Sherrington-Kirkpatrick modelのレプリカ対称解１

高橋 昂
August 15, 2025

Abstract

スピングラス研究の最初期に提案された平均場モデルであるSherrington-Kirkpatrickモデルのレプリカ対称解の計算。ここでは最も愚直な計算を示した。元ネタは[SK75, KS78]である。"1"と言っても、これで完結していないというわけではなくて、単に１つの計算の仕方を書いているということである[1]。

1 introduction

Sherrington-Kirkpatrick(SK)モデル[SK75]とはスピングラス研究の最初期に提案された平均場モデルである。不純物の影響で結合定数が不規則に分布しているスピングラスの性質を反映し、結合定数が確率変数となっている特徴がある。このような場合、Boltzmann分布や自由エネルギーそのものが確率変数となってしまうため、やや特殊な取り扱いが必要となる。

ここでは、SKモデルの自由エネルギーの典型評価のレプリカ対称計算を紹介する。特に、古い教科書によく出てくる標準的なレプリカ計算を扱う。文献としては[Nis01, MM09]がある[2]。

2 setting

Sherrington-KirkpatrickモデルはIsingスピンのモデルで、そのハミルトニアンは以下のように与えられる:

$$H(\boldsymbol{x};J) = -\sum_{i<j} J_{ij}x_i x_j - h\sum_{i=1}^{N} x_i, \quad \boldsymbol{x}\in\{-1,1\}^N, h\in\mathbb{R}$$

$$J_{ij} \sim_{\mathrm{iid}} \mathcal{N}\left(\frac{J_0}{N}, \frac{J^2}{N}\right).$$

つまり、全結合のIsingスピン系で、ただしその相互作用が確率変数になっていて一定の値にはならないようになっている。自由エネルギーは

$$-\frac{1}{\beta N}\log Z^{(\beta)}(J), \quad Z^{(\beta)}(J) = \mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}} e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)}, \quad \beta>0,$$

で与えられる。$\beta>0$は逆温度である。また、Trは、下付きの添字で書かれた変数について全ての組み合わせの和をとる記号である。混乱がなさそうなときは、β, Jは省略する。

[1] 日本語のSKのRS計算がインターネットに落ちてたらいいかなと思って書き出したのだが、結局[SK75]と[KS78]を追った際のメモなのかRS計算の解説なのかよくわからなくなってしまった。

[2] SKについては既に数学としてもかなり理解が進んでいる。レプリカ法を使わない数学的に厳密な議論については[Tal10, Pan13]がある

我々はこの典型評価

$$\lim_{N\to\infty} -\frac{1}{\beta N}\mathbb{E}_J\left[\log Z\right], \tag{1}$$

に興味がある。

3 method

恒等式$\mathbb{E}[\log Z] = \lim_{n\to 0} n^{-1}\log\mathbb{E}[Z^n]$を用い、極限$N\to\infty$と$n\to 0$の順序を入れ替えられるとすれば、自由エネルギーの典型評価は以下のように書き直せる:

$$f = \lim_{n\to 0}\frac{1}{n}\phi_n,$$
$$\phi_n = \lim_{N\to\infty}\frac{-1}{\beta N}\log\mathbb{E}\left[Z^n\right].$$

これは（極限の順序の入れ替えを気にしなければ）ただの恒等式である。この表式の利点は$n = 1, 2, \ldots$に対しては分配関数の定義式を用いてϕ_nが

$$\phi_n = \lim_{N\to\infty}\frac{-1}{\beta N}\log\mathbb{E}_J\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}^n\prod_{a=1}^{n}\exp\left(\beta\sum_{i<j}J_{ij}x_{a,i}x_{a,j} + \beta h\sum_i x_{a,i}\right)\right],$$

と書き直せる点にある。ここで、$\boldsymbol{x}_a \in \{-1,1\}^N, a = 1,2,\ldots,n$であり、$\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}^n = \mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\ldots,\boldsymbol{x}_n}$である。もとの表式では、$\log Z$という、$\boldsymbol{x}$の和をとって対数をとった後にはどのように$J$に依存しているのかよくわからないものの平均を取る必要があった。しかし、ここではJ依存性が透明なものの平均をとるだけでよい。先にJについての平均をとってしまって、その後でN次元からNn次元に高次元化された問題を扱おうというわけである。こちらは、もし平均をとった後でも対称性が高ければ、統計力学でも高次元統計学でも何でも普通の多体問題を扱う手段が使えるだろう。$n = 1, 2, \ldots$に対して計算結果を得たとする。もしその表式がnの離散性を陽に含まなければ、$n\to 0$への外挿によって答を得ることができる。このようにしてべきの極限で難しいところを書き直し、整数べきからの外挿によって結果を得る方法をレプリカ法と呼ぶ。この整数べきからの外挿法はスピングラスの平均場理論が関係するところで、一般にはレプリカ対称性の破れを取り込んだ計算方法を用いる必要がある。ここでは最も簡単なものとして、鞍点法でZ^nを評価し、その鞍点が$n\to 0$の外挿時にもレプリカ対称性を保つと仮定する、レプリカ対称計算を紹介する。

4 replica calculation

このセクションでは整数のnに対する$\mathbb{E}_J[Z^n]$の計算と、レプリカ対称仮定に基づく$n\to 0$の外挿をまとめる。

4.1 Z^nの整理

まず、Z^nを以下のように整理する

$$\begin{aligned} Z^n &= \mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}^n\prod_{a=1}^{n}\exp\left(\beta\sum_{i<j}J_{ij}x_{a,i}x_{b,j} + \beta h\sum_i x_{a,i}\right) \\ &= \mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}^n\prod_{i<j}\exp\left(\beta\sum_{a=1}^{n}x_{a,i}x_{a,j}J_{ij}\right)\prod_{i=1}^{N}\exp\left(\beta h\sum_{a=1}^{n}x_{a,i}\right). \end{aligned}$$

