6A-05

Improved Susceptibility Propagation による適応 Thouless-Anderson-Palmer 方程式の導出

高橋　茶子 *　東北大学大学院情報科学研究科
安田　宗樹 †　山形大学大学院理工学研究科
田中　和之 *　東北大学大学院情報科学研究科

1　序論

平均場近似 (mean-field approximation) は統計力学の分野で発展してきた近似法の一つであり，近年の深層学習の技術発展に大きく貢献してきた．平均場近似はモンテカルロ法に基づいたサンプリング手法に比べ計算が高速であることから，実アプリケーションにおいて多く用いられている．

本研究で扱う適応 Thouless-Anderson-Palmer (TAP) 平均場近似は他の平均場近似に比べ高次な制約を付加した近似であり，優れた性能を示すことが知られている [1, 2]．2 体相互作用モデルに対する適応 TAP 平均場方程式は，適応 TAP 平均場自由エネルギーと呼ばれる量を最小化することで導かれる．しかし一連の計算の煩雑さから，適応 TAP 平均場方程式が実際に用いられることは多くない．この問題に対し，適応 TAP 平均場方程式に対応する方程式を得ることができる別の方法として improved susceptibility propagation (I-SusP) が提案された [3]．しかしこの手法はイジング変数を持つ 2 体相互作用モデルのみに対して示されたものであり，より一般的な場合にも同様に適応 TAP 平均場方程式が導出できるかどうかは示されていない．

また適応 TAP 平均場方程式は，3 体以上の多体の相互作用を持つモデルに対しては定式化されていない．3 体以上の相互作用モデルでは，適応 TAP 平均場自由エネルギーそのものの導出は 2 体相互作用モデルにおける方法と同様の方針で行うことができないため，その導出自体が非自明であり未解決の問題である．

本研究では上記 2 点の問題に取り組む．本研究では，(i) 離散および連続の変数を持つ 2 体相互作用マルコフ確率場に対する適応 TAP 平均場方程式が I-SusP により導出できることを示す．(ii) I-SusP を用いて 3 体以上の相互作用を持つマルコフ確率場に対する適応 TAP 平均場方程式に対応する方程式を導出する．紙面の都合上，本稿では主に (i) についての説明を行う．

2　2 体相互作用を持つマルコフ確率場

ノード $V = \{1, 2, \cdots, n\}$，リンク $E = \{(i, j)\}$ を持つ無向グラフ $G(V, E)$ に対するエネルギー関数を次のように定義する．

$$E(\boldsymbol{x}; \theta) := -\sum_{i \in V} h_i x_i + \sum_{i \in V} \frac{\lambda_i}{2} x_i^2 - \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} x_i x_j \tag{1}$$

$\boldsymbol{x} = \{x_i \mid i = 1, 2, \cdots, n\}$ は離散または連続の値をとる確率変数である．$\theta = \{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{h}, \boldsymbol{J}\}$ はモデルパラメータをまとめて表記したものである．h_i は x_i のバイアスを，J_{ij} は x_i と x_j の間の結合の重みを表すパラメータである．変数間の結合に方向性はなく ($J_{ij} = J_{ji}$)，自己結合を持たない ($J_{ii} = 0$)．λ_i は x_i の分散に関連するパラメータである．マルコフ確率場は式 (1) を用いて次のように定義される．

$$P(\boldsymbol{x}; \theta) := \frac{1}{Z} \exp(-E(\boldsymbol{x}; \theta)) \tag{2}$$

