基底状態スピングラスイジングモデル秩序変数と
機械学習パーセプトロン

— 機械学習パーセプトロンの理論的立証 —

斉藤　晃（akira311049@gmail.com）

要約

前著[2]で基底状態においてスピングラスイジングモデルの秩序変数を連立方程式で表すことができた。同様の式展開により機械学習パーセプトロンと同等の式を得ることができる。機械学習パーセプトロンは試行錯誤の結果の経験上の形式であり、その式化の根拠はないが、スピングラスイジングモデルの数学的式展開により同等の式が導けたことで、機械学習パーセプトロンの理論的立証が成立したと考える。また、連立方程式化により、機械学習の解析が進み、学習コストの軽減や精度の高いモデル作成に資する可能性があり、機械学習のさらなる各分野への浸透が進むことに貢献できると考える。

1　前書き

イジングモデルは最もシンプルで基本的な相互作用モデルである。お互いのスピン（ノード）が（-1or1）または（0or1）（以後 0or1 で述べる）によって温度 T による t=1/(Tk)（k はボルツマン定数）で定義される t（時間発展のパラメーター）と相互作用エネルギーがかけられ、初期値 t=0 から始まり、無限遠 t=∞の基底状態と呼ばれる状態に帰着する。この基底状態は系のエネルギーが最も低く、秩序変数は 0or1 をとり、相互作用の結果、系が最終どのような状態に落ち着くかを表す。スピングラスイジングモデルはイジングモデルの中でも各相互作用（正負が混ざった）をランダムに（個別に指定して）取るモデルであり[1]、様々な相互作用系や組み合わせ最適化問題をモデル化することができる。前著[2]でスピングラスイジングモデルの基底状態の解を連立方程式化することができた。同様の式展開により tanh での形式に表すことができる。これは機械学習パーセプトロンの形式そのものであり、機械学習のパーセプトロンが単なる経験則ではなく、自然を表した数学的な根拠のある式形式であることが分かる。以下、その式の導出と数値計算結果を示す。

2　結果

$1/k_BT \equiv t = \infty$ （基底状態）においてスピングラスイジングモデルの秩序変数を連立方程式で表せた。（状態変数 n_i は 0 または 1 ）

$$\langle n_i \rangle \ = \ \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(\frac{1}{2}\xi_i t\right) \quad (1)$$

$$\xi_i \ = \ \varepsilon_{ii} + \ \sum_{j \neq i} \varepsilon_{ij} \langle n_j \rangle$$

秩序変数 $\langle n_i \rangle$ は他ノードに重みをかけたものの和にバイアスを加え、活性化関数に通して（0 or 1）化されており、機械学習パーセプトロンの式と同等である。

3　理論

N 個の各ノード $i = 1 \sim N$ に以下の状態を持つ状態変数があるとする。

$$n_i = 0\ or\ 1 \quad (2)$$

系のハミルトニアンが以下で表せるモデルをイジングモデルという[1]。（イジングモデルは一般に $n_x = -1\ or\ 1$ だが簡単な計算で $n_x = 0\ or\ 1$ として扱うことができる）

$$-H = \sum_{i \le j} \varepsilon_{i,j} n_i n_j \quad (3)$$

ただし、$\varepsilon_{i,j}$は以下の範囲の任意の値を取る（スピングラスイジングモデル[1]）。

$$\varepsilon_{i,j} = -1 \sim 1 \quad (4)$$

秩序変数 $\langle n_x \rangle$ は以下で求まる。

$$\langle n_i \rangle = \frac{Z_i}{Z} \quad (5)$$

$$Z = \sum_{\{n\}} e^{-Ht}\ , Z_i = \sum_{\{n\}} n_i e^{-Ht}\ , t = \frac{1}{k_B T} \quad (6)$$

(5)式、(6)式から

$$\langle n_i \rangle = \ \langle \overline{n_\imath} e^{\varepsilon_{i,i} t} \prod_{j=1 \ne i}^{N} e^{\varepsilon_{i,j} n_j t} \rangle \quad (7)$$

$n_j = 0or1$ なので以下と同等である。

$$\langle n_i \rangle = \ \langle \overline{n_\imath} e^{\varepsilon_{i,i} t} \prod_{j=1 \ne i}^{N} \left((e^{\varepsilon_{i,j} t} - 1) n_j + 1 \right) \rangle \quad (8)$$

右辺はn_jの掛け算の期待値となるが、$t = \infty$では $\langle n_a n_b \rangle = \langle n_a \rangle \langle n_b \rangle$ であるので、

$$\langle n_i \rangle = \ \langle \overline{n_\imath} \rangle e^{\varepsilon_{i,i} t} \prod_{j=1 \ne i}^{N} \left((e^{\varepsilon_{i,j} t} - 1) \langle n_j \rangle + 1 \right) \quad (9)$$

