



計算・磁石・脳 --- Spin Glass ---

東大物性研究所 川島 直輝

現代物理学入門 2005年4月25日 本郷

強磁性体 「普通の磁石」

- 磁石は小さな磁石(=スピン)の集まり.
- 個々の磁石のN極は上向きか下向き. (簡単化)
個々のスピンの番号をつけて, 第 i 番目の磁石のN極が上向きであることを $S_i = 1$ で下向きであることを $S_i = -1$ で表そう.
- 強磁性体ではエネルギーが以下のように与えられる.

$$E = - \sum_{(ij)} J S_i S_j \quad (J > 0)$$

(Σ は全ての最隣接格子点ペアについての和)



強磁性体の熱力学

平衡状態では

$$F = E - TS$$

が最小になる。つまり、物質の平衡状態はエネルギーを小さくしようとする傾向と、エントロピーを大きくしようとする傾向のバランスした状態。低温になるほど、後者の影響は弱まる。

低温になるほど全てのスピンの同じ向きに向いた状態が出現しやすくなる。(秩序化した状態)



強磁性体のシミュレーション

状態 Σ の出現確率は

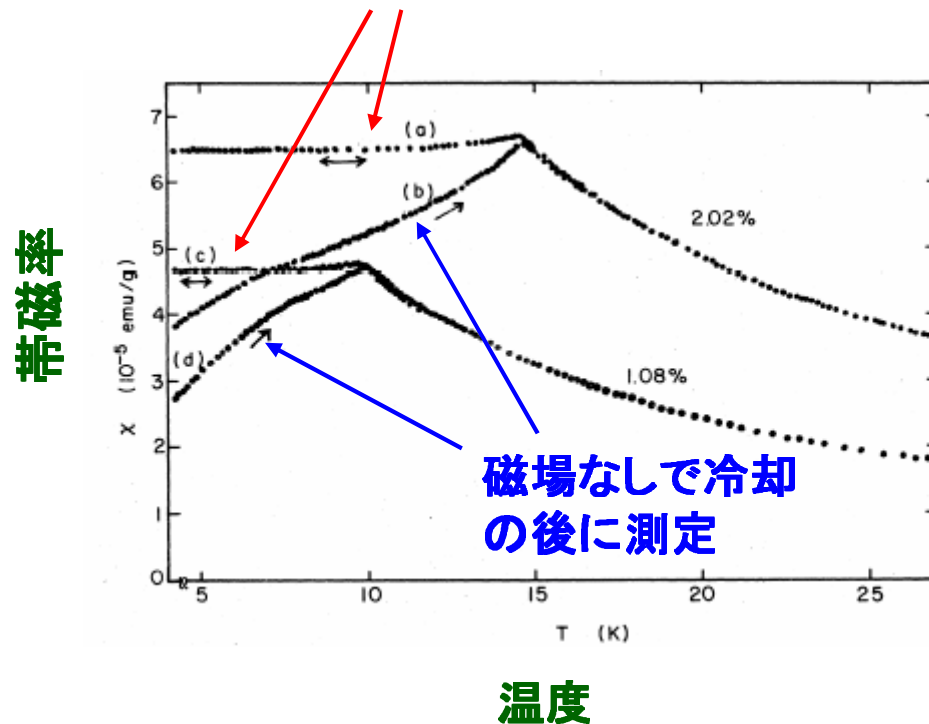
$$P(\Sigma) \propto e^{-E(\Sigma)/k_B T}$$

実際にこの確率で状態を次々に発生させるのが、
磁性体のモンテカルロシミュレーション

実際にやってみる.

スピングラス物質 「変わった磁石」

磁場の下で冷却ののち測定



磁性合金 CuMn

Nagata Keesom Harrison 1979

履歴現象

同じ量を同じ条件で測っているのに、ある温度以下ではそれ以前に系が置かれた状況で結果が異なる。

スピングラスモデル

相互作用 J_{ij} がランダムな値をもつイジングモデル

$$E = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j$$

J_{ij} は (i, j) ごとに統計的に独立なある確率変数.

たとえば

$$J_{ij} = \begin{cases} +1 & (\text{強磁性的}) & (\text{確率 } 1/2) \\ -1 & (\text{反強磁性的}) & (\text{確率 } 1/2) \end{cases}$$



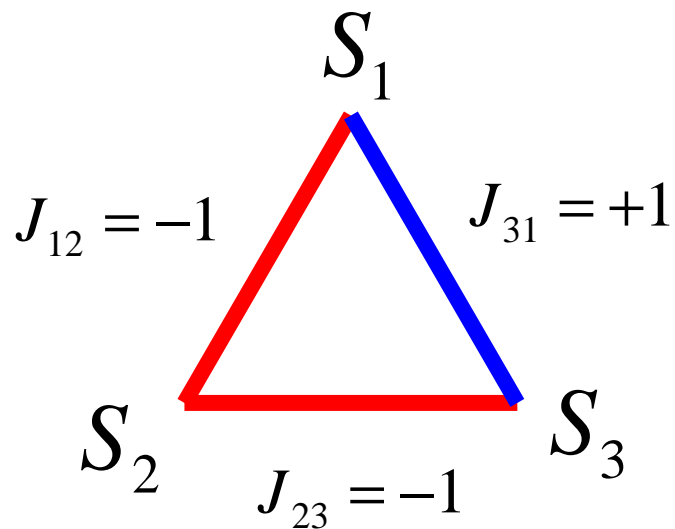
スピングラス問題

Jij が与えられたとき,
温度が非常に低いときにスピングラスモデル
はどのような振る舞いをするか？

エネルギーがもっとも小さくなる状態を求める問題.

... 最適化問題

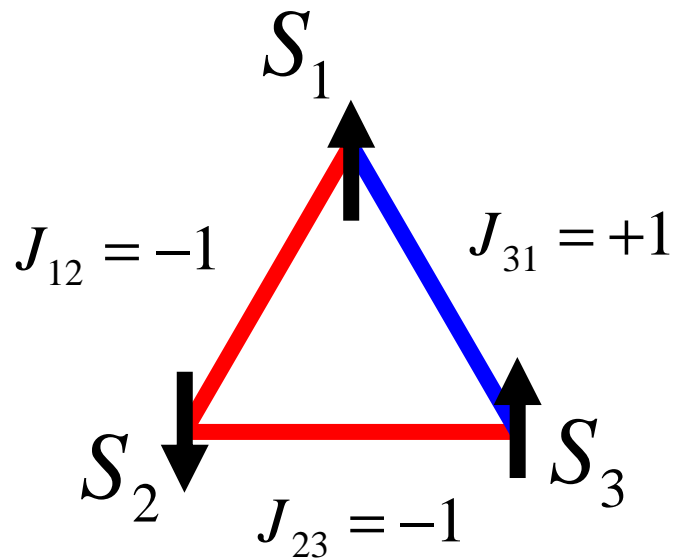
スピングラス問題の例



問題:

