

Spin Glass と平均場モデル

中島 秀太 (Kyoto University)

Young Summer Seminar 2018

Joint work with Erwin Bolthausen

話の流れ

- ① コイントスの数理
～ 大偏差原理を体感する ～
- ② 磁性体の数理: Curie-Weiss モデル
～ 統計力学の研究及び相転移を理解する ～
- ③ Spin Glass と平均場モデル
～ Spin Glass を体感する ～
- ④ 今後の研究

コイントスの数理

～ 大偏差原理を体感する ～

コイントス

モデル

- コインを N 回投げる。
- $S_N = ((\text{表が出た回数}) - (\text{裏が出た回数})) \div N$.

Q S_N はどのように振る舞うか？

実験の結果

一回目	二回目	三回目	四回目	五回目	S_5
+	-	-	-	-	-0.6
-	+	-	+	-	-0.2
+	-	+	-	+	0.2

モデルの定式化

コインが表の時 $+1$ 、裏の時 -1 を割り当てる.

- $\Sigma_N := \{-1, 1\}^N$.
- σ_i を i 番目のコイン投げの結果とする.
- \mathbb{P}_N^{CT} を Σ_N 上の一様確率測度とする: $\mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) \equiv 2^{-N}$.
- $S_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i$.

Theorem 1 (大数の法則)

任意の $\epsilon > 0$ について、 $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(|S_N| < \epsilon) = 1$.

つまり S_N は平均 (この場合は 0) に近づいていく.

コイントスと大偏差原理

大偏差原理とは

平均から外れた場所の測度の減衰の速さを記述する。

Proposition 2 (Cramér)

任意の $m \in [-1, 1]$ について、

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} \log \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(|S_N - m| < \epsilon) = I(m),$$

ここで $I(m) := \frac{1}{2} ((1+m) \log(1+m) + (1-m) \log(1-m))$.

言い換えると、

$$\mathbb{P}_N^{\text{CT}}(S_N \approx m) \approx \exp(-N I(m)).$$

Curie-Weiss モデル

～ 統計力学の研究及び相転移を理解する ～

Curie-Weiss モデル

- $\Sigma_N := \{-1, 1\}^N$. (σ_i は i 番目のスピンの向きを表す.)
- ハミルトニアン H_N を次で定義:

$$H_N(\sigma) := N^{-1} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j = N \left(N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \quad \text{for } \sigma \in \Sigma_N$$

Curie-Weiss モデル

- $\Sigma_N := \{-1, 1\}^N$. (σ_i は i 番目のスピンの向きを表す.)
- ハミルトニアン H_N を次で定義:

$$H_N(\sigma) = N^{-1} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j = N S_N^2 \quad \text{for } \sigma \in \Sigma_N$$

Curie-Weiss モデル

- $\Sigma_N := \{-1, 1\}^N$. (σ_i は i 番目のスピンの向きを表す.)
- ハミルトニアン H_N を次で定義:

$$H_N(\sigma) = N^{-1} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j = N S_N^2 \quad \text{for } \sigma \in \Sigma_N$$

Definition 1 (Curie-Weiss 模型)

与えられた $\beta \geq 0$ (逆温度) に対し、確率測度 μ_N^β を次で定義:

$$\mu_N^\beta(\sigma) = \frac{1}{Z_N^\beta} e^{\beta H_N(\sigma)} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma),$$

ここで $Z_N^\beta := \sum_{\sigma \in \Sigma_N} e^{\beta H_N(\sigma)} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma)$ (分配関数).

- $\beta = 0$ の時は、コイントスの確率測度と一致.

Curie-Weiss 模型での相転移現象

$S_N = S_N(\sigma) = N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i$ を思い出す.

Proposition 3 (磁化の相転移)

ある $\beta_c > 0$ が存在し、次が成り立つ:

- $\beta \leq \beta_c$ ならば、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N^\beta(S_N \approx 0) = 1.$$

- $\beta > \beta_c$ ならば、ある $m^*(\beta) > 0$ が存在し、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N^\beta(S_N \approx \pm m^*(\beta)) = 1/2.$$

- この場合、 S_N は平均磁化と呼ばれる.
- $\beta > \beta_c$ において、磁化が自然と発生している (永久磁石).

証明: Step1 (分配関数 Z_N^β の計算)

$H_N(\sigma) = NS_N^2$ に注意.

