システム科学としての不規則系の統計力学

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　樺島　祥介 [1]

1　はじめに

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わ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はやはり「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年代半ば連想記憶模型への適用により，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 [1]．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．連想記憶模型の後，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

[1] E-mail: kaba@dis.titech.ac.jp

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も応用する自律したサイクルも回りはじめている．

以下では，そうした流れの中でも特に１９９０年代の初頭〜半ばに掛けて盛んに議論されたパーセプトロンの統計力学に目を向け，それによって得られた知見がその後の研究にどのように結びついているか，について概要を記す．

2　パーセプトロンの統計力学

2.1　パーセプトロン

N 次元ベクトル $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^N$ を可変パラメータとし，入力ベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対して

$$y = \mathrm{sign}\,(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}) \in \{+1, -1\} \tag{1}$$

により，ラベル (出力値) $y = \pm 1$ を付与する判別器を単純パーセプトロンとよぶ [2]．$\mathrm{sign}(x) = x/|x|$ は符号関数である．単純パーセプトロンを多段に組み合わせたネットワークを多層パーセプトロン，あるいは，単にパーセプトロンとよぶ．

入力 $\boldsymbol{x}$ はある対象を数学的に表現したもの，ラベル $y = \pm 1$ はその対象が「ある概念」に適合する $(+1)$ か，否 (-1) か，に対応していると解釈する．一般にヒトが日常的に接する概念の多くは数学的に明文化することが難しく，その判別（対象が「いきもの」か否かの判断など）はフォン・ノイマン型コンピュータによる機械化が難しい問題として知られている．これに対し，対象となる概念を反映した訓練データ $\xi^p = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_p, y_p)\}$ を与えそれを再現するようにパラメータ $\boldsymbol{w}$ を調整する（＝学習する）方法ならば，概念ルールの明文化は必要ではなく訓練データの収集と機械の学習によって機械化を実現することができる．こうした「機械学習」によるアプローチは長らく基礎研究の域を出なかったが，２０００年代以降，コンピュータ／デジタルデバイス／インターネットの発達／普及を背景として情報検索や推薦システムなどへの応用を中心に急速に実用化が進んでいる．

2.2　ネットワーク容量と学習曲線

機械学習の可能性と限界を理論的に吟味するための足がかりとして，パーセプトロンに関する以下のような性能指標の評価が１９９０年代に盛んに試みられた．

- **ネットワーク容量** [3]：パラメータを調整することで表現できる概念（＝判別ルール）の範囲は学習器の構造に依存する．構造が定まった学習器の潜在的な表現能力をランダムにラベル付けされた訓練データを誤りなく学習できる例題数 p の上限値 p_{c} によって定量化する．p_{c} は ξ^p の実現値に応じて統計的にばらつくが，$N \to \infty$ のとき $\alpha_{\mathrm{c}} = p_{\mathrm{c}}/N$ は確率 1 でその典型値に収束する．この値をネットワーク（パーセプトロン）容量とよぶ．

- **学習曲線** [4]**：**現実的な状況で機械学習を用いることを想定すると，学習器が訓練データに含まれる少数の例のみを対処すれば事足りることは稀であり，むしろ訓練データから獲得した規則を一般化し未知の例に対しても適切な判別能力を示すことが求められる．こうした要請の実現可能性を吟味するために，ある「教師」パーセプトロン $\boldsymbol{w}^0$ によってラベル付けされた訓練データ ξ^p を学習した「生徒」が未学習の $p+1$ 個目の例の分類を誤る確率（汎化誤差）を評価する．汎化誤差は ξ^p の実現値に応じて統計的にばらつくが，$N, p \to \infty$ のとき $\alpha = p/N$ の関数として確率 1 でその典型値に収束する．これを学習曲線とよぶ．

2.3 不規則系の統計力学によるアプローチ

ベイズ推論の枠組みにしたがうと ξ^p を与えたあとのパラメータ $\boldsymbol{w}$ の事後分布は

$$P(\boldsymbol{w}|\xi^p) = \frac{1}{V(\xi^p)} \prod_{\mu=1}^{p} \Theta(y_\mu(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_\mu))\delta(|\boldsymbol{w}|^2 - N) \tag{2}$$

によって与えられる．ただし，$\Theta(u) = 1 \ (u > 0), \ 0 \ (u < 0)$,

$$V(\xi^p) = \int d\boldsymbol{w} \prod_{\mu=1}^{p} \Theta(y_\mu(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{x}_\mu))\delta(|\boldsymbol{w}|^2 - N) \tag{3}$$

であり，$\boldsymbol{w}$ の大きさはラベルの出力に関係しないため $|\boldsymbol{w}|^2 = N$ に規格化している．

ネットワーク容量や学習曲線を求めるためには

$$q = \frac{1}{N}\left[|\langle \boldsymbol{w} \rangle|^2\right] \tag{4}$$

$$m = \frac{1}{N}\left[\boldsymbol{w}^0 \cdot \langle \boldsymbol{w} \rangle\right] \tag{5}$$

といった２重の平均量の評価が必要になる．ただし，$\langle \cdot \rangle$ は (2) による平均を $[\cdot]$ は ξ^p に関わる平均をそれぞれ表している．

ところで，具体例 ξ^p によって条件づけられた事後分布 (2) はランダムな結合定数や磁場で条件付けされるスピングラスモデルのカノニカル分布と数理的に類似した構造を有している．このことにもとづけば，(4)，(5) のような２重の平均量はスピングラスの研究で発展したレプリカ法 [5] やキャビティ法 [6] といった不規則系の統計力学の計算手法によってシステマティックに評価できる．こうした発想にもとづいて，１９９０年代，様々な構造のパーセプトロンや学習の形態に関して統計力学的な観点からの研究成果が多数報告された [7]．

これらの研究に関する「パーセプトロン（機械学習）」あるいは「物理」といった対象によって区分けされた個別分野での意義については賛否両論がある．しかしながら，パーセプトロンの研究を通じて，連想記憶などそれ以前の個別問題への応用では希薄であった「構造の数理的類似性に着眼すれば物理の考え方や解析手法を情報科学の広汎な問題群に系統的に利用することが可能になる」というシステム科学的な発想が不規則系の統計力学に生まれたことは，少なくとも，画期的であった．

3 パーセプトロンの統計力学以降

パーセプトロンの研究以降，多数の確率変数が関わりベイズの定理によって定式化される問題には不規則系の統計力学の方法を系統的に利用することができる，という認識が広まっていった．「不規則系」は物理の中ではどちらかといえば特殊な分野と位置づけられているが，シャノンの通信理論をはじめ，情報科学ではむしろこうしたタイプの問題の方が主流である．情報科学では伝統的に数学的厳密性を重視する傾向が強く，物理で用いられるような「荒っぽい」計算への馴染みは浅い．こうしたことから，不規則系の統計力学の方法は情報科学の重要な問題に対して従来理論で知られているものよりも（数学的厳密性を犠牲にしているおかげで）強い結果を主張できることが多く，現在,「統計力学的アプローチ」には多くの分野で強い関心が寄せられている．

以下，パーセプトロン以降，不規則系の統計力学が適用された情報科学の代表的問題を２例記す．

- **ランダム k-SAT の相転移 [8]：**N 個のリテラル（論理変数）の組を $\boldsymbol{x} \in \{0,1\}^N$ で表す．$\boldsymbol{x}$ から k 個の変数を取り出し，それ自身あるいはその否定を $\vee$ (or) でつないだ論理式の基本単位を k 節 (k-clause) とよぶ．M 個の k 節をランダムに構成しそれらを $\wedge$ (and) でつないでできる論理式に出力を真 (1) とするとリテラル（充足解）が存在する確率に着目する．$N, M \to \infty$ のとき，$\alpha = M/N$ が k 毎に定まるある臨界値 $\alpha_{\rm c}(k)$ より小さければ 1 に漸近する確率で充足解は存在し，$\alpha_{\rm c}(k)$ よりも大きければ 1 に漸近する確率で充足解は存在しないことが実験的に確認される．相転移点 $\alpha_{\rm c}(k)$ を理論的に評価したい．

- **圧縮センシングの性能限界 [9]：**線形変換で得られる M 個のデータから，N 次元の信号を復元したい．線形変換を表す行列がランク落ちしていない場合，こうした目的のためには $\alpha = M/N \geq 1$ が必要十分であることが線形代数の一般論から示される．しかしながら，対象となる信号がスパースである（ゼロになる成分が多い）ことが統計的に期待される場合には，$\alpha < 1$ であっても信号復元が可能になるかもしれない．このようなアイデアにもとづく信号計測／復元の枠組みは圧縮センシングとよばれ，現在盛んに研究されている．さて，圧縮センシングが成功するためには，対象となる信号を構成する非ゼロ成分の割合 ρ は与えられた圧縮率 α によって定まるある臨界値 $\rho_{\rm c}(\alpha)$ よりも小さくなる必要があるはずである．$N, M \to \infty$ において，臨界値 $\rho_{\rm c}(\alpha)$ あるいはその逆関数 $\alpha_{\rm c}(\rho)$ を理論的に評価したい．

これらの他にも，低密度パリティ検査符号の性能解析 [10]，公開鍵暗号の提案 [11]，無線通信の性能解析 [12, 13], 無線通信の復調アルゴリズム開発 [14] などの例がある．

参考文献

[1] H. Nishimori (2001). Statistical physics of spin glasses and information processing: an introduction (Oxford Univ. Press: Oxford).

[2] F. Rosenblatt (1958). The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the Brain. Psychological Review 65 (6): 386–408.

[3] E. Gardner and B. Derrida (1988). Optimal storage properties of neural network models. J. Phys. A: Math. and Gen. 21: 271–284.

[4] G. Györgyi and N. Tishby (1990). Statistical theory of learning a rule. In Neural Networks and Spin Glasses (W. K. Theumann and R. Köberle eds.) (World Scientific: Singapore): 1–36.

[5] V. Dotzenko (2001). Introduction to the Replica Theory of Statistical Systems (Cambridge Univ. Press: New York).

[6] M. Mézard, G. Parisi and M. Virasoro (1987). Spin Glass Theory and Beyond (World Scientific: Singapore).

[7] T. L. H. Watkin, A. Rau and M. Biehl (1993). The statistical mechanics of learning a rule. Rev. Mod. Phys. 65: 499–556.

[8] R. Monasson and R. Zecchina (1996). Entropy of the K-Satisfiability Problem. Phys. Rev. Lett. 76: 3881–3885.

[9] Y. Kabashima, T. Wadayama and T. Tanaka (2009). A typical reconstruction limit for compressed sensing based on Lp-norm minimization. J. Stat. Mech. (2009) L09003 (12 pages).

[10] Y. Kabashima, T. Murayama and D. Saad (2000). Typical performance of Gallager-type error-correcting codes. Phys. Rev. Lett. 84: 1355–1358.

[11] Y. Kabashima, T. Murayama and D. Saad (2000). Cryptographical properties of Ising spin systems. Phys. Rev. Lett. 84: 2030–2033.

[12] T. Tanaka (2002). A statistical-mechanics approach to large-system analysis of CDMA multiuser detectors. IEEE Trans. on Inform. Theory 48: 2888–2910.

[13] K. Takeda, S. Uda and Y. Kabashima (2006). Analysis of CDMA systems that are characterized by eigenvalue spectrum. Europhysics Letters 76: 1193-1199.

[14] Y. Kabashima (2003). A CDMA multiuser detection algorithm on the basis of belief propagation. J. Phys. A: Math. and Gen. 36: 11111-11121.

Susceptibility Propagation と組合せ最適化[1]

龍谷大学 理工学部　樋口 三郎 [2]

1　グラフ上の統計モデル

ファクターグラフ上の統計モデル, すなわち, 変数 x_i $(i = 1, \ldots, N)$ と, 2 個以上の変数の間の相互作用 $\psi_a(x_{i_1}, \ldots, x_{i_{k(a)}})$ $(a = 1, \ldots, M = \alpha N)$ を考える. これには $\{i\}, \{a\}$ を頂点集合とする 2 部グラフ G が自然に対応する. 順問題とは, 確率分布 $p(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{Z} \prod_{a=1}^{M} \psi_a(\underline{x}_{\partial a})$ のもとで期待値を計算することである.

2　BP と SusProp

信念伝搬法 (Belief propagation, BP) は, 磁化率 $\langle x_i \rangle$ を推定するための message passing method である. Message とは, G の有向辺上の場 $\nu_{k\to a}(x_k), \hat{\nu}_{a\to i}(x_i)$ であり, 順問題における磁化率の期待値は message に対するある漸化式の固定点での値から計算できる [1].

同種の方法で, 高次の相関関数も計算しようというのは自然な発想であり, 実際, 磁気感受率 $\langle x_i x_j \rangle$ を計算する message passing method が, BP の線形応答として構成できる [2, 3]. その, message は, $\nu_{k\to a,j}(x_k, x_j), \hat{\nu}_{a\to i,j}(x_i, x_j)$ のように, グラフ上で局所的ではない.

3　SusProp と逆 Ising 問題

ファクターグラフ上の統計モデルの逆問題とは, 標本や期待値が与えられたときに相互作用 $\psi_a(\underline{x}_{\partial a})$ の形を決定する問題である. 逆 Ising 問題はその一例で, 磁化率と磁気感受率から, 外場と 2 体の結合定数を決定する問題である.

Mézard らは BP の線形応答を感受率伝搬法 (Susceptibility Propagation, SusProp) と呼び, 逆 Ising 問題に適用できる形に書き直した [4]. すなわち, 磁気感受率を計算する message passing method の漸化式において, 外場と結合定数を更新される変数, 磁化率と磁気感受率をパラメタと見直しても, message passing method として機能することを指摘した. この方法は, さらに詳しく調べられている [5, 6].

[1] Marc Mézard との共同研究に基づく.

[2] E-mail: hig@math.ryukoku.ac.jp

4 SusProp と組合せ最適化

組合せ拘束充足問題とは, ファクターグラフ上の統計モデルにおいて, ψ_a が 0 または 1 の値のみをとる場合である. すなわち, ψ_a によって表現される拘束条件をすべてみたす変数 x_i の値の組の集合について調べる普遍的な問題である. 典型例として k-SAT がある.

多くの組合せ拘束充足問題に, BP の深化である survey propagation (SP) による期待値評価を利用したヒューリスティックなアルゴリズムが良好な性能を示し, その理由も物理的に理解された [7, 8].

しかし, この状況には不思議な側面がある. 難しい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, あの変数の値も変更が必要’ 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, ここでは 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.

私達は, SusProp (順問題) 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探索するアルゴリズムを提案した [9]. そのアルゴリズムは次のようなもので, BP-guided decimation [10] に ○ を追加したものと考えられる.

- ファクターグラフか十分小さくない間繰り返す
  - SP で $\langle x_i \rangle$ を評価
  - ○ SusProp(順問題) で $\langle x_i x_j \rangle_{\text{connected}}$ を評価
  - ○ $\mathbb{Z}_2$ 線形方程式 solver で $\langle x_i x_j \rangle_{\text{connected}}$ を評価
  - $\langle x_i \rangle$ の値が偏っている変数の値を固定
  - ○ ‘相関の強い’ 変数ペアを同一視
- 総当たりにより解を探す

このアルゴリズムは, 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 [11, 12] では, SP よりも広いパラメタ領域で有効に働くことを示した

この状況をよく理解するためには, 2 変数の相関について, 解空間の形状の観点からさらに調べることが必要である.

参考文献

[1] J. Yedidia, W. Freeman, and Y. Weiss, *Understanding belief propagation and its generalizations*, pages 239–236, Science & Technology Books, 2003.

[2] M. Welling and Y. W. Teh, *Neural Computation* **16** (2004) 197.

[3] K. Tanaka, *IEICE Transactions on Information and Systems* **E86-D** (2003) 1228.

[4] M. Mézard and T. Mora, *Journal of Physiology* **103** (2009) 107.

[5] E. Aurell, C. Ollion, and Y. Roudi, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **77** (2010) 587.

[6] E. Marinari and V. Van Kerrebroeck, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* (2010) P02008.

[7] M. Mézard, G. Parisi, and R. Zecchina, *Science* **297** (2002) 812.

[8] A. Braunstein, M. Mézard, and R. Zecchina, *Random Structures and Algorithms* **27** (2005) 201.

[9] S. Higuchi and M. Mézard, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* (2009) P12009.

[10] A. Montanari, F. Ricci-Tersenghi, and G. Semerjian, (2007).

[11] L. Zdeborová and M. Mézard, *Physical Review Letters* **101** (2008) 078702.

[12] L. Zdeborová and M. Mézard, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* (2008) P12004.

Dictionary Learning への統計力学的アプローチ

東京工業大学大学院総合理工学研究科　坂田綾香[1]，　樺島祥介

ゼロ成分が有限確率で存在する性質(スパース性)を持つデータについて、線形圧縮された表現から元のデータを推定する問題は圧縮センシングと呼ばれる。本研究では、スパース性を利用する圧縮センシングの枠組みを、スパース性を持たない一般のデータに適用するために、データがスパースに表現される基底(Dictionary)を推定する Dictionary Learning という問題を考える。

ここでは、与えられた P 個のデータサンプル(N 次元)から、それらデータがスパースに表現されるための Dictionary を学習する、という問題設定をたて統計力学的な解析を行った。その結果、Dictionary を特定するために必要な P は $O(N)$であることが分かった。

1　はじめに

1.1　圧縮センシングと Dictionary Learning

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 $\boldsymbol{F} \in \mathbb{R}^{M\times N}$ を用いた線形変換により、信号行列 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{N\times P}$ がデータ行列 $\boldsymbol{Y} \in \mathbb{R}^{M\times P}$ 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、$\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{FX}$ の解 $\boldsymbol{X}$ 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 $\boldsymbol{X}$ 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。

圧縮センシングにおけるスパース性に関する事前知識は、画像や音声などの多くの情報に一般的にみられる冗長性、つまり適切な基底のもとではスパースに表現できるという性質を反映している。したがって圧縮センシングは、情報をスパースに表現できる基底が既に得られている状況を扱った問題であると言える。

このような情報がスパースに表現されるための基底を推定する問題は、Dictionary Learning と呼ばれる[2]。Dictionary Learning は次の最適化問題として表現することができる。

$$\min_{\boldsymbol{D},\boldsymbol{X}} \|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{DX}\|^2,\ \text{subject to}\ \|\boldsymbol{D}\|^2 = MN, \|\boldsymbol{X}\|_0 = NP\theta$$

つまり、データ列 $\boldsymbol{Y}$ を、辞書行列 D とスパース行列 $\boldsymbol{X}$ の積として表す $\boldsymbol{D}$ と $\boldsymbol{X}$ を推定する問題である。$\|\cdots\|$ は行列の大きさ(Frobenius norm)を意味し、$\|\cdots\|_0$は非ゼロ要素の数を意味する。θ は $\boldsymbol{X}$ の非ゼロ成分の割合であり、$\boldsymbol{Y}$ が $\boldsymbol{D}$ の縦ベクトルのうちθ個の縦ベクトルの和として表現されるということを意味する。

---

[1] E-mail:　ayaka@sp.dis.titech.ac.jp

1.2 Dictionary Learning の一意性

Dictionary Learning においては、P が重要なパラメータであると言える。Dictionary Learning を一般のデータ圧縮に適用する場合には、元のデータを一意に復元する必要がある。すなわち、元の情報を特定するためには、辞書とそれに対応するスパースな表現を一意に決める必要がある。一意性に関する先行研究[3]では、“真の” 辞書 $\boldsymbol{D}^0$ と $\boldsymbol{X}^0$ からサンプル $\boldsymbol{Y}$ を $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{D}^0\boldsymbol{X}^0$ として構成したうえで、$\boldsymbol{Y}$ のみを与えられる状況下で Dictionary Learning を行う場合、下記の条件を満たすときに $\boldsymbol{D}^0$ と $\boldsymbol{X}^0$ が一意な解として求まることが数学的に証明されている。

1. Support condition: $\|\boldsymbol{X}_i^{\mathbf{0}}\|_0 = k < \sigma(\mathbf{D}^{\mathbf{0}})/2$
   ここで $\sigma(\boldsymbol{D}^0)$ は spark と呼ばれ、$\boldsymbol{D}^0$ の縦ベクトルのうち最小の線形従属な縦ベクトルの数である。特に $\boldsymbol{D}^0 \in \mathbb{R}^{\mathrm{M}\times\mathrm{N}}$ がランダム行列のとき、$\sigma(\boldsymbol{D}^0) = M + 1$ である。
2. Richness condition： $\|\boldsymbol{X}_i^{\mathbf{0}}\|_0 = k$ のとき、$\boldsymbol{D}^0$ の縦ベクトルの選び方は ${}_N\mathrm{C}_k$ 通りである。各選び方について、少なくとも $k + 1$ 個のサンプルが存在する必要がある。
   (したがって、 $P > (k + 1)\ {}_N\mathrm{C}_k$)
3. Non-degeneracy condition：同じ $\boldsymbol{D}^0$ の縦ベクトルの組み合わせから構成される k サンプルからなる行列は rank k で、異なる組み合わせから構成される k サンプルからなる行列は rank $k + 1$。

つまり、条件 1 と 3 を満たすようにサンプルを構成した場合、必要なサンプル数は条件 2 より $P > (k + 1)\ {}_N\mathrm{C}_k$ である。しかしこの見積もりは数学的に厳密に証明できる範囲内での結果であり、実際はより少ないサンプル数で十分であることが予想できる。そこで、本研究では統計力学的な解析を行い、Dictionary の特定に必要なサンプル数の典型評価を行う。

２ Dictionary Learning の統計力学的解析

ここでも先行研究と同じように“真の”解を埋め込んでおく。$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{D}^0\boldsymbol{X}^0$ として与えられた $\boldsymbol{Y}$ から辞書行列 $\boldsymbol{D}$ とスパース行列 $\boldsymbol{X}$ を推定する。$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^0, \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^0$ となれば、一意に解が特定できたことになる。$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{D}^0\boldsymbol{X}^0$ が与えられたとき、推定結果 $\boldsymbol{D}, \boldsymbol{X}$ の事後分布確率は次のように与えられる。

$$P_\beta(\mathbf{D},\mathbf{X}\,|\,\mathbf{D}^0,\mathbf{X}^0) = \frac{\exp\left(-\beta\left\|\mathbf{D}\mathbf{X}-\mathbf{D}^0\mathbf{X}^0\right\|^2 \Big/ 2N\right)}{Z_\beta(\mathbf{D}^0,\mathbf{X}^0)}\delta(\|\mathbf{D}\|^2 - NM)\delta(\|\mathbf{X}\|_0 - NP\theta)$$

ここで Z_β は規格化定数(分配関数)である。辞書行列の大きさは 1 とした。また $\beta\to\infty$ 極限で $\boldsymbol{D}^0\boldsymbol{X}^0 = \boldsymbol{D}\boldsymbol{X}$ の条件が課される。この分布関数の性質を知るには、次の自由エネルギーを計算すればよい。

$$f = -\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\beta}\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N^2}\left[\log Z_\beta(\mathbf{D}^0,\mathbf{X}^0)\right]_0$$

ここで $[...]_0$ は $\boldsymbol{D}^0, \boldsymbol{X}^0$ に関するランダム平均である。$\alpha = M / N,\ \gamma = P / N \sim O(1)$ として、レプリカ法を用いて自由エネルギーを計算すると、マクロな変数 $\Omega = \{\chi_D, m_D, Q_X, \chi_X\}$ と共役な変数(hat つき変数)を用いて次のように表される。

$$f=\underset{\Omega,\hat{\Omega}}{\mathrm{extr}}\left\{-\alpha\left(\frac{\hat{Q}_D-\hat{\chi}_D\chi_D}{2}-\hat{m}_D m_D+\frac{\hat{\chi}_D+\hat{m}_D^2}{2\hat{Q}_D}\right)\right.$$
$$\left.-\gamma\left(\frac{\hat{Q}_X Q_X-\hat{\chi}_X\chi_X}{2}-\hat{m}_X m_X+\lambda\theta+\left\langle\left\langle\phi(h;\hat{Q}_X,\lambda)\right\rangle\right\rangle_h\right)+\frac{\alpha\gamma(Q_X-2m_D m_X+\rho)}{2(1+Q_X\chi_D+\chi_X)}\right\}$$

ここでρ は真のスパース表現における非ゼロ成分の割合、λ は推定結果の非ゼロ要素数がθ という条件に関する Lagrange multiplier である。関数ϕ は次のように与えられる。

$$\phi(h;\hat{Q}_X,\lambda)=\min_X\left\{\frac{\hat{Q}_X X^2}{2}-hX+\lambda|X|_0\right\}$$

また h は $\boldsymbol{D}^0,\boldsymbol{X}^0$ のランダムネスを反映した確率変数で、$\langle\langle\ldots\rangle\rangle_h$ は h に関する平均を意味する。

