大域結合系の多重谷構造

東大教養　時田恵一郎*

1 Introduction

近年スピングラスやニューラルネットなど大域的に結合したIsing 結合系の族が注目されている。それらのモデルの持つ最大の特徴の一つは、膨大な数の準安定状態とそれらのもたらす相空間中の複雑な多重谷構造である。これらの多重谷構造すなわち「でこぼこの地形」の概念[1] は「複雑系」を扱う上での一つのキーワードであるとも言える。本稿で扱うような、平均場理論では現れてこないマクロなオーダーパラメータに関しても様々なアプローチで直観的理解が試みられている。例えば、Kinzel[5] はSK モデルが温度0では有限の残留磁化 (remanent overlaps) を持つことを示している。また Amit[4] らは Hopfield モデルにおけるパターンオーバーラップと上記の SK モデルにおける残留磁化との関係を論じている。さらに、Gardner[6] の解析は Hopfield モデルがパターンの数とシステムサイズの比 ($\alpha \equiv p/N$) に応じて膨大な数の準安定状態を持つことを明らかにしている。

上記のようなシステムの「谷」に関する情報の一つは谷の「深さ」であり、エネルギーを通じて統計力学的描像で与えられる。もう一つの重要な情報は谷の「広がり」であり、basins of attraction を調べることが定量的理解の一つの候補である。本稿では Hopfield モデルを Mattis モデルやSK モデルを含むより広いクラスのモデルとして理解し、相互作用がランダムパターンの相関行列で与えられるランダム Ising 系の族とみなす。そして温度0における Hopfield モデルの basins of attraction が初期状態、パラメーター、システムサイズなどにどのように依存するかをモンテカルロ・シミュレーション及び有限サイズスケーリングの方法を用いて調べた。

具体的にはまずスピングラスの残留磁化に対応する「残留オーバーラップ」を定義する。この残留オーバーラップの分布はとりもなおさずオーバーラップ空間中での basins of attraction を与えるので、その初期状態依存性、α依存性を調べた。この結果は、ニューラルネットの言葉で言えばランダムパターンの数や初期状態に依存する想起率を調べたことに対応する。最も重要な結論は、システムサイズ無限大の極限では残留オーバーラップの値は、初期オーバーラップの値及びαの値だけで一意に決まるということである。しかもその初期オーバーラップと残留オーバーラップの関係は非常に単純な形式で表されることがわかり、残留オーバーラップの分布関数を得ることが出来る。これはオーバーラップの空間で準安定状態の分布を得たことに対応する。また、$\alpha \to \infty$ の極限で Hopfield モデルが SK モデルと等価になるという予想 [7][9] を支持する結果を得た。

*e-mail address : tokita@complex.c.u-tokyo.ac.jp

2 モデル

考えるモデル (Hopfield モデル) はシステムサイズ N の Ising スピン系で、以下のようなハミルトニアンを持つ。

$$H = -\sum_{i,j}^{N} J_{ij} S_i S_j \tag{1}$$

ここで、J_{ij}は p 個のランダムパターン ($\xi_i^\mu = \pm 1, \mu = 1, \ldots, p$) から作られる相互作用で、

$$J_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p} \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \qquad J_{ii} = 0. \tag{2}$$

である。この定義から$\alpha = 1/N$が Mattis モデルに、$\alpha \sim O(1)$ が連想記憶として動作する Hopfield モデルに、そして Provost and Vallée[7, 8] 及び深井、椎野 [9] の予想から$\alpha \to \infty$ が SK モデルに対応することがわかる。そこで、パラメーターαがモデルを特徴づけることが予想される。

時間発展は以下の温度 $0 (T = 0)$ の Glauber ダイナミクスを用いる。

$$S_i(t+1) = \theta\left(\sum_j J_{ij}\, S_j(t) \right) \tag{3}$$

ただし、$\theta(x)$ は階段関数 ($\theta(x) = 1 \,\mathrm{for}\, x > 0$; $-1 \,\mathrm{for}\, x \leq 0$) である。つまり、スピンフリップの順番がランダムであることを除くと決定論的なダイナミクスを扱うことになる。有限温度における SK モデルでは残留磁化は見られないこと、および、系の谷構造が最も強くダイナミクスに影響することを期待して温度0での振舞いを調べようというわけである。

