



Title	2004年度 混沌系工学特論講義ノート
Author(s)	井上, 純一
Issue Date	2004
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/370
Rights(URL)	http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.1/jp/
Type	learningobject
Note	当講義資料は著者のホームページ http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/ からもダウンロードできます。
Note(URL)	http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/
Additional Information	There are other files related to this item in HUSCAP. Check the above URL.
File Information	konton2004_6.pdf (第6回講義ノート)



Instructions for use

混沌系工学特論 配布資料 #6

担当：井上 純一 (情報科学研究科棟 8-13)

URL : http://chaosweb.complex.eng.hokudai.ac.jp/~j_inoue/

平成 16 年 11 月 29 日

目次

2.3	連想記憶と相転移再考	76
2.3.1	$O(1)$ 個のパターンを記憶させた神経系の分配関数	77
2.3.2	自由エネルギーの展開式と 2 次相転移の現象論	79
2.3.3	マクロな量を指定した場合の分配関数	81
2.4	2 分割問題の統計力学	82
2.4.1	制約つき最小エネルギーの評価	83
2.4.2	制約なし最小エネルギーの荒い評価	84
2.4.3	感度分析	84
2.4.4	制約なし最小エネルギーの統計力学による評価	93
2.4.5	準安定状態数の評価	95

2.3 連想記憶と相転移再考

統計力学の方法を学んだところで、前節 [連想記憶の数理] で学んだ連想記憶の相転移現象について再び見ていくことにしよう。前回の講義で学んだことをまとめると

- [ノイズを利用したアルゴリズム] をエネルギー関数が $E(s)$ で与えられるシステムに適用すると、システムの状態 s はボルツマン分布 : $P(s) = e^{-\beta E(s)} / Z$ に従う。このとき、考える 1 つのシステムにおける物理量の長時間平均はアンサンプルの平均、つまり、 $P(s)$ についての平均に一致する。なお、2 体系 (s_1, s_2) に関してみた [ノイズを用いたアルゴリズム] は容易に多体系 (s_1, s_2, \dots, s_N) に拡張することができる (今回の問 9 参照)。
- 分配関数 : $Z = \sum_s e^{-\beta E(s)}$ を解析的に計算することができれば、様々な物理量のボルツマン分布での期待値が自由エネルギー : $F = -T \log Z$ を介して算出できる。

であった。今回は特に 2 番目の手続きを連想記憶の問題を例にとり、具体的にその計算過程を詳しく追っていくことにする。

2.3.1 $\mathcal{O}(1)$ 個のパターンを記憶させた神経系の分配関数

まずは神経素子間を Hebb 則: $w_{ij} = (1/N) \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu$ でつなげた全結合型神経回路網のエネルギー関数が

$$E(\mathbf{S}) = -\frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_i S_j \quad (64)$$

のように書けたことを思い出そう. ターゲットパターンを $\xi^1 = (1, 1, \dots, 1)$ とし, (64) 式を次のように書き直す.

$$E(\mathbf{S}) = E(S_1, S_2, \dots, S_N) = -\frac{1}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mu \neq 1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_i S_j \quad (65)$$

そこで, 例によってはじめに回路網に記憶させるパターン数を $\mathcal{O}(1)$ として, 上式 (65) 右辺の各項のオーダーを評価してみると, 第 1 項は明らかに $\mathcal{O}(N)$ の量であり, 第 2 項は $\mathcal{O}(\sqrt{N(N-1)}/N) = \mathcal{O}(1)$ 量である. 従って, (65) 式の右辺第 2 項は第 1 項と比べて無視できる. よって, 我々がこれから議論すべきエネルギー関数は

$$E(\mathbf{S}) = -\frac{1}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \quad (66)$$

で与えられる.

ちなみに, パターン数が $\mathcal{O}(N)$ に比例する場合には異なる時間スケールで変動する ξ^μ に関する平均操作を行う必要が出てくる. この平均操作の意味とその処理方法であるレプリカ法に関してはここで取り扱うにはまだ準備が必要である. 従って, その具体的な方法に関しては統計力学の方法に十分に慣れた時点で改めて見てみることにしよう.

