s_1, s_2) = (1, 1)$ をとる確率 $P(\mathrm{uu})$ の時間変化を初期状態を変えてプロット．アンサンブルのシステム数総 $N = 10000$, ノイズレベル $T = 1$.

それ以外の状態 $\boldsymbol{s}'$ へ出て行く確率の流れを表しており, この両者の差がシステムが状態 $\boldsymbol{s}$ をとる確率の変化率を決める, という意味を (4.9) 式は持っている．そこで, このマスター方程式を我々が議論してきたエネルギー関数が (4.1) 式で与えられ, 状態が [**ノイズを利用したアルゴリズム**] で更新されるシステムに適用すれば, 状態 1 をとる確率の時間的な変化は次のマスター方程式に従う．

$$\begin{aligned}\underbrace{\frac{dP_1}{dt}}_{\text{状態 1 をとる確率の時間変化}} &= \underbrace{1 \times P_2 + 1 \times P_3}_{\text{状態 1 よりエネルギーの高い状態 2,3 からは確率 1 で状態 1 へ流入}} \\ &- \underbrace{(\mathrm{e}^{-2(J+h_2)/T} + \mathrm{e}^{-2(J+h_1)/T})P_1}_{\text{状態 1 から確率 } \mathrm{e}^{-\Delta E/T} \text{ の確率で状態 2,3 へ流出}} \end{aligned} \tag{4.10}$$

ここで, 状態 $1(1, 1)$ から状態 $4(-1, -1)$ へ移行するためには, 同時に 2 つのスピンの符号変化を必要とするため, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] においては禁止されることに注意されたい．また, 状態 2 と状態 1 のエネルギー差は $\Delta E = 2(J + h_2)$, 状態 3 と状態 1 のエネルギー差は $\Delta E = 2(J + h_1)$ である．これらが上式右辺の第 2 項, 指数関数の肩に現れている．

同様にして, 状態 2,3,4 をとる確率の時間変化は次の方程式で書くことができる．

$$\frac{dP_2}{dt} = P_3 - \left\{2 + \mathrm{e}^{-2(h_1-h_2)/T}\right\} P_2 + \mathrm{e}^{-2(J+h_2)/T} P_1 + \mathrm{e}^{-2(J-h_1)/T} P_4 \tag{4.11}$$

$$\frac{dP_3}{dt} = \mathrm{e}^{-2(h_1-h_2)/T} P_2 - 2P_3 + \mathrm{e}^{-2(J-h_2)/T} P_4 \tag{4.12}$$

$$\frac{dP_4}{dt} = P_2 + P_3 - \left\{\mathrm{e}^{-2(J-h_1)/T} + \mathrm{e}^{-2(J-h_2)/T}\right\} P_4 \tag{4.13}$$

ここで, 当然 $P_1 + P_2 + P_3 + P_4 = 1$ が成り立っていることに注意しなければならない．

さて, システムが定常状態になっているのであれば,

$$\frac{dP_1}{dt} = \frac{dP_2}{dt} = \frac{dP_3}{dt} = \frac{dP_4}{dt} = 0 \tag{4.14}$$

が成り立つはずであるから, これから得られる方程式 (4.10),(4.11),(4.12),(4.13) を P_1, P_2, P_3, P_4 に関して解くことにより, 多少面倒な計算の結果

$$P_1 = P(1,1) = \frac{\mathrm{e}^{(J+h_1+h_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}\mathrm{e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}} = \frac{\mathrm{e}^{(J+h_1+h_2)/T}}{Z} \tag{4.15}$$

$$P_2 = P(1,-1) = \frac{\mathrm{e}^{(-J+h_1-h_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}\mathrm{e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}} = \frac{\mathrm{e}^{(-J+h_1-h_2)/T}}{Z} \tag{4.16}$$

$$P_3 = P(-1,1) = \frac{\mathrm{e}^{(-J-h_1+h_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}\mathrm{e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}} = \frac{\mathrm{e}^{(-J-h_1+h_2)/T}}{Z} \tag{4.17}$$

$$P_4 = P(-1,-1) = \frac{\mathrm{e}^{(J-h_1-h_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}\mathrm{e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}} = \frac{\mathrm{e}^{(J-h_1-h_2)/T}}{Z} \tag{4.18}$$

が得られるので, 一般に状態 $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2)$ をとる確率は

$$P(\boldsymbol{s}) = P(s_1, s_2) = \frac{\mathrm{e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}\mathrm{e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}} = \frac{\mathrm{e}^{-E(\boldsymbol{s})/T}}{Z} \tag{4.19}$$

と書ける. ここで, Z は確率の規格化因子に相当し,

$$Z = \sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}\mathrm{e}^{-E(\boldsymbol{s})/T} \tag{4.20}$$

と書き直すことができ, 統計力学ではこの Z のことを**分配関数**と呼んでいる. また, 分布 (4.19) は**ボルツマン分布**, あるいは, **ギブス分布**と呼ばれる. 従って, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] の定常分布はボルツマン分布になることがわかった. なお, 図 7 にはこの定常分布から見積もられる各確率を横線で書き込んであるが, この図から [**ノイズを利用したアルゴリズム**] から求められる定常確率はいずれもこのボルツマン分布に収束している様子が見て取れる.

4.1.3 最適化問題 : $E(s_1, s_2) = -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2$ 再考

さて, 我々の当初の問題に戻ろう. 我々の問題はエネルギー関数 (4.1) 式の最小値とその最小値を与える状態 (s_1, s_2) を求めることであった. そこで, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] から得られる定常分布 (4.19) 式の形を見てみると, この式でノイズレベル T を十分に小さく設定すると, 低いエネルギーを与える状態が比較的高頻度で出現し, $T = 0$ では最小エネルギーをとる状態 $(s_1, s_2) = (1, 1)$ のみが確率 1 で現れることがわかるであろう. これは我々の期待していた結果である. つまり, $P_1 = 1, P_2 = P_3 = P_4 = 0$ という結果が [**ノイズを利用したアルゴリズム**] から得られるのであれば, アンサンブルの中の全てのシステムの状態は $(s_1, s_2) = (1, 1)$ という「正解」となっているはずである. そこで, ノイズレベルを $T = 0.8, 0.6, 0.4, 0.2$ で固定した場合の計算機シミュレーション結果を見てみよう. その結果を図 9 に載せた. この図からまず, $T = 0.8$ ではエネルギーの 1 番高い $P(\mathsf{du})$, 及び, 2 番目に高い $P(\mathsf{ud})$ が比較的小さな値をとり, 一番エネルギーの低い $P(\mathsf{uu})$ が最も大きく, 次にエネルギーの低い $P(\mathsf{dd})$ が 2 番目に高い値に収束している. これは図 6 に示したエネルギー準位 $\varepsilon_1 < \varepsilon_4 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$ がきちんと反映されている. そして $T = 0.4$ ではエネルギーの高い $P(\mathsf{du}), P(\mathsf{ud})$ が完全にゼロになり, 2 番目にエネルギーの低い $P(\mathsf{dd})$ が減少に転じ, $P(\mathsf{uu})$ が増加し始める. そして, $T = 0.2$ に固定して [**ノイズを利用したアルゴリズム**] を走らせると $t = 500$ 程度ではまだ定常分布に収束していないとは言え, この「好ましい傾向」は依然として見られる. そこで, 調子に乗って一挙に $T = 0.01$ までノイズレベルを下げて, このノイズレベルに固定してアルゴリズムを走らせて見よう. 結果を図 10 に載せる.

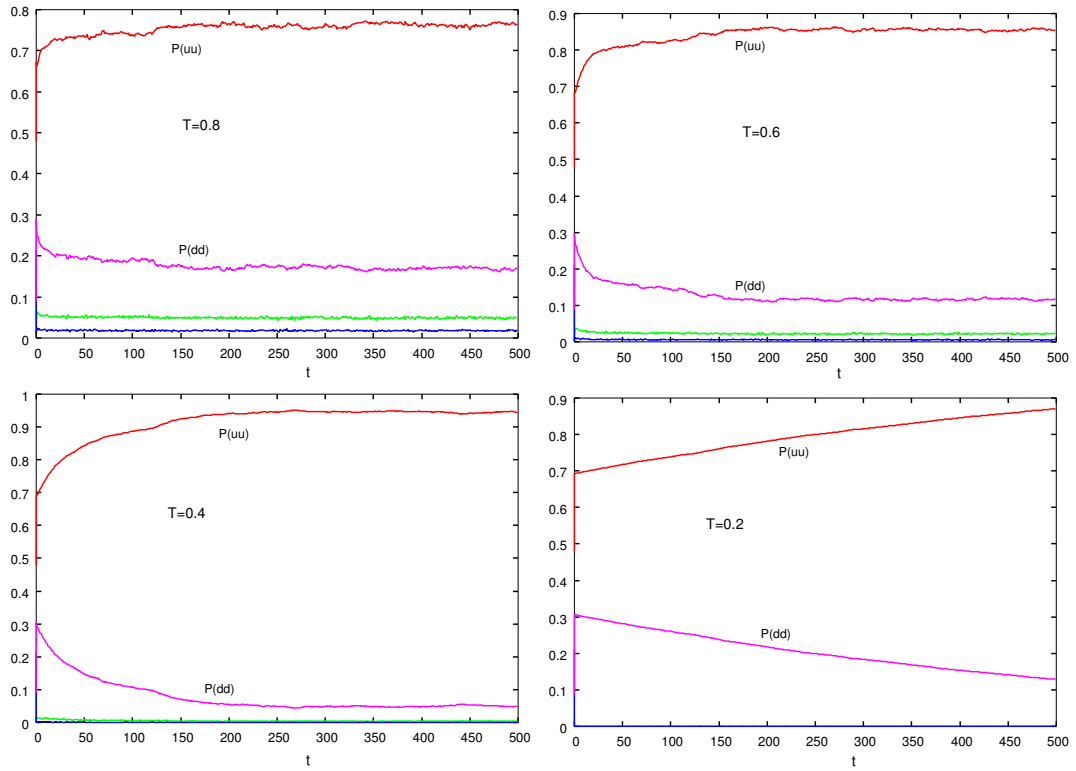


図 9: 左上から右下へ, $T = 0.8, 0.6, 0.4, 0.2$ とノイズレベルを固定した場合の各確率の時間変化の様子.

残念ながらこの図は我々の期待を裏切っている. $P(\mathsf{uu}), P(\mathsf{dd})$ とも完全に一定値に収束しているが, 我々が望む結果 : $P(\mathsf{uu}) = 1, P(\mathsf{dd}) = 0$ ではない. 何が問題だったのであろうか ?

そこで, 図 6 を見ながらもう一度考えてみると, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] では 1 ステップで s_1 か s_2 のいずれか一方のみの状態変化しか許されていないので, **状態** $(-1,-1)$ **から状態** $(1,1)$ **へ確率が流入するためには, 必ず, 状態** $(1,-1)$ **か** $(-1,1)$ **を経由しなければならない**ことがわかる. 従って, 例えば, $(-1,-1)$ $(E = \varepsilon_4)$ から, $(-1,1)$ $(E = \varepsilon_3)$ に移るためには $\Delta E = \varepsilon_3 - \varepsilon_4 = 2(J - h_2)$ の「エネルギー障壁」を飛び越えなければならない. この計算機シミュレーションでは $J = 1, h_2 = 0.1$ と選んでいるので, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] より, このエネルギー障壁を飛び越える確率は $T = 0.01$ のとき

$$P((-1,-1) \to (-1,1)) \quad = \quad \mathrm{e}^{-\Delta E/T} = \mathrm{e}^{-1.8/0.01} = \mathrm{e}^{-180} \tag{4.21}$$

であり, この逆数でもって状態 $(-1,-1)$ に留まる**滞在時間**を定めれば, アルゴリズムをスタートさせてから, おおよそ $t = \mathrm{e}^{180}$ までの間, この状態 $(-1,-1)$ に居座ることになる. これは事実上, $(-1,-1)$ に状態が落ち込めば, そこからは永遠に脱出できないことを意味する. 従って, 初期状態の選び方が悪く, 初期状態 $(-1,-1)$ を比較的高頻度でアンサンブルの中の各システムに与えてしまえば $P(\mathsf{uu})$ は低くなってしまい, 逆にアンサンブルの中の全てのシステムの初期状態を $(1,1)$ に選べば, $P(\mathsf{uu}) = 1$ となることが予想される. 定常分布が初期状態に依存するという意味において, 実質的にはエルゴード性が破れてしまっているわけである[5]. 実際にこれを見るために, $T = 0.01$

[5] もちろん, ノイズレベル T が完全にゼロでは無いわけであるから, 本当はエルゴード性が破れているわけではなく, 無限の時間が経過しさえすれば, いずれは (熱) 平衡状態に達する. しかし, 我々の我慢できる時間の範囲内ではあたかもエルゴード性が破れているように見え, 平衡状態になることはとても期待できない.

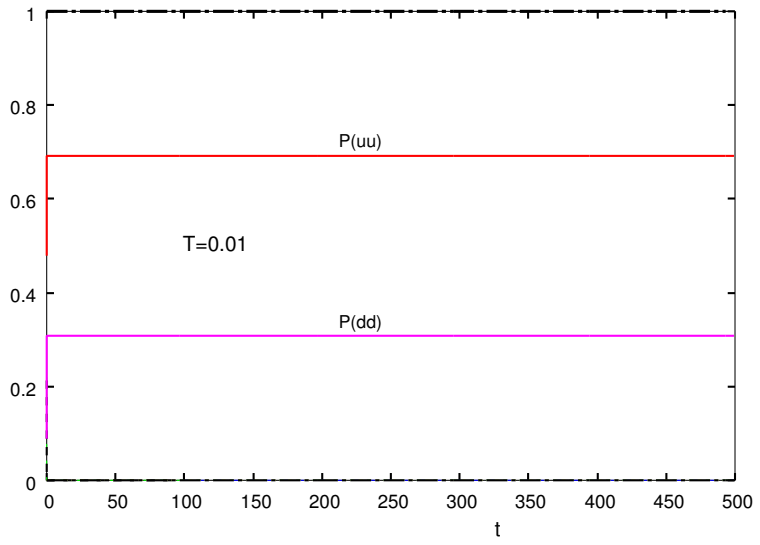


図 10: $T = 0.01$ にした場合の各確率時間発展. 横に走る破線はマスター方程式の定常解である平衡分布.

のときに複数の初期状態を選んだ場合の計算機シミュレーションによる $P(\mathsf{uu})$ の時間発展を図 11 に載せよう. この図から予想通り, $P(\mathsf{uu})$ の値は初期値の選び方に依存している.

4.1.4　ノイズレベルのスケジューリング

以上の結果から, いきなり $T = 0$ と置いてしまうと [**ノイズを利用したアルゴリズム**] は「ランダムシューティング」と何ら変わりなく, また, ゼロではないにしても T を低く設定しすぎれば $(-1, -1)$ から脱出するのは我慢できないほどの時間がかかってしまうことがわかった. では T を時間的に変化させ, アルゴリズムのスタート段階では T を大きめにとって全ての状態を等確率で生成させるようにし, ある程度のアンサンブルが状態 $(1, 1)$ に落ち込んだのを見はからって T を徐々に下げていくという戦略はどうであろうか？ これはうまく行きそうである. なぜならば, $T = \infty$ では完全に等確率 $1/4$ で 4 つの状態 $(1, 1), (1, -1), (-1, 1), (-1, -1)$ が実現するが, 図 7 で見たようにノイズレベル T を $T = 1$ 程度まで下げていくとエネルギーの低い順：$\varepsilon_1 < \varepsilon_4 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$ に出現確率の大小関係：$P(\mathsf{uu}) > P(\mathsf{dd}) > P(\mathsf{ud}) > P(\mathsf{du})$ が決まった. 従って, **システムがあるノイズレベル T での (熱) 平衡状態に到達する限り, 得られる定常確率はエネルギー準位をそのまま反映する**のである. さらに, 各ノイズレベルではアルゴリズムの初期値を再設定するわけではなく, 直前のノイズレベルでのアンサンブルの状態をそのまま使うわけであるから, いきなりノイズレベルを $T = 0$ に設定したときのようなランダムシューティングにはならず, **必ずアルゴリズムの全プロセスを通じて最小エネルギー状態が最も高頻度に現れるという「好ましい性質」「好ましい状態」を引きずりながら新しい状態が生成されていく**ことになる. よって, ノイズレベルを徐々に下げつつ, つまり, 各ノイズレベルではシステムが平衡状態になるのを待ってから次の (より小さな) ノイズレベルに設定する, というように [**ノイズを利用したアルゴリズム**] を修正すれば, 十分に長い時間をかけさえすれば確率 1 で最小エネルギー状態が求められる (つまり, $P(\mathsf{uu}) = 1, P(\mathsf{dd}) = P(\mathsf{ud}) = P(\mathsf{du}) = 0$)

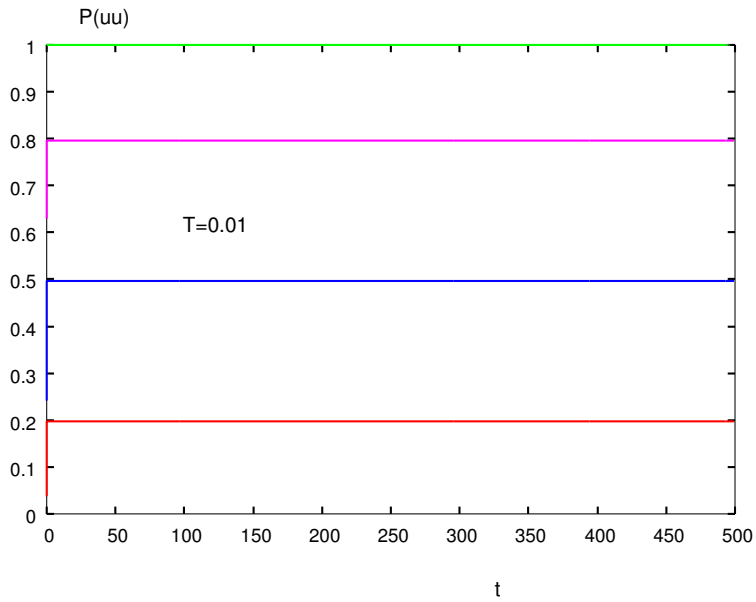


図 11: $T = 0.01$ の場合に初期状態を様々変えてみたときの $P(\mathrm{uu})$ の時間変化. 見かけ上, エルゴード性が破れている.

と推察できる[6].

さて, 早速これを確かめるため, T に時間依存性を持たせ

$$T(t) = \frac{2}{1+2t} \tag{4.22}$$

$$T(t) = \frac{2}{\log(1+2t)} \tag{4.23}$$

のような 2 通りで下げた場合の結果を図 12 に載せる. この図より, $T \sim 1/t$: (4.22) でノイズレベ

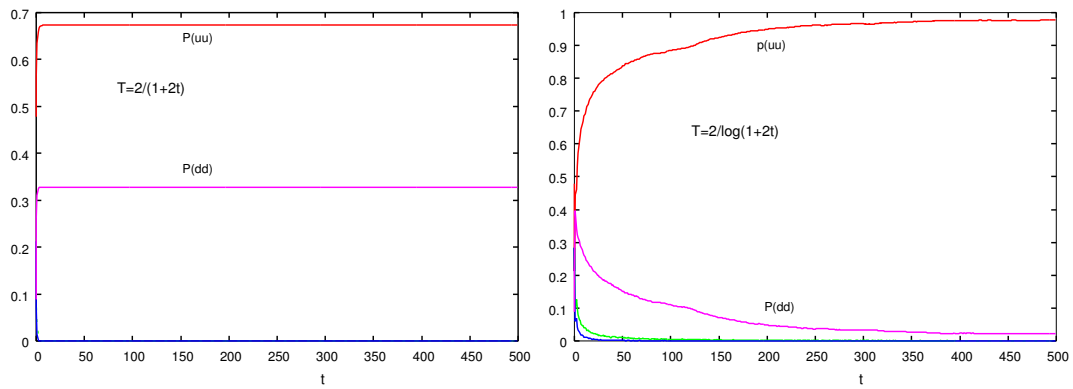


図 12: ノイズレベルを $T(t) = 2/(1+2t)$ (左) , $T(t) = 2/\log(1+2t)$ (右) で下げた場合の各確率の時間変化の様子.

ルを下げてしまうと, 下げ方が早すぎてうまくいっていない. 一方, $T \sim 1/\log t$: (4.23) で下げる

[6] 確率 1 で最小状態を得るためにはアニーリングプロセスの最後のつめの段階 ($T \simeq 0$) で熱平衡状態を作る必要があり, 前述のように, これには極めて長い時間ががかる. 従って, 実用的にはどこか満足の行くところでアニーリングプロセスを打ち切ってしまう場合が多い. 近似解, それも精度の良い近似解なら OK とするわけである.

と, $P(\mathsf{uu}) = 1$ へ順調に向かっていることがわかる. このようにノイズレベル T に時間的な変化をもたせて徐々に下げていく [**ノイズを利用したアルゴリズム**] のことを**シミュレーテッドアニーリング**と呼んでおり, 様々な工学的場面で用いられている. 一般的に, エネルギー関数が極めて特殊な状態依存性を持たなければノイズレベルを $1/\log t$ より十分に遅く下げていけば, 十分な時間の経過後には確率 1 で最小エネルギーを与える状態が得られることが知られている.

4.1.5 アニーリング・スケジュールの解析的導出

前節までで, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] により, 簡単な 2 つのスピン変数からなる $2^2 = 4$ 状態の最適化問題を解くことで, 「温度」と呼ばれる変数を適切に制御することで, 最小エネルギー状態が確率 1 で得られることを数値実験によってみた. また, 任意の温度でアルゴリズムを動作させることで, ボルツマン分布と呼ばれる平衡分布が得られることもみた. ここからは, この最適化問題に対し, 統計力学の方法がいかに有効なのかを数値実験に頼らずに解析的議論によって紹介していきたい.

まずは, 具体的にシミュレーテッド・アニーリング (SA) における最適な温度制御が

$$T(t) \sim \frac{1}{\log t} \tag{4.24}$$

であることを簡単な 2 準位系での状態遷移を議論することによって解析的に示そう.

まず, 図 13 のような 2 準位系を考える. B はエネルギー準位 1 から 2 へ飛び移るのに越えなければならない「エネルギー障壁」の高さであり, Δ は準位 1, 2 間のエネルギー差である. さて, この系がノイズレベル T にある場合, 粒子は [**ノイズを利用したアルゴリズム**] の遷移確率に従って状態 1,2 間の間を行ったり来たりする.

まずは, この系に対して前節で見たマスター方程式を導出しよう. 時刻 t に状態 1 に粒子が存在する確率を $P_1(t)$, 状態 1 に存在する確率を $P_2(t)$ としよう. このとき, 確率 P_1 の微小時間 Δt の間の増加分 $[P_1(t+\Delta t) - P_1(t)]$ は次のように表すことができる.

$$P_1(t+\Delta t) - P_1(t) = [\underbrace{P_2 \times w(2\to 1)}_{\text{単位時間に状態 1 へ入る確率の流れ}} - \underbrace{P_1 \times w(1\to 2)}_{\text{単位時間に状態 1 から出る確率の流れ}}]\Delta t \tag{4.25}$$

ここで, $w(2\to 1), w(1\to 2)$ 等はそれぞれ状態 2 から 1 へ飛び移る遷移確率, 状態 1 から 2 へ飛び移る遷移確率である. ここで, メトロポリスアルゴリズムのところで見たように, 考えている系が温度 T の熱浴と平衡状態にある場合, エネルギー ΔE の山を越える確率は $\mathrm{e}^{-\Delta E/T}$ で与えられた. これを踏まえると, いまの場合

$$w(2\to 1) = \mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} \tag{4.26}$$

$$w(1\to 2) = \mathrm{e}^{-B/T} \tag{4.27}$$

でそれぞれの遷移確率が与えられることになる (各自, 図を見て確かめること). また, $\Delta t \to 0$ の極限のもとで (4.25) の左辺は

$$P_1(t+\Delta t) - P_1(t) = \left(\frac{dP_1}{dt}\right)\Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \tag{4.28}$$

となる. また, 確率の保存の式から $P_2 = 1 - P_1 \equiv 1 - P$ とすると, (4.28) 式は結局

$$\frac{dP}{dt} = -[\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} + \mathrm{e}^{-B/T}]P + \mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} \tag{4.29}$$

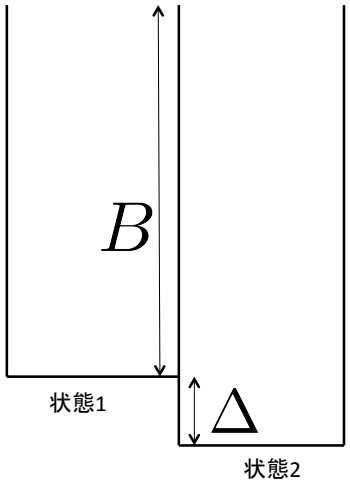


図 13: ここで考える 2 準位系.

となる.

ここで, エネルギー最小状態 (今の場合, 状態 2) に粒子がいる確率ができるだけ大きくあってくれれば「最適化問題」の立場からは好ましいわけであるから ($P = 0$ (つまり, $P_2 = 1$) となれば基底状態が確率 1 で実現することになる), (4.29) 式の右辺に逆符号をつけたものを温度 T の関数

$$\mathcal{L}(T) \equiv [\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} + \mathrm{e}^{-B/T}]P - \mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} \tag{4.30}$$

とみなし, 各時刻 t で $\mathcal{L}(T)$ を最大化する T の条件を求めることにしよう (そうすれば結果的に $-dP/dt$ を最大化, つまり P の減少率を最大化することになり, 我々の目標に沿う). そのような条件は直ちに $(\partial\mathcal{L}/\partial T) = 0$ であることがわかるので, 実際この条件を書き下してみると

$$\left[\frac{(B+\Delta)}{T^2}\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} + \frac{B}{T^2}\mathrm{e}^{-B/T}\right]P + [\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} + \mathrm{e}^{-B/T}]\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right) - \frac{(B+\Delta)}{T^2}\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T} = 0 \tag{4.31}$$

ここで, 状態 1,2 間のエネルギー差 Δ は状態 1,2 間のエネルギー障壁の高さと比べて小さい ($B \gg \Delta$) と仮定すると, (4.31) 式は次のように書き直すことができる.

$$\frac{dP}{dT} = -\frac{B}{T^2}P + \frac{B}{T^2}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\Delta/T}}{1+\mathrm{e}^{-\Delta/T}}\right] \tag{4.32}$$

まず, 上の微分方程式を解く前に, 次の斉次の方程式

$$\frac{dP}{dT} = -\frac{B}{T^2}P \tag{4.33}$$

をまず解くことにしよう. これは変数分離形だから難なく解けて

$$P(T) = C\mathrm{e}^{\frac{B}{T}} \tag{4.34}$$

である. 次にこの積分定数を T の関数とみなして (定数変化法),

$$P(T) = C(T)\mathrm{e}^{\frac{B}{T}} \tag{4.35}$$

とし, これを (4.32) に代入してみると,

$$\frac{dP}{dT} = \frac{dC(T)}{dT}\mathrm{e}^{\frac{B}{T}} - \frac{B}{T^2}C(T)\mathrm{e}^{\frac{B}{T}} = -\frac{B}{T^2}C(T)\mathrm{e}^{\frac{B}{T}} + \frac{B}{T^2}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\Delta/T}}{1+\mathrm{e}^{-\Delta/T}}\right] \tag{4.36}$$

となり, 整理すると

$$\frac{dC(T)}{dT} = \frac{B}{T^2}\left[\frac{\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T}}{1+\mathrm{e}^{-\Delta/T}}\right] \tag{4.37}$$

となる. 次に

$$\frac{1}{T} = x \tag{4.38}$$

と変数変換すると,

$$\frac{dC}{dx} = -B\left[\frac{\mathrm{e}^{-(B+\Delta)x}}{1+\mathrm{e}^{-\Delta x}}\right] \tag{4.39}$$

と簡略化され, 形式的に (4.39) の解は

$$C(x) = -B\int\frac{\mathrm{e}^{-(B+\Delta)x}}{1+\mathrm{e}^{-\Delta x}}dx \tag{4.40}$$

と求めることができる.

さて, $\mathrm{e}^{-\Delta x} = y$ とおくと, $\mathrm{e}^{-\Delta x}dx = -dy/\Delta$ であり, $\mathrm{e}^{-Bx} = (\mathrm{e}^{-\Delta x})^{B/\Delta} = y^{B/\Delta}$ となるので, (4.40) は

$$C(x) = \frac{B}{\Delta}\int\frac{y^{\frac{B}{\Delta}}}{1+y}dy \simeq \frac{B}{\Delta}\int y^{\frac{B}{\Delta}}dy \tag{4.41}$$

と変形できるので, これを積分し,

$$C(x) = \frac{B}{\Delta}\times\frac{1}{1+\frac{B}{\Delta}}y^{\frac{B}{\Delta}+1} = \frac{B}{B+\Delta}\,y^{\frac{B+\Delta}{\Delta}} \tag{4.42}$$

となるが, $y = \mathrm{e}^{-\Delta x}$, $T^{-1} = x$ を用いて元に戻せば

$$C(T) = \frac{B}{(B+\Delta)}\mathrm{e}^{-\frac{(B+\Delta)}{T}} \tag{4.43}$$

が得られ, $P(T)$ は

$$P(T) = \frac{B}{(B+\Delta)}\mathrm{e}^{-\frac{\Delta}{T}} \simeq \mathrm{e}^{-\frac{\Delta}{T}} \quad (B \gg \Delta \text{ を用いた}) \tag{4.44}$$

となる. 従って, $T = T_{\mathrm{opt}}$ の場合,

$$\mathrm{e}^{-\frac{\Delta}{T_{\mathrm{opt}}}} = P \tag{4.45}$$

が成り立つ. また,

$$\mathrm{e}^{-\frac{B}{T_{\mathrm{opt}}}} = (\mathrm{e}^{-\frac{\Delta}{T_{\mathrm{opt}}}})^{\frac{B}{\Delta}} = P^{\frac{B}{\Delta}} \tag{4.46}$$

$$\mathrm{e}^{-(B+\Delta)/T_{\mathrm{opt}}} = P^{\frac{B}{\Delta}+1} \tag{4.47}$$

(4.45), (4.46), (4.47) を (4.29) に代入して整理すれば

$$\frac{dP}{dt} = -[P^{\frac{B}{\Delta}+1} + P]P + P^{\frac{B}{\Delta}+1} \tag{4.48}$$

が得られる. $P \leq 1$ であることに注意して主要項のみ残すと

$$\frac{dP}{dT} = -P^{\frac{B}{\Delta}+2} \tag{4.49}$$

が得られ, これを積分すると,

$$P \simeq \left(\frac{\Delta}{B}\right)^{-\frac{\Delta}{B}} t^{-\frac{\Delta}{B}} \underbrace{\rightarrow}_{t \to \infty} 0 \tag{4.50}$$

が得られる. この (4.50) 式を (4.44) 式に代入して,

$$-\frac{\Delta}{B}\log\left(\frac{\Delta}{B}\right) - \frac{\Delta}{B}\log t = -\frac{\Delta}{T_{\rm opt}} \tag{4.51}$$

となるので, 主要項のみ残すと $t \to \infty$ の極限で, 最適な温度制御は

$$T_{\rm opt} = \frac{B}{\log t} \tag{4.52}$$

となることがわかる.

4.2 平衡状態と物理量の期待値：内部/自由エネルギー, エントロピー *etc.*

ここまでの議論で [**ノイズを利用したアルゴリズム**] を動作させることにより, アンサンブルの中の各システムが状態 $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2)$ を割合：

$$P(s_1, s_2) = \frac{{\rm e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}{\rm e}^{(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)/T}} = \frac{{\rm e}^{-E(\boldsymbol{s})/T}}{\sum_{\boldsymbol{s}\in\pm1}{\rm e}^{-E(\boldsymbol{s})/T}} \tag{4.53}$$

でとることがわかった. 時間が十分に経過し, システムが平衡状態に達すれば, 注目する 1 つのシステムの物理量の長時間平均は分布 $P(s_1, s_2)$ に関する平均で置き換えることができる.

さて, このシステムのエネルギー E のアンサンブルでの期待値は $\beta \equiv T^{-1}$ と置けば

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} E(s_1, s_2)P(s_1, s_2) \\
&= -\left[\frac{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2){\rm e}^{\beta(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}{\rm e}^{\beta(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)}}\right] \\
&= -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z \qquad (4.54)\\
Z &\equiv \sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}{\rm e}^{\beta(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)} \\
&= \left[{\rm e}^{\beta(J+h_1+h_2)} + {\rm e}^{\beta(-J+h_1-h_2)} + {\rm e}^{\beta(-J-h_1+h_2)} + {\rm e}^{\beta(J-h_1-h_2)}\right] \qquad (4.55)
\end{aligned}$$

と表すことができる. 従って, エネルギーの期待値を求めるためには, 分配関数 Z, あるいは**自由エネルギー**と呼ばれる次の関数：

$$F = -T\log Z \tag{4.56}$$

から

$$\langle E \rangle = \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F) \tag{4.57}$$

という操作を通じて求めることができる.

この自由エネルギーはとても便利な関数である. なぜならば, 任意の物理量 $A(s_1, s_2)$ の期待値 $\langle A(s_1, s_2)\rangle$ が算出したければ, $A(s_1, s_2)$ に共役な外場 (パラメータ) a を用いて $aA(s_1, s_2)$ を分配関数の指数部分に加えた自由エネルギー :

$$F = -T\log\left(\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} \mathrm{e}^{\beta(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)+aA(s_1,s_2)}\right) \tag{4.58}$$

を作り, これから

$$\langle A(s_1, s_2)\rangle = -\frac{1}{T}\lim_{a\to0}\left(\frac{\partial F}{\partial a}\right) = \frac{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} A(s_1, s_2)\,\mathrm{e}^{\beta(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)}}{\sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} \mathrm{e}^{\beta(Js_1s_2+h_1s_1+h_2s_2)}} \tag{4.59}$$

という操作を実行すればよい.

また, このシステムの**エントロピー** S は熱力学的関係式 :

$$F = \langle E\rangle - TS \tag{4.60}$$

から, 自由エネルギー, 及び, **内部エネルギー** $\langle E\rangle$ を用いて

$$S = \frac{1}{T}(\langle E\rangle - F) \tag{4.61}$$

からみ積もることができる.

4.2.1 変分原理とボルツマン分布

ここまでの節では, [**ノイズを利用したアルゴリズム**] の平衡分布としてボルツマン分布を受け入れてきたが, この分布を条件付き最適化問題 (変分問題) の解として導出することもできる. 以下にそれを見ておこう. まずは, 使い慣れたいくつかの確率分布が**シャノンの情報論的エントロピー**の最大原理から導かれることを復習しておく.

- **一様分布**
  問題の確率分布を $P(x)$ とする. 確率変数のとりうる値は $x \in \{1, 2, \cdots, K\}$. 規格化条件: $\sum_{x=1}^{K} P(x) = 1$ を満たす $P(x)$ のなかで, 実現値 x についての多様性を最大化するものを選ぶ. λ を未定係数として

  $$f(P(x), \lambda) = \underbrace{-\sum_{x=1}^{K} P(x)\log P(x)}_{\text{情報論的エントロピー}} + \lambda\left\{\sum_{x=1}^{K} P(x) - 1\right\}$$

  を $P(x), \lambda$ について最大化する. $\delta f/\delta P(x) = 0$ より

  $$-\sum_{x=1}^{L}\{\log P(x) + 1 + \lambda\} = 0,\ \text{つまり},\ P(x) = \mathrm{e}^{-1-\lambda}$$

  $\partial f/\partial\lambda = 0$ より, $\sum_{x=1}^{K} P(x) = 1$, すなわち

  $$\mathrm{e}^{-1-\lambda}\sum_{x=1}^{K} = 1,\quad \text{つまり},\ \mathrm{e}^{-1-\lambda} = \frac{1}{\sum_{x=1}^{K}} = \frac{1}{K} = P(x)\quad (\text{一様分布})$$

  である.

- **指数分布**

確率変数のとりうる値は $0 \le x < \infty$ の実数. 規格化条件: $\int_0^\infty P(x)dx = 1$, および, その平均値が一定: $\int_0^\infty xP(x)dx = m$ を満たす $P(x)$ のなかで, 実現値 x についての多様性を最大化するものを選ぶ. λ, β を未定係数として

$$f(P(x), \lambda, \beta) = -\int_0^\infty P(x)\log P(x) + \lambda\{\int_0^\infty P(x)dx - 1\} + \beta\{\int_0^\infty xP(x)dx - m\}$$

を $P(x), \lambda, \beta$ について最大化. $\delta f/\delta P(x) = 0$ より

$$-\int_0^\infty \{\log P(x) + 1 + \lambda + \beta x\}dx = 0, \text{ つまり, } P(x) = \mathrm{e}^{-1-\lambda} \cdot \mathrm{e}^{-\beta x}$$

$\partial f/\partial\lambda = 0$ より, $\int_0^\infty P(x)dx = 1$, すなわち

$$\mathrm{e}^{-1-\lambda} = \frac{1}{\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta x}dx}, \text{ つまり, } P(x) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta x}}{\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta x}dx} = \beta\,\mathrm{e}^{-\beta x}$$

である. ここに, $Z \equiv \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta x}dx = [-\frac{1}{\beta}\mathrm{e}^{-\beta x}]_0^\infty = 1/\beta$ に注意. また, $\partial f/\partial\beta = 0$ より, $\sum_{x=1}^K xP(x) = m$, すなわち

$$\frac{\int_0^\infty x\mathrm{e}^{-\beta x}dx}{\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta x}dx} = -\frac{\partial \log Z}{\partial\beta} = m, \quad Z \equiv \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta x}dx = \frac{1}{\beta}$$

つまり, $\beta = 1/m$. よって, 求める分布は

$$P(x) = \frac{1}{m}\,\mathrm{e}^{-\frac{x}{m}} \quad \text{(指数分布)}$$

である.

- **正規分布**

確率変数のとりうる値は $-\infty < x < \infty$ の実数. 規格化条件: $\int_{-\infty}^\infty P(x)dx = 1$, 平均値が一定: $\int_{-\infty}^\infty xP(x)dx = m$, 分散が一定: $\int_{-\infty}^\infty (x-m)^2P(x)dx = \sigma^2$ を満たす $P(x)$ のなかで, x についての多様性を最大化するものを選ぶ. λ, β, γ を未定係数として

$$\begin{aligned} f(P(x), \lambda, \beta, \gamma) &= -\int_{-\infty}^\infty P(x)\log P(x)dx + \lambda\{\int_{-\infty}^\infty P(x)dx - 1\} \\ &+ \beta\{\int_{-\infty}^\infty xP(x)dx - m\} + \gamma\{\int_{-\infty}^\infty (x-m)^2P(x)dx - \sigma^2\} \end{aligned}$$

を $P(x), \lambda, \beta, \gamma$ について最大化. $\delta f/\delta P(x) = 0$ より,

$$-\int_{-\infty}^\infty \{\log P(x) + 1 + \lambda + \beta x + \gamma(x-m)^2\}dx = 0, \text{ つまり, } P(x) = \mathrm{e}^{-1-\lambda} \cdot \mathrm{e}^{-\beta x - \gamma(x-m)^2}$$

また, $\partial f/\partial\lambda = 0$ より, $\int_{-\infty}^\infty P(x)dx = 1$, すなわち

$$\mathrm{e}^{-1-\lambda} = \frac{1}{\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-\beta x - \gamma(x-m)^2}dx}, \text{ つまり, } P(x) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta x - \gamma(x-m)^2}}{\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-\beta x - \gamma(x-m)^2}dx}$$

である. ここで, 既に学んだ積分公式:

$$\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

を用いると

$$Z \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta x-\gamma(x-m)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}\, \mathrm{e}^{\frac{(\gamma m-\lambda)^2}{4\gamma}-\gamma m^2}$$

である. $\partial f/\partial\beta = 0$ より, $\int_{-\infty}^{\infty} xP(x)dx = m$, すなわち

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{e}^{-\beta x-\gamma(x-m)^2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta x-\gamma(x-m)^2} dx} = -\frac{\partial \log Z}{\partial\beta} = \frac{2\gamma m-\beta}{2\gamma} = m,\ \text{つまり},\ \beta = 0$$

また, $\partial f/\partial\gamma = 0$ より, $\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)^2 P(x)dx = \sigma^2$, すなわち

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)^2\mathrm{e}^{-\gamma(x-m)^2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\gamma(x-m)^2} dx} = -\frac{\partial \log Z}{\partial\gamma} = \frac{1}{2\gamma} = \sigma^2,\ \text{つまり},\ \gamma = \frac{1}{2\sigma^2}$$

である. 以上より

$$P(x) = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}}}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} \quad (\text{正規分布})$$

が得られる.

このように既に使い慣れた確率分布も, いくつかの条件下で情報論的エントロピーを最大化する分布として定式化することができる. 例えば, 社会科学などのエージェントベースモデリングで, システムに多様性を与えるように確率変数に値を割り当てる際, 分布の規格化以外に何も条件を課さないのであれば, それは「一様分布」を用いるべきであるし, 確率変数の平均値を一定に保ち, この平均値を制御変数としてシステムのマクロな性質を調べたいのであれば「指数分布」を用いるべきである. また, 制御変数として平均値と分散を採用し, これらの値を色々変えた場合のシステムの振る舞いに興味があるのであれば「正規分布」を選ぶべきである.

さて, 上記の例は全て一変数の場合であったが, これが多変数になっても基本的方針は同じである. 問題の分布を $P(\boldsymbol{s})$ としよう. この $P(\boldsymbol{s})$ は確率分布であるから, 規格化条件を満たさなければならず, また, ここではエネルギー関数 $E(\boldsymbol{s})$ のこの分布での期待値が一定としょう. つまり

$$\sum_{\boldsymbol{s}} P(\boldsymbol{s}) = 1,\ \sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})P(\boldsymbol{s}) = E \tag{4.62}$$

である. この条件下で求める分布 $P(\boldsymbol{s})$ はシャノンの情報論的エントロピー: $-\sum_{\boldsymbol{s}} P(\boldsymbol{s})\log P(\boldsymbol{s})$ を最大化するものであると考えよう. すると, ラグランジュの未定係数を λ, β として, 次の $P(\boldsymbol{s})$ についての関数を最大化すればよい.

$$f = -\sum_{\boldsymbol{s}} P(\boldsymbol{s})\log P(\boldsymbol{s}) + \lambda(1-\sum_{\boldsymbol{s}} P(\boldsymbol{s})) + \beta(E-\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})P(\boldsymbol{s})) \tag{4.63}$$

$\delta f/\delta P(\boldsymbol{s}) = 0$ より, 直ちに

$$P(\boldsymbol{s}) = \mathrm{e}^{-1-\lambda}\cdot \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})} \tag{4.64}$$

が得られる. $\partial f/\partial\lambda = 0$ より, 規格化条件 $\sum_{\boldsymbol{s}} P(\boldsymbol{s}) = 1$ が出るが, この式に上式 (4.64) を代入することで, $\mathrm{e}^{-1-\lambda} = (\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})})^{-1}$ が得られるので, 結局

$$P(\boldsymbol{s}) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}} \tag{4.65}$$

が得られる．これは, $\beta = 1/T$ で逆温度を定義すればボルツマン分布そのものである．しかし, ここでは T の意味について少し詳しくみていくために, もう一つの変分条件 $\partial f/\partial\beta = 0$ を考えよう．これはエネルギーの期待値が一定という式がでるから, この式 $\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})P(\boldsymbol{s}) = E$ の中に得られた分布 (4.65) を代入してみると

$$\frac{\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})\mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}} \equiv \langle E\rangle = E \tag{4.66}$$

が得られる．さらにこの両辺を β で微分し, マイナス符号をつけると, 簡単な計算より直ちに

$$\begin{aligned} -\frac{\partial E}{\partial\beta} &= \frac{(\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})^2\mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})})(\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}) - \{\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})\mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}\}^2}{\{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}\}^2} \\ &= \frac{\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})^2\mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}} - \left\{\frac{\sum_{\boldsymbol{s}} E(\boldsymbol{s})\mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta E(\boldsymbol{s})}}\right\}^2 \\ &= \langle E(\boldsymbol{s})^2\rangle - \langle E(\boldsymbol{s})\rangle^2 \equiv (\Delta E)^2 \end{aligned} \tag{4.67}$$

が得られる．ここで, 記号 $\langle\cdots\rangle$ は分布 (4.65) での期待値を意味する．さて, 「分散」の定義を思い出してみると, まさに上記の $(\Delta E)^2$ はエネルギー $E(\boldsymbol{s})$ の分散である．一方, 熱力学を思い起こしてみると, 比熱 C_v は, (内部) エネルギーを温度 T で微分したものであった．つまり,

$$C_v = \frac{dE}{dT} = -\frac{1}{T^2}\frac{dE}{d\beta} = \frac{(\Delta E)^2}{T^2} \tag{4.68}$$

従って, エネルギーの標準偏差 ΔE は比熱を用いて

$$\Delta E = \sqrt{C_v}T \tag{4.69}$$

と書ける．例えば, 理想気体を考えると, $C_v = (3/2)N, E = (3/2)NT$ であったことを思い出すとエネルギーの期待値 E の周りの「揺らぎ」は

$$\frac{\Delta E}{E} \simeq \frac{T}{\sqrt{N}} \tag{4.70}$$

となる．これから次の 2 つのことがわかる．

- 有限の温度 T で, エネルギー $E(\boldsymbol{s})$ の期待値 E の揺らぎは N が十分大きな場合に無視できる．
- 有限の N で, エネルギー $E(\boldsymbol{s})$ の期待値 E のまわりの揺らぎは温度 T に比例する．

統計力学が扱う対象は $N \to \infty$ の場合が多いので, 結局, 全ての有限温度で期待値 E の周りの揺らぎは無視できることになり, 実験等で E からのズレが観測されることはない．

4.2.2 十分統計量 $E(\boldsymbol{s})$

ここで, エネルギーの値 E を与えたとき, エネルギー関数 $E(\boldsymbol{s})$ が丁度 $E(\boldsymbol{s}) = E$ を満たす「ミクロな状態 $\boldsymbol{s}$」の条件付き分布 $P(\boldsymbol{s}|E(\boldsymbol{s}) = E)$ を考えよう．

まず, 確率統計の復習でみた「積の公式」を用いてこの条件付き分布を次のように書き直す．

$$P(\boldsymbol{s}|E(\boldsymbol{s}) = E) = \frac{P(\boldsymbol{s}, E(\boldsymbol{s}) = E)}{P(E(\boldsymbol{s}) = E)} \tag{4.71}$$

ここで, 上式 (4.71) 右辺の分母は

$$P(E(\boldsymbol{s}) = E) = \frac{\Omega(E)\,\mathrm{e}^{-\beta E}}{\sum_E \Omega(E)\,\mathrm{e}^{-\beta E}} \tag{4.72}$$

である．ここに, $\Omega(E)$ は $E(\boldsymbol{s}) = E$ を満たすミクロ状態 $\boldsymbol{s}$ の個数であり (「熱力学的重率」「状態密度」などと呼ばれる), $\delta_{a,b}$ をクロネッカのデルタとして

$$\Omega(E) = \sum_{\boldsymbol{s}} \delta_{E(\boldsymbol{s}),E} \tag{4.73}$$

で定義される．一方, (4.71) 式の分子は

$$P(\boldsymbol{s}, E(\boldsymbol{s}) = E) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta E}\,\delta_{E(\boldsymbol{s}),E}}{\sum_E \Omega(E)\,\mathrm{e}^{-\beta E}} \tag{4.74}$$

である．よって, (4.71) 式は

$$P(\boldsymbol{s}|E(\boldsymbol{s}) = E) = \frac{\delta_{E(\boldsymbol{s}),E}}{\Omega(E)} \tag{4.75}$$

となり, 逆温度 β には依存しない[7]．すなわち, ミクロな状態の分布を知るためにはエネルギー関数 $E(\boldsymbol{s})$ の値だけで十分であり, パラメータ β は何ら必要ないことになる．このような統計量 $E(\boldsymbol{s})$ を統計学ではパラメータ (母数) β に対する**十分統計量**と呼んでいる．つまり, 我々が見てきたボルツマン分布の場合, エネルギー関数 $E(\boldsymbol{s})$ は逆温度 β に対する十分統計量である．

4.3　巡回セールスマン問題とイジング模型

既にみたように, 図 14 のような, 縦 × 横のサイズが $L_1 \times L_2$ の 2 次元格子上に置かれた多数の原子磁石 (スピン): $\sigma_{i,j} = \pm 1$ からなるシステムを**イジング模型**と呼ぶ．この図では, 上向き矢印で $\sigma_{i,j} = 1$ を, 下向き矢印で $\sigma_{i,j} = -1$ を表していることに注意する．この模型においては, スピン間

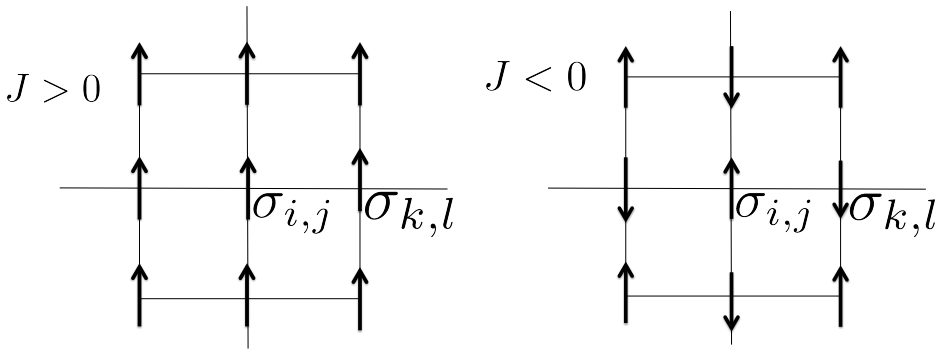


図 14: イジング模型の例．左図は全ての相互作用が $J_{ij,kl} = J > 0$ の場合．右図は逆に相互作用が $J_{ij,kl} = J < 0$ の場合．前者を**強磁性体**, 後者を**反強磁性体**と呼ぶ．

の相互作用により, スピン $\sigma_{i,j}$ と $\sigma_{k,l}$ との間 ($(i,j) \neq (k,l)$) には

$$-J_{ij,kl}\sigma_{i,j}\sigma_{k,l}$$

だけのエネルギーが蓄えられる．ここでは, $J_{ij,kl}$ が「相互作用の強さ」を与えることになる．また, 各スピンにその強さが $h_{i,j}$ で与えられる「磁場」が加わるとすれば, この磁場効果により, スピン $\sigma_{i,j}$ には

$$-h_{i,j}\sigma_{i,j}$$

[7] この式の意味は「等重率の原理」, つまり, ミクロカノニカル分布である．

ものエネルギーが蓄えられることになる．従って, システム全体でみると, これらを全てのスピンに対して足せば良いわけなので,

$$E = -\sum_{i=1}^{L_1}\sum_{j=1}^{L_2}\sum_{k=1}^{L_1}\sum_{l=1}^{L_2} J_{ij,kl}\sigma_{i,j}\sigma_{k,l} - \sum_{i=1}^{L_1}\sum_{j=1}^{L_2} h_{i,j}\sigma_{i,j} \tag{4.76}$$

ものエネルギーを持つことになる．まずは簡単のため, 全ての (i,j) で $h_{i,j}=0$ となる状況を考えてみよう．つまり, エネルギーとしては, (4.76) 式の右辺第 1 項のみで与えられる場合を考える．このとき, 全ての相互作用が一様に $J_{ij,kl}=J>0$ の場合, 全てのスピンが同じ方向を向いた場合にエネルギーが最も低くなる (図 14 の左)．このときのエネルギーの最小値は, スピンの個数を $N=L1\times L2$ として

$$E = -\frac{N(N-1)}{2}$$

である．逆に全ての相互作用が一様に $J_{ij,kl}=J<0$ の場合, 全ての隣り合うスピンがお互い逆向きになるとき, 全体のエネルギーが最小になることがわかる．従って, なんらかの基準で定義されるエネルギー (コスト) 関数とその最小値を与える配列 $\{\sigma_{i,j}\}$ がきちんと定義できるわけなので, (4.76) 式は一つの**組み合わせ最適化問題**を与えると言ってよい．また, 以下で見るように, 世の中に存在する多くの組み合わせ最適化問題は, そのエネルギー関数が (4.76) 式の形で書き表せることが非常に多い．数理科学では**「式の形が同じならば, そこから得られる結論 (現象) は同じである」**という信念があるので, 組み合わせ最適化問題に対し, イジング模型で用いられる多くの手法や概念を使うことができるようになるわけである．

そこで以下では, 典型的な最適化問題として知られる**巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem: TSP)** がイジング模型で記述するされること, この問題がイジング模型の最小エネルギー状態の探索と等価であることを見ていこう．ポイントは, 適切に変形を行うと, 巡回セールスマン問題の巡回路の長さが (4.76) 式で与えられるイジング模型のエネルギー関数で書けるという点である．この「ゴール」を気にしながら, 以下でその議論を追っていくことにしよう．

まず, 標準的な巡回セールスマン問題は 1 人のセールスマンが N 都市を巡回する際の「最小移動距離を与える巡回路」を求める問題として定式化される．具体的には, 各都市の名前を $m=A_1,A_2,\cdots,A_N$ とし, これらの都市を訪れる順番を $n=1,2,\cdots,N$ としますと, セールスマンが巡回する経路を特定することは, 対応関係:

$$f(n)=A_m,\ (n=1,2,\cdots,N, m=A_1,A_2,\cdots,A_N) \tag{4.77}$$

を 1 つ決めることに等しいことがわかる．ここで,

$$f(\underbrace{n}_{\text{何番目に訪れたか}}) = \underbrace{A_m}_{\text{訪れたのはどの都市か}}$$

と書くことで, セールスマンが n 番目に都市 A_m を訪れたことがわかるわけである．

この対応関係の規則に慣れるため, 図 15 のように $m=A_1,\cdots,A_5$ の計 5 都市に関する巡回路を考えてみよう．セールスマンは A_1 からスタートし, A_1 に戻ってくるものとする．このとき, 図 15 左側の「黒色」の経路を (4.77) 式で表すと

$$f(1)=A_1, f(2)=A_2, f(3)=A_3, f(4)=A_4, f(5)=A_5, f(6)=f(1)=A_1 \tag{4.78}$$

となるし, 右側の「赤色」の経路の場合には

$$f(1)=A_1, f(2)=A_3, f(3)=A_2, f(4)=A_4, f(5)=A_5, f(6)=f(1)=A_1 \tag{4.79}$$

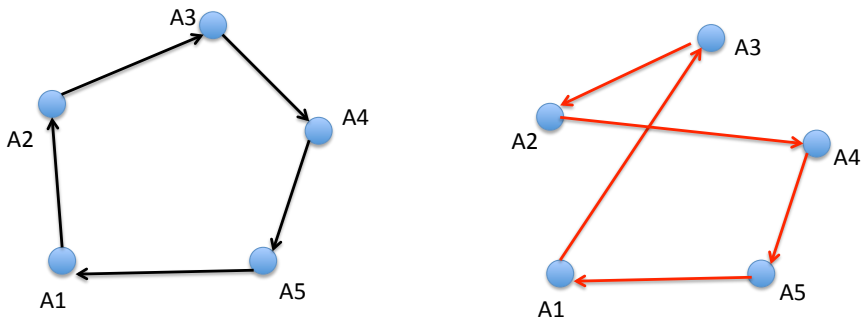


図 15: 5 都市 $(A_1, \cdots, A_5)$ の場合の例.

となることが直ちにわかる.

従って, 任意の 2 つの都市 A_k, A_l の間の距離を $d(A_k, A_l)$ で表すことにすれば, セールスマンがとる経路の全長は

$$D[f] = \sum_{i=1}^{N} d(f(i), f(i+1)) = \sum_{i=1}^{N} d(f(i), f(i-1)) \tag{4.80}$$

と書ける. ここで, 明らかに,

$$d(A_k, A_k) = 0 \,(\text{同一都市間の距離はゼロ}) \tag{4.81}$$

であり, さらに,

$$d(A_k, A_l) = d(A_l, A_k) \,(\text{都市間の距離はどちらを基準にとっても同じ}) \tag{4.82}$$

であることに注意しよう. また

$$f(N+1) = f(1) \qquad f(0) = f(N) \tag{4.83}$$

が成り立っているので, 上記 (4.80) 式は

$$\begin{aligned} D[f] &= \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{N} d(f(i), f(i+1)) + \sum_{i=1}^{N} d(f(i), f(i-1))\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha,\beta)\delta_{\alpha,f(i)}\delta_{\beta,f(i+1)} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha,\beta)\delta_{\alpha,f(i)}\delta_{\beta,f(i-1)} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha,\beta)t_{i,\alpha}(t_{i+1,\beta} + t_{i-1,\beta}) \equiv D[t] \end{aligned} \tag{4.84}$$

となる. ただし, ここでは見通しを良くするため, 上式の第 1 行目から第 2 行目への変形で

$$t_{i,\alpha} = \delta_{\alpha,f(i)} \tag{4.85}$$

なる変数 $t_{i,\alpha}$ を導入してある. ここに, $\delta_{x,y}$ はクロネッカのデルタ, すなわち

$$\delta_{a,b} = \begin{cases} 1 & (a = b) \\ 0 & (a \neq b) \end{cases} \tag{4.86}$$

である. 従って, 具体的に図 15 に示した 5 都市の場合 ($N = 5$) で上記 $D[t]$ を書き出してみると

$$
\begin{aligned}
D[t] &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5}\sum_{\alpha=A_1}^{A_5}\sum_{\beta=A_1}^{A_5} d(\alpha,\beta)t_{i,\alpha}(t_{i+1,\beta}+t_{i-1,\beta}) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5}\Bigg\{d(A_1,A_2)t_{i,A_1}(t_{i+1,A_2}+t_{i-1,A_2})+d(A_1,A_3)t_{i,A_1}(t_{i+1,A_3}+t_{i-1,A(3)})+\cdots \\
&+ \cdots + d(A_5,A_4)t_{i,A_5}(t_{i+1,A_4}+t_{i-1,A_4})\Bigg\} \\
&= \frac{1}{2}\Bigg\{d(A_1,A_2)t_{1,A_1}(t_{2,A_2}+t_{5,A_2})+d(A_1,A_2)t_{2,A_1}(t_{3,A_2}+t_{1,A_2})+d(A_1,A_2)t_{3,A_1}(t_{4,A_2}+t_{2,A_2}) \\
&+ d(A_1,A_2)t_{4,A_1}(t_{5,A_2}+t_{3,A_2})+d(A_1,A_2)t_{5,A_1}(t_{1,A_2}+t_{4,A_2}) \\
&+ \cdots + d(A_5,A_4)t_{1,A_5}(t_{2,A_4}+t_{5,A_4})+d(A_5,A_4)t_{2,A_5}(t_{3,A_4}+t_{1,A_4})+d(A_5,A_4)t_{3,A_5}(t_{4,A_4}+t_{2,A_4}) \\
&+ d(A_5,A_4)t_{4,A_5}(t_{5,A_4}+t_{3,A_4})+d(A_5,A_4)t_{5,A_5}(t_{1,A_4}+t_{4,A_4})\Bigg\} \qquad (4.87)
\end{aligned}
$$

となる. 上式では「$\cdots$」を用いてだいぶ省略して書いたのだが, 全てを省かないで書くとなると, この右辺には $5\times5\times5 = 125$ 項から $d(A_1,A_1) = \cdots = d(A_5,A_5) = 0$ を含む $5\times5 = 25$ 項を引いた計 $125 - 25 = 100$ もの項が現れることになるので, 書くだけで困難である.

さて, 具体的に図 15 左側の「黒色」経路の場合には

$$t_{1,A_1} = t_{2,A_2} = t_{3,A_3} = t_{4,A_4} = t_{5,A_5} = 1 \qquad (4.88)$$

で残りの全ての $t_{i,\alpha}$ はゼロとなるので巡回路長は

$$D[t] = d(A_1,A_2)+d(A_2,A_3)+d(A_3,A_4)+d(A_4,A_5)+d(A_5,A_1) \qquad (4.89)$$

となり, 図 15 右側の「赤色」の経路の場合には

$$t_{1,A_1} = t_{2,A_3} = t_{3,A_2} = t_{4,A_4} = t_{5,A_5} = 1 \qquad (4.90)$$

であり, 残りの全ての $t_{i,\alpha}$ はゼロとなるので

$$D[t] = d(A_1,A_3)+d(A_3,A_2)+d(A_2,A_4)+d(A_4,A_5)+d(A_5,A_1) \qquad (4.91)$$

となることが直ちにわかる. 従って, 具体的に都市間の距離 $d(A_k,A_l)$ の全てが与えられれば, (4.89)(4.91) のいずれが「より短いか」を判定することができることになる.

さて, この変数 $t_{i,\alpha}$ の各々が好き勝手に 0 または 1 をとることができるものとすると, $D[t]$ の最小値を与える解は自明であり, 全ての i と α に対し

$$t_{i,\alpha} = 0 \qquad (4.92)$$

とすればよいことがわかる. このとき (4.87) 式から, $D[t]$ の最小値はゼロであることも直ぐにわかる.

しかし, よく考えてみると, この解は決して「許されない」解であることもわかる. なぜならば, もしも (4.92) 式が成り立てば

$$t_{1,A_1}+t_{1,A_2}+t_{1,A_3}+t_{1,A_4}+t_{1,A_5} = 0 \qquad (4.93)$$

も成立することになるが, これは「セールスマンがどの都市からもスタートできない」ことを意味するので, そもそも巡回セールスマン問題が定義できない. また, 同様に (4.92) を認めると

$$t_{2,A_1} + t_{2,A_2} + t_{2,A_3} + t_{2,A_4} + t_{2,A_5} = 0 \tag{4.94}$$

も満たされますが, 「セールスマンは 2 番目に必ず $A_1, \cdots, A_5$ の都市のうちのいずれかを訪れる」ので, これはその事実に反することになってしまう. 従って, (4.93) 式は

$$t_{1,A_1} + t_{1,A_2} + t_{1,A_3} + t_{1,A_4} + t_{1,A_5} = 1 \tag{4.95}$$

のように修正するべきだし (セールスマンは必ず 1 都市からスタートする), (4.94) 式も

$$t_{2,A_1} + t_{2,A_2} + t_{2,A_3} + t_{2,A_4} + t_{2,A_5} = 1 \tag{4.96}$$

のように正されるべきである (セールスマンは 2 番目の訪問地として必ずどこかの都市を訪れる).

このように, セールスマンのとるべき行動として必ず満たされなければならない条件はいくつかあり, そのような条件を満たさないような解は, いくら小さな巡回路長 $D[t]$ を与えるとしても, 最適解として採用することはできない.

そのような条件を具体的に示すと, それは今の場合 3 通りあって

(I) <u>i 番目に同時に 2 つ以上の都市を訪れることがない</u>

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha=A_1}^{A_N} \sum_{\beta \neq \alpha} t_{i,\alpha} t_{i,\beta} = 0 \tag{4.97}$$

(II) <u>どの都市も 2 度以上訪れることがない</u>

$$\sum_{\alpha=A_1}^{A_N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} t_{i,\alpha} t_{j,\alpha} = 0 \tag{4.98}$$

(III) <u>全ての都市を必ず 1 度は訪れる</u>

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha=A_1}^{A_N} t_{i,\alpha} = N \tag{4.99}$$

です.

そこで, これら 3 つの条件を「ものすごく大きな係数」$K, L, M (\gg 1)$ を用いて $D[t]$ に加えたものをエネルギー関数 $E[t]$ とすると

$$\begin{aligned} E[t] &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha=A_1}^{A_N} \sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha, \beta) t_{i,\alpha} (t_{i+1,\beta} + t_{i-1,\beta}) \\ &+ K \sum_{i=1} \sum_{\alpha=A_1}^{A_N} \sum_{\beta \neq \alpha} t_{i,\alpha} t_{i,\beta} + L \sum_{\alpha=A_1}^{A_N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} t_{i,\alpha} t_{j,\alpha} + M \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha=A_1}^{A_N} t_{i,\alpha} - N \right)^2 \end{aligned} \tag{4.100}$$

となりますが, K, L, M がものすごく大きいため, **条件 (I)(II)(III) を満たさないような解** $t = \{t_{i,\alpha}\}$ **はエネルギー関数** $E[t]$ **をとてつもなく大きくしてしまうため, 自動的に最小エネルギーを与える解の候補から外される**ことになる.

さて, (4.100) 式を少し変形すると

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha,\beta)(\delta_{j,i+1}+\delta_{j,i-1})t_{i,\alpha}t_{j,\beta} \\ &+ K\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} t_{i,\alpha}t_{j,\beta}\delta_{i,j}(1-\delta_{\alpha,\beta}) \\ &+ L\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} \delta_{\alpha,\beta}(1-\delta_{i,j})t_{i,\alpha}t_{j,\beta} \\ &+ M\left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N} t_{i,\alpha}-N\right)\left(\sum_{j=1}^{N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} t_{j,B}-N\right) \\ &\equiv -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} I_{i\alpha,j\beta}\, t_{i,\alpha}t_{j,\beta} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N} B_{i\alpha}t_{i,\alpha}+C_0 \end{aligned} \tag{4.101}$$

となる. ここで, 見通しを良くするため

$$I_{i\alpha,j\beta} \equiv -[d(\alpha,\beta)(\delta_{j,i+1}+\delta_{j,i+1})+2K\delta_{i,j}(1-\delta_{\alpha,\beta})+2L\delta_{\alpha,\beta}(1-\delta_{i,j})+2M] \tag{4.102}$$

$$B_{iA} \equiv 2MN \tag{4.103}$$

$$C_0 \equiv MN^2 \tag{4.104}$$

と置いた.

さて, ここまでの話では, 変数 $t_{i,\alpha}$ として $0, 1$ の 2 値を用いてきたが, ± 1 のイジングスピンに直すには単純に, 全ての i, α で変換

$$t_{i,\alpha} = \frac{1}{2}(\sigma_{i,\alpha}+1) \tag{4.105}$$

をほどこせば良く, この変換によって得られるエネルギー関数は

$$E[\sigma] = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} J_{i\alpha,j\beta}\,\sigma_{i,\alpha}\sigma_{j,\alpha} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=A_1}^{A_N} h_{i,\alpha}\sigma_{i,\alpha}+C \tag{4.106}$$

$$J_{i\alpha,j\alpha} \equiv \frac{1}{8}I_{i\alpha,j\alpha} \tag{4.107}$$

$$h_{i,\alpha} \equiv MN - \frac{1}{2}\left[\sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha,\beta)+(K+L)(N-1)+MN^2\right] \tag{4.108}$$

$$C \equiv MN^2 - MN^3 + \frac{1}{4}\left[N\sum_{\alpha=A_1}^{A_N}\sum_{\beta=A_1}^{A_N} d(\alpha,\beta)+(K+L)N^2(N-1)+MN^4\right] \tag{4.109}$$

となる. (4.106) 式で記述されるエネルギー関数は我々が既にみたイジング模型のエネルギー関数 (4.76) と同じ形をしている. 従って, **巡回セールスマン問題はイジング模型のエネルギー関数の最小エネルギー状態を求める問題と等価**であることが示せた.

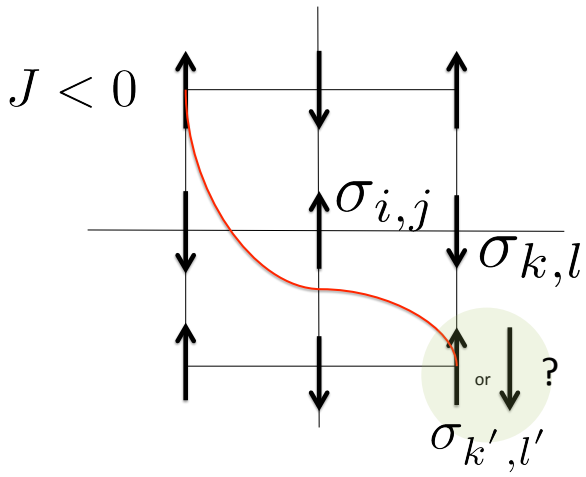


図 16: ほとんど全てのスピンがつながっている場合の反常磁性体の場合, 特定のスピンがどちらを向いたら良いかがわからなくなる状況が生じる (フラストレーション).

さて, (4.102)(4.107) より, $J_{i\alpha,j\alpha} < 0$ ですから, これは図 14(右) に見た「反強磁性体」である. 図 14 では, エネルギー最小を与える各スピンの向きは, 隣接するスピンと互いに反対向きになればよく, これはある意味「自明」であった. なので, エネルギー関数が (4.106) で与えられる巡回セールスマン問題の最小エネルギーを与えるスピンの配列も自明なのではないか, と思えてくる. しかし, 残念ながら, これは全く自明ではない. というのも, 図 14(右) に示したイジング模型が正方格子上で定義され, 「最近接スピン対のみ」に相互作用がある一方, エネルギー関数が (4.106) では「全てのスピンが相互作用」しています. 従って, 図のように, 左上のスピンとスピン $\sigma_{k',l'}$ に新たな相互作用 (図では赤線) を 1 本追加すると, それまで上を向けば良かったスピン $\sigma_{k',l'}$ は上を向いたら良いのか下を向いたら良いのかが全くわからなくなる. このような効果を「フラストレーション」と呼ぶが, こうしたフラストレーションを持つエネルギー関数の場合, 最小エネルギー状態を探索することが極めて難しくなる. その際, **量子アニーリング**などの量子計算が有効になるわけである.

4.4 線形計画と統計力学: 多制約ナップサック問題

統計力学の方法は, いくつかの典型的最適化問題に対し, そのシステムパラメータのコストに対する影響を調べる際にも有効である. つまり, 統計力学を用いることで, 最適化問題の**感度分析**を行うことができる. ここではその手続きと結果の一部を紹介しょう.

最適化問題の中でも多制約の**ナップサック問題**は代表的な線形計画問題の一つであり, NP 困難な問題としても知られている. この問題は次のように定式化される.

$$\max_{\boldsymbol{s}} U(\boldsymbol{s}),\ \ U \equiv \sum_{i=1}^{N} s_i,\ \ s_i \in \{1,0\} \tag{4.110}$$

$$\text{subject to} \sum_{i=1}^{N} a_{ki} s_i \leq b_k,\ \ k = 1, \cdots, K \tag{4.111}$$

つまり, 与えられた複数個の線形な制約のもとで, できる限りナップサックの中に入るアイテム $s_i = 1$ の個数を増やしたい. 言い換えれば, (4.111) 式のもとで, コスト U を最大化することが

ここでの問題である．この問題は先にみた, 2 つのスピンの計 $2^2 = 4$ 状態の最適化: $E(s_1, s_2) = -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2$ と比べて圧倒的に難しいことはもちろんのこと, その難しさが制約数とともに, どのように変化するかなど, この問題を多角的に検討すればするほど, 次から次へと多くの疑問が生まれてくる．そうした疑問に部分的にではあるが統計力学は答えを出すことができることを示すのが, この節の主な目標である．なお, 多くの受講生にとって, 下記に載せる一連の解析方法は自身の研究には直接関係せず, また, 必要でもないであろう．その場合には解析結果だけをみて次に進んでもよいかもしれない．しかし, ここでの手法を使って実際に自分で研究を進めたいと考える者は, 下記の**式変形の一行一行を, 紙と鉛筆を用意して面倒がらずに追ってみることが不可欠**である．

4.4.1 イジングスピンでの定式化

ここでは多制約ナップサック問題について統計力学に基づく解析を行うため, 問題をイジングスピンの言葉で書き直しておく．具体的には

$$s_i = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i),\ \sigma_i = \{-1, +1\} \tag{4.112}$$

なる変数変換を行う．また, アイテム数が十分に大きな極限を考えるため,

$$a_{ki} = \frac{1}{2} + \xi_{ki},\ \ \xi_{ki} \sim \mathcal{N}(0, \delta^2) \tag{4.113}$$

とし, 簡単のため, $b_k = b\,(\forall_k)$ とする[8]．このもとで

$$\sum_{i=1}^{N} a_{ki}s_i - b = \frac{N}{4} - b + \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \frac{1}{2}\sum_i (1 + \sigma_i)\xi_{ki} \tag{4.114}$$

が得られる．ここで, 上式右辺の第 3 項までは $\mathcal{O}(N)$ の量であるが, ξ_{ki} のランダム性により, 制約に本質的な意味を持たせる右辺最終稿は $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ であり, $N \to \infty$ の極限で落ちてしまう．そこで, 制約が本質的な部分がこの極限で落ちないためには, 残りの 3 項の和がゼロ, すなわち

$$\frac{1}{4}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i = b - \frac{N}{4} \tag{4.115}$$

が成り立つことが必要である．上式左辺は, ナップサックに入るアイテムの割合を表すことに注意する．このとき, $b > N/4$ ならば, 多くのアイテムをナップサックの中に入れることができる．逆に, $b < N/4$ であれば, ほとんどのアイテムはナップサックの中に入れない．従って, この両者は計画問題としては比較的易しく, 我々がここで調べるべきケースは「マージナル」な

$$b = \frac{N}{4} \tag{4.116}$$

の場合である．このとき, $\sum_{i=1}^{N}\sigma_i = 0$ となるから, ほぼ半々のアイテムがナップサックの内外に分かれることになる．よって, 次の秩序変数 (あるいはコスト関数) を導入する．

$$M = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{4.117}$$

この M は $\mathcal{O}(1)$ の量となることに注意されたい．従って, (4.116)(4.117) 式を考慮すると, 制約の不等式は次のように書き直すことができる．

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{(1 + \sigma_i)\xi_{ki}}{\sqrt{N}} + \frac{M}{2} \le 0,\ k = 1, \cdots, K \tag{4.118}$$

[8] $\mathcal{N}(a, b)$ と書いた際に, これは平均 a, 分散 b の正規分布を意味するものとする．

4.4.2 レプリカ法による解析: 感度分析

ここでは, 具体的にシステムの典型的な振る舞いを調べたい. このとき我々が注目するのは, 制約 (4.118) を全て満たすことのできる解 $\{\sigma_i\}$ の「場合の数 Ω」である. この場合の数 Ω は, 制約数を増加させるにつれて減少し, やがては 1 となるに違いない. そこで, 最大制約数 $K_{\max}$ を課した場合にコスト M はいかなる値を取るのか, という問題を Ω の振る舞いを介して考えることは自然であろう.

しかし, この Ω は制約数 K, アイテム数 N はもちろんのこと, 扱う問題の種類: $\{\xi_{ki}\}$ にも依存するので, これら $\{\xi_{ki}\}$ についての平均操作 $\ll \cdots \gg$ を行う必要がある. 我々はアイテム数 N も制約数 K も十分大きい場合を考えており, こうした場合, ある一組の制約セット $\{\xi_{ki}\}$ に対して計算される Ω が Ω の様々な ξ_{ki} に関する平均値 $\ll \Omega \gg$ と同じになれば都合が良い. そのような性質を持つ量を**自己平均量**と呼ぶが, 残念ながら, Ω は自己平均ではなく, その対数をとった $\log \Omega$ がこの場合の自己平均量である. つまり,

$$\Omega \text{ (一つの実現値 } \{\xi_{ki}\} \text{ に対して計算したもの)} \neq \ll \Omega \gg \tag{4.119}$$

であるが,

$$\log \Omega \text{ (一つの実現値 } \{\xi_{ki}\} \text{ に対して計算したもの)} = \ll \log \Omega \gg \tag{4.120}$$

である. 我々が興味のあるのは, N, K が十分大きな大自由度極限における問題の典型的振る舞いであるから, $\ll \log \Omega \gg$ を計算する必要がある. しかし, 実際にこの計算は難しく, この平均を直接解析的に計算することのできた人間はまだ一人として居ない. 一方, $\ll \Omega \gg$ もしくは, Ω のモーメントの平均 $\ll \Omega^n \gg$ は比較的容易である. この事実から, 展開式:

$$\Omega^n \simeq 1 + n \log \Omega \tag{4.121}$$

に基づき, 次のレプリカ法:

$$\ll \log \Omega \gg = \lim_{n \to 0} \frac{\ll \Omega^n \gg -1}{n} \tag{4.122}$$

を用いて $\ll \Omega \gg$ を間接的に実行しよう. 解の場合の数 Ω の n 次のモーメントは

$$\begin{aligned}
\Omega^n &= \prod_{i,\alpha} \mathrm{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \prod_{k,\alpha} \Theta\left(-\sum_i \frac{(1+\sigma_i^\alpha)\xi_{ki}}{\sqrt{N}} - \frac{M_\alpha}{2} \right) \\
&= \prod_{i,\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dM_\alpha \mathrm{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \prod_\alpha \delta(\sqrt{N} M_\alpha - \sum_i \sigma_i^\alpha) \\
&\times \prod_{k,\alpha} \Theta\left(-\sum_i \frac{(1+\sigma_i^\alpha)\xi_{ki}}{\sqrt{N}} - \frac{M_\alpha}{2} \right)
\end{aligned} \tag{4.123}$$

と書ける. ここに, k は制約についてのインデックスであり, $k = 1, \cdots, K$ をとり, α は n 個の「レプリカ」を導入したことにより, レプリカのひとつ一つを識別するためのインデックスであり, $\alpha = 1, \cdots, n$ をとる. また, $\Theta(x)$ はステップ関数:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \tag{4.124}$$

である. また,

$$\mathrm{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}}(\cdots) = \sum_{\sigma_1^1 = \pm 1} \sum_{\sigma_2^1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N^n = \pm 1} (\cdots) \tag{4.125}$$

を定義したことに注意しておこう.

次に ξ_{ki} についての平均操作を実行する. ステップ関数の積分表示:

$$\Theta(a-X)=\int_{-a}^{\infty}\frac{dY}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dZ\exp[iZ(Y+X)] \tag{4.126}$$

を用いると

$$\begin{aligned}
&\prod_{k,\alpha}\Theta\left(-\sum_i\frac{(1+\sigma_i^\alpha)\xi_{ki}}{\sqrt{N}}-\frac{M_\alpha}{2}\right)\\
=&\prod_{k,\alpha}\int_{\frac{M_\alpha}{2}}^{\infty}\frac{d\lambda_\alpha^k}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dx_\alpha^k\exp\left[i\sum_{\alpha,k}x_\alpha^k\left(\lambda_\alpha^k+\sum_{i,k}\frac{(1+\sigma_i^\alpha)}{\sqrt{N}}\xi_{ki}\right)\right]\\
=&\prod_{k,\alpha}\int_{\frac{M_\alpha}{2}}^{\infty}\frac{d\lambda_\alpha^k}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dx_\alpha^k\exp\left[i\sum_{\alpha,k}x_\alpha^k\lambda_\alpha^k+i\sum_{k,i}\xi_{ki}\sum_\alpha x_\alpha\frac{(1+\sigma_i^\alpha)}{\sqrt{N}}\right]
\end{aligned} \tag{4.127}$$

となる. 従って, ξ_{ki} ごと分布:

$$P(\xi_{ki})=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta}\exp\left[-\frac{\xi_{ki}^2}{2\delta^2}\right] \tag{4.128}$$

で平均すると

$$\prod_{k,i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\xi_{ki}}{\sqrt{2\pi}\delta}\exp\left[-\frac{\xi_{ki}^2}{2\delta^2}+i\xi_{ki}\sum_\alpha\frac{(1+\sigma_i^\alpha)}{\sqrt{N}}x_\alpha^k\right]=\prod_k\exp\left[-\frac{\delta^2}{2}\sum_i\left(\sum_\alpha\frac{(1+\sigma_i^\alpha)}{\sqrt{N}}x_\alpha^k\right)^2\right] \tag{4.129}$$

が得られるが

$$\left(\sum_\alpha\frac{(1+\sigma_i^\alpha)}{\sqrt{N}}x_\alpha^k\right)^2=\frac{1}{N}\left\{\sum_\alpha(x_\alpha^k)^2\sum_i(1+\sigma_i^\alpha)^2+2\sum_\alpha\sum_{\beta<\alpha}x_\alpha^kx_\beta^k\sum_i(1+\sigma_i^\alpha)(1+\sigma_i^\beta)\right\} \tag{4.130}$$

であり, $N\to\infty$ の大自由度極限で

$$\begin{aligned}
\sum_i(1+\sigma_i^\alpha)^2&=N+2\sum_i\sigma_i^\alpha+\sum_i(\sigma_\alpha)^2\\
&=N\left\{1+\frac{2}{\sqrt{N}}M_\alpha+1\right\}\underbrace{=}_{N\to\infty}2N
\end{aligned} \tag{4.131}$$

$$\begin{aligned}
\sum_i(1+\sigma_i^\alpha)(1+\sigma_i^\beta)&=\sum_i(1+\sigma_i^\alpha+\sigma_i^\beta+\sigma_i^\alpha\sigma_i^\beta)\\
&=N\left\{1+\frac{1}{\sqrt{N}}(M_\alpha+M_\beta)+q_{\alpha\beta}\right\}\underbrace{=}_{N\to\infty}N(1+q_{\alpha\beta})
\end{aligned} \tag{4.132}$$

となるから

$$\left(\sum_\alpha\frac{(1+\sigma_i^\alpha)}{\sqrt{N}}x_\alpha^k\right)^2=2\sum_\alpha(x_\alpha^k)^2+2\sum_\alpha\sum_{\beta<\alpha}(1+q_{\alpha\beta})x_\alpha^kx_\beta^k \tag{4.133}$$

が得られる．ここに, $q_{\alpha\beta}$ は次式で定義される秩序変数 (スピングラス秩序変数) である．

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N}\sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \tag{4.134}$$

さて, ここまでの解析はレプリカ法の妥当性を除けば「厳密」である[9]．しかし, ここから先に計算を進めるためには, $q_{\alpha\beta}$ に関して仮定を入れる必要がある．具体的には, $q_{\alpha\beta}$ の α, β 依存性を無視したレプリカ対称解:

$$q_{\alpha\beta} = q \ \ (\forall_{\alpha,\beta}) \tag{4.135}$$

を仮定して議論を進めることにする．この仮定のもとで

$$\begin{aligned} &\ll \prod_{k,\alpha}\Theta\left(-\sum_i \frac{(1+\sigma_i^\alpha)\xi_{ki}}{\sqrt{N}} - \frac{M_\alpha}{2}\right) \gg \\ = &\prod_{k,\alpha}\int_{\frac{M_\alpha}{2}}^\infty \frac{d\lambda_\alpha^k}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty dx_\alpha^k \exp\left[i\sum_{\alpha,k} x_\alpha^k\lambda_\alpha^k - \frac{\delta^2}{2}\sum_{\alpha,k}(x_\alpha^k)^2 - \delta^2(1+q)\sum_{\alpha,k}\sum_{\beta<\alpha} x_\alpha^k x_\beta^k\right] \end{aligned} \tag{4.136}$$

となるが, 指数関数内の最終項はハバード・ストラトノビッチ変換と呼ばれる恒等式:

$$\mathrm{e}^{A^2} = \int_{-\infty}^\infty Dx\,\mathrm{e}^{\sqrt{2}xA},\ \ Dx \equiv \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \tag{4.137}$$

を用いると

$$\begin{aligned} &\exp\left[-\delta^2(1+q)\sum_{\alpha,k}\sum_{\beta<\alpha} x_\alpha^k x_\beta^k\right] \\ = &\prod_k \exp\left[\frac{\delta^2(1+q)}{2}\sum_\alpha (x_\alpha^k)^2\right]\exp\left[\left\{-i\delta\sqrt{\frac{1+q}{2}}\sum_\alpha x_\alpha^k\right\}^2\right] \\ = &\prod_k \exp\left[\frac{\delta^2(1+q)}{2}\sum_\alpha (x_\alpha^k)^2\right]\int_{-\infty}^\infty Dt_k \exp\left[-i\delta t_k\sqrt{1+q}\sum_\alpha x_\alpha^k\right] \end{aligned} \tag{4.138}$$

となるから

$$\begin{aligned} &\ll \prod_{k,\alpha}\Theta\left(-\sum_i \frac{(1+\sigma_i^\alpha)\xi_{ki}}{\sqrt{N}} - \frac{M_\alpha}{2}\right) \gg \\ = &\left\{\int_{\frac{M}{2}}^\infty \frac{d\lambda_\alpha}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty dx_\alpha \int_{-\infty}^\infty Dt \exp\left[-\frac{\delta^2(1-q)}{2}\sum_\alpha x_\alpha^2 + i\sum_\alpha(\lambda_\alpha - \delta t\sqrt{1+q})\sum_\alpha x_\alpha\right]\right\}^K \\ = &\left[\int_{-\infty}^\infty Dt\left\{\int_{\frac{M}{2}}^\infty \frac{d\lambda}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty dx \exp\left[-\frac{\delta^2(1-q)}{2}x^2 + i(\lambda - \delta t\sqrt{1+q})x\right]\right\}^n\right]^K \end{aligned} \tag{4.139}$$

[9] 整数 n 個のレプリカを導入し, 最終的に $n \to 0$ の極限操作を行うことは, かなり乱暴な議論であって, 今のところ数学的な裏付けがあるわけではない．

が得られるが, x についてのガウス積分を実行すると, 結局

$$
\begin{aligned}
&\ll \prod_{k,\alpha} \Theta\left(-\sum_i \frac{(1+\sigma_i^\alpha)\xi_{ki}}{\sqrt{N}} - \frac{M_\alpha}{2}\right) \gg \\
=\ & \left[\int_{-\infty}^{\infty} Dt \left\{\int_{\frac{M}{2}}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi}\sqrt{\frac{2\pi}{\delta^2(1-q)}}\exp\left[-\frac{(\lambda-\delta t\sqrt{1+q})^2}{2\delta^2(1-q)}\right]\right\}^n\right]^K \\
=\ & \left[\int_{-\infty}^{\infty} Dt \left\{H\left(\frac{M/2\delta - t\sqrt{1+q}}{\sqrt{1-q}}\right)\right\}^n\right]^K \\
\simeq\ & \exp\left[K\log\int_{-\infty}^{\infty} Dt\left\{1+n\log H\left(\frac{M/2\delta - t\sqrt{1+q}}{\sqrt{1-q}}\right)\right\}\right] \\
\simeq\ & \exp\left[nN\alpha\int_{-\infty}^{\infty} Dt\ \log H\left(\frac{M/2\delta - t\sqrt{1+q}}{\sqrt{1-q}}\right)\right]
\end{aligned}
\tag{4.140}
$$

となる. ここで, $\varepsilon \ll 1$ に対して

$$
X^\varepsilon \simeq 1+\varepsilon\log X,\ \ \log(1+\varepsilon)\simeq 1+\varepsilon \tag{4.141}
$$

を使い,

$$
\alpha \equiv \frac{K}{N} \tag{4.142}
$$

を定義したことに注意されたい. つまり, ここでは $K, N\to\infty$ のもとで α が $\mathcal{O}(1)$ に保たれる「大自由度極限」を考えることになる. また, $H(x)$ は補誤差関数であり, ここでは

$$
H(x) = \int_x^\infty Dz,\ \ Dz \equiv \frac{dz}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \tag{4.143}
$$

で定義した.

さて, ここまでに導入した秩序変数の関係を逐次デルタ関数で取り込んできたが, この部分も具体的に積分表示すると計算を進めることができる. デルタ関数の積分表示は

$$
\delta(X-a) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dZ}{2\pi}\exp[iZ(X-a)] \tag{4.144}
$$

で与えられるので, これを用いてレプリカ対称解のもとで

$$
\begin{aligned}
&\prod_\alpha\prod_{\beta<\alpha}\int_{\infty}^{\infty} dq_{\alpha\beta}\delta(Nq_{\alpha\beta}-\sum_i\sigma_i^\alpha\sigma_i^\beta) \\
=\ & \prod_\alpha\prod_{\beta<\alpha}\int_{\infty}^{\infty} dq_{\alpha\beta}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\hat{q}_{\alpha\beta}}{2\pi}\exp\left[\frac{iNn(1-n)q\hat{q}}{2} - i\hat{q}\sum_i\sigma_i^\alpha\sigma_i^\beta\right]
\end{aligned}
\tag{4.145}
$$

となり, 同様にして

$$
\prod_\alpha\int_{-\infty}^{\infty} dM_\alpha\delta(\sqrt{N}M_\alpha - \sum_i\sigma_i^\alpha) = \prod_\alpha\int_{-\infty}^{\infty} dM_\alpha\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\hat{M}_\alpha}{2\pi}\exp\left[in\sqrt{N}M\hat{M} - i\hat{M}\sum_i\sigma_i^\alpha\right] \tag{4.146}
$$

が得られるが, 上記指数部分の $in\sqrt{N}M\hat{M} - i\hat{M}\sum_i\sigma_i^\alpha$ は $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ の量であり, (4.145) 式の指数部が $\mathcal{O}(N)$ の量であるのに対し, $N\to\infty$ の大自由度極限では後にみる鞍点に効かないので, 以降では無視する.