J_{ij} が左のように与えられたとき、エネルギーを最小にするような S_1, S_2, S_3 の組み合わせを求めよ。

スピングラス問題の例



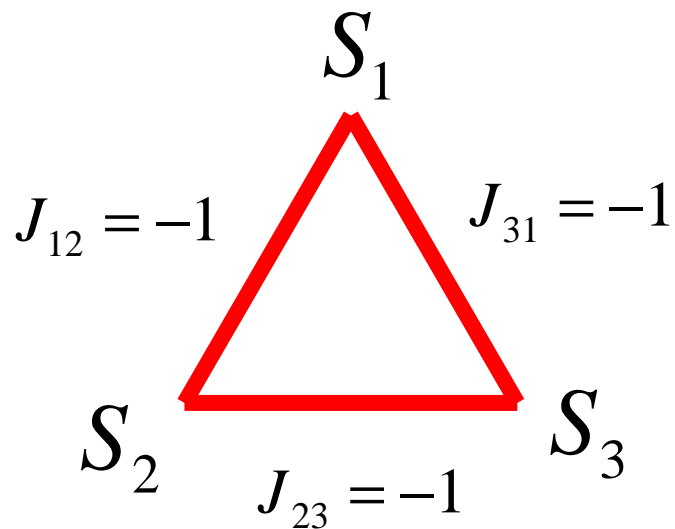
答え:

$$S_1 = -S_2 = S_3 = +1$$

または

$$S_1 = -S_2 = S_3 = -1$$

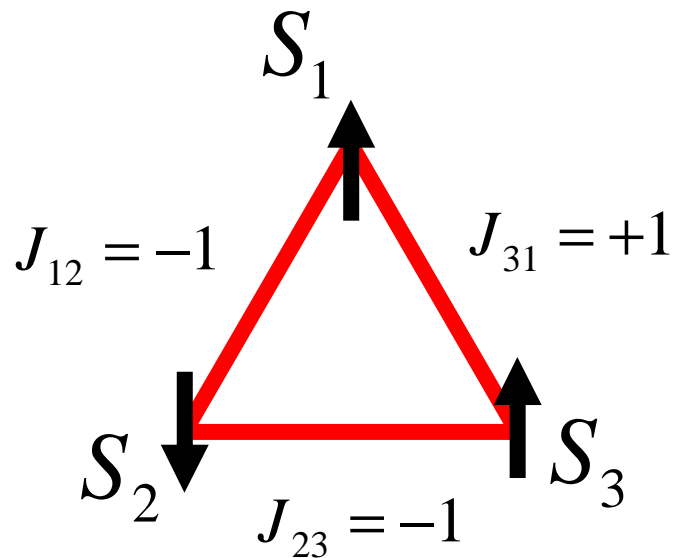
スピングラス問題の例



問題:

J_{ij} が左のように与えられたとき、エネルギーを最小にするような S_1, S_2, S_3 の組み合わせを求めよ。

スピングラス問題の例



答え:

$$-S_1 = S_2 = S_3 = +1$$

または

$$-S_1 = S_2 = S_3 = -1$$

または

$$S_1 = -S_2 = S_3 = +1$$

または

$$S_1 = -S_2 = S_3 = -1$$

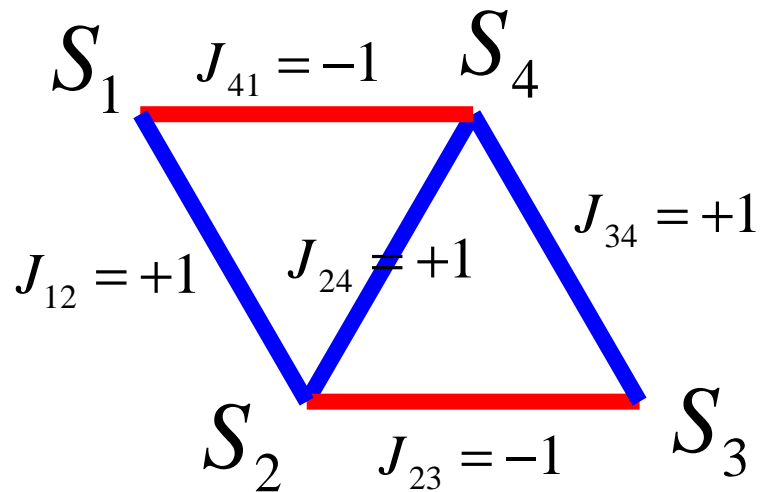
または

$$S_1 = S_2 = -S_3 = +1$$

または

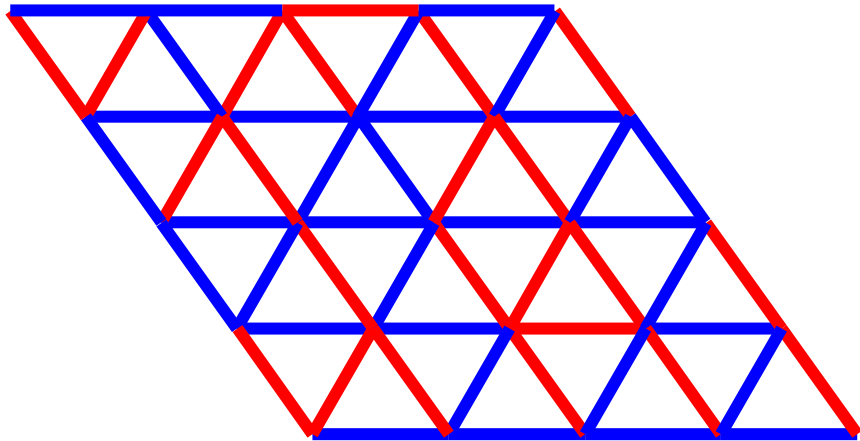
$$S_1 = S_2 = -S_3 = -1$$

スピングラス問題の例



これだと？

スピングラス問題の例



これだと？

コンピュータを使えば
できるか？



スピニングラス問題の困難

スピニングラス問題には一般にはうまい解き方は存在しない.

普通の計算機を使って解くために必要な計算時間は, どんな方法を使ったとしても, L のべき乗では抑えられないことが「ほぼ証明」されている.

... ただし, 2次元だとうまい方法が存在する.

系の1辺の長さを L として, L の6乗に比例する計算時間をかけると解ける.



