

講義ノート

最適化問題の統計力学的研究¹

東京大学大学院総合文化研究科 福島 孝治

講義ノート作成：九州大学 理学府物理学専攻 近藤 洋一郎

(2009 年 12 月 22 日受理)

ランダムスピン系の統計力学を基盤として、最適化問題・制約充足問題への最近のアプローチを議論する。特に、

- ランダム系の統計力学の基本ツールであるレプリカ法とキャビティ法を習得する
- もっとも簡単な制約充足問題の例であるランダム化された K -XORSAT 問題について、その統計的性質を詳しくみる。パラメータを変化させたときの相転移の様子を理解すること

ことを目標とする。

目次

1 はじめに	138
2 ランダム系の相転移理論:レプリカ法とキャビティ法	142
2.1 イジング模型の相転移	142
2.2 レプリカ法によるランダムグラフ上のイジング模型の解析	144
2.3 キャビティ法によるランダムグラフ上のイジング模型の解析	152
3 ランダムな K -XORSAT 問題の解析	155
3.1 $K = 1$ の場合	157
3.2 $K = 2$ の場合	159
3.3 $K = 3$ の場合	162

¹本講義ノートは 2009 年 7 月 15 日から 17 日に九州大学で行われた集中講義を受講者の近藤 洋一郎がまとめたものである。

1 はじめに

はじめに、最適化問題の例を挙げながら統計力学からのアプローチとその特色について概観する。

巡回セールスマン問題 典型的な最適化問題である、巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP) から話を始める。TSP は、

「ある都市を出発したセールスマンの移動距離が最小値を取るように、与えられた全ての都市を一度ずつ必ず訪問して出発点に戻るための経路を求めよ」

という問題である。図 1 に例としてアメリカ合衆国 48 都市に対する TSP の解を示す。

TSP は、**たくさんの自由度**(都市数) と**競合する制約条件**(与えられたすべての都市を一度ずつ必ず訪問する)のもとでの**エネルギー (経路長) の最小化問題**としてとらえられる。すべての巡回路の数は都市数を N として $(N-1)!/2$ 個あり、 N が大きくなるにつれて爆発的に大きくなる。計算理論的には TSP は NP 完全というクラスに属しており、効率のよい探索アルゴリズムの開発が主要な研究課題となってきた。

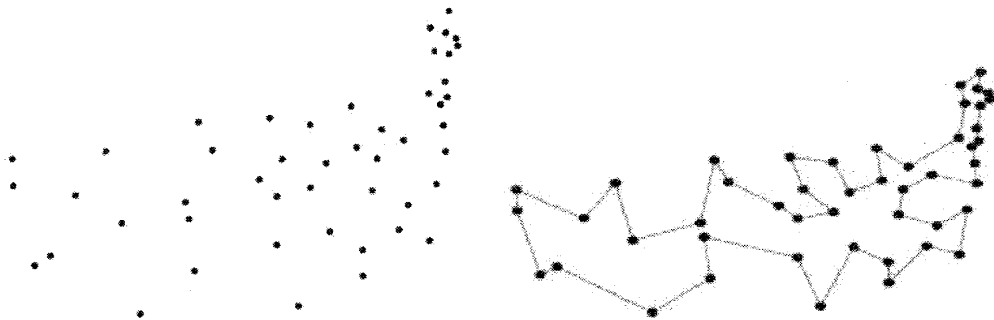


図 1: アメリカ合衆国の 48 都市に対する TSP の解。

計算科学の最適化問題と統計力学 ランダム系の統計力学と計算科学の最適化問題とは素朴なレベルで対応関係がつけられる。最小コストを実現する配位の探索は最小エネルギー状態の探索であるので、TSP は絶対零度の統計力学と対応がつく。また、広く制約充足問題も、変数の配位に対して制約を破った条件の数をエネルギーとすることで、有限温度の統計力学と対応づけることができ、その絶対零度極限として制約充足問題は定式化できる。

統計力学から最適化問題へのアプローチとしては、1986 年にフーとアンダーソン (Fu and Anderson) によるグラフ分割問題への先駆的な研究があり [1]、引き続き、1986 年のメザードとパリジ (Mézard and Parisi) による TSP の解析がある [2]。彼らは平均場スピングラス理論のテクニック (レプリカ理論) を使って、正方形内のランダムな点に対する TSP を考え、点の数を無限にする熱力学極限をとり平均経路長の「温度依存性」を求めた。その結果は数値実験と数%の精度で合致した。

しかし、その後ほぼ 10 年くらいこの分野の統計力学からの進歩は表面上は無いように見える。その原因として、研究分野の違い・立場の違いが挙げられる。統計力学的なアプローチでは、あるランダム変数 (例えばランダムな都市配置) で記述された問題に対する典型的な最小エネルギー (最適解)、解の個数、温度依存性に興味がある。一方で計算科学の最適化問題では、平均的な振る舞いではなく、ある与えられた特定の問題 (例えばアメリカ 48 都市問題) を具体的に解くこと、そのために必要な計算量や具体的なアルゴリズムとその構成方法が主な関心事項である。計算科学からは、典型的な性質がわかって、特定の問題を「解くこと」には役立たないという不満があり、逆に統計力学の分野からは個別論よりも普遍性を追求するあまり、個別の問題の性質には興味がもてないというモチベーションの問題があった。そのため統計力学から最適化問題への知見は多く生まれなかった。例外的に影響を与えたのはシミュレーテッド・アニーリングという統計力学から生まれたシミュレーション手法である [3]。それはしかし具体的にある問題に対する答えを出すのに有用なアルゴリズムであるという点で他の分野で広く普及したのであった。

相転移的な振る舞い 状況が変わったのが 1990 年代中頃である。あるランダムな制約充足問題 (本講義で取り扱う SAT 問題) に関して、

$$\text{パラメータ } \alpha = (\text{制約条件の数 } M) / (\text{変数の数 } N)$$

として α を変化させたとき、解の性質に急激な変化が見られることが発表された [4]。その後、様々な制約充足問題に対して、同様な相転移に見える“現象”が報告された。

具体的には、 N が十分大きいところで充足解がほとんど存在する SAT 相と解がほとんど存在しない UNSAT 相が存在し、 α を大きくしていったときにある α_c で SAT 相から UNSAT 相へ移り変わる相転移的な振る舞いがみられることがわかった。また、ある探索アルゴリズムの解への到達時間がちょうど α_c あたりで非常に遅くなる、臨界緩和 (critical slowing down) を思わせる現象が見出された。このように、何か物性論での「相転移と臨界現象」に似ていないだろうか。と統計力学からのアプローチが盛り上がりを見せた。本講義ではこのような背景のもとで SAT 問題についての統計力学的研究について解説する。その前に、TSP 以外の最適化問題、制約充足問題の面白い例をいくつか紹介しておこう。

例 1：彩色問題 地図上の彩色問題は、「全ての地図に対して、隣接する領域が異なる色になるように塗るには何色必要か？」という問題である (図 2)。この問題は頂点を国、エッジを国境としたグラフ表現が可能である。有名な 4 色定理として、任意の平面グラフは 4 色で塗り分け可能であることが、1976 年にケネス・アッペルとヴォルフガング・ハーケンによってコンピュータを利用して証明されている。

彩色問題はスケジュール問題と対応がある。例えば博士論文の審査員割り当て問題として、 N 人の D3 の大学院生に適切に審査員を割り当てて、公聴会の日程を設定したいとしよう。各教員は複数の審査を担当し、同じ時間帯に複数の審査は担当できない、審査時期は決まっていて、公聴会のスロット数は固定する、という制約条件があるとする。このとき、 N 人の学生を頂点で表し、

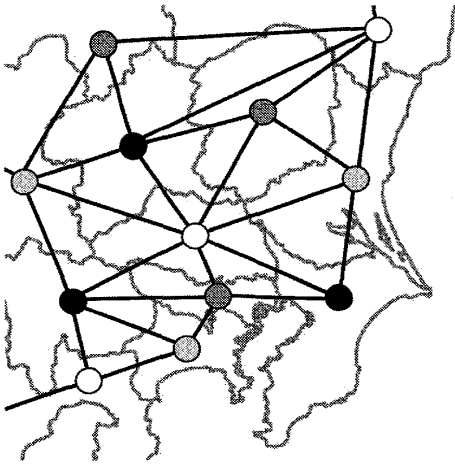


図 2: 関東地方の都道府県に対する 4 色問題.

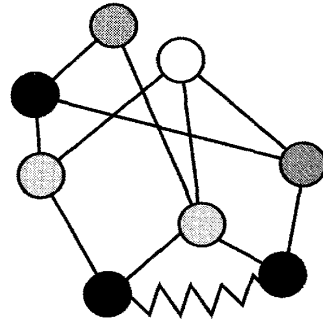


図 3: グラフ上の 4 色問題の例.

同じ教員によって担当される学生の上にエッジを引き、同じ色は同じスロットの別教室に対応するとすれば、これは彩色問題にマッピングすることができる。隣り合う頂点 (同じ教員によって担当される学生) は常に違うスロット (違う色) に振り分けられるのである。

さて、彩色問題をランダムグラフ (各頂点同士をランダムに結んだグラフ. 次章で詳しく説明する) 上で考えてみる。頂点に色を塗るとき、隣り合った頂点は同じ色で塗らないように色塗りできるのか、また、最低何色必要か、という問題は次のようにランダムグラフ上のポッツ模型にマッピングできる。

各頂点 i に色 $\sigma_i \in \{1, \dots, q\}$ を割り当てる。これはポッツ変数とみなせる。格子構造としてランダムグラフ、相互作用として反強磁性相互作用 (同じ色がとなりにくると罰金) をとるように、エネルギー関数を

$$E = \text{制約条件を破った数} = \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$$

とすると、これは反強磁性ポッツ模型と同型であることがわかる。

変数の数 (頂点の数) N に対して、制約条件の数をエッジ数 M とすると、 M が大きいほど q 色で塗れない場合が増えてくる。そこでパラメータ $\alpha = M/N$ を固定して大自由度極限 $N \rightarrow \infty$ をとると、図 4 のような彩色可能な領域 (Color 相) と彩色不可能な領域 (UnColor 相) の相転移が起こることがランダムグラフ上では分かっている。

例 2: バーテックス・カバー問題 バーテックス・カバー (vertex cover) 問題はグラフ理論の基本的な問題で、頂点 V 、エッジ E のグラフ $G(V, E)$ に対して、

全てのエッジ $e = (i, j)$ に対して、少なくとも $i \in V'$ か $j \in V'$ であるような頂点のサブセット $V' \subset V$ を探索せよ

という問題である。サブセットの大きさ $x = |V'|/|V|$ をパラメータとして、

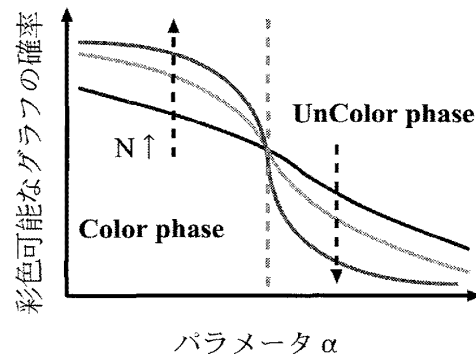
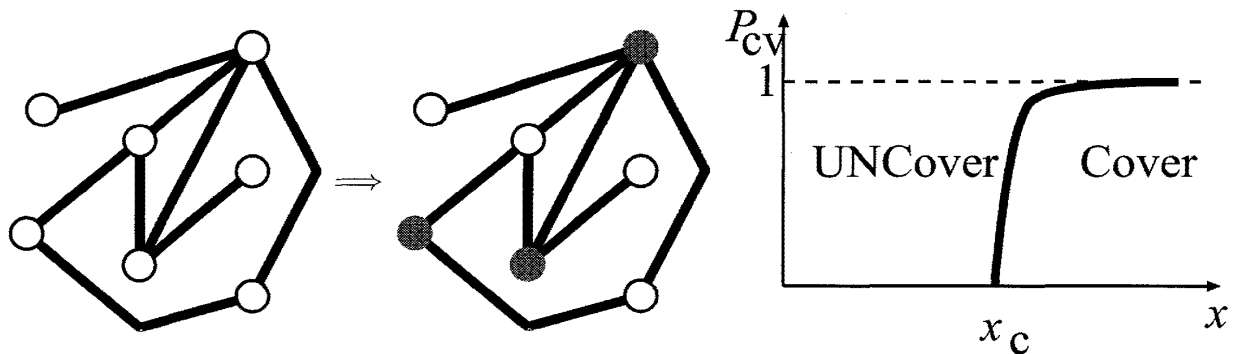


図 4: Color-UnColor 相転移.

