イジングモデルとスペクトラルクラスタリング

Author: 小倉 康睦

Date: 22/11/2017

イジングモデル

エドワード・アンダーソン模型のスピングラスの基底探索問題は、次のハミルトニアン

$$H_0 = -\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j \tag{1}$$

の最小化問題と考えることができる。ただしJ_{ij}には正負のランダムな値が割り当てられており、σ_i, σ_jは$1, -1$のいずれかの値を取る。

量子アニーリングマシン（D-waveマシンなど）やイジングマシンは、J_{ij}を与えるだけでσ_i, σ_jの候補を探索できるが、古典コンピュータでは組み合わせ最適化問題となり、一般に解くことが困難である。

Jの対角成分のみを取り出した行列をTとして$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n)^{\mathrm{T}}$とおけば(1)式は$P = T - J$を用いて

$$H_0 = \sigma^{\mathrm{T}} P\sigma \tag{2}$$

と表すことができる。

スペクトラルクタスタリング

スペクトラルクラスタリングはカーネル法の手法のひとつである。データ点をふたつのクラスに分類したいとき、i番目のノードのクラスβ_iを$1, -1$のいずれかで表すことにする。ここでグラム行列Kを各ノード間の隣接行列とみなし、分類することによって生成された2-部グラフのカットを最小化するためにコスト関数

$$S = \sum_{i,j} K_{ij}(\beta_i - \beta_j)^2 \tag{3}$$

を最小化することを考える。これはグラフ信号処理の分野では、グラフK上のグラフ信号のなだらかさを表す尺度でもある。ここでこれを最小化問題としたのは、K_{ij}が、点どうしが離れるほど0に近づき、点どうしが近づくほど1に近づくような関数によって生成されたものだからである。したがって、ここでもしもK_{ij}が、点どうしが遠く離れるほど大きな値を取るような関数によって生成されていれば、この問題は最大化問題として解くことになる。

ここで$\Lambda_{ii} = \sum_{j=1}^{n} K_{ij}$となる対角行列$\Lambda$を定義し、(3)式は$L = \Lambda - K$を用いて

$$S = 2\beta^{\mathrm{T}} L\beta \tag{4}$$

と表すことができる。Lはスペクトルグラフ理論においてグラフラプラシアンと呼ばれている。(4)式は(2)式と酷似しており、Lが実対称行列であるのに対してJは各成分がランダムな値を持つ行列であること、および符号

の違いを除けば一致している。

β_iが$1, -1$のいずれかであるという制約においてこの最小化問題を解くことは困難であるから、β_iの値を実数に緩和した問題を考える。βのノルムは本質的にこの最小化問題に関係ないから、$\beta^{\mathrm{T}} \Lambda \beta = 1$という制約を置くと、ラグランジュの未定乗数法より、

$$L\beta = \lambda \Lambda \beta \tag{4}$$

という一般化固有値問題の最小固有値に対応する固有ベクトルを求めることに帰着される。求めたβ_iはいずれも実数になっているので、しきい値を用いるなどして$1, -1$に写像する。