

Statistical Physics Methods in Optimization and Machine Learning のノート

市川佑馬^{*1}

2022 年 6 月 24 日

^{*1} 東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻相関基礎科学系 福島研究室

Contents

第 I 部	Techniques and methods	5
第 1 章	The mean-field ferromagnet of Curie & Weiss	7
1.1	Rigorous solution	8
1.2	The free energy / entropy is all you need	11
1.3	Toolbox: Gibbs free-entropy and the variational approach	15
1.4	Toolbox: The cavity method	17
1.5	Toolbox: The “field theoretic” computation	19
1.6	Exercices	20
第 2 章	A simple example: The Random Field Ising Model	29
2.1	Self-averaging and Concentration	29
2.2	Replica Method	30
2.3	A rigorous computation with the interpolation technique	33
2.4	Exercices	37
第 3 章	A first application: The spectrum of random matrices	45
3.1	The Stieltjes transform	45
3.2	Exercices	46
第 4 章	Sparse Graphs & Locally Tree-like Graphical Models	47
4.1	Graphical Models	47
4.2	Belief Propagation and the Bethe free energy	47
4.3	Exercices	47
第 5 章	Belief propagation for graph coloring	49
5.1	Deriving quantities of interest	49
5.2	Specifying generic BP to coloring	49
5.3	Bethe free energy for coloring	49
5.4	Paramagnetic fixed point for graph coloring	49
5.5	Ferromagnetic fixed point for graph coloring	49
5.6	Back to the anti-ferromagnetic ($\beta > 0$) case	49
5.7	Exercices	49

第 II 部	Probabilistic Inference	51
Appendix A	The jargon of Statistical Physics	53
A.1	The ABC of phase transitions	54
A.2	A Rigorous version of the cavity method	58

第 I 部

Techniques and methods

第 1 章

The mean-field ferromagnet of Curie & Weiss

The world was so recent that many things lacked names, and in order to indicate them it was necessary to point. Every year during the month of March a family of ragged gypsies would set up their tents near the village, and with a great uproar of pipes and kettledrums they would display new inventions. First they brought the magnet.

Curie-Weiss 模型とは、強磁性体の簡単なモデルである。強磁性体の代表的な現象の一つとして、ある臨界温度以下で外部磁場がなくても自発的な磁化の発生がある。Curie-Weiss 模型は、マクロな性質を特徴づける熱力学関数が厳密に計算可能であり単純な模型だが、相転移の基本現象（ここでは無秩序な常磁性相（磁化が存在しない）から秩序ある強磁性相（磁化が存在する）への転移）を捉えるのに十分豊かな模型である。そのため Curie-Weiss 模型は、その単純さ、少なくともいくつかの予測の正確さ^{*1}から、統計力学の文献で重要な位置を占めている。

この模型では、磁気モーメントは N 個のミクロなスピン変数 $S_i \in \{\pm 1\}, i = 1, \dots, N$ で表される。そして全ての磁気モーメント S_i は、他のすべての磁気モーメント $S_j, j \neq i$ と相互作用する。強磁性は、同じ方向の磁気モーメントからなる集団配列によってモデル化される。従って、強磁性の性質を促進するために、整列していないスピンのコストを与えるようなコスト関数を考える。そのコスト関数の中で最も単純な形は、二体相互作用 $-S_i S_j$ である。そこで、与えられたスピン配列 $S \in \{\pm 1\}^N$ に関するコスト関数（物理学では Hamiltonian として知られる）を次式で与える：

$$\mathcal{H}_N^0(S) = -\frac{1}{2N} \sum_{ij} S_i S_j \quad (1.1)$$

配位を方向を強制するために、定数磁場 $h \in \mathbb{R}$ を加えると便利である。この外場により、 $h > 0$ のとき $S_i = +1$ 、 $h < 0$ のとき $S_i = -1$ となるよう促進される。この項を加えるとハミルトニアンは以下のように表される：

$$\mathcal{H}_N(S) = \mathcal{H}_N^0(S) - h \sum_i S_i = -\frac{1}{2N} \sum_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.2)$$

スピン配位が $s \in \{-1, +1\}^N$ となる確率は、以下のボツマン測度で与えられる：

$$\mathbb{P}_{N,\beta,h}(S = s) = \frac{1}{Z_N(\beta, h)} e^{-\beta \mathcal{H}(s)} \quad (1.3)$$

ここで、 $\beta = T^{-1} \geq 0$ は、逆温度である。 $\beta > 0$ ならば、ボツマン測度^{*2}は、エネルギーまたはコストをより小さくするスピン配位に大きな確率重みを対応させる。特に、 $\beta \rightarrow \infty$ （または、 $T = 0$ ）のとき、 \mathcal{H} を最小化するような配位の

^{*1} これは何に関する予測を指している？ 実際の強磁性体の性質を少しだけ反映している意味か、スピン数 $N \rightarrow \infty$ の熱力学極限化に限定すれば、マクロな性質をミクロな性質から厳密に議論できるという意味か

^{*2} ギブス-ボルツマン測度とも呼ばれる。

周りに確率重みが集中する。逆の極限である $\beta = 0$ (または, $T \rightarrow \infty$) のとき, ボルツマン測度は全ての配位に対して同じ確率重みを割り当てる (一様測度)。ボルツマン測度の規格化定数は, 統計物理学で重要な役割を担い, 分配関数として知られている。

$$Z_N(\beta, h) = \sum_{S \in \{-1, +1\}^N} e^{\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j + \beta h \sum_i S_i} \quad (1.4)$$

次の章で示すように, 分配関数は, モデルの巨視的な性質を特徴づける熱力学関数と密接に関連している。

1.1 Rigorous solution

導入でも述べたように, 強磁性はスピンまたは磁気モーメントの整列によってモデル化される。従って, 強磁性状態の知るためには, 1 スピンあたりの磁化を調べるのが有効である:

$$\bar{S} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (1.5)$$

\bar{S} は, スピンの標本平均であり確率変数である。ここで, Curie-Weiss 模型の Hamiltonian が, 磁化の関数として表せることに着目する:

$$\mathcal{H}(\bar{S}) = -N \left(\frac{1}{2} \bar{S}^2 + h \bar{S} \right) \quad (1.6)$$

Eq. (1.6) は, $\mathcal{H}(\bar{S}) \propto N$ となり示量変数である。以降, 磁化が $\mathbb{S}_N = \{-1, -1 + 2/N, \dots, +1\}$ 中から特定の値を取る確率について考える。Eq. (1.2) から, 磁化の確率測度は, 以下で与えられる^{*3}:

$$\mathbb{P}(\bar{S} = m) = \frac{1}{Z_N(\beta, h)} \sum_S \mathbf{1}[\bar{S} = m] e^{\beta N (\frac{1}{2} \bar{S}^2 + h \bar{S})} = \frac{1}{Z_N(\beta, h)} \Omega(m, N) e^{\beta N (\frac{1}{2} m^2 + h m)}$$

ここで, $\Omega(m, N)$ は, 磁化が $\bar{S} = m$ となる配位の数を表している。この値は, 明示的に計算することができ, 以下で与えられる:

$$\Omega(m, N) = \frac{N!}{N_+! N_-!} = \frac{N!}{\frac{N(1+m)}{2}! \frac{N(1-m)}{2}!}$$

この形式は, 決して扱いやすい形ではないが, 少し変形を行うと以下の関係式を導くことができる (Exercise. 1.1 参照):

$$\frac{1}{N+1} e^{NH(m)} \leq \Omega(m, N) \leq e^{NH(m)} \quad (1.7)$$

ここで, $H(m)$ は, binary entropy と呼ばれ以下で定義される:

$$H(m) = -\frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} \quad (1.8)$$

この性質から, 以下の補題が成立する。

Lemma 1.1.1. $\phi(m, \beta, h) = H(m) + \beta m^2/2 + \beta h m$ とすると

$$\frac{1}{N+1} \frac{e^{N\phi(m)}}{Z_N(\beta, h)} \leq \mathbb{P}(\bar{S} = m) \leq \frac{e^{N\phi(m)}}{Z_N(\beta, h)} \quad (1.9)$$

が成り立つ。

^{*3} スピン変数から磁化への写像は全射であり, 全単射ではないため, 情報は失われている。

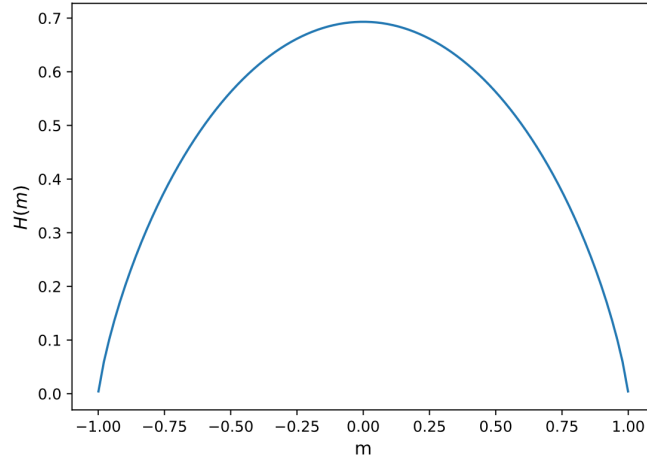


図 1.1 Eq. (1.8) で定義した binary entropy, $H(m)$

また, Eq. (1.7) の右側の不等式の両辺を全ての m について和を取ると以下の不等式が導かれる:

$$1 \leq \sum_m \frac{e^{N\phi(m)}}{Z_N(\beta, h)} \leq (N+1) \frac{e^{N\phi(m^*)}}{Z_N(\beta, h)} \quad (1.10)$$

ここで, m^* は $\phi(m, \beta, h)$ を最大化する連続値 $m^* \in [-1, 1]$ とした. さらに両辺の対数を取ると以下を得る

$$\frac{\log Z_N(\beta, h)}{N} \leq \phi(m^*) + \frac{\log(N+1)}{N} \quad (1.11)$$

さらに左側の不等式より

$$\frac{1}{N+1} \frac{e^{N\phi(m)}}{Z_N(\beta, h)} \leq \mathbb{P}(\bar{S} = m) \leq 1 \quad (1.12)$$

となる. 同様に, 両辺の対数を取ると

$$-\frac{\log(N+1)}{N} + \phi(m, \beta, h) \leq \frac{\log Z_N(\beta, h)}{N} \quad (1.13)$$

この結果は, 任意の $\bar{S} \in \mathcal{S}_N$ に関する関係式であり, $\phi(m)$ を最大とする $m^{\max} \in \mathcal{S}_N$ についても成り立つ*4.

$$-\frac{\log(N+1)}{N} + \phi(m^{\max}, \beta, h) \leq \frac{\log Z_N(\beta, h)}{N}$$

また, \mathcal{S}_N の代わりに区間 $[-1, 1]$ の中で $\phi(m)$ を最大化を行っても結果は大幅に変わらない. 具体的には, N が大きいとき以下の関係が成り立つ:

$$\phi(m^{\max}) > \phi(m^*) - \frac{\log N}{N}$$

そのため,

$$-\frac{\log N(N+1)}{N} + \phi(m^*) \leq \frac{\log Z_N(\beta, h)}{N}$$

となり, 以下の補題が成り立つ.

Lemma 1.1.2. $\Phi_N(\beta, h) = \log Z_N(\beta, h)/N$ とする.

$$\phi(m^*) - \frac{\log N(N+1)}{N} \leq \Phi_N(\beta, h) \leq \phi(m^*) + \frac{\log(N+1)}{N} \quad (1.14)$$

4 Eq. (1.13) の最右側の不等式は, 磁化の確率測度 $\bar{S} \in \mathcal{S}_N$ 上で定義されているため, $\bar{S} \in \mathcal{S}_N$ ときのみ成り立つ. そのため, Eq. (1.13) は, 連続量である m^ の場合, 不等式は成立しない.

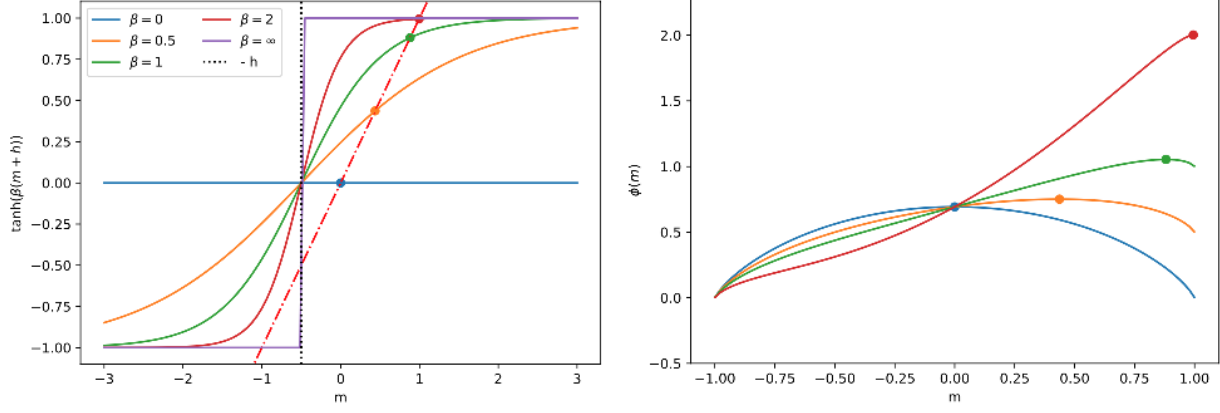


図 1.2 (左側) $h = 0.5$ に固定して異なる温度で Eq. (1.18) の右辺を m の関数として可視化した図. Eq. (1.18) の解は, $f(m) = m$ (赤点線) と $f(m) = \tanh(\beta(h+m))$ の交点に対応する. (右側) 同様のパラメータでポテンシャル関数 $\phi(m)$ を可視化.

本稿では, $\log Z_N(\beta, h)$ を自由エントロピーと呼び, $\log Z_N(\beta, h)/N$ を自由エントロピー密度と呼ぶことにする. これまでの結果から, 漸近的に以下の定理が成り立つ.

Theorem 1.1.3. $\Phi_N(\beta, h) = \log Z_N(\beta, h)/N$ とする. このとき以下が成り立つ.

$$\Phi(\beta, h) := \lim_{N \rightarrow \infty} \Phi_N(\beta, h) = \max_{m \in [-1, 1]} \phi(m) = \phi(m^*) \quad (1.15)$$

さらに, Eq. (1.9) の両辺の対数を取り, Eq. (1.15) を代入すると

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log \mathbb{P}(\bar{S} = m)}{N} = \phi(m) - \phi(m^*) \quad (1.16)$$

が成り立つ.

この結果から, Eq. (1.4) のような 2^n の状態和の計算が, 一次元のポテンシャル関数 $\phi(m)$ の単純な最大化問題となることがわかった. 特に, Eq. (1.16) は, 熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ において, $\phi(m)$ が, あたえられた巨視的な状態 $\bar{S} = m$ となる確率を完全に特徴づけることがわかった. さらに重要なのが, これまでの結果に近似的な主張は存在せず, 全ての結果が厳密という点である. この結果は, もちろんキュリーワイスモデルの単純さに起因する.

1.1.1 Phase Transition in the Curie-Weiss model

厳密な結果から, キュリーワイスモデルのふるまいを解析することができる. 極値条件 $\phi'(m) = 0$ は,

$$\frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{1-m} \right) = \beta(m+h) \quad (1.17)$$

さらに, $\tanh^{-1}(x) = \frac{1}{2} \log \frac{1+x}{1-x}$ を用いると, キュリーワイス平均場方程式と呼ばれる方程式が導出される.

$$m = \tanh(\beta(h+m)) \quad (1.18)$$

Eq. (1.18) の両辺を可視化した図を Fig. 1.3 に示す. 左側の図では, 外部磁場 h を固定し, 異なる逆温度 β の平均場方程式の右辺を可視化している. 平均場方程式の解は, $f(m) = \tanh(\beta(h+m))$ と直線 $f(m) = m$ の交点により与えられる. パラメータの値に依存して, 三つまでの解が存在し, 一つは大域的な最大解に対応し, 他の二つは, 最小値または鞍点に対応する.

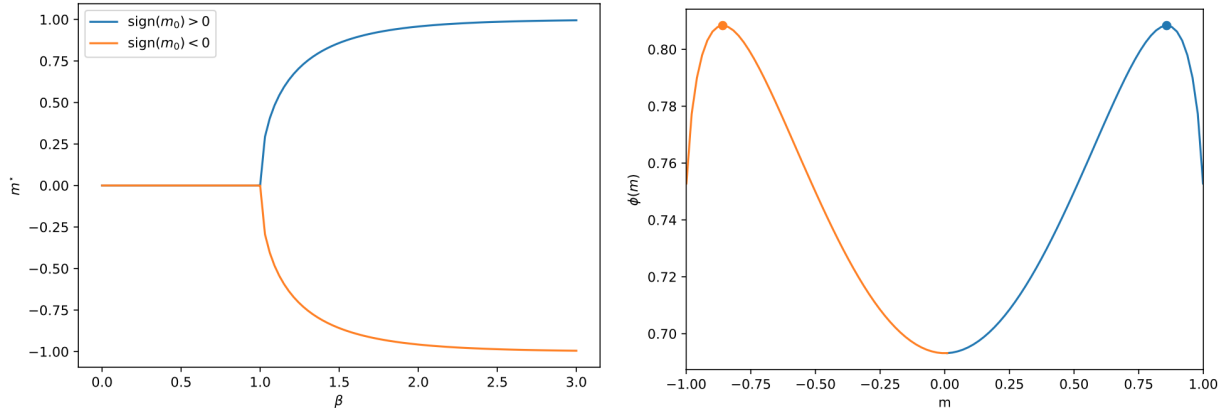


図 1.3 (左側) 平均場方程式 $m = \tanh \beta m$ の固定点 m^* . (右側) $\beta = 1.5$ のポテンシャル関数 $\phi(m)$

$\frac{1}{N} \log \mathbb{P}(\bar{S} = m) \rightarrow \phi(m) - \phi(m^*)$ となる性質は、数学の中で大偏差原理^{*5}と呼ばれる。大偏差原理は、 \bar{S} が m^* 以外の値を取る確率が指数関数的に小さくなることを主張している。簡単に言えば、ある値 m を取るような系が出現する確率は、近似的に以下のように表すことができる。

$$P(m) \asymp e^{N(\phi(m) - \phi(m^*))}$$

ここで、 \asymp は、 N に対して漸近的に成立することを意味する。仮にポテンシャル関数の最大値が一意に定まる場合、磁化は確率 1 で m^* となる。この確率の収束性は、確率論で集中現象 (concentration phenomena) と呼ばれる。物理学者にとっては、磁化のような巨視的な変数が完全に確定的であることを意味する。すなわち、平均値まわりのゆらぎが無視できるほど小さい。このような確率測度の集中現象は、統計力学が機能する根源である。

しかしながら、キュリーワイス模型場合、 $h = 0$ かつ $\beta > 1$ のとき大域的最大値が一意に定まらない。すなわち、二つの極値 $\pm m^*$ が縮退している。このことは、ボルツマン測度からサンプルを生成した場合、確率 1/2 で磁化が $\pm m^*$ となることを意味している。この状況は、物理学では相共存 (phase coexistence) と呼ばれ、液体、固体、気体の基本的な性質である。キュリーワイス模型では、相共存は $\beta > 1$ かつ $h = 0$ の状況でのみ生じる。実際、 $h \neq 0$ に対して、平均場方程式の解は一つ以上存在するが、大域的最大値は一意に定まる。この状態は、単一ギブス状態 (single Gibbs state) として知られている。

1.2 The free energy / entropy is all you need

より複雑なモデルでは、Theorem. 1.1.3のように直接的に、興味のある量の確率分布関数を計算できる望みは薄い。しかしながら、他の模型の場合も、Curie-Weiss 模型と同様に熱力学極限化の巨視的な量の集中現象、ギブス測度の大偏差原理、単相/相共存、もちろん相転移現象が存在することを期待すべきだろう。本節で見るように、これらに関係するほとんどの量は、漸近的な自由エントロピー $\Phi(\beta, h)$ を計算することで理解される。そのため、自由エントロピーを解析的に評価することが統計力学の中で最も重要な任務である。

最初に些細なことだが、多くの物理学者は自由エントロピー、もしくは自由エントロピー密度を使用せず (カルノーやクラウジウスに遡り、熱力学の歴史に根付く理由から自由エネルギーが一般に使用される)、むしろ、 $-\beta^{-1}$ を

^{*5} 大偏差原理とは、一言で言えば確率測度が集中する—確率論の言葉で言えば大数の法則のようなものが成り立つ—ときに、集中する点から外れたところの測度の減衰の速さを記述するものであり、とくに指数的に減衰する状況を問題にする。

掛けた自由エネルギー, もしくは自由エネルギー密度を使用する. Curie-Weiss 模型の場合以下で与えられる:

$$f_N(\beta, h) := \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \log Z_N(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \Phi_N(\beta, h) \quad (1.19)$$

$$f(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N(\beta, h) = \min_m f_m(m, \beta, h) \quad (1.20)$$

$$f_m(m, \beta, h) = -\frac{1}{2}m^2 - hm - \frac{1}{\beta}H(m) = -\frac{1}{\beta}\phi(m) \quad (1.21)$$

クラウジウス以来, 物理学者が自由エネルギーを \log の前に $-\beta^{-1}$ をつけて使っているのは, 多くの数学者にとって単なる表記上の問題のように感じ, なぜ些細なマイナス記号をわざわざつけるのか理解できず, 多くの数学者は単に $\Phi(\beta, h)$ を自由エネルギーと呼んでいた (最悪の場合, 気体の理論から用語を使って“圧力”と呼ぶこともあった^{*6}). また, 数学者はハミルトニアンに不負号をつけてハミルトニアンと定義するのが一般的である. ここでは, 実際の物理学への応用には関心がないため, このような乱用は許されるかもしれない. しかし, 本稿では正しい用語を使用する.

