

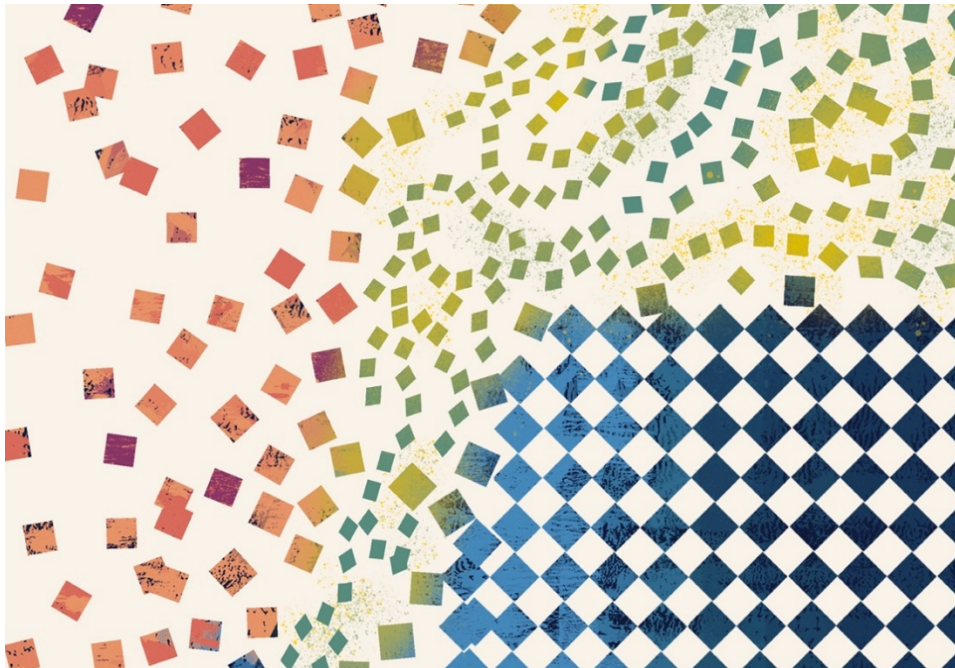
# 大規模複雑ネットワークの非平衡熱力学を切り開く

## —非対称イジング模型のエントロピー生成の厳密解導出に成功—

### 概要

物理的な現象から生命に至るまで、自然界のシステムは環境とのエネルギーや物質の交換を通じて秩序を維持しています。このメカニズムは長年にわたり非平衡熱力学という分野で研究されてきました。近年、ゆらぎの熱力学という新たな分野が発展し、コロイド粒子や分子モーターなどの微視的な非平衡過程の理解が急速に進んでいます。しかし、相互に複雑に影響し合う要素を持つ大規模なシステムの非平衡熱力学は未解決の課題として残っていました。今回、京都大学大学院情報学研究科の島崎秀昭准教授（北海道大学人間知・脳・AI 研究教育センター客員准教授）と Miguel Aguilera 博士（スペイン Basque Center for Applied Mathematics）らの研究グループは、大規模な非平衡システムに対して、時間非対称性を定量的に評価するエントロピー生成の厳密な解を導出しました。このシステムは統計物理学や機械学習分野の標準モデルであるイジングモデルに基づいています。その結果、時間非対称性はこれまでに他のシステムで示されていたのと同様に秩序-無秩序相転移点近くで局所的に最大化されるだけでなく、準決定論的なダイナミクスが示す無秩序相において最大となることがわかりました。標準モデルのエントロピー生成が厳密に導かれたことで、生物や機械の再帰的ニューラルネットワークにおけるパターン生成を正確に記述することが可能になりました。本成果は大規模で複雑なシステムの非平衡熱力学の確立に向けた重要な一歩となります。

この成果は、2023年6月23日に英国の国際学術誌「*Nature Communications*」にオンラインで掲載されました。



今回発見された時間非対称性を生むダイナミクスの相図イメージ (Illust. Robin Hoshino)