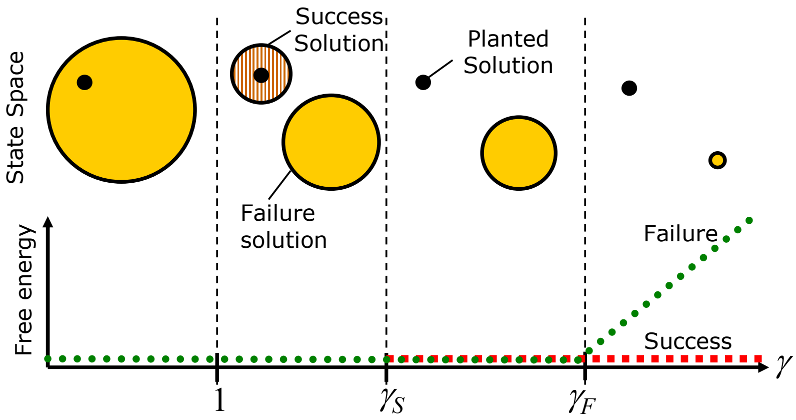
３　結果

マクロな変数に関する鞍点方程式より、マクロな変数については成功解と失敗解という二つの解が構成されることが分かった。成功解は $m_D=1, m_X=Q_X=\rho$, 失敗解は $m_D=m_X=0$ として特徴づけられる。成功解は埋め込んだ解と推定した解の最小二乗誤差がゼロの状態に対応する。したがって、マクロな変数に関する唯一の安定状態として成功解が存在するとき、辞書の特定が可能である。

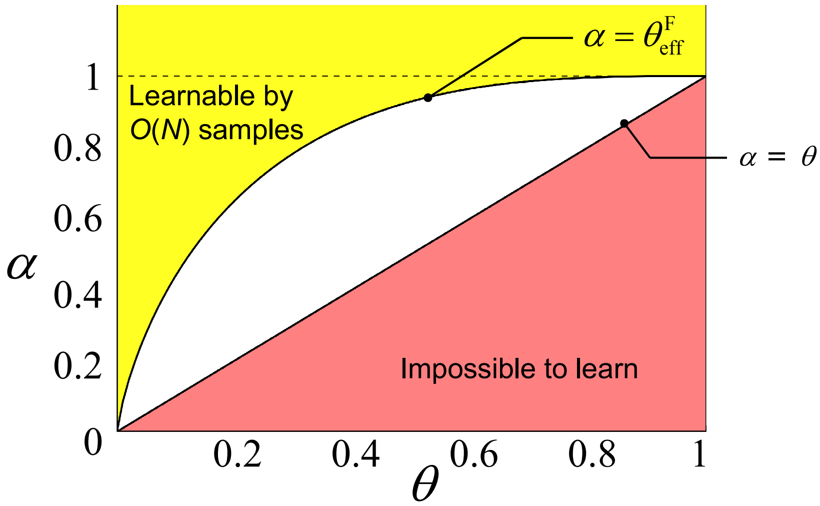
成功解は$\gamma>\gamma_S$で現れるが、この領域においては失敗解と自由エネルギーが縮退しているため、二つの解を区別することが出来ない。この縮退は$\gamma>\gamma_F$で解ける。γ_Fは必ずγ_Sより大きい。したがって、$\gamma>\gamma_F$では成功解が唯一の安定状態として存在し、埋め込んだ解 $\boldsymbol{D}^0,\boldsymbol{X}^0$ を特定することが可能である(図 1)。

つまり我々の結果は、$O(N)$個のサンプルから辞書とスパース行列を特定することが可能な領域が存在することを示している。これは[2]における結果からの大きな改善であると言える。

この$\gamma>\gamma_F$における Dictionary Learning の成功は、θ に依存したあるα 以上でみられる現象である。α － θ平面上で、$\gamma>\gamma_F$での Dictionary Learning が成功する領域を図 2 に示す。



[図 1] 相空間のγ依存性(上図)と自由エネルギーの変化(下図)。



[図 2] $\alpha-\theta$平面上の相図。曲線より上部では$O(N)$個のサンプルで辞書を学習することが可能。

4　まとめと今後の展望

以上の結果、辞書行列とスパース行列の特定のために必要なサンプル数は$O(N)$で十分なパラメータ領域が存在することがわかった[4]。今回の解析はレプリカ対称性の仮定に基づくものである。より精度よく必要なサンプル数を見積もるためには、レプリカ対称性の破れを考慮する必要がある。

謝辞

本研究は日本学術振興会特別研究員奨励費(N0. 23・4665)、(N0. 22300003)の補助を受けています。

参考文献

[1] D. Donoho, IEEE Trans. Inform. Theory **52** (2006) , 1289.

[2] M. Elad, *Sparse and Redundant Representations: From Theory to Applications in Signal and Image Processing*, (Springer-Verlag, New York, 2010).

[3] M. Aharon et al., Linear Algebra and its Applications **48** (2006), 416.

[4] A. Sakata and Y. Kabashima, arXiv: 1203.6178.

圧縮センシングによる画像補修

東北大学 大学院情報科学研究科　片岡 駿[1], 安田 宗樹, 田中和之
東京工業大学 大学院総合理工学研究科　樺島祥介

画像補修とは画像の輝度値の情報が部分的に欠落した欠損画像から原画像を推定する問題である．この問題はコサイン変換などの周波数変換を利用することで圧縮センシングの問題としてとらえることができる．画像補修の問題を圧縮センシングとして定式化し，圧縮センシングを利用した画像補修アルゴリズムを提案する．

1 はじめに

画像の欠損部分を再構成する画像処理技術は画像補修と呼ばれており，画像の非欠損部分の輝度値から欠損部分の輝度値を推定する問題である [1]．この技術は実際に様々なソフトウェアに実装されており，社会的にも注目を集めている画像処理技術の一つである．一方，画像の圧縮などで利用されているように，画像にはコサイン変換による周波数表現がスパースベクトルで近似できるという性質がある [2]．本研究では，この性質を利用し原画像の周波数表現を推定することで，画像補修を行うことを考える．

2 周波数表現の推定による画像補修

2.1 画像補修と圧縮センシング

欠損画像から原画像の周波数表現を推定する問題を圧縮センシングとして考える．圧縮センシングとは観測値 $\boldsymbol{y}$ が未知のスパースベクトル $\boldsymbol{x}$ からの線形観測 $\boldsymbol{y} = C\boldsymbol{x}$ $(\dim \boldsymbol{y} < \dim \boldsymbol{x})$ で与えられるとして，$\boldsymbol{y}$ と C の情報から $\boldsymbol{x}$ を推定する問題である [3].

欠損する前の $N \times N$ の原画像の輝度値を $\boldsymbol{I} = \{I_i\}, I_i \in \{0, 1, \ldots, 255\}, i \in V = \{0, 1, \ldots, N^2-1\}$ で表わし，$\boldsymbol{I}$ のコサイン変換による周波数表現を $\boldsymbol{x}$ とする．V の要素は画像の位置を表わし，画像の左上を始点としたラスター順序に対応している．観測される欠損画像は原画像から輝度値の情報が

[1]E-mail:xkataoka@smapip.is.tohoku.ac.jp

部分的に無くなったものである．欠損画像の欠損していない部分の輝度値を $\boldsymbol{y} = \{y_j\}, j \in V' \subset V$ とする．このとき，$\boldsymbol{y}$ と $\boldsymbol{x}$ の間にはコサイン逆変換に関係づけられる線形観測

$$\boldsymbol{y} = C_I \boldsymbol{x} \quad , \quad C_{Iij} = \frac{2}{N} \alpha_p \alpha_q \cos\frac{(2k+1)\pi p}{2N} \cos\frac{(2l+1)\pi q}{2N} \tag{1}$$

が成立する．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．

式 (1) より，欠損画像の非欠損部は元の画像の周波数表現からの線形観測で与えられることが分かる．この線形観測を利用して元の画像の周波数表現を推定することを考えると，これは線形観測から高次元のスパースベクトルを推定する圧縮センシングである．圧縮センシングにより周波数表現の推定値 $\widehat{\boldsymbol{x}}$ が求まれば，原画像 $\boldsymbol{I}$ は $\widehat{\boldsymbol{x}}$ のコサイン逆変換で与えられる．

2.2 ベイズ推定による周波数表現の推定

圧縮センシングではスパースベクトルの推定に l_1 再構成がよく使用される．l_1 再構成ではスパースベクトルの推定値 $\widehat{\boldsymbol{x}}$ は

$$\widehat{\boldsymbol{x}} = \arg\min_{\boldsymbol{x}} \sum_{i=0}^{N^2-1} a_i |x_i| \quad \text{subj.to} \quad \boldsymbol{y} = C_I \boldsymbol{x} \tag{2}$$

で与えられる．これは l_1 ノルム最適化問題であり，尤度を $\delta\left(\boldsymbol{y} - C_I \boldsymbol{x}\right)$，事前確率分布をラプラス分布

$$P(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}) = \frac{1}{2^{N^2}} \exp\left(-\sum_{i=0}^{N^2-1} a_i |x_i|\right) \tag{3}$$

として，事後確率分布 $P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) \propto \delta\left(\boldsymbol{y} - C_I \boldsymbol{x}\right) P(\boldsymbol{x})$ を最大にする $\boldsymbol{x}$ を推定値とする方法である．通常の l_1 再構成では $a_i = 1, i \in V$ としたものが使用される．しかし，コサイン変換による画像の周波数表現には低周波成分に比べ高周波成分がよりスパースになる性質があるため，本研究では $\boldsymbol{a}$ によりスパース性の高周波成分への偏りを表現することを考える．$\boldsymbol{a}$ の値は自然画像からの学習により決定する．

2.3 事前確率分布の学習

最尤推定により，自然画像から $\boldsymbol{a}$ の値を決定する．最尤推定は経験分布 $Q(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^{M} \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{d}_l)$ と分布 $P(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a})$ に対して対数尤度

$$L(\boldsymbol{a}) = \int d\boldsymbol{x} Q(\boldsymbol{x}) \log P(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}) \tag{4}$$

を最大にする $\boldsymbol{a}$ を分布 $P(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a})$ のパラメータ値とするものである．ここで $\{\boldsymbol{d}_l | l = 1, \ldots, M\}$ は学習データである．式 (4) の極値条件を求めることで，対数尤度を最大にする $\boldsymbol{a}$ は

$$a_i = \frac{M}{\sum_{l=1}^{M} |d_{li}|} \tag{5}$$

で与えられる．自然画像の周波数表現を学習データとして $\boldsymbol{a}$ の値を求めることで，式 (3) の事前確率分布に $\boldsymbol{x}$ のスパース性とスパース性の高周波成分への偏りを表現させることができる．

3 反復条件付きモードを使った画像補修アルゴリズム

事後確率分布 $P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y};\boldsymbol{a}) \propto \delta\left(\boldsymbol{y} - C_I\boldsymbol{x}\right) P(\boldsymbol{x};\boldsymbol{a})$ から $\boldsymbol{x}$ を推定する具体的なアルゴリズムを導出する．事後確率分布 $P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y};\boldsymbol{a})$ を最大にする $\boldsymbol{x}$ を求める問題は l_1 ノルム最適化問題であり，単体法などの計算法が存在する．しかし，画像などでは $\boldsymbol{x}$ の次元が大きくなり計算時間や必要なメモリ量が大きくなってしまう問題が発生する．そのため，$P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y};\boldsymbol{a})$ の極大値を与える $\boldsymbol{x}$ を推定値 $\widehat{\boldsymbol{x}}$ として，反復条件付きモード [4] を利用した単体法に代わるアルゴリズムを提案する．

欠損画像の欠損部の輝度値を確率変数 $\boldsymbol{z} = \{z_k\}, k \in V\backslash V'$ とする．このとき，原画像の周波数表現は

$$x_i = \frac{2}{N}\left(\sum_{a\in V'} z_a \cos\frac{\pi p(2k_a+1)}{2N}\cos\frac{\pi q(2l_a+1)}{2N} + \sum_{b\in V\backslash V'} y_b \cos\frac{\pi p(2k_b+1)}{2N}\cos\frac{\pi q(2l_b+1)}{2N}\right) \tag{6}$$

となり，$\boldsymbol{z}$ の関数 $\boldsymbol{x} = C(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ として与えられる．式 (6) は欠損部を変数 $\boldsymbol{z}$ とした欠損画像のコサイン変換である．この関数 $C(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ を利用して，$P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y};\boldsymbol{a})$ の極大値となる $\boldsymbol{x}$ を与える欠損部 $\boldsymbol{z}$ を直接推定することを考える．

関数 $\boldsymbol{x} = C(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ による変数変換により，$\boldsymbol{z}$ の事後確率分布は

$$P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y}) = P(C(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})|\boldsymbol{y};\boldsymbol{a}) \propto \exp\left(-\sum_{i=0}^{N^2-1} a_i|C_i(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})|\right) \tag{7}$$

で与えられる．ここで $C_i(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ は $C(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ の第 i 成分である．$P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y};\boldsymbol{a})$ の極大値を与える $\boldsymbol{x}$ の推定は $P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ の極大値を与える $\boldsymbol{z} = \widehat{\boldsymbol{z}}$ の推定と等価であり，この $\widehat{\boldsymbol{x}}$ は反復条件付きモードを使用することで効率的に推定することができる．反復条件付きモードは適当に初期値を与え，初期値に近い極大値を求めるアルゴリズムである．反復条件付きモードを使った画像補修アルゴリズムを以下にを示す．

- 提案アルゴリズム

Step 1 $\boldsymbol{z}$ を初期化し，$\sum_{i=0}^{N^2-1} a_i|C_i(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})| \to C_b$ とする．

Step 2 すべての $k \in V\backslash V'$ に対して次の操作を行う．

- ○ z_k を一つ選んで，その他の変数を固定したまま $\sum_{i=0}^{N^2-1} a_i|C_i(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})|$ を最大にする $z_k = z_k^*$ を求め，$z_k^* \to z_k$ と更新する．

Step 3 $\sum_{i=0}^{N^2-1} a_i|C_i(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})| \to C_n$ として $|C_b - C_n| < \varepsilon$ なら Step 4 へ，$|C_b - C_n| \geq \varepsilon$ なら Step 2 へ戻る．

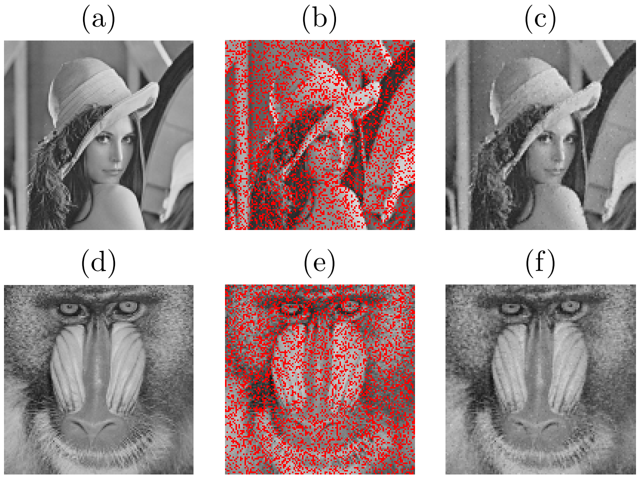


図 1: (a) 原画像 Lenna．(b) (a) の画像を 30% ランダムに欠損させた欠損画像．(c) (b) の画像の修復画像 (MSE:192.07)．(d) 原画像 Mandrill．(e) (d) の画像を 30% ランダムに欠損させた欠損画像．(f) (e) の画像の修復画像 (MSE:279.85)．

Step 4 $\boldsymbol{z} \rightarrow \widehat{\boldsymbol{z}}$ として終了．

提案アルゴリズムによる画像補修結果を図 1 に与える．$\boldsymbol{a}$ の学習には自然画像 42 枚を用いた．図 1(c) と図 1(f) がそれぞれ図 1(b) および図 1(e) の欠損画像の補修結果であり，原画像との間の平均二乗誤差 (MSE) は図 1(c) が 192.07，図 1(f) が 279.85 である．図 1 から提案アルゴリズムがランダム欠損に対して良い補修結果を与えているのが分かる．

4 まとめ

本研究では画像の周波数表現がスパースであることを利用して画像補修問題を圧縮センシングとしてとらえ，反復条件付きモードによる画像補修アルゴリズムを提案した．数値実験によりランダム欠損に対しては提案アルゴリズムが有効に機能することが確認できた．しかし，本研究で提案した画像補修法は事後確率分布の最大点ではなく極大点を与える方法である．この事後確率分布の最大点を効率よく求めるようアルゴリズムを改良することが今後の課題であると考えている．

参考文献

[1] M.Bertalmio, G.Sapiro, V. Caselles and C.Ballester, In Proc. ACM Conf. Comp. Graphics (SIGGRAPH), (2000), 417.

[2] 谷口慶治・編, “ 画像処理工学-基礎編- ”, 共立出版 (1996).

[3] E.J.Candès and M.B.Wakin, IEEE Signal Process. Mag. **25**(2008), 21.

[4] J.Kittler and J.Föglein, Image Vision Comput. **2**(1984), 13.

法＋線形応答法による近似学習 [4]，摂動展開近似 (Plefka 展開) による近似学習 [5]，一般化クラスタ変分法 (generalized belief propagation) による近似学習 [6]，ベーテ近似 (belief propagation) ＋線形応答法すなわち感受率伝搬法による近似学習 [7, 8, 9] などが代表である．もちろん物理分野だけでなく，情報科学の機械学習の分野でも 2000 年代初頭の contrastive divergence 法 [10] の提案を皮切りに最近様々な近似学習法が提案され続けており，minimum probability flow [11] とよばれる最新の近似学習法が注目を集めている．

4　おわりに

本稿ではボルツマンマシンの学習の基礎について概説してきた．本稿で紹介したモデルはもっとも単純な形のボルツマンマシンであり，現在ではその用途に応じて様々な拡張モデルが用いられている（ex. 高次ボルツマンマシン，制約付きボルツマンマシン (restricted Boltzmann machine), etc.）．しかしどのモデルもやはり本稿で解説したモデルが基礎になっており，確率変数間に複雑な相互作用をもつ確率モデルであることには違いがなく，その解析は結局のところ自由エネルギーの解析という問題に必ず帰着される．自由エネルギーの解析という観点においては，情報科学分野に比べ物理学分野にはより多くの知識蓄積がある．機械学習は情報科学分野の斬新な問題意識と物理学分野の強力な解決手法が上手に協力しあえる格好の土壌のひとつであると考えられる．

参考文献

[1] D. H. Ackley, G. E. Hinton and T. J. Sejnowski, Cognitive Science **9** (1985), 147.

[2] C. Peterson and J. R. Anderson, Complex Systems **1** (1987), 995.

[3] H. J. Kappen, F. B. Rodríguez, Nueral Computation **10** (1998), 1137.

[4] T. Tanaka, Phys. Rev. E **58** (1998), 2302.

[5] V. Sessak and R. Monasson, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009), 055001.

[6] M. Yasuda and T. Horiguchi, Physica A **368** (2006), 83.

[7] M. Yasuda and K. Tanaka, Neural Computation **21** (2009), 3130.

[8] M. Mézard and T. Mora, J. Physiol. **103** (2009) 107.

[9] E. Marinari and V. Van Kerrebroeck, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2010) P02008.

[10] G. E. Hinton, Neural Computation **14** (2002), 1771.

[11] J. Sohl-Dickstein, P. B. Battaglino and M. R. DeWeese, Phys. Rev. Lett. **107** (2011), 220601.

ボルツマンマシン

— データからのモデル発掘法 —

東北大学　大学院情報科学研究科　　安田宗樹 [1]

1　はじめに

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 [1]．統計力学を中心に古くから研究のおこなわれてきたイジング模型との数理的類似性から，物理と情報科学の双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，また，物理分野では**逆イジング問題** (inverse Ising problem) と呼ばれている．端的にいえば，学習とは得られた観測データからモデルのパラメータ（イジング模型での外部磁場と交換相互作用パラメータに相当する）を決定することであり，統計学的には逆問題と呼ばれるものに相当する．

2　ボルツマンマシンの学習

ボルツマンマシンはノード $\mathcal{V}=\{1,2,\ldots,n\}$ とリンク $\mathcal{E}=\{(i,j)\}$ から構成される無向グラフ $G(\mathcal{V},\mathcal{E})$（図 1）上に定義されたグラフィカルモデルである．ノード i に確率変数 $x_i\in\{+1,-1\}$ を

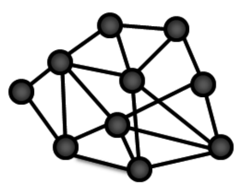


図 1: ボルツマンマシンの例.

割り当て，結合分布を

$$P(\boldsymbol{x}\mid\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{w}):=\frac{1}{Z(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{w})}\exp\left(\sum_{i\in\mathcal{V}}\theta_i x_i+\sum_{(i,j)\in\mathcal{E}}w_{ij}x_ix_j\right) \tag{1}$$

と定義する．ここで $Z(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{w})$ は規格化定数（分配関数）である．パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ と $\boldsymbol{w}$ はそれぞれバイアスと（対称な）結合の重みである．

[1]E-mail: muneki1005@gmail.com

まず M 個の観測データ $\mathcal{D} = \{\boldsymbol{d}^{(\mu)} \in \{+1,-1\}^n \mid \mu = 1,2,\ldots,M\}$ が独立同分布で得られたとする．ここでいう観測データとは，イジング模型でいえば，ある瞬間のスピン配位のスナップショットだと思っていただいて構わない．この M 個の観測データが "とあるパラメータ" をもつボルツマンマシンから確率的に生成されたものであると考える．もちろんどのようなボルツマンマシンから生成されたのかは分からない．知っているのは観測されたデータのみである．ボルツマンマシン学習とは，**得られた M 個の観測データのみからそれを生成したボルツマンマシンのパラメータの値を当てることと捉えられる**．

ボルツマンマシンの学習は以下で説明する最尤推定法 (maximum likelihood estimation) により達成される．観測データのヒストグラム（**経験分布**）は

$$Q_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{x}) := \frac{1}{M}\sum_{\mu=1}^{M}\delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{d}^{(\mu)})$$

とあらわされる．ここで δ はクロネッカーデルタである．この経験分布に対して次のような関数を定義する．

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{w} \mid \mathcal{D}) := \sum_{\boldsymbol{x}} Q_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{x}) \ln P(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta},\boldsymbol{w}) \tag{2}$$

これは（対数）尤度関数とよばれ，これを最大とするパラメータがボルツマンマシンの学習の解である[2]．式 (2) はパラメータについて凹関数となっているため，最大点が存在し,（データの共分散行列が正定値であるような観測データに対しては）解が一意に存在する．式 (2) の極値条件から以下の連立方程式が得られる．

$$\langle x_i \rangle_{\mathcal{D}} = \langle x_i \rangle_B \quad \forall i \in \mathcal{V} \tag{3}$$

$$\langle x_i x_j \rangle_{\mathcal{D}} = \langle x_i x_j \rangle_B \quad \forall (i,j) \in \mathcal{E} \tag{4}$$

ここで $\langle\cdots\rangle_{\mathcal{D}}$ は経験分布に関する平均をあらわしており，$\langle\cdots\rangle_B$ はボルツマンマシン (1) に関する平均である．連立方程式 (3, 4) は**ボルツマンマシンの学習方程式**とよばれ，この方程式の解が学習解である．連立方程式 (3, 4) は『**学習解は観測データの標本平均とモデルの対応する平均値を一致させるものある**』といっている．この性質から学習方程式は別名モーメントマッチングともよばれている．この性質はボルツマンマシンに限らず，モデルが指数分布族であれば，その学習方程式は一般に十分統計量同士のモーメントマッチングの形になる．

ボルツマンマシンの学習の概略を図 2 に示す．まず確率分布が与えられ，そこから何らかの統計量を計算するという問題を統計的**順問題**とよぶ．統計物理などでよくある "ハミルトニアンを与えて物理量を見計算する" 問題は順問題である．学習はまさにその逆の統計的**逆問題**である．つまり "物理量が先に与えられて，それからハミルトニアンを構成する" といった流れであり，通常と

[2]観測データが実際にあるボルツマンマシンから生成されており，かつデータ数が十分である（$M \to \infty$）状況ならば，最尤推定法によりデータを生成したボルツマンマシン（生成モデル）のパラメータを完璧に当てることが可能である．

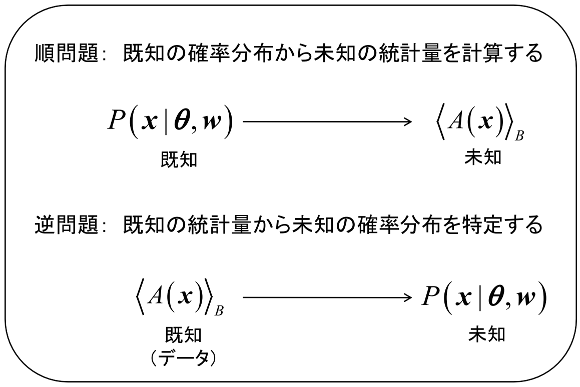


図 2: 順問題と逆問題（学習）の概略.