図 5: (左) バーテックス・カバーされたグラフの例. (右) カバーできる確率 $P_{CV}(x)$ の概形.

- 与えられた x でバーテックス・カバーできるか? (決定問題)
- 与えられた x でカバーされないエッジ数を最小にせよ (最適化問題).

という問いがたてられる. 図 5 に示すように, グラフの特性を与えた上で頂点数を無限にした極限では, x を変えたときにカバーできない領域からカバーできる領域への転移が起きることが分かっている.

バーテックス・カバー問題は「ガードマン問題」と対応させることができる [5]. ガードマン問題は, 「頂点をガードマンを置く位置, エッジを通路とする. ガードマンは近接した通路 (エッジ) のみ見張れるとすると, N 人のガードマンで美術館のすべての通路を見守れるか?」という問題であり, これはバーテックス・カバー問題そのものである.

また, バーテックス・カバー問題は格子ガス模型へのマッピングができる. 変数 $\sigma_i \in \{0, 1\}$, ($i = 1, \dots, N$) として, $\sigma_i = 1$ のときガードマンが頂点 i に居ないとするこことで, ある通路の両側の頂点にガードマンがどちらもいない (バーテックス・カバーできていない) ときだけエネルギー $\sigma_i \sigma_j$ が上がるとすればよい.

例3：ビロリ-メザード模型 ビロリ-メザード模型 [6] は，ガラス転移の統計力学的な格子模型で，ランダムグラフ $G(V, E)$ 上に格子ガス変数を $\sigma_i = 1$ を粒子が占有，0 なら非占有というようにおく．制約条件として，粒子がいる頂点の近接頂点には K 個より多くの粒子がいてはいけないとしたとき，どこまで粒子が詰まるかという問題を考える．彼らは化学ポテンシャル μ の関数として密度に異常が生じることを示した．ここで， $K = 0$ としたものが先のバーテックス・カバー問題に相当し，この模型はその一般化になっている．

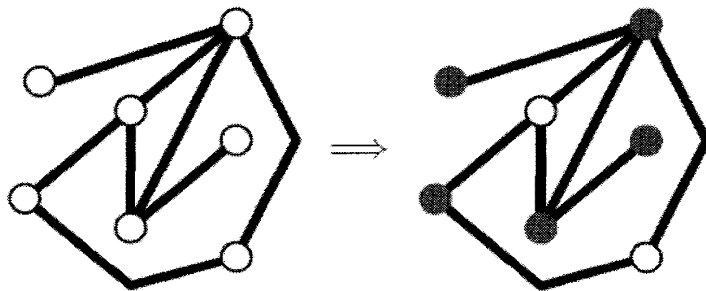


図 6: ビロリ-メザード模型の条件を満たす粒子の配置例 ($K = 2$).

2 ランダム系の相転移理論:レプリカ法とキャビティ法

本章ではランダム系の統計力学の基本ツールであるレプリカ法とキャビティ(cavity)法についての解説を行う．まず準備として，もっとも簡単な相転移の模型であるイジング模型の相転移の話からはじめる．次にそれをランダムグラフ上に載せ，レプリカ法とキャビティ法を用いて解析を行う．現在世界的には後者のキャビティ法が主流である．その一因として，後述するレプリカ極限の数学的な正当化が難しいことが挙げられるが，キャビティ法もある近似を用いており，その正当性もはっきりとはしない．2つの方法のメリット・デメリットについても簡単に触れる．

2.1 イジング模型の相転移

ミクロな状態として N 個のイジング変数 $\sigma_i \in \{1, -1\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$)，ハミルトニアン $\mathcal{H}(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j$ を考える．ここでは，すべてのサイト同士が相互作用する，無限大次元の理論(平均場模型)に話を限定する．表現としては，**伏見・テンパリ模型**と呼ばれている模型，

$$\mathcal{H}(\{\sigma_i\}) = -\frac{1}{N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j = -\frac{1}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \frac{1}{2N} \sum_i \sigma_i^2 = -\frac{1}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \frac{1}{2} \quad (1)$$

に相当する。ここで、エネルギー関数の示量性を保証するために N で割っている。分配関数 Z は定数項を無視して、

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\frac{\beta}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \right] \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_m \delta \left(m, \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right) e^{\frac{\beta}{2} N m^2} \end{aligned} \quad (2)$$

とかける。ここで、クロネッカーのデルタ δ を用いて、ダミー変数 m を導入した。この手法は後でレプリカ法でも用いる。 m は現時点では何かは分からない量だが、意味としては磁化に相当する秩序変数を導入したことに相当する。下線部分で状態和を計算した結果は、 m の確率分布 $n(m)$ とみなすことができる。具体的には、ある状態 $\{\sigma_i\}$ で $+1$ のスピンの数を N_+ 、 -1 のスピンの数を N_- と書くと、

$$\begin{cases} N = N_+ + N_- \\ Nm = N_+ - N_- \end{cases} \quad (3)$$

の関係があるから $N_+ = N(1+m)/2$ 。これとスターリングの公式を用いると、 $n(m)$ は

$$\begin{aligned} n(m) &= \sum_{\{\sigma_i\}} \delta \left(m, \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right) = \binom{N}{N_+} \\ &= \frac{N!}{(N(1+m)/2)!(N(1-m)/2)!} \simeq \exp \left[-N \frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} - N \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

となり、分配関数は

$$Z = \sum_m \exp \left[N \left(\frac{\beta m^2}{2} - \frac{(1+m)}{2} \ln \frac{(1+m)}{2} - \frac{(1-m)}{2} \ln \frac{(1-m)}{2} \right) \right] \quad (5)$$

と計算できる。ここで m の取り得る値は

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i = \left\{ -1, -1 + \frac{2}{N}, 1 + \frac{4}{N}, \dots, +1 \right\} \quad (6)$$

と離散的だが、 $\Delta m = 2/N$ より $N \rightarrow \infty$ で和を積分に置き換えて鞍点近似をとる。

$$\begin{aligned} Z &\simeq \int_{-1}^{+1} dm \exp[-\beta N f(m)] \simeq \exp[-\beta N f(m^*)], \\ \beta f(m) &:= -\frac{\beta m^2}{2} + \frac{(1+m)}{2} \ln \frac{(1+m)}{2} + \frac{(1-m)}{2} \ln \frac{(1-m)}{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

m^* を決める鞍点方程式から、

$$\begin{aligned} 0 &= \beta f'(m^*) = -\beta m^* + \frac{1}{2} \ln \frac{(1+m^*)}{2} - \frac{1}{2} \ln \frac{(1-m^*)}{2} \\ \Rightarrow \beta m^* &= \frac{1}{2} \ln \frac{1+m^*}{1-m^*} \Rightarrow m^* = \tanh \beta m^* \end{aligned} \quad (8)$$

と状態方程式が得られる。自発磁化 $\langle (\sum_i \sigma_i)/N \rangle$ を秩序変数とすると、それを計算すると m^* に一致することがわかる。解はよく知られたように、 $\beta < 1$ のときに解は $m^* = 0$ だけ、 $\beta > 1$ のときは3つの解が得られ、転移温度は $\beta_c = 1$ となる。また、 $\beta \simeq 1 + \epsilon$ とおいて状態方程式を展開すると、

$$m^* = (1 + \epsilon)m^* + \frac{1}{3}(1 + \epsilon)^3 m^{*3} \Rightarrow m^* = \sqrt{3(T - T_c)} \propto \sqrt{T - T_c} \quad (9)$$

から平均場の臨界指数 $\beta = 1/2$ が得られる。

計算過程をまとめると、(1) 解きたい模型模型の分配関数を書き下し、スピンの多体効果を一体化するために (2) ダミー変数をいれて (3) 和の計算で先に状態和をとる、となる。これから取り扱うランダム系の解析のエッセンスのほぼすべては実はこの平均場模型の計算に含まれている。

2.2 レプリカ法によるランダムグラフ上のイジング模型の解析

2.2.1 設定

まずランダムグラフを定義する。ランダムグラフ $G = (V, E)$ は、頂点 $V = \{1, \dots, N\}$ とエッジ E からなり、各頂点間をエッジが確率 c/N でランダムに結合するようなグラフである。ここで c を平均結合数という。このようなグラフの上でのイジング模型を考える。隣接行列 J_{ij} を

$$J_{ij} = \begin{cases} 1 & (i, j) \in E \\ 0 & (i, j) \notin E \end{cases} \quad (10)$$

で定義し、その確率分布を

$$P(\{J_{ij}\}) = \prod_{i < j} \left[\left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta(J_{ij}) + \frac{c}{N} \delta(J_{ij} - 1) \right] \quad (11)$$

で与える。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(\{\sigma_i\}) = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (12)$$

と書ける。ミクロな状態はスピンのセット $\{\sigma_i\}$ で指定され、相互作用 J_{ij} は熱的にゆらがないランダムなクエンチ変数である。

レプリカ法による解析に入る前に、ランダムグラフについて数学的に知られていることを述べておく。コンポーネントをエッジでつながっている頂点の集合とし、特にシステムサイズに比例する大きなコンポーネントをジャイアントコンポーネント ($O(N)$ のクラスター、物理の用語ではパーコレートクラスター) と呼ぶ。平均結合数 c が $c > 1$ のときにはジャイアント・コンポーネントが存在し、 $c < 1$ では存在しないことがわかっている。これからわかることは、有限の $O(1)$ のコンポーネントでは相転移できないから、少なくとも $c < 1$ のときには強磁性相がないことがわかる。 $c > 1$ のときはさらにエントロピーの効果があって、安定に相が存在できるかが決まる。以下の解析ではこの事実をまったく知らないものとして計算を進めていくが、レプリカ法での解析結果が絶対零度で今述べた数学的事実と整合的であることを後で確かめる。

2.2.2 レプリカ法

分配関数は $\mathbf{J} = \{J_{ij}\}$ に依存して

$$Z(\mathbf{J}) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{J}, \boldsymbol{\sigma})} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (13)$$

である。グラフごとに分配関数を計算するのは難しいので、ここで「 $N \rightarrow \infty$ の熱力学極限で $O(1)$ の物理量は $\mathbf{J}$ に依存しない」という**自己平均性の仮定**をおく。例えば、磁化密度 $m = \langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \rangle$ やエネルギー密度は $P(\mathbf{J})$ のなかのパラメータには依存するが、グラフの詳細には依存しない。そこで、グラフ平均をとった自由エネルギー密度、

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\ln Z(\mathbf{J})} \quad (14)$$

を評価する。ここで $\overline{\cdot}$ は $P(\mathbf{J})$ での平均を意味する。 $Z(\mathbf{J})$ は隣接行列を与えたときの分配関数であり、そこからできる一自由度あたりの自由エネルギーは $\mathbf{J}$ に依存しないので、平均した量に一致するということである。この問題でとるべき操作としては**(1) スピンに関する熱平均 (状態和の計算)**、**(2) 隣接行列に関する平均**、そして**(3) 熱力学極限**の順になっている。レプリカ法ではこの順序を入れ替え、まず(2)を計算し、(1)と(3)を「混ぜて」行う。

レプリカトリック まずはじめに、 $Z^n = \exp[n \ln Z]$ よりわかる恒等式

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n - 1}}{n} \quad (15)$$

を用いて、右辺、すなわち $\overline{Z^n}$ を計算する。 $\overline{Z^n}$ は n が整数のときだけ計算できるが、レプリカ「トリック」として、それを実数の n にまで「接続」し、 $n \rightarrow 0$ の極限をとるという操作を行う。 $n = 1, 2, 3, \dots$ での値は分かっているが、 $n = 0.5$ や $n = 1.5$ のときにどうなっているかはわからない。一般に、正の整数の値だけから接続した関数の唯一性は証明はできない。これでは情報が足りないので、 $n \rightarrow 0$ 極限をとるためにはさらに仮定が必要である。具体的には後で述べるレプリカ対称性の仮定、あるいはその破れ方の仮定をおく。

まず、 n を正の整数として、

$$\begin{aligned} Z^n(\mathbf{J}) &= \underbrace{Z(\mathbf{J}) Z(\mathbf{J}) \cdots Z(\mathbf{J})}_{n \text{ 個}} \\ &= \sum_{\{\sigma^1\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma^1)} \sum_{\{\sigma^2\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma^2)} \cdots \sum_{\{\sigma^n\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma^n)} \\ &= \sum_{\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^n} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha=1}^n \mathcal{H}(\sigma^\alpha) \right] \\ &= \sum_{\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^n} \exp \left[\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right] \end{aligned} \quad (16)$$

と自分自身のレプリカを n 枚用意する. スピン変数の上添字はレプリカの指標を表す.

