

Sourlas 符号の PCA による解析

A PCA approach to Sourlas code analysis

井上 真郷* 福島 孝治† 岡田 真人‡
Masato Inoue Koji Hukushima Masato Okada

Abstract: We investigated the decoding process of 3-body Sourlas code using principal component analysis (PCA) method. In this report, we show the possibility that extracted axes by PCA could be useful parameters, such as order parameters or free energy, for understanding both dynamical and equilibrium states of the system. This PCA approach could be valid even in more difficult systems that we cannot investigate analytically.

Keywords: Sourlas code, spin glass, principal component analysis (PCA), exchange Monte Carlo method, replica theory

1 はじめに

近年、統計力学的手法が確率的情報処理に盛んに適用されている。その一つの理由は、Sourlas 符号や Gallager 符号のような誤り訂正符号 [1] や CDMA [2] が、統計力学で解析されてきた平均場モデルに属しており、それらの系をレプリカ法に代表される理論的な手法によって、定量的に解析できるからである。統計力学的手法では、系の大きさが無限大の極限をとり、オーダーパラメータと呼ばれる、系のマクロなパラメータが満たす閉じた方程式 (オーダーパラメータ方程式) を導出する。我々はそのオーダーパラメータ方程式を解き、オーダーパラメータを“視る”ことにより、系のミクロな挙動に捕われることなく、望ましくない局所解の存在など、系のマクロな性質を知ることができる。

このような魅力的な枠組にも致命的な欠点がある。ほ

とんど全ての確率モデルは解けないということである。そこで普通は、解けるモデルを典型系として解いておいて、これらの典型系の性質を定性的に補間することで、解けないモデルの性質を類推する戦略がとられる。しかし、この戦略にも限界がある。これは、格子上のスピングラスモデルで平均場モデルで展開された、レプリカ対称性の破れ描像が成り立つか否かの論争が続いていることから容易に想像できる [3]。補間による類推が難しい系では、何某かの特殊性が存在していると考えられ、それらを一つ一つ解明していくことが必要である。

解けないモデルを“視る”手法として、計算物理の分野では、素子の相関行列の固有ベクトルのうち、大きな固有値を持つ少数個の固有ベクトルが張る部分空間へ状態空間を射影する主成分分析 (PCA) が、最近積極的に試されている。PCA により、格子上のスピングラスモデルの性質が直観的に理解できたり [3, 4]、タンパク質の折畳みのダイナミクスを可視化することが可能になっている [5]。

これらを前提にすれば、解けない確率モデルに PCA を用いて、少数個の固有モードを解析すれば、解けないモデルでもオーダーパラメータに対応する量が自動抽出できる可能性がある。しかし、PCA で抽出された軸が、本当にオーダーパラメータに対応するのか、対応しないのならどう違うのかは、それほど明らかになっていない。これを知るためには、可解モデルを PCA で解析し、オーダーパラメータから得られる系の性質が、PCA の手法で得られる系の性質とどのように関係しているかを調べる必要がある。そこで、本研究では、確率的情報処理の統計力学モデルで最も単純なものの一つである 3 体 Sourlas 符号を議論する。3 体 Sourlas 符号では正しい解と不適切な局所解が共存することが知られており、

*理化学研究所 脳科学総合研究センター 脳数理研究チーム
〒 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1
Laboratory for Mathematical Neuroscience, RIKEN Brain Science Institute, Saitama 351-0198, Japan
科学技術振興事業団 さきがけ研究 21 「協調と制御」領域
“Intelligent Cooperation and Control”, PRESTO, JST
TEL: 048-467-6845, FAX: 048-467-7349,
E-mail: minoue@brain.riken.go.jp

†東京大学大学院総合文化研究科 広域科学専攻 関連基礎科学系
〒 153-8902 東京都目黒区駒場 3-8-1
Department of Basic Science, Graduate School of Arts and Sciences, University of Tokyo, 3-8-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8902, Japan
TEL: 03-5454-6513, FAX: 03-5454-6513,
E-mail: hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp

‡第一著者に同じ。Same as the ones of the first author.
E-mail: okada@brain.riken.go.jp

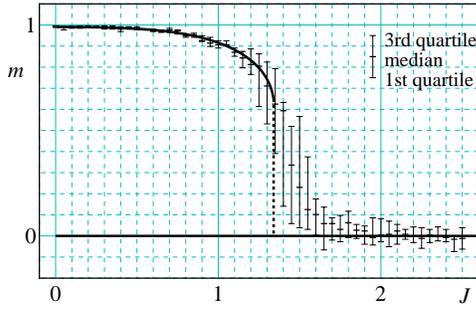


図 1: $T = 1.1$, $J_0 = 1$ での m の安定解 (太線). $J = 1.34$ で一次相転移を起こす. パー付きプロットは $N = 512$ でのシミュレーション結果. $J = 0$ でスタートさせ, 0.05 刻みで増加させた. J_{ijk} は試行毎に独立に設定した.

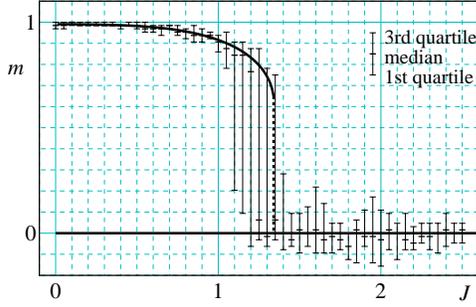


図 2: $N = 128$ でのシミュレーション結果. 他は図 1 に同じ.

レプリカ法の結果と PCA の手法を比較する良い系の一つであると考えられる.

2 モデルと解析

ここでは 3 体 Sourlas 符号の復号を議論する. 原信号 $\xi \equiv [\xi_1, \dots, \xi_N]$ の各成分は ± 1 の二値をとるものとし, その事前確率は一様分布であるとする. 符号化には 3 体のパリティ検査符号 $\tilde{J}_{ijk} = \xi_i \xi_j \xi_k$ を用いる. 通信路はガウス通信路を考え, 雑音のある通信路からの出力 $\{J_{ijk}\}$ を与えた時の原信号 ξ の事後確率を用いて原信号を推定する. この 3 体 Sourlas 符号の復号過程の性質は, 下記の確率分布を持つ系の平衡状態を求める時の性質に対応する [6],

$$P(\mathbf{s}) \equiv \exp(-\beta H(\mathbf{s})), \quad (1)$$

$$H(\mathbf{s}) \equiv - \sum_{i < j < k}^N J_{ijk} s_i s_j s_k, \quad (2)$$

$$J_{ijk} \sim \mathcal{N}\left(\frac{K! J_0}{N^{K-1}} \xi_i \xi_j \xi_k, \frac{K! J^2}{2N^{K-1}}\right). \quad (3)$$

ここで $K = 3$, N は符号の次元, $\mathbf{s} \equiv [s_1, \dots, s_N]$ は復号スピンを表す. $N \rightarrow \infty$ の熱力学的極限を議論するために, J_{ijk} は N に関してスケールされた正規分布に従うとした.

式 (2), (3) をレプリカ法及びレプリカ対称性近似を使って解析すると, オーダーパラメータ方程式は,

$$m = \int Dz \tanh \beta \left(J_0 K m^{K-1} + J \sqrt{\frac{K q^{K-1}}{2}} z \right), \quad (4)$$

$$q = \int Dz \tanh^2 \beta \left(J_0 K m^{K-1} + J \sqrt{\frac{K q^{K-1}}{2}} z \right), \quad (5)$$

となる [6]. $\int Dz$ は, $\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\exp(-z^2/2)}{\sqrt{2\pi}}$ の意味である. また, $m \equiv \frac{1}{N} \mathbf{s} \cdot \xi$ は, 復号スピンと原符号とのオーバーラップ, q はレプリカ間のオーバーラップである.