は逆のプロセスである．そのため，ボルツマンマシンの学習はイジング模型の逆問題をであるから，統計物理学において逆イジング問題とよばれている．

情報理論において非常に重要な量である Kullback-Leibler(KL) 情報量（物理学における相対エントロピーに相当）を用いて学習を見直すことができる．次のような KL 情報量を導入する．

$$D(Q_{\mathcal{D}} \mid\mid P) := \sum_{\boldsymbol{x}} Q_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{x}) \ln \frac{Q_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{x})}{P(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{w})} \tag{5}$$

情報化科学分野において KL 情報量は 2 つの確率分布間の近さの尺度としてよく用いられる．この KL 情報量をパラメータについて最小化する（すわなち経験分布とボルツマンマシンをもっとも近づける）ようなパラメータが学習解となる．なぜなら，式 (2) と式 (5) の間には

$$D(Q_{\mathcal{D}} \mid\mid P) = -\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{w} \mid \mathcal{D}) + e(\mathcal{D}) \tag{6}$$

なる関係が成り立つからである．ここで $e(\mathcal{D})$ は経験分布のエントロピーであり，ボルツマンマシンのパラメータには無関係な項である．したがって，先に説明した最尤推定法は経験分布とボルツマンマシンの間の KL 情報量最小化に対応していることがわかる．

3 最尤推定法と自由エネルギー

式 (2) を変形すると

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{w} \mid \mathcal{D}) = \sum_{i \in \mathcal{V}} \theta_i \langle x_i \rangle_{\mathcal{D}} + \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} w_{ij} \langle x_i x_j \rangle_{\mathcal{D}} + F(\boldsymbol{w} \mid \mathcal{D}) \tag{7}$$

となることが直ちにわかる．ここで $F(\boldsymbol{w} \mid \mathcal{D}) := -\ln Z(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{w})$ であり，ボルツマンマシンの**自由エネルギー**に対応する．したがって，ボルツマンマシンの学習とは結局のところ自由エネルギーの解析にいきつく．イジング模型の自由エネルギーの解析は平均場理論を中心に統計力学のなかで古くから研究されてきた．その背景から，平均場近似を用いた近似学習法が現在までに多く提案されてきている：naive 平均場近似による近似学習 [2]，naive 平均場近似＋線形応答法による近似学習 [3]，TAP

法＋線形応答法による近似学習 [4]，摂動展開近似 (Plefka 展開) による近似学習 [5]，一般化クラスタ変分法 (generalized belief propagation) による近似学習 [6]，ベーテ近似 (belief propagation) ＋線形応答法すなわち感受率伝搬法による近似学習 [7, 8, 9] などが代表である．もちろん物理分野だけでなく，情報科学の機械学習の分野でも 2000 年代初頭の contrastive divergence 法 [10] の提案を皮切りに最近様々な近似学習法が提案され続けており，minimum probability flow [11] とよばれる最新の近似学習法が注目を集めている．

4　おわりに

本稿ではボルツマンマシンの学習の基礎について概説してきた．本稿で紹介したモデルはもっとも単純な形のボルツマンマシンであり，現在ではその用途に応じて様々な拡張モデルが用いられている（ex. 高次ボルツマンマシン，制約付きボルツマンマシン (restricted Boltzmann machine), etc.）．しかしどのモデルもやはり本稿で解説したモデルが基礎になっており，確率変数間に複雑な相互作用をもつ確率モデルであることには違いがなく，その解析は結局のところ自由エネルギーの解析という問題に必ず帰着される．自由エネルギーの解析という観点においては，情報科学分野に比べ物理学分野にはより多くの知識蓄積がある．機械学習は情報科学分野の斬新な問題意識と物理学分野の強力な解決手法が上手に協力しあえる格好の土壌のひとつであると考えられる．

参考文献

[1] D. H. Ackley, G. E. Hinton and T. J. Sejnowski, Cognitive Science **9** (1985), 147.

[2] C. Peterson and J. R. Anderson, Complex Systems **1** (1987), 995.

[3] H. J. Kappen, F. B. Rodríguez, Nueral Computation **10** (1998), 1137.

[4] T. Tanaka, Phys. Rev. E **58** (1998), 2302.

[5] V. Sessak and R. Monasson, J. Phys. A: Math. Theor. **42** (2009), 055001.

[6] M. Yasuda and T. Horiguchi, Physica A **368** (2006), 83.

[7] M. Yasuda and K. Tanaka, Neural Computation **21** (2009), 3130.

[8] M. Mézard and T. Mora, J. Physiol. **103** (2009) 107.

[9] E. Marinari and V. Van Kerrebroeck, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2010) P02008.

[10] G. E. Hinton, Neural Computation **14** (2002), 1771.

[11] J. Sohl-Dickstein, P. B. Battaglino and M. R. DeWeese, Phys. Rev. Lett. **107** (2011), 220601.

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 —

大阪大学　産業科学研究所　　清水 昌平 [1]

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 [6–8]．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した．

まず、統計的因果推論 [2] における因果の概念として反実仮想モデル [9] とそれに基づく介入効果の定義を紹介した．この介入効果が因果効果と呼ばれる．そして個体における因果効果はデータから同定できないという因果推論の基本問題 [9] を説明した．次に、個体における因果効果の代わりに、集団における因果効果 [10] について述べた．統計的因果推論の主な目的は、集団における因果効果を推定することである．個体における因果効果と違い、集団における因果効果はデータから同定可能な場合がある．その一つの例が、無作為割り当てを伴う実験である．次に、因果効果を数学的に表現するための記号として do 記号 [2] を紹介した．この do 記号は、伝統的な統計学における条件付きの記号とは異なる．この記号によって、統計的因果推論の議論が透明化され、研究の進展が早まったと言われる．

次に、統計的因果推論の議論のための数学的フレームワークとして構造方程式モデルによるアプローチ [2] を紹介した．構造方程式モデル [1] 自体は、データ生成過程のモデルであるが、因果効果などの因果に関する概念や仮説を数学的に記述するのに役立つ．ざっくり言うと、反実仮想モデルで因果とは何かを定義し、構造方程式モデルを使って数学的に表現して推定や検定の対象にする．おおざっぱに言うと、データ生成過程が既知となれば因果効果を計算することができる．

先に述べたように、因果効果を推定する効果的な方法は無作為割り当てを伴う実験を行うことである．しかし, 実験を行うことが倫理的・コスト的に難しい場合がしばしばあり, 実験によって得られたのではないデータを用いて因果効果を推定したいというニーズがある．

[1]E-mail: sshimizu@ar.sanken.osaka-u.ac.jp

実験によって得られたのではないデータから因果効果を推定する方法 [2,11] は、大きく 2 つのカテゴリに分けられる．1 つ目は、データ生成過程における変数の生成順序が既知の場合の方法である．この場合は、ある変数からある別の変数への因果効果をバイアスなく推定するためには、当該変数に加えてどの変数を観測すべきかと言うようなことが研究対象になる．2 つ目は、データ生成過程における変数の生成順序が未知の場合の方法である．この場合は、データ生成過程の推定そのものが研究対象になる．1 つ目に比べて、かなり難易度が上がるため, (大事な) 変数はすべて観測されていると言った強めの仮定のあるモデルが研究されることが多い．しかし、そのような基本モデルに関する研究成果を基にしてより一般的な状況を扱う研究も盛んに行われるようになってきていると共に、応用事例も増えてきている．

従来は、観測変数間の条件付き独立性やガウス分布の仮定に基づく手法が主流であったが、最近は、外的影響の独立性や非ガウス性の仮定に基づく手法が盛んに研究されるようになってきている [4]. 従来は、データ生成過程を表す関数形になにも仮定をおかない状況での議論が中心であったが、仮定をおかない分、データ生成過程を一意に識別できない場合が多く、結果的に因果効果も計算できないということが多々あった．一方、最近は関数形に何らかの仮定をおいても、識別性を確保し、因果効果を計算する研究方向になってきている．もちろん、何らかの仮定をおく分、モデルの一般性は幾分低下する．しかし, いずれにしても実際には, 関数形以外も含めてモデルの仮定が完全に満たされていることはない．また、仮定の成否をあとで検定することにより、あまりにデータから逸脱した仮定は検出できるような工夫を行っている．これら最近の発展に関する一連の論文へのリンクは次のウェブページにある: `http://www.ar.sanken.osaka-u.ac.jp/~sshimizu/lingampapers.html`

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] E. Ferkingsta, A. Lølanda, and M. Wilhelmsen. Causal modeling and inference for electricity markets. *Energy Economics*, 33(3):404–412, 2011.

[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] 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.

[9] P. Holland. Statistics and causal inference. *J. American Statistical Association*, 81:945–970, 1986.

[10] D. B. Rubin. Estimating causal effects of treatments in randomized and nonrandomized studies. *Journal of Educational Psychology*, 66:688–701, 1974.

[11] P. Spirtes, C. Glymour, and R. Scheines. *Causation, Prediction, and Search.* Springer Verlag, 1993. (2nd ed. MIT Press 2000).

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

京都大学 情報学研究科　前田 新一 [1]

離散変数の分布の学習において Contrastive Divergence アルゴリズム [1] と呼ばれる学習アルゴリズムが有効に働くことが示されている [1][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。本稿では、Contrastive Divergence が離散マルコフ連鎖における定常分布の学習法として解釈することで、コスト関数を明らかにしたり、その収束性について論じることができることを報告する。

1　序論

多次元の離散変数の分布の推論・学習には、しばしば計算困難な正規化定数の計算が問題になる。少数の離散変数間の相互作用、たとえば、二体間相互作用の強弱をパラメータとして表現するボルツマンマシンは、離散変数の分布表現としてシンプルなものであるが、正規化定数の計算は困難であり学習を難しくしている。

この問題に対して、Hinton [1] は Contrastive Divergence アルゴリズムと呼ばれる学習を用いることで、ボルツマンマシンを従来より高速に学習できることを実験的に示した。さらに、Hinton と Salakhutdinov [2] は Restricted Boltzmann Machine(RBM) と呼ばれる二部グラフの構造を持つボルツマンマシンを、階層的に順次、Contrastive Divergence アルゴリズムを用いて学習させておくことで従来に比べて非常によりパラメータを得ることができ、実際に顔画像、手書き文字の特徴抽出・再構成、トピック解析といった大規模な学習を必要する問題に対して良好に学習できることを示し、注目を集めた。

このように Contrastive Divergence アルゴリズムの有効性は確認されていたものの、Contrastive Divergence アルゴリズムはどういったコスト関数を最適化しているのかや、収束性が保証されるのか、などに関しては疑問が残っていた。

本稿では、この Contrastive Divergence アルゴリズムをマルコフ連鎖における定常分布の学習法として位置づけて解釈する DBL [4] を紹介することで、コスト関数を明らかにし、その収束性について議論する。また、近年の関連研究との位置づけについて述べる。

[1]E-mail: busseied@yukawa.kyoto-u.ac.jp

2 マルコフ連鎖の定常分布の学習

2.1 コスト関数

多次元離散確率変数 $\mathbf{v} = [v_1, \cdots, v_n] \in S^n$ とその分布 $r(\mathbf{v})$ を真の分布として、真の分布からサンプルセット D が得られるとする。離散確率分布の学習は、このサンプルセット D から真の分布 $r(\mathbf{v})$ にもっとも近い分布 $p(\mathbf{v})$ を求める問題として定式化できる。ここで、通常、分布 $p(\mathbf{v})$ はパラメータ θ をもつパラメトリックな分布 $p(\mathbf{v}|\theta)$ として表現される。

しかしながら、多次元離散変数の分布においては、どのような分布表現であれ変数間に相関がある場合、正規化定数の計算には計算困難性が生じ、学習を難しくする。

そこで、この学習の問題をマルコフ連鎖の定常分布の学習と視点を変えて計算困難性を回避することを考える。まず多次元の離散変数分布 $p(\mathbf{v}|\theta)$ を唯一の定常分布にもつマルコフ連鎖 $p(\mathbf{v}|\mathbf{v}', \theta)$ を構成することを考える。以降、$p(\mathbf{v}|\theta)$ がマルコフ連鎖の定常分布となることを強調するために $p_\infty(\mathbf{v}|\theta)$ と表記する。二部グラフの構造をもつボルツマンマシンなどでは、マルコフ連鎖 $p(\mathbf{v}|\mathbf{v}', \theta)$ は計算困難性の生じない条件付き独立な分布の組み合わせによって構成できるため、容易にサンプルを得ることができるメリットをもつ。マルコフ連鎖の定常分布の学習とは、このより扱いやすいパラメトリックなマルコフ連鎖 $p(\mathbf{v}|\mathbf{v}', \theta)$ から得られる定常分布 $p_\infty(\mathbf{v}|\theta)$ を真の分布 $r(\mathbf{v})$ に近づけるようマルコフ連鎖のパラメータを学習することを意味する。

このマルコフ連鎖の定常分布の学習を行うために、詳細釣り合い条件を用いる。分布 $q(\mathbf{v})$ に対する詳細釣り合い条件は以下で与えられる。

$$\text{For any } \mathbf{v}, \mathbf{v}' \in S,\ p(\mathbf{v}'|\mathbf{v}, \theta) q(\mathbf{v}) = p(\mathbf{v}|\mathbf{v}', \theta) q(\mathbf{v}') \tag{1}$$

もし、上記のような分布 $q(\mathbf{v})$ が存在したならば、$q(\mathbf{v})$ は定常分布 $p_\infty(\mathbf{v}|\theta)$ に一致する。この事実に基づき、以下のコスト関数を考える。

$$F(\theta, \bar{\theta}) = KL\left[p(\mathbf{v}'|\mathbf{v}, \bar{\theta}) r(\mathbf{v}) | p(\mathbf{v}|\mathbf{v}', \theta) r(\mathbf{v}') \right] \tag{2}$$

ここで、$KL\left[p(\mathbf{x})|q(\mathbf{x})\right] \equiv \sum_{\mathbf{x}} q(\mathbf{x}) \log \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}$ は、Kullback-Leibler 擬距離である。同様に、隠れ変数 $\mathbf{h}$ を介したマルコフ連鎖が定義される場合、以下のコスト関数を考えることができる。

$$F(\theta, \bar{\theta}) = KL\left[p(\mathbf{v}', \mathbf{h}|\mathbf{v}, \bar{\theta}) r(\mathbf{v}) | p(\mathbf{v}, \mathbf{h}|\mathbf{v}', \theta) r(\mathbf{v}') \right] \tag{3}$$

これらのコスト関数 (2), (3) は、任意のパラメータ $\theta, \bar{\theta}$ に対して $F(\theta, \bar{\theta}) \geq 0$ であり、$F(\theta, \theta) = 0$ となるのは、$r(\mathbf{v})$ に対して詳細釣り合い条件が成り立つときのみ、すなわち、少なくとも $r(\mathbf{v}) = p_\infty(\mathbf{v}|\theta)$ が成り立つときのみに限られる、といったコスト関数として望ましい性質をもつ。しかしながら、$F(\theta, \theta)$ には、未知の分布 $r(\mathbf{v})$ が含まれるため直接の最小化は難しい。次節で $F(\theta, \theta)$ を最小化するための近似的な学習アルゴリズムを述べる。

2.2 Detailed Balance Learning (DBL) アルゴリズム

真の分布 $r(\mathbf{v})$ による期待値をサンプル D を用いた算術平均で置き換えることで、以下のようなアルゴリズムを考えることができる。

Detailed Balance Learning アルゴリズム

1. $t=1$ として、θ_0, θ_1 に初期値を設定する。
2. $F(\theta_{t+1},\theta_t) < F(\theta_{t-1},\theta_t)$ を満たす θ_{t+1} を求める。
3. 終了条件を満たしたならばアルゴリズムを終了し、そうでないならば t を 1 増やし、ステップ 2 に進む。

$F(\theta,\bar{\theta}) = \sum_{\mathbf{v}'}\sum_{\mathbf{v}} p(\mathbf{v}'|\mathbf{v},\bar{\theta})r(\mathbf{v})\log p(\mathbf{v}|\mathbf{v}',\theta) + const$ (ただし、$const$ は θ に依存しない定数) より、ステップ 2 は $\sum_{\mathbf{v}'}\sum_{\mathbf{v}} p(\mathbf{v}'|\mathbf{v},\theta_t)r(\mathbf{v})\log p(\mathbf{v}|\mathbf{v}',\theta_{t+1})$ が評価できれば実行可能であり、これはサンプル平均によって評価できる。また、コスト関数が θ に関して微分可能であれば、ステップ 2 の実行に準ニュートン法などの最適化手法を用いることも可能である。

2.3 DBL アルゴリズムの収束性

DBL アルゴリズムは、各ステップにおいて、$F(\theta_t,\theta_t)$ を小さくするという保証はないが、特定の条件のもとでは収束性を保証できる。θ_t が DBL アルゴリズムに従って更新されたとする。このとき、以下は θ_t が収束するための十分条件となる。

$F(\theta_{t+1},\theta_t) < F(\theta_{t-1},\theta_t)$ であるとき，$F(\theta_t,\theta_{t+1}) < F(\theta_t,\theta_{t-1})$ が成り立つ。

3 Contrastive Divergence Learning (CDL) との関係

DBL は、RBM の学習において CDL と密接な関係を持つ。RBM は、観測変数 $\mathbf{v}\in\{0,1\}^n$ と隠れ変数 $\mathbf{h}\in\{0,1\}^m$ の二部グラフで書ける分布として以下のように定義される。

$$p(\mathbf{v},\mathbf{h}|\theta) = \frac{1}{Z}\exp\left(-E(\mathbf{v},\mathbf{h};\theta)\right), \tag{4}$$

ここで Z は正規化定数である。T をベクトルの転置を表すものとすると、$E(\mathbf{v},\mathbf{h};\theta) \equiv -\mathbf{v}^{\mathrm{T}}W\mathbf{h} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} - \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{h}$ と定義される。$\theta=\{W,\mathbf{b},\mathbf{c}\}$ は学習すべきパラメータである。

ここでギブスサンプラーを $p_G(\mathbf{v}|\mathbf{v}',\theta) = \sum_{\mathbf{h}'} p(\mathbf{v}|\mathbf{h}',\theta)p(\mathbf{h}'|\mathbf{v}',\theta)$ とすると、このマルコフ連鎖によって定常分布 $p_\infty(\mathbf{v}|\theta) = \sum_{\mathbf{h}} p(\mathbf{v},\mathbf{h}|\theta)$ が得られる。また、二部グラフの性質により $p(\mathbf{v}|\mathbf{h}',\theta)$ と $p(\mathbf{h}'|\mathbf{v}',\theta)$ はともに条件付き独立な分布となることに注意する。

初期分布 $p_0(\mathbf{v}|\theta)$ を $r(\mathbf{v})$ として、マルコフ遷移 $p_G(\mathbf{v}|\mathbf{v}',\theta)$ に従って t 回、遷移した後の分布を $p_t(\mathbf{v}|\theta)$ と表現する。すなわち、$p_t(\mathbf{v}|\theta) \equiv \sum_{\mathbf{v}'} p_G(\mathbf{v}|\mathbf{v}',\theta)p_{t-1}(\mathbf{v}'|\theta)$。このとき、DBL アルゴリズムにおけるステップ 2 の更新則は、以下で与えられる。

$$\Delta w_{ij} = \langle v_i h_j \rangle_{r(\mathbf{v})p(\mathbf{h}|\mathbf{v},\theta_t)} - \langle v_i h_j \rangle_{Q_1(\mathbf{v}|\theta_t)p(\mathbf{h}|\mathbf{v},\theta_t)} \tag{5}$$

これは、Contrastive Divergence アルゴリズムによる更新則と一致するものとなっている。したがって、Contrastive Divergence アルゴリズムを DBL アルゴリズムとして解釈できる。

4 真の分布が詳細釣り合い条件を満たす必要十分条件

DBL アルゴリズムは、真の分布を定常分布としたときの詳細釣り合い条件が成り立つことを目的として、導出された学習アルゴリズムであった。定常分布は常に詳細釣り合い条件を満たさなければいけないわけではないが、以下のことが示される。

$p(\mathbf{v},\mathbf{h}|\theta)$ の条件付き分布 $p(\mathbf{v}|\mathbf{h},\theta)$ と $p(\mathbf{h}|\mathbf{v},\theta)$ から構成されるマルコフ連鎖 $p_G(\mathbf{v}|\mathbf{v}',\theta) = \sum_{\mathbf{h}} p(\mathbf{v}|\mathbf{h},\theta)p(\mathbf{h}|\mathbf{v}',\theta)$ を考える。このとき、真の分布を表現可能なパラメータが存在する条件 For any $\mathbf{v} \in S,\ r(\mathbf{v}) = \sum_{\mathbf{h}} p(\mathbf{v},\mathbf{h}|\theta)$ は、真の分布を定常分布とした詳細釣り合いが成り立つ条件 For any $\mathbf{v},\mathbf{v}' \in S,\ p(\mathbf{v}'|\mathbf{h},\theta)p(\mathbf{h}|\mathbf{v},\theta)r(\mathbf{v}) = p(\mathbf{v}|\mathbf{h},\theta)p(\mathbf{h}|\mathbf{v}',\theta)r(\mathbf{v}')$ の必要十分条件である。

5 まとめ

本稿では、マルコフ連鎖の定常分布を学習する方法として DBL [4] を紹介し、DBL が CDL と密接な関係をもつことを示した。近年、Minimum Probability Flow [3] と呼ばれる学習アルゴリズムが提案されているが、そこでは連続時間のマルコフ連鎖であるマスター方程式から導かれる。このように、計算上、扱いの困難であった離散分布を直接、扱うのではなく、その分布を定常分布として持つマルコフ連鎖を構成することで学習アルゴリズムを構成する新しい方法が生み出されている。

参考文献

[1] G. E. Hinton, *Neural Computation*, 14(8), pp.1771–1800, (2002).

[2] G. E. Hinton and R. R. Salakhutdinov, *Science*, 313(5786), pp.504–507, (2006).

[3] J. Sohl-Dickstein, P. B. Battaglino, and M. R. DeWeese, *Physical Review Letters*, 107(22), 22601, (2011).

[4] 前田新一、青木佑紀、石井信、日本神経回路学会, (2009).

