数理解析研究所講究録
1532 巻 2007 年 136-143



京都大学数理解析研究所共同利用研究会「情報物理学の数学的構造」2006 年 6 月 28 日-30 日

# 単一サンプル系に関するレプリカ法とレプリカ対称性の破れについて[1]

東京工業大学・大学院総合理工学研究科　樺島祥介（Yoshiyuki Kabashima）
Dept. of Compt. Intell. & Syst. Sci.
Tokyo Institute of Technology

## 1　はじめに

レプリカ法は確率変数の非自然数べきに対するモーメントをべき指数に関する解析接続を通じて求めるテクニックである．このアイデアの原型は既に１９３０年代ハーディら数学者によって触れられている [1, 2, 3]．しかしながら，この方法が実際的に広く活用されるようになったのは１９７０年代半ば以降統計力学におけるスピングラス問題の解析に応用されてからであり，現在では「物理の方法」という認識が広く定着している．

物理学でレプリカ法が用いられるのは主に以下のような文脈である．詳細には立ち入らないが，例として $N$ 個のイジングスピン変数 $\boldsymbol{S} = (S_i) = \{+1, -1\}^N$ がハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{J}) = -\sum_{i>j} J_{ij} S_i S_j \tag{1}$$

によって特徴づけられるシェリントン・カークパトリック (SK) モデルを取り上げる．このモデルではスピン間相互作用の強さを表す結合定数 $J_{ij}$ は分布 $P(J_{ij}) \propto \exp\left[-NJ_{ij}^2/(2J^2)\right]$ に従ってランダムに抽出されたサンプル値であるとし，したがって，熱による $\boldsymbol{S}$ の確率的な運動に対して $\boldsymbol{J} = \{J_{ij}\}$ は凍結された（quenched）定数として振舞うと仮定する．これは $\boldsymbol{S}$ の熱平衡状態が $\boldsymbol{J}$ で条件付けされたボルツマン分布

$$P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{J}) = \frac{e^{-\beta H(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{J})}}{Z(\boldsymbol{J})} \tag{2}$$

により記述される，とする仮定である．ただし，$\beta$ は絶対温度 $T$ の逆数に比例する逆温度パラメータであり，$Z(\boldsymbol{J}) = \sum_{\boldsymbol{S}} e^{-\beta H(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{J})}$ はサンプル値 $\boldsymbol{J}$ に対する分配関数である．

物理学では微視的な相互作用のサンプル値 $\boldsymbol{J}$ 毎のシステムの詳細な性質よりも適切な熱力学的極限 $N \to \infty$ において $\boldsymbol{J}$ の典型的な出方に対し共通する巨視的な振る舞いに目を向けることが多い．それは多くの場合自由エネルギー密度 $f(\boldsymbol{J}) = -\lim_{N\to\infty} 1/(N\beta) \ln Z(\beta)$ の $\boldsymbol{J}$ に関する平均

$$\overline{f(\beta)} = -\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N\beta} \overline{\ln Z(\beta)} = -\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N\beta} \int \prod_{i>j} dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln Z(\boldsymbol{J}) \tag{3}$$

の評価に帰着される．ここで $\overline{\cdots} = \int \prod_{i>j} dJ_{ij} P(J_{ij}) (\cdots)$ は $\boldsymbol{J}$ に関する平均を表す記号であり，ボルツマン分布 (2) による熱平均 $\langle \cdots \rangle = \sum_{\boldsymbol{S}} P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{J}) (\cdots)$ と区別してしばしば配位平均と呼ばれる．

[1] 共同研究者：福島孝治（東大総合文化），金子勇次（東工大知能システム科学専攻）

残念ながら，式 (3) は確率変数である $Z(\boldsymbol{J})$ に関する対数の平均を含むため評価が難しい．そこで登場するのがレプリカ法である．具体的には，まず，恒等式

$$\overline{\ln Z(\beta)} = \lim_{n\to 0} \frac{\partial}{\partial n} \ln \overline{Z^n(\beta)} \tag{4}$$