計算上の本質的困難 「NP困難性」

スピングラス問題はNP困難であることが証明されている。

NP困難な問題について以下のことが証明されている。

「NP困難な問題のどれか1つについて、問題のサイズある多項式で抑えられる計算時間(多項式時間)で解けるアルゴリズムが存在するなら、以下のようなおよそありえないことが可能だということになる。

『解の候補が提案されたとき、多項式時間内にそれが本当に解であるかどうか確かめられるような任意の充足可能問題に対して、多項式時間内に答え(yes か no か)を見つける方法も存在する。』



もしスピニングラス問題が解けるなら...

- 巡回セールスマン問題も解ける.
- 「与えられた論理式を真にできるか(SAT問題)」も解ける.
- 最大派閥問題も解ける.
- 「配線を最短にする回路設計の問題(グラフ2分割)」も解ける.
- ・
- ・
- ・

Garey and Johnson "Computers and Intractability"
にはこのような問題が300以上紹介されている. しかし,
これらの問題は多くの「賢い」人たちの試みにもかかわらず
今のところ1つも解かれていない. (多分**本質的に**解けない.)



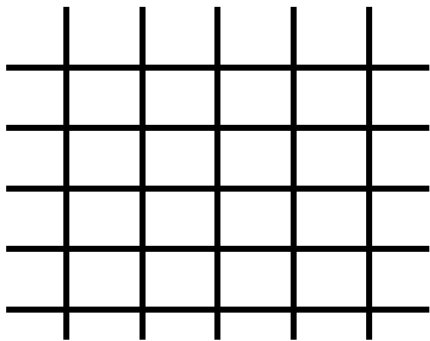
では我々に何ができるか？

- (1) **問題を変える, または近似を考える.**
- (2) **計算不可能領域にぎりぎりまで近づく.**
- (3) **計算不可能領域をはっきり知る.**

問題を変える, または近似

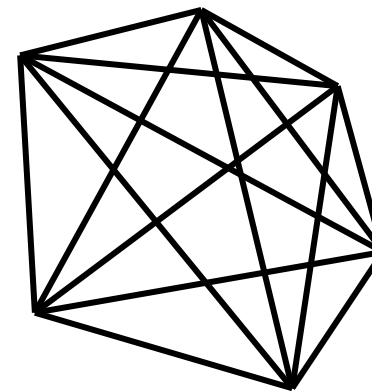
もとの問題

$$E = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j$$



SKモデル(平均場モデル)

$$E = - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{i,j \\ (i < j)}} J_{ij} S_i S_j$$



Quenched (急冷) Randomness

計算すべき量:

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \left[\frac{\text{Tr}_S \left(e^{-\beta E_J(S)} Q(S) \right)}{\text{Tr}_S \left(e^{-\beta E_J(S)} \right)} \right] \\ &= \lim_{\Lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \Lambda} \left[k_B T \log \text{Tr}_S \left(e^{-\beta(E_J(S) - \Lambda Q(S))} \right) \right] \\ &= - \lim_{\Lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \Lambda} F(\Lambda) \quad ([\] \text{ は } J_{ij} \text{ に関する平均}) \end{aligned}$$

$$F(\Lambda) \equiv \left[-k_B T \log Z_J(\Lambda) \right]$$

レプリカ法 (1)

一般に quenched random 平均

$$[\log Z_J]$$

は計算しにくい. これに対して, annealed random 平均

$$\log[Z_J]$$

なら簡単に計算できる.

$$\begin{aligned} [Z_J] &= \int \left(\prod_{(ij)} dJ_{ij} P(J_{ij}) \right) \sum_s \exp \left(\frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j \right) \\ &= \sum_s \prod_{(ij)} \left\{ \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta}{\sqrt{N}} J_{ij} S_i S_j \right) \right\} \\ &= \sum_s \prod_{(ij)} e^{\beta^2/2N} \quad (\text{ガウス分布の場合}) \\ &= 2^N e^{d\beta^2/2} \end{aligned}$$

レプリカ法 (2)

そこで恒等式

$$[\log Z_J] = \left[\lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z_J^n - 1}{n} \right] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z_J^n] - 1}{n}$$

を用いて、一種の annealed 平均の形に変形する.

$$\begin{aligned} [Z_J^n] &= \int \left(\prod_{(ij)} dJ_{ij} P(J_{ij}) \right) \sum_S \exp \left(\sum_{(ij)} \frac{\beta J_{ij}}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right) \\ &= \sum_S \prod_{(ij)} \left\{ \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta J_{ij}}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right) \right\} \quad (K^2 \equiv \beta^2 [J_{ij}^2]) \\ &= \sum_S \prod_{(ij)} \exp \left(\frac{K^2}{2N} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right)^2 \right) = \sum_S \exp \left(\frac{K^2}{4N} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta \right) \end{aligned}$$

これでランダムネスのないモデルに帰着できた.

鞍点法

$$\begin{aligned} [Z_J^n] &= \sum_S \exp\left(\frac{K^2}{4N} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta\right) \\ &= \sum_S \prod_{(\alpha,\beta)} \exp\left(\frac{NK^2}{2} \left(\frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2\right) \\ &= \sum_S \prod_{(\alpha,\beta)} \int dq_{\alpha\beta} \exp\left(-\frac{NK^2}{2} q_{\alpha\beta}^2 + K^2 q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right) \\ &= \int d\{q_{\alpha\beta}\} \exp\left(-\frac{NK^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta}^2\right) \prod_i \sum_{S_i} \exp\left(K^2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta\right) \\ &= \int d\{q_{\alpha\beta}\} \exp\left(-\frac{NK^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta}^2\right) \left(\sum_{S_1} \exp\left(K^2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S_1^\alpha S_1^\beta\right)\right)^N \\ &= \int d\{q_{\alpha\beta}\} \exp\left(-N \left(\frac{K^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + g(\{q_{\alpha\beta}\})\right)\right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \left(\frac{K^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + g(\{q_{\alpha\beta}\}) \right) = 0$$



$$q_{\alpha\beta} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right\rangle$$

2つのレプリカがどのくらい近いかの尺度.

