

システム科学としての不規則系の統計力学

樺島 祥介

東京工業大学 大学院総合理工学研究科 知能システム科学専攻

機械工学のバネ・ダンパ系と電気工学の RLC 回路は、用途も見た目も異なるが、どちらもその動作は 2 階の線形微分方程式で記述される。数理的なモデル化を行った際にあられるこうした仕組みや法則の類似性に着目し、対象によって規定される個別の研究分野の枠を超えて共通に使うことのできる分析手法や設計手法を開発したり、また、ある分野で得られたアイデアや方法論を他の分野に橋渡ししたりする研究態度や志向性をここでは「システム科学」と呼ぶことにする。冒頭に述べたバネ・ダンパ系と RLC 回路との類似性は 2 階の線形微分方程式で記述される「数理的なモデル (= システム)」の扱い方さえ身につけておけば機械も電気回路も (ある程度の範囲では) 自在に操ることができることを意味している。制御工学はこうした考え方が成功した代表例であり、現在我々は自動車、ロボットをはじめ日常の様々な場面においてその恩恵に浴している。

制御工学に並ぶほど実社会に貢献することは難しいが、システム科学的な発想が画期的な学術上の進歩や新しい研究分野の創出に結びついた例は枚挙に暇がない。素粒子論の自発的対称性の破れのメカニズムは超伝導研究の知見にもとづいて提案された。ホタルの集団発光とレーザーの発振はともに非線形振動子の引き込み現象として理解される。物質の伝導特性と伝染病の伝播はどちらもパーコレーション理論で分析できる。オーストラリア・アボリジニの特殊な婚姻体系が群論を使って説明される。このような話をはじめて聞けば多くの人やはり「へーっ、そうなんだ」、「そいつは気がつかなかったな」、「その手があったか」と感心するのであり、こうした意外性は学術的な価値としても上位にランクされるべきものであろう。

さて、不規則系の統計力学は 1980 年代半ばの連想記憶モデルへの適用により、伝統的な物理の枠外にある異分野の問題にも使えることが示された。対象の個別性にとらわれないシステム科学の一例といえよう。とはいえ、こうした分野の越境は得てしてどちらの側からも注目されず、また、注目されても一過性のものであってすぐに廃れてしまうことがほとんどである。ところが、不規則系の統計力学の場合は存外にしぶとい。連想記憶モデルの後、機械学習、制約充足問題の解析、誤り訂正符号、無線通信などへと次々と適用範囲を拡げ、最近では先端的な信号処理技術である圧縮センシングでも注目されるなど 30 年近くにわたりアクティブな研究分野であり続けている。また、最近ではこうした研究の蓄積にもとづき、過去の個別問題への適用で得られた知見を他の問題へと応用する自律したサイクルも回りはじめている。

本講演では、1990 年代の初頭～半ばに掛けて盛んに研究されたパーセプトロンの統計力学の知見がその後の研究にどのように活かされているか、具体例を挙げながら議論したい。

Susceptibility Propagation と組合せ最適化

樋口三郎
龍谷大学 理工学部

Belief propagation は、磁化率を推定するための message passing method とみなせる。同種の方法で、高次の相関関数も計算できないか、というのは自然な発想であり、初期に提案された [1, 2]。すなわち、感受率を計算する message passing method が、belief propagation の‘微分’として構成できる。

Mezard らは独立にこれらの手続きを見だし、Susceptibility Propagation (SusProp=感受率伝搬法)、と呼んで逆イジング問題に適用した [3]。それ以来、belief / survey propagation を越える情報を得る方法として注目されている。

組合せ拘束充足問題とは、離散的な変数と拘束条件が与えられたとき、すべての拘束条件が満たされるような、変数への値の割当を見つけるという普遍的な問題であり、典型例として k -SAT がある。多くの組合せ拘束充足問題に、survey propagation は優秀な性能を示し、しかし、その理由も物理的に理解された [4]。

しかし、この状況には不思議な側面がある。組合せ拘束充足問題を人間がヒューリスティックに解く際には、‘この変数をこの値にすると、この拘束が破れるので、あっちの変数の値をかえなきゃ’のような状況によく出会う。すなわち、変数間の相関が重要であるように感じられる。しかし、survey propagation の与える 1 変数の期待値の情報だけで、多くの組合せ拘束充足問題が効果的に解かれている。Survey propagation はなぜそんなに万能なのだろうか。

Higuchi らは SusProp を中心的な要素として採用した、組合せ拘束充足問題の解を見つけるアルゴリズムを提案し、相関が重要と思われるあるクラスの組合せ拘束充足問題では、survey propagation よりも広いパラメタ領域で有効に働くことを示した [5]。

この報告では、逆イジング問題および組合せ拘束充足問題への SusProp の応用の進展について述べる。

参考文献

- [1] M. Welling and Y. W. Teh, *Neural Computation* **16** (2004) 197.
- [2] K. Tanaka, *IEICE Transactions on Information and Systems* **E86-D** (2003) 1228.
- [3] M. Mézard and T. Mora, *Journal of Physiology* **103** (2009) 107, arXiv:0803.3061.
- [4] M. Mézard, G. Parisi, and R. Zecchina, *Science* **297** (2002) 812.
- [5] S. Higuchi and M. Mézard, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2009** (2009) P12009, arXiv:0908.1599.

Dictionary Learning への統計力学的アプローチ

坂田 綾香, 樺島 祥介
東京工業大学大学院 総合理工学研究科

圧縮センシングとは、原情報がスパース、すなわちゼロ成分が有限の確率で存在するという事前知識を用いて、圧縮された表現から原信号を復元する手法である[1]。観測行列 $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ を用いた線形変換により、信号行列 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times P}$ がデータ行列 $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{M \times P}$ に変換された場合を考える。これは P 個の N 次元データに対して M 回の観測を行い、その結果から元のデータを推定する問題とも言える。 $M < N$ のとき、 $\mathbf{Y} = \mathbf{F}\mathbf{X}$ の解 \mathbf{X} は一意に定まらず、原信号を復元することは一般的には不可能である。しかし \mathbf{X} のゼロ成分が有限の割合で存在するとき、そのスパース性を利用して原情報を復元する枠組みが圧縮センシングである。

一方、原情報に対してスパース性を仮定せずに、データの次元より少ない観測結果から復元を行う問題は、ブラインド圧縮センシングと呼ばれる[2]。ブラインド圧縮センシングでは、観測行列 $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ と観測結果 $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{M \times P}$ は既知であるとして、① \mathbf{Y} を、 $\mathbf{Y} = \mathbf{D}\mathbf{S}$ を満たすスパース行列 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times P}$ と辞書行列 $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{M \times n}$ に分解し、② $\mathbf{D} = \mathbf{F}\mathbf{B}$ を満たす基底行列 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N \times n}$ を得て、原信号を $\mathbf{X} = \mathbf{B}\mathbf{S}$ として復元する。すなわちブラインド圧縮センシングは、適切な基底 \mathbf{B} のもとで原信号はスパース行列として表現できるという事前知識を用いて、原情報を復元する方法である。①の手続きは Dictionary Learning と呼ばれる[3]。Dictionary Learning の一意性は、ブラインド圧縮センシングによる復元が成功するための必要条件であると言える。文献[4]では、Dictionary Learning の一意性が議論されており、 \mathbf{S} の各コラムの非ゼロ成分数が k のとき、ある特別な条件を課したうえで、 $P_c = (k+1)_M C_k$ であれば一意に \mathbf{D} と \mathbf{S} を構成できることが示された。この P_c 値は十分条件であり、実際はさらに少ないサンプル数でも \mathbf{D} と \mathbf{S} を決定できる場合があると考えられる。

本研究では、Dictionary Learning の統計力学モデルを構成し、一意性に関する研究を行う。ここでは P 個のサンプルはランダムに与える。その場合でも、サンプル数 P を増やすことで辞書行列 \mathbf{D} が一意に定まることが予想される。本発表では、 \mathbf{D} の一意性について、 P 方向の相転移として捉える事が出来るかということを考える。その解析と今後の応用について説明したい。

- [1] Candes E J and Wakin M B, 2008 IEEE Signal Processing Magazine 25 21.
- [2] Gleichman S and Eldar YC, 2011 IEEE Transactions on Information Theory 57 6958.
- [3] Rubinstein R, Bruckstein A M and Elad M, 2010 Proceedings of the IEEE 98 1045.
- [4] Aharon M, Elad M and Bruckstein A M, 2006 Linear Algebra and Its Applications 416 48.

圧縮センシングによる画像補修

片岡 駿, 安田 宗樹, 樺島祥介^A, 田中和之
 東北大院情報科学, 東工大院総理工^A

画像補修 (Image Inpainting) とは画像の輝度値の情報が部分的に欠落した欠損画像を元の原画像へ修復する技術であり, 欠損画像の欠損していない画素の輝度値の情報から欠損した画素の輝度値を推定することで達成される. JPEG 圧縮等で利用されているように, コサイン変換により得られる画像の周波数表現からある程度小さい値をとる周波数成分を 0 として逆変換を施しても視覚的には元の画像とほとんど変わらない画像が得られる. そのため, コサイン変換による画像の周波数表現はスパースとすることができる. このコサイン変換によるスパース表現を利用することで, 画像補修の問題は圧縮センシングの枠組みで定式化することができる.

圧縮センシングは観測ベクトル y がスパースベクトル x からの線形観測 $y = Ax$ で与えられるとして, 観測ベクトル y と観測行列 A からスパースベクトル x を推定する問題である. 画像補修問題では, スパースベクトル $x = \{x_i\}, i \in V = \{0, 1, \dots, N^2 - 1\}$ は画像サイズ $N \times N$ の原画像のコサイン変換に対応し, 観測ベクトル $y = \{y_j\}, j \in V' \subset V$ は欠損画像の非欠損部の輝度値に対応する. x と y_j の間には位置 j に関するコサイン逆変換で与える線形関係

$$y_j = \sum_{i=0}^{N^2-1} A_{ji}x_i, \quad A_{ij} = \frac{2}{N} \alpha_p \alpha_q \cos \frac{(2k+1)\pi p}{2N} \cos \frac{(2l+1)\pi q}{2N} \quad (1)$$

が成立し, この関係式が線形観測 $y = Ax$ に対応する. ここで $(p, q), (k, l)$ はそれぞれ $i = k + Nl, j = p + Nq$ を満足する 0 から $N - 1$ の間の整数の組であり, α_s は $s = 0$ で $1/2$ をとり $s \neq 0$ で 1 をとる. 1-ノルム最適化による再構成法では x の推定値 \hat{x} は

$$\hat{x} = \arg \min_x \sum_{i=0}^{N^2-1} |x_i| \quad \text{subj. to } y_j = \sum_{i=0}^{N^2-1} A_{ji}x_i, j \in V' \quad (2)$$

で与えられ, 欠損部の輝度値は推定値 \hat{x} をコサイン逆変換することで得られる. 本講演ではこのような圧縮センシングを用いた画像補修法を提案し, 数値実験によりどの程度の補修が行えるかについて検討する.

ボルツマンマシン

～ データからのモデル発掘法 ～

安田 宗樹

東北大学 大学院情報科学研究科

ボルツマンマシン (Boltzmann machine) は 1980 年代に提案された相互結合型の確率的ニューラルネットワークモデルである (図 1)。統計力学を中心に古くから研究のこなわれてきたイジング模型との数理的類似性から、物理と情報科学の両方面から様々なアプローチを受けてきたという背景をもつ。ボルツマンマシンのひとつの主要な目的が『学習 (learning)』である (情報科学分野では「機械学習 (machine learning)」と呼ばれ、物理分野では「逆イジング問題 (inverse Ising problem)」と呼ばれている)。学習とは端的には観測データから確率モデルのパラメータを決定することと言え、統計学的には逆問題と呼ばれるものに相当する。

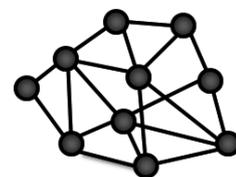


図 1: Boltzmann machine .

例えば、ある磁場のパラメータと相互作用のパラメータをもったイジング模型が与えられたとしよう。磁場のパラメータと相互作用のパラメータの値がひとたび決定されれば、個々のスピン配位に対する出現確率は決定されるため、磁化や帯磁率などに相当する統計量が (原理的には) 計算可能である。これは、与えられた確率モデルから統計量を決定するという課題に対応しており、統計的順問題と呼ばれる。この課題の逆を考えるのが学習である。すなわち、「まず最初に (磁化や帯磁率などの) 統計量が与えられて、その統計量を実現する (磁場や相互作用などの) モデルパラメータを決定する」問題である (図 2)。イジング模型の統計量

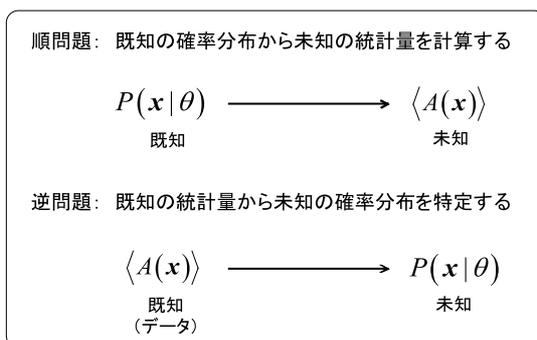


図 2: 順問題と逆問題 (学習) の概略。

の計算は“原理的には可能”と言ったが、計算量の問題から、もちろん一般にはとても難しい問題であるということはよく知られている。同様にその逆に相当する学習も計算量的に困難な問題となっているため、物理学における平均場近似法をはじめとした方法や、統計学的な近似法を基礎とした方法などボルツマンマシンに対する近似学習法の数々が提案されてきており、それは今日でも尚続いている。

本講演ではボルツマンマシンのひとつの基礎付けである最大エントロピーの原理から出発し、ボルツマンマシンの学習の最近の動向を含め解説する予定である。

構造方程式モデルによる因果構造探索: 非ガウス性の利用

清水 昌平

大阪大学 産業科学研究所

構造方程式モデル [1] は、データ生成過程のモデルとして使うことができる。重要な応用には、因果推論がある [2]。従来は、線形性とガウス分布の仮定が基本であった。だが、データ生成過程の構造に関する背景知識がない場合に、識別できるモデルが少ないという問題があった。そのため最近では、ガウス分布の代わりに非ガウス分布を仮定するモデルが盛んに研究されるようになってきている [3, 4]。データの非ガウス性を利用することで、従来は識別できなかったモデルの多くが識別可能になる。データの非ガウス性の利用という点で、独立成分分析 [5] と強く関連している。多くの分野においてガウス分布では上手く近似できないようなデータがあり、生体科学・経済学・心理学など実際の適用例も増えてきている [6, 7, 8, 9]。本講演では、そのような非ガウス構造方程式モデルについて概観する。

