

# 修論ゼミ

須賀勇貴

茨城大学大学院 理工学研究科 量子線科学専攻 2 年

2023 年 7 月 20 日

1 4.2  $WW^T$  におけるスピン相関

2 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)

3 4.4 固有値スペクトルと  $W$  に格納された情報

1 4.2  $WW^T$  におけるスピン相関

2 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)

3 4.4 固有値スペクトルと  $W$  に格納された情報

## 4.2 $WW^T$ におけるスピン相関

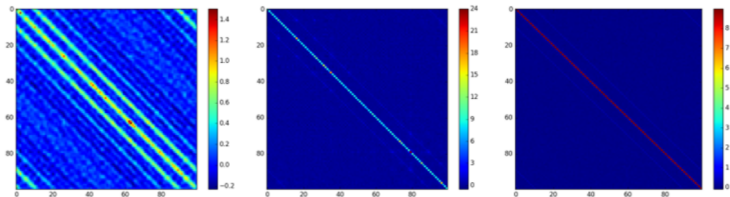


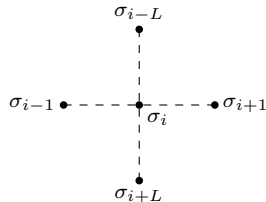
Figure 12: Elements of  $WW^T$  when the hidden layer has 16 (left), 100 (center), 400 (right) neurons.

図 12 は TypeV の RBM での行列  $WW^T$  ( $100 \times 100$ ) の各要素の値をプロットしたもの

$$(\sigma_{1,1}, \sigma_{1,2}, \dots, \sigma_{1,L}, \sigma_{2,1}, \dots, \sigma_{2,L}, \sigma_{3,1}, \dots, \sigma_{L,L})$$

$\Downarrow$

$$(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L, \sigma_{L+1}, \dots, \sigma_{2L}, \sigma_{2L+1}, \dots, \sigma_{LL})$$



## 4.2 $WW^T$ におけるスピン相関

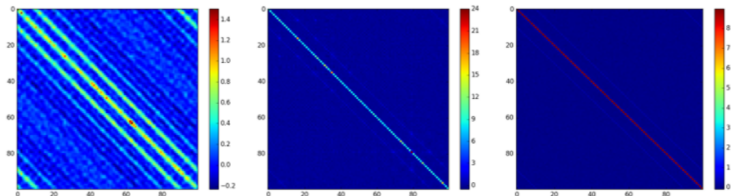


Figure 12: Elements of  $WW^T$  when the hidden layer has 16 (left), 100 (center), 400 (right) neurons.

### 図からわかること

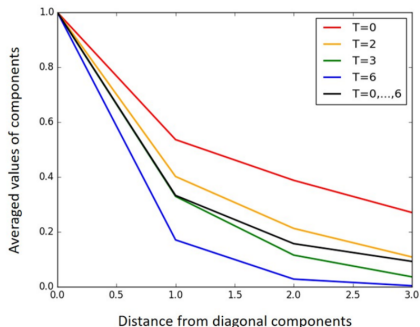
- どの場合も対角成分の値は大きい
- $N_h = 400$ ,  $N_h = 100$  の時は対角行列に近い
- $N_h = 16 < 100$  の時, 非対角成分にも大きな値が存在

⇒  $N_h = 16$  の時の  $WW^T$  は入力配位のスピン相関を反映しているに違いない!!

## 4.2 $WW^T$ におけるスピン相関

### 図からわかること

- $WW^T$  の相関は高温でより急速に減少  
⇒RBM は相関距離 (クラスターのサイズ) を正確に学習している
- TypeV は  $T=2$  と  $T=3$  の間  
⇒TypeV の RBM は  $T_c$  付近の配位と似た特徴を取得した



1 4.2  $WW^T$  におけるスピン相関

2 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)

