

# 自己組織化の数理を俯瞰する

(京都工芸繊維大学 平成 27 年 3 月 27 日)

羽鳥尹承 (文科省核融合科学研究所 名誉教授)

以下の目次は、

- (1) スピン系の相転移と平均場理論 (文献 1, 2)
  - 1-1) Ising モデル
  - 1-2) 平均場理論
  - 1-3) Landau 理論
  - 1-4) ゆらぎと相関関数
  - 1-5) 動的臨界現象
- (2) Synergetics (文献 3)
  - 2-1) Fokker-Planck (以下 F-P) 方程式と Landau 理論の類似
  - 2-2) F-P 方程式と Ginzburg-Landau (以下 G-L) 方程式の類似
  - 2-3) 非平衡相転移としての自己組織化 (方程式の縮約)
- (3) G-L 方程式の普遍性 (文献 4)
  - 3-1) Bénard/液晶対流
  - 3-2) 反応拡散系
- (4) 連想記憶に対する Hopfield のニューラルネットワークモデル (文献 5)
  - 4-1) 連想記憶
  - 4-2) 更新規則とエネルギー関数の導入
  - 4-3) ゆらぎの役割の重要性

## 参考文献

- 1) 西森秀稔 「相転移・臨界現象の統計力学」(2011)
- 2) 高橋和孝 東工大講義ノート「相転移・臨界現象とくり込み群」(2014)
- 3) H.Haken ”Synergetics” 2nd (1978)
- 4) 森肇、蔵本由紀 「散逸構造とカオス」 (2003)
- 5) 堀口 剛、佐野雅己 「情報数理物理」 (2000)

## (1) スピン系の相転移と平均場理論

相転移現象には 普遍性 があるのでスピン系の理論にも普遍性がある。

### 1-1) Ising モデル

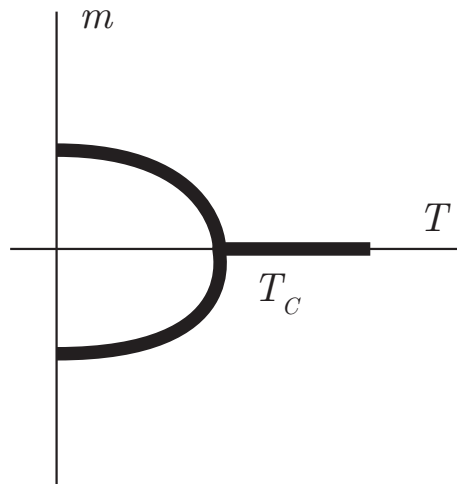


図 1: 相転移

$m$  : 自発磁化

$h$  : 外部磁場

Hamiltonian は交換相互作用で表される。温度が極低温でない限り量子効果は考えなくてよい。

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (1)$$

もし  $J_{ij} = J$  と簡略化できれば、

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (2)$$

となり Ising 模型 と呼ばれる。  $J > 0$  なら強磁性、  $J < 0$  なら反磁性に相当するが、ここでは強磁性とする。  $S_i = \{1, -1\}$  で、  $\langle i, j \rangle$  は相互作用しているスピン対を表す。

### 1-2) 平均場理論

特定の  $i$ -th スピンに着目し、それと相互作用している周りのスピンの効果を平均値  $m$  で置き換える。すなわち、 $m = \langle S_i \rangle$ ,  $S_i = m + \delta S_i$ ,

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (m + \delta S_i)(m + \delta S_j) - h \sum_i S_i \\ &= -Jm^2 N_B + Jm^2 z N - (Jmz + h) \sum_i S_i, \end{aligned} \quad (3)$$

ここに  $N$  : 格子の総数、 $N_B$  : ボンドの総数、 $z$  : 1つのサイトから出るボンドの総数、 $Jmz$  : 分子場である。Self-consistency の条件は、

$$\begin{aligned} m = \langle S_i \rangle &= \frac{\sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} S_i e^{-\beta H}}{\sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} e^{-\beta H}} \\ &= \tanh[\beta(Jmz + h)] \end{aligned} \quad (4)$$