参考文献

- [1] K. Bollen. *Structural Equations with Latent Variables*. John Wiley & Sons, 1989.
- [2] J. Pearl. *Causality: Models, Reasoning, and Inference*. Cambridge University Press, 2000. (2nd ed. 2009).
- [3] S. Shimizu, P. O. Hoyer, A. Hyvärinen, and A. Kerminen. A linear non-gaussian acyclic model for causal discovery. *Journal of Machine Learning Research*, 7:2003–2030, 2006.
- [4] P. Spirtes, C. Glymour, R. Scheines, and R. Tillman. Automated search for causal relations: Theory and practice. In R. Dechter, H. Geffner, and J. Halpern, editors, *Heuristics, Probability, and Causality: A Tribute to Judea Pearl*, pages 467–506. College Publications, 2010.
- [5] A. Hyvärinen, J. Karhunen, and E. Oja. *Independent component analysis*. Wiley, New York, 2001.
- [6] L. Faes, S. Erla, E. Tranquillini, D. Orrico, and G. Nollo. An identifiable model to assess frequency-domain Granger causality in the presence of significant instantaneous interactions. In *Proceedings of the 32nd Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBS2010)*, pages 1699–1702, 2010.
- [7] S. M. Smith, K. L. Miller, G. Salimi-Khorshidi, M. Webster, C. F. Beckmann, T. E. Nichols, J. D. Ramsey, and M. W. Woolrich. Network modelling methods for FMRI. *NeuroImage*, 54(2):875–891, 2011.
- [8] E. Ferkingsta, A. Lølanda, and M. Wilhelmsen. Causal modeling and inference for electricity markets. *Energy Economics*, 33(3):404–412, 2011.
- [9] Y. Takahashi, K. Ozaki, B.W. Roberts, and J. Ando. Can low behavioral activation system predict depressive mood?: An application of non-normal structural equation modeling. *Japanese Psychological Research*, 2011.

マルコフ連鎖における定常分布の学習法としての Contrastive Divergence アルゴリズム

前田 新一

京都大学 情報学研究科 システム科学専攻

高次元のボルツマンマシンのような多数の離散変数を有する離散分布の学習は、正規化定数の計算が困難であり、最尤推定やベイズ推定の適用を難しくしていた。計算困難性は、マルコフ連鎖モンテカルロ法や平均場近似などの近似計算手法によって解決が図られていたが、近年、Contrastive Divergence アルゴリズム [1] と呼ばれる学習アルゴリズムが提案され、顔画像、手書き文字の特徴抽出・再構成、トピック解析などの種々の応用に対してうまく働くことが報告されている [2]。

しかしながら、Contrastive Divergence アルゴリズムは、その直接、最適化しているコスト関数やアルゴリズムの収束性が不明であるという問題点を有していた。そのため、Contrastive Divergence アルゴリズムを理解しようとする試みがなされるとともに、得られた知見に基づいた Contrastive Divergence アルゴリズムと類似した新しいアルゴリズムも提案されている。

Sohl-Dickstein らは、マルコフ連鎖の停留点の満たすべき条件から Minimum probability flow アルゴリズムと呼ばれる収束性の保証されたアルゴリズムを提案している [3]。Minimum probability flow アルゴリズムは、Contrastive Divergence アルゴリズムとは非常に近い関係を持っているがその収束性の保証されるアルゴリズムを導出することでより学習を早めることが示されている。その一方、Lyu は、contrastive divergence だけでなく partial likelihood, pseudo-likelihood や non-local contrastive objectives といった最尤推定と異なるコスト関数をもつ複数の学習法に対してそれらの関係性を統一的に俯瞰する見方を提案している [4]。

本発表では、これら近年の研究を紹介するとともに、それらとはまた違った見方を加えて Contrastive Divergence がマルコフ連鎖における定常分布の学習法としてみなせることについて解説する。その上で、なぜ収束が保証されないのか、どのような場合に収束が保証されるかについて述べる。

参考文献

- [1] G. E. Hinton, "Training Products of Experts by Minimizing Contrastive Divergence", *Neural Computation*, 14(8), pp.1771–1800, (2002).
- [2] G. E. Hinton and R. R. Salakhutdinov, "Reducing the dimensionality of data with neural networks", *Science*, 313(5786), pp.504–507, (2006).
- [3] J. Sohl-Dickstein, P. B. Battaglino, and M. R. DeWeese, "New Method for Parameter Estimation in Probabilistic Models: Minimum Probability Flow", *Physical Review Letters*, 107(22), 22601, (2011).
- [4] S. Lyu, "Unifying Non-Maximum Likelihood Learning Objectives with Minimum KL Contraction", *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, (2011).

時空間的相互作用を含む逆イジング問題の近似解法

加藤 紳也¹, 増田 直紀^{1,2}

¹ 東京大学大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻

² 科学技術振興機構 さきがけ

1 神経活動の同時記録と対数線形モデル

近年, 多数の神経細胞の活動を同時に記録する実験手法が急速に発達している. それに伴い, データから集団活動としての特徴を抽出するデータ解析手法の需要が高まっており, 中でも対数線形モデルを用いた方法に注目が集まっている. 細胞集団の活動状態は, 適切な仮定の下で 2 値変数ベクトル $s = (s_i) \in \{\pm 1\}^N$ として表される. ここで扱う対数線形モデルは, 活動状態 s の実現確率を, s_i の多項式について対数線形な指数型分布族として表現する確率モデルである. 先行研究により, 次に示す 2 次の対数線形モデルは, トカゲ網膜, マウス海馬など複数の神経組織の活動状態を精度よく再現することが知られている [2, 4].

$$p(s) = \exp \left\{ \sum_i \theta_i s_i + \sum_{i < j} \theta_{ij} s_i s_j - \psi \right\}. \quad (1)$$

しかし, その後の研究により (1) パラメータ推定の計算コストが高く大きな集団を扱えないこと (2) 空間的な高次相互作用を無視していること (3) 時間的な相互作用を無視していることが主な課題として指摘されている [5].

対数線形モデルの推定は, 統計物理学におけるイジングモデルの逆問題となっており, 与えられたモーメントを満たす分布のパラメータを推定する問題である. これは Boltzmann 学習と等価な問題であるため, その基本的な学習アルゴリズムである勾配法が上述の先行研究でも使用されている. しかし, この方法では更新式の計算にモーメントの推定値を求める必要があり, 細胞数に対して指数的な計算量が必要となってしまう. Boltzmann 学習を近似的にだが高速に行う方法がこれまでに複数提案されている [1]. ただ, 時間的, あるいは高次の空間的相互作用をもつような一般の場合について適用できる方法はほとんど知られていない.

そこで本研究では, 時間的相互作用を考慮しない 2 次対数線形モデルの近似推定法として提案された先行研究 [3] の方法を, 高次の空間的相互作用をもつ場合, 時間的相互作用をもつ場合に対しても適用できるように拡張することを目標とした.

2 摂動展開に基づく推定手法の拡張

観測分布 q について, n 次までのモーメント $\langle F_{I_k}(s) \rangle_q$ ($k \leq n$) が与えられているとする. ただし, I_k は k 個の変数を選ぶ添字, F_{I_k} はその積を取る関数をそれぞれ表す. 新

たなパラメータ $\beta \in [0, 1]$ を導入し，次の分布，

$$p(\mathbf{s}; \beta) = \exp \left\{ \sum_{k=1}^n \sum_{I_k} \theta_{I_k}(\beta) F_{I_k}(\mathbf{s}) - \psi(\beta) \right\},$$

$$\text{s.t. } \langle F_{I_k}(\mathbf{s}) \rangle_p = \beta \langle F_{I_k}(\mathbf{s}) \rangle_q + (1 - \beta) \prod_{i \in I_k} \langle s_i \rangle_q \quad (\forall I_k, \forall k \leq n) \quad (2)$$

を考える．ただし， $\langle \cdot \rangle_q$ は観測平均を表す． $p(\mathbf{s}; 1)$ が求めたい分布で， $p(\mathbf{s}; 0)$ は変数間の独立性を仮定する場合である．情報幾何的には， $p(\mathbf{s}; \beta)$ の集合はこの 2 点を結ぶ η -座標系の測地線である． η -座標系と θ -座標系との双対性により， $p(\mathbf{s}; \beta)$ のエントロピーを $S(\beta)$ として， η_{I_k} と θ_{I_k} との間には $\beta = 0$ において次の関係式が成り立つ．

$$\frac{\partial S}{\partial \eta_{I_k}} = -\beta \theta_{I_k}(\beta). \quad (3)$$

式(3)より， $S(\beta)$ の β についての Taylor 展開が $\{\eta_{I_k}\}$ の多項式として書けるならば，パラメータ θ_{I_k} の推定値が容易に求まる．そこで，Sessak と Monasson が 2 次対数線形モデルについて行った [3] のと同様の手法により $S(\beta)$ の摂動項を求めた．この方法は， β の値に対する θ -座標の変化を $\beta = 0$ における Taylor 展開で近似するものである．スピングラスにおける Plefka 展開は，高次パラメータを独立変数とするギブス自由エネルギーの摂動展開であるのに対し，ここで展開されるエントロピーの独立変数は観測可能な統計量である．したがって，一度摂動展開を行って方程式を確立すれば，観測値を代入することで簡単にパラメータを推定することができる．摂動展開の結果， β について 2 次までの展開により， θ_{I_k} の推定値が，

$$\hat{\theta}_{I_k}(\beta) = \beta \frac{\langle \prod_{i \in I_k} (s_i - \eta_i) \rangle_q}{\prod_{i \in I_k} (1 - \eta_i^2)} \quad (4)$$

で与えられることを示した．

次に，時間的相互作用を含むような対数線形モデルについての推定手法を提案した．時間的に隣接する 2 状態 s, s' の同時分布 $p(s, s')$ は， $2N$ 個の 2 値変数からなるベクトルについての確率分布である．状態間の遷移が定常状態にあることは，周辺分布についての任意の k 次モーメント $\langle F_{I_k}(\mathbf{s}) \rangle_p, \langle F_{I_k}(\mathbf{s}') \rangle_p$ が互いに等しいことと同値である．そこで， n 次 ($n \leq N$) までのモーメントが経験分布に等しい同時分布を，近似的に定常な分布として考えれば，上に述べた方法が適用できる．

具体例として，時間的相互作用を含む最も単純で，かつ，実データへの適用を考える上でも重要だと考えられる次の同時分布 (最小モデル) のパラメータを近似する多項式を求めた．

$$p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \exp \left\{ \sum_i \theta_i s_i + \sum_j \theta'_j s'_j + \sum_{i,j} \theta''_{ij} s_i s'_j - \psi \right\},$$

$$\text{s.t. } \langle s_i \rangle_p = \langle s'_i \rangle_p = \langle s_i \rangle_q, \quad \langle s_i s'_j \rangle_p = \langle s_i^t s_j^{t-1} \rangle_q. \quad (5)$$

この分布のエントロピーについて摂動展開を実行し， $\theta_i, \theta'_j, \theta''_{ij}$ について 3 次までの摂動項を求め，近似方程式を導出した．

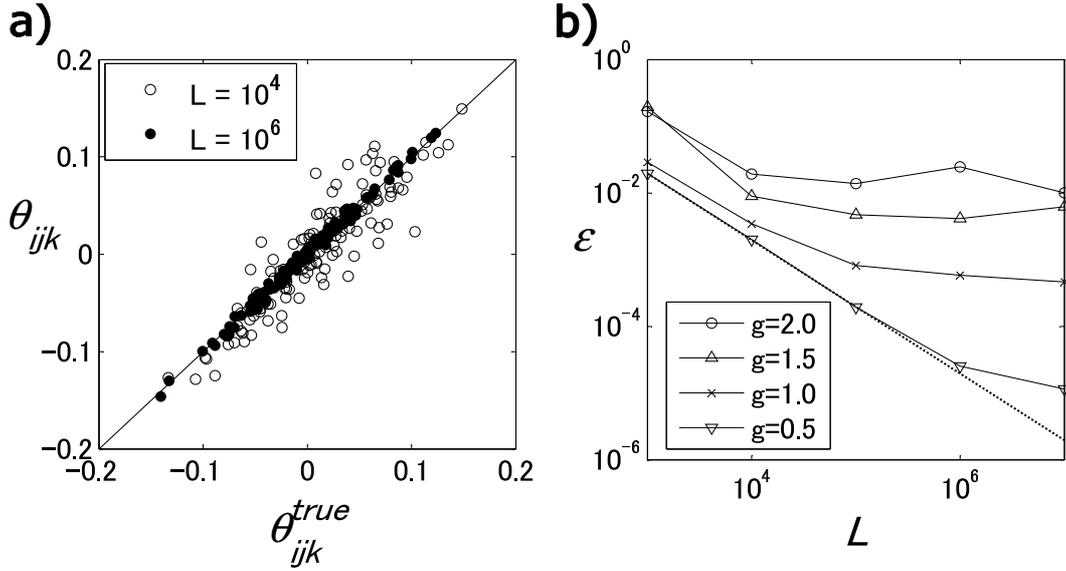


図 1: 3 次相互作用パラメータの推定 . (a), (b) 共に $N = 10$ とした . (a) パラメータの真の値に対する推定値の分布 . 相互作用が弱いとき , 標本数 L を大きくすることで推定精度が向上した . (b) 相互作用が平均 0 , 標準偏差 g/N の正規分布に従うとき , 推定値の , 真の値に対する平均二乗誤差の値を示す .