1.2.1 Derivatives of the free entropy

自由エントロピーを知ることで, これまで説明してきたすべての現象を再発見可能点を確認する. まず, 任意の有限値の N に対して, 自由エネルギーが磁化の (連結) モーメントの生成関数^{*7}となることを確認する. 例えば, 自由エントロピーの磁場に関する一回微分により磁化が得られる:

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \Phi_N(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial h} \frac{1}{\beta N} \log Z_N(\beta, h) = \sum_s \frac{\bar{S} e^{-\beta \mathcal{H}_N}}{Z_N(\beta, h)} = \langle \bar{S} \rangle_N = m_N \quad (1.22)$$

一方, 2 次微分では分散などが得られます. しかし, 極限と微分を反転させる数学的条件は自明ではないため, この関係が極限 $N \rightarrow \infty$ を取った場合に成り立つこと自明ではない. しかし, 以降の説明により少なくとも相転移の外側では, 自由エントロピーの凸性により 上述の極限と微分の反転が許される. まず, 自由エントロピーの凸性を確認する:

$$\frac{\partial^2}{\partial h^2} \Phi_N(\beta, h) = \beta \frac{\partial}{\partial h} \sum_s \frac{\bar{S} e^{-\beta \mathcal{H}_N}}{Z_N(\beta, h)} = N\beta(\langle \bar{S}^2 \rangle_N - \langle \bar{S} \rangle_N^2) \geq 0 \quad (1.23)$$

従って, Φ_N は下に凸である. ここで凸関数の無限系列 $\{f_n\}_n$ の基本的な定理から, 任意の x について $f_n(x) \rightarrow f(x)$ かつ $f_n(x)$ が凸なとき, $f(x)$ が微分可能となる任意の x について $f'_n(x) \rightarrow f'(x)$ が成り立つ. そのため, 自由エントロピーが特異性を持つ相転移の外側では, 漸近的な自由エネルギーの微分は, 漸近的な磁化を生成する. 実際, $\Phi(\beta, h) = \phi(m^*(\beta, h))$ と表すと以下が成り立つ:

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \Phi(\beta, h) = m^*(h, \beta) + \frac{\partial}{\partial m} \phi(m)|_{m=m^*} \frac{\partial m^*}{\partial h} = m^*(h, \beta) \quad (1.24)$$

ここで, $\phi(m)$ の微分が m^* で 0 となることを用いた. 従って, 自由エントロピーの一階微分により平衡状態の磁化が得られることが確認できた.

1.2.2 Legendre transforms

もう一つの有益な見方は, フランスの著名な数学者, Laplace と Legendre が残した二つの重要な数学的事実を用いることである. まず, 積分を計算するのに非常に便利なラプラス法について述べる.

^{*6} 結構前に読んだ論文で自由エネルギーのことを“pressure”と言っていて混乱したことがある...

^{*7} 役は, generating function for (connected) moments of magnetization である. この (connected) の意味がなんのかわからない...

Theorem 1.2.1. $f(x)$ を $[a, b]$ 上の連続二階微分可能な関数とする。また、以下を満たす一意な点 $x_0 \in (a, b)$ が存在することを仮定する:

$$f(x_0) = \max_{x \in [a, b]} f(x), \quad f''(x_0) < 0 \quad (1.25)$$

このとき以下が成り立つ。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\int_a^b e^{nf(x)} dx}{e^{nf(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{n(-f''(x_0))}}} = 1 \quad (1.26)$$

特に以下が成り立つ。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \int_a^b e^{nf(x)} dx = f(x_0) \quad (1.27)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\int_a^b g(x) e^{nf(x)} dx}{\int_a^b e^{nf(x)} dx} = g(x_0) \quad (1.28)$$

これらの公式は、ラプラスが 1774 年に発表した書 “Mémoire sur la probabilité des causes par les évènements” で証明したもので、大偏差原理と組み合わせることで大きな意味を持つ。

ここで、磁場のない ($h = 0$) の Curie-Weiss 模型について考える。まず、磁場のないギブス測度が大偏差原理が満たすことを仮定する:

$$\mathbb{P}(\bar{S} = m; h = 0) = \frac{\sum_s \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_0}}{Z_N(\beta, h = 0)} = \frac{\sum_s \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_0(\bar{S} = m)}}{e^{N \Phi_N(\beta, 0)}} \underset{N \rightarrow \infty}{\asymp} e^{-N I_0^*(m)} \quad (1.29)$$

ここで、 $I_0^*(m)$ を外場 $h = 0$ の真の大偏差レートとする*8。この大偏差原理を仮定すると、 $I_0^*(m)$ の具体的な値を評価できなくても深い結論を自由エントロピーから得ることができる。まず、外場が存在する分配関数をラプラス法を用いて評価すると以下のように表す。

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, h) &= \sum_m \left(\sum_s \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_N^0} \right) e^{N \beta h m} \\ &\underset{N \rightarrow \infty}{\asymp} \int_{-1}^1 dm e^{N H(m) - \beta \mathcal{H}_0(m) + \beta h m} \\ &\equiv \int_{-1}^1 dm e^{N(-I_0^*(m, \beta) + \beta h m)} = \int_{-1}^1 dm e^{N(\phi(m, \beta, h=0) + \beta h m)} \end{aligned}$$

すでに上述の議論から大偏差レート $I_0^*(m)$ は、 $-I_0^*(m) = H(m) - \beta m^2/2 = \phi(m, \beta, h = 0)$ となることはわかっているが、正確な形式を得ることは重要ではない。実際、大偏差レートに最大値が存在することさえわかれば、Laplace 法により自動的に以下が満たされる。

$$\Phi(\beta, h) = \max_m [\beta h m - I_0^*(m)] = \max_m [\phi(m, \beta, h)] = \phi(m^*, \beta, h) \quad (1.30)$$

この結果から、外場を追加した系の自由エントロピーは、外場を追加しない系の大偏差レート $I_0^*(m)$ はルジャンドル変換を通して関係づけられることがわかった:

$$\Phi(\beta, h) = \max_m [\beta h m - I_0^*(m)] \quad (1.31)$$

さらに、ルジャンドル変換の理論からより詳しい性質を明らかにすることができる: すなわち、 $\Phi(\beta, h)$ に逆ルジャンドル変換を行うと

$$I_0(m, \beta) = \max_h [\beta h m - \Phi(\beta, h)] \quad (1.32)$$

8 Curie-Weiss 模型の場合、上述の議論から厳密に $\mathbb{P}(\bar{S} = m) \asymp e^{N \phi(m)}$ となるため、 $I_0^(m) = -\phi(m)$ と評価することができる。

となる。ルジャンドル変換の基本定理により、 $I_0(m)$ は $I_0^*(m)$ の凸包となる。この結果から、自由エントロピーを逆ルジャンドル変換することで、大偏差レートの上界を得ることができる。これまでの議論を通して、自由エントロピーを通して興味のある量ほとんどが計算できることがわかった。まさに、“The free entropy is all you need”である。

しかし、この手法で大偏差レートを計算するには、基本的な制限がある。仮に真の大偏差レート $I_0^*(m)$ が非凸の場合、真の大偏差レートの上界が計算される。そのため、真の大偏差レートに関する情報を得られない部分が存在する。この様子を Fig. 1.4 に示す: $I_0(m)$ と $I_0^*(m)$ の凸包が一致する部分 (この領域の点集合は $I_0^*(m)$ の“露出点 (exposed points)”と呼ばれる) のみが真の大偏差レートを評価していることに対応し、それ以外の点では、真の大偏差レートの上界が与えられる。これらの考察は、統計力学の古典的な考え方の一つであり、“アンサンブルの等価性 (equivalence of ensembles)” の基礎であり、熱力学の導出にも用いられる^{*9}。

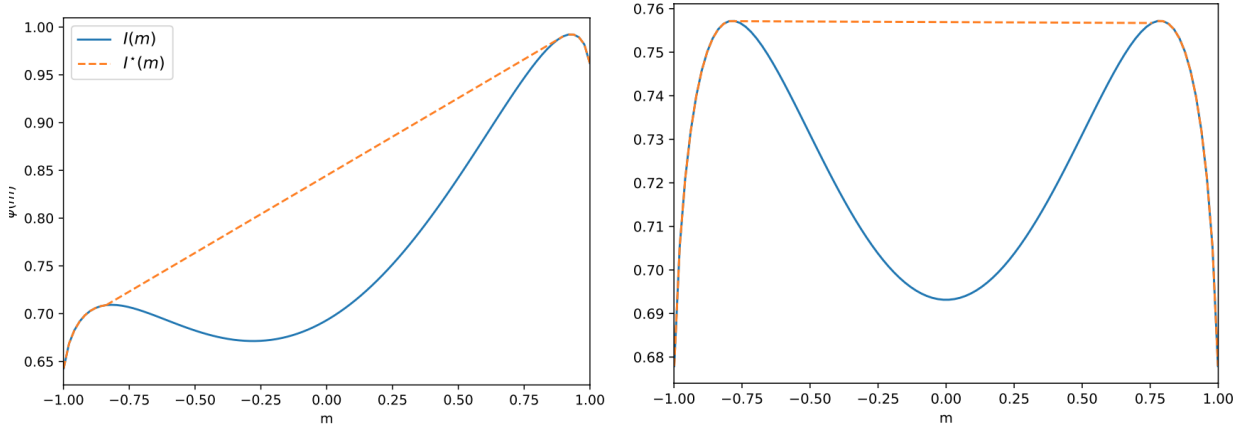


図 1.4 青色が真の大偏差レート $I_0^*(m)$ を表し、オレンジ点線がルジャンドル変換により得られる大偏差レートの上界 $I_0(m)$ を表す (おそらく原論分の凡例は逆)

1.2.3 Gartner-Ellis Theorem

これら全ては、近年の大偏差原理の言葉で厳密に説明することができる。特に、Gartner-Ellis の定理は、大偏差レートと分配関数の Legendre 変換を非常に一般的な方法で結びつける:

Theorem 1.2.2. 任意の $k \in \mathbb{R}$ に対して

$$\lambda(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mathbb{E}_{A_N} [e^{NkA_N}]$$

が存在し、微分可能とする^{*10}。さらに、

$$I(a) = \sup_{k \in \mathbb{R}} (ka - \lambda(k)) \quad (1.33)$$

を定義する。大偏差原理より

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mathbb{P}[A_N = a] \leq -I(a) \quad (1.34)$$

露出点では、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mathbb{P}[A_N = a] = -I(a), \quad \forall a \in \{\text{exposed point}\} \quad (1.35)$$

^{*9} 勉強不足でピンときていない...

^{*10} あまり意味はないコメントかもしれないが、 $\lambda(k)$ は、キュムラント母関数 $\alpha(k) = \log \mathbb{E}_{A_N} [e^{kA_N}]$ に類似している。そう考えると $\lambda(k)$ は分布に関する全ての情報を持っているため、 $\lambda(k)$ を用いて分布の性質を議論できて良い気がする...

この定理は, ある確率変数 A_N の大偏差レート $I(a)$ を知りたい場合, $\lambda(k)$ という量を評価し, ルジャンドル変換を行うことで, 大偏差レートの上限を得ること (露出点の場合は, 大偏差レート) を得ることができることを主張している. Curie-Weiss 模型の場合, 先ほどの導出との関連性がすぐにわかる: 磁場がない場合 (つまり $h = 0$) を考え, 今は磁化 S の確率分布を知りたいため $A_N = \bar{S}$ とする. Theorem. 1.2.2 より (この特殊な場合は, 一般的に Cramer' の定理と呼ばれる) より, 以下を計算すれば良い:

$$\begin{aligned}\lambda(k) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \sum_{\bar{S}} \frac{1}{Z_N} \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_0} e^{Nk\bar{S}} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} [\Phi(\beta, h = k/\beta) - \Phi_N(\beta, h = 0)] \\ &= \max_m \phi(m, h = k/\beta) + \text{const}\end{aligned}$$

ゆえに, 磁場がゼロのときの真の大偏差レート $\phi(m, h = 0)$ の上界は以下のルジャンドル変換により得られる:

$$I_0(m) = \max_{k \in \mathbb{R}} (km - \lambda(k))$$

この結果は, 前節の結果を再現する.

1.3 Toolbox: Gibbs free-entropy and the variational approach

分配関数の計算が常に簡単となるとは限らないため, 分配関数を評価するためのいくつかの手法を覚えることは有益だろう. また, これらの手法は, 多くの解析的, 実用的アプローチの根底となり, 機械学習分野でも広く用いられるようになった. そのうちの 하나가, Gibbs variational approach と呼ばれる以下の定理である.

Theorem 1.3.1 (Gibbs variational approach). あるハミルトニアン $\mathcal{H}_N(x)$, $x \in \mathbb{R}^N$ とギブス測度 $\mathbb{P}_{\text{Gibbs}}[x] = e^{-\beta \mathcal{H}_N} / Z_N(\beta)$ を考える. \mathbb{R}^N 上の任意の確率分布 $\mathbb{Q}(x)$ と, そのエントロピー密度 $S[\mathbb{Q}] = -\langle \log \mathbb{Q} \rangle$ が与えられたとき, ギブス関数を

$$N\phi^{\text{Gibbs}}(\mathbb{Q}) := S[\mathbb{Q}] - \beta \langle \mathcal{H} \rangle_{\mathbb{Q}} \quad (1.36)$$

と定義する. ここで, $\langle \cdot \rangle_{\mathbb{Q}}$ は, 確率測度 \mathbb{Q} に関する期待値を表す. そして, 以下が成り立つ.

$$\forall \mathbb{Q}, \quad \Phi_N(\beta) = \frac{1}{N} \log Z_N \geq \phi^{\text{Gibbs}}(\mathbb{Q}) \quad (1.37)$$

が成り立つ. $\mathbb{Q} = \mathbb{P}_{\text{Gibbs}}$ のとき等号が成立する.

まずは, 簡単な結果を証明する. まず, Kullback-Liebler divergence または相対エントロピーと呼ばれる次の量を導入する:

$$D_{\text{KL}}(\mathcal{P} \parallel \mathcal{Q}) = \int dx \mathcal{P}(x) \log \frac{\mathcal{P}(x)}{\mathcal{Q}(x)} \quad (1.38)$$

この量は, 二つの確率分布 $\mathcal{P}(x)$, $\mathcal{Q}(x)$ がどの程度異なるかを測る量である. そして以下の補題が成り立つ.

Lemma 1.3.2 (Gibbs inequality).

$$D_{\text{KL}}(\mathcal{P} \parallel \mathcal{Q}) \geq 0 \quad (1.39)$$

$\mathcal{P} = \mathcal{Q}$ のとき等号が成立する.

Proof. 任意の $u \in \mathbb{R}_+$ に対して, $\log u \leq u - 1$ が成り立つ. この不等式は, $u = 1$ のとき等号が成立する. 従って

$$\begin{aligned} -D_{\text{KL}}(\mathcal{P} \parallel \mathcal{Q}) &= \int dx \mathcal{P}(x) \log \frac{\mathcal{Q}(x)}{\mathcal{P}(x)} \\ &\leq \int dx \left(\frac{\mathcal{Q}(x)}{\mathcal{P}(x)} - 1 \right) = \int dx \mathcal{Q}(x) - \int dx \mathcal{P}(x) \\ &= 1 - 1 = 0 \end{aligned} \quad (1.40)$$

また, $\log u < u - 1$ の等号成立条件より, $\mathcal{P} = \mathcal{Q}$ のとき等号が成り立つ. \square

そして, Gibbs free entropy と真の free entropy の違いを Kullback-Leibler divergence で以下のように書くことができる.

Lemma 1.3.3. ボルツマン分布を $\mathcal{P}^{\text{Boltzmann}}(x) = e^{-\beta \mathcal{H}(x)} / Z_N$ と表す. このとき任意の分布 \mathcal{Q} に対して以下が成り立つ.

$$N\Phi_N = N\phi^{\text{gibbs}}(\mathcal{Q}) + D_{\text{KL}}(\mathcal{Q} \parallel \mathcal{P}^{\text{Boltzmann}}) \quad (1.41)$$

Proof. まず, 以下の等式が成り立つ.

$$\langle \log \mathcal{P}^{\text{Boltzmann}} \rangle_{\mathcal{Q}} = -\beta \langle \mathcal{H}_N \rangle_{\mathcal{Q}} - \log Z_N \quad (1.42)$$

さらに自明な式変形により Eq. (1.41) が得られる:

$$\langle \log \mathcal{P}^{\text{Boltzmann}} \rangle_{\mathcal{Q}} - \langle \log \mathcal{Q} \rangle_{\mathcal{Q}} = -D_{\text{KL}}(\mathcal{Q} \parallel \mathcal{P}^{\text{Boltzmann}}) \quad (1.43)$$

$$= -\beta \langle \mathcal{H}_N \rangle_{\mathcal{Q}} - \log Z_N - \langle \log \mathcal{Q} \rangle_{\mathcal{Q}} \quad (1.44)$$

$$= N\phi^{\text{Gibbs}}(\mathcal{Q}) - N\Phi_N \quad (1.45)$$

ゆえに

$$N\Phi_N = N\phi^{\text{Gibbs}}(\mathcal{Q}) + D_{\text{KL}}(\mathcal{Q} \parallel \mathcal{P}^{\text{Boltzmann}}) \quad (1.46)$$

\square

1.3.2と1.3.3を合わせると,

$$\Phi_N(\beta) = \phi^{\text{Gibbs}}(\mathcal{Q}) + D_{\text{KL}}(\mathcal{Q} \parallel \mathcal{P}^{\text{Boltzmann}}) \geq \phi^{\text{Gibbs}}(\mathcal{Q})$$

となり, 1.3.1が成り立つ. なぜ, これが興味深いのだろうか? 理由は, 多くの“試行分布 (\mathcal{Q})”を使って, Gibbs free entropy が最も大きくなる分布を探索することで, 分配関数を近似することが可能であるためである. この方法は, 統計物理学や量子物理学の文脈で様々な名前で使用されてきた (例えば, “Gibbs-Bogoliubov-Feynmann” など). また, バイズ統計学や機械学習にも多くの応用がなされている. この場合, Gibbs free entropy は, “Evidence Lower BOund” 略して ELBO と呼ばれる.

この手法が Curie-Weiss model にどう適用できるのかを確認する. 試行関数として最も単純な分布は全てのスピンに関して独立同分布である:

$$\mathcal{Q}(S) = \prod_i \mathcal{Q}_i(S_i) = \prod_i \left(\frac{1+m}{2} \delta(S_i - 1) + \frac{1-m}{2} \delta(S_i + 1) \right) \quad (1.47)$$

このとき Gibbs free entropy を評価すると以下ようになる:

$$\phi^{\text{Gibbs}}(\mathcal{Q}) = -\beta \langle (\bar{S})^2 / 2 + h\bar{S} \rangle_{\mathcal{Q}} + \frac{1}{N} \sum_i H(\mathcal{Q}_i) \quad (1.48)$$

$$= -\beta \frac{m^2}{2} - \beta h m + H(m) \quad (1.49)$$

ここで, $H(m)$ は binary entropy である. この単純な変分法で m を固定した際の Free entropy の厳密な結果を再現することがわかった. そのため, Gibbs free entropy を m について最大化した量は Free entropy と厳密に一致する.