$\langle \overline{n_\imath} \rangle = 1 - \langle n_i \rangle$ と $n_j = 0or1$ より、

$$\langle n_i \rangle = \ (1 - \langle n_i \rangle)\, e^{\varepsilon_{i,i} t} \prod_{j=1 \ne i}^{N} e^{\varepsilon_{i,j} \langle n_j \rangle\, t} \quad (10)$$

ここで

$$\xi_i \ = \ \varepsilon_{ii} + \sum_{j \ne i} \varepsilon_{ij} \langle n_j \rangle \quad (11)$$

を用いて表すと、

$$\langle n_i \rangle = \ (1-\langle n_i \rangle)\, e^{\xi_i t} \quad (12)$$

ここから $\langle n_i \rangle$ と $\langle \overline{n_i} \rangle = 1 - \langle n_i \rangle$ についてまとめると

$$\langle n_i \rangle \ = \ \frac{e^{\xi_i t}}{1+e^{\xi_i t}} \quad (13)$$

$$\langle \overline{n_i} \rangle \ = \ \frac{e^{-\xi_i t}}{1+e^{-\xi_i t}} \ = \ \frac{1}{1+e^{\xi_i t}} \quad (14)$$

ゆえに、$\langle n_i \rangle - \langle \overline{n_i} \rangle$ は

$$\langle n_i \rangle - \langle \overline{n_i} \rangle \ = \ \frac{e^{\xi_i t}-1}{1+e^{\xi_i t}} \ = \ \frac{e^{\xi_i/2t}-e^{-\xi_i/2t}}{e^{\xi_i/2t}+e^{-\xi_i/2t}} = \tanh\left(\frac{1}{2}\xi_i t\right) \quad (15)$$

$\langle \overline{n_i} \rangle = 1 - \langle n_i \rangle$ より、以下の式を得る。

$$\langle n_i \rangle \ = \ \frac{1}{2}+\frac{1}{2}\tanh\left(\frac{1}{2}\xi_i t\right) \quad (16)$$

$$\xi_i \ = \ \varepsilon_{ii} + \sum_{j\neq i} \varepsilon_{ij}\langle n_j \rangle$$

秩序変数 $\langle n_i \rangle$ は他ノードに重みをかけたものの和にバイアスを加え、活性化関数に通して（0 or 1）化されており、機械学習パーセプトロンの式と同等である。

4　連立方程式数値計算

（16)式の解の精度と速度はその連立方程式のソルバーの精度と速度による。python の科学技術計算ライブラリ SciPy を使ってサイト数（ノード数）N=6 と N=12 で厳密解と比較した結果が以下である。

【N＝ 6 と N＝12 で 100 回試算した結果】

サイト（ノード）数	正解率	エネルギー比率
6	99.50 %	99.96 %
12	98.91 %	99.72 %

連立方程式の精度はソルバーの精度により、いつも厳密解が得られるとは限らないが(16)式は成立していると言えそうだ。

5　考察

基底状態においてスピングラスイジングモデルの秩序変数を連立方程式で表すことができた。これにより連立方程式ソルバーの持つ精度や時間でイジングモデルの解を得ることができる。上式は各サイトに重み $\varepsilon_{i,j}$を掛けて和を取ったものに、活性化関数を通して $0or1$化したものであり、機械学習のパーセプトロンの構造そのものである。そもそも上式は

統計力学相互作用系（スピングラスイジングモデル）の数学的式展開から導いており、自然現象を反映したものである。ゆえに機械学習・ニューラルネットワークモデルを立証することに等しい。イジングモデルはノードの値を求める問題に対して、機械学習は重みの値を決める問題となる。 上式が数学的な理論が通っている、あるいは自然現象を表しているがゆえに、機械学習を解析できる理解できる可能性がある。したがって、より精度のいいモデルや学習不要で数値解析による機械学習モデルを作成することができる可能性がある。以上のように、スピングラスイジングモデルの基底状態での連立方程式化は、今まで困難だった様々な分野でのビジネス、社会課題の解決手段として大きな可能性を秘めている。ご興味をお待ちの方は下記メールアドレスまでご連絡いただきたい。
【問い合わせ】

e-mail	宛先
akira311049@gmail.com	齊藤　晃

6　引用文献

[1] 西森 秀稔 岩波書店 新物理学選書 スピングラス理論と情報統計力学 2016,2,10

[2] 齊藤 晃 基底状態スピングラスイジングモデルの秩序変数連立方程式化とその数値解 2023,10,13（https://vixra.org/abs/2310.0067）