3 数値実験結果

提案した推定方法の精度を検証するため , 対数線形モデルから人工的にデータを生成し , そのパラメータを推定した . 高次相互作用をもつ場合の例として , 3 次の相互作用項をもつ対数線形モデル ,

$$p(\mathbf{s}) = \exp \left\{ \sum_{i < j < k} \theta_{ijk} s_i s_j s_k - \psi \right\} \quad (6)$$

から MCMC 法 (メトロポリス法) によって 2 値ベクトルの標本を生成した . 標本分布から 3 次までのモーメントの観測値を求め , 式 (4) によって θ_{ijk} の推定値をえた . θ_{ijk} の真の値 (θ_{ijk}^{true}) と比較すると , 相互作用が弱く , 標本が多い場合ほど精度が高くなる傾向が観測された (図 1) . また , θ_{ijk} の θ_{ijk}^{true} に対する平均二乗誤差を調べることで , この傾向を確かめた .

最小モデルについても推定精度を検証するため , 次の遷移確率 ,

$$p(\mathbf{s}^t | \mathbf{s}^{t-1}) = \exp \left\{ \sum_i \theta_i s_i^t + \sum_{i,j} \theta''_{ij} s_i^t s_j^{t-1} - \psi(\mathbf{s}^{t-1}) \right\} \quad (7)$$

で与えられる Glauber dynamics に従う 2 値ベクトル時系列を生成し , モーメントの観測値を求めた . 近似方程式にこれらの値を代入してえられた θ''_{ij} の推定値と真の値とを比較したところ , 相互作用が弱く , 観測時間が長い場合に推定精度が高くなるという結果がえられた .

4 結論

神経活動の同時記録データを解析するために、時間的相互作用や高次の空間的相互作用をもつ対数線形モデルを推定する方法を提案した。数値実験を用いてその精度を評価したところ、相互作用が弱い場合についてこの方法が有効であることが示された。

この手法を用いて実際の神経活動を対数線形モデルとして推定し、集団活動としての特性を分析することが今後の課題として挙げられる。

参考文献

- [1] Y. Roudi, J. Tyrcha, and J. Hertz. Ising model for neural data: model quality and approximate methods for extracting functional connectivity. *Physical Review E*, 79(5):051915, 2009.
- [2] E. Schneidman, M. Berry, R. Segev, and W. Bialek. Weak pairwise correlations imply strongly correlated network states in a neural population. *Nature*, 440(7087):1007–1012, 2006.
- [3] V. Sessak and R. Monasson. Small-correlation expansions for the inverse Ising problem. *Journal of Physics A*, 42(5):055001, 2009.
- [4] A. Tang, D. Jackson, J. Hobbs, W. Chen, J. Smith, H. Patel, A. Prieto, D. Petrusca, M. Grivich, A. Sher, et al. A maximum entropy model applied to spatial and temporal correlations from cortical networks in vitro. *The Journal of Neuroscience*, 28(2):505, 2008.
- [5] F. Yeh, A. Tang, J. Hobbs, P. Hottowy, W. Dabrowski, A. Sher, A. Litke, and J. Beggs. Maximum entropy approaches to living neural networks. *Entropy*, 12(1):89–106, 2010.

量子ビット間の相互作用推定手法

田中宗

東京大学理学系研究科 化学専攻

量子情報処理を実現するためには、量子ビット間の相互作用を高精度に推定する必要がある。我々は、NMR 量子コンピュータやダイヤモンド中の格子欠陥と窒素サイトとの間の電子状態を量子ビットとみなす系 (NV 中心) を具体例とし、量子ビット間の相互作用を推定する手法を二通り紹介する。

NMR 量子コンピュータを念頭に置いた系の相互作用推定問題

核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance: NMR) はもともと化学物質の分析・同定的手段として用いられてきた。またスピンを選択的に回転させることができることから、量子コンピュータとして利用することも期待され、量子状態の操作や量子アルゴリズムのデモンストレーションをするためによく用いられる方法の1つである。この系は横磁場イジングモデルで記述することができる。すなわちハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{NMR}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i^x \hat{\sigma}_i^x \quad (1)$$

ただしここで、 $\hat{\sigma}_i^\alpha$ は、サイト i におけるパウリ行列の α 成分である：

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

我々は以下の条件のもと、全ての相互作用を推定する方法を考案した。片端の相互作用のみがわかっており、また端のスピンのみ測定・操作をすることが可能であるとする。また各々のサイトにかかっている磁場 h_i^x が全て未知であるとする。我々は端のスピンダイナミクスを追跡することにより、すべての相互作用を推定することができることを見出した [1]。本研究は中原幹夫氏 (近畿大)、近藤康氏 (近畿大)、Mohammad Ali Fasihi 氏 (近畿大) との共同研究である。

NV 中心を例とした相互作用推定問題

先程の例では横磁場イジングモデルについて考察した。量子ビット間の相互作用はイジング的相互作用であるとは限らず、より複雑な場合が考えられる。例えばダイヤモンド中の空孔と窒素とで形成される電子状態を量子ビットとみなした時、それらの相互作用は双極子・双極子相互作用で記述される。そのような場合についても相互作用推定を行うことができる方法を検討した。我々は2スピンからなる、最も一般的な相互作用について考察した。

$$\mathcal{H}_{\text{NV}} = \sum_{\mu, \nu \in \{x, y, z\}} g_{\mu\nu} (\hat{\sigma}_1^\mu \otimes \hat{\sigma}_2^\nu), \quad (3)$$

$$[g_{\mu\nu}] = \begin{pmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{yx} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{zx} & g_{zy} & g_{zz} \end{pmatrix} \quad (4)$$

我々は片方のスピン状態を観測することによって、上の $g_{\mu\nu}$ を全て求めることの出来る方法を考案した [2,3,4]。本研究は鹿野豊氏（分子研）、細谷暁夫氏（東工大）、各務惣太氏（東工大）との共同研究である。

両者の方法とも、1つのスピンの状態を観測することにより、全ての相互作用の形を推定するというものである。このように量子力学的ダイナミクスの情報をベースにハミルトニアンの中のパラメータを推定する、いわゆる逆問題となっている。今回取り扱った問題は極めて簡単な場合である。そのため、より現実的に複雑で難しい系を扱う場合の一般的枠組みは、物理学の知見からの正面突破のみでは太刀打ち出来ず、情報科学の分野で蓄積されてきた推定問題に対する手法の助けが不可欠になってくると考えている。本講演ではそのような観点からの今後の展望についても述べる予定である。

- [1] M. A. Fasihi, S. Tanaka, M. Nakahara, and Y. Kondo, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 044002 (2011).
- [2] Y. Shikano and S. Tanaka, Europhys. Lett. **96**, 40002 (2011).
- [3] Y. Shikano, S. Kagami, S. Tanaka, and A. Hosoya, AIP Conf. Proc. **1363**, 177 (2011).
- [4] 田中宗、鹿野豊、素粒子論研究 **119** (2012).

結び目の彩色問題

中島 千尋

九州大学 大学院理学研究院 物理学部門

結び目は昔から素朴な問題意識とともに数学の対象となってきた。また近年は生体高分子の組織化や機能の発現にトポロジー構造が深く関わっていることが見出され [1]、熱揺らぎを受ける結び目構造の実現確率分布や選択・制御の問題が注目を集めている。

結び目の理論と統計力学の関係は深く [2]、R 行列を通した多項式不変量と可解模型の対応関係 [3] や高分子レオロジーへの応用 [4] がある。多項式不変量と可解模型の対応関係は指摘されているが、関係が存在することと具体的な結び目の弁別・解析が可能であることの間にはギャップがある。実際、結び目不変量の計算量は大きく、多くの場合に射影図式の交点数やひもの長さの指数関数で計算量が増大することが知られている。他にも、Jones 多項式の計算 [5] や結び目の単純化による自明性判別 [6] が NP 計算量クラスに属することが証明されるなど、結び目のトポロジーには計算機科学的にも興味深い話題がある。前述の通り、生体高分子の大規模な高分子配位の結び目構造の実現・遷移の仕方を解析する動機があるが、計算量の問題は多くの点で壁となっている。

与えられた結び目についての不変量の計算に関連して、我々は結び目の p 彩色数と呼ばれる不変量（ある条件を満たす p 色塗り分けの配位の数）を計算する問題を、射影図式の弧と交点の情報を 2 部グラフにマップすることでグラフ上の制約充足問題に定式化できることを見出し、高分子結び目のサンプルに対してレプリカ交換モンテカルロ法と熱力学積分を用いてこの不変量の計算を行った [7]。この方法がどの程度大きな結び目に対して現実的に適用できるかは現在調査中であるが、塗り分け配位について幾つかの新しい事実が見出されている。例えば、非自明な塗り分けが可能な p の値の系列が同じである結び目の組が幾つか知られているが、それらにおいても塗り分け配位そのものには重複が無いこと、塗り分けの配位にラテン方阵との関係が示唆されること（詳細は未解明）などである。

射影図式をグラフに対応させる方式を用いて、固定された構造の不変量計算にとどまらず、構造の遷移を扱うことも可能である。結び目の完備な変形として知られる Reidemeister 移動をグラフの局所的な変換として定式化することができる。そのため可約な結び目の変形（結び目をほどく操作など）はグラフの変形の繰り返しとして記述でき、これを用いて可約な結び目の単純化問題をグラフ上で考えることができる。結合の情報のみを抽出することで、紐の空間構造において各々の弧の長さに依存する揺らぎの効果は無視される。しかし結び目の大規模構造の変化に対して一定の示唆を与えることを期待している。特に、結び目をほどくことによる自明性判別問題が NP 計算量のクラスに属する [6] ことを受けて、グラフ Reidemeister 変形における準安定状態の埋め込まれ方を調べることにより計算量クラスとの関係にアプローチすることは興味深い。

講演では最近の筆者らの仕事の内容を中心に述べるが、確率的アルゴリズムを用いた計算トポロジーの問題へのアプローチの可能性についても紹介する。『グラフによる結び目の単純化問題』、『Jones 多項式などの多項式不変量のモンテカルロ法による計算の性能』などの話題に触れたいと考えている。

参考文献

[1] C. Ernst and D. W. Sumners, Math. Proc. Camb. Philos. Soc. **108**, 489 (1990) など。

- [2] L. H. Kauffman, *Knots and Physics*, (World Scientific, 1991).
- [3] T. Deguchi, et.al., J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 3039 (1987) など。
- [4] T. Deguchi and K. Tsurusaki, arXiv:hep-th/920911.
- [5] D. J. A. Welsh: *Complexity: Knots, Colorings and Counting*, London Mathematical Society Note Series 186, (Cambridge University Press, 1993).
- [6] J. Hass, J. C. Lagarias, and N. Pippenger, J. ACM, **46**, 185 (1999).
- [7] C. H. Nakajima and T. Sakaue, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 035001 (2012).

揺らぎ定理に基づく熱力学の構成

杉山 友規

東京工業大学理工学研究科

近年、揺らぎ定理[1,2]の発見により、非平衡系における仕事や熱量そしてエントロピー生成の微視的スケールにおける揺らぎの構造が明らかになった。この定理は様々な導出が存在し、また様々な文脈で表現されているが、最も重要な点は非平衡系を記述する微視的確率モデル（確率過程）が従う対称性を規定していることにあると言える。即ち、この定理は、平衡統計物理学（統計力学）で謂う所の等重率の原理に対応すると考えることが出来る。この立場に立ったとき、我々は、微視的スケールの確率論である揺らぎ定理と巨視的スケールにおける決定論である熱力学の間を繋ぐ架け橋がどのようなものであるかと言うことに興味を持つ。多くの場合、この様な研究は積分形の揺らぎ定理である Jarzynski 恒等式[3]を用いて、微視的物理量の期待値を熱力学的物理量であると仮定して遂行される。しかし、果たして熱力学は期待値に関する理論であったのだろうか？そもそも、統計物理学の本質は熱力学極限を取る操作（即ち、微視的物理量を粗視化し、システムサイズを大きくする操作）にあると言っても過言ではない。この操作のおかげで、微視的スケールに存在する揺らぎは系が大きくなると共に減衰し、極限においては決定論的な熱力学が構築されるのである。この様に考えると、期待値を用いた従来の揺らぎ定理と熱力学の対応付けには問題があると言わざるを得ない。本講演では、この点を克服し、微視的物理量に対し直接熱力学極限を取ることによって、揺らぎ定理と熱力学（特に第2法則）の関係を明らかにする。また、熱力学極限を考えることによって初めて理解される準安定状態の自由エネルギーの測定方法を提示する。

構成は以下の通りである。まず、簡単に揺らぎ定理の主張について紹介し、続いて統計力学を例として熱力学極限を取る操作について復習する。その後、非平衡系を記述する確率モデル（確率過程）に対し熱力学極限の取り、揺らぎ定理と熱力学第2法則の関係を明らかにする。最後に、以上の議論を用いて、準安定状態に対する自由エネルギーの測定方法を提示する。

参考文献

- [1] C. Jarzynski, J. Stat. Phys. **98**, 77 (2000).
- [2] G. E. Crooks, Phys. Rev. E **60**, 2721 (1999).
- [3] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
- [4] D. A. Dawson, J. Stat. Phys. **31**, 29 (1983).
- [5] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell, Random Perturbations of Dynamical Systems (Springer, 1984).

