

ホップフィールドモデルと ボルツマンマシン

樺島祥介

東京大学大学院理学系研究科

知の物理学研究センター

2024年ノーベル物理学賞

- 人工ニューラルネットワークによる機械学習を可能にした基礎的発見と発明に対する業績



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

John J. Hopfield

Prize share: 1/2



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Geoffrey E. Hinton

Prize share: 1/2

Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

ホップフィールドモデルとは

無駄を削ぎ落とした連想記憶モデル

2024年ノーベル物理学賞

- 人工ニューラルネットワークによる機械学習を可能にした基礎的発見と発明に対する業績



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

John J. Hopfield

Prize share: 1/2



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

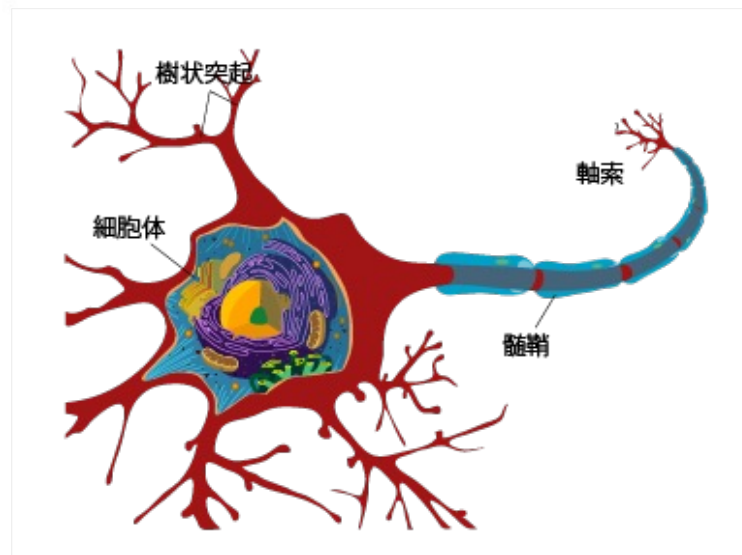
Geoffrey E. Hinton

Prize share: 1/2

III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

脳とニューロン

- 脳:ニューロンと呼ばれる神経細胞が多数結合したシステム
- ニューロン:大雑把に見ると、発火と非発火の2状態をとる。シナプス結合を通じて他のニューロンと電氣的に相互作用する



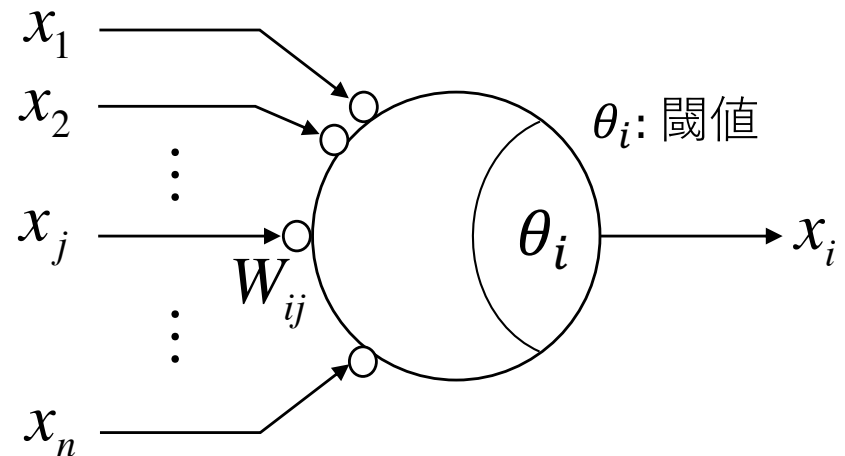
ニューロン (Wikipedia パブリックドメイン)

マカロック・ピッツモデル (1943)

W. McCulloch and W. Pitts, Bulletin of Mathematical Biophysics, 5, 127-147 (1943).

- ニューロンの状態を $x \in \{+1, -1\}$ の2状態で表現
- ニューロン j からニューロン i への電氣的刺激は $W_{ij}x_j$
- ニューロン i の状態は次式で更新される

$$x_i^{t+1} = \text{sgn} \left(\sum_{j \in N(i)} W_{ij} x_j^t - \theta_i \right)$$



⇒うまく回路を作り W_{ij} , θ_i を調整するとチューリングマシンと同等の能力が得られる (存在定理)

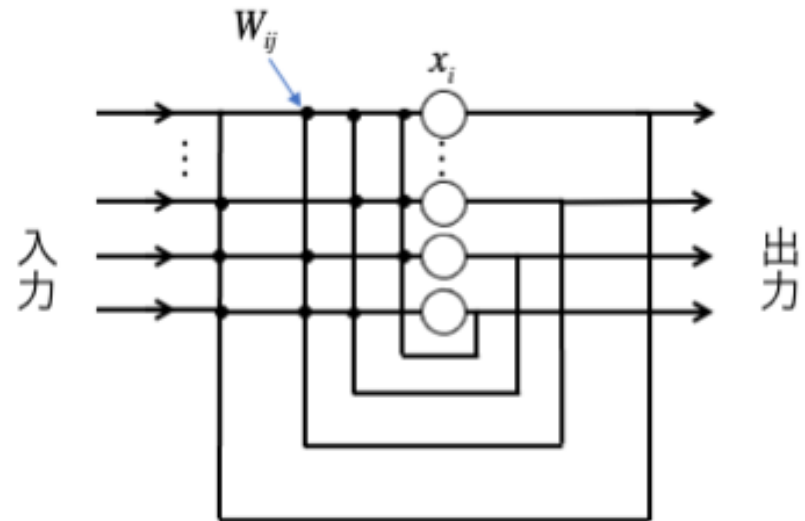
ホップフィールドモデル (1982)

J.J. Hopfield, PNAS 79 (8): 2554-8. (1982)

- マカロック・ピッツモデルを相互に結合させる
→ 人工的な脳 = “人工知能” を作る
- 何ができるのか？
→ パターンを覚えて、思い出す (想起する) ことができる



マクロ

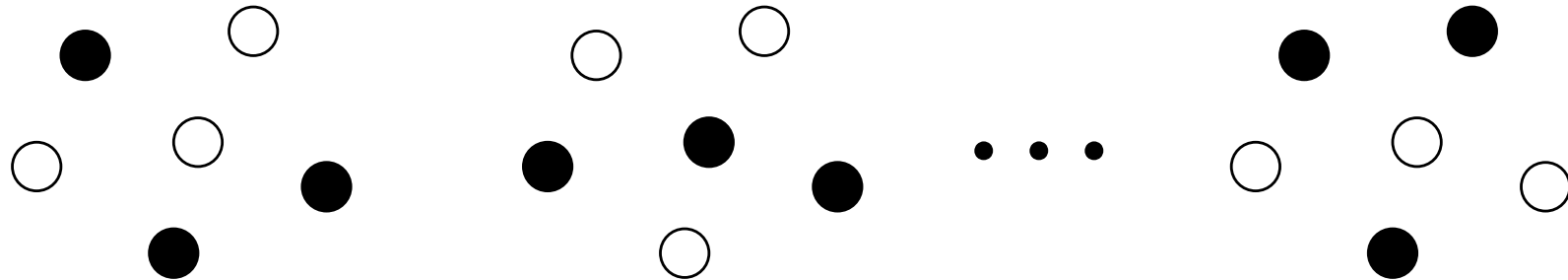


ミクロ

どうやって覚えさせるの？

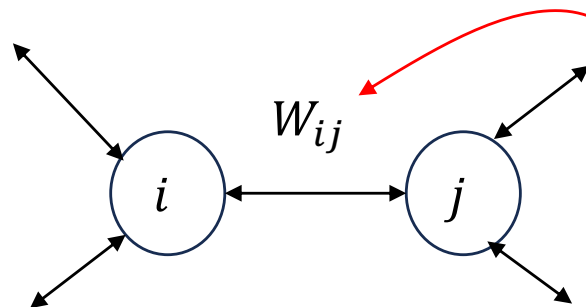
- ± 1 をランダムに生成し作った p 個のパターン

$$\left(\xi_1^1, \xi_2^1, \dots, \xi_N^1 \right) \quad \left(\xi_1^2, \xi_2^2, \dots, \xi_N^2 \right) \quad \dots \quad \left(\xi_1^p, \xi_2^p, \dots, \xi_N^p \right)$$



- シナプス結合の学習

- 神経生理学の有力な仮説(ヘッブの法則)にもとづく



結合に覚えさせる

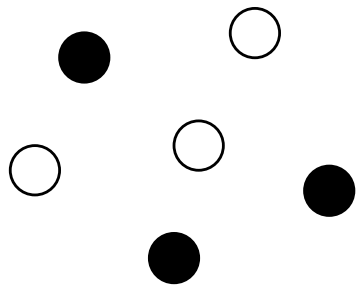
$$W_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu} = \frac{1}{N} \left(\xi_i^1 \xi_j^1 + \dots + \xi_i^p \xi_j^p \right)$$