Z は分配関数である．x_i が連続変数の場合は，式 (2) はガウシアングラフィカルモデルと呼ばれる．

Gibbs 自由エネルギー

適応 TAP 平均場方程式の導出に際しては，従来手法，提案手法ともにモデルの Gibbs 自由エネルギーを利用する．テスト分布 $Q(\boldsymbol{x})$ に対し，ある制約のもとで Kullback-Leibler 情報量 $\mathrm{KL}[P \parallel Q] := \sum_{\boldsymbol{x}} Q(\boldsymbol{x}) \ln(Q(\boldsymbol{x})/P(\boldsymbol{x}; \theta))$ を最小とする $Q^*(\boldsymbol{x})$ が近似分布として得られる．$\mathrm{KL}[P \parallel Q]$ の最小化は，$\mathrm{KL}[P \parallel Q]$ から定数部分を除外した変分自由エネルギーと呼ばれる量 $\mathcal{F}[Q] = \langle \ln Q(\boldsymbol{x}) \rangle_Q + \langle E(\boldsymbol{x}) \rangle_Q$ の最小化と等価であるため，そちらを考えることとする．$\langle \cdots \rangle_Q$ は $\cdots$ の分布 $Q(\boldsymbol{x})$ における期待値を表す．制約条件 $m_i = \langle x_i \rangle_Q, v_i = \langle x_i^2 \rangle_Q$ $(\forall i \in V)$ を考慮して $\mathcal{F}[Q]$ の最小化を行うと，式 (2) に対する Gibbs 自由エネルギーは次のように表される．

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{v}, \alpha) = &-\sum_{i \in V} h_i m_i + \sum_{i \in V} \frac{\lambda_i}{2} v_i + \sum_{i \in V} R_i^*(\alpha) m_i \\ &- \sum_{i \in V} \frac{L_i^*(\alpha)}{2} v_i - \ln Z(\alpha) \end{aligned} \tag{3}$$

α は第 4 節で行うプレフカ展開 [4] において相互作用の強さを調整するためのパラメータである．$Z(\alpha)$ は次のように定義している．

$$Z(\alpha) := \sum_{\boldsymbol{x}} \exp\Big(\sum_{i \in V} R_i^*(\alpha) x_i - \sum_{i \in V} \frac{L_i^*(\alpha)}{2} x_i^2 + \alpha \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} x_i x_j \Big)$$

$L_i^*(\alpha), R_i^*(\alpha)$ は次の条件を満たすラグランジュの未定乗数である．

$$\begin{aligned} \{L_i^*(\alpha), R_i^*(\alpha)\} = \mathop{\arg\max}_{L_i(\alpha), R_i(\alpha)} \Big\{ &\sum_{i \in V} R_i(\alpha) m_i - \sum_{i \in V} \frac{L_i(\alpha)}{2} v_i \\ &- \ln \sum_{\boldsymbol{x}} \exp\Big(\sum_{i \in V} R_i(\alpha) x_i - \sum_{i \in V} \frac{L_i(\alpha)}{2} x_i^2 + \alpha \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} x_i x_j \Big) \Big\} \end{aligned}$$

3　適応 TAP 平均場自由エネルギーからの適応 TAP 平均場方程式の導出

適応 TAP 平均場方程式は，適応 TAP 平均場自由エネルギー

$$G_{\mathrm{adaTAP}}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{v}) := G(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{v}, 0) + G^G(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{v}, 1) - G^G(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{v}, 0) \tag{4}$$

を $\boldsymbol{m}$ について最小化することで得られる．$G^G(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{v}, \alpha)$ は x_i が連続変数の場合の Gibbs 自由エネルギーである．式 (2) のマルコフ確

Derivation of adaptive Thouless-Anderson-Palmer equation via improved susceptibility propagation

*Chako Takahashi, Kazuyuki Tanaka;
Graduate School of Information Sciences, Tohoku University
†Muneki Yasuda;
Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University

率場に対する適応 TAP 平均場方程式は次のように導かれる．

$$m_i^\dagger = \frac{\sum_{x_i} x_i \exp\Big(\sum_{i\in V} R_i^{*\dagger}(0)x_i - \sum_{i\in V} L_i^{*\dagger}(0)x_i^2/2\Big)}{\sum_x \exp\Big(\sum_{i\in V} R_i^{*\dagger}(0)x - \sum_{i\in V} L_i^{*\dagger}(0)x^2/2\Big)}, \quad (5)$$

$$v_i^\dagger = \chi_{ii}^\dagger + (m_i^\dagger)^2, \quad (6)$$

$$\chi_{ij}^\dagger = \frac{v_i - (m_i^\dagger)^2}{1+\Lambda_i(v_i-(m_i^\dagger)^2)}\Big(\delta_{ij} + \sum_{k\in\partial(i)} J_{ik}\chi_{kj}^\dagger\Big), \quad (7)$$

$$\Lambda_i = \frac{1}{v_i-(m_i^\dagger)^2}\sum_{k\in\partial(i)} J_{ik}\chi_{ki}^\dagger \quad (8)$$