そこで最後に

$$-i\hat{q} = \hat{q} \tag{4.147}$$

と変数変換し, 上式 (4.145) をまとめると

$$\begin{aligned}
& \prod_{\alpha}\prod_{\beta<\alpha}\int_{\infty}^{\infty} dq_{\alpha\beta}\int_{-\infty/i}^{\infty/i}\frac{d\hat{q}_{\alpha\beta}}{2\pi i}\exp\left[nN\frac{\hat{q}}{2}\right]\left\{\prod_{\alpha}\mathrm{Tr}_{\{\sigma_\alpha\}}\exp\left[\hat{q}\sum_{\alpha}\sum_{\beta<\alpha}\sigma^{\alpha}\sigma^{\beta}\right]\right\}^{N} \\
= & \prod_{\alpha}\prod_{\beta<\alpha}\int_{\infty}^{\infty} dq_{\alpha\beta}\int_{-\infty/i}^{\infty/i}\frac{d\hat{q}_{\alpha\beta}}{2\pi i}\exp\left[nN\frac{(q-1)\hat{q}}{2}\right]\left\{\prod_{\alpha}\mathrm{Tr}_{\{\sigma_\alpha\}}Dz\exp\left[z\sqrt{\hat{q}}\right]\right\}^{N} \\
= & \prod_{\alpha}\prod_{\beta<\alpha}\int_{\infty}^{\infty} dq_{\alpha\beta}\int_{-\infty/i}^{\infty/i}\frac{d\hat{q}_{\alpha\beta}}{2\pi i}\exp\left[nN\frac{(q-1)\hat{q}}{2}\right]\left[\int_{-\infty}^{\infty}Dz\left\{\sum_{\sigma=\pm1}\exp\left[z\sqrt{\hat{q}}\sigma\right]\right\}^{n}\right]^{N} \\
\underbrace{\simeq}_{N\to\infty,\, n\to 0} & \exp\left[Nn\left\{\frac{(q-1)\hat{q}}{2}+\int_{-\infty}^{\infty}Dz\log 2\cosh(z\sqrt{\hat{q}})\right\}\right]
\end{aligned} \tag{4.148}$$

となる.

従って, 以上 (4.140)(4.148) をまとめると

$$\ll \Omega^n \gg = \exp(nNS) \tag{4.149}$$

が得られる. ここで, S は単位アイテム当たりのエントロピーであり

$$S = \frac{\hat{q}(q-1)}{2} + \alpha\int_{-\infty}^{\infty}Dt\,\log H\left(\frac{\frac{M}{2\delta}-t\sqrt{1+q}}{\sqrt{1-q}}\right) + \int_{-\infty}^{\infty}Dz\log 2\cosh(z\sqrt{\hat{q}}) \tag{4.150}$$

で与えられる.

4.4.3 解析結果

$\ll \Omega^n \gg$ は秩序変数についての積分を含むが, それが (4.149) 式のように評価できるためには, N が十分大きなときに, 積分が S の鞍点で代表することができなければならない. そこで, この「鞍点条件」を具体的に計算しよう. まずは, $\partial S/\partial\hat{q} = 0$ より

$$q = \int_{-\infty}^{\infty}Dz\tanh^2(z\sqrt{\hat{q}}) \tag{4.151}$$

であり, $\partial S/\partial q = 0$ より

$$\hat{q} = \frac{\alpha}{(1-q)\sqrt{1-q^2}\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}Dt\,\frac{(\frac{M}{2\delta}\sqrt{1+q}-2t)}{H\left(\frac{\frac{M}{2\delta}-t\sqrt{1+q}}{\sqrt{1-q}}\right)}\exp\left[-\frac{(\frac{M}{2\delta}-t\sqrt{1+q})^2}{2(1-q)}\right] \tag{4.152}$$

が得られる. 最後に最大制約数 $M = M_{\mathrm{opt}}$ では解の候補が 1 点のみ, すなわち, $\Omega = 1$ で $S = \log W = 0$ より

$$\alpha = \frac{\frac{\hat{q}(1-q)}{2} - \int_{-\infty}^{\infty}Dz\log 2\cosh(z\sqrt{\hat{q}})}{\int_{-\infty}^{\infty}Dt\log H\left(\frac{\frac{M}{2\delta}-t\sqrt{1+q}}{\sqrt{1-q}}\right)} \tag{4.153}$$

となる. 従って, 与えた M の値に対し, (4.151)(4.152)(4.153) を数値的に解き, 得られる α の値 $\alpha(M)$ が求める曲線を与えることになる. 結果を図 17 に載せる. この図より, 制約数 α の増加とともにコスト (ナップサックの中へ入る品物の個数) は減少し, その減少の仕方は, 制約の係数 ξ_{ki} の分散が小さければ小さなほど急峻である.

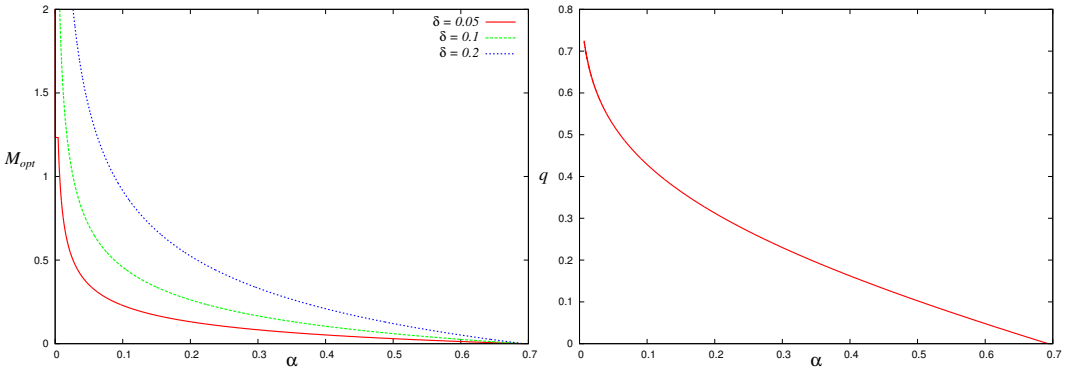


図 17: 重みの分散を $\delta = 0.05, 0.1, 0.2$ と変えた場合の最大コスト $M_{\rm opt}$ と制約数 α の関係 (左). 右は $\delta = 0.1$ の場合の秩序変数 q (スピングラス秩序変数) の制約数依存性.

4.5 参考: 量子アニーリング

前節までで最適化ツールとしてのシミュレーテッド・アニーリング (SA) を学んだ. これはマルコフ連鎖モンテカルロ法を組み合わせ最適化問題における解空間探索に適用するものであった. 十分高温でモンテカルロ法を実行すれば, 高温でのボルツマン因子に比例し, 全ての可能な状態が等確率で出現するが, 逆に低温では考える問題のエネルギー関数 (目的関数) の構造を反映し, 比較的低いエネルギー状態が高頻度で出現する. 従って, 高温から低温へと対象系を徐冷することで, エネルギー関数の大域的最小値を与える状態を, 生成される状態に含みつつ, 局所最小からの脱出の余地も残しながら, 探索空間を自律的に狭め, 最終的に温度ゼロで所望の大域的最小状態 (あるいはそれに近い解) を高確率で得ようとするのがこの方法である.

このように熱浴の温度を制御することで「熱揺らぎ」を有効に使う SA は, 組み合わせ最適化問題全般に対し, 目的関数を適切に導入しさえすれば, 変数の離散/連続のいかんによらず適用できるという柔軟性があることから, 多くの情報科学/工学的諸問題に用いられてきた.

このとき, 少しでも物理を勉強したことがあれば, 「量子力学的揺らぎ」を用いた別種の「徐冷」が構成できないかと考えることは自然なことであろう. この**量子アニーリング (QA)** は様々な場面で用いられている. この節では QA に関し, 簡単にもておくことにする. ここで考える QA は次のように構成される. 全系のハミルトニアン (エネルギー関数) $\hat{H}$ を次式のように, 最適化問題を表現する目的関数 $\hat{H}_{\text{古典}}$, 量子力学的状態遷移を引き起こし, かつ, 時間的に変化する部分 $\hat{H}(t)$ に分解する.

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{古典}} + \hat{H}(t)$$

ここで, 量子力学の従う世界では粒子の動きは**シュレーディンガー方程式**に従う. このとき, $\hat{H}(t = 0) \gg \hat{H}_{\text{古典}}$ の基底状態からシュレーディンガー方程式に従って系を時間発展させ, 各時刻で系の基底状態をたどりつつ, $\hat{H}(t \to \infty) \to 0$ で解くべき最適化問題の目的関数 $\hat{H}_{\text{古典}}$ の最小エネルギー状態へと断熱移行させることができれば, 所望の目的関数の最適解が得られることになる. これは量子ダイナミックスを用いた最適化であり, 熱浴の温度を制御することで構成される SA とは本質的に異なる方法である. 例えば, 次の量子スピン 1 個の問題:

$$\hat{H} \quad = \quad -h\hat{\sigma}^z - \Gamma\hat{\sigma}^x \tag{4.154}$$

を考えよう. ここに,

$$\hat{H}_{\text{古典}} = -h\hat{\sigma}^z, \hat{H}(t) = -\Gamma\hat{\sigma}^x$$

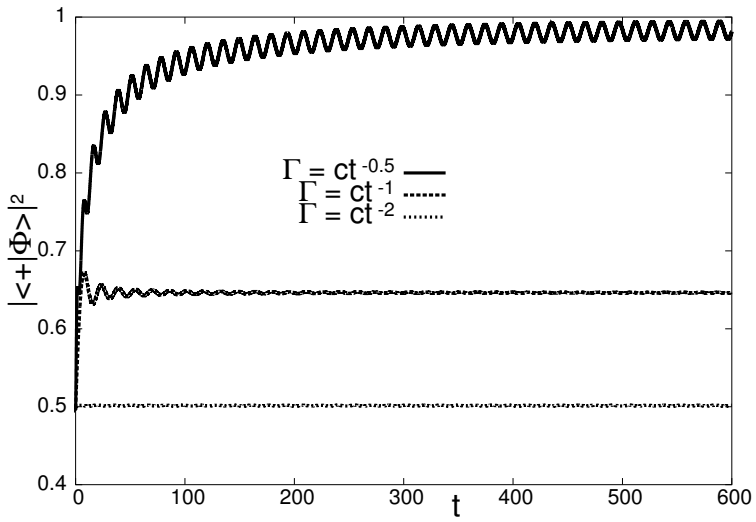


図 18: $\Gamma(t) = ct^{-2}, ct^{-1}, ct^{-1/2}$ の 3 通りで揺らぎを制御した場合に対し, 方程式 (4.155) の時間発展を $\hat{H}_{古典}$ の基底状態との重なり $|a(t)|^2$ でプロットした結果. ただし, $a(0) = b(0) = 1/\sqrt{2}$ と選んだ.

であり, $\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^z$ は量子化軸を z 方向にとった場合の**パウリ行列**:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

である. $\Gamma = 0$ の場合, このハミルトニアン (4.154) の固有状態 (ベクトル) は

$$|+\rangle = {}^t(1,0), |-\rangle = {}^t(0,1)$$

であり, それぞれ, 固有値 $-h, h$ が対応するが, その一方, $h/\Gamma \to 0$ の場合の固有状態は, もはやこの 2 つではなく,

$$(|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}, (|+\rangle - |-\rangle)/\sqrt{2}$$

であり, それぞれ, $-\Gamma, \Gamma$ が対応する固有値である. ハミルトニアンは Γ を介して時間に依存するが, パウリ行列 $\hat{\sigma}^x$ が射影演算子を用いて

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0,1) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1,0) = |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|$$

と書き直すことができることに注意すれば, 状態ベクトルの直交性から, $\langle+|+\rangle = 1, \langle-|+\rangle = 0$ なので

$$\hat{\sigma}_x|+\rangle = |+\rangle\langle-|+\rangle + |-\rangle\langle+|+\rangle = |-\rangle$$

等が成り立つから, 系のハミルトニアン (4.154) 式第 2 項は状態遷移:

$$|+\rangle \to |-\rangle, |-\rangle \to |+\rangle$$

を引き起こし, その遷移頻度が Γ で制御されることがわかる. この効果がここで言うところの「量子力学的揺らぎ」になるわけである. 従って, Γ を十分に大きい値から徐々に小さくしてゆき, 基底状態 $(|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$ から, 各時刻でのハミルトニアン (4.154) の基底状態をたどりつつ, かつ, 連続

的に確率振幅の中の $|+\rangle$ の割合を増やしてゆき, 最終的に $\hat{H}_{古典} \equiv -h\hat{\sigma}^z$ の基底状態, つまり, $|+\rangle$ に到着させることができれば, 所望の目的関数の最小エネルギー状態 $|+\rangle = {}^t(1,0)$ が高確率で得られることになる.

ここでもやはり, 量子揺らぎの制御, つまり, Γ をいかにゼロへ落とすかがポイントになる. これを具体的に簡単な数値実験で見てみよう. 系の時間発展は次のシュレーディンガー方程式:

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle,$$

すなわち,

$$a(t) = \langle +|\psi(t)\rangle, b(t) = \langle -|\psi(t)\rangle$$

に対して

$$i\hbar\frac{da(t)}{dt} = -ha(t) - \Gamma(t)b(t), \qquad i\hbar\frac{db(t)}{dt} = -\Gamma(t)a(t) + hb(t) \tag{4.155}$$

に従う. 初期状態を $h/\Gamma \to 0$ の基底状態である $|\Psi(0)\rangle\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$, つまり, $a(0) = b(0) = 1/\sqrt{2}$ と選び, $\Gamma(t) = ct^{-2}, ct^{-1}, ct^{-1/2}$ の 3 通りで揺らぎを制御した場合に対し, 方程式 (4.155) の時間発展を $\hat{H}_{古典}$ の基底状態との重なり

$$|a(t)|^2 = |\langle +|\psi(t)\rangle|^2$$

で観測した結果を図 18 に載せよう. この図より, $|a(t)|^2$ の時間変化は Γ の制御に依存し, 十分な時間の経過後に基底状態を高確率で得るには, Γ を $ct^{-1/2}$ よりも遅く徐冷しなければならないことがわかる.

課題 4：図 18 は方程式 (4.155) をオイラー差分で数値積分した結果である. 同じ方程式をルンゲ・クッタ法で数値積分し, 得られた結果を比較せよ. ルンゲ・クッタ法に関しては学部講義「カオス・フラクタル」の講義ノート:

`http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/ChaosFractal2014/ChaosFractal2014.html`

を参考にするとよい.

4.6 ミクロからマクロへの例: 理想気体の状態方程式

既に我々は [**ノイズを利用したアルゴリズム**] の平衡分布が**ボルツマン分布**であり, この分布を用いることで, 実験で測定できる様々な物理量がその「平均値」や「分散」として求めることができることを学んだ. ここでは実際に, この方法を用いて理想気体 (単原子分子, 分子数 N, 質量 m) の状態方程式を求めてみる. まずは, 理想気体では分子間に働く力を無視することができるので, そのエネルギー関数は

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N; \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_N) &= \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \\ &= \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} \end{aligned} \tag{4.156}$$

となる．ここで, U は分子間の位置によって定まるポテンシャルエネルギーであるが, 分子間に働く力がゼロなので, $U=0$ と置いた．また, 粒子 i の座標と運動量を $\boldsymbol{r}_i=(x_i,y_i,z_i), \boldsymbol{p}_i=(p_{ix},p_{iy},p_{iz})$ とした．

既にみた統計力学の処方箋に従うと, このエネルギー関数を温度 T で割って, それを指数関数の肩に乗せたものがボルツマン分布である．$\beta\equiv T^{-1}$ とすると, その分布の規格化因子 Z は

$$\begin{aligned} Z &= \int d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_N \int d\boldsymbol{p}_1\cdots d\boldsymbol{p}_N \exp\left[-\frac{\beta}{2m}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{p}_i^2\right] \\ &= V^N \int d\boldsymbol{p}_1 \exp\left[-\frac{\beta}{2m}(p_{1x}^2+p_{1y}^2+p_{1z}^2)\right]\cdots\int d\boldsymbol{p}_N \exp\left[-\frac{\beta}{2m}(p_{Nx}^2+p_{Ny}^2+p_{Nz}^2)\right] \end{aligned} \tag{4.157}$$

となる．ここで, $\int d\boldsymbol{r}_i = V$ であることを用いた．ここで, $d\boldsymbol{p}_i = dp_{ix}dp_{iy}dp_{iz}$ であることに注意して, ガウス積分:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-Ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \tag{4.158}$$

を用いると

$$Z = V^N(2\pi mT)^{3N/2} \tag{4.159}$$

が得られる．従って, 自由エネルギー F は

$$F = -T\log Z = -NT\log V - \frac{3NT}{2}\log(2\pi mT) \tag{4.160}$$

となる．よって, 気体の圧力は

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \tag{4.161}$$

で与えられることに注意する．これは次のように示すことができる．熱力学第1法則: $dQ=dU+pdV$, エントロピーの熱力学的定義: $dQ=TdS$ より, 直ちに

$$pdV = -dU + TdS = -d(U-TdS) = -dF \tag{4.162}$$

が成り立つ．よって

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \tag{4.163}$$

である．ここに自由エネルギー F は $F=U-TS$ で定義される．

従って, (4.161) 式から直ちに

$$p = \frac{NT}{V} \tag{4.164}$$

が得られる．今は簡単のため, ボルツマン定数 $k_B=1$ と置いていたが, これを復活させ, 上の結果で $T\to k_BT$ とし, $Nk_B=R$ で気体定数が定義されたことを思い出せば, 気体の状態方程式

$$pV = RT \tag{4.165}$$

が得られる．

このように, N 分子の位置と運動量という「ミクロな量」の同時分布から気体の圧力, 体積, 温度という「マクロな量」の間の関係を導くことができる．

5　デジタル画像の復元

ここからは画像データとして「2 次元デジタル画像」を用い, 確率的に劣化した画像から原画像を復元する状況を考える. まず, システムを「小磁石」で表すことからはじめ, ベイズ統計を介した最大事後確率推定という原画像データの推定法の下では, 問題が最適化問題として定式化されることを示す. また, 画像およびまた, 画像の修復アルゴリズムを平均場近似という考え方を用いて実時間で解く手続きについても詳しく見て行くことにする.

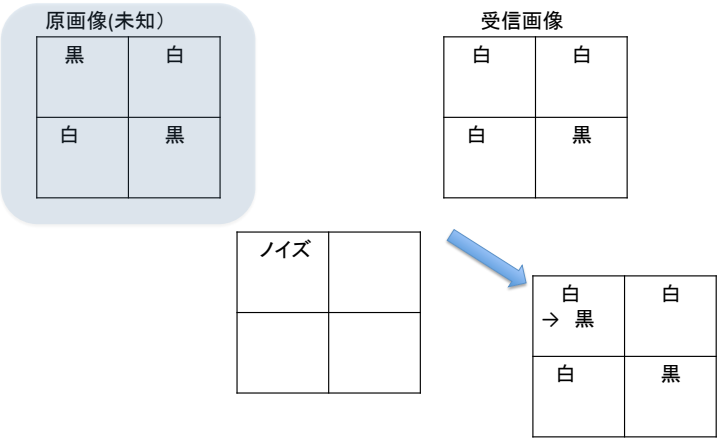


図 19: 画像復元. 未知の原画像を受信画像から当てる問題. 原画像の情報が無くても, この「確定的ノイズ」の「場所」がわかりさえすれば, 難なく推定できる. しかし, わからなければ, $2^4 = 8$ 通り全てのパターンが解となり得て, 前述の条件 (2) が満たされない「不良設定問題」となる.

まずは, 図 19 に画像復元の簡単な例を示そう. ここで, 原画像の情報が無くても, この「確定的ノイズ」の「場所」がわかりさえすれば, 難なく推定できることに注意すべきである. この例の場合, 「左上がノイズ」という情報がわかりさえすれば, 受信画像の該当する左上を「白」から「黒」に変えればよい. しかし, その情報がなければ, $2^4 = 8$ 通り全てのパターンが解となり得て, 所謂「不良設定問題」となる. この問題を解くためにはどうしたら良いかの一般的方法論としては「正則化理論」および「ベイズ推定」が代表的なものとして知られるが, 数学的に両者はほぼ等価である. ここでは後者について学習する.

5.1　原画像と劣化過程の「小磁石」による表現

本節で扱う 2 次元のデジタル画像は例えば次のような「白」と「黒」の**ピクセル (画素)** からなるものであるとする. さて, これらのデジタル画像を Xemacs 等のテキストエディタを用いて開いてみると

図 20: ここで扱うデジタル画像の例. 原画像 (左) と劣化画像 (右).

```
P1

200 200
11111111111110000
11111111111111111
.................
........
```

のようになっている. このファイルの先頭の P1 はこのファイルが白黒の 2 値画像であることを表すタグであり, 次の 200 200 はこの画像のサイズ, つまり, 図 20 が縦 200, 横 200 ピクセル (画素) の画像であることを示している. また, この次の行から始まる 11110000111111 ···· の並びが画像の本体を表している. もちろん, この画像は 2 値画像なので, この数の要素は 1 か 0 のみである.

さて, この各要素の「番地」を指定するにはいくつかやり方があるが, ここでは各画素の番地の決め方を「右上から左したに順を追って付ける」という約束にし, 先頭の 1 から数えて, i 番目の画素の値を ξ_i で表現することにする. 従って, この画素の値が 1 ならば

$$\xi_i = 1 \text{ (黒)} \tag{5.1}$$

であるし, 逆に 0 ならば

$$\xi_i = 0 \text{ (白)} \tag{5.2}$$

というわけである. もし, 上記ではなく, 2 次元座標 (x, y) を番地として, $\xi[x][y]$ で画素を指定してもよいが, この場合, i と x, y との関係は

$$i = x + Ly \tag{5.3}$$

$$x = i\%L \tag{5.4}$$

$$y = (i - x)/L \tag{5.5}$$

が成り立つことを覚えておくべきである. ここで, $a\%b$ は「a を b で割った余り」を表し, $x, y \in \{0, \cdots, L-1\}$ のとき, $i = 0, \cdots, L^2 - 1 = N$ となることに注意されたい.

ところで, このデジタル画像を「小磁石」の塊としてみる場合, 画素の値を 0, 1 であるとするのではなく, 「小磁石」の N 極と S 極に対応した 1 か −1 とする方が何かと都合がよい. つまり,

$$\xi_i = \begin{cases} +1 \ (\text{黒}) \\ -1 \ (\text{白}) \end{cases} \tag{5.6}$$

とする. これは全ての画素で $\xi_i \to 2\xi_i - 1$ なる変換を行えば良いだけの話ではあるが, この講義では式 (5.6) の表現を用いることにしよう.

さて, この画像がノイズを含む通信路を通過し, 各画素が独立に確率 p で反転する状況を考える. つまり,

$$\xi_i \to \begin{cases} -\xi_i & \text{確率}: p \\ +\xi_i & \text{確率}: 1-p \end{cases} \tag{5.7}$$

とする. この各ピクセルの劣化過程をグラフを用いて描くと図 21 のようなグラフとなる. これは

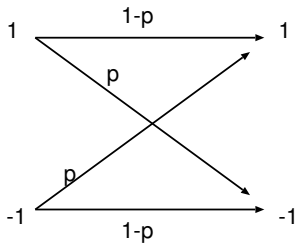


図 21: 2 元対称通信路.

また, 原画像

$$\{\xi\} \equiv (\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) \tag{5.8}$$

に対する劣化画像を

$$\{\tau\} \equiv (\tau_1, \tau_2, \cdots, \tau_N) \tag{5.9}$$

とすれば, 条件付き確率を用いて

$$P(\tau_i|\xi_i) = \frac{\mathrm{e}^{h^*\tau_i\xi_i}}{2\cosh(h^*)} \tag{5.10}$$

と表すことができることにも注意しよう. (5.7) 式の p, (5.10) 式の h^* の間には

$$p = \frac{\mathrm{e}^{-h^*}}{2\cosh(h^*)}, \ 1-p = \frac{\mathrm{e}^{h^*}}{2\cosh(h^*)} \tag{5.11}$$

つまり,

$$h^* = \frac{1}{2}\log\left(\frac{1-p}{p}\right) \tag{5.12}$$

が成り立つ. このような統計的性質を持つ通信路を情報理論では **2 元対称通信路 (Binary Symmetric Channel : BSC)** と呼ぶ.

各画素が独立にノイズからの影響を受けるとすれば, 原画像全体 $\{\xi\}$ は劣化画像全体 $\{\tau\}$ へ

$$P(\{\tau\}|\{\xi\}) = P(\tau_1|\xi_1) \times P(\tau_2|\xi_2) \times \cdots \times P(\tau_N|\xi_N) = \prod_{i=1}^{N} P(\tau_i|\xi_i) = \frac{\mathrm{e}^{h^*\sum_{i=1}^{N}\tau_i\xi_i}}{[2\cosh(h^*)]^N} \tag{5.13}$$

の確率で変化する. 以上が原画像及び劣化過程の「小磁石」を用いた表現方法である.

5.2 事前情報の導入と事後確率の計算

前節でデジタル原画像と劣化過程を「小磁石」— **スピン** — の言葉で表した．この確率システム — **スピン系** — に対し，ここからの問題は**劣化画像** $\{\tau\}$ **から原画像** $\{\xi\}$ **を言い当てる**ことである．もう少し明示的に書くと，原画像 $\{\xi\}$ の推定値を

$$\{\sigma\} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N) \tag{5.14}$$

とすると，我々はできるだけ $\{\sigma\}$ が $\{\xi\}$ に近くなるような戦略を選ぶべきであると言える．この目標下では当然 $\{\sigma\} = \{\xi\}$，つまり

$$\sigma_i \quad = \quad \xi_i \quad (\forall_i) \tag{5.15}$$

のとき，デジタル原画像の完全な復元ができたことになる．

さて，ここで条件付き確率 $P(\{\sigma\}|\{\xi\})$ を求めることができれば，画像を修復する上で有用であろう．この条件付き確率は，劣化画像 $\{\tau\}$ を観測した条件下での原画像の推定値が $\{\sigma\}$ である確率である．今の場合，この確率自体は直接手に入らないが，**ベイズの公式 (Bayes formula)** と呼ばれる関係式：

$$P(\{\sigma\}|\{\tau\}) \quad = \quad \frac{P(\{\tau\}|\{\tau\})P(\{\sigma\})}{\sum_\sigma P(\{\tau\}|\{\sigma\})P(\{\sigma\})} \tag{5.16}$$

を用いることにより，間接的に計算される．ここで，

$$\sum_\sigma (\cdots) \equiv \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} (\cdots) \tag{5.17}$$

と定義してあり，以降では断りの無い限り全てこの定義に従うものとする．

(5.16) 式の中に含まれる，$P(\{\tau\}|\{\sigma\})$ は**尤度 (likelihood)** と呼ばれる確率であり，「通信路の確率モデル」を表している．我々は通信路に関する統計的性質を事前に知ることはできないが，$0 \leq q \leq 1$ なるパラメータ q を用いて，各画素 i に関して

$$P(\tau_i = -\sigma_i|\sigma_i) \quad = \quad q, \quad P(\tau_i = \sigma_i|\sigma_i) = 1 - q \tag{5.18}$$

と仮定することは自然であろう．従って，(5.10)(5.12) 式で見たように

$$h \quad = \quad \frac{1}{2}\log\left(\frac{1-q}{q}\right) \tag{5.19}$$

を満たすような h を用いることにより，通信路の確率モデルである尤度 $P(\{\tau\}|\{\sigma\})$ は

$$P(\{\tau\}|\{\sigma\}) \quad = \quad \frac{\mathrm{e}^{h\sum_{i=1}^N \tau_i\sigma_i}}{[2\cosh(h)]^N} \tag{5.20}$$

のように一般的に書くことができる．

一方，$P(\{\sigma\})$ は**事前分布 (prior distribution)** と呼ばれる「原画像の確率モデル」である．原画像がどのような統計的性質を持つのか，我々は知る由もないが，例えば，図 20 のような画像を見ると，画像の局所的には同じ色の画素を取っていることが見て取れるであろう．これは図 20 にかかわらず，どの種類の画像であっても，多かれ少なかれこのような一般的性質を持っていることが予想される．従って，次のように事前分布を選ぶことができる．

$$P(\{\sigma\}) \quad = \quad \frac{\mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j}} \tag{5.21}$$

ここで, $J > 0$ であり, 上記確率分布に含まれる和 $\sum_{\langle ij \rangle}(\cdots)$ は近接する画素についてのみ取られる. 従って, 上の確率分布からわかることは**隣り合う画素対 σ_i, σ_j が同じ色を取るような画像 $\{\sigma\}$ が相対的に高確率で現れる**ということである.

もちろん, 実際に我々が修復する画像はこの性質を持っていないかもしれないし, 原画像としてより特殊な (あるいは特定の) 画像を想定して, (5.21) 式よりさらに複雑な形を持つ確率分布を事前分布とすべきかもしれない. しかし, いずれにしても我々は原画像に関しては何も知りえないわけである. 従って, 特殊で複雑な事前分布を用いるよりも, どの画像についても最小限あてはまりそうな自由度を持つ (5.21) を選ぶことが得策であろうと, ここでは考えるわけである.

この事前確率 (5.21) からのスナップショットはパラメータ J の値に依存することに注意しよう. このパラメータ J の逆数をエネルギー関数が

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \tag{5.22}$$

で与えられる磁石 — **強磁性イジングモデル** — が置かれた**温度** : $T = J^{-1}$ として定義すると, この温度を $T = 1.15, 2.15, 3, 15$ と変化させると, それぞれの温度での分布 (5.21) からのスナップショットは図 22 のようになる. T は温度であったので, T の値が大きな場合には, 隣接する小磁石が同じ方向に揃おうとする影響より, 熱によりバラバラな向きを取ろうとする影響の方が大きく, 図 22 の右側の図を見てみると白黒のまだらな模様が現れることがわかる. 逆に, 温度 T が小さいと, 今度は隣接する小磁石が同一の方向に揃う影響が強く, 図 22 の左側の図のように同じ色を持つ大きな塊 (クラスタ) を持つような画像が現れる.

ここで, 我々は図 20 の「印鑑」のような 2 値デジタル画像を図 22 で与えられる複数枚のスナップショット画像の「張り合わせ」で表現することを試みる. このとき, どの温度 $T = J^{-1}$ でのスナップショットを用いれば望ましい張り合わせを作ることができるか, は自明ではないので, J の値自体を劣化画像から特定しなければならない (このやり方はこの講義で触れない). さて, (5.20)(5.21)

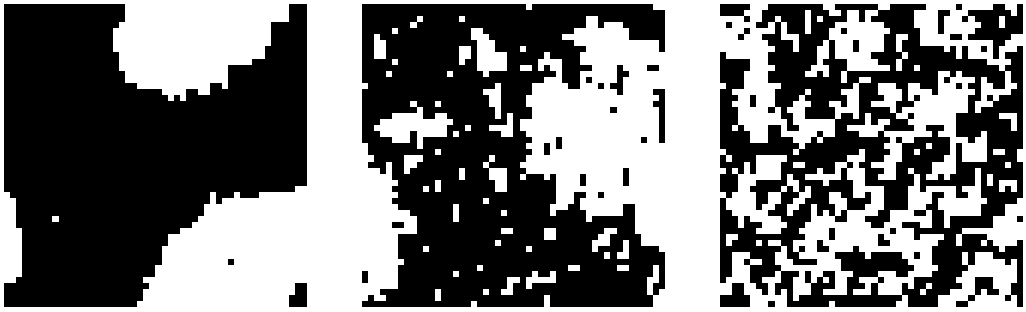


図 22: ここで用いる事前分布からのスナップショット. デジタル画像のサイズは 50×50. 左から $T = 1.15, 2.15, 3.15$ に選んである.

式を (5.16) に代入すれば**事後確率 (posterior distribution)** が得られる.

$$P(\{\sigma\}|\{\tau\}) \quad = \quad \frac{\mathrm{e}^{J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \tau_i \sigma_i}} \tag{5.23}$$

この分布の形を良くみると, エネルギー関数を

$$E(\{\sigma\}) \quad = \quad -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \tau_i \sigma_i \tag{5.24}$$

とした場合, 既に学んだボルツマン分布の形をしている. 従って, アンサンブルの考え方に基づき, この分布での物理量の平均を計算することにより, 例えば内部エネルギーや比熱などの値が得られる. しかし, ここでの我々の目標は, それらの物理量を求めることと言うよりもむしろ, この事後分布を用いてどのように原画像を推定するのか, というところにある. 以下では, この事後確率の「使い方」を見て行くことにする.

5.3 最大事後確率推定と有限温度推定

前節で事後分布が得られたわけであるが, この事前分布を原画像の推定にどのように使うのか, が次の問題になるであろう. この目的の下に最も素朴には, 事後確率 (5.23) を最大化するような $\{\sigma\} = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N)$ を原画像の推定値に選ぶ戦略である. これを**最大事後確率推定 (Maximum A Posteriori 推定 : MAP 推定)** と呼ぶ.

事後確率 (5.23) を最大化することは次に定義されるエネルギー関数 :

$$E(\{\sigma\}) \quad = \quad -J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \tau_i\sigma_i \tag{5.25}$$

を最小化する操作に等しい. 従って, この組合せ最適化問題はアニーリングや遺伝的アルゴリズムなどの既存の最適化ツールにより解くことができる.

さて, これとは別に, 事後確率 (5.23) を着目する画素 σ_i の周りで「周辺化」し, 次の**周辺化事後確率** :

$$P(\sigma_i|\{\tau\}) \quad \equiv \quad \sum_{\sigma\neq\sigma_i} P(\{\sigma\}|\{\tau\}) \tag{5.26}$$

を求め, 確率 $P(\sigma_i = 1|\{\tau\})$ と $P(\sigma_i = -1|\{\tau\})$ とを比較し, $P(\sigma_i = 1|\{\tau\})$ の方が大きければ i 番目の画素の推定値 $\hat{\xi}_i$ を $\hat{\xi}_i = 1$ に, 逆に $P(\sigma_i = -1|\{\tau\})$ が大きければ, $\hat{\xi}_i = -1$ とするような推定も考えられる. 式で書けば

$$\begin{aligned}
\hat{\xi}_i &= \mathrm{sgn}\left[P(\sigma_i = 1|\{\tau\}) - P(\sigma_i = -1|\{\tau\})\right] \\
&= \mathrm{sgn}\left[\sum_{\sigma_i}\sigma_i\sum_{\sigma\neq\sigma_i}P(\{\sigma\}|\{\tau\})\right] \\
&= \mathrm{sgn}\left[\frac{\sum_{\sigma_i}\sigma_i\sum_{\sigma\neq\sigma_i}\mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i\tau_i\sigma_i}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i\tau_i\sigma_i}}\right] \\
&= \mathrm{sgn}\left[\frac{\sum_\sigma\sigma_i\mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i\tau_i\sigma_i}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i\tau_i\sigma_i}}\right] = \mathrm{sgn}\left[\frac{\sum_\sigma\sigma_i\mathrm{e}^{-E(\{\sigma\})}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{-E(\{\sigma\})}}\right] \equiv \mathrm{sgn}\left[\langle\sigma_i\rangle_{J,h}\right]
\end{aligned} \tag{5.27}$$

である. この推定法を**有限温度推定 (finite temperature estimation)** と呼ぶことにしょう. この名称の由来は, (5.27) の形がエネルギー関数 (5.25) を持つ磁性体の温度 $T = 1$ での局所磁化に相当することに由来する. この考え方の下では, 前出の MAP 推定は $T = 0$ つまり, 絶対ゼロ度での推定ということになる. これをもう少し良く見るためには, (5.27) 式の 3 行目を

$$\hat{\xi}_i \quad = \quad \mathrm{sgn}\left[\frac{\sum_\sigma\sigma_i\mathrm{e}^{-E(\{\sigma\})/T}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{-E(\{\sigma\})/T}}\right] \tag{5.28}$$

と書き直せば 上式右辺で $T = 1$ と置いたものが有限温度推定値を, $T = 0$ と置いたものが $E(\{\sigma\})$ を最小にするような σ_i を与えることから MAP 推定値に対応することが容易に見て取れるであろう.

劣化の度合いが大きい場合には MAP 推定と比べて有限温度推定が有効である (ノイズを「揺らぎ」とみなしたとき, (5.27) 式中の温度による「熱揺らぎ」を巧くこの「ノイズ揺らぎ」と調節することにより, 1 画素当たりの誤り率が最小化される.).

5.4 いくつかの近似的アプローチ

ここまでに出てきたボルツマン分布についての期待値は式でコンパクトに表すことができるとは言え, そこに現れる「和」を実行することは極めて難しい. こうした計算の難しさは情報統計力学特有のものであり, 多くの場合にはいくつかの近似を用いて計算を進めることになる. ここでは, 平均場近似と呼ばれる最も荒い近似から出発して, 逐次近似を改善していくことで, 注目する物理量がどのように修正を受けていくのかに関し, 最も基本的な強磁性イジング模型を例にしてみていくことにしよう.

5.4.1 平均場近似

既に何度も見てきたように, 強磁性イジング模型のエネルギー関数は J をスピン対の相互作用の強さ, h を各スピンへの外部磁場の強さとすると

$$H = -\frac{J}{z}\sum_{\langle ij\rangle} s_i s_j - h\sum_i s_i \tag{5.29}$$

と書ける. ここで, z は最近接のスピン数, つまり, 考えるネットワーク (格子) の次数である. また, $\sum_{\langle ij\rangle}(\cdots)$ はこの最近接スピン対についての和を意味する. 既に説明したように, 式 (5.29) のエネルギー関数を持つ系の任意の物理量のボルツマン分布 e^{-H} での平均値は, 次の分配関数を計算することで求めることができる.

$$Z = \sum_{s_0=\pm 1}\cdots\sum_{s_{N-1}=\pm 1}\mathrm{e}^{-H} \tag{5.30}$$

ここで, 簡単のために以下の議論では全て温度を $T=1$ とすることに注意されたい.

さて, この状態和を正確に実行することは非常に難しい. このとき, この困難を回避して和の計算を「近似的に」実行する最も簡単なやり方は, 着目するスピン s_0 を残して, この s_0 の周りのスピン全てを「平均場」m で表し, 状態和の候補から外してしまうことである (図 23(左) 参照). このとき, 問題は s_0 についての「一体問題」となる. 従って, s_0 にはこの他に外場を h が作用するから, エネルギー関数は

$$\begin{aligned} H &= -\frac{J}{z}s_0(s_1+\cdots+s_z) - hs_0 \\ &= -\frac{J}{z}s_0(\underbrace{m+\cdots+m}_{z\text{ 個}}) - hs_0 \\ &= -Jms_0 - hs_0 \end{aligned} \tag{5.31}$$

となる. よって, 分配関数は直ちに

$$Z = \sum_{s_0=\pm 1}\mathrm{e}^{(Jm+h)s_0} = 2\cosh(Jm+h) \tag{5.32}$$

と計算できる. 従って, s_0 のボルツマン分布 e^{-H} での平均値を磁化 m とすると

$$m = \langle s_0 \rangle = \frac{\partial}{\partial h} \log Z = \tanh(Jm + h) \tag{5.33}$$

が得られるので, $h = 0$ の場合の自発磁化は

$$m = \tanh(Jm) \tag{5.34}$$

の解となる.

5.4.2 ベーテ近似

上記平均場近似では, 着目するスピン以外は全てその平均値 (局所磁化) で置き換えてしまう, という近似であった. このとき必要な計算量は, (5.32) の和として s_0 に関する 2 つ (± 1) のみである. 従って, この取り扱いは計算量からみると画期的な進歩と言えるが, 近似の精度から見れば極めて粗く, 改善の余地がある. そこで, 全てのスピンの相関を正確に取り入れて状態和 (5.30) を計算することは難しいからやめるにしても, 注目するスピン s_0 の他に, s_0 **に直接結合している** $z(\ll N)$ **個のスピンの状態和までは正確に計算する**というやり方もできるはずである. 格子の次数 z が高々10 程度までであれば, これは十分に実行可能であろう.

そこで, 注目するスピン s_0 と結合強度 J 相互作用する z 個のスピン $s_1, \cdots, s_z$ を考える (図 23(右) 参照). 注目するスピンには外場 h が作用する. 一方, z 個のスピンは各々その周辺に位置する他の

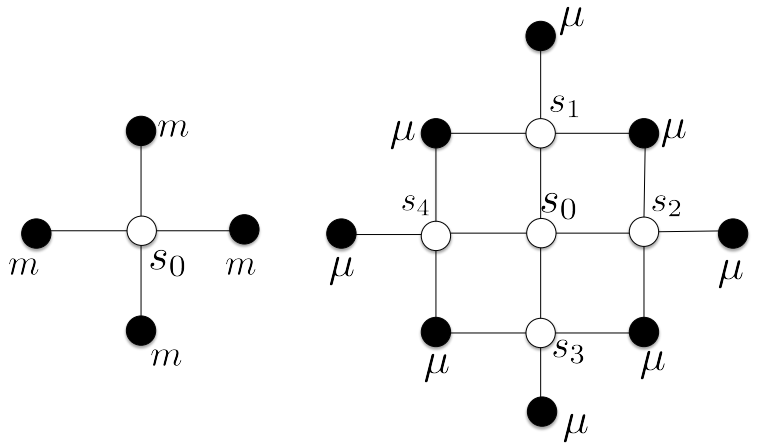


図 23: 平均場近似 (左) とベーテ近似 (右).

スピンからの影響を受けるはずであるが, $s_1, \cdots, s_z$ の個々に働く外場も含めた, この周辺効果を全て μ という外場に押し込める (図 23(右) 参照). 我々は, この「有効場 μ」を後に自己矛盾無く決めることにする. この手の近似法を開発者の名前にちなんで**ベーテ近似**と呼ぶ.

さて, ここから我々は注目するスピン s_0 とその周りの z 個のスピンからなる計 $(z+1)$ 個のスピンからなる系を考えるわけであるが, エネルギー関数を上記のように分解したとすると, この $z+1$ 個のスピンからなる系のエネルギー関数は次のように書ける.

$$H = -\mathcal{J} s_0(s_1 + \cdots + s_z) - h s_0 - \mu(s_1 + \cdots + s_z) \tag{5.35}$$

ここで, $\mathcal{J} \equiv J/z$ である. 従って, このエネルギー関数に対して分配関数は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_0=\pm1}\sum_{s_1=\pm1}\cdots\sum_{s_z=\pm1} \mathrm{e}^{-H} \\ &= \sum_{s_0=\pm1} \mathrm{e}^{hs_0}\left\{\sum_{s=\pm1}\mathrm{e}^{(\mathcal{J}s_0+\mu)s}\right\}^z = \mathrm{e}^h\{2\cosh(\mu+\mathcal{J})\}^z + \mathrm{e}^{-h}\{2\cosh(\mu-\mathcal{J})\}^z \end{aligned} \tag{5.36}$$

と比較的簡単に計算できる. 注目するスピン s_0 のボルツマン分布での期待値は

$$\begin{aligned} \langle s_0\rangle &= \frac{\sum_{s_0=\pm1}\sum_{s_1=\pm1}\cdots\sum_{s_z=\pm1} s_0\,\mathrm{e}^{-H}}{\sum_{s_0=\pm1}\sum_{s_1=\pm1}\cdots\sum_{s_z=\pm1}\mathrm{e}^{-H}} \\ &= \frac{\partial}{\partial h}\log Z = \frac{\mathrm{e}^h\{2\cosh(\mu+\mathcal{J})\}^z - \mathrm{e}^{-h}\{2\cosh(\mu-\mathcal{J})\}^z}{\mathrm{e}^h\{2\cosh(\mu+\mathcal{J})\}^z + \mathrm{e}^{-h}\{2\cosh(\mu-\mathcal{J})\}^z} \end{aligned} \tag{5.37}$$

であり, 一方, s_0 の周りを取り囲む任意のスピン s の期待値は

$$\begin{aligned} \langle s\rangle &= \left\langle\frac{s_1+\cdots+s_z}{z}\right\rangle = \frac{\sum_{s_0=\pm1}\sum_{s_1=\pm1}\cdots\sum_{s_z=\pm1}\{\frac{s_1+\cdots+s_z}{z}\}\,\mathrm{e}^{-H}}{\sum_{s_0=\pm1}\sum_{s_1=\pm1}\cdots\sum_{s_z=\pm1}\mathrm{e}^{-H}} \\ &= \frac{1}{z}\frac{\partial}{\partial\mu}\log Z \\ &= \frac{\mathrm{e}^h\{2\cosh(\mu+\mathcal{J})\}^z\tanh(\mu+\mathcal{J}) + \mathrm{e}^{-h}\{2\cosh(\mu-\mathcal{J})\}^z\tanh(\mu-\mathcal{J})}{\mathrm{e}^h\{2\cosh(\mu+\mathcal{J})\}^z + \mathrm{e}^{-h}\{2\cosh(\mu-\mathcal{J})\}^z} \end{aligned} \tag{5.38}$$

となる.

さて, 有効場 μ を決めるためには, 少なくとも何か一つの条件 (方程式) を課す必要がある. そこで, 次のような考察を行おう. つまり, $z+1$ 個のスピンからなる系を考え, その中から一つのスピンに着目し, そのボルツマン分布での期待値を計算する. このとき, **どのスピンに着目しても, その期待値は同じになるべき**である. これは系全体のエネルギー関数 (5.29) においてスピン交換 $s_i \leftrightarrow s_j$ を施してもエネルギー関数が不変に保たれることから正当化できる[10]. よって, 今の場合, s_0 とこれ以外の任意のスピン s に関しても

$$\langle s_0\rangle = \langle s\rangle \equiv m \tag{5.39}$$

が成り立つはずである. ここに, $\langle\cdots\rangle$ はボルツマン分布 e^{-H} での期待値である. 従って, (5.37)(5.38) 式より, (5.39) 式は

$$\frac{\cosh(\mu+\mathcal{J})}{\cosh(\mu-\mathcal{J})} = \exp\left[\frac{2}{z-1}(\mu-h)\right] \tag{5.40}$$

と書き直すことができる. 簡単のため, 外場無し: $h=0$ とし, $\mathcal{J}=J/z$ でもとの相互作用に戻すと

$$\mu = \frac{(z-1)}{2}\log\left[\frac{\cosh(\mu+J/z)}{\cosh(\mu-J/z)}\right] \tag{5.41}$$

が得られるが, J の値を変えつつ, 上式 (5.41) を数値的に解き, 解 μ を

$$\langle s\rangle \equiv m = \frac{\{2\cosh(\mu+J/z)\}^z - \{2\cosh(\mu-J/z)\}^z}{\{2\cosh(\mu+J/z)\}^z + \{2\cosh(\mu-J/z)\}^z} \tag{5.42}$$

に代入したものが自発磁化 m を与える. 図 24 に $z=4$ と選んだ場合のベーテ近似による自発磁化の振る舞いと, 平均場近似のそれとの比較を載せる.

[10] 系が「非一様」な場合, つまり, 各スピンに作用する外場がスピンごとにマチマチであるような場合, この議論は再検討の余地がある.

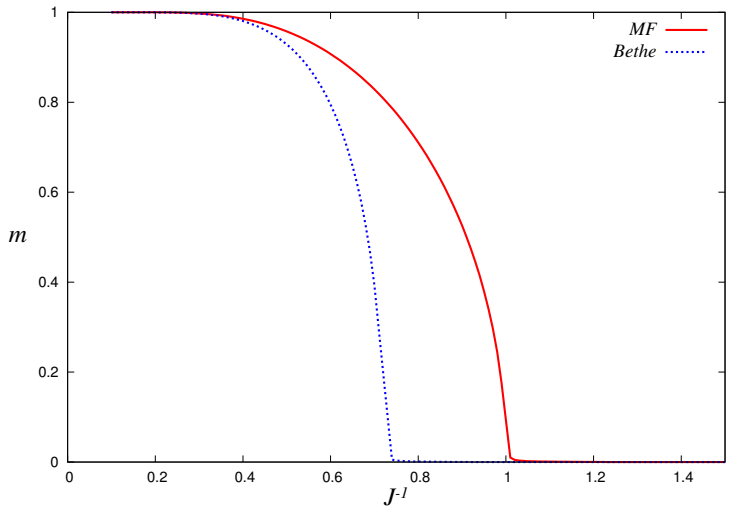


図 24: 結果. $z = 4$ のとき. ベーテ近似がより「正解」に近い.

5.4.3　平均場アルゴリズム

前節で有限温度推定を導入したが, 局所磁化での計算には $\{\sigma\}$ の自由度にわたる計算量, つまり, 2^N 個の和の計算が必要である. 前出の画像のように $200 \times 200 = 4 \times 10^4$ 程度の画像サイズでは $\sim 2^{10^4}$ もの和を計算する必要がある. これを全ての画素 σ_i について行うわけであるから, 事実上, この計算は不可能ということになってしまう. このとき, 次に説明する**平均場近似 (mean-field approximation)** に基づくアルゴリズム — **平均場アルゴリズム (mean-field algorithm)** — の適用が有効である.

まず, 各画素が $L_1 \times L_2 = N$ の正方格子上に乗っているとし, 番地 (i, j) の画素を σ_{ij} で表現する (図 25(左) 参照). すると, エネルギー関数は

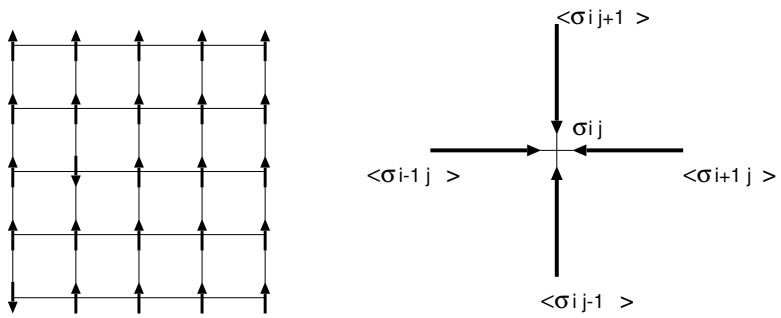


図 25: 2 次元正方格子上に乗った画素 (左). と平均場近似の概念図 (右).

$$E_2(\{\sigma\}) \quad \equiv \quad -J \sum_{ij} \sigma_{ij}(\sigma_{ij+1} + \sigma_{ij-1} + \sigma_{i+1j} + \sigma_{i-1j}) - h \sum_{ij} \tau_{ij}\sigma_{ij} \tag{5.43}$$

となる. このとき, 平均場近似では, 着目する画素 σ_{ij} の周りの画素をその期待値で置き換える (図

25(右) 参照). つまり

$$\sigma_{ij+1} \simeq \langle\sigma_{ij+1}\rangle_{J,h} \equiv m_{ij+1} \tag{5.44}$$
$$\sigma_{ij-1} \simeq \langle\sigma_{ij-1}\rangle_{J,h} \equiv m_{ij-1} \tag{5.45}$$
$$\sigma_{i+1j} \simeq \langle\sigma_{i+1j}\rangle_{J,h} \equiv m_{i+1j} \tag{5.46}$$
$$\sigma_{i-1j} \simeq \langle\sigma_{i-1j}\rangle_{J,h} \equiv m_{i-1j} \tag{5.47}$$

この下で, 着目する画素 σ_{ij} の期待値は

$$m_{ij} = \langle\sigma_{ij}\rangle_{J,h} = \frac{\sum_\sigma \sigma_{ij}\,\mathrm{e}^{-E_2^{(\mathrm{mean-filed})}(\{\sigma\})}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{-E_2^{(\mathrm{mean-field})}(\{\sigma\})}} \tag{5.48}$$
$$E_2^{(\mathrm{mean-field})}(\{\sigma\}) \equiv -J\sum_{ij}(m_{ij+1}+m_{ij-1}+m_{i+1j}+m_{i-1j})\sigma_{ij} - h\sum_{ij}\tau_{ij}\sigma_{ij} \tag{5.49}$$

となり, 実際に (5.48) の和は簡単に実行できて全ての番地 (i,j) にある画素の平均値に関し,

$$m_{ij} = \tanh\left[J(m_{ij+1}+m_{ij-1}+m_{i+1j}+m_{i-1j})+h\tau_{ij}\right] \quad \forall_{(i,j)} \tag{5.50}$$

なる連立式が得られる.

従って, 劣化画像 $\{\tau\}$ に対し, 式 (5.50) を

$$m_{ij}^{(t+1)} = \tanh\left[J(m_{ij+1}^{(t)}+m_{ij-1}^{(t)}+m_{i+1j}^{(t)}+m_{i-1j}^{(t)})+h\tau_{ij}\right] \quad \forall_{(i,j)} \tag{5.51}$$

という「連立漸化式」とみなし, 全ての画素に関して反復計算し, 引き続く 2 ステップ間の誤差 $|m_{ij}^{(t+1)}-m_{ij}^{(t)}|$ がある ϵ 以内に収まったときの m_{ij} を解とし, 原画像の画素 ξ_{ij} の推定値 $\hat{\xi}_{ij}$ を (5.27) に従って

$$\hat{\xi}_{ij} = \mathrm{sgn}(m_{ij}) \tag{5.52}$$

とすれば良い.

課題 5：

原画像 ($J_* = 0.465$ の事前分布 (5.21) からのスナップショット) として用いるデジタル画像を

`http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/konton2013/konton2013.html`

からダウンロードし, この画像を 20% 程度の 2 元対称通信路で劣化後, 平均場近似を用いた有限温度推定を用いて復元せよ. 上記 URL に置く画像ファイルの大きさは $L_1 \times L_2 = 50 \times 50$ であるが, 計算時間や手持ちの計算機への負荷等を考え, 各自 GIMP, PaintShop 等の画像編集ソフトで画像サイズを変更すること.

5.5 確率モデルのパラメータ推定

ここまでで, デジタル画像及び, 劣化の過程を確率モデルで表現し, 我々の画像復元の問題を定式化した. 既に説明したように, 各確率モデルはパラメータ J, h により特定され, このパラメータを

どのような値に選ぶかにより, MAP 推定, 及び有限温度推定の精度が変化する. このとき, 例えば, 原画像 $\{\xi\}$ と修復画像 $\{\tau\}$ との間のハミング距離:

$$D = \frac{1}{N}\sum_i |\xi_i - \sigma_i| \tag{5.53}$$

を用い, この距離を最小にするようなパラメータ J, h を選ぶ方策をとることはできない. なぜならば, 我々は原画像 $\{\tau\}$ に関する情報を用いることができないからである. それでは, どのような基準のもとにこれらのパラメータを選んだらよいのであろうか. 以下でその手続きを説明する. ここでの手続きは画像修復だけでなく, **広く, 隠れ変数を含む統計モデルのパラメータ推定法として用いることができる**.

5.5.1 周辺尤度関数最大化法

確率モデルのパラメータ J, h を決定するには劣化画像 $\{\tau\}$ に対し, 次に定義される**周辺尤度**をコスト関数として導入し, パラメータに関する最適化問題を解けばよい (**周辺尤度最大化法**).

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(J,h:\{\tau\}) &\equiv \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} P_h(\{\tau\}|\{\sigma\})P_J(\{\sigma\}) \\ &= \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i} - \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j} - N\log 2\cosh h\end{aligned} \tag{5.54}$$

ここで, $\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\cdots) = \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(\cdots)$ を定義した. この定義は以降すべて同じ用法をすることに注意されたい. ここに, 上式右辺の第 2,3 項はそれぞれ, 事前分布, 尤度の規格化因子 Z_m, Z_l の対数をとったものであることに注意しょう. Z_l は

$$Z_l = \mathrm{tr}_{\{\tau\}}\exp\left(h\sum_i \tau_i\sigma_i\right) = \left\{\sum_{\tau=\sigma,-\sigma}\exp(h\tau\sigma)\right\}^N = (2\cosh(h))^N \tag{5.55}$$

である. 劣化画像に関する平均操作 $[\cdots]_{\{\tau\}}$ を施した場合の周辺尤度が確率モデルのパラメータの真値 (J_*, h_*) で最大値をとること, つまり, 不等式 : $[\mathcal{L}(J_*,h_*:\{\tau\})]_{\{\tau\}} \geq [\mathcal{L}(J,h:\{\tau\})]_{\{\tau\}}$ が成り立つことは確率分布 $P_{h_*}(\{\tau\}|\{\sigma\})P_{J_*}(\{\sigma\})$ と $P_h(\{\tau\}|\{\sigma\})P_J(\{\sigma\})$ 間のカルバック距離の非負性を用いることにより, によって簡単に示すことができる. この事実を具体的に示すために, 次の周辺分布を導入して見通しを良くしよう.

$$\phi_{J^*,h^*}(\{\tau\}) = \mathrm{tr}_{\{\xi\}}P_{h^*}(\{\tau\}|\{\xi\})P_{J^*}(\{\xi\}) = \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}P_{h^*}(\{\tau\}|\{\sigma\})P_{J^*}(\{\sigma\}) \tag{5.56}$$

$$\phi_{J,h}(\{\tau\}) = \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}P_h(\{\tau\}|\{\sigma\})P_J(\{\sigma\}) \tag{5.57}$$

このとき,

$$\begin{aligned}[\mathcal{L}(J_*,h_*:\{\tau\})]_{\{\tau\}} - [\mathcal{L}(J,h:\{\tau\})]_{\{\tau\}} &= \mathrm{tr}_{\{\tau\}}\phi_{J^*,h^*}(\{\tau\})\log\phi_{J^*,h^*}(\{\tau\}) \\ &- \mathrm{tr}_{\{\tau\}}\phi_{J^*,h^*}(\{\tau\})\log\phi_{J,h}(\{\tau\}) \\ &= \mathrm{tr}_{\{\tau\}}\phi_{J^*,h^*}(\{\tau\})\log\frac{\phi_{J^*,h^*}(\{\tau\})}{\phi_{J,h}(\{\tau\})} \\ &= D_{KL}(\phi_{J^*,h^*} \parallel \phi_{J,h}) \geq 0\end{aligned} \tag{5.58}$$

すなわち, $[\mathcal{L}(J_*,h_*:\{\tau\})]_{\{\tau\}} \geq [\mathcal{L}(J,h:\{\tau\})]_{\{\tau\}}$ である.

この問題において我々は原画像に関する情報を何も持たず, その部分のデータが欠落しているので, 推定値 $\{\sigma\}$ の自由度に関して和 $\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\cdots)$ をとり, 唯一利用できる観測データ $\{\tau\}$ を残して確率分布 $P_h(\{\tau\}|\{\sigma\})P_J(\{\sigma\})$ を周辺化したものの対数をもってパラメータ決定のコスト関数としているわけである. 従って, パラメータの最尤推定値を求めるには周辺尤度 $\mathcal{L}$ をパラメータに関して最大化すればよい.

5.5.2 EM アルゴリズムによる周辺尤度の最大化

周辺尤度 $\mathcal{L}$ を最大化する手法として **EM アルゴリズム (Expectation-Maximization)** が知られている. この方法では周辺尤度を直接最大化せず, 尤度関数のステップ依存した事後確率での平均 : $\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}P_{J_t,h_t}(\{\sigma\}|\{\tau\})\log P_h(\{\tau\}|\{\sigma\})P_J(\{\sigma\})$ で定義される以下の **Q 関数**を最大化する手続きにより周辺尤度を間接的に最大化する.

$$\begin{aligned} Q(J,h|J_t,h_t) &= -NJ\frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\varepsilon_B\,\mathrm{e}^{J_t\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j+h_t\sum_i\tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J_t\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j+h_t\sum_i\tau_i\sigma_i}} - Nh\frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\varepsilon_C\,\mathrm{e}^{J_t\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j+h_t\sum_i\tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J_t\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j+h_t\sum_i\tau_i\sigma_i}} \\ &- \log\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j} - N\log 2\cosh h \end{aligned} \tag{5.59}$$

ここに

$$\varepsilon_B = -\frac{1}{2N}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j, \tag{5.60}$$

$$\varepsilon_C = -\frac{1}{N}\sum_i\tau_i\sigma_i \tag{5.61}$$

である. EM アルゴリズムは Q 関数の計算 (Expectation) とその最大化 (Maximization) :

$$J_{t+1} = \arg\max_J Q(J,h|J_t,h_t) \tag{5.62}$$

$$h_{t+1} = \arg\max_h Q(J,h|J_t,h_t) \tag{5.63}$$

の繰り返しで構成される. ここではまず劣化過程の反転確率 p が既知であるとし,

$$h = h_* = \frac{1}{2}\log\frac{1-p}{p} \tag{5.64}$$

とおいて J の更新のみを考えよう. このとき更新式の『方程式』は具体的に

$$u_m(J_{t+1}) \equiv \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\varepsilon_B\mathrm{e}^{J_{t+1}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J_{t+1}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j}} = \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\varepsilon_B\mathrm{e}^{J_t\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j+h_*\sum_i\tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J_t\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j+h_*\sum_i\tau_i\sigma_i}} \equiv u_p(J_t,h_*) \tag{5.65}$$

と書ける. 幸いなことに上式左辺 u_m はデータ $\{\tau\}$ を含まない確率変数 $\{\sigma\}$ のみからなる系における統計量 ε_B の期待値であり, 十分に多数個 $(N\to\infty)$ の画素が 2 次元正方格子上に配置されている場合には以下に示す厳密解 $u_m(J)$ が知られており (Onsager (1944)), 更新式が

$$u_m(J_{t+1}) = u_p(J_t,h_*) \tag{5.66}$$

$$u_m(J) = -\coth 2J\left\{1+\frac{2}{\pi}(2\tanh^2 2J-1)K(k)\right\} \tag{5.67}$$

と書けることになる. ただし, $K(k)$ はその母数が

$$k = \frac{2\tanh 2J}{\cosh 2J} \tag{5.68}$$

で与えられる完全楕円関数：

$$K(k) \quad = \quad \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1-k^2\sin^2\phi}} \tag{5.69}$$

である．従って, 具体的なアルゴリズムの処理過程は, まず初期値 J_0 を適当に設定し, $u_p(J_0, h_*)$ を計算する．ついで, その値 u_p と $u_m(J)$ の値が等しくなるような J を J_1 とし, その J_1 に対して再度 $u_p(J_1, h_*)$ を計算し, その値 u_p と $u_m(J)$ の値が等しくなるような J を J_2 とする $\cdots\cdot$ というように逐次的に進んで行くことになる．そしてパラメータ J は

$$J_0 \to J_1 \to J_2 \to \cdots$$

ように更新される．このダイナミックスの固定点が EM アルゴリズムの与える解である．このように書くだけならば容易だが, しかし問題はそう簡単ではない．$u_p(J, h_*)$ は観測データ $\{\tau\}$ を含む非一様な系での期待値であり, u_m のような厳密解は無い．従って, これを正確に評価するには 2^N の和 $\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\cdots)$ を計算する必要があるのだが, N が大きな場合には, この計算が現実的ではなくなるのである．

5.5.3　マルコフ連鎖モンテカルロ法の適用

ここでは, ミクロ変数である各画素 $\sigma_i (i = 1, \cdots, N)$ に次の確率過程を課し, 十分な時間が経過した後に系 $\{\sigma\}$ が平衡分布 (事後分布)：$\mathrm{e}^{-H(\{\sigma\}|\{\tau\})}/\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{-H(\{\sigma\}|\{\tau\})}$ に収束することに着目する．このとき事後分布でのアンサンブル平均が上述確率過程からのサンプリング平均 (時間平均) で置き換えられることを利用し, 式 (5.65) で与えられる ε_B の重み付き平均を $(1/N_{\mathrm{MCS}})\sum_{k=1}^{N_{\mathrm{MCS}}} \varepsilon_B(k)$ で近似計算することを考えよう．この方法を**マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC：Markov Chain Monte Calro 法)** と呼ぶ．

ミクロ変数の従う確率過程 (シングルスピンフリップ・メトロポリス法)

(i) $i \in \{1, 2, \cdots, N\}$ をランダムに選び, その位置の画素を反転させる．$\sigma_i \to -\sigma_i$.

(ii) $\Delta E = H(F_i\{\sigma\}|\{\tau\}) - H(\{\sigma\}|\{\tau\})$ を計算し (F_i は位置 i の画素を反転させる演算子), $\Delta E \leq 0$ であれば, (i) の反転を受け入れ, $\Delta E > 0$ であっても, 確率：$\mathrm{e}^{-\Delta E}$ で反転を受け入れる．

(iii) (i)(ii) を $N \times N_{\mathrm{MCS}}$ 回繰り返す．

これは既に学習した 2 変数関数であるエネルギー関数に対する [**ノイズを利用したアルゴリズム**] の多変数関数であるエネルギー関数への拡張版であることに注意する．なお, この MCMC 法は u_m の厳密解を知らない場合,

$$H = -J\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i\sigma_j \tag{5.70}$$

と置くことで u_m の計算にも適用できる．つまり, EM アルゴリズムを適用する前に予め MCMC 法で J と u_m の対応関係をテーブルにしておく．そして J の更新毎に $u_p = u_m$ を与える J をそのテーブルから拾い出し, 該当値を次ステップの J 値とするように更新を進めればよい．図 26 (左)

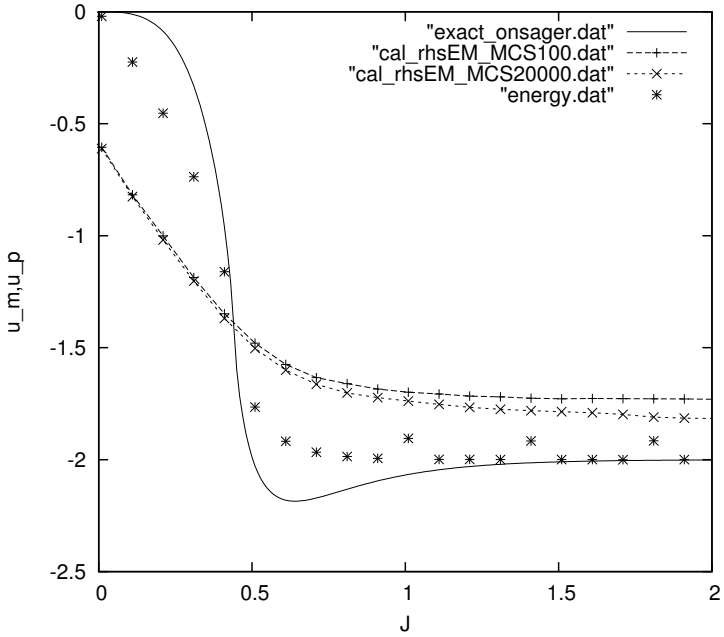


図 26: $u_m(J)$ の厳密解と $N_{\rm MCS} = 2\times 10^5$ での MCMC 法による近似解, 及び, $u_p(J, h_*)$ の $N_{\rm MCS} = 100, 2\times 10^5$ での MCMC 法による計算結果. u_m, u_p の交点が J の推定値を与える (真値は $J_* = 0.465$.)

に比較のため u_m の厳密解と MCMC 法による結果 ($N = 50\times 50, N_{\rm MCS} = 2\times 10^5$) を載せる. ところで, MCMC 法では $N_{\rm MCS}$ の値をいくらに設定するか, 言い換えれば, パラメータを更新する際, 直前のパラメータ値で特徴づけられる系がどのくらい平衡状態から遠いのか, によって結果が異なるので注意が必要である. 事実, 図 26 (左) からわかるように, u_m の厳密解と MCMC 法から求めた u_p の交点が EM アルゴリズムの決定する J 値を与えるのだが, この交点の値は $N_{\rm MCS} = 100$ と $N_{\rm MCS} = 2\times 10^5$ とでは有意な差があり, $N_{\rm MCS}$ を大きくとり, 系を十分に緩和させた場合の方が真値 $J_* = 0.465$ に近いことが見てとれる. 前に述べた確率伝播法は基本的に平均場近似の考え方に基づいており, ミクロ変数 (の期待値) の更新は EM アルゴリズムにおけるマクロ変数の更新式と同様に確定的な式で与えられ, 逐次的に画素間の相関を取り込むことにより精度が向上する. 一方, MCMC 法ではミクロ変数に確率過程を課し, そこから生成される系の時系列の長時間平均で期待値を近似計算するため, 系の平衡状態への緩和時間がミクロ変数だけでなく, パラメータの推定精度にとっても決定的である. これは MCMC 法を用いた EM アルゴリズムではミクロ変数の確率過程 (ダイナミックス) がマクロ変数 J, h に共役な統計量 $\varepsilon_B, \varepsilon_C$ の期待値を決定し, それが Maximization ステップを介して J, h に影響し, さらに, そうして更新された J, h がミクロ変数の確率過程にフィードバックされる $\cdots$ といった具合にミクロ変数とマクロ変数が相互に絡み合いながら情報処理が進んで行くことになるからである. 特に確率的情報処理の課題では事後確率が必ず何らかの観測データを含み, 空間的に非一様なものとなる. そこで統計物理の知見を借りるならば, 空間的に非一様な系の平衡状態への緩和は一般的に言って非常に遅い, という事実が知られている. そうであるならば Expectation ステップ, つまり u_p の計算では系の緩和に関して慎重にならざるを得ず, どのタイミングで処理を Maximiation ステップへと切り替えてマクロ変数を更新したならば, どの程度の精度が得られるのか, を調べることはアルゴリズムの性能を議論する上ではとても重要になる. それはここで示した簡単な数値実験からも明らかであろう.

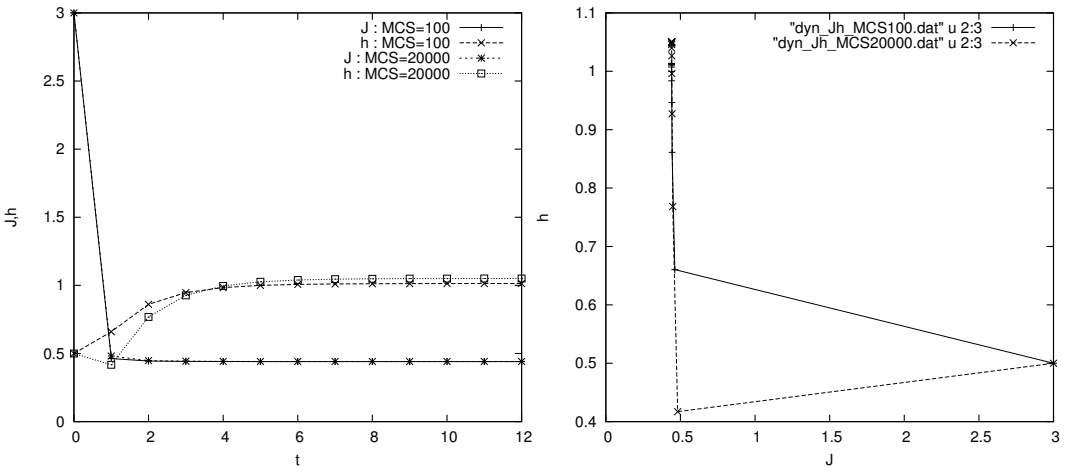


図 27: EM アルゴリズムの処理過程. $J_* = 0.465$ で与えられる事前確率 (5.72) からのスナップショットを原画像に選んだ場合であり, 劣化率は $p = 0.1$ ($h_* = 1.1$). 右図はパラメータ空間 (J, h) でみた EM アルゴリズム処理過程の軌跡.

5.5.4 デジタル画像復元の実行例

さて, 最後に劣化度 h をも未知とし, これと J を EM アルゴリズムで同時推定しよう. h の更新式は $\hat{u}_p(J, h)$ を ε_C の事後確率での平均値として,

$$h_{t+1} = \tanh^{-1}(\hat{u}_p(J_t, h_t)) \tag{5.71}$$

と書けるので, これと h も未知であるとした場合の J の更新式 : $u_m(J_{t+1}) = u_p(J_t, h_t)$ とを組んで反復計算を行う. 結果を図 26 (右) に示す. この図より, 原画像として $J_* = 0.465$ と選んだ事前確率:

$$P(\{\sigma\}) \quad = \quad \frac{\mathrm{e}^{J_* \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{J_* \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j}} \tag{5.72}$$

からのスナップショットに選び, 劣化率を $p = 0.1$ ($h_* = 1.1$) に定め, $N_{\mathrm{MCS}} = 100$, 及び, $N_{\mathrm{MCS}} = 2 \times 10^5$ としてアルゴリズムを動作させた場合, それらの収束値には小さいが有意な差があることが見て取れる. なお, 当然のことながら図 29 (b1) のような印鑑等の自然画像に対しても MCMC 法に基づく EM アルゴリズムを適用することができる. そのパラメータの時間発展と最終的に得られる修復画像とをそれぞれ図 26 (右) と図 29 (b3) に載せておく. 図 30 に $J_* = 0.465$ の事前分布 (5.72) からのスナップショットを原画像とした場合に EM アルゴリズムで決定されたパラメータに対して, シミュレーテッド・アニーリングを実行した際のエネルギー E の時間変化 (左), 及び, ビット誤り率 P_b の時間変化 (右) をプロットしたものも載せておこう.

5.6 平均場モデルによる解析的性能評価

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 (図 31 参照). 原画像として

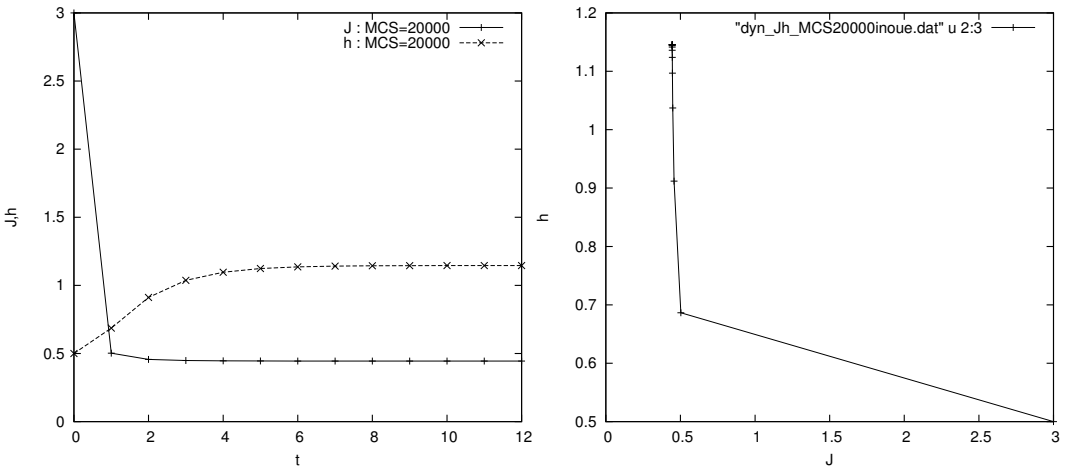


図 28: EM アルゴリズムの処理過程. 図 29 (b1) の印鑑画像を原画像としたものである. 劣化率は $p = 0.1$ ($h_* = 1.1$). 右図はパラメータ空間 (J, h) でみた EM アルゴリズム処理過程の軌跡.

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.

5.6.1 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.

$$P_{J^*}(\{\xi\}) = \frac{1}{Z_{J^*}} \mathrm{e}^{J^* \sum_{ij} \xi_i \xi_j} \tag{5.73}$$

ここで, Z_{J^*} は規格化定数 (分配関数) で

$$Z_{J^*} = \mathrm{tr}_{\{\xi\}} \mathrm{e}^{J^* \sum_{ij} \xi_i \xi_j} \tag{5.74}$$

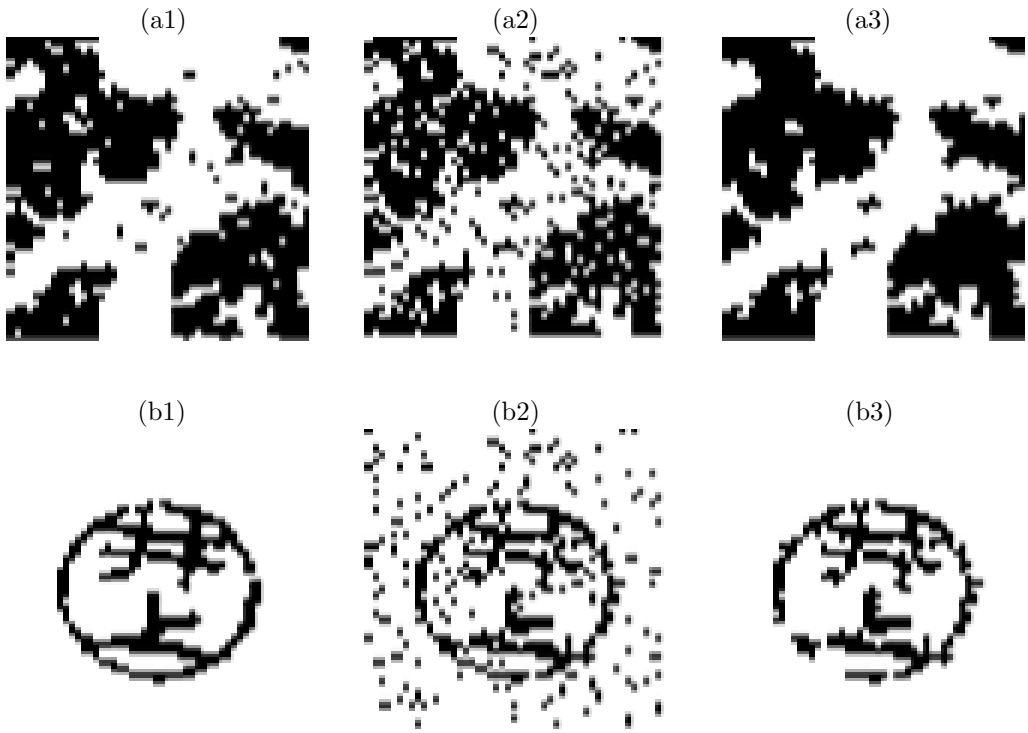


図 29: 原画像 (a1)(b1) ((a1) は $J_* = 0.465$ の事前分布 (5.72) からのスナップショット), 劣化画像 (a2)(b2) (劣化率 : $p = 0.1$) $N_{\rm MCS} = 2 \times 10^2$ での EM アルゴリズムで求められたパラメータ (図 26 (右) の収束点) で温度制御 $T = 3/\sqrt{t}$ でのシミュレーテッド・アニーリング法による最大事後確率推定により復元された画像 (a3)(b3).

で与えられる. ここに, トレース : $\mathrm{tr}_{\{\xi\}}(\cdots)$ は状態変数に関する和 : $\sum_{\xi_1=\pm1}\sum_{\xi_2=\pm1}\cdots\sum_{\xi_N=\pm1}(\cdots)$ 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.

$$P_J(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z_J}\,\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j} \tag{5.75}$$

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,

$$Z_J = \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j} \tag{5.76}$$

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,

$$P_h(\{\tau\}|\{\sigma\}) = \frac{1}{Z_h}\mathrm{e}^{h\sum_i\tau_i\sigma_i}, \quad Z_h = \mathrm{tr}_{\{\tau\}}\mathrm{e}^{h\sum_i\tau_i\sigma_i} \tag{5.77}$$

で与えれるものとする. 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 $p = \mathrm{e}^{h^*}/2\cosh(h^*)$ である 2 元対称通信路 :

$$P_{h^*}(\{\tau\}|\{\xi\}) \quad = \quad \frac{\mathrm{e}^{h^*\sum_i\tau_i\xi_i}}{[2\cosh(h^*)]^N} \tag{5.78}$$

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 $[\cdots]_{\{\tau\}}$ で定義すると, 上の 2 元対称通信路 (BSC) とガウ

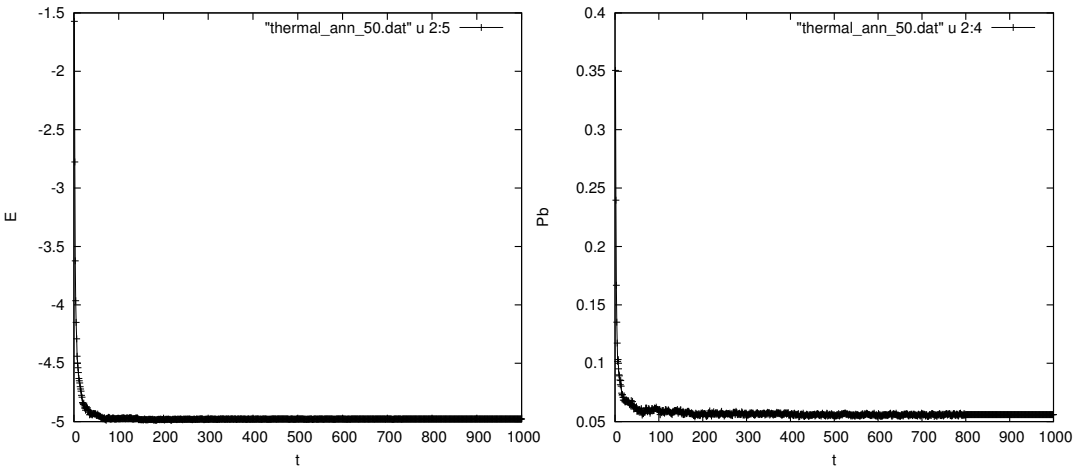


図 30: $J_* = 0.465$ の事前分布 (5.72) からのスナップショットを原画像とした場合に EM アルゴリズムで決定されたパラメータに対して, シミュレーテッド・アニーリングを実行した際のエネルギー E の時間変化 (左), 及び, ビット誤り率 P_b の時間変化 (右) 横軸の時間単位は 1 モンテカルロ・ステップに選んである.

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.

$$[\cdots]_{\{\tau\}} = \mathrm{tr}_{\{\tau\}}(\cdots) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i d\tau_i (\cdots) F^{(\mathsf{BSC},\mathsf{GC})}(\tau_i) \tag{5.79}$$

ここで, 重み関数 F はそれぞれ

$$F^{(\mathsf{BSC})}(\tau_i) = \frac{1}{2\cosh(h^*)} \left[\delta(\tau_i - 1) + \delta(\tau_i + 1)\right] \tag{5.80}$$

$$F^{(\mathsf{GC})}(\tau_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2a^2}(\tau_i^2 + a_0^2)} \tag{5.81}$$

で定義されるものとする. また, $h^* = a_0/a^2$ 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

$$Z_h = \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\tau_i F^{(\mathsf{GC})}(\tau_i)\, \mathrm{e}^{h\tau_i\sigma_i}\right]^N = \exp\left[N\left(-\frac{a_0^2}{2a^2} + \frac{a^2h^2}{2}\right)\right] \tag{5.82}$$

となる.

5.6.2 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.

$$\begin{aligned} -\mathcal{L}(J,h;\{\tau\}) &= \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} P_h(\{\tau\}|\{\sigma\}) P_J(\{\sigma\}) \\ &= \log\left[\frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}}{Z_J Z_h}\right] \\ &= \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i} - \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j} + \frac{Na_0^2}{2a^2} - \frac{Na^2h^2}{2} \end{aligned} \tag{5.83}$$

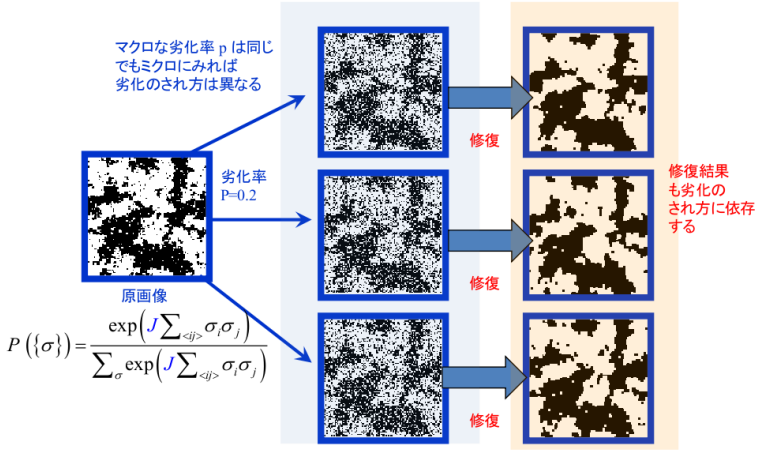


図 31: ビット誤り率の値は伝送路の反転率が同じであっても, 毎回の観測毎に揺らぎがともない, 得られる結果は観測毎に異なる.

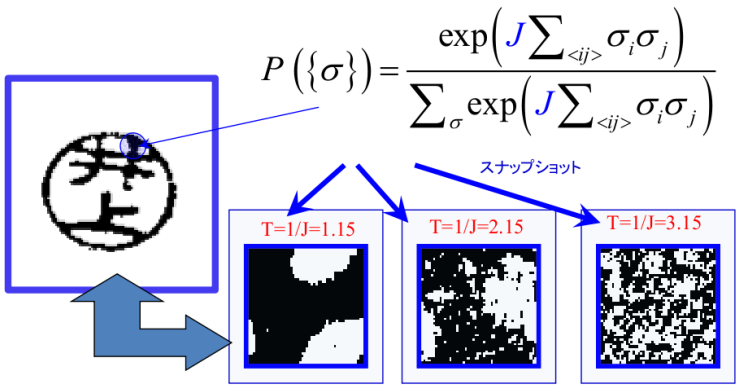


図 32: 同じ温度での強磁性イジングモデルのスナップショットであっても, 得られる結果は観測毎に異なる.

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.

5.6.3 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

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial J} = \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j)\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}} - \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j)\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j}} = 0 \quad (5.84)$$

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h} = \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\sum_{i}\tau_i\sigma_i)\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}} - Na^2h = 0 \quad (5.85)$$

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 :

$$c_J \frac{dJ}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial J} = \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j)\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}} - \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j)\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j}} \tag{5.86}$$

$$c_h \frac{dh}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h} = \frac{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}(\sum_{i}\tau_i\sigma_i)\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{J\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}} - Na^2 h \tag{5.87}$$

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.

5.6.4　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. 以下では

$$J \to \frac{J}{N},\ J^* \to \frac{J^*}{N} \tag{5.88}$$

とスケール変換し, $\sum_{ij}(\cdots)$ は全ての i, j についてとることに注意されたい.

5.6.5　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いけないのは

$$-\mathcal{L}(J, h; \{\tau\}) = \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{\frac{J}{2N}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i} + \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{\frac{J}{2N}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j} + \frac{Na_0^2}{2a^2} - \frac{Na^2h^2}{2} \tag{5.89}$$

の $\{\tau,\xi\}$ による平均[11], つまり

$$-[\mathcal{L}(J,h;\{\tau\})]_{\{\tau,\xi\}} = [\log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{\frac{J}{2N}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \tau_i\sigma_i}]_{\{\tau,\xi\}} - \log \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \mathrm{e}^{\frac{J}{2N}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j} + \frac{Na_0^2}{2a^2} - \frac{Na^2h^2}{2} \tag{5.90}$$

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

$$-\frac{\partial[\mathcal{L}(J,h;\{\tau\})]_{\{\tau,\xi\}}}{\partial J} = -\left[\frac{\partial \mathcal{L}(J,h;\{\tau\})}{\partial J}\right]_{\{\tau,\xi\}} \tag{5.91}$$

$$-\frac{\partial[\mathcal{L}(J,h;\{\tau\})]_{\{\tau,\xi\}}}{\partial h} = -\left[\frac{\partial \mathcal{L}(J,h;\{\tau\})}{\partial h}\right]_{\{\tau,\xi\}} \tag{5.92}$$

等と仮定する. そこで, この更新式を評価する際に厄介な (5.89) 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.