図 1, 2 の実線が温度 $T = 1/\beta = 1.0$ での m - J プロットである. 式 (4), (5) は $m = 0$ の自明な解を持ち, 更に $J \leq 1.34$ では $m \neq 0$ の非自明な解も持つ. $m \neq 0$ 解が, Sourlas 符号の望ましい復号結果に対応する. $m = 0$ 解と $m \neq 0$ 解が共存することから, 復号する際に必ず $m = 0$ の不適切な解が存在することが分かる. この不適切な解がスピングラス状態もしくは常磁性状態に対応する.

3 シミュレーション

3.1 交換モンテカルロ法

シミュレーションには, 交換モンテカルロ法 [7] を用いた. これは, $\{J_{ijk}\}$ は同じだが, 温度が異なる複数の系を用意し, 個々の系で通常の緩和を行いつつ, 系の温度も時々々入換える手法である. 高温でグローバルサーチ, 低温でローカルサーチを同時に行うため, ローカルミナに留まってしまうことが少ない. また, 温度交換は詳細釣合を満たすよう行うため, 設定した全ての温度についての平衡分布が求まる. これは, simulated annealing 法等には無い利点である.

本研究では, 各温度での系を, Heat bath 法で 1 モンテカルロステップ行う毎に, 各温度間を Metropolis 法で交換した. Heat bath 法は, ランダムに選択されたスピンについて, 確率

$$\frac{\exp(-\beta H_1)}{\exp(-\beta H_0) + \exp(-\beta H_1)} \quad (6)$$

で, スピン反転を起こさせる手法である. H_0 は現在のスピン状態でのハミルトニアン, H_1 は, 選択されたスピンが反転している状態でのハミルトニアンである. 一方 Metropolis 法は, 確率

$$\min\left(\frac{\exp(-\beta H_1)}{\exp(-\beta H_0)}, 1\right) \quad (7)$$

で, スピン反転を起こさせる手法である. ここでは, これを温度交換に使うため, $\{\beta_0, H_0\}$, $\{\beta_1, H_1\}$ で表され

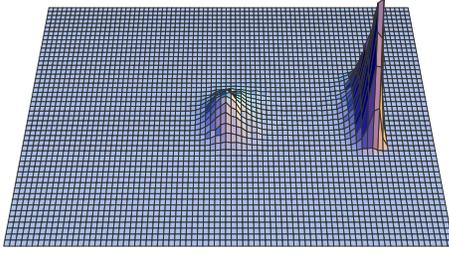


図 3: $N = 128$, $J = J_0 = 1$, $T = 1.10$ での, 第 1(横軸), 第 2(縦軸) 主成分のヒストグラム.

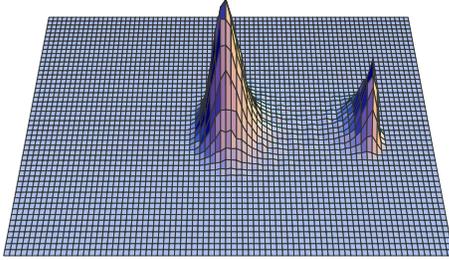


図 4: $T = 1.15$ でのヒストグラム. 他は, 図 3 に同じ.

る二つの系を選択して, 確率

$$\min \left(\frac{\exp(-\beta_0 H_1) \exp(-\beta_1 H_0)}{\exp(-\beta_0 H_0) \exp(-\beta_1 H_1)}, 1 \right) \quad (8)$$

で, それぞれの系の全スピンを入換えるものである. 全ての温度の系のスピン状態を S で表すと, Heat bath 法も Metropolis 法も, 遷移確率は平衡状態での詳細釣り合

$$P(S_0)P(S_0 \rightarrow S_1) = P(S_1)P(S_1 \rightarrow S_0) \quad (9)$$

を満たすため, 平衡状態に達すれば, 正しい分布が得られることになる. ここで $P(S_0)$ は状態 S_0 をとる確率, $P(S_0 \rightarrow S_1)$ は状態 S_0 から S_1 へ遷移させる確率である.