3 4.4 固有値スペクトルと  $W$  に格納された情報

## 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)

$WW^\top$  の固有値, 固有ベクトルをそれぞれ  $\lambda_a, u_a$  ( $a = 1, \dots, N_h$ ) とする

$$WW^\top u_a = \lambda_a u_a$$

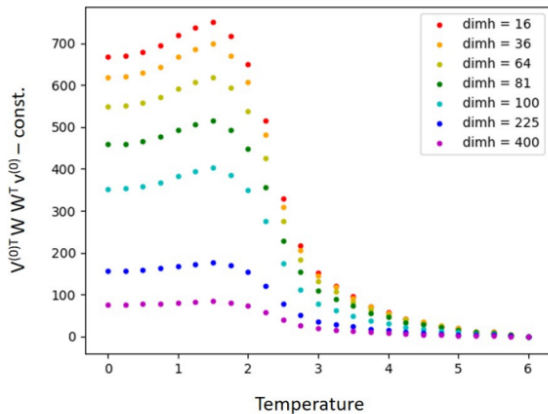
入力の配位ベクトル  $v^{(0)}$  は固有値ベクトルを使って  $v^{(0)} = \sum_a c_a u_a$  (規格化条件:  $\sum_a (c_a)^2 = 1$ ) のように分解することができるので

$$\begin{aligned} v^{(0)\top} WW^\top v^{(0)\top} &= \left( \sum_a c_a u_a \right)^\top WW^\top \left( \sum_a c_a u_a \right) \\ &= \left( \sum_a c_a u_a \right)^\top \left( \sum_a c_a \lambda_a u_a \right) \\ &= \sum_a \sum_{a'} c_a c_{a'} \lambda_{a'} (u_a)^\top u_{a'} \\ &= \sum_a c_a^2 \lambda_a \end{aligned}$$

$\Rightarrow v^{(0)}$  が  $WW^\top$  の固有値の要素を多く含んでいれば  $v^{(0)\top} WW^\top v^{(0)\top}$  の値が大きくなる

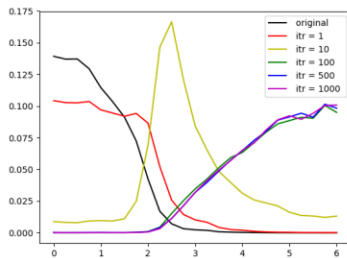
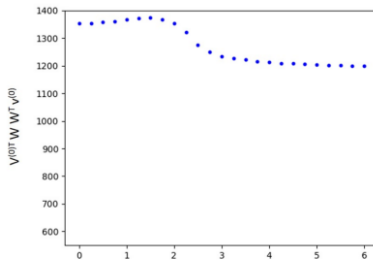
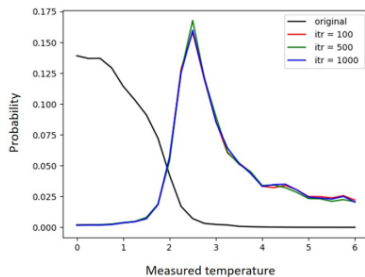
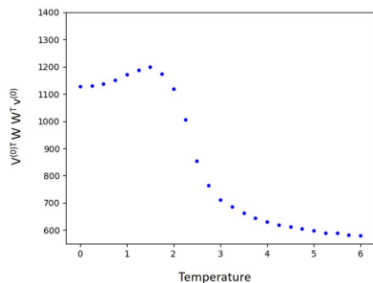


## 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)



- 臨界点付近で大きな変化 (イジングモデルの磁化を思わせる)

## 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)



## 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)

### 図 15 から分かること

- $N_h$  が大きい時と小さいとで臨界点付近での値の変化量が異なる  
→ この違いが図 6 と図 9 の RBM フローの違いを引き起こす原因?
- $H_h$  が大きいときは高温の時も値が大きい  
→  $N_h$  が大きい RBM は高温における特徴をより多く学習しているのではないか?

これは第 3.2 節の 2 番目の予想に他ならず、これは、4.2 章のスピン相関の振舞いで裏付けられている!!!

1 4.2  $WW^T$  におけるスピン相関

2 4.3 磁化と特異値分解 (SVD)

3 4.4 固有値スペクトルと  $W$  に格納された情報

## 4.4 固有値スペクトルと W に格納された情報

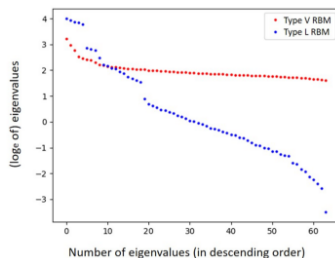


図 16 からわかること

- Type L ではいくつかの固有値だけが値が大きい

⇒ Type L RBM は、隠れ層のニューロンは少数で十分

- Type V では固有値の値は緩やかに減少

⇒ Type V RBM は、すべての固有ベクトルが均等に利用されている

⇒ 広い温度範囲の特徴を学習するには、隠れ層に多くのニューロンが必要!!

## 4.4 固有値スペクトルと $W$ に格納された情報