どうやって思い出すの？

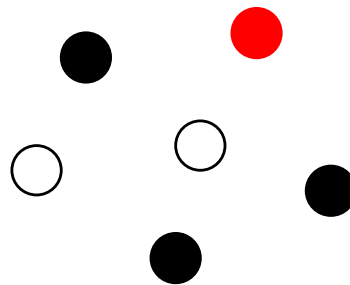
- 入力：記憶したどれかのパターンに近いパターン
- 想起：マカロック・ピッツ則で収束するまで更新

$$x_i^{t+1} = \text{sgn} \left(\sum_{j \neq i} W_{ij} x_j^t - \theta_i \right)$$

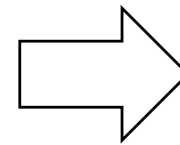
記憶しているパターン



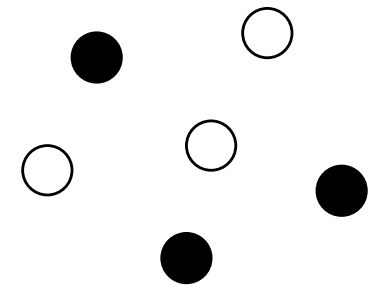
入力パターン



収束するまで
状態更新



出力パターン



“そういえばアレ何だったかな“

“そうだ、アレだ!“

ホップフィールドモデルは二番煎じ！？

- 同様のモデル(連想記憶モデル)は1970年代初頭までに多数提案されていた

Associatron—A Model of Associative Memory

KAORU NAKANO

IEEE SMC (1972)

Abstract—Thinking in the human brain greatly depends upon association mechanisms which can be utilized in machine intelligence. An associative memory device, called “Associatron,” is proposed. The Associatron stores entities represented by bit patterns in a distributed manner and recalls the whole of any entity from a part of it. If the part is large, the recalled entity will be accurate; on the other hand, if the part is small, the recalled entity will be rather ambiguous. Any number of entities can be stored, but the accuracy of the recalled entity decreases as the number of entities increases.

I. INTRODUCTION

THE PURPOSE of this paper is to outline an approach for simulating certain functions of the human brain. It has been known that an association mechanism is essential to information processing in the human brain. Association in the human brain has been studied mainly in the field of psychology. Quite a few semantic models for

Non-Holographic Associative Memory

by

D. J. WILLSHAW

O. P. BUNEMAN

H. C. LONGUET-HIGGINS

Department of Machine Intelligence
and Perception,
University of Edinburgh

The features of a holographic
memory can be improved

Nature (1969)

IEEE TRANSACTIONS ON COMPUTERS, VOL. C-21, NO. 11, NOVEMBER 1972

1197

Learning Patterns and Pattern Sequences by Self-Organizing Nets of Threshold Elements

SHUN-ICHI AMARI

IEEE Trans. Comput. (1972)

An Adaptive Associative Memory Principle

TEUVO KOHONEN

Abstract—It is shown that an analog associative memory with optimal selectivity can be formed in adaptive processes which use learning algorithms related to the gradient method. The information is distributed throughout the memory by a matrix transform.

Index Terms—Adaptive system, analog associative memory, associative recall, correlation matrix memory, distributed memory, learning system, pattern recognition, pseudoinverse matrix.

IEEE Trans. Comput. (1974)

ホップフィールドモデルが優れていたところ

- ① 無駄を削ぎ落とし本質だけを残した

覚える

$$W_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}$$

思い出す

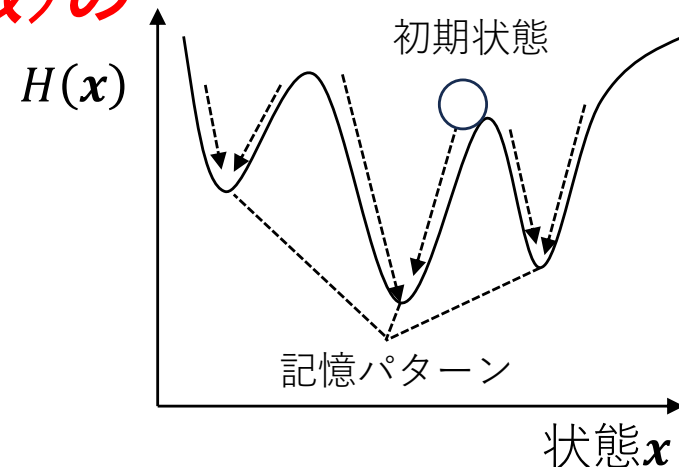
$$x_i^{t+1} = \text{sgn} \left(\sum_{j \neq i} W_{ij} x_j^t - \theta_i \right)$$

- ② 見通しのよい考え方の筋道を示した

✓ **リアプノフ関数(エネルギー関数)の存在を指摘**

$$H(\mathbf{x}) = - \sum_{i < j} W_{ij} x_i x_j + \sum_i \theta_i x_i$$

↑
磁性体のイジングモデルと同型



極小状態 = 記憶パターン
極小状態への落ち込み = 想起

ホップフィールドモデルが優れていたところ

① 無駄を削ぎ落とし本質だけを残す

覚える

$$W_{ij} = \frac{1}{N} \sum_p x_i^p x_j^p$$

思い出す

$$W_{ij} x_j^t - \theta_i$$

呼び水となり、物理学者（特にスピングラスの研究者）が多数参入

$$H(\mathbf{x}) = - \sum_{i < j} w_{ij} x_i x_j - \sum_i \theta_i x_i$$

磁性体のイジングモデルと同型

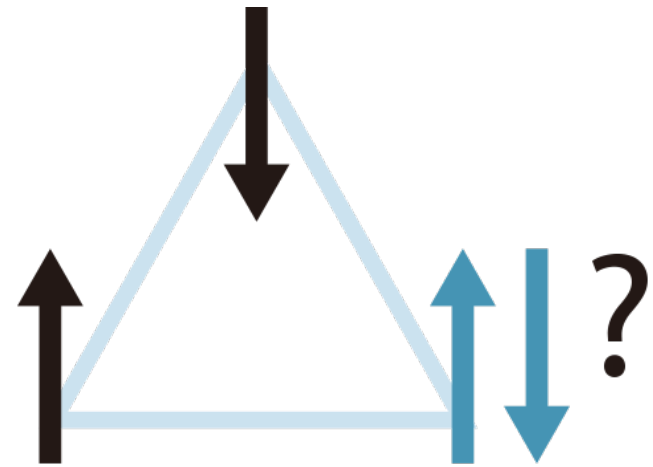
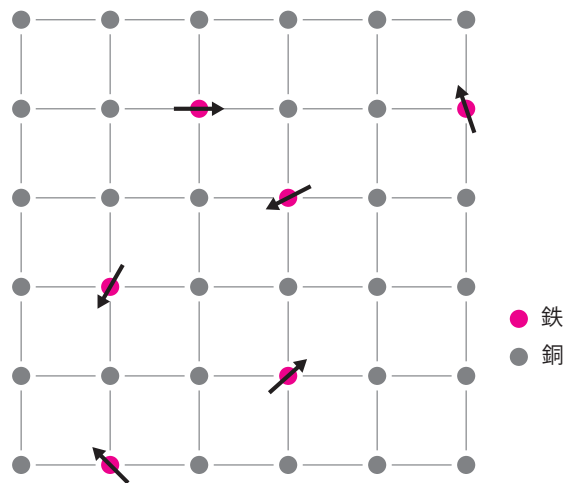
記憶パターン