## 1. 背景

自然界のシステムは物理的な現象から生命現象に至るまで、環境とエネルギーや物質を交換しながら秩序を維持しています。物質は放っておくと無秩序な状態になると考えられていますが、なぜ世界には秩序や構造が存在するのでしょうか。無秩序の程度を測るエントロピー<sup>1</sup>という指標を用いると、システム全体が無秩序に向かう原則は熱力学第二法則<sup>2</sup>、あるいはエントロピー増大の法則で表されます。この法則に基づいてシステムの一部が残りの部分とエネルギーや物質を交換することで秩序や構造が生まれる仕組みは、非平衡熱力学という分野で長らく研究されてきました。

近年、ゆらぎの熱力学（確率的熱力学）という分野が発展し、不可逆なダイナミクスの時間非対称性を定量化したエントロピー生成<sup>3</sup>の探求を起点に熱力学第二法則が拡張され、非平衡過程の理解が進んできました。しかし、ゆらぎの熱力学は主に小さなシステムを対象として発展してきたため、複雑に影響しあう要素からなる大規模なシステムの非平衡熱力学は未解決の問題として残っていました。

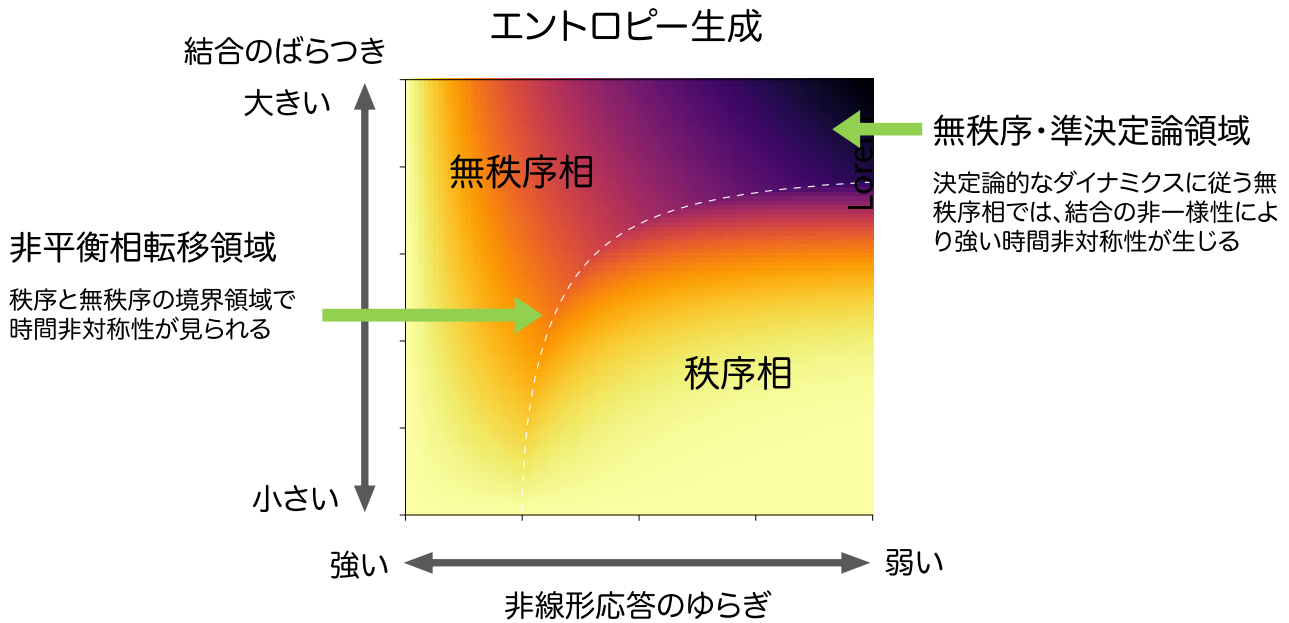
磁性体のモデルであるイジングモデル<sup>4</sup>は、複雑な相互作用を表現する古典的な物理モデルとして知られています。このモデルは対称な結合構造<sup>5</sup>を持つニューラルネットワークのモデルでもあり、生物や機械の学習を理解する上でも不可欠なモデルです。イジングモデルは、結合の強さやばらつきを変えることで、秩序・無秩序相やスピングラス相と呼ばれる複雑な状態が現れるなど、驚くべき現象を示します。2021年にはレプリカ法という巧みな手法でスピングラス相を解析した Parisi 博士にノーベル物理学賞が授与されました。イジングモデルの挙動の解明は様々な分野へ大きな波及効果をもたらすことから、顕著な科学的貢献であると認識されています。