こうすると、J_{ij}は独立した因子に含まれていて、各J_{ij}ごとに平均をとればよいことがわかる。

4.2 J_{ij}平均

J_{ij}がGaussianなので容易に平均がとれて以下のようになる

$$\mathbb{E}_{J_{ij}}\left[\exp\left(\beta\sum_{a=1}^{n}x_{a,i}x_{a,j}J_{ij}\right)\right]=\exp\left(\frac{\beta^2J^2}{2N}\left(\sum_{a=1}^{n}x_{a,i}x_{a,j}\right)^2+\frac{\beta J_0}{N}\left(\sum_{a=1}^{n}x_{a,i}\right)^2\right).$$

これをZ^nの式に代入して整理すると、

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_J\left[Z^n\right]=\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}^n\exp&\left(\frac{\beta^2J^2}{4}\sum_{a\neq b}\left(\sum_{i=1}^{N}x_{a,i}x_{b,i}\right)^2+\frac{\beta J_0}{2}\sum_{a=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{N}x_{a,i}\right)^2\right)\\&\times\prod_{i=1}^{N}\exp\left(\beta h\sum_{a=1}^{n}x_{a,i}\right).\end{aligned}\tag{2}$$

となる。ここで、$\left(\sum_{a=1}^{n}...\right)^2$を展開したあと$\sum_{i<j}\cdots=\frac{1}{2}\sum_{i,j}\cdots-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\ldots$を利用し、$i=1$から$N$までの和の項は$\boldsymbol{x}$に依存しない量となることを用いた。

4.3 秩序変数の導入

(2)式は$\boldsymbol{x}$に$\sum_{i=1}^{N}x_{a,i}x_{b,i}$と$\sum_{i=1}^{N}x_{a,i}$を通して依存しているので、恒等式

$$1=\prod_{a<b}\int\delta(NQ_{ab}-\sum_{i=1}^{N}x_{a,i}x_{b,i})dQ_{ab},$$

$$1=\prod_{a=1}^{n}\int\delta(Nm_a-\sum_{i=1}^{N}x_{a,i})dm_a,$$

を挿入して秩序変数を導入する[3]。これをFourier変換して、その際の共役変数を$\tilde{Q}_{ab},-\tilde{m}_a$として整理すれば以下のようになる:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_J\left[Z^n\right]&\overset{(a)}{=}\int\exp\left(\frac{N}{2}\sum_{a\neq b}Q_{ab}\tilde{Q}_{ab}-N\sum_{a=1}^{n}m_a\tilde{m}_a+\frac{\beta^2J^2N}{4}\sum_{a\neq b}Q_{ab}^2+\frac{\beta J_0N}{2}\sum_{a=1}^{n}m_a^2\right)\\&\quad\times\prod_{i=1}^{N}\mathrm{Tr}_{\{x_{a,i}\}_{a=1}^n}\exp\left(-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_{a,i}x_{b,i}+\sum_{a=1}^{n}(\beta h+\tilde{m}_a)x_{a,i}\right)dQd\tilde{Q}dmd\tilde{m}\\&\overset{(b)}{=}\int\exp\left(\frac{N}{2}\sum_{a\neq b}Q_{ab}\tilde{Q}_{ab}-N\sum_{a=1}^{n}m_a\tilde{m}_a+\frac{\beta^2J^2N}{4}\sum_{a\neq b}Q_{ab}^2+\frac{\beta J_0N}{2}\sum_{a=1}^{n}m_a^2\right)\\&\quad\times\left(\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}\exp\left(-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^{n}(\beta h+\tilde{m}_a)x_a\right)\right)^N dQd\tilde{Q}dmd\tilde{m}\\&\overset{(c)}{=}\int\exp\left\{N\left(\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}Q_{ab}\tilde{Q}_{ab}-\sum_{a=1}^{n}m_a\tilde{m}_a+\frac{\beta^2J^2N}{4}\sum_{a\neq b}Q_{ab}^2+\frac{\beta J_0N}{2}\sum_{a=1}^{n}m_a^2\right.\right.\\&\quad\left.\left.+\log\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^{n}(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}\right)\right\}dQd\tilde{Q}dmd\tilde{m}\\&\overset{(d)}{=}\exp\left\{N\underset{Q,\tilde{Q},m,\tilde{m}}{\mathrm{extr}}\left[\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}Q_{ab}\tilde{Q}_{ab}-\sum_{a=1}^{n}m_a\tilde{m}_a+\frac{\beta^2J^2}{4}\sum_{a\neq b}Q_{ab}^2+\frac{\beta J_0}{2}\sum_{a=1}^{n}m_a^2-\beta\phi\right]\right\},\\&\quad\varphi=-\frac{1}{\beta}\log\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^{n}(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}.\end{aligned}$$

[3] $e^{\mathcal{O}(N)}$の部分だけが自由エネルギーに寄与するので、それ以外の項は無視している。それを=で結ぶのはよくないのだが・・・。

(a)では各iごとに$\boldsymbol{x}_a$の和がとれることを利用した。(b)では各iごとに和をとった結果が等しいことを利用し、(c)では計算結果を指数関数の肩に上げ、(d)では$N \gg 1$で鞍点評価をした。

4.4　$n = 1, 2, \dots$ での鞍点（一般論）

$\mathbb{E}_J[Z^n]$は一般に上のようにして鞍点法で評価できることがわかった。この鞍点条件を一般に書き下すと、まずQ, mに関する鞍点条件は以下のようになる:

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_{ab} &= -\beta^2 J^2 Q_{ab},\\ \tilde{m}_a &= \beta J m_a.\end{aligned}$$

つまり、SKモデルの場合には共役変数は秩序変数に比例したものになる[4]。また、$\tilde{Q}, \tilde{m}$に関する鞍点条件は

$$\begin{aligned}Q_{ab} &= \frac{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n} x_a x_b e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_a x_b + \sum_{a=1}^n (\beta h + \tilde{m}_a) x_a}}{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n} e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_a x_b + \sum_{a=1}^n (\beta h + \tilde{m}_a) x_a}},\\ m_a &= \frac{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n} x_a e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_a x_b + \sum_{a=1}^n (\beta h + \tilde{m}_a) x_a}}{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n} e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_a x_b + \sum_{a=1}^n (\beta h + \tilde{m}_a) x_a}},\end{aligned}$$