ここで、時間に依存するマクロなオーダーパラメータであるパターンオーバーラップを定義する。

$$m^\mu(t) = \frac{1}{N}\sum_i \xi_i^\mu S_i(t). \tag{4}$$

このパターンオーバーラップは一般化された磁化と解釈することが出来る。すなわち、m^μは$\widetilde{S_i} = \xi_i^\mu S_i$とい

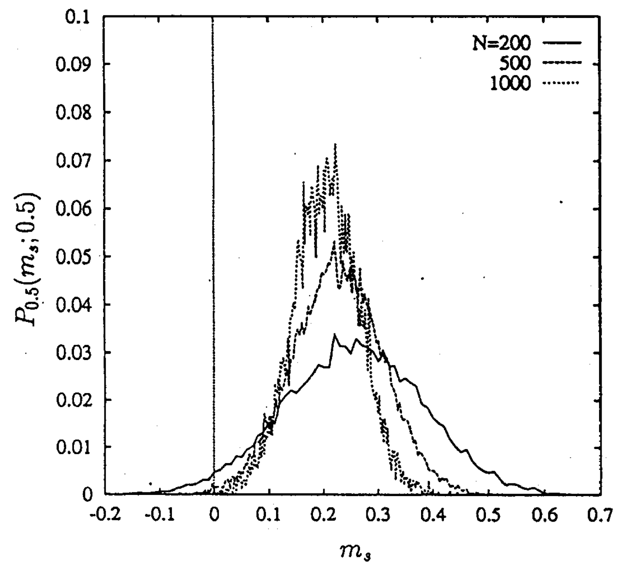

図 1: オーバーラップ空間での basins of attraction(残留オーバーラップの分布) のシステムサイズ依存性 ($m(0)=0.5, \alpha=0.5$)。N が大きくなると分布はデルタ関数に近付き、m_sの値が確定する。

う変換によって通常の磁化になる。有限温度のダイナミクスにおいては平均場理論の範ちゅうでこのような量が熱力学的極限で長時間的には消えることが予想されるが、Hopfield モデルの解析で知られているように $T=0$ においては準安定状態へトラップされ、有限のオーバーラップを与える。このような状況は、αの値のかなり広い範囲で見られることが予想される。今後は、準安定状態が与えるオーバーラップを「残留オーバーラップ (remanent overlaps:$m_s^\mu = m^\mu(t\to\infty)$)」と呼ぶことにする。サンプル間の揺らぎを考慮した有限サイズスケーリングによる解析の結果、αの値と、初期値 ($m^\mu(0)$) が決まると、残留オーバーラップの値が $N\to\infty$ では一意に決まることがわかる。

さて、J_{ij}が各パターンの交換に対して不変な形になっているので、p 個の m^μはある J_{ij}のサンプルに対して独立な結果であると考えられる（この性質を利用してサンプル平均の回数を減らすことが可能であり、実際それを利用したアルゴリズムを用いたが、ここではその詳細は述べない [10]）。そこでこれらをまとめて m_s と書くことにする。