線形フィードバック系における情報熱力学

藤谷洋平（慶應義塾大学理工学部）

制御される系（プラント）が、温度 T の熱浴に触れているとする。以下で、 β は Boltzmann 定数と T の積の逆数とする。離散時間で記述することにして、 k 番目の時刻のプラントの状態変数を \mathbf{x}_k とする。これが、線形 Langevin 方程式

$$\mathbf{x}_{k+1} = A_k \mathbf{x}_k + B_k \mathbf{u}_k + \mathbf{w}_k \quad (1)$$

に従うとする。入力 \mathbf{u}_k は、状態変数を時刻 k まで測定して決める。熱雑音 \mathbf{w}_k は白色で、平均はゼロとする。通常、係数行列 A_k および B_k ならびに \mathbf{w}_k は、 k に依らない。

各時刻で入力を切り替えていく。時刻 k でのプラントのエネルギーは、 $E(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_{k-1})$ から $E(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)$ に変わる。これが、外部がプラントにした仕事と考えられる。式 (1) による（つまり順過程の）遷移確率を $P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k)$ と書く。プラントの始状態は入力 \mathbf{u}_0 の下での平衡状態とする。終状態は入力 \mathbf{u}_N の下での平衡状態とする。時間反転した変数を $*$ で表わし、時間反転した Langevin 方程式に伴う（つまり逆過程の）遷移確率を $\overleftarrow{P}_{k|k+1}$ とする。各ステップでの詳細釣り合い

$$P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k) e^{-\beta E(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)} = \overleftarrow{P}_{k|k+1}(\mathbf{x}_k^*|\mathbf{x}_{k+1}^*; \mathbf{u}_k^*) e^{-\beta E(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_k)} \quad (2)$$

を仮定する。式 (1) が、このような性質を持っているとするわけである。プラントの発展が平衡に近いと仮定して、線形 Langevin 方程式を使ったが、入力が変わらない時この式は平衡のまわりのゆらぎも記述する。そのことの帰結が、上記の local detailed balance である。

式 (2) をかけあわせていくことで、

$$e^{\beta(\Delta F - W)} G = \overleftarrow{G} \quad (3)$$

を得る。ここで、 ΔF は始状態から終状態までのプラントの Helmholtz 自由エネルギーの変化分であり、 G と \overleftarrow{G} は次で定義する：

$$G \equiv P_0(\mathbf{x}_0) \left\{ \prod_{k=0}^{N-1} P_{k+1|k}(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k; \mathbf{u}_k) \right\}, \quad (4)$$

$$\overleftarrow{G} \equiv \overleftarrow{P}_N(\mathbf{x}_N^*) \left\{ \prod_{k=0}^{N-1} \overleftarrow{P}_{k|k+1}(\mathbf{x}_k^*|\mathbf{x}_{k+1}^*; \mathbf{u}_k^*) \right\}. \quad (5)$$

ここで P_0 は順過程における時刻 $k=0$ での状態変数の確率密度を表す。フィードバックがなければ、式 (4) は順過程における状態変数が $\mathbf{x}_{[0,N]} \equiv \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ である確率密度を表し、式 (5) は逆過程における状態変数が $\mathbf{x}_{[0,N]}^*$ である確率密度を表すことになる。この場合、文献 [1] にあるようにして、

$$\langle e^{-\beta(W - \Delta F)} \rangle = 1 \quad (6)$$

という Jarzynski 等式 [2] が導かれる。ここで $\langle \dots \rangle$ は統計平均をあらわすとする。

フィードバックがあると、順過程の Markov 性が失われ、式 (6) は導けない。代わりにどうなるかを、フィードバック系に条件をつけて議論しよう [3]。各時刻の測定量を

$$\mathbf{y}_k = C_k \mathbf{x}_k + \mathbf{v}_k \quad (7)$$

とする。係数行列 C_k は、必ずしも正方行列とは限らない。センサ雑音 \mathbf{v}_k は白色とする。また、時刻 k における状態変数の推定量 $\hat{\mathbf{x}}_k$ を、その時刻までの測定量 $\mathbf{y}_{[1,k]}$ に線形として、最小分散

推定で求める。 $k = 1, 2, \dots, N - 1$ の入力を、各時刻での状態変数の推定量 \hat{x}_k に比例するとする：

$$\mathbf{u}_k = K_k \hat{\mathbf{x}}_k . \quad (8)$$

ここで K_k はゲインと呼ばれる。この仕組みを線形レギュレータという。ゲインをどのように決めるかは、あとで議論する。

状態変数を $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_k^{(1)} + \mathbf{x}_k^{(2)}$ と分けて、それぞれが

$$\mathbf{x}_{k+1}^{(1)} = A_k \mathbf{x}_k^{(1)} + B_k \mathbf{u}_k , \quad (9)$$

$$\mathbf{x}_{k+1}^{(2)} = A_k \mathbf{x}_k^{(2)} + \mathbf{w}_k \quad (10)$$

を、 $k = 0, 1, \dots, N - 1$ で満たすようにする [4]。あわせると式 (1) が満たされることがわかる。はじめの $\mathbf{x}_0^{(1)}$ は決めてしまう。入力 \mathbf{u}_0 も決めておく。すると、 $\mathbf{x}_1^{(1)}$ も決まる。式 (10) からわかるように、 $\mathbf{x}_{[0,k]}^{(2)}$ は入力によらず、マルコフ過程となる。さらに、 $2 \leq k \leq N$ の場合、 $\mathbf{y}_{[1,k-1]}$ が決まれば、 \mathbf{u}_{k-1} が決まり、 $\mathbf{x}_k^{(1)}$ が決まる。したがって、 $k = 1, \dots, N - 1$ に対して、測定値 $\mathbf{y}_{[1,k]}$ が得られれば、

$$\mathbf{y}_k^{(2)} \equiv \mathbf{y}_k \quad C_k \mathbf{x}_k^{(1)} = C_k \mathbf{x}_k^{(2)} + \mathbf{v}_k \quad (11)$$

を計算することができる。

このようにして、測定値 $\mathbf{y}_{[1,k]}$ を得た時点で、確定した $\mathbf{y}_{[1,k]}^{(2)}$ の値を使って、 $\mathbf{x}_k^{(2)}$ と $\mathbf{x}_{k+1}^{(2)}$ の推定量を計算することができる。時刻 $k = 0$ での $\mathbf{x}_1^{(2)}$ の推定量は、 $\langle \mathbf{x}_1^{(2)} \rangle$ とする。なお、 $\mathbf{x}_{[0,k+1]}^{(1)}$ は、推定するまでもなく、確定値が得られる。このようにして、次々と状態変数の推定量を求めていく方法を Kalman フィルタという。詳細のわかりやすい解説は文献 [5] にある。

ある量の統計平均をとることは、そもそも x_0 と $w_{[0,N-1]}$ および $v_{[1,N-1]}$ に関して平均をとることだったが、これを $\mathbf{x}_{[0,N]}^{(2)}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ に関しての平均をとることと考えることもできる。しかも上述のように、 $\mathbf{x}_{[0,k]}^{(2)}$ はマルコフ過程である。これらのことに注意して、式 (4) と式 (5) を使って計算していくと、式 (6) の代わりに

$$e^{\beta \Delta F} \langle e^{-\beta W - \mathcal{I}_2} \rangle = 1 \quad (12)$$

を得る。ここで、 \mathcal{I}_2 は

$$\mathcal{I}_2 \left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} | \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} \right) \equiv \ln \left\{ P \left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} | \mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)} \right) / P \left(\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)} \right) \right\} \quad (13)$$

で定義する。式 (12) が、ここで考えた線形フィードバック系で書き換えられた Jarzynski 等式である。これから、

$$\langle W \rangle \geq \Delta F - k_B T \langle \mathcal{I}_2 \rangle \quad (14)$$

を導ける。ここで、 $\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ は $\mathbf{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ と $\mathbf{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の間の相互情報量である。式 (14) の等号成立条件は、すべてが決定論的であることである。

式 (12) は、任意のゲインについてなりたつ。通常の制御では、ゲインを評価関数が最小になるように決めることが多い。評価関数が

$$\sum_{k=1}^{N-1} \langle \mathbf{x}_{k+1}^T Q_{k+1} \mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{u}_k^T R_k \mathbf{u}_k \rangle \quad (15)$$

のように二次形式で与えられるとする。ここで $Q_{[2,N]}$ と $R_{[1,N-1]}$ は実対称行列である。このとき、各時刻の最適ゲインを求める手続きは、推定量を求めるとは独立に行うことができる。このことを分離定理という [4, 6]。

さらに、関わっている確率変数がすべて Gaussian とする。この場合を、LQG 問題 (linear, quadratic, Gaussian) という。このとき、広いクラスの制御系のなかで、最適な制御が線形レギュレータであたえられることが示せる。またこのとき、Kalman フィルタの計算途中で求められる行列 P_k と M_k を使って、相互情報量が簡便に

$$\langle \mathcal{I}_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \ln \det (P_k^{-1} M_k) \quad (16)$$

と計算できる [5, 7]。

通常の熱力学第二法則は $\langle W \rangle \geq \Delta F$ と書ける。左辺は過程途中の詳細に依らないので、最小仕事は、等号成立条件である準静過程のときに得られることがわかる。一方、この式をフィードバック系で書き換えた形になっている式 (14) では、過程の設定条件に依る量が $\langle W \rangle$ と $\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ のふたつがあるので、どのような条件で仕事が最小になるのか、わかりにくい。当日の発表では、この点について、具体的な例における数値計算結果を示すことにする。

以上の結果は、鈴木博之氏との共同研究による。沙川貴大氏および山本直樹氏との議論に感謝する。最後に、関連する研究成果について付記する。文献 [3] より以前に、量子系の一回測定フィードバック系で、熱力学第二法則を拡張した式を導いたのは文献 [8] であり、また古典系の一回測定フィードバック系で Jarzynski 等式を拡張したのは文献 [9] である。古典系の多数回測定線形フィードバック系で数値計算した例は文献 [10] にある。また、文献 [3] より後に、古典系の多数回測定の一一般のフィードバック系で、Jarzynski 等式を拡張した研究は文献 [11] および [12] にある。

References

- [1] G. E. Crooks: J. Stat. Phys. **90** (1998) 1481.
- [2] C. Jarzynski: Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 2690.
- [3] Y. Fujitani and H. Suzuki: J. Phys. Soc. Jpn **79** (2010) 104003.
- [4] W. M. Wonham: SIAM J. Control **6** (1968) 312.
- [5] S. Arimoto: *Kalman Filter* (Sangyo-Tosho, Tokyo, 1977) [in Japanese] Chapters 3 and 6.
- [6] Y. Sawaragi, T. Soeda, and T. Nakamizo: *Kakuritsu Sistemu Seigyo no Kiso (Fundamentals in Stochastic Control)* (Nisshin, Tokyo, 1975) [in Japanese] Chapters 4-6.
- [7] S. Omatu, Y. Tomita, and T. Soeda: IEEE Trans. Information Theory **22** (1976) 593.
- [8] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 080403.
- [9] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 090602.
- [10] H. Suzuki and Y. Fujitani: J. Phys. Soc. Jpn **78** (2009) 074007.
- [11] J. M. Horowitz and S. Vaikuntanathan: Phys. Rev. E **82** (2010) 061120.
- [12] T. Sagawa, Ph. D thesis, (Faculty of Science, University of Tokyo, 2011), Chapters 8 and 9.

有限時間熱機関の効率論による非平衡物理学へのアプローチ¹

泉田 勇輝²

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 日本学術振興会特別研究員 (PD)

熱機関は熱を仕事に変換する装置である。カルノーによれば、熱を仕事に変換するには温度 T_h の熱源から受け取った熱 Q_h は 100 パーセント仕事 W には変換されず、より低い温度 T_c の熱源に残り $Q_c \equiv Q_h - W$ を熱として捨てる必要がある。これは、熱機関の効率 $\eta \equiv W/Q_h$ は 1 を超えることが不可能であることを意味している。実際、カルノーによれば、 $\eta \leq \eta_C \equiv 1 - T_c/T_h$ となって熱源の温度で決まる上限値 η_C (カルノー効率) が存在する。このカルノー効率は、全ての可逆的な熱機関において成立する。熱機関が可逆的になるためには無限にゆっくりと熱平衡状態を経由して動作する準静的極限が必要である。例えばカルノーサイクルは高温・低温側の熱源と接触する準静的等温過程を準静的断熱過程でつないだ熱力学サイクルでありカルノー効率を達成する熱機関モデルとして知られている。

一方、可逆な熱機関は準静的極限が仮定されるため、単位時間当たりの仕事を意味する仕事率 (パワー) はゼロとなってしまうという実用上の問題点がある。工学的な観点からは最大の仕事率を目指すのが望ましい場合も多い。このような問題意識のもと Curzon と Ahlborn はカルノーサイクルを有限時間に拡張した熱機関の数理モデルを用いて、その最大仕事率時の効率 η^* が $\eta_{CA} = 1 - \sqrt{T_c/T_h}$ (Curzon-Ahlborn (CA) 効率) のように熱源の温度だけで与えられるという興味深い結果を導いた [1]。彼らの結論は実際には特殊なケースでしか成立しないことが後に分かるものの、最大仕事率時の効率というアイデア自体はその後の研究に大きな影響を与えた。

より正確な熱機関の最大仕事率時の効率を決定する問題は近年になって再び注目を集めている。Esposito, et al. はカルノーサイクルを最低次の非平衡度まで有限時間に拡張したモデルを提案した [2]。このモデルでは、熱源との熱のやりとりが準静的極限から以下のように拡張される:

$$Q_h = T_h \Delta S \frac{T_h \Sigma_h}{\tau_h} + \dots, Q_c = T_c \Delta S \frac{T_c \Sigma_c}{\tau_c} + \dots \quad (1)$$

ここで ΔS は高温熱源と接触している際の作業物質の準静的エントロピー変化、 τ_h (τ_c) は高温 (低温) 熱源との接触時間、 Σ_h と Σ_c は正の定数を仮定する。彼らはこの熱機関の最大仕事率時の効率 η^* には

$$\eta_-^* \equiv \frac{\eta_C}{2} \leq \eta^* \leq \frac{\eta_C}{2} \frac{\eta_C}{\eta_C} \equiv \eta_+^* \quad (2)$$

のように下限値 η_-^* と上限値 η_+^* が存在するという注目すべき結果を導いた。ちなみに CA 効率はこれら下限値と上限値に挟まれた範囲に存在することも分かる。一方、我々は最近

¹本研究の一部は北海道大学大学院理学研究院の奥田浩司氏との共同研究である

²E-mail: izumida@serow.t.u-tokyo.ac.jp

より一般的な熱流-パワー変換系を

$$J_1 = \dot{x} = L_{11}X_1 + L_{12}X_2, \quad (3)$$

$$J_2 = \dot{Q}_h = L_{21}X_1 + L_{22}X_2 - \gamma_h J_1^2 \quad (4)$$

のような散逸項 $\gamma_h J_1^2$ を含んだ Onsager 関係式で記述することを提案した [3]. ここで $X_1 \equiv F/T_c$, $X_2 \equiv 1/T_c - 1/T_h$ はそれぞれ外力 F と温度差による熱力学的力, J_1, J_2 はそれぞれ X_1, X_2 に共役な熱力学的流れ, L_{ij} 's は Onsager 係数 (相反関係 $L_{12} = L_{21}$ を仮定), $\gamma_h > 0$ は散逸の強さを表す定数である. ここで $q \equiv L_{12}/\sqrt{L_{11}L_{22}}$ はカップリング係数と呼ばれる Onsager 係数によって定義される量であり, エントロピー生成の非負性より $|q| \leq 1$ がいえる. この時与えられた q のもとでは, 最大仕事率時の効率 η^* は

$$\eta_-^q \equiv \frac{\eta_C}{2} \frac{q^2}{2 - q^2} \leq \eta^* \leq \frac{\eta_C}{2} \frac{q^2}{2 + q^2(1 + \eta_C/2)} \equiv \eta_+^q \quad (5)$$

のように熱源の温度と q によって決まる下限値 η_-^q と上限値 η_+^q が存在することが導ける. ここで $|q| = 1$ の場合に注目すると, Eq.(2) は Eq.(5) と一致することが分かる. しかも η_+^q はこの $|q| = 1$ の場合に最大値 $\eta_C/(2 - \eta_C)$ をとることも分かる. つまり, 有限時間カルノーサイクルは η^* の最大値を与える最も”性質の良い”モデルであることが結論される. しばしばカルノーサイクルは「ピストンの膨張・圧縮運動によって誘起される熱流以外に無駄な熱流がない」ようなサイクルであると言われるが, この $|q| = 1$ の条件はその数学的表現であると解釈することもできる. しがしながら, なぜ有限時間カルノーサイクルのような周期的な熱力学サイクルとこのような Onsager 関係式で記述される系が最大仕事率時の効率 η^* に関して同様な結果を与えるのであろうか. Eqs. (3), (4) で記述される系は有限時間カルノーサイクルのみならず, 熱電効果を利用したデバイス [4] や情報通信プロセスのエネルギー論 [5] についても同様な数学的構造があることが最近認識されてきている. その意味で有限時間熱機関の効率論は領域横断的なアイデアを提供する. またより高次の非平衡性をもった熱機関は Eq. (5) に制限される必要はないので, Eq. (5) は熱機関の非平衡度を調べるリトマス試験的な役割を果たす. 講演では有限時間熱機関の物理学の基礎から始め, これまでの進展とその広がり, 非平衡系物理学への今後の可能性について有限時間カルノーサイクルの性質を中心に議論したい.