レプリカ対称解(1)

結局次の自己無同着方程式を $n \rightarrow 0$ の極限で解けばよいことになった。

$$q_{\mu\nu} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i^\mu S_i^\nu \right\rangle = \frac{\sum_{\{S_1^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,n}} \exp\left(K^2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S_1^\alpha S_1^\beta\right) S_1^\mu S_1^\nu}{\sum_{\{S_1^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,n}} \exp\left(K^2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S_1^\alpha S_1^\beta\right)}$$

この方程式はレプリカインデックスの任意の入れ替えに関して対象だから、対称解をまず考える。

$$q_{\mu\nu} = \begin{cases} 1 & (\mu = \nu) \\ q & (\mu \neq \nu) \end{cases}$$

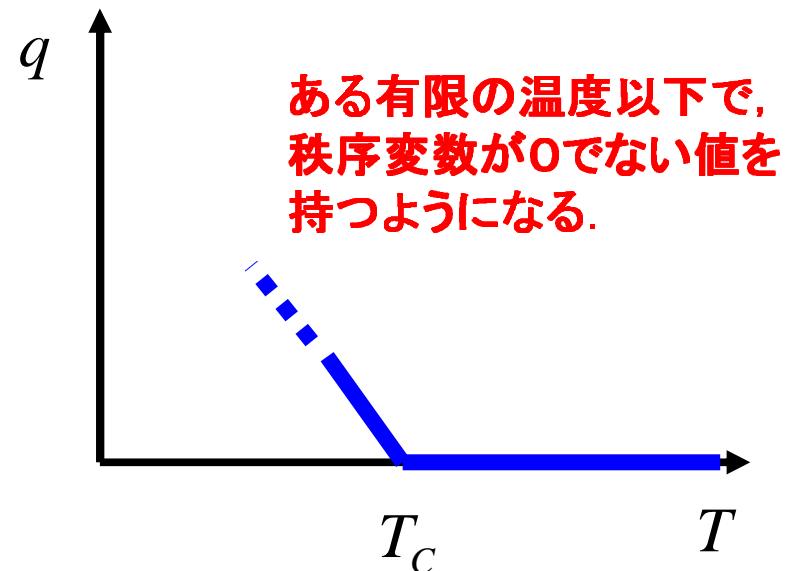
レプリカ対称解(2)

対称性を課すと方程式は比較的簡単に解けて、しかも、 $n \rightarrow 0$ の極限が簡単にとれる。

q_{12} は実際に2つの同じJをもつサンプル間の重なりとも解釈できるので、

$$q = q_{12} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i^1 S_i^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^1 \rangle \langle S_i^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle^2 \neq 0$$

は、 $\langle S_i \rangle \neq 0 \quad (T < T_c)$ を意味する。(ランダムな凍結。)



レプリカ非対称解 (パリシ解)

レプリカ対称解は転移温度以上では正しいが、
転移温度以下では、非対称解が存在し、そちらの方が
正しい(自由エネルギーが低い.)

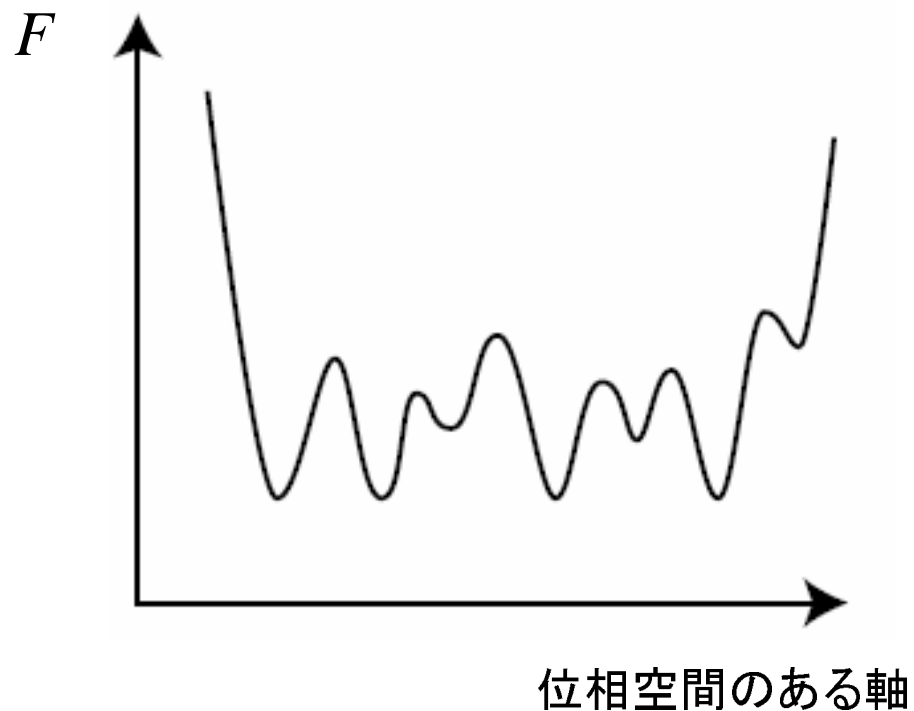
では $q_{12} \neq q_{13}$ であることは何を意味するのか？

$$\frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^1 \rangle \langle S_i^2 \rangle \neq \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^1 \rangle \langle S_i^3 \rangle$$

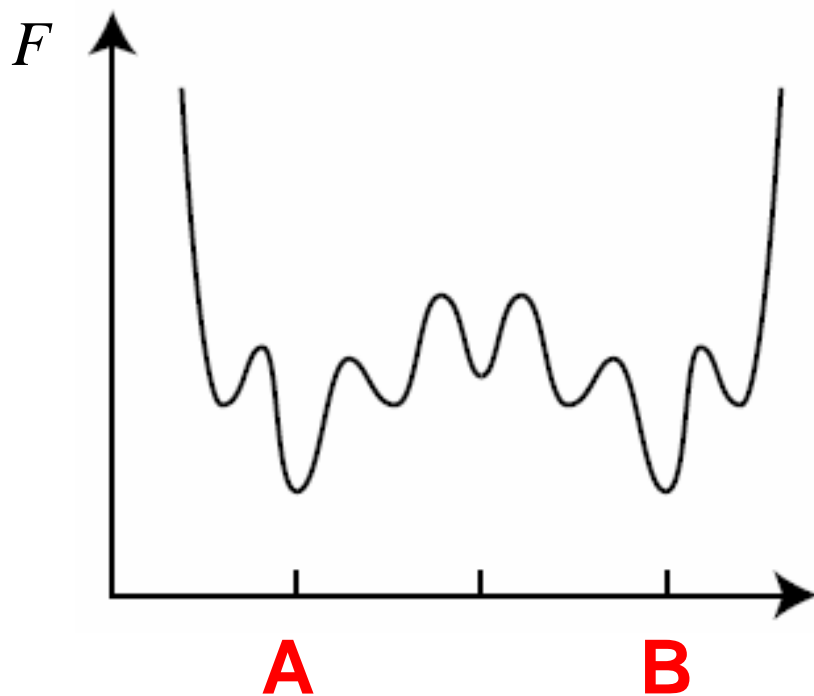
互いに異なる熱力学的安定状態が存在する。
(しかも、パリシの議論によると無数に存在する.)