実際に basins of attraction を求めるアルゴリズムは以下の通り。

(a) $p=\alpha N$個のランダムパターンを生成し、(2) 式から相互作用 J_{ij}のサンプルを一個作る。

(b) 実スピン空間ではランダムであるが初期オーバーラップ $m(0)$ を与えるような初期状態 ($S_i(0)$ から (3) 式に従って時間発展させる。

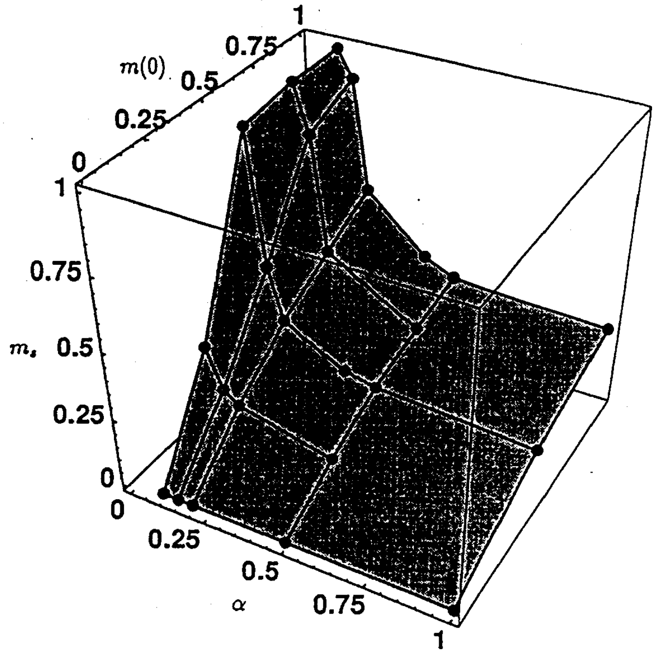

図 2: $N\to\infty$ での m_sの $m(0)$ 及びα依存性

(c) 全てのスピンフリップが止まった時のオーバーラップを (4) 式から計算し、一個の残留オーバーラップの値を得る。

(d) (a) に戻る。

J_{ij}のサンプル数は 200 個から 2000 個で、この種の計算では十分な数であると考える。上記のループをこの数だけ繰り返すと、サンプル依存性を排した残留オーバーラップの分布、すなわちオーバーラップ空間中での basins of attraction を得ることになる。

3 結果

図 1 に$\alpha=0.5$ における初期オーバーラップ $m(0)=0.5$ からの残留オーバーラップ m_sの分布を示す。これは、オーバーラップ空間中での basins of attraction のシステムサイズ依存性を与えていて、実際、平均残留オーバーラップ $\langle m_s\rangle$ は $1/\sqrt{N}$でスケールされ、有限の値に外挿できる。また、分散 $\langle(m_s-\langle m_s\rangle)^2\rangle$ は $1/N$で 0 に落ちる。このようなスケーリング関係からいくつかのαの値に対する残留オーバーラップの初期値依存性を得ることが出来る。重要なのは、αと $m(0)$ が与えられると、$N\to\infty$ の極限では残留オーバーラップの分布はデルタ関数状になり、残留オーバーラップの値は一意に与えられるということである。すなわち、オーバーラップの空間では、(平均的なサンプルに対しては) 同じ値の初期オーバーラップからの流れは同じオーバーラップをもつ準安定状態へと収束する（ただし、実空間でのスピン配列は必ずしも同じではない）。図 2 に $N\to\infty$ に外挿して得られた残留オーバーラップの初期オーバーラップおよびα依存性を同時に描いたものを

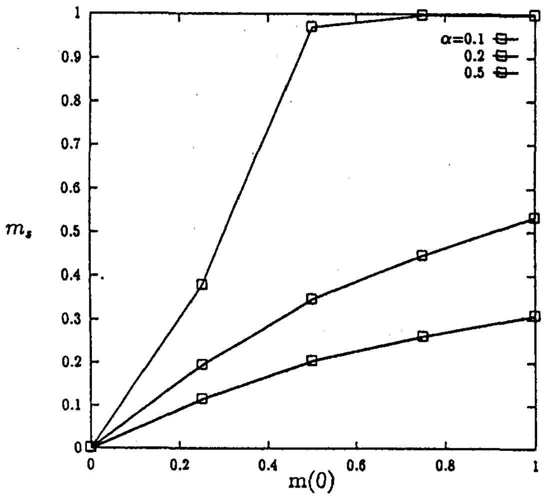

図 3: いくつかのαの値に対する m_sの $m(0)$ 依存性。一番上の線は連想記憶モデルとして動作するものに対応し、下に行くに従ってSKスピングラスモデルに近付く。