参考文献

- [1] F. Curzon and B. Ahlborn, Am. J. Phys. **43**, 22 (1975).
- [2] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg and C. Van den Broeck, Phys. Rev. Lett. **105** (2010), 150603.
- [3] Y. Izumida and K. Okuda, EPL. **97** (2012), 10004.
- [4] Y. Apertet, H. Ouerdane, O. Glavatskaya, C. Goupil and P. Lecoeur, EPL. **97** (2012), 28001.
- [5] Y. Zhou and D. Segal, Phys. Rev. E **82**, 011120 (2010).

モンテカルロ法に関する近年の話題について

福島孝治

東京大学大学院総合文化研究科

モンテカルロ法は確率分布からの汎用サンプリング手法として、統計物理や統計科学をはじめ様々な分野で応用されている。統計物理やベイズ統計では必然的に高次元の確率分布を扱うニーズがあり、主に重点サンプリング法が使われてきた。重点サンプリングはポピュレーション型モンテカルロ法とマルコフ連鎖モンテカルロ法に大別できる。マルコフ連鎖モンテカルロ法は90年代に統計物理の分野で拡張アンサンブルに基づく進展があり、マルチカノニカル法や交換法などが提案された。それらの方法は高次元かつ多峰的な分布からのサンプリングにもある程度耐えられる方法であり、応用範囲が非常に広がった。マルコフ連鎖モンテカルロ法の基本原理は単純であり、その設計部分は定常分布の設定と遷移確率の選択に分けられる。拡張アンサンブルでは定常分布を求めたい分布から拡張することにより、定常分布への収束性を改善している。一方で、遷移確率の模索はこれまでにあまりなされてこなかった。最近、Suwa-Todo[1]により、従来用いられてきた詳細釣り合い条件を緩めることにより緩和時間が短くなることが示され、遷移確率の選択の重要性が注目されつつあるように思われる。効率のよさを考えたときに、詳細釣り合い条件の位置づけはそれほど明確にはなっていないようであり、また改めてマルコフ連鎖モンテカルロ法の収束判定基準の不明瞭さを再認識させられる。我々は可解模型の知見から、詳細釣り合い条件を破ることの動力学への影響を考察する。具体的には、動的次元イジング模型について、詳細釣り合い条件を破る効果を研究した。我々はTuritsynら[2]のタイプの詳細釣り合い条件の破れたつりあい条件を考え、そのタイプに属するいくつかの遷移確率について調べた。その中で、ある遷移確率について熱力学極限において時間発展が閉じた方程式で記述されることを見出し、その緩和時間を評価した。それによれば、詳細釣り合い条件の破れは一つのパラメータで表され、詳細釣り合い点がかつとも緩和時間が遅いことがわかった。

拡張アンサンブルの遷移確率の設定方法も議論されるべき問題である。交換法では温度の設定方法とも関係する問題であり、これまでに様々な議論がなされてはいるが効率の観点から確定していることはなさそうである。元々の提案では、交換確率は温度に依らないことを指針として、それを実現する設定方法が提案されている。しかしながら、多くの応用例ではそれに従っているわけではなく、等(逆)温度間隔を基本に転移温度近傍で適当な補正をいれているだけのようである。近年、この指針は効率の観点から最適ではなく、交換遷移についての拡散定数を一定にすることが提案されている。また、できるだけ平衡状態に近づけてから交換を行う方法や、最近接だけでなく離れた温度交換を導入するのがよいとする説やJarzynski等式を用いることで温度間隔を離す方法などいくつかの提案がされている。これらを概観しながら、今後の展望を議論する。

本研究は、酒井佑士氏との共同研究である。

[1]H. Suwa and S. Todo, Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 120603.

[2]K. S. Turitsyn, M. Chertkov and M. Vucelja, Physica D **240** (2011) 410.

エルゴード的マルコフ鎖の一般的改良

諏訪 秀磨

東京大学工学系研究科物理工学専攻

本発表ではマルコフ連鎖モンテカルロ法での局所状態更新法による計算効率の違いを議論し、いくつかの系で実用的に最も効率の高い更新法を提案する。一般的にマルコフ連鎖モンテカルロ法はモンテカルロ積分における次元の呪いを解決するが、代わりに「サンプル間の相関」に苦しむ。相関を減らし効率的なサンプリングを行うために、以下の3つの点を考慮することが重要となる。1つ目はアンサンブルの決定である。欲しい量をどういったアンサンブルから抽出するかという問題であり、交換法やマルチカノニカル法等の拡張アンサンブル法はこの点における改良法と言える。2つ目は遷移先状態候補の選択である。クラスターアルゴリズムやハイブリッドモンテカルロ法が顕著な例となる。前者は分配関数を異なる状態変数で表現し、変数の変換を行いながら大域的な状態更新を可能とし、後者は人工的な状態変数を加え物理的な運動方程式を用いて候補を提案する。そして3つ目が本発表のテーマとなる遷移確率(カーネル)の最適化である。遷移確率を決める方法として、これまではメトロポリス法や熱浴法が主に用いられてきた。しかしこれらは最適ではない。

では「最適」な更新法とはどういったものであるだろうか。マルコフ連鎖モンテカルロ法におけるエルゴード的マルコフ鎖の良し悪しは2つの基準により議論できる。ひとつは分布収束の速さで、収束(緩和)が速ければ早くサンプルを開始できる。もうひとつは漸近分散の大きさと、分散が小さければ自己相関時間が短くサンプル効率が高い。状態数が有限の場合、マルコフ鎖は遷移行列と一対一に対応する。そして遷移行列の固有値が上記の基準と結びつく。分布収束は第2固有値の絶対値の大きさと決まり、一方、漸近分散は全固有値が関係する。これまで、全遷移確率を調整できる場合での遷移行列の最適化が数学的に議論されてきた[1,2]。しかしその状況では、そもそもモンテカルロ法による近似を必要としない。広大な状態空間に対し、局所的な更新を繰り返すことがマルコフ連鎖モンテカルロ法の基本精神なのだ。局所更新における遷移確率をどのように最適化するべきかは自明ではない。直感的にはできるだけ以前とは違う状態に遷移する方が、サンプリング効率が良いと考えられる。そこで我々は状態更新において状態が全く変化しない(平均の)棄却率をどんな場合でも最小化する遷移確率決定法を考案した[3,4]。これまで代数的に解かれてきた問題を幾何学的な「重みの割り当て」問題に置

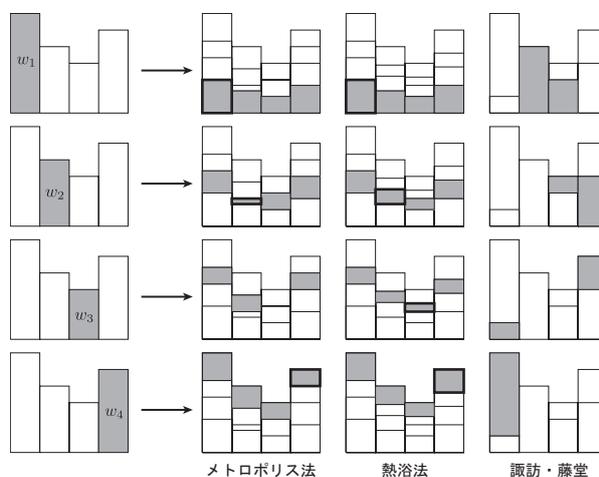


図 1: 遷移候補数 $n = 4$ の場合の例。我々の手法 [3] では棄却率がゼロになる。

き換えることでこれを可能とした(図1)。一方、これまでのマルコフ鎖はほとんどの場合「詳細つりあい」条件を満たすように構成されてきた。1953年の手法開発以来、マルコフ連鎖モンテカルロ法はこの条件の範囲内で発展を続けてきたと言える。しかし、詳細つりあいは十分条件にすぎず、必要条件ではない。我々は前述の新しい幾何学的なアプローチにより、この十分条件を満たさずとも正しいサンプリングを一般的に可能とする初めての手法を開発した[3]。このように幾何学的に構成されたマルコフ鎖の性能をポッツ模型を使って調べた。その結果上記の2つの基準のどちらにおいても、既存手法と比べ我々の状態更新法が最も優れていた(図2は自己相関時間の比較)。例えば4-状態ポッツ模型では、メトロポリス法より6倍以上計算効率を向上させる。

この離散状態変数に対するアルゴリズムのある種の連続極限を考えることができる[5]。条件付き累積分布関数における周期的シフトを用いることで、それは連続状態変数に対する熱浴法の改良法となる。熱浴法では今の状態を忘れて次の状態を決定するが、その代わりに累積分布関数において今の状態から周期的にシフトした点を次の状態として選ぶのである(図3)。この手順により詳細つりあいは破れ正味の確率流が導入される。その結果ある種の負の相関が生じサンプリング効率が高まるというわけである。一方、熱浴法のような棄却のない更新法が使えない連続変数に対しては、これまでほとんどの場合メトロポリス法またはメトロポリス・ヘイスティング法が用いられてきた。ここで棄却がボトルネックとなる。我々は新しい複数状態候補生成法を提案し、離散変数に対するアルゴリズムを用いることで棄却率を大幅に減らすことに成功した。発表ではこれまでの状態更新法と我々の新しい手法を説明し、いくつかの例で性能を比較した結果について議論する。

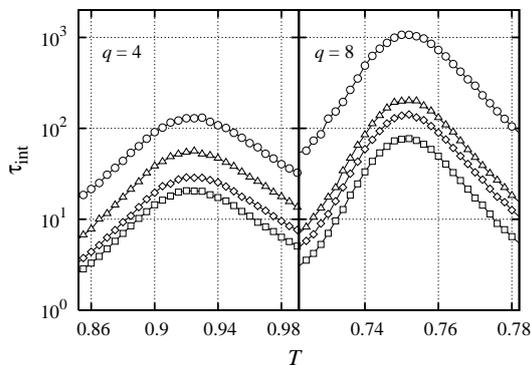


図2: 正方格子強磁性ポッツ模型 ($q = 4, 8$) の構造因子の自己相関時間。メトロポリス法 (○)、熱浴法 (□)、逐次的メトロポリス化ギブスサンプラー [1] (△)、我々の手法 [3,4] (◇) の結果を示す。転移温度はそれぞれ $T \simeq 0.910, 0.745$ 。格子サイズは 16×16 。

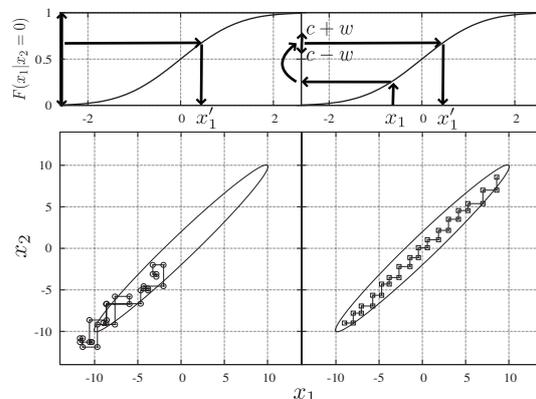


図3: 2変量正規分布での、熱浴法(左)と我々の手法(右)[5]による状態の軌跡。上は条件付き累積分布関数を用いた状態更新の手順。

- [1] A. Frigessi, C.-R. Hwang, L. Younes, *Ann. Appl. Probab.* **2**, 610–628 (1992).
- [2] C.-R. Hwang *Cosmos* **1**(1), 87 (2005).
- [3] H.Suwa and S. Todo, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 120603 (2010).
- [4] H.Suwa and S. Todo, arXiv:1106.3562
- [5] H.Suwa and S. Butsuri **66**, 370 (2011).

