

Tree-reweighted 近似による Ising 逆問題の解

佐野 崇*

A Solution to the Inverse Ising Problem in Tree-reweighted Approximation

Takashi Sano

ABSTRACT: To develop an efficient and accurate method for learning in the Ising model, we apply the tree-reweighted approximation to compute the partition function. Using the tree-reweighted approximation, we can optimize the rigorous lower bound of the exact objective function. By solving the moment-matching and self-consistency conditions analytically, we can derive the interaction matrix as a function of the given data statistics. With this solution, we can obtain the optimal interaction matrix without iterative computation. To evaluate the accuracy of the proposed inverse formula, we compared our results to those obtained by existing inverse formulae obtained by other approximations. In an experiment to reconstruct the interaction matrix, we found that the proposed formula returns the best estimates in strongly-attractive regions for various graph structures.

Keywords: Ising model, Inverse Ising problem, Bethe approximation, Tree-reweighted approximation

(Recived November 30, 2018)

1 はじめに

Ising スピン模型 (Boltzmann マシン) は、2 値確率変数を持つ無向グラフィカルモデルである。Ising モデルは単純な構造をしているが、分配関数の計算には大規模な和が現れ、厳密計算は難しい。Ising 模型はスピングラス等の物理現象のモデルとして重要であるだけでなく、画像認識などの機械学習器 [2]、生物学データのモデル化 [3] など応用は多岐に渡る。

与えられた Ising 模型から、確率変数の相関を求めることを順問題という。逆に、データから相関を計算した後に、相関行列から Ising 模型のパラメータを推定することを逆問題という。逆問題は、学習の問題に他ならない。順問題、逆問題ともに、その難しさは、分配関数の計算の難しさに帰着できる。先行研究では、変分法である Bethe 近似を用いて、逆問題を近似的に解き、パラメータを相関行列の関数として表している [4, 5]。近似の範囲内であるが、この方法には、サンプリング法などに現れる反復計算が必要なく、極めて小さい計算コストで逆問題が解けることが利点である。

Bethe 近似はグラフが木に近いときに精度が良くなると期待できるが、一般には精度を保証する理論的根拠があるわけではない。一方で、Tree-reweighted (TRW) 近似 [6] は、真の分配関数の上限を与えることができる。そのため、真の目的関数の下限を最適化することで、近似的に逆問題を解くことができる [7]。本論文では、Ising 模型の場合に TRW 自由エネルギーを導出し、それを解析することで、Bethe 近似と同様の逆問題の解を求めた。この解は真の目的関数の下限を与え、かつ計算コストも小さい。Bethe 近似と TRW 近似の精度を、いくつかの場合に実験的に評価したところ、特に引力の強い場合に、TRW 近似のほうが精度が良いことがわかった [1]。

本論文は次のように構成される。次の節で、Ising 模型と順問題、逆問題の定式化を行う。3 節では Bethe 近似による順 Ising 問題と逆 Ising 問題の解法をまとめる。4 節で、TRW 近似を導入し、TRW 近似による逆 Ising 問題の解を与える。5 節では、導出した TRW 近似と Bethe 近似の解を実験的に比較する。6 節はまとめの節である。

* 成蹊大学 理工学部 情報科学科 (tsano@st.seikei.ac.jp)

2 Ising 模型

Ising 模型は 2 値確率変数の pair-wise な相互作用を記述する確率模型である。確率変数 $s_i = \{\pm 1\}$ の集合を V , 相互作用のある変数の組 (edge) の集合を E とすると、Ising 模型のエネギー関数は次のように定義される。

$$E(\mathbf{s}) = - \sum_{\langle ij \rangle \in E} J_{ij} s_i s_j - \sum_{i \in V} h_i s_i \quad (1)$$

ここで J_{ij}, h_i はモデルパラメータであり、それぞれ 2 スピン、1 スピンに対するポテンシャルを表す。確率分布関数は、Boltzmann 分布として与えられる。

$$P(\mathbf{s}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\mathbf{s})) \quad (2)$$

ここで、規格化因子として分配関数 Z を定義した。

$$Z(J, h) = \sum_{\mathbf{s}} \exp(-E(\mathbf{s})) \quad (3)$$

応用上興味があるのは、与えられたパラメータに対して、ある変数 s_i の期待値 $\langle s_i \rangle$ や、2 つの変数の間の相関 $\langle s_i s_j \rangle$ を求めることである。このように Ising 模型から変数の相関を求めることを、Ising 模型に対する順問題と呼ぶ。定義より明らかに、もし分配関数が J, h の関数として計算できれば、これらの値は直ちに求めることができ、順問題が解けたことになる。しかし、ごく限られた場合を除き、分配関数を厳密に計算することは困難である。