ここで, 先ほどの (2) の手順, すなわち $P(\mathbf{J})$ での平均をとる.

$$\begin{aligned}
 \overline{Z^n(\mathbf{J})} &= \int \prod_{i < j} dJ_{ij} P(\mathbf{J}) Z^n(\mathbf{J}) \\
 &= \sum_{\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^n} \prod_{i < j} \left\{ \left(1 - \frac{c}{N}\right) 1 + \left(\frac{c}{N}\right) e^{\beta 1 \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha} \right\} \\
 &= \sum_{\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^n} \prod_{i < j} \exp \left[-\frac{c}{N} + \frac{c}{N} e^{\beta \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right] \\
 &= \sum_{\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \dots, \vec{\sigma}_N} \exp \left[-\frac{cN}{2} + \frac{c}{2N} \sum_{i,j} e^{\beta \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j} + O(N^0) \right] \tag{17}
 \end{aligned}$$

ここで, レプリカスピン $\vec{\sigma}_i := (\sigma_i^1, \sigma_i^2, \dots, \sigma_i^n)$ を導入した.

これで, レプリカを導入することでスピンの自由度は増えたが, $P(\mathbf{J})$ によって平均をとること
で, n 枚の独立なレプリカ系をレプリカ相互作用のある均一な $n \times N$ スピン系として書き直す
ことができた.

秩序変数の導入 レプリカ法 [7, 12, 13, 14] を用いたランダムスピン系の理論はエドワーズとアン
ダーソン (Edwards-Anderson) により導入され, 平均場模型の詳しい解析はすぐ後にシェリントン
とカークパトリック (Sherrington-Kirkpatrick) によりなされた. ここでは, モナソン (Monasson) [8]
によるやや一般的な処方箋に従って解析を行う. まず, 先ほどの伏見・テンパリ模型の m に相当
する量で, サイト i に関するレプリカスピン配位の割合

$$C(\vec{s}) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\vec{s}, \vec{\sigma}_i} \tag{18}$$

を導入する. $C(\vec{s})$ は, $\vec{s} = (s^1, s^2, \dots, s^n)$ を引数として指定したとき, これと i 番目のレプリカ
スピンを比較して, $\vec{s}$ と一致しているレプリカスピンの割合を表す関数である. すべてのレプリカ
スピン配位について和をとると, $\vec{\sigma}_i$ はどれかの $\vec{s}$ と一致することから,

$$\sum_{\vec{s}} C(\vec{s}) = 1 \tag{19}$$

という規格化条件が成り立っているので, 全体で自由度 $(2^n - 1)$ の「秩序変数」を導入したこと
になる. 「秩序変数」と呼ぶイメージをつかむために, 例として $n = 1$ のときを考える. 秩序変数
の成分は 1 つで,

$$C(+1) = \frac{1}{N} \sum_i \delta_{+1, \sigma_i} = \frac{N_+}{N} \tag{20}$$

$$C(-1) = \frac{1}{N} \sum_i \delta_{-1, \sigma_i} = \frac{N_-}{N} \tag{21}$$

である. 規格化条件 $C(+1) + C(-1) = 1$ は明らかに満たしている. $n = 1$, すなわちレプリカが 1
枚のときは, $C(\pm 1)$ は N 個のスピンのうち何割が ± 1 になっているか, すなわち伏見・テンパリ

模型でみた m と同じものだとわかる. $n > 1$ についての $C(\vec{s})$ は, このレプリカ方向の拡張だと言える.

レプリカ分配関数 $\overline{Z(J)^n}$ は $C(\vec{s})$ をダミー変数として,

$$\begin{aligned} \overline{Z(J)^n} = & \sum_{\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^n} \sum_{\{C\}} \prod_{\vec{s}} \delta \left(C(\vec{s}), \frac{1}{N} \sum_i \delta_{\vec{s}, \sigma_i} \right) \\ & \times \exp \left[-\frac{cN}{2} + \frac{cN}{2} \sum_{\vec{s}_1, \vec{s}_2} C(\vec{s}_1) C(\vec{s}_2) e^{\beta \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2} \right] \end{aligned} \quad (22)$$

となる. ここで, 一般の関数 $f(\vec{\sigma}_i, \vec{\sigma}_j)$ に対して,

$$\sum_{i,j} f(\vec{\sigma}_i, \vec{\sigma}_j) = N^2 \sum_{\vec{s}_1, \vec{s}_2} C(\vec{s}_1) C(\vec{s}_2) f(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \quad (23)$$

が成り立つことを用いた. 有効相互作用の項は,

$$\sum_{i,j} e^{\beta \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j} = N^2 \sum_{\vec{s}_1, \vec{s}_2} C(\vec{s}_1) C(\vec{s}_2) e^{\beta \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2} \quad (24)$$

となり, 下線部分のみが模型に依存する.

元のスピン変数に依存している部分は (22) 式で下線部分だけなので, 和の順番を入れ替え, スピン変数に対する和を書き下すと,

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^n} \prod_{\vec{s}} \delta \left(C(\vec{s}), \frac{1}{N} \sum_i \delta_{\vec{s}, \sigma_i} \right) &= \sum_{\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \dots, \vec{\sigma}_N} \prod_{\vec{s}} \delta \left(C(\vec{s}), \frac{1}{N} \sum_i \delta_{\vec{s}, \sigma_i} \right) = \frac{N!}{\prod_{\vec{s}} (NC(\vec{s}))!} \\ &\simeq \exp \left[-N \sum_{\vec{s}} C(\vec{s}) \ln C(\vec{s}) + \ln N \right] \end{aligned} \quad (25)$$

となる. これは, 2^n の状態を取りうる N 個のレプリカ $\vec{\sigma}_i$ を, それぞれのレプリカスピン状態 $\vec{s}$ に $NC(\vec{s})$ ずつ分配する場合の数に相当する. 名前付きの $\vec{s}$ 個の部屋に $NC(\vec{s})$ ずつボールを入れる場合の数は, $N!$ を同じ部屋の中での数えすぎ $NC(\vec{s})!$ で割ったものに等しい. 最後の式で, 模型の詳細によらない秩序変数 $C(\vec{s})$ のみからくるエントロピー項がでてきている [8].

$C(\vec{s})$ の和を積分で置き換えてまとめると, $O(N)$ に比例しない定数項を省略して,

$$\begin{aligned} \overline{Z(J)^n} &= \int \prod_{\vec{s}} dC(\vec{s}) \exp \left[-N \left(\frac{c}{2} - \frac{c}{2} \sum_{\vec{s}_1, \vec{s}_2} C(\vec{s}_1) C(\vec{s}_2) e^{\beta \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2} + \sum_{\vec{s}} C(\vec{s}) \ln C(\vec{s}) \right) \right] \\ &=: \int \prod_{\vec{s}} dC(\vec{s}) \exp [-\beta N f_n(C(\vec{s}))] \end{aligned} \quad (26)$$

とかける. 積分領域は $\{C(\vec{s}) | \forall \vec{s}, 0 \leq C(\vec{s}) \leq 1, \sum_{\vec{s}} C(\vec{s}) = 1\}$ である. 鞍点法を用いて, ラグランジュの未定乗数を λ と置くと,

$$0 = \frac{\delta}{\delta C(\vec{s})} \left[\beta f_n(C(\vec{s})) + \lambda \left(\sum_{\vec{s}} C(\vec{s}) - 1 \right) \right] \quad (27)$$

が得られる。(汎関数)微分のルールを

$$\frac{\delta C(\vec{s}_2)}{\delta C(\vec{s}_1)} = \delta(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \quad (28)$$

として、鞍点方程式は、

$$\begin{aligned} 0 &= -c \sum_{\vec{s}_1} C(\vec{s}_1) e^{\beta \vec{s}_1 \cdot \vec{s}} + \ln C(\vec{s}) + 1 + \lambda \\ \Rightarrow C(\vec{s}) &= \exp \left[-1 - \lambda + c \sum_{\vec{s}_1} C(\vec{s}_1) e^{\beta \vec{s}_1 \cdot \vec{s}} \right] \end{aligned} \quad (29)$$

となる。今までの計算によって、ランダムグラフ上のイジングモデルのレプリカ分配関数を計算するために秩序変数 $C(\vec{s})$ を導入して、その決定方程式を求めたところまで来た。決定方程式は自由度 $2^n - 1$ の連立方程式であり、 $C(\vec{s})$ を具体的に求めるには、さらに仮定が必要となる。

対称性 決定方程式を解くために、次の2種類の対称性を導入する。

1. スピン反転対称性：あるレプリカに対してスピン反転、

$$(\sigma_1^\alpha, \dots, \sigma_n^\alpha) \Rightarrow (-\sigma_1^\alpha, \dots, -\sigma_n^\alpha) \quad (30)$$

を行っても系の性質は変わらない。

2. レプリカ対称性：すべてのレプリカは同等だとする。レプリカの番号を、

$$(1, 2, \dots, n) \Rightarrow (\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(n)) \quad (31)$$

とシャッフル (π は置換を表す) したときに系の性質は変わらない。

対称解 (常磁性解) まず、完全対称解を考える。 $\vec{s}^j = (s^1, \dots, -s^k, \dots, s^n)$ のように任意の k 番目のレプリカのスピンを反転した時に $C(\vec{s})$ は変わらないとする。このとき規格化条件より、

$$C(\vec{s}) = \frac{1}{2^n} \quad (32)$$

である。自由エネルギーは、

$$\begin{aligned} \beta f_n &= \frac{c}{2} - \frac{c}{2} \sum_{\vec{s}_1, \vec{s}_2} \left(\frac{1}{2^n} \right)^2 e^{\beta \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2} + \sum_{\vec{s}} \frac{1}{2^n} \ln \frac{1}{2^n} \\ &= \frac{c}{2} - \frac{c}{2} \left(\frac{\cosh \beta}{2} \right)^n - n \ln 2. \end{aligned} \quad (33)$$

これが常磁性解である。

スピン反転対称性の破れ 低温領域では常磁性解以外に鞍点として強い解が出てくるかが問題となる。そこで、レプリカ対称性は破れていないが、スピン反転対称性が破れている場合の解を求める。この場合 $C(\vec{s})$ は $\sum_{\alpha} s^{\alpha}$ だけの関数である。例えば $\vec{s}$ の中に $+1$ が 3 個あるとすれば、それがレプリカベクトルのどこに入っているでもいいという状況である。この仮定より、 $2^n - 1$ の自由度が n にまで落ちる。ここで、 $C(\vec{s})$ を

$$C(\vec{s}) = C\left(\sum_{\alpha} s^{\alpha}\right) = \int dh P(h) \frac{e^{\beta h \sum_{\alpha} s^{\alpha}}}{(2 \cosh \beta h)^n} \quad (34)$$

と変形し、スピンに h という有効磁場がかかっていて、それを h の分布で積分した形でかけているとする。これによって $C(\vec{s})$ を求める問題を $P(h)$ を求める問題に変換するのである。 $C(\vec{s})$ に関する規格化条件より、

$$1 = \sum_{\vec{s}} C(\vec{s}) = \sum_{\vec{s}} \int dh P(h) \frac{e^{\beta h \sum_{\alpha} s^{\alpha}}}{(2 \cosh \beta h)^n} = \int dh P(h) \quad (35)$$

となり、元々の規格化条件は、 $P(h)$ に関する規格化条件となる。 $P(h)$ は有効磁場 h の分布関数としての意味を持つことがわかる。

平均磁化 m は、例えば 1 番目のレプリカの頻度分布 $C(\vec{s})$ での平均をとって、レプリカ極限をとったものに対応する。

$$\begin{aligned} m &= \lim_{n \rightarrow 0} \sum_{\vec{s}} s^1 C(\vec{s}) = \lim_{n \rightarrow 0} \sum_{\vec{s}} s^1 \int dh P(h) \frac{e^{\beta h \sum_{\alpha} s^{\alpha}}}{(2 \cosh \beta h)^n} \\ &= \int dh P(h) \tanh(\beta h). \end{aligned} \quad (36)$$

すなわち、有効磁場でスピンの期待値を計算して、 h の分布で平均した量が系の磁化に相当する。そこで $P(h)$ を計算して、強磁性解の有無を調べることができる。

$P(h)$ を以下の手順で計算していく。まず $C(\vec{s})$ で書いた鞍点方程式を $P(h)$ で書く。便宜的に $\mu := \beta \sum_{\alpha} s^{\alpha}$ と書くと、

$$\int dh P(h) \frac{e^{h\mu}}{(2 \cosh \beta h)^n} = \exp \left[-1 - \lambda + c \int dh P(h) \frac{\sum_{\vec{s}_1} e^{\beta \sum_{\alpha} (s^{\alpha} + h) s_1^{\alpha}}}{(2 \cosh \beta h)^n} \right] \quad (37)$$

