

ニューラルネットの基礎数理 (3)

上坂 吉則

5. ボルツマンマシン

値が0か1をとる n 個の入力 x_1, \dots, x_n に対して出力 y が確率:

$$(5.1) \quad P(y=1) = \sigma\left(\frac{u}{T}\right) = \frac{1}{1 + \exp(-u/T)}$$

で1を出し, また確率:

$$(5.2) \quad P(y=0) = 1 - P(y=1) = \sigma\left(-\frac{u}{T}\right)$$

で0を出すニューロンモデルを考える (図 5.1). ここに

$$(5.3) \quad u = w_0 + w_1x_1 + \dots + w_nx_n$$

は入力 $x = (x_1, \dots, x_n)$ と重み w_i としきい値 (の符号を反転したもの) w_0 から定まるニューロンの内部電位であり, T は個々のニューロンには依存しない温度と呼ばれる正の定数 (実数) である. 発火確率を u の関数とみると, それが大きいくほど出力として1が出やすく, 小さいほど0が出やすい. このような情報処理素子をニューロンのデジタル的静的確率論的モデルという.

このようなニューロン素子を, 前節のように, 相互に結合したフィードバック型の回路を考える (図 4.2). このとき, 各ニューロンの出力が x_i ならば, k 番目のニューロンの内部電位は

$$(5.4) \quad u_k = U_k(x) = U_k(x_1, \dots, x_n) \\ = a_{k1}x_1 + \dots + a_{kn}x_n + b_k$$

で与えられることになる. ここに a_{ij} は i 番目のニューロンと j 番目のニューロンとの結合係数であり, b_i は i 番目のニューロンのしきい値である. しかし, このような回路を考えても, 上のニューロンモデルには時間特性が規定されていないから, このままではこの回路は動きようがない. そこで回路の動作を次のように定めることにする:

- 1° $i=1, \dots, n$ に対して x_i に初期値を設定する.
- 2° n 個のニューロンの中から一様分布で1つのニュー

かみさか よしり 東京理科大学 理工学部
〒278 野田市山崎 2641

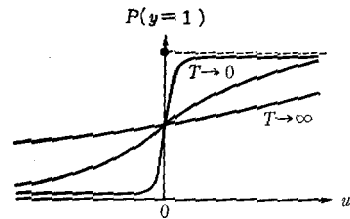
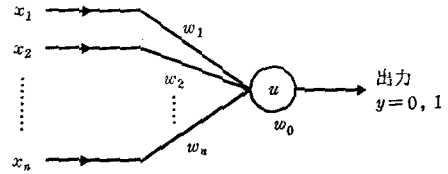


図 5.1 デジタル型静的確率論的ニューロンモデルと発火確率の温度 T への依存の様子

ロン k を選ぶ.

3° 内部電位 $u_k = U_k(x_1, \dots, x_n)$ を求める.

4° 確率 $\sigma(u_k/T)$ でこのニューロンの出力として1を出す (確率 $1 - \sigma(u_k/T)$ で出力として0を出す).

5° 2° へゆく.

つまり, 最初各ニューロンの出力を任意に定める. そうすると各ニューロンの内部電位が式 (5.3) によって決まる. このとき n 個のニューロンの中から確率 $1/n$ でランダムに1つのニューロンを選び, このニューロンについてだけ出力を確率的に定めるのである. このような確率的な動作を繰り返す機械をボルツマンマシンという.

この機械の各時刻における様子は各ニューロンの発火の状況によって記述することができるから, $x = (x_1, \dots, x_n)$ を状態と呼び, すべての状態の集合を S で表わすことにする. なお, 以下の議論では回路の結合係数に関して

$$(5.5) \quad a_{ii} = 0, \quad i \neq j \Rightarrow a_{ij} = a_{ji}$$

を仮定しておくことにする.