量子ビット間の相互作用推定手法

東京大学 理学系研究科 化学専攻　田中 宗 [1]

２つのタイプの相互作用を例に取り、量子ビット間に働く相互作用を推定する手法を考案した。１番目は、核磁気共鳴（Nuclear Magnetic Resonance: NMR）を用いた量子情報処理を念頭に置いた、サイトに依存する横磁場がかかったイジング的相互作用 [1–3] であり、２番目は２スピン系における一般の形の相互作用 [4–6] である[2]。

1　緒言

量子情報処理を実現するためには大きく分けて２つの課題を解決する必要がある。１つは「良質」な量子ビットを作成する技術を確立することである。ここで「良質」とは、コヒーレンス時間が長い、動作環境が極端な条件ではない（例：室温近くで動作する）、量子ビットに対するアクセスが容易であることなどが挙げられる。実験技術の進展により、有機分子の核スピン・超伝導磁束・ナノ分子磁性体・固体中におけるスピンを量子ビットとして用いることができることが確認されており、いくつかの場合において、量子計算のデモンストレーションが行われている段階である。もう１つの課題は、量子ビット間に働く相互作用を精度良く推定する手法を考案することである。量子ビットを所望通りに操作するためには、量子ビット間の相互作用を知らなければならない。そのことを示すために、量子情報処理において典型的な操作である制御 NOT ゲート (Controlled NOT gate: CNOT) について考えよう。基底を $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ とすると、制御 NOT ゲートは以下の行列で表現できる：

$$U_{\mathrm{CNOT}} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{i\pi\hat{\sigma}_1^z/2}\mathrm{e}^{-i\pi\hat{\sigma}_2^z/2}\mathrm{e}^{i\pi\hat{\sigma}_2^x/2}U_J(\pi/4J)\mathrm{e}^{i\pi\hat{\sigma}_2^y/2}, \quad U_J(\tau) := \mathrm{e}^{-iJ\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z\tau} \tag{1}$$

相互作用の強さ J がわからないと U_J を作用させるべき時間 τ を知ることができず、制御 NOT ゲートを作ることはできない。このように、量子状態を制御するためには、量子ビット間に働く相互作用を知ることは必要不可欠である。

---

[1]E-mail: shu-t@chem.s.u-tokyo.ac.jp

[2]前者は Mohammad Ali Fasihi 氏（近畿大学）、近藤康氏（近畿大学）、中原幹夫氏（近畿大学）との共同研究であり、後者は鹿野豊氏（分子研）との共同研究である。

2　相互作用推定手法

以下では２つのタイプの相互作用推定手法の概略を述べる。詳細については、論文 [1–6] を参照されたい。

2.1　NMR を用いた量子情報処理を念頭に置いた系の相互作用推定手法

NMR は、有機分子中の核スピンを選択的に回転させることができるため、量子コンピュータとしての利用が期待されている。NMR を用いた量子ビットは、サイトに依存する横磁場がかかったイジングモデルで表すことができる。すなわち、

$$\mathcal{H}_{\mathrm{NMR}} = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i^x\hat{\sigma}_i^x \tag{2}$$

と記述することができる[3]。ここで、

$$\hat{\sigma}^x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

である。問題設定は以下の通りである。

- 量子ビットは 1 次元鎖状に連なっているとする。
- 初期状態として擬純粋状態 $|\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ を用意することができる。
- 端のスピンのみ操作・観測することが可能である。
- 操作・観測することのできるスピンにかかっている磁場は既知であり、変化させることができる。ただし、その他の各々の量子ビットにかかっている磁場 h_i^x は固定されており、未知であるとする。

我々が提案した、相互作用を推定する手法は以下の通りである。非自明だが、最も簡単な場合である 3 スピン系について述べる。

Step 1 状態 $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ を用意する。

Step 2 1 番目のスピンのみを回転させ、初期状態を $\psi(0) = \alpha\,|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ とする。

Step 3 1 番目のスピンの x 方向の期待値の時間発展 $\langle\sigma_1^x(t)\rangle := \langle\psi(t)|\hat{\sigma}_1^x|\psi(t)\rangle$ を測定する。ただし、$|\psi(t)\rangle := \exp(-i\mathcal{H}_{\mathrm{NMR}}t)\,|\psi(0)\rangle$ である。

Step 4 Step 3 で得られたものをフーリエ変換し、$\langle\tilde{\sigma}_1^x(\omega)\rangle$ のピーク位置を得る。

Step 5 1 番目のスピンにかかっている磁場 h_1^x を変化させ、Step 1 から Step 4 について、同様の操作を行い、Step 4 で得られる $\langle\tilde{\sigma}_1^x(\omega)\rangle$ のピーク位置の変化を得る。そこから相互作用及び磁場の値を求めることができる。

[3] 式の導出の詳細は文献 [7,8] などを参照されたい。

2.2 NV 中心を例とした相互作用推定手法

先程の例では量子ビット間の相互作用が横磁場イジングモデルでよく記述できる場合について、相互作用を推定する手法を考察した。ところが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、固体中の量子情報処理素子として期待されている NV 中心と呼ばれる系が挙げられる。この系では、ダイヤモンド中の空孔と不純物である窒素とで形成される電子状態を量子ビットとみなすことができる。このとき、量子ビット間の相互作用は双極子・双極子相互作用で記述される。このように複雑な相互作用の場合にも相互作用を推定する手法を検討する必要がある。我々は２スピンから成る、最も一般的な相互作用について考察した：

$$\mathcal{H}_{\mathrm{NV}} = \sum_{\mu,\nu\in\{x,y,z\}} g_{\mu\nu}(\hat{\sigma}_1^{\mu}\otimes\hat{\sigma}_2^{\nu}), \quad [g_{\mu\nu}] := \begin{pmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{yx} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{zx} & g_{zy} & g_{zz} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

問題設定は以下の通りである。

- １体のハミルトニアンは既知であるとする。すなわち、各々の量子ビットの $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ のエネルギー差はわかっているものとする。
- 片方の量子ビットを操作することにより、もう片方の観測ができるとする。両者の量子ビットの直接的な観測は必ずしも必要ではない。情報を片方のスピンからもう片方のスピンに転送し、論文 [9] の方法で情報を取り出す。

我々の提案した手法は以下の通りである。

Step 1 初期状態として、$\Psi(0) = \rho_1\otimes\rho_2$ という状態を用意する。ここでそれぞれの密度行列は、$\rho_1 = (I + \mathbf{r}_i\cdot\vec{\sigma}_1)/2$, $\rho_2 = (I + \mathbf{p}\cdot\vec{\sigma}_2)/2$ とする。ここで $\mathbf{r}_i$ 及び $\mathbf{p}$ はそれぞれ、１番目・２番目の量子ビットの量子状態をブロッホ球表示した時の状態を表すベクトルである。

Step 2 短い時間 δt だけ待つ。すなわち、$\Psi(\delta t) = \mathrm{e}^{-i\mathcal{H}_{\mathrm{NV}}\delta t}\Psi(0)\mathrm{e}^{i\mathcal{H}_{\mathrm{NV}}\delta t}$ という状態が生成される。

Step 3 １番目の状態を量子トモグラフィを行うことで決定する。

Step 4 測定軸を $\mathbf{q}$ 方向とする。この方向で２番目のスピンを測定する。

Step 5 制御可能な４つのパラメータ $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}, \delta t, \mathbf{q})$ を変化させて、Step 1 から Step 4 を繰り返す。

Step 6 Step 4 で得られた期待値を下に相互作用を推定する。

この方法は、短時間のダイナミクスから相互作用の情報を引き出せることからデコヒーレンスに対してシビアではないという利点がある。また Bell 測定を必要としない、２つの量子ビット間の相対位置を知らなくても良いという利点もある。

3 結論・今後の展望

本原稿では、２つのタイプの量子ビット間の相互作用推定手法について検討した。両者の方法とも、１つのスピンの状態の時間発展を観測することにより、全ての相互作用を推定するという、いわゆる逆問題となっている。我々が取り扱った問題はいずれも極めて簡単な場合である。量子情報処理を真に実現するためには、より多くの量子ビットが一般のネットワーク上にある場合について検討しなければならず、多くの変数を推定する必要があるため、非常に難しい問題である。情報科学においては、パラメータ推定の手法は数多く開発されてきている。そのため、今回取り上げた問題は、純粋物理学的知見のみならず、情報科学的知見を駆使した新しい情報統計力学の展開により、更に現実的な問題として取り扱われることになると考えられる。

謝辞

田村亮氏には本原稿を注意深く読んでいただき、有益なコメントを頂きました。本研究は、日本学術振興会科学研究費助成事業（研究活動スタート支援：21840021、及び特別研究員奨励費：23-7601）の支援を受けて実施されました。また、今回報告した研究の計算の一部は、東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピュータを利用しました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

[1] Mohammad Ali Fasihi, 田中宗, 中原幹夫, 近藤康, 素粒子論研究 **119**-4A (2011).

[2] M. A. Fasihi, S. Tanaka, M. Nakahara, and Y. Kondo, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011), 044002.

[3] M. A. Fasihi, S. Tanaka, M. Nakahara, and Y. Kondo, to appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: "Symposium on Quantum Information and Quantum Computing (2011)".

[4] Y. Shikano, S. Kagami, S. Tanaka, and A. Hosoya, AIP Conf. Proc. **1363** (2011), 177.

[5] Y. Shikano and S. Tanaka, Europhys. Lett. **96** (2011), 40002.

[6] 田中宗, 鹿野豊, 素粒子論研究 **119**-4A (2011).

[7] M. Nakahara and T. Ohmi, "Quantum Computing: From Linear Algebra To Physical Realizations", CRC Press, (2008).

[8] S. Tanaka and R. Tamura, to appear in Kinki University Series on Quantum Computing Series "Lectures on Quantum Computing, Thermodynamics and Statistical Physics".

[9] M. V. Gurudev Dutt, L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A. S. Zibrov, P. R. Hemmer, and M. D. Lukin, Science **316** (2007), 1312.

結び目の彩色問題

九州大学 理学研究院 物理学部門　中島 千尋 [1]

1　イントロダクション

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・制御の問題が興味を持たれている。

結び目の理論と統計力学の関係は深く [2]、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] などに代表されるように数々の研究がされてきた。多項式不変量と可解模型の対応関係は [3] において指摘されているが、対応関係が存在することと具体的な結び目の弁別・解析との間にはなおギャップがある。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。前述の生体高分子の文脈に置いても、大規模な高分子配位の結び目構造における計算量の問題は様々な点で壁となっている [7]。

2　制約充足問題としての定式化

結び目の不変量には射影図式の交点に基づいて定義するものが多いが、p 彩色数は、射影図式の弧に $c_i = \{0, 1, \cdots, p-1\}$ で表される数字（色）を割り当て、射影図式中の交点で出会う 3 つの弧の色 c_{i-1}, c_i, c_k（図 2(c)）に対して、

$$\mathrm{mod}(c_{i-1} + c_i - 2c_k, p) = 0 \tag{1}$$

を満たす様な塗り分けの配位のみを許可するものとして定義される。塗り分け配位の総数と非自明な塗り分けを許す p の値の系列はともに、位相不変な量である。

この量は、弧の彩色を自由度と見なし、交点における弧の交差関係（またぐ・またがれるの関係）をグラフの結合関係として整理することにより、バイパータイトなランダムグラフ上の制約充足問題として定式化することが出来る。我々は、分子動力学法で得られた高分子結び目のサン

[1]E-mail: nakajima@stat.phys.kyushu-u.ac.jp

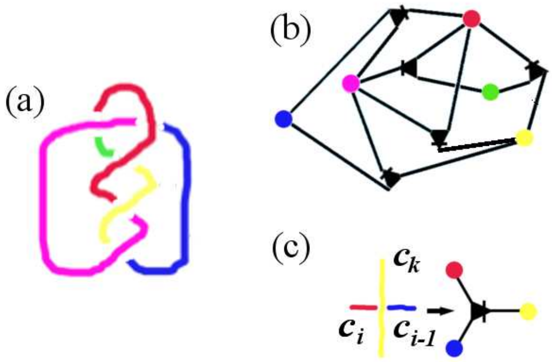


図 1: 結び目の射影図式とランダムグラフの対応の例。

プル（図 2(a) 参照）をもとにランダムグラフ上のハミルトニアンを構成し、レプリカ交換モンテカルロ法と熱力学積分を用いた制約充足状態の統計力学的数え上げの方法を用いて塗り分け配位の数を求めた。

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、非自明な塗り分けを許す p 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、塗り分けた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陣との関係が示唆されること（詳細は未解明）などである。

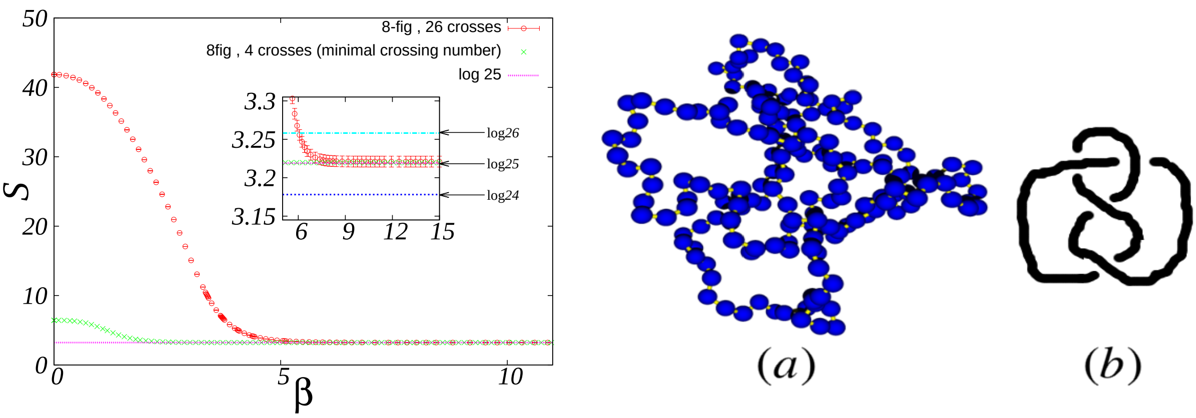


図 2: (左) 制約充足問題としてのエントロピーの計算結果。横軸は逆温度、縦軸は全エントロピー。$\beta \to \infty$ における基底エントロピーが塗り分け総数の対数にあたる。(右)(デモンストレーションに用いた高分子模型の配位。([8] より)

3　展望

結び目の数学的理解の文脈では、与えられた結び目をほどくためにかかる手数など、位相不変ではない構造も興味を持たれる。本研究で用いたハミルトニアン（詳細は [8] 参照）の基底状態は結び目不変量と対応し、これを求めることには成功した。本研究で用いたグラフ表現では、グラ

フの結合構造は結び目の弧の交差の構造で決まり、また有限エネルギー状態の状態密度の構造を決めている。従って、励起状態の状態密度や有限温度の熱力学量（内部エネルギーや比熱など）には結び目の位相不変性以外の情報が反映されている可能性があり、これらの情報を引き出すことも期待できる。

また、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るため、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。

謝辞

本研究は、九州大学理学研究院の坂上貴洋助教との共同研究です。また、本研究は、JSPS Core-to-Core Program“International research network for non-equilibrium dynamics of soft matter”による援助を受けています。

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, and J. Lagarias, J. Amer. Math. Soc., **14**, 399, (2001).

[7] C. Micheletti, D. Marenduzzo, and E. Orlandini, Phys. Rep., **504**, 1, (2011).

[8] 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[1]

科学技術振興機構 FIRST 合原最先端数理モデルプロジェクト
東京大学生産技術研究所民間等共同研究員　杉山　友規 [2]

本原稿は 2012 年 3 月 21 日～23 日の日程で京都大学基礎物理学研究所で行われた基研研究会「情報統計力学の最前線」における講演の記録である。講演では、近年非平衡物理学の領域で注目を浴びている揺らぎ定理に基づいて熱力学第 2 法則を構成すると共に、そこで得られた知見を用いて準安定状態を特徴づける自由エネルギーを測定する方法を提案した。以下で、講演内容の詳細について報告する。

1　導入

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、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）が従う時間反転に関する対称性を規定していることにあると言える。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様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は十分に満足できるものでないことに気付く。本原稿では、この点を克服すべく、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に対する自由エネルギーの測定方法を提示する。

2　巨視的スケールにおける揺らぎ定理

本研究において、我々は逆温度 β で特徴付けられる熱浴に接触している N 自由度の多体系を扱う。系の状態は $\{x_i\}$ で記述され、外的操作 λ を通して仕事を受ける。さらに、この系のダイナミクス及び Hamiltonian

[1] この原稿は、基研研究会「情報統計力学の最前線」の報告書である。
[2] E-mail: yuki_sughiyama@sat.t.u-tokyo.ac.jp

が以下のようにモデル化されることを仮定する。まず、ダイナミクスは伊藤過程で表される。

$$dx_i = \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} H_N\left(\{x_i\}, \lambda_t\right)\right] dt + \sqrt{\frac{2}{\beta}} d\xi_i \tag{1}$$

ここで、ξ_i は Wiener 過程を $H_N\left(\{x_i\}, \lambda_t\right)$ は系の Hamiltonian を表す。続いて、この Hamiltonian が以下のような平均場型であることを仮定する。

$$H_N\left(\{x_i\}, \lambda\right) = -\sum_i F_\lambda\left(x_i\right) - \frac{1}{2N} \sum_{ij} G\left(x_i, x_j\right) \tag{2}$$

ここで、F_λ は系のポテンシャルトラップを表し、G は２体の相互作用を表している。以上の設定の下、本節では巨視的スケールにおける揺らぎ定理を導出する。（この系は、微視的な意味での通常の揺らぎ定理は満たしている [2]。）

さて、微視的確率モデルを表す式（1），(2) から巨視的な物理法則を導くために熱力学極限を取ることを考えよう。このような方程式は経験分布 $\mu\left(x,t\right) = \left(1/N\right) \Sigma_i \delta\left(x_i - x\right)$ を用いて粗視化できることが知られている [4]。実際、この粗視化を行うと、

$$d\mu\left(x,t\right) = D_{\mu_t,\lambda_t}\left(x\right) dt + \frac{1}{N}\sqrt{\frac{2}{\beta}} \sum_i \frac{\partial \delta\left(x_i - x\right)}{\partial x_i} d\xi_i \tag{3}$$

を得る。ここで、右辺第１項は多自由度極限（$N \to \infty$）での振る舞い（熱力学的時間発展）を表しており、

$$\begin{aligned} D_{\mu_t,\lambda_t}\left(x\right) &= -\frac{\partial}{\partial x}\left\{f_{\lambda_t}\left(x\right)\mu\left(x,t\right)\right\} \\ &\quad -\frac{\partial}{\partial x}\left\{\mu\left(x,t\right)\int g\left(x,y\right)\mu\left(y,t\right)dy\right\} + \frac{1}{\beta}\frac{\partial^2 \mu\left(x,t\right)}{\partial x^2} \end{aligned} \tag{4}$$

で与えられる。（ここで、簡易表記 $f_{\lambda_t}\left(x\right) = \partial F_{\lambda_t}\left(x\right)/\partial x$、$g\left(x,y\right) = \partial G\left(x,y\right)/\partial x$ を用いた。）一方で、第２項は系の自由度の増大共に減衰する揺らぎの効果を表している。一見、この第２項は複雑な形をしているが、この表式から求められる拡散定数は

$$R_\mu\left(x,y\right) = \frac{2}{\beta}\int dz \frac{\partial \delta\left(x-z\right)}{\partial z}\frac{\partial \delta\left(y-z\right)}{\partial z}\mu\left(z\right) \tag{5}$$

となり、経験分布 μ で閉じた形になっている。続いて、式（3）を用いて、時間間隔 $[0,T]$ における μ の時間発展に対する経路確率 $Path\left[\lambda,\mu|\mu_0\right] = e^{-NJ_{[0,T]}[\lambda,\mu]}$ を求めよう。ここで、$J_{[0,T]}$ は作用汎関数 [5] と呼ばれる量で、実際に評価すると、

$$J_{[0,T]}\left[\lambda,\mu\right] = \int_0^T dt L_{\lambda_t}\left[\dot{\mu}_{\mathrm{t}},\mu_t\right], \tag{6}$$

$$\begin{aligned} L_{\lambda_t}\left[\dot{\mu}_t,\mu_t\right] &= \frac{1}{2}\int\int dxdy R^{-1}_{\mu_t}\left(x,y\right)\left\{\dot{\mu}\left(x,t\right) - D_{\mu_t,\lambda_t}\left(x\right)\right\} \\ &\quad \times\left\{\dot{\mu}\left(y,t\right) - D_{\mu_t,\lambda_t}\left(y\right)\right\} \end{aligned} \tag{7}$$

となる。さらに、この作用汎関数の表式（6），(7) を拡散定数の表式（5）を用いて変形すると、以下のような時間反転に関する対称性を得る。

$$\begin{aligned} &I_{\mathrm{eq},\lambda_0}\left[\mu_0\right] + J_{[0,T]}\left[\lambda,\mu\right] + \beta w_{[0,T]}\left[\lambda,\mu\right] \\ &= I_{\mathrm{eq},\hat{\lambda}_0}\left[\hat{\mu}_0\right] + J_{[0,T]}\left[\hat{\lambda},\hat{\mu}\right] + \beta\left\{\phi_{\mathrm{eq}}\left(\beta,\lambda_T\right) - \phi_{\mathrm{eq}}\left(\beta,\lambda_0\right)\right\}. \end{aligned} \tag{8}$$

ここで、$w_{[0,T]}[\lambda,\mu]$ は系に加えられた自由度当たりの仕事、$\phi_{\mathrm{eq}}(\beta,\lambda_T)-\phi_{\mathrm{eq}}(\beta,\lambda_0)$ は自由度当たりの平衡状態間の自由エネルギー差を表し、$I_{\mathrm{eq},\lambda}$ は外的状態 λ におけるカノニカル分布に対する大偏差関数 [5]、$\hat{\cdot}$ は時間反転操作 $\hat{\mu}_{\hat{t}}=\mu_t, \hat{\lambda}_{\hat{t}}=\lambda_t, \hat{t}=T-t$ を表す。左辺の第 1，2 項 $I_{\mathrm{eq},\lambda_0}[\mu_0]+J_{[0,T]}[\lambda,\mu]$ と右辺の第 1,2 項 $I_{\mathrm{eq},\hat{\lambda}_0}[\hat{\mu}_0]+J_{[0,T]}\left[\hat{\lambda},\hat{\mu}\right]$ に注目しよう。前者は経験分布 μ の時間発展の揺らぎを、後者は時間反転したときのそれを表している。これら２つが関係付けられていることを考慮すると、この対称性（8）が巨視的スケールにおける揺らぎ定理を表していると考えられる。

3　熱力学第２法則

前節で得られた巨視的スケールにおける揺らぎ定理の対称性（8）を用いて、熱力学第 2 法則を導出してみよう。経験分布の熱力学的時間発展は、大偏差関数及び作用汎関数の性質を考慮すると、それらを最小にする時の μ の時間発展を用いて与えられる。即ち、初期状態を平衡状態 $\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}$ に固定し、外的操作を λ で表した時、熱力学的時間発展 $\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]$ は以下の式を満たす。

$$I_{\mathrm{eq},\lambda_0}[\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]+J_{[0,T]}[\lambda,\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]=0 \tag{9}$$

この式（9）を揺らぎ定理の対称性（8）に代入すると、

$$\begin{aligned}\beta w_{[0,T]}[\lambda,\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]] &= I_{\mathrm{eq},\hat{\lambda}_0}[\hat{\mu}_0^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]+J_{[0,T]}\left[\hat{\lambda},\hat{\mu}^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]\right]\\ &\quad+\beta\left\{\phi_{\mathrm{eq}}(\beta,\lambda_T)-\phi_{\mathrm{eq}}(\beta,\lambda_0)\right\}\end{aligned} \tag{10}$$

を得る。ここで、$\hat{\mu}^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]$ は熱力学的時間発展 $\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]$ を時間反転したものであり、$\hat{\mu}_0^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]$ はその初期条件である。また、$w[\lambda,\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]$ は熱力学的時間発展が起こったときに系が受け取る仕事、即ち熱力学的に測定される仕事を表している。さらに、大偏差関数及び作用汎関数が非負の関数であること $I_{\mathrm{eq},\hat{\lambda}_0}[\hat{\mu}_0^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]+J_{[0,T]}\left[\hat{\lambda},\hat{\mu}^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]\right]\geq 0$ を考慮すると、我々は熱力学第 2 法則 $w_{[0,T]}[\lambda,\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]\geq\phi_{\mathrm{eq}}(\beta,\lambda_T)-\phi_{\mathrm{eq}}(\beta,\lambda_0)$ を得る。また、エントロピー生成 $\sigma[\lambda]=\beta\left\{w_{[0,T]}[\lambda,\mu^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]-\Delta\phi_{\mathrm{eq}}\right\}$ は大偏差関数及び作用汎関数を用いて、

$$\sigma[\lambda]=I_{\mathrm{eq},\hat{\lambda}_0}[\hat{\mu}_0^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]]+J_{[0,T]}\left[\hat{\lambda},\hat{\mu}^*[\lambda;\mu_{\mathrm{eq},\lambda_0}]\right]. \tag{11}$$

と評価される。以上が、本研究における主要結果の一つである。

4　準安定状態に対する自由エネルギーの測定

近年、Jarzynski 恒等式

$$\left\langle e^{-\beta W}\right\rangle_{\mathrm{eq}}=e^{-\beta\Delta\Phi_{\mathrm{eq}}} \tag{12}$$

を用いて自由エネルギーを測定する方法が考案されている。ここで、$\Delta\Phi_{\mathrm{eq}}$ は平衡状態間の自由エネルギー差、W は系に加えられる仕事、$\langle\cdot\rangle_{\mathrm{eq}}$ は初期状態を平衡状態としたときの確率的時間発展に対する期待値を表す。この方法は、式（12）左辺の期待値を取る操作を、多数回仕事を測定することによって評価し、自由エネルギーを求めようというものである。熱力学的に自由エネルギーを評価しようと試みるとき、準静的

操作の下での仕事を測定する必要がある。一方で、この方法は、任意の操作における仕事を用いて自由エネルギーを評価出来るという意味で優れている。ところで、この Jarzynski 恒等式は、初期状態が平衡状態である時に成り立つ恒等式である。もし、初期状態を準安定状態に拡張し、その場合に対しても Jarzynski 恒等式と同じように仕事と自由エネルギーが関係付けられていれば、我々は上述の方法を用いて、準安定状態に対する自由エネルギーを測定することができる。実際に、前節までの議論を用いて、初期状態を準安定状態とした場合に対して、仕事と自由エネルギーを関係付けることを考えてみよう。この時、我々は外的操作を一定程度制限することによって、以下の恒等式を得る。(詳細の導出は参考文献 [6] を参照)

$$\left\langle e^{-N\beta w}\right\rangle_i = e^{-N\beta\{\phi_{\rm eq}(\beta,\lambda_T)-\phi_i(\beta,\lambda_0)\}} \tag{13}$$

ここで、ϕ_i は初期状態として与えた準安定状態の自由エネルギーを表す。しかし、この恒等式は上述したように、通常の Jarzynski 恒等式とは異なり、任意の外的操作の下で成り立つわけではない。そこで、この恒等式が成り立つ制限の下で、有益な実験計画を考えてみよう。その時、我々は以下のような計画を思いつく。まず、初期状態として与える準安定状態が過去の平衡状態から人為的にある操作下で作られている場合を想定しよう。そして、この操作を我々は知っていると仮定する。この時、この操作を時間反転した操作を用いて実際の実験を行う。具体的には、初期状態にあたる作られた準安定状態に時間反転した操作を加え仕事を観測する。この操作の下では、式（13）が成り立つため、この実験を多数回行い左辺の期待値を評価することにより、自由エネルギー ϕ_i が評価できる。以上が本研究の 2 つ目の主要結果である。

謝辞

本研究を遂行するに当たり、日本学術振興会特別研究員奨励費（DC2) からの助成に感謝する。また、本原稿の執筆においては、先端研究開発支援プログラム（FIRST 合原最先端数理モデルプロジェクト）からの助成に感謝する。

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) H. Touchette, Phys. Rep. **478**, 1 (2009).

6) Y. Sghiyama and M. Ohzeki, arXiv:1110.2088 (2011).

