

データサイエンス・シリーズ 6

データ学習アルゴリズム

(渡辺澄夫著, 共立出版 2001)

発表日: 平成 15 年 9 月 18 日
担当者: 岩崎 唯史
担当箇所: 3.3 ボルツマンマシン
 3.3.5 平均場近似
 3.3.6 確定的ボルツマンマシン

3.3 ボルツマンマシン

3.3.5 平均場近似

$$p(s|w) = \frac{1}{Z(w)} \exp(-L(s|w)),$$
$$Z(w) = \sum_{s \in \{0,1\}^K} \exp(-L(s|w)),$$

の平衡状態の分布を厳密に計算するには膨大な計算量が必要



効率的な近似アルゴリズム

平均場近似

仮定: ユニット間の相互作用は各ユニットの平均値に影響を与えるだけで、全てのユニット (相互作用) は独立な確率変数とみなす。

定式化: 平均的相互作用を用いた式 + self-consistent 方程式

ユニット s_i に対する平均場近似

確率変数 S_i の平衡状態での平均値: \bar{s}_i

\bar{s}_i に関する方程式 1: 平衡状態での分布関数

$$\begin{aligned} p(x, u, y|w) &\approx \frac{1}{Z(w)} \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} s_i \bar{s}_j + \sum_{i=1}^K \theta_i s_i \right) \\ &= \frac{1}{Z(w)} \exp \left(\sum_{i=1}^K s_i J_i \right), \end{aligned} \quad (1)$$

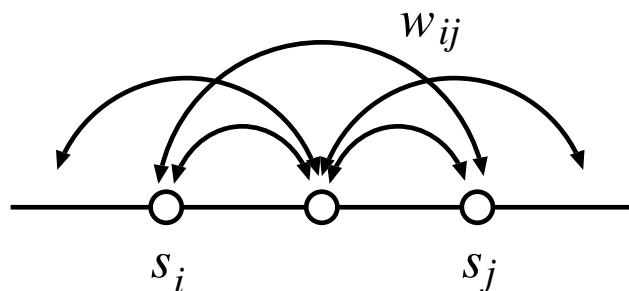
$$J_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^K w_{ij} \bar{s}_j + \theta_i. \quad (2)$$

\bar{s}_i に関する方程式 2: \bar{s}_i は平衡状態での平均値であるべし

$$\bar{s}_i = \frac{\sum_{s_i=0,1} s_i \exp(s_i J_i)}{\sum_{s_i=0,1} \exp(s_i J_i)} = \sigma(J_i). \quad (3)$$

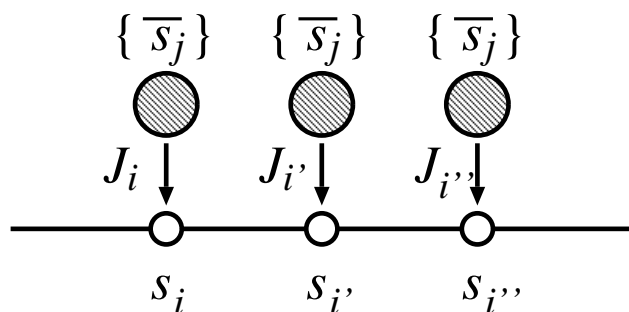
ただし $\sigma(x) = 1/(1 + \exp(-x))$, $\sigma^{-1}(x) = \log(x/(1 - x))$.

平均場近似のイメージ



$$p(x, u, y|w) = \frac{1}{Z(w)} \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} s_i s_j + \sum_{i=1}^K \theta_i s_i \right)$$

↓ 平均場近似



$$p(x, u, y|w) \approx \frac{1}{Z(w)} \exp \left(\sum_{i=1}^K s_i J_i \right)$$

$$J_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^K w_{ij} \bar{s}_j + \theta_i$$

拘束条件 (式 (2),(3)) を満たす $\{\bar{s}_i\}$ を見出すための微分方程式

$t \rightarrow \infty$ で極限值 $\{\bar{s}_i\}$ を持つ $\{s_i(t), r_i(t)\}$ に関する微分方程式:

$$\frac{dr_i(t)}{dt} = -r_i(t) + \frac{1}{2} \sum_j w_{ij} s_j(t) + \theta_i, \quad (4)$$

$$s_i(t) = \sigma(r_i(t)). \quad (5)$$

[1] $t \rightarrow \infty$ で極限点 $\{(s_i(\infty), r_i(\infty))\}$ をもてば, それらは拘束条件 (式 (2),(3)) を満たすことの証明:

$dr_i(\infty)/dt = 0$ より式 (4)(5) は

$$\frac{1}{2} \sum_j w_{ij} s_j(\infty) + \theta_i = r_i(\infty), \quad (6)$$

$$s_i(\infty) = \sigma(r_i(\infty)). \quad (7)$$

➡ 拘束条件 (式 (2),(3)) と等価.