ボルツマンマシンは, 上でみたように, その状態を確

率的に変えていく機械である。そこで時刻 t での状態を表わす確率変数 (ベクトル) を、習慣にしたがって大文字を使って、 $X(t)$ と表わすことにすると、ボルツマンマシンは1つの確率過程:

$$(5.6) \quad X(0), X(1), \dots, X(t), \dots$$

と同一視できる。この過程は実は以下に述べるような状態推移確率行列 G_T を持つ有限マルコフ連鎖であることがわかっている [4]。以下でそのことを簡単に見ておこう。

いま、状態 $x=(x_1, \dots, x_n)$ に対してその第 k 成分を反転した (つまり、0 ならば 1 に、1 ならば 0 にした) 状態を

$$(5.7) \quad x(k)=(x_1, \dots, x_{k-1}, 1-x_k, x_{k+1}, \dots, x_n)$$

で表わすことにする。このとき、上のアルゴリズムの 2° は x を摂動し、次に移る状態の候補として $x(k)$ を確率分布:

$$(5.8) \quad P(x, y) = \begin{cases} 1/n, & \exists k: y=x(k) \text{ であるとき;} \\ 0, & \text{その他のとき} \end{cases}$$

にしたがって、確率 $P(x, x(k))$ で選定したということが出来る。この $P(x, y)$ を摂動確率といい、これを x 行 y 列の成分とする行列 P を摂動行列と呼んでいる。

ボルツマンマシンのメカニズムの第 2 の部分は選んだニューロンの発火を試み、その結果によって状態の第 k 成分 x_k を決めることである (上のアルゴリズムの 4° を参照)。これを次に推移する状態の候補という観点から考えると、その候補をほんとうに受け入れるかどうかを決めるということになる。つまり、現在 x という状態にあって、選んだ候補が $x(k)$ であったとすると、その候補が受け入れられるのは $x_k=0$ のときはニューロン k が発火するときであり、また、 $x_k=1$ のときはニューロン k が発火しないときである。したがって、ニューロンモデルの発火確率の式 (5.1), (5.2) に注意すれば、確率 $\sigma(-(2x_k-1)U_k(x)/T)$ で状態 $x(k)$ を受け入れると考えるとよいことになる。

ここで状態 x から定まる量:

$$(5.9) \quad E(x) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j - \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

を考え、これをエネルギーと呼ぶことにする。そうすると状態 x が $x(k)$ に変わったときのエネルギーの差は

$$(5.10) \quad E(x(k)) - E(x) = (2x_k - 1)U_k(x)$$

と表わされるので、状態 y を受け入れる上の確率は

$$(5.11) \quad A_T(x, y) = \sigma\left(-\frac{E(x(k)) - E(x)}{T}\right)$$

と書くことができる。この確率を受理確率といい、これ

を x 行 y 列の成分とする行列 A を受理行列という。

この 2 つの確率、すなわち、摂動確率と受理確率を用いると時刻 t で状態が x であるとき時刻 $t+1$ で状態が y に移る確率:

$$(5.12) \quad G_T(x, y) = P(X(t+1)=y | X(t)=x)$$

は

$$(5.13) \quad G_T(x, y) = \begin{cases} P(x, y)A_T(x, y), & x \neq y \text{ のとき;} \\ 1 - \sum_{z \neq x} P(x, z)A_T(x, z), & x = y \text{ のとき} \end{cases}$$

で与えられることがわかる。そして、この確率は明らかに

$$(5.14) \quad \forall x, y \in S: 0 \leq G_T(x, y) \leq 1,$$

$$(5.15) \quad \forall x \in S: \sum_{y \in S} G_T(x, y) = 1$$

を満たしているの、ボルツマンマシンの状態の列は $G_T(x, y)$ を x 行 y 列の成分とする状態推移確率行列 G_T にしたがうマルコフ連鎖であることがわかるわけである。

ここで、このマルコフ連鎖にしたがう状態の確率分布がどのような分布に近づいていくかを考えてみる。そのためにエネルギー E から定まるギブス分布あるいはボルツマン分布と呼ばれる確率分布:

$$(5.16) \quad q_T(x) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{T} E(x)\right) \quad (x \in S)$$

を導入する。ここに Z は式 (5.16) の x に関する和を 1 とするための規格化定数であるが、統計物理学において分配関数と呼ばれるものに相当している。

このとき、ギブス分布とギブス行列の間に次のようないちじるしい関係 (詳細的合条件):

$$(5.17) \quad \forall x, y \in S: q_T(x)G_T(x, y) = q_T(y)G_T(y, x)$$

が成り立つことが簡単な計算からわかり、これを用いると、さらに

$$(5.18) \quad \forall T: q_T G_T = q_T$$

を示すことができる。ここに q_T は $q_T(x)$ を第 x 成分とする確率 (行) ベクトル (状態の確率分布) である。

式 (5.18) は状態の確率分布がギブス分布であるときには、状態推移確率行列 G_T によって状態確率分布が変化しないということを意味している。このような状態確率分布をこのマルコフ連鎖の平衡分布と呼んでいる。