状態 \mathbf{x}

極小状態 = 記憶パターン
極小状態への落ち込み = 想起

(参考) スピングラスとは？

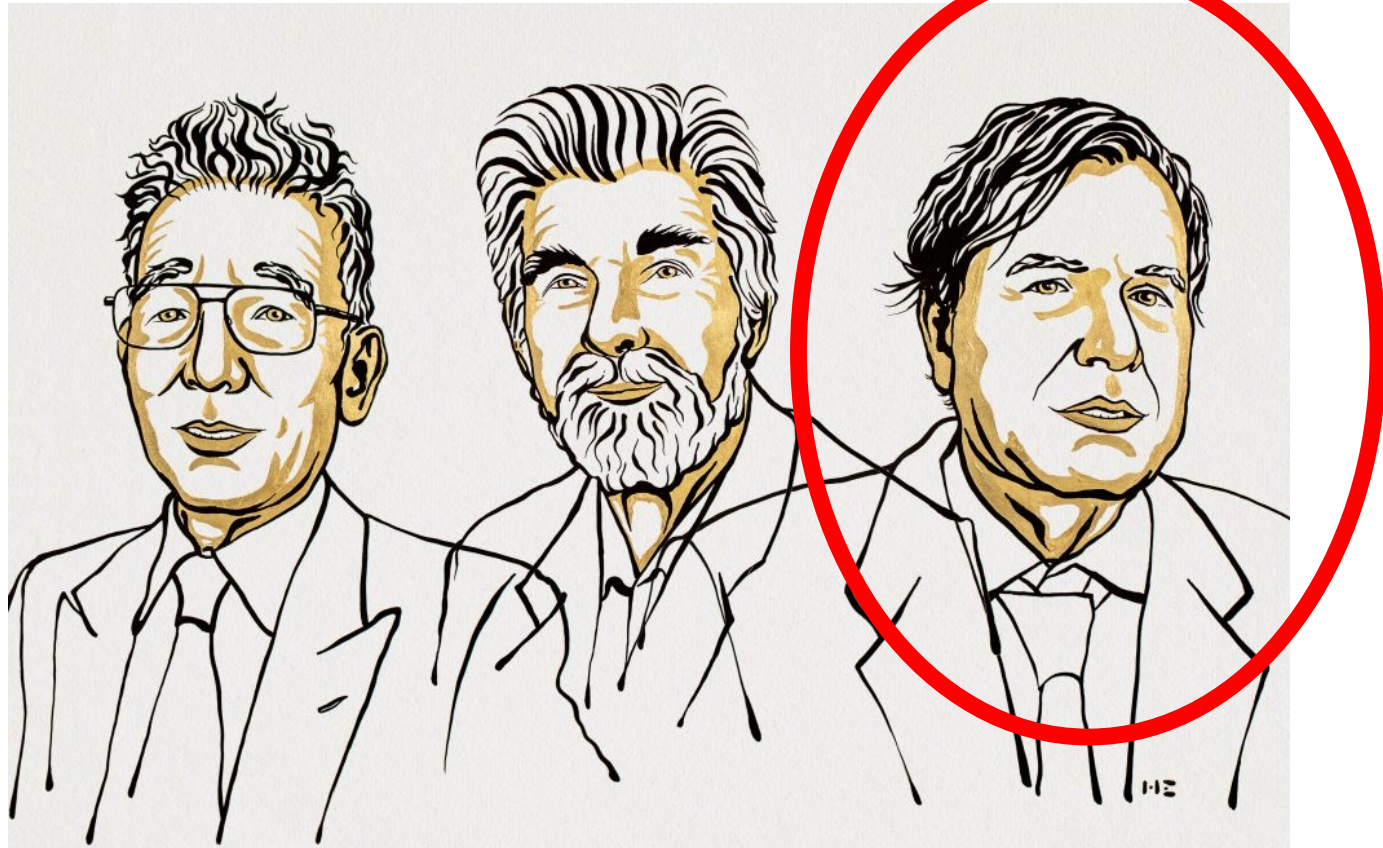
- 非磁性金属(例えば銅)に磁性金属(例えば鉄)を少量溶かし, 急冷する
- 磁性原子は**ランダム**な位置に置かれるため, スピンを並行／反並行にする力が**ランダム**に混在
⇒ **ガラス(身動きできない)状態**



©Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences

(参考)2021年ノーベル物理学賞

- 複雑系の理解に関する革新的な貢献に対して



真鍋淑郎博士

Klaus Hasselmann博士

Giorgio Parisi博士

Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

その後の展開

平衡解析とダイナミクス解析

平衡解析

- 記憶するパターン数 $p = \alpha N$ による変化
 - $p = o(N)$ ($\alpha \rightarrow +0$) : 記憶パターンを完全に想起
 - $p < \alpha_c N$: 記憶パターンとほぼ同じパターンを想起
 - $p > \alpha_c N$: 記憶したパターンを何も想起できない

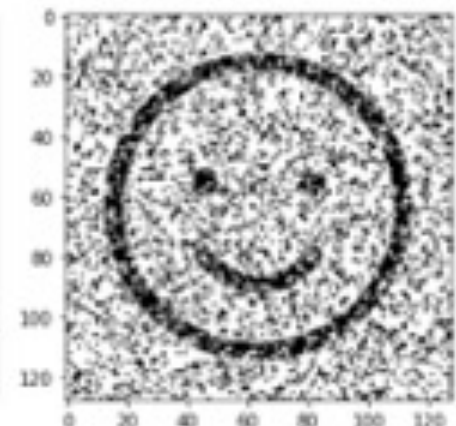
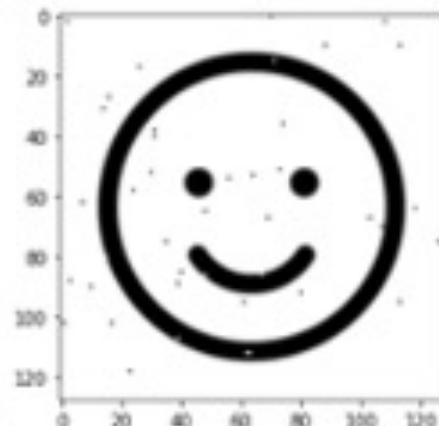
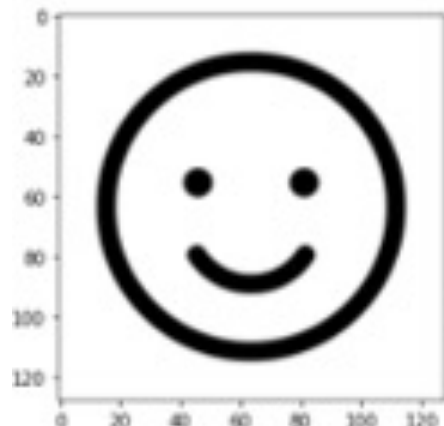
$N = 128^2 = 16384$ 個のニューロンからなるモデルの振る舞い ($\theta = 0$)

記憶パターン (の1つ)

$p = 819$

$p = 1638$

$p = 2457$



Amit, Gutfreund, Sompolinsky (1985)

Phys. Rev. Lett. **55**, 1530 (1985)

• スピングラス理論 (レプリカ法) を用いた解析

微視的法則

$$H(\mathbf{x}) = - \sum_{i < j} W_{ij} x_i x_j + \sum_i \theta_i (= 0) x_i \quad \left(W_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right)$$

レポート用紙 10枚
くらい計算する

記憶パターンと想起パターンの類似度

$$\left\{ \begin{aligned} m &= 1 - 2 \int_{\frac{m}{\sqrt{\alpha r}}}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \\ C &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{m^2}{2\alpha r}\right) \quad \left(\alpha = \frac{p}{N}\right) \\ r &= \frac{1}{1 - C} \end{aligned} \right.$$

巨視的法則

理想気体の

$$\mathbf{F}_i = m \mathbf{a}_i \quad (i = 1, \dots, N)$$

(運動方程式)

$$pV = nRT$$

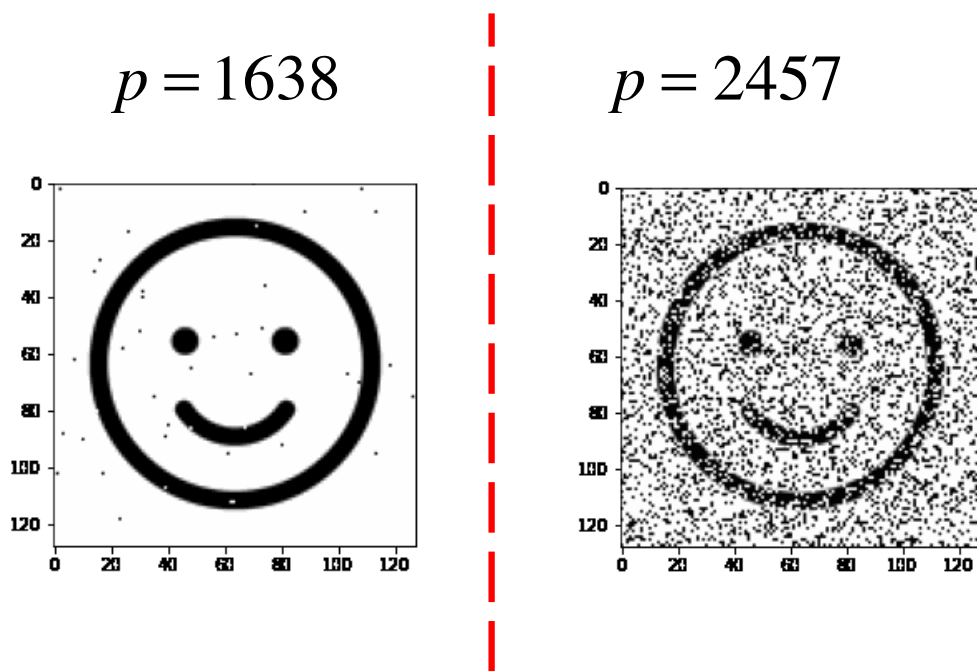
(状態方程式)