[2] 微分方程式 (4),(5) が $t \rightarrow \infty$ で極限点をもつことの証明:

$\{s_i(t)\}$ によって定まる次式の関数 $F(\{s_i(t)\}) = F(t)$ を考える.

$$F(t) = -\frac{1}{4} \sum_{i,j} w_{ij} s_i(t) s_j(t) - \sum_i \theta_i s_i(t) + \sum_i \{s_i(t) \log s_i(t) + (1 - s_i(t)) \log(1 - s_i(t))\}. \quad (8)$$

$s_i(t)$ が式 (4),(5) に従うとき, $0 < s_i(t) < 1$ であるから

$$\begin{aligned} \frac{dF(t)}{dt} &= \sum_k \frac{\partial F}{\partial s_k} \frac{ds_k}{dr_k} \frac{dr_k}{dt} \\ &= -\sum_k \left(r_k(t) - \frac{1}{2} \sum_j w_{kj} s_j(t) - \theta_k \right)^2 s_k(t) (1 - s_k(t)) \leq 0. \quad (9) \end{aligned}$$

したがって $F(\{s_i(t)\})$ は t に関する単調減少関数であり, かつ, $s_i(t)$ は有界であるから, $t \rightarrow \infty$ で $s_i(t)$ ($r_i(t)$) は極限点に収束する.

[注 33] ホップフィールドモデルとスピン系

神経細胞の状態 (2 値モデル): $s_i(t) = \begin{cases} +1 & \text{興奮状態} \\ -1 & \text{静止状態} \end{cases}$

ある初期状態 $\{s_i(0)\}$ から出発し, 神経細胞が相互作用しながら時間発展した結果, ある定常状態に達する.

- ▷ 定常状態での $\{s_i\}$ のパターン → “記憶” に相当
- ▷ 時間発展 → 結合係数を w_{ij} とすると, “記憶” の検索は

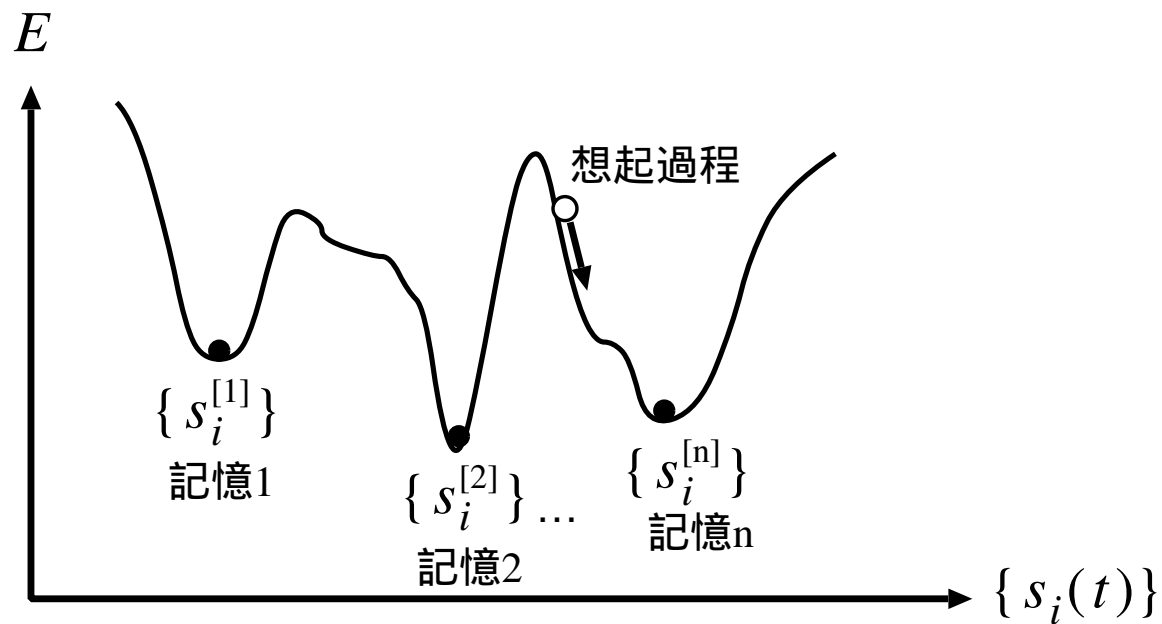
$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} s_i(t) s_j(t),$$

