数理脳科学
ボルツマンマシン

宮崎大学 工学研究科 工学専攻 情報
T2103329 東郷 拓弥

2021 年 7 月 12 日

1 問題設定

素子数 $n = 3$ のボルツマン機械を考えよう. この機械の j 番目の素子から i 番目の素子への結合を w_{ij}. 状態を $x = (x1, x2, x3)$, $x_i \in 0, 1$ と書く. ここで, 結合は対称であり ($w_{ij} = w_{ji}$), 自己結合はないとする ($w_{ii} = 0$). 各素子は非同期的に以下の確率にしたがい自分の状態を変えていく.

$$\Pr\{x_i = 1\} = \frac{1}{1 + \exp\{-u_i/T\}}, \qquad \Pr\{x_i = 0\} = 1 - \Pr\{x_i = 1\} \tag{1}$$

$$u_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}x_j - h_i = \sum_{j=0}^{n} w_{ij}x_j \tag{2}$$

ここで, 常に興奮している素子 $x_0 = 1$ を仮想的に考え, しきい値を $h_i = - w_{i0}$ と表現し記述を簡潔にした. パラメータ T の値は, 以下では特別な指示がなければ $T = 1$ とする. 時間 t における回路の状態を $\boldsymbol{x}(t)$ と書こう. 回路の状態は, $\boldsymbol{x}(0) \to \boldsymbol{x}(1) \to \boldsymbol{x}(2) \to \boldsymbol{x}(3) \to \cdots$ と, マルコフ連鎖として状態遷移を続けていく. これは次の定常分布

$$p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w}) = c \exp\{-E(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w})/T\} \tag{3}$$

をもつことが知られている. ここで

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w}) &= -\sum_{i<j} w_{ij}x_ix_j \\ &= -(w_{01}x_1 + w_{02}x_2 + w_{03}x_3 + w_{12}x_1x_2 + w_{13}x_1x_3 + w_{23}x_2x_3) \end{aligned} \tag{4}$$

であり,c は $\sum_{\boldsymbol{x}} p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w}) = 1$ とするための正規化定数

$$c = c(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}} \exp\{-E(\tilde{\boldsymbol{x}}; \boldsymbol{w})/T\}} \tag{5}$$

$\boldsymbol{w}$ はパラメータ $\boldsymbol{w} = (w_{01}, \cdots, w_{23})$ である. 回路の性質は $\boldsymbol{w}$ で決まる. 以下, 素子数 $n = 3$ の場合を考える. コンピュータプログラムは, 素子数が $n = 4, 5, \cdots$ となる場合にも簡単に対応できるよう書ければよいが, 無理はしなくてよい ($n = 16$ とか $n = 32$ の場合のシミュレーションができればよいが,2 進数と 10 進数を変換する関数を書く必要がある).

2 問 1

2.1 問題文

初期状態として回路に適当な興奮状態を設定した場合,(1) 式にしたがい状態が変化していく. 素子数 $n = 3$ の場合, $2^3 = 8$ 個の状態 ($\boldsymbol{x}_0 \sim \boldsymbol{x}_7$, 表 1 参照) をとりうる. それぞれの状態が (3) 式の確率で出現するか, 以下の (a),(b),(c) 3 通りについて計算機実験で確認し, 表 1, 表 2, 表 3 を完成させよ.

(a) どの素子も互いに結合していないとする ($w_{ij} = 0, i, j = 0, \cdots, 3$). この場合, 式 (3) の定常分布を計算すると, どの状態も確率 $\frac{1}{8}$ で出現することがわかる. 実際に計算機シミュレーションをおこない, 出現頻度を確かめよ (表 1).

(b) 結合係数 $\boldsymbol{w} = w_{ij}$ の値をランダムな値に設定し (たとえば $[-5:5]$ の一様分布にしたがう乱数. ただし $w_{ii} = 0, w_{ij} = w_{ji}$ とする), 式 (3) の定常分布を計算し, 各状態の出現確率を求めよ. また, 実際に計算機シミュレーションをおこない, 出現頻度を確かめよ (表 2).