次に、Ising 模型に対する逆問題を述べる。逆問題では、スピン変数のデータ集合が与えられる: $\mathbf{s}^{(i)}, i = 1, \dots, L$. このとき、模型のパラメータ J_{ij}, h_i を、可能な限りデータを再現するように定める。すなわち、つぎの対数尤度関数を最大化するようにパラメータを選ぶ。

$$\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \ln P(\mathbf{s}^{(i)}) = - \langle E \rangle_{data} - \ln Z \quad (4)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle_{data}$ は、データ集合による平均を意味する: $\langle f \rangle_{data} \equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L f(\mathbf{s}^{(i)})$. 言い換えれば、逆問題はデータからのモデルの学習に他ならない。

逆問題の素朴な解法は、(4) 式をパラメータ J_{ij}, h_i で微分し、勾配がゼロになる点を求めることである。しかしながら、順問題の場合と同様に、分配関数をパラメータの関数として求めることは難しく、したがって勾配を計算することも難しい。

3 Bethe 近似

ここでは、まず Bethe 近似によって、順 Ising 問題を近似的に解く方法を紹介する。その後、順 Ising 問題の近似解法を利用して、逆 Ising 問題の解を与える。

3.1 順問題

Bethe 近似は変分近似法の一種である。変分近似では、真の分布 $P(\mathbf{s})$ を、より評価しやすい変分分布 $Q(\mathbf{s})$ で近似する。Bethe 近似では次のように、隣接する変数との相関のみを考える。

$$Q(\mathbf{s}) \propto \prod_i q_i(s_i) \prod_{\langle ij \rangle} \frac{q_{ij}(s_i, s_j)}{q_i(s_i)q_j(s_j)} \quad (5)$$

ここで、周辺確率分布 $q_i(s_i), q_{ij}(s_i, s_j)$ は変分パラメータである。

確率変数が 2 値であることを使うと、周辺確率分布 q_i, q_{ij} は、

$$q_i(s_i) = \frac{1}{2}(1 + m_i s_i) \quad (6)$$

$$q_{ij}(s_i, s_j) = \frac{1}{4}((1 + m_i s_i)(1 + m_j s_j) + c_{ij} s_i s_j) \quad (7)$$

と書き表すことができる。ここで、 m_i は s_i の平均、 c_{ij} は s_i, s_j の connected 相関を意味する; $m_i = \langle s_i \rangle_Q = \sum_{s_i} s_i q_i(s_i)$, $c_{ij} = \langle s_i s_j \rangle_Q - m_i m_j$.

変分分布 (5) を m_i, c_{ij} で表し、真の確率分布との KL 情報量を最小化することで、変分パラメータ m_i, c_{ij} を決定することができる。KL 情報量の最小化は、次の Bethe 自由エネルギーの最小化と等価である。

$$F_{\text{Bethe}}(m_i, c_{ij}) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(c_{ij} + m_i m_j) - \sum_i h_i m_i - \sum_{\langle ij \rangle} H[q_{ij}] - \sum_i (1 - d_i) H[q_i] \quad (8)$$

ここで、 $H[q]$ は、確率分布 q のエントロピーである: $H[q] = - \sum_s q(s) \ln q(s)$. また、 d_i は、変数 s_i と接続するエッジの数である。

Bethe 近似の範囲内で順問題は、 F_{Bethe} の最小化に帰着する。そこで、 m_i, c_{ij} による F_{Bethe} の微分を考える。 $\partial F_{\text{Bethe}} / \partial m_i = 0, \partial F_{\text{Bethe}} / \partial c_{ij} = 0$ を連

立して解くと、 m_i は次の方程式を満たす。

$$m_i = \tanh \left[h_i + \sum_j a \tanh(t_{ij} f(m_j, m_i, t_{ij})) \right] \quad (9)$$

ただし、 $t_{ij} = \tanh(J_{ij})$ 、また関数 $f(m_1, m_2, t)$ は次のように定義される。

$$f(m_1, m_2, t) = \frac{1 - t^2 - \sqrt{(1 - t^2)^2 - 4t(m_1 - m_2t)(m_2 - m_1t)}}{2t(m_2 - m_1t)} \quad (10)$$