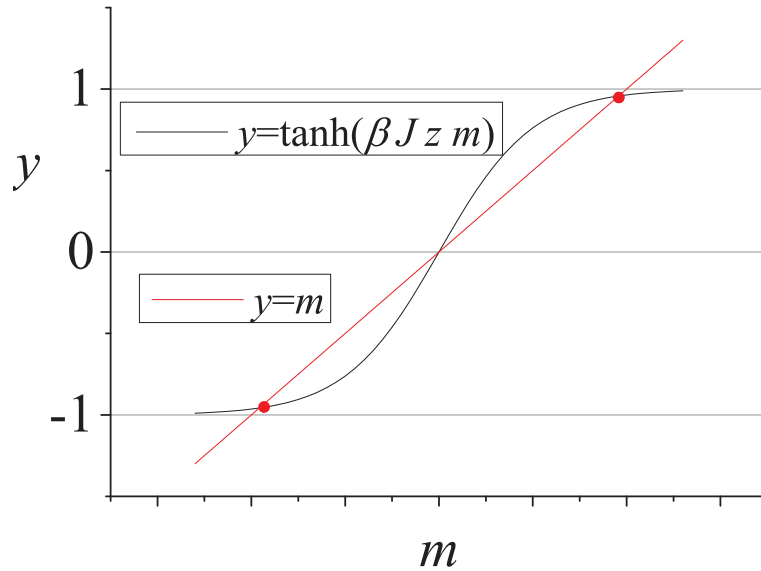


図 2:  $\beta J z > 1$  の場合

### 1-3) Landau 理論

現象論ではあるがかなり良い結果を導く。対称性の考察から一格子当たりの自由エネルギーを磁化  $m$  の関数として求める。

$$f(m) = f_0(\beta) + a(\beta)m^2 + b(\beta)m^4 + \dots \quad (5)$$

Landau 理論では  $m$  に相当する物理量を”order parameter” (秩序パラメータ) と呼ぶ。 $m$  の熱平衡値は関数  $f(m)$  の最小値で決まる、すなわち、

$$\frac{df(m)}{dm} = 0. \quad (6)$$

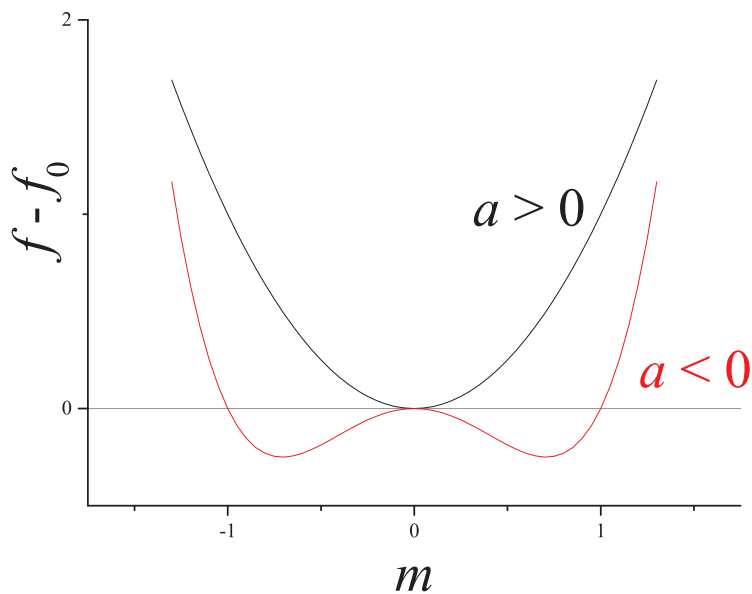


図 3: 秩序パラメータ

自発的対称性の破れ : 変換  $m \rightarrow -m$  に対して対称であるのに、 $a < 0$  のときは  $m \neq 0$  に自発的に変化する。なお外場があると  $f(m) = f_0 + am^2 + bm^4 - hm$  となる。

Landau 理論と平均場理論は等価である。

$$-\frac{1}{N\beta} \log Z(m) = f(m), \quad (7)$$

$$Z(m) = \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{-\beta H(m)}, \quad (8)$$

$$Z(m) = e^{\beta Jm^2(N_B - zN)} [2 \cosh \beta(Jmz + h)]^N, \quad (9)$$

$$f(m) = -\frac{1}{N} Jm^2(N_B - zN) - \frac{1}{\beta} \log [2 \cosh \beta(Jmz + h)], \quad (10)$$

最後の表式を  $m$  で展開すれば Landau の自由エネルギーの形になる。自由エネルギー最小の条件 (6) は平均場理論における self-consistency の条件 (4) に一致する。

- 無限レンジ模型では平均場理論が厳密解を与える。  $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i = m$
- 最近接正方格子の Ising モデルに対する厳密解は Onsager が与えた (1944)。
- $m$  を指定した分配関数  $Z(m) = \text{Tr}[\delta(m - \frac{1}{N} \sum_i S_i) e^{-\beta H}]$  と指定しない分配関数  $Z$  の間には、

$$Z = \int dm Z(m) \quad (11)$$

の関係がある。

- 平均場近似の適用限界 (文献 1, 2)

#### 1-4) ゆらぎと相関関数

現実の磁性体ではスピンの揃っている領域は空間的に不規則にばらついている。すなわち  $m(\vec{r}) = \langle m(\vec{r}) \rangle + \delta m(\vec{r})$  とみなせる。ゆらぎ  $\delta m(\vec{r})$  は平均場理論でも Landau 理論でも考慮されていない。Ginzburg-Landau (以下 G-L) 理論へと改良しなければならない。磁化のゆらぎの相関関数と外場に対する線形応答の Green 関数の間には、

$$\langle \delta m(\vec{r}) \delta m(\vec{r}') \rangle = G(\vec{r}, \vec{r}'), \quad (12)$$

$$\delta m(\vec{r}) = \beta \int d\vec{r}' G(\vec{r}, \vec{r}') \delta h(\vec{r}'). \quad (13)$$