となる。右辺の積分の中の分子の指数項は、

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{s}_1} e^{\beta \sum_{\alpha} (s^{\alpha} + h) s_1^{\alpha}} &= \prod_{\alpha=1}^n 2 \cosh \beta (s^{\alpha} + h) \\ &= [2 \cosh \beta (h + 1)]^{\sum_{\alpha} \frac{1+s^{\alpha}}{2}} [2 \cosh \beta (h - 1)]^{\sum_{\alpha} \frac{1-s^{\alpha}}{2}} \\ &= [2 \cosh \beta (h + 1)]^{\frac{n+\mu/\beta}{2}} [2 \cosh \beta (h - 1)]^{\frac{n-\mu/\beta}{2}} \end{aligned} \quad (38)$$

と計算できる。ここで、 $s^{\alpha} = \pm 1$ の個数は $\sum_{\alpha} \frac{1 \pm s^{\alpha}}{2}$ と書けることを用いた。これで s^{α} 依存性はあらわにはなくなった。右辺をあらためて書くと、

$$\exp \left[-1 - \lambda + c \int dh P(h) \frac{[2 \cosh \beta (h + 1)]^{\frac{n+\mu/\beta}{2}} [2 \cosh \beta (h - 1)]^{\frac{n-\mu/\beta}{2}}}{(2 \cosh \beta h)^n} \right] \quad (39)$$

となる。ここで n に関する和がなくなり、この段階でレプリカ極限、 $n \rightarrow 0$ をとることができる。

$n \rightarrow 0$ をとった後で目標である $P(h)$ を計算する。ここで未定乗数 λ は規格化条件より求まるが、 $c = 1 + \lambda$ とすればよいことを先取りでとりいれておく。

$$\begin{aligned}
 \int dh P(h) e^{h\mu} &= \exp \left[-c + c \int dh P(h) \left[\frac{\cosh \beta(h+1)}{\cosh \beta(h-1)} \right]^{\frac{\mu}{2\beta}} \right] \\
 &= e^{-c} \exp \left[c \int dh P(h) \exp \left(\frac{\mu}{2\beta} \ln \frac{\cosh \beta(h+1)}{\cosh \beta(h-1)} \right) \right] \\
 &= e^{-c} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{c^l}{l!} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_l P(h_1) P(h_2) \cdots P(h_l) \\
 &\quad \times \exp \left[\frac{\mu}{2\beta} \sum_{m=1}^l \ln \frac{\cosh \beta(h_m+1)}{\cosh \beta(h_m-1)} \right]
 \end{aligned} \tag{40}$$

両辺を見比べることで、

$$\begin{aligned}
 P(h) &= e^{-c} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{c^l}{l!} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_l P(h_1) P(h_2) \cdots P(h_l) \\
 &\quad \times \delta \left(h - \sum_{m=1}^l \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\cosh \beta(h_m+1)}{\cosh \beta(h_m-1)} \right)
 \end{aligned} \tag{41}$$

が得られる。この反復方程式は数値的にとくことができ、 $P(h)$ が決まり、磁化、自由エネルギーが計算できる。

相図 常磁性解 $m = 0$ は $P(h) = \delta(h)$ となっているはずであり、 $C(\vec{s}) = 1/2^n$ に相当する。そこで、 $P_0(h)$ を $\delta(h)$ からずらしたときの線形安定性解析をすることで相境界を決める。入力として $\epsilon_0 = \int dh P_0(h) h > 0$ を入れたときのアウトプット $\epsilon_1 = \int dh P_1(h) h$ は、

$$\begin{aligned}
 \epsilon_1 &= \int dh h e^{-c} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{c^l}{l!} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_l P_0(h_1) P_0(h_2) \cdots P_0(h_l) \delta \left(h - \sum_{m=1}^l \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\cosh \beta(h_m+1)}{\cosh \beta(h_m-1)} \right) \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} e^{-c} \frac{c^l}{l!} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_l P_0(h_1) P_0(h_2) \cdots P_0(h_l) \sum_{m=1}^l \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\cosh \beta(h_m+1)}{\cosh \beta(h_m-1)} \\
 &= \left(\sum_{l=0}^{\infty} e^{-c} \frac{c^l}{l!} \right) \int dh P_0(h) \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\cosh \beta(h+1)}{\cosh \beta(h-1)} \\
 &= c \int dh (h \tanh \beta + O(h^2)) P_0(h) dh \\
 &= c \epsilon_0 \tanh \beta + O(\epsilon_0^2) = \epsilon_0 (c \tanh \beta) + \cdots
 \end{aligned} \tag{42}$$

となり、常磁性相の条件 $\epsilon_1 < \epsilon_0$ より、

$$1 > c \tanh \beta \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{T_c} = \tanh^{-1} \left(\frac{1}{c} \right) \tag{43}$$

となり $c < 1$ の時は常磁性相であるという先述した結果が再現された。さらに、 c が大きいときは、 $T_c \propto c$ となり、平均場の結果 (ワイス解) と同じになる (図 7)。

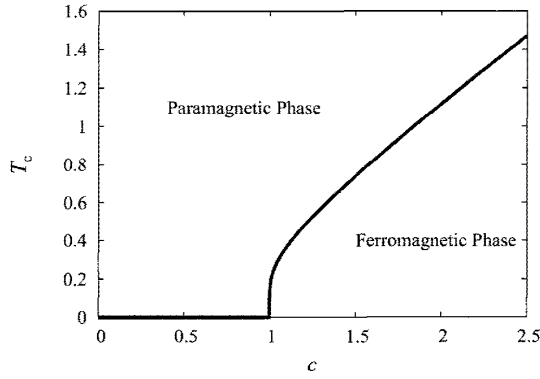


図 7: ランダムグラフ上のイジング模型の相図. c が十分大きなところでは T_c は c に比例し, 平均場模型の結果と整合している. 一方で, $c = 1$ では相境界の傾きは無限大になっていて, 温度の効果というよりは幾何学的な性質 (パーコレーション) で決まっていることが伺える.

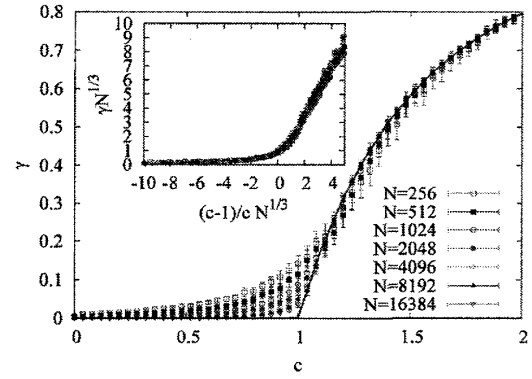


図 8: ジャイアントコンポーネントの大きさ γ の平均結合数依存性. データ点は有限頂点数 N での数値実験結果で, 曲線は式 48 の解. 挿入図には有限サイズスケーリングの結果. スケーリングの指数は $c = 1$ での最大コンポーネントが $N^{2/3}$ に比例することから導かれる.

$T = 0$ でのふるまい $T = 0$ では正確に解くことができる. まず, $\beta \rightarrow \infty$ で

$$\begin{aligned} K(h) &:= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\beta} \ln \frac{2 \cosh \beta(h+1)}{2 \cosh \beta(h-1)} \\ &= \begin{cases} 1 & (1 < h) \\ h & (-1 < h < 1) \\ -1 & (h < -1) \end{cases} \end{aligned} \quad (44)$$

と計算できる. これから $P(h)$ は

$$P(h) = \sum_{l=0}^{\infty} e^{-c} \frac{c^l}{l!} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_l P(h_1) P(h_2) \cdots P(h_l) \delta \left(h - \sum_{m=1}^l K(h_m) \right) \quad (45)$$

と書ける. $P(h)$ はスピンへの有効場の分布を表しており, $T = 0$ で, かつ, フラストレーションのないこの問題では, 隣接スピンは揺らぐことはなく, 有効場は整数の値しかとらないことが期待される. さらに, スピン反転対称性は破れていて $h \geq 0$ の部分だけを感じており,

$$P(h) = \sum_{l=0}^{\infty} r_l \delta(h - l) \quad (46)$$

と書けているとする. この式を (45) 式に代入すると, r_0 の項は

$$r_0 = \sum_{l=0}^{\infty} e^{-c} \frac{c^l}{l!} r_0^l = e^{-c(1-r_0)}. \quad (47)$$

r_0 以外の成分を $\gamma := \sum_{l=1}^{\infty} r_l = 1 - r_0$ として, その満たすべき方程式は

$$1 - \gamma = e^{-c\gamma} \quad (48)$$

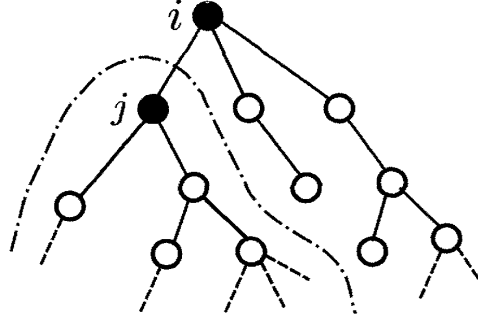


図 9: 局所的に木構造と仮定したランダムグラフ. i をルートとした. 囲まれた領域が (i, j) のエッジを除いた場合の部分木.

となる. γ は絶対零度では $m = 1$ を作るのので, この γ を用いてジャイアントコンポーネントの大きさは γN となる. $c < 1$ で解は $\gamma = 0$ しかなく, $c > 1$ で $\gamma > 0$ の解をもつ. これは前述したジャイアント・コンポーネントに関する数学的な結果と整合的である.

2.3 キャビティ法によるランダムグラフ上のイジング模型の解析

次に, 同じ問題をキャビティ法で解き, レプリカ法と同じ表式が得られることを示す. キャビティ法はベテ-パイエルス近似と本質的に同じ解析手法だが, 近年ランダム系への応用 [9] を機会にリバイバルしている.

引き続きランダムグラフ上のイジング模型を考える. ここでランダムグラフのある重要な性質に注目する. それは, ランダムグラフは局所的には木構造になっているという性質である. 数学的にはほとんどすべてのループ長が $\ln N$ くらいであることが示されている. そこで, $N \gg 1$ に対してグラフが本当に木だと仮定して解析を進めていく.

今ある頂点 i を木のルートとして, σ_i だけを除いたルートの条件付き分配関数 $Z_i(\sigma_i)$ を

$$Z_i(\sigma_i) = \sum_{\{\sigma_j; j \neq i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_N)} \quad (49)$$

と書く. 次に, i と j の間のエッジを除いた下の木 (図 9) の分配関数を $Z_{j|i}(\sigma_j)$ と置くと, 両者は

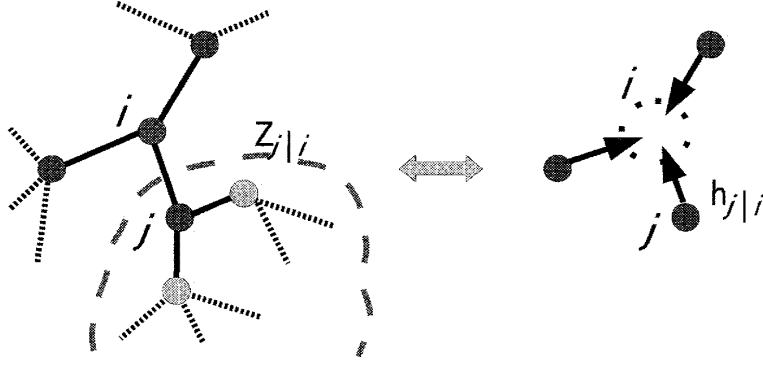
$$Z_i(\sigma_i) = \sum_{\{\sigma_j; j \in N_i\}} \exp \left[\beta \sigma_i \sum_{j \in N_i} \sigma_j \right] \prod_{j \in N_i} Z_{j|i}(\sigma_j) \quad (50)$$

の関係にある. ここで N_i は i の隣接サイトである. 一般に再帰式を書くことができ,

$$Z_{j|i}(\sigma_j) = \sum_{\{\sigma_k; k \in N_j \setminus i\}} e^{\beta \sigma_j \sum_{k \in N_j \setminus i} \sigma_k} \prod_{k \in N_j \setminus i} Z_{k|j}(\sigma_k). \quad (51)$$

ここでキャビティ場 (cavity field) $h_{j|i}$ を,

$$Z_{j|i}(\sigma_j) = e^{\beta h_{j|i} \sigma_j} \quad (52)$$

図 10: キャビティ場 $h_{j|i}$ の概念図.