無数の熱力学的安定状態

無数の安定状態が存在し、実際に実現される平衡分布はそれらの線形結合で表される。



もう1つのシナリオ



状態Aと状態Bは互いに時間反転によって移りあう。多くの準安定状態は存在するが、熱力学的に安定な状態はこの二つしかない。

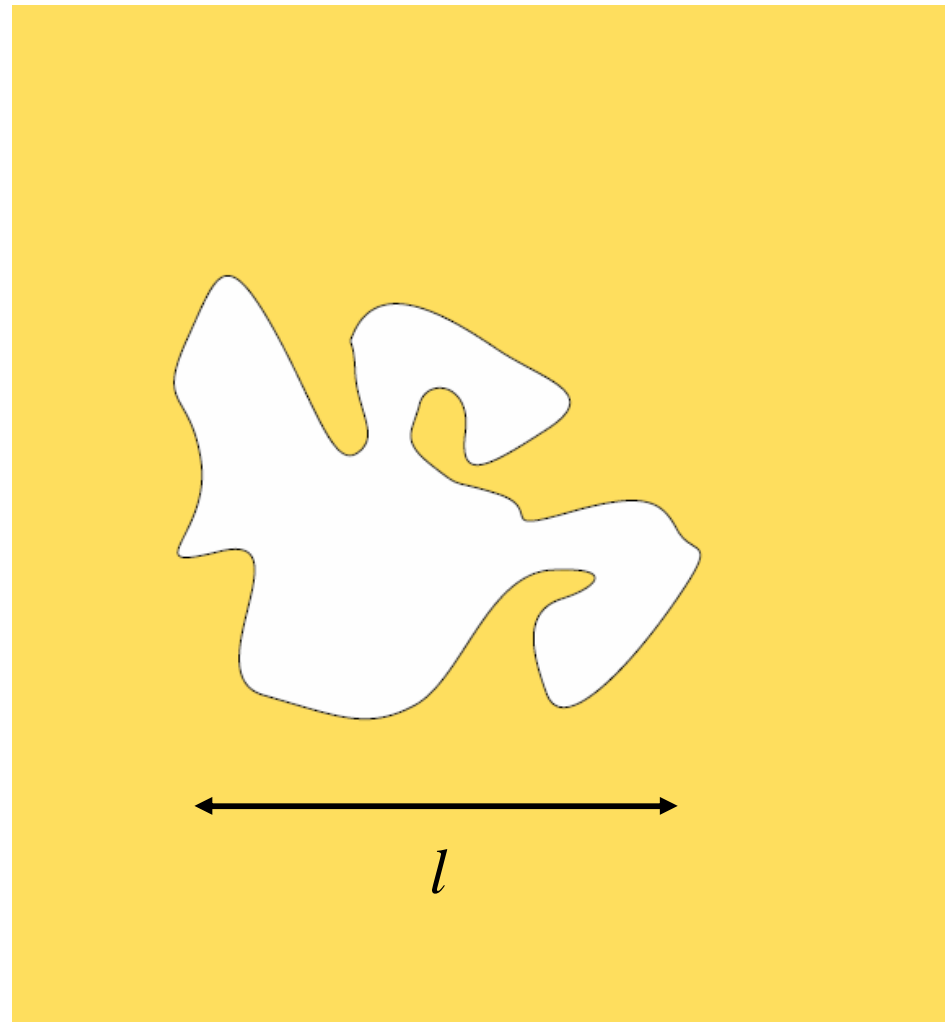
ドロップレット描像

ドロップレット描像:

「熱力学的な安定状態は1つ.
秩序相における熱揺らぎ効果は
全て安定状態からのドロップレット
の励起によって説明できる。」

ドロップレット励起エネルギー
(E_l)の分布関数

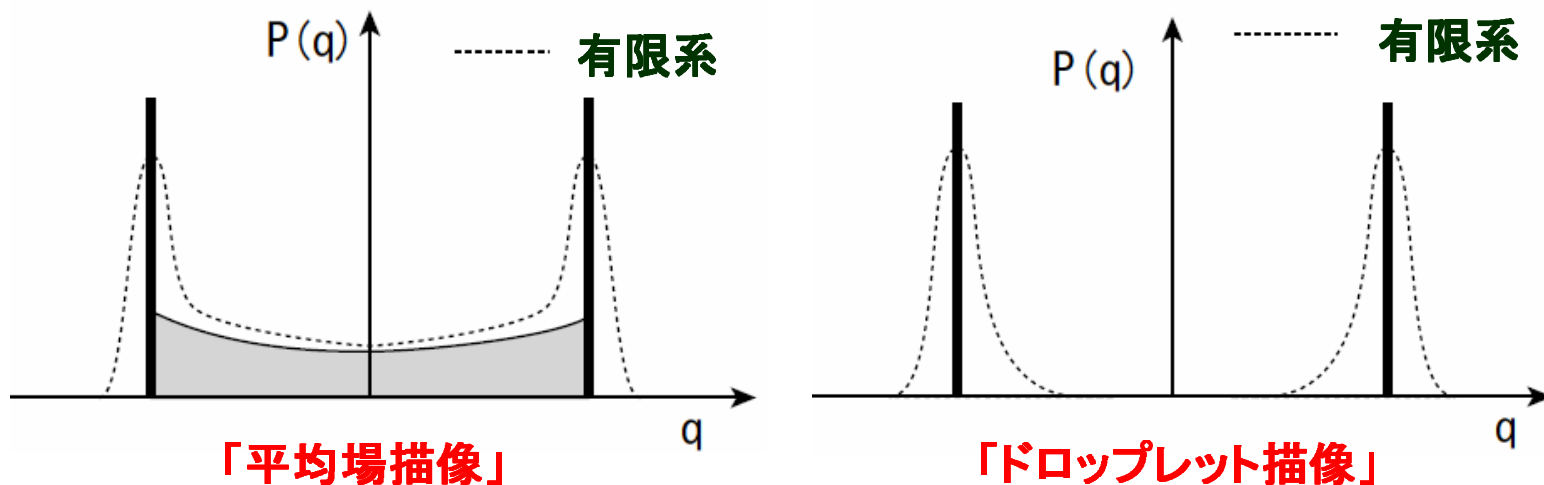
$$P(E_l) = \frac{1}{Yl^\theta} \tilde{P}\left(\frac{E_l}{Yl^\theta}\right)$$



$P(q)$ に関する異なる予言

$$q \equiv \frac{1}{N} \sum_i S_i^1 S_i^2$$

$$P(q) = \frac{\text{Tr}_{\{S_i^1, S_i^2\}} \exp(-\beta H(\{S^1\}) - \beta H(\{S^2\})) \delta\left(q - \frac{1}{N} \sum_i S_i^1 S_i^2\right)}{\text{Tr}_{\{S_i^1, S_i^2\}} \exp(-\beta H(\{S^1\}) - \beta H(\{S^2\}))}$$