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\, \mathrm{e}^{(\sqrt{J/2N}\sum_i \sigma_i)^2 + h\sum_i \tau_i\sigma_i} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/NJ}}\, \mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\, \mathrm{e}^{-\frac{NJ}{2}m^2 + Jm\sum_i \sigma_i + h\sum_i \tau_i\sigma_i} \end{aligned} \tag{5.93}$$

ここで, 第 1 行目の変形では, この講義で既に出てきた, ハバード・ストラトノビッチ変換:

$$\mathrm{e}^{A^2} = \int_{-\infty}^{\infty} Dx \exp(\sqrt{2}Ax), \;\; Dx \equiv \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \tag{5.94}$$

を用いた. この時点で各サイトごとに独立に σ に関する和をを実行することができるので

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/NJ}}\, \mathrm{e}^{-\frac{NJ}{2}m^2} \left(\mathrm{tr}_{\sigma_1} \mathrm{e}^{Jm\sigma_1 + h\tau_1\sigma_1}\right) \cdots \left(\mathrm{tr}_{\sigma_N} \mathrm{e}^{Jm\sigma_N + h\tau_1\sigma_N}\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/NJ}} \mathrm{e}^{N\left\{-\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \log\cosh(Jm + h\tau_i)\right\}} \\ &\simeq \mathrm{e}^{N\left\{-\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \log\cosh(Jm + h\tau_i)\right\}} \end{aligned} \tag{5.95}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial m}\left\{-\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \log\cosh(Jm + h\tau_i)\right\} = 0 \tag{5.96}$$

すなわち

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \tanh(Jm + h\tau_i) \tag{5.97}$$

を満たさなければならない. この右辺は自己平均な量となり, 大数の法則から $N\to\infty$ の極限で, この量は自身の $\{\tau,\xi\}$ に関する平均値に一致する. そこで, $\{\tau,\xi\}$ に関する平均が今や一体の分布:

$$\mathrm{tr}_\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, P_{J^*}(\xi) P_{h^*}(\tau|\xi)(\cdots) = \mathrm{tr}_\xi \frac{\mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{2\pi}a} \exp\left[-\frac{(\tau - a_0\xi)^2}{2a^2}\right](\cdots) \tag{5.98}$$

[11] 周辺尤度は $\{\tau\}$ を介して $\{\xi\}$ にも依存することに注意.

での平均であることに注意すると

$$
\begin{aligned}
m &= \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{2\pi}a} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2a^2}(\tau - a_0\xi)^2} \tanh(Jm + h\tau) \\
&= \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \, \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \qquad (5.99)
\end{aligned}
$$

となる (ここで, $\tau - a_0\xi = ax$ と変換した). また, m_0 は次の原画像についての状態方程式の解である.

$$
m_0 = \tanh(J^* m_0) \qquad (5.100)
$$

同様にして, (5.95) 式より

$$
\begin{aligned}
\frac{\log Z}{N} &= -\frac{Jm^2}{2} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \log\cosh(Jm + h\tau_i) \\
&= -\frac{Jm^2}{2} + \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \, \log\cosh(Jm + hax + ha_0\xi) \qquad (5.101)
\end{aligned}
$$

となり, 非一様系の自由エネルギーが得られる. これが (5.89) 式の右辺第 1 項に相当する.

5.6.6 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

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{N}\frac{\partial[\mathcal{L}(J,h;\{\tau\})]_{\{\tau,\xi\}}}{\partial J} &= -\frac{m^2}{2} + m\frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \\
&+ \frac{m_1^2}{2} - m_1 \tanh(m_1 J) \qquad (5.102) \\
-\frac{1}{N}\frac{\partial[\mathcal{L}(J,h;\{\tau\})]_{\{\tau,\xi\}}}{\partial h} &= \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx(ax + a\xi) \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \\
&- a^2 h \qquad (5.103)
\end{aligned}
$$

と直ちに計算できる (我々は (5.91),(5.92) 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

$$
c_J \frac{dJ}{dt} = -\frac{m^2}{2} + m\frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) + \frac{m_1^2}{2} - m_1 \tanh(m_1 J) \qquad (5.104)
$$

$$
c_h \frac{dh}{dt} = \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx(ax + a_0\xi) \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) - a^2 h \qquad (5.105)
$$

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て

$$
c_m \frac{dm}{dt} = -m + \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \qquad (5.106)
$$

$$
c_{m1} \frac{dm_1}{dt} = -m_1 + \tanh(Jm_1) \qquad (5.107)
$$

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.

$$\begin{aligned} M(t) &= \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx\, \mathrm{sgn}[J(t)m(t) + h(t)ax + h(t)a_0\xi] \\ &= 1 - \frac{\mathrm{e}^{J^* m_0}}{\cosh(J^* m_0)} H\left(\frac{J(t)m(t) + h(t)a_0}{h(t)a}\right) - \frac{\mathrm{e}^{-J^* m_0}}{\cosh(J^* m_0)} H\left(\frac{J(t)m(t) - h(t)a_0}{h(t)a}\right) \end{aligned} \tag{5.108}$$

ここで, $H(x)$ はこの講義で既に度々出てきた, 次式で定義される補誤差関数である.

$$H(x) = \int_x^{\infty} Dz, \;\; Dz \equiv \frac{dz}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \tag{5.109}$$

また, この重なり $M(t)$ 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ょう.

$$P_b(t) = \frac{1}{2}(1 - M(t)) \tag{5.110}$$

この P_b の平衡状態: $t \to \infty$ での値 P_b の $1/J$ 依存性は, (5.106) 式で $dm/dt = 0$ とおいた方程式と, (5.108)(5.110) 式で $J(t) = J, h(t) = h, m(t) = m, M(t) = M, P_b(t) = P_b$ と置いた式:

$$m = \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx \tanh(Jm + hax + ha_0\xi) \tag{5.111}$$

$$\begin{aligned} M &= \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)} \int_{-\infty}^{\infty} Dx\, \mathrm{sgn}[Jm + ax + a_0\xi] \qquad (5.112) \\ &= 1 - \frac{\mathrm{e}^{J^* m_0}}{\cosh(J^* m_0)} H\left(\frac{Jm + ha_0}{ha}\right) - \frac{\mathrm{e}^{-J^* m_0}}{\cosh(J^* m_0)} H\left(\frac{Jm - ha_0}{ha}\right) \end{aligned}$$

$$P_b = \frac{1}{2}(1 - M) \tag{5.113}$$

を解くことで, 例えば次の図 33 のように与えられる. ここで, ミクロなパラメータ (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.

5.6.7 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 (5.106) 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 : $\{\sigma\} = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_k, \cdots, \sigma_N)$ の配列中の k 番目のピクセル σ_k が $\sigma_k \to -\sigma_k$ とその符号を変える確率は

$$w_k(\{\sigma\}) = \frac{1}{2}[1 - \sigma_k \tanh[h_k(\{\sigma\})]] \tag{5.114}$$

で与えられる. ただし, 局所磁場, つまり, 画素 σ_i に作用する磁場を

$$h_k(\{\sigma\}) = \frac{J}{N}\sum_j \sigma_j + h\tau_k \tag{5.115}$$

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

$$E = -\sum_k h_k(\{\sigma\})\sigma_k = -\frac{J}{N}\sum_j\sum_k \sigma_j\sigma_k - h\sum_k \tau_k\sigma_k \tag{5.116}$$

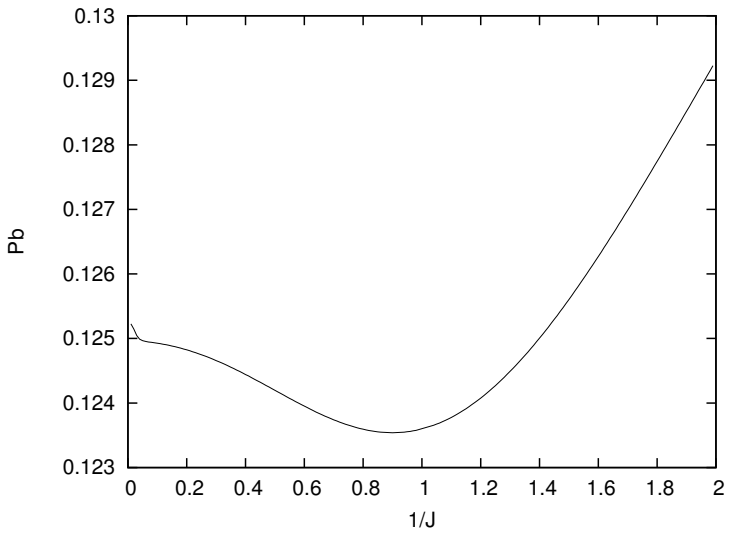


図 33: ビット誤り率：P_b の $1/J$ 依存性. ノイズレベル h の真の値を h_* として, $h = h_* J$ と置いている.

となっていることに注意しよう.

先に我々は, ボルツマン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 $\mathrm{e}^{-\Delta E/T}$ 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 $\{\sigma\}$ のヒストグラムはボルツマン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, やはりボルツマン分布を実現することができる. [**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, 既に度々この講義では出てきたが, このとき, 「確率の保存」を表す**マスター方程式**は

$$\frac{dP_t(\{\sigma\})}{dt} = \sum_{k=1}^{N} [P_t(F_k\{\sigma\})w_k(F_k\{\sigma\}) - P_t(\{\sigma\})w_k(\{\sigma\})] \tag{5.117}$$

で与えられる. 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 $F_k(\{\sigma\} = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_k, \cdots, \sigma_N)) = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, -\sigma_k, \cdots, \sigma_N)$ 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

$$m = \frac{1}{N}\sum_i \sigma_i \tag{5.118}$$

$$\hat{a} = \frac{1}{N}\sum_i \tau_i \sigma_i \tag{5.119}$$

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, 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

$$\mathcal{P}_t(m,\hat{a}) = \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} P_t(\{\sigma\})\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})] \tag{5.120}$$

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

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{P}_t(m,\hat{a})}{dt} &= \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \frac{dP_t(\{\sigma\})}{dt}\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})] \\
&= \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \sum_k \left[P_t(F_k\{\sigma\})w_k(F_k\{\sigma\}) - P_t(\{\sigma\})w_k(\{\sigma\})\right]\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})] \\
&= \mathrm{tr}_{\{\sigma\}} \sum_k P_t(\{\sigma\})w_k(\{\sigma\})\Bigg\{\delta\left(m-m(\{\sigma\})-\frac{2\sigma_k}{N}\right)\delta\left(\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})-\frac{2\tau_k\sigma_k}{N}\right) \\
&- \delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})]\Bigg\} \\
&= \frac{\partial}{\partial m}\sum_{\{\sigma\}} P_t(\{\sigma\})\left\{\frac{1}{N}\sum_k[1-\sigma_k\tanh(h_k(\{\sigma\}))]\sigma_k\right\}\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})] \\
&+ \frac{\partial}{\partial \hat{a}}\sum_{\{\sigma\}} P_t(\{\sigma\})\left\{\frac{1}{N}\sum_k[1-\sigma_k\tanh(h_k(\{\sigma\}))]\tau_k\sigma_k\right\}\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})] \\
&= \frac{\partial}{\partial m}\{P_t(m,\hat{a})m\} + \frac{\partial}{\partial \hat{a}}\{\mathcal{P}_t(m,\hat{a})\hat{a}\} \\
&- \frac{\partial}{\partial m}\left\{\mathcal{P}_t(m,\hat{a})\frac{1}{N}\sum_k \tanh\left(\frac{J}{N}\sum_j\sigma_j + h\tau_k\right)\right\} \\
&- \frac{\partial}{\partial \hat{a}}\left\{\mathcal{P}_t(m,\hat{a})\frac{1}{N}\sum_k \tau_k\tanh\left(\frac{J}{N}\sum_j\sigma_j + h\tau_k\right)\right\} \\
&= \frac{\partial}{\partial m}\{P_t(m,\hat{a})m\} + \frac{\partial}{\partial \hat{a}}\{\mathcal{P}_t(m,\hat{a})\hat{a}\} \\
&- \frac{\partial}{\partial m}\left\{\mathcal{P}_t(m,\hat{a})\frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^*m_0\xi}}{2\cosh(J^*m_0)}\int_{-\infty}^{\infty} Dx\tanh(Jm+hax+ha_0\xi)\right\} \\
&- \frac{\partial}{\partial \hat{a}}\left\{\mathcal{P}_t(m,\hat{a})\frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^*m_0\xi}}{2\cosh(J^*m_0)}\int_{-\infty}^{\infty} Dx\,(ax+a_0\xi)\tanh(Jm+hax+ha_0\xi)\right\}
\end{aligned} \tag{5.121}$$

が得られる．最後に

$$\mathcal{P}_t(m,\hat{a}) = \delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})] \tag{5.122}$$

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，例えば，m を両辺にかけて m で部分積分すれば，

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dmd\hat{a}\,\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})]m = \frac{dm}{dt} \tag{5.123}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dmd\hat{a}\,\frac{\partial}{\partial m}\{\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})]m\}\,m &= \left[\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})]m^2\right]_{-\infty}^{\infty} \\
&- \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dmd\hat{a}\,\delta[m-m(\{\sigma\})]\delta[\hat{a}-\hat{a}(\{\sigma\})]m \\
&= -m
\end{aligned} \tag{5.124}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dmda\frac{\partial}{\partial m}m\{\cdots\} \quad = \quad \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)}\int_{-\infty}^{\infty} Dx\tanh(Jm+hax+ha_0\xi) \tag{5.125}$$

が得られる．同様にして, 両辺に $\hat{a}$ をかけて $\hat{a}$ で部分積分する．すると結局, 次の 2 本の微分方程式が得られる．

$$\frac{dm}{dt} = -m + \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)}\int_{-\infty}^{\infty} Dx\tanh(Jm+hax+ha_0\xi) \tag{5.126}$$

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = -\hat{a} + \frac{\mathrm{tr}_\xi \mathrm{e}^{J^* m_0 \xi}}{2\cosh(J^* m_0)}\int_{-\infty}^{\infty} Dx\,(ax+a_0\xi)\tanh(Jm+hax+ha_0\xi) \tag{5.127}$$

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 (5.106) が得られた．なお, (5.107) 式の m_1 についての方程式は, 事前分布:

$$P_J(\{\sigma\}) = \frac{\exp(\frac{J}{N}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j)}{\mathrm{tr}_{\{\sigma\}}\exp(\frac{J}{N}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j)} \tag{5.128}$$

の系についての方程式であるから, (5.126) 式で $h=0$ とおけば, それが (5.107) 式となる．

5.6.8 解析結果：EM アルゴリズムとの比較

結果のいくつかを下の図 34 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 34(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

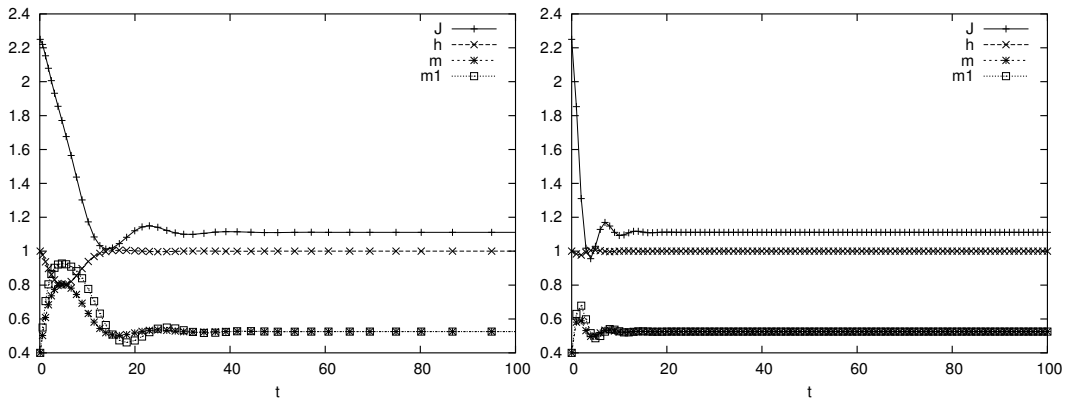


図 34: ここで説明した周辺尤度の勾配法による結果 (左) と EM アルゴリズムによる結果 (右)．いずれも, $J, h, m,$ および, m_1 の時間変化をプロットしてある．各パラメータの初期値は勾配法, EM アルゴリズム共に同じ値を選んである．勾配法の緩和時間は $c_J = c_h = c_m = c_{m_1} = 1$.

勾配法を上回っ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関しても, 次の図 35 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．

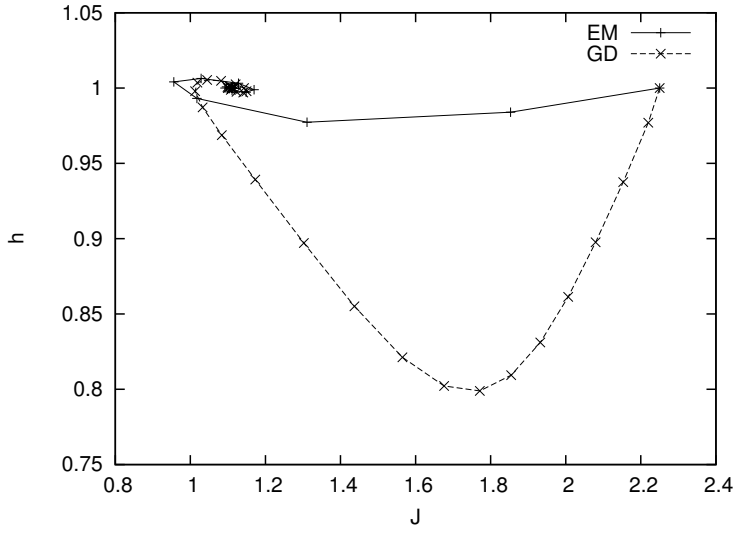


図 35: 勾配法と EM アルゴリズムの相空間内での軌道.

5.7 画像復元の応用

前節までで画像復元について詳しくみてきた. 画像復元の問題はベイズの公式を介してイジング模型と密接に関連つけられ, また, その関係性が非常に明確に与えられるため, 統計力学と情報処理の問題を考える上で見通しが良く, その意味でこれから情報統計力学を学ぼうとする者とって最も好ましい例となっている. しかし, 情報科学の問題は画像復元だけでは無いし, また, 画像処理一つとってみても, 画像復元は数ある問題の一つに過ぎない. そこで, ここでは画像復元の問題で得た知識を適用することのできる周辺課題, 類似課題を考えよう. どのような技術もその適用範囲を拡大していくことが重要であるし, また, そのような拡張例を具体的にみることで方法論としての統計力学の普遍性を改めて認識することができるかもしれない.

5.7.1 ハーフトーン処理とその逆処理

印刷の分野では高画質を実現するために数多くの情報処理技術が開発されている．とりわけ，白黒 2 値または数種類の色を用いて疑似的に多値画像を表現するハーフトーン画像を生成するための技術が重要とされており，これらは一般に**デジタルハーフトーン処理 (digital halftoning)** と呼ばれている．この研究分野では, 現在のところディザ法，誤差拡散法等，数多くのハーフトーン処理技法が確立されているが, 得られたハーフトーン画像から元の多値画像を復元する**逆ハーフトーン処理**もスキャナ技術等, 「ハーフトーン画像の電子化」の観点から重要となる．一般に高い階調値を持つ画素をより低い階調値を持つ画素の集合によって表現するハーフトーン処理では原画像情報が失われるため，その逆処理は不良設定問題に分類される. これまでのところ, この不良設定問題を解く手法としては, 個別の濃淡画像に特化したフィルタが提案されてきた.

このような背景を踏まえ, 本節では, どのような濃淡画像に対してもある程度柔軟に対応でき, かつ, その統計的な性能評価までもが統一の枠組みの中で, それも, 系統立てて遂行することのできる方法論として, 情報統計力学に基づくアプローチを紹介しよう．ここでみる方法は前節までの画像復元の特殊な一例として捉えることもできる.

そこで, ここではまず, ハーフトーン処理とその逆処理との関係を明らかにしておきたい. 図 36 はハーフトーン処理の一例を示したものである．まず，ここでのハーフトーン処理は白および黒の画素を用いて濃淡階調を疑似的に表現する処理として定義される．ハーフトーン画像においては，白または黒の画素の密度分布が元の濃淡画像の階調値を近似的に表現しており，高周波成分を認識できないヒトの視覚特性を通してハーフトーン画像を眺めた場合，あたかもそれが濃淡画像のように認識されるわけである．

一方の「逆ハーフトーン処理」はハーフトーン処理の逆処理であり，ハーフトーン画像から元の濃淡画像を復元する問題として定義される．ここで，ハーフトーン処理の前後で解像度が変化しない処理を施したハーフトーン画像は元の濃淡画像の情報を完全に保持することはできないことに注意すると, 逆ハーフトーン処理の問題はいわゆる「不良設定問題」に分類されることがわかる.

以上でハーフトーン処理とその逆処理が定義できた. そこで, 次に原濃淡画像とそのハーフトーン処理, そして統計力学に基づく逆ハーフトーン処理法を具体的に紹介していこう.

図 36: デジタルハーフトーン処理の一例.

5.7.2　閾値マスク法によるハーフトーン処理

逆ハーフトーン処理を行うためには, それに先んじて「順ハーフトーン処理」を定義しなければならない. 後に述べるように, 我々の方法はハーフトーン画像が一枚得られれば, そのエネルギー関数を構築することができるという意味において, 個別のハーフトーン処理法に依存しない定式化ではあるが, 性能評価にあたっては, 具体的に順処理の方法を与えなければならない. そこで, ここではディザ法の中でも, 閾値マスク法と呼ばれる処理に基づいて生成されるハーフトーン画像からの原濃淡画像の復元を考える.

閾値マスク法は最も基本的なハーフトーン処理技法の一つであり，濃淡画像の各画素にある種の閾値処理を施すことによりハーフトーン画像を生成する手法である．閾値マスク法の具体的な手続きは図 37 に示すサイズが $L_m \times L_m = 2 \times 2$, あるいは, 4×4 の閾値配列を複数用意し，これらをハーフトーン処理の対象となる原濃淡画像上に互いに重なり合わないように敷き詰め，濃淡画像の各画素に閾値配列中の閾値を 1 対 1 に対応づける．次いで, 各画素に対し, 濃淡画像の画素値

$\xi_{x,y}$ をこの画素と対応する閾値

$$M_{x,y} \in \{0, (Q-1)/(L_m^2-1), 2(Q-1)/(L_m^2-1), \cdots, Q-1\} \tag{5.129}$$

を使って次の閾値処理：

$$\tau_{x,y} \quad = \quad (Q-1)\Theta\left(\xi_{x,y} - M_{x,y}\right) \tag{5.130}$$

を施すことで所望のハーフトーン画像

$$\{\tau\} \equiv \{\tau_{x,y} | x, y = 0, \cdots, L-1\} \tag{5.131}$$

を生成する．ここで $\Theta(\cdots)$ はこの講義で度々出てきたステップ関数:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \tag{5.132}$$

である．また, $L_m^2 = Q$ の場合, 濃淡画像と閾値配列の各要素の取りうる範囲は共通に $0, \cdots, Q-1$ となることに注意されたい．よって, ハーフトーン画像の各画素は $\tau_{x,y} \in \{0, Q-1\}$ と 2 階調へ符号化される．このような閾値マスク法を用いて生成されたハーフトーン画像では, 黒白のドットの密度分布が近似的に濃淡画像の階調値を表している．従って, この手法, および, その有効性が認められている既存のいかなるハーフトーン手法も, **高周波成分を正確に認識できない特性を持つヒトの視覚系がハーフトーン画像を認識する際，その画像をあたかも元の濃淡画像であるかのように見てしまうというヒトの視覚特性を巧妙に使っている**ことに注意すべきである．

0	2
3	1

(a)

0	8	2	10
12	4	14	6
3	11	1	9
15	7	13	5

(b)

図 37: (a) 2×2 の Bayer 型閾値配列　(b) 4×4 の Bayer 型閾値配列.

5.7.3 最適化問題としての定式化

ここでは, 逆ハーフトーン画像を Q 階調イジングスピン: $z_{x,y} = 0, \cdots, Q-1$ で表現しよう．これらの集合:

$$\{z\} \equiv \{z_{x,y} | x, y = 0, \cdots, L-1\} \tag{5.133}$$

は原濃淡画像 ($\{\xi\}$ としよう) の推定値を表すことに注意されたい．ここで, 単位ステップ関数の性質から方程式 (5.130) は正則でない．つまり, $\tau_{x,y}$ が与えられた場合, 式 (5.130) を $\xi_{x,y}$ について解こうとすると不定になる．従って, $\xi_{x,y}$ の推定値 $z_{x,y}$ を定めるためには $z_{x,y}$ について何らかの拘束条件が必要となり, そうした付加的情報を別途補わない限り, 原濃淡画像を特定することはできないことに注意しよう．この意味で逆ハーフトーン処理は不良設定問題である．

そこで, エネルギー関数：

$$E(\{z\}|\{\hat{\tau}\}) = h\sum_{(x,y)}(z_{x,y}-\hat{\tau}_{x,y})^2 + J\sum_{(x,y)}\sum_{\delta_x,\delta_y=-1,0,+1}\{(z_{x,y}-z_{x+\delta_x,y})^2+\left(z_{x,y}-z_{x,y+\delta_y}\right)^2\} \tag{5.134}$$

を導入する. ここで変数 $\hat{\tau}_{x,y}$ はハーフトーン画素の情報を反映した「外場」であり, 各画素ごとに

$$\hat{\tau}_{x,y} = \Delta_\tau^{-1}\sum_{\Delta(\delta_x,\delta_y)}\tau_{x+\delta_x,y+\delta_y} \tag{5.135}$$

$$\sum_{\Delta(\delta_x,\delta_y)}(\cdots) \equiv \sum_{\delta_x,\delta_y=-\frac{\sqrt{\Delta_\tau}-1}{2},-\frac{\sqrt{\Delta_\tau}-1}{2}+1,\cdots,\frac{\sqrt{\Delta_\tau}-1}{2}}(\cdots) \tag{5.136}$$

によって定義される. ここに, Δ_τ はその平方根 $\sqrt{\Delta_\tau}$ が $1,3,5,\cdots$ のような奇数値をとる整数であり, 点 (x,y) に配置された画素, および, その画素を取り囲む周辺の画素数を表す. 特に, $\Delta_\tau=1$ の場合は, (5.135) 式が $\hat{\tau}_{x,y}=\tau_{x,y}$ となることに注意すれば, ハーフトーン画像の画素そのものを外場として用いることになる. この自然な拡張として, $\tau_{x,y}$ を中心とする 3×3 の画像領域を周辺情報として用いる場合には $\Delta_\tau=3\times3=9$ である.

ところで, この定義 (5.135) に従えば, 集合

$$\{\hat{\tau}\} \equiv \{\hat{\tau}_{x,y}|x,y=0,\cdots,L-1\} \tag{5.137}$$

の各成分は (5.130) 式より, 原濃淡画像 $\{z\}$ の各成分と同じ階調値幅 $\{0,Q-1\}$ の範囲内にその値を持つことに注意する. また, 上記のようにエネルギー関数を $E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})$ のように表記した理由は, このエネルギー関数が (5.135) 式の意味でのハーフトーン画像 $\{\hat{\tau}\}$ が一枚与えられて初めて定義される量であることを明示するためである. 従って, 本研究で性能評価の際に順ハーフトーン処理として用いる閾値マスク法で生成された (5.135) 式の意味でのハーフトーン画像 $\{\hat{\tau}\}$ 以外のいかなる方法で生成されたハーフトーン画像に対してもエネルギー関数 (5.134) 自体は有効であり, この意味において, ここでの手法は個別の濃淡画像, 個別のハーフトーン処理に依存しない.

さて, このように定義されたエネルギー関数 (5.134) のそれぞれの項の持つ意味を見ていくことにしょう. まず, このエネルギー関数 (5.134) の右辺第 1 項は, 推定画像 $\{z\}$ が (5.135) 式の意味での濃淡画像 $\{\hat{\tau}\}$ と近ければ近いほど全エネルギーを下げる効果を表し, 結果としてハーフトーン画像の注目画素, および, その近傍画素の画素値の平均値が元の濃淡画像の注目画素の階調値で近似できることを反映する. 一方, 式 (5.134) の右辺第 2 項は隣接する画素の階調値を可能な限り同じ値に保ち, 結果として面性の高い画像を安定化する効果を表す. これがこの問題を「正則」なものとする. 従って, 我々はここで, これら両効果を巧く取り込むような巨視的パラメータ J,h を設定し, エネルギー関数の最小化を行うことで, その最小エネルギー状態を原濃淡画像の推定値とする戦略を選ぶことができる. つまり, ここで我々の逆ハーフトーン処理がある種の「最適化問題」として定式化されたことになる.

次に考えなければならないのは最適化ツールであるが, ここでは, エネルギー関数 (5.134) を最小化する手続きとして, 本講義で既に何度もみてきたシミュレーテッド・アニーリング (SA) を用いることにする. この最適化アルゴリズムによる復元 (推定) 画像

$$\{\hat{z}\} \equiv \{\hat{z}_{x,y}|x,y=0,\cdots,L-1\} \tag{5.138}$$

は形式的に各画素ごとに

$$\hat{z}_{x,y} = \lim_{T_{\rm m}\to 0} \langle z_{x,y} \rangle_{T_{\rm m}} \tag{5.139}$$

$$\langle \cdots \rangle_{T_{\rm m}} \equiv \frac{\sum_{\{z\}} (\cdots)\, {\rm e}^{-E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})/T_{\rm m}}}{\sum_{\{z\}} {\rm e}^{-E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})/T_{\rm m}}} \tag{5.140}$$

で与えられる.

ここに現れる確率分布: ${\rm e}^{-E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})/T_{\rm m}}/Z, Z \equiv \sum_{\{z\}} {\rm e}^{-E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})/T_{\rm m}}$ は既に何度も出てきたボルツマン分布であり, Q^{L^2} の自由度を持つ確率分布関数である. L が大きな場合, この L についての指数オーダ: Q^{L^2} 個の和を解析的/数値的に実行することは事実上不可能であるため, ここでは上記期待値 $\langle \cdots \rangle_{T_{\rm m}}$ の計算をマルコフ連鎖モンテカルロ法からのサンプリングにより近似的に実行し, 温度を下げることで SA を構成する. このとき, ボルツマン分布を最大化する状態 $\{z\}$ は任意の有限温度 $T_{\rm m} < \infty$ で常にエネルギー関数 $E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})$ を最小化する状態であり, 特に絶対零度 $T_{\rm m} = 0$ ではこのエネルギー最小状態のみがボルツマン分布からのスナップショットとして出現することに注意する. 従って, 既にこの講義で見てきたように, 十分緩やかに温度を下げ, システムを徐冷することができれば, (5.135) 式で与えられたハーフトーン画像 $\{\hat{\tau}\}$ に対し, $T_{\rm m} = 0$ のとき生成される状態はエネルギー関数 $E(\{z\}|\{\hat{\tau}\})$ を最小化する状態のみとなり, この意味で確率 1 で最小エネルギー状態が得られることになる.

5.7.4 確率的画像復元との関係

ここまでの議論で, 我々は逆ハーフトーン処理を最適化問題として捉えた. 一方, ベイズ統計に基づく確率的画像修復における MAP 推定は事後確率の対数をエネルギー関数とみなすことにより, 本研究と同じように SA によって, 所望の修復画像を求めることができる. ここでは, これら両者の関係について簡単に述べておきたい.

画像修復は原画像が何らかの外部ノイズにより劣化し, その劣化画像の情報のみから原画像を推定する問題である. この意味でノイズによって欠落した情報を補うことが必要となり, 画像修復は逆ハーフトーン処理と同様に不良設定問題の一種であると言える.

ベイズ統計に従えば, 劣化過程 $\{z\}$ (原画像) $\to \{\tau\}$ (劣化画像) を条件付き確率分布 $P(\{\tau\}|\{z\})$ によって特徴付け, 事後確率をこの尤度と原画像についての事前知識を表す事前分布 $P(\{z\})$ を用いて

$$P(\{z\}|\{\tau\}) \propto P(\{\tau\}|\{z\})P(\{z\}) \tag{5.141}$$

と導出する. 従って, 原画像, 劣化画像をそれぞれ Q 階調イジングスピンで表現し, 外部ノイズを加法的白色ガウスノイズと仮定し, 事前確率として強磁性 Q 階調イジング模型のボルツマン分布を用いると, 事後確率の対数はエネルギー関数 (5.134) において, $\{\hat{\tau}\}$ をその劣化画像 (観測画像) $\{\tau\}$ で置きなおしたものと等しくなる.

この事実を考慮すると, 確率的画像修復と逆ハーフトーン処理の本質的な違いは観測量 $\{\tau\}$ をそのままエネルギー関数に組み込むか, あるいは, 各格子点でのハーフトーン画素としての観測量 $\tau_{x,y}$ の周辺情報を用い, (5.135) 式の意味での各画素 $\tau_{x,y}$ の周りの平均値 $\{\hat{\tau}\}$ を組み込むか, という点のみにある. しかし既に見たように, 本稿でのハーフトーン処理はディザ行列を用いて $\{z\}$ (原画像の推定値) $\to \{\tau\}$ (ハーフトーン画像) が決定論的に行われ, しかも, その階調値が Q 階調から 2 階調に低減されることから, ベイズ統計の意味での尤度 (ノイズ過程の確率模型) を適切な確率模型で表現することは難しい.

5.7.5 計算機実験: 最適化された平均値フィルタとの比較

実際のハーフトーン画像に適用した際に示す性能を検証するため，256 階調の標準画像 *Lenna* の画素数を画素数 400×400 に選んだものをサイズが 4×4 の Bayer 型閾値配列を使ったディザ法を用いて変換したハーフトーン画像を用意し, これに前節までで導入した統計力学の手法を適用する.

この手法との比較対象として, ここでは画像のノイズ除去等に用いられる平均値フィルタを選ぶことにする. $\Delta_\tau = 9$ の場合, エネルギー関数の定義 (5.134) より, $J/h \to 0$ の極限を取った後の SA によって構成される解 (5.139):

$$\hat{z}_{x,y} = \lim_{T_{\mathrm{m}} \to 0} \lim_{J/h \to 0} \langle z_{x,y} \rangle_{T_{\mathrm{m}}} \ (\forall_{x,y}) \tag{5.142}$$

は, 我々がここで比較対象として用いる平均値フィルタ 1 回分の処理 (5.135) のそれと一致することに注意されたい. この意味で, 上記に説明した統計力学に基づくアルゴリズムは巨視的パラメータ (J, h, Δ_τ), および, 制御変数 T_{m} の上記極限において, 比較対象である平均値フィルタ (5.135) '1 回分' の処理をその特殊な場合として含む手法となっている. さて, ノイズ除去法として平均値フィルタを用いる場合と異なり, 2 階調画像に対し平均値フィルタ適用する場合には濃淡画像に近い画像が 1 回の処理では得られないことに注意する. その理由は, 1 回の処理では十分な「階調値の混合」が行われないため, 濃淡画像に含まれる階調値の全てを生成することができないためである. より具体的に言えば, 平均値フィルタ一回分の処理で復元画像は $(Q-1)k/\Delta_\tau, k = 0, 1, 2, \cdots, \Delta_\tau - 1$ の計 Δ_τ 階調を持つが, 原濃淡画像の階調値が $Q(> \Delta_\tau)$ の場合, 残りの $Q - \Delta_\tau$ もの階調値は出現しない. また, 逆に過度に多数回の処理を施すと, 必要以上に階調値を平滑化してしまうため, 得られる画像は処理回数 n の増加とともに原画像から離れていくことになる. 図 38 この平均値フィルタを *Lenna* のハーフトーンの画像に対し, $n = 1$,25 回施して得られる修復画像である. この図より, $n = 1$(図 38(左)) の場合には原画像の階調値を十分に表現できておらず, 逆に $n = 25$(図 38(右)) の場合には平滑化が進みすぎて部分的にボケた画像となってしまっている. 従って, この平均値フィルタを逆ハーフトーン処理に用いるためには, その繰り返し回数の最適な選び方が得られる画像の良好性に対して本質的であることがわかる. 直ぐ後にみるように, 我々の提案手法は $n = 1, 25$ の平均値フィルタ $(\sigma(n=1) = 0.009584, \sigma(n=25) = 0.003384)$ より自乗誤差 σ の観点で優っている.

図 38: (左) 復元画像 (256 階調標準画像 *Lenna*, 4×4 の Bayer 型閾値配列，画素数 400×400, 平均値フィルタ 1 回). $\sigma = 0.009584$. (右) 復元画像 (256 階調標準画像 *Lenna*, 4×4 の Bayer 型閾値配列，画素数 400×400, 平均値フィルタ 25 回). $\sigma = 0.003384$.

図 39: (左) 復元画像 (256 階調標準画像 *Lenna*, 4×4 の Bayer 型閾値配列, 画素数 400×400, $(h, J, T_{\rm m}) = (1, 4.0, 0.1)$ の統計力学によるアルゴリズム), (右) 復元画像 (256 階調標準画像 *Lenna*, 4×4 の Bayer 型閾値配列, 画素数 400×400, 平均値フィルタ $n_{\rm opt} = 4$ 回)

図 39 に提案手法およびサイズが 3×3 の窓を用いた最適処理回数 $n_{\rm opt} = 4$ の平均値フィルタを用いて復元した濃淡画像を示す．図 39(左) の濃淡画像は各温度 $T_{\rm h}$ でのモンテカルロ・ステップを 2000 から 5000 に増加させて $T_{\rm h}$ の値を所望の $T_{\rm m} = 0.1$ まで冷却した後，式 (5.140) に基づき作成した．一方，平均値フィルタによる復元画像には，前述のようにハーフトーン画像に $n_{\rm opt} = 4$ 回平均値フィルタを施して生成した自乗誤差が最小値をとる濃淡画像を用いることとし，図 39(右) に示す復元画像が実際に得られた濃淡画像である．この結果より, SA 法による復元画像の自乗誤差は $\sigma = 0.002907$ である一方, サイズが 3×3 の窓を用いた平均値フィルタによる復元画像の自乗誤差は $\sigma = 0.001960$ となり，自乗誤差に基づく性能評価では, 最適処理回数 $n_{\rm opt} = 4$ の平均値フィルタが優れているという結果が得られた．しかし, この結果から, この差が有為であると結論つけることはできない. 事実, 自乗誤差に全画素数 L^2 を掛けた量：

$$L^2\sigma = \frac{1}{Q^2}\sum_{(x,y)}(\tilde{z}_{x,y} - \xi_{x,y})^2 \tag{5.143}$$

は 2 値画像の場合には復元画像と原画像とで食い違うビット数を表しており, Q 階調の濃淡画像に対しても実質的には同様の意味を持つと考えることができる．この量を，提案手法, 最適処理回数 $n_{\rm opt} = 4$ の最適化された平均値フィルタで得られた復元画像のそれぞれに対し, 全画素数 $160,000$ 個の画素について計算してみると, 提案手法による復元画像では 46.70 ビットの食い違いが見られ, 最適処理回数 $n_{\rm opt} = 4$ の最適化された平均値フィルタによる復元画像では 31.36 ビットの食い違いが見られることがわかる．このような尺度で精度を再考する限り，両者の差 15.34 ビット/160,000 ビットは必ずしも有為なものとは言えず，ここでは両者がおおよそ「同程度の性能」を有していると考えるのが自然である．

6　脳とその数理モデル

ここからは主に工学的立場から神経回路網 (ニューラルネットワーク) を研究していく上での必要な知識を学んでいく. 少なくとも工学的な意味において, 神経回路網を研究することの動機は脳を持つヒト (あるいは生命体) の情報処理手法を模倣した振る舞いをする機械 (あるいはコンピュータ) を作ることである. このとき, そのアウトプット (認識, 記憶, 学習などの機能) がヒトと同じであれば, 必ずしも「脳」と同じ方法である必要はなくなってしまうので, そのような機械を創る際には脳のアーキテクチャや生理学的知見をある程度は考慮しなければならない. そこで, いくつかの生理学実験等に基づく脳の基本単位とその構造/動作についてみていくことにする.

6.1　パーセプトロン

まずは結合ベクトルの調節機能を持つ形式ニューロンモデルである「パーセプトロン」とその性質について詳しくみていく.

6.1.1　ノイマン型コンピュータとの比較

ここでは脳の数理モデルを扱うわけであるから, ともあれ従来のコンピュータ (ノイマン型) と計算機としての脳の処理様式の比較をすることから始めよう. 次に両コンピュータの仕様を載せる.

ノイマン型コンピュータ	脳
単位: プロセッサ	単位: ニューロン
演算速度: $\sim 10^8$ Hz	演算速度: $\sim 10^2$ Hz
シグナル/ノイズ $\sim\infty$	シグナル/ノイズ ~ 1
シグナルスピード $\sim 10^8$ m/sec	シグナルスピード ~ 1 m/sec
コネクション数 ~ 10	コネクション数 $\sim 10^4$
特徴：直列演算 プログラム & データ 外部プログラミング	特徴: 並列演算 シナプス結合, ニューロン, 閾値 自己プログラミング (自己組織化), 適応
ハードウエアの欠陥が致命的	ハードウエアの欠陥に対してロバスト

以上をまとめると, 脳 (型コンピュータ) の利点は

- ノイズ, 欠陥に対してロバスト (脳の神経細胞は毎日死滅しているのに, 我々の情報処理能力はさほど変わらない).
- 外部から, C, Fortran, Pascal 等の言語を用いてプログラミングする必要なし ⇒ 「学習」(後述) によって外部に適応する能力あり.
- ファジー, 確率的, あるいはノイズを含む情報に対処することができる.
  (例)
  科学史上の重要人物とそのキーワードの対応表を覚え, それに答えるという状況を考えよう (例えばダーウィン ↔ 進化論, ニュートン ↔ 万有引力). このとき $E = mc^3$ と提示されたら, 皆さんはどう答えるだろうか? 多くの人は「アインシュタイン」と答えるに違いない.

$E = mc^2$ と正しくキーワードが提示されていないにも関わらず, である. これは我々の脳が $E = mc^3$ は何かの間違いで, 出題者は $E = mc^2$ のことを言っているに違いないと類推することができるからである.

- 高度な分散処理
- コンパクトである

一方, 不利な点は

- 一つの素子の処理速度は早くない.
- 一つ一つの素子レベルでみると非常に誤差動が大きい.

などが挙げられるが, 脳全体としてみると, これらの不利な点を**高度に分散化した情報表現と並列演算によって補っている**と言える.

こうして見ると通常のコンピュータとはかなりの部分で異なっており, 工学的な応用という立場で見た場合には非常に魅力的な対象であることがわかる.

6.2 生理学から最も簡素な数理モデルへ

脳における実際の神経細胞の写真を図 40 に示す.

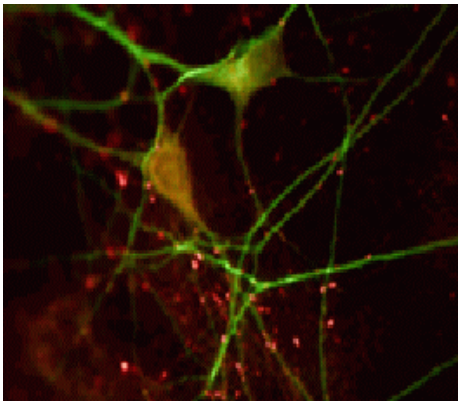


図 40: 実際の神経細胞.

これに対して, この神経細胞の模式図と各部位の名称を図 41 に載せる.
これらからわかることを要約すると, 各ニューロンはシナプスを介して他のニューロンに結合しており, 各ニューロンは信号を電気的なパルスとして伝える. 電気的なパルスの生成過程は次の様式に従う. 各シナプスはその結合部分に K^+, Na^+ 等の正のイオンを透過させるチャンネルと Cl^- 等の負のイオンを透過させる**イオンチャンネル**を有し, このチャンネルを調節することにより, シナプス内部と外部の電位差 (通常は -70 mV 程) を調節することができる. 一般的には, 図のようにこの電位差がある値 (約 -55 mV) を越えると高さ 100 V 幅 1 ms の大きさのパルスが生成され, このパルスは軸索上を電気的な信号 (イオンの流れ) として伝わっていく. その後, パルスを生成したニューロンは約 10 ms の「不応期」を経て, また, 電位差がある閾値を越えるとパルスを生成する. これを素朴に数理モデル化すると図 42 のようになる.

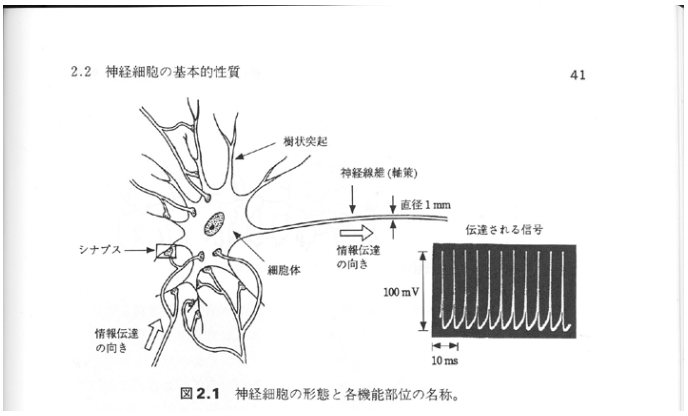


図 41: ニューロンの構成要素とその電圧特性.「神経細胞が行なう情報処理とそのメカニズム」松本元, 大津展之共編, 培風館 (1991) p. 41 の図 2.1 から抜粋.

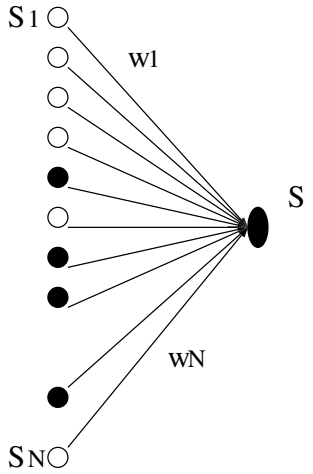


図 42: 神経素子 (ニューロン) の数理モデル. 各素子 $S_i(i=1,\cdots,N)$ は $S_i=1$(発火) あるいは $S_i=0$(静止) のどちらかの状態をとる. 注目するニューロン S の状態はこれらのニューロンからの重みつき和 $\sum_i w_i S_i$ がある閾値 θ を越えれば $S=1$ 越えなければ $S=0$ として決定される.

ここで, 各ニューロンは $S_i=1$(発火) か $S_i=0$(静止) の 2 つの状態のいずれかをとり, それぞれの値は注目するニューロンに重みつき和

$$h \equiv w_1 S_1 + w_2 S_2 + \cdots + w_N S_N \tag{6.1}$$

として入力される. S はこの入力和 h に対して

$$h > \theta \quad : S \to 1 \tag{6.2}$$

$$h < \theta \quad : S \to 0 \tag{6.3}$$

で決定される.

さて, ここでは注目する一つのニューロンの状態の決定がどのように行なわれるのかについて見たわけであるが, 図 43 のように, 他数のニューロンがつながっている場合はどうなるであろうか?

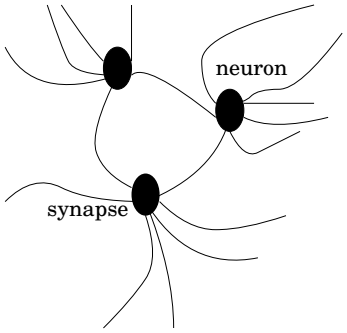


図 43: ニューロン同士をつなげる.

この場合には, 任意のニューロン i, j 間の結合 (シナプス結合) を w_{ij} とし, また i 番目のニューロンに関する閾値を θ_i とすると, 時刻 $t+1$ での i 番目のニューロンの状態が, 時刻 t でのニューロン $S_j (j \neq i)$ の状態を用いて

$$w_{i1}S_1 + w_{i2}S_2 + \cdots + w_{iN}S_N > \theta_i \quad : \quad S_i(t+1) = 1 \tag{6.4}$$

$$w_{i1}S_1 + w_{i2}S_2 + \cdots + w_{iN}S_N < \theta_i \quad : \quad S_i(t+1) = 0 \tag{6.5}$$

で決定されるとして自然に拡張される. ところで, ここで何も断りを入れずに「時刻」というものを導入したが, これはニューロン集団の状態変化が 1 ステップだけのものではなく, 上記のルールに従って $S_i(0) \to S_i(1) \to S_i(2) \to S_i(t) \to S_i(t+1) \to \cdots$ と変遷して行くものであるためである.

このように各ニューロンが時間的に変化するものであるとすると, その集団の時間変化の様式には大きく分けて次の 2 通りが考えられる.

- 状態変更則 (6.4),(6.5) が全てのニューロンに同時に適用される
  … 同期式状態変更 (paralell dynamics).
- ある時刻に 1 つだけのニューロンが状態更新の対象となる
  … 非同期式状態変更 (sequential dynamics).

現実の脳では各ニューロンが互いに「申し合わせて」状態を一斉に更新するとは考えづらいので後者の様式に従っているのではないかと予想される. 一方, 工学的な応用では前者をとる場合が比較的多い.

こうして, 例えばある時刻でのニューロン集団の状態 $\{S_i(t)\}$ はニューロン数が 9 の場合

	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_7	S_8	S_9
t=0	1	1	0	1	0	0	1	0	0
t=1	1	0	0	1	0	1	1	1	1
t=2	0	0	1	1	1	0	0	0	1
t=3	1	0	0	1	1	1	1	0	1
t=4	0	1	1	1	0	0	1	0	1

となり, これを● (発火; $S_i = 1$), ○ (静止; $S_i = 0$) で表し, ニューロンの番地を

$$\begin{matrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{matrix}$$

で表せば

```
 t=0      t=1      t=2      t=3      t=4
●●○      ●○○      ○○●      ●○○      ○●●
●○○      ●○●      ●●○      ●●●      ●○○
●○○      ●●●      ○○●      ●○●      ●○●
```

のように表現される.

6.2.1　単一ニューロンモデルの性能

次に単一ニューロンの数理モデル — **パーセプトロン**の素子としての性能についてまずは簡単にみていく. ここでは簡単のため, 2 入力 1 出力閾値ありの神経素子

$$S = \Theta(w_1 x + w_2 y - \theta) \tag{6.6}$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \tag{6.7}$$

このとき, 問題は w_1, w_2, θ を適当に選ぶことにより, 論理命題 AND,OR,NOT が実現できるかどうか, という点である. 答えを言ってしまうとこれらは可能である. 下の表を参照されたい.

AND : $w_1 = w_2 = 1, \theta = \frac{3}{2}$ とすればよい.

x	y	$x \wedge y$	$x + y - \frac{3}{2}$	S
0	0	0	-3/2	0
0	1	0	-1/2	0
1	0	0	-1/2	0
1	1	1	1/2	1

OR : $w_1 = w_2 = 1, \theta = \frac{1}{2}$ とすればよい.

x	y	$x \vee y$	$x + y - \frac{1}{2}$	S
0	0	0	-1/2	0
0	1	1	1/2	1
1	0	1	1/2	1
1	1	1	1/2	1

NOT : $w_1 = -1, \theta = \frac{1}{2}$ とすればよい.

x	$\bar{x}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}$	S
0	1	1/2	1
1	0	-1/2	0

このように, パーセプトロンによって実現される入出力の組み: $\{(x,y),S\}$ を**線形分離可能なパターン**と呼ぶことにする.

なお, **排他的論理和** (XOR) は一つのパーセプトロンでは実現できないことがわかっているが, 中間層を導入した層状パーセプトロンにより実現できる.

6.3 学習機械パーセプトロン

ここまでニューロンの状態および, 入力は 0 (静止) あるいは 1 (発火) の 2 値をとるものとしたが, これを -1 (静止), $+1$ (発火) としても結果はほとんどかわらない. そこで, これ以降, ニューロンの状態は ± 1 をとり, 単一ニューロンへの入力をベクトルとして $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_N)$, $x_i\in\{+1,-1\}$ に選び, それに対する結合ベクトルを $\boldsymbol{w}=(w_1,w_2,\cdots,w_N)$ としよう. すると, パーセプトロンは出力 S は

$$S \quad = \quad \mathrm{sgn}(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{x}) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} w_i x_i\right) \tag{6.8}$$

で与えられることになる. ここで, $\mathrm{sgn}(a)$ は**符号関数**と呼ばれ, $a\geq 0$ ならば $+1$ を, $a<0$ ならば -1 を返す関数である.

このパーセプトロンに対して, 入出力の組 : $(\boldsymbol{x},S)$ を与え, それを実現させるようにある規則によって結合を変化させることをここでは**学習**と呼ぶ. 従って, パーセプトロンはこの意味で最も簡単な**学習機械**であると言える. さて, そこで, 望ましい入出力関係を実現するためにどのような規則が存在し, その規則で状態更新した結合が有限の更新で収束するのか否かを確認しておくことは意味のあることであろう.

そこで, ここでは**拡張 Hebb 則**という学習則を導入し, それの収束性を議論してみることにしよう.

6.3.1 拡張 Hebb 則とその収束性

入出力 $(\boldsymbol{x},S)$ に対して, パーセプトロンの結合ベクトル $\boldsymbol{w}$ は次の更新式に従うものとする.

$$\boldsymbol{w}(n+1) \quad = \quad \begin{cases} \boldsymbol{w}(n)+S\,\boldsymbol{x} & (S(\boldsymbol{w}(n)\cdot\boldsymbol{x})<0) \\ \boldsymbol{w}(n) & (S(\boldsymbol{w}(n)\cdot\boldsymbol{x})>0) \end{cases} \tag{6.9}$$

つまり, 入出力 $(\boldsymbol{x},S)$ に対して, 間違った答えを出した場合のみ, その時点での入力 $\boldsymbol{x}$ に対応する出力の符号に応じて 1 ステップ手前の結合に入力ベクトルを足して (引いて) 行くわけである.

このとき, 更新式 (6.9) が収束するのか, 言い方を換えれば, 線形分離可能な望ましい入出力の組 : $(\boldsymbol{x},S)$ の全てに対して正しい結果を出すような結合を得るためにはどのくらいのステップ数 t_{need} が必要になるのかを調べることが重要になる.

6.3.2 パーセプトロンの収束定理

この問題を明らかにするため, まずは入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ が $|\boldsymbol{x}| = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_N^2} = 1$ のように規格化されているものとし, 入出力の組 : $(\boldsymbol{x}, S)$ の全てに対して正しい結果を出すような結合を $\boldsymbol{w}^*$ と名づけることにしょう (図 44 参照). 簡単のため, この結合も $|\boldsymbol{w}^*| = \sqrt{(w_1^*)^2 + (w_N^*)^2} = 1$ のように規格化されているものとする. このとき, δ という量を次で定義しておく.

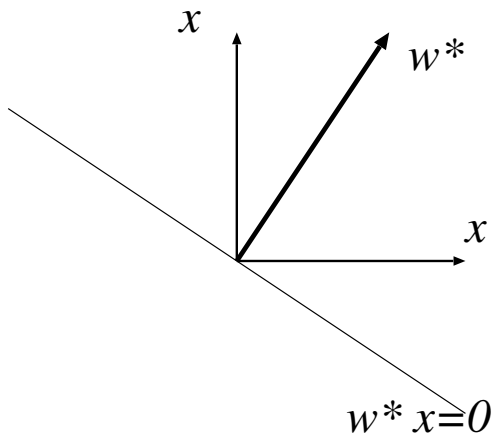


図 44: 結合 $\mathbf{w}^*$ は全ての入出力に対して, $S\,(\mathbf{w}^* \cdot \mathbf{x}) > 0$ となり, 正解を与える結合である.

$$\delta \quad = \quad \min_{(\boldsymbol{x},S)\in F}\{S \cdot (\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{x})\} > 0 \tag{6.10}$$

幾何学的に見ると, この δ という量は任意の入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ と「正解」「不正解」の分離面 : $\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{x} = 0$ 間の距離のうち, 最も短いものとなっている. また, F は線形分離可能な入出力の集合であり, $\boldsymbol{w}^*$ は全ての入出力に対して正しい答えを出す「正解」であるから, 全ての $(\boldsymbol{x}, S) \in F$ に対して $S(\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{x}) > 0$ であることに注意しておく (図 44 参照).

$\boldsymbol{w}(n)$ を n ステップ目の修正で得られる結合ベクトルとするのであれば

$$\begin{aligned} \boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}(i+1) &= \boldsymbol{w}^* \cdot (\boldsymbol{w}(i) + S\,\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}(i) + S\,(\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{x}) \\ &\geq \boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}(i) + \delta \end{aligned} \tag{6.11}$$

が成立する. 従って, 上記の操作を $i = 0$ から $n-1$ まで繰り返し行えば

$$\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}(n) \quad \geq \quad n\delta + \epsilon_0 \tag{6.12}$$

が満たされる. ここで, $\epsilon_0 = \boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}(0)$ である. これは学習スタート時における正解と学習機械の結合の内積である. 以下では $\epsilon_0 = 0$ として議論を進める. これは $\boldsymbol{w}(0) = 0$ であると考えても良いが, $\boldsymbol{w}(0)$ が有限の場合でも, $\epsilon_0 = 0$ は正解から最も遠い初期条件から学習をスタートさせることを意味するので, この最も難しい場合に関して収束までに必要なステップ数を評価すると考えれば我々の目的に即している. しかし, 以下では簡単のため $\boldsymbol{w}(0) = 0$ として話を進めよう.

このとき, 更新される場合の $|\boldsymbol{w}(i)|^2$ は $S\,(\boldsymbol{w}(i) \cdot \boldsymbol{x})$ が常に負であることを考えれば学習の状態更新式 (6.9) に対して

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{w}(i+1)|^2 &= |\boldsymbol{w}(i) + S\,\boldsymbol{x}|^2 = |\boldsymbol{w}(i)|^2 + 2S\,(\boldsymbol{w}(i) \cdot \boldsymbol{x}) + S^2|\boldsymbol{x}|^2 \\ &< |\boldsymbol{w}(i)|^2 + 1 \end{aligned} \tag{6.13}$$

となり, 従って, これを繰り返し用いることにより

$$|\boldsymbol{w}(n)| \quad < \quad \sqrt{n} \tag{6.14}$$

が成り立つ. ところで, $|\boldsymbol{w}^*| = 1$ であるから, 任意のベクトル $\boldsymbol{w}$ に対し,

$$G(\boldsymbol{w}) \quad = \quad \frac{\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|} \leq 1 \tag{6.15}$$

が成り立つことに注意すれば, (6.12)(6.14) 式から

$$G(\boldsymbol{w}(n)) \quad = \quad \frac{\boldsymbol{w}^* \cdot \boldsymbol{w}(n)}{|\boldsymbol{w}(n)|} \geq \sqrt{n}\delta \tag{6.16}$$

となる. 従って, $\sqrt{n}\delta > 1$, すなわち $n > \delta^{-2}$ であれば $G(\boldsymbol{w}^n) > 1$ となり G は常に 1 以下であることに矛盾してしまうので, $n \leq t_{\mathrm{need}} = \delta^{-2}$ である. 従って, パーセプトロンについての学習則が収束するためには, どんなに多くとも $t_{\mathrm{need}} = \delta^{-2}$ ステップあれば良く, アルゴリズムはこのステップ内で正解を得て終了する.

課題 6
XOR は一つのパーセプトロンでは実現できないこと上の AND,OR,NOT の表にならって示せ. また, 中間層を導入したパーセプトロンにより実現できることを具体的にその中間層を含むパーセプトロンの構造と結合 (及び閾値) を与えて示せ.

6.4 連想記憶とは何か ?

ここからは, 既に学んだ単一神経素子のモデル — パーセプトロン — を沢山つなげたときに創発する脳の高次機能として「連想記憶」を取り上げて議論したい. ここで言う「連想記憶」というのは先の例でいうと「進化論」と聞いたときに「ダーウイン」と答えるようなものである. あるいは, 友人の写真を見せられたときにその友人の名前を答えるという状況を考えても良い. これらの各状況をもう少し一般的に言うと

「ヒント」が与えられたときにそのヒントを足掛かりに正解を見つけ出すこと

と言えそうである. ところで, この「ヒント」とか「正解」とかいうことを数式を用いて表すにはどうしたらよいのだろう?

我々は神経回路網を用いたいわけであるから, N 次元超格子空間内の一点

$$(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) \tag{6.17}$$

を思い出すべき事項 — **パターン** — としょう. すると, 記憶すべき事項が p 個あった場合には上つきの添え字 μ を用いて

$$(\xi_1^\mu, \xi_2^\mu, \cdots, \xi_N^\mu) \qquad \mu = 1, \cdots, p \tag{6.18}$$

とそれぞれのパターンを区別すればよい. このとき, パターン $\mu = 1$ に対する「ヒント」はパターン $(\xi_1^1, \xi_2^1, \cdots, \xi_N^1)$ から少し離れた配列

$$(S_1, S_2, \cdots, S_N) \tag{6.19}$$

を選べばよい.

次に問題となるのはこの「ヒント」が**どれだけ良いヒントであるか**ということである. これは簡単で, 上記 2 つのベクトルの内積

$$m \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\xi_i^1 S_i \tag{6.20}$$

を調べ, これが限りなく 1 に近ければ限りなく良いヒントになるだろうし, 逆にこれが限りなくゼロに近い場合にはヒントとしては意味のないものになるであろう. これで大まかな問題設定はできたので, 後は全節までで説明された神経回路網を用いて $(S_1, S_2, \cdots, S_N) \to (\xi_1^1, \xi_2^1, \cdots, \xi_N^1)$ という正しい「連想の流れ」が実現できるかどうかという点が問題となる. つまり, 全ての i に対して

$$S_i(t+1) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} w_{ij} S_j(t)\right) \tag{6.21}$$

というダイナミックスを考えた場合, 十分に時間が経過した後に ($t\to\infty$ の極限で)

$$\xi_i^1 = \mathrm{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} w_{ij}\xi_j^1\right) \tag{6.22}$$

となり, 我々の欲している $(\xi_1^1, \xi_2^1, \cdots, \xi_N^1)$ が**ダイナミックスの固定点になりうるかどうか**というところがポイントである. もし $(\xi_1^1, \xi_2^1, \cdots, \xi_N^1)$ が無事に固定点になるならば, 我々の目論みは成功したことになる.

では, 何がこの成功・不成功をきめるのであろう? (6.21) で自由に変えることのできそうなのは結合 w_{ij} である. 実際この結合の選び方こそが, この神経回路網が連想記憶装置として機能するかどうかの鍵を握っている. 次節ではこの w_{ij} の選び方 — **Hebb 則** — を紹介しこの方法で果たして連想記憶が成り立つかどうかに関し, 1 つのパターンを記憶させるもっとも簡単な場合を例にとり, 調べてみることにする.

6.4.1　1 つだけパターンを記憶した場合の想起

ここでは一つのパターンを記憶した場合, そのパターンがダイナミックスの固定点にらるような w_{ij} の選び方について話しを進める. 結論から先に言うと, 任意の神経素子間の結合を

$$w_{ij} = \frac{1}{N}\xi_i^1\xi_j^1 \tag{6.23}$$

のように選べば良い. 実際にこのように選んだ場合, 各 i に対して

$$\xi_i^1 = \mathrm{sgn}\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_i^1\xi_j^1\xi_j^1\right) = \mathrm{sgn}(\xi_i^1) \tag{6.24}$$

となるが, これは成立しているのは明らかであろう. 従って, (6.23) 式のように結合を選べば少なくとも一つのパターンの記憶に関しては神経回路網は連想記憶装置として機能することがわかった.

課題 7：1 個のパターンを記憶することができることが示せたわけであるが, 2 個のパターンはどうだろうか？ 1 個のパターンの場合を拡張して数理的に議論せよ.

(ヒント)
(6.23) 式を 2 個のパターンに拡張して

$$w_{ij} = \frac{1}{N}(\xi_i^1\xi_j^1 + \xi_i^2\xi_j^2)$$

としてみる. これを (6.22) 式に代入して, 各 i に対して

$$\xi_i^1 = \mathrm{sgn}\left(\xi_i^1 + \frac{\xi_i^2}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_i^2\xi_j^1\right)$$

が成立すれば, 2 個のパターンを記憶し, その内のパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ を想起することができることになる. しかし, これが成立するかどうかは上式右辺括弧内の第 2 項の大きさを評価しなければわからない. 各 ξ_i^1, ξ_i^2 は独立かつ等確率に ± 1 をとる確率変数だから, この右辺括弧内第 2 項も確率変数となり, この変数の平均値の回りの揺らぎ — 標準偏差 —を評価し, それが $N \to \infty$ の極限でゼロになるかどうかを調べればパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ が想起できるかどうかが判定できる.

6.4.2 計算機シミュレーションで「感じ」をつかもう

1 つのパターンの記憶が可能であることがわかったわけであるから, 2 つ以上のパターンを記憶させた場合に任意のパターンが想起できるか否かが知りたくなる. しかし, 2 個程度ならともかく, 例えば思い切って 1000 個ではどうなのか？ 等, 多数個のパターンを Hebb 則でネットワークに埋め込んだ場合にシステムがどう動くのか, を解析的な議論に乗せるにはまだいくらかのギャップがありそうだ. このようなとき, 計算機を用いた簡単な**数値シミュレーション**を行うとシステムの振る舞いを大雑把にではあるが把握することができる. もちろん, 十分慎重にシミュレーションを行えば, 解析計算に劣らないほどの信頼度で答えを出すこともできるが, 以下に示すシミュレーションの目的は後に行う解析計算を始める前にある程度の「察し」をつける, 「感じ」をつかむことであることに注意しておこう.

さて, ここで行うシミュレーションは具体的に (6.25) 式でみた状態更新式：

$$S_i(t+1) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{i=1}^{N} w_{ij}S_j(t)\right) \tag{6.25}$$

を結合が次で与えられる **一般化 Hebb 則**：

$$w_{ij} = \frac{1}{N}(\xi_i^1\xi_j^1 + \xi_i^2\xi_j^2 + \cdots + \xi_i^p\xi_j^p) = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu \tag{6.26}$$

に選んで, 全ての神経素子 S_i に対し, 同時に上記の更新 (6.25) を行うことである (「同期的状態更新」). このとき, 時刻 t での回路網の状態：$\boldsymbol{S}(t) = (S_1(t), S_2(t), \cdots, S_N(t))$ と, 今思い出そうとしているパターン：$\boldsymbol{\xi}^1 = (\xi_1^1, \xi_2^1, \cdots, \xi_N^1)$ との内積を回路網の神経素子数 N で割ったものを

$$m(t) \equiv \frac{1}{N}\boldsymbol{S}(t)\cdot\boldsymbol{\xi}^1 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}S_i(t)\xi_i^1 \tag{6.27}$$

として定義し, これを**重なり (overlap)** と呼ぶことにしょう. この重なりを状態更新 (6.25) の各ステップで観察し, 重なりが 1 に収束すればパターン : $\boldsymbol{\xi}^1$ が想起できたとみなすわけである. ここで, 今想起しょうとするパターン (以下, 「想起パターン」と略記する) : $\boldsymbol{\xi}^1$ としては何でもよいのであるが, ここでは図 45 に示すような 2 次元の画像を選ぶことにする. このパターンは画像処

図 45: ここで思い出そうとするパターン $\vec{\xi}^1$. サイズはやや小さめで 64×50.

理の分野で良く知られた「標準画像レナ」を閾値を用いて 2 値化したものである. しかし, パターン $\boldsymbol{\xi}^1$ としては画像に限らず, 何でも良いのであり, 極端に言えば $\boldsymbol{\xi}^1 = (1, 1, \cdots, 1)$ と選んでも良いのである. ここでは視覚的に解りやすくするためにこのような特定の画像を選んだにすぎない.

さて, $\boldsymbol{\xi}^1$ 以外の $p-1$ 個のパターン $\boldsymbol{\xi}^\mu$ $(\mu \geq 2)$ はどのように選ぶかであるが, ここでは各成分にランダムに ± 1 を割り当てたものを採用することにしょう. すると, 素子数 N が十分に大きければ任意の 2 つのパターン・ベクトル $\boldsymbol{\xi}^\alpha, \boldsymbol{\xi}^\beta$ は統計的にみて直交していることに注意されたい ($\boldsymbol{\xi}^\alpha \cdot \boldsymbol{\xi}^\beta = 0$. なぜこれが言えるか, 各自考えてみるように).

また, 神経回路網の初期条件をどのように選ぶのかも重要であるが, ここでは想起パターン $\boldsymbol{\xi}^1$ の各成分を確率 p で反転させたものを $\boldsymbol{S}(0)$ に選ぶことにしょう. 図 46 に 1 つのパターンを埋め込ん

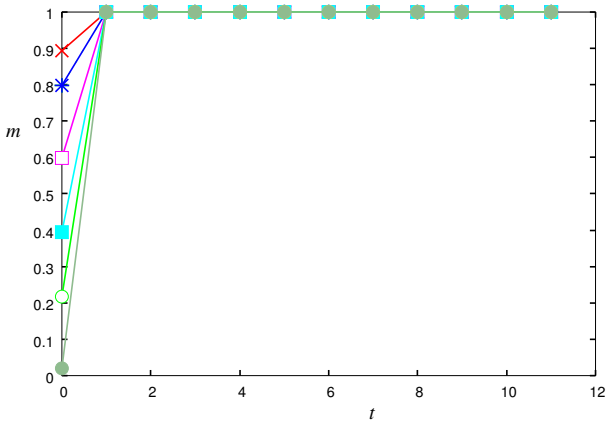


図 46: 1 つのパターンを埋め込んだ神経回路網の想起過程.

だ場合の想起過程を示す. このシミュレーションでは神経素子数を $64 \times 50 = 3200$ と選んでいる.

この図から明らかなように, たとえどんなに想起パターンから離れた初期状態から状態更新を始めても最後には想起パターンに収束していることがわかる. これは先に我々が見たとおりである. 次

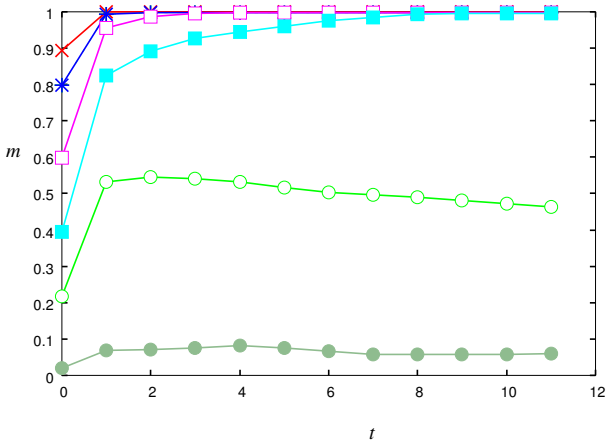


図 47: 300 個のパターンを埋め込んだ神経回路網の想起過程.

に, $p = 300$ 個のパターンを埋め込んだ場合の結果を図 47 に載せる. この場合には想起パターンにある程度近い初期状態からスタートすれば想起パターンに収束するが, 想起パターンから遠い初期状態から出発すると想起パターンとは異なる状態 (**偽記憶**と呼ぶ) に収束してしまうという特性が見られる.

図 48 に初期状態を $m(0) = (1/N)\boldsymbol{S}(0) \cdot \boldsymbol{\xi}^1 = 0.6$ に選んだ場合の想起過程における画像の変遷を載せる. 図 49 には初期状態を $m(0) = (1/N)\boldsymbol{S}(0) \cdot \boldsymbol{\xi}^1 = 0.2$ に選んだ場合の想起過程における

図 48: $p = 300$, 初期状態を $m(0) = (1/N)\vec{S}(0) \cdot \vec{\xi}^1 = 0.6$ に選んだ場合の想起過程. 左から $t = 0, 1, 12$ の時刻での回路網の状態.

画像の変遷を載せる. 図 49 の場合, 時間が経過しても想起パターンには近づかず, 全く関係の無い状態に収束することがわかる. 初期状態の選び方がまずかったというわけである.

最後に, $p = 1000$ 個のパターンを埋め込んだ場合の想起過程を図 50 に載せる. この図より, 明らかにどんなに想起パターンに近い初期状態からスタートしたとしても, 神経回路の状態は想起パターンには近づかないことがわかる. あまりにも多くの情報を詰め込んだために, 任意の想起パターンを回復できなくなってしまったわけである. このように Hebb 則に基づいて神経素子を多数つなげたシステムを構成しても, いくらでもパターンが記憶できるというわけではなく, ある限界が存在する. このような限界を詳細に調べることはシステムの設計上意味があることであろう. 次回は

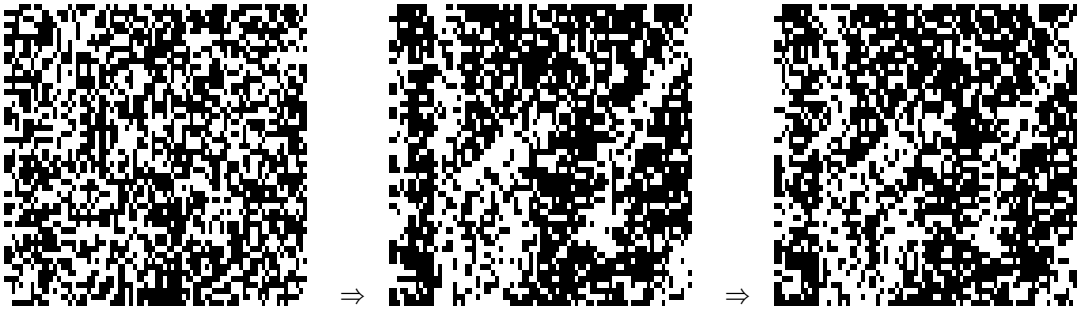


図 49: $p = 300$, 初期状態を $m(0) = (1/N)\vec{S}(0) \cdot \vec{\xi}^1 = 0.2$ に選んだ場合の想起過程. 左から $t = 0, 1, 12$ の時刻での回路網の状態.

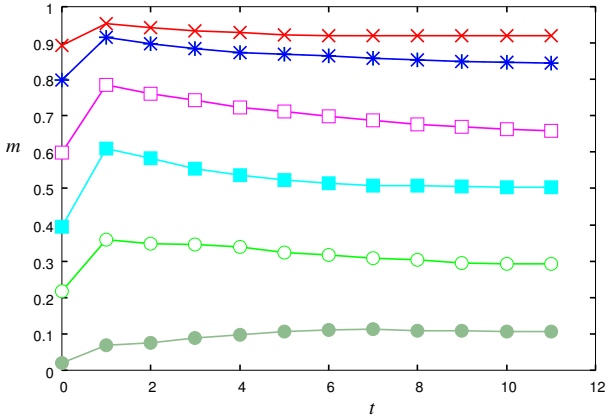


図 50: 1000 個のパターンを埋め込んだ神経回路網の想起過程.

この評価について詳しくみていくことにしょう.

6.5 多数のパターンを埋め込んだ場合の連想記憶

前回は一つのパターンをネットワークに埋め込んだ (記憶させた) 場合に, そのパターンの想起の可能性を調べた. この節では, 多数個のパターンをネットワークに埋め込んだ場合どうなるかについて考察する.

前々節では Hebb 則を用いて神経回路網の「結合」に記憶を埋め込んだわけであるから, 前節の計算機シミュレーションの際に採用した拡張 Hebb 則 :

$$w_{ij} = \frac{1}{N}(\xi_i^1\xi_j^1 + \xi_i^2\xi_j^2 + \cdots + \xi_i^p\xi_j^p) = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu \tag{6.28}$$

をここでもやはり用いて自然な拡張を図ろう. この場合, 注目するパターン $\boldsymbol{\xi}^\nu = (\xi_1^\nu, \xi_2^\nu, \cdots, \xi_N^\nu)$

の想起が安定である条件[12]

$$\xi_i^\nu = \mathrm{sgn}(h_i^\nu) \quad (\forall_i) \tag{6.29}$$

$$h_i^\nu \equiv \sum_{j=1}^{N} w_{ij}\xi_j^\nu \tag{6.30}$$

が成立するかどうかを確かめてみよう. まず, h_i^ν に (6.28) を代入してみると

$$h_i^\nu = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^\nu = \xi_i^\nu + \frac{1}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq\nu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^\nu = \xi_i^\nu\left\{1+\frac{\xi_i^\nu}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq\nu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^\nu\right\} \tag{6.31}$$

となる. ここで, (6.31) の最右辺第 2 項[13]がゼロならば, 前節で調べたものと全く同じになり, パターン ν は安定である.

従って, 想起が成功か失敗かに関して問題になるのは, 第 2 項の第 1 項へ及ぼす影響であり, 多数のパターンを埋め込んだ際にはこの項を何らかの方法で評価する必要がある.

そこで

$$C_i^\nu \equiv -\xi_i^\nu\frac{1}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq\nu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^\nu \tag{6.32}$$

とおき, この C_i^ν について詳しく調べてみることにする.

すぐにわかることは, もし, この C_i^ν が

$$C_i^\nu > 1 \tag{6.33}$$

を満たすならば (6.31) 式より, a を正の定数として

$$h_i = -a\xi_i^\nu \tag{6.34}$$

が成り立ち, 結局, パターン ξ_i^ν の安定条件は

$$\xi_i^\nu = \mathrm{sgn}(-a\xi_i^\nu) \tag{6.35}$$

となるので満たされない. 従って, 条件 (6.33) が想起に失敗する条件と言えそうだ. しかし, 多少厄介な問題として, この C_i^ν はただの数ではなくて「確率変数」であるという点がある. 従って, 我々が以下にできることと言えば, **この確率変数 C_i^ν の統計的性質 (どのような分布に従う確率変数なのか) を調べ, この変数のとる値が $C_i^\nu > 1$ を満たす確率を具体的に求めていく**ことである.

6.6 クロストーク項の統計的性質と最大記憶パターン

この節では C_i^ν を精密に評価する.

[12] 前小節では注目するパターン (想起パターン) を 1 番目のパターンとしたが, ここでは ν 番目のパターンとしている. しかし, これを選んだ理由は特にない. 重要なのは, 注目するパターンとそれ以外のパターンを分離することであり, それ以外のパターンからの寄与が大きくなると, 注目しているパターンの想起が妨害されるというところがポイントである.

[13] この項を**クロストーク項 (cross talk term)** あるいは**クロストークノイズ (cross talk noise)** と呼ぶ

まず, 各 ξ_i^μ がランダムに ± 1 をとる**ランダムパターン**を考えると, C_i^ν はこれらの和であるから, 中心極限定理より, 平均がゼロ, 分散 σ^2 が

$$\sigma^2 = \left(-\frac{\xi_i^\nu}{N}\right)^2 \sum_j \sum_{\mu\neq\nu} (\xi_i^\mu \xi_j^\mu \xi_\nu)^2 = \frac{1}{N^2} \sum_j \sum_{\mu\neq\nu} 1 = \frac{1}{N^2} \times N \times (p-1) \simeq \frac{p}{N} \tag{6.36}$$

であるガウス分布 (正規分布) に従う.
つまり, $C_i^\nu \equiv x$ とおくと, x は

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{6.37}$$

に従う確率変数である. 従って, ξ_i^ν が安定な固定点ではなくなる確率 (想起に失敗する確率)P_{error} は

$$P_{\mathrm{error}} = \mathrm{Prob}\,(C_i^\nu > 1) = \mathrm{Prob}\,(x > 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_1^\infty \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = H\left(\sqrt{\frac{N}{p}}\right) \tag{6.38}$$

となる.
ただし,

$$H(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_x^\infty du\, \mathrm{e}^{-\frac{u^2}{2}} \tag{6.39}$$

で**補誤差関数**を定義した (図 51 参照). 従って, 例えば $P_{\mathrm{error}} = 0.01$ を満たすような p, つまり,

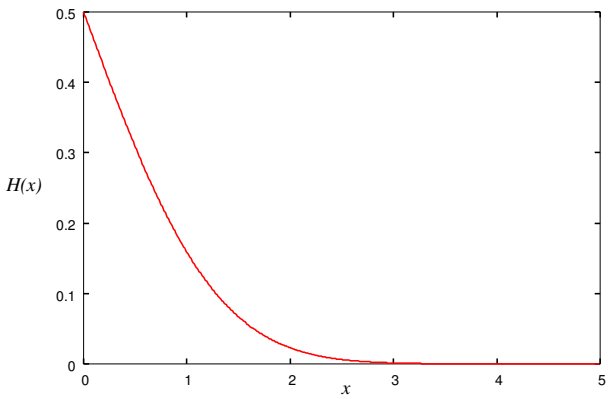


図 51: 補誤差関数 $H(x)$ の形状.

$$H\left(\sqrt{\frac{N}{p}}\right) = 0.01 \tag{6.40}$$

を満たす p を求めれば, **想起に失敗する確率が** 0.01 **以内に収まるような最大の埋め込みパターン数** $p_{\max}$ **が求まる**わけである. 実際に補誤差関数の数値テーブルを用いて求めた $p_{\max}$ をいくつかの P_{error} について算出したものを表にしておく.

$P_{\rm error}$	$p_{\rm max}/N$
0.001	0.105
0.036	0.138
0.01	0.185
0.05	0.37
0.1	0.61

この表より, 許容度を $P_{\rm error}=0.01$ に選ぶと

最大記憶パターン数 : $p_{\rm max}=0.185N$

までのパターンが安定に埋め込めることになる (つまり, 全素子数の 2 割ほどのパターンが記憶できる).

ところで, 以上の議論は i 番目のビット ξ_i^ν にのみ着目し, そのビットの安定性を調べたわけであるが, 実際には $\boldsymbol{\xi}^\nu=(\xi_1^\nu,\cdots,\xi_N^\nu)$ の N ビット全てに関する安定性を調べるべきではないだろうか? つまり, この場合

$$\prod_i(1-P(C_i^\nu>1)) \quad = \quad (1-P_{\rm error})^N \tag{6.41}$$

が $1-0.01=0.99$ より大きい, すなわち, 不等式

$$(1-P_{\rm error})^N \quad > \quad 0.99 \tag{6.42}$$

が許容度 0.01 での最大埋め込みパターン数 $p_{\rm max}$ を決定する.

ここで, 2 項定理を用いると

$$(1-P_{\rm error})^N \quad = \quad \sum_{r=0}^{N}{}_NC_r(-P_{\rm error})^r1^{N-r}\simeq{}_NC_01+{}_NC_1(-P_{\rm error})=1-NP_{\rm error} \tag{6.43}$$

となるので, 条件 (6.42) は

$$P_{\rm error} \quad < \quad \frac{0.01}{N} \tag{6.44}$$

と書き直せる.

さて, p のオーダーが N より小さく, $N\to\infty$ の極限で $\sqrt{N/p}\to\infty$ となる場合を考えよう. このとき, $x\to\infty$ で誤差関数が

$$1-{\rm erf}(x) \quad \simeq \quad \frac{{\rm e}^{-x^2}}{\sqrt{\pi}x} \tag{6.45}$$

で振舞うことに注意すると, 条件 (6.44) は

$$-\log2-\frac{N}{2p}-\frac{1}{2}\log\pi-\frac{1}{2}\log(N/2p) \quad < \quad \log(0.01)-\log N \tag{6.46}$$

となるから, $N\to\infty$ のときの主要項のみ残すと

$$p \quad < \quad \frac{N}{2\log N} = p_{\max} \tag{6.47}$$

となり, この場合の最大記憶パターン数 $p_{\max}$ は

最大記憶パターン ： $p_{\max} = \frac{N}{2\log N}$

となる[14].

課題 8：ここで示したシミュレーションを実行せよ. 特に, 埋め込むパターン数 p と神経素子数 N の比 p/N と想起可能性との関係を明らかにせよ. なお, 当問題を解いて提出する際にはプログラムソースも添付すること.

(課題 8 に取り組む際の注)
想起パターンとして, ここで用いたレナの 2 値化画像を用いる者は

http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/Intel2010/Intel2010.html

からダウンロードできるので用いても良い (もちろん, 自分の好きな画像を用いて良い).

6.7 補足：クロストークの数値的評価について

6.7.1 サンプリングとヒストグラム

前小節で記憶容量の評価をする際に, 各ニューロンにおけるクロストーク：

$$C_i^\nu \quad \equiv \quad -\frac{\xi_i^\nu}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq\nu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^\nu \tag{6.48}$$

の統計的性質を調べたわけであるが, これは独立なランダムパターン $\boldsymbol{\xi}^\mu$ の和であるから, 中心極限定理よりこの確率変数は平均がゼロ, 分散が $\sigma^2 = p/N$ のガウス分布に従うはずであるとして話を進めた. しかし, 実際に様々 $\boldsymbol{\xi}^\mu$ を変えて C_i^ν をサンプリングし, ヒストグラムを作った上で, それから C_i^ν の従う分布の大まかな形を予想することもできる. その例を図 52 に載せる. この図は $p = 50, N = 500$ (このとき中心極限定理から予想される分散は $\sigma^2 = p/N = 0.1$ である) と選び 1000 回のサンプリングからヒストグラムを作ってある. もちろん, 中心極限定理は和の要素数が十分に大きな場合の話であるから, 数値的に得られたヒストグラムには統計誤差が残るが, 中心極限定理からの結果とまあまあ良く合ってはいる. また, このサンプリングから平均や分散を求めることもできる.

[14] p のオーダーが N より小さく, $N\to\infty$ の極限で $\sqrt{N/p}\to\infty$ であるとした我々の仮定は正しかったことに注意されたい.

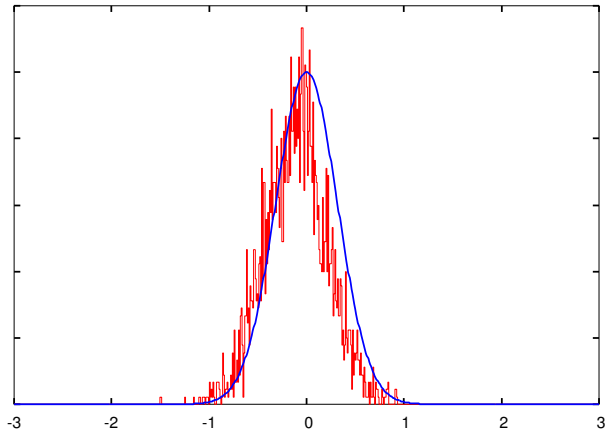


図 52: C_i^μ の $\boldsymbol{\xi}^\mu$ を様々変えたサンプリングによるヒストグラムと中心極限定理から予測される答え : $P(C_i^\nu) = (1/\sqrt{2\pi\sigma^2})\exp[-(C_i^\nu)^2/2\sigma^2)]$. ここでは $p = 50, N = 500$ $(\sigma^2 = p/N = 0.1)$ であり 1000 回のサンプリングからヒストグラムを作った.

6.8 非対称に結合した回路網の動作特性

6.8.1 非対称 Hebb 則とリミットサイクル解の出現

ここまででパーセプロトンと呼ばれる神経細胞のモデルを多数つなげたとき, 我々が日常的に「連想記憶」と呼んでいる現象と同じような動作が実現できることを学んだ. この際, どのように素子どうしをつなげれば良いのか, が本質的には重要であり, うまく連想記憶を実現するためには任意の神経素子 i と j とを p 個のパターン $\boldsymbol{\xi}^\mu$ $(\mu = 1, \cdots, p)$ から作られる Hebb 則 :

$$w_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu \tag{6.49}$$

として選べば良かった. ここで, この式 (6.49) を次のように一般化しておこう.

$$w_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\sum_{\nu=1}^{p}\xi_i^\mu A_{\mu\nu}\xi_j^\nu \tag{6.50}$$

すると, 我々がここまで調べてきたのは $A_{\mu\nu} = \delta_{\mu,\nu}$ の場合に相当する. 添え字 i と j を交換しても変わらないわけであるから, この場合を**対称結合**と呼ぼう.

ところで現実の脳の回路網では, あるニューロンから他のニューロンへの結合が対称であるとは限らない. むしろ, 「脳神経系の多様性」という観点からは非対称であると考えた方が自然であるような気もする. 従って, 今まで我々が調べてきた結合の対称性を破り, 非対称な結合を用いた場合の回路網の動作特性を調べておくことは意味のあることであろう.

そこで, ここでは行列 $A_{\mu\nu}$ を $A_{\mu\nu} = \delta_{\mu+1,\nu}$ と選ぶ. すなわち

$$w_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^{\mu+1}\xi_j^\mu \tag{6.51}$$

とする. もはやこの場合には添え字 i, j の交換に対して不変ではないことに注意しておく. また, 添え字 μ に関しては周期的な境界条件を課しておくことにする. つまり, $\mu = p+1$ は $\mu = 1$ である.

具体的に $p=3$ の場合を書き下してみると

$$w_{ij} = \frac{1}{N}(\xi_i^2\xi_j^1 + \xi_i^3\xi_j^2 + \xi_i^1\xi_j^3) \tag{6.52}$$

となる.