を用いて，分配関数の対数に関する平均評価を実数（複素数でも良い）のべき指数 $n$ に対するモーメント評価に帰着させる．さらに，$n = 1, 2, 3, \ldots$ のときに限っては，モーメント評価がべき展開の公式を用いることで形式的に $n$ 個の複製（レプリカ）系 $\boldsymbol{S}^1, \boldsymbol{S}^2, \ldots, \boldsymbol{S}^n$ の実効的な分配関数の計算

$$\begin{aligned}\overline{Z^n(\beta)} &= \sum_{\boldsymbol{S}^1,\boldsymbol{S}^2,\ldots,\boldsymbol{S}^n} \overline{\exp\left[-\beta \sum_{a=1}^{n} H(\boldsymbol{S}^a|\boldsymbol{J})\right]} \\ &\equiv \sum_{\boldsymbol{S}^1,\boldsymbol{S}^2,\ldots,\boldsymbol{S}^n} \exp\left[-\beta H_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{S}^1, \boldsymbol{S}^2, \ldots, \boldsymbol{S}^n; \beta)\right] \end{aligned} \tag{5}$$

に帰着されることに着目する．ただし，$H_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{S}^1, \boldsymbol{S}^2, \ldots, \boldsymbol{S}^n; \beta)$ は展開後に得られるボルツマン因子 $\exp\left[-\beta \sum_{a=1}^{n} H(\boldsymbol{S}^a|\boldsymbol{J})\right]$ を配位平均した結果得られる $n$ レプリカ系に関する有効ハミルトニアンである．もともとのレプリカ系は統計的に独立であったにも関わらず配位平均の結果得られる有効ハミルトニアンには一般にレプリカ間の相互作用が含まれることに注意したい．有限系における式 (5) の評価は容易ではないが分配関数の形をしているため $N \to \infty$ の極限では統計力学で知られているさまざまな技巧を駆使して解析的評価が可能になる（場合がある）．そこで，$n = 1, 2, \ldots$ に対して，式 (5) を（統計力学の計算法をはじめとする）何らかの方法で評価したのち，その結果を実数（あるいは複素数）の $n$ に解析接続した表現を用いて式 (4) を経由して平均自由エネルギー密度 (3) を求める方策が考えられる．物理学では通常この一連の手続きのことを「レプリカ法」と呼んでいる．

以上のことからもわかるように，レプリカ法が有名になった物理の問題ではレプリカ法はほとんどの場合

- 熱力学的極限において
- 分配関数の対数に関する配位平均を
- 統計力学のテクニックを駆使して

評価する，という形で現れる．そのためレプリカ法に関する考察も以上のような文脈を前提としたものが多い [4, 5].

しかしながら，レプリカ法の核心は，自然数から実数（あるいは複素数）への解析接続を通して一般化されたモーメントを求めるというアイデアにあり，本来，熱力学的極限，対数の平均，統計力学のテクニックなどとは独立なものである．もちろん，「（自発的な）レプリカ対称性の破れ（Replica Symmetry Breaking: RSB）」などレプリカ法に関する興味深い事柄はこれらの要因がなければ生じない．けれども，だからと言って熱力学的なシステムのみを考察していたのでは

- 有限系において
- ゼロ極限でないべき指数（レプリカ数）$n$ に対し
- 統計力学的なテクニックを用いなくても

現れる数理を見逃してしまう可能性がある．ひょっとすると，それらの中には熱力学的極限に現れる現象の理解に役立つものが含まれているかもしれない．そこで，本稿では物理におけるレプリカ法の計算過程に現れる分布にヒントを得た簡単なモデルシステムを数理統計学的観点から眺めることで，レプリカ法の周辺にある数理の意味や不思議さについて考察したい．

## 2 指数型分布族と自由エネルギー形式

まず考察の準備として指数型分布族と自由エネルギーについて触れておく．$N$ 次元の確率変数 $\boldsymbol{S}$ が従う確率分布が，連続パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を用いて

$$P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\theta})} P_0(\boldsymbol{S}) \exp\left[\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{O}(\boldsymbol{S})\right] \tag{6}$$

のように表現されるとする．このような分布を指数型分布と呼び，$\theta$ をいろいろな値に変化させて作られる分布の族を指数型分布族と呼ぶ．ただし，$Z(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\boldsymbol{S}} P_0(\boldsymbol{S}) \exp\left[\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{O}(\boldsymbol{S})\right]$ である．