非平衡系，生命，情報の関係：計数統計の視点から

大久保 潤

京都大学大学院情報学研究科 システム科学専攻

湯川秀樹博士は、生物物理学者の大沢文夫博士に「生物は積み木細工ですね」と述べた [1]. 量子力学では直感に反するような現象が数多く存在する一方で、生命は DNA から出発して細かい部品の積み重ねで構成されていて直感を越えることがない、ということである。確かに、生命は積み木細工という一面を持つ。だからといって生命を簡単に理解できるわけではない。そこで生物学、物理学、さらには情報科学も含め、さまざまな分野が協力して生命を理解しようとしているのが現状であろう。しかし実際には各分野ごとに手法が異なるばかりか、時には目的でさえも異なる場合がある。どのような視点でこれらの研究分野を眺め、どのようにその関係性を捉えればよいのだろうか。そして、非平衡系の研究は生命の理解とどのようにつながるのだろうか。

研究分野の関係を眺める視点について、一つの例を挙げてみよう。生命の理解の鍵は情報という概念にありそうであるが、そもそも情報とは何か。例えば DNA は情報と関係しており、その配列だけから、生成される RNA やタンパク質、そしてそのタンパク質の三次構造までも、ある程度は推定可能である。しかし、配列のパターンからタンパク質の三次構造を推定することは「生命に関わるパターンについて人間が解釈する」ことである。これは「生命に関わるパターンを生命が解釈する様子について人間が理解する」こととは異なっており、これらの区別が必要であるとも指摘されている [2]. 前者が主に情報科学に、後者が主に生物学や生物物理学に関わることであり、学際的な研究交流において、これらの違いを認識しておかないと会話が噛み合わない可能性もある。さらに「解釈」という考え方は、ある状態が「どのような過程を経て」別の状態へと変化するか、という動的な側面の研究が必要であることを示唆する。

本講演では、物理学と情報科学（と生物学）の接点を深めるという研究会の趣旨を考えて、まず生命に関係する研究分野を眺める視点を簡単に整理することを試みたい。その整理を通して、状態（モノ）と過程（コト）をつなぐための研究の一つとしての非平衡系という視点が見えてくる。さらに、状態と過程をつなぐ自然な枠組みの一つとしての（完全）計数統計と呼ばれる枠組みについて概説する [3, 4, 5]. この枠組みは分子モーターや周期摂動によるポンプカレントと呼ばれる現象と関係しており、さらには計数統計における幾何学的描像と非平衡系におけるエントロピー生成との関係も指摘されている [6].

もちろん、まだ生命について理解できたという段階からはほど遠い場所にいるが、具体的な問題に地道に取り組むこと、さらに数理的な構造を模索し続けることで、生命の理解に迫る何かが見つかることを期待したい。

[1] 大沢文夫, 物性研究 **87**, 362 (2006).

[2] 金城玲, 生物物理 **50**, 166 (2010).

[3] I. Gopich and A. Szabo, J. Chem. Phys. **122**, 014707 (2005); *ibid.* **124**, 154712 (2006).

[4] N.A. Sinityn, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 193001 (2009).

[5] J. Ohkubo and T. Eggel, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 425001 (2010).

[6] T. Sagawa and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **84**, 051110 (2011).

MEG 電流源のオンライン変分ベイズ推定

兼村 厚範

ATR 脳情報解析研究所

脳磁計 (MEG; magnetoencephalography) は、脳活動により発生した磁場を頭外で計測する。よって、脳に電極を直接置く侵襲的な方法より安全性が高く、臨床医料に限らず神経科学や BMI (brain machine interface) など広い目的に適用可能である。ただし、MEG の時間分解能は数 ms 程度と神経細胞活動の時間スケールとほぼ同じであるものの、数百個のセンサに様々な電流からの磁場が重ね合わさって観測されるため、空間分解能は数 cm 程度と粗い [1]。

脳内の電流分布をより高い空間分解能で知るためには、皮質上に相互距離が数 mm 程度の数千～数万個の電流源を仮定し、その強度を推定することが標準的である (図 1)。これは、マクスウェル方程式により記述される脳内電流から頭外磁場への順過程を逆転する逆推定問題である。逆問題を高精度で解くには、一般に良い拘束条件 (事前知識、正則化) が必要とされる。MEG 逆問題に対する拘束条件としては、L2 ノルム最小化 [1]、スパース性 [2] などが提案されている。皮質上の電流源を知ることには、神経科学的な解釈が可能となったり、BMI の精度が向上したりといった利点がある [3]。

脳活動は非定常であるため、MEG 逆推定法もオンライン性を持つことが望ましい。すなわち、1 セットの磁場計測データを受け取るたびに、電流源推定をデータに応じて適応的に変化させることで、その時その時の脳活動に適した推定をすることで、電流源推定の精度向上に繋がると考えられる。本発表では、オンライン変分ベイズ推定 [4] を MEG 逆問題に適用した、オンライン MEG 逆推定法について述べる。

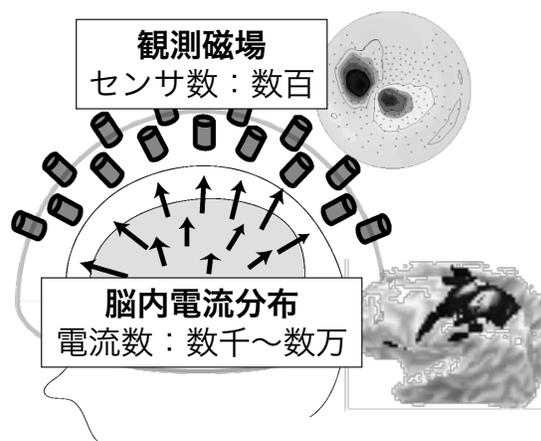


図 1 磁場計測と電流逆推定。矢印は電流を、円筒は磁気センサを表す。

謝辞

本研究は情報通信研究機構の研究委託および科研費(23700281)の助成により実施したものである。

参考文献

- [1] M. Hämmäläinen, R. Hari, R. J. Ilmoniemi, J. Knuutila, and O. V. Lounasmaa, “Magnetoencephalography—theory, instrumentation, and applications to noninvasive studies of the working human brain,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 65, no. 2, pp. 413–497, Apr. 1993.
- [2] M. Sato, T. Yoshioka, S. Kajihara, K. Toyama, N. Goda, K. Doya, and M. Kawato, “Hierarchical Bayesian estimation for MEG inverse problem,” *NeuroImage*, vol. 23, no. 3, pp. 806–826, Nov. 2004.
- [3] A. Toda, H. Imamizu, M. Kawato, and M. Sato, “Reconstruction of two-dimensional movement trajectories from selected magnetoencephalography cortical currents by combined sparse Bayesian methods,” *NeuroImage*, vol. 54, pp. 892–905, 2011.
- [4] M. Sato, “Online model selection based on the variational Bayes,” *Neural Computation*, vol. 13, no. 7, pp. 1649–1681, Mar. 2001.

Mechanical control of hexagonal cell packing in *Drosophila* wing

Shuji Ishihara^{a,b} and Kaoru Sugimura^{c,d}

^a Graduate School of Arts and Science, The University of Tokyo

^b JST PRESTO

^c iCeMS, Kyoto University

^d RIKEN BSI

In the course of animal development, tissues undergo deformation, which is driven by the mechanical forces regulated by the activity of constituent cells. Thus, to understand variety of morphologies of multi-cellular organisms one must elucidate physical process as well as molecular processes to determine the eventual forms of their bodies ~~from embryos~~. Recent studies have clarified how geometrical changes of cells are coordinated via the activity and/or localization of force-generating molecular machineries within a cell. On the other hand, it remains unclear how the mechanical interaction among cells and the resulting stress field of a tissue are organized to control cellular pattern formation. One of the difficulties to characterize mechanical processes of morphogenesis is the lack of proper experimental methods to directly measure and quantify the forces in the cell population inside the animal body.

Here we propose a novel method to estimate the forces from observed cell shapes. Consider that the geometry of epithelial cell population is represented by an assemblage of 2D polygons ('vertex model': Fig. 1a). Forces in the cell population are described by the isotropic pressures of respective cells and tensions applied in the adherent surface between cells. By considering the geometrical forms of the cells, we obtained balance equations of the aforementioned forces. We can estimate the unknown values of forces by solving the balance equations, however, the number of conditions is less than that of unknowns. To overcome the difficulty, we incorporated the experimental fact that the tensions of cell-cell surfaces are positive as the expected feature of the system, which is indicated from the responses to laser ablation of acto-myosin cable in the cell. Then by adopting the expectation as a prior, inverse problem is formulated in the scheme of Bayesian statistics (Fig. 1b-d). Present method has several advantages. At first, it is applicable to variety of systems. Second, the method is noninvasive and it can capture the dynamics of force field. Thirdly, it can distinguish pressures and tensions among respective cells, thus we can compare estimated forces with molecular activities responsible for

generating forces in each cell. Forth, several hundreds of cells are simultaneously estimated, thus we can approach for their relationship between cell level and tissue level kinetics.

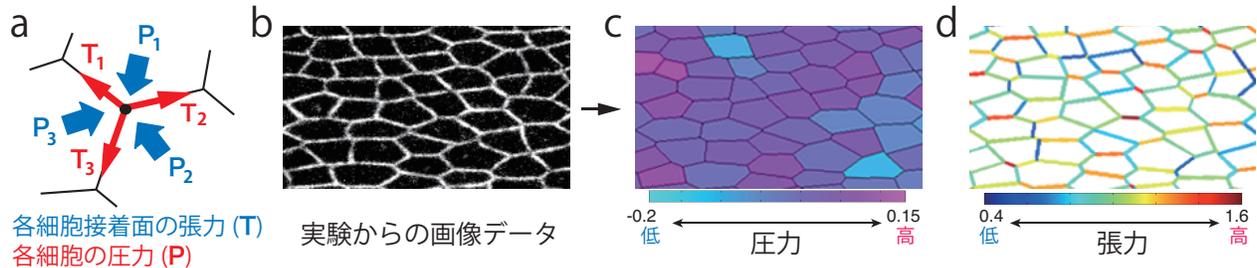


図1. 力の推定手法 (a)細胞集団中の細胞配置は、各細胞の圧力(P)、細胞接着面の張力(T)のバランスから決まる。この逆問題を理論的に定式化することで、細胞の形態画像(b)から個々の細胞の圧力(c)や接着面での張力(d)を推定する。画像は蛹期のショウジョウバエの翅上皮。

Using our method, we studied mechanical basis of hexagonal packing (the increase of hexagonal cells in the *Drosophila* wing during the pupal stage). Our quantification of developmental changes of the stress distribution within a tissue and of corresponding rearrangements of cells provides a physical mechanism for cell packing: biased external forces acting on the tissue provide the directional information for local orientation of hexagonal cells which underlies the global hexagonalization. Our force estimation method will become a powerful tool in analyzing how information for orchestrating cellular behaviors during morphogenesis is encoded in distributions of forces within a tissue.

Beyond the edge of chaos: Amplification and temporal integration by recurrent networks in the chaotic regime

Taro Toyozumi
RIKEN Brain Science Institute

Randomly connected networks of neurons exhibit a transition from fixed-point to chaotic activity as the variance of their synaptic connection strengths is increased. In this study, we analytically evaluate how well a small external input can be reconstructed from a sparse linear readout of network activity. At the transition point, known as the edge of chaos, networks display a number of desirable features, including large gains and integration times. Away from this edge, in the nonchaotic regime that has been the focus of most models and studies, gains and integration times fall off dramatically, which implies that parameters must be fine tuned with considerable precision if high performance is required. Here we show that, near the edge, decoding performance is characterized by a critical exponent that takes a different value on the two sides. As a result, when the network units have an odd saturating nonlinear response function, the falloff in gains and integration times is much slower on the chaotic side of the transition. This means that, under appropriate conditions, good performance can be achieved with less fine tuning beyond the edge, within the chaotic regime.

統計的機械学習における量子アニーリング

佐藤一誠¹, 田中宗², 栗原賢一³, 宮下精二², 中川裕志¹

東京大学 情報基盤センター¹, 東京大学 理学系研究科², Google³

我々人間があるテーマを「学習する」ことは、そのテーマに関する様々な情報を「未知の問題へ活用可能な形で抽象化する」ことであると言える。統計的機械学習は、蓄積された多くのデータや人の経験を数学的に抽象化することで、将来の予測を機械的に行うことを目指している。統計的機械学習では、確率モデルを用いてデータの性質をモデル化する。抽象化された情報は、確率モデルのパラメータとして表現される。機械学習では、これまで多種多様な分野の理論を基に学習手法が提案されている。例えば、確率・統計、情報理論、理論計算機科学、そして物理学などが挙げられる。我々は、量子情報理論に基づき、量子揺らぎの制御を学習のプロセスに応用するための理論構築を行っている。

データを統計的に抽象化する場合、統計的機械学習では、「潜在変数」と呼ばれる確率変数が重要な役割を果たす。例えば、我々人間が新たな問題を解く場合、過去の類似した問題を想起して解くことがある。このような類似性は、非観測である(どの問題と類似しているかは、問題には書いていない)。そのため、類似性の推定により問題解決を行う必要がある。統計的機械学習では、この類似性を、問題と問題との間に潜む確率変数であると仮定し推定する。潜在変数の推定は、学習データに潜む性質を知ることにつながるため、データ解析手法としてもよく用いられる。

具体的な例として、ある文書集合をいくつかのカテゴリーに分類したいとする。文書の分類では、「キーワード」が文字通り重要な役割を果たす。しかし、どの単語が「キー」になるのかは問題によって変わることが、カテゴリーを分類することの困難さの一因として挙げられる。例えば「機械学習」という単語は、情報科学全般の文書集合を分類するキーワードになるが、機械学習に関する文書集合を分けるキーワードにはならない。したがって、どの単語がキーワードになるかは、データ集合から学習する必要がある。この「キーワード」を潜在変数として導入し、文書集合から推定することで、各々の文書を自動的に分類することができる。新たな文書进行处理する場合は、その文書のカテゴリーを推定することで、どのような内容かを類推することや、類似文書(推定された同一カテゴリの文書)の検索などを行うことができる。このようにデータに潜む性質を潜在変数の推定として浮き彫りにすることで統計的機械学習が可能となる。

機械学習は、多くの場合、最適化問題として定式化される。また、確率的潜在変数モデルの学習では、多数の局所解を持つ非線形最適化問題として定式化される。機械学習における統計物理学的アプローチとしてよく知られているのはシミュレーテッド・アニーリング(SA: Simulated Annealing) (Kirkpatrick et al., 1983) である。SAは、温度を模したパラメータを導入し、熱揺らぎを制御する(温度を徐々に下げる)ことで、局所解を避けながら、より最適な解を探索する手法である。近年、量子情報理論では、別の揺らぎとして、量子揺らぎを用いた量子アニーリング(QA: Quantum annealing) が最適化問題を解く手法として注目を集めている (Kadowaki and Nishimori, 1998; Farhi et al., 2001; Santoro et al., 2002)。