示す。さらに図3にいくつかのαの値に対して得られた残留オーバーラップの $m(0)$ に対する値 (図2で$\alpha - m_s$面に垂直な方向から見たもの) を示す。

また、図3によると残留オーバーラップはαの値に応じてきまる$m(0)$ の単調に増加する関数 $m_s \equiv F_\alpha(m(0))$ で表されることが予想される。実際、$\alpha = 0.2$ では、$m(0)$ が比較的大きな値の領域で

$$m_s = F_{0.2}(m(0)) \sim m(0)^\gamma, \quad \gamma \sim 0.73 \tag{5}$$

とフィットすることが出来る。ここで重要なことは、関数 $m_s = F_\alpha(m(0))$ の形が決まると、一様分布から得られる残留オーバーラップの分布関数 $P_\alpha(m_s)$ が決められるということである。すなわち、

$$\begin{aligned} P_\alpha(m_s) &= \int P_\alpha(m_s; m_0)dm_0 \\ &= \int \delta(m_s - F_\alpha(m_0'))dm_0' \\ &= \int \delta(m_s - m_s'))\frac{dm_0'}{dm_s'}dm_s' \\ &= \int \delta(m_s - m_s')\frac{dF_\alpha^{-1}(m_s')}{dm_s'}dm_s' \\ &= \frac{dF_\alpha^{-1}(m_s)}{dm_s} \end{aligned} \tag{6}$$

となる。ここで、$P_\alpha(m_s; m_0)$ は初期オーバーラップ $m(0) = m_0$という条件つきのαにおける m_sの確率分布で、我々の結果の一つである

$$P_\alpha(m_s; m_0) \sim \delta(m_s - F_\alpha(m_0)), \tag{7}$$

を用いた。本質的には F_αが単調増加関数なので F_α^{-1}が存在することによる。式 (5) と (6) から残留オーバーラップの分布はベキの形になることがわかる。この結果から、オーバーラップの空間で見ると非常に多くの準安定状態が有限のメジャーを持ち、べき的に分布していることがわかる。

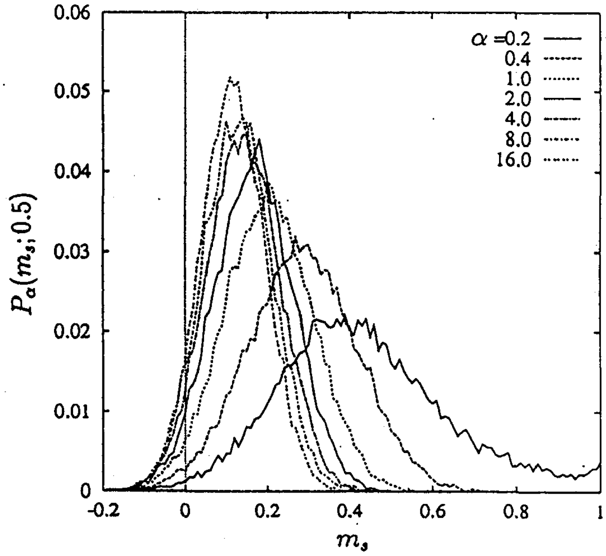

図 4: Basins of attraction(残留オーバーラップの分布)のα依存性 ($m(0) = 0.5, N = 200$) 。

次の結果はある初期オーバーラップにおける、残留オーバーラップの漸近的なα依存性についてである。図4にシステムサイズ $N = 200$ の時の初期オーバーラップ $m(0) = 0.5$ に対する残留オーバーラップの分布がαの値が大きくなっていった時にどのように変わるかを示した。平均値が漸近的に有限の値に近付いていく様子がわかる。ここで、$N \to \infty$ に外挿した m_sの値を $m(0) = 0.5, 1.0$ に対して描いたのが、図5である。