イジングモデルの結合が非対称である場合、そのダイナミクスは時間的な方向性を持つ非平衡過程になります。しかし、古典的なモデルであるにも関わらず、その特性は明確にはわかっていませんでした。研究グループはこれまでに、非対称イジングモデルの秩序・無秩序の指標や非平衡過程の特性を近似的に明らかにする様々な平均場近似手法を包括的にまとめた理論を同雑誌に発表していました[1]。しかし、時間非対称性の指標であるエントロピー生成に関する厳密な解は得られておらず、不可逆なダイナミクスを完全に明らかにすることはできていませんでした。

[1] Aguilera, M., Moosavi, S.A. & Shimazaki, H. A unifying framework for mean-field theories of asymmetric kinetic Ising systems. *Nature Communications* **12**, 1197 (2021)

## 2. 研究手法・成果

研究チームは、非平衡過程の大規模モデルの典型例として非対称シェリントン-カークパトリックモデルを調査しました。このモデルでは結合は独立な正規分布に従います。研究者たちはネットワークの大きさが無限大になる理論極限でダイナミクスの時間非対称性（定常エントロピー生成）の厳密解を導き出しました。その際、この種の解析にしばしば用いられるレプリカ法ではなく、経路積分という手法を使用することで、直接的に厳密解を求めることができました。その結果、エントロピー生成は秩序-無秩序相転移点の近くでピークを示すものの、準決定論的で無秩序なダイナミクスを示す領域ではさらに顕著に上昇することが分かりました（下図参照）。



この重要な結果は、離散時間での同期的ダイナミクスと連続時間での非同期的ダイナミクスを包括する枠組みのもとで導出されました。さらに、システムの要素の平均・相関（秩序パラメータ）やダイナミクスの乱雑さを表す経路エントロピーについても、離散・連続を問わずに厳密解を導出しました。これにより、いずれかの枠組みに依拠してきた従来の理論を大幅に進展させました。これらの結果はシミュレーションによって妥当性が確認されています。

### 3. 波及効果、今後の予定

イジングモデルは、再帰型ニューラルネットワークの原型としても知られており、その挙動の解析は生物の神経系や機械学習全般の理解や発展につながります。得られた厳密解は、有限サイズのニューラルネットワークの学習において、近似的な手法（例えば平均場近似法など）を開発する際のベンチマークとして役立ちます。今回発見された複数の領域において頑健に挙動する学習手法の開発など、機械学習の発展にも寄与することが期待されます。

今回の研究によって、エントロピー生成の上昇には異なるシナリオが存在し、非平衡システムの状態を正確に捉えるためには複数の熱力学量が必要であることが明らかになりました。この事実は、エントロピー生成を指標として非平衡システムの状態を特徴づける際には、その解釈を慎重に行う必要があることを示しています。例えば、脳活動に対して熱力学的な解析を行った研究では、脳の覚醒レベルや認知的負荷とともに脳活動のエントロピー生成が上昇する（脳活動が時間的な方向性を示す）という報告があります。しかし、今回の研究結果は、覚醒状態や認知的負荷のかかった状態では、脳が臨界状態に接近しているという可能性と、決定論的ダイナミクスに接近しているという可能性の2つの可能性がありうることを示唆しています。この2つのシナリオを見分けるためには、状態のより詳細な定量化が必要となります。

これら2つの状態は計算論的な位置づけが異なり、どちらの状態も脳活動として報告されているため、脳は部位や状況に応じて、異なる状態を使い分けている可能性もあります。例えば、海馬では繰り返し現れる神経活動パターン（セル・アセンブリ）による情報表現が報告されています。一方で、網膜や大脳皮質の様々な部位で神経細胞の活動が相転移近傍の臨界状態にあることを支持する実験結果も多数報告されています。今回使用した非平衡イジングモデルは、パラメータを変更することでこれらの異なるダイナミクスを再

現でき、それぞれ準決定論的なダイナミクスと臨界状態におけるダイナミクスに対応します。本研究により、両者ともエントロピー生成が高い状態にあり、時間非対称なパターンが生成されていることが明らかになりましたが、前者は繰り返し同じパターンが生成されるのに対し、後者は多様なパターンが確率的に生成されるため、計算論的な意義が異なります。