我々は経路積分表式に基づく方法で QA を実装した。我々の用いた QA は、相互作用を持つ並列化 SA として考えることができる。これは、量子系を鈴木・トロッター展開 (Trotter, 1959; Suzuki, 1976) により古典系にマッピングすることで導出される。量子揺らぎは複数のプロセスの相互作用として導入される。例えば、 N 人の研究者を、いくつかのグループに分ける問題を考える。どの研究者がどのグループに属するのかを潜在変数として定義する。グループの分け方 (状態) を σ で表現する (図 1 上図参照)。各グループ内での共著論文数が多いほど確率 $p(\sigma)$ が高くなるようなモデル化を行ったとする。目的は確率 $p(\sigma)$ を最大にする σ を求めることである。一般に機械学習では、初期状態を変えた m 個の SA プロセスを走らせ、最も確率の高い σ を解とする。具体的には、各 j プロセスで独立に以下の問題を解き、 m 個の中で最も確率が高い状態を解とする。

$$\sigma_j^* = \operatorname{argmax}_{\sigma_j} \log p(\sigma_j) \quad (1)$$

我々の提案する QA では、この m 個の SA 間で相互作用させながら探索を行う (図 1 下図参照)。ここで、 σ_j ($j = 1, \dots, m$) をそれぞれ j 番目のプロセスの状態とする。また、 $\sigma_{m+1} = \sigma_1$ となっている。 f を相互作用関数とする。このような枠組みは、鈴木・トロッター展開を用いることで、数学的に導出された手法である。我々の提案する QA では、以下のような m 個のプロセスにおける状態 $\{\sigma_j\}_{j=1}^m$ に関する確率を最大にする問題を解く。

$$(\sigma_1^*, \sigma_2^*, \dots, \sigma_m^*) = \operatorname{argmax}_{(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m)} \log p_{\text{QA}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m) \quad (2)$$

ここで、 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m)$ は、潜在変数が m 個の値を同時に取った状態を表現し、この潜在変数の重ね合わせに対する確率分布を $p_{\text{QA}}(\cdot)$ が定めている。図 1 の例では、 σ_j ($j = 1, \dots, m$) は、各々異なるグループ分けの状態を示しており、QA は、 m 個のグループ分け状態の重ね合わせ上の確率分布を基に解を探索していると考えられる。

最適化問題 (2) は、状態間の類似度を示す関数 $R(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$ を用いて、実際には以下のように書くことができる。

$$(\sigma_1^*, \sigma_2^*, \dots, \sigma_m^*) = \operatorname{argmax}_{(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m)} \sum_{j=1}^m \log p(\sigma_j) + f \cdot R(\sigma_1, \dots, \sigma_m) \quad (3)$$

$R(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$ は、実際には m 個の状態に関する制約を表現しているため、最適化問題 (3) は、最適化問題 (1) の制約付最適化問題としてみるることができる。 f が 0 の場合は、複数の最適化問題 (1) を独立に解くことに相当する。ここで、 f 及び $R(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$ は、数学的に導出される。

我々は、確率的潜在変数モデルの学習手法として変分ベイズ法 (Attias, 1999) に着目し、量子揺らぎの効果を導入する手法を提案している (Sato et al., 2009)。変分ベイズ法は、自然言語処理、画像処理、音声処理、Web データ解析など多くの分野で用いられている汎用的な手法である。我々の手法は、変分ベイズ法で学習可能なモデルに対して適用可能であるため、これまで提案されてきた様々な確率的潜在変数モデルの学習に用いることができる。本発表では、文書分類、個人の音楽再生履歴の分析、Web ページ閲覧履歴の分析などに、提案手法を用いた場合の実験結果について紹介する。

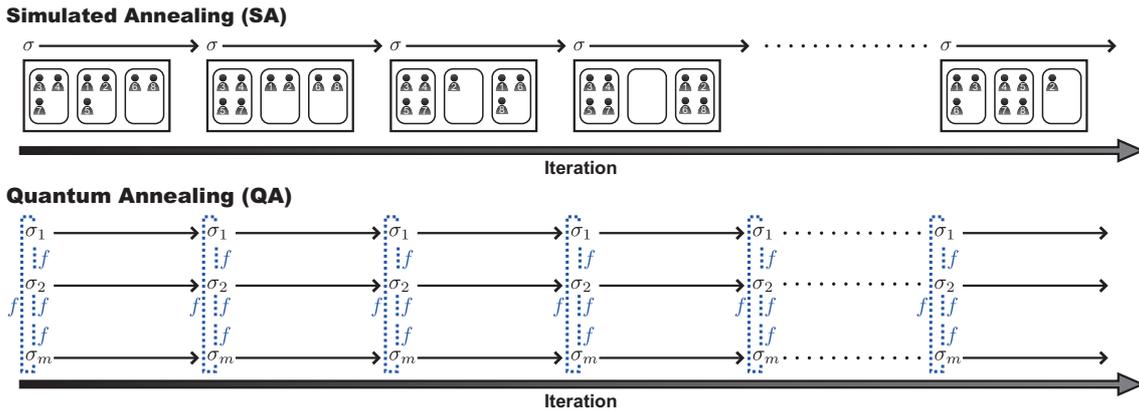


図 1: SA と QA : σ は潜在変数 (この場合、8 人のグループ分け) を表している。

参考文献

- H. Attias. Inferring Parameters and Structure of Latent Variable Models by Variational Bayes. In K. B. Laskey and H. Prade, editors, *Proceedings of the 15th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-99)*, pages 21–30, 1999.
- E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, A. L. J. Lapan, and D. Preda. A Quantum Adiabatic Evolution Algorithm Applied to Random Instances of an NP -complete Problem. *Science*, 292:472–476, 2001.
- T. Kadowaki and H. Nishimori. Quantum Annealing in the Transverse Ising Model. *Physical Review E*, 58:5355–5363, 1998.
- S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 220(4598):671–680, 1983.
- G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car. Theory of Quantum Annealing of an Ising Spin Glass. *Science*, 295:2427–2430, 2002.
- I. Sato, K. Kurihara, S. Tanaka, H. Nakagawa, and S. Miyashita. Quantum Annealing for Variational Bayes Inference. In *Proceedings of the 25th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, 2009.
- M. Suzuki. Relationship between d -Dimensional Quantal Spin Systems and $(d + 1)$ -Dimensional Ising Systems – Equivalence , Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations –. *Progress of Theoretical Physics*, 56(5):1454–1469, 1976.
- H. F. Trotter. On the Product of Semi-Groups of Operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 10(4):545–551, 1959.

有限温度における熱的な量子純粋状態

杉浦 祥, 清水 明
 東京大学総合文化研究科

統計力学では通常、エネルギーや磁場といった数個のマクロ物理量で指定されたアンサンブルを用いて、全磁化や相関関数といったその他のマクロ物理量を計算する。ところが近年になって、アンサンブルを用いずとも、エネルギーや磁場といったマクロ物理量で指定された量子純粋状態は、その殆ど全てが熱平衡状態を正しく与える事が明らかとなった。この事実は、「たった一つの典型的な量子純粋状態を用意することができれば、全ての熱平衡値をそれだけで計算できる」事を強く示唆する。我々は、従来の研究が抱えていた問題点を解決し、アンサンブルを用いない、たった一つの純粋状態による統計力学の定式化とその構成法を完成させた。

2006年、杉田により以下の事実が示された [1]。ミクロカノニカルアンサンブルのエネルギー殻 $[E - \Delta/2, E + \Delta/2)$ と対応するヒルベルト部分空間 $\mathcal{E}_{E,N}$ を指定し、そこに含まれる状態から一様な測度で取り出してきた状態

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu} |\nu\rangle \quad (1)$$

($\{|\nu\rangle\}_{\nu}$ は $\mathcal{E}_{E,N}$ 内の任意の基底、 $\{c_{\nu}\}_{\nu}$ は $\dim(\mathcal{E}_{E,N})$ -次元複素球 $\sum_{\nu} |c_{\nu}|^2 = 1$ から一様分布で用意したランダムな複素数の組) を用意する。すると、磁化や相関関数といった全てのマクロな力学量に対して、 $|\psi\rangle$ の期待値が対応するミクロカノニカルアンサンブル平均と殆ど常に非常によく精度で一致する値を与える。

しかし、温度やエントロピーといった純熱力学的量は本質的に状態数を必要とするため、純粋状態の期待値として計算する事はできない。そのため、統計力学で興味ある量全てが一つ純粋状態と与えられると主張するにはまだ不十分である。また、 $|\psi\rangle$ を実際に構成するには、エネルギー殻内の基底を用意する必要があり、それはアンサンブル平均を計算するのと同程度に困難である。そこで我々は、たった一つの状態で全てのマクロな力学量を正しく与えるような純粋状態を、従来より広いクラスに拡張し、一般に Thermal pure quantum states (TPQ) と名付け、定義した。そして、そのうちあるクラスの TPQ を効率的に構成する方法も合わせて開発する事で、これらの問題を解決した [2]。

本アブストラクトではその手法のみを述べる。まず、全ヒルベルト空間のランダムベクトル $|\psi_0\rangle \equiv \sum_i c_i |i\rangle$ を用意する。ここで、基底 $\{|i\rangle\}_i$ は $\{|\nu\rangle\}_{\nu}$ と違い、全ヒルベルト空間の任意の基底である。そして以下の計算を $k = 0, 1, \dots$ に対して反復的に行う。

$$u_k \equiv \langle \psi_k | \hat{h} | \psi_k \rangle, \quad (2)$$

$$|\psi_{k+1}\rangle \equiv (l - \hat{h}) |\psi_k\rangle / \|(l - \hat{h}) |\psi_k\rangle\| \quad (3)$$

($\hat{h} \equiv \hat{H}/N$, l は任意の定数) すると、各状態 $|\psi_k\rangle$ は、1粒子あたりのエネルギーが u_k での TPQ となっていることが示される。つまり、任意のマクロな力学量の熱平衡値は、 $|\psi_k\rangle$ の期待値として求められる。

次に、純熱力学量について述べる。一般に、エネルギー E の状態 $|\psi_k\rangle$ から対応する逆温度 $\beta(u, N)$ を求めることは困難である。しかし、構成の際に用いたパラメーター l と k を用いることで、温度は以下の式より求められる。

$$\beta(u_k; N) = \frac{2k}{N(l - u_k)} + O\left(\frac{1}{N}\right). \quad (4)$$

また、構成の際に用いたパラメーター l と k を用いずとも、純熱力学量は計算可能である。杉田の提案した状態 $|\psi\rangle$ に戻って考える。独立なランダムに用意した2個の状態 $|\psi^1\rangle, |\psi^2\rangle \in \mathcal{E}_{E,N}$ の内積と、 $\dim(\mathcal{E}_{E,N})$ は以下の関係で結ばれる。

$$\overline{\langle \psi_k^1 | \psi_k^1 \rangle} = 1 / \sqrt{\dim(\mathcal{E}_{E,N})} \quad (5)$$

($\overline{(\dots)}$ はランダム平均) この関係式を我々の提案した状態 $|\psi_k\rangle$ に応用することで、数個の状態間の内積から、状態数を推定問題として求める事が可能であり、これよりエントロピーを経由して全ての純熱力学量を求めることもできる。

T P Qを用いた計算法の特筆すべき点は、T P Qの期待値によりマクロな力学量を計算すると、期待値はアンサンブル平均の周りに N の指数関数分の一 (N :粒子数・サイト数) 程度の非常に小さな分散で分布する事が保証されている事である。また、開発した構成法は、ハミルトニアンが多項式を乗算するだけの単純な手法であるため、解析的にも数値的にも計算可能であるのみならず、離散量子系として記述できる系であれば他に制限は一切なく、どのような系でも適用可能である。例えば数値計算に応用した場合、Quantum Monte Carlo法でボトルネックとなっている negative sign problem は生じず、DMRGのように高次元系で急速に計算精度が落ちるといった問題もないため、2次元フラストレーション系やフェルミオン系に応用可能な手法となっている。また、たった一つの純粋状態を構成するだけで非常に精度のよい計算ができるため、計算量は厳密対角化に比べて二分の一乗から三分の一乗になる。

さらに、開発した手法は純粋状態1つを計算しているだけにも関わらず、実質的にハミルトニアンによって状態のエネルギー分布を直接操作し、その分布を把握する事ができる手法となっている。そのため高次の相関を計算することで、力学量・純熱力学量に関わらず、それらを $1/N$ 展開した高次の項を得る事ができる。つまり、有限の N であっても、高次項まで取り込んだ計算をすることで非常によい精度で計算が可能である。また、これを応用することである種の N への外挿すら可能である。つまり、 N サイト系を無限個並べた、ある種の無限系での計算を、 $1/N$ 展開の各項から逆算する事で、実質的に行うことができる。実際、温度の計算ではこの無限系への外挿により N サイト系1個での計算より精度が著しく向上することを確認している。

本講演では、これらの手法とその原理について述べ、数値計算による結果がよい精度で厳密解と一致することを示す。

[1] A. Sugita, RIMS Kokyuroku (Kyoto) 1507, 147 (2006)

[2] S. Sugiura, A. Shimizu, arXiv:1112.0740v1

新奇揺らぎの導入による相転移現象の制御

田村 亮¹, 田中 宗²

東大物性研¹, 東大院理²

相転移は性質の異なる相同士の境目で起こる物理現象である。例えば、温度や圧力に応じて、 H_2O が氷・水・水蒸気といった異なる性質を持つ相へ変化することが相転移である。これらの相の特徴は、いくつかの熱力学的変数で表現され、相転移点ではこの熱力学的変数に特異性が生じる。この特異性によって相転移は分類され、自由エネルギーの一階微分が特異的となる一次相転移（不連続転移）や、二階微分が特異的となる二次相転移（連続転移）、トポロジカルな励起に関連するトポロジカル相転移などが存在する。この相転移現象は、系の基底状態や秩序変数の対称性および空間次元によって特徴づけされる。相転移現象は統計力学的模型を用いて解析計算および数値計算によって非常に詳しく調査されており、統計力学の分野における最も重要な研究対象の一つである。