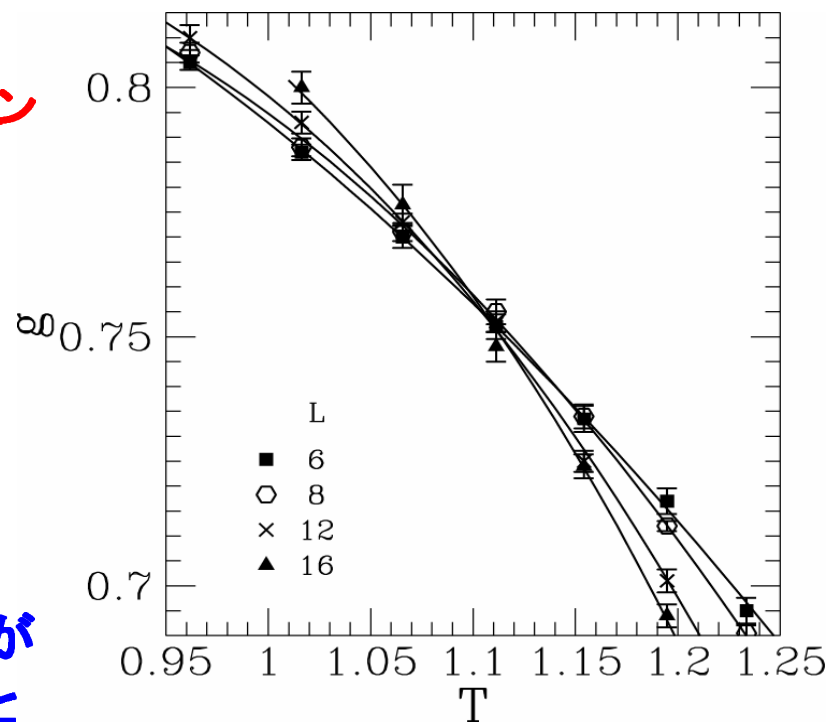
限界までやった例

有限温度のモンテカルロシミュレーション

秩序変数の分布がガウス分布になるかどうかを調べて、ある特定の温度で、何らかの秩序化がおきることがわかった。

しかし、秩序相(=スピングラス相)がどんな相なのか、という本質的なことがまだわかっていない。

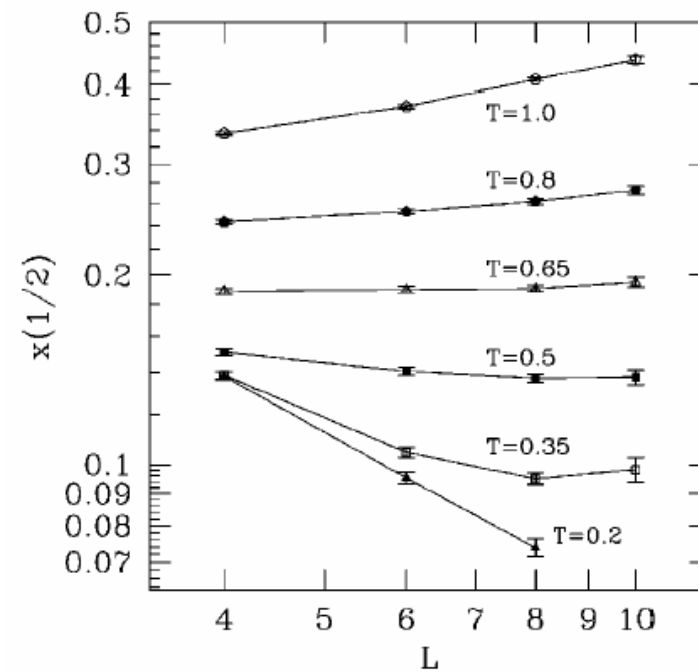
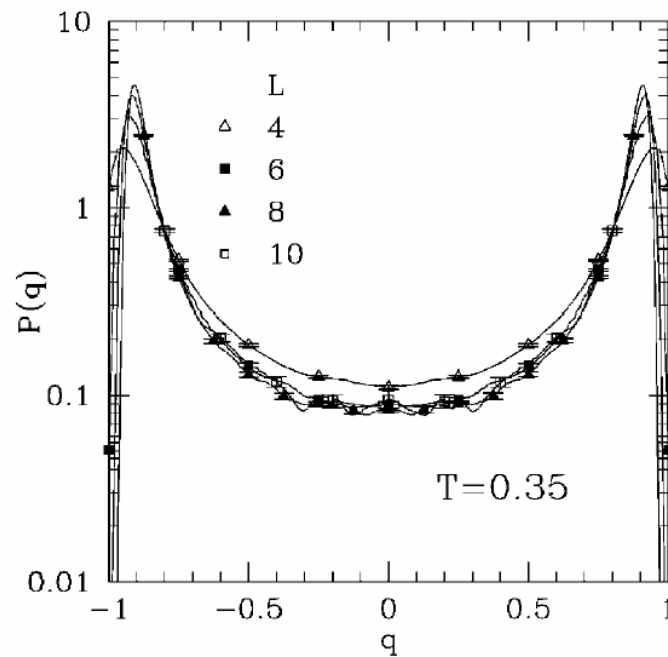
Kawashima and Young



g: 秩序変数の分布がどの程度ガウス関数からずれているかをあらわす無次元量

P(q)の数値計算

Palassini and Young



$$x(q) \equiv \int_{-q}^q dq' P(q')$$



閑話休題 「脳と計算機」

脳 : 10^{12} 個のニューロン, 10^{15} 個のシナプス, 動作時間 10^{-3}

スーパーコンピュータ : 10^3 個のCPU, 動作時間 10^{-9}

処理速度において, まだ6桁の差がある.