を極小にしていく過程 (想起過程)

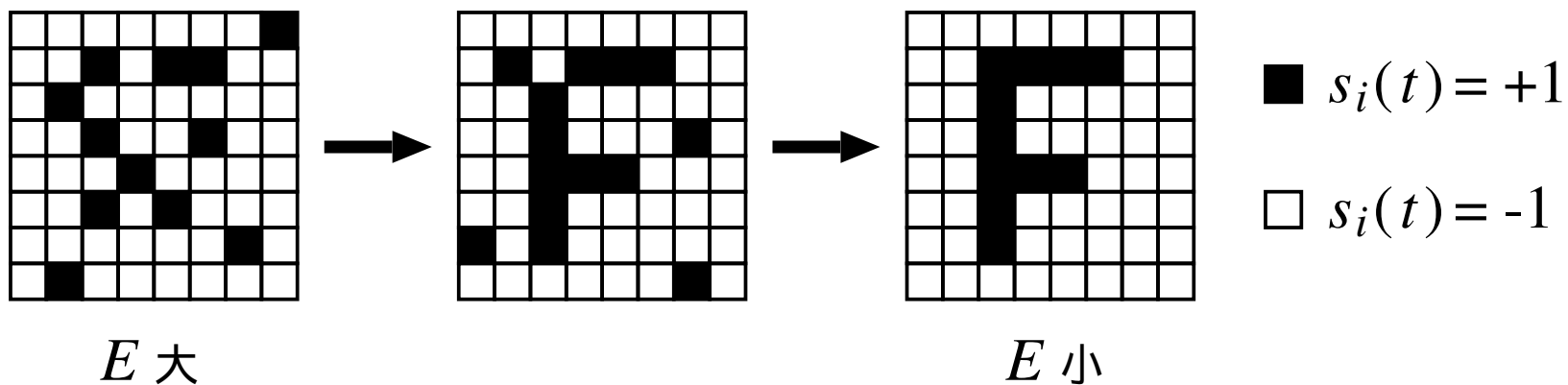
- [課題]
- 結合係数 w_{ij} をどう選ぶか
 - どうやって E の極小解 $\{s_i\}$ を見付けるか
 - E の極小値はいくつあるか (記憶容量)

Hebb 則による結合係数 w_{ij} の場合: 記憶容量 $\sim \alpha N$
→ 記憶容量は神経細胞の数 N で決まる

ホップフィールドモデルでの記憶と想起



パターンの想起



3.3.6 確定的ボルツマンマシン

平均場近似を用いた学習アルゴリズム

- (1) 入出力の組み (x, y) を用意する。
- (2) 入力を x に固定し, 中間層と出力層の出力値を全て $0.5 \pm \epsilon$ (ϵ は小さい乱数) とする。
- (3) 次の漸化式 (式 (4), (5) の離散時間版. η は正定数) を $s_i(t), r_i(t)$ が収束するまで繰り返し, 収束値 $s_i s_j$ を $E(s_i s_j | x, w)$ とする。

$$r_i(t+1) = r_i(t) + \eta \left\{ -r_i(t) + \frac{1}{2} \sum_j w_{ij} s_j(t) + \theta_i \right\}, \quad (10)$$

$$s_i(t+1) = \sigma(r_i(t+1)). \quad (11)$$

- (4) 入出力を (x, y) に固定し, (2), (3) と同様の手続きを繰り返す。そのときの収束値 $s_i s_j$ を $E(s_i s_j | x, y, w)$ とする。
- (5) $E(s_i s_j | x, w)$ と $E(s_i s_j | x, y, w)$ を基に, w_{ij} と θ_i に関する最急降下法 (3.3.4 節参照) を進める。