によって定義する. すなわち, 条件付きの分配関数をキャビティ場の 1 パラメータで表してみる.

$Z_{j|i}(+1) = e^{\beta h_{j|i}}$, $Z_{j|i}(-1) = e^{-\beta h_{j|i}}$ より,

$$h_{j|i} = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{Z_{j|i}(+1)}{Z_{j|i}(-1)} \quad (53)$$

となる. キャビティという名前の由来は, i の部分を「穴」にすることから来ている.

さて, 条件付き分配関数による再帰方程式は, $h_{j|i}$ で書き直せて,

$$\begin{aligned} h_{j|i} &= \frac{1}{2\beta} \ln \left[\frac{\sum_{\{\sigma_k, k \in N_j \setminus i\}} e^{+\beta \sum_k \sigma_k} \prod_k Z_{k|j}(\sigma_k)}{\sum_{\{\sigma_k, k \in N_j \setminus i\}} e^{-\beta \sum_k \sigma_k} \prod_k Z_{k|j}(\sigma_k)} \right] \\ &= \frac{1}{2\beta} \ln \prod_{k \in N_j \setminus i} \frac{\sum_{\sigma_k} e^{+\beta \sigma_k} Z_{k|j}(\sigma_k)}{\sum_{\sigma_k} e^{-\beta \sigma_k} Z_{k|j}(\sigma_k)} \\ &= \frac{1}{2\beta} \ln \prod_{k \in N_j \setminus i} \frac{e^{+\beta} Z_{k|j}(+1) + e^{-\beta} Z_{k|j}(-1)}{e^{-\beta} Z_{k|j}(+1) + e^{+\beta} Z_{k|j}(-1)} \\ &= \frac{1}{2\beta} \sum_k \ln \frac{\cosh \beta(h_{k|j} + 1)}{\cosh \beta(h_{k|j} - 1)} \end{aligned} \quad (54)$$

となる. $h_{j|i}$ は頂点 i を「穴」としたときのキャビティ場であったが, それは下部の木のキャビティ場によって再帰的に表すことができる. ルート i だけは特別なので, h_i を $Z_i(\sigma_i) = e^{\beta h_i \sigma_i}$ で定義する. h_i をルートの有効場(effective field)と呼ぶ. h_i もキャビティ場 $h_{j|i}$ と同じ形式でかけて,

$$h_i = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{Z_i(+1)}{Z_i(-1)} = \frac{1}{2\beta} \sum_{j \in N_i} \ln \frac{\cosh \beta(h_{j|i} + 1)}{\cosh \beta(h_{j|i} - 1)} \quad (55)$$

である. これからキャビティ場を集めてくれば, ルート i の周辺分布が求まることがわかる. 周辺分布 $P(\sigma_i)$ はボルツマンウェイトの和,

$$P(\sigma_i) = \sum_{\{\sigma_j, j \neq i\}} P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \frac{e^{\beta h_i \sigma_i}}{\sum_i Z_i(\sigma_i)} \quad (56)$$

でかける. これが有効場と呼ばれる所以で, 磁化は $m_i = \sum_i \sigma_i P(\sigma_i) = \tanh \beta h_i$ のようになる.

キャビティ法の計算はベータ近似の計算と似ているが、違うのは、ランダム系であること反映して各エッジのキャビティ場は違うことである。

ランダムグラフの性質の取り込み 今までの計算の手続きをまとめると、まず (1) ランダムグラフを任意の頂点 i をルートだと思って指定し、あとは木と仮定した。ついで (2) $Z_{j|i}$ から Z_i を再帰方程式でかき、(3) $h_{j|i} \rightarrow h_i \rightarrow m_i$ と計算していくというプログラムであった。しかしながら、実際には木でなくランダムグラフであるため、その違いを考えなければいけない。

さて、ランダムグラフの性質を取り込むために、 J_{ij} の平均をとる。平均をとると、何かキャビティ場の分布関数ができると期待できる。キャビティ場の分布を

$$\Pi_{\text{cav}}(h) = \frac{1}{cN} \sum_{(i,j) \in E} [\delta(h - h_{j|i}) + \delta(h - h_{i|j})] \quad (57)$$

と書く。また有効場の分布も

$$\Pi(h) = \frac{1}{N} \sum_{i \in N} \delta(h - h_i) \quad (58)$$

と書ける。そしてこの分布関数に対する反復方程式を求める。エッジにのっているキャビティ場を求めるには、頂点につながっている他のエッジのキャビティ場を集めてくればよかった。そのエッジの数はポアソン分布に従うので、

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{cav}}(h) = & \sum_{d=0}^{\infty} e^{-c} \frac{c^d}{d!} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_d \Pi_{\text{cav}}(h_1) \Pi_{\text{cav}}(h_2) \cdots \Pi_{\text{cav}}(h_d) \\ & \delta \left(h - \frac{1}{2\beta} \sum_{k \in N_i} \ln \frac{\cosh \beta(h_{k|i} + 1)}{\cosh \beta(h_{k|i} - 1)} \right) \end{aligned} \quad (59)$$

となり、レプリカ法の $P(h)$ と同じ方程式が得られた。この後の計算手法は省略するが、エネルギーや自由エネルギーを計算することができる。例えばエネルギーは、

$$E = \frac{\sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \sigma_i \sigma_j P(\sigma_i, \sigma_j)}{\sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} P(\sigma_i, \sigma_j)}, \quad (60)$$

$P(\sigma_i, \sigma_j) \propto e^{\beta \sigma_i \cdot \sigma_j + \beta \sigma_j h_{j|i} + \beta \sigma_i h_{i|j}}$ のように計算できる。

レプリカ法とキャビティ法の違い 以上でレプリカ法、キャビティ法によるランダムグラフ上のイジング模型の解析を行ったが、相互作用にループの効果が顕著でないランダムグラフ上の問題では両者は同じ結果を導くことがいくつかの問題では知られている。しかし、そうでない、例えば有限次元格子上的統計力学を考えるとときにはそれぞれに何かしらの近似理論を用いる必要があり、その段階で両者は一致する保証はないと考えられる。レプリカ法の問題点として、

- レプリカ極限の正当化ができない。

- もう一つ深刻な問題として、レプリカ対称性の破り方がよくわからない。レプリカ対称解、すなわち $C(\sum_{\alpha} s^{\alpha})$ という解を構成したが、それをどう破ればよいかよくわからない。仮説として、 $\vec{s}$ を、 $\sum_{\alpha \in A} s^{\alpha}, \sum_{\alpha \in B} s^{\alpha}$ の関数として、1段階で破ろうというモナソンによる試みがあるが、保証の限りではない。2段階で破るにはさらに非自明で、階層的に破ればよい気もするが、そのための原理は確立していない。

ことが挙げられる。一方でレプリカ法には全結合型ではないモデルでもレプリカ対称なものならば計算できるというメリットがある。キャビティ法にも特有の問題がある。

- 計算の手法自体はベータ近似であり、ループがあるとその効果がわからない。
- 方程式が本質的に反復的であるため、解が複数ある時はどうすればよいかかわからない。解が2個や3個ならば自由エネルギーを計算して最低値を選べばよいが、指数関数ほど解があったときはどうするのが自明ではない。現在は「1段階 RSB(Replica Symmetric Breaking) キャビティ法」が広く使われている。名前が紛らわしいがレプリカ法とは別の概念で、複数の解に対して統計力学を構成し、温度をパラメータとして導入し自由エネルギーを最小化するという手法である。しかし、本当の答えを与えている保証はない。

が挙げられる。

最後に注意すべき点として、ランダムグラフのイジングモデルでは2つの手法で同じ表式が得られたが、一般には常に一致する保証はなく、イジングモデル以外のモデルでの両者の詳細な比較はまだ十分に行われていない。

3 ランダムな K -XORSAT 問題の解析

本講義の後半では、前章で学んだランダム系の統計力学の手法を用いて、制約充足問題、最適化問題の具体例として K -XORSAT 問題を解析する。

問題設定 N 個のブール変数 $x_i (i = 1, 2, \dots, N, x_i \in \{0, 1\})$ を用意する (真を1, 偽を0に割り当てる)。和演算 $+$ を排他的論理和 (XOR) に対応させる。すなわち、 $0+0=0, 1+1=0, 0+1=1, 1+0=1$ である (表1)。XOR は2つ変数が揃っているか揃っていないかで値が変わるため、スピン系との対応が容易につく利点がある。XOR の代わりに OR 演算を導入したのが通常の SAT 問題である。

制約条件として方程式、例えば

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1 \quad (61)$$

をとり、これを満たす解を考える。状態の組み合わせは $2^3 = 8$ 通りあり、そのうち解は

$$(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 1)$$

表 1: 排他的論理和 (XOR) の真偽表.

x	y	$x + y$
0	0	0
1	1	0
0	1	1
1	0	1

の4つである.

N 個のブール変数を用いて M 個の方程式が制約条件として与えられているとき, 解空間からすべての方程式を満たす解を求めよという問題を XORSAT 問題という. もうひとつ例として,

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_2 + x_4 = 0 \\ x_1 + x_4 = 1 \end{cases} \quad (62)$$

の3つの方程式を考える. ただし $x_i, i = 1, 2, 3, 4$. この SAT 解は $(1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 1)$ である. 解がある問題を以後略して「SAT である」という. 一方で

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + x_3 = 1 \end{cases} \quad (63)$$

には解がない. このような問題を「UNSAT である」という. 特に, **すべての方程式が K 個の変数からなる問題を K -XORSAT 問題**という. この問題はガウスの消去法を用いると $O(N)$ の手続きで解を求めることができる. 計算理論の観点からは困難でない問題群 (クラス P) に属するが, 以下に見るように N が十分大きな極限で相転移が存在する.

問題のランダム化 次に, 問題のランダム化を行う. ランダムな制約条件を次のように作る.

1. N 個の変数からランダムに K 個を選び, 方程式を作る.

$$x_{i_1} + x_{i_2} + \cdots + x_{i_K} = v \quad (64)$$

右辺は確率は確率 $1/2$ で 0 か 1 を割り当てる. すなわち $P(v) = 1/2\delta(v) + 1/2\delta(v - 1)$.

2. これを M 回繰り返す.

あるいは別の作り方として, すべての $H = {}_N C_K$ 個の方程式を確率 p で問題に加え, $1 - p$ で加えないとする. 右辺は同じようなルールでつくる. 平均で pH 個の方程式ができ, この場合方程式の数がゆらぐ. 今回は前者の方法を採用する.

求めたい量は, N 個の変数で $M = \alpha N$ 個の方程式を満たす解が存在する確率 $P_{\text{SAT}}(N, \alpha)$ である. 一般に $P_{\text{SAT}}(N, \alpha)$ は α の減少関数であり, その形は K に強く依存する (格子模型の次元を思い浮かべるとよい). 以後 $K = 1, 2, 3$ について計算を行う.

3.1 $K = 1$ の場合

$K = 1$ の場合, XORSAT 演算は方程式に含まれないが, 以下のように, $x_1, x_2, \dots, x_N$ の N 個の変数で M 個の方程式をランダムに作る.

$$\begin{cases} x_{i_1} = 0 \\ x_{i_2} = 1 \\ \vdots \\ x_{i_M} = 1 \end{cases} \quad (65)$$

右辺は確率 $1/2$ で 0 か 1 を振り当てる. これらを満たす SAT 解が存在する確率, $P_{\text{SAT}}(N, \alpha = M/N)$ を計算したい.

いま, n_i を x_i が方程式に含まれている数とする. すべての n_i が 0 か 1 のとき, SAT 解は常に存在する. なぜなら $n_i = 0$ の変数の値は任意にとれ, $n_i = 1$ の変数は方程式の右辺と同じ値に決めればすべての方程式を満たせるからである. 一方, $n_i \geq 2$ のときは, すべての右辺が同じとき, すなわち $(1/2)^{n_i-1}$ の確率で SAT 解が存在する. N 個の変数をランダムに M 個選ぶとき, n_i は平均 M/N のポアソン分布,

$$P(n) = \frac{e^{-M/N}}{n!} \left(\frac{M}{N}\right)^n \quad (66)$$

に従うから, $\alpha = M/N$ を用いて,

$$\begin{aligned} P_{\text{SAT}}(N, \alpha) &= \left[\underbrace{e^{-\frac{M}{N}}}_{n=0} + \underbrace{e^{-\frac{M}{N}} \left(\frac{M}{N}\right)}_{n=1} + \sum_{n \geq 2} e^{-\frac{M}{N}} \frac{1}{n!} \left(\frac{M}{N}\right)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{n-1} \right]^N \\ &= \left[e^{-\frac{M}{N}} \left(1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \left(\frac{M}{N}\right)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{n-1} \right) \right]^N \\ &= \left[e^{-\frac{M}{N}} (2e^{\frac{M}{2N}} - 1) \right]^N \\ &= \left[2e^{-\frac{M}{2N}} - e^{-\frac{M}{N}} \right]^N = \left[2e^{-\frac{\alpha}{2}} - e^{-\alpha} \right]^N \end{aligned} \quad (67)$$

と計算できる (図 11). N が無限大のときは, 無限小の α で P_{SAT} はゼロになる.