指数型分布は様々な場面に登場する．たとえば，逆温度 $\beta$ をパラメータと考えると，統計力学のボルツマン分布は指数型分布族を構成している．指数型分布族に限らず，連続パラメータを含む分布族は多様体を成し，幾何構造の導入が可能である（情報幾何学）[6]．指数型分布族はその代表的な研究対象である．

指数型分布族が特別視される理由の一つに，しばしば自由エネルギー形式と称される構造の存在が挙げられる [7]．指数型分布族に対し

$$\Psi(\boldsymbol{\theta}) = -\ln Z(\boldsymbol{\theta}) \tag{7}$$

ならびに

$$\phi(\boldsymbol{m}) = \max_{\boldsymbol{\theta}} \left\{\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{m} + \psi(\boldsymbol{\theta})\right\} \tag{8}$$

によって，ヘルムホルツ自由エネルギー $\Psi(\boldsymbol{\theta})$ およびギブス自由エネルギー $\phi(\boldsymbol{m})$ を定義する．これらの関数を用いると，平均値 $\langle O(\boldsymbol{S})\rangle$ が 1 階微分に関する公式

$$\langle O(\boldsymbol{S})\rangle = -\left.\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta}\right|_{\boldsymbol{\theta}\to 0} = \underset{\boldsymbol{m}}{\operatorname{argmax}} \left\{\Phi(\boldsymbol{m})\right\} \tag{9}$$

を通じて，また，確率変数のサンプル値 $\{\boldsymbol{S}_t\}_{t=1}^{T}$ からのパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の推定に関する原理的な精度の限界を与えるフィッシャー情報行列 $\left\langle \partial_{\theta_i} \ln P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{\theta}) \partial_{\theta_j} \ln P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{\theta}) \right\rangle$ が 2 階微分に関する公式

$$\left\langle \partial_{\theta_i} \ln P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{\theta}) \partial_{\theta_j} \ln P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{\theta}) \right\rangle = -\partial_{\theta_i}\partial_{\theta_j}\Psi(\boldsymbol{\theta}) = \left(\partial_{m_i}\partial_{m_j}\Phi(\boldsymbol{m})\right)^{-1} \tag{10}$$

を通じて，それぞれ評価できる．

$\Psi(\boldsymbol{\theta})$ や $\Phi(\boldsymbol{m})$ を厳密に評価するには，平均やフィッシャー情報行列を評価するのと同様全状態に関する和が必要となる．そのため，この形式に計算量的な観点からのメリットが必ずしもある訳ではない．しかしながら，式 (9) や (10) は平均やフィッシャー情報行列など確率分布に関する重要な情報が自由エネルギーという 1 つの関数[2]に集約されることを示しており，いわば解析を行う際の攻撃目標が明確であるという都合のよさがある．その意味で，指数型分布族は構造がわかりやすく系統的な解析が比較的容易な分布である，ということができる．

[2] $\Psi(\boldsymbol{\theta})$ と $\Phi(\boldsymbol{m})$ はルジャンドル変換で結びついているのでどちらか 1 つだけが評価できれば他は容易にもとまる．

## 3 レプリカ系への拡張

数理統計学的にレプリカ法を考察するにあたり，本稿では与えられた分布 $P_0(\boldsymbol{S})$ に対し，その $n$ 個の独立なレプリカ系に相互作用を導入してできる拡張された分布

$$P(\{\boldsymbol{S}^a\}|\boldsymbol{\theta}) = Z_n^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \prod_{a=1}^{n} P_0(\boldsymbol{S}) \exp\left[\sum_{i=1}^{N} \theta_i \sum_{a>b} S_i^a S_i^b\right] \tag{11}$$

(ただし，$Z_n(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\boldsymbol{S}^1,\boldsymbol{S}^2,\ldots,\boldsymbol{S}^n} \prod_{a=1}^{n} P_0(\boldsymbol{S}) \exp\left[\sum_{i=1}^{N} \theta_i \sum_{a>b} S_i^a S_i^b\right]$) を考える．このような分布を考える動機は2つある．