また、相転移現象は情報統計力学の分野においても重要な研究対象である。情報統計力学で扱う問題として最適化問題がある。これら多くの最適化問題に適用することができる汎用的手法として、シミュレーテッドアニーリング法や量子アニーリング法がある。これらの手法は、系に熱揺らぎや量子揺らぎを導入し、これらの揺らぎを徐々に減少させることによって最適解を得る方法である。しかし多くの場合、温度や量子場を導入すると、これらの変化に応じて相転移現象が起こる。この相転移の有無は、最適解を求める際の困難さを大きく左右する一因となる。例えば、一次相転移点近傍において状態が準安定状態にトラップされてしまうことや、二次相転移点における臨界減速が困難さの原因となる。最適化問題では、最終的に得られる結果が重要であり、計算における過程は重要ではない。そのため、基底状態や秩序変数の対称性といった系の本質を変化させずに、相転移の様相を変化させることがもし可能であれば、最適解を求める際の困難さの解消につながる（図1）。そこで我々は、基底状態や秩序変数の性質を本質的に変えることなく、相転移の様相のみを変化させることはできるのかという問題に興味を持ち研究を行ってきた。

本講演では、教科書的に二次相転移（連続転移）が起こることが知られている以下の相転移現象に注目する。

- (i) 二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う相転移
- (ii) ネットワーク成長模型におけるパーコレーション転移

これらの模型に対して模型の秩序変数を本質的に変えることはない新しいタイプの揺らぎを導入することによって、相転移現象がどのように変化するかについて調べた。実際、前者のモデルに状態に関する余分な揺らぎを、後者のモデルにネットワークの成長過程で生じる選択確率（選択に関する揺らぎ）を導入することによって、相転移の臨界性が変化することを明らかにした。

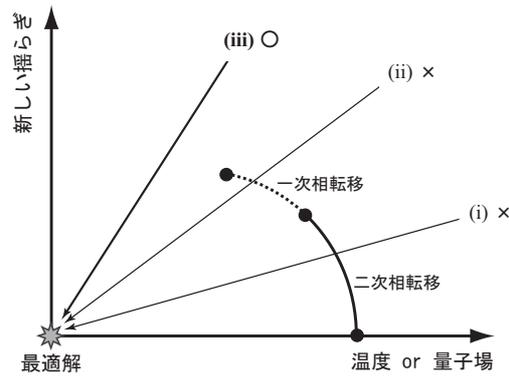


図 1: 新しい揺らぎの導入による相図の例．新しい揺らぎの導入によって，もしこのような相図が得られた場合，最適解の探索において (i) の経路では二次相転移点を通り，(ii) の経路では一次相転移点を通る．そのため，これらの経路では最適解を求める際に困難が生じてしまう．しかし，(iii) のような経路が存在したとすると，相転移点を通らないため，最適解を求める際に困難が生じない．

二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う相転移

ここでは，平衡相転移について考える．離散的対称性の破れを伴う平衡相転移は q -状態強磁性 Potts 模型を用いて非常に詳しく研究が行われている．二次元模型の場合には $q \leq 4$ で二次相転移， $q > 4$ で一次相転移が起こることが知られている [1]．この Potts 模型は，一般化された Ising 模型であり各格子点で q 個のうち一つの値をとることのできる模型である． $q = 2$ の場合は，Ising 模型と等価である．Potts 模型は非常にシンプルであるが，現実物質で起こる相転移（軌道秩序，強誘電性，原子吸着など）や，より複雑な理論模型で起こる相転移を説明することができ，統計力学模型として最も基礎的な模型の一つである．また，グラフ彩色問題や数独は Potts 模型に対応づけることができ，情報統計力学の分野でも頻りに扱われる模型である．例えば，彩色問題では，色の種類を離散的な値で表現することによって Potts 模型のスピンの対称性を利用することができる．本研究では，模型の性質（基底状態および秩序変数）を本質的に変えることなく，相転移の次数のみを変化させることが可能であるかどうかを調査した．

我々は，通常二次元強磁性 Potts 模型に，エネルギーに寄与しない余分な状態（透明状態）を複数付け加えたモデルを考察した [2, 3, 4, 5, 6]．この透明状態は，各サイトにおいてとり得る状態の数を増やしており，透明状態を加えることは状態に関する揺らぎの導入に対応している．この透明状態は基底状態の性質（スピン構造および縮退度）を変えずに励起状態における状態密度を変えることができる．したがって，秩序変数は透明状態を加えたとしても元の Potts 模型と変化しない．通常なら二次相転移を示す二次元強磁性 2, 3, 4-状態 Potts 模型に透明状態を付け加えたところ，有限温度一次相転移の存在が確認された．このように，エネルギーに寄与しない状態を付け加えることで相転移の次数を変化させることが可能である．この研究は，模型の本質を変化させることなく，相転移の次数をコントロールすることができる一つの可能性を提示している．本研究は東大物性研川島直輝教授との共同研究である．

ネットワーク成長模型におけるパーコレーション転移

ここでは、正方格子上的ネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移に着目する。簡単のため、ここで考えるネットワーク成長模型の初期状態はすべての要素が繋がっていないとする。ネットワーク成長模型では、これらの要素が時々刻々とあるルールによって繋がっていき、ネットワークが形成される。このネットワークの時間発展に対して、パーコレーション転移点は格子の端から端までをつなぐネットワークが形成された時間で定義される（図2）。この模型は非常に基礎的な模型であり、伝染病の伝搬や森林火災などの自然界における動的現象や、ウェブや送電線といった人工的なネットワークなどの社会現象に対しても適用されており、統計物理学だけでなく、自然界の非平衡現象、情報科学、あるいは社会科学における様々な現象に適用されている模型である。

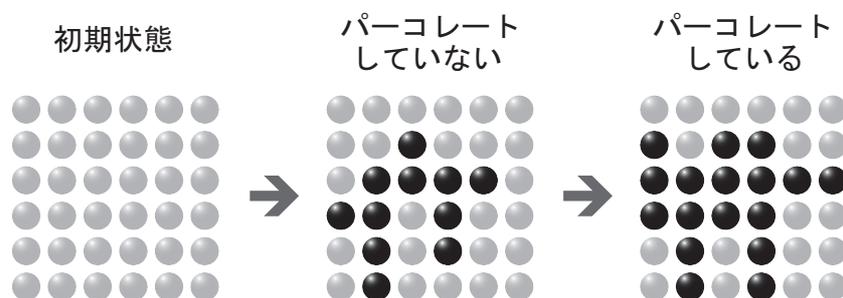


図 2: 正方格子上的ネットワーク成長の過程。黒丸がクラスタを形成してる要素である。初期状態，パーコレートしていないクラスタ，およびパーコレートしているクラスタの例をそれぞれ図示している。

一般的な理解では、パーコレーション転移は連続転移である。しかし、特別なルールを用いたネットワーク成長模型では、パーコレーション転移が不連続転移になる（Explosive percolation：爆発的パーコレーション）ことが Achlioptas らによって報告された [7]。連続転移を示す最もシンプルなネットワーク成長模型は、要素同士を完全にランダムに繋ぐことによって成長するものであるが、Achlioptas らが提案したルールは完全にランダムに繋ぐのではなく、大きいクラスタができにくくなるようなルールを採用している。つまり、初期の段階では、小さいクラスタが至る所で徐々に成長し、それらがある程度成長したら、一挙にシステムサイズと同程度の巨大なクラスタが形成されるという、バイアスがかかったルールである。そのため、ネットワークの時間発展においては、小さいクラスタが形成される成長過程が常に選ばれる。この研究以降、ネットワーク成長模型におけるパーコレーション転移は再び注目を集めているが、爆発的パーコレーションの相転移の様相は何なのかについて完璧な理解は得られていない。

我々は、連続転移を示す最もシンプルなネットワーク成長ルールと、Achlioptas らによって提案されたネットワーク成長ルールを連続的に繋ぐことのできる一般化パラメタを導入した [8]。この一般化パラメタにより、成長過程を選ぶ際の選択確率（選択に関する揺らぎ）を導入することができる。つまり、このルールでは、ネットワークの時間発展において、必ずしも小さいクラスタが形成される成長過程が選ばれるとは限らない。この一

一般化パラメタに対して、パーコレーション転移の様相がどのように変化するかを網羅的に調べることによって、両者のパーコレーション転移の臨界性の違いを定量的に検討した。結果としては、一般化パラメタがある値の時に、両者のネットワーク成長モデルとは異なるパーコレーション転移点のサイズ依存性がみられた。これは、両者のパーコレーション転移の間で、相転移の臨界性が変化していることを示しており、両者のパーコレーション転移は異なる臨界性を示すことが分かった。また、一般化パラメタに対するパーコレーション転移点直上のフラクタル次元についても検討し、一般化パラメタがある値の時に、フラクタル次元が変化する振る舞いがみられた。

本研究で導入したモデルは、ネットワーク成長モデルにおける動的パーコレーション転移を統一的に理解できる最もシンプルなモデルである。また、動的パーコレーション転移は、ネットワークの成長過程のダイナミクスに大きく関連しており、本研究は非平衡研究のパターン形成の観点からも興味深い問題であると考えている。

新しいタイプの揺らぎを導入することにより、基底状態や秩序変数の性質を本質的に変化させずに、相転移の様相を変化させることが可能であることを明らかにした。上で述べたものの他にも多くの揺らぎの導入方法を考えることができる。統計力学は、自然界における様々な揺らぎを説明することに成功してきた。それと同様に今度は情報統計力学において、揺らぎの導入方法とその性質を俯瞰的に捉える理論体系が形成されることが期待される。その結果、相転移の様相を望み通りに制御する方法が確立されたならば、それは情報統計力学のみにとどまらず、より広い(未だ見ぬ新しい)境界領域の形成の礎となると考えている。

参考文献

- [1] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [2] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. **124**, 381 (2010).
- [3] S. Tanaka, R. Tamura, and N. Kawashima, J. Phys.: Conf. Ser. **297**, 012022 (2011).
- [4] S. Tanaka and R. Tamura, J. Phys.: Conf. Ser. **320**, 012025 (2011).
- [5] S. Tanaka, R. Tamura, I. Sato, and K. Kurihara, To appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: "Summer School on Diversities in Quantum Computation/Information".
- [6] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, To appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: "Symposium on Interface between Quantum Information and Statistical Physics".
- [7] D. Achlioptas, R. M. D'Souza, and J. Spencer, Science **323**, 1453 (2009).
- [8] S. Tanaka and R. Tamura, arXiv:1111.2005.

ツイッターの確率モデル

川本達郎

東京大学大学院理学系研究科 物理学専攻

ツイッターはマイクロブログとして世界的に人気の高いウェブサービスですが、ユーザーとしての興味はやはり「どれだけの人が自分の文章(ツイート)を読んでいるか」だと思います。ツイッターでは、自分のツイートを直接受け取るフォロワーと呼ばれるユーザーたちが読むだけでなく、リツイートという機能によって、さらにたくさんの人に伝播していく可能性があります。ではそのツイートによる拡散過程には何か統計則があるのでしょうか。またあるとすればどのようなダイナミクスとして記述されるのでしょうか。ネットワーク上の拡散の問題としては、もっとも単純には各ノードが一定の確率で他とつながるパーコレーションが考えられます。また、病気の伝染モデルのように、各ノードに幾つかの相互作用のルールが与えられ、その運動を解くという問題もよく考えられます。ツイッター上の情報拡散は、素朴なパーコレーションほど単純ではなく、伝染モデルのような詳細な依存性を必要とするほど複雑でもないように思えます。今回、種ユーザーからどれだけ距離にいるかによってフォロワーを“世代”に分類し、各世代を一つの単位とした確率過程としてツイートの拡散ダイナミクスをうまく記述できるのではないかと考えました¹(図 1 参照)。そのようなダイナミクスを考えると、 $(m-1)$ 番目の世代のフォロワーがリツイートする回数 n_m は、以下のようなランダム乗算過程として表されます：

$$n_m = \prod_{g=1}^m J_g N_0, \quad (1)$$

ここで J_g は確率変数、 N_0 は種ユーザーのフォロワー数です。このモデルの正当性は、幾つかのデータ解析で、大抵の J_g がおよそ対数正規分布に乗っていることによって示します。また、リツイート回数がゼロ回以上のツイートをランダムにサンプルした場合、リツイート回数の頻度分布はほぼベキ則に従うのが見えますが、他のウェブコンテンツにおいてリツイート回数のような、人気の指標となる量の分布 (Wikipedia の編集回数の分布など) は、多くの場合対数正規分布を示します [1,2]。ここでのツイッターのモデルは、このベキ則が生じることも説明します。

非常にシンプルなモデルですが、大まかにはこの程度でツイッターのダイナミクスは記述できてしまうこと、どれくらいリツイートによって拡散するかなどが定量的に解くことは、興味深いことではないでしょうか。

[1] Wu F, Huberman B A (2007) Novelty and collective attention. Proc Natl Acad Sci USA 104(45):17599-17601.

[2] Wilkinson D M (2008) Strong regularities in online peer production. Proc. of the 2008 ACM Conference on E-Commerce 302-309.

¹ここで扱う拡散は、フォロワー間に限り、かつツイッター上のリツイートボタンを押したことによる伝播(公式リツイート)のみを考えます。

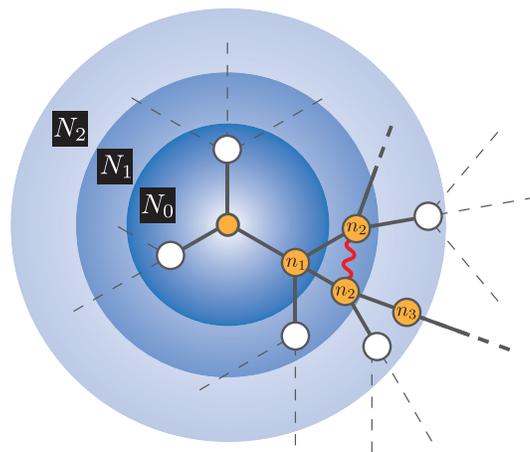


図 1: ツイッター上のフォロワーの世代ごとの分類と拡散の様子。中心のノードが種ユーザーを表し、リンクでつながったノードがフォロワーで、太線がリツイートによってツイートが伝播したことを示す。赤波線のようなループ構造は無視する。