(c) 状態 $\boldsymbol{x}^3$ と状態 $\boldsymbol{x}^6$ だけが出現するような回路を作ることはできるだろうか. 相関型連想記憶で記憶パターンを埋め込んだように $w_{ij} = \sum_{\boldsymbol{x}^3, \boldsymbol{x}^6} (2x_i - 1)(2x_j - 1)$ としてみよう. 学習前の結合係数が $w_{ij} = 0, i, j = 0, \cdots, n$ である場合, 学習後の各係数の具体的な値を求めよ ($w_{ij} = w_{ji}$ であるので, 以下では $i < j$ のみ記述を求めている). この w_{ij} と式 (3) を用い, 定常分布における各状態の $p(\boldsymbol{x})$(理論値. ボルツマン分布) を計算せよ. また, コンピュータシミュレーションをおこない, 各状態が実際に出現した頻度を計算し, それを理論値と比較せよ (表 3. 繰り返し回数 l を 1 万,100 万などと変えて, 少なくとも 2 通りは試すこと).

表 1: 機械の定常状態 (結合なし)

	状態 $\boldsymbol{x}$	出現回数	出現頻度
$\boldsymbol{x}^0$	$(0,0,0)$		
$\boldsymbol{x}^1$	$(0,0,1)$		
$\boldsymbol{x}^2$	$(0,1,0)$		
$\boldsymbol{x}^3$	$(0,1,1)$		
$\boldsymbol{x}^4$	$(1,0,0)$		
$\boldsymbol{x}^5$	$(1,0,1)$		
$\boldsymbol{x}^6$	$(1,1,0)$		
$\boldsymbol{x}^7$	$(1,1,1)$		

表 2: 機械の定常状態 (ランダム結合の場合)

	状態 $\boldsymbol{x}$	理論値： $p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w})$	実験値： $p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w})$ $l = 1,000$	実験値： $p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w})$ $l = 1,000,000$
$\boldsymbol{x}^0$	$(0,0,0)$			
$\boldsymbol{x}^1$	$(0,0,1)$			
$\boldsymbol{x}^2$	$(0,1,0)$			
$\boldsymbol{x}^3$	$(0,1,1)$			
$\boldsymbol{x}^4$	$(1,0,0)$			
$\boldsymbol{x}^5$	$(1,0,1)$			
$\boldsymbol{x}^6$	$(1,1,0)$			
$\boldsymbol{x}^7$	$(1,1,1)$			

表 3: 機械の定常状態 (連想記憶もどき)

	状態 $\boldsymbol{x}$	理論値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=1,000$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=1,000,000$
$\boldsymbol{x}^0$	$(0,0,0)$			
$\boldsymbol{x}^1$	$(0,0,1)$			
$\boldsymbol{x}^2$	$(0,1,0)$			
$\rightarrow\boldsymbol{x}^3$	$(0,1,1)$			
$\boldsymbol{x}^4$	$(1,0,0)$			
$\boldsymbol{x}^5$	$(1,0,1)$			
$\rightarrow\boldsymbol{x}^6$	$(1,1,0)$			
$\boldsymbol{x}^7$	$(1,1,1)$			

2.2 回答

2.2.1 (a)

結合係数を全て 0 とし実際に 100 万回シミュレーションを行ったところ、表 4 のようになった。

表 4: 機械の定常状態 (結合なし)

	状態 $\boldsymbol{x}$	出現回数	出現頻度
$\boldsymbol{x}^0$	$(0,0,0)$	125221	0.125221
$\boldsymbol{x}^1$	$(0,0,1)$	125772	0.125772
$\boldsymbol{x}^2$	$(0,1,0)$	124731	0.124731
$\boldsymbol{x}^3$	$(0,1,1)$	125890	0.125890
$\boldsymbol{x}^4$	$(1,0,0)$	124479	0.124479
$\boldsymbol{x}^5$	$(1,0,1)$	124638	0.124638
$\boldsymbol{x}^6$	$(1,1,0)$	124036	0.124036
$\boldsymbol{x}^7$	$(1,1,1)$	125233	0.125233