に相当

クロストークノイズの分散 / 他の記憶パターン

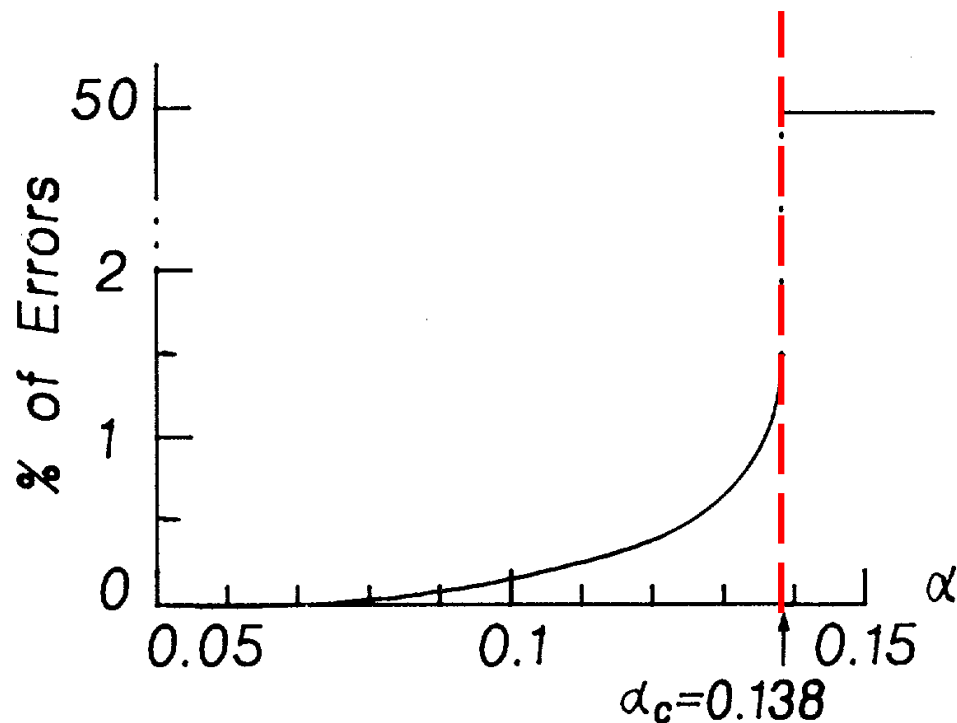
レプリカ対称仮定による近似解。その後、Tokita, J. Phys. A 26, 6915 (1993)がfull RSB解を評価。

記憶容量



$$p_c \approx 0.138 \times N \approx 2261$$

記憶パターン数 vs 想起誤差



出典：Amit et al, Phys. Rev. Lett. 55, 1530 (1985)

($N = 128^2 = 16384$: ニューロン数)

ダイナミクス解析

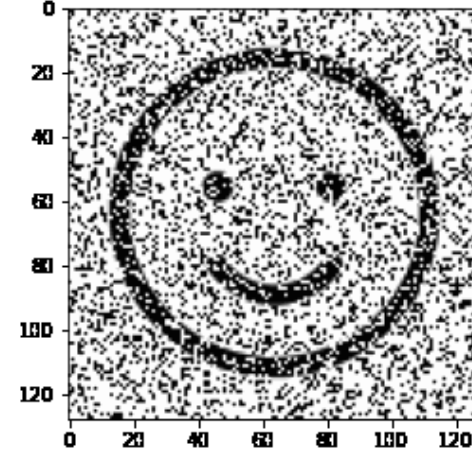
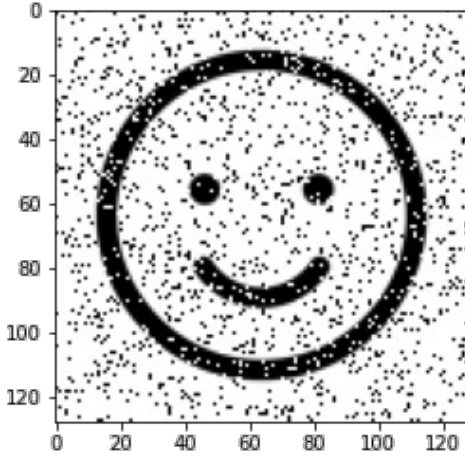
$p = 1638$

入力：70%一致

近 ← → 遠

入力：60%一致

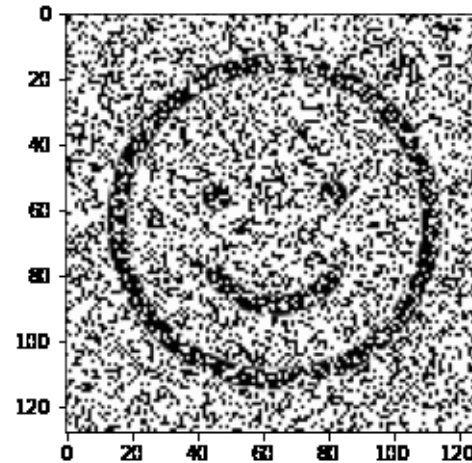
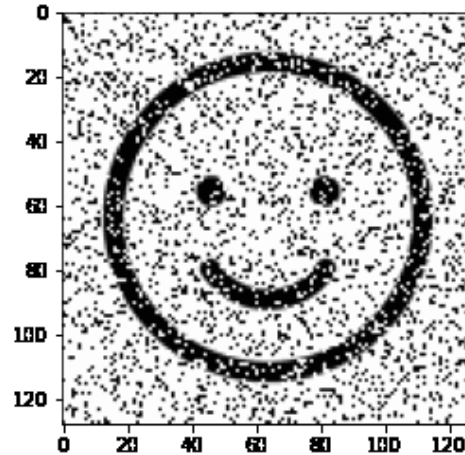
少 ↑ ↓ 多



$p = 2457$

入力：70%一致

入力：60%一致



Amari and Maginu (1988)

Neural Networks 1, 63-73 (1988)

• 統計神経力学を用いたダイナミクスの解析

微視的
ダイナミクス

$$x_i^{t+1} = \text{sgn} \left(\sum_{j \neq i} W_{ij} x_j^t - \theta_i (= 0) \right) \quad \left(W_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right)$$

レポート用紙10枚
くらい計算する

巨視的
ダイナミクス

$$\begin{cases} m_{t+1} = 1 - 2 \int_{\frac{m_t}{\sigma_t}}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \\ \sigma_{t+1}^2 = \alpha + \frac{2}{\pi} \exp\left(-\frac{m_{t-1}^2}{\sigma_{t-1}^2}\right) + \frac{4\alpha m_t m_{t+1}}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} \exp\left(-\frac{m_{t-1}^2}{2\sigma_{t-1}^2}\right) \quad \left(\alpha = \frac{p}{N}\right) \end{cases}$$

記憶パターンと想起パターンの類似度

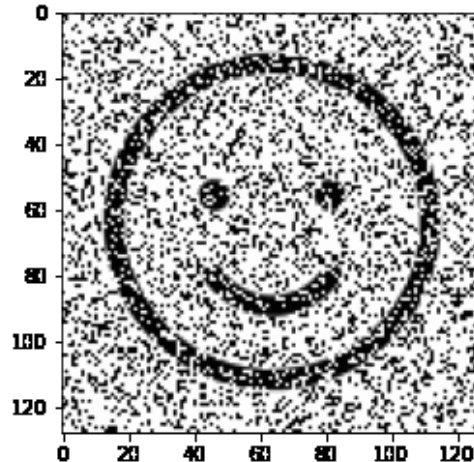
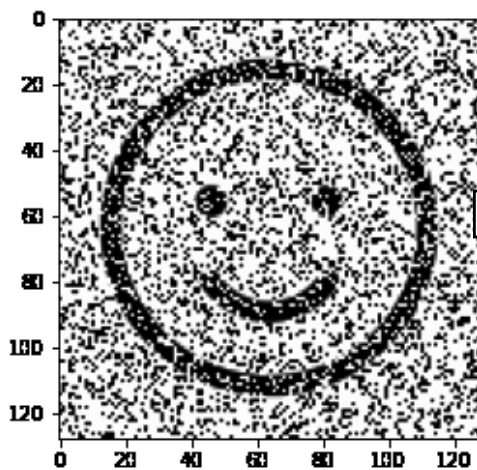
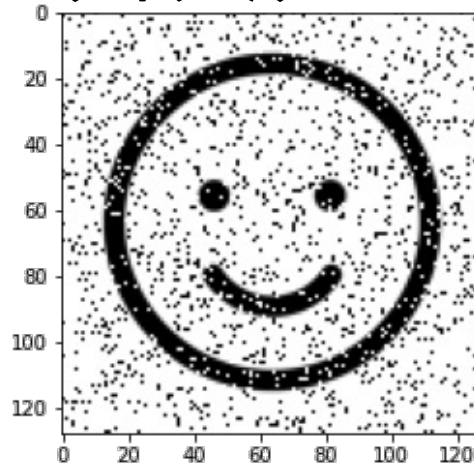
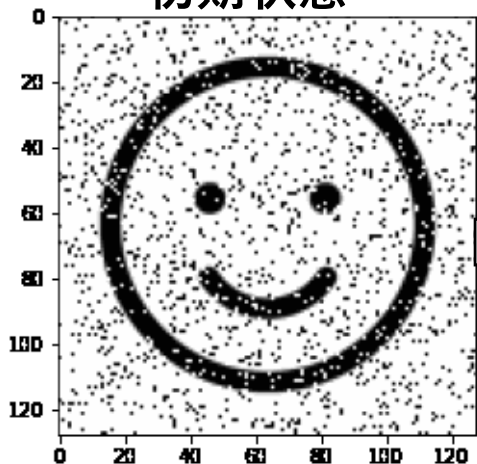
他の記憶パターンからのクロストークノイズの分散