である。

4.5　レプリカ対称仮定

さて、鞍点条件は一般に出せたが、$\mathbb{E}[Z^n]$はまだ離散的な変数a, bについての和を陽に含んでいて、$n \to 0$の外挿は行えない。そこで、鞍点の構造を適当に仮定することにする。変分関数がレプリカ添字の入れ替えに対して不変であることに注目し、鞍点にも同様の構造を仮定する:

$$\begin{aligned}Q_{ab} &= q,\\ m_a &= m.\end{aligned}$$

ただし、$\tilde{q}, \tilde{m}$はQ, mを決めれば勝手に決まるのでそれに応じたものとする。このようにレプリカの番号に依存しないような鞍点をレプリカ対称な鞍点と呼ぶ。このもとでは、極値条件は以下のようになる[5]:

$$\begin{aligned}q &= \frac{\mathbb{E}_\xi\left[\tanh^2\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)\left(2\cosh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)\right)^n\right]}{\mathbb{E}_\xi\left[\left(2\cosh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)\right)^n\right]},\\ m &= \frac{\mathbb{E}_\xi\left[\tanh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)\left(2\cosh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)\right)^n\right]}{\mathbb{E}_\xi\left[\left(2\cosh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)\right)^n\right]},\\ \xi &\sim \mathcal{N}(0, 1).\end{aligned}$$

[4] これは一般的な構造ではない

[5] RSの自由エネルギーを書いてから極値条件を改めて出すよりも、一般的な極値条件の式をRS構造を利用して変形したほうが楽だと思う。

ここで、$e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_a x_b+\sum_{a=1}^{n}(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}$ の部分がRS鞍点では、恒等式$\mathbb{E}_\xi[e^{a\xi}]=e^{\frac{a^2}{2}}, \xi\sim\mathcal{N}(0,1)$を用いて

$$\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{\beta^2J^2}{2}q\left(\sum_{a=1}^{n}x_a\right)^2-\frac{\beta^2J^2nq}{2}+\beta(h+J_0m)\sum_{a=1}^{n}x_a\right)\\
&=\mathbb{E}_\xi\left[\prod_{a=1}^{n}e^{\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)x_a}\right]e^{-\frac{\beta^2J^2}{2}nq},\quad \xi\sim\mathcal{N}(0,1),
\end{aligned}$$

と書けることを用いた。また、この極値の値を用いるとZ^nのほうも同様の計算によってnの1次までで以下のように求まる。

$$\begin{aligned}
\phi_n&=\lim_{N\to\infty}\frac{-1}{\beta N}\log\mathbb{E}_J[Z^n]\\
&=-\frac{\beta J^2n}{4}(1-q)^2+\frac{J_0n}{2}m^2+n\varphi_{\mathrm{RS}}+\mathcal{O}(n^2),\\
\varphi_{\mathrm{RS}}&=-\frac{1}{\beta}\mathbb{E}_\xi\left[\log 2\cosh\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right],\\
&\xi\sim\mathcal{N}(0,1).
\end{aligned}$$

もはや見かけ上nの離散性は消え、$n\to 0$に外挿できる格好である。この$n\to 0$極限から自由エネルギーを求めれば以下のようになる[6]:

$$f_{\mathrm{RS}}=-\frac{\beta J^2}{4}(1-q)^2+\frac{J_0}{2}m^2+\varphi_{\mathrm{RS}}, \tag{3}$$

$$m=\mathbb{E}_\xi\left[\tanh\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right], \tag{4}$$

$$q=\mathbb{E}_\xi\left[\tanh^2\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]. \tag{5}$$

4.5.1 秩序変数の意味

秩序変数の意味はそれぞれ

$$\begin{aligned}
q=&\mathbb{E}_J\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_{1,i}x_{2,i}\frac{1}{Z^2}e^{-\beta H(\boldsymbol{x}_1;J)-\beta H(\boldsymbol{x}_2;J)}\right]\\
=&\ \mathbb{E}_J\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}x_i\frac{1}{Z}e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)}\right)^2\right],\\
m=&\mathbb{E}_J\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i\frac{1}{Z}e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)}\right],
\end{aligned}$$

である。まず1つ目は同じ結合定数の実現値を持った2つの同一の系の自由度間の内積の典型評価で、これは各サイトの局所磁化の2乗の平均であるとも見られる。2つ目は磁化の典型評価である。これらがうえのq,mに対応するのを調べるためには以下のようなレプリカ法を考えればよい。一般にこのようなモーメントの典型評価が難しいのは、分

[6] 整数べきの$\mathbb{E}_J[Z^n]$を評価する際には、鞍点はレプリカ対称なかたちでよい。$\mathbb{E}_J[\prod_{a=1}^{n}e^{-\beta H(\boldsymbol{x}_a;J)}]$がレプリカ添字の入れ替えに対して実際に対称だからである。ただし、$n\to 0$と外挿する際には、もはや$\mathbb{E}_J[Z^n]$での構造が保たれる保証はない。したがって、RS構造のある鞍点を$n\to 0$に外挿する部分には強い仮定が入っている。

配関数が分母にあるためである。これをまず冪の極限で以下のように書き直す:

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_J\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N x_{1,i}x_{2,i}\frac{1}{Z^2}e^{-\beta H(\boldsymbol{x}_1;J)-\beta H(\boldsymbol{x}_2;J)}\right]\\
&=\lim_{n\to 0}\mathbb{E}_J\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N x_{1,i}x_{2,i}Z^{n-2}e^{-\beta H(\boldsymbol{x}_1;J)-\beta H(\boldsymbol{x}_2;J)}\right],\\
&\mathbb{E}_J\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}_1}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N x_i\frac{1}{Z}e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)}\right]\\
&=\lim_{n\to 0}\left[\mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}_1}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N x_i Z^{n-1}e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)}\right].
\end{aligned}
$$