P_{SAT} の大偏差統計 違った見方として, P_{SAT} を

$$P_{\text{SAT}}(N, \alpha) \simeq e^{-N\omega_1(\alpha) + o(1)} \quad (68)$$

と書いたときの $\omega_1(\alpha)$ を調べる. $\alpha > 0$ のとき N が有限ならば P_{SAT} は有限だが確率はとても小さい. このようなきわめてレアな事象を特徴づける枠組みが大偏差統計である. $\omega_1(\alpha)$ をレート関

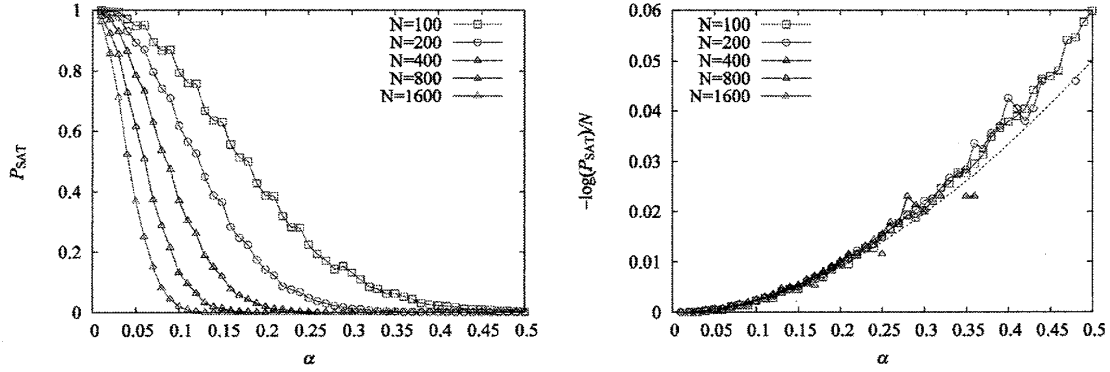


図 11: (左) $P_{\text{SAT}}(N, \alpha)$ の α 依存性. (右) レート関数 $\omega_1(\alpha)$.

数といい,

$$\begin{aligned}
 \omega_1(\alpha) &= -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln P_{\text{SAT}}(N, \alpha) \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\ln(2e^{-\frac{\alpha}{2}} - e^{-\alpha}) \right] \\
 &= \alpha - \ln(2e^{\alpha/2} - 1)
 \end{aligned} \tag{69}$$

と計算できる (図 11). 少しでもレート関数が 0 よりも大きくなると, $N \rightarrow \infty$ で UNSAT になる. すなわち, レート関数がある α_c で 0 から正に移り変わるような場合, SAT 相から UNSAT への相転移が起きていることがわかる. $K = 1$ の場合は任意の $\alpha > 0$ でレート関数は常に正であり, 転移は起きない.

基底状態のエントロピー 次に, 満たさない方程式の数が最小のセット $\{x_i\}$ を基底状態と定義し, この数を評価してみる. SAT 相では, 充足解の個数である.

n_i^0 を $x_i = 0$ があらわれる数, n_i^1 を $x_i = 1$ があらわれる数とする. もし $n_i^0 = n_i^1$ なら x_i は 0 と 1 のどちらの値をとっても, 充足しない方程式の数は変わらない. この意味で x_i を free な変数と呼ぶ. 一方で $n_i^0 \neq n_i^1$ ならば, n_i^0 と n_i^1 の大きな方に x_i の値を固定した方が充足しない方程式の数は少ない. このとき x_i は frozen 変数と呼ばれる. よって, 基底状態の縮退度 n は, free 変数の数 N_f を用いて, $n = 2^{N_f}$ となる.

ある変数が free である確率 ρ は, 平均 $(\frac{\alpha}{2})$ のポアソン分布の 2 乗の和であらわされ²,

$$\begin{aligned}
 \rho &= \sum_{n \geq 0} \left(\frac{e^{-\alpha/2}}{n!} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^n \right)^2 \\
 &= e^{-\alpha} \sum_{n \geq 0} \frac{1}{(n!)^2} \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{2n} \\
 &= e^{-\alpha} I_0(\alpha)
 \end{aligned} \tag{70}$$

² n_i は平均 $\alpha = M/N$ のポアソン分布に従っているが, 制約条件の右辺は確率 1/2 で 1 と 0 となるため, n_i^0 と n_i^1 はそれぞれ $\alpha/2$ のポアソン分布に従う. $n_i^0 = n_i^1$ となる条件はポアソン分布の二乗となる.

と計算できる. $I_0(x)$ は 0 次の修正ベッセル関数である.

N_f の平均数は $\overline{N_f} = \rho N$ なので, 基底状態のエントロピー S , すなわち基底状態の個数の対数は

$$S = \overline{\frac{1}{N} \ln n} = \overline{\frac{N_f}{N} \ln 2} = \rho \ln 2. \quad (71)$$

となる. $\alpha = 0$ では $\ln 2$ の全ての状態が解であるが, $\alpha > 0$ では α の指数関数的に減少する.

3.2 $K = 2$ の場合

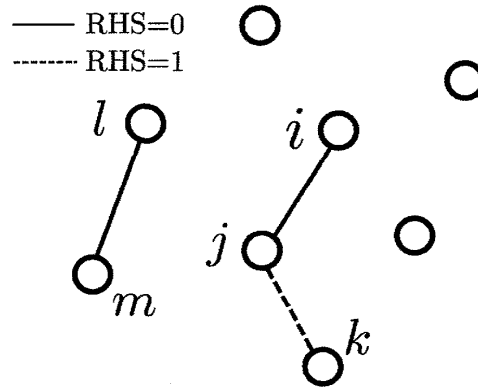


図 12: 2-XORSAT 問題のグラフ表示.

次に $K = 2$ の場合を解析する. 2-XORSAT はグラフ表現が可能である. 変数の数を N , 方程式の数が M のとき, このセットは頂点 N , エッジ M 個のグラフでかくことができる. 例えば,

$$\begin{cases} x_i + x_j = 0 \\ x_j + x_k = 1 \\ x_l + x_m = 0 \end{cases} \quad (72)$$

という問題は図 12 のグラフで表現できる.

α を大きくすると, このグラフの構造が質的に変わることが知られている. いまエッジの種類 (右辺が 0 か 1 かで 2 種類ある) は考えないことにして, 頂点どうしがつながっているかどうかだけに注目する. それぞれの頂点に接続するエッジの数を ν とすると, これは平均 $c = 2\alpha$ のポアソン分布に従う.

$$P(\nu) = e^{-2\alpha} \frac{(2\alpha)^\nu}{\nu!}. \quad (73)$$

このグラフに対して, 次のことが数学的に分かっている.

- $c < 1$ のとき, ほとんどのグラフは有限で木構造をもつ. 最大クラスターサイズ $V_{\max} = \frac{\ln N}{c-1-\ln c}$
- $c = 1$ のとき, $V_{\max} \sim O(N^{2/3})$.

- $c > 1$ のとき, 唯一のジャイアントコンポーネントが存在し, そのグラフのサイズは $V_G = \gamma(c)N$. ここで γ は $1 - \gamma = e^{-c\gamma}$ の解.

$c > 1$ のとき, γ はランダムグラフ上のイジング模型の $T = 0$ ででてきた磁化に関する決定方程式と同じ表式でかけていることに注目しよう. イジング模型の解析では, $\gamma = 1 - r_0$ が有限の有効場がでてくる確率であった. その部分は $T = 0$ ですべて同じ符号になりグラフの大きさを出すから, γ の決定方程式は数学の結果と一致するのである.

$K = 2$ の SAT-UNSAT 転移 上記のグラフの性質から, $c = 1(\alpha_c = 1/2)$ がジャイアント・コンポーネントがでてくる転移 (パーコレーション転移) に対応し, $\alpha < \alpha_c$ のときは系にはパーコレートクラスターは存在せず, $P_{\text{SAT}} > 0$ (SAT 相) であると予想できる. この領域で $P_{\text{SAT}}(\alpha)$ を具体的に計算する.

もしグラフが木になっているとすると, ルートから値を決めていくことで必ず SAT 解が作れる. しかし, もしグラフにループが含まれているとつじつまが合わない場合がでてきて, P_{SAT} は 1 より小さくなる (図 13). よって P_{SAT} を計算するためには, ループ構造をもつグラフを数えあげることが必要である.

いま, 全体のグラフ G 中のサブグラフ $G'(E, V)$ の平均数 $N(E, V)$ は, N 個の頂点から V 個選んでエッジを E 本おき, そのまわりにエッジを置かない場合の数であるから,

$$\begin{aligned} N(E, V) &= \binom{N}{V} \left(\frac{2\alpha}{N} \right)^E \left(1 - \frac{2\alpha}{N} \right)^{V(N-V)} \\ &\simeq N^{V-E} \frac{(2\alpha)^E}{V!} e^{-2\alpha V} \end{aligned} \quad (74)$$

となる (N は十分に大きいとしてスターリングの公式を用いた). この式から, 次のことがわかる.

- $V - E = 1$ のときは木構造しかないが, それが $O(N)$ 個存在する.
- $V - E = 0$ のとき, これはループ構造に対応するが, それは $O(1)$ 個存在し, $N \rightarrow \infty$ でも有限である.
- $V - E \leq -1$ のとき, 2 つ以上のループがあるが, $N \rightarrow \infty$ で存在しなくなる.

先ほど述べたように, 木の場合 SAT 解は常に構成できる. ループ構造の場合, ある頂点からループに沿ってきめていくと, 戻ってきたときに確率 $1/2$ で矛盾が生じるので, 確率 $1/2$ で SAT 解がある (図 13).

以上より, $P_{\text{SAT}}(N, \alpha)$ は全体のグラフ G のなかにあるループ構造をもったグラフの数 $C(G)$ を用いて,

$$P_{\text{SAT}}(N, \alpha) = \left\langle \left(\frac{1}{2} \right)^{C(G)} \right\rangle \quad (75)$$

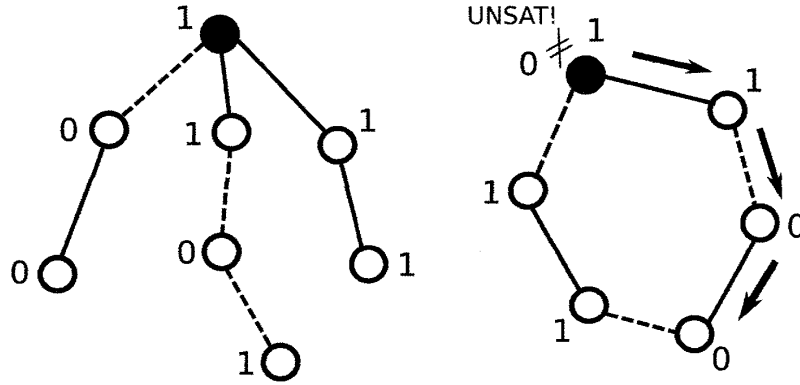


図 13: (左) 木構造の場合, 順番に決めていくことで SAT 解は必ず構成できる. (右) ループ構造の場合, 図の黒丸から時計回りに決めていくと, 黒丸に戻ってくるのエッジの種類によって確率 $1/2$ で矛盾が生じる.

で与えられる. 長さ L のループの平均数は,

$$N_L = \left(\frac{2\alpha}{N}\right)^L \frac{N(N-1)\cdots(N-L+1)}{2L} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{(2\alpha)^L}{2L} =: \Lambda_L \quad (76)$$

である. 分母の $2L$ はループの始点と向きの選び方に対応する. ここで, エッジの割合は小さいのでループは密に存在することなく局所的に存在することを仮定をする. このとき, それぞれのループは独立事象とみなせて, 長さ L のループが存在する確率はポアソン分布,

$$P(c) = e^{-\Lambda_L} \frac{\Lambda_L^c}{c!} \quad (77)$$

に従う. よって求めたい $P_{\text{SAT}}(\alpha)$ は,

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} P_{\text{SAT}}(\alpha) &= \prod_{L \geq L_0} \left(\sum_{c \geq 0} e^{-\Lambda_L} \frac{1}{c!} \Lambda_L^c \left(\frac{1}{2}\right)^c \right) \\ &= \prod_{L \geq 2} e^{-\Lambda_L/2} = \prod_{L \geq 2} \exp \left[-\frac{(2\alpha)^L}{4L} \right] = \exp \left[-\sum_{L \geq 2} \frac{(2\alpha)^L}{4L} \right] \\ &= e^{\alpha/2} (1 - 2\alpha)^{1/4} \end{aligned} \quad (78)$$

となる ($L_0 = 2$ はループを形成する最小の数). これから, $\alpha_c = 1/2$ で SAT 相から UNSAT 相に移り変わる SAT-UNSAT 転移がおきることが分かる (図 14).