素朴に考えるとαが大きくなると J_{ij}の分布はガウス分布に近付くので、考えているモデルは SK モデルになることが予想される。Provost and Vallée[7, 8] はこのことに簡単に触れているが、最近深井、椎野 [9] は $\alpha \to \infty$ における準安定状態の数の表式がスピングラスで知られているものと同じになることを示している。図5の結果も$\alpha \to \infty$ における我々のモデルと SK モデルとの等価性を示している。すなわち、比較的大きなαの領域で、

$$m_s = G_{m(0)}(\alpha) = \widetilde{m} + A\,\alpha^{-\beta}, \qquad \beta > 0 \tag{8}$$

となっている。ここで、$m(0) = 0.5$ に対しては$\widetilde{m} \sim 0.08, \beta \sim 0.5$ で、$m(0) = 1$ に対しては$\widetilde{m} \sim 0.14, \beta \sim 0.3$ である。これは SK モデルにおける残留磁化と等価で、$m(0)$ からの値 $m_s = 0.14$ は一様磁場によって全スピンが同じ方向を向いた状態から磁場を切って急冷した状況と等価である。これは Kinzel の結果 ($m_s \sim 0.14$ とも非常に良く合致する。また、図5の結果は SK モ

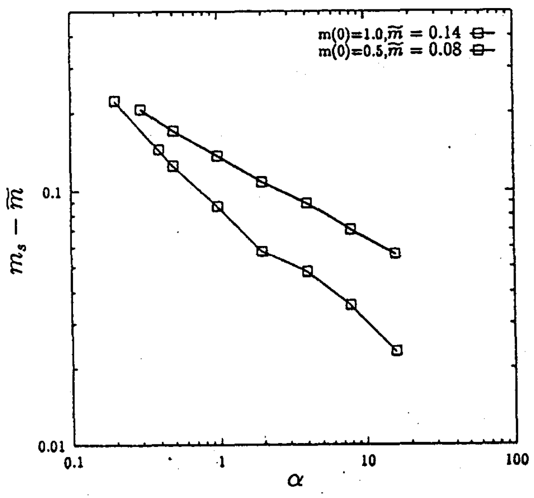

図 5: $N \to \infty$ での m_sのα依存性 $(m(0) = 0.5, 1.0)$ 。$\widetilde{m} = 0.14$ は Kinzel の結果と一致する。

デルが Hopfield モデルの特殊な場合に相当し、臨界容量 (α_c) を越えたαの領域では Hopfield モデルはスピングラス的な谷構造を持つが、定量的には (8) 式に従って SK モデルに近付くということを示している。

今回はマクロなオーダーパラメーターであるオーバーラップの空間中での谷構造について報告したが、実スピン配置空間中での多重谷構造についてもスピングラスのレプリカ対称性の破れを考慮した解析でいくつかの情報を得ることが可能であると考えている。特に筆者が注目する $T = 0$ の決定論的ダイナミクスの極限では Amit らのレプリカ対称解は不安定であるので Parisi のレプリカ非対称解を考慮しなければならないが、実際に谷の重み分布をαをパラメータとして表すことが可能であると予想している [10] 。

本稿をまとめるにあたり、金子邦彦氏、金子研の大学院生の諸氏、及び筑波大学の根本幸児氏との議論が大変参考になりました。感謝致します。

参考文献

[1] いうまでもなくスピングラスにおける TAP 方程式の多重解、純状態の超計量性に関する議論が重要な背景となっている。詳細は本研究会の根本の報告を参照。

[2] Sherrington D and Kirkpatrick S 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 1975

[3] Hopfield J 1982 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **79** 2554

[4] Amit D J, Gutfreund H and Sompolinsky H 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 1930; 1987 *Ann. Phys, NY* **173** 30

[5] Kinzel W 1986 *Phys. Rev. B* **33** 5086

[6] Gardner E 1986 *J.Phys. A:Math. Gen.* 19 L1047

[7] Provost J P and Vallee G 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 598

[8] 我々が考えているモデルは彼らの行列 J が対角行列の場合に相当する。

[9] Fukai T and M Shiino 1992 *J.Phys. A:Math. Gen.* **25** 2873

[10] In preparation.