式 (7) の $\chi_{ij}^\dagger$ は感受率 $\chi_{ij} := \langle x_i x_j\rangle - \langle x_i\rangle\langle x_j\rangle$ の適応 TAP 近似を表している．ここで，$\langle\cdots\rangle$ は $\cdots$ の $P(\boldsymbol{x};\theta)$ における期待値を表す．$\chi_{ij}^\dagger := \partial m_i^\dagger/\partial h_j$ と定義され，式 (6) はこの定義より導かれる．Λ_i は制約条件 $v_i = \langle x_i^2\rangle_Q$ に対するラグランジュの未定乗数である．δ_{ij} はクロネッカーのデルタである．$j\in\delta(i)$ は，ノード i とのリンクを持つノード j を表す．$L_i^{*\dagger}(0), R_i^{*\dagger}(0)$ は m_i, v_i の最小条件として次のように表される．

$$L_i^{*\dagger}(0) = \lambda_i - \Big(\Lambda_i + \frac{1}{v_i-(m_i^\dagger)^2}\Big), \quad (9)$$

$$R_i^{*\dagger}(0) = h_i + \sum_{j\in\partial(i)} J_{ij}m_j^\dagger - \Big(\Lambda_i + \frac{1}{v_i-(m_i^\dagger)^2}\Big)m_i^\dagger \quad (10)$$

式 (4) の最小化においては次の条件も満たす必要がある．

$$[(\boldsymbol{\Lambda}-\boldsymbol{J})^{-1}]_{ii} = v_i - (m_i^\dagger)^2 \quad (11)$$

ここで，$\boldsymbol{\Lambda}$ は ii 成分に $\Lambda_i + 1/(v_i-(m_i^\dagger)^2)$ を持つ対角行列であり，$\boldsymbol{J}$ は ij 成分に J_{ij} を持つ対称行列である．$[\boldsymbol{C}]_{ii}$ は行列 $\boldsymbol{C}$ の ii 成分を表す．

式 (4) の最小化は行列についての複雑な計算を要するため，避けられている問題である．またこの方法は，ガウシアングラフィカルモデルの分配関数を解析的に表現できるという恩恵を利用した方法である．しかし 3 体以上の相互作用を持つモデルはこの恩恵に浴することができないため，式 (4) の具体形を解析的に書き下すことすらも困難となる．

4 Improved Susceptibility Propagation による適応 TAP 平均場方程式の導出

I-SusP は 感受率伝搬法 (susceptibility propagation: SusP) と diagonal trick method (DTM) を組み合わせた方法である．式 (3) のギブス自由エネルギーをプレフカ展開 [4] し，α が 1 次の項までで打ち切ったものが式 (2) のナイーブ平均場自由エネルギーとして次のように得られる．

$$G_{\mathrm{nMF}}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{v}) = -\sum_{i\in V} h_i m_i + \sum_{i\in V}\frac{\lambda_i}{2}x_i^2 + \sum_{i\in V} R_i^*(0)m_i - \sum_{i\in V}\frac{L_i^*(0)}{2}v_i - \ln Z(0) - \sum_{(i,j)\in E} J_{ij}m_i m_j \quad (12)$$

$L_i^*(0), R_i^*(0), Z(0)$ は $L_i^*(\alpha), R_i^*(\alpha), Z(\alpha)$ に $\alpha = 0$ を代入したものである．I-SusP における DTM は，イジング変数を持つ 2 体相互作用モデルの SusP での分散の近似を 1 に補正するために用いる [3] が，本研究では DTM を離散または連続の変数の場合に拡張し，分散の近似を v_i に補正するために用いる．DTM による項 $\sum_{i\in V}\Lambda_i'(v_i - m_i^2)/2$ を式 (12) に追加した新しい近似自由エネルギーを次のように定義する．

$$G^\ddagger(\boldsymbol{m},\boldsymbol{v},\boldsymbol{\Lambda}) := G_{\mathrm{nMF}}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{v}) - \sum_{i\in V}\frac{\Lambda_i'}{2}(v_i - m_i^2) \quad (13)$$