1.4 Toolbox: The cavity method

ここでは、もう一つの重要な手法である cavity trick を紹介する。この手法は、本稿でも頻繁に行う計算の根底となる手法である。この考え方は、次の質問に基づく：ある系に 1 つの確率変数を加えるとどうなるか？ 物理学者は、 N 個の変数からなる系を考え、そこに小さな“穴”あるいは“空洞”を作り、1 個の確率変数を丁寧に追加していくイメージを持つ。それゆえ、この手法は“cavity method”と呼ばれる。

系のサイズが $N, N+1$ の二つのハミルトニアンを比較することがどのように働くかを確認していく。以降、新たに加えるスピンの“0”添字を付ける。すると、以下の関係式が成り立つ：

$$-\beta\mathcal{H}_{N+1} = \beta\frac{1}{2}(N+1)\left(\frac{S_0 + \sum_{i=1}^N S_i}{N+1}\right)^2 + \beta h\left(S_0 + \sum_{i=1}^N S_i\right) \quad (1.50)$$

$$= \beta\frac{1}{2(N+1)} + \frac{\beta}{2}\frac{N^2}{N+1}\bar{S}^2 + \beta S_0\frac{N}{N+1}\bar{S} + \beta h\sum_i S_i + \beta h S_0 \quad (1.51)$$

仮に、 $\beta' = \beta(N+1)/N$, $h' = hN/(N+1)$ と定義すると

$$-\beta'\mathcal{H}_{N+1}(h') = \text{cst} + \frac{\beta}{2}N\bar{S}^2 + \beta S_0\bar{S} + \beta h\sum_i S_i + \beta h S_0 \quad (1.52)$$

$$= \text{cst} - \beta\mathcal{H}_N + \beta S_0\bar{S} + \beta h S_0 \quad (1.53)$$

このように、システムサイズ $N+1$ で (β', h') の系とシステムサイズ N で (β, h) の系を関連付けることができた。そして、この関係式により、新しいシステムサイズが $N+1$ の系に関する期待値をシステムサイズ N の系に関する期待値として簡単に計算することができる。実際、新しい変数 S_0 に関する期待値は以下のように計算できる：

$$\begin{aligned} \langle S_0 \rangle_{N+1, \beta', h'} &= \frac{\sum_{S_0, \mathbf{S}} S_0 e^{-\beta'\mathcal{H}_{N+1}(h')}}{\sum_{S_0, \mathbf{S}} e^{-\beta'\mathcal{H}_{N+1}(h')}} \\ &= \frac{\sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})} \sum_{S_0} S_0 e^{\beta(\bar{S}+h)S_0}}{\sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})} \sum_{S_0} e^{\beta(\bar{S}+h)S_0}} \\ &= \frac{\sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})} \sinh \beta(\bar{S}+h)}{\sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})} \cosh \beta(\bar{S}+h)} \\ &= \frac{\langle \sinh(\beta(\bar{S}+h)) \rangle_{N, \beta, h}}{\langle \cosh(\beta(\bar{S}+h)) \rangle_{N, \beta, h}} \end{aligned} \quad (1.54)$$

物理学者のように、 \bar{S} が決定論的な m^* に測度集中が生じることを仮定し（相共存線から外れる）、 N が十分大きい極限で、 $N, N+1$ の同じ m^* を持つとすると

$$\langle S_0 \rangle_{N+1, \beta', h'} = \frac{\langle \sinh(\beta(\bar{S}+h)) \rangle_{N, \beta, h}}{\langle \cosh(\beta(\bar{S}+h)) \rangle_{N, \beta, h}} \approx \frac{\sinh(\beta(m^*+h))}{\cosh(\beta(m^*+h))} = \tanh(\beta(m^*+h)) \quad (1.55)$$

さらに、 $N \rightarrow \infty$ で β と β^* の違いはなくなるため、以下の平均場方程式を得る：

$$m^* = \tanh(\beta(m^*+h)) \quad (1.56)$$

また、類似の考え方である cavity の考え方から free entropy を求めることができる。ここでも、free entropy が N に対して漸近的に線形であることを仮定する（より厳密な議論は Cesaro sums を用いて行う、Appendix 参照）。すなわち、 $Z_{N+1} = (N+1)\Phi(\beta, h)$, $\log Z_N = N\Phi(\beta, h)$ となり、以下が成り立つ：

$$\Phi(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \log \frac{Z_{N+1}(\beta, h)}{Z_N(\beta, h)} \quad (1.57)$$

ここでは, $N, N+1$ 系の β が共通である点に注意する. Eq. (1.51) より,

$$\begin{aligned} -\beta\mathcal{H}_{N+1} &= o(1) + \frac{\beta}{2} \frac{N^2 - 1 + 1}{N+1} \bar{S}^2 + \beta S_0 \frac{N+1-1}{N+1} \bar{S} + \beta h \sum_i S_i + \beta h S_0 \\ &= o(1) + \frac{\beta}{2} (N-1 + o(1)) \bar{S}^2 + S_0 (1 + o(1)) \bar{S} + \beta h N \bar{S} + \beta h S_0 \end{aligned} \quad (1.58)$$

$$= o(1) - \beta\mathcal{H}_N - \frac{\beta}{2} \bar{S}^2 + \beta(\bar{S} + h) S_0 \quad (1.59)$$

慎重に展開しないと見落とす可能性がある $-\beta\bar{S}^2/2$ に注意する. 上述の方法では, この項は β' に含むことができ, N が十分大きい極限では差がなく, 計算には現れない項である. しかし, ここでは Z_{N+1}/Z_N を評価する必要がある, この項は $o(1)$ の定数補正に影響を与える^{*11}.

$$\begin{aligned} \Phi(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \log \frac{Z_{N+1}}{Z_N} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \log \frac{1}{Z_N} \sum_{S_0, \bar{S}} e^{-\beta\mathcal{H}_N} e^{-\frac{\beta}{2} \bar{S}^2 + \beta(\bar{S} + h) S_0} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \log \frac{1}{Z_N} \sum_{\bar{S}} e^{-\beta\mathcal{H}_N} e^{-\frac{\beta}{2} \bar{S}^2} 2 \cosh(\beta(\bar{S} + h) S_0) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \log \langle e^{-\frac{\beta}{2} \bar{S}^2} 2 \cosh(\beta(\bar{S} + h) S_0) \rangle_{N, \beta} \end{aligned} \quad (1.60)$$

さらに, \bar{S} が m^* に集中することを用いると

$$\Phi(\beta, h) = -\beta \frac{(m^*)^2}{2} + \log 2 \cosh(\beta(m^* + h)) \quad (1.61)$$

この結果は以下の関係があることを意味している.

$$\Phi(\beta, h) = \max_m \tilde{\phi}(m, \beta, h) \quad (1.62)$$

$$\tilde{\phi}(m, \beta, h) = -\beta \frac{m^2}{2} + \log 2 \cosh(\beta(m + h)) \quad (1.63)$$

ここで, これまで方法で得られた $\phi(m)$ と $\tilde{\phi}(m)$ の関数系が異なることに気が付く. しかし, 関数系が異なっても, $\tilde{\phi}(m)$ の微分から最大化条件を求めると $m^* = \tanh(\beta(m^* + h))$ となり, これまでと同様の平均場方程式が現れる. 実際, 極値となる領域では関数が完全に一致することが簡単に確認できる: $m^* = \tanh(\beta(m^* + h))$ より, $\beta(m^* + h) = \tanh^{-1}(m^*)$ であることを用い, 以下の恒等式

$$\log(2 \cosh(\tanh^{-1}(x))) - x \tanh^{-1}(x) = H(x) = -\left(\frac{1+x}{2} \log \frac{1+x}{2} + \frac{1-x}{2} \log \frac{1-x}{2} \right) \quad (1.64)$$

となり

$$\tilde{\phi}(m^*, \beta, h) = -\beta \frac{m^*}{2} + \log 2 \cosh(\beta(m^* + h)) \quad (1.65)$$

$$= -\beta \frac{m^*}{2} + \log 2 \cosh(\tanh^{-1}(m^*)) \quad (1.66)$$

$$= -\beta \frac{m^*}{2} + m^* \tanh^{-1}(m^*) + H(m^*) \quad (1.67)$$

$$= -\beta \frac{m^*}{2} + \beta(m^*)^2 + \beta m^* h + H(m^*) \quad (1.68)$$

$$= \phi(m^*, \beta, h) \quad (1.69)$$

^{*11} N 系の Hamiltonian と比較すると S_0 の関数となる “site” 項と “link” 項が加わる. これらの項は, スピンを一つ追加した上に, 系に N 個のリンクが追加したことにより生じる項である. これは, 完全グラフのケースのみならず一般的な性質であり, スパースグラフ上での cavity 法を議論する際に有益である.

しかし、 $\tilde{\phi}(m)$ が正しい大偏差レートであると仮定するべきではない。読者は、 $\Phi(\beta, h)$ のルジャンドル変換が正しい大偏差レート ϕ を与えることを期待するべきである。これらの考察は、Appendix で示すように、完全に厳密な操作であることが保証される。これは、数学者がこの monograph で論じるいくつかの結果を証明するために使うことができる非常に重要なツールの一つである。

1.5 Toolbox: The “field theoretic” computation

この講義の最後に、物理学者がよく使っていて、次の章のレプリカ計算の中心となるトリックを紹介する。単純な Curie-Weiss モデルの文脈で学ぶのが教育的であるため、キュリーワイスモデルを例に紹介する。キュリーワイスモデルのハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_N(S) = -\frac{1}{2N} \sum_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1.70)$$

のように表される。そして分配関数は、

$$Z_N = \sum_S e^{\frac{N\beta}{2} \left(\sum_i \frac{S_i}{N} \right)^2 + N\beta h \left(\sum_i \frac{S_i}{N} \right)} \quad (1.71)$$

ここで、二項係数 $\Omega(m)$ の計算方法を知らないと仮定する。その代わりに、物理学で良く使われる、いわゆる “Dirac-Fourier” 法を使用していく。これは次のような恒等式

$$\int dm f(m) \delta(m - x) = f(x) \quad (1.72)$$

より正確には、物理学者は、

$$\int dm f(m) \delta(Nm - x) = \frac{1}{N} \int dm f(m) \delta\left(m - \frac{x}{N}\right) = \frac{1}{N} f\left(\frac{x}{N}\right) \quad (1.73)$$

ここで、評価するべき free entropy には、 $1/N$ の項は $\log N/N = o(1)$ となり漸近的には問題とならないことに注意する。そのため、分配関数を以下のように表せる。

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_S e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= N \sum_S \int dm \delta(Nm - \sum_i S_i) e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2 + hm)} \end{aligned} \quad (1.74)$$

$$\begin{aligned} &= \int dm e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2 + hm + \frac{\log N}{\beta N})} \sum_S \delta(Nm - \sum_i S_i) \\ &\asymp \int dm e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2 + hm)} \sum_S \delta(Nm - \sum_i S_i) \end{aligned} \quad (1.75)$$

m を固定した時のエントロピー (状態数) を計算する必要があるが、ここでは組み合わせ論で計算できないことにする。代わりに、デルタ関数のフーリエ変換を用いて書き表す:

$$Z = \int dm \int d\lambda e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2 + h)} \sum_S e^{i2\pi\lambda(Nm - \sum_i S_i)}$$

さらに、 $\hat{m} = i2\pi\lambda$ と置いて、複素空間上での積分の形で表す:

$$Z = 2i\pi \int_{-1}^1 dm \int_{-2\pi i\infty}^{2\pi i\infty} e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2 + h + \hat{m}m)} \sum_S e^{-\hat{m} \sum_i S_i} \quad (1.76)$$

$$\asymp \int_{-1}^1 dm \int_{-2\pi i\infty}^{2\pi i\infty} e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2 + h + \hat{m}m)} (2 \cosh \hat{m})^N \quad (1.77)$$

見た目は複雑そうであるが、以下の量のみ興味があることに注意する:

$$\frac{\log Z}{N} \rightarrow \frac{1}{N} \left[\int_{-1}^1 dm \int_{-2\pi i\infty}^{2\pi i\infty} e^{N\beta(\frac{1}{2}m^2+h+\hat{m}m)} (2 \cosh \hat{m})^N \right]$$

この積分は, Cauchy の定理を用いて, \hat{m} の積分路を変形し, 複素数平面上の鞍点に入れることで, 評価できる. この手法は, 鞍点法と呼ばれ, 複素平面上のラプラス法の一般化である. ゆえに, Free entropy は m, \hat{m} に鞍点法を用いることで以下のように評価できる.

$$\Phi(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log Z}{N} = \text{extr}_{m, \hat{m}} g(m, \hat{m}) \quad (1.78)$$

$$g(m, \hat{m}) = \frac{\beta}{2} m^2 + \beta h m + \hat{m} m + \log 2 \cosh \hat{m} \quad (1.79)$$

この形式は, 前節で得られた形式と一致するのと同じように一致するのだろうか? まずは, \hat{m} についての積分を実行すると, \hat{m} に関する鞍点条件より, $m = -\tanh(\hat{m})$, すなわち $\hat{m} = -\tanh^{-1}(m)$ が得られる. この関係式を代入すると以下を得る:

$$g(m) = \frac{\beta}{2} m^2 - \beta h m - m \tanh^{-1}(m) + \log 2 \cosh(\tanh^{-1} m)$$

さらに, Eq. (1.64) の恒等式を用いると

$$g(m) = \frac{\beta}{2} m^2 + \beta h m + H(m) = \phi(m, \beta, h)$$

ゆえに, $\Phi(\beta, h) = \text{extr}_m \phi(\beta, m)$ を再現する. しかしながら, 多くの物理学者は等価であるが異なる方法で評価することで free entropy を評価することが多い. 具体的には, m に関する鞍点条件から $\hat{m} = -\beta(m + h)$ という鞍点条件を求め, m の代わりに \hat{m} を除去する:

$$\Phi(\beta, h) = \text{extr}_m - \frac{\beta}{2} m^2 + \log 2 \cosh(\beta(m + h)) = \max_m \tilde{\phi}(m, h, \beta)$$

前節の cavity 法の計算で確認したように, この式も正しいので問題はない. むしろ, この方法で両方の形式が求まるのは心強い.

Bibliography

Curie-Weiss 模型は, フランス人 Pierre Curie (1895) と Pierre Weiss (1907) の先駆的な研究から着想を得たものである. 物理学における平均場モデルと変分法の歴史は, Kadanoff (2009) によく述べられている. Curie-Weiss 模型の厳密解の導出は Dembo et al. (2010a) に従う. ラプラス法は, Pierre Simon de Laplace がその革命的な著作 Laplace (1774) で導入され, 統計学の分野を確立した. 鞍点法は Debye (1909) が最初に発表し, Riemann (1863) の未発表の指摘によるとされる. 大偏差原理に関する古典的な文献は Dembo et al. (1996) が有名である. Touchette (2009) は, 統計力学に対する大偏差原理のアプローチについて述べており, 物理学者にはお勧めの一冊である. 統計学や機械学習における変分法は, Wainwright and Jordan (2008) で詳しく述べられている.

1.6 Exercices

EXERCISE 1.1: BOUNDS ON THE BINOMIAL

第一章の最初で現れた二項係数に関する不等式の証明について説明する:

$$\frac{e^{nH(k/n)}}{n+1} < \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} < e^{nH(k/n)} \quad (1.80)$$

ここで, $H(p) = -p \log p - (1-p) \log(1-p)$ であり, Binomial Entropy とした (我々は, 第一章では $p = (1+m)/2$ とした).

EXERCISE 1.2: LAPLACE METHOD

この Exercise では, 以下の積分の $\lambda \rightarrow \infty$ 極限に興味がある:

$$I(\lambda) = \int_a^b dt h(t) e^{\lambda f(t)} \quad (1.81)$$

EXERCISE 1.3: SADDLE POINT METHOD

EXERCISE 1.4: METROPOLIS-HASTINGS ALGORITHM

再び Curie-Weiss モデルのハミルトニアンを考える. N 個のスピン配置をギブス確率分布

$$P(S = s; \beta, h) = \frac{1}{Z_N(\beta, h)} \exp(-\beta \mathcal{H}(s; h)), \quad (1.82)$$

からサンプリングする非常に実用的な方法はマルコフ連鎖モンテカルロ法, 特に Metropolis-Hastings アルゴリズムである. それは以下のように機能する.

- $i = 1, \dots, N$ のスピンの値 $s_i = \pm 1$ を設定する.
- スピン i をランダムに選び, 現段階のエネルギー E_{now} とスピン i をフリップ ($S_i^{\text{new}} = -S_i^{\text{old}}$) した際のエネルギー E_{flip} を計算する
- $[0, 1]$ の一様分布から値 r をサンプルして, $r < e^{\beta(E_{\text{now}} - E_{\text{flip}})}$ なら, スピンのフリップを実行する ($S_i^{\text{new}} = -S_i^{\text{old}}$). そうでない場合は, そのままにする.
- step 2 に戻る

このプログラムを長く続けていると, 最終的な配位 $\{S\}$ が正しい確率 (Eq. (1.82)) で生成されることが保証される.

(a) すべてのスピンの $S_i = 1$ となる配位を初期配位として設定し, $h = 0, \beta = 1.2$ として, 十分に長い時間 (例えば, スピンを反転 $t_{\text{max}} = 100N$ 回の試行するくらい) MCMC を実行する. その際, スピンあたりの磁化 $m = \sum_i S_i / N$ の値を時間の関数として観察せよ. また, $N = 10, 50, 100, 200, 1000$ スピンのときのプロットを作成せよ. 最後に $N = \infty$ の厳密な理論結果と比較して, 気づきと結論を述べよ.

Answer 数値実験を行った結果を Fig. 1.5 に示す. $\beta = 1.2, h = 0$ では $\phi(m)$ に二つの大域的最適解 $\pm m^*$ が存在する. アルゴリズムは $\bar{S} = (1, \dots, 1)$ で初期化されるため $N \rightarrow \infty$ で m^* に到達する. しかし, 有限の N で数値実験を行っているため e^N 更新を行うと $-m^*$ に到達する可能性がある. 実際, そのようなふるまいが $N = 10, 50$ でみられる. 実装例は, “Ex 1.4-1.5 の Notebook” へ.

(b) すべてのスピンの 1 に等しい配位を初期配位として設定し, $h = -0.1, \beta = 1.2$ として, MCMC を実行する. その際, 1 スピンあたりの磁化 $m = \sum_i S_i / N$ の値を時間の関数として再度確認せよ. また, $N = 10, 50, 100, 200, 1000$ スピンのプロットを作成せよ. 最後に $N \rightarrow \infty$ の厳密な理論結果と比較して気づきと結論を述べよ.

Answer 数値実験を行った結果を Fig. 1.6 に示す. $\beta = 1.2, h = -1, 0$ のとき $\phi(m)$ は一つの大域的最適解を持つ. 有限サイズ効果は弱く, N が小さくても平衡解に到達する. 実装例は, “Ex 1.4-1.5 の Notebook” へ.

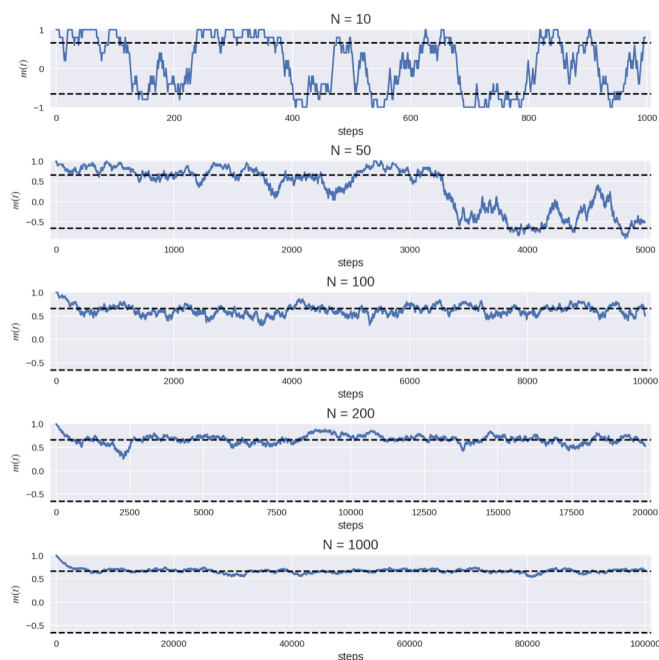


図 1.5 $h = -0.1, \beta = 1.2$ の設定で各サイズに対して Metropolis-Hastings アルゴリズムを実装した結果, 黒い点線は $N \rightarrow \infty$ の理論的な結果を表す.

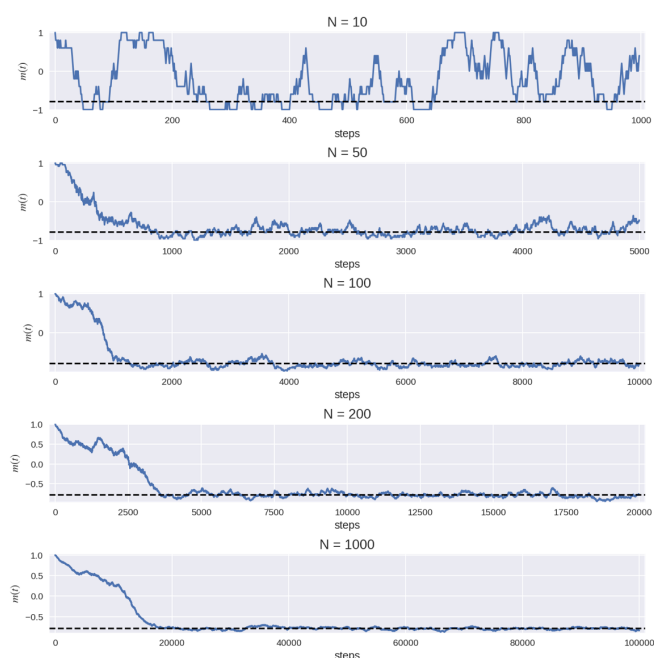


図 1.6 $h = -0.1, \beta = 1.2$ の設定で各サイズに対して Metropolis-Hastings アルゴリズムを実装した結果, 黒い点線は $N \rightarrow \infty$ の理論的な結果を表す.

EXERCISE 1.5: GLAUBER ALGORITHM

curie-wise model の確率測度からサンプリングする別のアルゴリズムは, Glauber または Heat bath Algorithm として知られている. スピンをランダムに反転させる代わりに, そのスピンを局所的な環境で熱的に変化させる方法

である。

Part I: The algorithm

(a) N スピン系の全磁化を $\bar{S} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i$ とする。任意の $i = 1, \dots, N$ に対して、スピン S_i 以外で条件付けたときの S_i の確率分布が

$$\mathbb{P}(S_i = \pm 1 \mid \{S_j\}_{j \neq i}) \equiv P_{\pm} = \frac{1 \pm \tanh \beta(\bar{S} + h)}{2}$$

となることを示せ。

Answer: Metropolis-Hastings と同様に, Glauber dynamics は, スピンのランダムな局所更新により定義される。しかし, 前者とは異なり, 後者は各ステップで平衡状態保つような遷移確率 P_{\pm} を求める。この遷移率を求めるためには, 更新するスピン以外で条件づけたときにボルツマン分布に従って $S_i = \pm 1$ がどのように更新されるかを表す確率分布

$$P_{\pm} = \mathbb{P}(S_i = \pm 1 \mid \{S_j\}_{j \neq i}) \quad (1.83)$$

この条件付き確率は, ボルツマン分布を

$$\mathbb{P}(\{S_j\}_{j=1}^N) = \mathbb{P}(S_i, \{S_j\}_{j \neq i}) = \mathbb{P}(S_i \mid \{S_j\}_{j \neq i}) P(\{S_j\}_{j \neq i}) \quad (1.84)$$

のように分解して

$$\mathbb{P}(S_i = \pm 1 \mid \{S_j\}_{j \neq i}) = \frac{\mathbb{P}(\{S_j\}_{j \neq i})}{\mathbb{P}(\{S_j\}_{j=1}^N)} = \frac{1}{Z_N} e^{\beta \mathcal{H}_N(s)} \mathbb{P}(\{S_j\}_{j \neq i}) \quad (1.85)$$

さらに, N スピン系のハミルトニアンは以下のように s_i に依存する部分とそれ以外の部分に分解することができる:

$$\mathcal{H}_N(s) = -\frac{1}{2N} \sum_{jk} s_j s_k - h \sum_j s_j \quad (1.86)$$

$$= -\frac{s_i^2}{2N} - \frac{s_i}{N} \sum_{j \neq i} s_j - \frac{1}{2N} \sum_{j, k \neq i} s_j s_k - h s_i - h \sum_{j \neq i} s_j \quad (1.87)$$

$$= -\frac{1}{2N} - s_i \left(\frac{1}{N} \sum_{j \neq i} s_j + h \right) + \mathcal{H}_N(\{s_j\}_{j \neq i}) \quad (1.88)$$

この結果を代入すると

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(S_i = s \mid \{S_j\}_{j \neq i}) &= \frac{1}{Z_N} e^{\beta(-\frac{1}{2N} + \mathcal{H}_N(\{s_j\}_{j \neq i}))} \mathbb{P}(\{S_j\}_{j \neq i}) e^{\beta s_i (\frac{1}{N} \sum_{j \neq i} s_j + h)} \\ &= \frac{1}{Z_N(\{s_j\}_{j \neq i})} e^{\beta s_i (\frac{1}{N} \sum_{j \neq i} s_j + h)} \\ &= \frac{1}{Z_N(\{s_j\}_{j \neq i})} e^{\beta s_i (\bar{S} + \frac{1}{N} s_i + h)} \end{aligned}$$

となる。ここで, $j \neq i$ の規格化定数 $\bar{Z}_N(\{s_j\}_{j \neq i})$ は以下のように定義した:

$$\bar{Z}_N(\{s_j\}_{j \neq i}) = \sum_{s \in \{\pm 1\}} \mathbb{P}(S_i = s \mid \{S_j\}_{j \neq i}) = e^{\beta(\bar{S} + \frac{1}{N} + h)} + e^{-\beta(\bar{S} - \frac{1}{N} + h)}$$

ゆえに条件付き確率は以下のように計算できる:

$$\mathbb{P}(S_i = s \mid \{S_j\}_{j \neq i}) = \frac{e^{\beta s (\bar{S} + \frac{1}{N} s + h)}}{e^{\beta(\bar{S} + \frac{1}{N} + h)} + e^{-\beta(\bar{S} - \frac{1}{N} + h)}}$$

さらに, $N \gg 1$ のとき条件付き確率は以下ようになる:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(S_i = s \mid \{S_j\}_{j \neq i}) &= \frac{e^{\beta s(\bar{S}+h)}}{e^{\beta(\bar{S}+h)} + e^{-\beta(\bar{S}+h)}} \\ &= \frac{1}{2 \cosh(\beta(\bar{S}+h))} (\cosh(\beta(\bar{S}+h)) + s \sinh(\beta(\bar{S}+h))) \\ &= \frac{1 + s \tanh(\beta(\bar{S}+h))}{2}\end{aligned}$$

(b) Glauber algorithm は以下で定義される:

- N 個の初期配位を設定し, 磁化 m_0 とエネルギー E_0 を計算する.
- ランダムにスピン S_i を選び, $r \in [0, 1]$ の一様乱数を生成する. 仮に $r < P_+$ ならば, $S_i = 1$ とし, そうでない場合は $S_i = -1$ とする. そして, その配位の磁化 m_t とエネルギー E_t を計算する.
- 収束するまで 2 を繰り返す.

exercise 1.4 の (a), (b) の条件のもと, この algorithm を実装し, 違いを考察せよ.