相関関数の代わりに Green 関数を求める。G-L 理論によれば自由エネルギー  $F$  は、

$$F = \int d\vec{r} \tilde{f}(m(\vec{r})), \quad (14)$$

$$\tilde{f}(m(\vec{r})) = \tilde{f}_0(\beta) + A(\beta)m^2(\vec{r}) + B(\beta)m^4(\vec{r}) + \frac{D}{2}|\nabla m(\vec{r})|^2 - h(\vec{r})m(\vec{r}). \quad (15)$$

導出は文献 1, 2 を参照。

熱平衡では  $\frac{\delta F}{\delta m} = 0$  となるから、

$$2Am(\vec{r}) + 4Bm^3(\vec{r}) - D\nabla^2 m(\vec{r}) = h(\vec{r}), \quad (16)$$

となる。  $h(\vec{r}) = h + \delta h(\vec{r})$ ,  $m(\vec{r}) = \langle m \rangle + \delta m(\vec{r})$  と置いて線形応答を求めると、

$$(2A + 12B\langle m \rangle^2 - D\nabla^2)\delta m(\vec{r}) = \delta h(\vec{r}). \quad (17)$$

ここに平衡値  $\langle m \rangle$  は Landau 理論で決める。Green 関数、

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi\beta D} \frac{e^{-|\vec{r}-\vec{r}'|/\xi}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (18)$$

相関長は

$$\xi = \begin{cases} \sqrt{\frac{D}{2A}} = \sqrt{\frac{D}{2a(T-T_c)}} & \text{if } T > T_c \\ \sqrt{\frac{D}{-4A}} = \sqrt{\frac{D}{4a(T_c-T)}} & \text{if } T < T_c \end{cases}$$

相転移点では 相関長は発散する。相関関数は冪則減衰、

$$\langle \delta m(\vec{r}) \delta m(\vec{r}') \rangle \propto \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{d-2}}. \quad (19)$$

つまり、相転移点での磁化は フラクタル構造 を形成している。モンテカルロシミュレーションの結果もそれを示している。

### 1-5) 動的臨界現象

今までは熱平衡に限った話だったが、ここで平衡への緩和を扱う。現象論ではあるが磁化の緩和は次のような Langevin 型の方程式に従う。

$$\frac{\partial}{\partial t} m(\vec{r}, t) = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta m(\vec{r}, t)} + \zeta(\vec{r}, t), \quad (20)$$

$$\langle \zeta(\vec{r}, t) \zeta(\vec{r}', t') \rangle = 2T\Gamma \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (21)$$

具体的には、

$$\frac{\partial}{\partial t} m(\vec{r}, t) = -\Gamma(2Am + 4Bm^3 - D\nabla^2 m) + \zeta(\vec{r}, t). \quad (22)$$

この方程式は time dependent Ginzburg Landau (以下では TDGL) 方程式と呼ばれていて、以下の議論でもたびたび登場する。

この方程式において  $\Gamma 2A \propto (T - T_c)$  は緩和時間の逆数の目安になることが分かる。したがって臨界点では緩和時間が発散する。これを一般的に、critical slowing down とよばれている。

## (2) Synergetics

この表題の意味は、文献3の序文によれば、種々の分野にある現象の類似性を強調する意図の下でつくられた造語である。

### 2-1) F-P 方程式と Landau 理論の類似

変数  $\vec{q} = (q_1, \dots, q_N)$  に対する力学系、

$$\frac{d}{dt}\vec{q} = \vec{K}(\vec{q}), \quad (23)$$

にゆらぎを導入した Langevin 方程式、

$$\frac{d}{dt}\vec{q} = \vec{K}(\vec{q}) + \vec{F}(t), \quad (24)$$

$$\langle F_i(t)F_j(t') \rangle = Q_{ij}\delta(t-t'), \quad (25)$$

に支配される確率変数  $\vec{q}$  の確率分布  $P(\vec{q}, t)$  は F-P 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P = -\nabla_{\vec{q}}(\vec{K}P) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} Q_{ij}\frac{\partial^2}{\partial q_i\partial q_j}P \quad (26)$$

を満たし、もし  $Q_{ij} = Q = \text{const.}$  ならば、定状解  $P_{eq}$  は

$$-\vec{K}P_{eq} + \frac{1}{2}Q\nabla_{\vec{q}}P_{eq} = 0. \quad (27)$$

特に  $\vec{K} = -\nabla_{\vec{q}}V$  と書けるならば、

$$P_{eq}(\vec{q}) \propto \exp\left\{-\frac{2V(\vec{q})}{Q}\right\} \quad (28)$$

となる。ただしポテンシャル  $V(\vec{q})$  は  $V \rightarrow \infty$ , as  $|\vec{q}| \rightarrow \infty$  と仮定する。従って確率変数  $\vec{q}$  はポテンシャル  $V$  を最小にする値がもっとも確率が高い。