すると、$n=2,3,\ldots$に対しては分配関数の負冪は消えて、分子にBoltzmann因子があるだけという格好になる。その後の評価はほぼ自由エネルギーの評価と同じで、変わるのは唯一$x_{a,i}$の和の部分がそれぞれ

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}x_1x_2e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^n(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}}{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^n(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}}\\
&\qquad\times\left(\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^n(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}\right)^N\\
&=\frac{\mathbb{E}_\xi\left[\tanh^2\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\cosh^n\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]}{\mathbb{E}_\xi\left[\cosh^n\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]}\\
&\qquad\times\left(\mathbb{E}_\xi\left[\cosh^n\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]\right)^N,
\end{aligned}
$$

および

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}x_1e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^n(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}}{\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^n(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}}\\
&\qquad\times\left(\mathrm{Tr}_{\{x_a\}_{a=1}^n}e^{-\sum_{a<b}\tilde{Q}_{ab}x_ax_b+\sum_{a=1}^n(\beta h+\tilde{m}_a)x_a}\right)^N\\
&=\frac{\mathbb{E}_\xi\left[\tanh\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\cosh^n\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]}{\mathbb{E}_\xi\left[\cosh^n\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]}\\
&\qquad\times\left(\mathbb{E}_\xi\left[\cosh^n\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)\right]\right)^N,
\end{aligned}
$$

となることのみである。ここでは対数をとってnで割るようなことはしていないので、赤字の部分以外は$e^{\mathcal{O}(n)}$という格好であり、$n\to 0$で1になる。Q_{ab},m_aはRS仮定下ではa,bに依存しないので[7]、結果的にそれぞれq,mだけが残る。

[7]なんか騙された感じがすると思うかもしれない。a,bといろいろあったうち、q_{12}とかm_1という恣意的な1つだけを選ぶというのは…。実際ここはレプリカ法の手続きの重要なポイントになっている。ただ、ここの事情はレプリカ対称性仮定の破綻が出てくるときに考え直すのがよいと思ってここではRSでの秩序変数の計算をやってQ行列のどこをとってくるかという悩みを無視して進むことにした。

4.5.2 確率変数ξの意味合いと有効ハミルトニアン[8]

ところで、自由エネルギーのφ_{RS}の部分を計算を行う際、恒等式$\mathbb{E}_\xi[e^{a\xi}] = e^{\frac{a^2}{2}}, \xi \sim \mathcal{N}(0,1)$を用いて

$$\exp\left(\frac{\beta^2 J^2}{2} q \left(\sum_{a=1}^n x_a\right)^2 - \frac{\beta^2 J^2 nq}{2} + \beta(h + J_0 m)\sum_{a=1}^n x_a\right)$$
$$= \mathbb{E}_\xi\left[\prod_{a=1}^n e^{\beta(h+J_0 m+J\sqrt{q}\xi)x_a}\right] e^{-\frac{\beta^2 J^2}{2} nq}, \quad \xi \sim \mathcal{N}(0,1),$$

という変形を行った。これを眺めただけだと、単にガウス積分に関する恒等式変形を行うと自由エネルギーの計算が進み、ξはその過程で出てきた謎の量、というくらいの意味合いしか感じられないと思う。しかしこのξにはきちんと意味がある。現時点で見て取れそうな意味を2つ述べておくことにする。

1. クエンチランダムネスに関するゆらぎの反映　まず、レプリカ法の枠組みを認めればすぐに計算から出てくる意味として、ξはクエンチランダムネスに関するゆらぎを反映しているというものを確認する。

少しノーテーションを準備する。一般にボルツマン分布

$$p^{(\beta)}(\boldsymbol{x} \mid J) = \frac{1}{Z^{(\beta)}(J)} e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)} \tag{6}$$

に関する熱平均を$\langle ... \rangle_J$と書くことにする:

$$\langle ... \rangle_J = \mathrm{Tr}_{\boldsymbol{x}}(...) \frac{1}{Z^{(\beta)}(J)} e^{-\beta H(\boldsymbol{x};J)}. \tag{7}$$

この期待値は明らかにJに依存した確率変数である。また、m, q, ξの一つの実現値に対して定まる$e^{\beta(h+J_0 m+\sqrt{q}\xi)x}/\cosh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi), x \in \{-1, 1\}$という分布に対する期待値を$\langle \dots \rangle^{(\mathrm{RS})}$と書くことにする:

$$\langle \dots \rangle^{(\mathrm{RS})} = \frac{\mathrm{Tr}_x(\dots) e^{\beta(h+J_0 m+\sqrt{q}\xi)x}}{\cosh\beta(h + J_0 m + J\sqrt{q}\xi)}. \tag{8}$$

これは明らかにξに依存した量である。このノーテーションを使うと、q, mは以下のように書ける:

$$q = \mathbb{E}_\xi\left[\left(\langle x \rangle^{(\mathrm{RS})}\right)^2\right], \tag{9}$$

$$m = \mathbb{E}_\xi\left[\langle x \rangle^{(\mathrm{RS})}\right]. \tag{10}$$

さらに、Boltzmann因子をn個かけ合わせたものをJで平均をとって得られる系をレプリカ系として以下のように定める:

$$\tilde{p}_n^{(\beta)}(\{\boldsymbol{x}_a\}_{a=1}^n) = \frac{1}{\Xi_n^{(\beta)}} \mathbb{E}_J\left[\prod_{a=1}^n e^{-\beta H(\boldsymbol{x}_a;J)}\right]. \tag{11}$$