Answer: Part II

ここでは, Glauber algorithm から Curie-Weiss モデルの平均場方程式を導きだす.

(a) m_t を時刻 t の全磁化として, $P_{t,m} = \mathbb{P}(m_t = m)$ と定義する. 簡単のため $h = 0$ とする. $\delta \ll 1$ に対して以下が成り立つことを示せ:

$$\begin{aligned}P_{t+\delta t, m} &= P_{t, m+\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 - \tanh(\beta(m+2/N))}{2} + P_{t, m-\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 + \tanh(\beta(m-2/N))}{2} \\ &\quad + P_{t, m} \times \left\{ \frac{1}{2} (1+m) \frac{1 + \tanh(\beta m)}{2} + \frac{1}{2} (1-m) \frac{1 - \tanh(\beta m)}{2} \right\}\end{aligned}$$

この方程式はマスター方程式 (master equation) として知られている.

Answer: まず, この問題を解くための準備を以下にまとめる.

- N_{\pm} を $S_i = \pm 1$ となるスピン数とすると, 全スピン N は, $N = N_+ + N_-$ と分解することができる. その際磁化は以下のように計算できる:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i S_i = \frac{N_+ - N_-}{N} = \frac{N_+ - (N - N_+)}{N} = \frac{2N_+}{N} - 1 = 1 - \frac{2N_-}{N}$$

- 上記の結果から, 磁化が m のとき N スピンからスピン ± 1 を選ぶ確率は, 以下のように評価できる

$$P_{\text{select}}(S_i \mid \bar{S} = m, S_i = \pm 1) = \frac{N_{\pm}}{N} = \frac{1 \pm m}{2}$$

- また, スピンを ± 1 から ∓ 1 にフリップすると磁化は以下のような影響を受ける:

$$m \rightarrow m \mp \frac{2}{N}$$

$P_{t+\delta t, m}$ になるためには, 以下の三つの可能性が考えられる:

1. すでに時刻 t で磁化が m の場合: この場合アルゴリズムの step 2. で $S_i = \pm 1$ を選ぶが, 変化すると磁化が変動してしまうため変化しないような事象が $P_{t+\delta t, m}$ に寄与する. その事象が生じる確率は以下のように

なる。

$$\begin{aligned} P_{\text{select}}(S_i | \bar{S} = m, S_i = +1)P_+(m) + P_{\text{select}}(S_i | \bar{S} = m, S_i = -1)P_-(m) \\ = \frac{1}{2}((m+1)P_+(m) + (1-m)P_-(m)) \end{aligned}$$

のように表せる。

2. 時刻 t に磁化 $m + 2/N$ の場合: $t + \delta t$ で m となるためには, スピンは $+1 \rightarrow -1$ へのフリップが必要となる.
この事象が生じる確率は以下となる:

$$P_{\text{select}}(S_i | \bar{S} = m + \frac{2}{N}, S_i = +1)P_-\left(m + \frac{2}{N}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + m + \frac{2}{N}\right)P_-\left(m + \frac{2}{N}\right)$$

3. 時刻 t に磁化が $m - 2/N$ の場合; $t + \delta t$ で m となるためには, スピンは $-1 \rightarrow +1$ のフリップが必要となる.
この事象が生じる確率は以下となる:

$$P_{\text{select}}(S_i | \bar{S} = m + \frac{2}{N}, S_i = -1)P_+\left(m - \frac{2}{N}\right) = \frac{1}{2}\left(1 - m + \frac{2}{N}\right)P_+\left(m - \frac{2}{N}\right)$$

この結果を表せると以下が得られる。

$$\begin{aligned} P_{t+\delta t, m} = \frac{1}{2}((m+1)P_+(m) + (1-m)P_-(m))P_{t, m} + \frac{1}{2}\left(1 + m + \frac{2}{N}\right)P_-\left(m + \frac{2}{N}\right)P_{t, m+\frac{2}{N}} \\ + \frac{1}{2}\left(1 - m + \frac{2}{N}\right)P_+\left(m - \frac{2}{N}\right)P_{t, m-\frac{2}{N}} \end{aligned}$$

あとは, 遷移確率 P_{\pm} を代入して, 証明終了。

(b) $P_{t, m}$ に関する磁化を以下のように定義する:

$$\langle m(t) \rangle = \int dmmP_{t, m} \quad (1.89)$$

マスター方程式から以下が得られることを示せ。

$$\begin{aligned} \langle m(t + \delta t) \rangle = \int P_{t, m+\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 - \tanh \beta \left(m + \frac{2}{N} \right)}{2} m dm \\ + \int P_{t, m-\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 - \tanh \beta \left(m - \frac{2}{N} \right)}{2} m dm \\ + \int P_{t, m} \times \left\{ \frac{1+m}{2} \frac{1 + \tanh \beta(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \frac{1 - \tanh \beta(m)}{2} \right\} m dm \end{aligned}$$

Answer: マスター方程式に m を掛けて, m に関して積分すると直ちに示せる:

$$\begin{aligned} \int dmmP_{t+\delta t, m} \equiv \langle m(t + \delta t) \rangle = \int P_{t, m+\frac{2}{N}} \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \frac{1 - \tanh \beta(m + 2/N)}{2} m dm \\ + \int P_{t, m-\frac{2}{N}} \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - m + \frac{2}{N} \right) \right\} \frac{1 + \tanh \beta(m - 2/N)}{2} m dm \\ + \int P_{t, m} \left\{ \frac{1}{2}(1+m) \frac{1 + \tanh \beta(m)}{2} + \frac{1}{2}(1-m) \frac{1 - \tanh \beta(m)}{2} \right\} m dm \end{aligned}$$

(c): 第一項, 第二項の積分変数を $m \rightarrow m \pm 2/N$ に変換し, $\delta = \frac{1}{N}$ として, $N \rightarrow \infty$ で以下の上微分方程式が導けることを示せ:

$$\frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = -\langle m(t) \rangle + \tanh \beta \langle m(t) \rangle$$

Answer: 題問にもあるように第一項, 第二項の積分変数を以下のように変換する:

$$\int dmm \times P_{t, m \pm \frac{2}{N}} \frac{1}{2} \left(1 \pm m + \frac{2}{N} \right) \left(\frac{1 \mp \tanh \beta(m \pm \frac{2}{N})}{2} \right) = \int dm \left(m \mp \frac{2}{N} \right) P_{t, m} \frac{1}{2} (1 \pm m) \left(\frac{1 \mp \tanh \beta(m)}{2} \right)$$

この結果を (b) で示した式に代入すると以下を得る:

$$\langle m(t + \delta t) \rangle = \int P_{t, m} \left(m + \frac{1}{N} (-m + \tanh \beta(m)) \right) = \langle m(t) \rangle + \frac{1}{N} (-\langle m(t) \rangle + \langle \tanh \beta m(t) \rangle)$$

$\delta = \frac{1}{N} \ll 1$ より, 以下を得る:

$$\frac{\langle m(t + \frac{1}{N}) \rangle - \langle m(t) \rangle}{\frac{1}{N}} = \frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = -\langle m(t) \rangle + \langle \tanh \beta m(t) \rangle \quad (1.90)$$

さらに $N \rightarrow \infty$ としたとき, $\langle \tanh m \rangle = \tanh \langle m \rangle + O(1/N)$ となることを用いると*¹², 問題の自分方程式を得る:

$$\frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = -\langle m(t) \rangle + \tanh \beta \langle m(t) \rangle$$

(d): 微分方程式の定常点が, キュリーワイス模型の平均場方程式となることを示せ.

Answer: 定義より定常点は,

$$\frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle m(t) \rangle = \tanh \beta \langle m(t) \rangle \quad (1.91)$$

この結果は, Curie-Weiss の平均場方程式である.

(e): 全てのスピンの 1 となるような初期条件のもと, さまざまな h, β に対して, (c) で得た理論的な常微分方程式の結果と Part I, (b) の結果を比較せよ. その際, どのような値でマルコフ連鎖は平衡値に達するのか, 自由エントロピー $\phi(m)$ の局所最適解に陥るのはいつかという点に着目せよ.

Answer まずは, $(h = 0, \beta = 1.2)$, $(h = -0.1, \beta = 1.2)$ のときに Glauber Dynamics を実行した結果と理論的に得られた常微分方程式の結果をそれぞれ Fig. 1.7, Fig. 1.8 に示す. $m(t)$ の挙動は, Ex 1.4 と変わらない. また, N が大きくなるにつれて常微分方程式の予測に近づくふりが見られる.

次に, $N = 3000$ かつ $h = 0, -0.1, \beta = 1.2$ の条件のもと, Metropolis Algorithm と Glauber Algorithm を比較した結果を Fig. 1.9 に示す. Metropolis Algorithm の方が早く平衡状態に到達することがわかった. また, 当然の結果ではあるが, Metropolis Algorithm の結果は, Glauber Dynamics の理論的な常微分方程式の予測から外れる*¹³.

実装例は, “Ex 1.4-1.5 の Notebook” へ.

Supplement 1.6.1 (臨界緩和 (critical slowing down)). 転移点近傍で $m(t)$ が十分小さいとき, 常微分方程式は $m(t)$ の一次の項まで展開して以下となる:

$$\frac{d\langle m(t) \rangle}{dt} = (\beta - 1) \langle m(t) \rangle$$

このとき微分方程式は簡単に解くことができる:

$$\langle m(t) \rangle = \langle m(0) \rangle e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad \tau \equiv \frac{T}{T_c - T}$$

このように磁化は時間に対して指数関数的に減衰する. 減衰の度合を表すパラメータ τ は緩和時間 (relaxation time) と呼ばれる. 緩和時間は温度 T に依存し, $T \rightarrow T_c$ で発散する. すなわち, Glauber dynamics では平衡状態 $\langle m(\infty) \rangle = 0$ に到達するまで無限の時間がかかる. この現象は, 臨界緩和 (critical slowing down) と呼ばれる.

*¹² これはどうやって導出するんだ...

*¹³ Metropolis に関しても Master 方程式から $N \rightarrow \infty$ の常微分方程式を計算できる気がする... その際, 微分方程式が Glauber の場合とどのように異なるか興味はある...

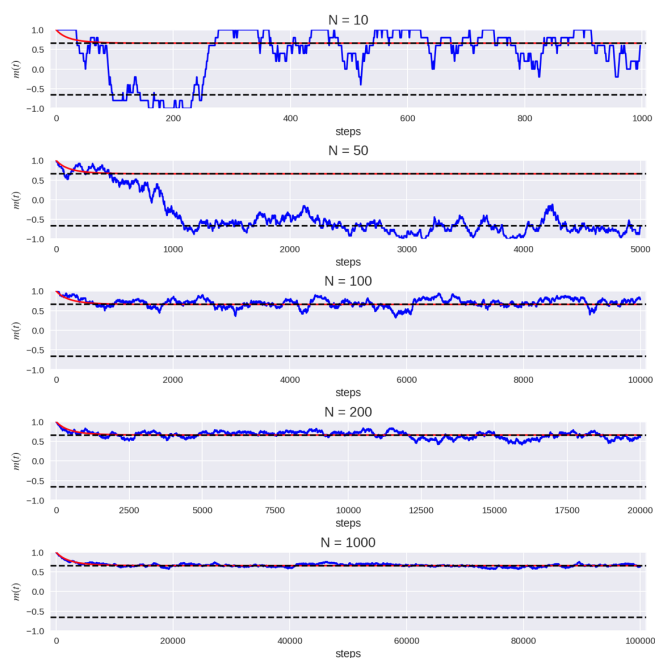


図 1.7 $h = 0.0, \beta = 1.2$ の設定で各サイズに対して Glauber アルゴリズムを実装した結果, 黒い点線は $N \rightarrow \infty$ の理論的な結果を表す. また, 赤線は (c) で得られた常微分方程式を数値的に解いた値を表す. $h = 0$ の場合, ポテンシャル関数は二つの最小値が存在するため, 理論的な結果は二つあることに注意する.

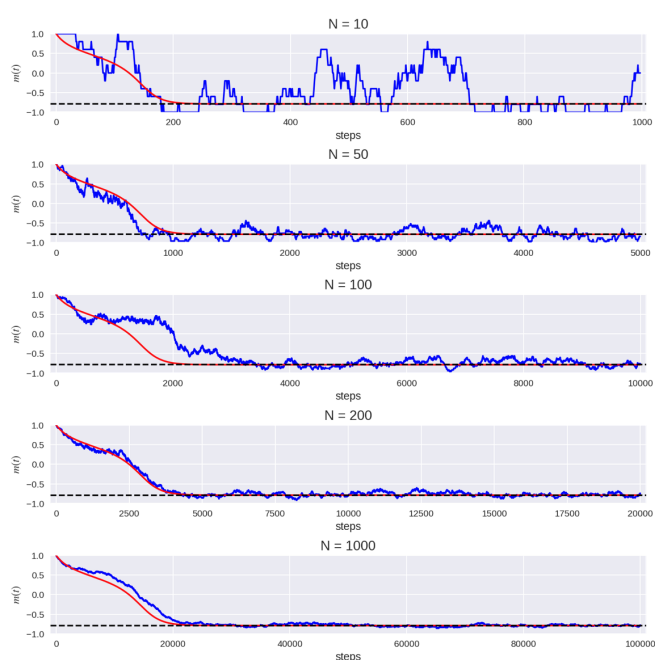


図 1.8 $h = -0.1, \beta = 1.2$ の設定で各サイズに対して Glauber アルゴリズムを実装した結果, 黒い点線は $N \rightarrow \infty$ の理論的な結果を表す. また, 赤線は (c) で得られた常微分方程式を数値的に解いた値を表す.

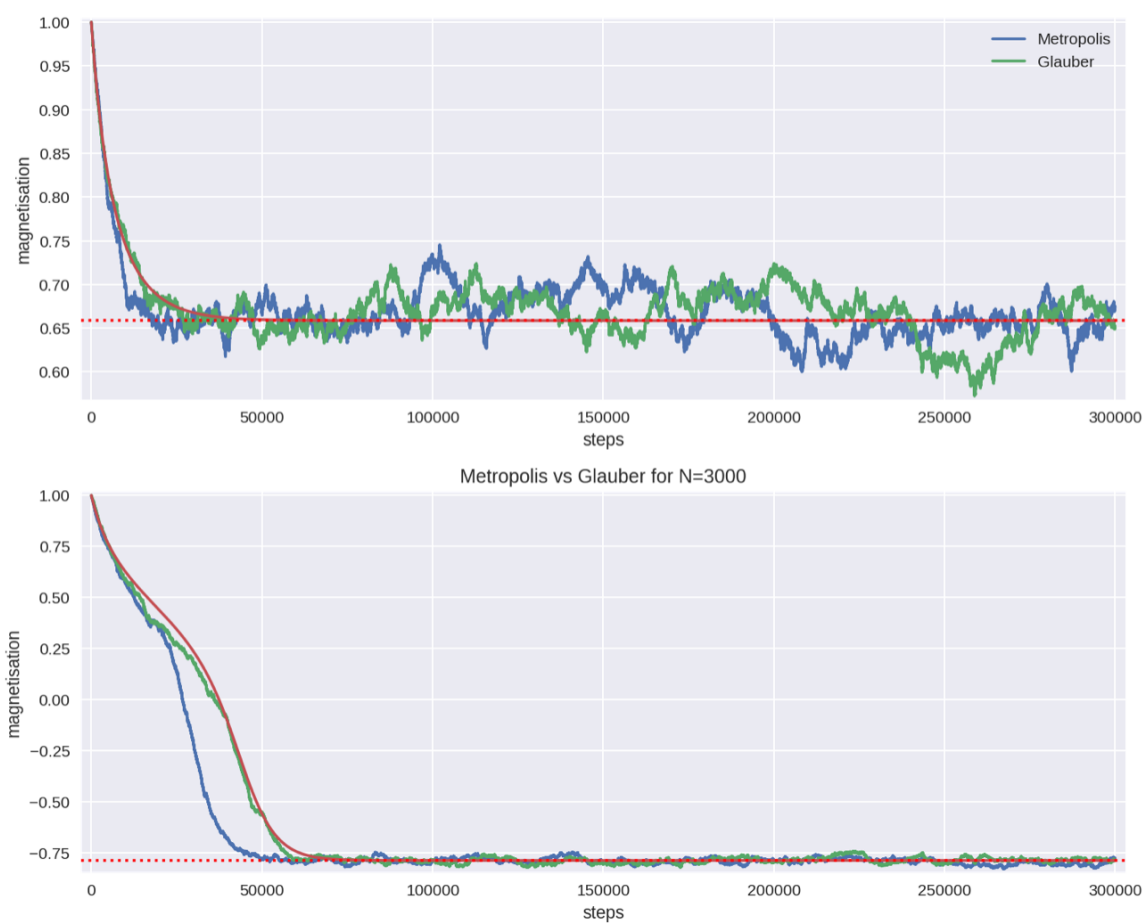


図 1.9 $N = 3000$ かつ $h = 0.0, -0.1, \beta = 1.2$ の設定で各サイズに対して Metropolis-Hastings アルゴリズムと Glauber アルゴリズムを実装した結果, 黒い点線は $N \rightarrow \infty$ の理論的な結果を表す. $h = 0$ の場合, ポテンシャル関数は二つの最小値が存在するため, 理論的な結果は二つあることに注意する.

第 2 章

A simple example: The Random Field Ising Model

Let's start at the very beginning. A very good place to start, The sound of music - 1965

より難しい問題に進んでいく。以降も引き続き、 N スピン ($s_i \in \{\pm 1\}$) 系で Hamiltonian が以下で与えられる場合を考える:

$$\mathcal{H}_{\text{RFIM}}(\mathbf{s}, \mathbf{h}) = -\frac{N}{2} \left(\sum_i \frac{s_i}{N} \right)^2 - \sum_i h_i s_i, \quad h_i \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathcal{N}(0, \Delta)$$

しかし、外場 \mathbf{h} は、 $h_i \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathcal{N}(0, \Delta)$ に従い、ある実現値に固定されていることにする。

これはイジングモデルの単純な変種だが、確率変数の外場 \mathbf{h} が新たに付加されている点が新しい所である。これにより、問題が少し複雑となる。また、このモデルは、ランダムな磁場に由来して、RFIM(Random Field Ising Model) と呼ばれている。我々はこのモデルに対して、多くの疑問を持つだろう。例えば、エネルギーを最小にするスピンの配位はどうなるか？ これは、すべての変数を同じ方向に揃える働きと、局所的なランダム磁場の方向に揃える働きが競合するため非自明である。さらに、この基底状態のエネルギーはどうなるか？ また、 \mathbf{h} に別のランダムな値を選んだ場合、エネルギーは大きく変動するのだろうか？ さらに、エネルギー最小状態の配位を見つけるアルゴリズムは存在するのだろうか？

2.1 Self-averaging and Concentration

我々は、このモデルの熱力学極限 (システムサイズ N 極限) の挙動に興味がある。まず、モデルに含まれる確率変数をどう扱うべきだろうか？ この問いに対して、ランダム系の統計力学の分野全体、及びその最適化や統計学への応用は、“自己平均性” という考え方に立脚している。簡単に説明すると、 $N \rightarrow \infty$ (数学者にとっての漸近極限, 物理学者にとっての熱力学的限界) において、 \mathbf{h} の特定の実現値ごとにモデルの振る舞いを議論することは重要でなく、確率変数 \mathbf{h} の平均的な挙動を見れば良いという強力な考え方である。

以降、この考え方が、どのように厳密に証明されるかを見ていく。まず、分配関数 Z_N は、 N に対して指数関数的なオーダーなため、平均値周りの変動も非常に大きくなることが予想される。しかし、幸いなことに、モデルの性質を議論するために重要な量は $\log Z_N(\mathbf{h})/N$ であり、 $N \rightarrow \infty$ のとき、 $O(1)$ の値に収束することが期待される。 $\log Z_N(\mathbf{h})/N$ は確率変数であり、 \mathbf{h} の値に依存するが、 $\log Z_N(\mathbf{h})/N$ の典型的な値は平均値に近いことが期待される。このように十分な大きな系の性質が、平均値の性質に近いことを統計物理学では、自己平均化 (self-averaging) と呼ぶ。また、確率論では、測度の集中現象 (concentration of measure phenomenon) と呼ばれる。

実際, Random Field Ising model の場合, free entropy が熱力学極限で平均値近傍に集中することを示すことが可能である.