1ステップの時間相関のみを考慮した近似理論。その後、Okada, Neural Networks 8, 833 (1995)、Mimura et al, JPSJ 78, 033001 (2009) などが理論を改良

引き込み領域

初期状態 $p = 1638$

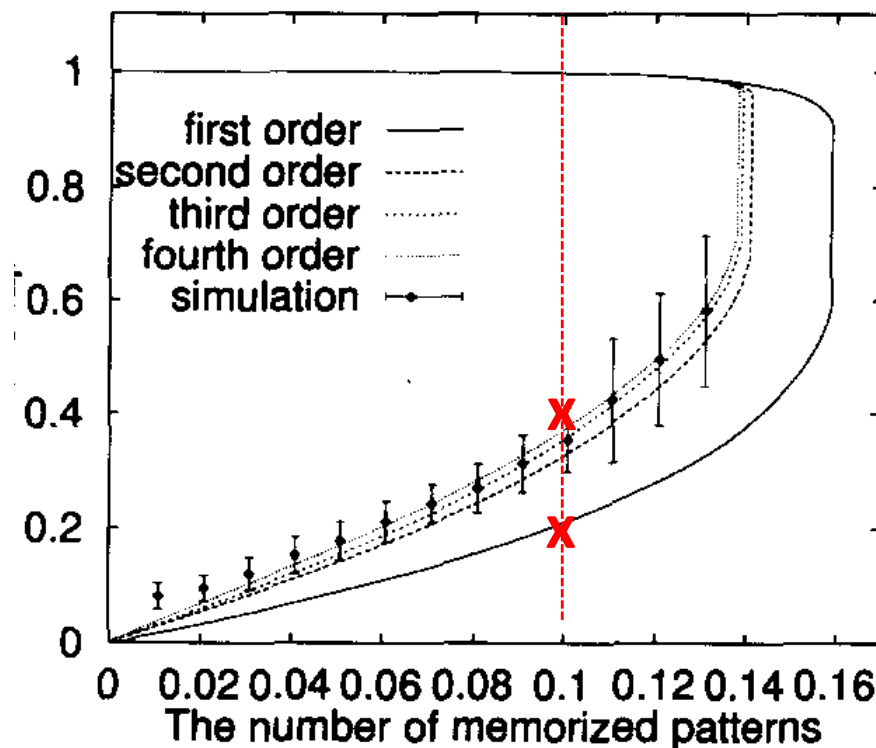
ダイナミクス



記憶状態に収束するために必要な初期状態の限界値

出典：

Okada, Neural Networks 8, 833 (1995)



さらにその後の展開

- 物理の方法を用いたホップフィールドモデルの解析をきっかけに、情報の問題に物理の方法を応用する研究が多数なされるようになる
 - 詳細は「ホップフィールドモデルとその後の展開」で検索し
YouTube 動画を御覧ください
- AIを含む情報科学・工学に物理を使う“分野”を発見・発明したことがホップフィールド氏の最大の功績

ボルツマンマシンとは

生成AIの祖先

2024年ノーベル物理学賞

- 人工ニューラルネットワークによる機械学習を可能にした基礎的発見と発明に対する業績



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

John J. Hopfield

Prize share: 1/2



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Geoffrey E. Hinton

Prize share: 1/2

Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

ボルツマンマシン(1985)

Ackley, Hinton, Sejnowski, Cognitive Science 9 (8): 147-169 (1985)

- ホップフィールドモデルの提案から3年後、ニューラルネットワークと統計力学との関係を更に押し進めた「ボルツマンマシン」が提案される
- 課題: $s \in \{0,1\}^N$ に対して、満たすべき関係の具体例 s^1, \dots, s^p が与えられたとき、それらがエネルギー関数

$$H(\mathbf{s}) = - \sum_{i < j} w_{ij} s_i s_j + \sum_i \theta_i s_i$$

の基底状態になるようにパラメータ w, θ を求める

(注) ホップフィールドモデルでは、ヘップ則により“手で”決めていた。これをデータから自律的に学習することが課題

生成AIとの関係

- Ackley, Hinton, Sejnowski (1985) はさまざまな主張が“ふんわりと”盛り込まれていて、とても読みにくい
- メインの主張は、変数間の複雑な関係を並列計算モデルで学習するためのアルゴリズムの提案。ただし、以下の2点に「生成AI」の萌芽が見られる
 - 環境の確率分布を学習
 - 隠れユニット(潜在変数)の導入
- 私が思う読みにくさの原因
 - 導入時に決定論的な関係を学習すると言いながら、実際にやっていることは確率分布の学習であること
 - 当時注目されていたSAIに言及し、ノイズの活用による局所状態からの脱出云々といった(今から振り返ると本質を外した)主張にページ数を割いていること

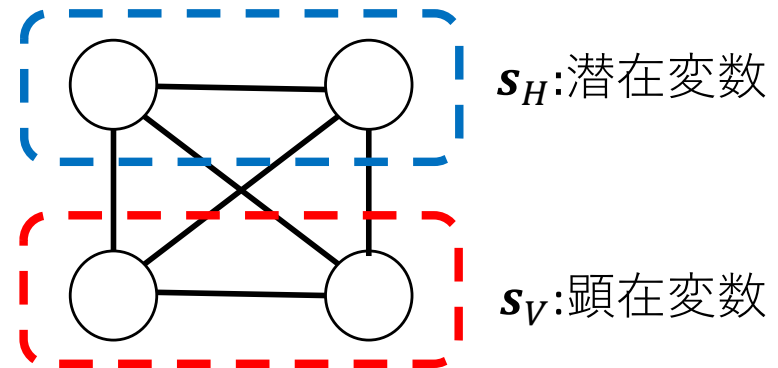
ボルツマンマシンアルゴリズム

- 原論文の記述はごちゃごちゃしているので、整理した形で説明

2種類の変数

$$\mathbf{s} = (\mathbf{s}_V, \mathbf{s}_H)$$

\mathbf{s}_V : 顕在変数
 \mathbf{s}_H : 潜在変数



ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H(\mathbf{s}) &= H(\mathbf{s}_V, \mathbf{s}_H) \\ &= - \sum_{i,j \in V} w_{ij}^{VV} s_i s_j - \sum_{i \in V, j \in H} w_{ij}^{VH} s_i s_j - \sum_{i,j \in H} w_{ij}^{HH} s_i s_j + \sum_{i \in V} \theta_i^V s_i + \sum_{i \in H} \theta_i^H s_i \end{aligned}$$

完全なボルツマン分布

$$P(\mathbf{s}_V, \mathbf{s}_H) = \frac{\exp(-H(\mathbf{s}_V, \mathbf{s}_H))}{Z(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta})}$$

周辺化されたボルツマン分布

$$P(\mathbf{s}_V) = \sum_{\mathbf{s}_H} P(\mathbf{s}_V, \mathbf{s}_H) = \frac{\sum_{\mathbf{s}_H} \exp(-H(\mathbf{s}_V, \mathbf{s}_H))}{Z(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta})}$$

\mathbf{s}_H の周辺化により複雑な分布の表現が可能

原理：最尤法

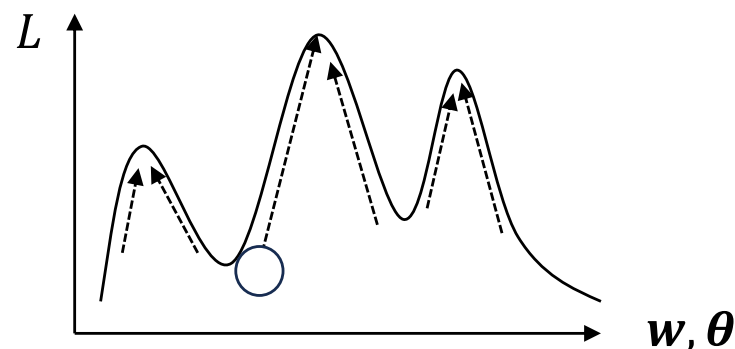
- 顕在変数 s_V のみが観測される
- データ s_V^1, \dots, s_V^p が与えられたとき、パラメータ w, θ を最尤法で求める