このときの回路網の動作を簡単に考えてみよう. そこで今, 回路網の状態が 1 番目のパターン $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}^1$ であるとしてみよう. すると, i 番目の神経素子の内部ポテンシャル h_i は

$$h_i = \sum_{j=1}^{N} w_{ij}\xi_j^1 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(\xi_i^2\xi_j^1 + \xi_i^3\xi_j^2 + \xi_i^1\xi_j^3)\xi_j^1 = \xi_i^2 + \frac{1}{N}\sum_{ij}(\xi_i^3\xi_j^2 + \xi_i^1\xi_j^3)\xi_j^1 \tag{6.53}$$

となるが, それぞれのパターンの各成分が無相関であるならば上式 (6.53) の右辺第 2 項は $\mathcal{O}(1/N\cdot\sqrt{N}) = \mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ のオーダとなり, 素子数 N が十分大きければ無視できる[15]. 従って, $h_i = \xi_i^2$ となり, 全ての神経素子に対して

$$\xi_i^2 = \mathrm{sgn}(h_i) = \mathrm{sgn}(\xi_i^2) \tag{6.54}$$

が成り立つ. 従って, 回路網の状態は $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}^2$ となるので 2 番目のパターンが安定となる. 次に, $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}^2$ としたときの内部ポテンシャルは

$$h_i = \sum_{j=1}^{N} w_{ij}\xi_j^1 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(\xi_i^2\xi_j^1 + \xi_i^3\xi_j^2 + \xi_i^1\xi_j^3)\xi_j^2 = \xi_i^3 + \frac{1}{N}\sum_{ij}(\xi_i^2\xi_j^1 + \xi_i^1\xi_j^3)\xi_j^2 = \xi_i^3 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \tag{6.55}$$

となるので, 明らかに回路網の状態は $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}^3$ となり, 今度は 3 番目のパターンが安定となる. そこで最後に $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}^3$ としたときの内部ポテンシャルを書き出してみると $h_i=\xi_i^1$ となるので, 回路網の状態は $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\xi}^1$ となり, 1 番目のパターンが安定となる. 以上の考察から直ちに, このような非対称結合 (6.51) を採用することにより, 回路網は

$$\boldsymbol{\xi}^1 \to \boldsymbol{\xi}^2 \to \boldsymbol{\xi}^3 \to \boldsymbol{\xi}^1 \to \cdots \tag{6.56}$$

のような周期的な運動 (**リミットサイクル**) を生成する.

6.8.2 計算機シミュレーションで動作を確かめる

ここでも例によって簡単なシミュレーションで回路網の動作を確かめておこう.

まずは $p=3$ の場合. 回路網に埋め込むパターンをわかりやすいように図 53 のような 3 つの 2 値画像に選ぶ. また, 回路網のある時刻での状態をモニタリングするために, 次の 3 種類の重なりを各ステップで観察することにしょう.

$$m_1(t) = \frac{1}{N}\boldsymbol{\xi}^1\cdot\boldsymbol{S}(t) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_i^1 S_i(t) \tag{6.57}$$

$$m_2(t) = \frac{1}{N}\boldsymbol{\xi}^2\cdot\boldsymbol{S}(t) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_i^2 S_i(t) \tag{6.58}$$

$$m_3(t) = \frac{1}{N}\boldsymbol{\xi}^3\cdot\boldsymbol{S}(t) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\xi_i^3 S_i(t) \tag{6.59}$$

[15] $\boldsymbol{\xi}^1, \boldsymbol{\xi}^2, \boldsymbol{\xi}^3$ のそれぞれが無相関であるのならば, $\xi_i^3\xi_j^2\xi_j^1$ 等はランダムに ±1 をとる変数となる. 原点を中心とした歩幅 1 のランダム・ウォークの t ステップ後の減点からのずれは $\sqrt{t}$ であったことを思い出すと, $\sum_{j=1}^{N}\xi_i^3\xi_j^2\xi_j^1$ の**オーダ (stochastic order)** は $\sqrt{N}$ となる.

図 53: 回路網に埋め込む 3 つのパターン. 画像サイズは 80×50.

つまり, 先ほどの考察が正しければ, 回路網の状態 $\boldsymbol{S}$ は全ての時刻で $\boldsymbol{\xi}^1, \boldsymbol{\xi}^2, \boldsymbol{\xi}^3$ どれかに一致しているはずなので, 各時刻の各パターンからの近さを重なりで測ろうというわけだ. 結果を図 54 に載せる. この図からきれいなリミットサイクルが確認できる. 図 55 に最初の 6 ステップの回路網の

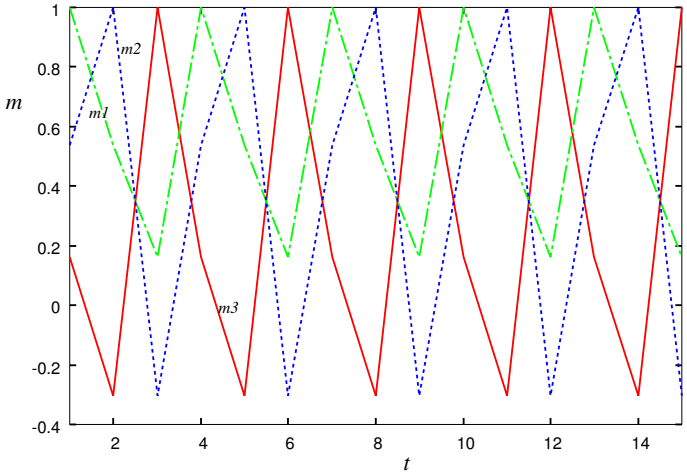


図 54: $p = 3$ の場合の 3 つの重なり m_1, m_2, m_3 の時間変化.

状態を載せる. この図で $t = 1$ のときの画像が $\boldsymbol{\xi}^1$ から若干ずれているのは, 初期条件を $\boldsymbol{\xi}^1$ に 20% 程度のノイズをかけた初期状態かた出発したためである. しかし, 十分に時間が立ち, 「リミットサイクル・アトラクタ」に軌道が落ち込んだ後にはきれいに $\boldsymbol{\xi}^1 \to \boldsymbol{\xi}^2 \to \boldsymbol{\xi}^3 \to \boldsymbol{\xi}^1 \to \cdots$ という画像が現れる.

次に $p = 4$ の場合を考える. 埋め込むパターンの画像としては図 56 の 4 枚の画像を選ぶ. この図 56 の 4 番目のパターン $\boldsymbol{\xi}^4$ は全ての要素が 1 であるようなパターンであることに注意しておこう. また, $p = 3$ の場合に観察した重なり m_1, m_2, m_3 の他に 4 番目のパターンと回路網の近さを測る量として

$$m_4(t) \quad = \quad \frac{1}{N}\boldsymbol{\xi}^4 \cdot \boldsymbol{S}(t) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \xi_j^4 S_j(t) \tag{6.60}$$

を導入し, 合計 4 つの重なりを各ステップで観察する. 結果を図 57 に載せる. この図 57 から明ら

図 55: 回路網の状態の変遷. 左上から右下に $t = 1, \cdots, 6$ の回路網の状態.

図 56: 回路網に埋め込む 4 つのパターン. 画像サイズは 80×50.

かに $p = 3$ の場合と異なる点はパターン $\boldsymbol{\xi}^1, \boldsymbol{\xi}^4$ と回路網の重なりが時間が経過した後であっても 1 にはならない点である (図 58 も合わせて参照).

これは奇妙に思えるかもしれないが, 図 56 からわかるように, これら 2 つのパターン $\boldsymbol{\xi}^1, \boldsymbol{\xi}^4$ はお互い画像が黒っぽくかなり強い相関を持っている. 従って, (6.53) 式の右辺第 2 項のように我々が $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ の寄与として無視した項がもはや無視できなくなり, $\mathcal{O}(1)$ の量になってしまっていることが原因であると考えられる.

具体的には, 回路網のある時点での状態が $\boldsymbol{\xi}^4$ であるとき, 素子 i の内部ポテンシャルは

$$h_i = \xi_i^1 + \frac{1}{N}\sum_j \xi_i^2(\xi_j^1\xi_j^4) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \tag{6.61}$$

となり, 上式右辺の第 2 項は $\boldsymbol{\xi}^1, \boldsymbol{\xi}^4$ の相関が強くなるとオーダ $\mathcal{O}(1)$ の量であり[16], 第 1 項と同じ寄与を及ぼし, これがパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ の想起を阻害しているわけである.

[16] 極端な話, $\boldsymbol{\xi}^1 = \boldsymbol{\xi}^4$ であるとすれば, (6.61) 式の右辺第 2 項は $(1/N)\sum_j \xi_i^2(\xi_j^1\xi_j^4) = \xi_i^2$ となり, これが第 1 項のシグナルに対するノイズとして寄与する.

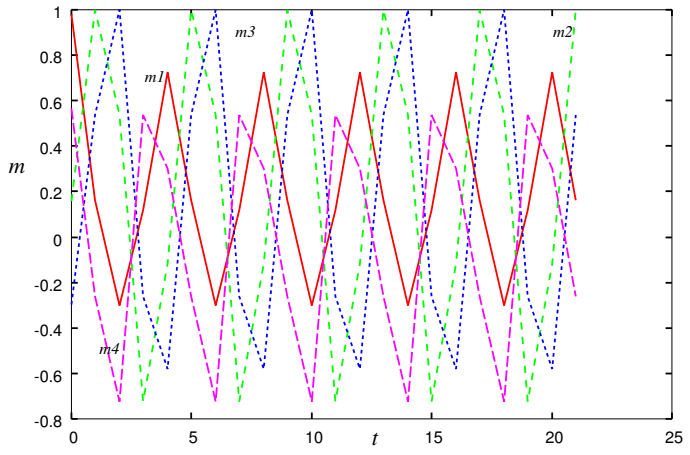


図 57: $p = 4$ の場合の 4 つの重なり m_1, m_2, m_3, m_4 の時間変化.

課題 9：リミットサイクルとしてのパターン分離性がこの節の最後に述べたようにパターン間の相関によって阻害されるとするのであれば, 直交パターンを 4 つ持ってきてそれらを用いて回路網を構成すれば全て 4 つのパターンがきれいに分離された形でリミットサイクルが実現できることが予想される. そこでこれを計算機シミュレーションにより確かめよ. 直交パターンとしては前回説明したように各成分にランダムに ± 1 を割り振るのが手っ取り早いが, 他の方法で直交パターンを作れる場合にはそれを用いても良い. 具体的には m_1, m_2, m_3, m_4 の時間発展を図示せよ.

6.9 確率的神経回路網の連想記憶とイジング模型

ここからは, 雑音 (ノイズ) を脳システムに取り込むにはどうしたらよいか, また, そうした雑音下での連想記憶の解析について学ぶ. ここでは既に学んだ平均場近似の考え方がとても役に立つ.

6.9.1 第 2 のノイズ：熱雑音の効果

ここまで, パーセプトロンと呼ばれる神経素子を Hebb 則に基づいて多数つなげた場合, その回路網が連想記憶として動作することを学んだ. 多数の (神経素子数に比例するオーダの) パターンを回路網に記憶させた場合, 任意のパターンを想起することが出来るか否かは, 想起パターン $\boldsymbol{\xi}^1$ に関する素子 i の内部ポテンシャル：

$$h_i = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^1 = \xi_i^1 + \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\mu\neq 1}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^1 \tag{6.62}$$

によって決まり, 特に, パターン数 p が $\mathcal{O}(N)$ の場合に上式 (6.62) 第 2 項は $\mathcal{O}(1)$ の確率変数となるので, この変数の統計的性質を調べることにより, 記憶させることのできるパターン数についての情報を得ることができた. この第 2 項はクロストークと呼ばれ, 多数のパターンを記憶させてシ

図 58: $p=4$ の場合の回路網の状態の変遷. 左上から右下に $t=1,\cdots,6$ の回路網の状態. $t=1,4,5$ のとき, 1 番目と 4 番目に対応するパターンがうまく分離されていない.

ステムを構成することによって生じ, 望ましい機能の発現 (記憶の想起) を妨害するという意味においてノイズである. しかし, このようなシステム構成時に内在してしまうようなノイズとは別個のノイズ — **外部ノイズ** — も脳神経系には存在する. 例えば, 1 つひとつのニューロンの動作は外部からの雑音 (例えば熱的な揺らぎ) によって, 必ずしも前に見たような正確な動作を示さない場合があり得る. そこで, ここからはこの種の外部ノイズが連想記憶に及ぼす影響を考えて行くことにしよう. ただし, 以下では対称結合の場合に限って話を進める.

6.9.2　ニューロンの動作は不確かである

既に述べたように, 神経回路を構成するニューロンの動作は決して信頼のおけるものではない. 前節で考えた神経回路網は, i 番目の神経素子に入力される信号の総和 (内部ポテンシャル) :

$$h_i \equiv \frac{1}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j \tag{6.63}$$

が正ならば $S_i=1$, 負ならば $S_i=-1$ として i 番目の素子の出力が決定された. しかし, 神経素子の入出力がこのような決定論的ルールに従って決まるというよりも, むしろ不安定な素子として, その出力を確率的に決定するものとして考えた方が, より現実的な神経素子の振舞いを説明し, その素子を多数つなげた神経回路網の性質を議論する場合にも望ましいのではないかと考えられる. この「確率的」という動作をどのように導入するかは様々あろうが, ここでは i 番目の神経素子が $S_i=1$ の出力をする確率 $P(S_i=1)$ が

$$P(S_i=1) = \frac{\mathrm{e}^{\beta h_i}}{\mathrm{e}^{\beta h_i}+\mathrm{e}^{-\beta h_i}} \tag{6.64}$$

で与えられるような神経素子を考える. ここで, β は誤作動の程度を表すパラメータであり, $\beta\to\infty$ の極限を考えると, $h_i>0$ のとき $P(S_i=1)=1$, $h_i<0$ のとき $P(S_i=1)=0$ となるから前節までの「決定論的素子」に戻る. 逆に $\beta=0$ の極限では $P(S_i=1)=1/2$ となり, 「全く信頼できない素子」となってしまう (図 59 参照). ここまで素子の動作を定義したところで, この確率的動作の「起源」は一体何なのかが知りたくなるが, ここではその詳細までは踏み込まないことにする. こ

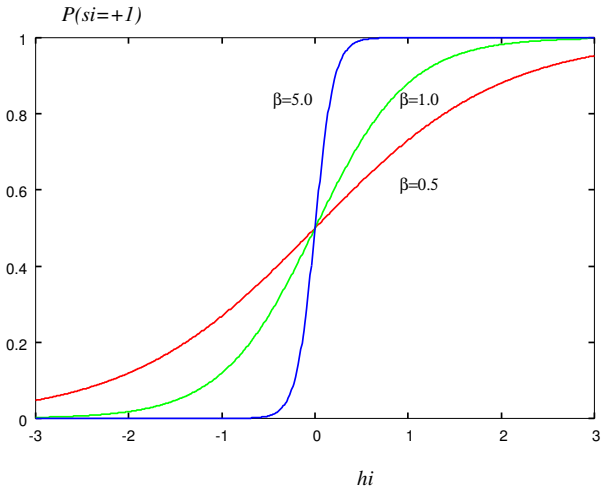


図 59: 内部ポテンシャル h_i の関数としての確率 $P(S_i = 1)$.

の種のノイズは [**熱的なもの**] であるかもしれないし, 何らかの [**化学的反応によるもの**] かもしれない. しかし, ここではそれらの起源が何であれ, そのノイズを全て β の中に押し込めて議論する. ただし, ここで導入した β で表されるノイズが前節までに見たクロストークとは本質的に異なることだけは明らかであろう.

また, このトピックス [連想記憶の数理] の初めに神経素子とノイマン型コンピュータとの比較を行ったが, その際に脳を計算機としてみた場合, 「神経回路網は個々の素子の不確かさを膨大な数の素子を結合させることによって補っている」ということを述べた. 従って, **個々の素子の不確かさを β で導入し, その不確かさを徐々に増加して行った場合, 連想記憶という多数の素子どうしの協力に基づく機能がどこまで損なわれずに残るのか**を調べることは大変に有意義であろうし, 以下では焦点をそこに絞って議論したい.

さて, 上記のように素子が確率的動作を示すとするならば, 素子 i が $S_i = -1$ をとる確率は

$$P(S_i = -1) = 1 - P(S_i = 1) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta h_i}}{\mathrm{e}^{\beta h_i} + \mathrm{e}^{-\beta h_i}} \tag{6.65}$$

で与えられる.

神経素子が, この確率で動作すると仮定すると i 番目の神経素子の出力値の平均 $\langle S_i \rangle$ は

$$\langle S_i \rangle \quad = \quad (+1)\times\frac{\mathrm{e}^{\beta h_i}}{\mathrm{e}^{\beta h_i} + \mathrm{e}^{-\beta h_i}} + (-1)\times\frac{\mathrm{e}^{-\beta h_i}}{\mathrm{e}^{\beta h_i} + \mathrm{e}^{-\beta h_i}} = \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j\right) \tag{6.66}$$

となる.

6.9.3 平均場近似の使い方

さて, ここで我々はこの神経回路網の性能 (最大記憶パターン数) を調べたいわけであるが, 上式 (6.66) の右辺の tanh の中に出てくる S_j は依然として確率変数である. 従って, この変数 S_j はそ

の平均値 $\langle S_j \rangle$ とそこからのずれ δS_j を用いて次のように表すことができる.

$$S_j = \langle S_j \rangle + \delta S_j \tag{6.67}$$

平均値からのずれがどの程度なのかを評価するためには具体的に (140) に従って作られる多数のアンサンブル $\{\boldsymbol{S}\}$ からその統計的性質を評価することによって初めてわかるのではあるが, ここでは思い切って, 平均値からのずれを完全に無視してしまう近似を行おう. この近似がどの程度良いものであるか, は後に改めて議論することにする.

つまり, ここでの近似は確率変数である S_j $(j = 1, \cdots, i-1, i+1, \cdots, N)$ の神経素子を

$$S_j = \langle S_j \rangle \tag{6.68}$$

と置いてしまうことである. これは明らかに既に学んだ平均場近似の考え方に基づく取り扱いである.

さて, この近似の下で (6.66) 式は

$$\langle S_i \rangle = \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu \xi_j^\mu \langle S_j \rangle\right) \tag{6.69}$$

となる.

6.9.4 局所的重なりの数値解法 : 平均場アニーリング

我々は各素子の状態 S_j をその平均値 $\langle S_j \rangle$ で置き換えてしまったわけであるから, これらを並べたベクトル $\overline{\boldsymbol{S}}$:

$$\overline{\boldsymbol{S}} \equiv (\langle S_1 \rangle, \langle S_2 \rangle, \cdots, \langle S_N \rangle) \tag{6.70}$$

のように定義し, これを回路網の状態ベクトルとしよう. すると, 想起パターン $\boldsymbol{\xi}^1$ と回路網の重なり m は

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\xi_i^1 \langle S_i \rangle \tag{6.71}$$

のように書ける. 想起パターン $\boldsymbol{\xi}^1$ としては何を選んでもよく, 先に見た計算機シミュレーションでは標準画像レナを用いた. しかし, ここでは簡単に $\boldsymbol{\xi}^1 = (1, 1, \cdots, 1)$ と選ぼう. このように選んだとしても一般性は損なわれないことに注意しておく. すると, 重なり (6.71) は

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle S_i \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} m_i \tag{6.72}$$

と書き直すことができる. ただし, ここで

$$m_i \equiv \xi_i^1 \langle S_i \rangle = \langle S_i \rangle \tag{6.73}$$

として, **局所的重なり (local overlap)** を定義した. すると, (6.69) 式はこの局所的重なりを用いて次のように書き直すことができる.

$$m_i = \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu \xi_j^\mu m_j\right) \tag{6.74}$$

従って, 想起の性能を評価する際には, 素子数 N, パターン数 p を与えて, 上式 (6.74) を全ての素子 i に対して数値的に解けば良い. その解が

$$\boldsymbol{m}^* = (m_1^*, m_2^*, m_3^*, \cdots, m_N^*) \tag{6.75}$$

であったとするならば, 想起パターンと回路網の状態の重なり m は

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} m_i^* \tag{6.76}$$

でもって測ることができる.

具体的な (6.74) の解法としては, (6.74) を次のような連立漸化式：

$$m_i^{(n+1)} = \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu m_j^{(n)}\right) \tag{6.77}$$

を全ての素子 i で収束条件：

$$|m_i^{(n+1)} - m_i^{(n)}| < \epsilon \tag{6.78}$$

(ϵ は例えば 10^{-5} のように小さな量) が満たされるまで反復的に解けば良い.

反復 (6.77) の過程で, **ノイズレベル**：$T \equiv \beta^{-1}$ を十分にゆっくりと $T : 2 \to 0$ のようにゼロに下げて行った場合, (6.77) の解 $\boldsymbol{m}^* = (m_1^*, m_2^*, \cdots, m_N^*)$ は状態 $\boldsymbol{S}$ に関する次のエネルギー関数：

$$E(\boldsymbol{S}) = -\frac{1}{N}\sum_{ij}\sum_{\mu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_i S_j \tag{6.79}$$

の最小値を与える.

実際, $\beta = \infty$ の極限での更新式は, 上記のエネルギー関数 (6.79) において, ニューロン変数 S_i をその期待値 m_i で書き直したもの

$$E(\boldsymbol{m}) = -\sum_{ij} w_{ij} m_i m_j, \;\; w_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu \tag{6.80}$$

を単調に減少させることが比較的簡単に示すことができる. いま, 時刻 n にニューロン 1 が (6.77) 式に従って非同期に状態更新したとする. すなわち

$$m_1^{(n+1)} = \tanh(\beta\sum_j w_{ij} m_j^{(n)}) \tag{6.81}$$

このとき, $n \to n+1$ の時間更新でエネルギー関数の増減分 $\Delta E = E(m_1^{(n+1)}) - E(m_1^{(n)})$ を計算してみよう. これは直ちに

$$\begin{aligned}
\Delta E &= -\sum_j (w_{1j} + w_{j1}) m_1^{(n+1)} m_j^{(n)} - \sum_{i,j\neq 1} w_{ij} m_i^{(n)} m_j^{(n)} \\
&+ \sum_j (w_{1j} + w_{j1}) m_1^{(n)} m_j^{(n)} + \sum_{i,j\neq 1} w_{ij} m_i^{(n)} m_j^{(n)} \\
&= -2\sum_j w_{1j} m_1^{(n+1)} m_j^{(n)} + 2\sum_j w_{1j} m_1^{(n)} m_j^{(n)} \\
&= -2(\sum_i w_{1j} m_j^{(n)}) \tanh(\beta\sum_j w_{ij} m_j^{(n)}) + 2\sum_j w_{1j} m_1^{(n)} m_j^{(n)}
\end{aligned} \tag{6.82}$$

ここで, 第 1,2 行目から第 3,4 行目への変形ではネットワークの結合が対称であること $w_{1j} = w_{j1}$ を用いていることに注意されたい. さて, $\beta \to \infty$ において, $\tanh(\beta x) = \mathrm{sgn}(x)$ となる事実と, $x\,\mathrm{sgn}(x) = |x|$ を用いると直ちに

$$\Delta E = 2\sum_j w_{ij} m_1^{(n)} m_j^{(n)} - 2|\sum_j w_{ij} m_1^{(n)} m_j^{(n)}| \leq 0 \tag{6.83}$$

が示される. つまり, $\beta = \infty$ のノイズゼロの場合に対し, 非同期に (6.77) を繰り返すとエネルギー関数 (6.79) は単調に減少していくことがわかる.

すなわち, 上記の議論を繰り返すと, ネットワークのエネルギーは固定点 $\boldsymbol{m}^*$ に達するまで単調に減少し, 不等式

$$E(\boldsymbol{m}) \quad \geq \quad -\frac{1}{N}\sum_{ij} w_{ij} m_i^* m_j^* = E(\boldsymbol{m}^*) \tag{6.84}$$

が成り立つ時点で停止する.

ところで, このようにして得られる固定点 $\boldsymbol{m}^*$ はエネルギー関数の局所最小を与えるが, それが大域的最小である保証はない. エネルギー関数には一般に多数のミニマムが存在するからである. 従って, $\beta \neq \infty$ でノイズの効果を取り入れた反復式 (6.77) は見方を変えれば, そのエネルギー関数が (6.79) 式で与えられる**組み合わせ最適化問題**の局所最小からの脱出メカニズムを取り込んだ解法であるとみなすことができる. この手の解法を**平均場アニーリング法 (meanfield annealing)** と呼ぶ.

実際にエネルギーの最小値が得られているか否かをパターン数が 1 つだけの自明な場合について見てみよう. このとき, エネルギー関数は

$$E(\boldsymbol{S}) \quad = \quad -\frac{1}{N}\sum_{ij}(\xi_i^1 S_i)(\xi_j^1 S_j) \tag{6.85}$$

と簡略化される. さらに, 想起パターン (ターゲットパターン) 全ての成分が 1 であるすればエネルギー関数は

$$E(\boldsymbol{S}) \quad = \quad -\frac{1}{N}\sum_{ij} S_i S_j \tag{6.86}$$

と書ける. すると, このエネルギー関数の最小値とそれを与える $\boldsymbol{S}$ は自明であり, $\boldsymbol{S} = (1, 1, \cdots, 1)$(あるいはその真逆の $\boldsymbol{S} = (-1, -1, \cdots, -1)$) のとき最小値 $E = -N$ をとる. さて, パターン数が 1 つの場合, 反復式 (6.77) は

$$m_i \quad = \quad \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i} m_j\right) \tag{6.87}$$

となるが, $T \to 0$ に近づける, つまり, $\beta \to \infty$ と増加させると, 上式 (6.87) の tanh は sgn 関数に変わり

$$m_i \quad = \quad \mathrm{sgn}\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i} m_j\right) \tag{6.88}$$

この式 (6.88) を満たす解は $\boldsymbol{m} = (1, 1, \cdots, 1)$ のとき $1 = \mathrm{sgn}(1)$ となり満たされるか, $\boldsymbol{m} = (-1, -1, \cdots, -1)$ のとき $-1 = \mathrm{sgn}(-1)$ となり満たされるか, のいずれかであり, この解は確かにエネルギー関数 (6.86) の最小値を与えている.

6.9.5　$p = \mathcal{O}(1)$ の場合の解析解とその相転移

パターン数 p が $\mathcal{O}(1)$ の場合には $N \to \infty$ の極限で解析的に重なりの β 依存性を簡単に求めることができる．ここではそれを示しておこう．まず, 重なり m は

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^1 \langle S_i \rangle \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^1 \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_i\sum_\mu \xi_i^\mu \xi_j^\mu \langle S_j \rangle\right) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^1 \tanh\left(\frac{\beta}{N}\xi_i^1 \sum_j \xi_j^1 \langle S_j \rangle + \frac{\beta}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq 1} \xi_i^\mu \xi_j^\mu \langle S_j \rangle\right) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \tanh\left(\beta m + \frac{\beta}{N}\xi_i^1 \sum_j\sum_{\mu\neq 1} \xi_i^\mu \xi_j^\mu \langle S_j \rangle\right) \end{aligned} \tag{6.89}$$

ここで, 上の (6.89) 式の $\tanh(\cdots)$ の中身の第 2 項のオーダーを考えてみよう．すると, p が $\mathcal{O}(1)$ であれば

$$\frac{\beta}{N}\xi_i^1 \sum_j\sum_{\mu\neq 1} \xi_i^\mu \xi_j^\mu \langle S_j \rangle \quad \sim \quad \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\times\sqrt{N}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \to 0 \tag{6.90}$$

となり, 神経素子数 N が無限大の極限で無視することができる．よって, 我々は重なり m に関する方程式を得ることができて

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \tanh(\beta m) = \tanh(\beta m) \tag{6.91}$$

がその方程式である．従って, ノイズレベル $T \equiv \beta^{-1}$ を様々に変えて (6.91) を解き, m と T の関係を図示すればよい．図 60 より, ノイズ $T = 0$ の場合には完全な想起が実現されているが, ノイズの増加とともに重なりも減少し, $T = 1$ で重なりはゼロになる．重なりが有限であるということは, 回路の状態ベクトル $\boldsymbol{S}$ と想起パターン $\boldsymbol{\xi}^1$ の間には $\mathcal{O}(N)$ 成分の一致が見られるということであり, 重なりがゼロの場合にはこの一致が $\mathcal{O}(1)$ 成分になっているということで, $m \neq 0$ と $m = 0$ とは本質的に異なり, 前者を「想起相」後者を「非想起相」と呼ぶとすれば, ノイズが $T = 1$ になるにつれてシステムは「想起相」から「非想起相」に変化し, 回路網は連想記憶装置としては働かなくなる．この種の変化を**相転移**と呼ぶ．ノイズが小さく, T が小さな領域では個々の神経細胞は想起パターン方向を向いた方がエネルギー的に安定である．つまり

$$E(\boldsymbol{S}) = -\frac{1}{N}\sum_{ij} \xi_i^1 \xi_j^1 S_i S_j = -\frac{1}{N}\sum_{ij} (\xi_i^1 S_i)(\xi_j^1 S_j) \tag{6.92}$$

であるから, 全ての素子 $(i = 1, \cdots, N)$ で $\xi_i^1 S_i = 1$ となればエネルギーが最小となることはすぐに見て取れる．しかし, ノイズが高くなってくると系を安定化するために個々の神経素子はバラバラな状態を取ろうとする．このバラバラな状態の程度を表す量として**エントロピー**：S(回路の状態と同じ記号であるが, ここから添え字無しの非ベクトル表示はエントロピーを表すことに注意 !) を導入すれば, ノイズが大きい場合, 神経系はこのエントロピー S を大きくするように動く．そして任意のノイズレベル T では既に学んだ自由エネルギー

$$F = E - TS \tag{6.93}$$

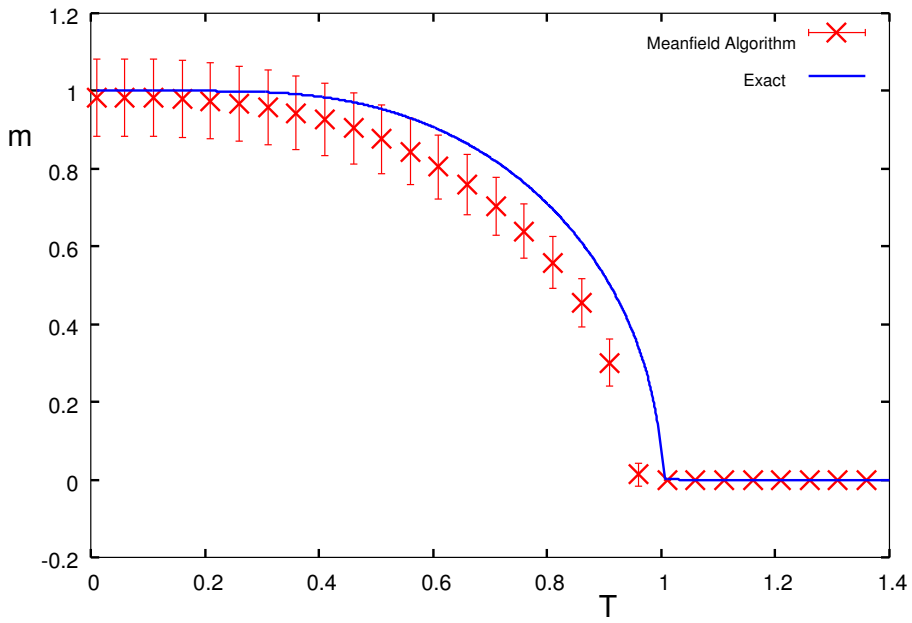


図 60: $p = \mathcal{O}(1)$ の場合の重なり m のノイズレベル T 依存性．なお, $N = 400, p = 4$ の場合に関する平均場アルゴリズム (式 (6.77)．なお, ここでは各ノイズレベルで T は固定してあり, アニーリングはしていない) による結果も合わせてプロットしてある．図中のエラーバーは 100 回の独立試行から算出した．

を最小にするように神経系は変化することになる．この式からノイズ $T = 0$ ではエネルギー E を最小にするように系は動き, T が増加するにつれ, F を最小とするためには S を大きくとるのが神経系にとっては得策になってくる[17]．相転移とは E を小さくしょうとする, つまり, 想起ベクトルの方に揃おうとする効果と S を大きくしょうとするバラバラになろうとする効果が拮抗することによって生じる．

ところで, $T = 1$ での相転移は重なり m がこの相転移点 $T = T_c = 1$ で連続的に有限値からゼロに変化する「2 次の相転移」と呼ばれる相転移であり, この場合には相転移点 T_c 及び, その相転移点近傍での重なりの振る舞いを解析的に求めることができる．まず, 転移点を求めるには方程式 : $m = \tanh(\beta m)$ を $m = 0$ のまわりで 1 次まで展開すると $m = \beta m$ が得られるので, これから直ちに $\beta = 1$, つまり, $T = T_c = 1$ が得られる．また, $T = T_c = 1$ 近傍での重なりの振る舞いは $m = \tanh(\beta m)$ を $m = 0$ のまわりに 3 次まで展開すれば

$$m = \beta m - \frac{1}{3}\beta^3 m^3 \tag{6.94}$$

となるから, これを m について解き, $\beta - \beta_c = \beta - 1 \equiv \Delta\beta$ を用いて書き直すと

$$m^2 = \frac{3(\beta - 1)}{\beta^3} = \frac{3\Delta\beta}{(1 + \Delta\beta)^3} \simeq \Delta\beta \tag{6.95}$$

となり, 従って, $\Delta\beta = (1 - T)/T$ より

$$m \sim (1 - T)^{\frac{1}{2}} \tag{6.96}$$

のように振る舞い, $T = T_c = 1$ で重なりはゼロに向かうことがわかる．

[17] ここまで書くと S はどのような形なのかが知りたくなる．S を導くためにはまだ準備不足なのであるが, ここでは形だけを書いておけば $S = N \log 2 \cosh(\beta m) - (Nm/T)\tanh(\beta m)$ である．$T \to \infty$ $(\beta = 0)$ での極限では $S = N \log 2 = \log 2^N$ となる．エントロピーは「場合の数の対数」として定義されるので, この結果は「ノイズ無限大では神経素子はバラバラで全ての状態 2^N 通りを取りうるであろう」という直観と合っている．

ここは 124 ページ目

6.9.6　$p=\mathcal{O}(N)$ の場合の解析解とその相転移

この場合には $p=\mathcal{O}(1)$ のときに $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ として無視した項が $\mathcal{O}(1)$ の量となるので, この項もきちんと扱わなければならない. 埋め込んだ ν 番目のパターンと神経回路網の状態との重なり m_ν は

$$\begin{aligned} m_\nu &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \langle S_i\rangle \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \tanh\left(\frac{\beta}{N}\sum_{j\neq i}\sum_\mu \xi_i^\mu \xi_j^\mu \langle S_j\rangle\right) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \tanh\left(\beta\sum_\mu \xi_i^\mu \frac{1}{N}\sum_j \xi_j^\mu \langle S_j\rangle\right) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \tanh\left(\beta\sum_\mu \xi_i^\mu m_\mu\right) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \xi_i^1 \tanh\left(\beta\xi_i^1\sum_\mu \xi_i^\mu m_\mu\right) \end{aligned} \tag{6.97}$$

となる. ここで, 最後の行の変形では $\xi=\pm 1$ に対する tanh の性質

$$\tanh(x) = \xi\tanh(\xi x) \tag{6.98}$$

を用いた.

次に tanh の中を $\mu=1$ の部分, $\mu=\nu$ の部分, それ以外の部分の 3 つの部分に分けると

$$\beta\xi_i^1\left(\xi_i^1 m_1 + \xi_i^\nu m_\nu + \sum_{\mu\neq 1,\nu}\xi_i^\mu m_\mu\right) = \beta m_1 + \beta\xi_i^1\xi_i^\nu m_\nu + \sum_{\mu\neq 1,\nu}\xi_i^\mu m_\mu \tag{6.99}$$

こうすると, (6.97) は

$$m_\nu = \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \xi_i^1 \tanh\left(\beta m_1 + \beta\xi_i^1\xi_i^\nu m_\nu + \sum_{\mu\neq 1,\nu}\xi_i^\mu m_\mu\right) \tag{6.100}$$

となる.

次に 1 番目のパターンを思い出している状況を考え, $m_1\sim\mathcal{O}(1)$, $m_\nu\sim\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$, $m_\mu\sim\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ $(m_\mu\neq 1,\nu)$ とすると, (6.100) 式の右辺の tanh の中の第 1 項は $\mathcal{O}(1)$, 第 2 項は $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$, 第 3 項は

$$\sum_{\mu\neq 1,\nu}\xi_i^\mu m_\mu \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\times\sqrt{p-2}\right)\sim\mathcal{O}(1) \tag{6.101}$$

のオーダーとなる. 従って, $N\to\infty$ の素子数無限大の極限で第 2 項は第 1 項, 第 3 項に比べて無視できる. この第 2 項を微小量として展開する.

$$\frac{d}{dx}\tanh(x) = 1-\tanh^2(x) \tag{6.102}$$

の関係に注意すると

$$
\begin{aligned}
m_\nu &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \xi_i^1 \tanh\left[\beta\left(m_1 + \sum_{\mu\neq 1,\nu} \xi_i^\mu \xi_i^1 m_\mu\right)\right] \\
&+ \frac{\beta}{N}\sum_i \left\{1 - \tanh^2\left[\beta\left(m_1 + \sum_{\mu\neq 1,\nu} \xi_i^\mu \xi_i^1 m_\mu\right)\right]\right\} m_\nu \\
&= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu \xi_i^1 \tanh\left[\beta\left(m_1 + \sum_{\mu\neq 1,\nu} \xi_i^\mu \xi_i^1 m_\mu\right)\right] + \beta m_\nu \\
&- \frac{\beta}{N}\sum_i \tanh^2\left[\beta\left(m_1 + \sum_{\mu\neq \nu,1} \xi_i^\mu \xi_i^1 m_\mu\right)\right] m_\nu \qquad (6.103)
\end{aligned}
$$

となる. ここで $x \equiv \sum_{\mu\neq\nu,1} \xi_i^\mu \xi_i^1 m_\mu$ は $\xi_i^\mu \xi_i^1$ が ± 1 をとることから, 平均ゼロ, 分散

$$
\sum_{\mu\neq 1} (\xi_i^\mu \xi_i^1)^2 m_\mu^2 = \sum_{\mu\neq\nu,1} m_\mu^2 \equiv \alpha r \qquad (6.104)
$$

のガウス分布:

$$
P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha r}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\alpha r}\right] \qquad (6.105)
$$

に従う[18]. ここで $N\to\infty$ では既に学んだ, 次の自己平均の性質：

$$
\frac{1}{N}\sum_i f(x_i) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, p(x)\, f(x) \qquad (6.106)
$$

が成り立つことに注意する. ここで $p(x)$ は確率変数 x の従う分布である. つまり, 確率変数 x_i によって本来は $f(x_i)$ 自体もばらつくはずなのであるが, 十分に大きなシステムを考えると $f(x_i)$ はその平均値：$\int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) f(x)$ に一致する.

これは直観的には次のようにして理解できる. 今の場合 $x_i = \sum_{\mu\neq\nu,1} \xi_i^\mu \xi_i^1 m_\mu$ は $\boldsymbol{\xi}^\mu$ を様々変えれば変わるので, その関数である $f(x_i)$ も変わる. もちろん, レナの 2 値化画像を $\boldsymbol{\xi}^\mu$ に選んだ場合と, 印鑑のような 2 値画像を $\boldsymbol{\xi}^\mu$ に選んだ場合とでは $f(x_i)$ は異なる. 従って, 我々は全ての可能な $\boldsymbol{\xi}^\mu$ に関して $f(x_i)$ を平均したものを求めなければならない. しかし, 十分に大きな N を考えた場合, つまり, 十分に大きなサイズの画像を考え, それを小さな部分画像に分割してみると, その十分大きな画像の中にはレナの 2 値化画像, 印鑑の画像はおろか, ありとあらゆる全ての 2 値画像がその部分画像としてその「どこかには」含まれることになると考えてよいであろう (これはちょっと奇異に聞こえるかもしれない. 大きさ無限大の画像などというものは我々の想像力を超えている. しかし, これは事実である). 従って, 十分大きな画像 $\boldsymbol{\xi}^\mu$ を考え, その $f(x_i)$ を測定すれば, それは実質全ての可能な部分画像に対して平均操作を行ったものに等しくなると予想できる.

[18] ここで $m_\mu \sim \mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ より, $m_\mu^2 \sim \mathcal{O}(1/N)$ となり

$$
\sum_{\mu\neq 1,\nu} m_\mu^2 \sim \mathcal{O}((p-2)/N) \sim \mathcal{O}(\alpha)
$$

であるから r はオーダー 1 の量になることに注意.

さて, この自己平均性を用いると

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}\sum_i \tanh^2\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq\nu,1}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right] &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi\alpha r}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\alpha r}}\tanh^2[\beta(m_1+x)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} Dz\tanh^2[\beta(m_1+\sqrt{\alpha r}z)]\equiv q \quad (6.107)\end{aligned}$$

となる. ここで, $x/\sqrt{\alpha r}=z$ と変数変換し, $Dz\equiv dz\,\mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}}/\sqrt{2\pi}$ でガウス積分の測度を定義した.

以上を (6.103) 式に代入すると,

$$m_\nu = \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu\xi_i^1\tanh\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right]+\beta m_\nu-\beta q m_\nu \quad (6.108)$$

となるので, これを m_ν に関して解いて

$$m_\nu = \frac{1}{[1-\beta(1-q)]}\frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\nu\xi_i^1\tanh\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right] \quad (6.109)$$

を得る.

さて, q の表式の中には r や m_1 が現れるので, これらを**自己無憧着 (self-consistent)** に求めなくてはならない. そこで, まずは上式の両辺の自乗を計算すると

$$\begin{aligned}m_\nu^2 &= \left[\frac{1}{1-\beta(1-q)}\right]^2\frac{1}{N^2}\sum_{ij}\xi_i^\nu\xi_i^1\xi_j^\nu\xi_j^1 \\ &\times \tanh\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right]\tanh\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_j^\mu\xi_j^1 m_\mu\right)\right] \quad (6.110)\end{aligned}$$

となるが, 生き残るのは $i=j$ を満たす項のみだから

$$m_\nu^2 = \left[\frac{1}{1-\beta(1-q)}\right]^2\frac{1}{N^2}\sum_i\tanh^2\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right] \quad (6.111)$$

が得られる. 従って r は

$$\begin{aligned}r=\frac{1}{\alpha}\sum_{\nu\neq1}m_\nu^2 &= \frac{1}{\alpha}\times(N\alpha-1)\times\frac{1}{N^2}\left[\frac{1}{1-\beta(1-q)}\right]^2\sum_i\tanh^2\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right] \\ &= \left[\frac{1}{1-\beta(1-q)}\right]^2\frac{1}{N}\sum_i\tanh^2\left[\beta\left(m_1+\sum_{\mu\neq1,\nu}\xi_i^\mu\xi_i^1 m_\mu\right)\right] \\ &= \left[\frac{1}{1-\beta(1-q)}\right]^2\int_{-\infty}^{\infty}Dz\tanh^2[\beta(m_1+\sqrt{\alpha r}z)] \\ &= \frac{q}{[1-\beta(1-q)]^2} \quad (6.112)\end{aligned}$$

を得る.

これで q, r が求まった. 残るは m_1 であるが, これは

$$m_\nu = \frac{1}{N}\sum_i\xi_i\tanh(\beta\sum_\mu\xi_i^\mu m_\mu) \quad (6.113)$$

で $\nu = 1$ とおいて,

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^1 \tanh(\beta \sum_\mu \xi_i^\mu m_\mu) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i (\xi_i^1)^2 \tanh(\beta \sum_\mu \xi_i^1 \xi_i^\mu m_\mu) \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \tanh\left(\beta m_1 + \beta \sum_{\mu\neq\nu=1} \xi_i^1 \xi_i^\mu m_\mu\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh[\beta(m_1 + \sqrt{\alpha r} z)] \end{aligned} \tag{6.114}$$

が得られる. 以上をまとめると ($m_1 = m$ とする)

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh[\beta(m + \sqrt{\alpha r} z)] \tag{6.115}$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh^2[\beta(m + \sqrt{\alpha r} z)] \tag{6.116}$$

$$r = \frac{q}{[1 - \beta(1-q)]^2} \tag{6.117}$$

となる.

従って, あるノイズレベル β のときの最大記憶パターンを求めるには, 上の 3 本の連立方程式を解き, $m \neq 0$ を解に持つような $\alpha = \alpha_{\max}$ を求めれば

$$p_{\max} = \alpha_{\max} N \tag{6.118}$$

として決定される.

(A) ノイズゼロの場合の記憶容量

まずはノイズゼロ : $T = 0$ の場合 $\beta \to \infty$ に関して最大記憶パターンを求めてみることにしょう.

$\beta \to \infty$ の極限で m は

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \,\mathrm{sgn}(m + \sqrt{\alpha r} z) = \int_{-\frac{m}{\sqrt{\alpha r}}}^{\infty} Dz - \int_{-\infty}^{-\frac{m}{\sqrt{\alpha r}}} Dz = 1 - 2H\left(\frac{m}{\sqrt{\alpha r}}\right) \tag{6.119}$$

となる. ここで関数 $H(x)$ を

$$H(x) \equiv \int_x^{\infty} Dz \tag{6.120}$$

で定義した.

$(1-q)$ は

$$
\begin{aligned}
1-q &= \int_{-\infty}^{\infty} Dz(1-\tanh^2[\beta(m+\sqrt{\alpha r}z)]) \\
&\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{m^2}{2\alpha r}}\int_{-\infty}^{\infty} dz(1-\tanh^2[\beta(m+\sqrt{\alpha r}z)]) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{m^2}{2\alpha r}}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dz}\left(\frac{\tanh[\beta(m+\sqrt{\alpha r})]}{\beta\sqrt{\alpha r}}\right)dz \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{m^2}{2\alpha r}}\left[\frac{\tanh[\beta(m+\sqrt{\alpha r})]}{\beta\sqrt{\alpha r}}\right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= \frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{2}{\pi\alpha r}}\,\mathrm{e}^{-\frac{m^2}{2\alpha r}} \qquad (6.121)
\end{aligned}
$$

となる. 従って, $C \equiv \beta(1-q)$ とおくと, 上 3 式は

$$
C = \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha r}}\,\mathrm{e}^{-\frac{m^2}{2\alpha r}} \qquad (6.122)
$$

$$
r = \frac{1}{(1-C)^2} \qquad (6.123)
$$

$$
m = 1-2H\left(\frac{m}{\sqrt{2\alpha r}}\right) \qquad (6.124)
$$

となり, さらに

$$
y \equiv \frac{m}{\sqrt{2\alpha r}} \qquad (6.125)
$$

で新しい変数 y を導入すると, 上式はさらに簡略化され

$$
y\left(\sqrt{2\alpha}+\frac{2}{\sqrt{\pi}}\,\mathrm{e}^{-y^2}\right) = 1-2H(y) \qquad (6.126)
$$

が得られる. これは, 図 61 のようにグラフを用いて解くことができる. 最終的に, 最大記憶パターンは $\alpha_{\max}\sim 0.138$ となるので,

最大記憶パターン数 : $p_{\max} = 0.138N$

が求まる.

(B) 有限ノイズの場合の記憶容量と相図

話が長くなってしまったので, 簡単にではあるがこの辺りでこれまでの問題を整理しておくことにしょう. 我々の問題は, 神経素子の出力に確率的な動作を導入した場合, つまり

$$
\begin{aligned}
P(S_i=1) &= \frac{\mathrm{e}^{\beta h_i}}{\mathrm{e}^{\beta h_i}+\mathrm{e}^{-\beta h_i}} \\
P(S_i=-1) &= \frac{\mathrm{e}^{-\beta h_i}}{\mathrm{e}^{\beta h_i}+\mathrm{e}^{-\beta h_i}} = 1-P(S_i=1) \\
h_i &\equiv \frac{1}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j
\end{aligned}
$$

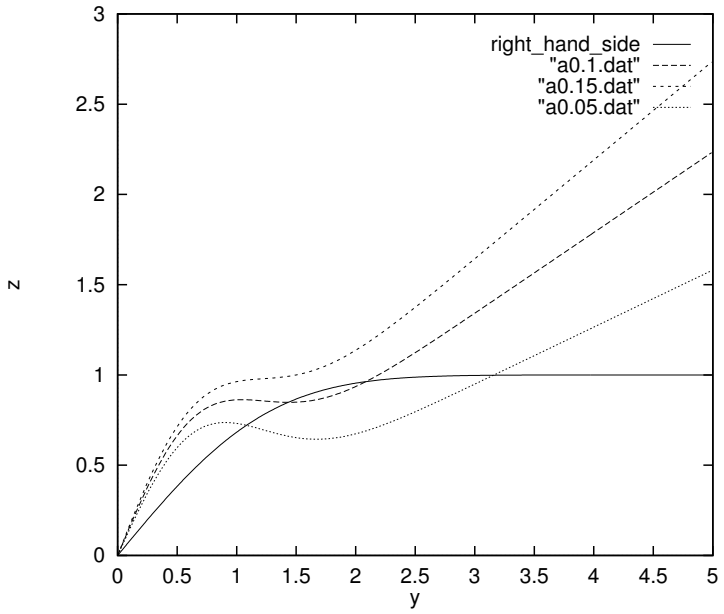


図 61: 実線が (6.126) の右辺, つまり $1-2H(y)$ である. 破線, 点線が (6.126) の左辺であり, これは α に依存して変化する. α を変化させて行くと, およそ $\alpha = 0.138$ で両者の交点がなくなる.

で与えられる確率により, 全ての神経素子 $S_i\,(i=1,\cdots,N)$ が非同期的状態変更をした場合, 任意の記憶パターン $\boldsymbol{\xi}^1 = (\xi_1^1, \xi_2^1, \cdots, \xi_N^1)$ と神経回路の状態 $\boldsymbol{S} = (S_1, S_2, \cdots, S_N)$ との間の重なり;

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \xi_i^1 S_i$$

が有限となるような最大の記憶パターン数 $p_{\max} = \alpha N$ を求めることであった. 最大記憶パターン数[19]α は回路網の確率的な動作の程度を表すノイズレベル : $T = \beta^{-1}$ に依存することに注意しよう. 明らかに $T=0$ の場合にはノイズフリーな回路網になり, T を大きくして行けば個々の神経素子の挙動は不確かさを増す ($T \to \infty$ で完全にランダムに ± 1 を出力する素子になる). よって, 有限ノイズの連想記憶装置の性能を評価するためには記憶させたパターン数とノイズレベル, すなわち (α, T) の組をある値に固定したときに, 重なり m が有限の値を持つかどうかを調べればよい. もし, $m \neq 0$ の解を持つならば**回路網はこのノイズレベル T の下で αN 個のパターンを記憶する連想記憶装置として動作する**ことが結論付けられる.

さて, (α, T) の一組が与えられたときに，重なり m を含む回路網は次の状態方程式で記述された.

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh[\beta(m + \sqrt{\alpha r} z)] \tag{6.127}$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh^2[\beta(m + \sqrt{\alpha r} z)] \tag{6.128}$$

$$r = \frac{q}{[1-\beta(1-q)]^2} \tag{6.129}$$

[19] 正確に言えばパターン数は α に全素子数 N をかけた αN であるが, 実質的には α を決めればパターン数は決まるわけであるから, 以後, α をもって「パターン数」と呼ぶ場合があることに注意されたい.

但し, ここでは積分測度を $Dz \equiv dz\mathrm{e}^{-z^2/2}/\sqrt{2\pi}$ と置いている. 上記の方程式はこれ以上簡単にはならない (z に関する積分が実行できない). 従って, 上記の方程式の中に含まれる z に関する数値積分を実行し, この連立方程式を数値的に解くことになる[20].

さて, 式 (6.129) で r は q のみで書けるのであるから，(6.129) 式を (6.127)(6.128) 式に代入すれば, 形式的に次のような m と q の 2 元非線形連立方程式を得る.

$$m = M(m,q) \tag{6.130}$$

$$q = Q(m,q) \tag{6.131}$$

この連立方程式の解き方は様々あろうが, 例えば, 上の方程式を一種の「写像」, つまり

$$m_{t+1} = M(m_t,q_t) \tag{6.132}$$

$$q_{t+1} = Q(m_t,q_t) \tag{6.133}$$

とみなし, 適当な初期条件 (m_0,q_0) からスタートし[21], 隣り合う時刻 $t=t,t+1$ のときの m_t 及び q_t の差が, ある範囲内 ϵ に収まったとき, つまり

$$|m_{t+1}-m_t| < \epsilon \tag{6.134}$$

$$|q_{t+1}-q_t| < \epsilon \tag{6.135}$$

が同時に成立したときの $(m_t,q_t)=(m,q)$ を解とするのも有効な方法の一つであろう. ϵ は例えば $\epsilon=10^{-5}$ と選ぶなど, 必要とする精度に応じて決めてやればよい. もちろん, これらは「非線形」な写像であるから, 一般的に言ってパラメータ (α,T) の取り方, 初期条件の選び方によっては振動解やカオス解が生じたりする可能性もある. しかし, 今の場合にはそのような解は現れず, 素直に固定点に収束する (その意味で非線形性はさほど強くない) [22].

以上の方法でノイズレベルを $T=0.4$ で固定した場合の重なり m の記憶パターン数 α 依存性を調べたので, それを図 62 に載せよう. この図より, パターン数 α を徐々に増やしていくと, ある臨界値 $\alpha_c \simeq 0.077$ で突然 m は有限の値からゼロへと変化し, これ以上のパターンを詰め込むと, 今まで思い出すことができたパターンさえも記憶から消失してしまうことがわかる. いわば「頭の中が真っ白な状態になってしまう」というわけである[23].

さて, この例では $T=0.4$ の場合であったが, T をも変えて行き, $m\neq 0$ である領域と $m=0$ である領域の境界を α-T 平面の中に書き込むと, この回路網の動作がつかみ易くなる. このような図を**相図 (phase diagram)** と呼ぶ. これを図 63 に載せる. この図より, 想起相 (retrival) と書かれている領域の (α,T) を選べば, 回路網は連想記憶装置として動作する. 言い方を変えると, この retrival 相は $m\neq 0$ で特徴付けられた相である. 一方, スピングラス相

[20] 最終的には数値積分やコンピュータを用いて連立方程式を解くことになったとはいえ, これらの状態方程式を導出した時点で問題自体はすっかり解けていることに注意されたい. これは状態方程式の中に回路網のサイズ (神経素子の個数)N が入っていないことから明らかである ($N\to\infty$ の極限操作で解析解を得たのであった.) 先に述べた平均場アニーリング法で計算機を用いて数値的に重なりを評価する場合には予め素子数 N を与えなければならず, 当然, 得られる結果は $N\to\infty$ の場合の近似解である.

[21] 写像の状態変更毎に数値積分を実行する必要があることに注意されたい.

[22] もちろん, $M(m,q)-M$, $Q(m,q)-q$ の 1 回微分を用いるニュートン法で解を求めてもよい.

[23] 先にも述べたように, 外部からの制御パラメータ (α,T) の変化によって, m などの巨視的な量 (秩序変数) に特異性が生じることを**相転移**と呼ぶ. また, この例のように, (「自由エネルギー」と呼ばれる物理量の制御変数に関する一回微分で得られる)m に不連続な変化があらわれる相転移を, 先に見たノイズレベルを増加していったときに m が連続的がゼロになった 2 次転移に対して **1 次の相転移 (1 次転移)** と呼んでいる.

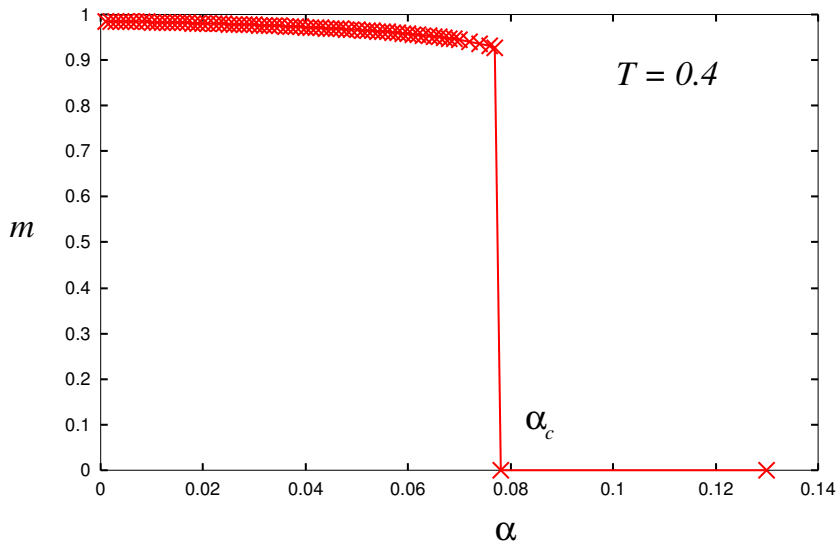


図 62: ノイズレベルを $T = 0.4$ とおいた場合の重なり m の記憶パターン数 α 依存性. $\alpha \simeq 0.077$ (図の critical point α_c) で有限の m の値から $m = 0$ へと突然変化する.

(spin glass) 相では $m = 0$ であり[24], 連想記憶装置としては動作しない. retrival 相から spin glass 相への相転移は一次転移である. つまり, retrival 相 → spin glass 相の過程で m が不連続に有限値からゼロに変化する (図 62 を参照されたい).

さて, ノイズゼロ, つまり, $T = 0$ の状況では方程式は簡略化され, 比較的簡単に $\alpha_c \simeq 0.138$ という結果を得たのであった. 今の場合, 図 63 の $T = 0$ の軸 (横軸) と相境界の接点を見ると, 確かに $T = 0$ で $\alpha_c \simeq 0.138$ となっており, 我々が以前行った計算結果とつじつまが合っていることが確認できる.

さて, スピングラス相と常磁性相の相境界線は 2 次転移であるから, 解析的に求めることができる. (6.128)(6.129) 式をそれぞれ, $q = 1, m = r = 0$ のまわりで展開すれば

$$q \simeq \beta^2 \alpha r \int_{-\infty}^{\infty} Dz z^2 = \beta^2 \alpha r \tag{6.136}$$

$$r \simeq \frac{q}{(1-\beta)^2} \tag{6.137}$$

であり, この両式から r を消去して $T = \beta^{-1}$ について解けば直ちに

$$T = 1 + \sqrt{\alpha} \tag{6.138}$$

が得られる. これがスピングラス相と常磁性相の相境界を表す式である.

[24] 当然の疑問として「スピングラスとは何か ?」というのがあるに違いない. ここでは「スピングラスとは磁性体の一種である」と言っておくにとどめるが, 回路網の状態という観点からは「スピングラス状態とは記憶してもいないパターンに回路網の状態が固定されてしまった状況」であると考えることができる. 詳細はこの講義で後ほど説明する.

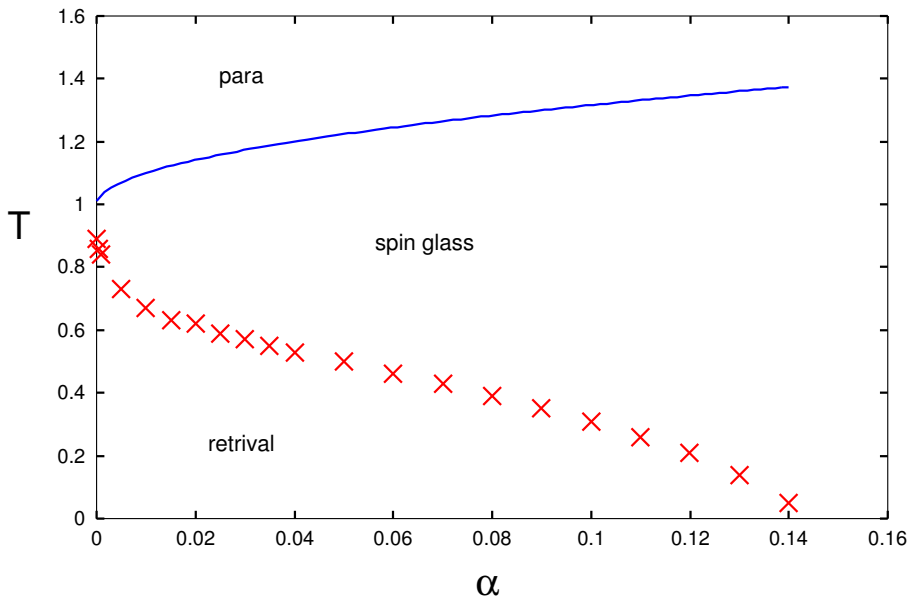


図 63: 確率的神経回路網の相図. 想起相 (retrival) と書かれている領域の (α, T) を選べば, 回路網は連想記憶装置として動作する. 一方, スピングラス相 (spin glass) では $m = 0$ であり, 連想記憶装置としては動作しない. retrival 相から spin glass 相への相転移は一次転移である. つまり, retrival 相 → spin glass 相の過程で m が不連続に有限値からゼロに変化する (図 62 参照).

6.10 想起過程のダイナミックス

今まで述べてきた連想記憶に関する解析は各素子が**同期的**に

$$S_i(t+1) \quad = \quad \mathrm{sgn}\left(\frac{1}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t)\right) \tag{6.139}$$

で記述される状態変更式に従って自らの状態を更新して行った後の収束点 $(t\to\infty)$ に関するものであった. つまり, 十分に時間が経った後に全ての素子 i に対して

$$\lim_{t\to\infty} S_i(t) \quad = \quad \xi_i^1 \tag{6.140}$$

となるための条件：

$$\xi_i^1 \quad = \quad \mathrm{sgn}\left(\frac{1}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu}\xi_i^\mu\xi_j^\mu\xi_j^1\right) \tag{6.141}$$

をクロストークノイズを評価することにより解析したり ($\boldsymbol{\xi}^1$：ターゲットパターン), あるいは確率的動作をする神経素子が**非同期的**に状態更新している場合, 十分時間が経過した後の素子状態に関する時間平均：

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T} S_i(t) \quad = \quad \langle S_i\rangle \tag{6.142}$$

に対して平均場方程式を作り, それを解析することにより, 回路網に記憶させることのできるパターン数を評価した. しかし, 初期状態 $\boldsymbol{S}(0)$ から固定点 $\boldsymbol{S}(\infty)$ へ至る過程を調べることで, 平衡系 (十

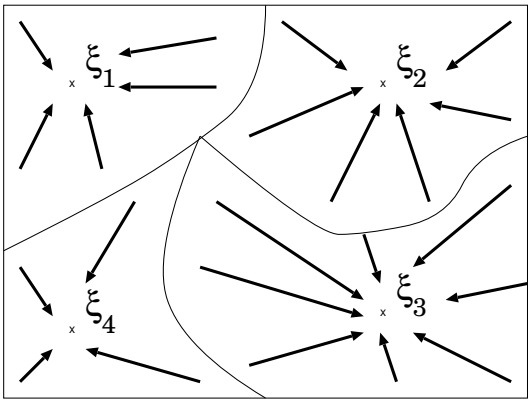


図 64: 連想記憶の想起過程の概念図. 初期状態の選び方によっては, 想起したいパターン以外の固定点に引き込まれる可能性がある. それぞれのパターンに引き込まれる領域のことを**引き込み領域 (basin)** と呼ぶ.

分時間が経過した後の系) の解析では得られない様々な連想記憶に関する性質や概念が明確になる (図 64 参照). そこで, ここでは記憶の「想起過程」のダイナミックスを調べる代表的な理論である **Amari-Maginu 理論**を紹介することにしょう.

ただし, ここでは各素子が (6.139) 式に従って状態変更して行くものを採用する. このときに問題となるのは, 素子群が一斉に状態を変更するのか (**同期式状態変更**), あるいは, 個々に状態変更するのか (**非同期式状態変更**) という点であるが, ここでは神経素子群が前者の更新様式をとるものとする. すなわち

$$\begin{pmatrix} S_1(0) \\ S_2(0) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ S_N(0) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} S_1(1) \\ S_2(1) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ S_N(1) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} S_1(2) \\ S_2(2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ S_N(2) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} S_1(3) \\ S_2(3) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ S_N(3) \end{pmatrix} \to \cdots \tag{6.143}$$

で状態変更するものとして議論を進める.

6.10.1 シグナル -ノイズ解析

ダイナミックスを扱う場合でも, 既に学んだ平衡状態の解析方法 — **シグナル -ノイズ解析 (SN 解析)** が役に立つ. そこで, まず時刻 t における素子 i への入力和 :

$$h_i(t) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t) \tag{6.144}$$

をとり, ターゲットパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ を想起するプロセスを考える. このとき, ターゲットパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ の安定性解析で行なったように $h_i(t)$ を $\mu = 1$ の項と, それ以外の項に分離して

$$\begin{aligned} h_i(t) &= \frac{1}{N}\sum_j \xi_i^1\xi_j^1 S_j(t) + \frac{1}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq 1}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t) \\ &= \xi_i^1\left(\frac{1}{N}\sum_j \xi_j^1 S_j(t)\right) + \frac{1}{N}\sum_j\sum_{\mu\neq 1}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t) \equiv \xi_i^1 m_t + N_i^t \end{aligned} \tag{6.145}$$

としておく. ここで

$$m_t \equiv \frac{1}{N}\sum_j \xi_j^1 S_j(t) \tag{6.146}$$

$$N_i^t \equiv \frac{1}{N}\sum_j \sum_{\mu\neq 1} \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_j(t) \tag{6.147}$$

とおいた. この N_i^t は 2 番目以降のパターンからのノイズである.

6.10.2 ノイズ項を固定分散ガウスで近似した発展方程式

既に学んだ SN 解析に従えば, 我々が次にすべきことは, 確率変数 N_i^t の統計的な性質を調べることである. そこで, N_i^t **は多数の** ± 1 **の和であり, 各項が独立である**と仮定する. すると中心極限定理より N_i^t は平均がゼロ, 分散 σ^2 が

$$\sigma^2 = \frac{1}{N^2}\sum_j \sum_{\mu\neq 1} (\xi_i^\mu \xi_j^\mu S_j(t))^2 = \frac{1}{N^2}\times N\times(p-1) \simeq \alpha \left(\equiv \frac{p}{N}\right) \tag{6.148}$$

のガウス分布に従う. よって, 時刻 $t+1$ での重なり m_{t+1} は

$$\begin{aligned} m_{t+1} &= \frac{1}{N}\sum_j \xi_j^1 S_j(t+1) \\ &= \frac{1}{N}\sum_j \xi_j^1 \mathrm{sgn}(h_j(t)) \\ &= \frac{1}{N}\sum_j \xi_j^1 \mathrm{sgn}(\xi_j^1 m_t + N_j(t)) \\ &= \frac{1}{N}\sum_j (\xi_j^1\xi_j^1)\mathrm{sgn}(\xi_j^1\xi_j^1 m_t + \xi_j^1 N_j(t)) \\ &= \frac{1}{N}\sum_j \mathrm{sgn}(m_t + \xi_j^1 N_j(t)) \end{aligned} \tag{6.149}$$

となる.

さて, N_i^t が平均ゼロ, 分散 $\sigma^2 = \alpha$ のガウス分布に従うのであるから, $x \equiv \xi_j^1 N_i^t$ もやはり, 平均ゼロ, 分散 σ^2 のガウス分布に従う. よって $\mathrm{sgn}(\cdots)$ の自己平均性から

$$\begin{aligned} m_{t+1} &= \frac{1}{N}\sum_j \mathrm{sgn}(m_t + \xi_j^1 N_j(t)) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}\sigma} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \mathrm{sgn}(m_t + x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{m_t/\sigma} dz\, \mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \end{aligned} \tag{6.150}$$

が得られ, 回路網の状態 $\boldsymbol{S}(t)$ と想起するパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ の重なり m_t の時間発展は

$$m_{t+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{m_t/\sigma} dz\ \mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} = 1 - 2H\left(\frac{m_t}{\sqrt{\alpha}}\right) \tag{6.151}$$

と書ける. ここで, $\sigma = \sqrt{\alpha}$ であり, $H(x)$ を $H(x) = \int_x^\infty Dz, Dz = dz\,\mathrm{e}^{-z^2/2}/\sqrt{2\pi}$ で定義した. この (6.151) 式から直ちにわかることは, 十分時間が経過した後に重なりが $m_{t+1} = m_t = m$ という一定値に収束したとすると, $\alpha = 0$, 及び, $\alpha = \infty$ でそれぞれ

$$m(\alpha = 0) = 1 - 2H(\infty) = 1 \tag{6.152}$$

$$m(\alpha = \infty) = 1 - 2H(0) = 0 \tag{6.153}$$

であるから, $0 < \alpha < \infty$ の間に必ず, 重なり m が有限値からゼロに変化する点が存在する. この α の増加に伴う想起相から非想起相への変化が 2 次転移だとすれば, (6.151) 式を m で展開することにより, $\alpha_c = 2/\pi$ が得られる. これは, 先に見た非同期的状態更新の場合の値 $\alpha_c = 0.138$ と比べてかなり大きい. そこで, 簡単にこのダイナミックスの式 (6.151) の妥当性を手っ取り早くチェックするために, 計算機シミュレーションを用いて (6.151) 式からの結果と比較してみることにしょう.

6.10.3 計算機シミュレーションによるチェックと問題点

図 65 にノイズ項を固定分散ガウスで近似した場合の想起過程のダイナミックス : $m_{t+1} = 1 - 2H(m_t/\sqrt{\alpha})$ をいくつかの α の値に対してプロットしたものを載せる. これらの図から, いずれの初

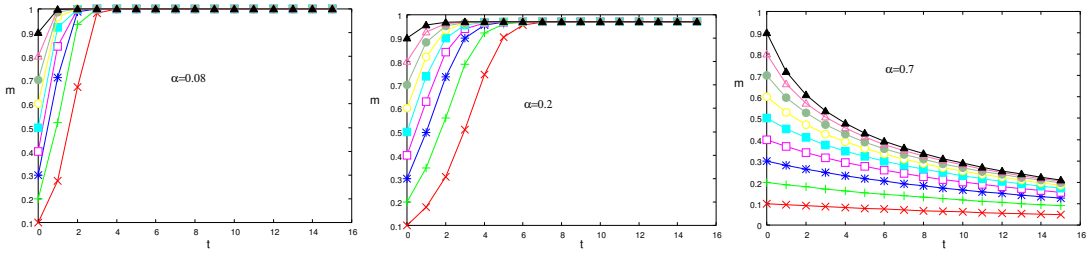


図 65: ノイズを単純に分散 $\sigma^2 = p/N$ とした場合の想起過程のダイナミックス (6.151). 左から, $\alpha = 0.08, 0.2, 0.7$ に対する結果.

期状態から出発しても α の値によって決まる一定値に単調に収束することがわかる. 次いで, 図 66 に計算機シミュレーションによる結果を載せる. このシミュレーションでは神経素子数を $N = 3600$ に選んである. $\alpha = 0.08$ の場合の (6.151) 式からの結果と比較するために, 回路網に記憶させるパターン数を $p = \alpha N = 0.08 \times 3600 = 288$ と選んだ. この図 66 からわかるように, 初期状態の選び方により, 重なりの時間発展に「閾値現象」が見られ, (6.151) 式からの結果 (図 65 の左側) とは明らかに異なる. 従って, この結果を見る限りにおいて, (6.151) 式は間違っており, 近似として考えてみても回路網の定性的振る舞いを全くとらえていないことがわかる.

どこに問題があったのであろうか? そこで, 確率変数 N_i^t に立ち帰って考えて直してみると, この N_i^t は時刻 t 以前の各素子の「履歴」に非常に複雑な形で依存しているわけであり, 我々が方程式 (6.151) を導出する際に用いた「N_i^t は平均ゼロ, 分散 σ^2 のガウス分布に従う」という仮定が果たして妥当なものであるかどうかは一見しただけではわからない. この状況で具体的に我々が調べるべき点は次の 2 つであろう.

- N_i^t が従う分布は何か ?
- N_i^t がガウス分布に従うことは認めるとすると, その平均と分散の時間発展はどうなるのか ?

これらはいずれも, もっともな疑問である. 1 番目の疑問に関しては, 中心極限定理が適用できるのは, あくまでも N_i^t **を構成する各項が独立である場合**であるから, 上の場合, ガウス分布から大きくずれる可能性は大いにあり得ることである. また, 2 番目の問題に関して言えば, 上の (6.151) では平均ゼロで分散 σ^2 が**時間に依らず一定である**とおいたが, 分散に時間依存性を持たせた場合, ダイナミックスはどう変わるのか, というのは調べるべき重要事項である.

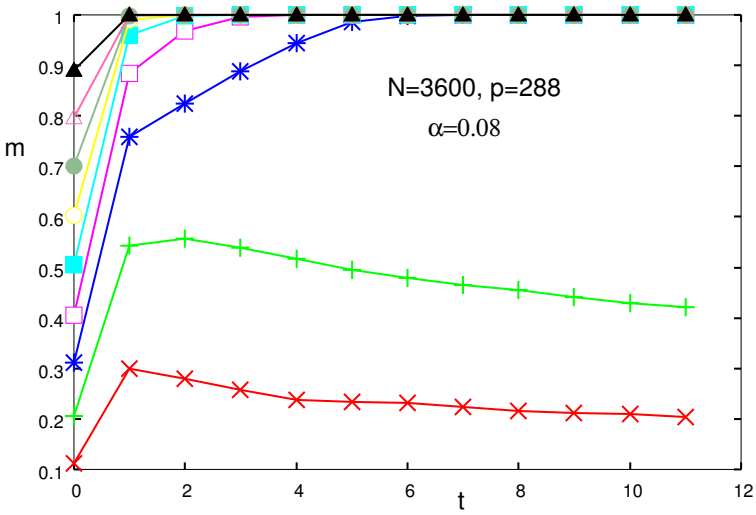


図 66: $N = 3600, p = 288, \alpha = p/N = 0.08$ での計算機シミュレーションの結果. 初期状態の選び方による閾値現象が見られる.

現段階で言うと, 1 番目の問題は完全には解っておらず[25], 従って, この講義で 1 番目の答えを述べることはできない. 一方, 2 番目の問題に関しては, σ^2 を時間に依存する分散 σ_t^2 としてこの σ_t^2 に関する閉じた方程式を書き下して, (m_t, σ_t) でもって想起過程のダイナミックスを記述するというアイデアが Amari と Maginu によって提唱され (1988), 今では代表的な近似理論の一つとなっている[26]. そこで次節ではこの理論の詳細を見て行くことにしよう.

6.10.4 Amari-Maginu 理論

まずは N_i^t がガウス分布に従うものとしよう. このとき, Amari と Maginu はこの**ガウス分布が平均ゼロ, 分散 σ_t^2 を持つとした**. このとき, 重なり m の時間発展は

$$m_{t+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{m_t/\sigma_t} dz\ \mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \tag{6.154}$$

となる.

ここで重要なのは m_t, σ_t **で閉じた方程式が得られる**ということであるから, σ_t の時間発展が σ_t, m_t のみで書けるかどうかが解析上の焦点となる. これ以降の計算はやや複雑なので, その導出は各自の自習に任せ, 計算結果をはじめに示そう.

解析の結果, 重なり m_t, 分散 σ_t^2 は次の方程式 :

$$m_t = \mathrm{erf}\left(\frac{m_{t-1}}{\sqrt{2}\sigma_{t-1}}\right) \tag{6.155}$$

$$\sigma_t^2 = \alpha + 4P\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}\right)^2 + 4\alpha\left(\frac{m_{t-1}m_t}{\sigma_{t-1}}\right)P\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}\right) \tag{6.156}$$

となる. ただし, $P(x) \equiv (1/\sqrt{2\pi})\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$ であり, 誤差関数を $\mathrm{erf}(x) = (2/\sqrt{\pi})\int_0^x dz \mathrm{e}^{-z^2}$ で定義している. 以下にこれらの方程式を記憶容量 $\alpha = 0.08, 0.2$ の 2 つの場合に関して解いた結果を載せ

[25] ある条件下 (後述) ではガウス分布の近似が正しく, ある条件では正しくないことはわかっている. 正しくない場合, それがどのような分布になるのかに関してはわかっていない.

[26] その後, この理論は Okada(1995) によって近似精度の改善がなされた

ておこう．ところで, ガウス分布の正当性であるが, **想起が成功する場合にはガウス近似が正しく, 想起が失敗する場合にはガウス近似から外れてくる**ことがわかっている．しかし, ガウス近似から外れた場合, クロストーク項がどのような分布になるのかに関してはわかっていない． これらの図

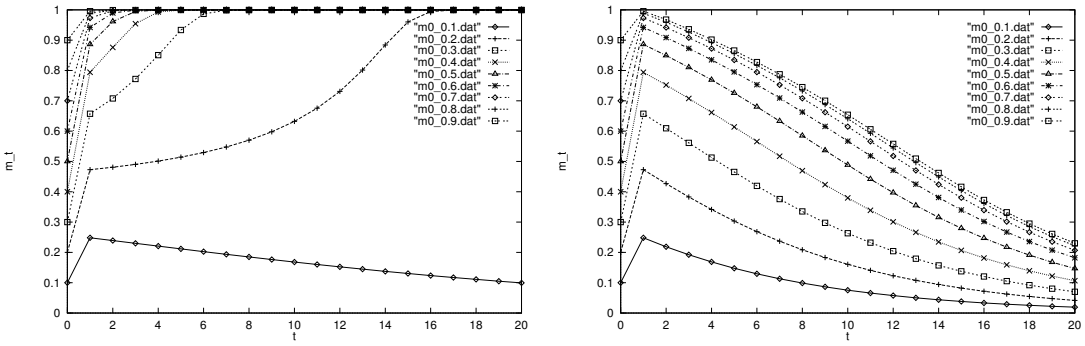


図 67: 重なり m の時間発展．記憶させたパターン数が $p = 0.08N$ の場合 (左) と $p = 0.2N$ の場合 (右)．$p = 0.08N$ では標準偏差の初期値は $\sigma_{t=0} = 0.1$ に選んである．重なりの初期値が小さいと想起に失敗することがわかる． $p = 0.2N$ の場合は重なりの初期値をどんなに正解 $(m = 1)$ に近い値に選んでも想起に失敗することがわかる．最大記憶パターン以上のパターンをネットワークに記憶させてしまったためである．

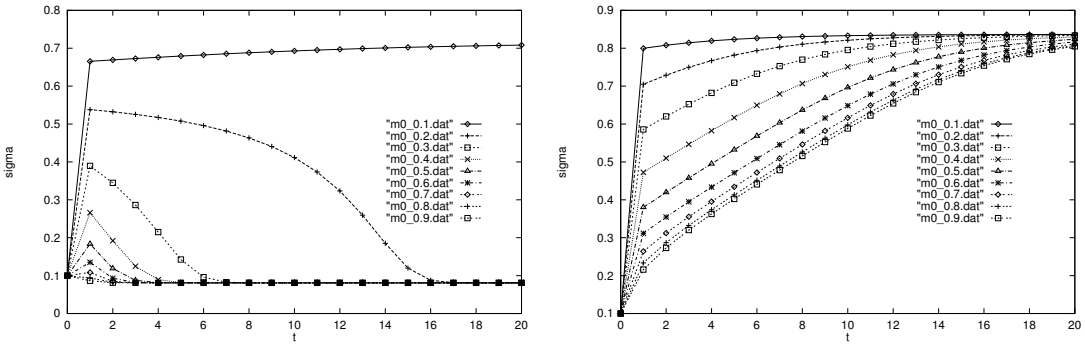


図 68: 標準偏差 σ の時間発展．記憶させたパターン数が $p = 0.08N$ の場合 (左) と $p = 0.20$ の場合 (右)．標準偏差の初期値は $\sigma_{t=0} = 0.1$ に選んである．重なりの初期値は $m_{t=0} = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8.0.9$ の 9 通りに選んだ．$p = 0.08N$ の場合には重なりの初期値が小さいと, クロストーク項の分散が成長し, 注目するパターンの想起を妨害することがわかる． $p = 0.2N$ の場合には全ての重なりの初期値に対しクロストーク項の分散が成長し, 注目するパターンの想起を妨害することがわかる．

から, m_t の時間発展では計算機シミュレーションで確認できたような初期状態の選び方による閾値現象が見られ, また定性的な振る舞いも計算機シミュレーションの結果と良く合っていることがわかる．

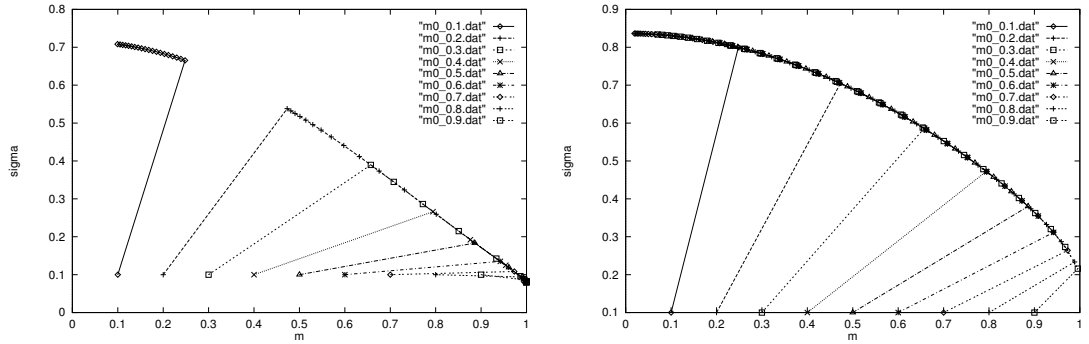


図 69: 記憶させたパターン数が $p = 0.08N$ の場合 (左) と $p = 0.2N$ の場合の重なり m_t と標準偏差 σ_t の流れ図.

課題 10：得られた m_t, σ_t に関する方程式：(6.155)(6.156) で十分時間が経過した後に m_t, σ_t が一定値：m, σ 収束したとすれば (6.155)(6.156) 両式からはぞれぞれ

$$
\begin{aligned}
m &= \mathrm{erf}\left(\frac{m}{\sqrt{2}\sigma}\right) \\
\sigma^2 &= \alpha + 4P\left(\frac{m}{\sigma}\right)^2 + 4\alpha\left(\frac{m^2}{\sigma}\right)P\left(\frac{m}{\sigma}\right)
\end{aligned}
$$

なる方程式が得られる. この連立方程式をニュートン法などを用いて数値的に解くことにより, 記憶容量 α_c を求めよ (記憶容量 α_c はこれまでと同様に α を大きくしていったときに $m = 0$ のみが解として得られる α として定義される). この値は先に求めた $\alpha_c = 0.138$ と同じになるか, あるいは異なるか？ 異なる場合にはその理由として考えられる点を述べよ.

課題 11：ここでの議論で仮定した時間依存するクロストークノイズ：

$$
N_i^t = \frac{1}{N}\sum_j \sum_{\mu\neq 1} \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_j(t)
$$

のガウス性を各更新ステップ t で N_i^t の 3 次のキュムラントを計算することによりチェックせよ. 計算には計算機シミュレーションを用いる. 具体的な手続きとしては, 同じ $\boldsymbol{\xi}^\mu$ $(\mu = 1, \cdots, p)$ から作られる結合を持つ回路網の動作を $\boldsymbol{S}$ の初期状態を変えて複数回実行させ, そこから得られる各更新ステップ t でのアンサンブルで $C_3(N_i(t)) = \langle N_i(t)^3\rangle - 3\langle N_i(t)\rangle\langle N_i(t)^2\rangle + 2\langle N_i(t)\rangle^3$ を計算する.

6.10.5 m_t, σ_t に関する発展方程式の導出

まず σ_t^2 を具体的に書き出してみると

$$
\sigma_t^2 + \{E[N_i^t]\}^2 = E[(N_i^t)^2] = \frac{1}{N^2}\sum_{jj'}\sum_{\mu\mu'} E\left[\xi_i^\mu \xi_j^\mu S_j(t) \xi_i^{\mu'} \xi_{j'}^{\mu'} S_{j'}(t)\right] \tag{6.157}
$$

となる．ここで $E(x)$ は確率変数 x の期待値を意味する．以下で $\mu, \mu, j, j^{'}$ の添え字間の関係に応じていくつかの場合にわけて考えてみる．

(1) $\mu = \mu^{'}, j = j^{'}$ の場合

項の値は 1, 項の数は $(p-1)(N-1)$ である．

(2) $\mu \neq \mu^{'}, j = j^{'}$ の場合

$$E[\xi_i^{\mu}\xi_j^{\mu}\xi_i^{\mu^{'}}\xi_j^{\mu^{'}}] = 0 \quad \text{(独立なパターンだから)}$$

(3) $\mu = \mu^{'}, j \neq j^{'}$ の場合

$$v = E[\xi_j^{\mu}\xi_{j^{'}}^{\mu}S_j(t)S_{j^{'}}(t)] \tag{6.158}$$

項の数 $(p-1)(N-1)(N-2)$.

(4) $\mu \neq \mu^{'}, j \neq j^{'}$ の場合

$$v^{'} = E[\xi_j^{\mu}\xi_j^{\mu}S_j(t)\xi_i^{\mu^{'}}\xi_{j^{'}}^{\mu^{'}}S_{j^{'}}(t)] \tag{6.159}$$

項の数 $(p-1)(p-2)(N-1)(N-2)$.