線形フィードバック系における情報熱力学

慶應義塾大学理工学部物理情報工学科　藤谷洋平 [1]

1　はじめに

ひとつの熱浴に接した系に仕事をする。熱力学第二法則によれば、「系と熱浴をあわせた断熱系のエントロピは減らない」。これを「系にする仕事は系の Helmholtz 自由エネルギの変化分より大きい」と言い換えたほうが、系の物理量が現れるだけなので便利だろう。フィードバック制御のもとで仕事をすることにしよう。以下では、制御される系をプラントということにする。プラントの物理量を測定し、これに基づいてプラントへの入力を変えるわけである。こうしても、プラントと熱浴と制御に関わるデバイスを含んだ断熱系を考えれば、熱力学第二法則は成り立ち、全体のエントロピは減らない。これをやはり、プラントにする仕事やその Helmholtz 自由エネルギ変化を使って言い換えられないか、というのが研究の動機である。

これは古くから考えられている問題である [1]。最近では、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かれ [2]、古典系の一回測定フィードバック系で Jarzynski 等式が拡張された [3]。複数回測定の場合にも研究されたが [4, 5]、特に線形フィードバック系に限れば、一回測定の場合とよく似た拡張ができる [6]。以下では、この結果の導出の概略を説明する。

2　プラントの時間発展

プラントが、温度 T の熱浴に触れているとする。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 $\boldsymbol{x}_k$ とする。これが、線形 Langevin 方程式

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = A_k\boldsymbol{x}_k + B_k\boldsymbol{u}_k + \boldsymbol{w}_k \tag{1}$$

に従うとする。入力 $\boldsymbol{u}_k$ は、状態変数を時刻 k まで測定して決める。熱雑音 $\boldsymbol{w}_k$ は白色で平均はゼロとする。通常の状況では、係数行列 A_k および B_k ならびに $\boldsymbol{w}_k$ 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は、$E(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{u}_{k-1})$ から $E(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{u}_k)$ に変わる。これは、外部がプラントにした仕事の結果である。式 (1) による（つまり順過程の）遷移確率を $P_{k+1|k}\,(\boldsymbol{x}_{k+1}|\boldsymbol{x}_k; \boldsymbol{u}_k)$ と書く。プラントの始状態は入力 $\boldsymbol{u}_0$ の下での平衡状態とする。終状態は入力 $\boldsymbol{u}_N$ の下での平衡状態とする。時間反転した変数を *

[1] E-mail: youhei@appi.keio.ac.jp

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。β を Boltzmann 定数と T の積の逆数として、各ステップでの詳細釣り合い

$$P_{k+1|k}\left(\boldsymbol{x}_{k+1}|\boldsymbol{x}_k;\boldsymbol{u}_k\right)e^{\ \ \beta E(\boldsymbol{x}_k,\boldsymbol{u}_k)} = \overleftarrow{P}_{k|k+1}\left(\boldsymbol{x}^*_k|\boldsymbol{x}^*_{k+1};\boldsymbol{u}^*_k\right)e^{\ \ \beta E(\boldsymbol{x}_{k+1},\boldsymbol{u}_k)} \ . \tag{2}$$

を仮定する。式 (1) が、この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、入力が変わらない場合はこの式は平衡のまわりのゆらぎも記述する。その帰結が、上記の local detailed balance である。

式 (2) をかけあわせていくことで、

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

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 自由エネルギの変化分であり、G と $\overleftarrow{G}$ は次で定義する：

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

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

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 $\boldsymbol{x}_{[0,N]} \equiv \boldsymbol{x}_0,\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N$ 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 $\boldsymbol{x}^*_{[0,N]}$ である確率密度を表すことになる。この場合、文献 [7] にあるようにして、

$$e^{\beta\Delta F}\langle e^{\ \ \beta W}\rangle = 1 \tag{6}$$

という Jarzynski 等式 [8] が導かれる。ここで $\langle\quad\rangle$ は統計平均をあらわすとする。

3　線形フィードバック系

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 [6]。各時刻の測定量を

$$\boldsymbol{y}_k = C_k\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}_k \tag{7}$$

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 $\boldsymbol{v}_k$ は白色とする。また、時刻 k における状態変数の推定量 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$ を、その時刻までの測定量 $\boldsymbol{y}_{[1,k]}$ に線形として、最小分散推定で求める。$k=1,2,\ldots,N\quad 1$ の入力を、各時刻での状態変数の推定量 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$ に比例するとする：

$$\boldsymbol{u}_k = \quad K_k\hat{\boldsymbol{x}}_k\ . \tag{8}$$

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 $\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^{(1)}_k + \boldsymbol{x}^{(2)}_k$ と分けて、それぞれが

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

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

を、$k = 0, 1 \ldots, N - 1$ で満たすようにする [9]。あわせると式 (1) が満たされることがわかる。はじめの $\boldsymbol{x}_0^{(1)}$ は決めてしまう。入力 $\boldsymbol{u}_0$ も決めておく。すると、$\boldsymbol{x}_1^{(1)}$ も決まる。式 (10) からわかるように、$\boldsymbol{x}_{[0,k]}^{(2)}$ は入力によらず、Markov 過程となる。さらに、$2 \le k \le N$ の場合、$\boldsymbol{y}_{[1,k-1]}$ が決まれば、$\boldsymbol{u}_{k-1}$ が決まり、$\boldsymbol{x}_k^{(1)}$ が決まる。したがって、$k = 1, \ldots, N - 1$ に対して、測定値 $\boldsymbol{y}_{[1,k]}$ が得られれば、

$$\boldsymbol{y}_k^{(2)} \equiv \boldsymbol{y}_k - C_k \boldsymbol{x}_k^{(1)} = C_k \boldsymbol{x}_k^{(2)} + \boldsymbol{v}_k \tag{11}$$

を計算することができる。

このようにして、測定値 $\boldsymbol{y}_{[1,k]}$ を得た時点で、確定した $\boldsymbol{y}_{[1,k]}^{(2)}$ の値を使って、$\boldsymbol{x}_k^{(2)}$ と $\boldsymbol{x}_{k+1}^{(2)}$ の推定量を計算することができる。時刻 $k = 0$ での $\boldsymbol{x}_1^{(2)}$ の推定量は、$\langle \boldsymbol{x}_1^{(2)} \rangle$ とする。$\boldsymbol{x}_{[0,k+1]}^{(1)}$ 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。わかりやすい解説は文献 [10] にある。

ある量の統計平均をとることは、そもそもは $\boldsymbol{x}_0$ と $\boldsymbol{w}_{[0,N-1]}$ および $\boldsymbol{v}_{[1,N-1]}$ に関して平均をとることだったが、これを $\boldsymbol{x}_{[0,N]}^{(2)}$ と $\boldsymbol{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ に関しての平均をとることと考えることもできる。$\boldsymbol{x}_{[0,N]}^{(2)}$ は、Markov 過程でない順過程から抜き出した Markov 過程である。こうして式 (4) と式 (5) を使って計算していくと、式 (6) の代わりに

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

を得る。ここで、$\mathcal{I}_2$ は、

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

で定義される。$P^{(2)}$ は上付き添字 $^{(2)}$ のついた過程に関わる確率密度を表す。式 (12) が、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、

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

を導ける。$\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ は $\boldsymbol{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ と $\boldsymbol{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の間の相互情報量である。式 (14) の等号成立条件は、すべてのゆらぎが無視できることである。

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

$$\sum_{k=1}^{N-1} \langle \boldsymbol{x}_{k+1}^T Q_{k+1} \boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{u}_k^T R_k \boldsymbol{u}_k \rangle \tag{15}$$

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 [9, 11]。

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

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

で計算できる [10, 12]。上式右辺はゲインに依らないので、ここで考えた枠組みでは、$\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ を最小にするような制御はできないことがわかる。

4　おわりに

通常の熱力学第二法則は $\langle W \rangle \qquad \Delta F$ と書ける。右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。一般に、情報を得れば確率が変わる。状態についてなんらかの情報があれば、左辺にある期待値の下限が変わるのは当然である。そこで、フィードバック系では、式 (14) に書き換わる、というわけである。この不等式では、過程の詳細に依る量が $\langle W \rangle$ と $\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ のふたつとなるので、仕事を最小にしようとしても、不等号が等号に近づくわけではない。静電的な力で荷電 Brown 粒子を、「一定時間に一定距離だけ一次元的に」、そして「する仕事が最小になるよう」最適制御をしながら動かす過程を数値的に検討してみると、不等号は等号からかけはなれて成立する [13]。どのような条件で不等号が等号に近くなるか、調和ポテンシャルにとらえられた Brown 粒子で現在調べている [14]。

謝辞: 鈴木博之氏との共同研究、沙川貴大氏および山本直樹氏との議論に感謝する。

References

[1] T. Sagawa, Prog. Theor. Phys. **127** (2012), 1.

[2] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **100** (2008), 080403.

[3] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **104** (2010), 090602.

[4] J. M. Horowitz and S. Vaikuntanathan, Phys. Rev. E **82** (2010), 061120.

[5] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. E **85** (2012), 021104.

[6] Y. Fujitani and H. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn **79** (2010), 104003.

[7] G. E. Crooks, J. Stat. Phys. **90** (1998), 1481.

[8] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78** (1997), 2690.

[9] W. M. Wonham, SIAM J. Control **6** (1968), 312.

[10] 有本卓, カルマンフィルタ (産業図書, 1977), 第 3,6 章.

[11] 椹木義一, 添田喬, 中溝高好, 確率システム制御の基礎 (日進出版, 1975), 第 4-6 章.

[12] S. Omatu, Y. Tomita, and T. Soeda, IEEE Trans. Information Theory **22** (1976), 593.

[13] H. Suzuki and Y. Fujitani, J. Phys. Soc. Jpn **78** (2009), 074007.

[14] H. Suzuki and Y. Fujitani, submitted.

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]

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻　泉田 勇輝[2]

本稿では近年注目を集めている熱機関の最大パワー時の効率を決定する問題の背景と最近の進展までを紹介する。

1　熱機関の性能：効率 vs.パワー

熱機関は温度T_hの高温熱源から受け取った熱Q_hの一部を仕事Wに変換する機械である。熱力学によれば、受け取った熱は全て仕事には変換されず、残りの熱$-Q_c = Q_h - W$を温度$T_c(<T_h)$のより低温の熱源に捨てる必要がある。すなわち熱の仕事への変換効率$\eta \equiv W/Q_h$は1とはならず、熱源の温度で決まる上限値（カルノー効率）$\eta \le \eta_C \equiv 1 - T_c/T_h$が存在することが知られている。このカルノー効率は熱機関が無限にゆっくりと動作する準静的極限で達成される。これは熱力学第二法則の一つの表現であり、エントロピー発見の契機となるなど重要な役割を果たした。一方で、準静的熱機関は単位時間当たりの仕事であるパワー（仕事率ともいう）$P \equiv W/\tau$がゼロとなってしまう。ここでτは熱機関が1サイクルに要する時間である。実際の熱機関からは有限の仕事だけでなく、有限のパワーも得られなければ意味がない。有限のパワーの熱機関は必然的に非平衡状態で動作する。効率やパワーなどの工学的な量と非平衡系の熱力学にはどのような関係があるだろうか。

2　Curzon-Ahlborn 効率と Finite-Time Thermodynamics

上記のような問題意識のもと、Curzon と Ahlborn は最大パワーで動作する熱機関の研究を行った[1]（彼らは熱力学の講義でこの研究のアイデアを得たようだ）。熱機関は実用的には最大パワーで動作するのが最も好ましい。彼らは Fourier の熱伝導則によって熱が流れると仮定し、また作業物質内部が一様な温度の平衡状態にあり不可逆性は熱源との熱のやりとりのみで発生するというシンプルな仮定（endoreversible approximation（内的可逆性）としばしば呼ばれる）のもと、最大パワー時の効率$\eta_{P\max}$を計算した。その結果、

$$\eta_{P\max} = 1 - \sqrt{\frac{T_c}{T_h}} \equiv \eta_{CA}$$

という非常に示唆的な公式を得ている。この効率は現在では主に Curzon-Ahlborn 効率と呼ばれており、カルノー効率のように熱源の温度だけで決まり、熱機関のデザインや作業物質の種類・熱伝導係数の値によらない点で注目に値する。そのシンプルな表現から Curzon-Ahlborn 効率は多くの研究者の興味を集め、「有限時間熱力学（Finite-Time Thermodynamics）」の名のもと、その後様々な熱機関モデルや熱伝導則を用いた同様な解析が行われている（例えば[2]参照）。ま

---

[1] 本稿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に基づいている

[2] E-mail:　izumida@daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp

た Curzon-Ahlborn 効率は H.Callen の有名な熱力学の教科書にも載るなど教育的題材としても扱われている[3]。一方で、もともとの導出における endoreversible approximation（内的可逆性）の仮定の物理的な妥当性など、Curzon-Ahborn 効率の一般性については分かっていなかった。

３　線形不可逆熱機関の提案と Curzon-Ahlborn 効率の一般性

Curzon-Ahlborn 効率の一般性を証明したのが 2005 年の Van den Broeck の論文[4]である。彼は熱源の温度差が小さい場合に線形 Onsager 関係式

$$J_1 = L_{11}X_1 + L_{12}X_2, \quad J_2 = L_{21}X_1 + L_{22}X_2$$

を用いて有限時間熱機関を記述することを提案した。ここで、熱力学的流れである $J_1 \equiv \dot{x}, J_2 \equiv \dot{Q}_h$ をそれぞれ運動流と（高温熱源からの）熱流として定義し、その共役な熱力学的力をそれぞれ $X_1 \equiv F/T_c \cong F/T$, $X_2 \equiv 1/T_c - 1/T_h \cong \Delta T/T^2$ と定義する。ここで F は x に共役な外力を、$T \equiv (T_h + T_c)/2$, $\Delta T \equiv T_h - T_c$ はそれぞれ平均温度と温度差を表す。L_{ij}'s は Onsager の（輸送）係数であり、時間反転対称性から相反関係 $L_{12} = L_{21}$ を仮定する。熱機関の個性はこれらの Onsager 係数 L_{ij}'s に含まれることになる。与えられた熱源の温度と Onsager 係数のもと、X_1 を変化させて最大パワーを探すことで、最大パワー時の効率 $\eta_{P\max}$ が

$$\eta_{P\max} = \frac{q^2}{2-q^2}\frac{\Delta T}{2T} \leq \frac{\Delta T}{2T}$$

と与えられる。ここで、$q \equiv L_{12}\big/\sqrt{L_{11}L_{22}}$ はカップリング係数と呼ばれ、エントロピー生成の非負性から $|q| \leq 1$ を満たす。不等式の上限値はタイトカップリング条件 $|q| = 1$ が成立する際に達成される。このタイトカップリング条件は運動流と熱流が比例することを意味する。この上限値は Curzon-Ahlborn 効率を温度差が小さいとして展開した際の線形項と一致している（$\eta_{CA} = \eta_C/2 + O(\eta_C{}^2) \cong \Delta T/(2T)$）。熱力学というマクロ系の普遍的な枠組みが熱機関の効率の上限値（カルノー効率）を決めるように、線形不可逆熱力学という線形非平衡系で成立する一般理論が熱機関の最大パワー時の効率の上限値（Curzon-Ahlborn 効率）を決定しているといえる。このように熱機関の個性によらず最大パワー時の効率の上限値が一般的に決定されたことは、Curzon-Ahlborn 効率が工学者のみならず理論物理学者にも注目される契機となった。

Izumida ら[5]は、理想気体を作業物質とする（有限時間）カルノーサイクルの Onsager 係数を計算してそれらがタイトカップリング条件を満たすことを示し、カルノーサイクルは上限値を達成するモデルであることを実際に証明した。この結果はコンピュータシミュレーションによるカルノーサイクルの数値実験とも整合している[5,6]。さらに、Van den Broeck[4]や Jiménez de Cisneros ら[7]は線形不可逆熱機関が結合して働く場合の最大パワー時の効率を議論し、タイトカップリング条件を満たす場合には、その値が厳密に Curzon-Ahlborn 効率となることも示している。これらの仕事によって、線形不可逆系の熱機関の最大パワー時の効率論は完成したと考えられている。

４　非線形不可逆熱機関への様々なアプローチ

温度差が小さい極限における熱機関の挙動は、線形不可逆熱力学とその枠組みである Onsager 関係式によって記述されうることをみた。一方で、より温度差が大きくなると非線形系の不可逆熱力学が必要となるがその一般理論は完成していない。そのためそこでの熱機関の効率論も一般的枠組みは存在しておらず、実際に最大パワー時の効率 $\eta_{P\max}$ は Curzon-Ahlborn 効率を上限値とせず、それより大きくも小さくもなりうる。しかしながら、いくつか興味深い枠組みは存在する。例えば Esposito ら[8]は、タイトカップリング条件にさらに左右対称性（left-right symmetry）と呼ばれるある種の空間反転に対する対称性が熱機関に存在する場合、最大パワー時の効率

$\eta_{P\max}$ は $\eta_{P\max} = \eta_C/2 + \eta_C{}^2/8 + O(\eta_C{}^3)$ となって温度差の２次の範囲まで Curzon-Ahlborn 効率と一致することを示した。また、Gaveau ら[9]は揺らぎの定理から出発して定常状態熱機関について、

$$\eta_{P\max} \le \frac{\eta_C}{2-\eta_C} \equiv \eta_+$$

が成立することを導いた。また Esposito ら[10]は、カルノーサイクルを有限時間で動作するモデルに拡張し、熱の準静的極限からの最低次のずれが熱源と接触している時間の逆数に比例すると仮定し、より高次のずれを無視したモデル（低散逸カルノーサイクルと呼ばれる）を提案した：

$$Q_h = T_h \Delta S - \frac{\Sigma_h T_h}{\tau_h} + \cdots, \qquad Q_c = -T_c \Delta S - \frac{\Sigma_c T_c}{\tau_c} + \cdots$$

ここで、ΔS は等温過程における作業物質の準静的なエントロピー変化、$\Sigma_h, \Sigma_c (>0)$ はエントロピー生成の強さを表す定数である。彼らはこのモデルの最大パワー時の効率 $\eta_{P\max}$ を計算し、その値がとりうる範囲には下限値と上限値があることを導いた：

$$\frac{\eta_C}{2} \le \eta_{P\max} \le \frac{\eta_C}{2-\eta_C}$$

ここで､下限値･上限値はそれぞれ､散逸の強さの比 Σ_c/Σ_h の非対称極限 $\Sigma_c/\Sigma_h \to \infty, \Sigma_c/\Sigma_h \to 0$ で達成される。ちなみに Curzon-Ahlborn 効率はこれらの中間に位置しており対称散逸 $\Sigma_h = \Sigma_c$ の際に成立する。また注目すべきことにこの上限値は Gaveau が得た η_+ と一致している。これらの普遍性の背後には何があるのだろうか。

５　非線形不可逆熱機関のミニマルモデル

我々は最近、Van den Broeck の理論[4]を拡張し、非線形不可逆熱機関を記述する“ミニマル”なモデルを提案している[11]。このミニマルモデルでは熱機関を

$$J_1 = L_{11}X_1 + L_{12}X_2, \quad J_2 = L_{21}X_1 + L_{22}X_2 - \gamma_h J_1^2$$

のような拡張された Onsager 関係式によって記述する。ここで熱流 J_2 に通常の Onsager 関係式にはないパワーの散逸率を意味する非線形項を新たに付け加えた。またこの他の“本質的に”非線形な応答を表す項はこのパワーの散逸率を表す非線形項に比べて十分に小さいと仮定して無視する。このモデルを“ミニマル”モデルと呼ぶのはここからきている。この非線形項は熱機関が有限時間で動作する際の不可避的なパワーの散逸率を表しており、電気伝導系における Joule 熱の一般化であると考えることもできる（ただし電気伝導系では周囲の環境は温度が一定であり温度差がない。そのため Joule 熱の効果はエントロピー生成率に関して熱力学的力の２次までに含まれる）。また低温熱源からの熱流 $J_3 = \dot{Q}_c = P - J_2$ を定義し、J_1 を使って J_2, J_3 を書き換えると、

$$J_2 = (L_{12}/L_{11})\,J_1 + L_{22}(1-q^2)X_2 - \gamma_h J_1^2, \quad J_3 = -(L_{12}T_c/L_{11}T_h)\,J_1 - L_{22}(1-q^2)X_2 - \gamma_c J_1^2$$

が得られる。ここで $\gamma_c \equiv T_c/L_{11} - \gamma_h > 0$ は低温熱源へのパワーの散逸率の強さを表す。各項はそれぞれ可逆的な熱輸送、熱漏れ（Fourier の熱伝導）、パワーの散逸率という物理的意味をもつことが分かる。パワー $P = J_2 + J_3 = L_{12}\eta_C J_1/L_{11} - (T_c/L_{11})J_1{}^2$ を J_1 について最大化すると、この時の最大パワー時の効率 $\eta_{P\max}$ は次のように与えられる：

$$\eta_{P\max} = \frac{\eta_C}{2}\frac{q^2}{2-q^2(1+\eta_C/(2(1+\gamma_c/\gamma_h)))}$$

ここで、$\gamma_c/\gamma_h \to \infty, \gamma_c/\gamma_h \to 0$ の非対称な散逸比の極限をとると、与えられた q のもとでの $\eta_{P\max}$ の下限値・上限値が以下のように求まる：

$$\eta_-^q \equiv \frac{\eta_C}{2}\frac{q^2}{2-q^2} \le \eta_{P\max} \le \frac{\eta_C}{2}\frac{q^2}{2-q^2(1+\eta_C/2)} \equiv \eta_+^q$$

さらにη_+^qは$|q|=1$の際に最大値η_+をとることも分かる。注目すべきことにこの値は、[9],[10]で導かれたものと一致している。実際に我々[11]（[12]も参照）は、低散逸カルノーサイクルのOnsager 係数$L_{ij}'s$と散逸の強さ$\gamma_i's$を解析的に計算することで、低散逸カルノーサイクルがタイトカップリング条件$|q|=1$を満たすことを示し、我々の理論の特殊な例となっていることを証明した。最近になって、このミニマルモデルは熱電対の数理モデル[13]とも実際に整合しており、一般性の高いものとなっていることが示されている。

６　まとめ

本稿では、準静的熱機関の問題点や Curzon-Ahlborn 効率はじめ熱機関の最大パワー時の効率に関する様々なアプローチについて紹介した。特に我々が提案した非線形不可逆熱機関のミニマルモデル[11]はこれらの中でも最も一般性のある理論であると考えられる。一方、“本質的に”非線形非平衡状態で動作する熱機関（例えば蒸気機関）はこれらの理論の枠組みには入らないと思われる。しかしながら、ミニマルモデルなどで得られている$\eta_{P\max}$の上限値η_+は、もしある熱機関の$\eta_{P\max}$がこれを超えていれば、その熱機関には何かしらの非線形応答が効いていることを意味するため、“リトマス試験紙”的な役割を果たすことが可能である。非線形非平衡熱機関の効率論の一般性を探ることは次の重要な課題である。

謝辞

本研究は科学研究費補助金(日本学術振興会特別研究員奨励費 22・2109）の助成を受けて行われた。

参考文献

[1] F. Curzon and B. Ahlborn, Am. J. Phys. **43** (1975), 22.

[2] A. Benjamin, *Advanced Engineering Thermodynamics* (Wiley, New York, 2005), 3rd ed.

[3] H. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (Wiley, New York, 1985), 2nd ed, Chap. 4.

[4] C. Van den Broeck, Phys. Rev. Lett. **95** (2005), 190602.

[5] Y. Izumida and K. Okuda, Phys. Rev. E **80** (2009), 021121.

[6] Y. Izumida and K. Okuda, EPL. **83** (2008), 60003.

[7] B. Jiménez de Cisneros and A. Calvo Hernández, PRL. **98** (2007), 130602.

[8] M. Esposito, K. Lindenberg and C. Van den Broeck, Phys. Rev. Lett. **102** (2009), 130602.

[9] B. Gaveau, M. Moreau and L. S. Schulman, Phys. Rev. Lett. **105** (2010), 060601.

[10] M. Esposito, R. kawai, K. Lindenberg and C. Van den Broeck, Phys. Rev. Lett. **105** (2010), 150603.

[11] Y. Izumida and K. Okuda, EPL. **97** (2012), 10004.

[12] 泉田勇輝, 物性研究 **96** (2011), 15.

[13] Y. Apertet, H. Ouerdane, O. Glavatskaya, C. Goupil and Ph. Lecoeur, EPL. **97** (2012), 28001.