Z_N^β の計算

$$\begin{aligned} Z_N^\beta &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} e^{\beta H_N(\sigma)} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) = \mathbb{E}_N^{\text{CT}} \left[e^{\beta NS_N^2} \right] \\ &= \int_{-1}^1 e^{\beta Nx^2} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(S_N \in dx) \\ &\approx \int_{-1}^1 e^{\beta Nx^2 - N I(x)} dx \quad (\text{コイントスの大偏差原理}) \\ &\approx e^{N \max_{x \in [-1,1]} (\beta x^2 - I(x))}. \quad (\text{Laplace 原理}) \end{aligned}$$

上の計算の中で $\mathbb{P}_N^{\text{CT}}(S_N \in dx) \approx e^{-N I(x)} dx$ を用いた.

証明: Step2 (Curie-Weiss モデルの大偏差原理)

$I^\beta(x) = I(x) - \beta x^2$ と置く. この時、

$$Z_N^\beta \approx e^{N \max_{x \in [-1,1]} (\beta x^2 - I(x))} = e^{-N \min_{x \in [-1,1]} I^\beta(x)}.$$

同様に、

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma: S_N(\sigma) \approx m} e^{N\beta S_N(\sigma)^2} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) &\approx e^{N\beta m^2} \sum_{\sigma: S_N(\sigma) \approx m} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) \\ &= e^{N\beta m^2} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(S_N \approx m) \\ &\approx e^{-N I^\beta(m)}. \end{aligned}$$

証明: Step2 (Curie-Weiss モデルの大偏差原理)

$I^\beta(x) = I(x) - \beta x^2$ と置く. この時、

$$Z_N^\beta \approx e^{N \max_{x \in [-1,1]} (\beta x^2 - I(x))} = e^{-N \min_{x \in [-1,1]} I^\beta(x)}.$$

同様に、

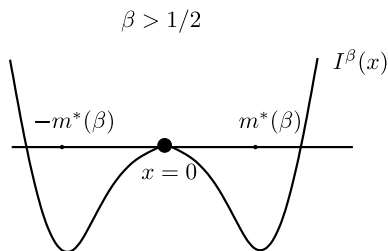
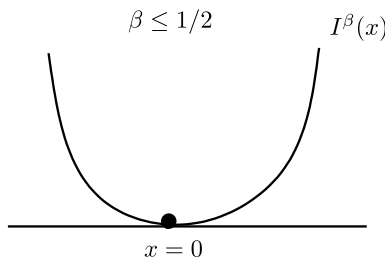
$$\begin{aligned} \sum_{\sigma: S_N(\sigma) \approx m} e^{N\beta S_N(\sigma)^2} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) &\approx e^{N\beta m^2} \sum_{\sigma: S_N(\sigma) \approx m} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) \\ &= e^{N\beta m^2} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(S_N \approx m) \\ &\approx e^{-N I^\beta(m)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_N^\beta(S_N \approx m) &= \frac{1}{Z_N^\beta} \sum_{\sigma: S_N(\sigma) \approx m} e^{N\beta S_N(\sigma)^2} \mathbb{P}_N^{\text{CT}}(\sigma) \\ &\approx e^{-N (I^\beta(m) - \min_{x \in [-1,1]} I^\beta(x))}. \end{aligned}$$

証明: Step3 (結論)

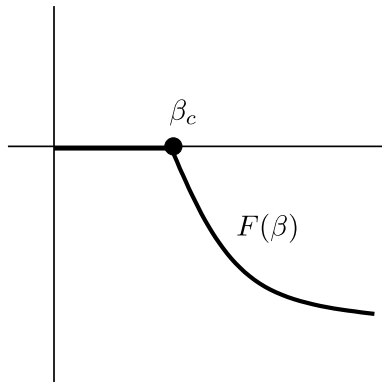
- 前スライドより $\mu_N^\beta(S_N \approx m) \approx e^{-N(I^\beta(m) - \min_{x \in [-1,1]} I^\beta(x))}$.
- m が I^β の最小値でない $\Rightarrow \mu_N^\beta(S_N \approx m)$ は指数的に減衰.
- S_N は I^β の最小値に集中している.

$I^\beta(x)$ のグラフ



$F(\beta) := \min_{m \in [-1,1]} I^\beta(m)$ のグラフ

$F(\beta) := \min_{m \in [-1,1]} I^\beta(m)$ とする.



$F(\beta)$ のグラフ

- Curie-Weiss 模型は平均磁化について相転移が起こる.
- $Z_N^\beta \approx \exp(-N \min_{m \in [-1,1]} I^\beta(m))$ と表すことができた.