### 3.1 平均場近似の排除

SK モデルなど物理でレプリカ法が利用される多くの対象では quenched ランダムネスに関する配位平均の結果，本来独立であった $n$ 個のレプリカ系に実効的な相互作用が生じる．統計力学のレプリカ法では，このレプリカ間相互作用による計算困難を適当な平均場近似を導入することによって解決するが，同時に解析接続に関する要請から自己無撞着に定まる近似解にレプリカ添え字に関する入れ替え対称性（レプリカ対称性）を課す必要がある．最も素朴は仮定はすべてのレプリカ間の相対距離が同じであることを意味するレプリカ対称仮定である．ところが，レプリカ対称仮定を課した自己無撞着条件は，解析接続により可能となる極限操作 $n \to 0$ を行った結果，計算の過程で用いる近似の成立条件をときとして破る．これは AT(de Almeida-Thouless) 安定性の破れと呼ばれ，RSB が生じる1つのシナリオを与えると考えられている [8].

AT 安定性の破れはある種の摂動に対する熱力学的な不安定性を表すと考えられているが，配位平均を取ったあとに現れる実効的な系の，しかも解析接続の後に現れる条件なので物理的なイメージを抱きにくい．また，そもそも上のような議論では安定性の破綻が平均場近似に起因しているのか，それとも解析接続にまつわる数理に原因があるのかもすぐには判断できない．熱力学的な安定性とはシステムの熱平衡状態における性質が制御変数の微小変化に対して過剰に応答しないことを意味する．平衡統計力学では，システムの平衡状態は制御変数をパラメータとする指数型分布族であらわされ，制御変数の変化に対する応答の強さはフィッシャー情報行列によって表現される[3]．式 (11) のような分布族を考察する動機の一つは，近似を施さなくてもある程度議論を進めることができる性質の良いレプリカ間相互作用を含む分布族を人為的に構成し，その応答に関する感受率解析を通じて AT 条件とのつながりを模索したいからである．

### 3.2 タイムスケールと温度の異なる結合ランジュバン系

分布 (11) を考察するもう一つの理由は，[9, 10] などによって指摘されているようにこのような分布は解析の都合を目的とした人工的なモデルということにとどまらず，2つの分離されたタイムスケールを持つ結合ランジュバン系の定常分布という物理的実体と密接に関係していると考えられるからである．このようなシステムはガラス系 [11] や神経回路網モデル [12] などに関連してしばしば考察されており，物理的な観点からも興味深い研究対象である．

具体的には次のようなランジュバン方程式で記述される結合系を考える[4]．

$$\dot{S}_i = -\theta_i S_i + \frac{\partial}{\partial S_i} \ln P_0(\boldsymbol{S}) + \sqrt{\theta_i} z_i + \eta_i^S(t) \tag{12}$$

[3] 物理では感受率行列 (susceptibility matrix) と呼ばれることが多い．

[4] ここでは話を簡単にするため $S_i$ は連続変数であるとする．離散変数の場合は適当な離散確率過程を考える．

$$\tau_z \dot{z}_i = -T_z z_i + \sqrt{\theta_i} S_i + \eta_i^z(t) \tag{13}$$

ただし，$i = 1, 2, \ldots, N$ であり，$\left\langle \eta_i^S(t)\eta_j^S(t') \right\rangle = 2T_S\delta_{ij}\delta(t-t')$，$\left\langle \eta_i^z(t)\eta_j^z(t') \right\rangle = 2\tau_z T_z \delta_{ij}\delta(t-t')$，とする．$T_S$，$T_z$ は $\boldsymbol{S}$，$\boldsymbol{z}$ に加わる熱雑音の大きさを表す定数で直感的には温度のに対応する[5]．以下では特に $\boldsymbol{z}$ の時定数 $\tau_z$ が $\boldsymbol{S}$ の時定数（$= 1$）と比較して十分長い状況 ($\tau_z \gg 1$) を想定する．そのような場合には式 (12) においては遅い変数 $z_i$ を定数とみなし，式 (13) においては速い変数 $S_i$ を式 (12) から定まる定常分布での平均値で置き換える断熱近似を導入することができる[6]．$\boldsymbol{z}$ を定数とみなして得られる $\boldsymbol{S}$ の定常分布は

$$P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}) = Z^{-1}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}; T_S) P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) \exp\left[\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}\right] \tag{14}$$

である．ただし

$$Z(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}; T_S) = \sum_{\boldsymbol{S}} P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) \exp\left[\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}\right] \tag{15}$$