従って, 以下では $v, v^{'}$ を評価して行くことにする．

(A) v の評価

$$S_j(t) = \mathrm{sgn}(h_j(t)) = \mathrm{sgn}\left(\xi_j^1 m_{t-1} + \frac{1}{N}\sum_{k\neq j}\sum_{\nu=2}^{p}\xi_j^{\nu}\xi_k^{\nu}S_k(t-1)\right) \tag{6.160}$$

であるが, (6.157) 式右辺 $E[\cdots]$ に現れる $\xi_j^{\mu}, \xi_{j^{'}}^{\mu}, S_j(t), S_{j^{'}}(t)$ の各項の相関を見たいのだから, $h_j(t)$ の中の ν についての和をの中で μ の項と, それ以外の項に分離すると

$$h_j(t) = \xi_j^1 m_{t-1} + \frac{1}{N}\sum_{k\neq j}\sum_{\nu\neq\mu}\xi_j^{\nu}\xi_k^{\nu}S_k(t-1) + \frac{1}{N}\sum_{k\neq j}\xi_j^{\mu}\xi_k^{\mu}S_k(t-1) \tag{6.161}$$

となる．さらに, この $h_j(t)$ の最後の項を $k = j^{'}$ とそれ以外に分離すれば

$$\begin{aligned} h_j(t) &= \xi_j^1 m_{t-1} + \frac{1}{N}\sum_{k\neq j}\sum_{\nu\neq\mu}\xi_j^{\nu}\xi_k^{\nu}S_k(t-1) + \frac{1}{N}\xi_j^{\mu}\xi_{j^{'}}^{\mu}S_{j^{'}}(t-1) + \frac{1}{N}\sum_{k\neq j,j^{'}}\xi_j^{\mu}\xi_k^{\mu}S_k(t-1) \\ &\equiv \xi_j^1 m_{t-1} + Q + \frac{1}{N}\xi_j^{\mu}\xi_{j^{'}}^{\mu}S_{j^{'}}(t-1) + \xi_j^{\mu}R \end{aligned} \tag{6.162}$$

と書ける．ここで

$$Q \equiv \frac{1}{N}\sum_{k\neq j}\sum_{\nu\neq\mu}\xi_j^\nu\xi_k^\nu S_k(t-1) \tag{6.163}$$

$$R \equiv \frac{1}{N}\sum_{k\neq j,j'}\xi_k^\mu S_k(t-1) \tag{6.164}$$

とおいた．

さて, Q, R は平均がゼロのガウス分布に従うと仮定すると, その分散は

$$Q: \quad \frac{1}{N^2}\sum_{k\neq j}\sum_{\nu\neq\mu}(\xi_j^\nu\xi_k^\nu S_k(t-1))^2 = \frac{1}{N^2}(N-1)(p-1) \simeq \alpha \equiv \sigma_{t-1}^2 \tag{6.165}$$

$$R: \quad \frac{1}{N^2}\sum_{k\neq j,j'}(\xi_k^\mu S_k(t-1))^2 = \frac{1}{N^2}\times(N-2) \simeq \frac{1}{p}\frac{p}{N} = \frac{\sigma_{t-1}^2}{p} \tag{6.166}$$

となる．

全く同様にして $S_{j'}(t)$ も v の表式の $E[\cdots]$ 内の別の因子に依存する部分と, 他の部分に分離すると

$$S_{j'}(t) = \mathrm{sgn}\left(\xi_{j'}^1 m_{t-1} + Q^{'} + \xi_{j'}^\mu R + \frac{1}{N}\xi_{j'}^\mu\xi_j^\mu S_j(t-1)\right) \tag{6.167}$$

$$Q^{'} \equiv \frac{1}{N}\sum_{k\neq j'}\sum_{\nu\neq\mu}\xi_{j'}^\nu\xi_k^\nu S_k(t-1) \tag{6.168}$$

となる．ここで $Q^{'}$ は平均ゼロ, 分散 σ_{t-1}^2 のガウス分布である．

次に, $\xi_j^\mu, \xi_{j'}^\mu$ の値に応じて期待値 E を求める．そこで

$$Y_{pq} \equiv E\left[\xi_j^\mu\xi_{j'}^\mu S_j(t)S_{j'}(t)\,\middle|\,\xi_j^\mu = p, \xi_{j'}^\mu = q\right] \tag{6.169}$$

で Y_{pq} を定義すると, v は

$$v = \frac{1}{4}(Y_{11} + Y_{1-1} + Y_{-11} + Y_{-1-1}) \tag{6.170}$$

と書けるので $Y_{11}, Y_{1-1}, Y_{-11}, Y_{-1-1}$ をそれぞれ評価すればよい．

また, 1 番目のパターン $\boldsymbol{\xi}^1$ を $\boldsymbol{\xi}^1 = (1, 1, \cdots, 1)$ としても一般性を失わないので, 以下このようにおくことにする．つまり, $\xi_{j'} = \xi_j^1 = 1$ である．

このとき Y_{11}, Y_{1-1} は

$$\begin{aligned} Y_{11} &= E[S_j(t)S_{j'}(t)] \\ &= E\left[\mathrm{sgn}\left(m_{t-1} + Q + R + \frac{1}{N}S_{j'}(t-1)\right)\mathrm{sgn}\left(m_{t-1} + Q^{'} + R + \frac{1}{N}S_j(t-1)\right)\right] \end{aligned} \tag{6.171}$$

$$\begin{aligned} Y_{1-1} &= -E[S_j(t)S_{j'}(t)] \\ &= -E\left[\mathrm{sgn}\left(m_{t-1} + Q + R - \frac{1}{N}S_{j'}(t-1)\right)\mathrm{sgn}\left(m_{t-1} + Q^{'} - R - \frac{1}{N}S_j(t-1)\right)\right] \end{aligned} \tag{6.172}$$

と書ける．ここで, 確率変数 $Q \pm R, Q^{'} \pm R$ は平均ゼロ, 分散 1 のガウス分布に従う確率変数 u, v を用いて次のように書き直せることに注意しょう．

$$Q \pm R = \sigma_{t-1}\left(u \pm \frac{1}{2p}v\right) \tag{6.173}$$

$$Q^{'} \pm R = \sigma_{t-1}\left(v \pm \frac{1}{2p}u\right) \tag{6.174}$$

[念のための証明]

上の左辺, 右辺での分散, 共分散が等しいことを示せばよい．
まず, 分散に関して (6.173) 式の左辺では

$$E[(Q \pm R)^2] = E[Q^2] \pm 2E[Q]E[R] + E[R^2] = \sigma_{t-1}^2 + \frac{\sigma_{t-1}^2}{p} \simeq \sigma_{t-1}^2 \tag{6.175}$$

一方, (6.173) 式の右辺では

$$E\left[\sigma_{t-1}^2\left(u \pm \frac{v}{2p}\right)^2\right] = \sigma_{t-1}^2 E[u^2] \pm \sigma_{t-1}^2 E[u]E\left[\frac{v}{2p}\right] \pm \frac{\sigma_{t-1}^2}{(2p)^2}E[v^2] \simeq \sigma_{t-1}^2 \tag{6.176}$$

となり, 両者は一致する．(6.174) 式に関しても全く同様にして両辺の分散が一致することが示せる．
次に共分散に関して (6.173)(6.174) 両式の左辺どうしの積の期待値は

$$E[(Q \pm R)(Q^{'} \pm R)] = \pm E[R^2] = \pm\frac{\sigma_{t-1}^2}{p} \tag{6.177}$$

となる．一方 (6.173)(6.174) 両式の右辺どうしの積の期待値は

$$E\left[\sigma_{t-1}^2\left(u \pm \frac{v}{2p}\right)\left(v \pm \frac{u}{2p}\right)\right] = \pm\frac{\sigma_{t-1}^2}{2p}\left(E[u^2] + E[v^2]\right) = \pm\frac{\sigma_{t-1}^2}{p} \tag{6.178}$$

となり共分散も一致する．

従って, 以下では使いやすい u, v を用いて議論を進めていく．まず, この変換の下で Y_{11}, Y_{1-1} は

$$\begin{aligned} Y_{11} &= E\left[\mathrm{sgn}\left(m_{t-1} + \sigma_{t-1}u + \frac{\sigma_{t-1}}{2p}v + \frac{S_{j'}(t-1)}{N}\right)\mathrm{sgn}\left(m_{t-1} + \sigma_{t-1}v + \frac{\sigma_{t-1}}{2p}u + \frac{S_j(t-1)}{N}\right)\right] \\ &= E\left[\mathrm{sgn}\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}} + u + \frac{v}{2p} + \frac{S_{j'}(t)}{N\sigma_{t-1}}\right)\mathrm{sgn}\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}} + v + \frac{u}{2p} + \frac{S_j(t-1)}{N\sigma_{t-1}}\right)\right] \\ &= E\left[\mathrm{sgn}(\bar{m} + u + \tilde{v} + \tilde{x}^{'})\mathrm{sgn}(\bar{m} + v + \tilde{u} + \tilde{x})\right] \end{aligned} \tag{6.179}$$

となる．ここで

$$\bar{m} \equiv \frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}} \tag{6.180}$$

$$\tilde{v} \equiv \frac{v}{2p} \tag{6.181}$$

$$\tilde{u} \equiv \frac{u}{2p} \tag{6.182}$$

$$\tilde{x}^{'} \equiv \frac{S_{j'}(t-1)}{N\sigma_{t-1}} \tag{6.183}$$

$$\tilde{x} \equiv \frac{S_j(t-1)}{N\sigma_{t-1}} \tag{6.184}$$

で新しい変数を導入した. Y_{1-1} に関してもこれらの変数で書き直せば $Y_{11}+Y_{1-1}$ は

$$\begin{aligned}
Y_{11}+Y_{1-1} &= E[\mathrm{sgn}\{(\bar{m}+u+\tilde{v}+\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v+\tilde{u}+\tilde{x})\}]-E[\mathrm{sgn}\{(\bar{m}+u-\tilde{v}-\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v+\tilde{u}-\tilde{x})\}] \\
&= \mathrm{Prob}[(\bar{m}+u+\tilde{v}+\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v+\tilde{u}+\tilde{x})>0] \\
&- \mathrm{Prob}[(\bar{m}+u+\tilde{v}+\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v+\tilde{u}+\tilde{x})<0] \\
&- \mathrm{Prob}[(\bar{m}+u-\tilde{v}-\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v-\tilde{u}-\tilde{x})>0] \\
&+ \mathrm{Prob}[(\bar{m}+u-\tilde{v}-\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v-\tilde{u}-\tilde{x})<0] \\
&= 2\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u+\tilde{v}+\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v+\tilde{u}+\tilde{x})] \\
&- 2\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u-\tilde{v}-\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v-\tilde{u}-\tilde{x})] \qquad (6.185)
\end{aligned}$$

となる. ここで $\mathrm{Prob}[A>0]$ は確率変数 A が $A>0$ を満たす確率を表す. また, 最後の式変形では

$$\mathrm{Prob}[A>0]+\mathrm{Prob}[A<0] = 1 \qquad (6.186)$$

を用いた.

さて, $p=N\alpha$ であったので p は N のオーダーであり, 従って $\tilde{u},\tilde{v},\tilde{x},\tilde{x}^{'}$ は $\bar{m},u,v$ に比べて非常に小さい. よって, これら小さな量の 2 次以上の積 ($\tilde{x}\tilde{v}$ 等) は無視できる. このとき $Y_{11}+Y_{1-1}$ はさらに簡単な形にすることができる. つまり

$$\begin{aligned}
Y_{11}+Y_{1-1} &= 2\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u+\tilde{v}+\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v)>0]-2\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u-\tilde{v}-\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v)>0] \\
&+ 2\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u)(\bar{m}+v+\tilde{u}+\tilde{x})>0]-2\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u)(\bar{m}+v-\tilde{u}-\tilde{x})>0] \\
&\equiv F_1+F_2 \qquad (6.187)
\end{aligned}$$

となる. ここで

$$\frac{F_1}{2} \equiv \mathrm{Prob}[(\bar{m}+u+\tilde{v}+\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v)>0]-\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u-\tilde{v}-\tilde{x}^{'})(\bar{m}+v)>0] \qquad (6.188)$$

$$\frac{F_2}{2} \equiv \mathrm{Prob}[(\bar{m}+u)(\bar{m}+v+\tilde{u}+\tilde{x})>0]-\mathrm{Prob}[(\bar{m}+u)(\bar{m}+v-\tilde{u}-\tilde{x})>0] \qquad (6.189)$$

で F_1,F_2 を定義した.

上の F_1 を評価しよう.

$$f(v) \equiv -\tilde{v}-\bar{m}-\tilde{x}^{'} \qquad (6.190)$$

$$g(v) \equiv \tilde{v}-\bar{m}+\tilde{x}^{'} \qquad (6.191)$$

とおき, u,v の分布が

$$P(u)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{u^2}{2}}, \qquad P(v)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{v^2}{2}} \qquad (6.192)$$

であったことを思い出すと

$$\begin{aligned}
\frac{F_1}{2} &= \int_{-\bar{m}}^{\infty}P(v)dv\int_{f(v)}^{\infty}P(u)du+\int_{-\infty}^{-\bar{m}}P(v)dv\int_{-\infty}^{f(v)}P(u)du \\
&- \int_{-\bar{m}}^{\infty}P(v)dv\int_{g(v)}^{\infty}P(u)du-\int_{-\infty}^{-\bar{m}}P(v)dv\int_{-\infty}^{g(v)}P(u)du \\
&= \int_{-\infty}^{-\bar{m}}P(v)dv\int_{g(v)}^{f(v)}P(u)du+\int_{-\bar{m}}^{\infty}P(v)dv\int_{f(v)}^{g(v)}P(u)du \qquad (6.193)
\end{aligned}$$

となる．ここで

$$f(v)-g(v) \quad = \quad -2(\tilde{v}+\tilde{x}) \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \tag{6.194}$$

であるから, 積分区間 $[f(v),g(v)],[g(v),f(v)]$ の積分を次のように書き直すことができる．

$$\begin{aligned}\int_{g(v)}^{f(v)} P(u)du &\simeq (f-g)P\left(\frac{f+g}{2}\right)\\ &= (f-g)P(-\bar{m})\\ &= (f-g)P(\bar{m})\end{aligned} \tag{6.195}$$

$$\int_{f(v)}^{g(v)} P(u)du \quad \simeq \quad (g-f)P(\bar{m}) \tag{6.196}$$

従って $F_1/2$ は

$$\begin{aligned}\frac{F_1}{2} &= P(\bar{m})\left\{\int_{-\infty}^{-\bar{m}}(f-g)P(v)dv+\int_{-\bar{m}}^{\infty}(g-f)P(v)dv\right\}\\ &= P(\bar{m})\left\{\int_{-\infty}^{-\bar{m}}\left(-\frac{v}{p}-\frac{2S_{j'}(t-1)}{N\sigma_{t-1}}\right)P(v)dv\right.\\ &+ \left.\int_{-\bar{m}}^{\infty}\left(\frac{v}{p}+\frac{2S_{j'}(t-1)}{N\sigma_{t-1}}\right)P(v)dv\right\}\\ &= \frac{P(\bar{m})}{N}\left\{\frac{1}{\alpha}\int_{-\bar{m}}^{\infty}vP(v)dv-\frac{1}{\alpha}\int_{\infty}^{\bar{m}}vP(v)dv\right.\\ &+ \left.\frac{2S_{j'}(t-1)}{\sigma_{t-1}}\left[\int_{-\bar{m}}^{\infty}P(v)dv+\int_{\bar{m}}^{\infty}P(v)dv\right]\right\}\\ &= \frac{P(\bar{m})}{N}\left[\frac{2}{\alpha}P(\bar{m})+\frac{2S_{j'}(t-1)}{\sigma_{t-1}}\int_{-\bar{m}}^{\bar{m}}P(v)dv\right]\\ &= \frac{P(\bar{m})}{N}\left[\frac{2}{\alpha}P(\bar{m})+\frac{2S_{j'}(t-1)}{\sigma_{t-1}}\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{m}}{\sqrt{2}}\right)\right]\end{aligned} \tag{6.197}$$

と計算される．

全く同様の手続きにより, $F_2/2$ も計算することができて

$$\frac{F_2}{2} \quad = \quad \frac{P(\bar{m})}{N}\left[\frac{2}{\alpha}P(\bar{m})+\frac{2S_j(t-1)}{\sigma_{t-1}}\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{m}}{\sqrt{2}}\right)\right] \tag{6.198}$$

となるので, $Y_{11}+Y_{1-1}$ は

$$\begin{aligned}Y_{11}+Y_{1-1} &= F_1+F_2\\ &= \frac{4}{N}\left[\frac{2}{\alpha}P(\bar{m})^2+\frac{1}{\sigma_{t-1}}(S_j(t-1)+S_{j'}(t-1))P(\bar{m})\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{m}}{\sqrt{2}}\right)\right]\\ &= \frac{4}{N}\left[\frac{2}{\alpha}P(\bar{m})^2+\frac{2m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}P(\bar{m})\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{m}}{\sqrt{2}}\right)\right]\end{aligned} \tag{6.199}$$

となる．上式の最後の式変形では

$$E[S_j(t-1)]=E[S_{j'}(t-1)]=m_{t-1} \tag{6.200}$$

を用いた.

上の $Y_{11}+Y_{1-1}$ を求めた方法は, そのまま $Y_{-11}+Y_{-1-1}$ の計算にも適用できて, ほとんど同じ手続きをふむことにより

$$Y_{-11}+Y_{-1-1} = Y_{11}+Y_{1-1} \tag{6.201}$$

を得る. 従って最終的に v は

$$\begin{aligned} v &= \frac{1}{4}(Y_{11}+Y_{1-1}+Y_{-11}+Y_{-1-1}) \\ &= \frac{1}{N}\left[\frac{4}{\alpha}P(\bar{m})^2+\frac{4m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}P(\bar{m})\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{m}}{\sqrt{2}}\right)\right] \\ &= \frac{1}{N}\left[\frac{4}{\alpha}P(\bar{m})^2+\frac{4m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}P(\bar{m})m_t\right] \end{aligned} \tag{6.202}$$

となる. ここで, 最後の変形では (6.151) より

$$\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{m}}{\sqrt{2}}\right)=\mathrm{erf}\left(\frac{m_{t-1}}{\sqrt{2}\sigma_{t-1}}\right)=m_t \tag{6.203}$$

であることを用いている.

(B) $v^{'}$ の評価

次に $v^{'}$ の評価に移るが, これは今の仮定のもとでは

$$v^{'} = E[\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t)\xi_i^{\mu^{'}}\xi_j^{\mu^{'}}S_{j'}(t)]=E[\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t)]E[\xi_i^{\mu^{'}}\xi_j^{\mu^{'}}S_{j'}(t)] \tag{6.204}$$

となり, また

$$E[N_i^t] = E\left[\frac{1}{N}\sum_{j\neq i}\sum_{\mu=2}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t)\right]=\frac{1}{N}(N-1)(p-1)E[\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t)]=pE[\xi_i^\mu\xi_j^\mu S_j(t)] \tag{6.205}$$

であるから

$$\{E[N_i^t]\}^2 = p^2v^{'}=N\alpha^2v^{'} \tag{6.206}$$

が成り立つ. よって, 最終的に (6.157) より

$$\begin{aligned} \sigma_t^2 &= E[(N_i^t)^2]-\{E[N_i^t]\}^2 \\ &= \alpha+\frac{1}{N^2}\times pN^2\frac{1}{N}\left[\frac{4}{\alpha}P(\bar{m})^2+4\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}P(\bar{m})m_t\right] \\ &+ \frac{1}{N^2}\times p^2N^2v^{'}-N^2\alpha^2v^{'} \\ &= \alpha+4P\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}\right)^2+4\alpha\left(\frac{m_{t-1}m_t}{\sigma_{t-1}}\right)P\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}\right) \end{aligned} \tag{6.207}$$

が得られる.

以上まとめると, m_t, σ_t の時間発展は

$$m_t = \mathrm{erf}\left(\frac{m_{t-1}}{\sqrt{2}\sigma_{t-1}}\right) \tag{6.208}$$

$$\sigma_t^2 = \alpha + 4P\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}\right)^2 + 4\alpha\left(\frac{m_{t-1}m_t}{\sigma_{t-1}}\right)P\left(\frac{m_{t-1}}{\sigma_{t-1}}\right) \tag{6.209}$$

となる. ただし,

$$P(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \tag{6.210}$$

であり, 誤差関数を

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x \mathrm{e}^{-z^2}dz \tag{6.211}$$

で定義している.

6.11 学習の結果としての Hebb 則 : もう一つの時間スケール

我々はこの節を通じて神経素子間の結合が Hebb 則で与えれ, 具体的には

$$w_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p}\xi_i^\mu\xi_j^\mu \tag{6.212}$$

で任意の素子間の結合を決めたのであった. しかし, 「神経回路網はどのようにして上記のような結合を獲得したのであろうか?」という疑問が残る.

実は, この Hebb 則は「記憶」と並ぶ脳の重要な高次機能である**学習**により得られたのであった. この「学習」においても, 回路網は「動的」にその結合を変化させる. μ でその更新ステップを表すとすれば, 脳は任意の素子間の結合を

$$w_{ij}(\mu+1) = w_{ij}(\mu) + \frac{1}{N}\xi_i^\mu\xi_j^\mu \tag{6.213}$$

の規則によって更新 (学習) させる. すると (6.212) 式はこの更新式の p ステップ後の結果であるとして理解できる.

ところで, 脳神経系では各神経素子 $\boldsymbol{S}$ の動きが始まる前にその学習 (6.213) を終えている必要がある. つまり, [学習フェーズ] と [想起フェーズ] は別個のものであり, 同じ時間スケール内では起こらないと考える. 我々が物事を記憶するというプロセスとそれを呼び起こすというプロセスを同時に行うことは実際の日常生活を考えても無いであろう. **物事を記憶から呼び起こすためには, それに先んじて記憶するというプロセスが無ければならない**. 従って, 計算機シミュレーションをする際にも予め結合 w_{ij} を与えて神経素子 $\boldsymbol{S}$ の動きを計算機上でシミュレートしたわけである (w_{ij} が (6.212) に確定した後の w_{ij} の緩和時間は無限大である. 従って, 回路網の状態ベクトル $\boldsymbol{S}$ は「速い変数」, 結合ベクトルは「遅い変数 (事実上, 時間変化無し)」とみなすことができる).

課題 12：神経素子の状態更新 $(t \geq 1)$：

$$S_i(t+1) = \mathrm{sgn}\left(\sum_{j \neq i} w_{ij} S_j(t)\right)$$

と結合の学習：

$$\begin{aligned} w_{ij}(t+1) &= w_{ij}(t) + \frac{1}{N}\sum_{\nu=1}^{q} \xi_i^{(t+1)\nu}\xi_j^{(t+1)\nu} \\ w_{ij}(0) &= 0 \end{aligned}$$

($\boldsymbol{\xi}^1$ をターゲットパターンとする) を同時に (同じ時間スケール内で) 行った場合の想起過程を計算機上でシミュレートせよ．このとき, 既に行った w_{ij} を初めに固定した場合のような連想記憶が実現できるであろうか？

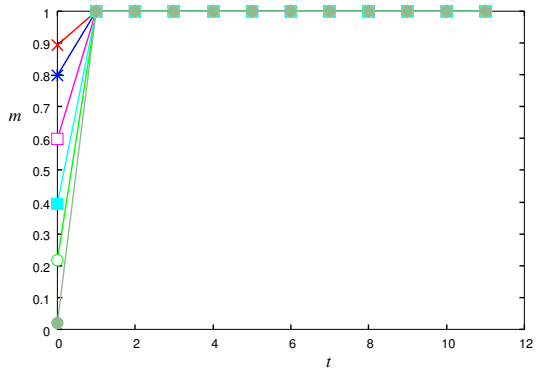
[考察へのヒント]
上記の w_{ij} の更新が $t = T$ ステップ経過した後の結合は直ちに

$$w_{ij}(T) = \frac{1}{N}\sum_{t=1}^{T}\sum_{\nu=1}^{p} \xi_i^{t\nu}\xi_j^{t\nu} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{Tq} \xi_i^{\mu}\xi_j^{\mu}$$

となる．ここで q の選び方により, 次のように記憶のスピードが異なってくる．

- $q = 1$ の場合には各ステップで 1 個ずつのパターンを記憶して行く．
- $q = \alpha N$ の場合には各ステップで $\mathcal{O}(N)$ 個ずつのパターンを記憶して行く．

$q = 1$ の場合にはターゲットパターンを初めに記憶し, それ以降はステップごとに 1 個ずつのパターンを記憶に追加して行く．



前に見た $\mathcal{O}(1)$ のパターンの埋め込みの結果からわかるように, 1 ステップ後には既にターゲットパターンのアトラクタに落ち込んでいる (ターゲットパターンを想起している) はずであるから (図参照), その後に追加して行くパターンがターゲットパターンを不安定化しない限り問題は生じないことが予想される (特に, $\mathcal{O}(N)$ ステップ経過後の安定性を調べて見ると良い)．一方, $q = \alpha N$ の場合には, α の大きさに依存し, これとターゲットパターンへ落ち込むステップ数との兼ね合いから想起の可能性が決まることとが予想される．

6.12 例題からの学習と汎化

ここでは神経回路網の**例題からの学習** (learning from examples) について, その導入と「汎化能力」に関し, 簡単な例題をもとに見ていくことにする. この「学習」を「外界からの信号 (環境) に応じて自らの構造を変化させていくこと」と定義するのであれば, 神経回路網の場合には素子間の結合を変えること (調節すること) がここでの学習に相当する. そのときの学習の仕方として大きく次の 2 種類 :

- **教師あり学習** (supervised learning)
- **教師なし学習** (un-supervised learning)

が考えられる. 前者は回路網に与える入力信号と, それに対する望ましい出力が陽に与えられる場合の学習であり, この入出力関係のことを**例題** (examples, **あるいは** training sets) と呼ぶ. 一方, そのような例題が陽に与えられない学習を考えることもできる. このような学習を**教師なし学習**と呼んでいる. ここでは主に前者の教師あり学習を考えることにする.

また, 与えられる例題の用い方として

- **バッチ学習** (Batch learning)
- **オンライン学習** (On-line learninig)

の 2 つの様式が考えられる. 前者は学習機械がいくつかの例題をまとめて受け取り, その例題全てに正解を与えるように自分の結合を変えていくような学習様式であり, 一方, 後者は学習機械に一つずつ例題が与えられ, その例題に対する結合変化を終えた段階でその例題は破棄され, 新たな例題が一つ与えられる, というように逐次的に学習が進んで行く.

計算時間 (処理時間) の観点から言って, ロボット制御などに神経回路網の学習を適用する際には, いくつかの例題をかき集めてその学習機械に与え, その全てに正解するように結合を調節することは, リアルタイム処理が重要となるこの種の課題には向いておらず, オンライン型の学習を用いた方が好ましい. しかし, 一般的にオンライン学習は後に見る「汎化誤差」という指標で評価される精度がバッチ学習に比べて落ちる場合が多く, 学習則の工夫等が必要となってくる.

6.12.1 教師機械の導入

ここでは簡単のため, 入力層と出力層のみからなる**単純パーセプトロン** (simple perceptron) を考える. また, 学習の様式として教師機械[27] 及び生徒機械を用意し, 生徒機械が教師機械から学ぶ, 教師あり学習を考えることにする. このように, 教師機械であるパーセプトロンからの入出力 $(\sigma_T, \boldsymbol{\xi})$ を例題とするのであれば, 生徒機械が受取る例題は全て線形分離可能なものであることは明らかである. なお, 全ての可能な入出力の数 2^N 個の中のいくつがパーセプトロンの実現できる入出力なのかが気になるところであるが, グラフ理論, 組み合わせ理論, 統計力学的手法など様々なアプローチにより, およそ $2N$ 個であることがわかっている[28].

さて, 入力数が N の単純パーセプトロンはその結合ベクトルのみで特徴付けられるのであるから, 教師機械の結合ベクトルを $\boldsymbol{T} = (T_1, T_2, \cdots, T_N)$ とし, 生徒機械の結合ベクトルを $\boldsymbol{J} =$

[27] 「機械」という言葉を頻繁に用いるが, この講義では全て単純パーセプトロンを指していると思ってよい.

[28] このことから, 教師機械の出力からではなく, ランダムに線形分離可能なパターンを選び出すことがいかに難しいかがわかるであろう. そのようなパターンが選び出される確率は $2N/2^N$ であり, 入力次元が大きくなればこの確率は限りなくゼロである.

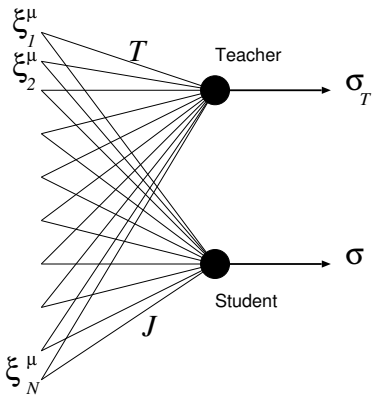


図 70: ここで扱う「教師あり学習」. 教師, 生徒共に単純パーセプトロンであり, 入力 ξ^μ に対し, $\sigma_T = \sigma$ となるように生徒機械は結合 $\boldsymbol{J}$ を調節して行く.

$(J_1, J_2, \cdots, J_N)$ と置こう. このとき教師あり学習の枠組みでは, 生徒機械は教師の提示する P 個の入出力の組 : $\{\boldsymbol{\xi}^\mu, \sigma_T^\mu\}, \quad \mu = 1, \cdots, P$ から自分の結合ベクトルを変更して行く (学習して行く). ここで $\boldsymbol{\xi}^\mu$ 及び σ_T^μ は $\mathrm{sgn}(\cdots)$ を符号関数として

$$\sigma_T^\mu \quad = \quad \mathrm{sgn}\left(\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{\xi}^\mu\right) = \left(\sum_{i=1}^{N} T_i \xi_i^\mu\right) \tag{6.214}$$

を満たさなければならない.

このとき生徒機械の行う学習は, 例題 $\{\boldsymbol{\xi}^\mu, \sigma_T^\mu\}$ から結合 $\boldsymbol{J}$ を決めることであり, P 個の例題全てに対して正しい答えを出す結合 $\boldsymbol{J}$ を学習により獲得できたとすれば

$$\sigma^\mu \quad = \quad \mathrm{sgn}\left(\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{\xi}^\mu\right) = \left(\sum_{i=1}^{N} J_i \xi_i^\mu\right) \tag{6.215}$$

に対して

$$\sigma^\mu \quad = \quad \sigma_T^\mu \quad \forall \ (\mu \in 1, \cdots, P) \tag{6.216}$$

が成立する (図 70 参照).

6.12.2 学習の 2 つの指標 — 訓練誤差と汎化誤差 —

ここまでで簡単にではあるが, 教師あり学習の問題設定を行った. 次にすべきなのは, 学習がどの程度巧く行われたかに関する指標を決めることである. この指標の一つは**訓練誤差 (training error)** と呼ばれるものであり

$$\epsilon_t(\boldsymbol{J}; \{\boldsymbol{\xi}^\mu\}, \boldsymbol{T}) \quad = \quad \frac{1}{P} \sum_{\mu=1}^{P} d(\boldsymbol{J}; \{\boldsymbol{\xi}^\mu\}, \boldsymbol{T}) \tag{6.217}$$

$$d(\boldsymbol{J}; \{\boldsymbol{S}\}, \boldsymbol{T}) \quad = \quad \Theta(-\sigma_T \sigma) \tag{6.218}$$

で与えられる. ここで $\Theta(\cdots)$ は階段関数である. これは見ての通り, 与えられた例題に対する誤り率である.

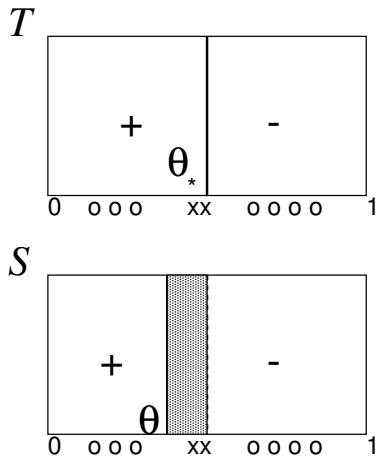


図 71: 簡単な 1 次元閾値入出力機の学習. 教師機械はパラメータ θ_* を有し, 入力 x が $0 \leq x < \theta_*$ の場合には $+1$ を, $\theta_* \leq x \leq 1$ の場合には -1 を返すとする. このとき, この入出力関係から生徒機械は可変なパラメータ θ を調節してゆくのだが, これがこの機械の「学習」である. 図のような θ を生徒機械が学習により獲得したとすると, 丸印を付けた例題に対しては確かに教師機械と同じ出力を返してうまくいっているように見えるが, しかし, バツ印をつけた問題に対しては間違った答えを返す (網模様部分に落ちた入力に対しては全て間違う). 有限個の例題の学習に成功しているからといって, それが必ずしも信頼のおける機械であるとは言えないことの一例である.

しかし, この訓練誤差のみからは生徒機械がどの程度巧く教師機械を「模倣できた」かは解らない. 特に例題数が少ない場合には, **その少数の例題に対してのみ正しい入出力を返す機械が出来上がっている可能性がある**からである (図 71 参照.). そこで有限個の例題に対して結合 $\boldsymbol{J}$ を獲得した回路網に対し, その**汎化誤差 (generalization error)** と呼ばれる量 :

$$\epsilon(\boldsymbol{J};\boldsymbol{T}) \quad = \quad \sum_{\{\boldsymbol{S}\}} P_S(\boldsymbol{S}) d(\boldsymbol{J};\{\boldsymbol{S}\},\boldsymbol{T}) \tag{6.219}$$

を導入する. ここで, 入力ベクトルに関する分布 $P_S(\boldsymbol{S})$ で d の平均をとっているのは, **提示された例題を含む全ての入出力に対する誤差**を学習の指標とするためである[29].

訓練誤差 ϵ_t と汎化誤差 ϵ の定義より, 訓練誤差は提示された有限個の例題 $\boldsymbol{\xi}^\mu$ から求められた汎化誤差の「推定値」とみなすことができる. また, この両者の差は例題数の増加とともに (確率的に) 小さくなることが予想される. つまり, ある正の数 δ に対して, 次のように定義される確率 $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P} \quad = \quad \mathrm{Prob}(|\epsilon_t - \epsilon| > \delta) \tag{6.220}$$

は例題数 P の増加とともに減少して行くことになる.

[29] 真の意味で平均的なパフォーマンスを求めるためには結合 $\boldsymbol{J}$ 及び $\boldsymbol{T}$ に関する分布 $P_J(\boldsymbol{J}), P_T(\boldsymbol{T})$ に関する平均操作も行うべきであることを注意しておく. 例えばこれらの結合が一様分布から生成されたものであれば $P_S(\boldsymbol{J}) = \delta(\boldsymbol{J}^2 - N), P_T(\boldsymbol{T}) = \delta(\boldsymbol{T}^2 - N)$ と置くことになる.

課題 13：
図 71 の教師機械, 生徒機械の t 番目の入力 $x(t)$ に対する出力 $\sigma_T(t), \sigma_S(t)$ は式で書けば

$$\sigma_T(t) = \mathrm{sgn}[\theta_* - x(t)] \tag{6.221}$$

$$\sigma_S(t) = \mathrm{sgn}[\theta(t) - x(t)] \tag{6.222}$$

となる. そこで, 生徒機械の持つパラメータ $\theta(t)$ の学習則を

$$\theta(t+1) = \theta(t) - \lambda\,\sigma_T(t)\Theta[-\sigma_T(t))\sigma_S(t)] \tag{6.223}$$

で与えることにしょう. ここに $\Theta(\cdots)$ は階段関数である. これは生徒機械/教師機械の出力値が異なる場合のみ θ の状態更新が行われ, 更新される場合には教師機械の出力とは逆符号で λ だけ θ が調整されることを意味する.
そこで, 各ステップ t で入力 $x(t)$ を $[0,1]$ の一様乱数として選び, 教師/生徒両機械に与えることにより, 更新式 (6.223) を計算機上でシミュレートし, $\theta(t)$ がどのような確率過程に従うのかを $\theta(t)$ をプロットすることにより確かめよ. また, 学習の各ステップでエラー：$E(t) = (\theta_* - \theta(t))^2$ を測定し, この振る舞いも同様にプロットせよ. ここで, 学習係数 λ は小さな値で一定値に選んでも, λ 自体にもステップ依存性を持たせ, $\lambda = \lambda_0\,\mathrm{e}^{-at}$ のような「減衰項」として扱っても良い. この選び方は各自の考察に任せるが, 少なくとも

(a) $\lambda =$ 比較的小さな一定値

(b) $\lambda = \lambda_0\,\mathrm{e}^{-at}$

の 2 通りは必ず確かめてみること.
なお, 正解 θ_*, 及び, 初期値 $\theta(0)$ は $[0,1]$ の間で各自が適当に設定せよ.

6.13 統計力学による性能評価

ここまでで, 教師あり学習の枠組みで学習と汎化を定義した. ある学習則の下に出来上がった学習機械が「どの程度信頼のおけるものであるかどうか」の評価指標は汎化誤差により与えられる. 従って汎化誤差の評価, つまり, 例題数の増加と共に汎化誤差がどのように振舞うか — **学習曲線 (learning curve)** — を求めることは, 学習理論におけるメインテーマの一つである[30]. そこで, ここではこの学習曲線を統計力学的手法に基づいて評価する手続きを紹介することにしょう. ただし, 以下の議論では入力次元 (結合ベクトルの次元) N と例題数 P が両者とも無限大に取れる場合を扱い, 両者の比を α とすると $P, N \to \infty$ で

$$\alpha = \frac{P}{N} \simeq \mathcal{O}(1) \tag{6.224}$$

であることを仮定して議論を進める.

[30] 「学習曲線」とはもともと心理学から来た用語らしい.

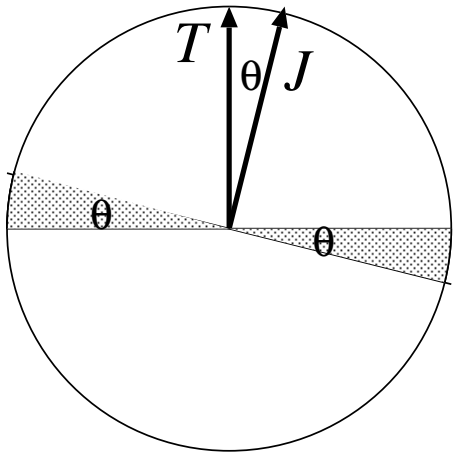


図 72: 解空間. 斜線部に落ちた例題に関しては誤った答えを出す.

6.13.1 解空間とギブス学習

簡単のため生徒機械, 教師機械の結合ベクトルは次の規格化条件：

$$\boldsymbol{J}^2 = \sum_{i=1}^{N} J_i^2 = N \tag{6.225}$$

$$\boldsymbol{T}^2 = \sum_{i=1}^{N} T_i^2 = N \tag{6.226}$$

を満たしているものとする. これは言い方を変えれば, $\boldsymbol{J}, \boldsymbol{T}$ がデルタ関数 $\delta(\cdots)$ を用いて分布：

$$P_J(\boldsymbol{J}) = \delta\left(\sum_{i=1}^{N} J_i^2 - N\right) \tag{6.227}$$

$$P_T(\boldsymbol{T}) = \delta\left(\sum_{i=1}^{N} T_i^2 - N\right) \tag{6.228}$$

から生成されたということである. この場合, N 次元球面上に $\boldsymbol{J}, \boldsymbol{T}$ があるということだから, 汎化誤差は球の中心を通り $\boldsymbol{J}$ に垂直な面と, 球の中心を通り $\boldsymbol{T}$ に垂直な面に囲まれる部分の全球面に対する比で与えられる[31]. 従って, $\boldsymbol{J}$ と $\boldsymbol{T}$ のなす角度を θ とすれば

$$\epsilon = \frac{\theta}{\pi} \tag{6.229}$$

となる. これはまた, 結合ベクトル $\boldsymbol{J}, \boldsymbol{T}$ の内積を入力数 N で割ったものを R とすると

$$R = \frac{1}{N}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} J_i T_i = \frac{1}{N}|\boldsymbol{J}||\boldsymbol{T}| = \frac{1}{N}\sqrt{N}\sqrt{N}\cos\theta = \cos\theta \tag{6.230}$$

と書けるから, 汎化誤差はこの R を用いて

$$\epsilon = \frac{1}{\pi}\mathrm{arc}\cos R = \frac{1}{\pi}\cos^{-1}(R) \tag{6.231}$$

[31] 分かりづらい場合には 2 次元の場合を図示してみること. 図 72 のようになります.

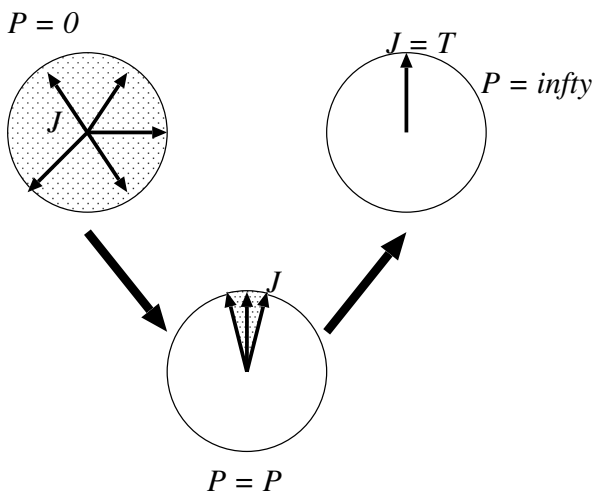


図 73: 解空間は例題数の増加とともに収縮して行く.

と書き直すこともできる.

ところで, ある有限個の例題の答えを正確に出力することのできる $\boldsymbol{J}$ は (6.225) 式を満たす空間の中のある有限部分空間 (**version space**, あるいは**解空間**と呼ばれる) を作るが, この中で, どの $\boldsymbol{J}$ を選ぶかによって異なる汎化能力を持つ機械が出来上がる. この解空間において一つの $\boldsymbol{J}$ をランダムに選ぶ戦略 (学習則) を**ギブス学習 (Gibbs learning)** と呼ぶ. 次の節ではギブス学習の学習曲線を具体的に求めてみることにしょう.

6.13.2 学習曲線解析評価の実際

前節の最後で, ある例題に対して正解を与える $\boldsymbol{J}$ は (6.225) 式を満たす全空間の中で, 「解空間」と呼ばれる部分空間を形作ることを見た. 当然のことながら, この解空間の「体積」は例題数の増加とともに減少して行く (図 73 参照) [32]. そこで, $\Omega_0(\epsilon)$ を $\boldsymbol{J}, \boldsymbol{T}$ の内積が $R = \cos(\pi\epsilon)$ のときの $\boldsymbol{J}$ 空間の体積とすれば, 生徒機械と教師機械が同じ出力をする確率は ϵ の定義から $1-\epsilon$ であるわけだから, P 個の例題が独立に与えられたとすれば, その時点での解空間の体積 $\Omega_P(\epsilon)$ は

$$\Omega_P(\epsilon) \quad = \quad \Omega_{P-1}(\epsilon)(1-\epsilon) = \Omega_{P-2}(\epsilon)(1-\epsilon)^2 = \cdots = \Omega_0(\epsilon)(1-\epsilon)^P \tag{6.232}$$

で与えられる. 実際, $0 < \epsilon < 1$ であるから $1-\epsilon < 1$ であり, $\Omega_P(\epsilon)$ は例題数の増加とともに減少して行くことに注意しょう.

さて, $\Omega_P(\epsilon)$ を $N, P \to \infty$ の極限で評価することになる. まず, 定義より $\Omega_0(\epsilon)$ は

$$\Omega_0(\epsilon) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{J}\delta(\boldsymbol{J}^2 - N)\delta\left(\frac{1}{N}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}) - \cos(\pi\epsilon)\right) \tag{6.233}$$

と書ける. ただし, $d\boldsymbol{J} \equiv \prod_j dJ_j$ と定義した. この式の中のデルタ関数をフーリエ変換で書き直

[32] 極端な場合として, 無限個の例題に対し正解を与えることのできる $\boldsymbol{J}$ は解空間の中で $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{T}$ となる 1 点にまで収縮していることを確認してみるとよい.

すと

$$\delta(\boldsymbol{J}^2 - N) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{J}}{2\pi} \mathrm{e}^{i\hat{J}(\sum_j J_j^2 - N)} \tag{6.234}$$

$$\delta\left(\frac{1}{N}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}) - \cos(\pi\epsilon)\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{T}}{2\pi/N} \mathrm{e}^{i\hat{T}(\sum_j J_j T_j - N\cos\pi\epsilon)} \tag{6.235}$$

となるから, (6.233) 式は

$$\begin{aligned}
\Omega_0(\epsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-i\infty}^{i\infty}\int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\boldsymbol{J}d\hat{J}d\hat{T}}{(2\pi)^2/N} \exp\left(-\hat{J}\sum_j (J_j)^2 - \hat{T}\sum_j J_j T_j + N\hat{J} + N\hat{T}\cos\pi\epsilon\right) \\
&= \int_{-i\infty}^{i\infty}\int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\hat{J}d\hat{T}}{(2\pi i)^2/N} \mathrm{e}^{N\{\hat{J}+\hat{T}\cos(\pi\epsilon)\}} \prod_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty} dJ_j \exp\left[-\hat{J}(J_j)^2 + \hat{T}T_jJ_j\right] \\
&= \int_{-i\infty}^{i\infty}\int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\hat{J}d\hat{T}}{(2\pi i)^2/N} \mathrm{e}^{N\{\hat{J}+\hat{T}\cos(\pi\epsilon)\}} \exp\left[\frac{\hat{T}^2}{4\hat{J}^2}\sum_{j=1}^{N}(T_j)^2\right] \prod_{j=1}^{N}\sqrt{\frac{\pi}{\hat{J}}}
\end{aligned} \tag{6.236}$$

と書き換えることができる. ただし, $\hat{J} \to i\hat{J}, \hat{T} \to i\hat{T}$ なる変換を施し, この中の J_j に関するガウス積分を各 j 毎に独立に実行した. すると, 最終的に $\Omega_0(\epsilon)$ は

$$\Omega_0(\epsilon) = \int_{-i\infty}^{i\infty}\int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\hat{J}d\hat{T}}{(2\pi)^2} \exp\left(N\Phi(\hat{J},\hat{T})\right) \tag{6.237}$$

$$\Phi(\hat{J},\hat{T}) = \frac{1}{2}\log(\pi/\hat{J}) + \frac{\hat{T}^2}{4\hat{J}} + \hat{J} + \hat{T}\cos\pi\epsilon \tag{6.238}$$

のように書ける. 残る $\hat{J},\hat{T}$ に関する積分はそのままでは実行できないが, P, N が無限大の極限において, これらの積分は既に説明してある鞍点法で評価できる. つまり

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\hat{J}} = 0, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial\hat{T}} = 0 \tag{6.239}$$

を満たす $\hat{J},\hat{T}$ を $\hat{J}_*, \hat{T}_*$ とすれば積分はこの点 $(\hat{J}_*, \hat{T}_*)$ での被積分関数の値

$$\Omega_0(\epsilon) = \exp\left(N\Phi(\hat{J}_*, \hat{T}_*)\right) \tag{6.240}$$

で評価できる. 実際に (6.239) 式を用いて鞍点を求めてみると

$$\hat{J}_* = \frac{1}{2}\frac{1}{1-\cos^2\pi\epsilon} \tag{6.241}$$

$$\hat{T}_* = -\frac{\cos\pi\epsilon}{1-\cos^2\pi\epsilon} \tag{6.242}$$

となるから，これを (6.238) に代入して

$$\Omega_0(\epsilon) = \exp\left(\frac{N}{2}[1 + \log 2\pi + \log\sin^2\pi\epsilon]\right) \tag{6.243}$$

が得られる. 従って解空間の体積 $\Omega_P(\epsilon)$ は (6.232) 式から

$$\begin{aligned}
\Omega_P(\epsilon) &= \exp\left(\frac{N}{2}[1 + \log 2\pi + \log\sin^2\pi\epsilon]\right)\mathrm{e}^{N\alpha\log(1-\epsilon)} \\
&= \exp\left(N\left[\frac{1}{2}(1+\log 2\pi) + \frac{1}{2}\log\sin^2(\pi\epsilon) + \alpha\log(1-\epsilon)\right]\right) \\
&\equiv \exp\left(S(\epsilon,\alpha)\right)
\end{aligned} \tag{6.244}$$

$$S(\epsilon,\alpha) \equiv \frac{1}{2}(1+\log 2\pi) + \frac{1}{2}\log\sin^2(\pi\epsilon) + \alpha\log(1-\epsilon) \tag{6.245}$$

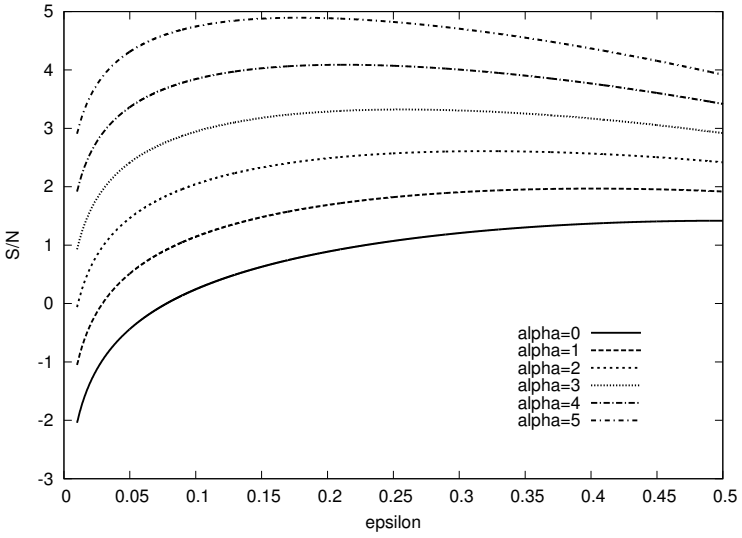


図 74: 上から $\alpha = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ に対する単位入力当たりのエントロピー S/N の汎化誤差 ϵ 依存性. α の増加と共に, S/N の極値を与える ϵ は 0.5 から単調に減少していることに注意しょう. また, エントロピーが「状態数の対数」であるとするならば, 状態数の最小値は 1 であるから, エントロピーの最小値は $\log 1 = 0$ のはずである. しかし, このグラフをみると, エントロピーが負にもなり得ている. この理由は状態空間 (解空間) の体積の対数をエントロピーとみなしたため, $|\Omega_P(\epsilon)| < 1$, つまり, $S < 0$ となり得ることがあるからである.

と決定される ($P = N\alpha$ に注意).

$\Omega_P(\epsilon)$ は汎化誤差 ϵ を与える解空間の体積 — 大雑把には $\boldsymbol{J}$ の取りうる場合の数[33] — であるから, これの対数をとることにより得られる $S(\epsilon, \alpha)$ は**解空間のエントロピー**に相当する量である. 図 74 にいくつかの α の値に対して, 単位入力数あたりのエントロピー, つまり S/N をプロットしたものを載せる. 各 α の値に対してエントロピーはある値 ϵ で極大値を持つが, 極値を与える ϵ_* とそれ以外の ϵ のエントロピーの差は $\mathcal{O}(N)$ であることから, 前に述べた「アンサンブル」の考え方に従えば, $N \to \infty$ の極限では圧倒的割合で汎化誤差 ϵ_* を持つ学習機械が現ることになる. それ以外の汎化誤差を持つ学習機械も出現することはするが, それは極めて希なことであるというわけである. よって, 各 α に対して S/N の極値を与える ϵ をプロットした $\epsilon(\alpha)$ がギブス学習の学習曲線となる. 式で書けば

$$\epsilon(\alpha) \quad = \quad \arg\max_{\epsilon} \left[\frac{1}{2} \log \sin^2(\pi\epsilon) + \alpha \log(1-\epsilon) \right] \tag{6.246}$$

である.

ところで図 74 より, $\alpha = 0$, つまり, 例題を与えていない状況では $\epsilon = 1/2$ となり, 所謂 **random guess** と同じ性能の学習機械が得られることになり, 直観と合っている. また, 例題数 α の増加とともに, S/N の極値を与える ϵ は単調に減少することも分かり, これも直観と合っている. これらを統合すると, 例題数の増加とともに汎化誤差は 0.5 から単調に減少するというのがギブス学習の学習曲線であることが分かる.

[33] $\boldsymbol{J}$ は連続値をとる変数だから, 「個数」とするのは大雑把な見方である.

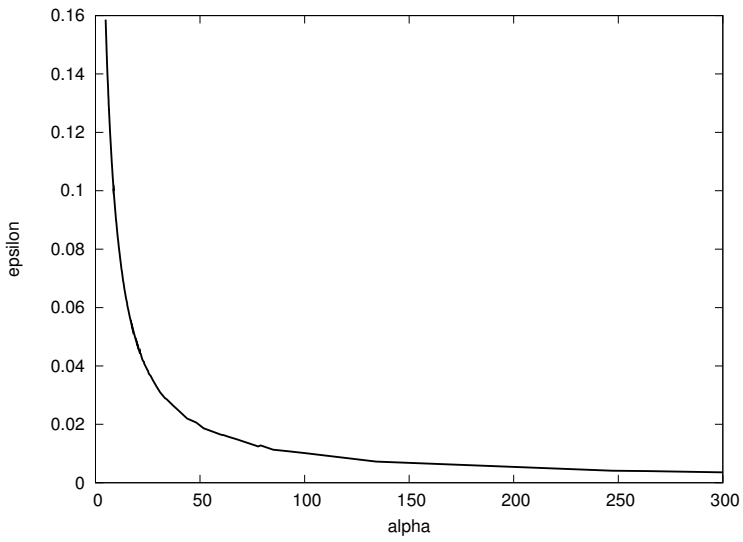


図 75: エントロピー最大化条件 (6.248) を数値的に解くことにより求めた学習曲線. 例題数 α の増加とともに汎化誤差は単調に減少する.

6.13.3 例題数無限大での漸近評価

(6.246) 式を具体的な極値条件として書き下せば

$$\frac{\pi\cos(\pi\epsilon)}{\sin(\pi\epsilon)}(1-\epsilon)=\alpha, \tag{6.247}$$

つまり,

$$1-\epsilon = \frac{\alpha}{\pi}\tan(\pi\epsilon) \tag{6.248}$$

が得られる. 図 75 に (6.248) 式を数値的に解き, ϵ を α の関数としてプロットしたものを載せよう. この図より, 例題数 α の増加とともに ϵ は単調にゼロへと近づくことがわかる. ここで取り上げた例では原理的に教師機械の与える例題から $\epsilon=0$ となる規則, つまり, $\boldsymbol{T}$ を見つけることができるという意味において「学習可能」な課題である. もちろん, 現実的には教師信号にノイズが加わった場合や, 生徒機械と学習機械の構造上のミスマッチがある場合の方が圧倒的に多いであろう. この場合, $\Omega_P(\epsilon)$ 自体が単調には減少しなくなり, ここに述べた解析が困難になるので, 適時工夫が必要となる.

さて, $\alpha\to\infty$ では汎化誤差は非常に小さくなっているはずだから，無限個の例題を与えたとき, $\epsilon\ll 1$ として (6.248) 式左辺を展開し, 主要項のみ残す. すると

$$1-\epsilon = \frac{\alpha}{\pi}\tan(\pi\epsilon)\simeq\frac{\alpha}{\pi}\pi\epsilon=\alpha\epsilon \tag{6.249}$$

つまり

$$\epsilon = \frac{1}{1+\alpha}\simeq\frac{1}{\alpha} \tag{6.250}$$

がギブス学習の学習曲線の例題数無限大での漸近形であり, 例題数の逆べきでゼロに漸近する. 図 76 に図 75 の数値計算で得た結果を対数プロットしたものと, 傾き -1 の直線を重ねて描く. この

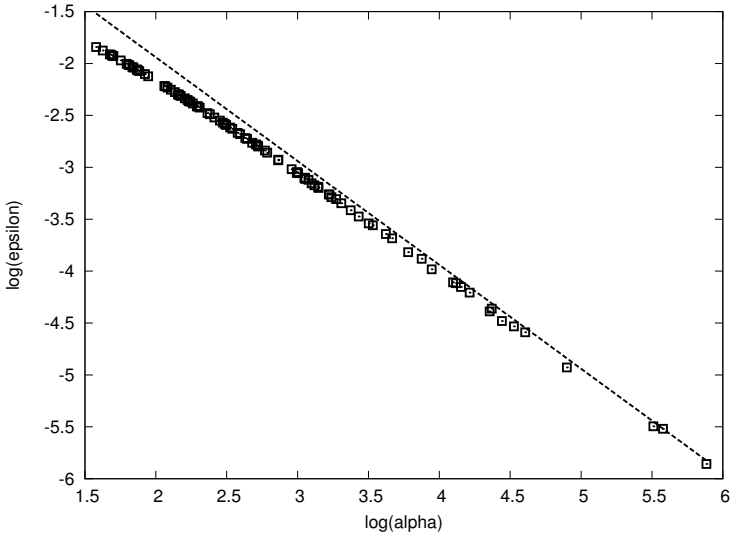


図 76: 学習曲線の α が十分大きい場合のスケーリング則. α が十分に大きければ α^{-1} 則に従う.

図より, α が大きければ (6.250) 式の漸近形に従うことが実際に確認できる.

$\alpha = \mathcal{O}(1)$ の領域での学習曲線は個々の学習機械の構造や用いる訓練データの統計的性質に依存するが, α が十分大きな漸近領域での振る舞いはこれらの詳細には依らない, 「ユニバーサル」なものであることが多い. 従って, 学習曲線の漸近形の評価及び, それに基づく学習曲線の分類は学習理論において非常に重要な課題であると考えられており, 様々異なるアプローチから精力的な研究が現在まで進められてきている.

6.14 オンライン学習

前節では学習機械の性能を評価するための指標として汎化という概念を導入し, 簡単な閾値機械の学習曲線 — 汎化誤差が例題数とともにどのように振舞うか — をバッチ学習のフレームワークにおいて統計力学を用いて調べた.

ここからは学習様式の一つである**オンライン学習**をパーセプトロンに関して詳しく調べていくことにしょう.

6.14.1 実現不可能な規則のオンライン学習

既に述べたが, 生徒機械はブラックボックスからの入出力からその機構を推測するわけだが, その課題が学習可能であるものとは限らない. 従って, 現実的にはいくら沢山の例題数を与えても, 汎化誤差がゼロにならないという意味で「実現不可能」な規則を学習する場合の方が多いであろう. ここではそのような場合の中で, 教師機械の性能が生徒機械の性能よりはるかに優っている場合を考えてみることにする. つまり, 世の中にはいくら努力しても敵わない存在がいるわけで, そのような師匠から「よく学ぶ」にはどうしたら良いのか, を考えていこうというわけである.

6.14.2　教師機械：$K=3$ パリティ・マシン

教師機械として次のような学習機械を考えてみよう．この学習機械は出力がそれぞれ次のように与えられる 3 つ ($K=3$) のパーセプトロン：

$$T^{(1)}(v) = \mathrm{sgn}[v] \tag{6.251}$$

$$T^{(2)}(v) = \mathrm{sgn}[a-v] \tag{6.252}$$

$$T^{(3)}(v) = \mathrm{sgn}[a+v] \tag{6.253}$$

から成る．ここで, v は結合を $\boldsymbol{J}^0$, 大きさが 1 である入力ベクトルを $\boldsymbol{x}$ とした場合の内部ポテンシャルであり, $v=\sqrt{N}(\boldsymbol{J}^0\cdot\boldsymbol{x})/|\boldsymbol{J}^0|$ で与えられる．また, a はある実数の閾値であるとしよう．このとき, 3 つの学習機械は自分の出力を持ち寄り, 3 人の出力の中で -1 の数が奇数ならば最終結論として出力 -1 を, 偶数であるならば $+1$ を出力するものとする．つまり, 個々のパーセプトロンは独立に入力を受け取り, 最終結果は「談合」により決める．こうした意味では, この学習機械は 3 つのエージェントからなる「集団学習」をしているとみなすことができるであろう．この機械の概念図を図 36 に載せた．

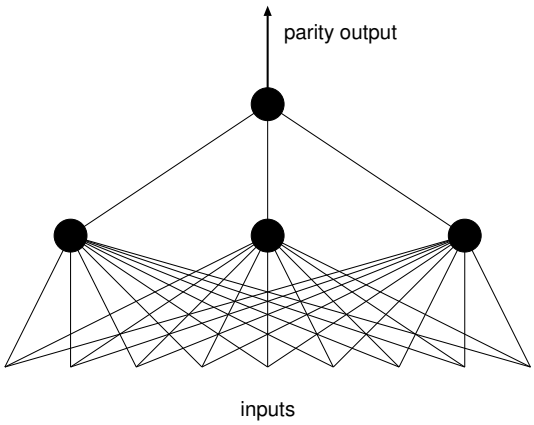


図 77: $K=3$ パリティ・マシン．3 つのパーセプトロンの出力の「パリティ」を最終出力とする．

この機械の最終出力を式で書けば

$$T_a(v) = \mathrm{sgn}[v(a-v)(v+a)] \tag{6.254}$$

となる．$a\to\infty$ の極限では

$$\lim_{a\to\infty} T_a(v) = \mathrm{sgn}[v] \tag{6.255}$$

となり, 単純パーセプトロンの出力に一致することに注意しよう．このような構造を持つ学習機械を**パリティ・マシン**と呼ぶ．この機械は通常のパーセプトロンと比べて優っているのであろうか？実際, 様々な観点からこの機械の性能を議論することができるが,「全ての可能な入出力 2^N 個の中のいくつを実現できるのか」という指標で両者を評価するのであれば, 単純パーセプトロンは入力次元 N に対し, $2N$ 個のパターンを実現することができる．一方, このパリティ・マシンの場合にはレプリカ法に基づく解析により, 閾値 a を適切に選べば $\sim 10N$ 程度まで上昇し, それ以外の全

ての有限な a の値に対しても, 実現可能なパターン数は $2N$ 以上であることがわかっている. 従って, このパリティ・マシンはパーセプトロンと比べてはるかに表現能力が高く, その意味で, 生徒機械であるパーセプトロンにとってパリティ・マシンの規則は実現不可能なものとなるのである.

ところで, このパリティ・マシンは解析上は非常に便利である. というのも, この機械の与える入出力関係は閾値関数が $v = \pm a$ で反転した**非単調パーセプトロン**と同じであり, このパーセプトロンの解析を通じてパリティ・マシンの様々な側面を計算機シミュレーションによらずに明らかにすることができる. 従って, ここではその中で, 単純パーセプトロンがパリティ・マシンの持つ規則をオンライン式に学習する場合の学習曲線を詳しく見ていくことにしょう.

6.14.3 マクロな量の導入と汎化誤差の一般形

統計力学によれば, システムの性質はマクロな量を介して明らかになる. 従って, ここでもそのような量を導入しょう. そこで, 今後, 教師の結合を $\boldsymbol{J}^0$, 生徒の結合を $\boldsymbol{J}$, 入力ベクトルを 1 に規格化された $\boldsymbol{x}$ で表記することにする. このとき, 我々がここで導入するマクロな量は教師, 生徒機械の結合の重なり：

$$R = \frac{\boldsymbol{J}^0 \cdot \boldsymbol{J}}{|\boldsymbol{J}^0||\boldsymbol{J}|} \tag{6.256}$$

及び, 生徒機械のノルム：

$$l = \frac{|\boldsymbol{J}|}{\sqrt{N}} \tag{6.257}$$

である. 従って, ある学習則を与えて, 「オンライン的に」生徒の結合ベクトルが変化して行けば, その変化はその都度 R と l にも反映されることになる.

ここで, 問題を一旦整理しておく. 我々が考える状況は内部ポテンシャルが $u = \sqrt{N}(\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{x})/|\boldsymbol{J}|$ で与えられ, 出力が

$$S(u) = \mathrm{sgn}[u] \tag{6.258}$$

で決まる生徒機械が, 内部ポテンシャルが $v = \sqrt{N}(\boldsymbol{J}^0 \cdot \boldsymbol{x})/|\boldsymbol{J}^0|$ で与えられ, その出力が

$$T_a(v) = \mathrm{sgn}[v(a-v)(v+a)] \tag{6.259}$$

で与えられる教師機械からオンライン学習をするというものであった. 入力は $|\boldsymbol{x}| = 1$ を満たす空間からランダムに取ってくるわけであるから, 中心極限定理より, u, v は正規分布に従い, その同時分布は相関：$\langle uv \rangle = R$ を用いて

$$P_R(u,v) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-R^2}} \exp\left[-\frac{u^2+v^2-2Ruv}{2(1-R^2)}\right] \tag{6.260}$$

と書ける. このとき, 汎化誤差 ϵ_g は全ての例題に対して生徒, 教師の出力が食い違う, つまり, $T_a(v) \neq S(u)$ となる確率で与えられるわけであるから,

$$\begin{aligned}
\epsilon_g &= = \langle \Theta(-T_a(v)S(u)) \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dudv\, \Theta(-T_a(u)S(v))P_R(u,v) \\
&= 2\int_a^{\infty} Dv\, H\left(\frac{-Rv}{\sqrt{1-R^2}}\right) + 2\int_0^a Dv\, H\left(\frac{Rv}{\sqrt{1-R^2}}\right) \equiv E_a(R)
\end{aligned} \tag{6.261}$$

のように, パラメータ a を与えると, 教師, 生徒機械の重なり R で与えられることになる. ここで, $H(x)$ は誤差関数 : $H(x) = (1/\sqrt{2\pi})\int_x^\infty dz\mathrm{e}^{-z^2/2}$ である.

図 78 にいくつかの a の値に対して汎化誤差 $\epsilon_g = E_a(R)$ を R の関数としてプロットしたものを載せる. この図より, $a = \infty$ の学習可能な場合には $R = 1$ で汎化誤差がゼロになる. つまり,

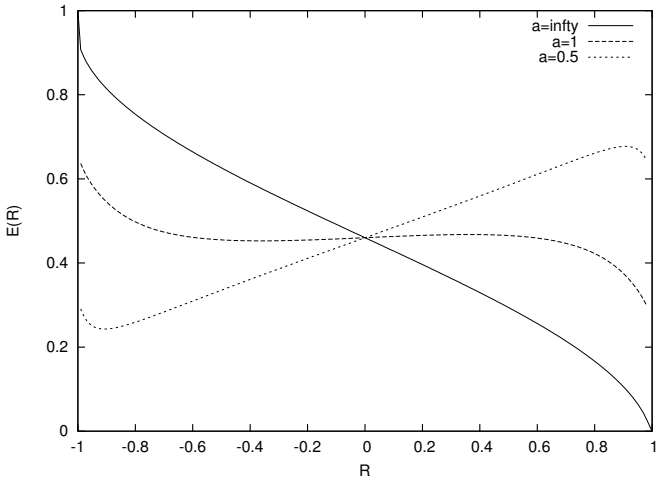


図 78: 重なり R の関数としての汎化誤差 ϵ_g. 教師機械の持つマクロなパラメータ a を $a = \infty, 1, 0.5$ に選んである.

$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^0$ となるように学習が完結した段階で, 両者の重なりが 1 になり, 誤差も完全にゼロになる. 一方, $a = 1.0, 0.5$ のときには様子が違い, $R < 0$ の領域で極小値が現れる. この極小値は $a \leq a_{c1} = \sqrt{2\log 2}$ のときに現れ, その極小値を与える R の値は

$$R_* = -\sqrt{\frac{2\log 2 - a^2}{2\log 2}} \tag{6.262}$$

である. この極小値 $E(R_*)$ が最小値になる条件は $a \leq a_{c2} = 0.80$ であり, $a_{c2} \leq a < a_{c1}$ では極小 $E(R_*)$ は存在するが, 最大値は $R = 1$ のときの $E(1) = 2H(a)$ となる. 従って, 以上をまとめると, 最適な学習則に対して, 教師機械の規則の実現不可能性のために残留する汎化誤差 ϵ_{min} はパラメータ a の値に対して

$$\epsilon_g = \begin{cases} E\left(-\sqrt{\frac{2\log 2 - a^2}{2\log 2}}\right) & (a < a_{c2}) \\ 2H(a) & (a \geq a_{c2}) \end{cases} \tag{6.263}$$

となる.

ここで, 重要なのは, **以上の結論, とりわけ (6.261) 式は生徒機械の採用する学習則には依らない**ということである. 与えられた学習則が R をこの最小値 ϵ_{min} を与えるような値に導くのか, また, そのときの収束スピードはどの程度であるか, という我々の知りたい事柄は具体的に $\boldsymbol{J}$ の更新式を与えなければわからない. そこで, 具体的にいくつかの学習則を与えて, R-l の流れ図, 及び, 汎化誤差の発展式を見ていくことにしよう.

6.15 学習過程のダイナミックス

汎化誤差の例題数依存性は学習則, つまり, $\boldsymbol{J}$ の更新則を与えなければわからないわけだから, ここでは具体的に次のような更新式を考えてみよう.

$$\boldsymbol{J}^{m+1} = \boldsymbol{J}^m - \Theta(-T_a(v)S(u))S(u)\boldsymbol{x} \tag{6.264}$$

ここで, $\Theta(\cdots)$ は階段関数であり, この学習則は教師, 生徒の出力が食い違う場合のみ生徒の結合ベクトルの更新が行われ, 自分の答えは間違ったわけであるから, そのときの出力値と逆符号で結合を入力ベクトル方向に移動させよう, という意味を持っている. これは既にみた (**課題 2** 参照), 1 次元のパラメータ θ の学習の高次元への拡張版となっている. この学習則を**パーセプトロン学習**と呼んでいる.

この (6.264) 式で入力数を例えば $N = 10000$ と具体的に与えて計算機上でシミュレートし, 重なり R を更新ステップ数の関数として求め, それを (6.261) に逐次代入すれば, 汎化誤差の時間発展が実際に観測できる. しかし, 入力次元 N, 例題数 P がともに無限大に取れ, その比 $\alpha = (P/N)$ が有限値に取れる極限を考えると, 解析的にこの学習のダイナミックスを議論することができる.

6.15.1 学習方程式の導出

まずは, (6.264) 式の両辺を自乗して, それを $l^m = |\boldsymbol{J}^m|/\sqrt{N}, R^m = (\boldsymbol{J}^0 \cdot \boldsymbol{J}^m)/|\boldsymbol{J}^0||\boldsymbol{J}^m|$ を用いて書き直すと

$$2l\left(\frac{l^{m+1} - l^m}{\frac{1}{N}}\right) = -2l^m\Theta(-T_a(v)S(u))u + \Theta(-T_a(v)S(u)) \tag{6.265}$$

が得られるが, 結合ベクトル $\boldsymbol{J}$ の次元は N であることから, このベクトルの自乗で定義されるノルム l に $\mathcal{O}(1)$ の変化が見られるためには $\mathcal{O}(N)$ の例題数が必要となる. このとき, $(1/N) = d\alpha$ は十分小さな量であり, これで上式左辺を展開し, P, N が十分大きければ, 右辺はその平均値に一致する (自己平均) ことを用いれば

$$2l\frac{dl}{d\alpha} = -2l\langle\Theta(-T_a(v)S(u))u\rangle + \langle\Theta(-T_a(v)S(u))\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \tag{6.266}$$

が得られる. 同様に, (6.264) の両辺に $\boldsymbol{J}^0$ をかけて内積をとることにより,

$$l^2\frac{dR}{d\alpha} = -\frac{R}{2}\langle\Theta(-T_a(v)S(u))\rangle + l\left(R\langle\Theta(-T_a(v)S(u))u\rangle - \langle\Theta(-T_a(v)S(u))v\rangle\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \tag{6.267}$$

が導かれ, 同時分布による平均 $\langle\cdots\rangle$ は直ちに計算できるので, 結局, 生徒機械の学習過程は次のようなマクロな量 l, R に関する閉じた微分方程式 :

$$\frac{dl}{d\alpha} = \frac{1}{l}\left[\frac{E_a(R)}{2} - F_a(R)l\right] \tag{6.268}$$

$$\frac{dR}{d\alpha} = \frac{1}{l^2}\left[-\frac{R}{2}E_a(R) + (F_a(R)R - G_a(R))l\right] \tag{6.269}$$

で与えられることになる. ここに,

$$F_a(R) = \langle\langle\Theta(-T_a(v)S(u))u\rangle = -\frac{R}{\sqrt{2\pi}}(1-2\Delta) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{6.270}$$

$$G_a(R) = \langle\langle\Theta(-T_a(v)S(u))v\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}}(1-2\Delta) + \frac{R}{\sqrt{2\pi}} \tag{6.271}$$

であり, $\Delta = \mathrm{e}^{-a^2/2}$ と置いている. 図 79 にいくつかの a の値に対する, R-l 空間の流れ図を載せよう. この図より, 学習可能な場合については, ϵ_{min} を与える $R = 1$ へ順調に漸近していくことがわ

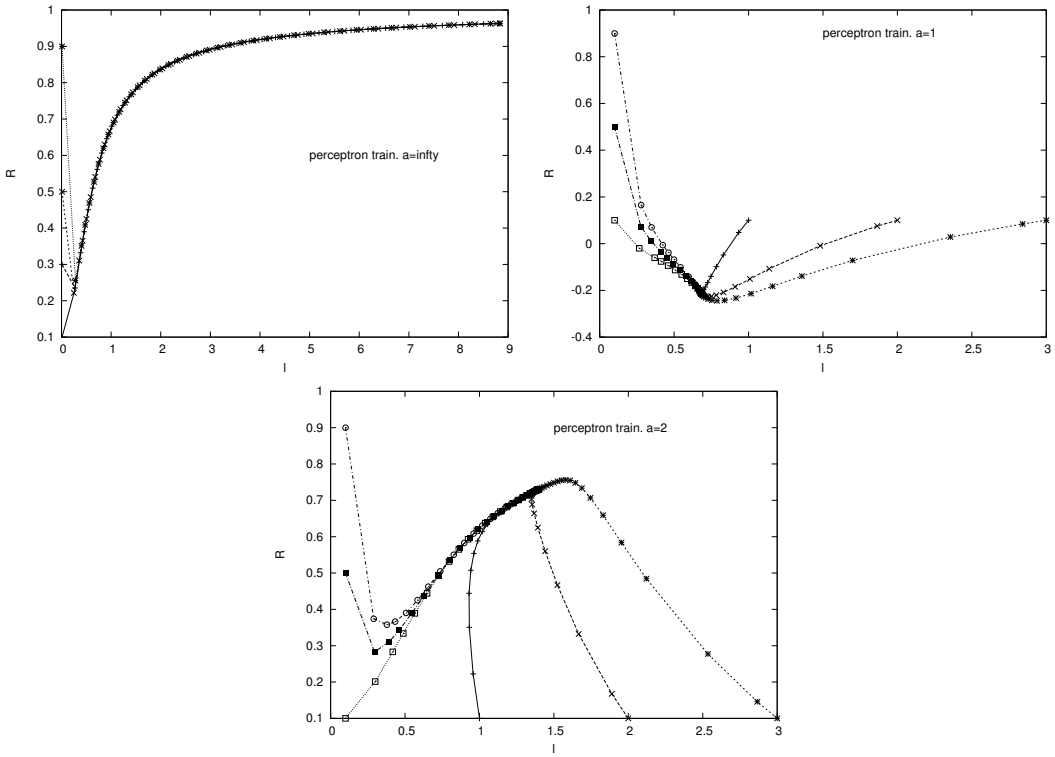


図 79: パーセプトロン学習での R-l 流れ図. 学習可能な場合 ($a = \infty$) の場合には $R = 1$ へと漸近していくが, 実現不可能な場合 ($a = 1, 2$) にはある固定点に引き込まれてしまう. この固定点は ϵ_{min} を与えない. しかも, 引き込まれ具合は指数的に速い.

かる. この場合の α が十分大きな漸近領域での振舞いは図 79 で得られた R の値を $E_a(R)$ に代入して, それを対数プロットしてみると, 図 80 のようになり, $\alpha^{-1/3}$ 則に従うことがわかる. これは数値的にではなく, 解析的にも汎化誤差を $\alpha \to \infty$ で展開することにより

$$\epsilon_g \quad = \quad k\,\alpha^{-1/3}, \quad k = \sqrt{2}(3\sqrt{2})^{-1/3}\pi \tag{6.272}$$

のように振舞うことが確かめられる. この結果より, 同じ例題を与えた場合に汎化誤差を通じて評価される精度は前回のギブス・バッチ学習 (α^{-1} 則) に比べて落ちることがわかる. これをどのように改善するか (加速するか) は後に述べることにしょう.

さて, 学習が不可能な場合, R は ϵ_{min} を与える値に収束しない. しかも, 悪いことにこの非最適値への収束は指数関数的に速い. a が無限大ではないが比較的に大きな場合の漸近解析によれば汎化誤差はこの領域で

$$\epsilon_g \quad = \quad \frac{1}{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\Delta^{3/4} + \frac{\sqrt{2}}{\pi}\exp\left(-\frac{2\Delta^{2/3}}{\pi}\alpha\right) \tag{6.273}$$

のように振舞うことがわかる. ここで, $\Gamma(\cdots)$ はガンマ関数であり, 上の方程式 (6.273) の右辺第 1 項は ϵ_{min} とは異なる値である. ちなみに, $\Delta = \mathrm{e}^{-a^2/2}$ であるから, 学習可能となる極限で (6.273) 式の指数部の「緩和時間」は発散し, 収束性は指数則から冪則に落ちて (6.272) 式に従うようになる.

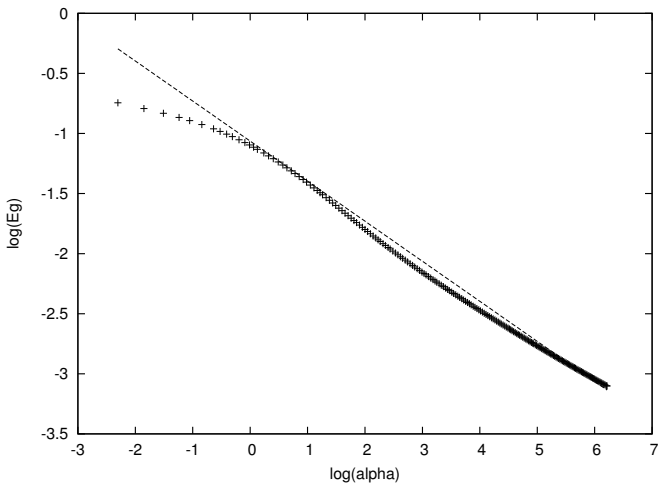


図 80: 学習可能な場合のパーセプトロン学習 (6.264) に対する学習曲線の漸近領域でのスケーリング則. $\alpha^{-1/3}$ 則に従う.

6.15.2 Hebb 学習と過学習

前節ではパーセプトロン学習の学習曲線に関して議論したが, 学習則としてはこれよりも素朴に

$$\boldsymbol{J}^{m+1} = \boldsymbol{J}^m + T_a(v)\boldsymbol{x} \tag{6.274}$$

を採用することもできる. これは教師機械の出力符号に応じて, 入力ベクトル方向に自分の結合を向けていく学習であり, ここでは **Hebb 学習**と呼ぶことにしょう. これも同様に, このミクロな成分の発展方程式 (6.274) から l と R のマクロな量に関する微分方程式を導くことができる. 結果は

$$\frac{dl}{d\alpha} = \frac{1}{l}\left[\frac{1}{2} + \frac{2R}{\sqrt{2\pi}}(1-2\Delta)l\right] \tag{6.275}$$

$$\frac{dR}{d\alpha} = \frac{1}{l^2}\left[-\frac{R}{2} + \frac{2}{\sqrt{2\pi}}(1-2\Delta)(1-R^2)l\right] \tag{6.276}$$

に従う. この微分方程式を数値的に解き, $\epsilon_g = E_a(R)$ の発展をいくつかのパラメータ a に対してプロットしたものを図 81 に載せる. この図より, $a=\infty$ の学習可能な場合, 汎化誤差は単調にゼロへと向かい, その減少の仕方は漸近的に $\alpha^{-1/2}$ 則であることがわかる. これは数値的にも図 82 のように確認できる.

ところで, 学習不可能である, 例えば, $a = 1, 0.5$ の場合には図 81 からわかるように, 例題をもらえばもらうほど汎化能力が落ちていくという意味で**過学習**が生じている. つまり, 皮肉なことに「良い加減」(けっして「いい加減」ではない. 念のため) のところで学習をストップしないと, それ以上の学習は返って生徒機械の害になるというわけである. Hebb 学習の $\alpha \to \infty$ での漸近形をもう少し詳しく調べても見ると

$$\epsilon_g = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}(1-2\Delta)}\frac{1}{\sqrt{\alpha}} + 2H(a) & (a > a_{c1}) \\ \frac{1}{\sqrt{6\pi}(1-2\Delta)}\frac{1}{\sqrt{\alpha}} + 1 - 2H(a) & (a < a_{c1}) \end{cases} \tag{6.277}$$

であることがわかる. 従って, $a < a_{c1} = \sqrt{2\log 2}$ で過学習が生じることになる.

次節では生徒機械に「質問」をすることを許すことにより, この Hebb 学習の過学習がどのようになるのか, を見ていくことにしよう.

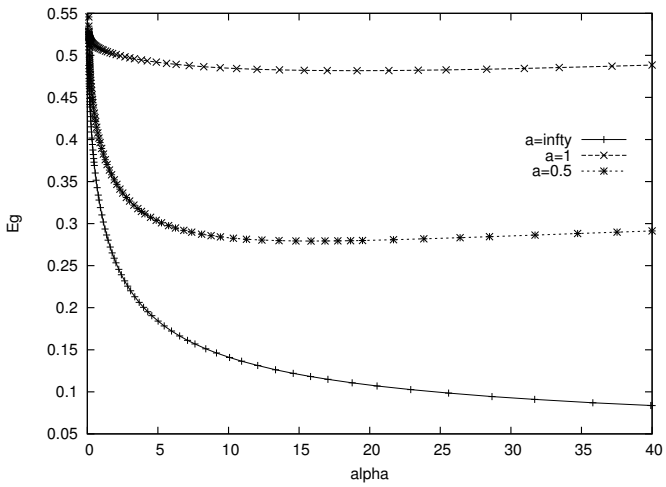


図 81: Hebb 学習の学習曲線. 学習可能な場合 ($a = \infty$), 汎化誤差は単調にゼロへと収束するが, $a = 0.5, 1$ の学習不可能な場合には例題数を与えれば与えるほど汎化能力が減少する「過学習」が見られる.

6.16 学習における「質問」の効果

我々は学生時代を通じて常に「わからなかったら質問してください」というアドバイスを教師から受けてきた. そしてその質問が良い質問であれば, その後の学習が進んだり, 教師に褒められたりしたものである. そこで, そのような「質問」が, 我々の今まで調べてきた機械学習の文脈でも可能であるか, そして, どのような効果が見込めるのかを調べてみることは, とても意味のあることであろう. そこで, ここでは機械学習における質問をどのように構成し, その効果はどの程度のものなのか, をこれまでと同様に汎化誤差を通じて調べていくことにしょう.

まず, 「質問」と言った場合, 答えそのものズバリを聞いてはいけないことは明らかであろう. それが可能ならば何も苦労はない. 従って, ここでは結合 $\boldsymbol{J}^0$ の情報を直接的には質問の中に取り入れることはできない. それではどうするかと言うと, 入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ の中で最も情報を担っていると思われるものをピックアップし, その入力と教師機械の出力を 1 セットとしてここでの「質問」とすることにしょう. 今までの議論では $|\boldsymbol{x}| = 1$ を満たす一様な分布から入力を取ってきていたわけで, その意味では質問による「バイアス」がかかっているわけではなかったのではあるが, ここでは**入力 $\boldsymbol{x}$ の空間に制約を入れる**ことによって質問としようというわけである.

それでは単純パーセプトロンである生徒機械にとって, どの入力が最も多くの情報を含むのか ? これは明らかに $u = \sqrt{N}(\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{x})/|\boldsymbol{J}| = 0$ を満たす入力 $\boldsymbol{x}$, つまり, **学習の各ステップで生徒機械のパターン分離面上を向いた入力ベクトルを要求するのが最も効果的**であろう (図 83 参照). ここに落ちた入力に対する生徒機械のとる判断が最も難しく, 従って, それだけ多くの情報を含むことになる.

6.16.1 Hebb 学習における質問の構築と過学習の消失

このような入力を要求する場合, 教師の内部ポテンシャル v の分布は

$$P_R(v|u=0) \quad = \quad \sqrt{2\pi}\delta(u)P_R(u,v) \tag{6.278}$$

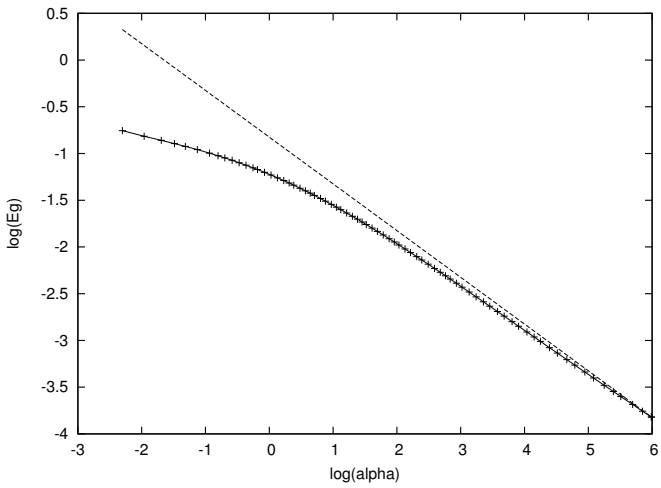


図 82: Hebb 学習の学習曲線の例題数無限大での漸近形. $\alpha^{-1/2}$ 則に従う.

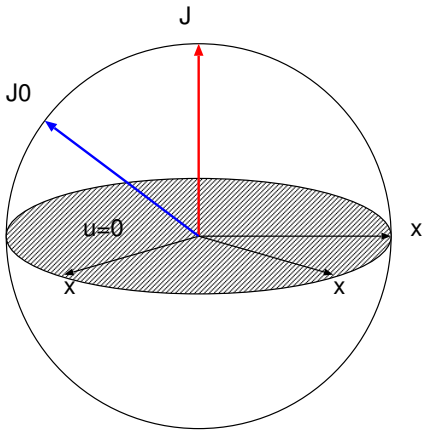


図 83: 入力として, 各ステップで分離面 $u=0$ を満たすような入力ベクトル $\vec{x}$ を要求する. これが「質問」となる.

に従う. よって, Hebb 学習でこの質問を用いるのであれば[34], その発展方程式は例によって (6.274) から R と l に関する方程式を組み立てることにより,

$$2l\frac{dl}{d\alpha} = \ll 1 \gg +2l \ll T_a(v)u \gg \tag{6.279}$$

$$l\frac{dR}{d\alpha} + R\frac{dl}{d\alpha} = \ll T_a(v)v \gg \tag{6.280}$$

で与えられる. ここで, $\ll \cdots \gg$ は分布 (6.278) 式での平均を意味する. 従って, この平均を具体的に計算することにより, 学習方程式は R のみで書けて (l は $l=\sqrt{\alpha}$),

$$\frac{dR}{d\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\left[\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{1-R^2}\left\{1-2\,\mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2(1-R^2)}}\right\} - \frac{R}{2\sqrt{\alpha}}\right] \tag{6.281}$$

[34] パーセプトロン学習にこの $u=0$ での質問は導入できないことに注意しよう. パーセプトロン学習は $\mathrm{sgn}(u)$ のような生徒機械の出力を含むので, $u=0$ とすることができないためである. なお, 生徒機械が a という階層の一つ高いパラメータの値を知っているのであれば, これを用いて $u=\pm a$ からの入力を取ってくることによって質問を構築することは可能である.

が得られる. 図に前節でみた $a = 1.0$ の場合に過学習が起こる場合とそれに質問を加えた場合の学習曲線を載せる. この図より, 質問を考慮して, 各学習ステップで入力空間に制約を入れることに

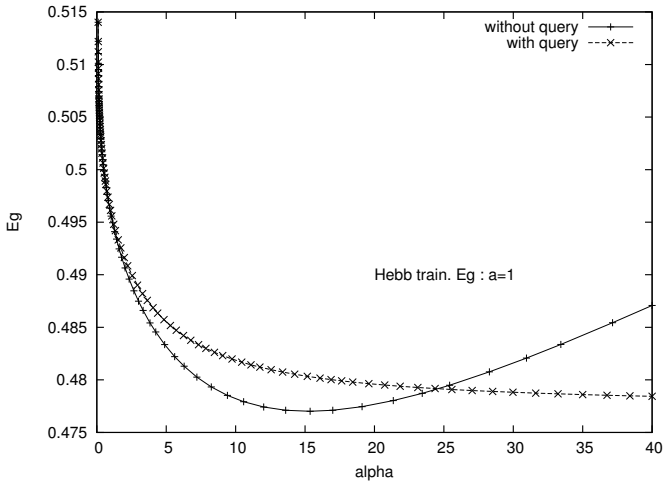


図 84: $a = 1.0$ の場合に過学習が生じる Hebb 学習の学習曲線 (without query) とそれに質問の効果を加えた場合の学習曲線 (with query).

より, 過学習が消失し, 汎化誤差は理論上の最小値 ϵ_{min} に収束することがわかる.

課題 14 :
ここで調べた Hebb 学習 :

$$\boldsymbol{J}^{m+1} \quad = \quad \boldsymbol{J}^{m} + T_a(v)\boldsymbol{x}$$

を解析的にではなく, $N = 5000$ 程度のシステムサイズでの計算機シミュレーションを実行することにより調べよ. 具体的には

(1) R-l の流れ図を描く.

(2) 汎化誤差 $E_a(R)$ の発展を描く.

の 2 点に関して調べること. 特に, $a = 1$ の場合に過学習が確認できるかチェックせよ. 入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ は各成分を $[-1, 1]$ の一様乱数から取り出し, その大きさで 1 に規格化して用いると良い. 余裕のある者は $u = 0$ を満たす入力ベクトルを作り, それを用いた場合に過学習が消失するか否かを確認せよ.

7　経済金融システムにおける「ミクロ」と「マクロ」

前回までの講義では統計力学の考え方や計算技法が情報科学の諸問題に適用できることを画像復元の問題を例をとって見てきた. しかし, 統計力学の方法や考え方の適用範囲はこれらにとどまるわけではない. 実際, 経済現象, 金融活動などの社会科学的な諸問題にもその考え方を応用することができる. その際の基本的考え方, 目標はミクロな構成要素の動きから系のマクロな振る舞いを説明すること. つまり, 市場に参加する膨大な数のトレーダの意思決定の方式をミクロに与えて, そこから市場価格変動等のマクロな経済現象を定性的に, 可能ならば定量的に説明することである. つまり

トレーダ (ミクロ情報)　⇒　市場 (マクロ情報)

を目指す.

7.1　なぜ「情報」で「経済」「金融」なのか?

実はこのような考え方自体は, かなり早い段階で一部の経済学者のなかにもあったにはあった. 例えば, F. Hayek (1945) は

「**マクロの集計的な数字のみでは経済を議論することができない**.」「例えば, 消費であれば, どのような人々がどのような考え方に基づいて消費しているのか, という**ミクロな議論の積み重ねが無ければならない**.」

と言っているし, R. Lucas (1976) は

「マクロ経済のモデルは**ミクロ経済学的基礎に立脚すべき**である (所謂, 「ルーカス批判」).」「経済主体 (つまり, ここでは現代的に「エージェント」と考えても良いと思う) の行動原理のないマクロ経済モデルは, 将来に対する予想の変化によって経済主体の行動様式自体が変化すれば, 全く意味が無くなる. 」

と言い切っている[35].

彼らが統計力学, あるいは, 熱力学と統計力学の関係に精通していたかどうかは定かではないが, いずれにしても, 彼らのような著名な経済学者が, 経済金融システムにおける「階層性」を明確に意識していたことは上記引用からも良くわかる.