$\Xi_n^{(\beta)}$は規格化定数であり、$\Xi_n^{(\beta)} = \mathbb{E}_J[(Z(J)^{(\beta)})^n]$が成り立つ。レプリカ法で自由エネルギーを計算する途中で計算していたのは、このレプリカ系の分配関数、自由エネルギーであったことがわかる[9]。そのnの1次オーダーの係数が$n \to 0$で普通の自由エネルギーを与えていたのであった。このレプリカ系での期待値を$\langle \dots \rangle_n$で表すことにしよう:

$$\langle \dots \rangle_n = \mathrm{Tr}_{\{\boldsymbol{x}_a\}_{a=1}^n}(\dots)\tilde{p}_n^{(\beta)}(\{\boldsymbol{x}_a\}_{a=1}^n). \tag{12}$$

[8] 初めて読むときは飛ばしても次のセクションを読んでもいい気がする。

[9] $\lim_{n\to 0} n^{-1} \lim_{N\to\infty} N^{-1} \log \mathbb{E}_J[Z^n] = \lim_{N\to\infty} N^{-1}\mathbb{E}_J[\log Z]$だった。

なお、これはJに依存しない。

ここで、レプリカ系の相関関数$\langle x_{a,i}x_{b,i}\rangle_n$を考える。レプリカ系の定義からして、

$$\begin{aligned}\langle x_{a,i}x_{b,i}\rangle_n &= \frac{1}{\Xi_n^{(\beta)}}\mathbb{E}_J\left[x_{a,i}x_{b,i}\prod_{a=1}^{n}e^{-\beta H \boldsymbol{x}_a;J}\right]\\ &= \frac{1}{\Xi_n^{(\beta)}}\mathbb{E}_J\left[\langle x_i\rangle^2(Z^{(\beta)}(J))^n\right],\end{aligned}$$

が成り立つので、$n\to 0$の極限（外挿）を考えると、

$$\lim_{n\to 0}\langle x_{a,i}x_{b,i}\rangle_n = \mathbb{E}_J\left[\langle x_i\rangle^2\right],$$

である。つまり、レプリカ系の相関関数を計算し$n\to 0$に外挿したものは、物理量の熱平均（これはJに依存する）
とがわかる。例えば、

$$\langle x_{a,i}x_{b,i}\rangle_n - \langle x_{a,i}\rangle_n\langle x_{b,i}\rangle_n \to \mathbb{E}_J\left[\langle x_i\rangle^2\right] - \mathbb{E}_J\left[\langle x_i\rangle\right]^2 \tag{13}$$

だから、レプリカ系の（連結）相関関数はサイトiのモーメント（磁化）のJに関する分散を表している。より一般に、より高次の相関関数として$\langle x_{a_1}x_{a_2}\dots x_{a_r}\rangle_n, r\in\mathbb{N}$を考えると上と全く同じ式変形によって

$$\langle x_{a_1}x_{a_2}\dots x_{a_r}\rangle_n = \frac{1}{\Xi_n^{(\beta)}}\mathbb{E}_J\left[\langle x_i\rangle^r Z^n\right] \to \mathbb{E}_J\left[\langle x_i\rangle^r\right],$$

を得ることができる。任意次数モーメントの情報が得られることはその分布の情報を完全に得ているのと同じである[10]。ここまではレプリカ系が持つ完全に一般的な特性である。

とはいえ、上の変形は無理やり外挿できるとした点を除けば極めて自明で、何か新しい情報を得ている感じがしない。しかし、上に現れたレプリカ系の相関関数は4.5.1でq,mをレプリカ法で評価する際に現れたものと全く同じで、$\mathbb{E}[Z^n]$の計算と同様に、「先にJ平均をとり、秩序変数を導入し、$N\to\infty$で鞍点法を使い、$n\to 0$の極限をとる」という順序で計算することもできる。このような手続きを踏むと、実は上の相関関数は次のように評価される

$$\langle x_{a_1}x_{a_2}\dots x_{a_r}\rangle_n = \mathbb{E}_\xi\left[\left(\langle x\rangle^{(\mathrm{RS})}\right)^r\right](1+\mathcal{O}(n)),$$

つまり、レプリカ系におけるモーメントの揺らぎはξに関する揺らぎによって特徴づけられることがわかる。$n\to 0$に外挿すると、

$$\langle x_{a_1}x_{a_2}\dots x_{a_r}\rangle_n \to \mathbb{E}_\xi\left[\left(\langle x\rangle^{(\mathrm{RS})}\right)^r\right],$$

である。以上を踏まえると、恒等式を用いた式変形に出てきた$\xi\sim\mathcal{N}(0,1)$はモーメントのJに関する揺らぎを特徴づけるものであったということがわかる。さらに踏み込んで解釈すると、$\langle\dots\rangle^{(\mathrm{RS})}$が特定の$J$の実現値における熱平均（これは当然$J$に応じて揺らぐ）を実効的にあらわし、$J$に対する平均を実効的に表したのが$\mathbb{E}_\xi$であるというように考えることができる[11]。$\langle\dots\rangle^{(\mathrm{RS})}$の計算に現れる$e^{-\beta(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)x}$の$(h+J_0m+J\sqrt{q}\xi)x$の部分が一体問題によって有効的に問題を記述する有効ハミルトニアンであると解釈できる。

---

[10] このようなことができるためには当然だが$n>r$である必要がある。実はレプリカ法の計算は$n\gg 1$の鞍点を$n\to 0$に外挿しているような構造になっている。すごい話だ。

[11] 具体的なJの実現値に対して熱平均$\{\langle x_i\rangle\}_{i=1}^N$を計算すると、当然具体的な値がある。それはサイトごとにξの具体的な実現値が得られたことに対応するのだが、これを解析するには、特定のJに対して磁化がどのような関係を満たしているかを考えなくてはいけない。それは磁化$\boldsymbol{m}$, オーバーラップ$q=N^{-1}\sum_{i=1}^N\langle x_i\rangle^2$の関数としてのGibbs自由エネルギーを$\boldsymbol{m},q$について変分するこ