は $\boldsymbol{z}$ が与えられた際の速い変数 $\boldsymbol{S}$ に関する分配関数を表す．これを式 (13) において $S_i$ を定常分布 (14) による平均で置き換えた式に代入すると

$$\tau_z \dot{z}_i = \frac{\partial}{\partial z_i}\left(-T_z \frac{z_i^2}{2} + T_S \ln Z(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}; T_S)\right) + \eta_i^z(t) \tag{16}$$

が得られる．この実効的なランジュバン方程式で記述される系の定常分布は

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) &= \frac{e^{-\frac{|\boldsymbol{z}|^2}{2}} Z^{\frac{T_S}{T_z}}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}; T_S)}{\int d\boldsymbol{z} e^{-\frac{|\boldsymbol{z}|^2}{2}} Z^{\frac{T_S}{T_z}}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}; T_S)} \\ &= \frac{e^{-\frac{|\boldsymbol{z}|^2}{2}} \left(\sum_{\boldsymbol{S}} P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) e^{\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}}\right)^{\frac{T_S}{T_z}}}{\int d\boldsymbol{z} e^{-\frac{|\boldsymbol{z}|^2}{2}} \left(\sum_{\boldsymbol{S}} P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) e^{\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}}\right)^{\frac{T_S}{T_z}}} \end{aligned} \tag{17}$$

となる．さらに，ベイズの公式を用いると速い変数 $\boldsymbol{S}$ の定常分布

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{\theta}) &= \int d\boldsymbol{z} P(\boldsymbol{S}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}) P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) \\ &= \frac{\int d\boldsymbol{z} e^{-\frac{|\boldsymbol{z}|^2}{2}} \left(\sum_{\boldsymbol{S}} P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) e^{\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}}\right)^{\frac{T_S}{T_z}} \dfrac{P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) e^{\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}}}{\sum_{\boldsymbol{S}} P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) e^{\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}}}}{\int d\boldsymbol{z} e^{-\frac{|\boldsymbol{z}|^2}{2}} \left(\sum_{\boldsymbol{S}} P_0^{\frac{1}{T_S}}(\boldsymbol{S}) e^{\frac{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\theta_i}{2}S_i^2 + \sqrt{\theta_i} z_i S_i\right)}{T_S}}\right)^{\frac{T_S}{T_z}}} \end{aligned} \tag{18}$$

[5]レプリカ法との形式的な対応を簡単に示すため定数の与え方はかなり不自然である．

[6]この近似の成立条件や妥当性については自明ではないが，ここでは適切な取り扱いであるとして話を進める．

を得る．

さて，ここで特に $T_S = 1$ とし温度比 $n = T_S/T_z$ が自然数 $n = 1, 2, \ldots$ となる場合に，得られた定常分布 (18) とレプリカ系に拡張された分布 (11) との関係を考える．ガウス積分に関する公式

$$\exp\left[\theta_i \sum_{a>b} S_i^a S_i^b\right] = \int \frac{dz_i}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\theta_i}{2}\sum_{a=1}^{n}(S_i^a)^2 - \sqrt{\theta_i} z_i \sum_{a=1}^{n} S_i^a\right] \tag{19}$$

を分布 (11) に代入すると，補助変数 $\boldsymbol{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_N)$ と $\boldsymbol{S}$ との同時分布

$$P(\{\boldsymbol{S}^a\}, \boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) = \frac{\exp\left[\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{1}{2}z_i^2 - \frac{\theta_i}{2}\sum_{a=1}^{n}(S_i^a)^2 + \sqrt{\theta_i} z_i \sum_{a=1}^{n} S_i^a\right)\right]\prod_{a=1}^{n} P_0(\boldsymbol{S}^a)}{(\sqrt{2\pi})^N Z(\boldsymbol{\theta})} \tag{20}$$

を構成することができる．$n = 1, 2, \ldots$ に対して，$\boldsymbol{S}^1 = \boldsymbol{S}$ とし，$\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}^3, \ldots, \boldsymbol{S}^n$ ならびに $\boldsymbol{z}$ に関してこの同時分布を周辺化すると式 (18) と全く同じ表現が得られることに注意しよう．このことは拡張された分布 (11) がガウス積分の公式 (19) と周辺化操作によって $n \in \mathbf{R}$ で定義されるタイムスケールと温度の異なる結合ランジュバン系の定常分布に解析接続されることを意味している．