一方、自由エネルギー最小の Landau 理論を力学系として解釈すれば、

$$\frac{d}{dt}m = -\Gamma \frac{df}{dm} \quad (29)$$

であるがもし図4のように二つの極小値  $m = 0, m_1$  が存在する場合は平衡が求まらない。そこで揺らぎが登場する。Langevain 型の方程式、

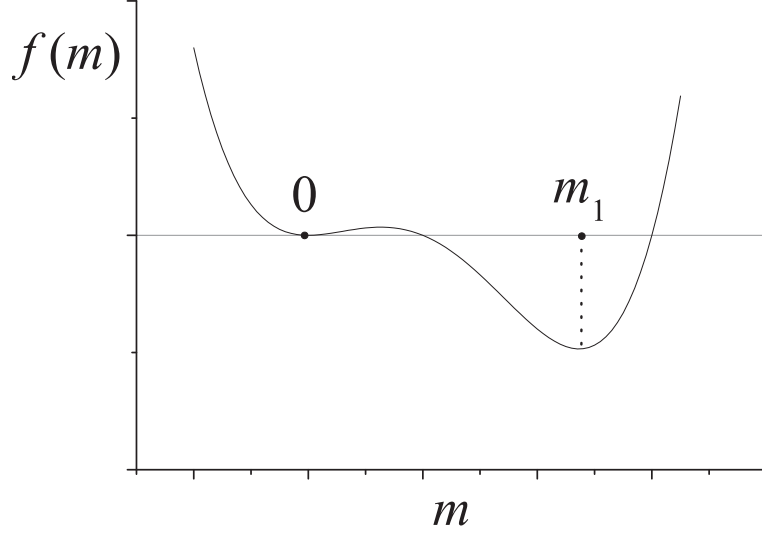


図 4: 二つの極小値が存在する場合

$$\frac{d}{dt}m = -\Gamma \frac{df}{dm} + F(t), \quad (30)$$

$$\langle F(t)F(t') \rangle = Q\delta(t-t') \quad (31)$$

これは F-P と等価だから確率密度の定常解は

$$P_{eq}(m) \propto \exp\left\{-\frac{2\Gamma f(m)}{Q}\right\} \quad (32)$$

となり  $m = m_1$  のほうが確率が高いので実現するのは  $m_1$  の方であろう。本来の Landau 理論では自由エネルギー  $f(m)$  は

$$Z(m) = e^{-\beta N f(m)} \quad (33)$$

で分配関数を定義するので  $m$  の確率分布  $P_{eq}(m)$  は

$$P_{eq}(m) = \frac{e^{-\beta N f(m)}}{\int Z(m) dm}. \quad (34)$$

以上を見比べれば  $\frac{2\Gamma}{Q}$  は  $\beta N$  に対応させることができる。

## 2-2) F-P 方程式と G-L 方程式の類似

オーダーパラメタ  $m$  の揺らぎを考えた G-L の場合も同様の類似性がある。G-L functional で自由エネルギー  $f$  を表すと、

$$f(\{m(\vec{r})\}) = f_0 + \int d\vec{r} \left[ \frac{\alpha}{2} m^2(\vec{r}) + \frac{\beta}{4} m^4(\vec{r}) + \frac{\gamma}{2} |\nabla m(\vec{r})|^2 \right], \quad (35)$$

$$P_{eq}(\{m(\vec{r})\}) = \frac{e^{-\beta f(\{m(\vec{r})\})}}{\int D\{m\} e^{-\beta f}} \quad (36)$$

一方、単純緩和の方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} m(\vec{r}, t) = -\frac{\Gamma \delta f}{\delta m(\vec{r})} = -\alpha m - \beta m^3 + \gamma \nabla^2 m \quad (37)$$

ゆらぎを考慮すると

$$\frac{\partial}{\partial t} m = -\alpha m - \beta m^3 + \gamma \nabla^2 m + F \quad (38)$$

これから F-P 型の方程式を導くことができ、

$$\frac{\partial}{\partial t} P = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\delta}{\delta m(\vec{r})} (\alpha m + \beta m^3 - \gamma \nabla^2 m) + \frac{Q}{2} \frac{\delta^2}{\delta m(\vec{r})^2} \right\} P \quad (39)$$

定状態解は

$$P_{eq}(\{m(\vec{r})\}) \propto \exp\left\{-\frac{2\Gamma}{Q} f(\{m(\vec{r})\})\right\} \quad (40)$$

となり G-L の平衡解と同形になる。

なお、order parameter が複素数  $\xi$  の場合の TDGL および定常解は、

$$\frac{\partial}{\partial t} \xi = -\alpha \xi - \beta |\xi|^2 \xi + \gamma \nabla^2 \xi + F, \quad (41)$$

$$P_{eq}(\{\xi\}) \propto \exp\left\{-\frac{2\Gamma}{Q} \int d\vec{r} \left[ \alpha |\xi|^2 + \frac{\beta}{2} |\xi|^4 + \gamma |\nabla \xi|^2 \right]\right\} \quad (42)$$

## 2-3) 非平衡相転移としての自己組織化

連続的に空間に広がった系で、流体などの非平衡の現象や反応拡散系などのように、空間構造を自己組織化することが知られている。いままでのスピン系の相転移の数理はそのような一般的な非平衡の自己組織化現象の理解に役立つ。非線形偏微分方程式系、

$$\frac{\partial}{\partial t} U_\mu = G_\mu(\nabla, U; \sigma) + D_\mu \nabla^2 U_\mu + F_\mu(t),$$