Theorem 2.1.1 (Self-averaging). $\Phi_N(\mathbf{h}, \beta) \equiv \log Z_N(\beta, \mathbf{h})/N$ を RFIM の自由エントロピー密度とする. このとき以下が成り立つ:

$$\text{Var} [\Phi_N(\mathbf{h}, \beta)] \leq \frac{\Delta\beta^2}{N} \quad (2.1)$$

Proof. 証明は, 以下の Gaussian Poincaré の不等式を用いる:

Theorem 2.1.2 (Gaussian Poincaré inequality). $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ を smooth function^{*1}かつ X を分散共分散行列 $\Gamma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ の多次元ガウス分布に従う確率変数 $X \sim \mathcal{N}(0, \Gamma)$, $\Gamma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ とする. このとき以下が成り立つ:

$$\text{Var}[f(X)] \leq \mathbb{E} [\langle \Gamma \nabla_X f(X), \nabla_X f(X) \rangle] \quad (2.2)$$

Proof. Exercice 9 を参照. □

RFIM に対して, 不等式の右辺部分は,

$$\nabla \Phi_N(\mathbf{h}, \beta) = (\partial_{h_i} \Phi_N(\mathbf{h}, \beta))_{i=1}^N, \quad \partial_{h_i} \Phi_N(\mathbf{h}, \beta) = \frac{\beta}{N} \langle S_i \rangle \quad (2.3)$$

となり,

$$\begin{aligned} \text{Var}_{\mathbf{h}} [\Phi_N(\mathbf{h}, \beta)] &\leq \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\langle \Delta I \nabla \Phi_N(\mathbf{h}, \beta), \nabla \Phi_N(\mathbf{h}, \beta) \rangle] \\ &= \frac{\Delta\beta^2}{N^2} \sum_i \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\langle S_i \rangle^2] \leq \frac{\Delta\beta^2}{N} \end{aligned} \quad (2.4)$$

□

そのため, \mathbf{h} の各実現値に対して Free Entropy 密度を計算する代わりに, \mathbf{h} 上の期待値を計算すれば良い. すなわち

$$\Phi(\beta, \Delta) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_{\mathbf{h}} \Phi_N(\beta, \mathbf{h}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log Z(\beta, \mathbf{h})] \quad (2.5)$$

を計算すれば良い. 自己平均性は, $N \rightarrow \infty$ のとき, $\mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log Z(\beta, \mathbf{h})]/N$ が $\log Z(\beta, \mathbf{h})/N$ に近づくことを保証する. 確率論では, 分散が 0 となるときの, 確率変数が確率的に収束するといい, これまでの議論により, $\Phi_N(\beta, \mathbf{h})$ が確率的に $\Phi(\beta, \Delta)$ に収束することを示した. さらに, もう少し解析を進めると期待値からずれた値の確率重みが指数関数的に小さくなることを示すことができ, ある程度の N の値でもこの主張が成立することを示せる. しかし, この結果は, 我々に質問を提示する: どのように \log の期待値を含む, $\Phi(\beta, \Delta)$ を計算するのか?

2.2 Replica Method

前節の対数の平均を求めるために, 統計物理学で広く用いられている強力な経験的手法がある. それが, 1970 年に Sir Sam Edwards と Marc Kac によって提案されたレプリカ法である. レプリカ法の主張は, 0 に十分近い n に対して

$$Z^n = e^{n \log Z} = 1 + n \log Z + o(n) \rightarrow \log Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} \quad (2.6)$$

^{*1} smooth function(Wikipedia): 関数 f が(それが属する文脈での議論に用いるに) 十分大きな n に関して C^n -級であるとき, 滑らかな関数 (smooth function) と総称される. またこのとき, 関数 f は十分滑らかであるともいう. このような語法を用いるとき, n は十分大きければよく, その値が厳密に知られている必要はない, とくに n は固定して考えないのが通例である.

が成り立つことである. Z が確率変数とし, 極限と期待値の入れ替えが妥当であると仮定すると*2

$$\mathbb{E}[\log Z] = \mathbb{E}\left[\lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}\right] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\mathbb{E}[Z^n] - 1}{n} \quad (2.7)$$

が成り立つ. これがレプリカ法の根幹であり, 困難な Z の対数の平均を, Z の累乗の平均に置き換えることができる. 仮に n を整数とするなら, Z^n の計算可能性が現れる. そして, 仮に n を整数のもと計算が可能ならば, $n \in \mathbb{R}$ に対しても有効である「ふり」をして, $\mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ への解析接続を行い, $n \rightarrow 0$ の極限を取る. これは“アクロバティック”であり, 厳密な数学的な主張ではないが, 物理学者である Parisi と Mézard の過去数十年間に提案したガイドラインを尊重すると一つの有益な手法であることがわかる. 実際, この方法と 厳密な計算を比較し, 厳密な計算結果と同様の計算結果を導く例が存在する. そのため, 近年ではレプリカ法に深い信頼がある*3. ここからは, Random Field Ising 模型の $\Phi(\beta, \Delta)$ の計算に対してレプリカ法がどのように機能するのかを詳細に確認していく.

2.2.1 Computing the replicated partition sum

n をレプリカの数とし, $\alpha = 1, \dots, n$ をレプリカを特徴づける添字とする. このとき, 分配関数の n 乗は以下のように表せる:

$$Z^n = \sum_{\mathbf{s}^{(1)}} \dots \sum_{\mathbf{s}^{(n)}} e^{\sum_{\alpha=1}^n \beta \left[\frac{N}{2} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^{(\alpha)} \right)^2 + \sum_i h_i s_i^{(\alpha)} \right]} \quad (2.8)$$

ここで, $\sum_{\mathbf{s}^{(\alpha)}}$ はレプリカスピン $\{s_i^{(\alpha)}\}_{i=1}^N$ の取りうる全ての状態に関する和を表す. 次に, Curie-Weiss 模型の解析と同様に磁化の値を固定して, ランダム磁場に関する平均の評価をを目指す:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_h[Z^n] &= \mathbb{E}_h \left[\sum_{\{\mathbf{s}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^n} e^{\frac{\beta N}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^{(\alpha)} \right)^2 + \beta \sum_{\alpha=1}^n \sum_i h_i s_i^{(\alpha)}} \right] \\ &\stackrel{(a)}{=} \mathbb{E}_h \left[\sum_{\{\mathbf{s}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^n} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \delta \left(Nm_{\alpha} - \sum_{i=1}^N s_i^{(\alpha)} \right) e^{\frac{\beta N}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha} \sum_i h_i s_i^{(\alpha)}} \right] \\ &\stackrel{(b)}{=} \mathbb{E}_h \left[\sum_{\{\mathbf{s}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^n} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \hat{m}_{\alpha} \left(Nm_{\alpha} - \sum_i s_i^{(\alpha)} \right)} e^{\frac{\beta N}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha} \sum_i h_i s_i^{(\alpha)}} \right] \\ &= \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} e^{N \sum_{\alpha} \left(\frac{\beta}{2} m_{\alpha}^2 - \hat{m}_{\alpha} m_{\alpha} \right)} \mathbb{E}_h \left[\sum_{\{\mathbf{s}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^n} e^{\sum_{\alpha} \sum_i (\hat{m}_{\alpha} + \beta h_i) s_i^{(\alpha)}} \right] \\ &= \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} e^{N \sum_{\alpha} \left(\frac{\beta}{2} m_{\alpha}^2 - \hat{m}_{\alpha} m_{\alpha} \right)} \mathbb{E}_h \left[\sum_{\{\mathbf{s}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1}^n} \prod_{\alpha} \prod_i e^{(\hat{m}_{\alpha} + \beta h_i) s_i^{(\alpha)}} \right] \\ &\stackrel{(c)}{=} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} e^{N \sum_{\alpha} \left(\frac{\beta}{2} m_{\alpha}^2 - \hat{m}_{\alpha} m_{\alpha} \right)} \mathbb{E}_h \left[\prod_{\alpha} \prod_i \sum_{s_i^{(\alpha)}} e^{(\hat{m}_{\alpha} + \beta h_i) s_i^{(\alpha)}} \right] \\ &\stackrel{(d)}{=} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} e^{N \sum_{\alpha} \left(\frac{\beta}{2} m_{\alpha}^2 - \hat{m}_{\alpha} m_{\alpha} \right)} \left(\mathbb{E}_h \left[\prod_{\alpha} 2 \cosh(\hat{m}_{\alpha} + \beta h) \right] \right)^N \\ &= \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} e^{N \left(\sum_{\alpha} \left(\frac{\beta}{2} m_{\alpha}^2 - \hat{m}_{\alpha} m_{\alpha} \right) + \log \mathbb{E}_h [\prod_{\alpha} 2 \cosh(\hat{m}_{\alpha} + \beta h)] \right)} \end{aligned}$$

*2 決して, この操作が妥当となる証拠はないことに注意する.

*3 ...

式変形に関して以下にまとめる:

- (a): デルタ関数により磁化を固定し, 部分和の形で表した.
- (b): デルタ関数のフーリエ変換表示で表した. また, $-\hat{m}_\alpha = 2\pi i \lambda_\alpha$ のように置いた.
- (c): 積和の和を和の積和の形に変形した.
- (d): h_i が i.i.d となることを利用して, 期待値を h_i ごとに分解した.

2.2.2 Replica Symmetry Ansatz

この時点で, 我々は非常に複雑な式に到達したように見える: 何とかして, 全ての m_α, \hat{m}_α 上の積分を実行して, $n \rightarrow 0$ 極限を取る必要がある. これらの積分は, 二つの n 次元ベクトル $\mathbf{m} = (m_\alpha)_{\alpha=1}^n$ と $\hat{\mathbf{m}} = (\hat{m}_\alpha)_{\alpha=1}^n$ 上の積分と見なすことができる. すなわち以下の通りである.

$$\int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} d\hat{m}_{\alpha} \equiv \int d\mathbf{m} d\hat{\mathbf{m}}$$

積分の構造から鞍点法が成立することが予想されるため, この二つのベクトル上で指数の肩の式を極値化した形式で表すことを目指す. この極値化は, 一見複雑に見えるが (全ての可能なベクトルに対する極値化を行う必要がある), しかし, これらのベクトルがどのような極値をとるような程度程度の推測は可能である. その推測の一つとして, 非常に合理的仮定であるレプリカ対称性 (RS) 仮定がある. この仮定は, 指数関数の肩の式が極値となると, 全てのレプリカは等価になるというもので, 形式的には以下のように表せることを仮定する:

$$m_{\alpha} \equiv m, \quad \hat{m}_{\alpha} \equiv \hat{m}, \quad \forall \alpha$$

19 世紀末から 20 世紀初頭にかけてのドイツの著名な科学者の歩みに倣って訓練されてきた物理学者たちは, このような推測を *ansatz* と呼んでいる. そして, レプリカ対称性の仮定に従うと, 一見, 巨大な怪物に見える $\mathbb{E}_{\mathbf{h}}[Z^n]$ は, より優しい形となる:

$$\mathbb{E}_{\mathbf{h}}[Z^n] = \int d\mathbf{m} d\hat{\mathbf{m}} e^{N \left[\frac{\beta}{2} n m^2 - n \hat{m} m + \log (\mathbb{E}_{\mathbf{h}}[2^n \cosh^n(\hat{m} + \beta h)]) \right]}$$

ゆえに, 問題は単純化され, 典型的な自由エントロピーは, 以下のように計算できる:

$$\begin{aligned} \Phi(\beta, \Delta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{h}}[\log Z(\beta, \mathbf{h})] \\ &\stackrel{(a)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\mathbb{E}_{\mathbf{h}}[Z^n(\beta, \mathbf{h})] - 1}{n} \\ &\stackrel{(b)}{=} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\mathbb{E}_{\mathbf{h}}[Z^n(\beta, \mathbf{h})] - 1}{N} \\ &\stackrel{(c)}{=} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{extr}_{m, \hat{m}} \left[\frac{\beta}{2} n m^2 - n \hat{m} m + \log (\mathbb{E}_{\mathbf{h}}[2^n \cosh^n(\hat{m} + \beta h)]) \right] \\ &\stackrel{(d)}{=} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{extr}_{m, \hat{m}} \left[\frac{\beta}{2} n m^2 - n \hat{m} m + n \mathbb{E}_{\mathbf{h}}[\log (2 \cosh(\hat{m} + \beta h))] \right] \\ &= \text{extr}_{m, \hat{m}} \left[\frac{\beta}{2} m^2 - \hat{m} m + \mathbb{E}_{\mathbf{h}}[\log (2 \cosh(\hat{m} + \beta h))] \right] \end{aligned}$$

式変形に関して以下にまとめる:

- (a): レプリカ法の適用
- (b): レプリカ法で正しいことが期待される 2 つの極限の非厳密な入れ替え

- (c): 鞍点法の適用
- (d): 以下の展開:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[X^n] &= \mathbb{E}[e^{n \log X}] \approx \mathbb{E}[1 + n \log X] = 1 + n \mathbb{E}[\log X] \approx e^{n \mathbb{E}[\log X]} \\ \log \mathbb{E}[X^n] &\approx n \mathbb{E}[\log X]\end{aligned}$$

voodoo 教^{*4}のようなレプリカマジックには驚かされるはずだ: 本質的には, n が 0 になるとき, 期待値を自由エントロピー内の関数内に押し込むことができることがわかった. この結果が妥当となるには, 確率変数に何らかの集中現象が必要であることを示唆している. いずれにせよ, レプリカ法用いた計算は終了し, Curie-Weiss 模型と同様に, 自由エントロピーの評価を 2 次元関数の極値問題に落とし込むことに成功した:

$$\Phi(\beta, \Delta) = \text{extr}_{m, \hat{m}} \left[\frac{\beta}{2} m^2 - \hat{m} m + \mathbb{E}_h [\log (2 \cosh(\hat{m} + \beta h))] \right] \quad (2.9)$$

2.2.3 Computing the Saddle points: mean-field equation

次に我々は, 鞍点を計算していく. まず, m に関して以下が成り立つ:

$$\frac{\partial}{\partial m} \left[\frac{\beta}{2} m^2 - \hat{m} m + \mathbb{E}_h [\log (2 \cosh(\hat{m} + \beta h))] \right] = \beta m - \hat{m} \rightarrow \hat{m} = \beta m$$

この結果を Eq. (2.9) に代入すると, Curie-Weiss 模型で定義された式と同様な形式に到達する:

$$\Phi_{\text{RS}}(m, \beta, \Delta) \equiv -\frac{\beta}{2} m^2 + \mathbb{E}_h [\log 2 \cosh(\beta(h + m))]$$

さらに m に関する極値化を行うことで自由エントロピーが評価できる:

$$\Phi(\beta, \Delta) = \text{extr}_m \phi_{\text{RS}}(m) = \phi_{\text{RS}}(m^*)$$

ここで, m^* は, 以下の self-consistent 方程式 (mean-field 方程式) を満たす:

$$m = \mathbb{E}_h [\tanh(\beta(h + m))] = \int dh \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{h^2}{2\Delta}} \tanh(\beta(h + m))$$

さらに大偏差レートは以下で与えられる:

$$\mathbb{P}(m) \asymp e^{N \phi_{\text{RS}}(m)} \quad (2.10)$$

また, 指示関数 $\mathbf{1}[m = \sum_i^N s_i/N]$ を theorem 2.1.1 の左辺に $\text{Var}[\Phi_N(\mathbf{h}, \beta) \mathbf{1}[m = \sum_i^N s_i/N]]$ と含めば同様のステップで大偏差関数も自己平均性を持つことを示すことができる. レプリカ法により導かれた結果から, ランダム磁場の分散と最小エネルギーの関係をプロットしたものを Fig. 2.1 に示す.

2.3 A rigorous computation with the interpolation technique

レプリカ計算が “acrobatic” なものであったことを考えると, 得られた結果が正確であることの厳密な再保証を求めるのは当然である. そのために, Francesco Guerra により提案された補間法 (interpolation method) を用いて, レプリカ法の結果を証明する.

^{*4} voodoo 教は, 西アフリカのベナンやカリブ海などで信仰されている民間信仰らしい. 「全ては聖霊である」という考えを基本原理し, 人間は可視的な世界にする聖霊で目に見えない世界には精霊や先祖, 亡くなった人の霊が住むという考え方...

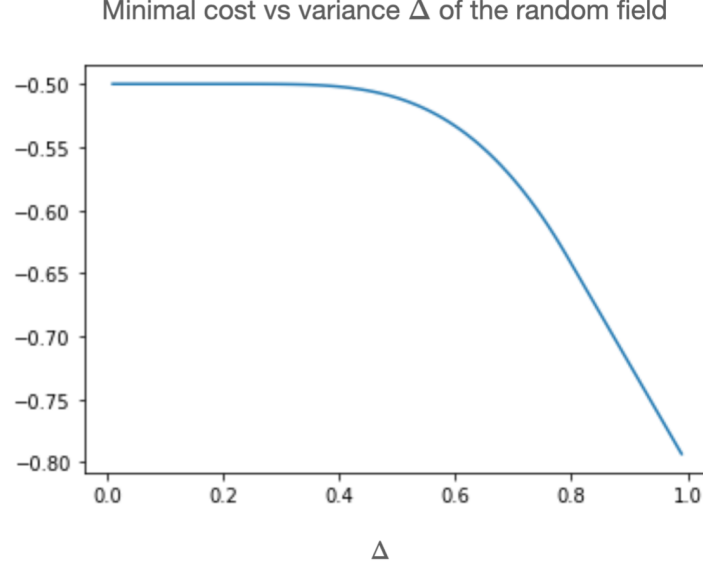


図 2.1 Δ を関数とした Random Field Ising Model の最小エネルギー. 具体的な導出は Exercise 2.3 で行う.

2.3.1 A Simple Problem

最初に, RFIM と異なり, より単純な一体問題を考える. 具体的には, 以下の Hamiltonian の問題である:

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m) = - \sum_i s_i (h_i + m)$$

このとき, 分配関数と自由エントロピーは以下のように表せる:

$$Z_0(\beta, \mathbf{h}; m) = \sum_{\mathbf{s}} e^{\beta \sum_i s_i (h_i + m)} = \prod_i \sum_{s_i} e^{\beta s_i (h_i + m)} = \prod_i 2 \cosh(\beta (h_i + m))$$

$$\Phi_0(\beta, \Delta; m) = \mathbb{E}_{\mathbf{h}} \left[\frac{\log Z_0(\beta, \mathbf{h}; m)}{N} \right] = \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log(2 \cosh(\beta(h + m)))]$$

さらに, $\bar{S} = m$ で固定した分配関数を定義する:

$$Z_0(\beta, \mathbf{h}; m, \bar{S} = m) = \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{\beta \sum_i s_i (h_i + m)}$$

この分配関数を直接計算することは難しいが*, $N \rightarrow \infty$ で Gartner-Ellis の定理または, ルジャンドル変換を用いれば評価することができる. そのために以下を定義する:

$$\tilde{Z}_0(\beta, \mathbf{h}; m, k) = \sum_{\mathbf{s}} e^{-\beta \mathcal{H}_0(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m) + k N \bar{S}} \quad (2.11)$$

$$\Phi(\beta, \Delta; m, k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log \tilde{Z}_0(\beta, \mathbf{h}; m, k)] = \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log(2 \cosh(\beta(h + m) + k))] \quad (2.12)$$

そして, Chapter 1 より, $\Phi(\beta, \Delta)$ をルジャンドル変換すれば, 以下を得ることができる:

$$\phi_0(\beta, m; \Delta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log Z_0(\beta, \mathbf{h}; m, \bar{S} = m)] = \sup_k [\Phi(\beta, \Delta; k, m) - km] \quad (2.13)$$

*5 Field Computation のようにデルタ関数を挿入することで直接計算することも可能.

ここで, \sup_k の条件から k^* は以下の関係式を満たす:

$$m = \mathbb{E}_h [\tanh(\beta(h + m) + k^*)] \quad (2.14)$$

さらに変数 $k^* = \hat{m} - \beta m$ に変数変換を行うと以下の関係式を得る:

$$\Phi_0(\beta, m, \Delta) = \text{extr}_{\hat{m}} \mathbb{E}_h [\log(2 \cosh(\beta h + \hat{m}))] - m\hat{m} + \beta m^2 \quad (2.15)$$

この結果は, すでに導出した二体相互作用を持つレプリカ計算の結果と類似の形式である.