最後に, $K = 2$ の場合はスピン系, あるいは格子ガス系へのマッピングが可能であることを紹介しておく. ブール変数を用いてスピン変数 $\sigma_i = 2x_i - 1$ をつくと, 充足しない時にエネルギーがあがるようなエネルギー関数として $E = \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$ とできる. ここで J_{ij} は方程式の右辺に合わせて $\pm J$ の値をとるとする. これにより, $T \rightarrow 0$ でエネルギーが $-JM$ のときに SAT 解が存在したことになる.

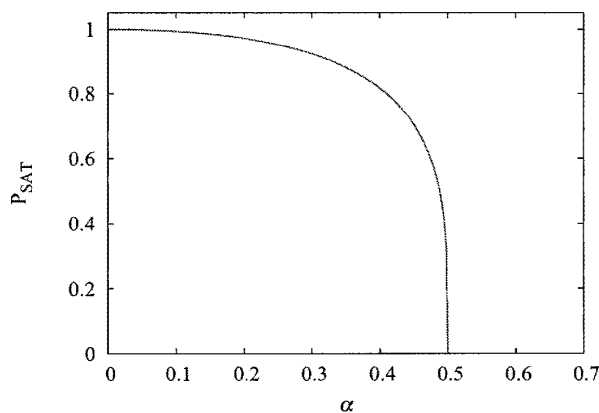


図 14: N が十分大きいときの P_{SAT} の漸近形 ($K = 2$).

3.3 $K = 3$ の場合

3.3.1 問題設定

$K = 2$ の場合はジャイアント・コンポーネント (パーコレーション) に由来する SAT-UNSAT 転移が起きたが, $K = 3$ の場合はまた違った起源をもつ SAT-UNSAT 転移が起きる. 結論を先にかくと, P_{SAT} は $N \rightarrow \infty$ のとき, $\alpha < \alpha_c \simeq 0.92$ で $P_{\text{SAT}} \rightarrow 1$, $\alpha_c < \alpha$ で $P_{\text{SAT}} \rightarrow 0$ となる (図 15).

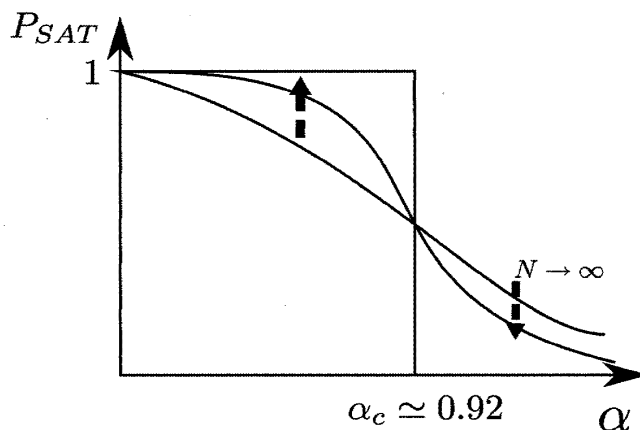


図 15: $K = 3$ の P_{SAT} .

$K = 3$ のときは, $x_i + x_j + x_k = 0$ という制約条件を含む問題はグラフで表現すると, 図 16 のような 2 種類の頂点をもつ 2 部グラフと呼ばれるグラフで表せる. $K = 2$ のときはループができたことが問題だったが, $K = 3$ のときは図のようにループからはみ出した部分 (頂点 j など) で調整できるため, ループ構造が本質的な役割をもつわけではない. $K = 2$ の場合と異なり, 別のグラフの幾何学的性質が重要になることが予想できる.

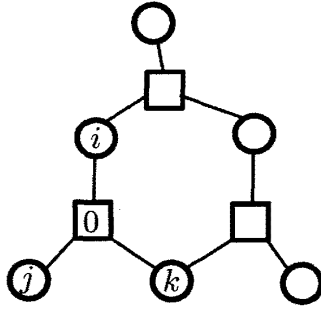


図 16: 3-XORSAT に対応する 2 部グラフ.

モーメント不等式による評価 まず P_{SAT} の大ざっぱな評価をするために、モーメント不等式を導入する. n をランダムな正の整数, P_n を n の確率分布, n の q 次モーメントを $\langle n^q \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n^q P_n$, $P_r(n \geq 1) := \sum_{n=1}^{\infty} P_n = 1 - P_0$ としたとき、一般に

$$\frac{\langle n \rangle^2}{\langle n^2 \rangle} \leq P_r(n \geq 1) \leq \langle n \rangle \quad (79)$$

が成り立つ. いま, n を SAT 解の個数とすると, $P_{\text{SAT}} = P_r(n \geq 1)$. なので,

$$P_{\text{SAT}} \leq \langle n \rangle \leq \underbrace{\frac{2^N}{2 \cdots 2}}_{M \text{ 個}} = \exp[(N - M) \ln 2] = \exp[N(1 - \alpha) \ln 2]. \quad (80)$$

ここで、一つの方程式に対して 1 変数分自由度が減る場合で上側から不等式をおさえた. レート関数でみると, $\omega(\alpha) \geq (\alpha - 1) \ln 2$. これからもし α_c があったとすると, それは 1 以下であることがわかる. この結論は K によらない. 実際 $K = 2$ のとき $\alpha_c = 1/2$ でこの条件を満たしている.

解析の指針 ある 3-XORSAT の方程式のセットをみると, 変数の中には, 「大事な変数」と「そうでない変数」があることがわかる. 例えば方程式のセットのなかに, x_1 が一度しかあらわれないとする. いま, M 個の方程式のセットを $F(\{x\})$, x_1 がでてくる方程式を除いたものを $F_1(\{x \setminus x_1\})$ と書く. すると明らかに F が SAT であることと F_1 が SAT であることは同値である. この意味で一度しか現れない変数は「大事ではない」といえる. 大事でない変数の数は, 平均的に

$$3M(1 - 1/N)^{3M-1} \simeq 3Me^{-3\alpha} \quad (81)$$

個だけある. 大事でない変数が現れる方程式を取り除くと, 新たに 1 個しかあらわれない変数がでてくる. それをさらに取り除く, と繰り返していくと, どの変数も 2 つ以上現れる方程式のセット F_2 が得られる. こうして, F に対する 3-XORSAT 問題を F_2 に対する 3-XORSAT 問題に置き換えられた.

以下で, (1) F_2 にはどれくらい方程式があるか, また (2) 解の個数はどれだけあるかをレプリカ法によって解析していく.

3.3.2 レプリカ法による解析

結果 先にこれからの計算の結果を書いておく.

結果 A

$$\alpha_d = \min_b \frac{-\ln(1-b)}{3b^2} \simeq 0.8184 \quad (82)$$

となる α_d があって, $\alpha < \alpha_d$ のとき $F_2 \rightarrow \emptyset (N \rightarrow \infty)$.

結果 B $\alpha > \alpha_d$ なら $O(N)$ 個残り, F_2 の解の個数が $e^{NS(\alpha)}$ ある. ここで,

$$S(\alpha) = (b - 3\alpha b^2 + 2\alpha b^3) \ln 2 \quad (83)$$

であり, b は $1 - b = e^{-3\alpha b^2}$ の解である.

F_2 が SAT ということは, $S(\alpha) \geq 0$ を意味する. 数値的に解くと $\alpha_c \simeq 0.9179$ となり, この値は数値実験によって求めた SAT-UNSAT 転移点とよく一致している.

F_2 が分かったとすると, ここから F を求めることができる. 先ほどの F から F_2 を作った手順の逆を行い, 1 つずつ方程式を戻す. そのときに加わる変数の数 m によって縮重度が決まっていて, (1) $m = 1$ のとき, つまり 1 つだけ変数を加えるときにはその方程式を満たすように加える変数を決めるので, F に戻す解は唯一にきまる. (2) $m = 2$ のときは 3 つの変数のうち 1 つだけ値が決まっているので $2^{2-1} = 2$ 個, (3) $m = 3$ のときは 3 つの変数が他では使われていないので, $2^{3-1} = 4$ 個になる. この手順で戻った数を $e^{NS_{\text{in}}(\alpha)}$ と書くと, $S_{\text{in}}(\alpha) = (1 - \alpha) \ln 2 - S(\alpha)$ となる (**結果 C**).

3.3.3 解の個数に対するレプリカ理論

解の個数 n をエントロピー表現 ($n = e^{NS}$) したとき, エントロピーの確率分布が $e^{-N\omega(S)}$ と書けるとすると,

$$\begin{aligned} \langle n^q \rangle &= \int dS e^{-N\omega(S)} n^q = \int dS \exp[N(Sq - \omega(S))] \\ &\simeq \exp[N \max_S (Sq - \omega(S))] =: e^{Ng(q)} \end{aligned} \quad (84)$$

となり, $\omega(S)$ のルジャンドル変換 $g(q)$ で表せるので, 典型的なエントロピーは,

$$S^* = \left. \frac{d}{dq} g(q) \right|_{q=0} \quad (85)$$

で与えられる. ここで平均 $\langle \dots \rangle$ はランダムな方程式に対する平均である. これはまた以下のように考えることができる. 解の個数は問題 F に依存する確率変数であるが, 1 自由度あたりのエントロピーに対して自己平均性の仮定をすると, 評価すべきは, $S^* = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln n \rangle$ である. これをレプリカ法を用いて, $g(q = 0) = 0$ であることに注意すると,

$$S^* = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{d}{dq} \langle n^q \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{d}{dq} g(q). \quad (86)$$

これから S^* を求めることを目的に, 問題を

1. $g(q)$ を整数 q で計算する. これは解の個数の q 次モーメントに対応する.
2. これを, 非整数の q に拡張する.
3. 実数の q について求まると思って, S^* を評価する.

の順番で解いていく.

ここでさらに問題の簡単化を行う. 方程式の右辺は確率 $1/2$ でランダムであるが, これをすべて 0 の一様系にする. 一様系の解の個数 n_h は $n_h \geq n$ である. このような簡単化で解の性質は変わらないことを仮定する (最終的には数値実験との比較でそれを正当化する). また, 一般の正の整数 q に対して, もとのランダム化された問題の個数 n と n_h の間には,

$$\langle n^{q+1} \rangle = \exp(N(1 - \alpha) \ln 2) \langle n_h^q \rangle \quad (87)$$

の関係がある.

一様系の n の q 次モーメント q 次モーメントは,

$$n_h^q = \left[\sum_X \prod_{l=1}^M e_l(X) \right]^q. \quad (88)$$

ここで $e_l(X)$ は変数の配位 X が l 番目の方程式を充足 (SAT) するときに 1 を返し, そうでない (UNSAT) とき 0 を返す関数である. X のなかには $x_1, x_2, \dots, x_N$ の具体的な配位が入る. q は正の整数である. 上式を次のように書き直す.

$$\sum_{X_1 \dots X_q} \prod_{l=1}^M \prod_{a=1}^q e_l(X_a). \quad (89)$$

ここで X_a ($a = 1, \dots, q$) は X のレプリカである. レプリカベクトルを, $\vec{x}_i := (x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^q)$ で導入する. ランダム平均をとると,

$$\langle n_h^q \rangle = \sum_{X_1, \dots, X_q} \left\langle \prod_{a=1}^q e_l(X_a) \right\rangle^M = \sum_{X_1, \dots, X_q} \left[\frac{1}{N^3} \sum_{1 \leq i, j, k \leq N} \delta_{\vec{x}_i + \vec{x}_j + \vec{x}_k} \right]^M. \quad (90)$$

$\delta_{\vec{x}}$ は $\vec{x}$ のすべての成分が 0 のとき 1 , そうでないとき 0 を返す関数である.

レプリカ配位 次に, レプリカ配位 $\{X_1, \dots, X_q\}$ を導入する. そして, レプリカベクトルの頻度分布 $\rho(\vec{x})$ を, 変数 x_i , ($i = 1, \dots, N$) が $\vec{x}$ に等しい頻度として,

$$\rho(\vec{x}) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x}, \vec{x}_i) \quad (91)$$

で定義する. これがランダムグラフの解析で導入したモナソンの $C(\vec{s})$ 関数に対応する. もちろん $\sum_{\vec{x}} \rho(\vec{x}) = 1$ である.