ところで、上の推移行列 G_T をよく調べてみると 2 つの重要な性質を持っていることがわかる。すなわち、その 1 つは

$$(5.19) \quad \forall x, y \in S, \exists s: G_T^s(x, y) > 0$$

が成り立つことで、このとき G_T は既約であるという。

ここに $G_T^s(x, y)$ は行列 G_T の s 個の積の x 行 y 列の成分である。時刻 0 での状態確率分布を $p(0)$ とするとき、 s 時刻後の状態確率分布 $p(s)$ は $p(s) = p(0)G_T^s$ で与えられるから、マルコフ連鎖が既約であるとはどんな状態から出発しても十分の時間の経過の後には任意の状態に推移できる可能性をもっているということに他ならない。

状態推移確率行列のもう 1 つの性質は

(5.20) $\forall x \in S: \{s | G_T^s(x, x) > 0\}$ の最大公約数 = 1 が成り立つことであり、このとき G_T は非周期的であるという。つまり、任意の状態に関して自分自身に戻るのに要する推移の回数の最大公約数が 1 であるということである。

さて、状態推移確率行列が既約でしかも非周期的であると、唯一つの平衡分布が存在して、どんな初期分布から出発しても状態分布はやがてはこの平衡分布に収束することがマルコフ連鎖の理論でよく知られている。つまり、 r を任意の状態確率分布とすると

$$(5.21) \quad \lim_{m \rightarrow \infty} r G_T^m = q_T$$

が成り立つ。したがって、すでに見たように、ギブス分布が平衡分布であったわけであるが、実はこれが唯一の平衡分布であり、ボルツマンマシンを動かしていくと、最初の状態が何であれ、やがては状態分布は式 (5.16) のギブス分布に必ず近づいていくということになる。これがボルツマンマシンの最も重要な確率的性質である。

ここで平衡分布であるギブス分布の形が温度 T によってどのように変わるかを調べてみよう。そのためにエネルギー E の最小値 E_{\min} を与える S の要素の集合を

$$(5.22) \quad S_0 = \{x | E(x) = E_{\min}\}$$

と表わすことにし、これを用いて状態の確率分布:

$$(5.23) \quad q_0(x) = \begin{cases} 1/|S_0|, & x \in S_0 \text{ のとき;} \\ 0, & x \notin S_0 \text{ のとき} \end{cases}$$

を考える。ここに $|A|$ は集合 A の要素の数を表わす。この確率分布をエネルギー E の最適分布と呼ぶことにする。

そうすると温度 T を 0 に近づけることによって、ギブス分布は最適分布を限りなく十分に近似できるという性質をもっていることが簡単な計算から確かめられる。つまり、

$$(5.24) \quad \lim_{T \rightarrow 0} q_T = q_0$$

が成り立つ。

したがって、この式と式 (5.21) を合わせると、結局

$$(5.25) \quad \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow \infty} r G_T^m = q_0$$

が成り立つことになる。

最適分布 q_0 はエネルギーを最小にするような状態が確率 1 で発生することを意味している。したがって、十分低い温度 T を設定し、ボルツマンマシンを駆動すると、状態分布はやがてはギブス分布に近づき、それはほとんど最適分布に等しいから、エネルギーの最小値を与える状態が高い確率で発生することになる。つまり、離散値をとる変数の関数 (エネルギー) の最小値を求めることができるわけである。これが確率的探索機械としてのボルツマンマシンの基本的なからくりである。

6. 確率論的最小値探索機械

いま、ボルツマンマシンのアルゴリズムを摂動確率と受理確率を用いて書き改めると次のようになる。

- 1° x に初期状態を設定する。
- 2° 確率分布 $P(x, y)$ にしたがって状態 y を選ぶ。
- 3° 受理確率 $A_T(x, y)$ を求める。
- 4° 確率 $A_T(x, y)$ で状態を x から y に更新する (確率 $1 - A_T(x, y)$ で状態を変えない)。
- 5° 2° へゆく。