2.3.2 Guerra's Interpolation

Guerra's method は, 単純なハミルトニアン \mathcal{H}_0 を徐々に実際に解きたい問題に変換していく手法である. 具体的には, 任意の“時間” $t \in (0, 1]$ に対して以下のハミルトニアンと分配関数を定義する.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_t(s, \mathbf{h}; m) &= - \sum_i s_i (h_i + m(1-t)) - t \frac{N}{2} \left(\frac{1}{N} \sum_i s_i \right)^2 \\ Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m) &= \sum_s \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_t(s, \mathbf{h}; m)} \end{aligned}$$

$t = 0$ のときは, 前節で説明した“A Simple Problem”と等価になることは簡単に確かめられる. また, $t = 1$ のときは RFIM と等価になる:

$$\mathcal{H}_1(s, \mathbf{h}; m) = \mathcal{H}_{\text{RFIM}}(s, \mathbf{h}), \quad Z_1(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m) = Z_{\text{RFIM}}(\beta, \mathbf{h}, \bar{S} = m), \quad \forall m \in [-1, 1]$$

ここで, 時刻 0 のモデルから時刻 1 のモデルを補間して, 微積分の基本定理を用いて以下のように表す:

$$\begin{aligned} \Phi_1(\beta, \bar{S} = m, \Delta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_h \left[\frac{\log Z_{\text{RFIM}}(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)}{N} \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_h \left[\frac{\log Z_1(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)}{N} \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_h \left[\frac{\log Z_0(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)}{N} + \int_0^1 d\tau \frac{\partial}{\partial t} \frac{\log Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)}{N} \Big|_{t=\tau} \right] \\ &= \Phi_0(\bar{S} = m, \Delta, \beta) + \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_h \left[\int_0^1 d\tau \frac{\partial}{\partial t} \frac{\log Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)}{N} \Big|_{t=\tau} \right] \end{aligned}$$

すでに $\Phi_0(m, \Delta, \beta)$ は評価できているため、以降、第二項の積分に関する項を評価する。

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial}{\partial t} \frac{\log Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)}{N} \right|_{t=\tau} &= \frac{1}{N} \frac{1}{Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_t(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m)} \\
&= \frac{1}{N} \frac{1}{Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)} \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_t(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m)} (-\beta) \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{H}_t(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m) \\
&= \frac{\beta}{N} \frac{1}{Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)} \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_t(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m)} \left[-m \sum_i s_i + \frac{N}{2} \left(\frac{1}{N} \sum_i s_i \right)^2 \right] \\
&= \beta \sum_{\mathbf{s}} \underbrace{\frac{1}{Z_t(\beta, \mathbf{h}; \bar{S} = m)} \mathbf{1}(\bar{S} = m) e^{-\beta \mathcal{H}_t(\mathbf{s}, \mathbf{h}; m)}}_{P_{\beta, t, \mathbf{h}, m}(\bar{s}) : \bar{S} = m \text{ に磁化を固定したときの全スピンの確率分布}} \left[-m \frac{1}{N} \sum_i s_i + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{N} \sum_i s_i \right)^2 \right] \\
&= \beta \left\{ -m \left\langle \frac{1}{N} \sum_i s_i \right\rangle_{\beta, t, \mathbf{h}, m} + \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_i s_i \right)^2 \right\rangle_{\beta, t, \mathbf{h}, m} \right\}, \quad \langle \cdot \rangle_{\beta, t, \mathbf{h}, m} \equiv \sum_{\mathbf{s}} \cdot P_{\beta, t, \mathbf{h}, m}(\bar{s}) \\
&= \beta \left\{ \frac{1}{2} \left\langle (m - \bar{S})^2 \right\rangle_{\beta, t, \mathbf{h}, m} - \frac{m^2}{2} \right\}
\end{aligned}$$

この結果を代入すると

$$\begin{aligned}
\Phi(\beta, m, \Delta) &= \Phi_0(m, \Delta, \beta) + \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_{\mathbf{h}} \left[\int_0^1 d\tau \beta \left\{ \frac{1}{2} \left\langle (m - \bar{S})^2 \right\rangle_{\beta, \tau, \mathbf{h}, m} - \frac{m^2}{2} \right\} \right] \\
&= \underbrace{\Phi_0(m, \Delta, \beta) - \frac{\beta m^2}{2}}_{\text{extr}_{\hat{m}} \Phi_{\text{RS}}(m, \hat{m})} + \underbrace{\frac{\beta}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}_{\mathbf{h}} \left[\int_0^1 d\tau \left\langle (m - \bar{S})^2 \right\rangle_{\beta, \tau, \mathbf{h}, m} \right]}_{=0} \\
&= \text{extr}_{\hat{m}} \Phi_{\text{RS}}(m, \hat{m})
\end{aligned}$$

ここで、第二項は、磁化が $\bar{S} = m$ で固定した確率分布 $P_{\beta, t, \mathbf{h}, m}(\bar{s})$ に関する期待値であるため、任意の $\tau \in [0, 1]$ で 0 となる。このように、レプリカ対称性を仮定して評価した自由エントロピーが任意の m に対して厳密であることが示された。

Bibliography

物理学におけるランダム磁場イジング模型に関する優れたレビューとして、Nattermann (1998) がある。これは、無秩序系の統計力学の発展において基本的な役割を果たした。レプリカ法は Sam Edwards によって提案され、彼はそれを Marc Kac に託した (Goldbart et al. (2005))。これは、Parisi, Mézard, Virasoro に率いられた世代の物理学者の仕事によって、強力で多用途なツールとなった (Mézard et al. (1987b))。レプリカ法を証明するために取り上げた interpolation trick は、Guerra (2003) によって提案された。ここで用いた磁化を固定する独特の手法は、El Alaoui と Krzakala (2018) から着想を得たものである。Gaussian Poincaré 等の確率的不等式は、現代の確率・統計理論の基本となっている。Boucheron et al (2013) が良い参考文献である。これらの集中不等式は、統計物理模型の厳密な数学的なアプローチの基礎となるものである。

2.4 Exercises

EXERCISE 2.1: GAUSSIAN POINCARÉ AND EFRONS-STEIN

Gaussian Poincaré の不等式を示すために, 多くの確率論の重要な結果を与えた一般的な Efron-Stein の不等式を示す:

Theorem 2.4.1 (Efron-Stein). X_1, \dots, X_n と X'_1, \dots, X'_n を独立な確率変数かつ任意 i に対して X_i, X'_i は同じ分布に従うことにする. これらをまとめて $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$, $\mathbf{X}^{(i)} = (X'_1, \dots, X'_{i-1}, X'_i, X_{i+1}, \dots, X_n)$ とする. このとき任意の関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ に対して, 以下が成り立つ:

$$\text{Var}[f(\mathbf{X})] \leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)})]^2 \quad (2.16)$$

以降, 我々は, X'_i と X_i が混ざった期待値を考えることによって (Lindeberg trick), Efron-Stein の不等式を証明する. 最初に $\mathbf{X}_{(i)}$ を $\mathbf{X}_{(i)} = (X'_1, \dots, X'_{i-1}, X'_i, X_{i+1}, \dots, X_n)$ と定義する. 定義から, $\mathbf{X}_{(0)} = \mathbf{X}$ かつ $\mathbf{X}_{(n)} = \mathbf{X}'$ が成り立つ.

(1) 以下を示せ (Lindeberg replacement trick)

$$\text{Var}[f(\mathbf{X})] = \mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}'))] = \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))] \quad (2.17)$$

Answer \mathbf{X} と \mathbf{X}' が同じ分布に従うことから以下が得られる:

$$\begin{aligned} \text{Var}[f(\mathbf{X})] &= \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}))^2] - (\mathbb{E}[f(\mathbf{X})])^2 \\ &= \mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}'))] \\ &= \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\left(f(\mathbf{X}_{(0)}) + (f(\mathbf{X}_{(1)}) - f(\mathbf{X}_{(1)})) + \dots + (f(\mathbf{X}_{(n-1)}) - f(\mathbf{X}_{(n-1)})) - f(\mathbf{X}'_{(n)})\right)\right] \\ &= \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\left((f(\mathbf{X}_{(0)}) - f(\mathbf{X}_{(1)})) + (f(\mathbf{X}_{(1)}) - f(\mathbf{X}_{(2)})) \dots + (f(\mathbf{X}_{(n-1)}) - f(\mathbf{X}_{(n)}))\right)\right] \\ &= \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))] \end{aligned}$$

(2) 任意の i について以下が成り立つことを示せ:

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))] = \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X}^{(i)})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))\right] \quad (2.18)$$

$$= \frac{1}{2} \mathbb{E}\left[\left(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)})\right)(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))\right] \quad (2.19)$$

Answer 各 i について独立かつ \mathbf{X} と \mathbf{X}' が同じ分布に従うため, $X_i \leftrightarrow X'_i$ にしても結果は変わらない. そのことを

用いると以下のように示せる:

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))] &= \mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(X'_1, \dots, X'_{i-1}, X_i, \dots, X_n) - f(X'_1, \dots, X'_{i-1}, X'_i, X_{i+1}, \dots, X_n))] \\
 &= \mathbb{E}[f(\mathbf{X}^{(i)})(f(X'_1, \dots, X'_{i-1}, X'_i, \dots, X_n) - f(X'_1, \dots, X'_{i-1}, X_i, X_{i+1}, \dots, X_n))] \\
 &= \mathbb{E}[f(\mathbf{X}^{(i)})(f(\mathbf{X}_{(i)}) - f(\mathbf{X}_{(i-1)}))] \\
 &= \frac{1}{2} \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))]
 \end{aligned}$$

(3) Cauchy-Schwartz の不等式より以下を示せ:

$$|\mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))]| \leq \frac{1}{2} \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))^2] \quad (2.20)$$

Answer Cauchy-Schwartz の不等式より

$$\left(\mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))] \right)^2 \leq \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))^2] \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))^2]$$

ここで, 各 i について X_i, X'_i は同じ分布に従うことから以下が成り立つ:

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))^2] &= \mathbb{E}[(f(X'_1, \dots, X'_{i-1}, X_i, \dots, X_n) - f(X'_1, \dots, X'_{i-1}, X'_i, X_{i+1}, \dots, X_n))^2] \\
 &= \mathbb{E}[(f(X_1, \dots, X_{i-1}, X_i, \dots, X_n) - f(X_1, \dots, X_{i-1}, X'_i, X_{i+1}, \dots, X_n))^2] \\
 &= \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))^2]
 \end{aligned}$$

ゆえに

$$|\mathbb{E}[f(\mathbf{X})(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))]| \leq \frac{1}{2} \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))^2]$$

が成り立つ.

Eq. (2.20) を Eq. (2.17) に代入すると Efron-Stein の不等式が証明できる:

$$\begin{aligned}
 \text{Var}[f(\mathbf{X})] &= |\text{Var}[f(\mathbf{X})]| \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))(f(\mathbf{X}_{(i-1)}) - f(\mathbf{X}_{(i)}))] \\
 &\leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[(f(\mathbf{X}) - f(\mathbf{X}^{(i)}))^2]
 \end{aligned}$$

Efron-Stein の不等式の証明が完了したため, ここからはガウス確率変数に対する Gaussian Poincare's の定理を証明する. 簡単のため一変数の場合の証明を行うが, 多変数の場合の一般化も可能である. まず, 確率 $1/2$ で ± 1 となる確率変数 X_i を導入し, 以下を定義する:

$$S_n = X_1 + X_2 + \dots + X_n \quad (2.21)$$

(4) Efron-Stein の不等式を用いて以下を示せ.

$$\text{Var}\left[f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}}\right)\right] \leq \frac{n}{4} \mathbb{E}\left[\left(f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right] \quad (2.22)$$

Answer Efron-Stein の不等式より

$$\begin{aligned}
\text{Var}\left[f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}}\right)\right] &\leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left[\left(f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}} + \frac{X_i}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{X'_i}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{S_{n-1}}\left[\mathbb{E}_{X_i, X'_i}\left(f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}} + \frac{X_i}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{X'_i}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right] \\
&\stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{S_{n-1}}\left[\frac{1}{4}\left(f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2 + \frac{1}{4}\left(f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right. \\
&\quad \left.+ \frac{1}{4}\left(f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2 + \frac{1}{4}\left(f\left(\frac{S_n}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{S_{n-1}}\left[\left(f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right] \\
&= \frac{n}{4} \mathbb{E}_{S_{n-1}}\left[\left(f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right]
\end{aligned}$$

ここで, (a) では X_i, X'_i が Rademacher 変数であることを用いて期待値を陽に書き下した.

(5) 中心極限定理を用いて, $n \rightarrow \infty$ で以下の定理を示せ.

Theorem 2.4.2 (Gaussian-Poincaré). $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ の smooth function, X をガウス変数 $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$ とする. そのとき以下が成り立つ:

$$\text{Var}[f(X)] \leq \mathbb{E}[(f'(X))^2] \quad (2.23)$$

Answer 中心極限定理より規格化された確率変数 $S_n/\sqrt{n}, S_{n-1}/\sqrt{n}$ は標準正規分布 $\mathcal{N}(0, 1)$ に従う. ゆえに以下が成り立つ.

$$\begin{aligned}
\text{Var}[f(X)] &\leq \frac{n}{4} \mathbb{E}\left[\left(f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)^2\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\frac{f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} + \frac{1}{\sqrt{n}}\right) - f\left(\frac{S_{n-1}}{\sqrt{n}} - \frac{1}{\sqrt{n}}\right)}{\frac{2}{\sqrt{n}}}\right)^2\right] \\
&\stackrel{(a)}{=} \mathbb{E}[(f(X'))^2]
\end{aligned}$$

(a) は, $n \rightarrow \infty$ のとき微分の定義から得られる.

EXERCISE 2.2: RANDOM FIELD ISING MODEL BY THE CAVITY METHOD

この演習の目的は, キャビティ法に近い手法を用いて, ランダム磁場イジングモデルの自由エントロピーを評価する代替的な証明を行うことである.

(1): ランダム磁場イジングに対して以下を示せ:

$$A_N(\beta, \Delta) \equiv \mathbb{E}_{h_0, h}\left[\log \frac{Z_{N+1}}{Z_N}\right] = \mathbb{E}_{h_0, h}\left[\log \left\langle e^{-\frac{\beta}{s} \bar{S}^2} 2 \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \right\rangle_{N, \beta, h}\right] + o(1) \quad (2.24)$$

Answer: まず, \mathcal{H}_{N+1} が以下のように表せることに着目する:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{N+1} &= -\frac{N+1}{2} \left(\frac{\sum_{i=1}^N S_i + S_0}{N+1} \right)^2 - \sum_{i=1}^N h_i S_i - h_0 S_0 \\
 &= -\frac{N^2}{2(N+1)} \left(\bar{S} + \frac{S_0}{N} \right)^2 - \sum_{i=1}^N h_i S_i - h_0 S_0 \\
 &= -\frac{N^2+1}{2(N+1)} \bar{S}^2 - \frac{N+1}{N+1} \bar{S} S_0 - \sum_{i=1}^N h_i S_i - h_0 S_0 \\
 &= -\frac{1}{2} (N-1+o(1)) \bar{S}^2 - (1+o(1)) \bar{S} S_0 - \sum_{i=1}^N h_i S_i - h_0 S_0 \\
 &= \mathcal{H}_N + \frac{1}{2} \bar{S}^2 - (\bar{S} + h_0) S_0 + o(1)
 \end{aligned}$$

ゆえに

$$\begin{aligned}
 A_N(\beta, \Delta) &= \mathbb{E}_{\mathbf{h}, h_0} \left[\log \frac{\sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta(\mathcal{H}_N(\mathbf{h}) + \frac{1}{2} \bar{S}^2)} \sum_{S_0} e^{\beta(\bar{S} + h_0) S_0}}{\sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta \mathcal{H}_N(\mathbf{h})}} \right] \\
 &= \mathbb{E}_{\mathbf{h}, h_0} \left[\log \left\langle e^{-\frac{\beta}{2} \bar{S}^2} 2 \cosh \beta(\bar{S} + h_0) \right\rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} \right]
 \end{aligned}$$

(2): ハミルトニアンに外部磁場 B を加える (すなわち項 $B \sum_i S_i$) と, 任意の \mathbf{h} に対して, 以下成り立つことを示せ:

$$\int_{B_1}^{B_2} \langle \bar{S}^2 \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} - \langle \bar{S} \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}}^2 dB \leq \frac{2}{\beta N} \quad (2.25)$$

これは, ボルツマン測度に関する磁化の集中を表した不等式であり, ランダム磁場 \mathbf{h} に関する平均量には何も言及していないことに注意する. つまり, あらかじめ与えられたある実現値 \mathbf{h} に依存して, 磁化はある値に集中することを示している.

Answer 以下のように示すことができる:

$$\begin{aligned}
 \int_{B_1}^{B_2} \langle \bar{S}^2 \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} - \langle \bar{S} \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}}^2 dB &\stackrel{(a)}{=} \frac{1}{N\beta} \int_{B_1}^{B_2} \frac{d}{dB} \langle \bar{S} \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} dB \\
 &= \frac{1}{\beta N} \left(\langle \bar{S}(B_2) \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} - \langle \bar{S}(B_1) \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} \right) \\
 &\stackrel{(b)}{\leq} \sup_{\mathbf{h}} \left[\langle \bar{S}(B_2) \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} - \langle \bar{S}(B_1) \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} \right] \leq \frac{2}{\beta N}
 \end{aligned}$$

(3): ほとんど任意の B, N が十分大きい極限で以下が成り立つことを示せ:

$$A_N(\beta, \Delta, B) = \mathbb{E}_{h_0, \mathbf{h}} \left[-\frac{\beta}{2} \langle \bar{S} \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}}^2 + \log 2 \cosh \beta(\langle S \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} + h_0 + B) \right] + o_N(1) \quad (2.26)$$

Answer(1), (2) より $A_N(\beta, \Delta)$ は以下のようになる.

$$A_N(\beta, \Delta, B) = \mathbb{E}_{h_0, \mathbf{h}} \left[-\frac{\beta}{2} \langle \bar{S} \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}}^2 + \log 2 \cosh \beta(\langle S \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}} + h_0 + B) \right] + o_N(1)$$

(4): N が十分大きい極限で, $\langle S \rangle_{N, \beta, \mathbf{h}}$ がある値 $m(\mathbf{h})$ に集中することから, $N \rightarrow \infty$ で以下の不等式が成り立つことを示せ:

$$\Phi(\beta, \Delta, B) \leq \sup_m \left[-\frac{\beta}{2} m^2 + \mathbb{E}_{\mathbf{h}} [\log 2 \cosh \beta(m + h + B)] \right] \quad (2.27)$$

Answer: Chapter 1 より, 以下が成り立つ.

$$\Phi(\beta, \Delta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \log A_N(\beta, \Delta)$$

また, $\langle \bar{S} \rangle$ は, そのサポート上の全ての値に対する上界によって上から抑えられるため, Eq. (2.27) が成り立つ.

(5): Chapter 1 の変分法を用いて, 下界を評価することで以下を示せ:

$$\Phi(\beta, \Delta) = \sup_m \left[-\frac{\beta}{2} m^2 + \mathbb{E}[\log 2 \cosh \beta(m + h)] \right] \quad (2.28)$$

Answer: Curie-Weiss 模型と同様に, 一つのパラメータを持つ独立同分布

$$Q(S) = \prod_i \left(\frac{1+m}{2} \delta(S_i - 1) + \frac{1-m}{2} \delta(S_i + 1) \right)$$

このとき, Chapter 1 より以下が成り立つ:

$$\Phi(\beta, \Delta) \geq \phi^{\text{Gibbs}}(Q), \quad \phi^{\text{Gibbs}}(Q) = \frac{1}{N} \left(S[Q] - \beta \langle \mathcal{H} \rangle_Q \right).$$

$\phi^{\text{Gibbs}}(Q)$ を評価すると

$$\phi^{\text{Gibbs}}(Q) = H(m) + \frac{\beta}{2} m^2 + \frac{m}{N} \sum_i \mathbb{E}_{h_i} h_i = H(m) + \frac{\beta}{2} m^2 + m \mathbb{E}_h h$$

ここで,

$$H(m) = \log(2 \cosh(\tanh^{-1}(m))) - m \tanh^{-1}(m)$$

また, (5) の停留点条件から以下が得られる:

$$m^* = \mathbb{E}_h [\tanh \beta(m^* + h)]$$

この結果を代入すると以下が得られる:

$$\begin{aligned} \Phi(\beta, \Delta) &\geq \phi^{\text{Gibbs}}(Q) \\ &= \log(2 \cosh(\tanh^{-1}(\mathbb{E}_h [\tanh \beta(m^* + h)]))) - m \tanh^{-1}(\mathbb{E}_h [\tanh \beta(m^* + h)]) + \frac{\beta}{2} m^2 + m \mathbb{E}_h h \\ &\stackrel{(a)}{\geq} \mathbb{E}_h \log(2 \cosh(\tanh^{-1}([\tanh \beta(m^* + h)]))) - \mathbb{E}_h m \tanh^{-1}([\tanh \beta(m^* + h)]) + \frac{\beta}{2} m^2 + m \mathbb{E}_h h \\ &= \mathbb{E}_h \log(2 \cosh \beta(m^* + h)) - m \mathbb{E}_h \beta(m^* + h) + \frac{\beta}{2} m^2 + m \mathbb{E}_h h \\ &= \mathbb{E}_h \log(2 \cosh \beta(m^* + h)) - \frac{\beta}{2} m^2 \end{aligned}$$

この下界は, (5) の上界と一致するため, 以下が成り立つ:

$$\Phi(\beta, \Delta) = \sup_m \left[-\frac{\beta}{2} m^2 + \mathbb{E}[\log 2 \cosh \beta(m + h)] \right] \quad (2.29)$$

EXERCISE 2.3: MEAN-FIELD ALGORITHM STATE FOR THE RFIM

この演習問題の目的は, 最低エネルギー状態を求めるアルゴリズムを提供し, その性質を議論することである.