### 3.3 安定性解析

結合ランジュバン系において $\boldsymbol{\theta}$ は $\boldsymbol{S}$，$\boldsymbol{z}$ 間の相互作用の強さを表す．特に $\boldsymbol{\theta} = 0$ から $\boldsymbol{\theta} \neq 0$ へパラメータを変化させたときの応答を調べることはタイムスケールの速いシステム（$\boldsymbol{S}$）に遅いタイムスケールを持つ変数（$\boldsymbol{z}$）との相互作用という外乱を導入したときの定常分布 $P_0(\boldsymbol{S})$ の構造安定性の吟味に他ならない．すでに触れたように指数型分布に関するシステムの安定性はフィッシャー情報行列を表す自由エネルギーの 2 階微分（ヘシアン）によって評価できる．ただし，ここでの解析に関しては微妙な問題が生じる．

$n = 1, 2, \ldots$ に対しては，分布 (11) は $n$ レプリカ系の同時分布として指数型であり，ヘルムホルツ自由エネルギー $-\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})$ のヘシアンによってフィッシャー情報行列が求まる．しかしながら，結合ランジュバン系とのつながりのある解析接続された後の分布 (18) は式 (19) の適用ならびに周辺化によって指数型分布ではなくなっており $-\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})$ のヘシアンはフィッシャー情報行列を意味しない．そのため，通常の平衡統計力学で行われる自由エネルギーに基づいた安定性解析は一般の実数 $n \in \mathbf{R}$ に対しては，データからのパラメータ推定に関する原理的な難しさ，といった数理統計学的な解釈ができなくなる．

その一方で $\boldsymbol{\theta} = 0$ の周りで分布 (11) に関する自由エネルギーの微分を評価すると 1 階微分が

$$\left.\frac{\partial}{\partial\theta_i}\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})\right|_{\boldsymbol{\theta}=0} = \frac{n(n-1)}{2}\langle S_i\rangle^2 \tag{21}$$

ヘシアンが

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})\right|_{\boldsymbol{\theta}=0} \simeq \frac{n(n-1)}{2}\left(\langle S_iS_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle\right)^2 + O((n-1)^2) \tag{22}$$

と表され $n = 1, 2, \ldots$ でない場合でも定義可能な量となる．式 (21) は分布 $P_0(\boldsymbol{S})$ に関する統計量 $\frac{n(n-1)}{2}\langle S_i\rangle^2$ がパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の微分を通じて求まることを意味しており指数型分布

とは限らない一般の $n \in \mathbf{R}$ に対しても $-\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})$ がヘルムホルツ自由エネルギー的な役割を果たしていることを示している．また，テイラー展開により $|\boldsymbol{\theta}| \ll 1$ に対して

$$\frac{\partial}{\partial\theta_i}\ln Z_n(\boldsymbol{\theta}) = \frac{n(n-1)}{2}\left(\langle S_i\rangle^2 + \sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})\bigg|_{\boldsymbol{\theta}=0}\theta_j\right) + O(|\boldsymbol{\theta}|^2) \tag{23}$$

が得られる．このことはヘシアン $\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})\Big|_{\boldsymbol{\theta}=0}$ がフィッシャー情報行列との関係は失っても遅い変数との微小な相互作用 $\boldsymbol{\theta}$ を導入した際に定常分布に関する統計量 $\langle S_i\rangle^2$ がどの程度変化するか，という基準に基づく安定性の指標を与えることを意味している．

これまでに知られている知見との関係を探るためにこの安定性解析を SK モデルに適用しもとの系に対応する $n \to 1$ について調べると，スケールしなおした感受率行列 $\frac{2}{n(n-1)}\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\ln Z_n(\boldsymbol{\theta})\Big|_{\boldsymbol{\theta}=0}$ の最大固有値が発散する条件として

$$1 - \frac{\beta^2 J^2}{N}\sum_{i=1}^{N}(1-\langle S_i\rangle^2)^2 \to 0 \tag{24}$$

が得られる．これはSKモデルに対するAT不安定性の条件に他ならない [8]．このことは従来のレプリカ法の枠組みでは技巧的に導かれその直感的な意味を把握しにくかった AT 条件に，ほぼ温度の等しい遅い変数との微弱な相互作用という外乱に対してシステムが不安定化する条件，という物理的に明確な意味づけが可能なことを示している．