しかし, 「問題を把握する」という観念論のレベルにとどまることと, 具体的「ミクロな」数理モデルを構築し, 重要となる「マクロな」統計量をコンピュータなどを用いて**実際に計算することで問題を定量的議論にのせる**こととの間にはひどく大きなギャップがあるし, そのギャップを埋めるためには, ある程度, 経済学の知識を持った上で, 統計力学や統計学 (およびその周辺の数学), エントロピーなど各種の情報量規準に基づく情報論的考え方, 大規模な計算機実験や実データ解析を行うためのスキルなど「現代的なモノの考え方/理論的道具立て」をマスターすることが不可欠である. 従って, 「経済学」「経済金融システムの研究」は典型的「多体問題」であるだけでなく, 脳科学と同様に学際的研究分野なのであり, この講義でその内容の一端を紹介し, 具体的な計算過程

[35] いずれも「経済古典は役に立つ」竹中平蔵 著, 光文社新書 (2010) より.

(我々がこれからやろうとしていることは, 具体的計算ができなければ話にならない) などを学習することは十分に意義があるわけである.

7.2 市場とその構成要素

脳の数理モデルである神経回路網の構成要素が, パーセプトロンのような単純素子であった一方, (金融) 市場の構成要素であるトレーダ, あるいはエージェントは「人間」の数理模型である. 従って, 彼らの意思決定方式のミクロな定式化はより複雑になることが予想されるが, ここでも, まずは可能な限り単純で扱いやすい模型から出発する. 当然, その後, 得られたマクロな振る舞いを金融データなどとつき合わせてチェックすることにより数理模型自体を検証し, 必要とあらば, より複雑化, 精密化していくこともできる. ここからは, そうした具体例のいくつかを詳しく見ていくことにしょう.

7.3 ゲーム理論: エージェント群による「人工市場」

日常行われている株や貨幣などの商取引きに代表される「エージェント (トレーダ) のミクロな意思決定」における合理的判断とは何かを系統的に調べ, その判断がマクロに見てどのような結果を引き起こすのかを調べる学問分野は, 今日では**ゲーム理論**と呼ばれ, 従来の経済学 (ミクロ経済学) にとどまらず, 数学や社会学, 心理学, 生物学や物理学など多くの学問間を横断する研究分野となっている.

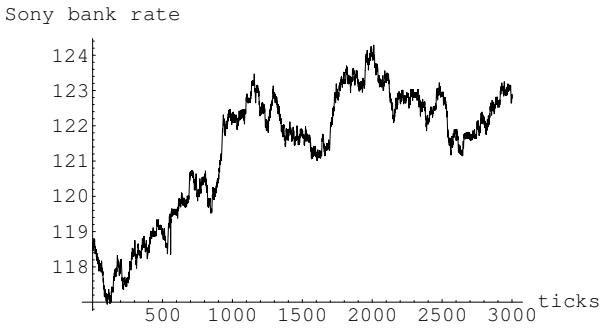


図 85: ソニー銀行 (http://moneykit.net) の円ドル為替レート.

例えば, 図 85 に載せたグラフは後にこの講義で見る**インターネット・トレーディングシステム**を採用するソニー銀行の円ドル為替レートであるが, 全てのトレーダに提示される, この「為替レートの変動」という「マクロ情報」はその起源をミクロに遡れば, 個々のトレーダの「売り」「買い」の意思決定の結果であると考えることができる. 従って, 市場に参入するトレーダは公に提供されるこのレート変動の情報をもとに手持ちの貨幣を「円」または「ドル」に変えることで自らの資産を有効に運用しょうとする. よって, 公に開示される為替レートの情報に基づく戦略を個々のトレーダが採用する限り, それらの戦略[36] とそれに基づく行動結果がマクロなレート変動に (ある程度の時間差を伴って) フィードバックされることになる. その結果, ここで言う「マクロ情報」と

[36] その手の戦略の基になる分析手法は, この業界では「 テクニカル分析」などと呼ばれている.

「ミクロ情報」はけっして無相関ではなく, 互いに絡み合っており, ミクロなトレーダの行動様式がマクロな情報をどのように変えるのか, あるいは, 「為替レート変動間隔」のようなマクロな情報における確率変数の統計的性質にどのように影響するのか, を調べることが市場を定量的に分析する上でとても重要になる.

本講義では時間の都合上, ゲーム理論のいくつかの典型的な問題とその性質, 基本的概念を細かく説明していく余裕がないので, ゲーム理論が対象とする様々なゲーム (システム) の中でも**マイノリティ・ゲーム**と呼ばれる**繰り返しゲーム**の一種に注目し, これをここでの中心的題材に据え, それを統計力学の観点から計算機実験により調べてみることにする. この繰り返しゲームはシステムにおけるトレーダの動きに [ノイズ] やある種の [ランダムネス] が介在し, そのような確率的要素がシステム全体の振る舞いに影響を与えるという意味において, 統計力学的な考え方が役立つ一例となっている.

7.4 ゲーム理論の情報統計力学

マイノリティ・ゲームとは **El-Farol bar の問題**を起源とするゲームの一種である. El-Farol bar とは米国サンタフェにあるバー (酒場) の名前で, 毎週週末に楽団による演奏会が行われる. そのとき, 店内が満員では客はなかなか演奏を楽しむことができないので, バーには出かけずに自宅で楽しむ方が良いと考える. 一方, 店内が空いていればバーで演奏会を楽しむのが, ここでの好ましい選択となる. これは自分のとるべき行動の決定が他の人々の行動によって左右され (つまり「今晩は人気の楽団のコンサートが行われるので人出が多そうだから自宅でゆっくり過ごそう」だとか), 逆に自分の取った行動が他の人々にも影響されるという状況の典型例となっている. 我々がここで考えるマイノリティ・ゲームではこれを単純化し

マイノリティ・ゲーム:
N(奇数) 人が「売り」「買い」のどちらかの判断を行って少数派のグループに属した者が勝つ.

と簡単に書くことができる. ここで人数が奇数なのは, 少数派の決定に対して都合が良いためにである (偶数だと少数派が決まらない場合もありうる). もちろん, 我々がこれから具体的に「ゲーム」としてその数理を楽しんで行くためには, いくつかの取り決め, つまり, ここに書いた「判断」とはどのように行われるのか, 「勝ち」「負け」とはどのように定義されるのか等, 実際に数理モデル化する際に決めなくてはならない部分も多々あるが, ゲームの基本的内容はおおかたこの 1 行で表すことができる. 統計物理からのモデルの提案としては Challet and Zhang (1997) が最初のものであるが, 彼らの導入した数理モデルには各トレーダが意思決定に用いるであろう履歴の情報が含まれていない.

そこで, 以下で我々は各トレーダの意思決定が過去の履歴に反映され, 決定されるような, より現実に近い数理モデルを導入する. ここでは, この数理モデルで定義されるゲームのマクロな挙動を計算機を用いた簡単な数値シミュレーションで確かめてみた結果の一部を紹介したい.

7.5 市場の履歴をともなうマイノリティ・ゲーム

ここからはいよいよ, 市場の履歴が各トレーダの意思決定に反映するような繰り返しゲームとしてのマイノリティ・ゲームを導入する. 問題設定とその定式化がやや複雑なので, いつも以上に各

変数が何を意味しているのかに注意しながら, ときには変数に具体的な数字を当てはめながら読み進めて行くと良いであろう.

7.5.1 数理モデルによる定式化

先に 1 行の文章で定義した問題を式を用いて定義しておく. まず, 各トレーダ i : $(i = 1, \cdots, N)$ は各ゲーム・ラウンド l で自分の**入札価格** : $b_i(l) \in \Re$ を決める. ここでは入札価格 $b_i(l)$ は ± 1 の 2 値 ($+1$:「売り」, -1 :「買い」) をとるものとして考えるが, この 2 値 (± 1) を多値, もしくは連続する実数一般に拡張して考えても構わない. つまり, ここでの「入札」の解釈を「$b_i(l)$ が正のある値を取るならば, 繰り返しゲームのラウンド l でトレーダ i は商品を価格 b_i で売りたいと考えている」とするわけである. もちろん, 逆に入札価格 $b_i(l)$ が負であるならば, 「繰り返しゲームのラウンド l でトレーダ i は商品を価格 b_i で買いたいと考えている」ということになる. どちらを採用するかは, もちろん, どのような取引きを問題にするのかにも依存するし, このシステムの何に着目し, どのような物理量を観測したいのかにもよる[37]. このとき, 各トレーダからなるシステム全体の入札価格の総和を

$$A(l) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} b_i(l) \tag{7.1}$$

と定義しよう. この $1/\sqrt{N}$ のファクタは $A(l)$ が $\mathcal{O}(1)$ の量となるために付けた. この統計量 $A(l)$ が正の値を持つとき, 市場はそのラウンドで「売り超過」にあり, 逆にこの量が負の値を持つとき, 市場は「買い超過」にあることに注意しよう. 今の場合, N を奇数に選んだ関係で, 売り手数, 買い手数間の「タイ・ブレイク」はあり得ず, 必ず市場は「売り超過」か「買い超過」にある.

さて, 各トレーダはステップ l での自分の意思決定に際し, 過去の M ステップまで遡って定義される**情報ベクトル**:

$$\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z) \quad = \quad \begin{pmatrix} \mathrm{sgn}[(1-\zeta)A(l-1) + \zeta Z(l,1)] \\ \mathrm{sgn}[(1-\zeta)A(l-2) + \zeta Z(l,2)] \\ \cdots \\ \cdots \\ \mathrm{sgn}[(1-\zeta)A(l-M) + \zeta Z(l,M)] \end{pmatrix} \tag{7.2}$$

を用いる. ここに $Z(l, \lambda)$: $\lambda = 1, \cdots, M$ はホワイト・ノイズであり

$$\langle Z(l,\lambda) Z(l^{'}, \lambda^{'}) \rangle \quad = \quad \delta_{l,l'} \delta_{\lambda,\lambda'} \tag{7.3}$$

が成り立つ. 括弧 $\langle \cdots \rangle$ は Z の従う分布での平均を意味する. $\zeta = 1$ の場合には市場の履歴は実質的にノイズからの寄与だけしかなくなり, トレーダ達のとった行動をマクロに表す $A(l)$ の履歴情報 : $A(l-1), A(l-2), \cdots, A(l-M)$ はトレーダ達には見えなくなっている. 一方, $\zeta = 0$ の場合にはノイズはゼロであるから, この情報ベクトルはトレーダ達のとった行動が $A(l-1), A(l-2), \cdots, A(l-M)$ を介して反映されることになる. ζ は $0 \leq \zeta \leq 1$ の値をとるのだが, この値が 1 に近ければ近いほど, トレーダ達にとって利用可能な市場の情報はノイズに埋まってしまうことになる. 以下では簡単のため, この $\zeta = 0$ の場合につき, この情報ベクトルの意味するところを考えてみよう.

[37] これはこのゲーム理論によらず, 全ての現象の数理的モデル化において当てはまることである. また, 注目する物理量がこのような変数の選択に依存しない場合もある. それはモデルを導入した段階で予めわかる場合もあるし, 問題を解いた結果にわかる場合もある.

例えば, 過去に遡る M ステップでの $\mathrm{sgn}[A(l-\lambda)]$, $\lambda = 1, \cdots, M$ の値が全て $+1$ の場合, これをベクトルで書くと

$$\overline{\boldsymbol{\lambda}}(l, A, Z) \quad = \quad \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ \cdots \\ \cdots \\ +1 \\ +1 \end{pmatrix} \tag{7.4}$$

となるが, この情報ベクトルの意味することろは「過去 M ラウンドで市場は常に『売り超過』にあった」という事実である. この手の情報が各ラウンドで全てのトレーダに利用可能な情報として提示されることになる[38]. 情報ベクトル $\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z)$ の個数は, ベクトルの各成分が ± 1 の 2 値であるから $2 \cdot 2 \cdot 2 \cdots 2 = 2^M$ 個あり, 各トレーダは各ラウンドでこの中から一つ選択される情報ベクトル $\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z)$ を参照し, 自分の決定に役立てる. ところで, 各トレーダはどのように自分の行動を決定するのであろうか?

例えば, 上に見た特定のベクトル $\overline{\boldsymbol{\lambda}}$ がトレーダに提示された場合, 市場は過去 M ラウンドにおいて常に「売り超過」にあるわけであるから, この場合の「マイノリティ・グループ」は「買い」の行動をとった方であり, あるトレーダはこの情報ベクトルに対して「次も『売り超過』のはずだろうから自分は買おう (-1 を入札価格としよう)」と考えるかもしれないし, 別のトレーダは「次のラウンドあたりには市場は『買い超過』に転じるはずである」と状況を裏読みし, $+1$ を入札価格にするかもしれない. このように提示された情報ベクトルに対する各トレーダのとる行動はトレーダの思惑, つまり, 戦略に依存する. 今の場合, 各トレーダのアクションは「売る」か「買う」かの 2 通りしかないが, 便宜上, 提示された情報ベクトル $\boldsymbol{\lambda}$ に対し, S 通りの戦略が取れるものとし[39], 各ゲーム・ラウンド l においてトレーダ i 毎に定義される S 次元の**戦略ベクトル**:

$$\boldsymbol{R}^i_{\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} \quad = \quad (R^1_{\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)}, \cdots, R^S_{\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)}) \tag{7.5}$$

を考えよう. これは各トレーダ毎に可能な情報ベクトル $\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z)$ の数 $P = 2^M$ 個だけ保有されており, ベクトルの各成分は ± 1 をとり, ここで我々が考えている 2 値入札価格モデル $b_i(l) = \pm 1$ では, この成分値 $R^a_{\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} = \pm 1$ はそれぞれトレーダが「売る」か「買う」かに対応することになる. すると, 上で見た特定の情報ベクトル $\overline{\boldsymbol{\lambda}}$ に対し, トレーダ i は例えば $\boldsymbol{R}^i_{\overline{\boldsymbol{\lambda}}(l,A,Z)} = (1, -1, 1, \cdots, 1)$ という戦略ベクトルを持つことになり, 別の情報ベクトル $\underline{\boldsymbol{\lambda}}$ に対しては $\boldsymbol{R}^i_{\underline{\boldsymbol{\lambda}}(l,A,Z)} = (-1, -1, -1, \cdots, 1)$ を持っている. 従って, トレーダ i は各ラウンドで提示された情報ベクトル $\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z)$ に対応する戦略ベクトル $\boldsymbol{R}^i_{\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)}$ の S 個の成分の中から一つを選ぶことで, その成分値を次のラウンドにおける自分の行動 (「売る」か「買う」か) とする.

それでは, このシステム解析を実行していくにあたり, 各トレーダの戦略ベクトルの各成分 ± 1 をどのような値に選んだらよいでろうか?

この指針として, 実際に何人かの被験者にゲームの状況を説明したのちに戦略ベクトルを作成してもらっても良いが, システムのマクロな振る舞いを調べる限りはトレーダ数が十分に大きな場合において, 確率 1/2 で各成分 ± 1 を割り振ってもよいであろう. そこで, ここではそれらの成分を上

[38] 「売り超過」といっても, この数理モデルの場合, $A(l)$ の符号を各成分に持つベクトルを導入したので, 市場がどの程度「売り」に傾いているのかまではわからない. 例えば, 101 人のトレーダがいる場合, あるラウンドで買い手 1 人, 売り手 100 人でも「売り超過」だし, 買い手 50 人, 売り手 51 人でも「売り超過」である. 前者は意味のある「市場の反応」であろうが, 後者の場合はシステムが内在する「揺らぎ」である.

[39] ある戦略 A と戦略 B に対応するアクションが双方ともに「買い」でも構わないとする.

記の意味でランダムに割り振り, その値はゲームの開始前に与えられ, ゲームを通して固定された一定値をとるものとして話を進める[40]. 以上により, この情報ベクトルを可能な情報ベクトルの個数だけ縦に並べたものは

$$\boldsymbol{R}^i = \begin{pmatrix} R_1^{i1} & R_1^{i2} & \cdots & R_1^{iS} \\ R_2^{i1} & R_2^{i2} & \cdots & R_2^{iS} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ R_{2^M}^{i1} & R_{2^M}^{i2} & \cdots & R_{2^M}^{iS} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & -1 & \cdots & +1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ +1 & +1 & \cdots & +1 \end{pmatrix} \text{(各成分はクエンチ変数)} \tag{7.6}$$

のような $S \times 2^M$ のサイズの行列となり, ここではこれを**ルックアップ・テーブル**と呼ぶことにする.

以下では簡単のため, $S = 2$, すなわち, 各トレーダは $a = 1$ あるいは $a = 2$ の 2 つの戦略のうちの一つを各ラウンド l で選択し, 自分の行動を決定する状況を考え, システムの振る舞いを計算機実験によって調べていくことにしょう.

7.5.2　各トレーダの行動決定式

各トレーダはゲームの各ラウンド (ステップ) l で次の決定方程式に従って戦略 $a(= 1, 2)$ を選択した場合の**利得**：$p_{ia}(l)$ を更新する.

$$p_{ia}(l+1) = p_{ia}(l) - \frac{\tilde{\eta}}{\sqrt{N}} b_i(l) A(l), \quad b_i(l) = \sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} R_{\boldsymbol{\lambda}}^{i\tilde{a}_i(l)} \tag{7.7}$$

ここで, $\delta(x, y)$ はクロネッカ・デルタであり, $\tilde{\eta}$ は更新の重みで, ここでは簡単のため $\tilde{\eta} = 1$ として話を進めることにする. $\tilde{a}$ は次で与えられる「利得を最大化する」という意味での**最適戦略**である.

$$\tilde{a}_i(l) = \underset{a}{\operatorname{argmax}}[p_{ia}(l)] \tag{7.8}$$

クロネッカ・デルタの性質:

$$\sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} f(\boldsymbol{\lambda}) = f(\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z)) \tag{7.9}$$

から, $b_i(l)$ の値は, 各ラウンド l で選ばれた情報ベクトル $\boldsymbol{\lambda}(l, A, Z)$ に対し, 自分の所有するルックアップ・テーブルの中の該当戦略 $R_{\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)}^{i\tilde{a}_i(l)} \in \pm 1$ の値に相当する. 従って, この更新式は各ラウンドで自分の入札価格の符号 (つまり, 「売る」か「買う」か) と総入札価格 $A(l)$ が逆符号になるとき (つまり, 自分が少数派の選択を行った場合), その戦略に対して得られる利得 p_{ia} を増加させるという意味を持っている[41]. これは各トレーダにとって合理的な行動と言えるであろう.

このときの最適戦略とは, (7.7) で各ラウンドで自分の各戦略 (ここでは $a = 1, 2$) に対する利得が決まった際, その利得を最大とするような (今の 2 戦略系の場合には「最大とする方の」) 戦略が

[40] つまり,「クエンチする」わけである

[41] 先に「入札価格」という言葉を用いて各トレーダの提示する判断 (価格)：$b_i(l)$ を導入したが, 通常の「オークション」では各トレーダからの入札価格を参照し, 最も高い値で「買い」を出したトレーダがその商品を「落札」する. 従って, そこでの勝者は最終的に落札したトレーダであって, ここで考えている勝者であるところの「少数派」とは異なる. しかし, 我々がここで調べようとしている「総入札価格：$A(l)$」あるいはそれの「揺らぎ (ボラティリティ)」に注目する限りは勝者を一人選び出す必要はなく, その意味でこのマイノリティ・ゲームはオークションの一面をも合わせ持った数理モデルであると言うこともできる.

選ばれるということである. 従って, 各トレーダ i は各ステップ l で**更新式 (7.7) に従って, 自分の入札価格 $b_i(l)$ と多数派の判定 $A(l)$ が逆になるように, 自らの持つ各戦略 a に対する利得 p_{ia} を定め, これらを最大にするような最適戦略を (7.8) 式に従って決める, という一連の行動をとって行く**ことになる.

さて, いま我々は 2 つの戦略が選択できる場合を考えているわけであるから, 具体的には次の 2 本の方程式で $a = 1, 2$ それぞれの戦略の利得を決めて行くことになる.

$$p_{i1}(l+1) = p_{i1}(l) - \frac{\tilde{\eta}}{\sqrt{N}} \left(\sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} R^{i1}_{\boldsymbol{\lambda}} \right) A(l) \tag{7.10}$$

$$p_{i2}(l+1) = p_{i2}(l) - \frac{\tilde{\eta}}{\sqrt{N}} \left(\sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} R^{i2}_{\boldsymbol{\lambda}} \right) A(l) \tag{7.11}$$

そこで

$$q_i(l) = \frac{1}{2}(p_{i1}(l) - p_{i2}(l)) \tag{7.12}$$

で 2 つの戦略間の利得の差 $q_i(l)$ を定義し,

$$\xi^i_{\boldsymbol{\lambda}} = \frac{1}{2}(R^{i1}_{\boldsymbol{\lambda}} - R^{i2}_{\boldsymbol{\lambda}}) \tag{7.13}$$

とおくと, (7.10)(7.11) 式を辺々引くことにより

$$q_i(l+1) = q_i(l) - \frac{\tilde{\eta}}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} \xi^i_{\boldsymbol{\lambda}} A(l) \tag{7.14}$$

と $q_i(l)$ に関する更新式に書き直すことができる. この方程式 (7.14) をこのシステムを記述するための基本方程式の一つとしよう.

さて, 式 (7.14) は入札価格の総和 $A(l)$ を含むので, 我々は次にこれに関する更新式を求めることにする. まず, その定義より

$$A(l) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} b_i(l) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} R^{i\tilde{a}_i(l)}_{\boldsymbol{\lambda}} \tag{7.15}$$

であるから, 次で定義される新しい変数 $w^i_{\boldsymbol{\lambda}}$:

$$w^i_{\boldsymbol{\lambda}} = \frac{1}{2}(R^{i1}_{\boldsymbol{\lambda}} + R^{i2}_{\boldsymbol{\lambda}}) \tag{7.16}$$

を導入すると

$$R^{i\tilde{a}(l)}_{\boldsymbol{\lambda}} = w^i_{\boldsymbol{\lambda}} + \mathrm{sgn}[q_i(l)]\xi^i_{\boldsymbol{\lambda}} \tag{7.17}$$

が成り立つことに注意しょう. 実際, $q_i(l) > 0$, つまり, $p_{i1}(l) > p_{i2}(l)$ で戦略 1 が選ばれるならば, 式 (7.17) より, $R^{i\tilde{a}(l)}_{\boldsymbol{\lambda}} = R^{i1}_{\boldsymbol{\lambda}}$ となるし, 逆に, $q_i(l) < 0$, つまり, $p_{i2}(l) > p_{i1}(l)$ で戦略 2 が選ばれるならば, 式 (7.17) より, $R^{i\tilde{a}(l)}_{\boldsymbol{\lambda}} = R^{i2}_{\boldsymbol{\lambda}}$ でつじつまが合っている. 従って, 入札価格の総和 $A(l)$ に関する方程式は

$$A(l) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \sum_{\boldsymbol{\lambda}} \delta_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\lambda}(l,A,Z)} \left\{ w^i_{\boldsymbol{\lambda}} + \mathrm{sgn}[q_i(l)]\xi^i_{\boldsymbol{\lambda}} \right\} \tag{7.18}$$

となる. 従って, 我々がここで調べている市場履歴をともなったマイノリティ・ゲームのシステムは式 (7.14)(7.18) でミクロに記述されることになる. ここで強調しておきたいのは, この方程式

(7.14)(7.18) を良く見てみると, 個々のトレーダの利得決定方程式であるミクロな式 (7.14) の中には, マクロな量である総入札価格 $A(l)$ が現れており, 逆に, 市場のマクロな情報を担う総入札価格 $A(l)$ の方程式 (7.18) の中にはミクロな情報である個々のトレーダの利得 $q_i(l)$ (正確に言えば, 2 つの戦略による利得の差) が現れている. このことは, 我々が当初予想したように, **市場においてはミクロな情報とマクロな情報は無相関ではなく, 互いに絡み合っているという事実が, ここで導かれた決定方程式に反映されている**ことを意味する.

以上により, ここからの我々の目標は, これらのミクロな意思決定方程式を何らかの方法によって解析し, 市場のマクロな振る舞いをそこから導き出し, 様々な統計的性質を調べていくことである. その際の方法としては計算機による数値シミュレーションが有力である.

7.6 ボラティリティとその時間変化

我々はシステムの時間変化を式 (7.14)(7.18) から知ることになるが, どのような物理量に着目したら良いのであろうか？

$q_i(l)$, あるいはその符号を取った $\mathrm{sgn}[q_i(l)]$ はトレーダ i が時刻 l に $a = 1, 2$ どちらの戦略をとったかという情報であるから, この値そのもので言えば, $(1, -1, 1, -1, -1, \cdots, -1, \cdots)$, あるいは, この時間変化を各トレーダの採用した戦略の時系列パターンに直した $(1, 2, 1, 2, 2, \cdots, 2, \cdots)$ 等を表している. しかし, これはトレーダ個人の意思決定の時系列であり, その意味でミクロな量である. 従って, このような, ある特定のトレーダの挙動にのみ着目しても, システム全体のマクロな振る舞いは当然わからない. そこで, 統計力学的な考え方 — ミクロな構成要素の挙動にはふれないで, マクロに定義される量の変化を追う — という精神のもとに, まずは各エージェントからの入札価格の総和 $A(l)$ に着目し, これを有限のサイズの系 (ここでは $N = 1001$ とする) に対し, (7.14)(7.18) を計算機上でシミュレートすることにより調べてみよう.

7.6.1 総入札価格の時間変化

まずはそのダイナミックスが (7.18) 及び (7.14) で記述される総入札価格の時間変化を調べよう. このとき, この $A(l)$ の値が連続する 2 つの時刻間 $A(l)$,$A(l+1)$ でどのような分布をするのかをそれぞれ縦軸横軸に重ね打ちして調べてみよう. 結果を図 86 に示す. この図より, 遡った市場の履歴

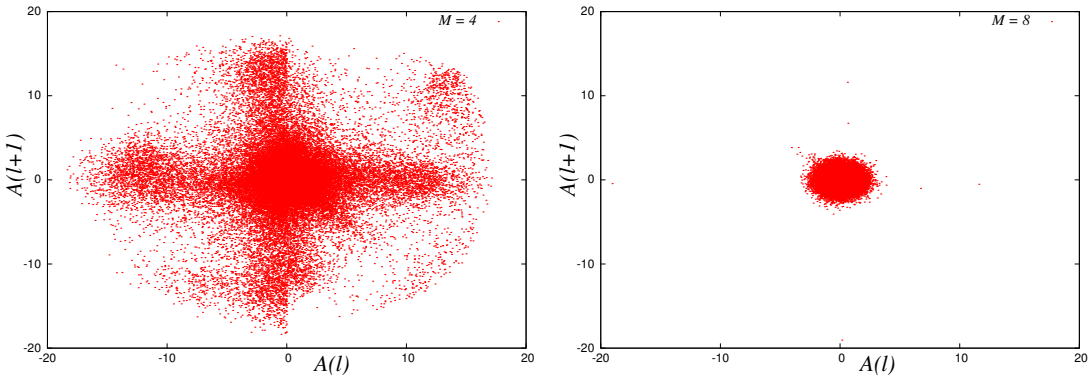


図 86: 総入札価格の連続する 2 ラウンド間隔の値 $A(l)$ と $A(l+1)$ のプロット. 左は $M = 4(P = 2^4 = 16)$, 右が $M = 8(P = 2^8 = 256)$. $\zeta = 0$ の real memory の場合. システムサイズは $N = 1001$.

数 M が比較的小さい場合 ($M=4$) には, この図 86 の左図より, $A(l)$-$A(l+1)$ のプロットはかなり広範囲に分散したものになる. 一方, 用いることのできる履歴数 M が多くなり, $M=8$ となるとこの広がりは小さくなっている (右図参照). 従って, 明らかに総入札価格 $A(l)$ のばらつきはトレーダの用いることのできる履歴数 M に依存する. 「市場の安定性」という観点から見ると, ここでの結果より, 各トレーダが市場の履歴をより長い過去まで遡って利用できるシステムの方が, 市場全体としては安定化する傾向があると言える.

7.6.2 ボラティリティ — 総入札価格の揺らぎ —

図 86 の結果から, 我々が着目すべきなのは総入札価格それ自体の時間変化ではなく, その「揺らぎ」であることがわかった. つまり, 我々は次の量:

$$\sigma^2(L) = \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{l} A(l)^2 - \left\{\frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} A(l)\right\}^2 \tag{7.19}$$

で総入札価格の「揺らぎ」を定義し, これをラウンド L まで累積した量とし, L の関数として調べてみようというわけである. この量 σ^2 を経済学 (金融工学) では**ボラティリティ**と呼んでいる[42]. このボラティリティはここで示したような, ある金融商品の不安定性を示す量であり, ボラティリティが大きい商品に対して各トレーダは大きく勝つ場合もあるけれども, 何しろ価格の揺らぎが大きいので, ひどく負けるケースもかなりの頻度で現れ, 商品の取引き自体がギャンブル的要素を持つようになる. 図 87 にボラティリティの時間変化を示した. 左は real memory ($\zeta=0$) の場合で右が fake

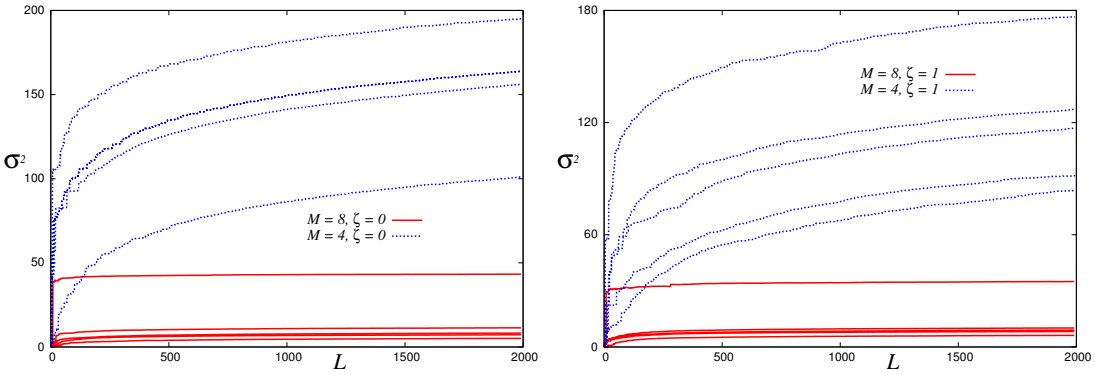


図 87: ボラティリティの時間変化. 左は real memory ($\zeta=0$) の場合で右が fake memory ($\zeta=1$) の場合. $M=4(P=2^4=16)$, 及び, $M=8(P=2^8=256)$ に対してプロットしてある. 異なる線は異なる情報ベクトル, 初期値に対応している. システムサイズ (トレーダ数) は $N=1001$.

memory ($\zeta=1$) の場合に対応する. それぞれ $M=4(P=2^4=16)$, 及び, $M=8(P=2^8=256)$ に対してプロットしてあるのだが, 明らかに遡る履歴数が大きい場合の方がボラティリティは小さい. この傾向は不思議なことに, real memory ($\zeta=0$) でも fake memory ($\zeta=1$) でも変わらない. ちなみに, 同じ M の値で異なる線は異なる情報ベクトル, 初期値などの「データ」に対応している. 従って, 遡る履歴数が少ない場合にはデータによるばらつきも大きい. ところで, 履歴を過去まで遡って利用すればするほどボラティリティを小さく押さえること, 言い方をかえれば, 市場を安定

[42] 通常, ボラティリティσ^2 とは $\sigma^2(L)$ でラウンド数 L を無限大にした極限で定義される. しかし, ここではこの量が定常状態へ向かうプロセスにも興味があるので, $\sigma^2(L)$ と σ^2 をともにボラティリティと呼ぶことにする.

化させることができるであろうか? 直観的にその予想は正しそうではあるが, この問い具体的に答えるために, 次節ではボラティリティの履歴数 M 依存性について調べてみよう.

7.7 ボラティリティの履歴数依存性

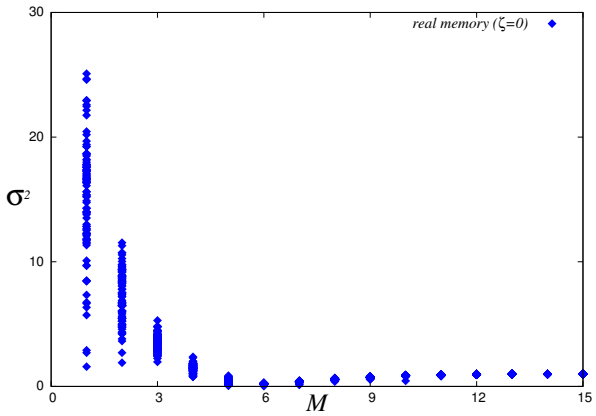


図 88: ボラティリティの履歴数 M 依存性. real memory ($\zeta = 0$) の場合.

図 88 に real memory ($\zeta = 0$) の場合のボラティリティ:

$$\sigma^2 \quad = \quad \lim_{L\to\infty} \sigma^2(L) \tag{7.20}$$

の履歴数 M 依存性をプロットした. この図より, **ボラティリティを最小化するような最適な履歴数 M が存在する**ことがわかる[43]. また, 意外なことに, この依存性は real memory($\zeta = 0$) でも fake memory($\zeta = 1$) でも変わらない.

以上で市場の履歴をともなったマイノリティ・ゲームに関し, 計算機シミュレーションによりわかってきているごく一部を紹介した. 計算機シミュレーションは有限サイズのシステム (これらの実験ではいずれも $N = 1001$ 程度) を扱うため, 各種の統計誤差は考慮しなければならない. ここに示した結果は市場で公に開示される履歴情報が総入札価格の安定性— 市場の安定性 — に及ぼす影響を調べるための有益な指針, より数学的/解析的に調べていくための動機づけを与えるものと位置づけられる. もちろん, 実際の市場では公開される各商品の価格変動に対し, 各トレーダが「売り」「買い」のマイノリティ・グループへ属することを目標として行動するわけではないし, また, 各ラウンドで提示される情報も「売り」「買い」の 2 値化された符号ではなく, 直前の数ラウンドからどの程度入札価格が上がったか下がったか, などの変動幅それ自体である場合が多い[44]. 例えば, 図 89 はここで得られた総入札価格 $A(l)$ とその符号 $\mathrm{sgn}[A(l)]$ の時間変化を表しているが, 明らかに総入札価格の変動幅そのものの情報を含む左図の方がトレーダの意思決定に対して有益であるように思われる. また, ここでゲームの開始から終了まで固定した各トレーダの戦略ベクトルも, 変化の時間スケールは緩やかではあるけれども時間的に変化する (各トレーダの市場情報から

[43] つまり, ネット上に公開する株価をコンピュータ上に蓄積された過去数年にわたる履歴まで遡って顧客に提示する場合, 「その履歴が長ければ長いほど価格が安定化する」ということは言えないことになる.

[44] 例えば Google 検索で「株価 ソニー」と打ち込むとソニーの株価が表示されるが, 多くのトレーダは株価の上がり下がりの 2 値化された情報に基づき行動するのではなく,「株価自体がどれくらいの幅で上がり続けているか (あるいは逆に下がり続けているか)」という, 中・短期間にわたる「トレンド」を参考にする場合が多いのではないだろうか.

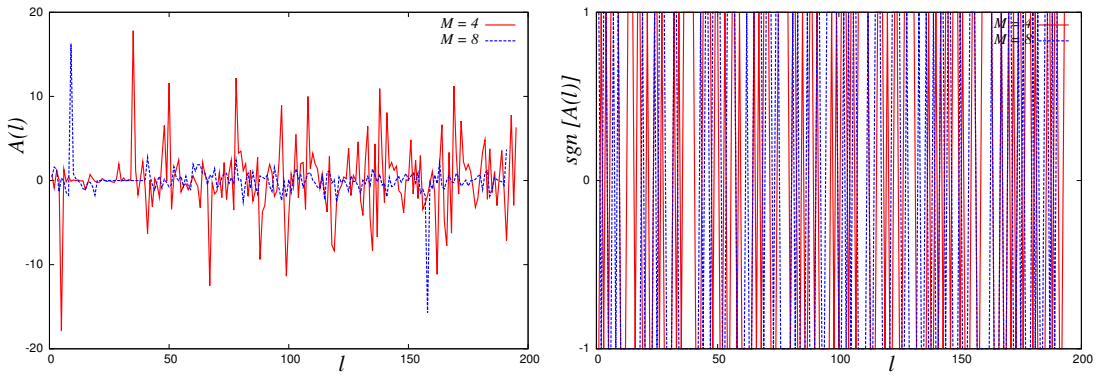


図 89: 総入札価格 $A(l)$ の時間変化 (左) と総入札価格の符号 $\mathrm{sgn}[A(l)]$ の時間変化 (右).

の「学習効果」により変化する) と考えた方が, より現実の状況に近いかもしれない. しかし, そのような場合でもここで紹介したゲームを逐次改良, 拡張することにより, そうした状況を反映した数理モデルの振る舞いを計算機実験などで解析することで, トレーダの動きである「ミクロ」から市場の振る舞いである「マクロ」な性質を調べていくことは可能であるように思われる.

7.8 母関数の方法による時間発展の厳密解

ここまで主に計算機シミュレーションを用いてマイノリティ・ゲームのダイナミックスについて調べてきた. しかし, 扱う数理モデルを可能な限りシンプルにし, 数学的に厳密な結果を得ておくことは, どのような対象に取り組む際にも重要であろう. そこで, ここでは市場履歴をトレーダ群が参照できない場合に関し, 母関数の経路積分表示による解析により, 数ステップ目までの時間発展が厳密に追跡できることを見ておこう.

7.8.1 解析にあたってのセットアップ

既に述べたように, 市場の履歴を考慮しない場合, 状態ベクトル $\boldsymbol{\lambda}_{l,A,Z}$ は市場のマクロな情報 $\{A, Z\}$ に依存せず, ゲームのラウンド l にのみ依存するので, $\boldsymbol{\lambda}_{l,A,Z} = \boldsymbol{\lambda}_l$, $|\boldsymbol{\lambda}_l| = P$ であり, トレーダ i の参照するルックアップ・テーブルは

$$\boldsymbol{R}^i = \begin{pmatrix} R_1^{i1} & R_1^{i2} & \cdots & R_1^{iS} \\ R_2^{i1} & R_2^{i2} & \cdots & R_2^{iS} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ R_P^{i1} & R_P^{i2} & \cdots & R_P^{iS} \end{pmatrix} \tag{7.21}$$

と書けることに注意しよう. この各成分 $R_\mu^{ia(l)}$ はランダムに ± 1 をとり, ゲームの開始時に固定される. また, ゲームの繰り返しの過程で全てのトレーダは各ラウンドにおいて参照可能な $\mu \in \{1, \cdots, P = \alpha N\}$ 個の情報のなかの一つを共有し (ルックアップ・テーブルの特定の一行を選ぶ), 対応する戦略ベクトルの S 個の成分のなかから最適な戦略を選ぶことで, そのラウンド

での自分の行動を決める．以下では簡単のため, 戦略数が $S = 2$ の場合を考えよう．このとき, $\boldsymbol{R}^{i1} = (R_1^{i1}, R_2^{i1}, \cdots, R_P^{i1})^\dagger, \boldsymbol{R}^{i2} = (R_1^{i2}, R_2^{i2}, \cdots, R_P^{i2})^\dagger$ に対し[45],

$$\boldsymbol{\omega}^i = \frac{1}{2}(\boldsymbol{R}^{i1} + \boldsymbol{R}^{i2}) \tag{7.22}$$

$$\boldsymbol{\xi}^i = \frac{1}{2}(\boldsymbol{R}^{i1} - \boldsymbol{R}^{i2}) \tag{7.23}$$

で定義すると, ラウンド l での最適戦略 $\tilde{a}(l) = \arg\max_a p_{ia}(l)$ に対する戦略ベクトルは

$$R^{i\tilde{a}(l)} = \boldsymbol{\omega}^i + \mathrm{sgn}[q_i(l)]\boldsymbol{\xi}^i \tag{7.24}$$

$$q_i(l) = \frac{1}{2}(p_{i1}(l) - p_{i2}(l)) \tag{7.25}$$

と書けるので, 総入札価格が $A(l) = (1/\sqrt{N})\sum_i b_i(l) = (1/\sqrt{N})\sum_i R_\mu^{i\tilde{a}(l)}$ となることに注意してラウンド l でトレーダ群が情報 μ を共有した場合の利得の更新式:

$$p_{i1}(l+1) = p_{i1}(l) - R_\mu^{i1}A(l) \tag{7.26}$$

$$p_{i2}(l+1) = p_{i2}(l) - R_\mu^{i2}A(l) \tag{7.27}$$

の辺々の差をとることにより,

$$q_i(l+1) = q_i(l) - \xi_\mu^i\left[\Omega_\mu + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j \xi_\mu^j s_j(l)\right] \tag{7.28}$$

$$\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i \boldsymbol{\omega}^i, \quad s_i(l) = \mathrm{sgn}[q_i(l)] \tag{7.29}$$

が得られるが, N ラウンド後に利得差 q_i に $\mathcal{O}(1)$ の変化が現れるように時間スケールを l から t へと変えよう. 具体的には

$$J_{ij} \equiv \frac{2(\boldsymbol{\xi}^i \cdot \boldsymbol{\xi}^j)}{N} = \frac{2}{N}\sum_{\mu=1}^{P}\xi_\mu^i\xi_\mu^j \tag{7.30}$$

$$h_i \equiv \frac{2(\boldsymbol{\xi}^i \cdot \boldsymbol{\Omega})}{\sqrt{N}} = \frac{2}{\sqrt{N}}\sum_{\mu=1}^{P}\xi_\mu^i\Omega_\mu \tag{7.31}$$

に対し, (7.28) 式を書き直した

$$q_i(t+1) = q_i(t) - h_i - \sum_j J_{ij}s_j(t) \tag{7.32}$$

が今後の解析で中心となるミクロな状態 $\boldsymbol{q}$ の方程式となる．以下では母関数の経路積分表示により, システムの時間発展の様子が相関関数や応答関数などのマクロな量で厳密に書けることを段階的に示していく.

まずは, 時刻 t にシステムのミクロな状態を表す利得差ベクトルが $\boldsymbol{q} = (q_1, \cdots, q_N)$ をとる確率を $P_t(\boldsymbol{q})$ とすると, この確率は $P_{t+1}(\boldsymbol{q})$ と遷移確率 (行列) $W(\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}')$ を介し, 次のチャップマン-コルモゴロフ方程式で結ばれることに注意する.

$$P_{t+1}(\boldsymbol{q}) = \int d\boldsymbol{q}' W(\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}')p_t(\boldsymbol{q}') \tag{7.33}$$

[45] † は「転置」を表すものとする.

今の場合, ミクロな状態 $\boldsymbol{q}$ の更新式が (7.32) 式で '決定論的' に (確率 1 で) 与えられることから, 遷移確率 (行列) はデルタ関数を用いて

$$W(\boldsymbol{q}|\boldsymbol{q}^{'}) = \prod_{i=1}^{N} \delta\left(q_i - q_i^{'} + h_i + \sum_j J_{ij} s_j^{'}\right) = \int \frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^N} \, \mathrm{e}^{i\sum_{i=1}^{N} \hat{q}_i (q_i - q_i^{'} + h_i + \sum_j J_{ij} s_j^{'})} \tag{7.34}$$

と書ける. ここに $d\boldsymbol{q} \equiv dq_1 dq_2 \cdots dq_N$ であり, プライム付きのミクロな状態を $q_i^{'} = q_i(t)$, プライム無しの状態を一単位時刻後の状態 $q_i = q_i(t+1)$ で略記していることに注意されたい. また, 第 1 行目から第 2 行目への変形ではデルタ関数のフーリエ変換表示を用いている.

7.8.2 母関数の経路積分表示

ここで, このシステムの母関数を次で定義する.

$$Z[\boldsymbol{\psi}] = \int \prod_t [d\boldsymbol{q}(t) W(\boldsymbol{q}(t+1)|\boldsymbol{q}(t))] P_0(\boldsymbol{q}(0))] \, \mathrm{e}^{i\sum_{t,i} \psi_i(t) q_i(t)} \equiv \left\langle \mathrm{e}^{i\sum_t \sum_i \psi_i(t) q_i(t)} \right\rangle \tag{7.35}$$

$$\boldsymbol{\psi} = (\psi_1(t), \psi_2(t), \cdots, \psi_N(t)) \tag{7.36}$$

上記は変数 $i\psi_i(t)$ で微分するごとに, 利得差 $q_i(t)$ の任意の次数のモーメントを算出することができることから, **母関数**と呼ばれる. ここで $\langle \cdots \rangle$ は利得差の状態ベクトル $\boldsymbol{q}$ についての汎関数 $(\cdots)$ (今の場合には $\mathrm{e}^{i\sum_t \sum_i \psi_i(t) q_i(t)}$) を初期状態 $\boldsymbol{q}(0)$ から出発する時空間上の一本の経路: $\boldsymbol{q}(0) \to \boldsymbol{q}(1) \to \cdots \to \boldsymbol{q}(t)$ ごとの重み

$$P_t(\boldsymbol{q}(t)) = W(\boldsymbol{q}(t)|\boldsymbol{q}(t-1)) W(\boldsymbol{q}(t-1)|\boldsymbol{q}(t-2)) \times \cdots \times W(\boldsymbol{q}(1)|\boldsymbol{q}(0)) P_0(\boldsymbol{q}(0)) \tag{7.37}$$

をつけて平均することを意味し, 母関数の上記表現を**経路積分表示**と呼んでいる. 自明ではあるが, 後に用いる事実:

$$Z[\boldsymbol{\psi} = 0] = \langle \mathrm{e}^0 \rangle = \langle 1 \rangle = 1 \tag{7.38}$$

に注意して次に進もう.

7.8.3 母関数の戦略ベクトルに関する配位平均

上で定義した母関数は (7.30)(7.31) 式, および, (7.22)(7.23) 式を介して, ゲームの開始時に固定された戦略ベクトル $\boldsymbol{R}^{i1}, \boldsymbol{R}^{i2}$ に依存する. 従って, 戦略ベクトルの選び方によらない形でこのシステムのダイナミックスを議論するためには, 上記の母関数 $Z[\boldsymbol{\psi}]$ をこれら変数に関して平均しなければならない. この平均 $\overline{Z[\boldsymbol{\psi}]}$ は母関数 $Z[\boldsymbol{\psi}]$ を

$$\begin{aligned} Z[\boldsymbol{\psi}] &= \int \mathcal{D}\boldsymbol{w} \, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{w}} \, \mathcal{D}\boldsymbol{x} \, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{x}} \, \mathrm{e}^{i\sum_{t,\mu}[\hat{w}_t^\mu w_t^\mu + \hat{x}_t^\mu x_t^\mu + w_t^\mu (2\Omega_\mu + x_t^\mu)] \int \mathcal{D}\boldsymbol{q} \, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{q}} \, P_0(\boldsymbol{q}(0))} \\ &\times \mathrm{e}^{\frac{-2i}{\sqrt{N}} \sum_{i,\mu} \xi_\mu^i \sum_t [\hat{w}_t^\mu \hat{q}_i(t) + \hat{x}_t^\mu s_i(t)] + i\sum_{i,t}\{\hat{q}_i(t)[q_i(t+1) - q_i(t) - \theta_i(t)] + \psi_i(t) q_i(t)\}} \end{aligned} \tag{7.39}$$

と書き直すことで, ξ_μ^i, Ω_μ についての平均操作 ((7.22)(7.23)(7.29) 式参照) が具体的に実行できる. ここでは後の計算の便宜上, 変数 w_t^μ, x_t^μ を

$$w_t^\mu = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_i \hat{q}_i(t) \xi_\mu^i \tag{7.40}$$

$$x_t^\mu = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_i s_i(t) \xi_\mu^i \tag{7.41}$$

として定義し, これらを恒等式:

$$\int dw_t^\mu \delta\left(w_t^\mu - \frac{2}{\sqrt{N}}\sum_i \hat{q}_i^t \xi_\mu^i\right) = \int \frac{d\hat{w}_t^\mu dw_t^\mu}{2\pi}\, \mathrm{e}^{i\hat{w}_t^\mu (w_t^\mu - \frac{2}{\sqrt{N}}\sum_i \hat{q}_i^t \xi_\mu^i)} = 1 \tag{7.42}$$

を用いて $Z[\boldsymbol{\psi}]$ に取り込んだ ((7.42) の左辺をかけ合せることで '1' をかけた). また, このときの積分測度を $\mathcal{D}\boldsymbol{q} \equiv \prod_{i,t} dq_i(t)/\sqrt{2\pi}, \mathcal{D}\boldsymbol{w} \equiv \prod_{\mu,t} dw_t^\mu/\sqrt{2\pi}$, および, $\mathcal{D}\boldsymbol{x} \equiv \prod_{\mu,t} dx_t^\mu/\sqrt{2\pi}$ 等で定義した[46]. また, $\theta_i(t)$ はこの母関数のこの変数による微分操作により, $\hat{q}_i(t)$ の任意の次数のモーメントを算出できるために付加した項であり, 計算の終局でゼロと置くことになる. あとは具体的に戦略ベクトルについての平均操作を行うだけである.

母関数 $Z[\boldsymbol{\psi}]$ の表示の中から注意深く戦略ベクトルを含む部分をピックアップすると

$$\prod_{i,\mu} \mathrm{e}^{\frac{2i}{\sqrt{N}}\sum_t \{w_t^\mu (R^{i1}+R^{i2}) - (R^{i1}-R^{i2})[\hat{t}^\mu \hat{q}_i(t) + \hat{x}_t^\mu s_i(t)]\}}$$

のみが戦略ベクトルに依存することがわかるので, これを R^{i1}, R^{i2} がそれぞれ確率 1/2 で独立に ± 1 をとる確率分布で平均すればよい. ここでは 平均をとるべき変数は全て指数関数の肩 (有効ラグランジアン) に現れるので, レプリカ法等によらず, 厳密に遂行することができる. トレーダ数 N が十分大きな場合に成り立つ恒等式:

$$\exp\left[N \log\cos\left(\frac{\delta}{\sqrt{N}}\right)\right] = \mathrm{e}^{-\frac{\delta^2}{2} + \mathcal{O}(N^{-1})}$$

に注意すれば, 直ちに次が得られる.

$$\overline{Z[\boldsymbol{\psi}]} = \int \mathcal{D}\boldsymbol{C}\, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{C}}\, \mathcal{D}\boldsymbol{K}\, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{K}}\, \mathcal{D}\boldsymbol{L}\, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{L}}\, \mathrm{e}^{N[\Psi+\Phi+\Omega] + \mathcal{O}(N^0)} \tag{7.43}$$

ここに関数 Ψ, Φ, Ω はそれぞれ次で定義される.

$$\Psi = \sum_{tt'} (\hat{C}_{tt'} C_{tt} + \hat{K}_{tt'} K_{tt'} + \hat{L}_{tt'} L_{tt'}) \tag{7.44}$$

$$\Phi = \alpha \log\left[\int \mathcal{D}\boldsymbol{w}\, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{w}}\, \mathcal{D}\boldsymbol{x}\, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{x}}\, \mathrm{e}^{i\sum_t (\hat{w}_r w_t + \hat{x}_t x_t + w_t x_t) - \frac{1}{2}\sum_{tt'} (w_t w_{t'} + \hat{w}_t L_{tt'} \hat{w}_{t'} + 2\hat{x}_t K_{tt'} \hat{w}_{t'} + \hat{x}_t C_{tt'} \hat{x}_{t'})}\right]$$

(α は $\alpha = P/N$ で定義されたことに注意) (7.45)

$$\Omega = \log\left[\int \mathcal{D}\boldsymbol{q}\, \mathcal{D}\hat{\boldsymbol{q}}\, P_0(\boldsymbol{q}(0))\, \mathrm{e}^{i\sum_t \hat{q}(t)(q(t+1)-q(t)-\theta(t)) + i\sum_t \psi_i(t) q(t) - i\sum_{tt'} [s(t)\hat{C}_{tt'} s(t') + s(t)\hat{K}_{tt'} \hat{q}(t') + \hat{q}(t)\hat{L}_{tt'} \hat{q}(t')]}\right]$$

(ここで外場 $\theta_i(t)$ の i 依存性を落とした) (7.46)

平均操作によってトレーダのインデックス i ごとに指数関数が積の形で分離され, 結果として上記の式中に i は現れないことに注意しょう. また, ここでは $C_{tt'}, K_{tt'}, L_{tt'}$ を

$$C_{tt'} = \frac{1}{N}\sum_i s_i(t) s_i(t') \tag{7.47}$$

$$K_{tt'} = \frac{1}{N}\sum_i s_i(t) \hat{q}_i(t') \tag{7.48}$$

$$L_{tt'} = \frac{1}{N}\sum_i \hat{q}_i(t) \hat{q}_i(t') \tag{7.49}$$

[46] それぞれに共役な変数 $\hat{\boldsymbol{q}}, \hat{\boldsymbol{w}}, \hat{\boldsymbol{x}}$ についての積分測度もそれぞれ同様に定義する. また, ここでは $\mathcal{D}\boldsymbol{q}$ はガウス積分の測度でないことに注意.

でそれぞれ定義し, 恒等式:

$$\int dC_{tt'}\,\delta\left(C_{tt'}-\frac{1}{N}\sum_i s_i(t)s_i(t')\right)=\int\frac{dC_{tt'}d\hat{C}_{tt'}}{2\pi}\mathrm{e}^{i\hat{C}_{tt'}\left(C_{tt'}-\frac{1}{N}\sum_i s_i(t)s_i(t')\right)}=1 \tag{7.50}$$

等を用いて $\overline{Z[\boldsymbol{\psi}]}$ にとりこんだ ((7.50) の左辺をかけ合せることで '1' をかけた). また, $\mathcal{D}C_{tt'}\equiv\prod_{tt'}dC_{tt'}/\sqrt{2\pi}$ 等で積分測度を定義してあることにも注意しておく.

さて, トレーダ数 $N\to\infty$ の極限で $\overline{Z[\boldsymbol{\psi}]}$ をその鞍点で評価しよう. $\partial(\Phi+\Psi+\Omega)/\partial\hat{C}_{tt'}=0$ 等の単純な微分操作により, 直ちに

$$C_{tt'} = \langle s(t)s(t')\rangle_* \tag{7.51}$$

$$K_{tt'} = \langle s(t)\hat{q}(t')\rangle_* = -i\frac{\partial\langle s(t)\rangle_*}{\partial\theta(t')}\equiv -iG_{tt'} \tag{7.52}$$

$$L_{tt'} = \langle\hat{q}(t)\hat{q}(t')\rangle_* \tag{7.53}$$

$$\langle\cdots\rangle_* \equiv \frac{\int\mathcal{D}q\mathcal{M}[\{q,\hat{q}\}](\cdots)}{\int\mathcal{D}q\mathcal{M}[\{q,\hat{q}\}]} \tag{7.54}$$

$$\mathcal{M}[\{q,\hat{q}\}]\equiv P_0(q(0))\,\mathrm{e}^{-i\sum_{tt'}s(t)\hat{C}_{tt'}s(t')}\int\mathcal{D}\hat{q}\,\mathrm{e}^{-i\sum_{tt'}\hat{q}(t)\hat{C}_{tt'}\hat{q}(t')+i\sum_t\hat{q}(t)[q(t+1)-q(t)-\theta(t)-\sum_{tt'}\hat{K}_{tt'}s(t')]} \tag{7.55}$$

の各々が得られる. ここに現れる $C_{tt'}$ は**相関関数**, $G_{tt'}$ は**応答関数**と呼ばれる物理量である. また, $\langle\hat{q}(t)\hat{q}(t')\rangle_*=\partial^2\overline{Z[\boldsymbol{\psi}=0]}/\partial\theta(t)\partial\theta(t')$ であることに注意し, $\overline{Z[\boldsymbol{\psi}=0]}=Z[\boldsymbol{\psi}=0]=1$ であったことを思い出すと ((7.38) 式参照), $\langle\hat{q}(t)\hat{q}(t')\rangle_*=0$, すなわち

$$L_{tt'} = 0 \tag{7.56}$$

であることがわかる.

さて, 相関関数と応答関数についての計算を進めるためには, $\mathcal{M}[\{q,\hat{q}\}]$ の中に含まれる $\hat{C}_{tt'},\hat{K}_{tt'},\hat{L}_{tt'}$ を求めなければならないが, これらは, 鞍点方程式により

$$\hat{C}_{tt'} = i\frac{\partial\Phi}{\partial C_{tt'}} \tag{7.57}$$

$$\hat{K}_{tt'} = i\frac{\partial\Phi}{\partial K_{tt'}} \tag{7.58}$$

$$\hat{L}_{tt'} = i\frac{\partial\Phi}{\partial L_{tt'}} \tag{7.59}$$

において $C_{tt'},K_{tt'},L_{tt'}$ と関係を持つから, 汎関数 Φ の評価をさらに進める必要がある. そこで, 以下では (7.57)(7.58)(7.59) 式を評価するために Φ を簡略化することを考えよう.

7.8.4 汎関数 Φ の簡略化と鞍点方程式

ここで問題となる Φ を指数の肩が w_t についての 2 次形式になるように

$$\Phi=\alpha\log\int\mathcal{D}w\mathcal{D}\hat{w}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{tt'}w_t[\mathbf{1}+\boldsymbol{C}]_{tt'}w_{t'}-\sum_{tt'}[\mathbf{1}-i\boldsymbol{K}]_{tt'}\hat{w}_{t'}w_t-\frac{1}{2}\sum_{tt'}\hat{w}_tL_{tt'}\hat{w}_{t'}} \tag{7.60}$$

と書き直し, $\mathcal{D}w = \prod_t dw_t/\sqrt{2\pi}$ に関するガウス積分を実行すると, $L_{tt'} \to 0$ に注意して

$$
\begin{aligned}
\Phi &= \alpha \log \int \mathcal{D}\hat{w} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{tt'} \hat{w}_t L_{tt'} \hat{w}_{t'}}}{\det\sqrt{[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{tt'} \hat{w}_t [(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]_{tt'} \hat{w}_{t'}} \\
&- \frac{\alpha}{2}\left(\log\det \boldsymbol{D} + \log\det[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]\right) \\
&= \alpha \log \int \mathcal{D}\hat{w} \frac{1 - \frac{1}{2}\sum_{tt'} \hat{w}_t L_{tt'} \hat{w}_{t'} + \mathcal{O}(L^2)}{\det\sqrt{[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{tt'} \hat{w}_t [(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]_{tt'} \hat{w}_{t'}} \\
&- \frac{\alpha}{2}\left(\log\det \boldsymbol{D} + \log\det[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]\right) \\
&= \alpha \log \left\{ 1 - \frac{1}{2}\sum_{tt'} L_{tt'} \int \mathcal{D}\hat{w} \frac{\hat{w}_t \hat{w}_{t'} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sum_{tt'} \hat{w}_t [(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]_{tt'} \hat{w}_{t'}}}{\det\sqrt{[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]}} \right\} \\
&- \frac{\alpha}{2}\mathrm{tr}\log[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})] + \mathcal{O}(L^2)
\end{aligned}
\tag{7.61}
$$

が得られるが, 最後に $\mathcal{D}\hat{w} \equiv \prod_t \hat{w}_t/\sqrt{2\pi}$ に関するガウス積分を実行し, 任意の行列 $\boldsymbol{U}$ に関する恒等式: $\log\det \boldsymbol{U} = \mathrm{tr}\log \boldsymbol{U}$ に注意すれば, 汎関数 Φ は

$$
\Phi = -\alpha\,\mathrm{tr}\log(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}) - \frac{\alpha}{2}\sum_{tt'} L_{tt'} [(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^\dagger \boldsymbol{D}^{-1}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})]^{-1}_{tt'} \tag{7.62}
$$

のように簡略化される.

従って, 鞍点方程式 (7.57)(7.58)(7.59) は任意の行列 $\boldsymbol{U}$ に対して $\partial\,\mathrm{tr}\log \boldsymbol{U}/\partial U_{tt'} = (\boldsymbol{U}^{-1})_{t't}$ が成り立つことに注意して

$$
\begin{aligned}
\hat{C}_{tt'} &= 0 && (7.63)\\
\hat{K}_{tt'} &= -\alpha(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}_{t't} && (7.64)\\
\hat{L}_{tt'} &= -\frac{i\alpha}{2}[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1} D (\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1}]_{tt'} && (7.65)
\end{aligned}
$$

となる.

7.8.5 有効シングル・トレーダ方程式への縮約

$\hat{C}_{tt'}, \hat{K}_{tt'}, \hat{L}_{tt'}$ を具体的に求めることができたので, (7.51)(7.52) 式で相関関数, 応答関数を求めるための平均操作 $\langle\cdots\rangle_*$ に関する密度 $M[\{q,\hat{q}\}]$ を相関関数, 応答関数の関数として書くことができ, 従って, これらマクロな動的関数について閉じた方程式が得られることになる. 具体的に (7.63)(7.64)(7.65) 式を (7.55) に代入すると

$$
\begin{aligned}
\mathcal{M}[\{q,\hat{q}\}] &= P_0(q(0)) \int \mathcal{D}\hat{q}\, \mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{2}\sum_{tt'} \hat{q}(t)[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{D}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1}]_{tt'} \hat{q}(t) + i\sum_t \hat{q}(t)[q(t+1)-q(t)-\theta(t)+\alpha\sum_{t'}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}_{tt'} s(t')]} \\
&= P_0(q(0)) \int \prod_t \frac{d\eta(t)}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{D}\hat{q}\, \mathrm{e}^{i\sqrt{\alpha}\sum_t \hat{q}(t)\eta(t)}\, \mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{2}\sum_{tt'} \hat{q}(t)[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{D}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1}]_{tt'} \hat{q}(t)} \\
&\times\ \mathrm{e}^{-i\sqrt{\alpha}\sum_t \hat{q}(t)\eta(t) + i\sum_t \hat{q}(t)[q(t+1)-q(t)-\theta(t)+\alpha\sum_{t'}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}_{tt'} s(t')]}
\end{aligned}
\tag{7.66}
$$

が得られるが, $\mathcal{D}\hat{q} \equiv \prod_t d\hat{q}(t)/\sqrt{2\pi}$ についてのガウス積分を実行すると

$$\begin{aligned}\mathcal{M}[\{q,\hat{q}\}] &= P_0(q(0)) \int \prod_t \frac{d\eta(t)}{\sqrt{2\pi}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{2}\sum_{tt'}\eta(t)[(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{D}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1}]_{tt'}\eta(t')}}{\sqrt{\det(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{D}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1}}} \\ &\times \prod_{t\geq 0}\delta\left[q(t+1)-q(t)-\theta(t)+\alpha\sum_{t'}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}_{tt'}s(t')-\sqrt{\alpha}\,\eta(t)\right] \qquad (7.67)\end{aligned}$$

が得られる. $s(t) = \mathrm{sgn}[q(t)]$ であったことを思い出すと, この式からトレーダ群の典型的な振る舞いはトレーダ数 N が無限大の極限で, 実質的に利得差に関する次の有効シングル・トレーダ方程式:

$$q(t+1) = q(t) + \theta(t) - \alpha\sum_{t\geq t'}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}_{tt'}\mathrm{sgn}[q(t')] + \sqrt{\alpha}\eta(t) \qquad (7.68)$$

に従うことがわかる. ここで, $\eta(t)$ は (7.68) 式から明らかに平均ゼロ, 分散共分散行列が

$$\langle\eta(t)\eta(t')\rangle = [(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{D}(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1}]_{tt'} \equiv \Sigma_{tt'} \qquad (7.69)$$

で与えられる正規雑音である.

7.8.6 数ステップ目までの厳密解

ここまでで数ステップ目までの厳密解を求まるための準備ができたので, 具体的にそれを計算してみよう. その際, もう一度, (7.52) 式で与えられた応答関数を見てみると

$$G_{tt'} = \frac{\partial}{\partial\theta(t')}\langle s(t)\rangle_* \qquad (7.70)$$

であるから, この関数は時刻 t' における外場 $\theta(t)$ の変化に対する, 時刻 t での物理量 $\langle s(t)\rangle_*$ を介してのシステムの応答を表している. 従って, システムの応答は外場の変化より先に来てはいけないという '因果律' (未来の出来事が過去に影響を及ぼしてはいけない) を考慮すると, 常に

$$G_{tt'} = 0 \quad (t' > t) \qquad (7.71)$$

が成り立たなければならない. 以下この事実を用いて計算を進めよう.

まず, (7.69) 式で与えられる分散共分散行列 $\Sigma_{tt'}$ の評価を行う. 行列に関する恒等式:

$$(\mathbf{1}+\boldsymbol{G})^{-1} = \sum_{n\geq 0}(-1)^n\boldsymbol{G}^n \qquad (7.72)$$

$$(\mathbf{1}+\boldsymbol{G}^\dagger)^{-1} = \sum_{n'\geq 0}(-1)^{n'}(\boldsymbol{G}^\dagger)^{n'} \qquad (7.73)$$

に注意すると, $\Sigma_{tt'}$ は

$$\Sigma_{tt'} = \sum_{n\geq 0}\sum_{n'\geq 0}(-1)^{n+n'}\sum_{s,s'}[\boldsymbol{G}^n]_{ts}[\boldsymbol{D}]_{ss'}[\boldsymbol{G}^{n'}]_{t's'} \qquad (7.74)$$

と書き直すことができる. また, 因果律の要請より $[\boldsymbol{G}^n]_{ts} = 0$ $(s > t-n)$, $[\boldsymbol{G}^{n'}]_{t's'} = 0$ $(s' > t'-n')$ であるから, $\Sigma_{tt'}$ への非ゼロの寄与のみ考えて

$$\Sigma_{tt'} = \sum_{n\geq 0}\sum_{n'\geq 0}(-1)^{n+n'}\sum_{s=0}^{t-n}\sum_{s'=0}^{t'-n'}[\boldsymbol{G}]_{ts}[\boldsymbol{D}]_{ss'}[\boldsymbol{G}]_{t's'} \qquad (7.75)$$

が成り立つ. この式を用いて $\Sigma_{00}, \Sigma_{10}, \Sigma_{11}$ を具体的に計算して行くと, $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{1} + \boldsymbol{C}$ であったことを思い出し, 相関関数の定義より $[\boldsymbol{C}]_{tt} = C_{tt} = \langle s(t)^2 \rangle_* = \langle \mathrm{sgn}[q(t)]^2 \rangle_* = \langle 1 \rangle_* = 1$ に注意して

$$\Sigma_{00} = (-1)^{0+0}[\boldsymbol{G}]_{00}[\boldsymbol{D}]_{00}[\boldsymbol{G}]_{00} = [\boldsymbol{D}]_{00} = [\boldsymbol{1} + \boldsymbol{C}]_{00} = 2 \tag{7.76}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_{10} &= (-1)^0 \sum_{s=0}^{1} [\boldsymbol{G}^0]_{1s}[\boldsymbol{D}]_{s0}[\boldsymbol{G}^0]_{00} + (-1)^1 \sum_{s=0}^{0} [\boldsymbol{G}^1]_{1s}[\boldsymbol{D}]_{s0}[\boldsymbol{G}^0]_{00} \\
&= [\boldsymbol{1}]_{10}[\boldsymbol{D}]_{00}[\boldsymbol{G}]_{00} + [\boldsymbol{1}]_{11}[\boldsymbol{D}]_{10}[\boldsymbol{1}]_{00} - [\boldsymbol{G}]_{10}[\boldsymbol{D}]_{00}[\boldsymbol{1}]_{00} = [\boldsymbol{D}]_{10} - [\boldsymbol{G}]_{10}[\boldsymbol{D}]_{00} \\
&= [\boldsymbol{1} + \boldsymbol{C}]_{10} - 2[\boldsymbol{G}]_{10} \\
&= 1 + C_{10} - 2G_{10}
\end{aligned} \tag{7.77}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_{11} &= (-1)^0 \sum_{s=0}^{1} \sum_{s'=0}^{1} [\boldsymbol{G}^0]_{1s}[\boldsymbol{D}]_{ss'}[\boldsymbol{G}^0]_{1s'} + (-1)^1 \sum_{s=0}^{0} \sum_{s'=0}^{1} [\boldsymbol{G}]_{1s}[\boldsymbol{D}]_{ss'}[\boldsymbol{G}^0]_{1s'} \\
&+ (-1)^0 \sum_{s=0}^{1} \sum_{s'=0}^{0} [\boldsymbol{G}^0]_{1s}[\boldsymbol{D}]_{ss'}[\boldsymbol{G}]_{1s'} + (-1)^2 \sum_{s=0}^{0} \sum_{s'=0}^{0} [\boldsymbol{G}]_{1s}[\boldsymbol{D}]_{ss'}[\boldsymbol{G}]_{1s'} \\
&= [\boldsymbol{D}]_{11} - [\boldsymbol{G}]_{10}[\boldsymbol{D}]_{01} - [\boldsymbol{D}]_{10}[\boldsymbol{G}]_{10} + [\boldsymbol{G}]_{10}[\boldsymbol{D}]_{00}[\boldsymbol{G}]_{10} \\
&= 2 - 2G_{10}(1 + C_{10}) + 2(G_{10})^2
\end{aligned} \tag{7.78}$$

が得られる. 一方, 有効シングル・トレーダ方程式 (7.68) は因果律を考慮すると

$$q(t+1) = q(t) + \theta(t) - \alpha \sum_{t \geq t'} \sum_{n=0}^{t-t'} (-1)^n [\boldsymbol{G}]_{tt'} \mathrm{sgn}[q(t')] + \sqrt{\alpha}\,\eta(t) \tag{7.79}$$

と書き直すことができるので, $t = 1, 2$ に対して

$$q(1) = q(0) + \theta(0) + \sqrt{\alpha}\,\eta(0) - \alpha\,\mathrm{sgn}[q(0)] \tag{7.80}$$

$$\begin{aligned}
q(2) &= q(1) + \theta(1) - \alpha \sum_{n=0}^{1} (-1)^n [\boldsymbol{G}]_{10} \mathrm{sgn}[q(0)] - \alpha \sum_{n=0}^{0} (-1)^n [\boldsymbol{G}]_{11} \mathrm{sgn}[q(1)] + \sqrt{\alpha}\,\eta(1) \\
&= q(0) + \theta(0) + \sqrt{\alpha}\,\eta(0) + \theta(0) - \alpha\,\mathrm{sgn}[q(0)] - \alpha G_{10}\,\mathrm{sgn}[q(0)] \\
&- \mathrm{sgn}[q(0) - \theta(0) + \sqrt{\alpha}\,\eta(0) - \alpha\,\mathrm{sgn}[q(0)]]
\end{aligned} \tag{7.81}$$

が得られる.

さて, 相関関数と応答関数 C_{10}, G_{10} を求めるためには, (7.67) で与えられる密度関数に対する期待値 (7.54) を計算しなければならない. しかし, C_{10} は (7.80) 式より, $s(0)s(1) = \mathrm{sgn}[q(0)]\mathrm{sgn}[q(1)] = \mathrm{sgn}[q(0)]\mathrm{sgn}[q(0) + \theta(0) + \sqrt{\alpha}\,\eta(0) - \alpha\,\mathrm{sgn}[q(0)]]$ であるから, $\eta(0)$ のみの積分で済み, 簡単のため初期条件を $q(0) > 0$ に選んで具体的に書き下すと

$$\begin{aligned}
C_{10} &= \langle s(0)s(1) \rangle_* \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta(0)}{\sqrt{2\pi\Sigma_{00}}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\eta(0)^2}{2\Sigma_{00}}} \mathrm{sgn}[q(0)]\mathrm{sgn}[q(0) + \theta(0) + \sqrt{\alpha}\,\eta(0) - \alpha\,\mathrm{sgn}[q(0)]] \\
&= 2H\left(\frac{\alpha - q(0) - \theta(0)}{\sqrt{2\alpha}}\right) - 1
\end{aligned} \tag{7.82}$$

が得られる．ここに $\Sigma_{00}=2$ を用いた．また，ここで用いた関数 $H(x)$ は

$$H(x) \equiv \int_x^\infty \frac{dz}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \tag{7.83}$$

で定義される誤差関数である．従って，応答関数 G_{10} は $q(0)>0$ の初期条件のもとで

$$\begin{aligned} G_{10} &= \frac{\partial}{\partial\theta(0)}\langle \mathrm{sgn}[q(1)]\rangle_* \\ &= \frac{\partial}{\partial\theta(0)}\langle \mathrm{sgn}[q(0)+\theta(0)+\sqrt{\alpha}\,\eta(0)-\alpha]\rangle_* \\ &= \frac{\partial}{\partial\theta(0)}C_{10} = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{(\alpha-q(0)-\theta(0))^2}{2\alpha}}}{\sqrt{\pi\alpha}} \end{aligned} \tag{7.84}$$

のように計算される．また，簡単な計算により，ボラティリティは $\sigma_t^2=\overline{\langle (A(t)-\langle A(t)\rangle)^2\rangle}=(1/2)\Sigma_{tt}$ と書けるので，$0,1$ ステップ後のボラティリティは $\sigma_0^2=1,\sigma_1^2=(1/2)\Sigma_{11}$ である．

ここまで長い道のりではあったが，以上をまとめると，数ステップ目までの厳密解は

$$C_{00} = 2 \tag{7.85}$$

$$C_{10} = 2H\left(\frac{\alpha-q(0)}{\sqrt{2\alpha}}\right)-1 \tag{7.86}$$

$$G_{10} = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{(\alpha-q(0))^2}{2\alpha}}}{\sqrt{\pi\alpha}} \tag{7.87}$$

$$q(1) = q(0)+\sqrt{\alpha}\,\eta(0)-\alpha \tag{7.88}$$

$$q(2) = q(0)+\sqrt{\alpha}\,(\eta(0)+\eta(1))-\alpha+\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{(\alpha-q(0))^2}{2\alpha}}-\alpha\,\mathrm{sgn}[q(0)+\sqrt{\alpha}\,\eta(0)-\alpha] \tag{7.89}$$

$$\sigma_0^2 = 1 \tag{7.90}$$

$$\sigma_1^2 = 1-G_{10}(1+C_{10})+(G_{10})^2 \tag{7.91}$$

で与えられる．ただし，外場を $\theta(0)=\theta(1)=0$ と置いたことに注意されたい．相関関数 C_{10}，応答

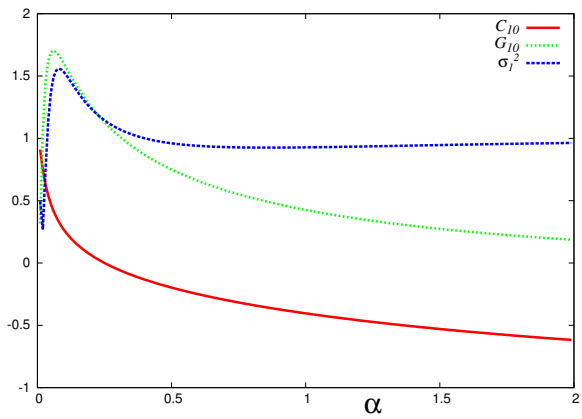


図 90: 相関関数 C_{10}，応答関数 G_{10}，ボラティリティ σ_1^2 の α 依存性．$q(0)=0.25>0$ に選んだ．

関数 G_{10}，ボラティリティ σ_1^2 の α 依存性を図 90 に示す．

なお, さらにこの解析を進めて, これ以降の発展方程式を陽に導出するためには, 相関関数 $C_{tt'}$ や応答関数 $G_{tt'}$ に反映される長い時間相関をも含む様々な相関を取り込んで (7.54)(7.67) 式で期待値 $\langle\cdots\rangle_*$ を計算し, それらの相関/応答関数, 利得差 $q(t)$ 等を自己無矛盾な形で決定していかなければならない. このような相関/応答関数等の個数はステップ数の増加とともに急激に増加するので, 厳密解を求めることが非常に困難になる.

そのような模型の改良の際に我々の指針となるべきなのは, やはり, 実際の金融データである. 経済学が実証的科学である以上, そのような実データの存在を無視することはできない. よって, マクロな市場の情報を担う金融データそのものの解析も, 経済現象を説明する数理モデルを提案し, それに基づく理論を構築していく上でとても重要になる. そこで次回からはそのような金融データの一つである, 為替レートの変動を確率過程にみたて, その統計的性質を調べていくためのいくつかの方法, 道具立てについて解説していくことにしよう.

8　金融データと確率過程

ここでは為替レートなどの金融時系列データを確率過程として扱い, それを人工的に再現するような確率モデル, その確率モデルを特徴つける基本的な統計量について学ぶ. 前節のゲーム理論 (マイノリティ・ゲーム) で述べたように, この種のレート変動をミクロな立場から説明することが我々の最終的な目標であるが, レート変動の時系列の統計的性質を詳細に調べることによっても有益なマクロ情報を得ることができる. 例えば, 図 91 はある確率モデルを用いて為替レート (例えば 1 ド

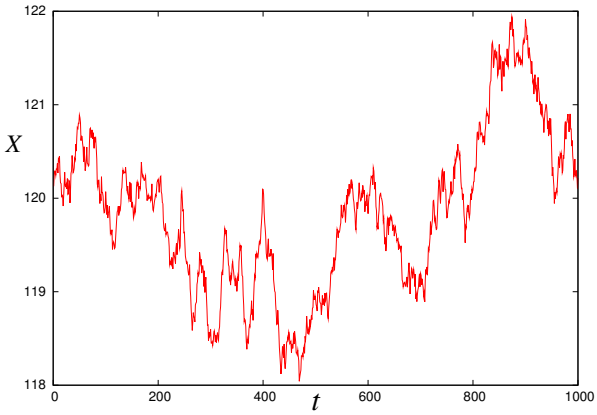


図 91: 確率モデルによって人工的に生成した為替レート変動

ル当たり何円になるかという値段) の時系列: X_t を計算機上で人工的に生成したものであるが, 具体的には, このレート変動が例えばソニー銀行の円ドル為替レートの時系列をよく再現しているか否か, というのがここでの問題になる. その際, 我々が考えなければならないのは, 確率モデルの生成する時系列と実データの何を比較したらよいのか, その観点で両者の差が大きい場合には確率モデルの何を修正したらよいのか, またそのような確率モデルの適切な候補に対して, 工学的にどのような応用が考えられるかということなどである.

そこで, ここからは, そうした金融データの確率モデル化を考える際に必要となる確率過程の復習をしておくことにする. その際, あまり数学的に厳密な議論に踏み込むことはせず, 主に計算機を用いた数値実験を通じて直観的な理解を深めることを目指す. 時間があれば各節で説明されている例を自分でプログラミングを行うことにより確認しながら読み進めていくと理解が深まるものと思われるし, そうされることを期待している.

8.1　確率モデルとその統計的性質

さて, 図 91 に載せた為替レートがどのような確率モデルから生成されたものなのかを調べるために, 時刻 t でのレート X_t と次の時刻でのレート X_{t+1} の差を**リターン**として

$$Y_t \equiv X_{t+1} - X_t \tag{8.1}$$

で定義しよう. このとき, X_t が確率的に変動するならば, Y_t も確率変数であるはずなので, ここでのレート変動は (8.1) 式を書き直した漸化式: $X_{t+1} = X_t + Y_t$ で与えられ, 直前のレートの値に Y_t なる「ノイズ」が加わったものとして逐次生成されるものとする. 各時刻で直前のレート値に加わ

るノイズ Y_t が各時刻で独立に同一の確率分布から生成されているものと仮定すれば, Y_t の統計的性質を調べるにはこの量 Y_t を $t=0$ から $t=20000$ 程度まで観測し, そのヒストグラムを取ってみればよい. 具体的には図 91 を与えるデータ:

```
1 120.074612
2 120.178779
3 120.180312
4 120.130503
...........
.........
.......
```

に対し, $Y_1 = 120.178779 - 120.074612 = -0.567341$ などを算出し[47], Y に関するヒストグラムを作成する. その結果を図 92 に載せよう. この図の実線がそのヒストグラムである. ただし, ここで

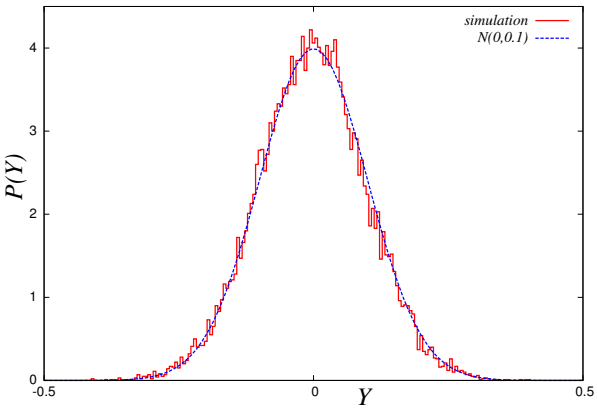


図 92: リターン Y のヒストグラム. 実線は標準偏差 $\sigma = 0.1$ の正規分布.

はこのヒストグラムを確率分布にするために適当な規格化を施していることに注意されたい. 一方, 図中の実線は標準偏差が $\sigma = 0.1$ の正規分布である. この図から明らかに両者は良く一致していることがわかる. 従って, 図 91 で人工的金融データ X_t は次の確率モデルから生成されたものであることがわかる[48]

$$X_{t+1} = X_t + Y_t, \quad P(Y_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{Y_t^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma = 0.1 \text{ (時間によらない一定値)} \tag{8.2}$$

このとき (8.2) 式は N ステップ後のレートの値 X_N として次のように書き直すことができることに注意しょう.

$$X_N = \sum_{t=0}^{N-1} Y_t \tag{8.3}$$

[47] このデータの第 1 列はレートが変動した時刻を表す. この場合, 一定間隔ごとにレートが変動するが, 実際の金融データではこの様にならない場合が多い.

[48] ここでは人工的にそのような確率モデルでレート変動を生成したので, この一致は当然である. 実際の金融データでは, 後にみるように (8.1) 式の妥当性, 各時刻での分布の独立性, 同一性などを吟味しながら実データを説明する確率モデルを組み立てなければならない.

ここで, 簡単のため, 初期条件として $X_0 = 0$ としたことに注意されたい. また, ここでの解 X_N 自身も確率変数になっていることも注意しなければならない. よって, 確率変数 X_N の統計的性質, つまり, X_N の従う分布がわかれば図 91 に示した人工的為替レートの様々な統計量を計算することができる. そこで, まずはこの X_N の平均値と分散を計算してみよう. まず平均値は

$$E[X_N] = E\left[\sum_{t=0}^{N} Y_t\right] = E[Y_0] + E[Y_1] + \cdots E[Y_{N-1}] = 0 \tag{8.4}$$

となる. ここに $E[\cdots]$ は確率変数 $\cdots$ の平均を意味する. また分散は平均値がゼロであったことを考慮すると

$$E[X_N^2] = E\left[\sum_{k=0}^{N-1}\sum_{l=0}^{N-1} Y_k Y_l\right] = \sum_{k=0}^{N-1} E[Y_k^2] + 2\sum_{k=0}^{N-1}\sum_{l\neq k} E[Y_k]E[Y_l] = N\sigma^2 \equiv \sigma_N^2 \tag{8.5}$$

となる. 従って, 確率変数 X_N は平均ゼロ, 分散 $\sigma_N^2 = N\sigma^2$ を持つことになる. すなわち, X はその平均値からステップ数の平方根 $\sim \sqrt{N}$ で離れていくというランダムウォークとして良く知られた結果が得られる. ここで述べた確率過程 (特にその連続時間版) は**ウイナー過程**と呼ばれている.

8.1.1 中心極限定理 — 正規分布への収束 —

中心極限定理によれば, 確率変数 X_N をここで得られた標準偏差 σ_N で割ったもの

$$Z_N \equiv \frac{X_N}{\sigma_N} = \frac{Y_0 + Y_1 + \cdots + Y_{N-1}}{\sqrt{N}\sigma} \tag{8.6}$$

は $N \to \infty$ で平均ゼロ, 分散 1 の正規分布 $\mathcal{N}(0,1)$ に従う. つまり,

$$P_G(Z_\infty) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{Z_\infty^2}{2}\right) \tag{8.7}$$

である. ここで N を「ステップ数」とみなすと, 確率変数 Z_N の従う分布はステップ数とともに

$$P(Z_1) \to P(Z_2) \to P(Z_3) \to \cdots \to P(Z_N) \to \cdots \to P_G(Z_\infty) \tag{8.8}$$

のように正規分布に収束する. ここで考えた例では (8.6) 式右辺の和を構成する各 Y_t の従う分布は平均ゼロ, 分散標準偏差 σ の正規分布であったが, 中心極限定理によれば, Y_t が有限の分散を持つならば, (8.6) 式で定義される確率変数 Z_N は $N \to \infty$ の極限で正規分布へと収束することが知られている.

例えば, Y_t の従う分布を定数 c を有限値として

$$P(Y_t) = \frac{1}{2}\delta(Y_t - c) + \frac{1}{2}\delta(Y_t + c) \tag{8.9}$$

と置けば, この確率変数の平均はゼロ. 分散を評価すると

$$E[Y_t^2] = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(Y_t - c)\, Y_t^2 dY_t + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(Y_t + c)\, Y_t^2 dY_t = c^2 < \infty \tag{8.10}$$

であるから有限値を持つ. よって, この Y_t による確率変数 Z_N は N の増加とともに平均値ゼロ, 分散 1 の正規分布 $\mathcal{N}(0,1)$ へと近づいていくはずである. これを実際に計算機による数値実験で確かめてみよう. 図 93 より, 明らかに N の増加とともに Z_N の従う分布は正規分布 $\mathcal{N}(0,1)$ に近づいていくことがわかる. また, これをもう少し明示的に見るために, 分布の「時間発展」の様子を 3 次元的にプロットしたものを図 93(下図) に載せておく.

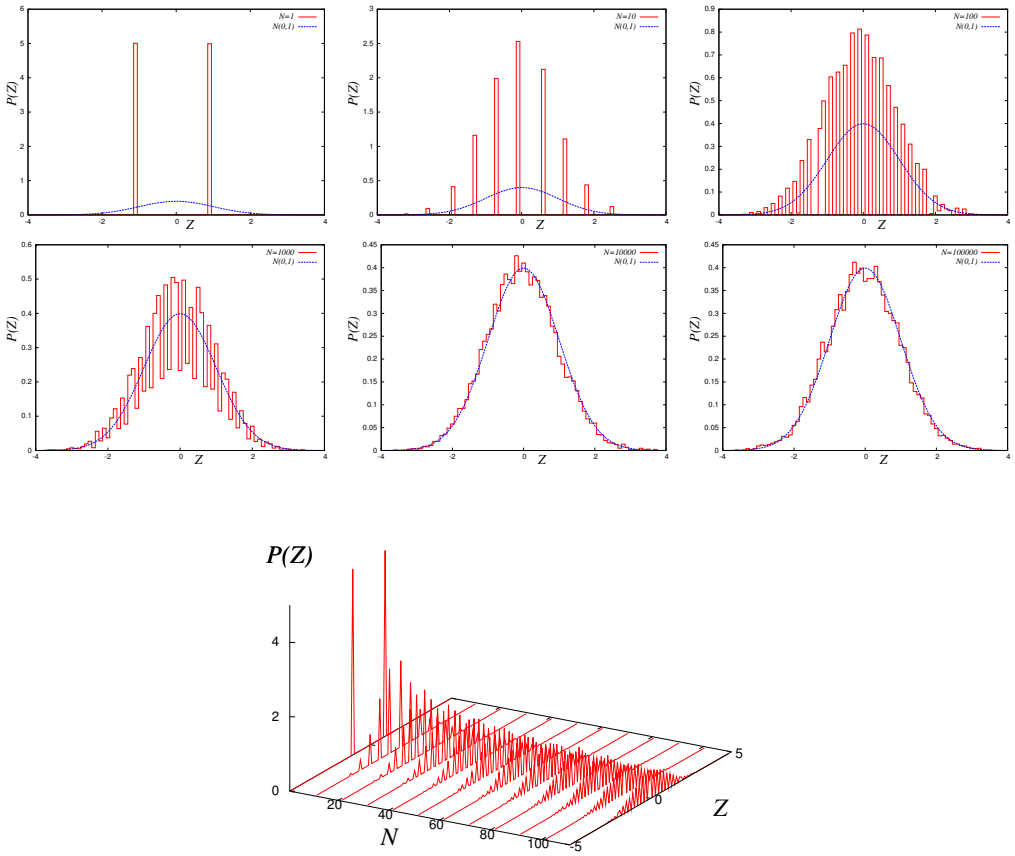


図 93: $P(Y_t) = (1/2)\,\delta(Y_t - c) + (1/2)\,\delta(Y_t + c)$ に従う確率変数 Y_t で構成された Z_N の従う分布が N の増加とともに正規分布 $\mathcal{N}(0,1)$ へと近づく様子. ここでは $c = 0.01$ に選んでおり, ヒストグラムの作成では各 10000 回のサンプリングを行っている. $N = 10000$ と $N = 100000$ のヒストグラムがほとんど変わらないのは $N = 10000$ 程度で実質的に正規分布へと収束したため. 下は確率分布 $P(Z_N)$ の「時間発展」の様子.