(1): Section 1.3 の変分法, または Section 1.4 のキャビティ法を用いて, 以下の反復アルゴリズムが実際に最小エネルギーを求めるのに適していると考えられる理由を説明せよ.

$$S_i^{t+1} = \text{sign} \left(h_i + \frac{1}{N} \sum_i S_i^t \right) \quad (2.30)$$

Answer: Ex 1.5 と同様に, ハミルトニアンのスピン i に依存するすべての項の依存性を分けて S_i の関数として以下のように表す:

$$\mathcal{H}_N(S_i; \{S_j\}_{j \neq i}, \mathbf{h}) = -\frac{N}{2} \left(\sum_{j \neq i} \frac{S_j}{N} + \frac{S_i}{N} \right) - \sum_{j \neq i} h_j S_j - h_i S_i = - \left(\sum_{j \neq i} \frac{S_j}{N} + h_i \right) S_i + \text{const} \quad (2.31)$$

ここで,

$$\frac{1}{N} \sum_{j \neq i} S_j = \bar{S} + O\left(\frac{1}{N}\right) \quad (2.32)$$

となるため, $N \rightarrow \infty$ でハミルトニアンは以下のように表せる:

$$\mathcal{H}_N(S_i; \{S_j\}_{j \neq i}, \mathbf{h}) = -(\bar{S} + h_i) S_i + \text{const} \quad (2.33)$$

このとき, Ex. 1.5 で現れた $P_{\pm}(S_i | \{S_j\}_{j \neq i})$ は以下ようになる:

$$P_{\pm}(S_i | \{S_j\}_{j \neq i}) = \frac{e^{\beta S_i (\bar{S} + h_i)}}{2 \cosh(\beta(\bar{S} + h_i))} \quad (2.34)$$

この分布は, $\beta \rightarrow \infty$ で

$$P_{\pm}(S_i | \{S_j\}_{j \neq i}) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \delta(S_i, \text{sign}(h_i + \bar{S})) \quad (2.35)$$

この結果は, 離散的なエネルギーを下降させるための貪欲なアルゴリズムにより $\beta \rightarrow \infty$ の平衡状態の値が求められることを示唆している:

$$S_i^{(t+1)} = \text{sign}(h_i + \bar{S}^{(t)}) \quad (2.36)$$

(2): このアルゴリズムを実装し, 実際に系が十分に大きいとき, レプリカ法により評価した最小エネルギーを持つスピン配位が探索できることを責めせ.

Answer まずレプリカ法の結果と比較するためレプリカ法で得られた自由エントロピーから基底状態のエネルギーを評価する. $\beta \rightarrow \infty$ で鞍点方程式は以下のように評価できる:

$$\begin{aligned} m &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{E}_h[\tanh(\beta(h+m))] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dh \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{h^2}{2\Delta}} \text{sign}(h+m) \\ &\stackrel{(a)}{=} \int_{-\frac{m}{\sqrt{2\Delta}}}^{\infty} dh \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-h^2} - \int_{-\infty}^{-\frac{m}{\sqrt{2\Delta}}} dh \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-h^2} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{m}{\sqrt{2\Delta}}} dh e^{-h^2} = \text{erf}\left(\frac{m}{\sqrt{2\Delta}}\right) \end{aligned}$$

ここで, (a) では $h \rightarrow h/\sqrt{2\Delta}$ の置換積分を行い, 符号関数の場合分けを陽に示した. この鞍点方程式の解 m^* はもはや β には依存しないことに注意する. そのため自由エントロピーは以下のように評価できる:

$$\Phi_{\text{RS}}(\beta, \Delta) = -\frac{1}{2} \beta (m^*(\Delta))^2 + \mathbb{E}_h[2 \log \cosh \beta(h + m^*(\Delta))]$$

エネルギーは自由エントロピーの β 微分で得られる:

$$E(\beta, \Delta) = \frac{1}{2} (m^*(\Delta))^2 + \mathbb{E}_h[(h + m^*(\Delta)) \tanh \beta(h + m^*(\Delta))]$$

さらに $\beta \rightarrow \infty$ 極限を取ると基底状態のエネルギーは以下で評価できる:

$$\begin{aligned}
 E_0(\Delta) &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} E(\beta, \Delta) \\
 &= \frac{1}{2}(m^*(\Delta))^2 + \int_{-\infty}^{\infty} dh \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{h^2}{2\Delta}} h \text{sign}(h + m^*(\Delta)) + m^*(\Delta) \text{erf}\left(\frac{m^*(\Delta)}{\sqrt{2\Delta}}\right) \\
 &\stackrel{(b)}{=} \frac{1}{2}(m^*(\Delta))^2 + \sqrt{\frac{2\Delta}{\pi}} e^{-\frac{(m^*(\Delta))^2}{2\Delta}} + m^*(\Delta) \text{erf}\left(\frac{m^*(\Delta)}{\sqrt{2\Delta}}\right)
 \end{aligned}$$

ここで, (b) は部分積分と鞍点方程式と同様の計算により積分を評価できる. この結果と (1) で導出した貪欲アルゴリズムの結果を $N = 10^6$ のとき比較した結果を Fig. 2.2 に示す. この結果から, 理論的な結果と貪欲アルゴリズムの結果はほとんど一致することがわかった. 実装例は, “Ex2.2 の Notebook” へ

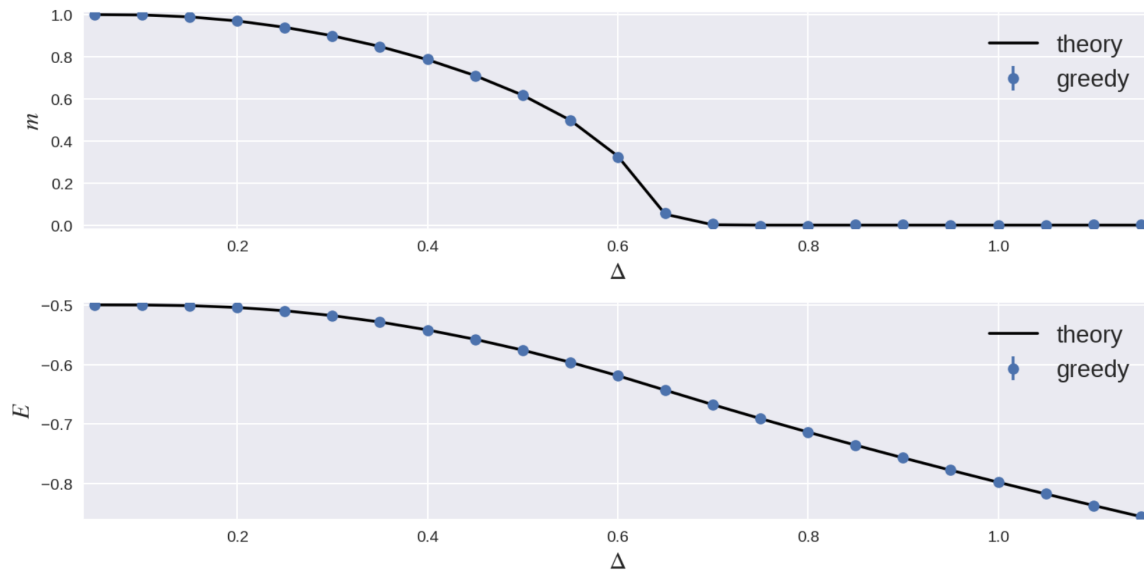


図 2.2 $N = 10^6$ の系の RFIM の レプリカ法による理論的な結果と (1) で導出した貪欲アルゴリズムの結果. 黒線が理論的な結果を表し, 青点が貪欲アルゴリズムによる結果を表す.

(3): 熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$) において, 各時刻の平均磁化 $m^t = \sum_i S_i^t / N$ が状態進化方程式と呼ばれる決定論的な方程式に従うことを示せ:

$$m^{t+1} = \mathbb{E}_h [\text{sign}(h + m^t)] \quad (2.37)$$

そして, このアルゴリズムは, レプリカ対称自由エネルギーの固定点反復方程式を実行していることを結論づけよ.

Answer(1) の状態方程式の両辺を i に関する和をとり, $1/N$ すると以下の方程式を得る:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^{t+1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{sign}\left(h_i + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^t\right) \Leftrightarrow m^{t+1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{sign}(h_i + m^t)$$

ここで, 右辺がランダム磁場に関する経験平均となっていることに気づく. それぞれ磁場は, 独立でガウス分布 $h_i \sim \mathcal{N}(0, \Delta)$ に従うため, 十分大きなサンプル数 $N \rightarrow \infty$ で経験平均は, 母平均に収束する. そのため以下が成り立つ:

$$m^{t+1} = \mathbb{E}_h \text{sign}(h + m^t)$$

次に貪欲アルゴリズムの結果と State Evolution の結果が N が十分大きいとき ($N = 10^6$) どの程度一致するかを確認する. その結果を Fig. 2.3 に示す. 実装例は, “Ex2.2 の Notebook” へ

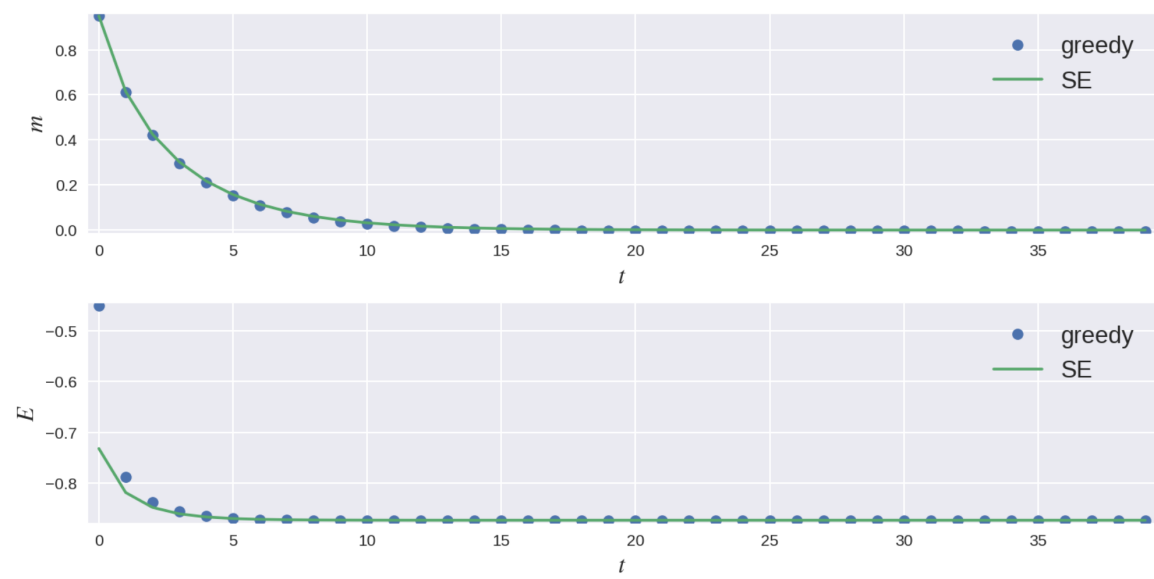


図 2.3 $N = 10^6$ の貪欲アルゴリズムのダイナミクスと State Evolution の結果

第 3 章

A first application: The spectrum of random matrices

Unfortunately, no one can be told what the Matrix is. You have to see it for yourself -Morpheus-The Matrix, 1999

本章では、レプリカ法の最初の非自明な応用例として、ランダム行列のスペクトルの計算を紹介する。ランダム行列は、重原子の原子核をモデル化するために Eugene Wigner によって導入された。Wigner は、重原子核のスペクトル線の間隔がランダム行列の固有値の間隔に似ていると考え、ランダム行列の対称性のクラスにのみ依存すると考えていた。それ以来、ランダム行列の研究は、固体物理学、量子カオス、機械学習、数論など、さまざまな分野で行われるようになった。最も単純なランダム行列は Wigner 行列である：

$$A_N = \frac{1}{\sqrt{N}}(G + G^\top) \quad (3.1)$$

G はランダム行列であり、各要素 $G_{ij} \sim \text{i.i.d } \mathcal{N}(0, 1)$ となる。主となる問題は、 $N \rightarrow \infty$ 極限の Eq. (3.1) のランダム行列の固有値 $\nu_{A_N}(\lambda)$ 分布である。この問題は解決され、固有値分布は well-defined な決定論的関数 $\nu(\lambda)$ に収束することがわかった。ここでは、その固有値分布を計算するために、レプリカ法と Cavity 法をどのように使用するかを説明する。

3.1 The Stieltjes transform

ここでは、Stieltjes 変換と呼ばれる手法を使用する。まずは、Sokhotsky の公式と呼ばれる非常に便利な恒等式を説明する。この恒等式は、物理の場の理論でよく使われ、"Feynman trick"と呼ばれている。また、Kramers-Kronig 関係式の計算や、causal function のヒルベルト変換の定義にも使われる：

$$\delta(x - x_0) = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{x - x_0 + i\epsilon} \right\} \quad (3.2)$$

恒等式 Eq. (3.2) は、ランダム行列理論の理論的アプローチの根幹をなすものである。実際、一様確率で N 個の値をとりうる確率分布 $\nu(x)$ を与えると以下の変換が可能である：

$$\nu(x) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(x - x_i) = -\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N\pi} \sum_i \text{Im} \left\{ \frac{1}{x - x_i + i\epsilon} \right\} \quad (3.3)$$

さらに, $1/x$ が $\log x$ の微分であることを利用すると

$$\frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{x - x_i} = \frac{1}{N} \frac{d}{dx} \sum_i \log(x_i - x) = \frac{1}{N} \frac{d}{dx} \prod_i (x_i - x) \quad (3.4)$$

そのため, 固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ を持つ行列 $A_N \in N \times N$ が与えられたとき, 行列式が固有値の積でかけることを利用するといかが成り立つ.

$$\begin{aligned} \nu(\lambda) &= \frac{1}{N} \sum_i \delta(\lambda - \lambda_i) \\ &= -\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{N\pi} \sum_i \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\lambda - \lambda_i + i\epsilon} \right\} \\ &= -\frac{1}{N\pi} \operatorname{Im} \left\{ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \log \prod_i (\lambda_i - \lambda + i\epsilon) \right\} \\ &= -\frac{1}{N\pi} \operatorname{Im} \left\{ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \log \det(A - (\lambda + i\epsilon)\mathbf{1}) \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

この変形が, ランダム行列理論で用いられる計算テクニックの基本である. そして, 行列に対して, Stieltjes 変換を導入する.

$$S_A(\lambda) = -\frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{\lambda - \lambda_i} = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \lambda} \log \det(A - \lambda \mathbf{1}) \quad (3.6)$$

そして, Stieltjes 変換の虚部を用いて, 固有値分布を

$$\nu_A(\lambda) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} \{ S_A(\lambda + i\epsilon) \} \quad (3.7)$$

のように表すことができる. ランダム行列理論では, このようにある行列 A の固有値分布を評価する計算を行列 A の Stieltjes 変換に帰着して評価を行う.

3.1.1 The replica method

我々の目的は, レプリカ法を用いて Wigner 行列の Stieltjes 変換を計算することである. 目的は, レプリカ法のツールとしての強力さを説明するため, ここでは, 数学的厳密性はある無視する.

3.2 Exercices

EXERCISE 3.1: WISHART, OR MARCENKO-PASTUR LAW

(1)

(2)

(3)

(4)

第 4 章

Sparse Graphs & Locally Tree-like Graphical Models

Auprès de mon arbre je vivais heureux J'aurais jamais dû m'éloigner de mon arbre, Geoges Brassens - 1955

4.1 Graphical Models

4.1.1 Graphs

4.1.2 Factor Graph

4.1.3 Some properties and usage of factor graphs

4.2 Belief Propagation and the Bethe free energy

4.2.1 Derivation and Propagation on a tree graphical model

4.2.2 Belief propagation equations summary

4.2.3 How do we use Belief Propagation?

4.3 Exercices

EXERCISE 4.1: REPRESENTING PROBLEMS BY GRAPHICAL MODELS AND BELIEF PROPAGATION

(1)

(2)

(3)

EXERCISE 4.2: BETHE FREE ENTROPY

第 5 章

Belief propagation for graph coloring

The picture will have charm when each colour is unlike the one next to it., Leon Battista Alberti -
1404-1472

5.1 Deriving quantities of interest

5.2 Specifying generic BP to coloring

5.3 Bethe free energy for coloring

5.4 Paramagnetic fixed point for graph coloring

5.5 Ferromagnetic fixed point for graph coloring

5.5.1 Ising ferromagnetic, $q = 2$

5.5.2 Potts ferromagnet $q \geq 3$

5.6 Back to the anti-ferromagnetic ($\beta > 0$) case

5.7 Exercices

EXERCISE 5.1: BETHE FREE ENTROPY

(1)

(2)

(3)

EXERCISE 5.1: FULLY CONNECTED LIMIT FROM BELIEF PROPAGATION

(a)

(b)

(c)

(d)

EXERCISE 5.3: BELIEF PROPAGATION FOR THE MATCHING PROBLEM ON RANDOM GRAPHS

(a)

(b)

(c)

第 II 部

Probabilistic Inference

Appendix A

The jargon of Statistical Physics

本稿では、しばしば統計物理学の用語を採用することがある。すでにこの分野の講義を受けた方にとっては標準的なことだが、他の分野から入ってきた方にとってはしばしば混乱を引き起こすことがある。

冒頭で述べたように、“システム (系)” は自由度を持つ変数の集合 $\{x_i\}_{i \in I}$ と自由度を持つ変数集合毎にエネルギーやコストを割り当てるハミルトニアン関数 $\mathcal{H}(\{x_i\}_{i \in I})$ によって定義される。例えば、Curie-Weiss 模型の場合、自由度は $\{x_i\}_{i=1}^N, x_i \in \{-1, 1\}$ であり、Hamiltonian は、Eq. (1.2) で与えられる。しかし、添字集合 I と状態空間 X はより一般的なものであることに注意する。例えば、Chapter5 では、Graph Colouring 問題について議論する。この例では、グラフ G のノードに q 個の異なる自由度が割り当てられるため、状態空間は $X = \{1, \dots, q\}$ となる。また、Chapter13 では、単層ニューラルネットワークの重みのように、状態空間が連続量となるような推論問題を解析する。また、 $I \in \mathbb{R}$ のように不可算集合からなる添字集合を持つ系を研究することもあり、この場合、自由度を“場 (field)” と呼ぶのが一般的である。しかし、本稿では離散的かつ有限な (可算集合) 添字集合のみを扱うことにする。したがって、ある配位に対して、ベクトル表記 $\mathbf{x} \in X^N$ を採用し、 $N \equiv |I|$ を“システムサイズ (系のサイズ)” と呼ぶことにする。そして、システムサイズ N でスケールする量 (数学的表記は、 $O_N(N)$) を示量変数、システムサイズに比例しない量 ($O_N(1)$) を示強変数と呼ぶことが多い。典型的な示量変数は、エネルギー、エントロピー、体積があり、典型的な示強変数は、温度や圧力がある。示量変数の密度は示強変数となることに注意する。また、システムサイズ無限大極限 $N \rightarrow \infty$ を熱力学極限と呼ぶ。そして、統計力学の大部分は、熱力学極限化の示強変数の振る舞いを研究することに注力する。

古典力学では、気体の各分子の軌跡や神経回路網の各ニューロンの訓練時の動態など、系の微視的な性質を研究することが目的である。一方、統計力学では系の巨視的な性質を明らかにすることが目的である。例えば、自由度の協力現象、先ほどの例の場合、気体の巨視的性質は平均エネルギー、温度、圧力であり、ニューラルネットワークの巨視的性質は汎化誤差である。これらの概念をより正確にするために、統計物理学では、配置に対するアンサンブルを定義する。これは、すべての可能な配置の空間に対する単純な確率測度である。同じシステムに対して異なるアンサンブルを定義をすることはできるが、ここでは主に以下のギブスボルツマン分布で定義されるカノニカルアンサンブルに焦点を当てる。

$$\mathbb{P}(\mathbf{X} = \mathbf{x}) = \frac{1}{Z_N(\beta)} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})} \quad (\text{A.1})$$

ここで、正規化定数 $Z_N(\beta)$ は、分配関数として知られている。また、分配関数はエネルギーのモーメント生成関数と密接な関係がある。確率論的な観点から、配位 $\mathbf{x} \in X^N$ はギブスボルツマン分布からのランダムに生成されたサンプルであり、巨視的な量はアンサンブルの統計量と見なすことができる。物理学者は、ギブスボルツマン分布に関する平均を $\langle \cdot \rangle_\beta$ の括弧で表し、熱平均 (thermal average) と呼ぶことが多い。ここで、本稿で最も重要な量である

自由エネルギー密度 (または, 自由エントロピー) を定義する:

$$\Phi(\beta, h) \equiv -\beta f_N(\beta) = \frac{1}{N} \log Z_N(\beta) \quad (\text{A.2})$$

ここで, ハミルトニアンは典型的に示量変数 $\mathcal{H} = O(N)$ であり, 自由エネルギーは, 分配関数の対数であるため資料変数となり, その密度は示強変数となることに注意する. この関数は, エネルギーのキュムラント母関数と密接に関係指定る. そのため, 導入で議論したように, 自由エントロピーから我々は系を特徴づける重要な巨視的性質を評価することができる. 物理学者が興味を持つ巨視的な量としてエネルギーとエントロピー密度があり, これらは自由エネルギーにより評価できる:

$$e_N(\beta) = \left\langle \frac{1}{N} \mathcal{H}(S) \right\rangle_\beta = \frac{\partial}{\partial \beta} \beta f_N(\beta), \quad s_N(\beta) = \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} f_N(\beta) \quad (\text{A.3})$$

これらは以下の関係式を満たすことが簡単に確認できる:

$$e_N(\beta) - \frac{1}{\beta} s_N(\beta) = f_N(\beta) + \beta \frac{\partial}{\partial \beta} f_N(\beta) - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} f_N(\beta) = f_N(\beta) \quad (\text{A.4})$$

A.1 The ABC of phase transitions

統計物理学者の主な目的の 1 つは, システムの異なる相を特徴付けることである. ややルーズに相を定義すると, モデルを定義するパラメータ空間内で, 巨視的な性質を共有する領域である. 例えば, Chapter1 の Curie-Weiss 模型のモデルを定義するパラメータは, $(\beta, h) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$ であり, 熱力学的極限において, 巨視的な量である磁化が存在しない常磁性相と磁化が存在する強磁性相の 2 相が存在した. 系の相を特徴づける巨視的な量 (この場合は磁化) は, 系の “秩序変数” と呼ばれる. Chapter 13 では, 圧縮センシングの性質を研究する. 圧縮センシングとは, ノイズによって破損したスパースな信号を復元する問題である. この系を定義するパラメータは, スパースレベル (非ゼロ要素の密度) $\rho \in [0, 1]$ とノイズレベル $\Delta \in \mathbb{R}_+$ であり, 信号を再構成が容易な相, 困難な相, 不可能な相の 3 つの存在が明らかとなる. この場合の系の秩序変数は, 圧縮センシングによる信号の推定量と真の信号の相関となる. 本稿で現れる例では, 明確な秩序変数が存在するが, それを特定することは必ずしも容易ではなく, 一意でない場合もある. 例えば, 圧縮センシングの例では, 平均二乗誤差を秩序変数として選択することも可能である.