ここで、式 (5.11) の受理確率をギブス分布を用いて表わすと

$$(6.1) \quad A_T(x, y) = \frac{q_T(y)/q_T(x)}{1 + q_T(y)/q_T(x)}$$

と書くことができる。

一方、ニューラルネットのことを忘れて、 S を一般の状態集合 (数学的には単に有限集合であればよい) とし、 E をその上で定義された実数値関数と考えてみると、上のアルゴリズムはシミュレーテッドアニーリングと呼ばれる確率論的探索機械とほぼ同じものになっているのである [1, 4]。違うところは 2 つある。

その 1 つは摂動確率 $P(x, y)$ を x 行 y 列の成分とする行列 P (これを摂動行列という) がいわゆる確率行列であって、次の条件:

$$(6.2) \quad \forall x \in S: P(x, x) = 0,$$

$$(6.3) \quad \forall x, y \in S: P(x, y) = P(y, x),$$

$$(6.4) \quad \forall x, y \in S, \exists s: P^s(x, y) > 0$$

を満たしているならばどんなものでもよいという点である。ここに、 $P^s(x, y)$ は行列 P の s 個の積の (x, y) 成分である。

違いの他の 1 つは受理確率が

$$(6.5) \quad A_T(x, y) = g\left(\frac{q_T(y)}{q_T(x)}\right)$$

の形で与えられればよいということである。ここに g は区間 $(0, \infty)$ から区間 $(0, 1]$ への単調増加な関数で

$$(6.6) \quad \forall u \in (0, \infty) : g(u) = ug\left(\frac{1}{u}\right)$$

を満たすものである [4]。 g の例としては式 (6.1) のボルツマンマシンの場合、すなわち、

$$(6.7) \quad g(u) = \frac{u}{1+u}$$

や

$$(6.8) \quad g(u) = \min\{1, u\}$$

が知られているが、これらは

$$(6.9) \quad g_r(u) = \left[\frac{ur}{1+ur}\right]^{1/r}$$

において、それぞれ $r=1$ あるいは $r \rightarrow \infty$ とした場合に含まれる。特に式 (6.8) の g を用いた場合のアルゴリズムはメトロポリス法として知られている。

以上述べたことから、ボルツマンマシンはシミュレーテッドアニーリングの特殊なタイプであることがわかる。“アニーリング”とは物質を高温から低温へとゆっくりと“焼きなまし”ていく物理現象のことをいう。このとき、物質の内部エネルギーが最小の単位になることが知られている。そして温度 T においてエネルギー単位が $E(x)$ である状態 x が生起する確率が式 (5.16) のギブス分布で与えられるというわけである。

ところで、式 (5.24) によれば、温度 T を小さく設定するほど、状態分布は最適分布 q_0 に近づき、したがって、大きい確率で最小値を求めることができるはずである。しかし、このとき状態推移に関してやっかいな問題が生じてくる。つまり、状態が目的関数の極小点に到達すると、そこから抜け出すことができなくて困難になり、なかなか最小点に到達できない。こういうときには一度温度 T を大きくすれば極小点から飛び出すことができそうである。このように、状態推移を重ねていく過程で温度 T をゆっくりと下げていく方がより確実に最小点に到達できそうに考えられる。

しかし、こうするとギブス行列 G_T はもはや時間に関して一定ではなくなり、したがって、これまでの議論は通用しなくなる。つまり、状態推移確率行列が時間に依存するタイプのマルコフ連鎖（これを（時間的に）一様でないマルコフ連鎖という）を扱わなければならない。探索の過程で温度をしだいに下げていく場合、つまり、一様でないアニーリングを議論するには多くの準備を必

要とするが、その筋道は次のように要約することができる。

いま、温度 T を時刻 t に対して

$$(6.10) \quad \theta(t) = \frac{\Delta}{\ln(t+2)}, \quad t=0, 1, 2, \dots$$

と制御することにする。ここに Δ はエネルギー E と摂動行列から定まるある定数である。このとき受理確率 $A_T(x, y)$ とギブス行列の成分 $G_T(x, y)$ は時間 t に依存するので、それぞれを $A(x, y; t)$ および $G(x, y; t)$ と書くことにする。そうすると、上のシミュレーテッドアニーリングのアルゴリズムは次のように書き改められる。

- 1° x に初期状態を設定する。
- 2° 時刻 t を 0 にセットする。
- 3° 確率分布 $P(x, y)$ にしたがって状態 y を選ぶ。
- 4° 温度 T を $\theta(t)$ に設定する。
- 5° 受理確率 $A(x, y; t)$ を求める。
- 6° 確率 $A(x, y; t)$ で状態を x から y に更新する（確率 $1 - A(x, y; t)$ で状態を変えない）。
- 7° 時刻 t を 1 だけ増し、3° へゆく。