また，ここで示したレプリカ系に対する安定性解析は従来のレプリカ理論における解析とは異なり配位平均を必要としない．そのため quenched ランダムネスを含まない系が示す，いわゆる，「構造ガラス現象」に対しても有効な解析手段となることが期待される [11]．

# 4 まとめ

単一のシステムを複製化しレプリカ間相互作用によってパラメトライズした分布族について，その物理的意味と相互作用の導入に対する分布の安定性とういう観点から考察した．考察した分布族は，一見具体的な対象を欠いた抽象的なモデルのように見えるがタイムスケールと温度の異なる変数が相互作用する結合されたランジュバン系と密接な関わりを持つ．このような系の解析は quenched ランダムネスに関する配位平均を伴わないため通常のレプリカ法とは若干趣が異なる．しかしならがら，レプリカ数 $n$ の自然数から実数への解析接続を考える点は共通しており，配位平均という他の要素が除かれている，また，平均場近似等の近似を用いずにある程度の解析的表現を保ったまま議論を進めることができる，という点でレプリカ法に伴う解析接続の問題を数理統計学的な観点から考察する上で有益な示唆を与えると期待される．

$n = 1, 2, \ldots$ に対し，考察した系は $n$ 個のレプリカ系全体を一つのシステムとみなした指数型分布族を構成する．そのため，自由エネルギーのヘシアンに基づく安定性解析はフィッシャー情報行列と結びつきデータからのパラメータ推定に関する原理的不可能性という数理統計学的な解釈が可能である．しかしながら，実数の $n$ に解析接続した結果は一般に指数型分布とはならない．そのため，分配関数を実数の $n$ に解析接続した結果の対数をヘルムホルツ自由エネルギーとみなし，そのヘシアンを用いてシステムの安定性を調べる解析法はパラメータ推定という観点からの数理統計学的な解釈が自明ではない．それでもなお，得られるヘシアンはある統計量に関する感受率行列を表しており，安定性解析の指標として用いることが可能である．既存の知見との関係を調べるためにSKモデ

ルに対してその解析を適用すると，レプリカ理論で知られているAT不安定性の解析と同じ結果が導かれる．このことから，多くの技巧を伴い直感的な理解が難しいAT不安定性について，遅い変数との微弱な相互作用の導入という外乱に対してシステムが不安定化する条件，という解釈が得られる．

ここに述べた内容も含めて現在広く用いられているレプリカ法とは指数型分布に属さず解析の面倒な一般の $n$ に対する式（18）のような分布の性質を指数型分布を構成し解析の容易な $n=1,2,\ldots$ に対する結果を外挿して調べる方法であるといえる．確かに，式（18）に代表される分布は指数型分布ではなく，その性質が十分明らかにされているとはいえない．しかしながら，指数型分布を解析接続した結果得られる分布であるので何からの都合の良い性質を備えていると期待される．このような分布の数理統計学的な観点からの考察は興味深い研究課題である．

## References


[1] G. H. Hardy, Messenger Math. **58**, 115, 1929.

[2] F. Riesz, J. London. Math. Soc. **5**, 120, 1930.

[3] G. H. Hardy, J. E. Littlewood and G. Pólya, *Inequalities*, Cambridge University Press (Cambridge), 1934.

[4] J. L. van Hemmen and R. G. Palmer, J. Phys. A **12**, 156, 1979.

[5] K. Ogure and Y. Kabashima, Prog. Theor. Phys. **111**, 661, 2004.

[6] 甘利俊一・長岡浩司, 情報幾何の方法（岩波書店）,1993

[7] M. Opper and O. Winther, Journal of Machine Learning Research **6**, 2177, 2005.

[8] J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless, J. Phys. A **11**, 983, 1978.

[9] A. C. C. Coolen, R. W. Penny and D. Sherrington, Phys. Rev. **B**, 16116, 1993.

[10] V. Dotsenko, S. Franz and M. Mézard, J. Phys. A **27**, 2351, 1994.

[11] R. Monasson, Phys. Rev. Lett. **75**, 2847, 1995

[12] S. Shinomoto, J. Phys. A **20**, L1305, 1987.