2. サイトごとの量のゆらぎとの関連　うえではξが特定のサイトのスピンに関する揺らぎと結びついていることをみた。一方で、実はサイトごとの磁化の揺らぎにも関連している。これをみるために系全体での磁化の平均

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle x_i \rangle,$$

を考える。これは、$N \to \infty$で自己平均的である（つまりJに関する揺らぎが$N \to \infty$でゼロに収束する）と期待されるので、J平均をとってもよい:

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle x_i \rangle \to \mathbb{E}_J\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle x_i \rangle\right].$$

レプリカ法を用いて評価すれば以下のようになる:

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle x_i \rangle \to \mathbb{E}_\xi\left[\langle x \rangle^{(\mathrm{RS})}\right].$$

最後の式は妙である。上でξはJに関する揺らぎと関連していると述べた。一方で、mは自己平均的である、つまりJには依存しないと考えられる。では最後の式に現れるξ平均はなにか？とならないか。これは実は$\langle x_i \rangle$のサイトごとの揺らぎをiについて和を取るときに取り込んだ影響がξに反映されていると考えることができる[12]。あるJに対して$\langle x_i \rangle$を計算すると、これは当然iに依存している。mを計算する際にはiで和をとるのでその揺らぎが取り込まれることになるのだが、これがξによって反映されていると考えられるというわけである。

これを考えるために、一般に次のような量を考えてみよう:

$$p(s) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(s - \langle x_i \rangle)$$

これは、局所磁化の経験分布を表している。$N \to \infty$でこれがJに依存しない分布に収束する（つまり、分布が自己平均的）とすれば、平均を調べればよい:

$$\lim_{N\to\infty} p(s) = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(s - \langle x_i \rangle) = \lim_{N\to\infty}\mathbb{E}_J\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(s - \langle x_i \rangle)\right].$$

とで得られ、Thouless-Anderson-Palmer（TAP）方程式と呼ばれる[TAP77]。導出としては、Plefkaの高温展開の方法[Ple82]がわりと優しいと思う。ただし、TAP方程式そのものから解を具体的に得るのは非常に難しい（[MPV87]のChapter IIの終わりとかで既に触れられている）。TAP方程式の解を具体的に得る効率的なアルゴリズムとしては近似信念伝搬法（Approximate message passing）[Bol14, Kab03, DMM09]が知られている。

[12]全結合強磁性Ising模型では、各サイトごとに磁化の期待値はばらつかず、$\langle x_i \rangle = m, i = 1, 2, \ldots, N$が成り立ち、$m$は$m = \tanh\beta(h + Jm)$という条件によって決まっていたのであった。しかし、J_{ij}がばらばらの値をとっているときには$\langle x_i \rangle$がすべてのiに対して一定値をとる保証はない。

デルタ関数をフーリエ変換し、Taylor展開すると、

$$
\begin{aligned}
&\lim_{N\to\infty}\mathbb{E}_J\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(s-\langle x_i\rangle)\right]\\
&=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\mathbb{E}_J\left[\frac{1}{2\pi}\int e^{\sqrt{-1}\hat{s}s}e^{-\sqrt{-1}\hat{s}\langle x_i\rangle}d\hat{s}\right]\\
&=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\frac{1}{2\pi}\int e^{\sqrt{-1}\hat{s}s}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-\sqrt{-1}\hat{s})^k}{k!}\mathbb{E}_J\left[(\langle x_i\rangle)^k\right]d\hat{s}\\
&=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\frac{1}{2\pi}\int e^{\sqrt{-1}\hat{s}s}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-\sqrt{-1}\hat{s})^k}{k!}\mathbb{E}_\xi\left[(\langle x\rangle^{(\mathrm{RS})})^k\right]d\hat{s}\\
&=\mathbb{E}_\xi\left[\frac{1}{2\pi}\int e^{\sqrt{-1}\hat{s}s}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-\sqrt{-1}\hat{s})^k}{k!}(\langle x\rangle^{(\mathrm{RS})})^k d\hat{s}\right]\\
&=\mathbb{E}_\xi\left[\delta(s-\langle x\rangle^{(\mathrm{RS})})\right].
\end{aligned}
$$

つまり、サイトごとの局所磁化の経験分布は$\langle x\rangle^{(\mathrm{RS})}$が$\xi$についての分布と等しいということになる。

5 thermodynamic properties under RS ansatz

ここではレプリカ対称下でのSKモデルの性質を調べていくことにする。

5.1 rs phase diagram

まず、簡単のため、$h=0$の場合にRS仮定下での相図を調べてみる。$J_0=0$の場合は常に$m=\mathbb{E}_\xi[\tanh\beta\sqrt{q}\xi]=0$である。よって秩序変数は$q$のみであり、ありえる転移は$q=0$から$q>0$となるものだろう。二次相転移点を調べるために$q$に関する自己無撞着方程式を$q\ll 1$で展開すると最低次の寄与で

$$q=\beta^2J^2q,$$

となり、転移点は$\beta J=1$となることがわかる。この転移点以下では$q>0, m=0$である。つまり、全体的にはスピンはバラバラの方向を向いているが、各局所磁化の期待値は非ゼロであるという状況を表している（qは各局所磁化の二乗のサイト平均になっていた)。このようにランダムに凍結しているような状態をスピングラス状態と呼ぶ。また、$J_0>0$の場合には$q=0, m=0$の状態から、$q, m>0$の状態への強磁性転移がありえるだろう。そこで、mの自己無撞着方程式を展開したいがそこにはqがあるので、まずqを$q, |m|\ll 1$で展開する:

$$q=\beta^2J^2q+\beta^2J_0^2m^2.$$

これを見るとqはmの二乗のオーダーになることが分かる。これを踏まえてmを展開すると

$$m=\beta J_0 m,$$

が最低次の寄与である。qからの寄与もあるのだが、それは結局m^2のオーダーだから高次項である。これを踏まえると、J_0が十分に大きなところでは$\beta J_0=1$の直線上で二次相転移があるのではないかという予想が立つ。実際、極値条件(4), (5)を反復代入法で解いてみた結果が図1である。$J_0/J=0, T/J=1$で予想通り相転移があり、その転移線は$J_0/J=1$のところまで水平に続いている。さらに、$J_0/J>1$のところでは、