モンテカルロ法に関する近年の話題について

東京大学大学院総合文化研究科　福島孝治 [1]

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．重点サンプリングには，多数の重み付き粒子で求めたい分布を表すポピュレーション型モンテカルロ法と，求めたい分布を定常分布とするマルコフ連鎖の構成するマルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法に大別できる．前者は時系列などの系列データ解析との形式的類似性から統計科学の分野で大きく発展してきた．一方，後者は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．ここでは，それ以降の近年のモンテカルロ法に関する話題を議論する．

近年，非平衡統計力学の分野の話題の一つに非平衡関係式の発見が挙げられる．非平衡関係式の一つである Jarzynski 等式は，非平衡過程での仕事の指数関数の統計平均が平衡自由エネルギー差と等号関係にあることを示している．この等式は非平衡統計力学の基本法則として捉えられると同時に，非平衡状態の計算から平衡状態の情報を効率よく引き出すための方法論の基礎として盛んに研究されている．特に，通常の MCMC 法では計算が困難とされる自由エネルギーの計算方法として化学物理の分野で注目された [1]．当然ながら自由エネルギーだけがこの方法の利点ではなく，任意の物理量の期待値計算も同様に可能である．実用的に使える方法として考察されたポピュレーション・アニーリング法 [2] はポピュレーション型モンテカルロ法に Jarzynski 等式を用いた例になっている．この方法は Ohzeki–Nishimori[3] によってスピングラス系において近年見出された非平衡関係式に適用することでランダムネスに関する非自明な情報を引き出せる可能性が示唆されている．また，非平衡関係式の MCMC 法への変わった応用として，交換法との結合法が提案されている [4]．交換法は複数の温度の系を同時に並列計算し，それらに詳細つり合い条件を満たすように交換過程を導入することにより緩和を促進させようする方法である．これまでにランダム系や生体シミュレーションなどに精力的に応用されている．大規模計算に適応するためには並列に計算する温度の数をできるだけ減らす必要があるが，素朴には交換確率は温度差の指数関数になるために，温度差を大きくすると実質的に交換しなくなる困難点がある．そこで，温度間隔を大きくしつつ交換確率を上げるために, 温度を入れ替えた系の計算を行い，その過程も含めた “正しい交換確率” を Jarzynski 等式を用いて評価しようとしている．この方法は提案されて以来，大規模計算への応用がされていないようであるので今後の検討が待たれている．

[1]E-mail: hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp

ここでとりあげるもう一つの話題は MCMC 法の設計問題である．MCMC 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[5] により，従来用いられてきた詳細つ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．詳細つり合い条件はマルコフ連鎖の収束性を保証するための必要条件ではなく，十分条件であり，効率のよさを考えたときに，詳細つ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る．また，改めて MCMC 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，Glauber の動的一次元イジング模型について，詳細つり合い条件を破ることの動力学への影響を研究した [6]．詳細つり合い条件の破り方の自由度は大きいが，我々は Turitsyn ら [7] のタイプのねじれ詳細つり合い条件に注目した．彼らの方法では系に仮想的な磁場の方向を表す付加的なイジングスピン ($\epsilon = \pm 1$) を導入する．ねじれ詳細つり合い条件とは，例えば $\epsilon = 1$ のときのスピンフリップに伴う確率流が $\epsilon = -1$ での逆過程の確率流とつりあうことを要請する．さらに，仮想スピンの状態遷移と合わせてつり合い条件を満たすようにする．これでもまだ遷移確率には自由度が残るが，このタイプに属するいくつかの遷移確率を構成した．その中で，ある遷移確率について，熱力学極限における磁化密度の時間発展が閉じた方程式で記述されることを見出し，その結果，緩和時間 τ が $\tau = \frac{\tau_{\mathrm{Glauber}}}{1+\beta^2}$ となることを示した．ここで，τ_{Glauber} は元々の動的イジング模型の緩和時間であり，β は詳細つり合い条件の破れを特徴づける変数である．詳細つり合い条件を破る ($\beta \neq 0$) と緩和時間が短くなることが解析的に示されたことになる．可解でない遷移確率に対しても，詳細つり合い条件を満たす遷移確率が局所的に大きな緩和時間を与えることを示唆する結果を得ている．一次元イジング模型という特別な模型を越えてこの性質が成り立つかどうかは興味深い今後の課題である．

本研究は，酒井佑士氏との共同研究である．

参考文献

[1] C. Chipot and A. Pohorille (Eds.), *Free energy calculations*, Springer Series in Chemical Physics **86** (2007), Springer-Verlag Berlin.

[2] K. Hukushima and Y. Iba, AIP. Conf. Proc. **690**, (2003) 200.

[3] M. Ohzeki and H. Nishimori, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, (2010) 084003.

[4] A. J. Ballarda and C. Jarzynski, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **106** (2009), 12224.

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

[6] 酒井佑士, 卒業論文「詳細つり合い条件を満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法の 1 次元イジングモデルにおける緩和時間の評価」，東京大学教養学部基礎科学科 (2012).

[7] 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

東京大学 工学系研究科物理工学専攻　諏訪 秀麿 [1]

マルコフ連鎖モンテカルロ法において遷移確率の最適化は計算効率を大きく左右する。我々は代数的問題を幾何学的問題に焼き直すことで新しい最適化法を考案し、平均棄却率を必ず最小化することに成功した。その結果、例えばポッツ模型や量子スピン模型において、メトロポリス法等の従来の手法と比較し数倍から 100 倍程度計算効率が向上した。我々の手法は、詳細つりあいを破りながら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であり、連続変数系にも広く応用可能である。

1　マルコフ連鎖モンテカルロ

モンテカルロ法は物理・数学・化学・情報等の多分野で広く用いられている汎用数値手法であり、確率的に状態をサンプルすることで直接計算が困難な和や積分を求めることができる。中でもマルコフ鎖を構成しながら重要度サンプリングを行うマルコフ連鎖モンテカルロ法は、物性物理等で重要となる多体問題に対する強力な解析手段となっている [1]。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。次の状態は前の状態を引きずって確率的に定まるので、互いに独立ではないのである。この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。求めたい物理量をどのアンサンブルから抽出するかという観点からの改良として、交換法やマルチカノニカル法等の拡張アンサンブル法が挙げられる [2]。2 つ目は遷移先状態候補の選択であり、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。前者は状態変数の変換を行いながら大域的な更新を可能とし、後者は人工的な運動量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 つ目が本研究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が、これらは実は最適ではない。

2　遷移確率の最適化

それでは「最適」な状態更新法とはどのような量ではかられるのであろうか。マルコフ連鎖モンテカルロ法におけるマルコフ鎖の性能は 2 つの基準から議論できる。ひとつは分布収束の速さで、収束 (緩和) が速ければサンプリングを早く開始できる。もうひとつは漸近分散の大きさで、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

[1]現在ボストン大学物理 (Department of Physics, Boston University) 所属。
E-mail: suwamaro@looper.t.u-tokyo.ac.jp

遷移行列と一対一に対応し、遷移行列の固有値が上記の基準と結びつく。ここで分布収束は第 2 固有値の絶対値の大きさで決まるが、一方漸近分散には全固有値が効いてくる。これまで遷移行列の最適化がいくつか数学的に議論されており、例えばメトロポリス化したギブスサンプラーは多くの場合で単純な熱浴法よりサンプル効率が高くなる [3, 4]。

3 幾何学的重みの割り当てアルゴリズム

しかしそもそもモンテカルロ法が必要となるような広大な状態空間で全遷移確率を調整して最適な遷移行列を構成することは実質的に困難である。そこで局所的な状態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方針なのだが、この局所的遷移確率の最適化も全く非自明な問題である。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) 棄却率を必ず最小化する遷移確率決定法を考案した [5–7]。主要なアイデアは、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」問題に置き換えるというものである。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 [5]。

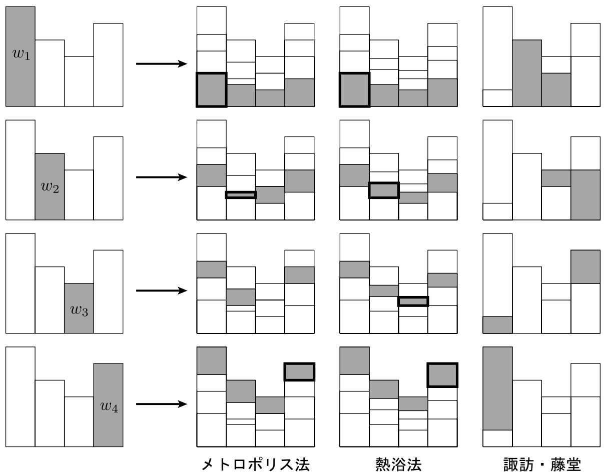


図 1: 遷移候補数 $n = 4$ の場合の例。我々の手法 [3] では棄却率がゼロになる。

以下、そのアルゴリズムを説明する。マルコフ連鎖モンテカルロ法では局所的な状態更新を繰り返す。今、あるひとつの離散変数を更新するとしよう。遷移状態候補の数を n、それぞれの重みを $w_i (i = 1, 2, ..., n)$ とする。以下にその具体的な手続きを述べる (図 1 参照)。

1. 遷移状態候補の中で最大の重みのものを選ぶ。複数ある場合はそのうちの 1 つを選ぶ。以下ではその重みを w_1 とする。残りの順序は任意でよい。

2. 最大重み w_1 を次の箱 $(i = 2)$ に割り当てる。さらに余りを次の箱 $(i = 3)$ に割り当てる。余りがなくなるまで続ける。

3. 最初に埋め立てられた箱 $(i = 2)$ の重み (w_2) を、ステップ 2 の続きに割り当てる。同様に余りがなくなるまで続ける。

4. 残りの重み $w_3, w_4, ..., w_n$ についてもステップ 3 を順番に繰り返す。一度 $i \geq 2$ の全ての箱が埋め立てられたら、その後は最初の箱 $(i = 1)$ に割り当てる。

この手順によって j 番目の箱に割り当てられた w_i の重みを $w_{i\to j}$ とし、遷移確率を $p_{i\to j}=w_{i\to j}/w_i$ と決める。その結果、欲しい平衡状態が不変となる制約の範囲内で平均棄却率が必ず最小化され、多くの場合に完全にゼロとなる。イジング模型の単一スピン更新のように状態候補数 $n=2$ のとき、このアルゴリズムはメトロポリス法と同じ遷移確率を与えるが、$n\geq 3$ ときは既存の手法より棄却率が小さくなる。

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での単一スピン更新を使って調べた。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。例えば 4-状態ポッツ模型では、臨界点直上でメトロポリス法より 6 倍以上相関時間が短くなる (図 2 はビンニング解析 [8] を用いて求めた自己相関時間の比較)。また磁場中の反強磁性量子ハイゼンベルグ鎖では、磁化の相関時間が熱浴法より 100 倍以上短くなる [5]。さらに別の割り当てアルゴリズムを用いると、詳細つりあいを満たしながらも棄却率を最小化することも可能である [7]。

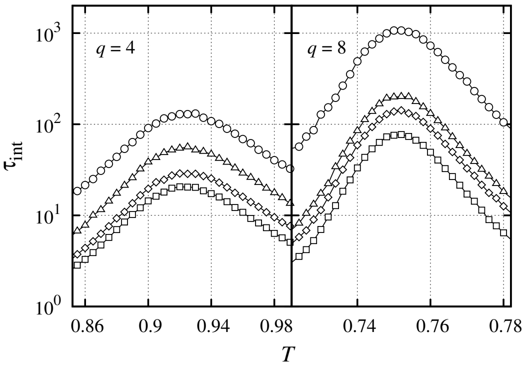


図 2: 正方格子 q-状態強磁性ポッツ模型 ($q=4, 8$) の構造因子の自己相関時間。メトロポリス法 (◯)、熱浴法 (△)、逐次的メトロポリス化ギブスサンプラー [3](◇)、我々の手法 [5](□) の結果を示す。転移温度はそれぞれ $T\simeq 0.910, 0.745$。格子サイズは 16×16。

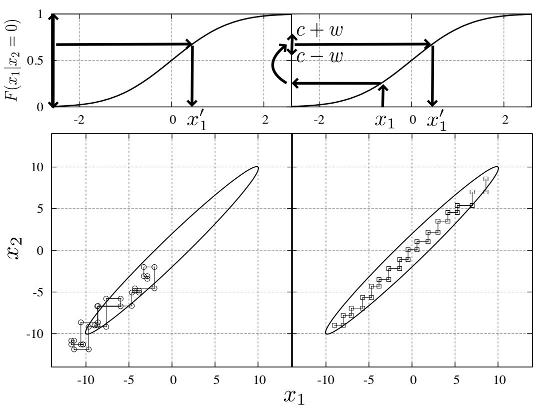


図 3: 傾いた 2 変量正規分布 ($\sigma_1=1,\sigma_2=10$) での、熱浴法 (左) と我々の手法 (右, $c=0.4, w=0.1$) [6] による状態の軌跡。上は条件付き累積分布関数を用いた状態更新の手順。

4 連続変数への拡張

上記の割り当てアルゴリズムを重みの累積分布関数における周期的シフトとして捕え直すと、自然に連続変数へ拡張できる。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 [6]。簡単な例として、2 変量正規分布 $P(x_1,x_2)\propto\exp(-(x_1-x_2)^2/2\sigma_1^2-(x_1+x_2)^2/2\sigma_2^2)$ を考えよう。x_2 が与えられたとき、x_1 の条件付き累積分布関数

$$F(x_1|x_2)=\int_{-\infty}^{x_1}P(x|x_2)\,dx \qquad (1)$$

を用いて、遷移先を

$$x_1'=F^{-1}(\{F(x_1|x_2)+c+wu\}) \qquad (2)$$

と決めることにする。ここで c, w は $c \geq w$ を満たす正の実数のパラメータ、u は区間 $[-1, 1)$ で一様分布する (疑似) 乱数である。また記号 $\{a\}$ は実数 a の小数部分を表す。$c = w = 1/2$ の場合は、通常の熱浴法に帰着する。一方、$\{c\} \neq 0$, $1/2$ の場合、この状態更新は詳細つりあいを満たさない。2 つの更新法の比較を図 3 に示す。右図の奇跡を見ると、詳細つりあいの破れにより正味の確率流が導入され、効率良く状態を探索できていることがわかる。

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・ヘイスティング法が用いられてきた。ここで棄却が手法のボトルネックとなる。我々はうまく複数の状態候補を生成し、離散変数の場合と同様の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 [9]。

5　まとめと今後の展望

本研究で我々はこれまであまり注目されてこなかった遷移確率の最適化に注目し、より計算効率の高いマルコフ鎖の構成に成功した。我々の手法は冒頭で述べたように効率化のための 3 番目の点の改良であり、他のモンテカルロ法 (拡張アンサンブル法やハイブリッドモンテカルロ法) と組み合わせることも可能である。今後、さらなる最適化法の開発や計算効率の詳細な解析、また組み合わせ法の性能評価を行うことが重要であろう。

謝辞

本研究に関して、藤堂眞治先生には多くの助言をいただきました。また宮下精二先生、川島直輝先生、伊藤伸泰先生、求幸年先生、福島孝治先生、原田健自先生には大変有意義な議論をさせていただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

参考文献

[1] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge 2nd edition (2005).

[2] 伊庭幸人, 他: 『計算統計 2 マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺』(岩波書店, 2005)

[3] A. Frigessi, C.-R. Hwang, L. Younes, *Ann. Appl. Probab.* **2** (1992), 610-628.

[4] C.-R. Hwang *Cosmos* **1(1)** (2005), 87.

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

[6] 諏訪 秀麿，藤堂 眞治，日本物理学会誌 **66** (2011), 370.

[7] H.Suwa and S. Todo, arXiv:1106.3562; to be published in *Monte Carlo Methods and Applications*

[8] B. A. Berg, *Introduction to Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*, Singapore University Press, (2005) Chap. 1, pp. 1-52.

[9] H. Suwa, Ph.D. Thesis; to be published in *Springer Theses 2011*

非平衡系，生命，情報の関係
— 計数統計の視点から —

京都大学 大学院情報学研究科　大久保 潤 [1]

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超えることがない，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はアデニン，チミン，グアニン，シトシンと呼ばれる分子の並び方，すなわちパターンをもっている．そのパターンからmRNAを媒介にして，最終的にタンパク質が生成される．さらに，タンパク質は高次構造をとりながらさまざまな機能を発現する．その意味で，DNAは生命に欠かせない機能を生み出すための情報を担っていると考えられる．しかし，DNAだけに着目すれば，ただの高分子であり，ただの物質である．DNAに存在するパターンが解釈されて初めてタンパク質が作られる．したがって，パターンだけでは情報とは言えず，解釈されて初めて情報になるのだ，と考えることもできるだろう．しかも，DNA分子にDNA分子をぶつけても，mRNAが生成されることはない．DNA分子にRNAポリメラーゼが適切に作用することで，mRNAが生成される．つまり，どのように解釈されるかによっても，情報となるかどうかが決まるとも言える．

次に，タンパク質の高次構造を例に取り上げてみる．情報科学的なアプローチでは，ホモロジーモデリングによってアミノ酸配列からタンパク質の高次構造を推定することができる[2]．一方，実際の生物の中では，シャペロンを利用するなどしてタンパク質の高次構造が作られる．明らかに，ホモロジーモデリングで結果を推定することと，実際に生命

[1]E-mail: ohkubo@i.kyoto-u.ac.jp

の中で行われている情報の処理について理解することとは別物である．実際，前者と後者はそれぞれ

- 生命に関わるパターンについて，人間が解釈する
- 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

に対応しており，これらの区別が必要であることがすでに指摘されている [3]．パターンの生成過程については物質，すなわち「モノ」を扱う物理学で研究することができる．パターン間の類似性に基づく結果の推定については情報，すなわち「コト」を扱う情報科学で研究することができる．そして生物学が目指していることのひとつは，生命がパターンを解釈する様子を理解することである．その方向へと研究を進めるためには，パターン間，すなわち状態間の遷移のダイナミクスである「過程」を扱う必要がある．

ここで，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，という問いに戻ってみるならば，非平衡系の物理学はまさに「過程」に着目した研究を実施しているのだ，と答えられるだろう．以下では，この「過程」ということについて，簡単なモデルを用いながらもう少し詳しく説明してみる．

図 1 には，粒子のホッピングのモデルを示した．両側に巨大な粒子浴が接続されたコンテナがある．コンテナは粒子を一つしか受け入れることができず，コンテナが空の時にのみ，どちらかの粒子浴から粒子が移動してくる．このモデルの時間発展がマルコフ的だとすれば，コンテナの状態変化は次のマスター方程式で記述できる．

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} p_{\mathrm{e}} \\ p_{\mathrm{f}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 - k_{-2} & k_{-1} + k_2 \\ k_1 + k_{-2} & -k_{-1} - k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{\mathrm{e}} \\ p_{\mathrm{f}} \end{bmatrix}. \tag{1}$$

ここで，p_{e}，p_{f} はそれぞれコンテナに粒子が入っていない状態と入っている状態の確率，$k_i (i \in \{1, -1, 2, -2\})$ は粒子の移動に関する推移率である．

このモデルにおいて「[L]$\Rightarrow$ コンテナ $\Rightarrow$[L]」という粒子の移動を考えた場合，コンテナの状態は空の状態から始まり，最終的に空の状態で終わる．よってコンテナの状態は最初と最後で変化はない．また粒子も [L] から出て [L] に戻るので，全体としても変化はない．では，「[L]$\Rightarrow$ コンテナ $\Rightarrow$[R]」という粒子の移動ではどうか．コンテナの状態はやはり最初と最後で変化はないが，粒子は [L] から [R] へと移動している．式 (1) を用いてコンテ

図 1: 粒子のホッピングのモデル．

ナの状態変化のみに着目している限り両者の区別はつかないが，非平衡系で着目すべきは [L] と [R] の間の粒子のやり取りである．すなわち，どのような状態にいるかに着目するのではなく，どのような過程が生じたかに着目するのである．

もちろん，状態と過程は切り離せるものではない．そして上記の例では，ある意味において，実際に状態と過程をつなぐことができる．すなわち，(完全) 計数統計と呼ばれる枠組みを利用することで，式 (1) の遷移確率行列を少しだけ変更することによって，非常に簡単に遷移の統計性を計算するための時間発展方程式が得られる [4]．例えば，コンテナと [R] との粒子のやり取りを数える場合を考える．t 時間にコンテナから [R] へ移動した粒子の個数を N をすると ([R] からコンテナに移動した粒子の方が多い場合には N は負の値をとる)，この遷移に関するすべての統計性は母関数

$$F(\lambda, t) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \lambda^N P(N|t) \tag{2}$$

から計算できる．なお，$P(N|t)$ は N 個の粒子がコンテナから [R] へ移動する確率である．そして計数統計の枠組みを用いると，母関数が以下のように計算できる．

$$F(\lambda, t) = f_{\mathrm{e}}(\lambda, t) + f_{\mathrm{f}}(\lambda, t), \tag{3}$$

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} f_{\mathrm{e}} \\ f_{\mathrm{f}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 - k_{-2} & k_{-1} + \lambda k_2 \\ k_1 + \lambda^{-1} k_{-2} & -k_{-1} - k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{\mathrm{e}} \\ f_{\mathrm{f}} \end{bmatrix}. \tag{4}$$

マスター方程式 (1) の遷移行列と，式 (4) の行列の部分を見るとわかるように，遷移行列の非対角項において数えたい遷移に関わる部分を修正するだけで，母関数を計算するための時間発展方程式が得られる．つまり，状態を記述する方程式と過程を記述する方程式の間に，非常に単純な対応関係が存在するのである．

着目した遷移に関する統計性を数値的に計算するのは簡単である [5]．しかし，さらに理解を進めるためには，適切な数理的方法論 [6] を探す必要があるだろう．実は前述した計数統計の文脈では，周期摂動によるポンプカレントと呼ばれる現象や分子モータなどの研究において，幾何学的位相という数理的概念を利用できることが知られている [7, 8]．さらに，周期摂動に対する幾何学的位相の議論は非周期の場合にも拡張できるほか [9]，幾何学的描像と非平衡定常系におけるエントロピー生成の関係についても議論されている [10]．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が，状態と過程の接点に数理的方法論で迫ることが可能かもしれないこと，そこに生命と情報の関係に関わる何かを見出だすことが可能かもしれないこと，といった期待を持てる．

当然のことながら，生命の理解には非平衡系の研究だけが本質である，ということではない．例えば情報科学の問題としてパターンと機能の関係を調べることも，そして情報という視点とは関係なく生体分子の物質としての性質を調べることも大切である．どれが重要であるかはわからないが，少なくとも学際的な研究のためには研究の位置づけや目的を明確にしておくべきだろう．このことにより，他分野の研究者との会話が円滑になった

り，新しい研究テーマの創出につながったりすることもあるのではないか．そして，具体的な問題に地道に取り組むこと，数理的方法論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．

参考文献

[1] 大沢文夫, 物性研究 **87**, 362 (2006).

[2] 阿久津達也, “バイオインフォマティクスの数理とアルゴリズム” (共立出版, 2007).

[3] 金城玲, 生物物理 **50**, 166 (2010).

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

[5] J. Ohkubo and T. Eggel, J. Stat. Mech. P06013 (2010).

[6] 甘利俊一, 科学 **77**, 348 (2007).

[7] N.A. Sinitsyn and I. Nemenman, Europhys. Lett. **77**, 58001 (2007).

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

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

[10] 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

ATR 脳情報解析研究所　　兼村 厚範[1]

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、数百個のセンサには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 程度であり、神経細胞の分布密度に比べれば非常に粗い [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]、時間的連続性 [3] 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 [4]。

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

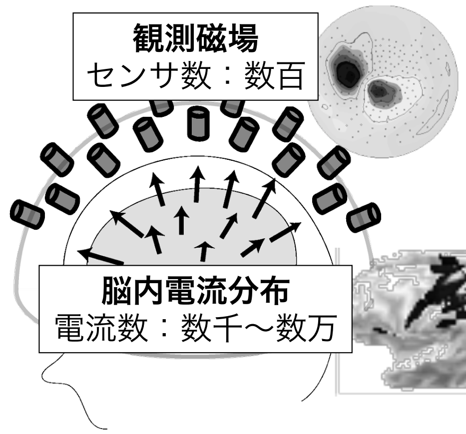


図 1: 磁場計測と電流逆推定。矢印は電流を、円筒は磁気センサを表す。

[1]E-mail: atsu-kan@atr.jp

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。

我々は、オンライン変文ベイズ推定 [5] を MEG 逆問題に適用した、オンライン MEG 逆推定法を開発している。変分ベイズ推定は、十分統計量の繰り返し計算に帰着されるため、その計算を再帰的に実行することでナイーブなオンライン変分ベイズ推定法が得られる [6, 7]。しかし、ナイーブアルゴリズムは収束性に難があることが知られており、それを改善した割引オンライン変分ベイズ推定法 [5, 8] が提案されている。割引オンライン変分ベイズ推定法を MEG 逆問題に適用することで、新たな脳活動源の出現や脳活動源の消失に対して適応的な推定ができることが分かった。

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. Hämäläinen, R. Hari, R. J. Ilmoniemi, J. Knuutila, and O. V. Lounasmaa, Rev. Mod. Phys. **65** (1993), 413.

[2] M. Sato, T. Yoshioka, S. Kajihara, K. Toyama, N. Goda, K. Doya, and M. Kawato, NeuroImage. **23** (2004), 806.

[3] M. Fukushima, O. Yamashita, A. Kanemura, S. Ishii, M. Kawato, and M. Sato, IEEE Trans. Biomed. Eng. **59** (2012), 1561.

[4] A. Toda, H. Imamizu, M. Kawato, and M. Sato, NeuroImage. **54** (2011), 892.

[5] M. Sato, Neural Comput. **13** (2001), 1649.

[6] Z. Ghahramani and H. Attias, NIPS 2000 Workshop Online Learning. (2000).