このとき、時刻 t での状態の確率分布 $p(t)$ は

$$(6.11) \quad p(t) = p(0)G(0)G(1)\dots G(t)$$

と表わされる。この $p(t)$ が $t \rightarrow \infty$ で最適分布 q_0 に収束してくれれば、すなわち、

$$(6.12) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} p(t) = q_0$$

が成り立つならば、時間に関して非一様なアニーリングによって関数 E の最小値を確率 1 で求めることができることになる。そしてこの収束性は一様でないマルコフ連鎖の理論を使い、やや長い議論ののちに保証されることになるのである [2, 3, 4]。

こうして得られた結果は、式 (6.10) の温度制御にしたがうならば、どんな状態から出発してもボルツマンマシンを含むアニーリングの手法によって必ずエネルギーの最小値を探索できることを意味している。しかし、そうはいっても最小値が得られる確率が時刻 t に関してどれくらい早さで 1 に近づくかが問題である。つまり、収束の速度である。これに関しては実験的にいろいろ考察されているが、明確な結論は現在のところ得られていない模様である [5]。

7. おわりに

多くのニューラルネットの中から典型的なマシンを 3 つ選んでその数理的からくりを紹介した。学習認識機械

は基本的には関数補間の問題であるが、汎化性まで考慮に入れるとさまざまな課題をはらんでおり、統計的推定やトポロジーや組合せ理論が採用されることになる。決定論的探索機械では微分方程式の安定点に関する議論が中心的役割を演じる。また、シミュレーティッドアニーリングは本質的には有限マルコフ連鎖の理論に負うところが大きい。

大部分は大学初年級の線形代数・微分積分・確率統計でこと足りるとはいえ、少しきちんと理解しようとする、数値解析や微分方程式の定性的理論やマルコフ連鎖の入り口程度は理解しておく必要がある。ましてや新しいを展開を試みようとする、ときには予想もしない数学が必要になることもあるかも知れない。

この傾向は、ニューラルネットのような、幹線道路が敷かれていない新興分野の特徴であると同時に悩みでもある。これに対処するには、専門にとらわれない自由な発想と時間を掛けて培われた底力に頼るしかないように思われる。そのような資質をもった優れた理論研究者が多く輩出して、この世界に新風を吹き込んでくれることを期待しつつ、この連載の筆をおくこととする。

参 考 文 献

- [1] Aarts, E. and Korst, J.: *Simulated annealing and Boltzmann machines: A stochastic approach to combinatorial optimization and neural computing*, Wiley, 1988.
- [2] Geman, S. and Geman, D.: Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images, *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, PAMI-6, 6 (1984), 721-741.
- [3] Mitra, D., Romeo, F. and Sangiovanni-Vincentelli, A.: Convergence and finite-time behavior of simulated annealing, *Adv. Appl. Prob.*, 18 (1986), 747-771.
- [4] 上坂, 塚田: シミュレーティッドアニーリングのための受理関数の族について, 電子情報通信学会技術報告, NC89-66 (1990), 31-36.
- [5] 上坂: シミュレーティッドアニーリングの摂動近傍と収束速度について, 電子情報通信学会技術報告, AI90-37, PRU90-31 (1990), 23-29.

大学教員募集

募集人員 経営情報学部専任講師または助教授…2名
 担当科目 プログラミング/情報システム設計/
 シミュレーション
 専門分野 計算機ソフトウェア、情報システム
 (情報システム開発の実務経験のあること
 が望ましい)
 着任時期 1992年4月1日
 応募資格 大学院博士課程修了者
 またはこれに準ずる研究歴を有する者。
 通勤圏に居住できる者、年齢40歳位まで。
 提出書類 履歴書、教育研究業績一覧、
 主要論文別刷
 応募締切 随時(適任者が決定次第締切ります。)
 ※応募書類は返却いたしませんのでご了承下さい。

〈勤務先〉
 〒259-11
 神奈川県伊勢原市上粕屋1573

産能大学 (旧産業能率大学)
経営情報学部

〈書類送付先・問合せ先〉

〒141 東京都品川区大崎5-6-2
 TEL.03-5487-8855
 学校法人 産能大学 人事2課OR係