$T/J_0 = 1$で$q, m > 0$に移る強磁性転移が続く。また、$J_0/J = 1$のあたりでは、低温で一旦$m > 0$になった後に再び$m = 0$になっている。このときqはずっと正の値だから、常磁性から強磁性そしてスピングラスと転移するということになる（が、これはRS仮定が導く誤った結論であることが知られている[13]）。

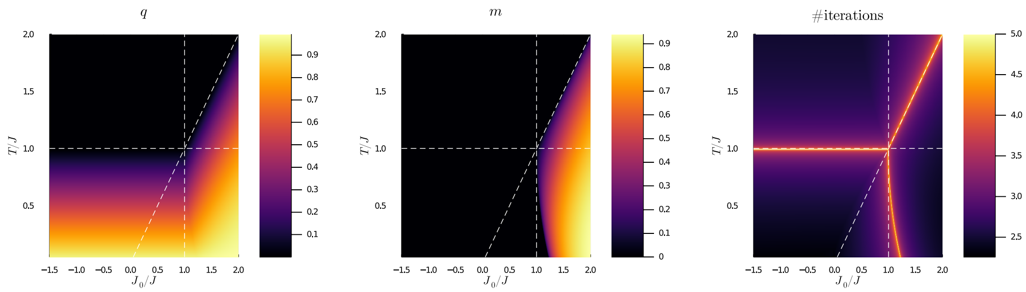

Figure 1: RS仮定下での相図。左から順にq, mそして反復代入法で数値的に鞍点条件を解くのに要した反復回数を示している。白い点線はそれぞれ$T/J = 1.0, J_0/J = 1.0, T = J_0$を表している。この$h = 0$の場合には各相転移点の直上で反復回数が発散するような振る舞いが見える（でも$h > 0$でRSBによる転移が生じるときはこうはならない）。

5.2 熱力学関数あれこれ

自由エネルギーの表式から、内部エネルギー密度uは

$$u = -\frac{1}{2}\left(J_0 m^2 + \frac{J^2}{T}(1-q^2) + 2hm\right),$$

となる。この微分から比熱が計算できるが、$h \neq 0$の場合には転移点でカスプや不連続性などの特異性が現れる。また、磁化mの磁場微分$\chi = \partial m/\partial h$は$m$に関する自己無撞着方程式の両辺を$h$微分することで

$$\chi = \frac{\chi_0}{1 - J_0\chi_0}, \quad \chi_0 = \beta(1-q),$$

となる。これらを図示すると比熱が図2、微分感受率が図3となる。転移点で帯磁率や比熱にはカスプが出る。

[13]別途レプリカ対称解が不安定になる条件を出すと、

$$\beta^2 J^2 \mathbb{E}_\xi[(1 - \tanh^2\beta(J\sqrt{q}\xi + J_0 m + h))^2] > 1 \tag{14}$$

となる。これはAlmeda-Thoulessの方法[dAT78]で具体的な固有値計算をしてもよいが、RSB解の形を知っている人向けの簡便な方法としては以下のようなものがある。まず、1RSB解を構成する。このとき、対称性の破れによって秩序変数はq_1, q_0の２つになる。もし$q_1 = q_0$ならRS解が復活するから、$q_1 - q_0 = \epsilon \ll 1$とするのが、RS解周辺で1RSB方向への微小な摂動を考えることに対応する。この際、breaking parameterは何でもよいので（とにかくRSが不安定ならbreaking parameterが何でもそちらに滑り落ちるだろうと考えるわけである）、それは$\to 1$として考えておけばよい（具体的な$(0, 1)$区間の値として残しておいてもよいのだが、それに依存したものは結局ϵの高次項になってしまうので効いてこない）。このもとで安定性を考えるとAT不安定性と同様の条件が出てくる。これは固有値計算よりはずっと楽である。