脳のみならず物質科学や生態・経済・社会における大規模な非平衡システムの熱力学的な特徴づけが行われるなかで、複数の熱力学的量を組み合わせて状態を把握し、計算論的な意義を議論していくことが重要になってくると考えられます。これにより大規模非平衡システムの理解がより深まり、新たな知見が得られることが期待されます。

#### 4. 研究プロジェクトについて

日本学術振興会 科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A) センサデータ駆動による適応回路の理論構築 21H05246

日本学術振興会 科学研究費助成事業 基盤研究(C) 大規模・非線形な神経細胞集団活動を可視化する統計解析技術の開発 20K11709

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 人と共に進化する次世代人工知能に関する技術開発事業

自然科学研究機構 分野融合型共同研究事業 共同研究型 脳の自由エネルギー原理：実装と検証

#### <用語解説>

##### 1 エントロピー

「乱雑さ」または「不確実性」の度合いを定量化する量。物理学におけるエントロピーはシステムの無秩序さや乱雑さを表す量として用いられ、情報理論では情報の予測困難性や不確実性を数値化したものとして導入される。いずれもシステムが取り得る状態の多様性を表現している。

##### 2 熱力学第二法則

自然現象はエントロピー（乱雑さや不確実性の尺度）を増加させる方向に進行するとする法則。孤立したシステムのエントロピーは常に一定もしくは増加する。

##### 3 エントロピー生成

時系列の時間非対称性（不可逆性）の度合いを特徴づける量。注目するシステムのエントロピー変化と外界のエントロピー変化の和で表すことができ、エントロピー生成は必ず非負の量になる。エントロピー生成が0のときにシステムは平衡状態にある。

##### 4 イジングモデル

もともとは磁石などの磁性体の性質を調べるための統計力学のモデル（模型）として提案された。上向きと下向きの2つの状態をとるスピンからなる。スピン同士の相互作用および外場の影響によって各スピンの状態が決定される。イジングモデルは本来、格子状に配置されたスピンにおいて、最隣接する格子点のみの相互作用を考慮したモデルだが、ここでは全結合のモデルも含んでイジングモデルと呼んでいる。

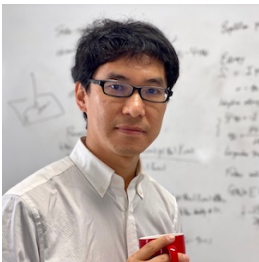
## 5 対称な結合構造

イジングモデルは活性・不活性の二値状態を取るニューロンからなるニューラルネットワークでもある。このネットワークのニューロンは相互に結合して影響を与え合っており、その影響の強さを結合強度と呼ぶ。対称な結合を持つとは、2つのニューロンA・Bに対して、ニューロンAからニューロンBへの結合強度と、ニューロンBからニューロンAへの結合強度が等しく、これがどの2つのニューロンの組にも成り立つような結合構造を指す。

### <研究者のコメント>



**Aguilera** 2018年に京都大学の島崎博士の研究室を訪れたことで、神経科学・物理学・数学モデリングといった異分野からのアイデアを含む刺激的な学際的コラボレーションが生まれました。この分野の組み合わせは、大規模な神経ネットワークの組織化を理解するための新しい方法を生み出す上で重要な要素でした。



**島崎** 本研究は、ニューラルネットワークの古典的なモデルを理論的に解析した研究で、同雑誌に掲載された第2弾目の研究です。使用したモデルは、物理・統計・神経科学を含む様々な分野で現れる複雑ネットワークの標準的な数理モデルにもかかわらず、その挙動はまだまだ驚きに満ちています。非平衡系を特徴づける「エントロピー生成」も明らかでなく、今回、厳密解の導出にチャレンジして成功しました。厳密解は理論家にとってひとつの到達点で、Aguilera博士との出会いにより、この奥深い世界を探究できたことはこの上ない喜びです。

### <論文タイトルと著者>

タイトル：Nonequilibrium thermodynamics of the asymmetric Sherrington-Kirkpatrick model  
(非対称シェリントン-カークパトリックモデルの非平衡熱力学)

著者：Miguel Aguilera, Masanao Igarashi, Hideaki Shimazaki

掲載誌： *Nature Communications* DOI： <https://doi.org/10.1038/s41467-023-39107-y>