また，I-SusP による感受率の近似 $\chi_{ij}^\ddagger$ を次のように定義する．

$$\chi_{ij}^\ddagger = \frac{\partial m_i^\ddagger}{\partial h_j} \quad \Big(\boldsymbol{m}^\ddagger = \arg\min_{\boldsymbol{m}} G^\ddagger(\boldsymbol{m},\boldsymbol{v},\boldsymbol{\Lambda})\Big) \quad (14)$$

式 (7) を考慮しつつ式 (13) を $\boldsymbol{m}$ について最小化することにより，次の方程式が得られる．

$$m_i^\ddagger = \frac{\sum_{x_i} x_i \exp\Big(\sum_{i\in V} R_i^{*\ddagger}(0)x_i - \sum_{i\in V} L_i^{*\ddagger}(0)x_i^2/2\Big)}{\sum_x \exp\Big(\sum_{i\in V} R_i^{*\ddagger}(0)x - \sum_{i\in V} L_i^{*\ddagger}(0)x^2/2\Big)}, \quad (15)$$

$$v_i^\ddagger = \chi_{ii}^\ddagger + (m_i^\ddagger)^2, \quad (16)$$

$$\chi_{ij}^\ddagger = \frac{v_i - (m_i^\ddagger)^2}{1+\Lambda_i'(x_i-(m_i^\ddagger)^2)}\Big(\delta_{ij} + \sum_{k\in\partial(i)} J_{ik}\chi_{kj}^\ddagger\Big), \quad (17)$$

$$\Lambda_i' = \frac{1}{v_i-(m_i^\ddagger)^2}\Big(\sum_{k\in\partial(i)} J_{ik}\chi_{ki}^\ddagger\Big) \quad (18)$$

式 (17) は式 (14) より導かれる．m_i, v_i それぞれについての最小条件は次の 2 式で与えられる．

$$L_i^{*\ddagger}(0) = \lambda_i - \Lambda_i', \quad (19)$$

$$R_i^{*\ddagger}(0) = h_i + \sum_{j\in\delta(i)} J_{ij}m_j - \Lambda_i' m_i \quad (20)$$

デルタ関数の性質より，式 (17) から

$$[\boldsymbol{B}^{-1}]_{ii} = v_i - (m_i^\ddagger)^2 \quad (21)$$

が成り立つ．ここで $\boldsymbol{B}$ は ij 成分に B_{ij} を持つ対称行列であり，$B_{ij} := \delta_{ij}\big(\Lambda_i' + 1/(v_i-(m_i^\ddagger)^2)\big) - J_{ij}$ である．変数変換 $\Lambda_i + 1/(v_i - (m_i^*)^2) \to \Lambda_i'$ を施すと，式 (9), 式 (10) は式 (19), 式 (20) とそれぞれ一致し，式 (5)–(8) は式 (15)–(18) とそれぞれ一致する．よって式 (11) は式 (21) と一致し，I-SusP により適応 TAP 平均場方程式に対応する方程式が導出された．

5 結論

本稿では，離散および連続の変数を持つ 2 体相互作用モデルに対する適応 TAP 平均場方程式が I-SusP によって導出できることを示した．離散および連続変数の場合でも，I-SusP を用いることで適応 TAP 平均場自由エネルギー導出における煩雑な手続きを経ることなく適応 TAP 平均場方程式を導出することができる．講演では，多体相互作用を持つマルコフ確率場に対する適応 TAP 平均場方程式の導出および数値実験の結果を発表する予定である．

謝辞

本研究の一部は，日本学術振興会特別研究員奨励費 (JP17J03081)，文部科学省科学研究費補助金 (15K00330)，JST-CREST (JPMJCR1402) の補助を受けて行われたものである．

参考文献

[1] M. Opper and O. Winther: Adaptive and self-averaging Thouless-Anderson-Palmer mean field theory for probabilistic modeling, Phys. Rev. E, **64** (5), 056131, 2001.

[2] H. Huang and Y. Kabashima: Adaptive Thouless-Anderson-Palmer approach to inverse Ising problems with quenched random fields, Phys. Rev. E, **87** (6), 062129, 2013.

[3] M. Yasuda and K. Tanaka: Susceptibility propagation by using diagonal consistency, Phys. Rev. E, **87** (1), 012134, 2013.

[4] T. Plefka: Convergence condition of the TAP equation for the infinite-ranged Ising spin glass model, J. Phys. A, **15**, 1971, 1982.