ここに  $G_\mu$  は  $U, \nabla$  の非線形関数である。この方程式を第一原理として、現象論ではない、縮約する摂動論 が展開されている。

パラメータ  $\sigma$  は分岐パラメータと呼ぶ。相転移における温度のようなパラメータである。 $\sigma < \sigma_c$  では安定な空間一様解  $U^0$  を持つ。 $\sigma > \sigma_c$  で  $U^0$  は不安定化するので  $U_\mu = U_\mu^0 + q_\mu(\vec{r}, t)$  と展開すれば、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - K(\nabla)\right)q = g(\nabla, q) + F(t), \quad (43)$$

線形化方程式

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - K(\nabla)\right)q = 0, \quad (44)$$

を固有モードに分解し、marginal stable mode をみつける。 $\sigma$  がわずかに臨界値を超えた領域で摂動展開する。marginal モードの振幅に相当する量  $\xi$  は空間的にも時間的にも緩やかに変化すると仮定し、 $\xi$  をオーダーパラメータとみなす。摂動展開して  $\xi$  に対する閉じた方程式に帰着させることができる。このさい安定モードは 断熱的に消去される。このことを”slaving principle” (H.Haken) とよんでいる。

以上、この方法は分岐点の近傍でのみ成立する。一般の  $\sigma$  では縮約はできない。臨界点以外では系の構造は定性的変化は無いのだから、定性的変化が起こる臨界点近傍が最も興味がある。

### (3) Ginzburg-Landau 型方程式の普遍性

前節の一般論に基づきいくつかの各論。流体现象における分岐現象弱不安定モード、反応拡散系における抑制物質の濃度、などの遅い自由度の示す 散逸構造 (I.Prigogine の用語 (1971))。

#### 3-1) Bénard/液晶対流

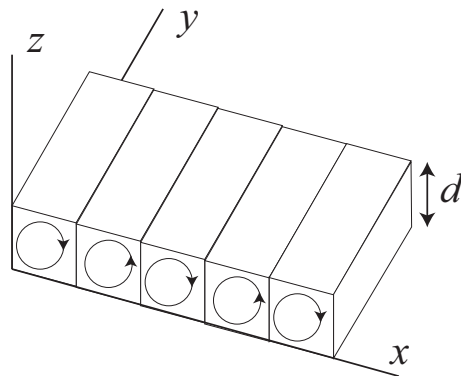


図 5: ロール構造

基礎方程式 (Boussinesq 方程式) :

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \nu \nabla^2 \vec{u} - \frac{1}{\rho_0} \nabla \pi + \alpha g \hat{z} \theta, \quad (46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta + \vec{u} \cdot \nabla \theta = \kappa \nabla^2 \theta + \beta w, \quad (47)$$

$$\vec{u} = (u, v, w), \quad (48)$$

$$\theta = T - (T_0 - \beta z). \quad (49)$$

この方程式系は  $\vec{u} = \theta = \pi = 0$  が定常解である。変数  $\pi$  は消去できる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 w = \nu (\nabla^2)^2 w + \alpha g \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \theta. \quad (50)$$

境界条件を考慮して、線形化方程式の安定性モード解析をする。 $\vec{k} = (k_x, k_y)$  とし、

$$(w, \theta) = (w_{m, \vec{k}}(t), \theta_{m, \vec{k}}(t)) \sin \frac{m\pi z}{d} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (51)$$

$$(w_{m, \vec{k}}(t), \theta_{m, \vec{k}}(t)) \propto e^{\lambda t}. \quad (52)$$