[7] M. J. Beal, Variational Algorithms for Approximate Bayesian Inference. Ph.D. Thesis, (2003), 71.

[8] A. Honkela and H. Valpola, Int. Symp. Independent Component Analysis and Blind Signal Separation (ICA). (2003), 803.

個体発生における多細胞組織の変形の力学的制御

― 細胞集団内の力場を推定する ―

東京大学大学院総合文化研究科 石原 秀至[1]
京都大学物質-細胞統合システム拠点 杉村 薫

１　はじめに

動物の発生過程では、組織が伸びる、折れ曲がるといった変形を繰り返すことで、成体の複雑、かつ、機能的な形態が獲得される。この過程において、多細胞組織を構成する個々の細胞が生み出す「機械的な力」が変形を駆動する。一方で、組織の変形は力の場を変える。従って、力と変形の間の循環的な作用から成体のかたちが生み出される過程の物理的な理解は、生物学における非常に重要で未解決の問題の１つである。近年、細胞間のおしあいへしあいの力やそれを生み出す分子の局在・活性の測定から、個体発生の力学的な制御を理解することが試みられるようになってきた[1−4]。しかし、単細胞系において力や一分子動態の計測技術の進歩が著しいのとは対照的に、生体内においてそれらの計測は非常に困難であることから、先行研究のほとんどでは、張力を生み出すアクトミオシンの細胞内分布、アクトミオシン系の局所的な破壊に対する応答の強さ、組織や細胞の変形テンソルなどの間接的／局所的／侵襲的な解析から、力の分布が議論されるにとどまっている。そこで我々は、細胞の形態をもとに力の釣り合い方程式をたて逆問題を定式化することで、細胞集団の応力場の動態を可視化する手法を開発した[5]。

２　細胞集団にはたらく力学の推定

2.1　　細胞集団にはたらく力

ショウジョウバエの翅などの単層の上皮組織では、シート状に並んだ細胞がアドヘレンスジャンクション面で接着分子を介して連結している。加えて、アドヘレンスジャンクション面の細胞内裏打ち構造として、細胞膜にそってアクトミオシンケーブルが走っている (図 1A)。この系は二次元構造として扱うことができ、各々の細胞の圧力と細胞接着面上で働く張力の釣り合いによって細胞の形態が決まると考えられている（図１B-C)。特に張力にはアクトミオシンケーブルの収縮力が寄与しており、二光子レーザーを用いて局所的にアクトミオシンケーブルを切断すると、応答として切断された細胞接着面の頂点が離れるように動く様子が観察される[2]。このとき、レーザー切断への応答が大きければ、正の（contracting）強い張力が働いていたと推察できる（侵襲的な測定であり、また、一度の測定で１つの細胞接着面の張力しか測定することができないことに注意)。

1　E-mail: shuji@complex.c.u-tokyo.ac.jp

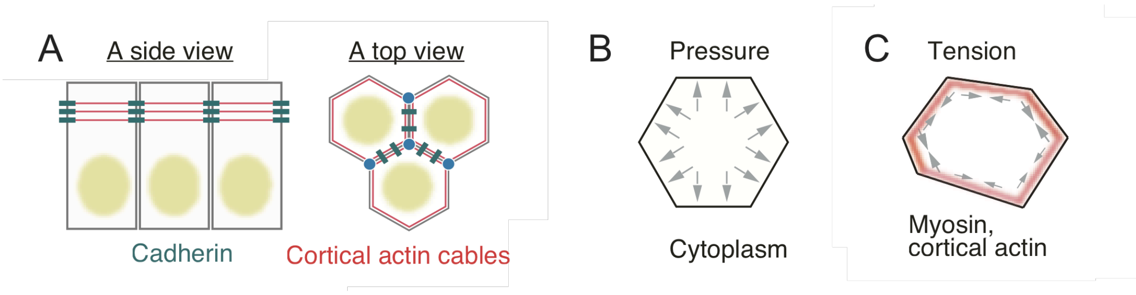


図１　A 翅上皮組織の模式図。アクチンケーブルが細胞内を膜にそって走っている　B,C 上皮組織に働く力。個々の細胞の圧力(B)と細胞接着面の張力（C）の釣り合いによって細胞の形態が決まる。

2.2　経験ベイズ法に基づいた定式化

細胞の形態をポリゴンで表し、各細胞の圧力 P_i, 細胞接着面に作用する張力を T_j とおくことにより、各結節点にはたらく力の釣り合いを考える。この釣り合い方程式は未知数 $\mathbf{p} = (\mathbf{P}, \mathbf{T})$について線形方程式となる（係数行列 A は結節点の相対位置のみから決まる)。ただし、釣り合い方程式の数（結節点数×2）は一般に未知変数（細胞数＋細胞接着面数）より少ない。この不定性は、静水圧と境界条件が未知であることに由来する(実際､N 個の細胞が R 個の細胞に囲まれており、F 個の４重結節点がある場合には、 R + F + 1 個の不定性があることをトポロジーの議論から示すことができる)。したがって、静水圧成分を無視し、圧力に関しては細胞間の差のみを考慮するとしても、残りの R + F 個の不定性をどう取り扱うかという問題が残る。

そこで本研究では、経験ベイズ法に基づいて逆問題を定式化した。経験ベイズは、多くの逆問題に対して推定の妥当性の理論的基盤を与えている[5]。先行研究や我々自身のレーザー切断実験から、ほとんどの場合、細胞接着面の張力は正であることが知られているので、事前分布として平均値 T_0、分散 Σ^2 のガウス分布をおき（スケールの任意性から $T_0 = 1$ ととることができ、Σ^2 はハイパーパラメータとして経験ベイズの枠内で決定する)､尤度関数を釣り合い方程式から決めた。これから求まる事後分布の最大値から圧力､張力の推定値を決める。ハイパーパラメータは、周辺尤度の最大化から求めた（この値が観測データと系に対する期待の「バランス」を決める)。以上から、細胞の画像データから細胞の圧力、細胞接着面の張力を推定する手法を構築した。得られた値を積分してストレステンソルを計算することで、細胞集団の力場の最大方向などを見積もることができる。

３　結果

多細胞の力学モデルを用いて数値的に作成したデータを用いた試験を行うと、力の真の値と推定した値はよく合っていた[5]。L2 正則化、もしくは空間的な滑らかさを期待する事前分布に基づいた推定についても同様の試験を実施したが、張力が正であることを期待する事前分布に基づく推定が最もよい結果を出すことを確認した。次に、蛹期のショウジョウバエの翅にこの手法を適用し、張力の推定値とレーザー切断への応答の強さ（切断された細胞接着面の頂点の初速）を比較した。その結果、両者は相関係数 0.86 と高い相関を示し、我々の

手法が生体組織における張力の妥当な推定値を与えることを確認した。ここでは詳細を省略するが、種々の解析の結果と合わせて、我々が開発した力の推定手法が上皮組織における応力場の分布の解析に有効であると示すことができた。

力推定手法を用いて、ショウジョウバエ翅発生過程における応力場のパターンを系統的に調べた結果、翅の遠近軸方向に強い張力が働いていることを見出した。このとき、張力を生成するミオシン分子も遠近軸方向に偏った細胞内分布を示していた。

４　まとめ

上述のショウジョウバエ翅形成過程の解析からは、張力･ミオシンの分布と細胞の形態の間に、「張力が強い方向に細胞が長くなる」という一見整合的でない結果が現れる。 実はこの系では、組織が外からの引っ張りを受けており[7]、異方的な外力が上述の張力分布と細胞形態変化の不整合を説明する。さらに、我々は、細胞配置換え過程における力の動態の詳細な解析から、別のモデル系を用いて提唱されてきた「ミオシンが細胞配置替えを駆動する」というメカニズムが、翅では働いていないことを明らかにし、翅全体の力のバランスが細胞配置の六角格子化を促進するという新規メカニズムを同定している。講演ではこれらの結果についても紹介した。今後は、力推定手法による細胞集団の物性の定量的な解析から、個体発生の力学制御の包括的な理解を深めていきたい。

謝辞

上村匡氏（京都大学)、宮脇敦史氏（理研 BSI)、金子邦彦氏（東京大学）の支援に感謝いたします。この研究の遂行にあたって、JST さきがけ、理研研究奨励ファンド、文部科学省科学研究費の支援を受けました。

参考文献

[1] Bertet, C., Sulak, L., and Lecuit, T. (2004). Myosin-dependent junction remodeling controls planar cell intercalation and axis elongation. Nature *429*, 667-671

[2] Rauzi, M., Verant, P., Lecuit, T., and Lenne, P.F. (2008). Nature and anisotropy of cortical forces orienting *Drosophila* tissue morphogenesis. Nat. Cell. Biol. *10,* 1401-1410.

[3] Krieg, M., et al. (2008). Tensile forces govern germ-layer organization in zebrafish. Nat. Cell. Biol. 10, 429-436.

[4] Classen, A-K., Anderson, K.I., Marois, E., Eaton, S. (2005).Hexagonal packing of *Drosophila* wing epithelial cells by the planar cell polarity pathway. Dev. Cell *9* 805-817.

[5] Sugimura, K. Uemura, T., Miyawaki, A., Kaneko, K. and Ishihara, S. in revision.

[6] 石黒真木夫, 松本隆, 乾敏郎, 田邉國士「階層ベイズモデルとその周辺」第 I 部、補論 岩波書店　統計科学のフロンティア 4 (2004)

[7] Aigouy, B., Farhadifar, R., Staple, D.B., Sagner, A., Röper, J.C., Jülicher, F., and Eaton, S. (2010). Cell flow reorients the axis of planar polarity in the wing epithelium of *Drosophila*. Cell *142,* 773-786.

カオスの縁を超えて[1]

― カオスの縁とその付近における神経回路網の信号増幅および信号積分 ―

独立行政法人理化学研究所脳科学総合研究センター　豊泉太郎[2]

ランダムな結合によって細胞間の信号を伝達をする神経回路網は、その結合の強度に応じて、静的な状態（固定点領域）から動的な状態（カオス領域）へ相転移を起こすことが知られている。そのような転移点、「カオスの縁」、付近においては信号の増幅率が高く回路網の時定数が長いという情報表現に関して有益な性質が報告されている。しかし、従来から研究が進んでいる固定点領域では、結合強度の値が転移点での値から離れるに従って急速にこれらの性質が失われるために、パラメータの微調整が必要不可欠であった。本研究では神経活動の観測の精度が有限であることと、神経細胞の持つ非線形性に関する特定の条件の下で、結合強度の調整が固定点領域よりもカオス領域においてより容易であり、より高精度の情報表現が可能であることを示す[1]。

1　モデルと解析

本研究では簡単のために以下の離散時間ニューラルネットワークを解析した。

$$h_i(t+1) = \sum_{j=1}^{N} J_{ij}\phi\Big(\theta(t) + h_j(t)\Big)$$

ここで $h_i(t)$は素子 i の時刻 t における状態変数、$\theta\ (t)$時刻 t における外部からの入力、N は素子数、ϕ は入出力非線形関数、J_{ij} は素子 j から素子 i への結合強度で平均 0 分散 g^2/N のガウス分布から独立に選ばれるとする。変数 g は相互作用の強度を表すパラメータで、この値が小さい場合状態変数は固定点に収束し、この値が大きい場合状態変数はカオスアトラクターに収束することが知られている[2,3]（図１）。本研究では観測にノイズのある状況下で $O(N^{1/2})$個の素子の状態変数の線形和を最適に選んで観測した場合、どの程度の精度で過去の外部入力の値を推定可能かを観測のシグナル・ノイズ比を評価することで解析的に計算した。その結果、シグナル・ノイズ比は固定点解からカオス解への相転移が起きる臨界点直上で発散し、さらにその臨界点付近での振る舞いは系の詳細によらない臨界指数を用いて特徴づけられることが分かった[1]。個々の素子の持つ入出力関数 ϕ が奇関数でかつ飽和する場合、臨界点近傍の固定点解側ではシグナル・ノイズ比が変数 g の臨界点からの距離に反比例して発散するのに対し、カオス解側では距離の２乗に反比例して発散することが分かった[1]。これは臨界点近傍ではカオス解側に変数 g を設定することによって、その値をファインチューニングせずとも、高いシグナル・ノイズ比を達成できること

---

[1] この原稿は、基礎物理学研究所研究会「統計力学の最前線」の発表をもとに作成した。

[2] E-mail:　taro.toyoizumi@brain.riken.jp

を示している。本研究では簡単のために、離散時間、全結合システム、入出力関数の対称性等を仮定したが動的平均場理論を用いた本解析方法はより一般のシステムに対して応用が可能である。

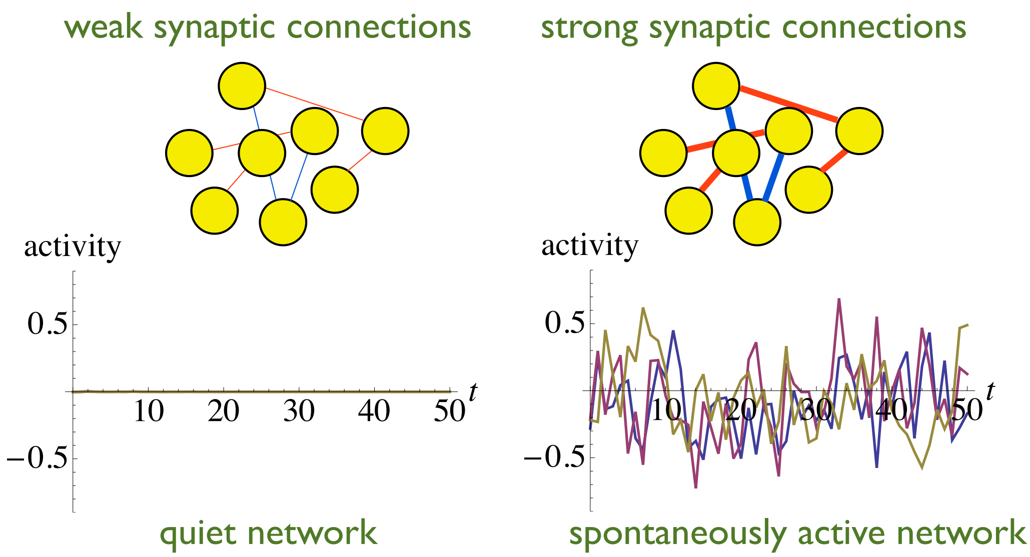


図１：ランダムに結合するニューラルネットワークは結合強度の絶対値が小さい場合（左図）には固定点に収束し、結合強度の絶対値が大きい場合（右図）にはカオスを示す。上図：ニューラルネットワークの模式図。下図：状態変数 h_1, h_2, h_3 の時間的な変動。

参考文献

[1] T. Toyoizumi and L. F. Abbott, Phys. Rev. E 84 (2011), 1539.
[2] H. Sompolinsky, A. Crisanti, and H. J. Sommers, Phys. Rev. Lett. 61 (1988), 259.
[3] L. Molgedey, J. Schuchhardt, and H. G. Schuster, Phys. Rev. Lett. 69 (1992), 3717.

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 [4], 中川 裕志[5]

統計的機械学習は、過去に蓄積されたデータから何らかのルールを自動的に抽出する情報処理技術である。我々は、ルールの抽出過程、すなわち学習プロセスにおいて量子揺らぎを導入し効率的に学習する手法を開発した。我々のアルゴリズムは機械学習分野で幅広く使われている変分ベイズ法に基づいているため、変分ベイズ法が適用可能である従来研究に対して容易に量子揺らぎを導入できる。つまり、広範囲な応用分野に対して量子揺らぎを導入することを可能にした。

1 はじめに

統計的機械学習は、過去に蓄積されたデータを学習データとして未知の問題解決を機械的に行う情報処理技術である。学習データを未知の問題解決に利用するためには、データをどのような形で抽象化するかが重要である。例えば、我々人間は数学の問題を解く場合に、過去に解いた問題を公式または解法として抽象的に表現することで、新たな問題を解けるようになる。統計的機械学習では、確率モデルによってデータの性質を抽象化する。機械学習は、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目指す。

データの特性を確率モデルによって抽象化する場合、「潜在変数」と呼ばれる確率変数が重要な役割を果たす。潜在変数は、データ間の隠れた類似性を数学的に取り扱うために導入される。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することで解決に至る場合が多々ある。しかし、どの問題と類似しているかは問題には書いていないため、問題間の類似性は非観測である。したがって、類似性の推定を行うことで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、すなわち潜在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。特に、分類に関してなんら情報を与えずに自動的にいくつかのカテゴリーに分類するような問題を考える。文

[1]東京大学 情報基盤センター, E-mail: sato@r.dl.itc.u-tokyo.ac.jp
[2]東京大学大学院 理学系研究科, E-mail:shu-t@chem.s.u-tokyo.ac.jp
[3]Google, E-mail:kenichi.kurihara@gmail.com
[4]東京大学大学院 理学系研究科,E-mail:miya@spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp
[5]東京大学 情報基盤センター, E-mail: n3@dl.itc.u-tokyo.ac.jp

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。「キーワード」に基づくカテゴリー分類の難しさとして、どの単語が「キー」になるのかは与えられた文書集合に依存して変わることが挙げられる。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。具体的には、「ある単語がキーワードとなるか (1)/ならないか (0)」という二値確率変数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。新たな文書を処理する場合は、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。

2　確率的潜在変数モデルにおける量子アニーリング

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。このような場合に、統計物理学的アプローチであるシミュレーテッド・アニーリング (SA : Simulated Annealing) (Kirkpatrick et al., 1983) が主に用いられる。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、局所解を含む最適化問題を解く手法として、量子揺らぎを用いた量子アニーリング (QA : Quantum annealing) が量子情報理論におい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における潜在変数間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。

$$\sigma_j^* = \underset{\sigma_j}{\operatorname{argmax}} \log p(\sigma_j) \tag{1}$$

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 $(j = 1, \cdots, m)$ 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

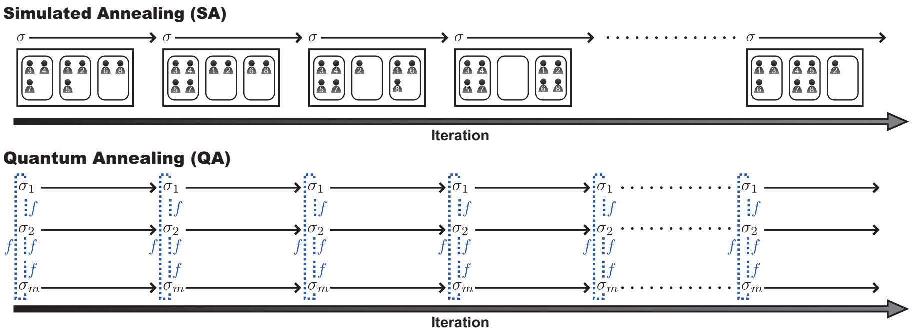


図 1: SA と QA：σ は潜在変数（この場合、8 人のグループ分け）を表している。

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。

$$(\sigma_1^*, \sigma_2^*, \cdots, \sigma_m^*) = \underset{(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_m)}{\mathrm{argmax}} \log p_{\mathrm{QA}}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m) \tag{2}$$

ここで、$(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m)$ 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 $p_{\mathrm{QA}}(\cdot)$ が定めている。図 1 の例では、σ_j $(j = 1, \cdots, m)$ 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 $R(\sigma_1, \cdots, \sigma_m)$ を用いて、実際には以下のように書くことができる。

$$(\sigma_1^*, \sigma_2^*, \cdots, \sigma_m^*) = \underset{(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_m)}{\mathrm{argmax}} \sum_{j=1}^{m} \log p(\sigma_j) + f \cdot R(\sigma_1, \cdots, \sigma_m) \tag{3}$$

$f \cdot R(\sigma_1, \cdots, \sigma_m)$ が、潜在変数間の相互作用に相当する項である。またこの項は、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 $R(\sigma_1, \cdots, \sigma_m)$ は、数学的に導出される。

我々は、最適化問題 (1) を近似的に解く手法として変分ベイズ法 (Attias, 1999) に着目し、最適化問題 (3) を近似的に解く量子アニーリング変分ベイズ法を提案した (Sato et al., 2009)。文書分類やトピック抽出に応用した結果、より効率的な学習ができることを確認した。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として知られている。したがって我々の手法は、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応用分野で適用可能である。

3　おわりに

本稿では、潜在変数を含む確率モデルの学習において、量子揺らぎを導入する枠組みを紹介した。量子揺らぎは、統計力学的アプローチである熱揺らぎとは異なる揺らぎであるため、量子揺

らぎの制御は古典系の学習プロセスとは異なる学習プロセスとなる。このような量子系の学習プロセスが学習効率にどのような形で影響を与えるかについては未解明の問題であり、今後取り組んでいきたいと考えている。また、我々の手法は並列学習アルゴリズムであるため、大規模な並列数による学習効率の効果についても調べていく予定である。

謝辞

数値計算の一部は、東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピューターを利用いたしました。ここに感謝申し上げます。

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

東京大学総合文化研究科　杉浦　祥[1]，清水　明

1　はじめに

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を完成し、その純粋状態の具体的な構成法を提案した。

2　定式化の概要とその結果

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

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu} c_\nu |\nu\rangle \tag{1}$$

($\{|\nu\rangle\}_\nu$ 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い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の純粋状態で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。

[1]E-mail: sugiura@ASone.c.u-tokyo.ac.jp

我々は、これらの問題を解決して、たった一つの純粋状態による統計力学の定式化を完成した。まず、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 **Themal pure quantum (TPQ) states** と名付け、定義した。そして、TPQ state から純熱力学量を求める方法を提案した。さらに、そのうちあるクラスの TPQ states を効率的に構成する方法も合わせて開発し、この新しい定式化が実用的にも利点があることを示した [2]。

本プロシーディングスではその定式化のみを述べる。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 $\{i\}_i$ 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 $k = 0, 1, \cdots$ に対して反復的に行う。

$$u_k \equiv \langle\psi_k|\hat{h}|\psi_k\rangle, \tag{2}$$

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

($\hat{h} \equiv \hat{H}/N$, 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 state 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 の状態がひとつ与えられても、その状態に対応する逆温度 $\beta(u, N)$ などの純熱力学量を求めることは困難である。ところが、上記の TPQ state $|\psi_k\rangle$ であれば、たったひとつ与えられただけで、対応する逆温度 $\beta(u, N)$ が、以下の式より求められる。

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

さらに、もしも 複数個の TPQ states が与えられている場合 には、それらの間の内積から純熱力学量を求めることもできる。こちらの方法は、上記の TPQ state に限らず、あらゆる種類の TPQ states に対して適用可能なので、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。

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

($\overline{(\cdots)}$ はランダム平均）この関係式から $\dim(\mathcal{E}_{E,N})$ を求める事が可能であり、そ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ができる。

ＴＰＱ state を用いた計算法の特筆すべき点は、ＴＰＱ state 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、ハミルトニアンの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

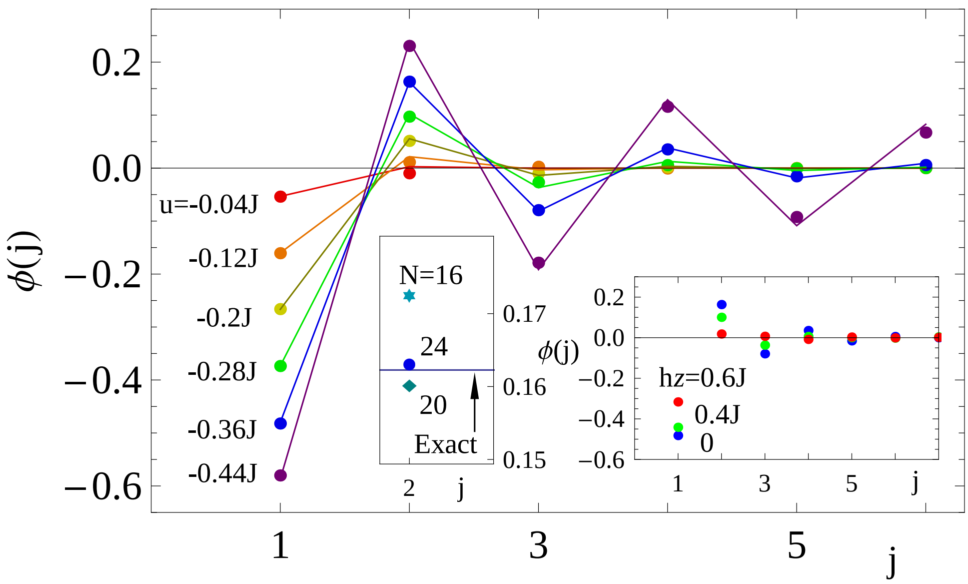


図 1: $J=+1$, $h_z=0$ での相関関数 $\phi(j)$ のグラフ。実線：$N\to\infty$ における様々な u の値での厳密解 [3]。各点：TPQ state による我々の定式化を用いた $N=24$ での数値計算結果。(左の挿入図) $N=16$-24, $j=2$ での $u=-0.36J$ の TPQ state による数値計算結果。(右の挿入図) 有限の h_z を加えた状態での $\phi(j)$ の TPQ state による数値計算結果。温度は $T\simeq 0.45J$ に固定してある.