対数周辺尤度関数

$$\begin{aligned} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | s_V^1, \dots, s_V^p) &= \sum_{\mu=1}^p \log P(s_V^\mu) = \sum_{\mu=1}^p \log \left(\sum_{s_H} P(s_V^\mu, s_H) \right) \\ &= \sum_{\mu=1}^p \log \left(\sum_{s_H} \exp(-H(s_V^\mu, s_H)) \right) - p \log Z(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}) \end{aligned}$$

勾配法による尤度最大化

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{n+1} &= \mathbf{w}_n + \eta \nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | s_V^1, \dots, s_V^p) \\ \boldsymbol{\theta}_{n+1} &= \boldsymbol{\theta}_n + \eta \nabla_{\boldsymbol{\theta}} L(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | s_V^1, \dots, s_V^p) \end{aligned}$$



アルゴリズムの実際とその解釈

- 勾配 = 「観測時のモーメント」 - 「未観測時のモーメント」
 - モーメントは観測時 / 未観測時のボルツマン分布で評価

$$\mathbf{w}_{n+1} = \mathbf{w}_n + \eta p \left(\left(\frac{1}{p} \sum_{\mu=1}^p \langle \mathbf{s} \mathbf{s}^\top \rangle \Big|_{s_V^\mu} \right) - \langle \mathbf{s} \mathbf{s}^\top \rangle \right)$$

$$\boldsymbol{\theta}_{n+1} = \boldsymbol{\theta}_n + \eta p \left(\left(\frac{1}{p} \sum_{\mu=1}^p \langle \mathbf{s} \rangle \Big|_{s_V^\mu} \right) - \langle \mathbf{s} \rangle \right)$$

アルゴリズムの具体的表現

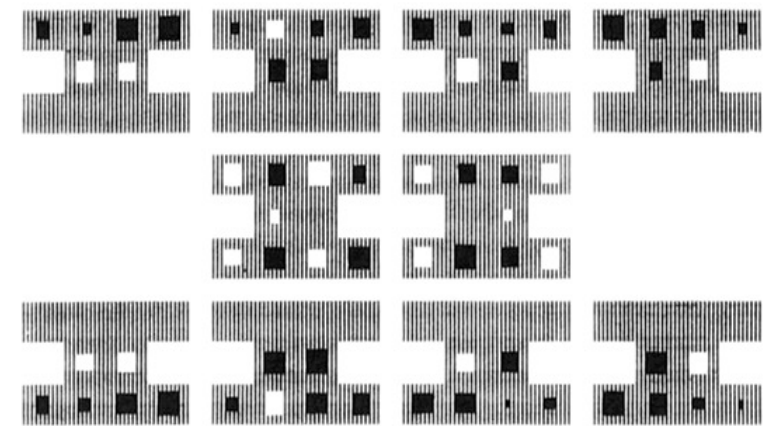
- ヘップ則を特別な場合を含む
 - 隠れ変数なし、かつ、 $\mathbf{w}_0 = \mathbf{0}$ のとき
 $\mathbf{w}_1 \propto \sum_{\mu=1}^p \langle \mathbf{s} \mathbf{s}^\top \rangle \Big|_{s_V^\mu} = \sum_{\mu=1}^p \mathbf{s}_V^\mu (\mathbf{s}_V^\mu)^\top$

- 認知科学的に興味深い
 - $\langle \mathbf{s} \mathbf{s}^\top \rangle \Big|_{s_V^\mu}, \langle \mathbf{s} \rangle \Big|_{s_V^\mu}$: 外界から刺激を受けているときの脳活動
 - $\langle \mathbf{s} \mathbf{s}^\top \rangle, \langle \mathbf{s} \rangle$: ボーっとしているときの脳活動

アルゴリズムの課題

- 計算量的負荷がとても高い
 - ボルツマン分布での期待値評価に必要な計算量は変数の個数に関して指数関数的に増大
 - 更にその情報を使って w, θ を更新する2重ループ
- 興味深いが概ね“実用的でない”と認識されていた
 - 例題:「 $N-K-N$ エンコーダ問題」
 - いわゆるオートエンコーダ問題
 - $N = 4 \sim 40, K = 2 \sim 10$

4-2-4エンコーダ問題の解



出典: Ackley, et al, Cognitive Science 9 (8): 147-169 (1985)

その後の展開

3つの方向への発展

ボルツマンマシンから派生した研究

- ボルツマンマシンは、そのままでは使いものにならない
- それでも、ヒントン氏らはボルツマンマシンを出発点として様々な試行錯誤を重ねていった。その結果、現在、以下の3つの方向の研究が大きく発展している
- 3つの方向への展開
 - 関数近似(隠れユニットあり)
 - 詳細は「ボルツマンマシンと物質科学研究への応用例」で検索し、今田正俊先生のYouTube動画を御覧ください
 - 生成AI(隠れユニットあり)
 - データ解析(隠れユニットなし)

制限ボルツマンマシン (RBM)

Smolensky, Chapter 6, in *Parallel Distributed Processing Volume 1* (1986).

- 相互作用を全結合ではなく2部グラフにする
⇒ 計算コストを抑えることができる

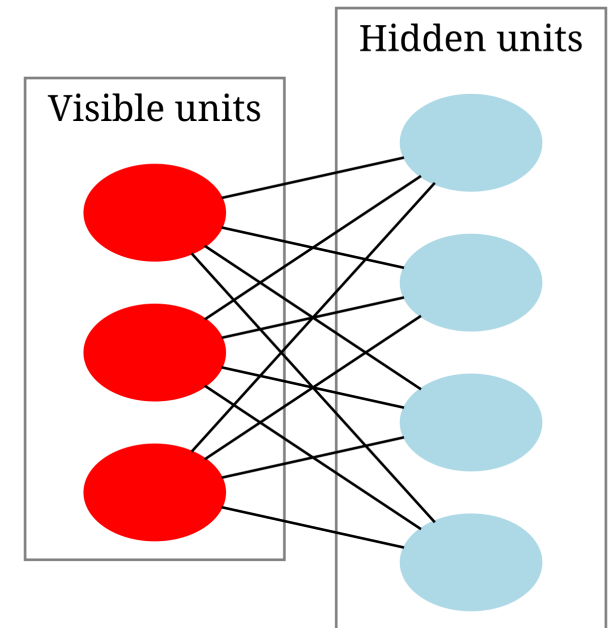
$$\left. \begin{aligned} P(\mathbf{s}_V | \mathbf{s}_H) &= \prod_j P(s_{V,i} | \mathbf{s}_H) \\ P(\mathbf{s}_H | \mathbf{s}_V) &= \prod_i P(s_{H,i} | \mathbf{s}_V) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{確率変数が独立} \\ \downarrow \\ \text{サンプル生成が} \\ \text{容易} \end{array}$$

Contrastive Divergence :
(Hinton, *Neural Comput.* **14**, 1771-1800 (2002))

訓練データからランダムに \mathbf{s}_V^μ を選択

$$\mathbf{s}_H \sim P(\mathbf{s}_H | \mathbf{s}_V^\mu), \mathbf{s}'_V \sim P(\mathbf{s}_V | \mathbf{s}_H), \mathbf{s}'_H \sim P(\mathbf{s}_H | \mathbf{s}'_V)$$

$$\Delta \mathbf{w} \propto \mathbf{s}_V^\mu (\mathbf{s}_H)^\top - \mathbf{s}'_V (\mathbf{s}'_H)^\top$$



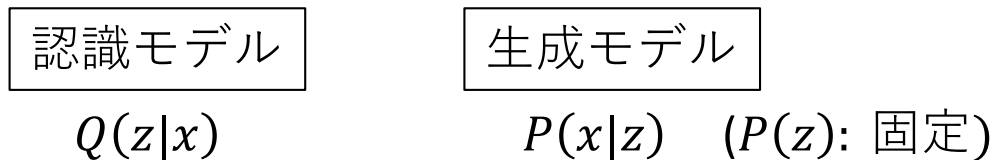
出典 : https://en.wikipedia.org/wiki/Restricted_Boltzmann_machine#cite_note-2

ヘルムホルツマシン

Dayan et al, *Neural Computation*. 7, 889–904 (1995)