$\tilde{k}_c$  は marginal モードの波数であり波数ベクトルの方向は等方であるが実際は特

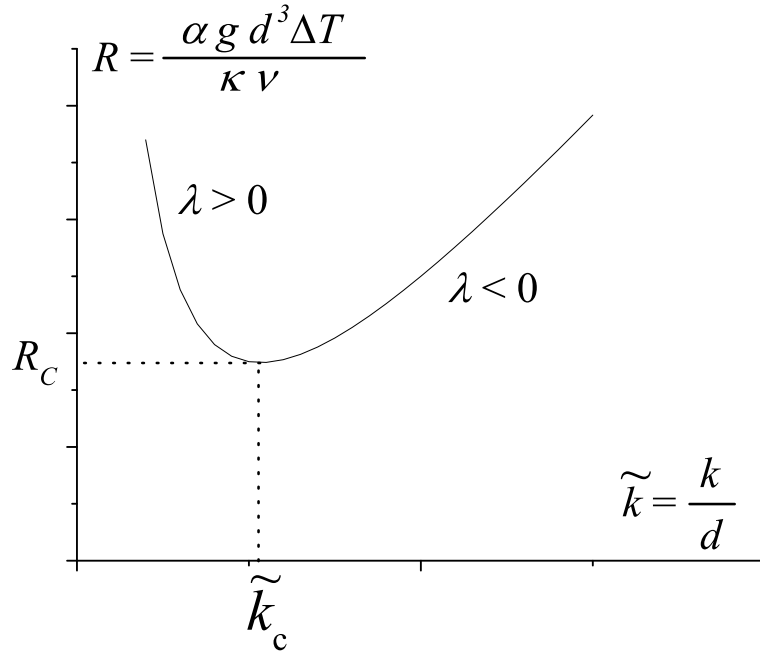


図 6:  $m = 1$  の場合の安定性

定の方向のみ不安定化する。その方向を  $x$  軸に選ぶ。臨界モードは

$$w(x, y, z) = (Z + \bar{Z}) \sin \frac{\pi z}{d}, \quad (53)$$

$$Z = W e^{ik_c x}, \quad (54)$$

線形解析の範囲では  $W$  は任意定数である。

次に、わずかに super-critical,  $R > R_c$  の場合、 $R - R_c = \mu R_c$ ,  $\lambda(\vec{k}_c) = \mu \lambda_1$  と置き、振幅を時間的にゆっくり変動する関数  $W(t)$  へと置き換える。

振幅  $W$  の saturation を決める振幅方程式は、

$$\frac{d}{dt} W = \mu \lambda_1 W - g |W|^2 W, \quad (55)$$

となる。ここに、 $g$ は正の実数である。この方程式は問題設定の対称性から直ちに求めることができる。すなわち空間座標の併進や反転に対して対称であることを使う。

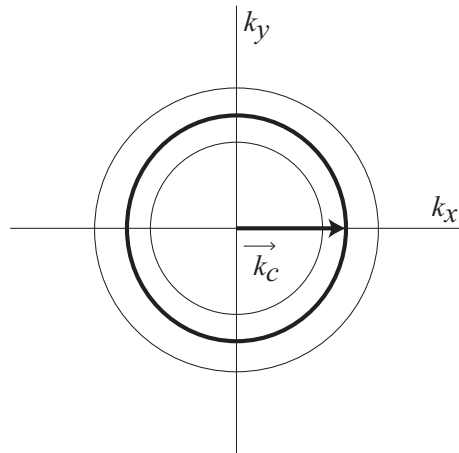


図 7:  $k$  空間の不安定領域

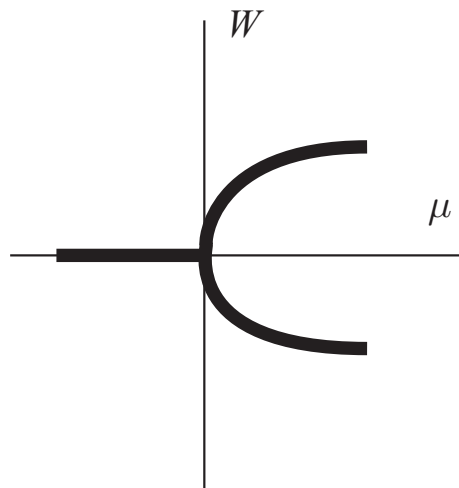


図 8: 分岐

次に空間座標  $(x, y)$  依存性を考えに入れる。super-critical になると波数  $\vec{k}_c$  単独ではなく  $\vec{k} = \vec{k}_c + \delta\vec{k}$  が不安定化する。しかし弱い不安定 ( $\mu \ll 1$ ) のため  $|\delta\vec{k}| \ll k_c$  だけが不安定化すると考えれば平面波に対する波束の効果をもたらし振幅  $W$  の空間依存性が現れる。このとき、

$$\lambda(\vec{k}) = \mu\lambda_1 - D(k - k_c)^2, \quad D > 0, \quad (56)$$

$$= \mu\lambda_1 - D\left(k_x - k_c + \frac{k_y^2}{2k_c}\right)^2. \quad (57)$$

従って、

$$\frac{\partial}{\partial t} W = \mu\lambda_1 W - g|W|^2 W + D\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i}{2k_c} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^2 W. \quad (58)$$

この方程式は Newell-Whitehead (以下 N-W) 方程式と呼ばれている。この方程式はポテンシャル  $\Psi$  を持つ。

$$\frac{\partial}{\partial t} W = -\frac{\delta\Psi}{\delta\bar{W}}, \quad (59)$$

$$\Psi = \int d\vec{r} \left( -\mu\lambda_1 |W|^2 + \frac{g}{2} |W|^4 + D \left| \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{i}{2k_c} \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right|^2 \right). \quad (60)$$

従って  $\Psi$  は減少関数である。

液晶の対流では非等方性があるので、臨界点で中立安定モードの波数は特定の方向  $\vec{k}_c$  に限定される。従って、

$$\lambda(\vec{k}) = \mu\lambda_1 - D_1(k_x - k_{cx})^2 - D_2(k_y - k_{cy})^2 \quad (61)$$

となるので、Ginzburg-Pitaevskii 方程式が得られる。異方性があるために単純化された形に縮約されることもある。

- なぜ実際はロール構造になるのか？ 多モードが不安定化する場合より単独モードが不安定化する方が F-P の確率を計算すると単独の方が確率が高い (H.Haken)。
- 条件によっては六角型の構造が観測されることがある。この結果を導くためには Bousinesq の近似を使ってはいけない (H.Haken)