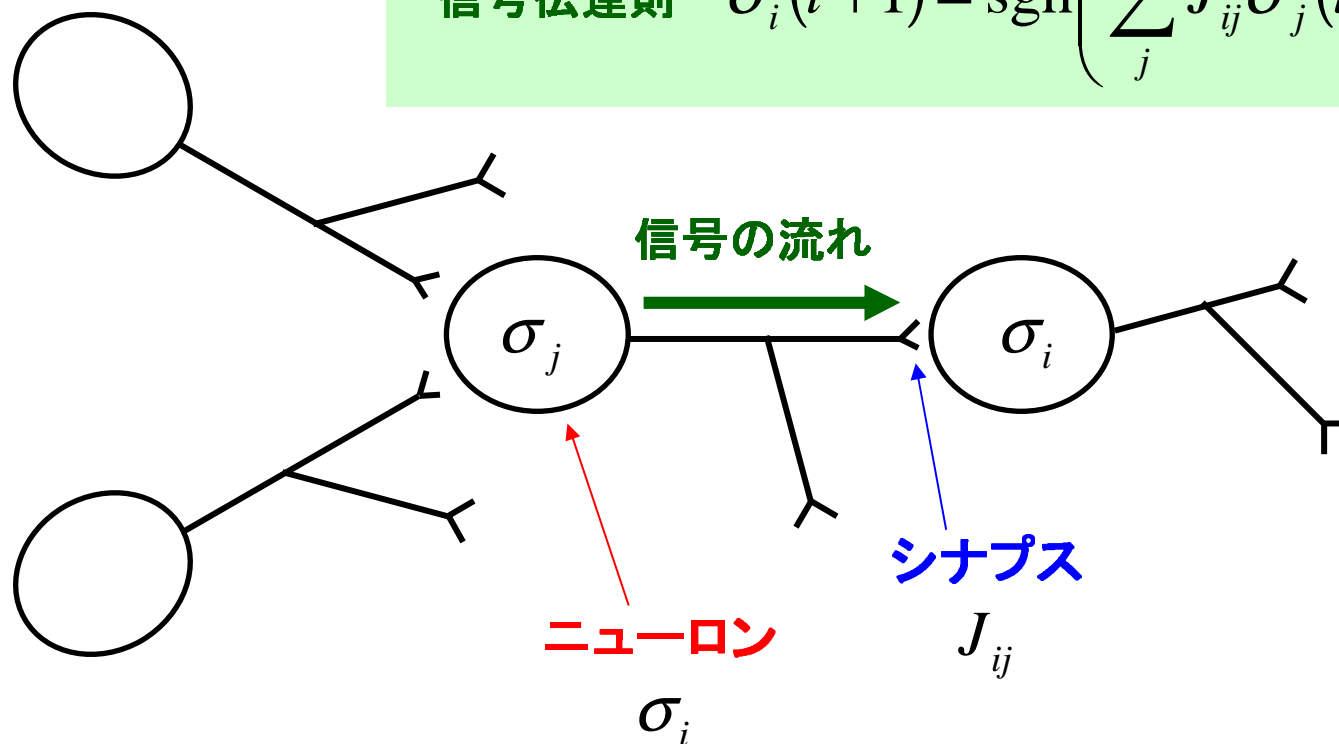
しかし, 計算機の処理速度の進歩スピードは10年で1桁.

(60年で追いつくかもしれない.)

また, 1つのシナプスより1つのCPUの方が複雑な処理が可能であることや, 脳は全ての部分が働いているわけではないことを考えると, もっと短期間に単純にハードウェア的な処理速度は追いつく可能性がある.

脳のモデル化 (Hopfield model)

信号伝達則
$$\sigma_i(t+1) = \text{sgn}\left(\sum_j J_{ij}\sigma_j(t)\right)$$



学習則
$$J_{ij} = N^{-1} \sum_{\mu} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}$$

Hopfield モデルとSKモデル

Hopfield モデルの信号伝達規則

$$\sigma_i(t+1) = \text{sgn} \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j(t) \right)$$

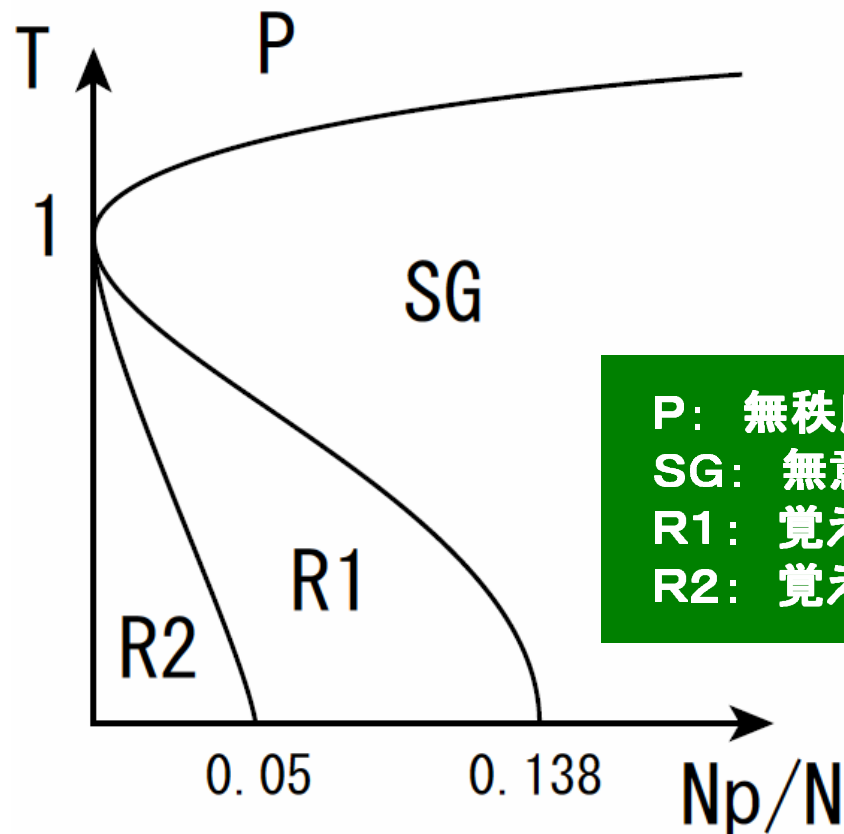
は, SKモデル

$$E = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{i,j \\ (i<j)}} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

の絶対零度におけるモンテカルロシミュレーションと同じ.

→ SKモデルと同じ道具が使える.

Hopfield モデルの「相図」



$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^{N_P} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}$$

$N_P =$ (覚えさせるパターン数)

- P: 無秩序相 (何も想起しない)
- SG: 無意味なパターンを想起する
- R1: 覚えさせたパターンを想起する (準安定).
- R2: 覚えさせたパターンを想起する (安定).