ただし、これはいわゆるレプリコンモードに対する不安定性なので、、、。

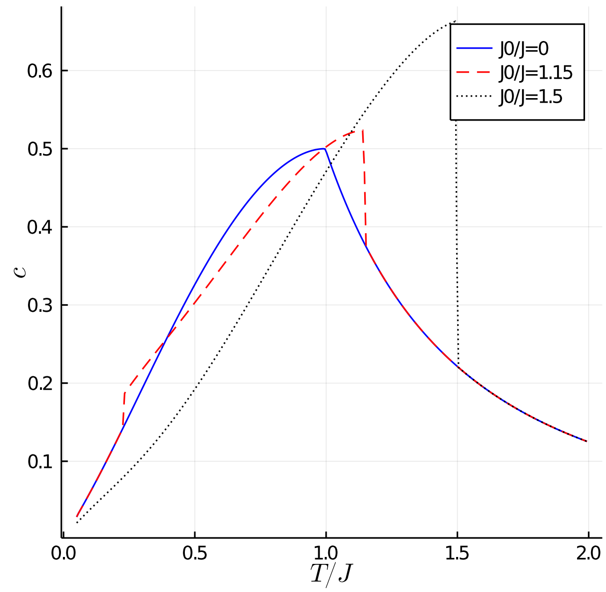

Figure 2: 比熱。

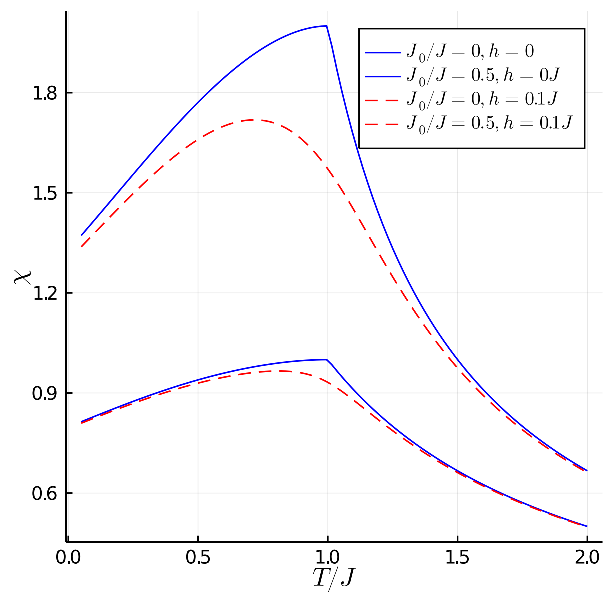

Figure 3: 微分感受率。

5.3 RS計算の明らかな問題点: 負のエントロピー

低温でレプリカ対称仮定は実は正しくないのだが、初期に認識された明らかな問題点に$h=0, J_0=0$のとき$T\to 0$でエントロピーが負になるというものがある[14]。これを見てみる。$h=0, J_0=0$のとき、自由エネルギー、鞍点条件は下記の通りである:

$$
\begin{aligned}
f_{\mathrm{RS}} &= -\frac{\beta J^2}{4}(1-q)^2+\phi_{\mathrm{RS}},\\
\phi_{\mathrm{RS}} &= \mathbb{E}_\xi\left[\log 2\cosh\beta\sqrt{q}\xi\right],\\
q &= \mathbb{E}_\xi\left[\tanh^2\beta\sqrt{q}\xi\right].
\end{aligned}
$$

$0<T\ll 1$では$q\simeq 1$である。$q=1$からの微小なずれを最低次の寄与で計算して調べる。そのためにはまず$\tanh^2 x = 1-1/\cosh^2 x = 1-\partial_x\tanh x$と、$\lim_{a\to\infty}\partial_x\tanh ax = 2\delta(x)$であることを用いて

$$
q\simeq 1-\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{T}{J},
$$

を導く。これをf_{RS}に代入してTの一次までの寄与を計算すると[15]、

$$
f_{\mathrm{RS}} = -J\sqrt{\frac{2}{\pi}}+\frac{T}{2\pi},
$$

となり、$T\to 0$でのエントロピーは以下のようになる:

$$
-\frac{1}{2\pi}.
$$

離散スピンの系でこれはおかしい。一応、MCMCで調べてみても当然低温でエントロピーは0である[KS78]。

6 summary

レプリカ対称仮定のもとでの、SK模型の自由エネルギーの計算を紹介した。RS解で一応相転移点は出てくるということ、そしてRS解はなんかおかしいということを確認した。[SK75]の論文ではこのおかしさは$N\to\infty$と$n\to 0$の極限の順序を入れ替えたのが悪いのではないかと言っていたが、実際にはレプリカ対称仮定に問題があるらしいというのがその後すぐ明らかになった [dAT78]。

参考文献

[Bol14] Erwin Bolthausen, An iterative construction of solutions of the tap equations for the sherrington–kirkpatrick model, Communications in Mathematical Physics **325** (2014), no. 1, 333–366.

[dAT78] Jairo RL de Almeida and David J Thouless, Stability of the sherrington-kirkpatrick solution of a spin glass model, Journal of Physics A: Mathematical and General **11** (1978), no. 5, 983.

[14] レプリカ法の正しさを調べる路線ではいわゆるAlmeida-Thouless条件に行くのが筋だと思うが、[SK75]の時点では「一通り調べて見るとエントロピーがなんか変」という話で終わるので、それに合わせた。でもレプリカ法の解説という筋ではとっととATの話をしたほうが良いのかもしれない。

[15] ここでは、$\mathbb{E}_\xi[\log 2\cosh\beta\sqrt{q}\xi] = 2\int_0^\infty \log 2\cosh\beta\sqrt{q}\xi\frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}}$として計算するのがよい。ここを間違えてエントロピーがマイナス無限大になると結論するのがありがちな間違いっぽい。冷静に考えると間違えない気がするんだが、僕自身も、そして僕以外の人も少なくとも２人その間違いを犯したことがあることを知っているのでありがちなんだと思う。

[DMM09] David L Donoho, Arian Maleki, and Andrea Montanari, Message-passing algorithms for compressed sensing, Proceedings of the National Academy of Sciences **106** (2009), no. 45, 18914–18919.

[Kab03] Yoshiyuki Kabashima, A cdma multiuser detection algorithm on the basis of belief propagation, Journal of Physics A: Mathematical and General **36** (2003), no. 43, 11111.

[KS78] Scott Kirkpatrick and David Sherrington, Infinite-ranged models of spin-glasses, Physical Review B **17** (1978), no. 11, 4384.

[MM09] Marc Mezard and Andrea Montanari, Information, physics, and computation, Oxford University Press, 2009.

[MPV87] Marc Mézard, Giorgio Parisi, and Miguel Angel Virasoro, Spin glass theory and beyond: An introduction to the replica method and its applications, vol. 9, World Scientific Publishing Company, 1987.

[Nis01] Hidetoshi Nishimori, Statistical physics of spin glasses and information processing: an introduction, no. 111, Clarendon Press, 2001.

[Pan13] Dmitry Panchenko, The sherrington-kirkpatrick model, Springer Science & Business Media, 2013.

[Ple82] Timm Plefka, Convergence condition of the tap equation for the infinite-ranged ising spin glass model, Journal of Physics A: Mathematical and general **15** (1982), no. 6, 1971.

[SK75] David Sherrington and Scott Kirkpatrick, Solvable model of a spin-glass, Physical review letters **35** (1975), no. 26, 1792.

[Tal10] Michel Talagrand, Mean field models for spin glasses: Volume i: Basic examples, vol. 54, Springer Science & Business Media, 2010.

[TAP77] David J Thouless, Philip W Anderson, and Robert G Palmer, Solution of'solvable model of a spin glass', Philosophical Magazine **35** (1977), no. 3, 593–601.