どのパターンも誤差 ± 0.001 以内で $\frac{1}{8}$ の確率で出現し、理論通りの結果となった。

2.2.2 (b)

結合係数を $[-5:5]$ の一様分布にしたがう乱数により初期化し、表 2 を埋めたところ、表 5 のようになった。
確率が著しく小さい値があったが、定常分布を計算した値とシミュレーションの結果は概ね等しくなった。

2.2.3 (c)

$\boldsymbol{x}^3=(0,1,1), \boldsymbol{x}^6=(1,1,0)$ を考慮し、$w_{ij}=\sum_{\boldsymbol{x}^3,\boldsymbol{x}^6}(2x_i-1)(2x_j-1)$ を計算した結果、次のようになった。

表 5: 機械の定常状態 (ランダム結合の場合)

	状態 $\boldsymbol{x}$	理論値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=1,000$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=1,000,000$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=10,000,000$
$\boldsymbol{x}^0$	$(0,0,0)$	8.85748763e-01	0.888	8.86341e-01	8.860349e-01
$\boldsymbol{x}^1$	$(0,0,1)$	7.04071483e-03	0.006	7.39600e-03	7.035400e-03
$\boldsymbol{x}^2$	$(0,1,0)$	8.99050110e-03	0.009	9.14200e-03	8.939600e-03
$\boldsymbol{x}^3$	$(0,1,1)$	4.94892468e-07	0.	0.00000e+00	7.000000e-07
$\boldsymbol{x}^4$	$(1,0,0)$	8.86149417e-02	0.08	8.74730e-02	8.836140e-02
$\boldsymbol{x}^5$	$(1,0,1)$	6.99043265e-03	0.006	6.96700e-03	7.025500e-03
$\boldsymbol{x}^6$	$(1,1,0)$	2.61272433e-03	0.011	2.68000e-03	2.600700e-03
$\boldsymbol{x}^7$	$(1,1,1)$	1.42728741e-06	0.	1.00000e-06	1.800000e-06

$$
\begin{aligned}
w_{01} &= (2-1)(0-1)+(2-1)(2-1) = -1+1 = 0\\
w_{02} &= (2-1)(2-1)+(2-1)(2-1) = 1+1 \quad = 2\\
w_{03} &= (2-1)(2-1)+(2-1)(0-1) = 1-1 \quad = 0\\
w_{12} &= (0-1)(2-1)+(2-1)(2-1) = -1+1 = 0\\
w_{13} &= (0-1)(2-1)+(2-1)(0-1) = -1-1 = -2\\
w_{23} &= (2-1)(2-1)+(2-1)(0-1) = 1-1 \quad = 0
\end{aligned}
$$

これを初期値として回路を作成し、シミュレーションを行った。

表 6: 機械の定常状態 (連想記憶もどき)

	状態 $\boldsymbol{x}$	理論値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=1,000$	実験値： $p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w})$ $l=1,000,000$
$\boldsymbol{x}^0$	$(0,0,0)$	0.03801919	0.033	0.038053
$\boldsymbol{x}^1$	$(0,0,1)$	0.03801919	0.052	0.037384
$\boldsymbol{x}^2$	$(0,1,0)$	0.28092596	0.311	0.281948
$\rightarrow \boldsymbol{x}^3$	$(0,1,1)$	0.28092596	0.243	0.280352
$\boldsymbol{x}^4$	$(1,0,0)$	0.03801919	0.05	0.038028
$\boldsymbol{x}^5$	$(1,0,1)$	0.00514534	0.006	0.005136
$\rightarrow \boldsymbol{x}^6$	$(1,1,0)$	0.28092596	0.279	0.280848
$\boldsymbol{x}^7$	$(1,1,1)$	0.03801919	0.026	0.038251

理論値、実験値共に状態 $\boldsymbol{x}^3$ と状態 $\boldsymbol{x}^6$ だけが出現するような回路にはならなかった.

3 問 2

3.1 問題文

各状態 $\boldsymbol{x}$ が次の表 4 に示す頻度で出現するボルツマン機械を, 学習により実現しよう.