ここでは, $N = 128$, $T = 0.9, 0.95, \dots, 1.4$ の 11 温度で交換モンテカルル法を行った.

3.2 主成分分析

次に, 平衡状態に達した系のスピン状態をサンプリングし, 以下の手順で PCA を適用した. PCA は次のように, 分散共分散行列の対角化で求められる.

$$\Sigma \equiv \text{Var}[s] = \mathbf{V} \mathbf{D} \mathbf{V}^T \quad (10)$$

ここで Σ は, 全スピン $s \equiv [s_1, \dots, s_N]$ の分散共分散行列, $\mathbf{D} \equiv \text{diag}[d_1, \dots, d_N]$ は $N \times N$ 対角行列で, 固有値に対応する. $d_1 \geq \dots \geq d_N \geq 0$ とすれば, 対応する正規直交化された固有ベクトル v_1, \dots, v_N を用いて,

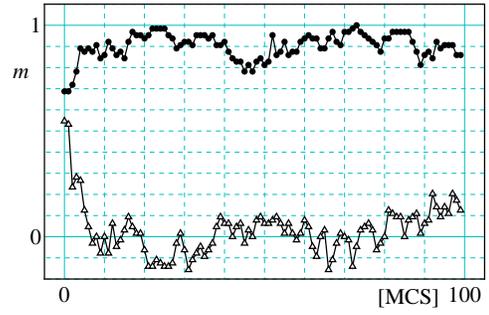


図 5: 図 3 で使用した T, J_{ijk} を用いて, 新たな初期値で緩和させた様子. 初期 m の値によって, 約 0.6 を境に, $m \neq 0$ 解への収束 (\bullet) と, $m = 0$ 解への収束 (\triangle) に分かれた.

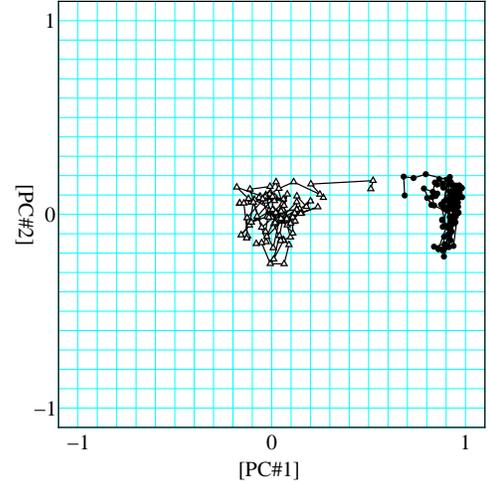


図 6: 図 5 の緩和の様子を, 図 3 で得られた PCA 軸 (第 1 主成分及び第 2 主成分) に射影したもの.

$\mathbf{V} \equiv [v_1, \dots, v_N]$ となる. 第 i 固有ベクトル v_i が第 i 主成分ベクトルである. 分散共分散行列 Σ は, 系のスピン状態を $M (\geq N)$ 回サンプリング ($s^{(1)}, \dots, s^{(M)}$) して, 各成分 Σ_{ij} を, 次のように計算すればよい.

$$\Sigma_{ij} = \frac{1}{M-1} \sum_{k=1}^M (s_i^{(k)} - \bar{s}_i)(s_j^{(k)} - \bar{s}_j), \quad (11)$$

但し, $\bar{s}_i \equiv \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M s_i^{(k)}$.

交換モンテカルル法を用いて得られた平衡状態のデータについて, 各温度でそれぞれこの操作を行った.