### 3-2 反応拡散系

複数の種が反応しあってそれぞれの密度が空間的にも時間的にも定常に達する。しかし分岐パラメタ  $\mu$  を変化させると空間一様なまま時間的に振動を始める。力学系の観点からはこれはリミットサイクルとして知られている。分岐の観点からは Hopf 分岐として知られている。これは波動とは異なる。波動では有限の波長を持った振動が発生する。

臨界点では、このリミットサイクルは、各種の密度を  $x_\nu$  とすれば、

$$x_\nu = \alpha_\nu Z, \quad (62)$$

$$Z = W e^{i\omega_0 t} \quad (63)$$

と表すことができる。弱い超臨界では  $W$  は時間的に緩やかに変動する

$$\frac{\partial}{\partial t} W = \mu \lambda_1 W. \quad (64)$$

対称性を考慮して非線形効果を取り入れると、

$$\frac{\partial}{\partial t} W = \mu \lambda_1 W - g |W|^2 W. \quad g : \text{complex}, \quad (65)$$

空間的非一様の効果は成長率  $\lambda$  が

$$\lambda(k) = i\omega_0 + \mu \lambda_1 - Dk^2, \quad (66)$$

ここに  $D$  は一般には複素数で実部は正である。臨界波数がゼロになっていることに注意。従って空間的な緩やかな変動も考慮すると 複素 G-L 方程式 が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t} W = \mu \lambda_1 W - g |W|^2 W + D \nabla^2 W, \quad (67)$$

ここに係数  $\lambda_1, g, D$  は全て複素数である。この方程式はポテンシャルを持たない。

- 複素 G-L 方程式の示す現象のなかで回転らせん波というものがある。
- 位相ダイナミクス (文献4)



#### (4) 連想記憶に対する Hopfield のニューラルネットワークモデル

##### 4-1) 連想記憶

脳の記憶は連想記憶と言われている。

連想記憶とは

- 1) 事物を属性に分ける。
- 2) 属性を連合させて覚える (記名)。
- 3) 一部の属性を知り関連する属性と合わせて思い出す (想起)。

Hopfield はニューラルネットワークで連想記憶の数理モデルを作った。

脳という複雑系の示す自己組織化の解明は永遠の課題である。Hopfield の示した連想記憶のモデルはスピン系とも類似性があり興味深い。

##### 4-2) 更新規則とエネルギーの導入

想起のモデル :

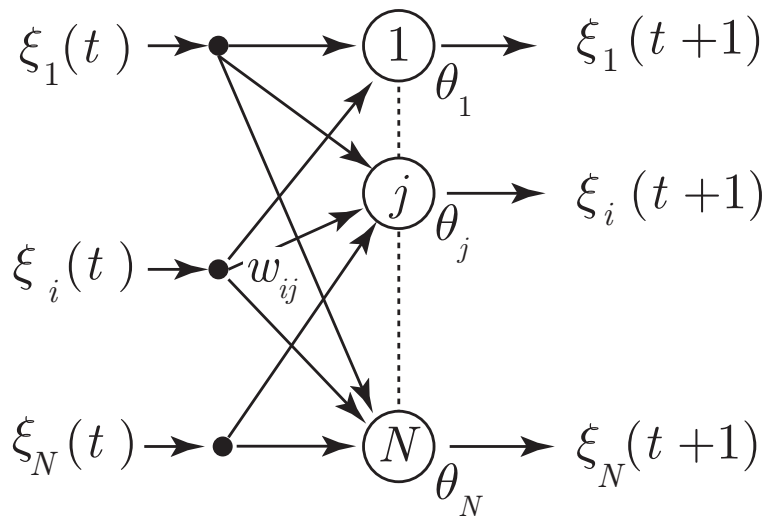


図 9: Hopfield モデル

$$\xi_i(t+1) = \text{sgn}\left(\sum_{j=1}^N w_{ij}\xi_j(t) - \theta_i\right), \quad (68)$$

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ -1 & \text{if } x < 0 \end{cases}$$

ここに  $\xi = \{1, -1\}$  で  $\theta_i$  は閾値である。更新は非同期で行う。すなわち乱数で特定の自然数  $I$  を選び  $i = I$  のニューロンだけを更新する。

記名のモデル :

$$w_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^P \xi_i^\mu \xi_j^\mu. \quad (69)$$

インデックス  $\mu$  は記憶すべき事物の番号であり、ここでは  $P$  個の事物を覚えたことになる。なお、ニューロンの個数  $N$  は属性の数ということもできるが、画像を記憶する際に全体を  $N$  個のピクセルに分解したと考えればよい。

$\xi_1^\mu$	$\xi_2^\mu$			
				$\xi_N^\mu$

図 10: 画像のピクセル

ハミルトニアンという量、

$$H(t) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij}\xi_i(t)\xi_j(t) + \sum_i \theta_i \xi_i(t) \quad (70)$$