あるパラメータ (例えば温度) を変化させることによって系が相転移することを相転移といい, 2 つの相を分ける (モデルを定義するパラメータ空間) の境界を相境界と呼ぶことにする. 物理学では通常, 系の相に関する情報を相図にまとめるが, これはモデルを定義するパラメータ空間上に相境界をプロットしたものにはすぎない. 物理学でよく知られている相図の 2 つの例を Fig. A.1 に示す.

相転移は, 系の振る舞いが巨視的に変化することで現れる (水が沸騰し始めるとどうなるか考えよ). したがって, Chapter1 と Appendix の議論を追った読者は, 相転移が自由エントロピーにより特徴づけられ, 相転移の種類を自由エントロピーにより分類できるという考え方に抵抗はないだろう. 実際, 自由エントロピーの解析的性質から相転移を分類することは, 1933 年の Paul Ehrenfest の研究にまでさかのぼる (歴史的経緯は Jaeger (1998) を参照). このとき, Eq. (A.2) からの自由エントロピーはモデルパラメータの解析的関数であり, どうして相の間で自由エントロピーの解析的性質が変わるのだろうか? と数学的志向の強い読者は次のように反論するかもしれない. 確かに, 有限の N では自由エントロピーはモデルパラメータの解析的な関数である. しかし, 解析的関数の極限は解析的である必要となることは自明ではなく, 熱力学的極限では自由エントロピーは特異点を持つ可能性がある. 熱力学極限化での自由エントロピーの特異性を研究することが, Ehrenfest による相転移の分類の鍵となっている. 以下, 相転移の代表的な二つの例を紹介する:

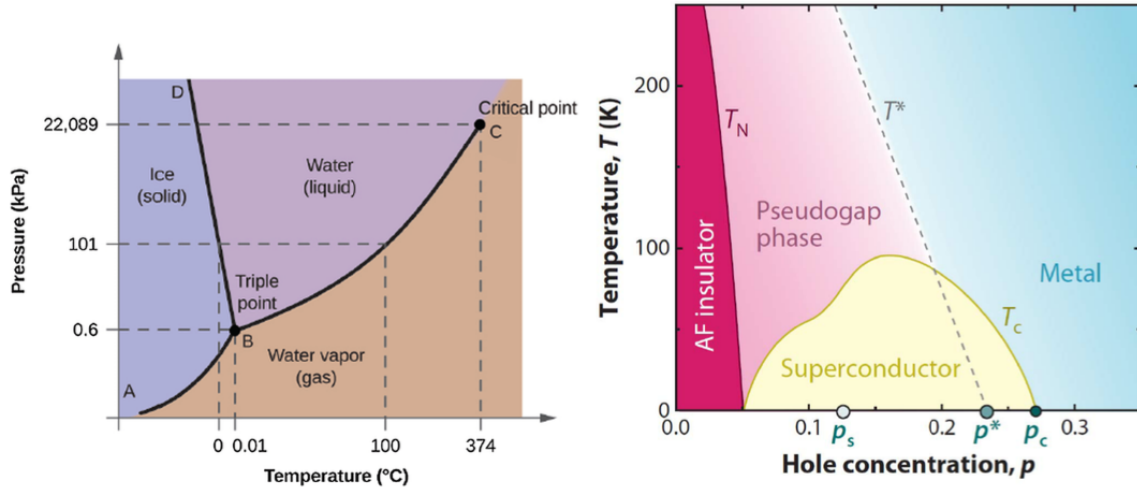


図 A.1 Caption

■**一次転移** 一次相転移は、モデルを定義するパラメータに対する熱力学極限下の自由エネルギーの一次導関数が不連続性により特徴づけられる。最も一般的な例は、一定の圧力で温度を変化させたとき、水が液体から気体に転移する例である（パスタを茹でるときあなたも行うこと）。具体的な相図を Fig. A.1に示す。この例では、エントロピーとして知られる温度に対する自由エネルギーの微分が相境界横切の際に不連続にジャンプする。

■**二次転移** 二次の相転移は、パラメータに対する熱力学極限下の自由エネルギーの二次導関数の不連続性により特徴づけられる。したがって、2次相転移では自由エネルギーそのものとその1次導関数は連続である。自由エネルギーの2次導関数は、一般的に帯磁率のような応答関数と関連していることに注意する。2次転移の最も有名な例は、強磁性転移として知られる、ある温度で自発的に現れるある金属磁化である。

あまり一般的ではないが、熱力学極限下自由エネルギーの n 階導関数の不連続性という観点から、 n 次相転移を定義することができる。相転移の次数は、豊かな現象論と結びついている。ここでは、この概念を説明するため、我々のお気に入りのモデルである強磁性体の Curie-Weiss 模型を使って議論する。

Phase transitions in Curie-Weiss model Curie Weiss 模型の自由エネルギー密度の熱力学的極限を計算したことを思い出す：

$$-\beta f_\beta = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N = \max_{m \in [-1, 1]} \phi(m) \quad (\text{A.5})$$

ここで、

$$\phi(m) = \frac{\beta}{2} m^2 + \beta h m + H(m) \quad (\text{A.6})$$

$$H(m) = -\frac{1+m}{2} \log \frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2} \log \frac{1-m}{2} \quad (\text{A.7})$$

これまでこれまで見てきたように、平衡状態の磁化は以下の最適化問題を解くことで評価できる：

$$m^* = \operatorname{argmax}_m \phi(m) = \langle \bar{S} \rangle_\beta \quad (\text{A.8})$$

また、熱力学極限下のエネルギー密度とエントロピー密度は以下で与えられる。

$$e(\beta, h) = -m^{ast} \left(\frac{m^*}{2} + h \right), \quad s(\beta, h) = H(m^*) \quad (\text{A.9})$$

この結果から、エネルギー密度とエントロピー密度は磁化 $m^*(\beta, h)$ を通して間接的にモデルを定義するパラメータ (β, h) に依存することに注意する。ポテンシャル関数 $\phi(m)$ は、 $m, (\beta, h)$ に対して解析的な関数だが、 m の最適化により得られる $m^*(\beta, h)$ により、自由エネルギー密度は非解析的な振る舞いする可能性がある。この点について以下、外部磁場が存在するケースと存在しないケースに分けて議論していく。

Zero external field and the second order transition $f(\beta, h) = e - \beta s$ から、自由エネルギーがエネルギーとエントロピーの二つの放物線の競合によって支配されることに注意する。外場が $h = 0$ の場合、ポテンシャル関数 (大偏差レート) は、 $\phi(-m) = \phi(m)$ となり対照的な関数となる。 $\beta \rightarrow 0^+$ のときポテンシャル関数は、 $\phi(m; \beta = 0^+) = H(m)$ となり、エントロピーのみで平衡状態の磁化が決定する。また、 $H(m)$ は、 $m = 0$ で唯一の極小値を持つため、平衡状態の磁化は $m^* = 0$ となり、常磁性相となる。また、臨界温度 $\beta_c = 1$ では、ポテンシャル関数 $\phi(m)$ の $m = 0$ の点は極大値となり、同じ値を持つ二つの極小値が連続的に現れる。ゆえに平衡状態の磁化は、 $|m^*| > 0$ となり、強磁性相への転移を示唆している。次にこの転移により自由エネルギーにどのような特異性が生じるかを確認する。今興味があるのは、磁化が 0 から非ゼロの値を持つようになる点の自由エネルギーの特異性であるため、 m が十分小さいと考えて展開すると平均場方程式から以下を得る：

$$m = \tanh(\beta m) = \beta m - \frac{1}{3}\beta^3 m^3 + O(m^5)$$

3 次の項まで考えると磁化は以下ようになる：

$$m \sim \sqrt{3 \frac{\beta - 1}{\beta^3}}$$

この結果をポテンシャル関数に代入することで free entropy を得ることができる：

$$\Phi(\beta, h = 0) \sim \frac{3(\beta - 1)}{2\beta^3}(\beta - 1) - \log 2$$

この free entropy は、 $\beta = 1 + 0$ で $-\log 2$ となる。一方、 $\beta = 1 - 0$ のとき、自由エントロピーは $\phi(0) = -\log 2$ となるため自由エネルギー自体の不連続性は存在しない。次に、一次導関数について考える。

$$\frac{d\Phi(\beta, h = 0)}{d\beta} = \frac{3(\beta - 1)}{\beta^4} \left(\frac{3}{2} - \beta \right)$$

この一次導関数は、 $\beta = 1 + 0$ で 0 となる。同様に、 $\beta = 1 - 0$ の自由エントロピーの一次導関数も 0 となるため不連続性は生じない。次に、二次導関数について考える：

$$\frac{d^2\Phi(\beta, h = 0)}{d\beta^2} = \frac{3(\beta^2 - 6(1 - \beta))}{\beta^5}$$

この二次導関数は、 $\beta = 1 + 0$ で 3 となる。一方、 $\beta = 1 - 0$ の自由エントロピーの二次導関数は、0 となり不連続性が生じる。ゆえに、磁化が連続的に非ゼロとなる転移は 2 次転移となることがわかった。この結果から、系の巨視的の変化と自由エネルギーの特異性が関連付くことがわかった。すなわち、 $\beta < 0$ では、ギブスボルツマン分布の磁化は $m^* \approx 0$ だが、 $\beta > 1$ では $|m^*| > 0$ となる。これは物理学の重要な概念の一つである自発的対称性の破れの例であり、ハミルトニアンは $\bar{S} \rightarrow -\bar{S}$ の \mathbb{Z}_2 対称性を持つが、ギブスボルツマン分布によって生成される配位 $\mathbf{S} \sim \mathbb{P}_\beta$ は、マクロなレベルでこの対称性を破る。また、これまでの結果から、 $m = 0$ 付近でのポテンシャル関数展開を調べることで臨界温度を求めることが可能である：

$$\phi(m) \underset{m \rightarrow 0}{=} \log 2 + \frac{m^2}{2}(\beta - 1) + O(m^3) \quad (\text{A.10})$$

この展開から, $\beta_c = 1$ で $m = 0$ で極小から極大への変化が生じることがわかり, 二次転移温度を決定することができる. また, 鞍点方程式の観点からこの上述と同様な概念を理解することは有益である. この問題の場合, 鞍点方程式は以下で与えられる:

$$m = \tanh \beta m \quad (\text{A.11})$$

この方程式は, 自由エントロピーの停留条件から得られるため, $m = 0$ が常にこの方程式の固定点であることは, その点がポテンシャル関数の極値であることを意味している. また, 臨界温度 $\beta_c = 1$ は, $m = 0$ の固定点の安定性が変化する点に対応する. 実際, 鞍点方程式を離散力学系 $m^{t+1} = f(m^t)$ と見なすと, 固定点 $m = 0$ 周りの写像 $f: [-1, 1] \rightarrow [-1, 1]$ のヤコビアンを見ることで安定性を判断することができる:

$$f(m) = \tanh \beta m \underset{m \rightarrow 0}{=} \beta m + O(m^3) \quad (\text{A.12})$$

この結果から, $\beta < 1$ で固定点は安定となり, $\beta > 1$ で不安定となることがわかった. 一方, 極大, 極小はポテンシャル関数の二階微分 (ヘシアン) から得ることができる:

$$\frac{d^2 \phi(m)}{dm^2} = \frac{1}{m^2 - 1} + \beta$$

この結果から, 停留点 $m = 0$ の極大極小が変化する点は, $\beta = 1$ を境に変化することがわかった. ゆえに, 離散力学系 $m^{t+1} = f(m^t)$ の固定点の安定性条件とポテンシャル関数のヘシアンによる極大極小の変化する条件は一致することがわかった.

Finite external field and the first order transition 外部磁場 $h \neq 0$ とすると, 上述の議論が劇的に変わる. まず, ハミルトニアンが \mathbb{Z}_2 の対称性を失う. この対称性の破れは, 物理学では自明な対称性の破れ (explicit symmetry breaking) として知られている. 高温極限 $\beta \rightarrow 0^+$ では, ポテンシャル関数は凸関数となり, 磁場に沿った方向 $m = h$ で唯一の極小値を持つ. 温度を下げ, 磁場がない時に強磁性相 ($\beta > 1$) に到達すると, 二つの振る舞いが見られる. h が小さいとき, 外部磁場は, 上述の議論で現れた 2 つの極小値の対称性を破り, 外部磁場と反対符号を持つ極小値を局所最適解とする効果がある. この場合, 自由エネルギーは, ポテンシャル関数の唯一の大域的最適解によって決定されるが, 局所最適解の存在は, 系のダイナミクスに重要な影響を与える. 実際, 局所最適解近傍で鞍点方程式を解くための反復方程式 (離散力学系) を初期化すると, 局所最適解は安定な固定点であるため, この局所最適解に収束する. この現象は物理学では, 準安定性 (metastability) と呼ばれる. 熱力学的極限で準安定状態は自由エネルギーポテンシャルの安定な固定点であるため, “準安定性” という言葉は誤解を招きやすいことに注意する. しかし, 有限系では, $t = O(e^N)$ の反復で平衡状態に到達する. 準安定状態はアルゴリズムの困難さと密接な関係があるため, 統計物理学による推論問題の解析において大きな役割を果たす.

外部磁場 h をさらに大きくすると, 2 つの極小値の差が大きくなり, 最終的にスピノーダル点と呼ばれる臨界磁場 h_{sp} で局所極小値がなくなり, 再び凸関数となる. スピノーダル点は局所最適解が存在しなくなる条件により得られる:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(m)}{\partial m} &= \frac{\partial^2 \phi(m)}{\partial m^2} = 0 \\ \frac{\partial \phi(m)}{\partial m} &= \beta(m + h) - \frac{1}{2} \log \frac{1+m}{1-m} \\ \frac{\partial^2 \phi(m)}{\partial m^2} &= \beta - \frac{1}{1-m^2} \end{aligned}$$

この条件から臨界磁場は以下のようになる:

$$h_{\text{sp}}(\beta) = \pm \sqrt{\frac{1}{\beta}(\beta - 1)} \mp \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} \sqrt{\frac{1}{\beta}(\beta - 1)} \quad (\text{A.13})$$

$\beta > 1$ の場合, $h \neq 0$ で非ゼロの磁化を持ち, 自由エントロピーの h 微分 (磁化) は, $h = 0$ で不連続となる. また, $|h| < h_{\text{sp}}$ の領域ではポテンシャル関数の安定な局所最適解の存在により, 反復方程式を解くための離散ダイナミクスの定常点は, 初期状態に依存する. この“初期状態の記憶”は, 物理学ではヒステリシス (hysteresis) として知られている.

A.2 A Rigorous version of the cavity method

Chapter1 で紹介した Cavity 法も, これから示すように完全に厳密な証明が可能である. この Appendix は, 数学に興味のない読者は読み飛ばしても良いが, 物事を正確に厳密に行う方法を見ることは常に重要である. 実際, この Appendix は, Chapter1 と同じ手法を使っているにもかかわらず, より厳密な証明が必要となる後の章の良い訓練となる.

まず, 磁化のみならず他の多くの観測値が, N が増加するにつれて一定の値に収束することを示す. 仮に, \bar{S} が本当に測度集中が生じるなら, どのような観測値も同様に収束するを以下の補題で示す.

Lemma A.2.1. 任意の有界な間測量 $O(S)$ に対して, 以下を満たす定数 $C = \|O(S)\|_{\infty}$ が存在する:

$$|\langle O(S) \rangle_{N+1, \beta'} - \langle O(S) \rangle_{N, \beta}| \leq C \beta \sinh(\beta h + \beta) \sqrt{\text{Var}_{N, \beta}(\bar{S})} \quad (\text{A.14})$$

ここで, $S = \{S_i\}_{i=1}^N$ を表す.

Proof. まず, 式変形により以下の関係式を得る.

$$\langle O(S) \rangle_{N+1, \beta'} = \frac{\langle O(S) \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta}}{\langle \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta}} \quad (\text{A.15})$$

この結果から

$$\langle O(S) \rangle_{N+1, \beta'} - \langle O(S) \rangle_{N, \beta} = \frac{\langle O(S) \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta} - \langle O(S) \rangle_{N, \beta} \langle \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta}}{\langle \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta}} \quad (\text{A.16})$$

$$\stackrel{(a)}{\leq} \langle O(S) \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta} - \langle O(S) \rangle_{N, \beta} \langle \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle_{N, \beta} \quad (\text{A.17})$$

$$= \text{COV}_{N, \beta}[O(S), \cosh(\beta(\bar{S} + h))] \quad (\text{A.18})$$

ここで, (a) では任意の x に関して $\cosh(x) \geq 1$ が成り立つことを用いた. 両辺を二乗すると

$$\left(\langle O(S) \rangle_{N+1, \beta'} - \langle O(S) \rangle_{N, \beta} \right)^2 \leq \text{COV}_{N, \beta}[O(S), \cosh(\beta(\bar{S} + h))] \quad (\text{A.19})$$

$$\stackrel{(a)}{\leq} \text{Var}_{N, \beta}[O(S)] \text{Var}_{N, \beta}[\cosh(\beta(\bar{S} + h))] \quad (\text{A.20})$$

ここで, (a) では Cauchy-Schwartz inequality $\text{COV}^2[X, Y] \leq \text{Var}[X] \text{Var}[Y]$ を用いた. さらに, $\bar{S} \in [-1, 1]$ において $\cosh \beta(\bar{S} + h)$ が $\beta \sinh \beta(1 + h)$ -convex Lipschitz 関数であることを用いると

$$|\cosh \beta(\bar{S} + h) - \langle \cosh \beta(\bar{S} + h) \rangle| \stackrel{(a)}{\leq} |\cosh \beta(\bar{S} + h) - \cosh \beta(\langle \bar{S} \rangle + h)| \quad (\text{A.21})$$

$$\stackrel{(b)}{\leq} \beta \sinh \beta(1 + h) |\bar{S} - \langle \bar{S} \rangle| \quad (\text{A.22})$$

ここで, (a) では凸性から Jensen の不等式, (b) では Lipschitz 性を用いた. さらに, 両辺を二乗して期待値を取ると以下が成り立つ.

$$\langle (\cosh \beta(\bar{S} + h) - \langle \cosh \beta(\bar{S} + h) \rangle)^2 \rangle \leq \beta^2 \sinh^2 \beta(1 + h) \langle (\bar{S} - \langle \bar{S} \rangle)^2 \rangle = \beta^2 \sinh^2 \beta(1 + h) \text{Var}_{N, \beta}[\bar{S}] \quad (\text{A.23})$$

この結果から

$$\begin{aligned} |\langle O(S) \rangle_{N+1, \beta'} - \langle O(S) \rangle_{N, \beta}| &\leq \beta \sinh(\beta h + \beta) \sqrt{\text{Var}_{N, \beta}(\bar{S})} \sqrt{\text{Var}_{N, \beta}(O(S))} \\ &\leq C \sinh(\beta h + \beta) \sqrt{\text{Var}_{N, \beta}(\bar{S})} \end{aligned}$$

□

さらに以下の定理が成り立つ.

Theorem A.2.2. 以下を満たす定数 $C(\beta, h)$ が存在する:

$$|\langle S_i \rangle_{N, \beta} - \tanh \beta(h + \langle \bar{S} \rangle_{N, \beta})| \leq C(\beta, h) \sqrt{\text{Var}_{N, \beta}(\bar{S})} \quad (\text{A.24})$$

Proof. 計算することで直接以下の関係式が得られる:

$$\langle S_i \rangle_{N, \beta} = \langle S_0 \rangle_{N, \beta} = \frac{\langle \sinh \beta(\bar{S} + h) \rangle_{N, \beta}}{\langle \cosh \beta(\bar{S} + h) \rangle_{N, \beta}} \quad (\text{A.25})$$

補題. A.2.1 と同様に凸性かつ Lipchiz 性から以下の不等式が成り立つ:

$$\left| \langle \cosh \beta(\bar{S} + h) \rangle_{N, \beta} - \cosh \beta(\langle \bar{S} \rangle + h) \right| \leq \beta \sinh \beta(1 + h) \text{Var}_{N, \beta}(\bar{S}) \quad (\text{A.26})$$

$$\left| \langle \sinh \beta(\bar{S} + h) \rangle_{N, \beta} - \sinh \beta(\langle \bar{S} \rangle + h) \right| \leq \beta \cosh \beta(1 + h) \text{Var}_{N, \beta}(\bar{S}) \quad (\text{A.27})$$

ここで以下の不等式を用いる:

$$\left| \frac{a_1}{b_1} - \frac{a_2}{b_2} \right| \leq \frac{|a_1 - a_2|}{b_1} + \frac{a_2 |b_1 - b_2|}{b_1 b_2}$$

この不等式に以下を代入すると

$$\begin{aligned} a_1 &= \langle \sinh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle \\ b_1 &= \langle \cosh(\beta(\bar{S} + h)) \rangle \\ a_2 &= \sinh(\beta(\langle \bar{S} \rangle + h)) \\ b_2 &= \cosh(\beta(\langle \bar{S} \rangle + h)) \end{aligned}$$

□

$|a_1 - a_2|$ は絶対値. 平均磁場方程式を得るために必要なことは, 磁化の分散が相転移/共存線の外側でゼロになることを示す必要がある. これは自明なことではないが, いわゆる散逸法を使って, 平面 (β, h) のほぼ全域でこのことが当てはまることを簡単に示すことができる.

Lemma A.2.3 (Bound on the variance). 任意の β , 磁場 h_1, h_2 に対して以下が成り立つ:

$$\int_{h_1}^{h_2} \text{Var}(\bar{S})_{\beta, N, h} dh \leq \frac{2}{\beta N} \quad (\text{A.28})$$

そのため, $\text{Var}(\bar{S})_{\beta, N, h} \leq 2/N$

Proof.

□

参考文献