8.2 安定分布

前節では有限分散を持つ確率変数の和が要素数の増加とともに $P(Z_1)\cdots P_G(Z_\infty)$ のように正規分布に収束することをみた. この考察を拡張して, ある確率分布 (分散が有限とは限らない) に従う確率変数の和の従う確率分布を考えてみる.

例えば, $x = X_1$ と $x = X_2$ の従う確率分布をそれぞれ $f(x)$, $g(x)$ とすると, この確率変数 X_1, X_2 の和 $X = X_1 + X_2$ の従う分布は

$$P_2(X) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} dt f(X-t)g(t) = f * g \tag{8.11}$$

のように関数の畳み込みの形で書ける. よって, 畳み込み積分のフーリエ変換はそれぞれの関数のフーリエ変換の積で書けたことを思い出すと, (8.11) 式両辺にフーリエ変換を施すことで

$$\phi_2(q) \quad = \quad \hat{f}(q)\hat{g}(q) \tag{8.12}$$

が得られる．ここに

$$\phi_2(q) = \int_{-\infty}^{\infty} P_2(X)\,\mathrm{e}^{iqX}dX \tag{8.13}$$

$$\hat{f}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\mathrm{e}^{iqx}dx, \quad \hat{g}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\,\mathrm{e}^{iqx}dx \tag{8.14}$$

と定義したことに注意されたい．従って, X_1, X_2 の従う確率分布が同一の $P(x)$ であるならば, つまり, 定義域全体で $f(x) = g(x) = P(x)$ ならば, 式 (8.12) を

$$\phi_2(q) = \{\phi(q)\}^2, \quad \phi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x)\mathrm{e}^{iqx}dx \tag{8.15}$$

と書き直すことができる．これを一般化し, 確率変数 $X_1, X_2, \cdots, X_N$ の従う分布が同一の $P(x)$ であるならば, $X = X_1 + X_2 + \cdots + X_N$ の従う分布 $P_N(X)$ のフーリエ変換 $\phi_N(q)$ は $P(x)$ のフーリエ変換 $\phi(q)$ と

$$\phi_N(q) = \{\phi(q)\}^N \tag{8.16}$$

の関係で結ばれることになる．

ところで, 先に言及した「中心極限定理」もここでみたフーリエ変換の性質を使うことで証明することができる．学部の復習になると思われるが, 折角なのでここでもう一辺確認しておこう．今,

$$y \equiv \frac{x_1 + \cdots + x_N}{\sqrt{N}} \tag{8.17}$$

なる確率変数の分布 $P(y)$ のフーリエ変換 (これは通常「特性関数」と呼ばれる) を考えると, (8.16) 式と同様の議論で

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{iqy}P(y)dy = \left\{\phi\left(\frac{q}{\sqrt{N}}\right)\right\}^N, \ \phi(q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{iqx}P(x)dx \tag{8.18}$$

が導かれる．また, $P(x)$ が平均ゼロ, 分散 $\int_{-\infty}^{\infty} x^2P(x)dx = \sigma^2$ が有限 ($\sigma^2 \ll N$) で, N が十分大きいならば, $\mathrm{e}^{iqx/\sqrt{N}}$ をテーラー展開してから項別に積分していくことで $\mathcal{O}(1/N)$ の項まで残すと

$$\phi\left(\frac{k}{\sqrt{N}}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\frac{qx}{\sqrt{N}}}P(x)dx = 1 - \frac{q^2\sigma^2}{2N} \tag{8.19}$$

が得られる．よって

$$\left\{\phi\left(\frac{q}{\sqrt{N}}\right)\right\}^N = \left(1 - \frac{q^2\sigma^2}{2N}\right)^N = \mathrm{e}^{-\frac{q\sigma^2}{2}} \tag{8.20}$$

となる．ここで, よく知られた極限公式:

$$\lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{X}{N}\right)^N = \mathrm{e}^{-X} \tag{8.21}$$

を用いた．これはすぐ後にみる (8.23) 式より正規分布のフーリエ変換である．従って, 確率変数 y は平均ゼロ, 分散 σ^2 の正規分布に従うことになる．

さて, ϕ_N の逆フーリエ変換:

$$P_N(X) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \phi_N(q)\,\mathrm{e}^{-iqX}dq \tag{8.22}$$

によって得られる分布 $P_N(X)$ の関数形が $P(x)$ と同一の場合, この分布 $P(x)$ を**安定分布**と呼ぶ.

8.2.1 正規分布とローレンツ分布の安定性

以下ではいくつかの安定分布について見ていく.

(1) $P(x)$ **が正規分布の場合**
これは前節で見たように有限の分散を持つ確率分布であるから, ウイナー過程の N ステップ後の確率変数 $X = X_1 + \cdots + X_N$ の従う確率分布 $P_N(X)$ も同じ正規分布を持つはずであり, 安定分布であることがわかる. しかし, 以下では本節での議論に従い, この事実を明示的に示してみる. 正規分布 $\mathcal{N}(0,\sigma)$ のフーリエ変換は $\gamma \equiv \sigma^2/2$ として

$$\phi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \mathrm{e}^{iqx} = \mathrm{e}^{-\gamma q^2} \tag{8.23}$$

で与えられる. 従って, $\phi_N(q) = \{\phi(q)\}^N = \mathrm{e}^{-N\gamma q^2}$ であるから, この逆フーリエ変換は

$$P_N(X) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-N\gamma q^2} \mathrm{e}^{-iqX} dq = \frac{1}{\sqrt{2\pi N}\sigma} \exp\left(-\frac{X^2}{4N\sigma^2}\right) \tag{8.24}$$

となる. よって, $P_N(X)$ の関数形は $P(x)$ と同じガウス関数であるから正規分布は安定分布であることがわかる.

(2) $P(x)$ **がローレンツ分布の場合**
和 $X = X_1 + \cdots + X_N$ の各要素: $X_1, X_2, \cdots, X_N$ の従う分布 $P(x)$ が

$$P(x) = \frac{\gamma}{\pi}\frac{1}{\gamma^2 + x^2} \tag{8.25}$$

で定義されるローレンツ分布の場合, そのフーリエ変換は

$$\phi(q) = \frac{\gamma}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{iqx}}{\gamma^2 + x^2} dx = \mathrm{e}^{-\gamma|q|} \tag{8.26}$$

となる[49]. 従って, $\phi_N(q) = \mathrm{e}^{-N\gamma|q|}$ であるから, これの逆フーリエ変換を計算してみると

$$P_N(X) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-N\gamma|q|} \mathrm{e}^{-iqX} dq = \frac{N\gamma}{\pi}\frac{1}{(N\gamma)^2 + X^2} \tag{8.27}$$

が得られる[50]. 明らかにこれは $P(x)$ と同じローレンツ関数である. よって, ローレンツ分布は安定分布であることがわかる.

8.2.2 レビ分布とレビ過程

正規分布とローレンツ分布がともに安定分布であることがわかった. また, それぞれの分布のフーリエ変換 — **特性関数** — は $\mathrm{e}^{-\gamma q^2}, \mathrm{e}^{-\gamma|q|}$ で与えられた. このとき, 一変数 α を用いて正規, ローレンツの両者を含む形でこれらの特性関数を拡張した

$$\phi(q) = \mathrm{e}^{-\gamma|q|^\alpha} \tag{8.28}$$

[49] 応用数学の復習になると思うが, この場合には複素数に拡張して積分すると良い. 被積分関数: $\mathrm{e}^{iqz}/(z+i\gamma)(z-i\gamma)$ の特異点が $z = \pm i\gamma$ であるから, そのうちの一つ $i\gamma$ を含む複素平面上の半径 R の半円と実軸上の $[-R, R]$ をつなげた経路でこの関数を積分すると, この経路内の留数が $\mathrm{Res}(i\gamma) = \lim_{z\to i\gamma}(z-i\gamma)\mathrm{e}^{iqz}/(z+i\gamma)(z-i\gamma) = \mathrm{e}^{-\gamma|q|}/2i\gamma$ となるから, コーシーの積分定理を使って $\phi(q) = (\gamma/\pi)2\pi i\,\mathrm{Res}(i\gamma) = \mathrm{e}^{-\gamma|q|}$ が得られる.

[50] $\mathrm{e}^{-iqX} = \cos(qX) - i\sin(qX)$ と展開して各々部分積分.

を考えてみたい．ここで, $\alpha = 2$ で正規分布, $\alpha = 1$ でローレンツ分布が復元できることに注意しょう．このとき, この特性関数が与える分布 $P_L(X)$ がどのような分布であるかを見るために, この特性関数の逆フーリエ変換を求めてみると

$$P_L(X) \quad = \quad \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dq\, \mathrm{e}^{-\gamma|q|^\alpha}\, \mathrm{e}^{-iqX} = \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\infty} dq\, \mathrm{e}^{-\gamma|q|^\alpha} \cos(qX) \tag{8.29}$$

が得られる．この分布を $\alpha = 1.5$ に対してプロットしたものを図 94 に載せよう．この図 94(左) 中

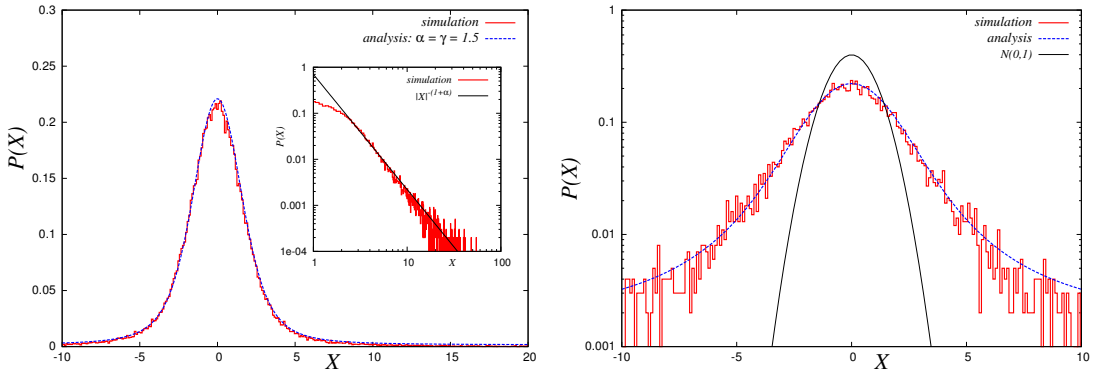


図 94: $\alpha = 1.5$ に対する $P_L(X)$. 実線は計算機上で人工的に作成したヒストグラム．破線は (8.29) を数値的に積分することで得られる解析解．組み込み図はこの分布の「すそ」の様子を表す両対数プロット．右図では縦軸を対数目盛りに変えてプロットしたものを比較のために正規分布とともに示した．

の組み込み図には分布の「すそ」の部分の両対数プロットを示す．この組み込み図より, この分布 $P_L(X)$ は X の大きな領域では正規分布における「平均」や「分散」, 指数分布における「緩和時間」のような特徴的なスケールを持たない冪分布に従うことがわかる．実際, (8.29) 式を $|X| \gg 1$ に対して展開してみると

$$P_L(X) \quad \sim \quad |X|^{-(\alpha+1)} \tag{8.30}$$

のような冪則に従うことがわかる．この分布 $P_L(X)$ を**レビ分布**と呼ぶ．レビ分布は安定分布である．図 94(右) に示したように, 正規分布と比べてレビ分布は「すそ広がり」な分布である．従って, 金融データの確率モデルとして $X_{t+1} = X_t + Y_t$ を選び, Y_t をレビ分布から生成すると, レートが大きく変動するチャンスは Y_t を正規分布に選んだウイナー過程と比べて大きくなる．このような確率過程を**レビ過程**と呼ぶ．また, ウイナー過程と比べ, レート自体が大きくジャンプするチャンスが多いことから**レビ・フライト (Lévy flight)** と呼ばれることも多い．

金融データの再現, モデル化において, このような大きなレート変動のジャンプの生じる頻度の高い確率過程が適切なのか, あるいはウイナー過程でよいのかは, もちろん扱う金融データに依存する．従って一見すると地味な作業であるデータ解析, 統計解析も適切な確率モデルを構築する上では重要なプロセスである．

8.2.3　カオス写像を用いたレビ分布からのサンプリング

計算機上で人工的にレビ過程を生成させる場合, レビ分布 (8.29) からのデータ・サンプリングが必要になる．この際, 一様乱数を用いて (8.29) 式に比例するようにデータ点を生成させることもで

きるが, ここではある種のカオス写像からのサンプリングによりレビ分布が生成できることを見ておこう.

既に情報工学実験では $[0,1]$ の一様分布を生成するために次のロジスティック写像:

$$X_{n+1} = aX_n(1-X_n) \tag{8.31}$$

を用い, $a=4.0$ の場合にカオス・アトラクタを持つ軌道を生成させ, そこからのサンプリングにより, 擬似的な一様分布が生成できることを学んだ (図 95 参照). このようなカオス写像を改良するこ

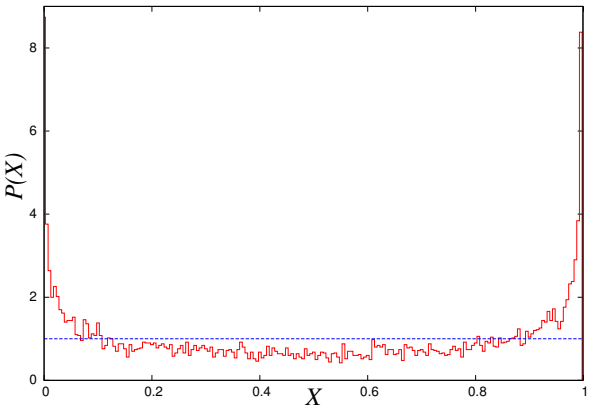


図 95: ロジスティック写像 $X_{n+1}=4X_n(1-X_n)$ からのサンプリングによるヒストグラム.

とでレビ分布を人工的に生成させることを考える.

この際, 次のようなカオス写像の重ね合わせによってもレビ分布からのサンプリングを行うことができる (Umeno 2005).

$$X_{n+1} = \left|\frac{1}{2}\left(|X_n|^\alpha - \frac{1}{|X_n|^\alpha}\right)\right|^{1/\alpha} \mathrm{sgn}\left(X_n - \frac{1}{X_n}\right) \tag{8.32}$$

上記の写像を N 個の異なる初期条件から更新させ, 各々を十分にカオス・アトラクタに落ち込ませたのちのサンプリング点 $X(i),\ i=1,\cdots,N$ の N 個からなる次のような重ね合わせを考える.

$$X = \frac{\sum_{i=1}^N X(i)}{N^{1/\alpha}} \tag{8.33}$$

この重ね合わせを施された変数 X を再サンプリングすることで, 重ね合わせの個数 N の増加とともに確率変数 X はレビ分布に従うようになる. 図 96 にその結果を載せる. この図より, 写像の重ね合わせの個数 N を増加させることによって, このカオス写像からのサンプリング点からなるヒストグラムは (8.29) 式を数値積分した解析解に近づいていくことがわかる.

8.3 ボラティリティ変動モデル

前節まででみたウイナー過程:

$$X_{t+1} = X_t + Y_t,\ \ P(Y_t) = \mathcal{N}(0,\sigma) \tag{8.34}$$

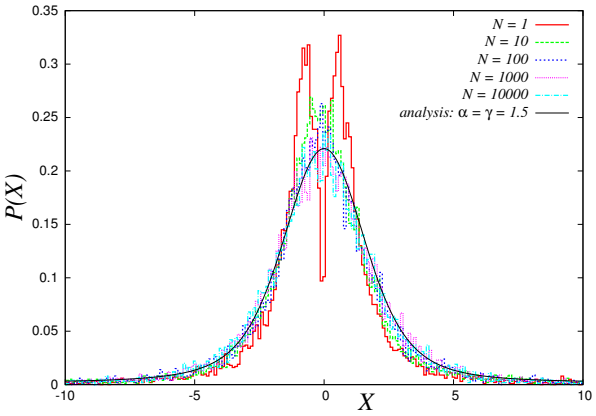


図 96: $\alpha = \gamma = 1.5$ に対するレビ分布 $P_L(X)$. 破線はカオス写像 (8.32) の N 個の重ね合わせを用いて計算機上で人工的に作成したヒストグラム. 実線は (8.29) を数値的に積分することで得られる解析解. 重ね合わせの個数 N を増やすと次第に解析解に一致する.

において, リターンの分散であるボラティリティ:

$$E[(X_{t+1} - X_t)(X_{t+1} - X_t)] \quad = \quad E[Y_t^2] = \sigma^2 \tag{8.35}$$

は時間的に変動しない一定値をとるものであった. しかし, 実際の金融データを具体的に調べてみると, このボラティリティ自体が時間的に変動するような場合が多い. そこで, ここではそのようなボラティリティが変動する確率モデルのいくつかを見ておくことにする.

8.3.1 ARCH 過程

金融工学などにおいて, ボラティリティ変動モデルとして最もよく使われるものの一つは **ARCH (AutoRegressive Conditional Heteroskedasticity) モデル**と呼ばれるものである. 最も単純な ARCH モデルである ARCH(1) 過程は次式で与えられる.

$$X_{t+1} \quad = \quad X_t + Y_t, \;\; P(Y_t) = \mathcal{N}(0, \sigma_t) \tag{8.36}$$

$$\sigma_{t+1}^2 \quad = \quad \alpha_0 + \alpha_1 X_t^2 \tag{8.37}$$

ここで, 確率変数である Y_t の従う分布はウイナー過程と同じ正規分布ではあるが, その分散 (ボラティリティ) は一定ではなく, (8.37) 式に従って時間的に変化することに注意されたい. また, この分散の更新式から, 分散の時間変化は一つ手前の時刻でのレートの値に依存することになる. 図 97 にボラティリティ σ_t^2, 及び, レートの累積:

$$X_t \quad = \quad \sum_{k=0}^{t-1} X_k \tag{8.38}$$

をパラメータ値 $\alpha_0 = 0.45, \alpha_1 = 0.55$ に対してプロットしたものを 97 に載せる. この図より, ボラティリティが時々大きく上昇しながら時間的に変化する様子を見て取れる.

ところで, 十分に時間が経ったのち, ボラティリティが定常値 σ^2 を持つとすると (8.37) 式より

$$\sigma^2 = E[\sigma_t^2] = \alpha_0 + \alpha_1 E[X_{t-1}^2] = \alpha_0 + \alpha_1 \sigma^2 \tag{8.39}$$

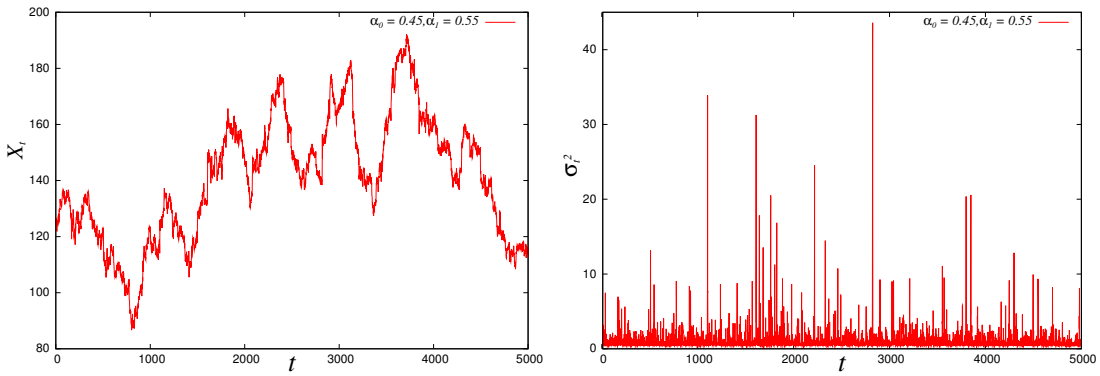


図 97: ARCH(1) 過程のレートの累積 $X_t = \sum_{k=0}^{t-1} X_k$ (左) とボラティリティσ_t^2 (右) の時間変化. ここではパラメータの値を $\alpha_0 = 0.45, \alpha_1 = 0.55$ と選んでいる.

が得られるから, これを σ^2 について解いて

$$\sigma^2 = \frac{\alpha_0}{1-\alpha_1} \tag{8.40}$$

がその定常値を与える. ここで, 期待値 $E[\cdots]$ は確率変数 $\cdots$ の示す時刻の一つ手前の時刻における変数が確定した条件下で $\cdots$ の従う分布での平均を意味する. 従って, 図 97 におけるパラメータ $\alpha_0 = 0.45, \alpha_1 = 0.55$ に対しては $\sigma^2 = 1$ となる.

また, $Z_t = X_t/\sigma_t$ を**イノベーション (innovation)** として定義し, この変数が $\mathcal{N}(0,1)$ に従うとすると[51], $X_t = Z_t\sigma_t$ の 4 次のモーメント $c = E[X_t^4]$ が具体的に計算できて, (8.37) 式の両辺の自乗を用いると

$$c \equiv E[X_t^4] = E[Z_t^4]E[\sigma_t^4] = 3(\alpha_0^2 + 2\alpha_0\alpha_1 E[X_{t-1}^2] + \alpha_1^2 E[X_{t-1}^4]) \tag{8.41}$$

が得られる[52]. $E[X_{t-1}^2] = \sigma^2 = \alpha_0/(1-\alpha_1), E[X_{t-1}^4] = c$ より, 上式を c について解くと

$$c = E[X_t^4] = \frac{3\alpha_0^2(1-\alpha_1^2)}{(1-3\alpha_1^2)(1-\alpha_2)^2} \tag{8.42}$$

が 4 次のモーメントとして得られる. 従って, 2 次のモーメントが $E[X_t^2] = \sigma^2 = \alpha_0/(1-\alpha_1)$ でであったから, X_t の分布の尖り具合を表す**尖度 (Kurtosis)** は

$$\kappa \equiv \frac{E[X_t^4]}{\{E[X_t^2]\}^2} = \frac{3(1-\alpha_1^2)}{1-3\alpha_1^2} \tag{8.43}$$

となる. 従って, ARCH(1) 過程の尖度はパラメータ α_1 のみで決まり, 図に示した ARCH(1) 過程の場合の尖度は $\kappa = 23$ となる. 実際には, 金融の実データ解析から尖度を計算し, その値を再現するように (8.43) 式から ARCH(1) モデルのパラメータ α_1 を決めることになる.

8.3.2 GARCH 過程

ARCH 過程はボラティリティの時間発展の式 (ARCH(1) モデルの場合には (8.37) 式) に過去の時刻でのボラティリティの値を逐次加えることで一般化することができる. このようにして一般化

[51] この場合を特に「強 ARCH 過程 (*strong ARCH process*)」と呼んでいる.
[52] $E[Z_t^4]$ は $\mathcal{N}(0,1)$ の 4 次のモーメント 3 であることに注意.

された確率モデルを **GARCH (Generalized ARCH) モデル**と呼び, 最も単純な GARCH モデルである GARCH(1,1) 過程は

$$X_{t+1} = X_t + Y_t, \quad P(Y_t) = \mathcal{N}(0, \sigma_t) \tag{8.44}$$

$$\sigma_{t+1}^2 = \alpha_0 + \alpha_1 X_t^2 + \beta_1 \sigma_t^2 \tag{8.45}$$

で与えられる. ARCH(1) のときと同様の解析により, GARCH(1,1) 過程の定常分散と尖度はそれぞれ

$$\sigma^2 = \frac{\alpha_0}{1 - \alpha_1 - \beta_1} \tag{8.46}$$

$$\kappa = \frac{3(1 + \alpha_1^2 - 2\alpha_1\beta_1 - \beta_1^2)}{1 - 3\alpha_1^2 - 2\alpha_1\beta_1 - \beta_1^2} \tag{8.47}$$

で与えられる. 図 98 にパラメータの値を $(\alpha_0, \alpha_1, \beta_1) = (0.4, 0.3, 0.3)$ の場合 (尖度 $\kappa = 4.17$) の GARCH(1,1) 過程に対するリターン Y_t の分布を載せる.

ここではいくつかの代表的なボラティリティ変動モデルについて述べたが, これ以外にも様々な確率モデルが提案されている. そのどれが適切なのかは, もちろん, 実際の金融データとの整合性を計りながら選ばなくてはいけない. そのようなデータ解析の一部を次回の後半以降に紹介したい.

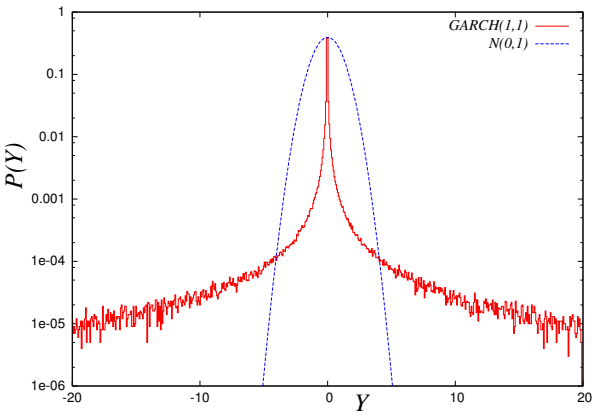
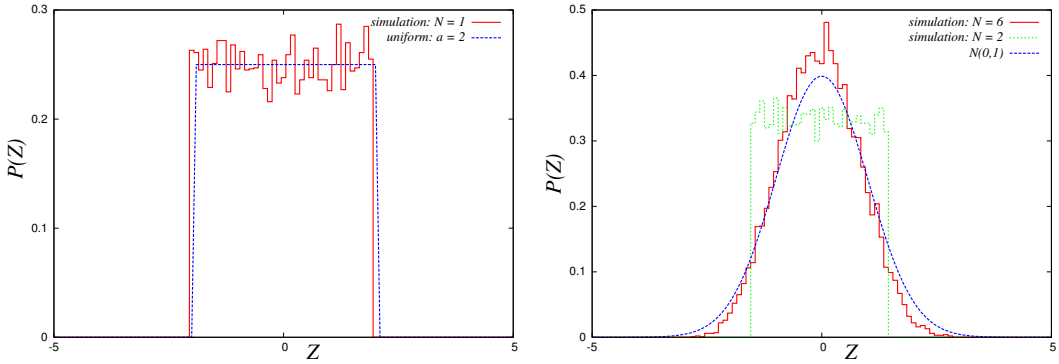


図 98: パラメータの値 $(\alpha_0, \alpha_1, \beta_1) = (0.4, 0.3, 0.3)$ の場合 (尖度 $\kappa = 4.17$) の GARCH(1,1) 過程に対するリターン Y_t の分布. 比較のために $\mathcal{N}(0, 1)$ も同時にプロットしてある.

課題 15：
その確率分布が

$$P(Y_t) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & (|Y_t| \leq a) \\ 0 & (|Y_t| > a) \end{cases} \tag{8.48}$$

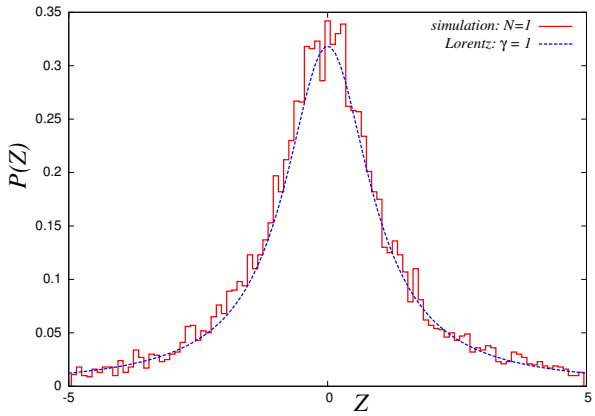
で与えられる確率変数 Y_t に対し, Z_N の従う分布 $P(Z_N)$ が N の増加とともに収束していくを図 93 にならって数値的に調べよ (下図を参考にせよ).



また, Y_t の従う分布が次のような**ローレンツ分布**:

$$P(Y_t) = \frac{\gamma}{\pi} \frac{1}{\gamma^2 + Y_t^2} \tag{8.49}$$

の場合はどうなるか? (下図を参考にせよ)



(ヒント) ローレンツ分布を生成させる際に次の写像からのサンプリングを用いても良い.

$$X_{n+1} = \frac{1}{2}\left(|X_n| - \frac{1}{|X_n|}\right)$$

8.4 点過程

前節まででは株価や為替レート等の金融商品の変動を確率過程にみたてて解析するための基本的な確率モデルを見てきた. このとき, 価格変動が生じる「時刻」とそれらの「間隔」に関しては特に何も言及しなかった. インターネット上で公開されている株式などはその価格が 1 時間程度の間隔で提示されるものもあれば, その履歴が 1 日単位, 1 週間単位などで提示されるものもある. 一方, 円/ドルなどの為替レートでは変動が逐次提示されることはなく, たいていの場合, 1 日を通して同じレートが用いられている[53]. 従って, 顧客に対し, そのように一定の単位時間に区切って価格の変動を提示する限り, その確率モデルを考える際には価格変動がある単位時間 (ステップ) 毎に発生するという仮定を置けば十分であった. 例えば, ウイナー過程は

$$X_{t+1} \quad = \quad X_t + Y_t, \quad P(Y_t) = \mathcal{N}(0, \sigma) \tag{8.50}$$

で与えられたが, この際, レート X_t の変動は $t+1-t=1$ 単位時間毎に生じる.

しかし, インターネットを介した金融取引きが一般にも普及し, 所謂, インターネット・トレーディング・システムを構築する際には顧客に対して可能な限り頻繁にレートを提示することが重要になる. つまり, 極端な場合には市場のレートをそのまま開示する方が, 顧客各自が購入した商品の価格動向を逐次観察することができ, その結果, オンラインでの投資を楽しみたいという類の顧客ニーズに応えることができる. しかし, 現実には, インターネットなどを介して我々が目にすることのできる「開示レート」の背後には (プロのトレーダ達の取り引きによって決まる) 「市場レート」があり, トレーディング・システムを提供する側が, その市場レートからある程度の情報を「間引いて」からそのレートを提示しているわけである.

このとき, どのように情報を間引くかが問題になるが, 一番単純には, 前述のように 1 日単位, あるいは 1 時間単位と一定の時間を区切り, その時点での市場レートを公開するのが良さそうである. しかし, 例えば大きな事件があったり, 何らかのアクシデントでレートそのものが乱高下し, その乱高下がある日の正午から午後 6 時の間継続した場合, 1 日ごとのレート提示 (開示) では, この時間帯のレート乱高下は顧客には見えなくなってしまう. 顧客にとっては出来る限り市場レートそのものにアクセスできた方が, このような乱高下のタイミングを利用して (それは小さなチャンスかもしれないが) 自分の資金を増やすことができるかもしれない. しかし, これは銀行 (システムを構築する側) にとってみれば逆な意味でリスクを負うことになりかねない. 従って, 両者にとって好ましいレート提示の方法は市場レートそのものを全て提示するのではなく, やはり, 情報を間引くのであるが, その**情報の縮約によって作られる開示レートの変動が市場レートの性質をある程度反映している**ようなものが望ましい. この意味では 1 日毎, 1 時間毎などの一定間隔での情報公開は好ましくない. 頻繁に変動したレート変動は上述のように「粗視化」されてしまうからである. このような市場レートの変動をうまく反映させた情報提示 (開示) として最近, **第 1 通過過程 (First-Passage Process)** を用いる方法が 24 時間随時トレーディングが可能な個人顧客向けのインターネット・バンクであるソニー銀行[54] などで採用されている. これは図のように頻繁に変動する市場レート (実線) に対し, 2ϵ の幅を設定し[55], 市場レートがこの幅を超えた場合のみ, その時点でのレートを顧客に提示する. このやり方だと, ± 0.1 円を越えて大きく変動した後のレートは必ず顧客に提示されることになり, 1 日毎, 1 時間毎にレートを提示するやり方よりも市場レートを開示レートに反映

[53] 例えば, 外国旅行へ行く前に円を外貨に換金する際, 銀行では「本日のレート」というような掲示があるし, 多くの場合, このレートは 1 日中変わらない

[54] http://moneykit.net

[55] ソニー銀行の円ドル為替レートの場合には $\epsilon = 0.1$ 円と設定されている.

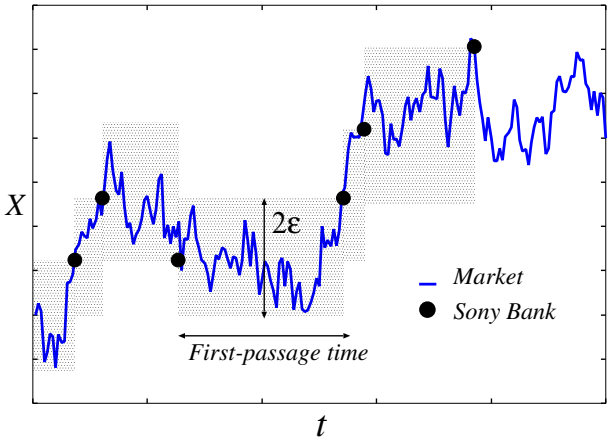


図 99: 市場レート (実線) に対する第一通過過程 (First-Passage Process) を取ったのちの提示レート (黒丸). このような提示システムを採用している企業としてソニー銀行がある.

させることができる[56] ここで注意しなければならないのは, 市場レートがウイナー過程 (8.50) に従っていたとしても, この第一通過過程のフィルタ (以下では単に「フィルタ」と呼ぶ) を介して提示されるレート変動の時間間隔はもはや一定ではなくなっているという事実である. つまり, フィルタを介した後のレート変動が時刻 $t_1, t_2, t_3, \cdots, t_N$ (当然, この順序は $0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N$ であり, $N \to \infty$ とする) に生じたとし, その間隔を

$$\Delta t_i \quad = \quad t_{i+1} - t_i, \quad (i = 1, \cdots, N) \tag{8.51}$$

で定義すると, Δt_i は一定ではなく, 揺らいでいて, ある確率分布を持つことになる. このレート変動時刻を表す点列: $t_1, \cdots, t_N$ からなる確率過程を**点過程 (Point Process)** と呼ぶ. このような点過程としてスーパーのレジに到達する顧客の時刻, 高速道路の料金所に入ってくる車の到着時刻などが挙げられるが, この他にも我々の身の周りで多くの例を見ることができる.

課題 16：
身の周りで点過程であると思われる事例を数件具体的に挙げよ. ただし, 上記 2 例を除く.

8.5 ポアソン過程

ここで, レートの変動 (イベント) がランダムに生じる場合にそのレート変動間隔の従う分布を求めてみよう. $P_n(t)$ をそのようなイベントが時刻 0 から t までの間に n 回生じる確率とする. また, 時刻 t と $t + \Delta t$ の間の Δt の時間間隔にそのようなイベントはその間隔に比例するものとし, その比例係数を λ と置く. つまり, t と $t + \Delta t$ の間の微小時間 Δt にレート変動が生じる確率は $\lambda \Delta t$ と

[56] これ以外にもいろいろやり方はあるかもしれない. 例えば, 立て続けに 5 回連続してレートが上昇あるいは下降した場合にはその 5 回目の変動直後のレートを提示するとか, もう少し複雑にしたければ, 1 ステップでのレート変動を「上昇 (u)」「留まり (s)」「下降 (d)」と 3 値に「符号化」し, (u, u, d, u, d, s) の組み合わせが時系列中に現れたら, その時点の値を開示するというような方法もとれるかもしれない. しかし, そのような時系列の構造を反映した複雑なレート開示を採用すれば, どのような状況が生じるのかは直観的にちょっとわかりにくい. その意味で, ここでの第 1 通過過程を用いた情報開示はかなり妥当な方法であると思われる. また, 同じ第 1 通過過程を用いるにしても, 顧客の生活リズム (顧客が日本人だけであると考えれば, 日本時間の真夜中にトレーディングする人はあまり居ない) や実社会での「季節性」を考えて, レート窓の幅 ϵ に時間依存性を持たせるやり方もあるかもしれない.

なる. このとき, 確率の保存から次の方程式が成り立つ.

$$P_n(t+\Delta t) \quad = \quad (1-\lambda\Delta t)P_n(t) + \lambda\Delta t P_{n-1}(t) \tag{8.52}$$

この右辺第 1 項は時刻 t までに n 回のイベントが生じている場合, 次の Δt の間隔でイベントが生じなければ左辺への寄与となることから来る部分. 右辺第 2 項は時刻 t までに $n-1$ 回のイベントが生じている場合, 次の Δt の間隔でイベントが生じれば左辺への寄与となることから来る部分であり, この 2 つの寄与の合算が $P_n(t+\Delta t)$ を与えることは明らかであろう. また, 右辺の各項がこのよう書けることから, ここでは「時刻 t と $t+\Delta t$ ではイベントが互いに独立に起こる」という仮定を置いていることに注意しておこう. これを $\Delta t \to 0$ のもとに書き換えると次の微分方程式が得られる.

$$\frac{dP_n(t)}{dt} \quad = \quad -\lambda(P_n(t) - P_{n-1}(t)) \tag{8.53}$$

これは今までにも度々出てきたマスター方程式である. 通常, (統計物理や確率的情報処理で扱うような) マスター方程式はその変数が膨大となるため解くことが困難である場合が多いが, 上記の場合には解析的にその解を求めることができる. $n=-1$ のとき, $P_{-1}=0$ であるとすると, $n=0$ に対する方程式は

$$\frac{dP_0(t)}{dt} \quad = \quad -\lambda P_0(t) \tag{8.54}$$

であり, $P_0(0)=1$ の条件下でこの解は $P_0(t)=\mathrm{e}^{-\lambda t}$ である. 従って, $n=1$ のときに解くべき方程式はこの結果を (8.53) 式に代入して

$$\frac{dP_1(t)}{dt} \quad = \quad -\lambda P_1(t) + \lambda \mathrm{e}^{-\lambda t} \tag{8.55}$$

が得られる. この方程式は通常よくやるように, 右辺第 2 項を無視した斉次方程式の解の積分定数を時変なものとした解 $A(t)\,\mathrm{e}^{-\lambda t}$ を (8.55) 式に代入し, A についての微分方程式を作り, それを解けばよい (定数変化法). 実際, その方程式は

$$\frac{dA}{dt} \quad = \quad \lambda \tag{8.56}$$

となり, その解は $A(t)=\lambda t$. 従って, 求めるべき方程式の解は $P_1(t)=\lambda t\mathrm{e}^{-\lambda t}$ となる. この操作を繰り返すと, $n=k$ のときの方程式の解 $P_k(t)$ は

$$P_k(t) \quad = \quad \frac{(\lambda t)^k}{k!}\,\mathrm{e}^{-\lambda t} \tag{8.57}$$

となる. この分布を**ポアソン分布**と呼ぶ. また, 上記の意味でイベントがランダムに次々と発生する確率過程 (点過程) を**ポアソン過程**という. ここで, このポアソン過程に対し, 計測を始めてからはじめのイベントが生じるまでの時間間隔 (duration) t の従う分布は (8.57) 式で $k=0$ とおいた ($0!=1$)

$$P(t) \quad \propto \quad \mathrm{e}^{-\lambda t} \tag{8.58}$$

のような指数分布に従うことがわかる. 従って, 為替レートの変動間隔 t の従う分布を実データから評価し, それが指数分布に従うのであれば, レートの変動は完全にランダムなポアソン過程であることがわかる.

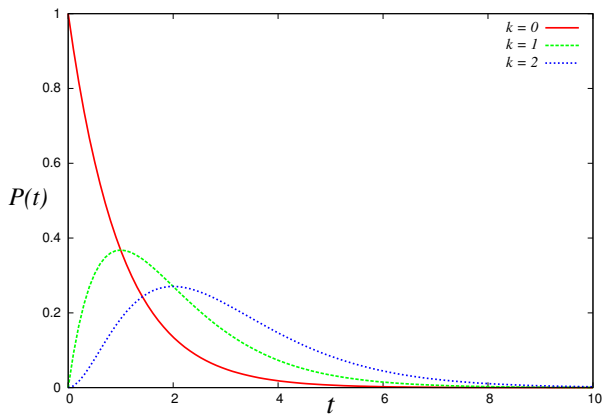


図 100: $\lambda = 1$, $k = 0, 1, 2$ の場合のポアソン分布.

8.6 レート変動間隔の実データ解析

実際にレート変動がランダムに起こるポアソン過程に従っているのか, あるいはランダムではなく, レート変動間隔間には何らかの相関があるのかを調べるためにはレートの変動間隔の従う分布を実データから評価すればよい. その際, 問題の焦点がレート変動がポアソンか否かであるのであれば, 指数分布を変数 m を用いて一般化した次のワイブル分布:

$$P_{m,a}(t) = \frac{mt^{m-1}}{a} \exp\left(-\frac{t^m}{a}\right) \tag{8.59}$$

に対し, この分布と実データから得られるレート変動間隔のヒストグラムとの当てはまり具合を調べることでパラメータ m, a を求めればよい (a は分布のスケールを決定するパラメータ. 図 101 参照). ここで, ワイブル分布は $m = 1$ であれば指数分布になり, 従って, その変動間隔分布を持つ確

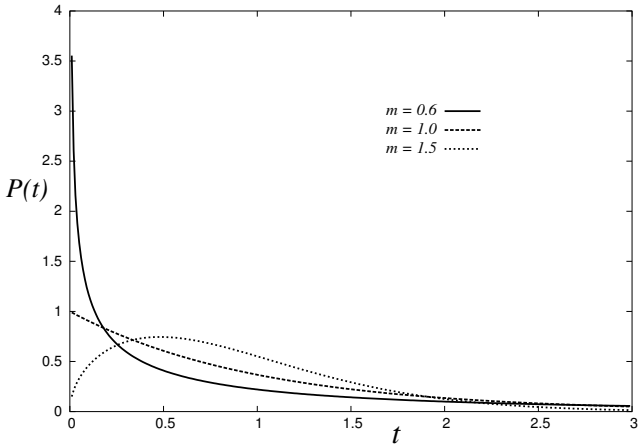


図 101: ワイブル分布.

率過程はポアソン過程ということになる. つまり, パラメータ m の値の $m = 1$ からの「ズレ」によってポアソン過程からの外れ具合を検出しょうというわけである. 「分布間の近さ」を議論する

わけであるから, 実データからの分布 (経験分布) と上記ワイブル分布とのカルバック-ライブラ距離を変数 m, a の関数とし, それを最小化するように m, a を決める方法をとることもできるが, ここではもう少し直接的な方法 — ワイブル確率紙の方法 — を紹介することにしょう.

8.6.1 ワイブル確率紙の方法

通常, データ (x, y) が指数分布に従うかどうかを調べる際には $y = \mathrm{e}^{-x}$ の両辺の対数を取った $\log y = -x$ から, このデータを y 軸が対数スケールとなるようにプロットし, そのプロットが直線に乗るかどうかで判断した. 同じような方法がワイブル分布で使えないかを考えたい. このとき, まず, ワイブル分布 (8.59) 式の累積分布:

$$W(t) \quad = \quad \int_0^t P_{m,a}(t)dt = \exp\left(-\frac{t^m}{a}\right) \tag{8.60}$$

を計算する. 従って, 次の式が成り立つことが容易にわかる.

$$\log\left(-\log W(t)\right) \quad = \quad m\log t + a \tag{8.61}$$

よって, レート変動間隔のヒストグラムから累積分布を求め, 間隔 t の「頻度」の対数を取ったものの符号を変えてさらにその対数をとり, それと間隔 t の対数をとったものをそれぞれ y, x 軸にプロットしたとき, そのプロットが直線に乗ればレート変動間隔はワイブル分布に従うことがわかり, このときの直線の傾きがワイブル分布を特徴つけるパラメータ m を決めることになる (y 軸との切片が a を与える). その m が 1 と異なれば, その確率過程はポアソン過程ではないと結論されることになる. この手の方法を**ワイブル確率紙の方法 (Weibull Paper Analysis)** と呼ぶ.

8.6.2 変動間隔が揺らぐ GARCH(1,1) 過程での計算機実験

ところで, 前述のレート変動幅 2ϵ のフィルタの効果はどのようなものであろうか？ 我々はここでレート変動間隔そのものに興味があるので, 確率過程のレート変動間隔がフィルタを介す前後でどのように変化するのかに興味がある. そこで, 前回学んだ GARCH(1,1) 過程の時間間隔がワイブル分布に従う確率過程に対し, 実際にレート窓のフィルタをかけることでこれを調べてみよう. 具体的には次の確率過程にフィルタをかける.

$$X_{t+\Delta t} \quad = \quad X_t + Y_t, \;\; P(Y_t) = \mathcal{N}(0, \sigma_t) \tag{8.62}$$

$$\sigma^2_{t+\Delta t} \quad = \quad \alpha_0 + \alpha_1 X_t^2 + \beta_1 \sigma_t^2 \tag{8.63}$$

$$P_{m_0,a}(\Delta t) \quad = \quad \frac{m_0(\Delta t)^{m_0-1}}{a}\exp\left(-\frac{(\Delta t)^{m_0}}{a}\right) \tag{8.64}$$

ここで, 為替レートそのものと時間間隔の間には何ら相関がないものと仮定する. すなわち, $P(X_t, \Delta t) = P(X_t)P_{m,a}(\Delta t)$ である. しかし, 当然, この相関を取り込んでモデル化することも可能である[57].

さて, この確率過程に窓をかけ, 出てくる確率過程の時間間隔をワイブル確率紙で調べよう. その際, m_0 で指定される第 1 通過過程の背後にある確率過程が, 第 1 通過過程を経ることでその時間

[57] 相関があれば $P(X_t, \Delta t) = P(X_t|\Delta t)P_{m,a}(\Delta t)$ なので, 条件つき確率 $P(X_t|\Delta t)$ を具体的に与えてモデル化することになる. 実際にそうなっているか否かは検証が必要であるが, 例えば, 「長く待たされた直後のレートは大きく変動する」などを具体的に条件つき確率 $P(X_t|\Delta t)$ に反映させることができるかもしれない.

間隔の従う統計性に変化が生じ, m_0 とは異なるパラメータ m で指定されるワイブル分布に従うようになると仮定する. そして, 最終的に m_0-m プロットを描くことでパラメータ m の変化を介してここでのフィルタの効果を調べようというわけである. その結果の一例を図 102 に載せる. ここ

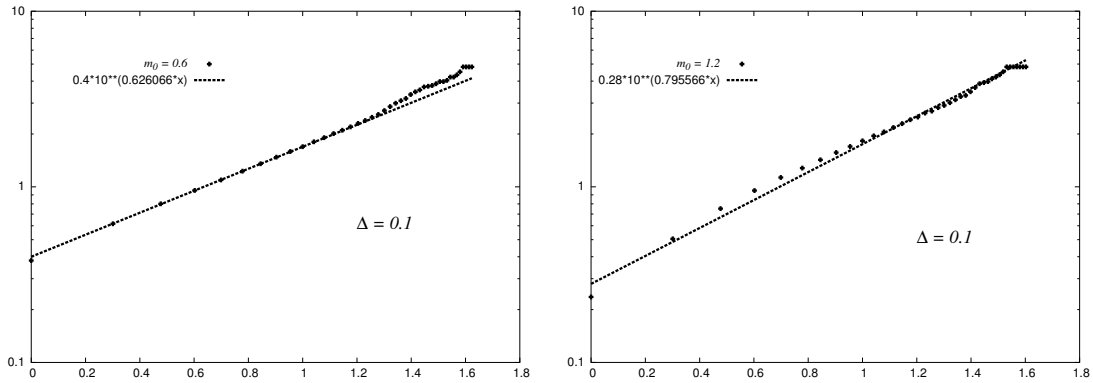


図 102: $m_0 = 0.6, 1.2$ のワイブル分布で変動間隔が揺らぐ GARCH(1,1) 過程のフィルタ出力の変動間隔をワイブル確率紙により評価する.

では $(\alpha_0, \alpha_1, \beta_1) = (0.4, 0.3, 0.3)$ と変数を選び, $m_0 = 0.6, 1.2$ のワイブル分布で変動間隔が揺らぐ GARCH(1,1) 過程のフィルタ出力の変動間隔をワイブル確率紙により評価している. ただし, レート自体は完全な連続値を取るわけではなく, レート窓幅 $\epsilon = \Delta = 0.1$ に応じた離散値を取ることから,

$$X_t \quad = \quad \Psi_\Delta(X_t) \equiv \Delta\,\mathrm{ceil}(\Delta^{-1}X_t) \tag{8.65}$$

なる変換を施していることに注意しょう. この図より, ワイブル確率紙による解析で出力データは直線上に乗っている. 従って, フィルタにかけた後の確率過程のレート変動間隔もやはりワイブル分布に従う. しかし, その傾きは一般に $m \neq m_0$ である. そこで, 図 103 に m_0-m プロットを載せよう. この図より, フィルタへの入力データが $m_0 = 1$ のポアソン過程である場合でも, フィルタを

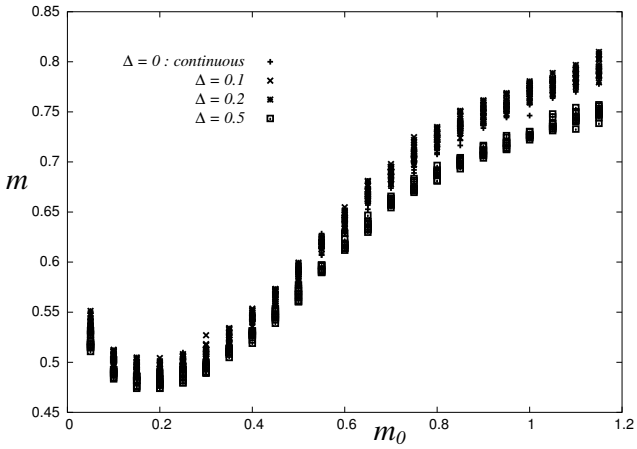


図 103: m_0-m ダイアグラム.

かけた後では $m \neq 0$ であり, ランダムなレート変動間隔ではなくなることがわかる. では, レート

変動間隔がランダムでなく, ある種の偏りがある場合, それをどのように定量化すればよいのであろうか. 時節ではそれを定量化する一つの指標としてジニ係数について見ていくことにする.

8.7 ジニ係数: 格差の一指標

最近では社会における格差が問題になっており, 各国での格差の指標として**ジニ係数 (Gini index)** と呼ばれる量が用いられている. この量は $[0,1]$ 間の実数値を取るように規格化されており, 完全に平等な社会で, その意味で富が国民に等分配される (少なくとも社会主義が考える) 理想的社会では 0 をとり, その対極の一人が全ての富を独占する状況では 1 をとる. 従って, ここで言うところの「格差」という観点で捉えるのであれば, ジニ係数がゼロに近ければ近いほど格差の無い社会ということになる. 参考までに 2000 年の統計によると日本のジニ係数は 0.314, アメリカ合衆国は 0.357, メキシコが 0.450, デンマークが 0.225 であった.

8.7.1 解析的評価

ジニ係数を解析的に求めるためには, まず, 所得の分布から**ローレンツ曲線 (Lorentz Curve)** を求めなければならない. そのために所得分布を $P(t)$ とし, その累積分布:

$$X(r) = \int_0^r P(t)dt \tag{8.66}$$

と規格化された累積所得:

$$Y(t) = \frac{\int_0^r tP(t)dt}{\int_0^\infty tP(t)dt} \tag{8.67}$$

を計算し, r を媒介変数として X と Y の関係をプロットする. このとき描かれる曲線がローレンツ曲線である. これは $[0,1]$ 間で下に凸の曲線であり, 完全平等の場合には $P(t)=\delta(t-t_*)$ を代入し

$$X(r) = \int_0^r \delta(t-t_*)dt = \Theta(r-t_*) \tag{8.68}$$

$$Y(t) = \frac{\int_0^r t\delta(t-t_*)dt}{\int_0^\infty t\delta(t-t_*)dt} = \frac{t_*\Theta(r-t_*)}{t_*} = \Theta(r-t_*) \tag{8.69}$$

となるから, $Y=X$ がローレンツ曲線となる ($\Theta(\cdots)$ は階段関数). これを「完全平等線」と呼ぶことにする.

ワイブル分布 (8.59) のローレンツ曲線は簡単な計算の結果

$$Y = Q\left(\frac{1}{m}+1, -\log(1-X)\right) \tag{8.70}$$

となる. ここに, $Q(z,x)$ は不完全ガンマ関数であり

$$Q(z,x) = \int_0^x t^{z-1}\,\mathrm{e}^{-t}dt \tag{8.71}$$

で定義される. 図 104 にいくつかの m 対するワイブル分布のローレンツ曲線を載せる. ジニ係数はこのローレンツ曲線と完全平等線との間の面積を 2 倍したものとして算出される. 従って, ローレンツ曲線自体が完全平等線の場合にはゼロ. その対極の一人勝ちの場合には一人に全ての富 r が

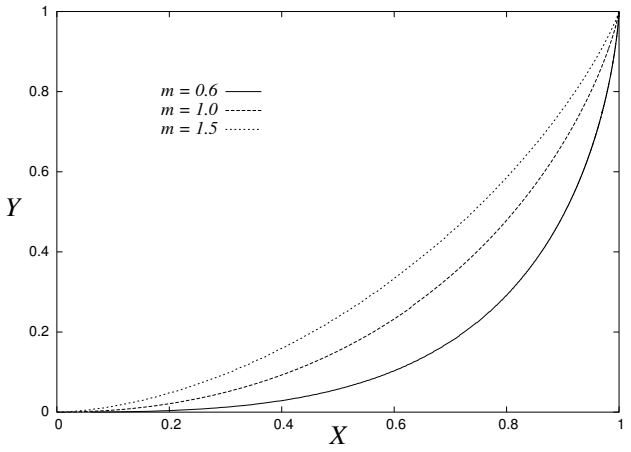


図 104: ワイブル分布に対するローレンツ曲線.

あつまるから (8.68)(8.69) の結果に $t_* = r = \infty$ を代入して, $Y = X = 1$ がローレンツ曲線となり, このときの面積は $Y = X$ と X 軸, Y 軸とで囲まれる三角形の面積 1/2 であり, 従ってジニ係数はその 2 倍の 1 となる.

このジニ係数は具体的に書くと

$$G = 2\int_0^1 (X - Y)dX = 2\int_0^\infty (X(r) - Y(r))\frac{dX}{dr} \cdot dr \tag{8.72}$$

となる. 具体的にワイブル分布に対して計算すると

$$G = 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^m \tag{8.73}$$

が得られる. ここで変数 a には依存しないことに注意しておこう. これを m の関数としてプロットすると図 105 のようになる. ところで, ここでは所得の分布を取り上げたが, 不平等の程度を測

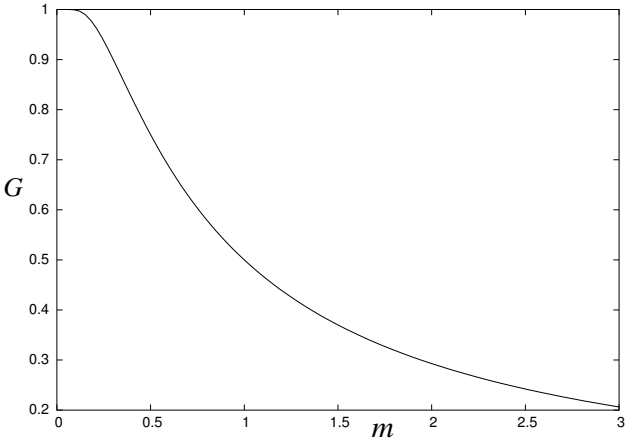


図 105: ワイブル分布に対するジニ係数.

る量は所得に限る必要はない. 事実, 例えば, ここで取り上げた所得を「レート変動間隔」と読み

直すことで, レート変動の間隔がどの程度ばらつき, どの程度偏りがあるのかを調べることができる. 例えば, $m = 1$ としてレートの変動がランダムなポアソンに従う場合, ジニ係数は 0.5 となる. また, ジニ係数がゼロに近ければ, おおよそ同じ変動間隔でレートが変化すると言える. 逆にジニ係数が 0.5 より大きければ間隔は偏りが大きく, 飛びぬけて大きな間隔, あるいは逆に小さな間隔がところどころで現れるようになる. ちなみに, 第 1 通過過程を採用しているソニー銀行のレート変動間隔はワイブル確率紙からの結果 $m = 0.59$ より, $G = 0.694$ 程度となり, これは後者, つまり, 飛びぬけて大きな間隔, あるいは逆に小さな間隔がところどころで現れている.

8.7.2 数値的評価

データが与えられたときに数値的にジニ係数を求めることもできる. 例えば各人の所得が $x_1 \leq x_2 \leq \cdots \leq x_N$ のように与えられたとすると (必ずしもデータとしてはこの順序に並んでいないかもしれないが, その場合には逐次ソーティングを行い, この順番に並び替える),

$$X_i = \frac{i}{N} \tag{8.74}$$

$$Y_i = \frac{\sum_{r=1}^{i} x_r}{\sum_{r=1}^{N} x_r} = \frac{\sum_{r=1}^{i} x_r}{N\mu}, \quad \mu \equiv \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N} x_r \tag{8.75}$$

であるから, $dX_i = (i+1)/N - i/N = 1/N$ に注意して

$$G = 2\sum_{i=1}^{N}(X_i - Y_i)\frac{1}{N} = \frac{1}{N^2\mu}\sum_{i=1}^{N}(2i - N - 1)x_i = \frac{2}{\mu N^2}\sum_{i=1}^{N} i x_i - \frac{(N+1)}{N} \tag{8.76}$$

が求めるジニ係数となる.

この式の最右辺は次のようにして簡単に示すことができる.

$$\begin{aligned} G &= 2\sum_{i=1}^{N}(X_i - Y_i)\frac{1}{N} \\ &= 2\sum_{i=1}^{N}\left\{\frac{i}{N} - \frac{1}{\mu N}\sum_{i=1}^{N} x_r\right\}\frac{1}{N} \\ &= \frac{2}{N^2}\sum_{i=1}^{N} i - \frac{2}{\mu N^2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{i} x_r \\ &= \frac{(N+1)}{N} - \frac{2}{\mu N^2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{i} x_r \end{aligned} \tag{8.77}$$

ここで, 和 $\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{i} x_r$ を具体的に書き出してみると

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{i} x_r = \sum_{i=1}^{N}(N - i + 1)x_i = \mu N(N+1) - \sum_{i=1}^{N} i x_i \tag{8.78}$$

となることがわかるから, 結局, これを (8.77) 式に代入して

$$G = \frac{2}{\mu N^2}\sum_{i=1}^{N} i x_i - \frac{(N+1)}{N} \tag{8.79}$$

が得られる．これは, (8.76) 式の最右辺である．

課題 17：
混沌系工学特論のページ:

`http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/konton2010/konton2010.html`

上に, ある分布から計算機を用いて人工的に生成したデータ (kadai3DATA.txt) を載せるので, このデータのジニ係数を (8.76) 式を用いて求めよ．

8.8 平均待ち時間

前節までで, 確率過程としてみたときの為替レートの変動間隔は一定ではなく, 揺らぎを持っていることがわかった．また, その揺らぎをジニ係数を介して定量化し, インターネット・トレーディングシステムを採用しているソニー銀行のそれは 0.694 であることも見た．この結果からレート変動がランダムに起こるポアソン過程とは異なり, 飛びぬけて大きな間隔, あるいは逆に小さな間隔がところどころで現れていることになる．ところで, ワイブル確率紙によるデータ解析でソニー銀行のレート変動間隔は $m = 0.59, a = 50.858$ のワイブル分布で特徴つけられることがわかったので, この分布の平均:

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty t P_{m,a}(t) dt \tag{8.80}$$

を計算することで平均レート変動間隔を評価することができる．ソニー銀行の場合にはこれが理論, 実データ解析双方から約 20 分となることがわかっている．この量はシステム設計においては有益な情報に違いないが, 顧客にとってさえも, この情報が有益であるかどうかはわからない[58]．例えば, 顧客は任意の時刻にインターネットにアクセスし, 為替レートをチェックするわけであるが, もし, 仮に変動間隔に偏りを持つソニー銀行のレートをチェックしたとすると, 極端に変動間隔の長いタイミングでレートをチェックしてしまい, 長い待ち時間にうんざりしてしまうかもしれないし, 逆に, 極端にレート変動間隔が短いタイミングでレートをチェックし, あまりにも早いレートの変化に驚くことになるかもしれない．顧客のレート・チェックが 1 日 24 時間の中でどの時間帯にも偏ることなく行われる条件下では, レート変動間隔がランダムならば, 前述の平均変動間隔が顧客の平均待ち時間と考えても良いであろう．しかし, レート変動がポアソン過程ではなく変動間隔に偏りがある場合には顧客の平均待ち時間は平均変動間隔とは異なる値を持つかもしれない．

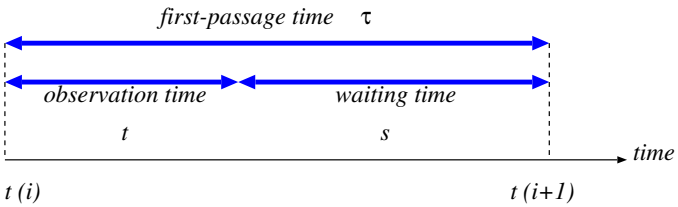


図 106: レート変動とその観測にともなう 3 つの時間.

[58] 有益には違いないだろうが, 他により適切な量があるのではないかと, ここでは考える．

8.8.1 レート変動とその観測に関連する時間

そこで, もう一度問題を整理すると, 我々の扱っている系にはレートの変動とその観測に関連して 3 種類の異なる時間 (時刻) が存在することがわかる. 一つは第一通過時間 τ であり, この時間の従う分布は実データ解析からワイブル分布であることがわかっている. もう一つは, 直前のレート変動時刻から測って顧客がレートをチェックするまでの時間 t であり, 最後は, レートをチェックしてから実際にレートが変動するまでの時間 s である. これら 3 者の関係は図 106 で与えられる.

ここで, 我々はインターネット・トレーディングを行う顧客にとって重要な情報は τ よりも s であると考える. つまり,

$$s = \tau - t \tag{8.81}$$

の分布, あるいは, この平均値こそ重要であると考えるわけである.

そこで, t の分布を $P_O(t)$ とし, 問題の待ち時間 s の分布 $\Omega(s)$ をこれと $P_{m,a}(\tau)$ を用いて表すと

$$\Omega(s) \propto \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau dt\, Q(s|\tau,t) P_O(t) P_{a,m}(\tau). \tag{8.82}$$

となる. ここに, $Q(s|\tau,t)$ は第一通過時間が τ である間隔に直前のレート変動から t だけ経過した時点で顧客がログインし, レートをチェックした条件下でその顧客が次のレート変動まで s だけ待つ確率であり, ここでは

$$Q(s|\tau,t) = \delta(s-\tau+t) \tag{8.83}$$

で与えられる. 従って, 待ち時間 s の分布は規格化定数も含めて

$$\Omega(s) = \frac{\int_0^\infty d\tau P_{m,a}(\tau) \int_0^\tau dt\, \delta(s-\tau+t) P_O(t)}{\int_0^\infty ds \int_0^\infty d\tau P_{m,a}(\tau) \int_0^\tau dt\, \delta(s-\tau+t) P_O(t)} \tag{8.84}$$

と書くことができる. 顧客のログイン時間は一様: $P_O(t) = 1$ と考えるのが自然であろうから, これを考慮して問題の待ち時間 s の平均を計算してみると

$$\begin{aligned} w &= \langle s \rangle = \int_0^\infty ds s \Omega(s) = \frac{\int_0^\infty ds s \int_s^\infty d\tau P_{m,a}(\tau)}{\int_0^\infty ds \int_s^\infty d\tau P_{m,a}(\tau)} \\ &= \frac{\int_0^\infty \frac{d}{dt}\{s^2/2\} ds \int_s^\infty d\tau P_{m,a}(\tau)}{\int_0^\infty \frac{d}{ds}\{s\} ds \int_s^\infty d\tau P_{m,a}(\tau)} = \frac{(1/2)\int_0^\infty s^2 P_{m,a}(s) ds}{\int_0^\infty s P_{m,a}(s) ds} = \frac{E(\tau^2)}{2E(\tau)} \end{aligned} \tag{8.85}$$

が得られる[59]. ここに第 1 通過時間の分布でのモーメントを

$$E(\tau^n) = \int_0^\infty ds s^n P_{m,a}(s) \tag{8.86}$$

で定義したことに注意しよう. 従って, (8.85) 式から顧客の平均待ち時間はここでの第 1 通過時間の従う分布の 2 次と 1 次のモーメントの比で与えられることになる. また, この結果から一般には $E(\tau) \neq w$ であることもわかる.

[59] 待ち時間 w の分布 $\Omega(s)$ までは必要なくて, s の平均値のみを求めるだけでよければ, 講義スライド (**課題 17** に載せたページからダウンロード) に幾何学的証明を載せたので参考にするとよい.

そこで, 実際に第 1 通過時間の分布をワイブル分布にした場合の平均待ち時間を求めてみよう. 簡単な計算の結果

$$\Omega(s) = \frac{m\,\mathrm{e}^{-s^m/a}}{a^{1/m}\Gamma\left(\frac{1}{m}\right)} \tag{8.87}$$

$$w = a^{1/m}\frac{\Gamma\left(\frac{2}{m}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{m}\right)} \tag{8.88}$$

$$\sigma = \frac{a^{1/m}\sqrt{\Gamma(1/m)\Gamma(3/m)-\Gamma(2/m)^2}}{\Gamma(1/m)} \tag{8.89}$$

を得ることができる. ここに, $\Gamma(x)$ は

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dz z^{x-1}\mathrm{e}^{-z} \tag{8.90}$$

で定義されるガンマ関数であり, σ は待ち時間の標準偏差である. 図 107(左) に $\Omega(s)$ の概形を載せる.

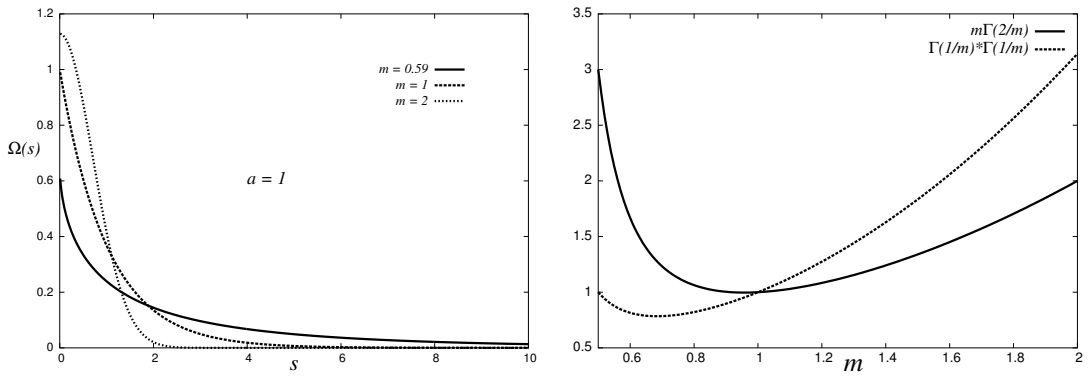


図 107: 待ち時間の分布 $\Omega(s)$ (左). 右図は $E(\tau)$ と w の大小関係. $m=1$ で両者は一致し, $m<1$ で $E(\tau)<w$ となる.

8.8.2 レートの観測に関するパラドクス

ところで, 前に一般には $E(\tau)\neq w$ であると述べたが, 特殊なパラメータの選び方に対しては $E(\tau)=w$ となることがあるかもしれない. そこで, $a=1$ で固定し, m を様々変えた場合に対し, $E(\tau)$ と w の関係を調べてみると図 107 (右) のようになる. つまり, この図では $E(\tau)$ を具体的にワイブル分布に対して計算すると

$$E(\tau) = \int_0^\infty d\tau\tau P_{m,a}(\tau) = a^{1/m}\frac{1}{m}\Gamma\left(\frac{1}{m}\right) \tag{8.91}$$

となるから, これと w を比較し, $w>E(\tau)$ ならば, $m\Gamma(2/m)>\{\Gamma(1/m)\}^2$ となることから, $m\Gamma(2/m)$ と $\{\Gamma(1/m)\}^2$ の比較でもって, 両者の関係を示したものが図 107 (右) である. この図より, 我々の当初の推測通り, $m=1$ のポアソン過程の場合には平均待ち時間が平均レート変動間隔と等しくなる. しかし, $m\neq 1$ であれば両者は異なり, 特に $m<1$ では平均待ち時間が平均レート変動間隔よりも長くなっている. これは一見すると矛盾しているように思える. なぜならば, 図 106 から明らかなうに, 必ず顧客は第 1 通過時間のいずこかへログインするので, s が t よりも大きく

なってしまうのは不自然に思えるからである．このことを**レート観測上のパラドクス (Inspection Paradox)** と呼ぶ．

このパラドクスは以下のようにして説明がつく．ジニ係数の m 依存性を示す図 105 より, m の値が 1 から小さくなればなるほどジニ係数が上昇し, その意味でレートの変動間隔に大きな偏りができる．その結果, 極端に長い変動間隔, 極端に短い変動間隔が現れ, 前者のタイミングでログインするチャンスは後者のタイミングでログインするチャンスと比べて圧倒的に多くなることが予想できる．従って, このようなログインのタイミングも含めて平均すると, 結果としてその待ち時間が変動間隔幅よりも大きくなることがありうるわけである．

ちなみに, w の式にソニー銀行のデータから見積もることのできるパラメータの値 $m = 0.59, a = 50.858$ を代入するとおおよそソニー銀行の顧客の待ち時間は 42 分と評価できる．平均レート変動間隔は約 20 分だったので, この場合には上記パラドクスが起こる．ところで, この待ち時間 42 分は当然, 背後にある市場データを加工する際に用いたフィルタのレート変動窓の幅 ϵ に依存して変化する．従って, システム設計の観点からはこの幅 ϵ の制御指針が得られることが望ましい．そのためには背後にある市場レートを調べなければならないが, そのようなデータは今のところ提供されていない．これは全く残念な話ではあるが, 無いものは無いわけであるから, 限られた状況証拠から市場レートを近似する確率モデルを構築していかなければならない．

9　複数時系列データの可視化と予測

前節まででは, 主に一つの時系列に対し, その点過程や待ち時間を解析してきた. しかし, 現在では複数の時系列から対象の持つ構造を把握し, それを可視化することで問題を解決できることも多い. ここではそのような例をみていくことにしょう.

2011 年 3 月 11 日の東日本大地震は, 多くの犠牲者を出すとともに, 様々な社会システムへ多大な影響を与えた. この大震災は被災地の人々の生活を一変してしまっただけではなく, 既存システムの脆弱性を明らかにした.

ここで今一度, 冷静にこうした状況 — 各種インフラや津波に対する避難経路を含めたマニュアルの不整備等 — を再考してみると, 既存の社会システムは (少なくとも「平時」においては), 人々がある程度「合理的な」意思決定を行い, 「合理的な」行動をとることを前提として設計/構築されていることがわかる. しかし, 大震災や金融危機などの極めて「クリティカルな」状況においては「人々が冷静かつ合理的に行動する」という, この前提そのものが成り立たない可能性もある.

例えば, 平時の金融市場において, トレーダは過去の値動きや利用可能な客観的データを参照した「テクニカル分析」に基づいて自らの「売り」「買い」判断を行う. しかし, 大震災や金融危機に直面した場合でさえもなお, 彼らが客観的データに基づいた「合理的な」意思決定を行い得るか, に関しては疑問の余地があり, そうした非常時には合理的判断よりむしろ「周り」や「場の雰囲気」に流された「非合理的な」意思決定をしてしまう傾向が顕著になるのでは, という予想もできる (図 108 参照). 事実, 今回の震災後, 金融市場はすばやく反応し, 北関東から東北地方にかけて工場や支

図 108: カスケード (雪崩現象) は人々の局所相互作用によって引き起こされうる.

社などを多く持つ企業を中心に, 先行きに関する不安が生まれ, トレーダ (投機 (資) 家) による売り注文が重なり, 日経平均株価はこの日を前後にして急落した. 所謂「プロスペクト理論」に基づく行動経済学においては, 既にこのような「非合理的意思決定」を前提にして経済活動を再考察する試みがなされてきている.

従って, 危機に直面した際の「ミクロな」社会的エージェント群の非合理的意思決定の結果生じる「マクロな」現象に着目し, 可能ならばそのプロセスを可視化し, 結果を将来への知見として蓄積していくことで, それら実データを利用したシステムの設計/リスク評価法の再構築を検討することは重要であり, この震災を経験した我が国の研究者にとって責務であるとも言えよう.

通常, 社会的エージェントには「個性」があり, 彼/彼女独自の合理的戦略に基づいた意思決定を行うと考えられる. 従って, それら「個性」を完全に捨象し, 単純な「粒子群」として扱う数理モデリングには自ずと限界がある. しかし, 大震災などによる危機に直面した場合には, 「粒子」に似て「没個性的」となった彼らの「集団行動」に基づくシステムの普遍的性質がマクロに創発することが予想される. これは同時に, クリティカルな状況における社会的エージェント群の振る舞いに関し, 何らかの一般理論が構築できる可能性を示唆する.

9.1 相互相関係数

まずはいくつかの実データからのエビデンスを見てみよう. 図 109 は東日本大震災を挟んだ前後における食料品業界におけるいくつかの銘柄株価の変動 (左) と建設業の銘柄価格変動 (右) である. この図から明らかに, 同じ業界の銘柄は平時より似通った動きをしているが, 2011 年 3 月 11 日後にはこの相関が強まっているように見える. しかし, 食品業の銘柄はこの震災を境にして下落している一方, 建設業では逆に上昇しているようである. こうした銘柄の業種の違いとともに相関の正負がどのように定まり, その後, どのように推移するのかをクリアに可視化するため, 複数の株価の状態を一つの画像の中に描画できないであろうか?

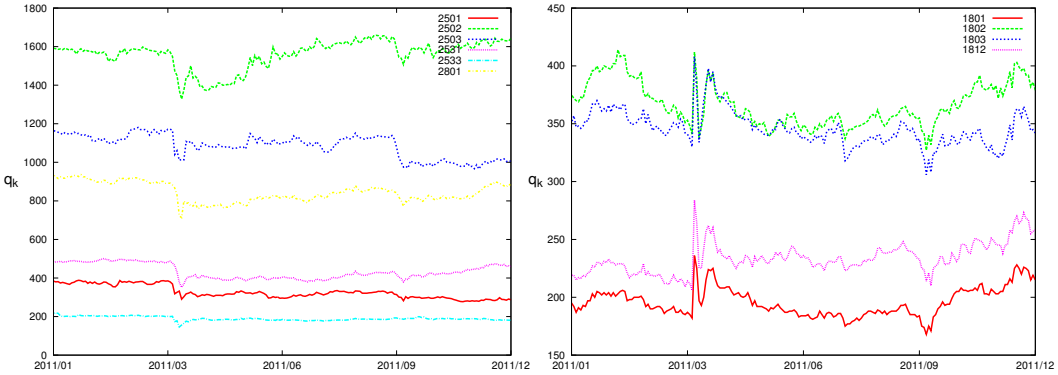


図 109: 東日本大震災を挟んだ前後における食料品業界におけるいくつかの銘柄株価の変動 (左). 右側は建設業の銘柄価格変動. 各ラインにつけられた ID は企業名を表し, 例えば, 2501: サッポロビール, 2502: アサヒビール, 2503: キリンビール, 2531:宝酒造, 2533: オエノンホールディングス, 2801: キッコーマン, 1801: 大成建設, 1802: 大林組, 1803: 清水建設, 1812: 鹿島建設. これらは全て, Yahoo ファイナンスから確認できる.

そこで, このような株式市場における各銘柄の価格間相関の強さを測る指標として, 画像解析等でも用いられる相関係数を採用する. この係数を計算するため, 銘柄 i の時刻 t における株価実測値 $q_i(t)(\geq 0)$ に対し, 対数尺度で測ったこの銘柄価格の「リターン (変動幅)」を

$$r_i^{(t)} \equiv \log\{q_i(t)/q_i(t-1)\} \tag{9.1}$$

で定義する. このとき, 銘柄 i の時間窓幅 M にわたる移動平均:

$$\overline{r_i^{(t)}} \equiv \frac{1}{M}\sum_{l=t-M+1}^{t} r_i^{(l)}, \tag{9.2}$$

銘柄 i, j 間の二体相互相関:

$$\overline{r_i^{(t)} r_j^{(t)}} \equiv \frac{1}{M}\sum_{l=t-M+1}^{t} r_i^{(l)} r_j^{(l)} \tag{9.3}$$

に対し, 銘柄 i, j 間の相関係数を

$$c_{ij}^{(t)} = \frac{\overline{r_i^{(t)} r_j^{(t)}} - (\overline{r_i^{(t)}})(\overline{r_j^{(t)}})}{\sqrt{[\overline{(r_i^{(t)})^2} - (\overline{r_i^{(t)}})^2][\overline{(r_j^{(t)})^2} - (\overline{r_j^{(t)}})^2]}} \tag{9.4}$$

に従って算出する. この相関係数は $-1 \leq c_{ij}^{(t)} \leq 1$ を満たすことに注意する. この相関係数 c の分布

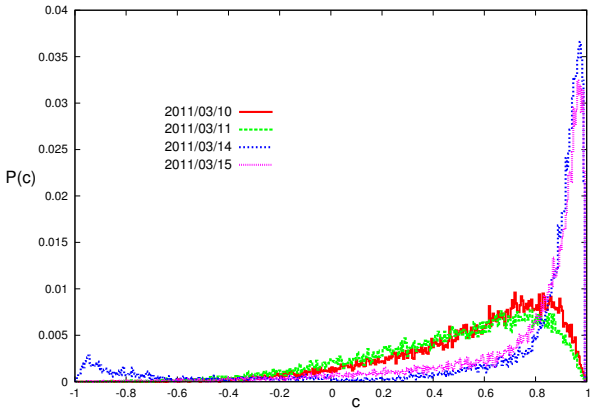


図 110: 相関係数の分布 $P(c)$. 震災前 (2011/3/10,11) と震災後 (2011/3/14,15) に関してプロット. 2011 年は 3/12,13 は週末であり, マーケットは閉じていたことに注意. 震災前には正の相関側に緩やかにバイアスのかかったシングルピークであったが, 震災直後には正の相関側に極めて強いピークが現れる他, 負の相関を持つ小さなピークも見られる. すなわち, 震災前のシングルピークは 2 つの正負の相関を意味する 2 つのピークに分離する. しかしながら, この負の相関のピークは 3/15 には消失している.

$P(c)$ を図 110 に載せよう. この図では, 震災前 (2011/3/10,11) と震災後 (2011/3/14,15) に関してプロットしてある. ここで, 2011 年は 3/12,13 は週末であり, マーケットは閉じていたことに注意されたい. この図 110 より, 震災前には正の相関側に緩やかにバイアスのかかったシングルピークであったが, 震災直後には正の相関側に極めて強いピークが現れる他, 負の相関を持つ小さなピークも見られる. すなわち, 震災前のシングルピークは 2 つの正負の相関を意味する 2 つのピークに分離する. しかしながら, この負の相関のピークは 3/15 には消失していることが見てとれる.

さて, この相関係数は距離の公理を満たさないが, 変換:

$$d_{ij}^{(t)} = \sqrt{(1 - \rho_{ij}^{(t)})/2} \tag{9.5}$$

の下で $d_{ij}^{(t)}$ は $0 \leq d_{ij}^{(t)} \leq 1$ を満たし, 確かに「距離の公理」($d_{ij}^{(t)} \geq 0, d_{ij}^{(t)} = 0$ ならば $i = j$, $d_{ij}^{(t)} = d_{ji}^{(t)}$, $d_{ij}^{(t)} + d_{jk}^{(t)} \geq d_{ik}^{(t)}$) を満足する. これが次節で述べる計量多次元尺度構成法への「入力データ」となる.

9.2 計量多次元尺度構成法

本節ではデータ可視化技術として重要な計量 MDS について簡単に説明する. 具体的には以下の手続きにより計量 MDS を構成する. まずは, P 次元のベクトルで株価 i の「P 次元空間内での位置」を表すことにし, $\boldsymbol{X}_i \equiv (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{iP})$, $i = 1, \cdots, N$ と置く. i は銘柄価格のインデックス

である．このとき, 銘柄 i, j 間の距離をユークリッド距離として

$$d_{ij} = \sqrt{\sum_{m=1}^{P} (x_{im} - x_{jm})^2} \tag{9.6}$$

で定義しておこう．このとき, 2 つの銘柄ベクトルの内積 $z_{ij} \equiv \sum_{m=1}^{P} x_{im} x_{jm}$ は N 点の重心を起点にして

$$z_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} d_{ij}^2 + \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} d_{ij}^2 - \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} d_{ij}^2 - d_{ij}^2\right) \tag{9.7}$$

のように距離 d_{ij} の関数として与えられる．よって, ここでの問題は次のエネルギー関数:

$$E = \sum_i \sum_j \left(z_{ij} - \sum_{m=1}^{P} x_{im} x_{jm}\right)^2 \tag{9.8}$$

を $\boldsymbol{X}_i; i = 1, \cdots, N$ に対して最小化する「最適化問題」として定式化できる．この最適化問題の解は $N \times N$ 対称行列 $\boldsymbol{Z} \equiv \{z_{ij} | i, j = 1, \cdots, N\}$ と, $\boldsymbol{X}$ を縦に並べた $P \times N$ 行列

$$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N)^T \tag{9.9}$$

に対して

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T \tag{9.10}$$

で与えられる．このとき, Z は実対称行列なので

$$\boldsymbol{Z}\boldsymbol{y}_k = \lambda_k \boldsymbol{y},\ k = 1, \cdots, N \tag{9.11}$$

を満たす $\boldsymbol{Z}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{y}$ に対し,

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Y}^T \tag{9.12}$$

なるエッカート・ヤング分解が可能である．ここに, $\boldsymbol{Y} = (\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_N)^T$ であり, $\boldsymbol{\Lambda}$ は $\boldsymbol{Z}$ の固有値を $\lambda_1, \cdots, \lambda_N$ の順番に対角成分に並べた行列である．従って, 直ちに

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \tag{9.13}$$

が求める最適化問題の解となる．

9.2.1 震災前後の日経株価データによる検証

ここでは上述の計量 MDS を具体的な株式データに当てはめてみる．ここで扱うデータとしては「Yahoo! ファイナンス」から入手したものを用いる．具体的には「TOPIX Core30」と呼ばれる代表的 30 銘柄[60] を含む東証上場企業からもいくつかの銘柄株をランダムに 200 銘柄取り込んだ「混合データ」を可視化した結果を図 111 に載せる．窓幅 M は 1 週間 ($M = 7$) に選んだ[61]．この図より, 明らかに震災直後の 3/11 に広く散布していた点群が 3/15 には限定された領域に収縮し, 各業種毎にそれぞれ固まった非自明な形状をとることがわかる．これらクラスタの形状は明らかに平時の散布図と異なるものである．

[60] TOPIX Core30 とは, TOPIX ニュー・インデックス・シリーズの一つで, 東京証券取引所の市場第一部全銘柄のうち「時価総額」「 流動性」の特に高い 30 銘柄で構成された株価指数である．

[61] 理論的には窓幅を各銘柄の自己相関関数の緩和時間 (の最大値) 程度にとるのが自然かもしれないが, ここでは試験的に 1 週間 ($M = 7$) にとった．

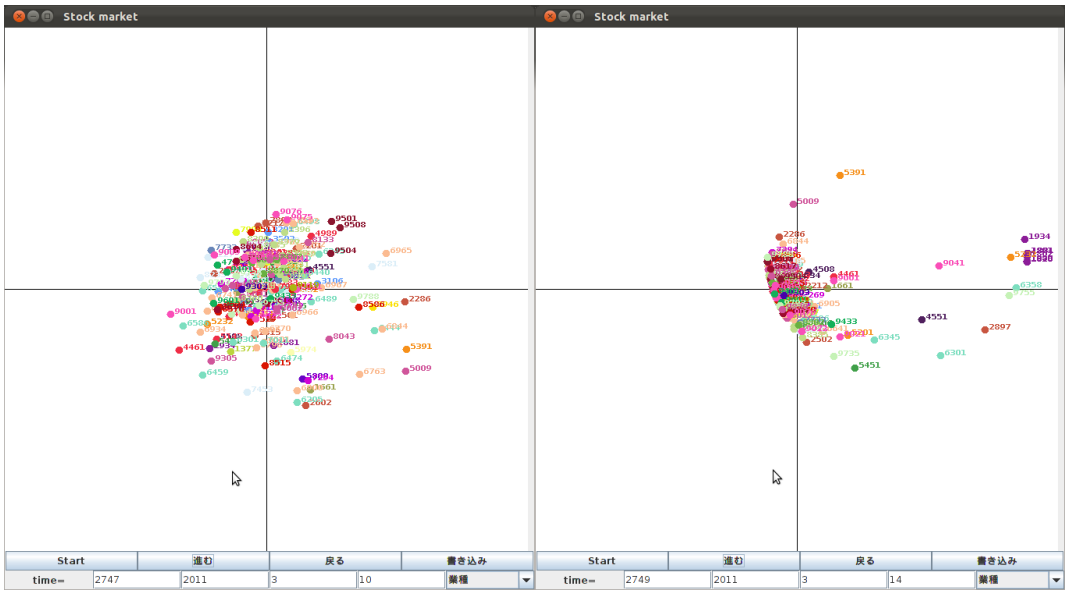


図 111: 2000 年から東証に上場している企業からランダムに 200 銘柄選択したデータに, 日経平均株価終値を含めた「混合データ」を計量 MDS に基づいて可視化した結果. 時間窓幅は $M = 7$ とした. 2011 年 3 月 10 日 (左), 14 日 (右) の結果. 各 ID で銘柄を特定. 色は業種を表す. 震災後に現れる孤立点は 1934: (株) ユアテック (東北地方の建設会社), 1826: 佐田建設である.

9.3 イジングスピン系と予測モデル

金融商品の価格時系列を予測する試みは古くから数々提案されており, この講義で既にみてきた AR モデルやそれらの拡張である ARCH や GARCH モデル, あるいはカルマンフィルタ等の伝統的時系列予測アルゴリズムの他, 最近では物理学をその基礎とした予測手法も提案されている. そこで, この節からは複数銘柄間の相互相関を用いて複数銘柄価格を同時予測する方法を提案する. 我々の手法はイジング模型の一つである「層状結合した時間依存磁場中のイジング模型」で記述される. すなわち, 我々がこの講義で主に扱ってきたイジング模型が金融・経済の分野でも利用できることを見ていくことになる.

9.3.1 価格のダイナミックス

金融市場において, ある特定の一銘柄に着目し, その時刻 t での価格を p_t と書こう. この単位時間ステップ後の時間変化 $p_{t+1} - p_t$ は次式で与えられる.

$$p_{t+1} - p_t = \delta_t \equiv \delta_t(\{t-1\}_M) \tag{9.14}$$

ここに, $\delta_t(\{t-1\}_M)$ はリターンが時刻 $t-1, t, \cdots, t-M+1$ の過去 M ステップ以前までの市場履歴の関数であることを陽に示すために記した (以下では省略する). リターン δ_t は時間依存するマクロ変数であるが, 市場に参加する個々のトレーダのミクロな意思決定の結果得られる物理量であることに注意する.

9.3.2　マクロ変数のミクロな構築

個々のトレーダ $i = 1, \cdots, N$ は利用可能な情報や個々の経験に基づき, 時刻 t において, 量 v_{it} だけの金融商品を取引き (売り/買い) する. そこで「買い」グループを $\mathcal{A}_+^{(t)}$, 「売り」グループを $\mathcal{A}_-^{(t)}$ で定義すると, 市場で売られた/買われた総価格はそれぞれ

$$\psi_+^{(t)} \equiv \sum_{i \in \mathcal{A}_+^{(t)}} v_{it}, \quad \psi_-^{(t)} \equiv \sum_{i \in \mathcal{A}_-^{(t)}} v_{it} \tag{9.15}$$

で与えられる. 従って, 時刻 t で「買い超過」$\psi_+^{(t)} > \psi_-^{(t)}$ であれば, 次の時刻で商品は値上がりし, 逆に「売り超過」$\psi_+^{(t)} < \psi_-^{(t)}$ であれば価格は下がると考えるのが自然であろう. そこで, (9.14) 式のリターンを比例係数を λ として

$$\delta_t = \lambda(\psi_+^{(t)} - \psi_-^{(t)}) \tag{9.16}$$

と書く. 個々のトレーダのミクロな意思決定と上記リターン δ_t を結びつけることが, 以下での主要な問題である.