組み合わせ最適化問題の「物理的」性質

Monasson et al, Nature 400 p. 133 (1999)

K-SAT 問題:

ブール変数の集合 $\{b_1, b_2, \dots, b_N\}$ 上で定義される論理式に関して、以下の問題を考える。K個のリテラルの論理和をK節とよぶことにして、m個のK節の論理積として表せる論理式

$$F = c_1 \wedge c_2 \wedge \dots \wedge c_m \quad \left(c_i = z_i^1 \vee z_i^2 \vee \dots \vee z_i^K \right)$$

が与えられたとする。この論理式が真であるような、ブール変数への真理値の割り当て方は存在するか？

Cookの定理: SAT問題が解けるなら任意のNP問題が解ける。

(系)3-SAT問題が解けるなら任意のNP問題が解ける。

(なぜならSAT問題は3-SAT問題に還元できるから。)

2-SAT問題はP。(多項式時間で解ける。)

スピングラス問題への変換

$$b_i = \text{true, false} \quad \leftrightarrow \quad S_i = +1, -1$$

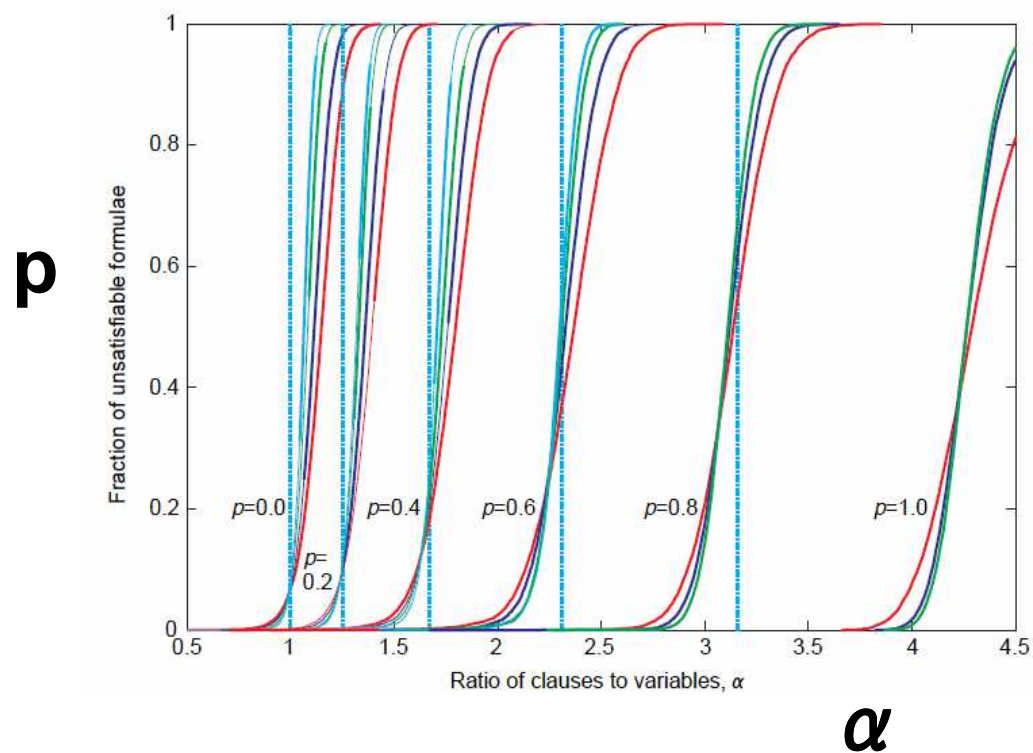
$$c_k = z_k^1 \vee z_k^2 \vee \cdots \vee z_k^K \quad \leftrightarrow \quad E_k = -1 + \prod_{\mu=1}^K \left(\frac{1 + S_{i_k^\mu}}{2} \right) = (S_i \text{ の } K \text{ 次多項式 })$$

$$F = c_1 \wedge c_2 \wedge \cdots \wedge c_m \quad \leftrightarrow \quad E = \sum_{k=1}^m E_k$$

$$\text{"satisfiable"} \quad \leftrightarrow \quad \min(E) = -m$$

相転移

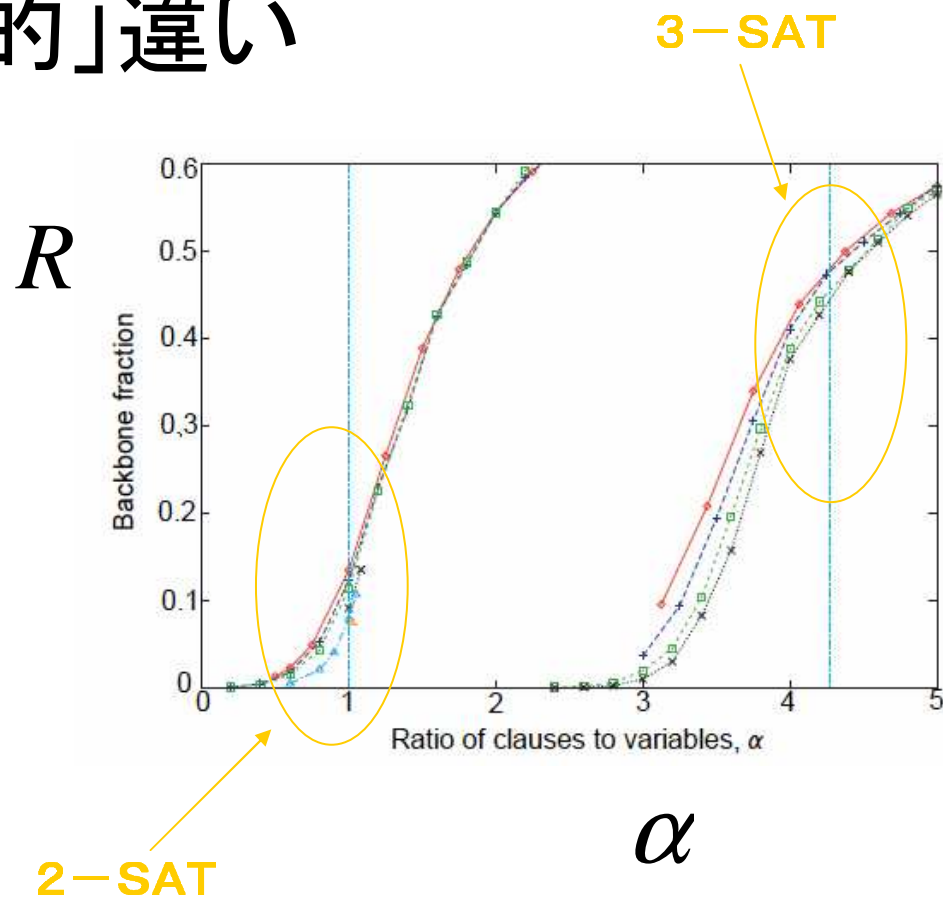
$\alpha = m/N$ が小さければ, unsatisfiable である確率(=p)は当然低く, 大きければ, 確率は高い. α を固定して, Nを大きくしていくと, $p=0$ から $p=1$ への変化が突然起こるようになる. (相転移)



縦線はレプリカ法から求められた転移点(2次転移なら厳密)

PとNPの「物理的」違い

R : 全ての基底状態
において同じ値をもつ
スピンの割合.



2-SATに対しては R は連続的に変化.
3-SATに対しては不連続.

まとめ