3.3 平衡状態

図 3 に, 横軸をスケールされた第 1 主成分 ($= \frac{1}{\sqrt{N}} s \cdot v_1$), 縦軸を第 2 主成分 ($= \frac{1}{\sqrt{N}} s \cdot v_2$) とした, スピンの状態のヒストグラムを示す. 各主成分軸と m 軸との関係を調べてみると, 第 1 主成分がほぼ m に相当し, 右の高いピークが $m \neq 0$ 解に, 真中の低い山が $m = 0$

解に相当していることが分かった。このことは、PCA によって m 軸が抽出できたことを意味する。第 2 主成分に相当する物理量は自明ではないが、 $m \neq 0$ 解周辺での揺らぎに対応していると考えられる。図 4 に、同様の条件で、温度を少しだけ上げた ($T = 1.15$) もを示す。この温度では、山の高さが逆転しており、この辺りの温度で自由エネルギーの入換が起こっていることを示唆する。

従来 3 体 Sourlas 符号は、シミュレーションで $m = 0$ 解を求めることは困難とされていたが、適切な温度設定を行えば、交換モンテカルロ法を使って、この解を安定に求められる可能性が示唆される。また、実際の復号問題では、 $m \neq 0$ 解と $m = 0$ 解の両者を発見できたとしても、何れの解が望ましい解に対応するのかを見分けることは難しいが、上述のように 2 解が共存する温度で PCA を行えば、 m 軸に相当する軸が第 1 主成分として抽出され、解が区別できる可能性が示唆される。

3.4 復号ダイナミクス

図 5 に、 $\{J_{ijk}\}$ の値は図 3 と同じにし、 m の初期値を変化させて、緩和の様子を m 軸でプロットしたものを示す。 $m = 0.6$ を境に、これ以上だと $m \neq 0$ 解に行き易く、これ未満だと $m = 0$ 解に行き易い傾向が見られた。このことは、実際の復号過程で初期値をランダムに設定すると、各主成分は 0 に近い値となるため、 $m = 0$ 解が容易に探索でき、 $m \neq 0$ 解はなかなか発見できないことを意味する。

図 6 に、この緩和の様子を、図 3 で得られた PCA の第 1、第 2 主成分軸に射影してプロットしたものを示す (同様に $\frac{1}{\sqrt{N}}$ でスケールした)。第 1 主成分はほぼ m に相当し、やはり 0.6 付近が境になっていることが確かめられる。

緩和過程が、図 3 のヒストグラムの勾配を登るような形で推移しているのは興味深い。ここでは、各主成分は平衡状態から得られた静的な情報を元に計算されているが、図 3、4 のように主成分を軸としてスピン状態のヒストグラムを描くことにより、復号過程の動的性質も議論できる。

4 まとめ

3 体 Sourlas 符号の復号過程を、主成分分析を用いて解析した。PCA により、 m 軸、即ち原符号 ξ が抽出され得ることが示された。また、PCA 軸でのヒストグラムは、自由エネルギー地形と同様の性質がある可能性が示された。これらより、解析が難しい複雑な系でも、PCA を行うことで自動的に、従来のオーダーパラメー

タや自由エネルギーに相当するパラメータが抽出できる可能性が示唆された。

謝辞

本論文の一部は科学研究費補助金 (課題番号 14084204, 14084212, 14580438) によるものである。

参考文献

- [1] Y. Kabashima, T. Murayama, and D. Saad: Phys. Rev. Lett. **84**, 1355 (2000)
- [2] T. Tanaka: Europhys. Lett., **54**(4) 540 (2001).
- [3] K. Hukushima and Y. Iba: cond-mat/0207123. K. Hukushima: Proceedings of 2003 Joint Workshop of Hayashibara Foundation and SMAPIP –Physics and Information–, pp.71. Okayama, (2003).
- [4] E. Domany, G. Hed, M. Palassini and A. P. Young: Phys. Rev. B **64**, 224406 (2001).
- [5] J. Higo, O. V. Galzitskaya, S. Ono and H. Nakamura: Chem. Phys. Lett. **337**, 169 (2001).
- [6] 西森秀稔: スピングラス理論と情報統計力学. 岩波書店 (1999). H. Nishimori and K. Y. M. Wong: Phys. Rev. E, **60**(1) 132 (1999).
- [7] K. Hukushima and K. Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn., **65**(6) 1604 (1996).