したがって、Bethe 近似による Ising 順問題の解法は、式 (9) の固定点として m_i を求めることに帰着される。

Bethe 近似には、グラフ構造が木の (閉路がない) 場合、厳密な解を与えるという重要な性質がある。このとき、Bethe 自由エネルギーは変分パラメータについて凸であり、固定点方程式の解が大域的な最小解であることが保証される。

3.2 逆問題

逆問題は、モデルから計算された相関と、データの相関を一致させることでパラメータを決定する。モデルからの相関の計算法として、connected 相関 C_{ij} が、分配関数のパラメータ依存性から求まることを利用する、線形応答理論を用いたものである [8]

$$C_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} \quad (11)$$

したがって、

$$(C^{-1})_{ij} = \frac{\partial h_i}{\partial m_j} \quad (12)$$

m_i の固定点方程式 (9) の両辺を m_j で微分することで、相関係数の逆行列 C^{-1} と、パラメータ J_{ij} を関連付けることができる。 J_{ij} について解くと、次のようになる。

$$J_{ij}^{BA} = -a \tanh \left[\frac{1}{2(C^{-1})_{ij}} \sqrt{D_{ij}} + \frac{1}{2(C^{-1})_{ij}} \sqrt{(\sqrt{D_{ij}} - 2m_i m_j (C^{-1})_{ij})^2 - 4(C^{-1})_{ij}^2 - m_i m_j} \right] \quad (13)$$

ここで、

$$D_{ij} = \sqrt{1 + 4(1 - m_i^2)(1 - m_j^2)(C^{-1})_{ij}^2} \quad (14)$$

である。

すなわち、データから平均 m_i と相関行列 C_{ij} を計算できれば、 J_{ij}^{BA} によって、反復計算を行わずにパラメータを近似計算できる。

4 Tree-Reweighted 近似

Tree-Reweighted(TRW) 近似では、模型のエッジ $\langle i, j \rangle$ に対する非負の値エッジ出現確率 ρ_{ij} を用いる (図 1)。与えられた ρ を用いると、分配関数 Z の上界を次のように与えることができる [6]。

$$Z(J, h) \leq Z^{TRW}(J, h, \rho) = \exp(-\tilde{F}_{TRW}(J, h, \rho)) \quad (15)$$

ここで、 \tilde{F}_{TRW} は、TRW 自由エネルギー

$$F_{TRW} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(c_{ij} + m_i m_j) - \sum_i h_i m_i - \sum_{\langle ij \rangle} \rho_{ij} H[q_{ij}] - \sum_i (1 - \sum_{j \in N(i)} \rho_{ij}) H[q_i] \quad (16)$$

の最小値を表す。

TRW 近似によって Ising 逆問題を扱う場合、Bethe 近似における Bethe 自由エネルギーを TRW 自由エネルギーに置き換えれば全く同様に計算が行える。TRW 近似での逆問題の解 J^{TRW} は次のように求まる。

$$J_{ij}^{TRW} = -\rho_{ij} a \tanh \left[\frac{1}{2(\tilde{C}^{-1})_{ij}} \sqrt{\tilde{D}_{ij}} + \frac{1}{2(\tilde{C}^{-1})_{ij}} \sqrt{(\sqrt{\tilde{D}_{ij}} - 2m_i m_j (\tilde{C}^{-1})_{ij})^2 - 4(\tilde{C}^{-1})_{ij}^2 - m_i m_j} \right] \quad (17)$$

ただし、 $(\tilde{C}^{-1})_{ij} = (C^{-1})_{ij} / \rho_{ij}$ 、また \tilde{D} は

$$\tilde{D}_{ij} = \sqrt{1 + 4(1 - m_i^2)(1 - m_j^2)(\tilde{C}^{-1})_{ij}^2} \quad (18)$$

である。

TRW 近似を用いる利点の 1 つは、TRW 近似の目的関数が、真の目的関数の下界になっていることである [7]。このことは、分配関数の大小関係から直ちに理解できる。

$$l = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \ln P(\mathbf{s}^{(i)}) = -\langle E \rangle_{data} - \ln Z \geq -\langle E \rangle_{data} - \ln Z^{TRW} \equiv l^{TRW} \quad (19)$$