を導入する。これはスピン系におけるハミルトニアンに相当している。

イ) ハミング距離

$$d_H(\xi_i^\mu, \xi_i) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N (\xi_i^\mu - \xi_i)^2, \quad (71)$$

$$= \frac{N}{2} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \xi_i^\mu \xi_i. \quad (72)$$

この定義より明らかに  $0 \leq d_H \leq N$ 。基本エネルギー  $E$  を導入する、

$$E = -\frac{1}{2N} \sum_{\mu=1}^P [N - 2d_H(\{\xi_i^\mu\}, \{\xi_i\})]^2. \quad (73)$$

上の式で、 $d_H(\{\xi_i^\mu\}, \{\xi_i\})$  が 0 または  $N$  のときに、すなわち  $\xi_i = \xi_i^\mu$  又は  $\xi_i = -\xi_i^\mu$  のとき、基本エネルギー  $E$  は極小値をとる。さらに変形する。

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mu=1}^P [N - 2(\frac{N}{2} - \frac{1}{2} \sum_i \xi_i^\mu \xi_i)]^2, \\ &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mu=1}^P \sum_{i,j} \xi_i^\mu \xi_j^\mu \xi_i \xi_j, \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} \xi_i \xi_j. \end{aligned} \quad (74)$$

従って (70) のハミルトニアン  $H$  は、

$$H(t) = E(t) + \sum_i \theta_i \xi_i(t). \quad (75)$$

ロ) 非同期更新に対してハミルトニアンは不変か減少となりけっして増加しないことが示せる。

もし更新して  $\xi_I(t+1) = \xi_I(t)$  ならば、明らかに  $\Delta H = H(t+1) - H(t) = 0$  である。

もし更新後  $\xi_I(t+1) = -\xi_I(t)$  ならば、

$$\begin{aligned} \Delta H &= \Delta E + \theta_I(\xi_I(t+1) - \xi_I(t)), \\ &= -2\xi_I(t+1) \sum_{j \neq I} w_{Ij} \xi_j(t) + \theta_I(\xi_I(t+1) - \xi_I(t)) \\ &= -2\xi_I(t+1) \sum_j w_{Ij} \xi_j(t) + 2\xi_I(t+1) w_{II} \xi_I(t) + \theta_I(\xi_I(t+1) - \xi_I(t)) \\ &= -2\text{sgn}(\sum_j w_{Ij} \xi_j(t) - \theta_I) (\sum_j w_{Ij} \xi_j(t) - \theta_I) - 2w_{II} \\ &\quad - 2\theta_I \xi_I(t+1) + \theta_I(\xi_I(t+1) - \xi_I(t)) \\ &= -2|\sum_j w_{Ij} \xi_j(t) - \theta_I| - 2w_{II} < 0. \end{aligned} \quad (77)$$

以上イ)、ロ) の結果を合わせると、(68) の非同期更新を繰り返すと、いずれは覚えている事物 (画像) に到達するはずである。すなわち (68) が想起のモデルになるはずである。

#### 4-3) ゆらぎの役割の重要性

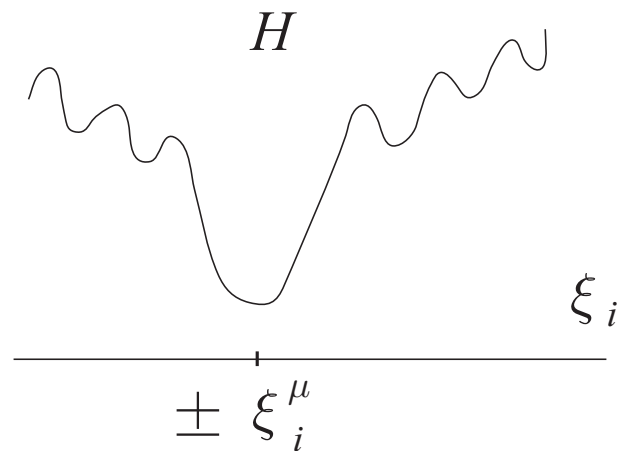


図 11: エネルギー  $H$  の多峰性

しかし、 $H(\{\xi_i\})$  の示す多峰性が大問題となる。極小値は  $\xi_i = \pm \xi_i^\mu$  に存在するが、それ以外にも小さな無意味な極小値が多数存在する。無意味な極小値に落ち込むと、そこで更新が止まってしまう。何らかの方法で新たな探索軌道を発生しなければならない。代表的な手法としては遺伝的アルゴリズム (GA) がある。その他にはカオスを使う試みもある。脳内の連想記憶においては後者の方が現実味は高い。新しい探索軌道を発生し続けて強い極小値に到達する。脳の働きは純粹に決定論的ではなく、何らかのゆらぎが重要な働きをしているのだろう。

## まとめ「自己組織化の数理の普遍性と個別性」

普遍性：

- 超臨界における構造形成
- ポテンシャル量が存在する。その極小値に向けて緩和  
(相転移、対流、Hopfield モデル)

個別性：

- 超臨界における構造形成という点では同じ
- ポテンシャルを持たず、それぞれの現実に対応して個別の方程式  
(反応拡散系の複素 TDGL など)