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した。詳細については文献 [2] をご覧頂きたい。

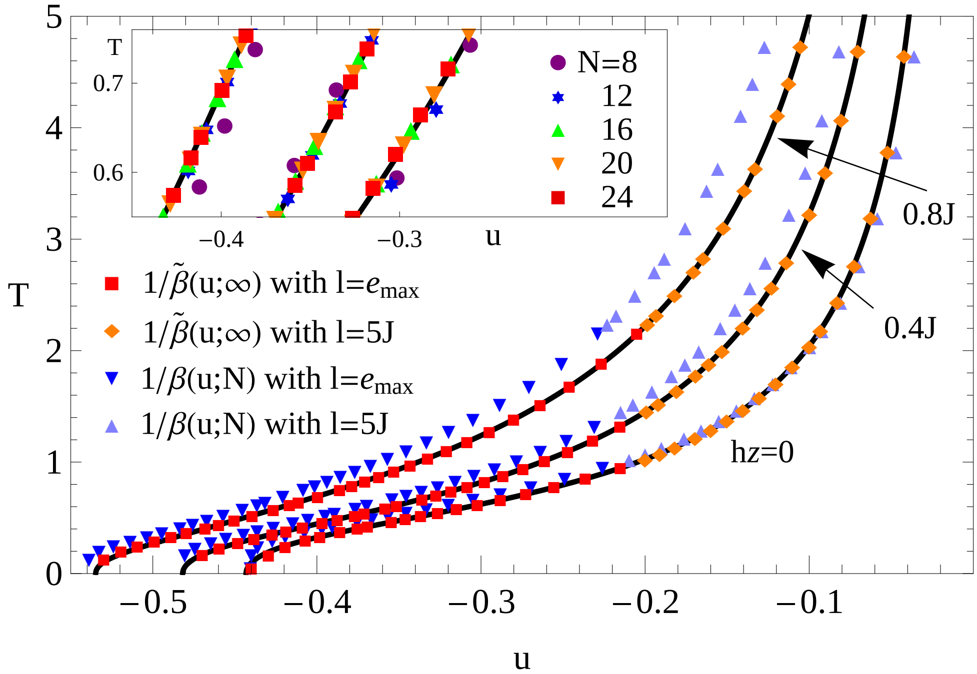


図 2: $J=+1$ での T vs. u のグラフ。実線：$h_z=0$-$0.8J$, $N\to\infty$ における様々な u の値での厳密解 [4]。各点：TPQ state による我々の定式化を用いた $N=24$ での数値計算結果。三角形の各点が $\beta^{-1}(u;N)$、四角形の各点が $\tilde{\beta}^{-1}(u;\infty)$ に対応する。(挿入図) $N=8$-24 における $\tilde{\beta}^{-1}(u;\infty)$.

謝辞

本研究会を企画して下さった、安田宗樹さん、大関真之さん、小渕智之さんには感謝しております。特に、小渕さんには学会での発表をきっかけに本研究会で発表する機会を設けて頂き、大変感謝しています。有難うございました。

参考文献

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

[2] S. Sugiura, A. Shimizu, arXiv:1112.0740v4 (to be published in Physical Review Letters)

[3] J. Sato *et al*, Phys. Rev. Lett **106**, 257201 (2011).

[4] K. Sakai, private communication.

新奇揺らぎの導入による相転移現象の制御

東京大学 物性研究所　田村 亮 [1,2]
東京大学 理学系研究科 化学専攻　田中 宗 [3]

本原稿では，相転移の次数制御に関する統計力学的研究について紹介する．具体的には，二次相転移（連続転移）が起こることが知られている二つの相転移現象に着目する．一つ目は二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う平衡相転移であり，二つ目は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である．それぞれの模型に新しい種類の揺らぎを付け加えることによって，これらの相転移現象の様相を変化させることができる．

1　緒言

相転移は，例えば H_2O が氷・水・水蒸気といった異なる性質を持つ相へ状態が変化する現象であり，統計力学研究における最も重要な研究対象の一つである．一般に，系の状態はいくつかの熱力学的変数によって表わすことができ，相転移点においてこの熱力学的変数は特異性を示す．この特異性から相転移を分類することができ，例えば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）がある．一般的な理解では，系の基底状態の対称性や秩序パラメタの対称性，さらには空間次元によって相転移の性質は決まるため，これらを変化させると，起こる相転移現象も同時に変化する．そこで我々は，基底状態や秩序変数の性質および空間次元といった系の本質を変化させることなく相転移の様相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，以下に述べる二つの研究を行った．

2　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[4]

離散的対称性の破れを伴う熱平衡相転移は q 状態強磁性 Potts 模型を用いて詳しく研究が行われている [1]．二次元格子上では，$q \leq 4$ 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．この Potts 模型に，エネルギーに寄与しない余分な状態（透明状態）を付け加えた模型を考察した [2–6]．この模型のハミルトニアンは以下のように書かれる．

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{s_i,s_j} \sum_{\alpha=1}^{q} \delta_{s_i,\alpha}, \qquad s_i = 1, \cdots, q, q+1, \cdots, q+r \qquad (J < 0). \tag{1}$$

[1] 現所属：(独）物質・材料研究機構　若手国際研究センター
[2] E-mail: tamura.ryo@nims.go.jp
[3] E-mail: shu-t@chem.u-tokyo.ac.jp
[4] 本研究は東京大学物性研究所川島直輝教授との共同研究である．

(q,r)	$T_c/\|J\|$	$l/\|J\|$	破れる対称性	文献
(2,0)	1.13459	0	2 回	[1]
(2,30)	0.57837(1)	1.02(2)	2 回	[2]
(2,32)	0.56857(1)	1.23(2)	2 回	[3]
(3,0)	0.994973	0	3 回	[1]
(3,25)	0.59630(1)	0.81(2)	3 回	[2]
(3,27)	0.58513(1)	1.05(2)	3 回	[3]
(4,0)	0.910239	0	4 回	[1]
(4,20)	0.61683(1)	0.68(2)	4 回	[2]
(4,22)	0.60396(1)	0.87(2)	4 回	[3]

表 1: 透明状態を r 個加えた際の，二次元格子上強磁性 q 状態 Potts 模型の相転移温度 $T_c/|J|$ および潜熱 $l/|J|$．$(q,r)=(2,0),(3,0),(4,0)$ の場合は二次相転移が起こる．

ここで，$q+1 \leq s_i \leq q+r$ の状態が透明状態であり，r は透明状態の個数を表わしている．この透明状態の導入により，各スピンの取り得る状態の数は $q+r$ 個となっており，透明状態を加えることは状態に関する揺らぎを導入したことに対応する．このハミルトニアンから分かるように，$1 \leq s_i = s_j \leq q$ のときに相互作用 J が働き，それ以外では相互作用は働かない．つまり，透明状態 $(q+1 \leq s_i \leq q+r)$ はエネルギーに寄与しないため，透明状態を系に加えても基底状態は変化しない．したがって，この模型は有限温度において q 回対称性の破れを伴った相転移が起こる模型である．

通常なら二次相転移が起こる二次元格子上 $q=2,3,4$ 状態強磁性 Potts 模型に透明状態を複数付け加えた場合，相転移がどのように変化するかについて数値計算を行った．その結果，いくつかのパラメタセット (q,r) において有限温度一次相転移の存在が確認された．数値計算によって得られた一次相転移温度および潜熱について表 1 にまとめた．この結果から，透明状態の数を増やすと，相転移温度は減少し，潜熱は増大することが分かる．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によって，相転移の次数を変化させることが可能であることを示した．さらに，透明状態によって潜熱も変化することから，同じ対称性の破れを伴う相転移でも透明状態の数を変化させることによって潜熱の大きさを制御することができる．以上の結果は平均場近似 (Bragg-Williams 近似) においても確認している．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．

3　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

正方格子上の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．パーコレーション転移は格子の端から端までを繋ぐネットワークが形成された時間で定義される．一般的な理解では，このパーコレーション転移は連続転移であり，要素同士をランダムに繋いでいく最もシンプルなネットワーク成長模型は連続転移を示す．しかし，特別なルールを採用したネットワー

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ことが Achlioptas らによって報告されている [7]．そこで，我々はこれらのネットワーク成長過程を繋ぐことのできるネットワーク成長ルールを導入し，動的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調べた．

我々が導入したネットワーク成長ルールは以下の通りである．

Step 1 全ての要素は孤立している．

Step 2 2つの異なる辺をランダムに選ぶ (i と j および k と l).

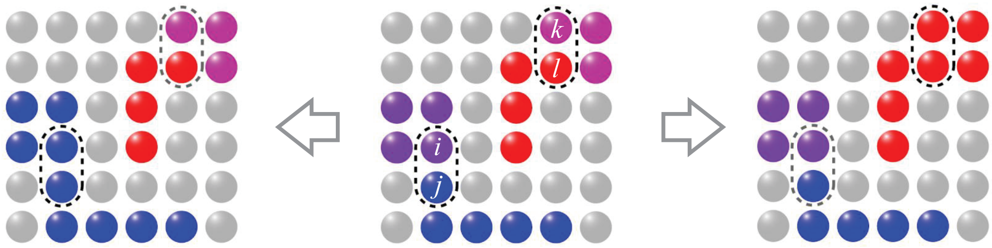
Step 3 選んだ辺のうち片方の辺（i と j を結ぶ辺）を，以下の確率で繋げる．

$$\omega_{ij} = \frac{e^{-q(n(\sigma_i)+n(\sigma_j))}}{e^{-q(n(\sigma_i)+n(\sigma_j))} + e^{-q(n(\sigma_k)+n(\sigma_l))}}. \tag{2}$$

ただし，$n(\sigma_i)$ は i 番目のサイトが属するクラスターが含むサイト数を意味している．また，一度結合された辺は切断されることはない．

Step 4 Step 2 と Step 3 を繰り返し，全ての要素が1つのクラスタに属したら終了．

このルールにおける成長過程の例を図1に示した．このルールにおいて $q = 0$ は要素同士をランダムに繋いでいくシンプルなルールとなり，$q = +\infty$ は必ず小さいクラスターができるように要素を繋いでいく Achlioptas らによって導入されたルールとなる．つまり，q はこれらのルールを繋ぐパラメタになっていることが分かる．いくつかの q を用いた数値計算を行ったところ，$q \simeq 10^{-4}$ 付近でパーコレーション転移の臨界性が変化することを示す結果を得た [8]．また，パーコレーション転移点直上におけるフラクタル次元も，同様の q の値を境に変化していることが分かった．このパラメタ q は，成長過程を選ぶ際の選択確率（選択に関する揺らぎ）になっており，このような選択に関する揺らぎによって動的パーコレーション転移の臨界性を制御できることが分かった．



$$\omega_{ij} = \frac{\mathrm{e}^{-q(4+5)}}{\mathrm{e}^{-q(4+5)} + \mathrm{e}^{-q(3+4)}} \qquad \omega_{kl} = \frac{\mathrm{e}^{-q(3+4)}}{\mathrm{e}^{-q(4+5)} + \mathrm{e}^{-q(3+4)}}$$

図 1: ネットワークの成長過程の一例．左図は確率 ω_{ij} で i と j を結ぶ辺が結合された場合，右図は確率 ω_{kl} で k と l を結ぶ辺が結合された場合をそれぞれ表している．

4　結言

本原稿では，相転移現象の様相を制御することのできる揺らぎの導入方法について，二種類の相転移に着目することによって紹介した．一つ目は二次元格子上 Potts 模型における 2, 3, 4 回対

称性の破れを伴う平衡相転移であり，状態に関する余分な揺らぎを導入することによって，相転移の次数が二次から一次に変化する振る舞いが観測された．二つ目は，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であり，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，相転移の臨界性の変化が観測された．このように，基底状態や秩序変数といった系の本質を変化させない新しいタイプの揺らぎを導入することによって，相転移の様相を制御することが可能である．このような相転移現象の制御という観点は，情報統計力学の分野でも重要であると考えている．この分野で扱われる最適化問題では，相転移の存在が問題の困難さを左右する一因になり得る．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要因となる．そのため，新奇揺らぎの導入による相転移現象の制御は最適化問題における困難を解消する有用な方法になると期待している．

謝辞

本研究を遂行するにあたって，田村は東京大学 GCOE「未来を拓く物理科学結集教育研究拠点」の支援を，田中は日本学術振興会科学研究費助成事業（21840021 および 23-7601）の支援を受けて実施いたしました．また，数値計算の一部は，東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピュータを利用いたしました．ここに感謝申し上げます．

参考文献

[1] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 235.

[2] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. **124** (2010) 381.

[3] S. Tanaka, R. Tamura, and N. Kawashima, J. Phys.: Conf. Ser. **297** (2011) 012022.

[4] S. Tanaka and R. Tamura, J. Phys.: Conf. Ser. **320** (2011) 012025.

[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** (2009) 1453.

[8] S. Tanaka and R. Tamura, arXiv:1111.2005.

ツイッターの確率モデル

東京大学 理学系研究科 物理学専攻　川本 達郎 [1]

マイクロブログとして有名なツイッターでの「つぶやき」の拡散現象を記述する確率モデルを、実際のデータを基に考案した。その結果、公式リツイートによる日々のつぶやきの拡散は、ランダム乗算過程という確率過程に従っていると見なせることを明らかにした。情報拡散のモデルとしては、ミクロな伝染ルールからマクロな拡散現象を記述するものがよく考えられるが、本研究のアプローチはそれらとはまったく異なるものである。

1　ツイッターとつぶやきの拡散

ツイッターはマイクロブログと呼ばれる人気のウェブサービスで、ユーザーたちはその上でネットワークを構成している。種ユーザーが文章「つぶやき」を書くと、フォロワーと呼ばれる、種ユーザーと直に繋がっているユーザーにそのつぶやきが配信される。ここで、つぶやきを受け取ったユーザーがリツイート・ボタンをクリックすると、その人のフォロワーにもそのつぶやきが配信される。このようにして、ツイッター上ではつぶやきの拡散現象が日常的に起きている。このつぶやきの拡散には何か統計則が存在するのだろうか。それとも、各ユーザーの詳細や日時によってまったく異なる振る舞いを示す非常に複雑な現象なのだろうか。

ネットワーク上の情報拡散の研究は病気の伝染や噂の伝播の文脈で従来から多く行われており、その多くは個々のノード (ユーザー) に対するミクロな伝染ルールを与え、その結果として生じるマクロな拡散現象を予測するものである (1)。すなわちミクロとマクロを繋ぐというステップを踏む。しかし、ツイッターのリツイートのような活動に妥当なミクロな伝染ルールを与えることは非常に困難と思える。また、そのような状況でミクロとマクロを繋ぐというステップを踏むことにあまり意味はないと考えられる。

このように、従来のアプローチに従ってツイッターの拡散現象を記述しようと試みると、非常に難しい問題になると予想される。しかし、最終的にマクロな拡散の様子を議論したいのであれば、個々のユーザーの振る舞いを指定する必要はないのではなかろうか。代わりに、幾らかのユーザーの集団を一つの単位として扱い、それらに対する伝染ルールを明らかにすれば、よりシンプルで意味のあるモデルが構成できるのではないだろうか。これが本研究のアプローチである[2]。

[1]E-mail: t-kwmt@iis.u-tokyo.ac.jp

[2]同じようなアプローチは他のウェブサービスについて行われたものがある (2; 3; 4)。しかし、それらはツイッターのような決まったネットワーク上を拡散するものではなく、拡散過程にはっきりとした構造がないと思われる点で本研究と大きく異なる。

本研究では、日常的なつぶやきの拡散を記述することを目的としている。その過程はフォロワーたちの公式リツイートによるものが支配的だと考え、データ解析ではそのようなデータをカウントする。

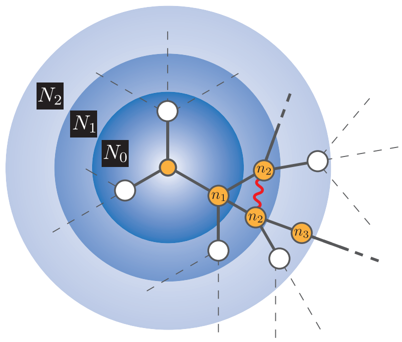


図 1: ツイッター上でのつぶやきの拡散。中心のノードが種ユーザー。リンクはフォロワーであることを示す。

2　確率モデル

図 1 に示すように、リツイートするユーザーが種ユーザーから何リンク離れているかを指標として世代分けし、その世代ごとのダイナミクスを議論する。まず、種ユーザーのフォロワー数を N_0 とする。(彼らはリツイートをしなくてもつぶやきを受け取る。) この N_0 人のうち、n_1 人がリツイートするとし、その n_1 人によって新たにつぶやきが配信されたユーザー数を N_1 とする。これが $n_g = 0$ (g は世代) となるまで続く。種ユーザーのつぶやきを受け取った人の総数は $N_{\rm tot} = \sum_{g=0}^{\infty} N_g$、リツイートした人の総数は $n_{\rm RT} = \sum_{g=1}^{\infty} n_g$ と表される。モデルとしては、g 世代目のユーザーの数 N_g からリツイートをするユーザーの数 n_g を推定し、また n_g 人のリツイートによって新たに配信される人の数 N_{g+1} が分かればよい。

ここで、次のような近似をする。ツイッターのネットワークにはループ構造が存在し得るため、リツイートによって配信しようとしたユーザーは、既につぶやきを受け取っているということが生じる[3]。従って、N_g をカウントするときにリツイートした人のフォロワー数を単純に数えると、カウントが重複してしまうことがある。しかし、ここではそのような重複は支配的な寄与をしないと仮定し、ネットワークを木構造と近似する。(図 1 の赤波線のようなリンクは存在しないとする。) このとき、N_g と n_g の関係を以下のようにモデル化する：

$$N_g = n_g \sum_{k=0}^{\infty} k\, P(k) = n_g \langle k \rangle, \tag{1}$$

$$n_g = \beta_g N_{g-1}. \tag{2}$$

ここで k はユーザーのフォロワー数、$P(k)$ はその分布、β_g は確率変数である。式 (1) は、分布 $P(k)$ から n_g 人を抽出し、それらのフォロワー数を足し上げたもので、木構造と近似したことによっている。式 (2) では、N_{g-1} を単位として、ある確率分布に従う確率変数 β_g によって n_g が決まっているとした。この β_g をリツイート率と呼ぶことにする。

どのような拡散の仕方をしていても、このようにユーザーを分類し、式 (1) や式 (2) のように表すことは可能である。しかし、もしこのようなモデル化が見当違いだとすれば、リツイート率の

[3]ツイッターではこのような場合、重複して同じつぶやきを受け取ることがないようになっている。

確率分布は非常に歪んだものであったり、世代 g によってまったく異なるものが現れると思われる。ところが次節のデータ解析で示すように、種ユーザーのフォロワーによる拡散 $(g=1)$ では定数倍の補正が必要なものの、どの世代でもおよそ対数正規分布に従っていることが分かり、モデル化の妥当性を支持している。上記の変数を J_g という記号で以下のようにまとめると、m 世代目の拡散はランダム乗算過程で表される：

$$n_m = J_g n_{m-1} = \cdots = \textstyle\prod_{g=1}^{m} J_g N_0, \quad J_g = \begin{cases} \beta_1 = \beta Q, \\ \beta_g \langle k \rangle = \beta \langle k \rangle. \end{cases} \tag{3}$$

ここで Q は他の世代との定数倍の違いを表し、種ユーザーを固定して統計を採ったときには、そのユーザーの実効的なフォロワーの割合を示す量と見なすことができる。

3　データ解析

実際のツイッターのデータから前節で述べたリツイート率 β_g の統計を調べる。ツイッターのデータはツイッター社が配布している Twitter API (5) というものを使って特定の URL にアクセスすれば取得することができる。まず、リツイート数がゼロでないツイートをランダムにサンプルし、そのリツイート数を世代ごとに分類してリツイート率 β_g を $g=3$ まで調べた。図 2a は各世代のリツイート率の累積分布関数を片対数プロットしたものである。この図から分かるように $g=1$ では平均値が異なるが、どの世代でも対数スケールで正規分布によってフィットされる振る舞いを示している。従ってリツイート率 β は対数正規分布とすれば良いことが分かる。このデータでは $Q>1$ となり、種ユーザーのフォロワーは他の世代よりも高い割合でリツイートすることを示している。乗算過程であるというモデル化に従うと、$g=4$ でリツイート数の平均値がおよそ 1 になり、つぶやきはその程度までしか拡散しないことが結論される。

種ユーザーをランダムに選ぶと、色々な国の人のつぶやきや、特殊な拡散のケースを拾っている可能性があり、あまり綺麗な統計が見られない。そこで、種ユーザーとしてフォロワー数の多い有名アカウントを考え、その拡散過程の統計を見てみる。有名アカウントのつぶやきの拡散を見るときは、技術的な理由により $g \leq 2$ で拡散が止まると仮定する。ここでは、我々のモデルからおおよそ $g \leq 2$ であるようなアカウントについて調べ、総リツイート数のうちで $g=1$ 以外のものはすべて $g=2$ に属するとした[4]。そのようなアカウントの一つが図 2b に載せた The New York Times (@nytimes) である。図 2b は図 2a と同じ片対数の累積分布関数で、$g=1$ と $g=2$ のどちらも分散がほぼ等しい対数正規分布となっている。平均値の違いから、$Q=0.023$、すなわちフォロワーのうちおよそ 2.3% が実効的なフォロワーであると推定される。この他のアカウントでも、特にニュース関連のアカウントで The New York Times と同じようにはっきりとした振る舞いが見られる。

もう一つの例として、堀江貴文氏のアカウント (@takapon_jp) を調べた（図 2c）。このアカウントの特殊性が効いて、$g=1$ のリツイート率の分布は激しく歪んでいるのが分かる。しかし、$g=2$

[4] このときの $g=2$ のリツイート率は $\widetilde{\beta}_2$ と表記する。

の分布を見てみると、やはり対数正規分布の振る舞いが見られる。これは世代による分類と式 (2) のようなモデル化が妥当であることを支持している。

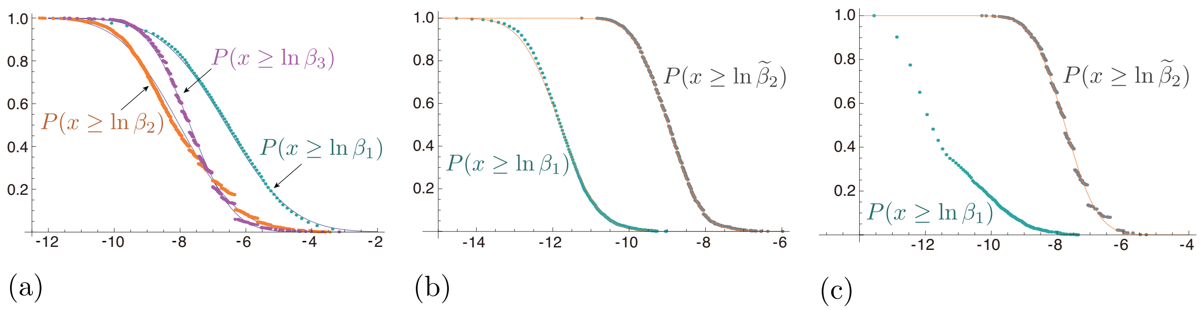


図 2: (a) 種ユーザーをランダムに選んだ場合のリツイート率の対数の累積分布。(b) The New York Times のリツイート率の対数の累積分布。(c) 堀江貴文氏のリツイート率の対数の累積分布。

4 まとめ

本研究では、ツイッター上でのつぶやきの拡散現象がランダム乗算過程で与えられるというモデル化をし、その妥当性を実際のリツイートのデータから検証した。今回、世代によって分類した場合にどのように拡散が表されるのかを議論し、何世代くらいまで拡散し得るのかや、アカウントの実効的なフォロワー数を推定することができた。しかし、ここでのモデル化が唯一の方法とは限らず、他の分類によって異なるモデル化をすることも可能かもしれない。また、今回はネットワークの構造を極度に単純化して扱ったが、その妥当性や、拡散過程でのリツイート率の相関効果なども議論する必要がある。このようなモデル化はツイッターに限らず、他の様々なネットワークにも適用できると期待している。

謝辞

指導教員である羽田野直道准教授には多くのコメントや議論をしていただきました。また、特に研究の開始段階で相談に乗ってくださった紺野友彦さんと桑原知剛君や、研究会でコメントをくださった Chris Wiggins さんを始め、議論してくださった皆様に感謝致します。

参考文献

[1] W. Galuba, K. Aberer, D. Chakraborty, Z. Despotovic, and W. Kellerer: WOSN'10 Proc. of the 3rd Conf. on Online social networks (2010) 3.
[2] F. Wu and B. A. Huberman: Proc Natl Acad Sci USA **104**(45) (2007) 17599-17601.
[3] K. Lerman and T. Hogg: Proc. of 19th Int. World Wide Web Conf. (WWW)(2010) 621-630.
[4] D. M. Wilkinson: Proc. of the 2008 ACM Conf. on E-Commerce (2008) 302-309.
[5] https://dev.twitter.com/docs/api, https://dev.twitter.com/docs/streaming-api