- 「潜在変数モデル」との出会い
 - 古典的: 因子分析、ガウス混合分布、etc
↓ に進化させるキッカケ
 - 現代的: GAN、VAE、拡散モデル、etc

Wake-Sleep アルゴリズム

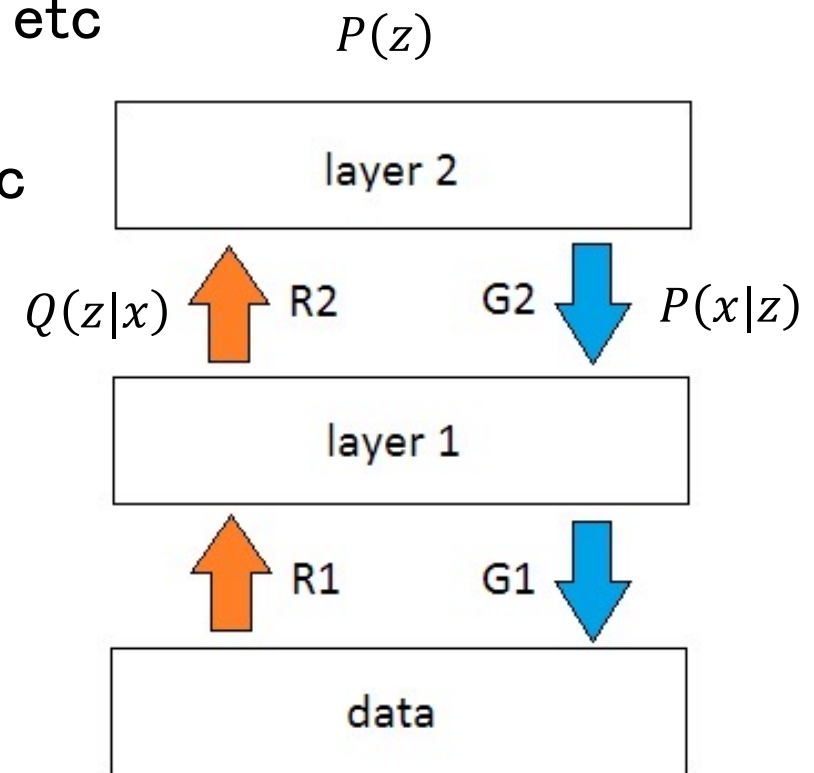


Wake phase :

1. 訓練データ x を選び $z \sim Q(z|x)$
2. $x' \sim P(x|z)$
3. x と x' の差を小さくするように $P(x|z)$ を学習

Sleep phase :

1. $z \sim P(z)$, $x' \sim P(x|z)$
2. z, x' に適合するように $Q(z|x')$ を学習



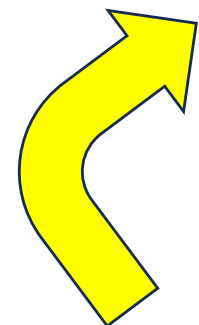
出典: https://en.wikipedia.org/wiki/Wake-sleep_algorithm

事前学習 (pretraining)

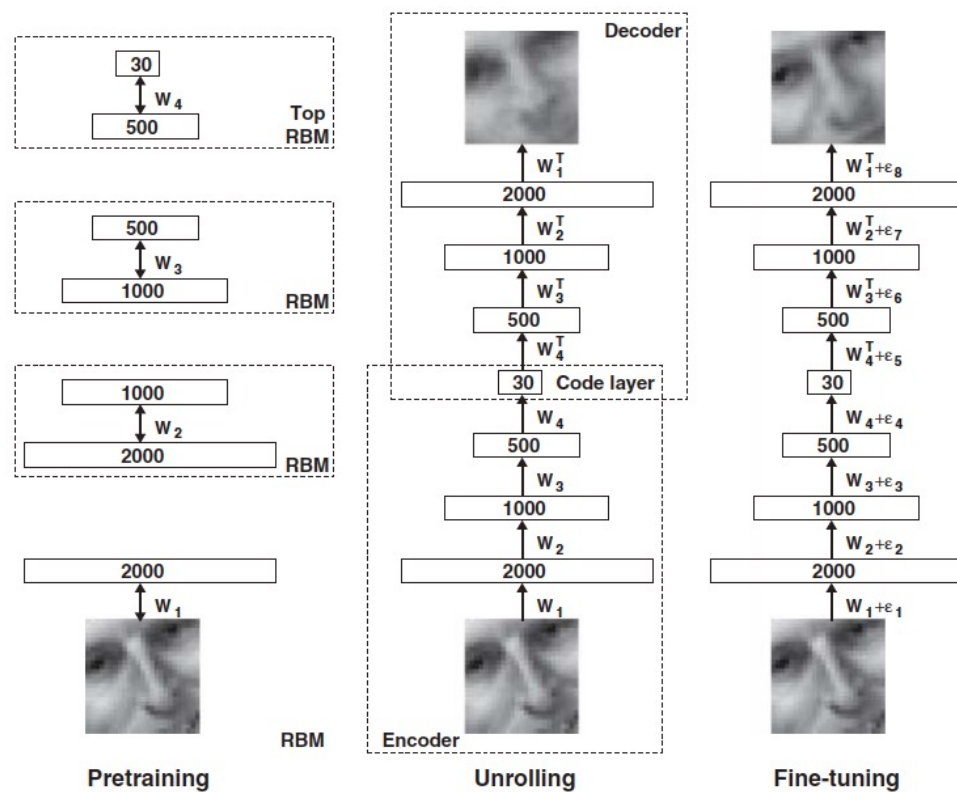
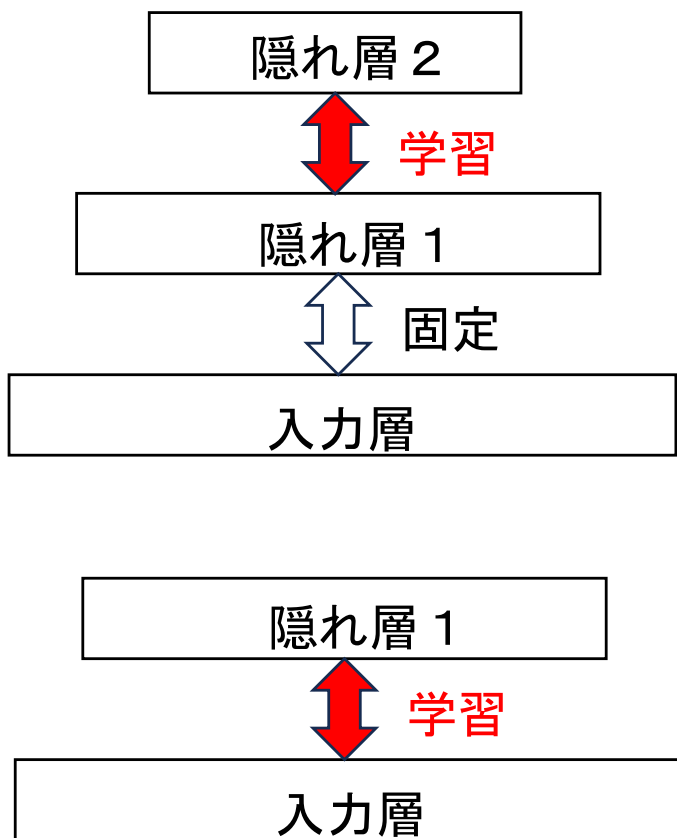
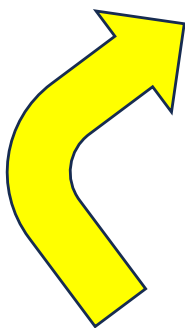
Hinton et al, Science, Vol. 313, pp. 504-507 (2006)

- RBMを順に学習させて深層学習の初期値とする
 ⇒ 学習効率が劇的に向上する (#今はあまり使われない)

学習が済んだら



学習が済んだら



出典：Hinton et al, Science, Vol. 313, pp. 504-507 (2006)

神経スパイクデータのモデリング

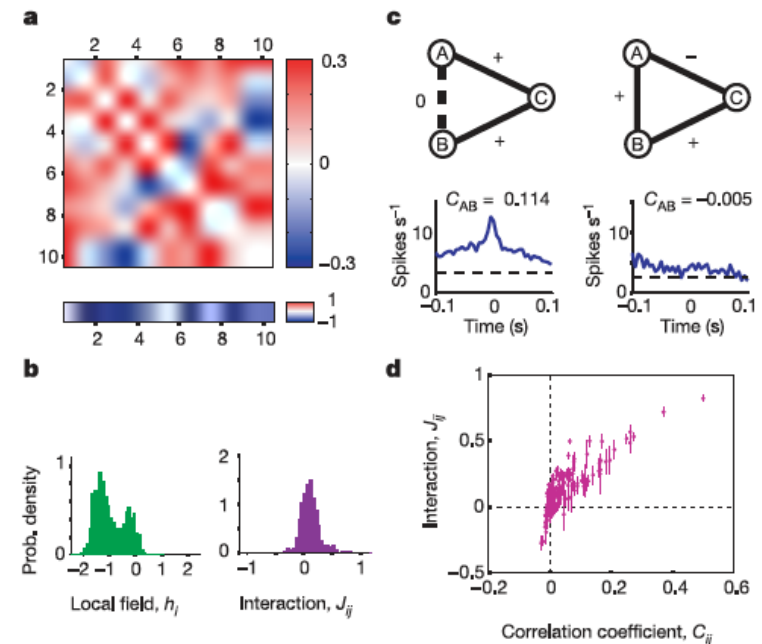
Schneidman et al , *Nature* **440**, pp.1007–1012 (2006)