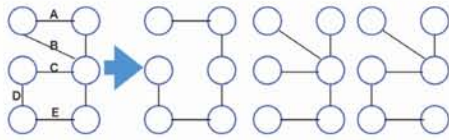


図1 閉路のあるグラフの ρ の決め方。左: 元のグラフ。右の3つ: 元のグラフからいくつかエッジを除いた3つの木グラフ。A から E のエッジが、この3つの木グラフの中で何回現れるかで ρ を決定できる。この場合は、 $\rho_A = 1/3, \rho_B = \rho_C = \rho_D = 2/3, \rho_E = 1$ である。

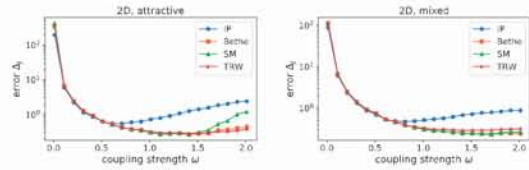


図2 2次元格子模型の場合の、IP 近似、Bethe 近似、TRW 近似の比較。左が引力相互作用、右が混合相互作用の場合である。

5 数値実験

Bethe 近似と TRW 近似による逆 Ising 問題の解を数値的に比較するために、2次元格子模型を用いて評価を行った。引力と混合相互作用の2種類を考え、Gibbs サンプリングによって計算された相関から、結合パラメータを再構成できるかどうかで手法を評価した。推定値の誤差は、推定値 J_{ij} と真の値 J_{ij}^{true} を用いて、次の尺度で評価した [4]。

$$\Delta_J = \sqrt{\frac{\sum_{\langle ij \rangle} (J_{ij} - J_{ij}^{true})^2}{\sum_{\langle ij \rangle} (J_{ij}^{true})^2}} \quad (20)$$

変数数は $N = 7 \times 7$ とした。パラメータは、引力の場合は $J_{ij} \sim u[0, \omega]$ 、混合の場合は $J_{ij} \sim u[-\omega, \omega]$ とした。 ω は結合強度を表す。バイアスはどちらの場合も $h_i \sim u[-0.05, 0.05]$ である。

逆公式は、Bethe 近似 (13)、TRW 近似 (17) の他に、Independent-Pair(IP) 近似と Sessak-Monasson(SM) 近似を比較した。TRW 近似にはエッジ出現確率 ρ_{ij} を定める必要があるが、今回は、変数数 N とエッジ数 $|E|$ を用いて、 $\rho_{ij} = (N - 1)/|E|$ というような値を採用した。

図2に、2次元格子模型の結果を示した。引力の場合には、特に相互作用が大きい場合に、TRW 近似がもっとも精度が良いことがわかる。混合相互作用の場合には、Bethe 近似や SM 近似の方が精度が良かったが、TRW 近似もそれらに近い精度を示した。

6 おわりに

本論文では、Ising 逆問題に対して、TRW 近似による解を与えた。解析的に TRW 近似解を与えたことで、相関行列から模型パラメータを求めるのに必

要な計算コストを非常に小さくすることができた。このような解析解の導出は、Bethe 近似には先行研究 [4, 5] があったが、TRW 近似に対しては本研究が初めてである。

TRW 近似解と Bethe 近似解を2次元格子模型で比較したところ、特に引力が強い領域で、TRW 近似がもっとも精度が良く、それ以外の領域でも既存手法と同等の精度を示した。

本研究では、エッジ出現確率 ρ_{ij} を1つに固定して性能評価を行った。より精度を求めるならば、本来は ρ_{ij} についても最適化を行うべきであり、今後の研究課題である。

参考文献

- [1] Sano, T. In proc. The 2018 International Joint Conference on Neural Networks(IJCNN), (2018).
- [2] Salakhutdinov, R., & Hinton, G. In proc. AI-STAT. (2009).
- [3] Cocco, S., Leibler, S., & Monasson, R. Proceedings of the National Academy of Sciences, 106(33), 14058-14062. (2009).
- [4] Ricci-Tersenghi, F. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2012(08), P08015. (2012).
- [5] Welling, M., & Teh, Y. W. Artificial Intelligence, 143(1), 19-50. (2003).
- [6] Wainwright, M. J., Jaakkola, T. S., & Willsky, A. S. In proc. UAI 2002. (2002).
- [7] Wainwright, M. J., Jaakkola, T. S., & Willsky, A. S. In proc. AISTATS. (2003).
- [8] Kappen, H. J., & Rodríguez, F. D. B. Neural Computation, 10(5), 1137-1156. (1998).