ここで状態和を ρ を介して計算する.

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^3} \sum_{1 \leq i, j, k \leq N} \delta_{\vec{x}_i + \vec{x}_j + \vec{x}_k} &= \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{x}, \vec{x}'} \sum_{i, j, k} \delta(\vec{x}, \vec{x}_i) \delta(\vec{x}', \vec{x}_j) \delta_{\vec{x} + \vec{x}' + \vec{x}_k} \\ &= \sum_{\vec{x}, \vec{x}'} \rho(\vec{x}) \rho(\vec{x}') \rho(\vec{x} + \vec{x}'). \end{aligned} \quad (92)$$

つまり, $\langle n_h^q \rangle$ への $\{X\}$ の寄与は配位には直接依存しなくて, $\rho(\vec{x})$ を介して和がとれる形になっている. 計算すると,

$$\begin{aligned} \langle n_h^q \rangle &= \sum_{X_1 \dots X_q} \left[\sum_{\vec{x}, \vec{x}'} \rho(\vec{x}) \rho(\vec{x}') \rho(\vec{x} + \vec{x}') \right]^M \\ &= \sum_{\{\rho\}} \exp \left[-N \sum_{\vec{x}} \rho(\vec{x}) \ln \rho(\vec{x}) + M \ln(\rho(\vec{x}) \rho(\vec{x}') \rho(\vec{x} + \vec{x}')) \right] \\ &= \sum_{\{\rho\}} \exp[NG(\{\rho\}; q, \alpha)] \end{aligned} \quad (93)$$

となり, ρ のエントロピー項がでてくる. 結局, 未定乗数を含めた形で

$$G(\{\rho\}; q, \alpha) = - \sum_{\vec{x}} \rho(\vec{x}) \ln \rho(\vec{x}) + \alpha \ln \left(\sum_{\vec{x}, \vec{x}'} \rho(\vec{x}) \rho(\vec{x}') \rho(\vec{x} + \vec{x}') \right) + \lambda \left(1 - \sum_{\vec{x}} \rho(\vec{x}) \right) \quad (94)$$

の鞍点評価をすればよく,

$$0 = \frac{\delta G}{\delta \rho} \quad (95)$$

の連立方程式を解けばよい.

この鞍点方程式を解くために, $\rho(\vec{x})$ に条件を課す. $\rho(\vec{x})$ の具体的な形として, 2つの極限分布, (1) 一様分布 $\rho(\vec{x}) = 1/2^q$ と (2) 集中型分布 $\rho(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$ を想定する ($\vec{x}_0 = \vec{0}$ とする). (1) と (2) の分布を混ぜて解を探索しようというのがアイデアである. すなわち

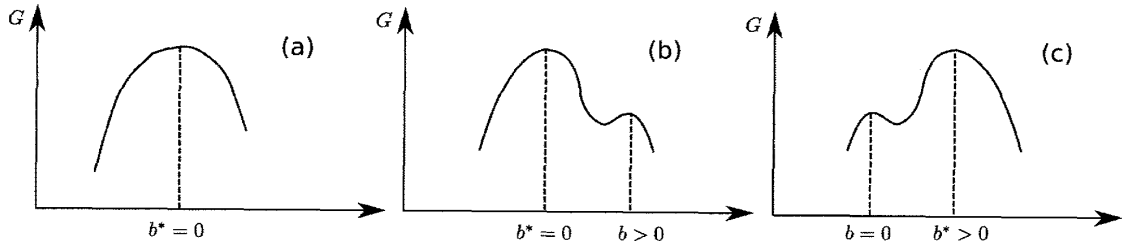
$$\rho^*(\vec{x}) = (1-b) \frac{1}{2^q} + b \delta_{\vec{x}}, \quad 0 \leq b \leq 1 \quad (96)$$

として, b をパラメータとして鞍点方程式の解空間を制限し解を探索する. $b = 0$ なら一様分布, $b = 1$ なら集中分布に相当する. 試行解 (96) を式 (94) に代入すると,

$$\begin{aligned} G(b; q, \alpha) &= - \left(1 - \frac{1}{2^q} \right) (1-b) \ln \frac{(1-b)}{2^q} - \left(b + \frac{1-b}{2^q} \right) \ln \left(b + \frac{1-b}{2^q} \right) \\ &\quad + \alpha \ln \left(b^3 + \frac{1-b^3}{2^q} \right) \end{aligned} \quad (97)$$

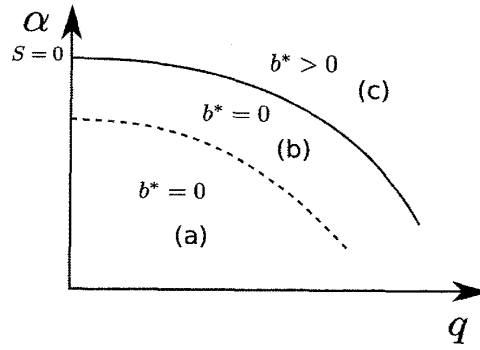
が求まる. 結局, 鞍点解をもとめる問題が, b に関する $G(b; q, \alpha)$ の最大化問題

$$g(q, \alpha) = \max_{0 \leq b \leq 1} G(b; q, \alpha) \quad (98)$$

図 17: 各領域での $G(b)$ の概形.

に帰着された.

結果は3つの領域に分けられ, (a) $\alpha < \alpha_d(q)$ のとき, $G(b=0; q, \alpha) = q(1-\alpha) \ln 2$ で, 一様分布 ($b=0$) のところが一番大きな G を与える. (b) 中間の $\alpha_d(q) < \alpha < \alpha_c(q)$ のところでは, $b=0$ が一番大きい, 新たな極大値が現れる. (c) $\alpha > \alpha_c(q)$ のときは $b > 0$ のところが大きくなる (図 17, 18).

図 18: $\alpha - q$ 領域での相図.

典型的エントロピー 最後に, 典型的エントロピー S^* を計算する.

$$\begin{aligned}
 S^*(\alpha) &= \lim_{q \rightarrow 0} \frac{d}{dq} g(q) = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{d}{dq} \left(\max_b G(b; q, \alpha) \right) \\
 &= \max_b [-(1-b) \ln 2 \times \ln(1-b) + (1-b) \ln 2 - \alpha(1-b^3) \ln 2] \\
 &= \ln 2 \times \max_b [(1-b)(1 - \ln(1-b)) - \alpha(1-b^3)].
 \end{aligned} \tag{99}$$

b を決める方程式は,

$$0 = \ln(1-b) + 3\alpha b^2 \Rightarrow 1-b = e^{-3\alpha b^2} \tag{100}$$

となる. この解を b^* とすると,

$$S^*(\alpha) = (1-\alpha) \ln 2 - (b^* - 3\alpha b^{*2} + 2\alpha b^{*3}) \ln 2$$

となる.

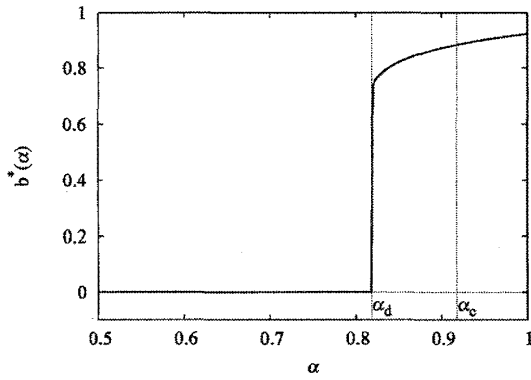


図 19: $q = 0$ のときの $G(b)$ の極値方程式の解 b^* の α 依存性. $b^* = 0$ の解は常に存在する. 一方で, $\alpha = \alpha_d$ では $b^* \neq 0$ の解が一次転移的に出現する.

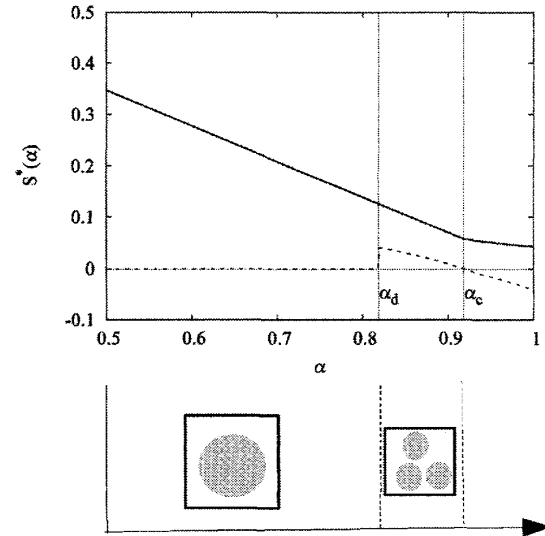


図 20: エントロピーの評価の α 依存性. G を極大にする解は, $\alpha < \alpha_c$ で $(1-\alpha) \ln 2$ (実線) を与える. また, $\alpha > \alpha_d$ では準安定解として, クラスターの個数エントロピーの寄与 (破線) が存在する. そのときのクラスター化の概念図を下に示す.

この結果は次のように解釈できる. まず, $\alpha < \alpha_d$ では, $b^* = 0$ が唯一の解となり, そのときの典型的なエントロピーは, $(1-\alpha) \ln 2$ である. これはモーメント不等式の上限と評価と一致する. つまり, 方程式 F の右辺の詳細に依らずに, ランダム系と一様系が同じ答えであることわかる. これはまた方程式の刈り込みを行った F_2 が最後には $\emptyset$ になることを示唆している. また, $\alpha_d < \alpha < \alpha_c$ では, 極大解は依然として $b^* = 0$ であるが, それ以外に $b^* \neq 0$ の解も存在する. 実は, $\rho(\vec{x})$ は秩序変数としての意味をもち, この問題では $[0,1]$ に規格化された解のハミング距離に相当することがわかる. $b \neq 0$ の解が存在するところでは ρ で指定されるハミング距離をもつクラスターに分かれて存在しており, 全エントロピーはクラスターの個数部分とそれぞれのクラスター内部のエントロピーの和で表現されていると考えられる (図 20). クラスターの個数からくるエントロピーがゼロになる値として, $\alpha = \alpha_c$ は定義される. $\alpha > \alpha_c$ では, $b^* \neq 0$ の解が極大解を与える. ここでは, 一様系の問題には解は存在するが, それはもはやランダム化された問題では解にはなり得ない. 実際に, P_{SAT} のレート関数を評価すると, $\alpha > \alpha_c$ で非負になることが示される.

以上, 3-XORSAT のレプリカ法による解析を簡単に解説した. より詳しくは, 文献 [10, 11] を参照されたい. また, キャビティ法や動的性質 (ある特定のアルゴリズムを用いたときの探索の様子) に関しても詳しい議論がされている. それらの結果も解空間のクラスター構造の理解に相補的な役割を果たしている (文献として, [13, 14] を参照).

謝辞

ランダムグラフの数値実験は、千葉康一氏（東京大学総合文化研究科）によるものである。福島は文部科学省 科学研究費補助金・特定領域研究 DEX-SMI(No.18079004) のサポートを受けている。

参考文献

- [1] Y. Fu and P. W. Anderson, J. Phys. A **19** (1986), 1605.
- [2] M. Mézard and G. Parisi, J. Physique **47** (1986), 1285.
- [3] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, Jr., M. P. Vecchi, Science **220** (1983), 671.
- [4] S. Kirkpatrick and B. Selman, Science **264** (1994), 1297.
- [5] M. Weigt and A. K. Hartmann, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 6118; M. Weigt and A. K. Hartmann, Phys. Rev. E **63** (2001), 056127.
- [6] G. Biroli, M. Mezard, Phys. Rev. Lett. **88** (2002), 025501.
- [7] M. Mézard, G. Parisi, M.A. Virasoro, *Spin glass theory and beyond*, World Scientific (1987).
- [8] R. Monasson, J. Phys. A **31** (1998), 513.
- [9] M. Mézard and G. Parisi, Eur. Phys. J. B **20** (2001), 217.
- [10] M. Mézard, F. Ricci-Tersenghi and R. Zecchina, J. Stat. Phys. **111** (2003), 505.
- [11] F. Ricci-Tersenghi, M. Weigt and R. Zecchina, Phys. Rev. E **63** (2001), 026702.
- [12] H. Nishimori, *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction*, Oxford Univ Pr (2001).
- [13] A. K. Hartmann, M. Weigt, *Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems: Basics, Algorithms and Statistical Mechanics*, Wiley-VCH (2005).
- [14] M. Mezard, A. Montanari, *Information, Physics, and Computation*, Oxford Univ Pr (2009).