つまり

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \log Z_N^\beta = - \min_{m \in [-1,1]} I^\beta(m).$$

- 相転移の有無は $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \log Z_N^\beta$ を使って調べる事ができる.
- $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \log Z_N^\beta$ を自由エネルギーと呼ぶ.

スピングラス理論と平均場モデル

～ Spin Glass を体感する ～

Spin glass とは？

Spin Glass とは、磁性体に金属の不純物を混ぜた物質の総称.

なぜ研究するか？

- ガラス状態の解明
- 計算機科学や最適化問題との関係
- 新しい数学的構造の発見

豊かな数学的構造

Parisi 公式, 超計量性, 多谷構造, etc...

平均場スピングラスモデル

- $\{g_{ij}\}_{i,j \in \mathbb{N}}$: 独立で平均 0, 分散 $1/N$ のガウス分布.
- $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 可測関数
- $N \in \mathbb{N}, \alpha > 0. M := \lceil \alpha N \rceil$.
- $H_N(\sigma) := \sum_{j=1}^M u(\sum_{i=1}^N g_{ij} \sigma_i)$.

Definition 2 (平均場スピングラスモデル)

Σ_N 上の確率測度 μ_N を次で定義:

$$\mu_N(\sigma) = \frac{1}{Z_N} e^{H_N(\sigma)},$$

ここで $Z_N := \sum_{\sigma \in \Sigma_N} e^{H_N(\sigma)}$.

- g_{ij} がランダムであるので、 μ_N はランダムな確率測度となる.

具体例

u が具体的に与えられた時、モデルは次のように呼ばれる。

- $u(x) = -\infty \mathbb{I}_{\{x < 0\}}$ の時、Perceptron モデル:

$$\log Z_N = \# \left\{ \sigma_N \in \Sigma_N \mid \forall j \leq M, \sum_{i=1}^N g_{ij} \sigma_i \geq 0 \right\}.$$

- $u(x) = \beta x^2$ の時、Hopfield モデル.

- $u(x) = \log(2 \cosh x)$ の時、Bipartite SK モデル:

$$\log Z_N = \sum_{\tau \in \Sigma_M} \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{g_{ij}}{\sqrt{N}} \sigma_i \tau_j \right).$$

今後の研究

研究の課題

任意の u と $\alpha > 0$ について、

$$(1) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N$$

の存在を示し、具体的な表示を求める.

Theorem 4 (Talagrand)

任意の十分滑らかな関数 u について、 $\alpha > 0$ が十分小さければ、(1) が存在し、“**レプリカ対称解**”を持つ.

レプリカ対称解とは何か？

レプリカ対称解

$q \in [0, 1]$ と $r \geq 0$ を固定する. 次の (汎) 関数を $RS(q, r)$ と置く:

$$-\frac{r(1-q)}{2} + \log 2 \operatorname{ch}(\sqrt{r}Z) + \alpha \mathbb{E} \log \left\{ \mathbb{E}_Z \exp(u(\sqrt{q}Z + \sqrt{1-q}Z')) \right\},$$

ここで Z, Z' は独立な標準ガウス分布、 \mathbb{E}_Z は Z の条件付き平均.

Theorem 5 (Talagrand)

任意の十分滑らかな関数 u と十分小さい $\alpha > 0$ について、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N = \min_{r \geq 0, q \in [0, 1]} RS(q, r).$$

- 右辺はレプリカ対称解 (または Gardner 公式) と呼ばれる.
- 下限を与える q, r をとる.

今後の課題

レプリカ対称解が成り立つ (u, α) の領域は、高温層と呼ばれる。

- Talagrand の結果は、特別な場合を除き u の滑らかさを仮定している。滑らかさを必要としない手法を開発する。
- 低温層の存在と、その境目を調べる事が重要であり次のことが予想されている：高温層と次の条件が同値：

$$\alpha \mathbb{E} \left[\cosh(\sqrt{r}Z)^{-4} \right] \mathbb{E} \left[\psi'_q(\sqrt{q}Z)^2 \right] \leq 1,$$

$$\text{ここで } \psi_q(x) = \frac{1}{\sqrt{1-q}} \frac{\mathbb{E} Z \exp[u(x + \sqrt{1-q}Z)]}{\mathbb{E} \exp[u(x + \sqrt{1-q}Z)]}.$$

- 全領域での自由エネルギーの存在を確認する。