9.3.3　時間依存磁場中のイジング模型

各トレーダ $i = 1, \cdots, N$ の「買い」「売り」の意思決定をイジングスピン:

$$S_i^{(t)} = \begin{cases} +1 & \text{「金融商品を買う」} \\ -1 & \text{「金融商品を売る」} \end{cases} \tag{9.17}$$

で区別する. この変数を導入することで, リターンを

$$\delta_t = \lambda(\psi_+^{(t)} - \psi_-^{(t)}) = \lambda \sum_{i=1}^{N} v_{it} S_i^{(t)} \tag{9.18}$$

と書くことができることに注意する. 以下では簡単のため, 各トレーダの取引き量は時刻に依らず一定 $v_{it} = 1\,(\forall i, t)$ とし, 価格の変動幅が $[-1, 1]$ の間に収まるよう, スケール・パラメータを $\lambda = N^{-1}$ とおく. このとき, リターンは

$$\delta_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} S_i^{(t)} \tag{9.19}$$

としてシステムの「磁化」で書けることになる.

さて, トレーダはある種の確率的意思決定を行うものとし, 金融市場のエネルギー関数を次式で定義する.

$$E(\boldsymbol{S}) = -\frac{1}{z} \sum_{i,j=1}^{N} J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^{N} h_i \sigma_\tau^{(t)} S_i \tag{9.20}$$

我々がこの講義の「最適化問題」のところでみた 2 スピン $2^2 = 4$ 状態のエネルギー関数: $E(s_1, s_2) = -Js_1s_2 - h_1s_1 - h_2s_2$ と比較すると, 上記がこの 2 スピンの問題の N スピンへの自然な拡張となっていることは容易に見てとれるであろう. ここに, 右辺第 1 項の $J_{ij} \in \mathcal{R}$ はトレーダ群からなるコミュニティの「重み付き隣接行列」であり, z はこのネットワークの「平均次数」である. この第 1 項はいわゆる「ケインズのビューティ・コンテスト」の効果を表し, 周りのトレーダが「売り」に走ると自分も「売り」に動く, といった類いの「協調行動」の効果を表す. このように, トレーダが周りにつられて協調行動をとり始める現象を行動経済学では「ハーディング現象」「インフォメー

ション・カスケード」と呼んでいるが, ここでみるように, その現象はエネルギー関数 (9.20) で記述される「イジング模型」で再現することができ, 統計力学の知見を用いると, トレーダ (要素) 間の相互作用に基づく「協力現象」として, 部分的にではあるが説明することができる.

ここでトレーダ自身の「周辺」をどのように定義するか, は重み付き隣接行列 J_{ij} の選び方に依存するが, ここでは全トレーダが同じ強さで互いに結合するものと考える. つまり, $J_{ij} = J > 0$ $(\forall_{i,j}), z = N$ である. 一方, 第 2 項は過去数 τ ステップの市場情報に対する「トレーダの反応」を表す効果であり, 例えば, 全てのトレーダがそのような情報を利用し ($h_i > 0$ $\forall i$. もし, 特定のトレーダ i がそのような情報を利用しなければ $h_i = 0$), 利用可能な市場情報としてトレンド:

$$\sigma_\tau^{(t)} = \frac{p_t - p_{t-\tau}}{\tau} \tag{9.21}$$

を選べば, これが「買い」($\sigma_\tau^{(t)} > 0$) に傾いていれば, 全てのトレーダが「買い」($S_i = 1$) に動くことでエネルギー関数が減少する. ここでは簡単のため, 全てのトレーダが同じ重みで市場情報を利用する ($h_i = h$ $\forall i$) と考える[62]. 従って, J, h の大きさを適切に決定した後, エネルギー関数 (9.20) の最小エネルギー解 $\boldsymbol{S}$ が金融市場の典型的状態を表すことになる.

このとき, (9.20) 式で与えられるエネルギー関数:

$$E(\boldsymbol{S}) = -\frac{J}{N}\sum_{i,j=1}^{N} S_i S_j - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_\tau^{(t)} S_i \tag{9.22}$$

はトレンド $\sigma_\tau^{(t)}$ を各イジング・スピンに作用する, 時間依存性をもつ「一様磁場」とみなせば, (9.22) 式は時間依存磁場中のイジング模型となる[63].

9.3.4 多様性最大化原理とボルツマン分布

エネルギー関数 (9.22) を最小化するベクトル: $\boldsymbol{S} = (S_1, \cdots, S_N)$ は多くの場合「唯一」であるが, 実際のトレーダ群の意思決定は「多様性」を持つべきである. そこで, トレーダの意思決定ベクトル $\boldsymbol{S}$ の「アンサンブル」を考え, その分布を $P(\boldsymbol{S})$ とし, 確率分布の規格化:

$$\sum_{\boldsymbol{S}} P(\boldsymbol{S}) = 1 \tag{9.23}$$

エネルギー期待値一定:

$$\sum_{\boldsymbol{S}} P(\boldsymbol{S}) E(\boldsymbol{S}) = E \tag{9.24}$$

のもとで多様性指標である情報論的エントロピー:

$$H = -\sum_{\boldsymbol{S}} P(\boldsymbol{S}) \log P(\boldsymbol{S}) \tag{9.25}$$

を最大化する分布を考えると, それは次の**ボルツマン分布**となる.

$$P(\boldsymbol{S}) = \frac{\exp[-\beta E(\boldsymbol{S})]}{\sum_{\boldsymbol{S}} \exp[-\beta E(\boldsymbol{S})]} \tag{9.26}$$

[62] 各トレーダがまちまちな重みで市場履歴を考慮する場合には「ランダム磁場イジング模型」となる.
[63] 利用可能な市場情報 σ_τ としては, (9.21) 式で定義される「トレンド」に限らず, 例えば長期もの国債の価格予測に対しては「金利」の変動情報を用いても良い.

ここで, β はシステムの「逆温度」であり (温度を T として $\beta = 1/T$), 以下では簡単のため $\beta = 1$ とおく. また, ベクトルに関する和の定義は

$$\sum_{\boldsymbol{S}}(\cdots) = \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} (\cdots) \tag{9.27}$$

であることに注意されたい.

9.3.5 ベイズ統計に基づく定式化

(9.26) 式で与えられるボルツマン分布 $P(\boldsymbol{S})$ をベイズ統計の「事後確率」として導出することもできる. まず, 各トレーダ i が自らの意思決定 $S_i = \pm 1$ を行った後, 市場において保有株の価格が σ_τ だけ「値上がり」あるいは「値下がり」したと考える. このとき, その意思決定による「報酬」は $\sigma_\tau S_i$ で測ることができる. つまり, この値が「正」で大きければトレーダ i の報酬は大きく (「負」で大きければ「損失」が大きい), 逆に「正」で小さければ報酬は小さい. 従って, 次の条件付き確率:

$$P(\sigma_\tau|\boldsymbol{S}) \propto \exp\left(h\sum_{i=1}^{N}\sigma_\tau S_i\right) \tag{9.28}$$

はトレーダ群の意思決定による「原因」$\boldsymbol{S}$ に対する「結果」σ_τ を与える「尤度」と解釈することができる. 我々がここで必要なのは, 意思決定の「結果」σ_τ が与えられた際の「原因 (予測)」$\boldsymbol{S}$ であるから, $Q(\boldsymbol{S})$ を事前確率としたベイズの公式から

$$P(\boldsymbol{S}|\sigma_\tau) \propto P(\sigma_\tau|\boldsymbol{S})Q(\boldsymbol{S}) \tag{9.29}$$

が得られる. 事前確率は「トレーダは兎角周りに流されて意思決定しやすい」という「ケインズのビューティ・コンテスト」効果を反映させて

$$Q(\boldsymbol{S}) \propto \exp\left(\frac{J}{N}\sum_{ij} S_i S_j\right) \tag{9.30}$$

と選ぶことができる. (9.28)(9.30) 式を (9.29) 式に代入し

$$P(\boldsymbol{S}|\sigma_\tau) = \frac{\exp(\frac{J}{N}\sum_{ij} S_i S_j + h\sum_i \sigma_\tau S_i)}{\sum_{\boldsymbol{S}} \exp(\frac{J}{N}\sum_{ij} S_i S_j + h\sum_i \sigma_\tau S_i)} \tag{9.31}$$

が事後確率となるが, これは (9.26) 式の $P(\boldsymbol{S})$ を与える.

9.3.6 リターンと磁化の平均場方程式

リターンを与える (9.18) 式をミクロに構築することが我々の当面の目標であったが, 与えられた市場情報 $\sigma_\tau = \sigma_\tau^{(t)}$ のもとで, $\boldsymbol{S}^{(t)} = (S_1^{(t)}, \cdots, S_N^{(t)})$ の確率過程が「エルゴード的」であれば, 時間間隔 $M(< \infty)$ に渡る物理量 B_t の移動平均を

$$\overline{B_t} = \frac{1}{M}\sum_{i=t-M+1}^{t} B_i \tag{9.32}$$

と定義すると, リターンの移動平均は

$$\overline{\delta_t} = \overline{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i^{(t)}} \simeq \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{S}} P(\boldsymbol{S}) \sum_{i=1}^{N} S_i \equiv m \tag{9.33}$$

と, 近似的に一様磁場中の伏見-テムパリ模型における磁化 m で書ける. この模型の場合, 磁化 m が厳密に計算できて, 与えられた「システム・パラメータ」J, h と「入力データ」σ_τ のもとで, 次の状態方程式 (平均場方程式):

$$m = \tanh(Jm + h\sigma_\tau) \tag{9.34}$$

の解として与えられる.

9.3.7 システム緩和と磁化の更新式

前節までで, リターンの移動平均値をアンサンブル平均値で置き直す際, その値がシステムの「磁化」を用いて書けることをみてきた. しかし, この取り扱いはやはり「近似」であり, 価格の更新式 (9.14) に現れるリターンが「平衡状態」の磁化で置き換え可能か否かは議論の余地がある. そこで, ここでは, 状態方程式の解としての磁化をリターンとするのではなく, 平衡状態へ至る磁化の時間発展:

$$m_{t+1} = \tanh(J_t m_t + h_t \sigma_\tau^{(t)}) \tag{9.35}$$

で各時刻のリターン $\overline{\delta_t}$ $(t = 1, 2, \cdots)$ を置き換える. ここで, パラメータ J_t, h_t は価格推定を試みる期間において一定値をとる, 市場をマクロに特徴つけるシステム・パラメータである. 通常, 状態方程式 (9.34) の反復数値解法で行うように, (9.35) 式を適切な初期値から十分繰り返すとことで, その収束点が (9.34) の解となる. ここでは, その手続きを「1 ステップ」だけ実行することで, 区間 $M(< \infty)$ での時間平均が実現されると考える. このとき, 価格の予測式は

$$p_{t+1} = p_t + m_t \tag{9.36}$$

で 陽に与えられる.

9.4 相互相関と複数銘柄同時予測

前節までの議論では, 単一銘柄の市場履歴のみを情報として利用した. しかし, 既に見たように, 現実には東日本大震災を引き金とした東証株価のクラッシュにおいては, 多くの異なる銘柄株価は「協調した」値動きをする. 従って, これらの「銘柄間相互相関」の情報を予測に役立てることはできないか, ここで検討することは十分に意義あることであろう. 実際の金融取引においても, 「同業種」「異業種」に関わらず, 保有銘柄に関連する複数銘柄の値動きの「関係性」に着目した意思決定を行うことは極めて合理的であるように思われる.

そこで, ここでは利用可能な株価情報が K 銘柄分あるとして (9.36) 式, エネルギー関数を次式で修正する.

$$p_{t+1}^{(k)} = p_t^{(k)} + m_t^{(k)}, \;\; k = 1, \cdots, K \tag{9.37}$$

$$E_k(\boldsymbol{S}^{(k)}) = -\frac{J_t^{(k)}}{N}\sum_{ij} S_i^{(k)} S_j^{(k)} - h_t^{(k)} \sum_i \sigma_\tau^{(k,t)} S_i^{(k)} - \gamma_l^{(k)} \sum_i \left(\frac{1}{K} \sum_{\mu=1}^{K} c_{k\mu}^{(t-1)} m_{t-1}^{(\mu)} \right) S_i^{(k)} \tag{9.38}$$

ここに, $\boldsymbol{c}^{(t-1)} = \{c_{k\mu}^{(t-1)}\}$ はサイズが $(K \times K)$ の対称行列である. 前節までの推定方式との違いはエネルギー関数右辺の第 3 項であり, 特定の「第 k 銘柄」以外の株価の直近時刻のリターンに関する効果を表している.

9.4.1 局所的相互相関情報の利用

そこで「ある銘柄が値上がりすれば, 逆に価格が下がる銘柄もある」という局所的な相互相関情報を利用することを考えよう. つまり, 相関行列 $\boldsymbol{c}^{(t)}$ の成分を銘柄間の相関係数: $c_{k\mu}^{(t)} = \rho_{k\mu}^{(t)}$ に選ぶ. ここで, もし, 銘柄 a, b 価格が無相関な場合, $c_{ab}^{(t)} = 0 \ (\forall t)$ であるから, 銘柄 a の株価予測において銘柄 b からの効果は一切効かない. 逆に, ある時刻 t で計算された相関係数が $c_{ab}^{(t)} \simeq 1$ となり, t の直近 M 区間で銘柄 a, b が非常に強い相関を持つのであれば, 次時刻 $t+1$ 銘柄 a, b の予測値は互いに同じ値に近づこうとする. 従って, エネルギー関数 (9.38) は K 層からなる時間依存磁場中の伏見-テムパリ模型において, 各層間のスピンがそれぞれ相互相関を伴った平均場 $c_{k\mu}^{(t-1)} m_{t-1}^{(\mu)}$ で結合している「層状イジング模型」を表す[64]. 以上により, 予測方程式は $k = 1, \cdots, K$ に対して

$$p_{t+1}^{(k)} = p_t^{(t)} + m_t^{(k)} \tag{9.39}$$

$$m_t^{(k)} = \tanh\left(J_t^{(k)} m_{t-1}^{(k)} + h_t^{(k)} \sigma_\tau^{(k,t)} + \frac{\gamma_t^{(k)}}{K} \sum_{\mu=1}^{K} c_{k\mu}^{(t-1)} m_{t-1}^{(\mu)} \right) \tag{9.40}$$

となる. ここで, 全ての相関係数がゼロ, すなわち, $\boldsymbol{c}^{(t)} = 0 \ (\forall t)$ で全ての銘柄が無相関に動く場合, 上記の予測方程式は各銘柄価格が前節で得られた予測方程式 (9.35)(9.36) に従って決定される場合に一致する.

9.4.2 システム・パラメータの学習

予測式 (9.39)(9.40) を用いるためには, システム・パラメータ $\boldsymbol{\theta}_k \equiv \{J^{(k)}, h^{(k)}, \gamma^{(k)}\}$ を実データから決定すべきである. ここでは, (9.40) 式両辺の差を実測価格 $q_t^{(k)}$ に対して

$$m_t^{(k)} \to \overline{\Delta q_l^{(k)}} \equiv \frac{1}{M} \sum_{i=l-M+1}^{l} (q_{i+1}^{(k)} - q_i^{(k)}) \tag{9.41}$$

の置き換えで計算し, この差分に関する過去 t ステップに渡る累積二乗誤差:

$$\mathcal{E}_k(J_t^{(k)}, h_t^{(k)}, \gamma_t^{(k)}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{t} \left[\overline{\Delta q_l^{(k)}} - \tanh\left(J_t^{(k)} \overline{\Delta q_{l-1}^{(k)}} + h_t^{(k)} \sigma_\tau^{(k,t)} + \frac{\gamma_t^{(k)}}{K} \sum_{\mu=1}^{K} c_{k\mu}^{(t-1)} \overline{\Delta q_{l-1}^{(\mu)}} \right) \right]^2 \tag{9.42}$$

を各銘柄 $k = 1, \cdots, K$ ごとにコスト関数として定義し, 学習係数を η とした勾配法:

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1}^{(k)} = \boldsymbol{\theta}_t^{(k)} - \eta \frac{\partial \mathcal{E}_k(\boldsymbol{\theta}_t^{(k)})}{\partial \boldsymbol{\theta}_t^{(k)}} \tag{9.43}$$

によってパラメータ $\boldsymbol{\theta}_k \equiv \{J^{(k)}, h^{(k)}, \gamma^{(k)}\}$ を更新する.

[64] 項 $m_{t-1}^{(\mu)} S_i^{(k)}$ は「銘柄 μ を代表する典型的トレーダ $m_{t-1}^{(\mu)}$」(有り体に言えば, FX 取引きにおける「ミセス・ワタナベ」のようなトレーダ) の意思決定と銘柄 k を取引するトレーダ i の意思決定 $S_i^{(k)}$ の間の相関を表す.

9.5 計算機実験

上記の予測方程式 (9.39)(9.40)(9.43) の妥当性を検証するため, 2010 年 4 月 27 日から 2010 年 5 月 13 日までの欧州ギリシャ・ショック前後における欧州ユーロ/豪ドル ($k=1$), 欧州ユーロ/加ドル ($k=2$), 欧州ユーロ/日本円 ($k=3$) の $K=3$ 種の為替データに対して計算機を用いた性能評価のための数値実験を行う.

得られた計算機実験結果を図 112 に載せよう. この図より, 各々の時系列において, それぞれの

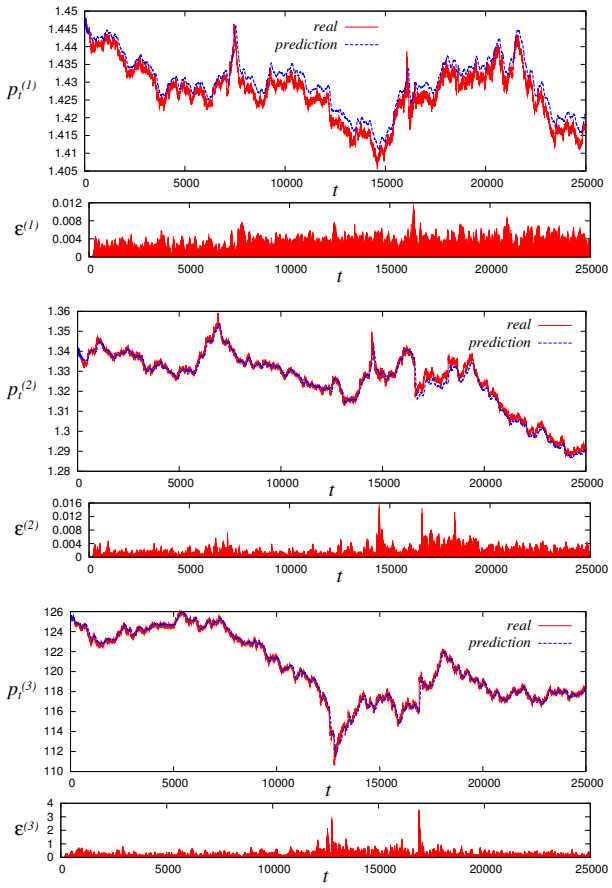


図 112: 2010 年 4 月 27 日から 2010 年 5 月 13 日までの, 欧州ギリシャ・ショック前後の欧州ユーロ/豪ドル ($k=1$), 欧州ユーロ/加ドル ($k=2$), 欧州ユーロ/日本円 ($k=3$) 為替レートの実測値 $q_t^{(k)}$ とその予測値 $p_t^{(k)}$, および, それらの 2 乗誤差 $\varepsilon_t^{(k)} \equiv (q_t^{(k)} - p_t^{(k)})^2$. $M=\tau=100, \eta=0.01$ に選んだ.

平均為替レートに対し, コンマ数パーセントの誤差の範囲内での予測が実現されていることが見てとれる.

次に, 各時刻でのシステム・パラメータの振る舞いを図 113(上) に載せる. この図より, パラメータ $J^{(k)}, h^{(k)}$ は $h^{(k)} \simeq 0, J^{(k)} \simeq 1$ で特徴つけられる相転移点に向かって行くことが見てとれる. このとき, 相関係数 $c_{k\mu}^{(t)}$ は不規則に変化を続けるが (図 113 (下)), システム・パラメータの一つである相関強度 $\gamma^{(k)}$ はゼロへ向かう.

注目すべきは, パラメータ $1/J^{(k)}$ が $h^{(k)}$ がほぼゼロへ近づいた後, $1/J^{(k)}$ の大きな「弱結合領域」から転移点へ向かって変化している事実である. ここでの結果から, 危機直後からトレーダはデータを重視した「合理的意思決定」よりも, むしろ, 周りの雰囲気に流された「非合理的意思決

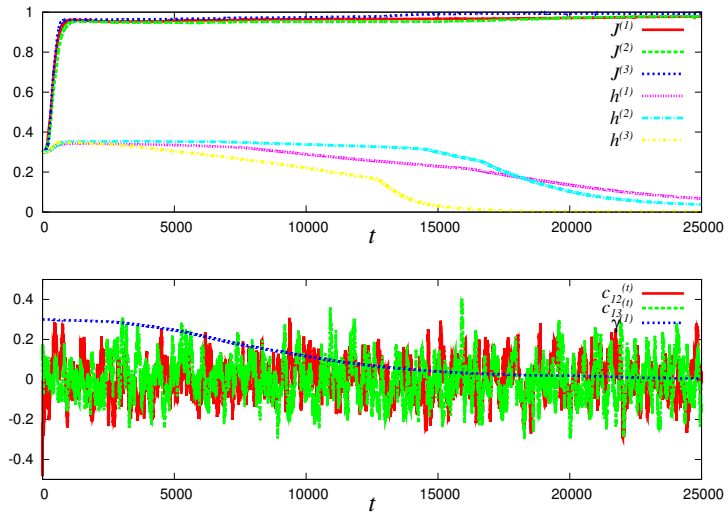


図 113: システム・パラメータ $J_t^{(k)}, h_t^{(k)}$, $k = 1, 2, 3$ の時間変化 (上). 下図は相互相関係数 $c_{12}^{(t)}, c_{13}^{(t)}$, および, $\gamma_t^{(1)}$ の変化.

定」を開始する. これより, 行動経済学における「ハーディング現象」が部分的にイジング模型の「フィルタ」を介して観測できたことになる.

9.6　3 状態イジング模型による拡張

前節では, 各トレーダが「売り」「買い」の 2 つの選択肢の一方を必ず選ばなければならず, そこに「市場動向によっては状況を静観する」という判断は許されない. しかし, 例えば震災直後, その後継続して手持ちの金融銘柄が続落することが確かだと思われれば, トレーダは必ず「売り」のアクションをとるであろうが, 逆に, 危機後の見通しが必ずしも明らかでなく, 時間をおいて, より多角的な情報源から最終判断をした方がよいと思えば「静観」する可能性が高い. 危機直後において, この「静観」のアクションをとるトレーダの割合を系統的に調べることで, 危機をミクロなトレーダの多角的意思決定のマクロな結果から特徴つけることができるかもしれない.

そこで, 本説ではトレーダの「静観」も許す「3 状態イジング模型」を導入し, 金融危機を市場に参加するトレーダの割合から特徴付けることを試みる. 具体的には, 各トレーダに “±1” (売り/買い), “0” (静観) の 3 つの選択肢を与え, “0” 以外の判断を行ったトレーダの割合を「出来高」として定義し, この量を金融危機前後で測定する. このとき, 出来高の共役変数として「化学ポテンシャル」 が自然な形でエネルギー関数に導入できる. 我々はこれらのハイパー・パラメータ, 出来高の時間発展を危機前後で観測/計算することで, 金融危機を「自己組織臨界現象」として特徴付けることの妥当性を検証する.

9.6.1　予備実験: 危機後の価格変動幅分布

この節では, 予備実験としてイジング模型という「ミクロなフィルタ」を介して金融データのマクロな振る舞いを考察するのではなく, 金融データの回収とより簡便, 直接的な統計解析から東日本大震災やリーマンショックを引き金とする危機を特徴付けることができないかを考えてみたい.

そこで, 危機後における市場の動きを株価の変動幅

$$|q_{t+1} - q_t| \equiv |m| \tag{9.44}$$

の分布を介して眺めてみる. このとき, 平時の市場では, 価格変動は「小刻み」で, その幅は比較的小さなものが多く, 大きな変動幅は稀であることから, $|m|$ についての標本分布を作ると $|m|$ の増加とともに急峻に減少する「指数分布」が得られると予想できる. 一方震災, ショック後は, この危機に派生する大きな変動幅も頻繁に混じるようになり, あらゆるスケールの変動が現れ, 変動幅に特徴的スケールを持たない「ベキ分布」となることが予想される. そこで「金融危機後における日経平均の変動幅 $|m|$ の標本分布はベキ分布 (あるいは指数分布) となる」という仮説を立て, それについて検証を試みてみたい. ここで解析に用いるデータは Yahoo!ファイナンスより取得した日経平均株価であり, 取引きごとに更新される, 所謂「高頻度金融データ」ではなく, 一日ごとの終値からなる「デイリー・データ」である. 具体的には, 現在までに蓄積されているデータ数を考慮し, 東日本大震災を起点とするのではなく, 株価暴落が起こったリーマンショック後の日経平均株価のデータを利用する (図 114(上)). 図 114(下図) は日経平均株価について, リーマンショック前 (左図), 後 (右図) に対し, 株価変動幅分布をプロットした. これらプロットからの目視で両者の違いを判定す

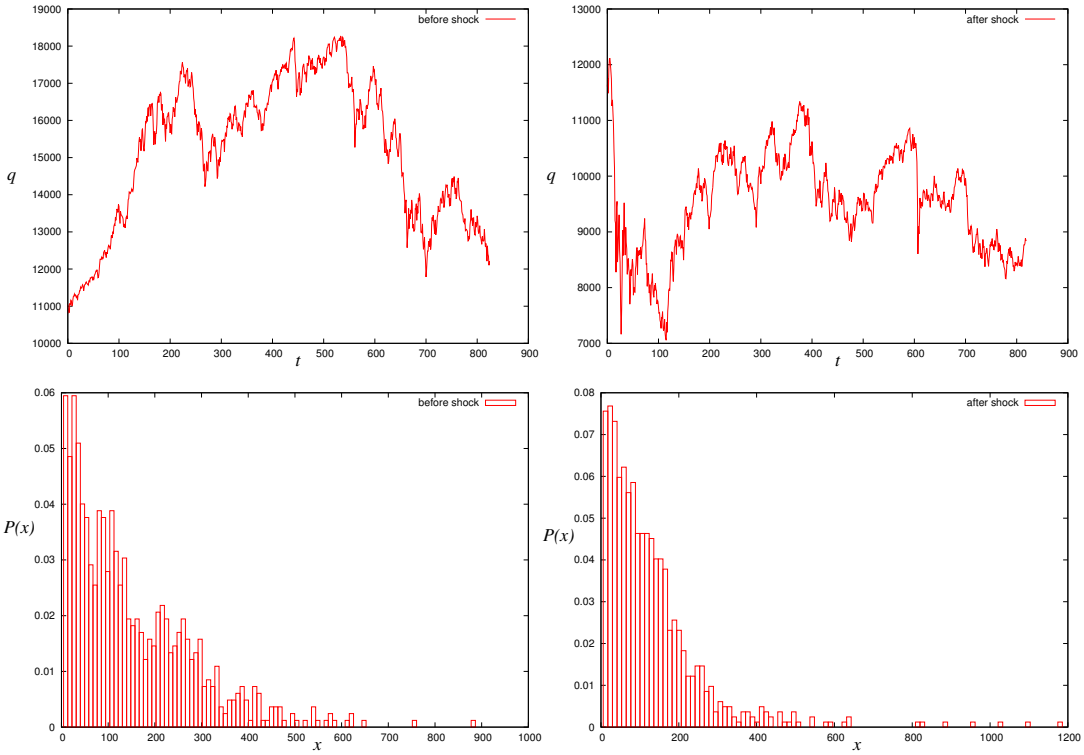


図 114: リーマンショック前 (左), 後 (右) の日経平均株価の時系列 (上図) とそれらの変動幅分布 (下図).

ることは困難なので, 次節では統計的検定を試みる.

9.6.2 コルモゴロフ-スミルノフ検定

ここでは, 前節で用いたリーマンショック後の日経平均株価の実データに対し, コルモゴロフ-スミルノフ検定 (以下では「KS 検定」と略記) を試みる. 具体的には, 価格変動幅 $x \equiv |m|$ に関する N 個の標本点からなる標本分布:

$$s(x) \equiv \frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\delta_{x,|q_{t+1}-q_t|} \tag{9.45}$$

に対し, 帰無仮説「標本分布 $s(x)$ は分布 $f(x)$ である」を統計的に検定する. このとき, $s(x)$ を十分にうまく表現することのできる確率分布の候補をベキ分布:

$$f(x) \propto \mathrm{e}^{-\alpha x} \tag{9.46}$$

および, 指数分布:

$$f(x) \propto x^{-\alpha} \tag{9.47}$$

に選び, それぞれの累積分布を

$$F(x) = \int_0^x f(s)ds \tag{9.48}$$

とし, (9.45) の累積分布 $S(x)$ に対する分布 $F(x)$ の「一標本 KS 検定」を行う. よく知られたように, KS 検定量:

$$z \equiv D\sqrt{N} = \max_x |S(x) - F(x)|\sqrt{N} \tag{9.49}$$

は次式

$$Q_{KS}(z) = 2\sum_{i=1}^{\infty}(-1)^{i-1}\exp(-2i^2z^2) \tag{9.50}$$

に従う. よって, 有意水準を 5% に決めると, 式 (9.50) で表わされる $Q_{KS}(z) = 0.05$ を z について解けば $z^* = 1.36$ となるので, $z = D\sqrt{N}$ の値が 1.36 以上, すなわち, $z \geq z^*$ ならば帰無仮説「$s(x)$ と $f(x)$ が同一」が棄却でき, 両分布は「一致しない」と結論される. ここでは, z は α に依存することを考慮し, α の値を変化させつつ KS 検定統計量 $z = D\sqrt{N}$ を α の関数としてプロットする. 標本点数は $N = 100$ である. 結果を図 115(左) に載せよう. この図内に描かれた「水平線」はそれぞれ有意水準 5% と 1% に対応する $z^* = 1.36, 1.62$ の値である. このグラフから z が最小値をとる $\alpha = 0.84$ においてさえ, $z > z^* = 1.62$ であり, 帰無仮説「標本累積分布はベキ分布である」が棄却されることがわかる.

次に $f(x)$ を指数分布と選んだ場合も同様にプロットすると, 図 115(右) のようになる. この図より, $\alpha = 10.0$ において, z は有意水準 5% と 1% のライン $z^* = 1.36, 1.62$ を大きく下回っており, 帰無仮説「標本累積分布は指数分布である」を棄却できない. 従って「指数分布である」とも言えないので, 結局, ここで用いたデータセットの範囲内で, 金融危機を価格変動幅の分布で特徴付けることはできないことがわかった. そこで, 次節以降ではミクロなフィルタとしての「3 状態イジング模型」を導入し, そこに自然な形で現れる秩序変数「出来高」の振る舞い等から金融危機が特徴つけられるかを詳しく考察していく.

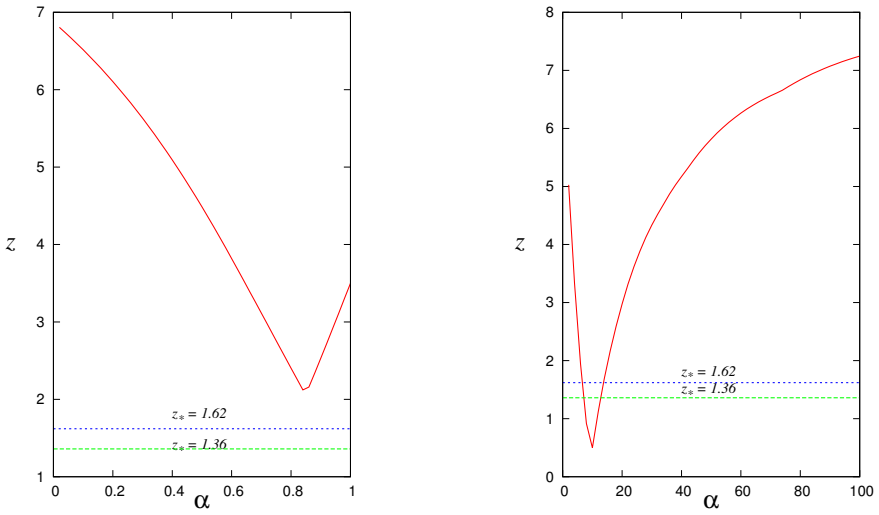


図 115: リーマンショック後の価格変動幅の標本分布に関する一標本 KS 検定. 標本数は $N = 100$ である. 左図は $f(x)$ をベキ分布 $x^{-\alpha}$ に選んだ場合, 右側は指数分布 $\mathrm{e}^{-\alpha x}$ に選んだ場合の検定統計量 z の α に関する振る舞い. 有意水準 5% と 1% のライン $z^* = 1.36, 1.62$ も引いてある.

9.6.3 定式化

ここからは前節の時系列解析を 3 状態イジング模型を用いて修正したい. はじめにトレーダ群の意思決定を記述するエネルギー関数を次式で修正する.

$$H = -\frac{J}{N}\sum_{i,j=1}^{N} S_i S_j - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_t S_i - \mu\sum_{i=1}^{N}|S_i| \tag{9.51}$$

イジング模型では, 意思決定変数 S_i は ± 1 の 2 状態をとったが, ここでは, この変数が $S_i = +1, 0, -1$ をとり, $S_i = 0$ も許す. この $S_i = 0$ はトレーダ i が「売る」「買う」を行わず, 金融市場に参加しないことを意味する. すなわち

$$S_i = \begin{cases} +1 & (\text{トレーダ } i \text{ は「買う」}) \\ 0 & (\text{トレーダ } i \text{ は「静観」}) \\ -1 & (\text{トレーダ } i \text{ は「売る」}) \end{cases} \tag{9.52}$$

である. また, エネルギー関数 (9.51) 右辺第 3 項は, 市場に参加している (「静観」していない) トレーダ数をコントロールする項である. $\mu \gg 1$ の場合, 多くのトレーダは市場に参加し, $S_i = 0$ となる静観トレーダの数が少ない方が全エネルギーが下がる. このパラメータ μ は「化学ポテンシャル」に対応する. 後にみるように, この μ は金融時系列データから学習される.

このような 3 状態のイジング模型 (9.51) により, 予測精度がどのように改善するか等を調べるのが, ここからの主要な問題である. また, 市場に参加するトレーダ (「静観」していないトレーダ) の全トレーダ数に対する割合を調べることで, 金融危機前後における市場活性度の定量評価が期待できる.

9.6.4 状態方程式

予測式を構成するためには, エネルギー関数 (9.51) についての (熱) 平衡状態を記述する状態方程式の導出が必要である. 以下で簡単にその導出を見ていくことにしょう.

まず, エネルギー関数 (9.51) に対して分配関数は

$$Z = \sum_{\boldsymbol{S}=0,\pm 1} \exp\left[\left(\sqrt{\frac{J}{2N}}\sum_{i=1}^{N} S_i\right)^2 + h\sum_{i=1}^{N}\sigma_t S_i + \mu\sum_{i=1}^{N}|S_i|\right] \tag{9.53}$$

で与えられる. ここで, トレーダは全結合していること — 平均場模型 — に注意しょう. ガウス積分に関する恒等式 (ハバード・ストラトノビッチ変換):

$$\mathrm{e}^{a^2} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}+\sqrt{2}ax} \tag{9.54}$$

に注意すれば, $N\to\infty$ の極限でシステムは「一体問題化」され

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty}da\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\tilde{a}}{2\pi/N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dm}{\sqrt{2\pi/JN}}\mathrm{e}^{-\frac{NJ}{2}m^2+N\mu a-N\tilde{a}a}\left\{\sum_{S=0,\pm 1}\mathrm{e}^{(Jm+h\sigma_t)S+\tilde{a}|S|}\right\}^N \simeq \mathrm{e}^{N\Phi(m,a,\tilde{a})} \tag{9.55}$$

のように鞍点評価できる. ここに, 関数 Φ は

$$\Phi(m,a,\tilde{a}) = -\frac{J}{2}m^2 + \mu a - a\tilde{a} + \log\left\{1+\mathrm{e}^{\tilde{a}}2\cosh(Jm+h\sigma_t)\right\} \tag{9.56}$$

で与えられる. 鞍点条件 $\partial\Phi/\partial m = 0$ より, 直ちに

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}S_i = \frac{\mathrm{e}^{\tilde{a}}2\sinh(Jm+h\sigma_t)}{1+\mathrm{e}^{\tilde{a}}2\cosh(Jm+h\sigma_t)} \tag{9.57}$$

が得られる. これは磁化ではあるが, 以降で見るように, ここでは「価格変動幅」としての意味を持つことになる. すわなち, この値が正ならば「買い超過」であることをマクロに表現する.

また, 鞍点条件 $\partial\Phi/\partial\tilde{a} = 0$ より

$$a = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|S_i| = \frac{\mathrm{e}^{\tilde{a}}2\cosh(Jm+h\sigma_t)}{1+\mathrm{e}^{\tilde{a}}2\cosh(Jm+h\sigma_t)} \tag{9.58}$$

が得られるが, $\partial\Phi/\partial a = 0$ から $\tilde{a} = \mu$ となるので, これを (9.57)(9.58) 式にそれぞれ代入すると, 結局, システムの状態方程式は次の連立方程式で与えられる.

$$m = \frac{2\mathrm{e}^{\mu}\sinh(Jm+h\sigma_t)}{1+2\mathrm{e}^{\mu}\cosh(Jm+h\sigma_t)} \tag{9.59}$$

$$a = \frac{2\mathrm{e}^{\mu}\cosh(Jm+h\sigma_t)}{1+2\mathrm{e}^{\mu}\cosh(Jm+h\sigma_t)} \tag{9.60}$$

ここで, 明らかに変数 a は変数 m の「従属変数」であり, m の値が決定すれば確定する量である. 秩序変数 a は市場に参加しているトレーダの割合である. 従って, $(1-a)$ は市場に参加しないトレーダの割合となる. a が 1 に近いほど市場における当該商品取引の活性度が高い. 慣例的に金融市場では, 一日 (あるいは単位時間) に取引きされる商品の総量を「出来高」と呼ぶ. ここで我々が扱う数理モデル (9.51) では, 各トレーダは常に「単位 1」のボリュームを取引する. 従って,

$a = (1/N)\sum_{i=1}^{N}|S_i|$ は市場において当該商品の取引きされる「総量」ではないから, 厳密な意味で a を「出来高」と呼ぶことはできないが, ここでは便宜上, 物理量 a を「出来高」と呼ぶことにする. しかし, 必要とあらば, エネルギー関数 (9.51) において, 次の変換: $S_i \to v_i S_i,\ \ v_i \in \mathbb{R}^+$ を施すことで, 修正される秩序変数: $a = (1/N)\sum_{i=1}^{N}|v_i S_i|$ を本来の意味での「出来高」として扱うことができる[65].

さて, (9.59)(9.60) 式から明らかに, $\mu \to \infty$ の極限で

$$m = \tanh(Jm + h\sigma_t),\ \ a = 1 \tag{9.61}$$

となり, イジング模型の状態方程式に戻ることに注意しておこう. 次節で状態方程式 (9.59)(9.60) を解析することで, 平衡状態の性質について議論する.

9.6.5　熱平衡状態

まず, 外部磁場が無い場合 $h = 0$ に対し, 方程式 (9.59)(9.60) を数値的に解き, 磁化 m の $1/J$ 依存性を調べた結果を図 116(左) に載せる. この図より, 任意の μ の値に対し, m は $1/J$ の増加とともに単調減少し, 臨界点 $(1/J)_c$ でゼロとなる. この臨界点は μ の値に依存するので, 臨界点の μ 依存性を調べるため, (9.59) 右辺を m に関する一次の項まで展開すると, 直ちに

$$(1/J)_c = \frac{2\mathrm{e}^{\mu}}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu}} \tag{9.62}$$

が得られる. $\mu \to 1$ の極限で $(1/J)_c = 1$, すなわち, 2 状態のイジング模型の臨界点に一致することに注意されたい. 次に, 対応する $1/J$ での a の値をプロットすると図 116(右) となる. この図より, 転移点以上での a の値は $1/J$ の値によらずに

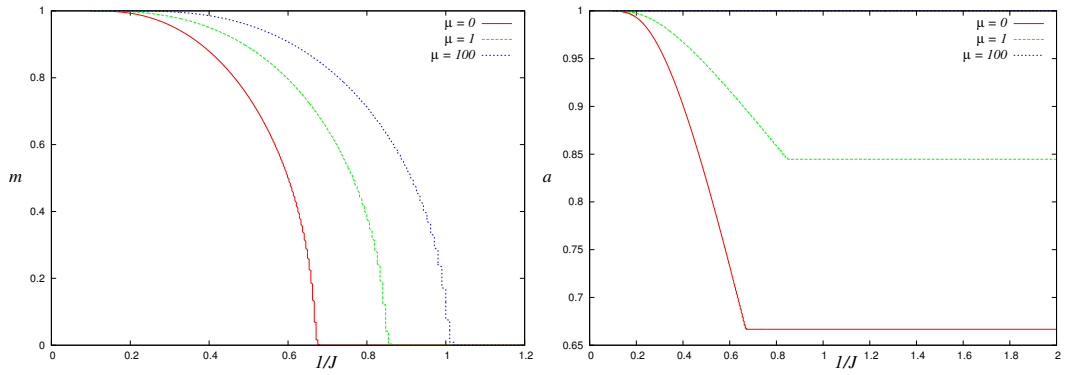


図 116: 磁場 $h = 0$ の場合の磁化 m, および, 出来高 a の $1/J$ の変化に対する振る舞い. 転移点 $(1/J)_c = 2\mathrm{e}^{\mu}/(1 + 2\mathrm{e}^{\mu})$ で二次転移を起こす.

$$a = \frac{\mathrm{e}^{\mu}}{1 + \mathrm{e}^{\mu}} \tag{9.63}$$

となる. ここでも, $\mu \to \infty$ の極限で $a = 1$ イジング模型に一致する.

[65] v_i はとトレーダ i の「時間によらない取引き総量」であると仮定すれば, v_i はスピングラスの言葉でいう「クエンチ変数」となり, $P(v_i)$ を想定し, m, a の自己平均性を用いて鞍点方程式を $P(v_i)$ で平均すればよいことになる.

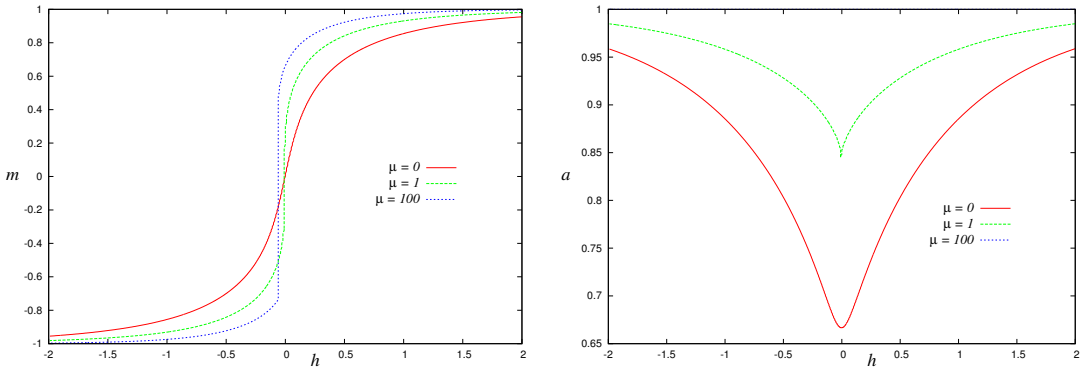


図 117: $J = 1.2$ の場合の磁化 m(左), 出来高 a の h の変化に対する振る舞い.

さて, J の値を固定して, h を負から正へ変化させていくと, $m > 0$, および, $m < 0$ となる自由エネルギーの双安定な 2 つの解間を行き来する自発的対称性の破れを伴わない一次転移が起こる (図 117 参照). この転移点前後での m の値 m_* は, (9.59) 式左辺が m_* において m と接線を共有する条件から, 直ちに

$$1 - m_*^2 = \frac{1}{4\mathrm{e}^{2\mu} - 1}\left\{\frac{1 - J(1 - m_*^2)}{2 - 2(1 - m_*^2)}\right\} + \frac{1}{J} \tag{9.64}$$

となる. このとき, $\mu \to \infty$ の極限では上式右辺第 1 項が落ち, 2 状態イジング模型の結果:

$$m_* = \pm\sqrt{(J-1)/J} \tag{9.65}$$

と一致することに注意しよう. 一方, 化学ポテンシャル μ が有限: $\mu < \infty$ の場合, 転移点直上の m_* は次式で与えれることになる.

$$m_* = \begin{cases} \pm\sqrt{\frac{J-1}{J}} & (\mu \geq \frac{1}{2}\log(\frac{J^2+2}{8})) \\ \pm\frac{\sqrt{J^2-2(4\mathrm{e}^{2\mu}-1)}}{J} & (\mu < \frac{1}{2}\log(\frac{J^2+2}{8})) \end{cases} \tag{9.66}$$

また, このときの転移点 h_c は

$$\frac{1}{J} = \frac{4\mathrm{e}^{2\mu} + 2\mathrm{e}^{\mu}\cosh(Jm_* + h_c\sigma_t)}{(1 + 2\mathrm{e}^{\mu}\cosh(Jm_* + h_c\sigma_t))^2} \tag{9.67}$$

の解である. 次節では, これらを踏まえて予測式を構築し, その統計的性能を計算機実験によって検証する.

9.6.6 修正予測モデル

前節で導出した状態方程式に基づく価格の推定式, および, ハイパー・パラメータの学習方程式は次式で与えられる.

$$
\begin{aligned}
p_{t+1} &= p_t + m_t && (9.68)\\
m_t &= \frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \sinh(J_t m_{t-1} + h_t\sigma_t)}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t m_{t-1} + h_t\sigma_t)} && (9.69)\\
J_{t+1} &= J_t - \eta\frac{\partial\mathcal{E}(J_t, h_t, \mu_t)}{\partial J_t} && (9.70)\\
h_{t+1} &= h_t - \eta\frac{\partial\mathcal{E}(J_t, h_t, \mu_t)}{\partial h_t} && (9.71)\\
\mu_{t+1} &= \mu_t - \eta\frac{\partial\mathcal{E}(J_t, h_t, \mu_t)}{\partial \mu_t} && (9.72)
\end{aligned}
$$

で与えられる. ここに, 勾配学習法のコスト関数 $\mathcal{E}$ は

$$
\mathcal{E}(J_t, h_t, \mu_t) = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{t}\left[\overline{\Delta q_l} - \frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \sinh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}\right]^2 \tag{9.73}
$$

で定義される.

学習方程式を決定するために, 具体的に微分をとってみると

$$
\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial J_t} = -\sum_{l=1}^{t}\left[\overline{\Delta q_l} - \frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \sinh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}\right]\frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\overline{\Delta q_{l-1}}\cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t) + 4\mathrm{e}^{2\mu_t}\overline{\Delta q_{l-1}}}{\{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)\}^2} \tag{9.74}
$$

$$
\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial h_t} = -\sum_{l=1}^{t}\left[\overline{\Delta q_l} - \frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \sinh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}\right]\frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\sigma_t\cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t) + 4\mathrm{e}^{2\mu_t}\sigma_t}{\{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)\}^2} \tag{9.75}
$$

$$
\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial \sigma_t} = -\sum_{l=1}^{t}\left[\overline{\Delta q_l} - \frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \sinh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}\right]\frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\sinh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)}{\{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t\overline{\Delta q_{l-1}} + h_t\sigma_t)\}^2} \tag{9.76}
$$

となる. また, 上記に現れる $\overline{\Delta q_t}$ は実測価格 q_t に対し

$$
\overline{\Delta q_t} = \frac{1}{M}\sum_{i=t-M+1}^{t}(q_{i+1} - q_i) \tag{9.77}
$$

によって算出される量である. 各時刻で求まる m_t, および, パラメータの値を (9.60) 式に逐次代入していくことで, 各時刻での出来高:

$$
a_t = \frac{2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t m_t + h_t\sigma_t)}{1 + 2\mathrm{e}^{\mu_t}\ \cosh(J_t m_t + h_t\sigma_t)} \tag{9.78}
$$

が定量的に評価できることになる. ここで, σ_t は実測価格に関するトレンド:

$$
\sigma_t = \frac{q_t - q_{t-\tau}}{\tau} \tag{9.79}
$$

であることに注意しよう. また, $M = \tau$ と選ぶ.

9.6.7　計算機実験

図 118 にクラッシュを含む実時系列データ q_t と推定値 p_t の振る舞い, および, それらの自乗誤差 $\varepsilon_t \equiv \{q_t - p_t\}^2/\max q_t$ をプロットする. 用いたデータは EUR/JPY 為替レートの 2010/4/27 から 2010/5/13 までの高頻度取引きデータである. 時間窓 $\tau = 100$ [ticks], ハイパー・パラメータの初期値は $J_0 = 0.1, h_0 = 0.6, \mu_0 = 0.1$ に選んだ. この図より, クラッシュ直前, 瞬間的に誤差が増加するものの, ほぼ全領域で誤差は数パーセントの範囲内にあり, 概ね良好な予測が達成されることがわかる. この意味で提案予測式は有効 (有用) と言える.

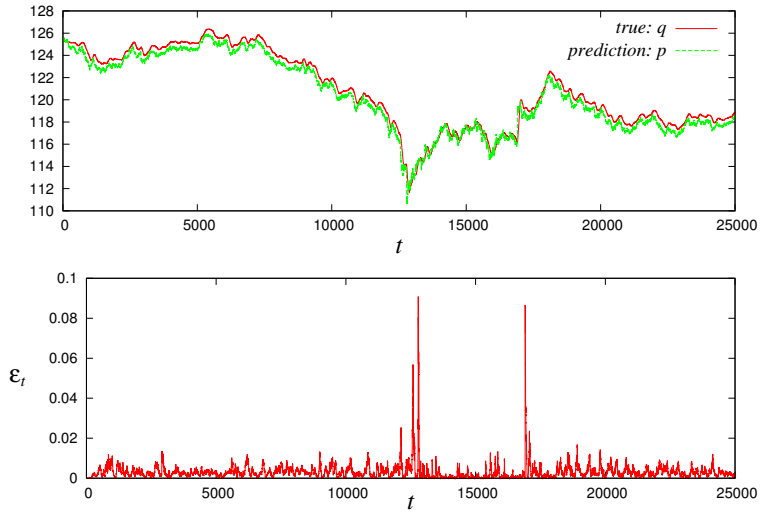


図 118: EUR/JPY 為替レートの 2010/4/27 から 2010/5/13 までの高頻度取引きデータに対する予測結果. 下図は各時刻での自乗誤差 $\varepsilon_t \equiv \{q_t - p_t\}^2/\max q_t$.

次に, クラッシュをまたいだデータに対し, 学習されたハイパー・パラメータの時間発展を図 119 に載せる. この図から, 磁場強度 h は単調にゼロに向かい, 化学ポテンシャル μ の値は 0.31 に, 結合強度 J は 1.35 にそれぞれ収束していることがわかる. 前節のイジング模型では, $\mu \to \infty$ のため, 臨界点は $(1/J)_c = 1$ であり, J はこの点に向かって収束したが, 本稿の場合, $\mu = 0.31 \neq \infty$ へ収束したため, 臨界点が $(1/J)_c = 1$ からずれ (図 116(左) 参照), $\mu = 0.31$ の場合の臨界点 $(1/J)_c = 1/1.35 \simeq 0.74$ へ収束していることがみてとれる. 従って, システムは 3 状態イジング模型 (9.51) の場合も自律的にその臨界状態へと向かっていく.

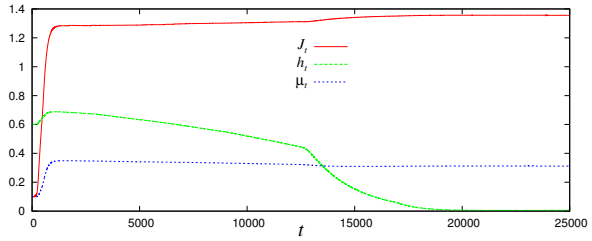


図 119: ハイパー・パラメータ (J, h, μ) の時間変化.

一方, 出来高の振る舞いを USD/JPY 為替レートの 2012/8/12 から 2012/8/24 までの「1 分足」

の実データでとったものを対応する a の値と並べて図 120 に載せる．ただし，この場合の数値実験に用いた時間窓は $\tau = 10$ [min] である．この図より，出来高の実データはクラッシュ前後で瞬間的

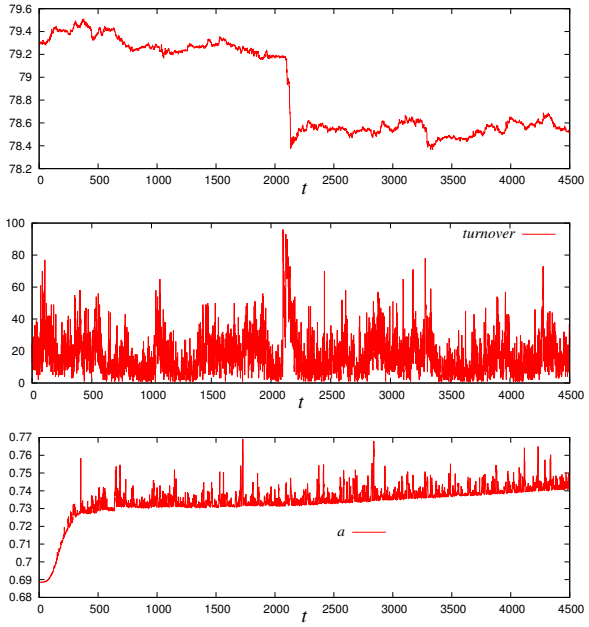


図 120: ここで用いた USD/JPY 為替レートの 2012/8/12 から 2012/8/24 までの「1 分足データ」(上) とその出来高 (中)．下図は我々の予測モデルから算出された「出来高」a.

に増加しているが，我々の予測モデルから算出された「出来高」a は (クラッシュ直前に比較的大きなピークを持つが) クラッシュを明確に反映する振る舞いはみられないことがわかる．この点に関しては今後も異なる複数のデータを用いた系統的検証が必要となる．

9.6.8　2 状態イジング模型との比較

最後に，2 状態イジング模型に基づく予測式との精度比較をしておこう．ここで用いたデータは USD/JPY 為替レートの 2012/3/1 から 2012/7/31 までの「30 分足」の実データである．時間窓 $\tau = 10$ [30min]，ハイパー・パラメータの初期値は 2 状態で $J_0 = 0.1, h_0 = 0.6$，3 状態では $J_0 = 0.1, h_0 = 0.6, \mu_0 = 0.1$ に選んだ．結果を図 121 に載せる．この図より，ほぼ全ての時刻で 3 状態イジング模型を用いた予測精度が 2 状態のそれを上回っていることがわかる．ここまでで，トレーダの「静観」も許す「3 状態イジング模型」を導入し，金融危機を市場に参加するトレーダの割合 (活動度=「出来高」) から特徴付けることを試みた．我々の定義した出来高 a はクラッシュ前後で際立った特異性をみせなかったが，これは実データの「粒度」にも依存すると推察される．事実，図 120 で用いたデータは「1 分足」のものであり，所謂「高頻度データ」ではない．また，図 121 で用いたデータも「30 分足」のものである．紙面の制約で載せなかったが，図 121 に対応するハイパー・パラメータの収束点は臨界点からかなり大きく外れており，このことを考慮すると，本稿で提案したイジング模型のフィルタを介してでクラッシュ前後の市場を特徴つけるためには，データがある程度高頻度であることが必要であるように思われる．

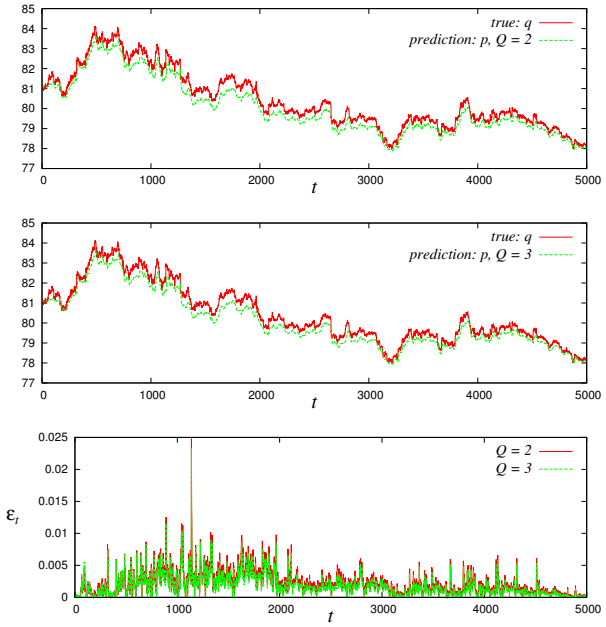


図 121: 2 状態イジング模型に基づく予測式との予測精度との比較. 上図は実測値と 2 状態イジング模型の予測値, 中図は実測値と 3 状態イジング模型の予測値, 下図はそれぞれの自乗誤差.

10　感覚弁別力の測定と推定: サイコメトリック関数のベイズ推定

前節まででは「実データ」として主に経済データ (金融データ) の解析例を説明してきた. これらのデータは, 細かな時間スケール (Ticks) 単位で膨大かつ簡易に回収することができ, 従って, データ数が十分大きな極限での「統計的規則」を見いだしやすく, よって, その知見を用いることで, 予測アルゴリズムなども設計することができる. このようなデータ解析の必要性は, 自然科学や社会科学などの分野に限定されるものではなく, 心理学など人文社会系の研究テーマにおいても重要である.

10.1　心理学実験とそのデータ解析

心理学実験では, 被験者に「ものの感じ方」や「対象物体の見え方」「音楽の聴こえ方」など, ヒトの ≪ 主観的判断 ≫ のなかに現れる ≪ 客観的事実 ≫ を, 複数人に対する「アンケート」から得られるデータの統計的規則を探ることで明らかにしていくことを試みる. 情報科学の課題の中にも, 例えば, 物体認識や画像認識, 画像生成とその生成画像の見え方やその理解など, ヒトの視覚系や感覚系に関係する情報処理アルゴリズムやその評価に対し, このような「心理学実験」が用いられることがある. 本来, これらの知覚情報処理は脳内で行われるため, そのアルゴリズムの (ヒトの情報処理にどれほど近いかという基準からの) 妥当性を究極的に判断するためには, おそらく, ニューロンとその回路の動作, つまり「ミクロな」レベルでの生理学実験とその評価というプロセスを踏んだ理解が必要になる. しかし, ニューラルネットの動作の結果として「マクロに」現れる我々ヒトの反応/行動などからも, その妥当性を「ある程度までは」推し量ることができるかもしれない. また, そのようなデータ解析からの知見を用いて, ヒトの感覚系のミニマルな数理モデルや, 工学的に有用なアルゴリズムを構築することもできるかもしれない.

そこで, この講義の最終回では, こうした心理学実験の一例と, そこから得られるデータ処理の方法について簡単に紹介したい. 具体的には, 心理学実験で問題になる感覚弁別力の測定とそのデータ解析に関し, 「サイコメトリック関数」と呼ばれる非線形関係をベイズ推定する方法を学習する. その際, この講義で度々触れてきた情報統計力学との関係や, 担当者 (井上) がこれからこの方法を用いて実際にやろうとしている研究などについても簡単に触れたい. なお, 確率統計の基本事項についての理解が必要となるので, これらを忘れてしまっている場合には, 再度, 講義ノート前半部分を見直しておくと良いであろう.

10.2　ヒトの弁別能力の評価

図 122 に載せた 9 枚の画像は, ある 1 枚の濃淡画像の解像度を落とし, さらに上下左右にズレを加え, さらにある点のまわりにわずかな角度だけ回転させて人工的に作成した画像である. もとの画像は共通の一枚であるが, このように低解像度画像に微妙な操作を施した, 複数枚の画像それぞれを適切に判別することは, 必ずしも容易な作業ではない.

例えば, もう少し話を具体的にして, 写真の女性の顔の中心線と水平線とのなす角度を特徴量として採用し, この角度を最も左上の画像 (「四角」で縁どりされたもの) を基準として, 時計/反時計回りに何度か回転した場合, 「ヒトは画像を何度回転させた場合, その変化を検出できるか」という問題を考えてみよう.

これは一種の「視覚の問題」であるから, ヒトの視覚系における「角度分解能」を議論しなければならないかもしれない. または, 情報科学や数理科学でよく使われるアプローチとして, ある種の

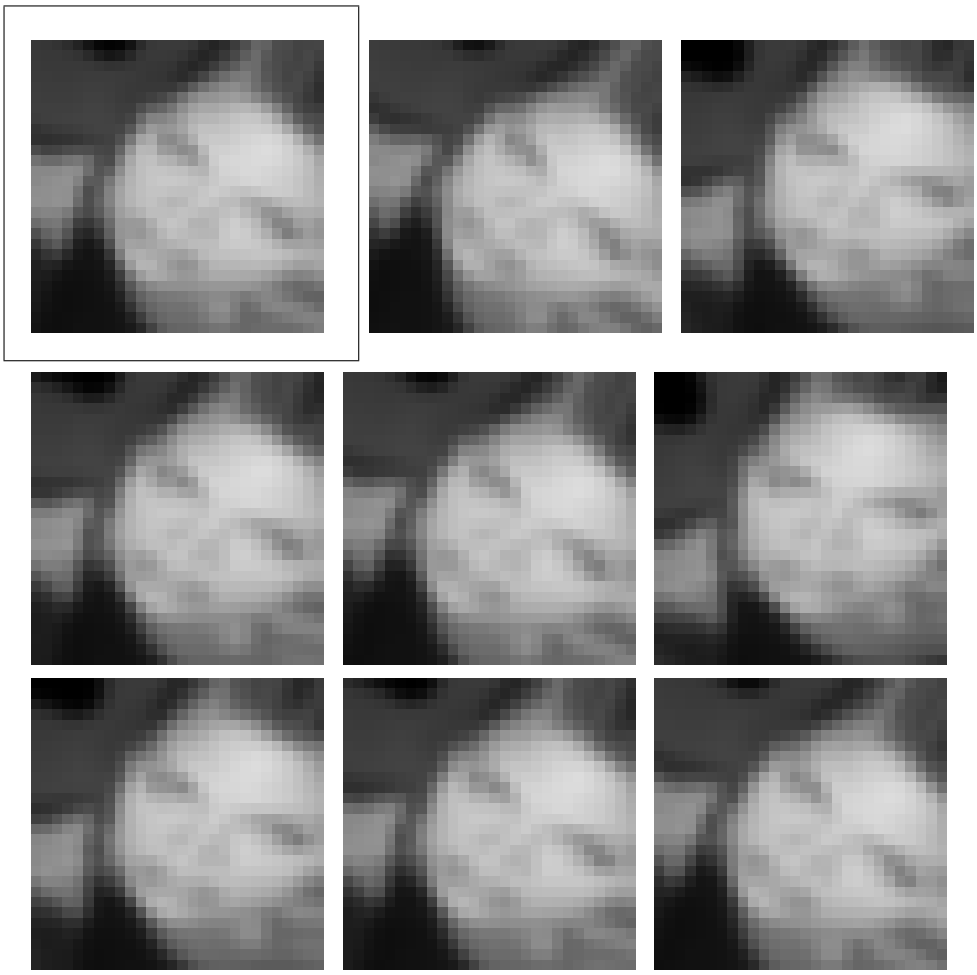


図 122: 1 枚の濃淡画像の解像度を落とし, さらに上下左右に「ズレ」を加え, さらにある点のまわりに「回転」させて人工的に作成した 9 枚の画像.

「線分の傾き」を検知するフィルタのような視覚系の数理モデルを作り, そのフィルタ出力と「正解の (真の) 回転角」との誤差などを考慮し, その弁別能力を定量的に議論しても良いかもしれない.

しかし, もっと簡便で, かつ有効な手段として, どこにでも居るような, いたって「普通の」被験者複数を募り, 彼ら/彼女らに基準となる画像から徐々に傾いて行く画像を見せながら, **何度回転させた時点で, その画像が「時計回りに変化した」と気づいたか, という投票**を行ってもらっても良いであろう. 時計回りの角度 (これを $+\theta$ と呼ぼう) が大きい場合, ほとんど全ての被験者が「イエス」と答えるだろうし, 逆に「反時計回り」(つまり, $-\theta$) に画像角度が変化したのであれば, ほとんどの被験者が「ノー」と答えるに違いない.

このとき, 次にあげる 2 つの, 素朴ではあるが本質的な疑問が生じる.

- 角度を $-\theta$ から $+\theta$ へと連続的に変えて行った場合, 「イエス」に投票する被験者の数はどのように (どのような「速さ」で) 増加していくか?
- ヒトの視覚系はどこまで微小な回転角を検知できるか?

このような「心理学実験」が正しく行われれば, ヒトの弁別能力に関する, ある種の「普遍性」を

見いだすことができるかもしれないし, それを足がかりにして, 心理学実験データに裏付けされた, 適切な数理モデルを構築していくことができるかもしれない.

そこで以下では, 上記の疑問に答えるための統計的方法について学んで行く. 特にこのような統計処理を行う際のソフトウエアを「ブラックボックス」として用いるのではなく, その背景やカラクリまで理解して用いることができることを目指す.

10.3 簡単な典型的事例

まずは, 簡単な場合を例にとって考えて行く. 被験者に 100 グラムの重さの「おもり」を持たせ, それをその後, 被験者に気づかれないように, おもりの重さを 2 グラムずつ上下に変えていく. その際, 「今持っているおもりは 100 グラムより重いですか?」という質問を行い, 「イエス」と答える被験者の数を記録して行く.

このとき, 20 人の被験者に対し, 次のような結果を得たとしょう.

x_i(**重さ** [g])	G_i (**「イエス」の人数**)	L_i(**「ノー」の人数**)	q_i (**「イエス」の確率**)
92	0	20	0
94	3	17	0.15
96	5	15	0.25
98	9	11	0.45
100	10	10	0.5
102	12	8	0.6
104	14	6	0.7
106	18	2	0.9
108	20	0	1.0

この実験結果から明らかに, 100 グラムのときは, やはり弁別結果は割れて, 「イエス」「ノー」が五分五分. しかし, 100 グラムからおもりの重さが増えるにつれ, 「イエス」の票が増加し, 108 グラムになったときには, 全員が「100 グラムより重い」と感じている. 一方, 逆に, 100 グラムから重さを軽くして行けば, 「イエス」の数は減少し, 92 グラムのとき, 全員が「100 グラムより**重くない**」と答える結果となった. これは全く「リーズナブル」であり, 何ら議論するにあたらない気もするが, しかし, 重さ x_i を $x_1 = 92, x_2 = 94, \cdots, x_9 = 108$ と変えて行ったとき, 確率 q_i が**どのような速さで増加していくのか**, という問いの答えは扱っている問題固有のものかもしれないし, その変化のスピードが何らかのパラメトリックな関数形で記述できるのであれば, 後々の議論のためにありがたい. そこで, ここではそのような関数形の典型例を取り上げ, その関数を有限個のデータから同定する統計学の問題を考えていく.

10.4 サイコメトリック関数 : 累積ガウス関数の場合

実験結果の $q_i(x_i)$ $(i = 1, \cdots, 9)$ の振る舞いを可能な限り再現するものは $x \to -\infty$ でゼロとなり, $x \to +\infty$ で 1 になる関数であるべきであるが, ここでは数あるそうした関数 — **サイコメトリック関数** — のなかから, 下記の累積ガウス関数を採用する.

$$\Phi\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \int_{-\infty}^{\frac{x-\mu}{\sigma}} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} = 1 - H\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) \tag{10.1}$$

ここに, $H(X)$ は次の誤差関数:

$$H(X) \equiv \int_X^\infty Dz, \quad Dz = \frac{dz}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \tag{10.2}$$

である. パラメータ μ, σ の変域はそれぞれ, $-\infty < \mu < +\infty, \sigma > 0$ である.

$\Phi((x-\mu)/\sigma)$ の典型的な振る舞いを図 123 に載せる. この $\Phi((x-\mu)/\sigma)$ は「x グラムのおもりが提示されたとき, それが $a = 100$ グラム (これを「標準刺激」と呼ぶ) より重いと感じる確率」であるから, 形式的に $p(x > a) = \Phi((x-\mu)/\sigma)$ と書くことができる. この図から明らかなように, こ

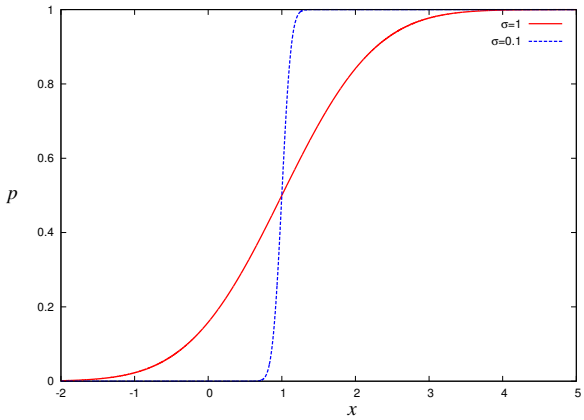


図 123: サイコメトリック関数の一例としての累積ガウス関数. $\mu = 1$ とし, σ は $1, 0.1$ に選んでいる.

の関数 (10.1) は上述の性質を満たし, 実験結果の表における $q_i(x_i)$ の振る舞いに似ている. しかし, 図 123 からわかるように, その詳細な形状は 2 つのパラメータ μ, σ に依存するので, 得られたデータからこれらのパラメータを適切に推定しなければならない. そこで, ここではベイズ推定を用いることで, この関数を同定することにする.

ところで, 図 123 をみると, $x \simeq \mu$ の近傍で, サイコメトリック関数は「直線」で十分によく近似できそうである. そこで, この $x = \mu$ のまわりで変数: $(x-\mu)/\sigma\,(\ll 1)$ に関してサイコメトリック関数をこの変数の 1 次式まで展開すると

$$p(x > a) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \frac{x}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{\mu}{\sqrt{2\pi}\sigma} + (2\text{ 次以上の項}) \tag{10.3}$$

となり, 「$y = ax + b$」の直線になる ($a = (1/\sqrt{2\pi}\sigma), b = -(\mu/\sqrt{2\pi}\sigma)$). 従って, 測定されたデータ $p_i(x_i)$ $(i = 1, \cdots, 9)$ が上記の「線形モデル」に正規分布に従う加法的独立ノイズのかかった生成モデルからの系列であると仮定すれば, モデルのパラメータ (μ, σ) に関する, その最尤推定値は, 良く知られた「最小二乗法」を用いて決定されるパラメータ (μ, σ) となる. これは所謂「線形回帰」と呼ばれる問題である.

しかし, 図 123 からもわかるように, x が μ から外れはじめると, もはや上記の線形モデルでは当てはまらなくなり, サイコメトリック関数のような非線形モデルをそのまま扱わなければならなくなる. 次節以降でその取り扱いについて詳しくみて行こう.

10.5 事後確率とパラメータのベイズ推定

パラメータ (μ,σ) のセットが与えられると, データとして, 「イエス」「ノー」のそれぞれの票数 G_i, L_i $(i=1,\cdots,M=9)$ が分布 $P(G_i,L_i|\mu,\sigma)$ から「確率的に」生成されると考える. そこで, 重さ x_i のおもりが被験者に提示された際, 彼/彼女が「イエス」と答える確率を $p_i=\Phi((x_i-\mu)/\sigma)$ とすれば, 生成モデルとして次の尤度関数:

$$\begin{aligned}
P(G_i,L_i|\mu,\sigma) &= (\text{規格化定数})\times\prod_{i=1}^{M}p_i^{G_i}(1-p_i)^{L_i}\\
&= (\text{規格化定数})\times\prod_{i=1}^{M}\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)^{G_i}\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)^{L_i}\\
&= (\text{規格化定数})\times\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]
\end{aligned}\tag{10.4}$$

と書ける[66]. ただし, 後の議論で必要となるため, パラメータ J を導入し, $J=1$ と置いた. また, 最後の式変形では, 恒等式: $\exp(\log(X))=X$ を用いた.

我々が今欲しいのは, データセット $\{G_i,L_i\}$ $(i=1,\cdots,9)$ が与えられた条件下で, パラメータが値 μ,σ をとる確率, つまり, 事後確率 $P(\mu,\sigma|G_i,L_i)$ であるが, パラメータの事前確率を $P(\mu,\sigma)$ とおけば, ベイズの公式より

$$P(\mu,\sigma|G_i,L_i) = \frac{P(G_i,L_i|\mu,\sigma)P(\mu,\sigma)}{\int_{-\infty}^{\infty}d\mu\int_0^{\infty}d\sigma P(G_i,L_i|\mu,\sigma)P(\mu,\sigma)}\tag{10.5}$$

として事後確率が得られる.

(10.5) 式を用いて具体的にパラメータを推定するためには, 事前確率を選ばなければならないが, あいにく, 我々はこれについて何の事前知識も持っていないので, とりあえず, ここでは一様分布: $P(\mu,\sigma)=$ (一定) を選べば

$$P(\mu,\sigma|G_i,L_i) = \frac{\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]}{\int_{-\infty}^{\infty}d\mu\int_0^{\infty}d\sigma\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]}\tag{10.6}$$

が得られる. 従って, ベイズ推定値 $\hat{\mu},\hat{\sigma}$ はそれぞれ, この事後確率に関する期待値として

$$\hat{\mu} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\mu d\mu\int_{-\infty}^{\infty}d\sigma\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]}{\int_{-\infty}^{\infty}d\mu\int_0^{\infty}d\sigma\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]}\tag{10.7}$$

$$\hat{\sigma} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}d\mu\int_{-\infty}^{\infty}\sigma d\sigma\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]}{\int_{-\infty}^{\infty}d\mu\int_0^{\infty}d\sigma\exp\left[J\left\{\sum_{i=1}^{M}G_i\log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)+\sum_{i=1}^{M}L_i\log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right)\right\}\right]}\tag{10.8}$$

によって与えられる.

実際に前出の表に載ったデータを上記方程式に代入して推定値を求めてみると, $\hat{\mu}$ はパラメータ J に依らずに $\hat{\mu}=100$. $\hat{\sigma}$ は図 124 のように, J の選び方により推定値が異なることがわかる[67]. こ

[66] x_i の刺激に対し, 「イエス」と答える被験者 (確率 p_i) が G_i 人, 「ノー」と答える被験者 (確率 $1-p_i$) が $L_i=20-G_i$ 人, 各 $i=1,\cdots,9$ で独立に答えると考える.

[67] ここに現れる μ,σ の積分は解析的に実行できないので, 例えば, μ,σ を有限区間内で細かなメッシュに切りわけ, 単純に足していくとよい.

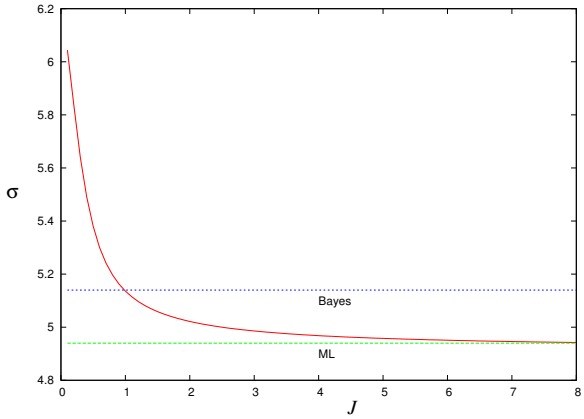


図 124: 推定値 $\hat{\sigma}$ の J 依存性. $J=1$ の場合がベイズ推定値を与え, $\hat{\sigma}_{\mathrm{Bayes}}=5.14$ である. 一方, $J\to\infty$ の場合が最尤推定値を与え, $\hat{\sigma}_{\mathrm{ML}}=4.94$ となる.

の図で, $J=1$ のときの推定値の値が所謂**ベイズ推定値**であり, $\hat{\sigma}_{\mathrm{Bayes}}=5.14$ である. また, (10.8) 式で $J\to\infty$ の極限をとると, 指数の肩:

$$l \equiv \sum_{i=1}^{M} G_i \log\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right) + \sum_{i=1}^{M} L_i \log\left(1-\Phi\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)\right) \tag{10.9}$$

を最大化する μ,σ が求める推定値を与える[68]. この l は最尤関数の対数, つまり, 対数最尤度となっていることに気がつけば, これを最大化する推定値であるから**最尤推定値**ということになる. 図 124 のグラフより, σ の最尤推定値は $\hat{\sigma}_{\mathrm{ML}}=4.94$ となる[69].

図 125 にデータ値からのプロット $q_i(x_i)(i=1,\cdots,9)$ と, これら推定値を代入したサイコメトリック関数を重ね打ちする. この図からわかるように, 推定されたサイコメトリック関数は実測さ

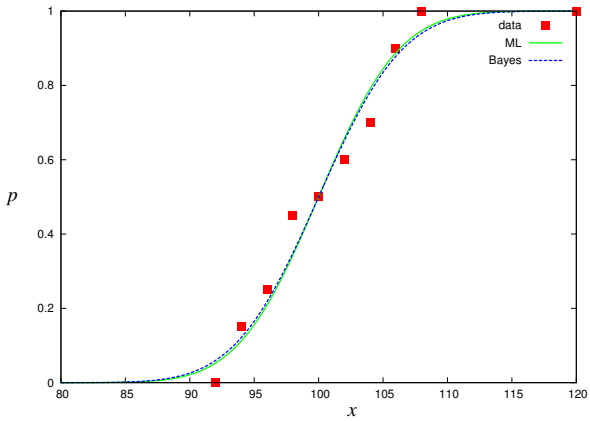


図 125: データ値からのプロット $q_i(x_i)$ $(i=1,\cdots,9)$ と推定されたサイコメトリック関数.

[68] 事後分布を「ギブス分布」$\sim \mathrm{e}^{-E/T}$ とみなせば統計力学との対応がつく. このとき, $-l$ が「エネルギー関数 E」, J^{-1} が「温度 T」を与える. また, ベイズ推定値は温度 $T=J^{-1}=1$ での「熱平均値」, 最尤推定値は「エネルギー関数の最小値を与える解」ということになる.

[69] 最尤推定値を算出する場合, 通常は最尤関数の極値条件を導き, その非線形方程式を解く必要があるが, ここでは, ベイズ推定の式で $J\to\infty$ の極限をとると自動的に最尤推定値が得られる. J で「アニーリング」した結果が出てくると考えても良いし, J を大きくとることで, 実質的に μ,σ の積分に関して「鞍点近似」を行っていると考えても良い.

れた 9 つの点にうまくあてはまっている. しかし, 最尤推定値とベイズ推定値の間の差異はほとんどみられない. そこで, 以下ではもう少し定量的にみていくことにしょう.

10.6 主観的等価点

当然のことであるが, x グラムのおもりが提示されたとき, それが $a = 100$ グラムより重いと感じる確率 $p(x > a) = \Phi((x - \mu)/\sigma)$ と $p(x < a)$ を足したものは 1, すなわち

$$p(x > a) + p(x < a) \quad = \quad 1 \tag{10.10}$$

が成り立つ. また, 上記の弁別が最も困難な提示入力の値 x_{PSE} は明らかに, $p(x_{\mathrm{PSE}} > a) = p(x_{\mathrm{PSE}} < a)$ を満たすべきであるから, これを上式に代入すると, x_{PSE} は

$$\Phi\left(\frac{x_{\mathrm{PSE}} - \mu}{\sigma}\right) \quad = \quad \frac{1}{2} \tag{10.11}$$

の解である. (10.1) 式から直ちに, $x_{\mathrm{PSE}} - \mu = 0$, すなわち

$$x_{\mathrm{PSE}} \quad = \quad \mu \tag{10.12}$$

が得られる. この x_{PSE} を**主観的等価点**と呼ぶ. ここで我々が扱った実験データでは, μ の推定値は $\hat{\mu} = 100 = a$ であり, たまたま, $x_{\mathrm{PSE}} = a(= 100)$ であったが, 一般的には $x_{\mathrm{PSE}} \neq a$ である.

10.7 主観的等価点から弁別可能な刺激までの距離

主観的等価点が最も弁別が難しいと述べたが, それでは, どの程度, この等価点から離れれば弁別が可能になるのであろうか?

既に述べたように, 刺激 x を大きくすれば, それだけ, $a = 100$ グラムより重く感じる確率は上がる. 従って, その確率が「ある基準値」以上になる $x = x_{\mathrm{JND1}}$ を逆算すればよい. ここで, 「ある基準値」とは伝統的に 0.75 と選ばれる場合が多く, ここでもこれを採用すれば

$$\Phi\left(\frac{x_{\mathrm{JND1}} - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right) \quad = \quad 0.75 \tag{10.13}$$

を x_{JND1} について解けばよい. 実際, これを補誤差関数の数値テーブルを用いて解くと, 最尤推定値を用いた場合, $x_{\mathrm{JND1}}^{(\mathrm{ML})} = 103.3320$, ベイズ推定値を用いた場合, $x_{\mathrm{JND1}}^{(\mathrm{Bayes})} = 103.4670$ となる. 従って, 等価点からの距離 Δa_1 は

$$\Delta a_1^{(\mathrm{ML})} \quad = \quad x_{\mathrm{JND1}}^{(\mathrm{ML})} - \hat{\mu} = 3.3320 \tag{10.14}$$

$$\Delta a_1^{(\mathrm{Bayes})} \quad = \quad x_{\mathrm{JND1}}^{(\mathrm{Bayes})} - \hat{\mu} = 3.4670 \tag{10.15}$$

である.

また, 逆に, 刺激 x を小さくすれば, それだけ, $a = 100$ グラムより重く感じる確率は下がる. これを利用して等価点からの距離を求めることもできる. これも伝統的に 0.25 まで確率が下がったときの $x = x_{\mathrm{JND2}}$ を求めればよいので

$$\Phi\left(\frac{x_{\mathrm{JND2}} - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right) \quad = \quad 0.25 \tag{10.16}$$

を x_{JND2} について解けばよい．これを具体的に補誤差関数の数値テーブルを用いて解くと, 最尤推定値を用いた場合, $x_{\mathrm{JND2}}^{(\mathrm{ML})} = 96.669$, ベイズ推定値を用いた場合, $x_{\mathrm{JND2}}^{(\mathrm{Bayes})} = 96.5340$ となる．従って, 等価点からの距離 Δa_2 は

$$\Delta a_2^{(\mathrm{ML})} = |x_{\mathrm{JND2}}^{(\mathrm{ML})} - \hat{\mu}| = 3.3310 \tag{10.17}$$

$$\Delta a_2^{(\mathrm{Bayes})} = |x_{\mathrm{JND2}}^{(\mathrm{Bayes})} - \hat{\mu}| = 3.4660 \tag{10.18}$$

となる．

従って, 上下いずれからの評価からも, 100 グラムの標準刺激からの変化を検知するには, 3.3 ∼ 3.5 グラムほどの差異が必要であると結論つけられる．

10.8　なぜ最尤推定値とベイズ推定値は一致しないのか? ：事後分布の歪み

ベイズ推定と最尤推定が異なる結果を与える要因は, 一般的に言って事前確率として入ってくる情報を用いるか, 用いないかである．ここで扱ったベイズ推定では, 一様な事前確率を用いており, その意味で, 両者は一致してもおかしくない．事実, (10.7)(10.8) 式から明らかに, 最尤推定値は事後分布の「最頻値 (モード)」を推定値と選んでおり, 一方のベイズ推定値は事後分布の「平均値」を推定値をして選んでいることになる．もし, 事後分布がガウス分布のように, 平均値のまわりに対称であれば, 平均値と最頻値 (分布のピーク) は一致する．従って, ベイズ推定値は最尤推定値と一致するはずである．しかし, 既にみたように, パラメータ σ に関する両者は明らかにズレている．

この理由は事後分布の平均値と最頻値 (分布のピーク) が食い違っているためであり, 事実, 事後分布を σ の関数としてプロットしてみると (μ には $\hat{\mu}$ を代入してある), 図 126 のようになる．この

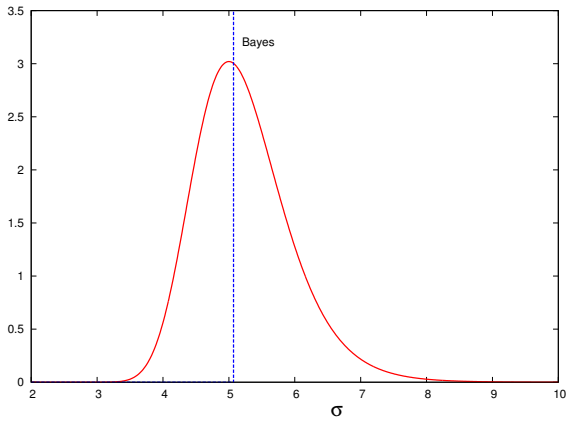


図 126: σ の関数としての事後確率．μ には $\hat{\mu} = 100$ を代入してある．

図より, 事後分布は明らかに非対称に歪んでおり, このことが, 最尤推定値とベイズ推定値の食い違いを生んでいる．この分布の歪み加減は用いたデータに依存するので, 両推定値の差は, やはり, 用いたデータに依存することになる．

10.9　いくつかの備考

心理学実験データをサイコメトリック関数で近似するための統計的推定に関して説明した．具体的な例を用いて議論を進めてきたものの, この節を自分なりにノートにまとめて, 説明を終わって

みると結局のところ, ただひたすらに「スタンダードな統計学」を解説してしまった気がしないでもない. しかし, 取り扱う問題によっては様々なヒトの認知, 知覚プロセス等の知見を取り込んでいくことで, 研究対象固有の困難が浮かび上がり, 新たな統計学上/計算上の技術的工夫や改良が必要となっていくのかもしれない. そうなれば, 研究対象や方法論として, 俄然面白くなるだろう[70]

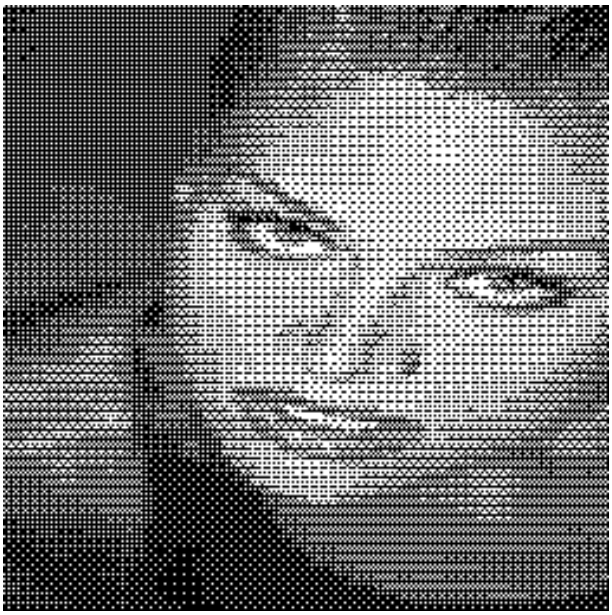


図 127: 濃淡画像のハーフトーン処理. 4×4 のベイヤーマスクを用いた閾値処理で作成. 濃淡画像に見えるだろうか? それとも, 白黒画像に見えてしまうであろうか? ちなみに, この原濃淡画像は図 122 の原濃淡画像でもあります.

さて, 担当者 (井上) はここ数年間に渡って「濃淡画像の 2 値化表現」を研究してきたが, その性能評価にこうした計量心理学の方法論が使えないものかと日夜考えている. 図 127 は 4×4 のサイズのベイヤーマスクを用いた閾値処理を施して作成したハーフトーン画像であるが, このマスクのサイズを変化させることで, 「白黒画像」と「濃淡画像」とを弁別可能な適切なマスクサイズ (標準刺激) 等を, こうした議論で評価/検討できないものか検討中である.

課題 18
ここで説明した方法論で取り組むことができそうな心理学実験を設計し, それを説明せよ.

[70] より進んだ内容や, 最近の話題, 関連する話題の原著論文情報などは

「計量心理学」心理学の世界 専門編 **14**, 岡本安晴 著, 培風館 (2006).

等を参照してみてください.