- サンショウウオの網膜神経節細胞のデータをボルツマンマシンでモデル化
 - 相関は弱いけど独立モデルはダメ
 - ボルツマンマシンはスパイクパターンの分布を高精度で予測可能
 - 神経ネットワークがエラー訂正特性を持つ可能性を示唆

Figure 3 | Pairwise interactions and individual cell biases, as in equation (1). **a**, Example of the pairwise interactions J_{ij} (above) and bias values (or local fields) h_i (below) for one group of 10 cells. **b**, Histograms of h_i and J_{ij} values from 250 different groups of 10 cells. **c**, Two examples of 3 cells within a group of 10. At left, cells A and B have almost no interaction ($J_{AB} = -0.02$), but cell C is very strongly interacting with both A and B ($J_{AC} = 0.52, J_{BC} = 0.70$), so that cells A and B exhibit strong correlation, as shown by their cross-correlogram (bottom panel). At right, a ‘frustrated’ triplet, in which cells A and B have a significant positive interaction ($J_{AB} = 0.13$), as do cells B and C ($J_{BC} = 0.09$), but A and C have a significant negative interaction ($J_{AC} = -0.11$). As a result, there is no clear correlation between cells A and B, as shown by their cross-correlogram (bottom panel). **d**, Interaction strength J_{ij} plotted against the correlation coefficient C_{ij} ; each point shows the value for one cell pair averaged over many different groups of neighbouring cells (190 pairs from 250 groups), and error bars show standard deviations.

Are pairwise correlations enough?

Figure 2 shows the predictions of the maximum entropy model P_2 consistent with pairwise correlations in populations of $N = 10$ cells. Looking in detail at the patterns of spiking and silence of one group of 10 cells, we see that the predicted rates for different binary words



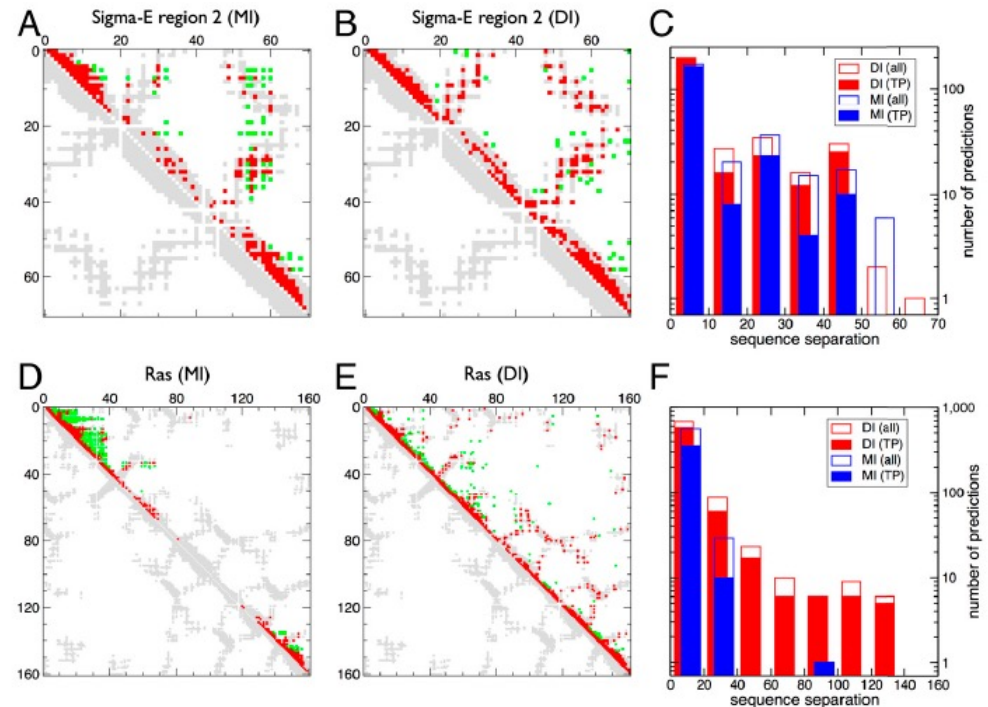
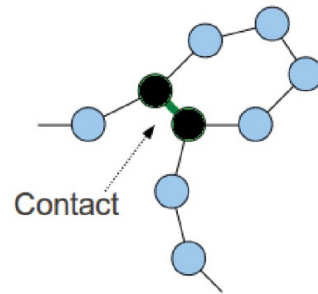
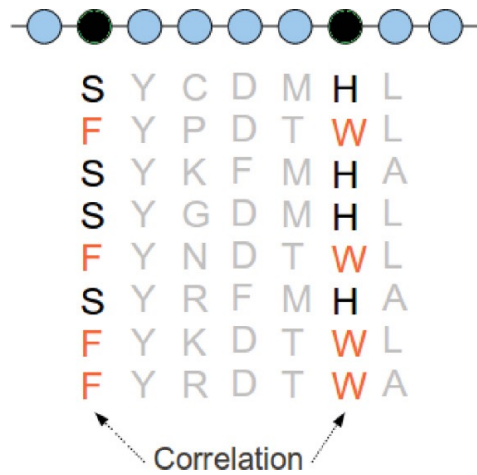
出典：Schneidman et al , *Nature* 440, pp.1007–1012 (2006)

Direct Coupling Analysis

Morcos et al , *PNAS* **108**, pp. E1293-E1301 (2011)

- タンパク質の共進化データから残基間の直接的な結合を20状態ポッツスピンのボルツマンマシンで推定
⇒ 立体構造予測の効率化 (AlphaFoldでも利用)

結合しているペアは共進化の結果相関が高い



出典 : Ekeberg et al, *Phys. Rev. E* **87**, 012707 (2013)

出典 : Morcos et al , *PNAS* **108**, pp. E1293-E1301 (2011)

Pseudolikelihood Maximization

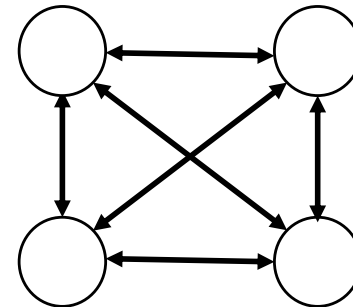
Aurell and Ekeberg, *Phys. Rev. Lett.* 108, 090201 (2012)

- 結合の対称性に目をつむり、条件付き尤度の最大化を行えばボルツマンマシンの計算量的困難は避けられる

Likelihood

$$P(\mathbf{s}^\mu | \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{Z(\mathbf{w}, \boldsymbol{\theta})} \exp \left(\sum_{i < j} w_{ij} s_i^\mu s_j^\mu - \sum_i \theta_i s_i^\mu \right)$$

計算困難

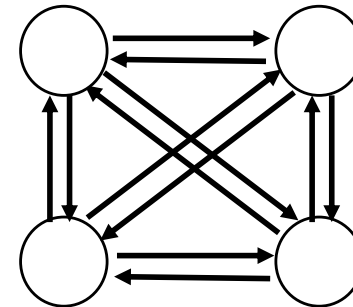


対称結合

Pseudolikelihood

$$P(s_i^\mu | \mathbf{s}_{\setminus i}^\mu, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\exp \left(s_i^\mu \left(\sum_{j \neq i} w_{ij} s_j^\mu - \theta_i \right) \right)}{2 \cosh \left(\sum_{j \neq i} w_{ij} s_j^\mu - \theta_i \right)} \quad (i = 1, \dots, N)$$

計算困難は生じない



非対称結合

適当な条件の下では、データ量の増加とともに推定結果は真の解に漸近
(Besag, *The Statistician*, 24 (3): 179–195 (1975))

まとめ

- ホップフィールドモデルとボルツマンマシンに関して原論文の内容とその後の展開について述べた

まとめ

- ホップフィールドモデルとボルツマンマシンに関して原論文の内容とその後の展開について述べた
- ホップフィールド氏、ヒントン氏、いずれもその後のAI研究に大きな影響を与えているが、研究者としてのスタイルが随分と異なる
 - ホップフィールド氏: ごちゃごちゃしていた問題をスッキリ整理し後進が遊びやすい土壌を作る。本人はすぐに別の問題へ
 - ヒントン氏: ごちゃごちゃした問題を提示。苦節30年自らしぶとく試行錯誤を重ねた結果、遂に大輪の花が開く

まとめ

- ホップフィールドモデルとボルツマンマシンに関して原論文の内容とその後の展開について述べた
- ホップフィールド氏、ヒントン氏、いずれもその後のAI研究に大きな影響を与えているが、研究者としてのスタイルが随分と異なる
 - ホップフィールド氏:ごちゃごちゃしていた問題をスッキリ整理し後進が遊びやすい土壌を作る。本人はすぐに別の問題へ
 - ヒントン氏:ごちゃごちゃした問題を提示。苦節30年自らしぶとく試行錯誤を重ねた結果、遂に大輪の花が開く
- とはいえ、お2人とも流行に流されず、自ら新しい分野を切り開く開拓者であることは同じ。研究者たるもの、そうありがたいものである