さて, 前回見た統計力学の処方箋によれば, 我々はまずは分配関数を計算しなければならない. エネルギー関数が (66) 式で与えられるシステムの分配関数

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta E(\mathbf{S})} = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{-\beta E(S_1, S_2, \dots, S_N)} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\left(\sqrt{\frac{\beta}{2N}} \sum_i S_i \right)^2} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{m}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\hat{m}^2}{2} + \hat{m} \sqrt{\frac{\beta}{N}} \sum_i S_i} \end{aligned} \quad (67)$$

のように書ける. ここで, 最後の行では次の恒等式:

$$e^{a^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}ax} \quad (68)$$

を用いた. (67) 式で $\hat{m} = \sqrt{\beta N} m$ なる変数変換を施すと

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/\beta N}} e^{-\frac{N}{2}\beta m^2 + \beta m \sum_i S_i} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/\beta N}} e^{-\frac{N}{2}\beta m^2} \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta m \sum_i S_i} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/\beta N}} e^{-\frac{N}{2}\beta m^2} \left\{ \sum_{S_1=\pm 1} e^{\beta m S_1} \right\} \dots \left\{ \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta m S_N} \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/\beta N}} e^{-\frac{N}{2}\beta m^2 + N \log 2 \cosh(\beta m)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm}{\sqrt{2\pi/\beta N}} e^{N\Phi(m)} \end{aligned} \quad (69)$$

が得られる。ところで、神経素子数 N が十分に大きいと ($N \rightarrow \infty$), m に関する上記積分 (69) は関数 $\Phi(m)$ の極大値で支配されるので、結局、分配関数は

$$Z = e^{N\Phi(m)} \tag{70}$$

と評価できる。ただし、 m は方程式: $(\partial\Phi/\partial m) = 0$, つまり、

$$m = \tanh(\beta m) \tag{71}$$

を満たす。この方程式を我々は既に別経路で求めていたことを思い出そう。この方程式の解は $T = \beta^{-1}$ でノイズレベルを定義すると図 10 のようになったのであった。この結果から自由エネルギーはその定義に

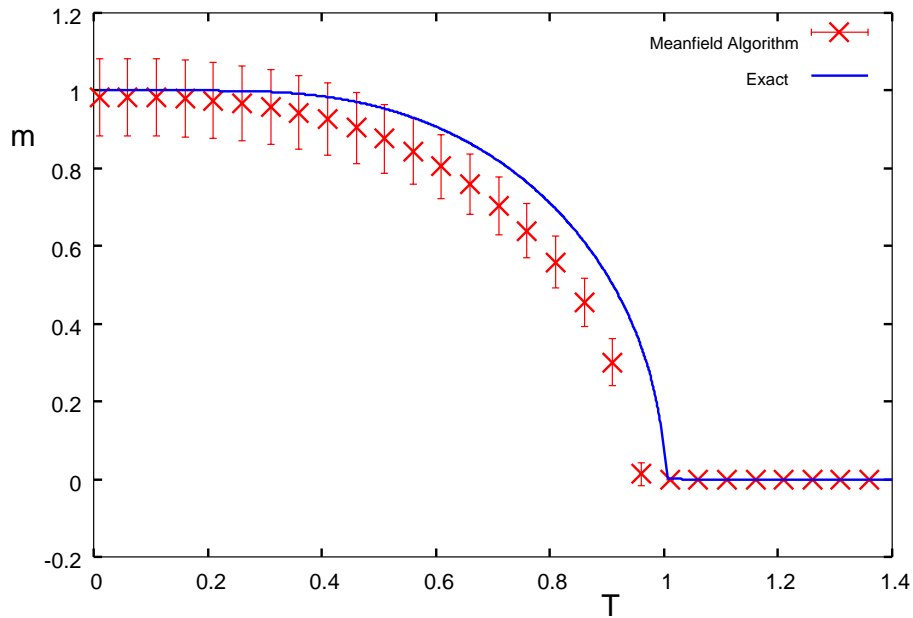


図 10: $p = \mathcal{O}(1)$ の場合の重なり m のノイズレベル T 依存性 (復習).

従って

$$F = -T \log Z = -NT\Phi(m) \tag{72}$$

のように簡単に求めることができる。従って、単位神経素子あたりの自由エネルギーを f で表すことにすれば

$$f \equiv \frac{F}{N} = \frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} \log 2 \cosh(\beta m) \tag{73}$$

が得られる。また、単位神経素子あたりの内部エネルギー e は

$$e = \frac{\langle E \rangle}{N} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F) = \frac{m^2}{2} - m \tanh(\beta m) \tag{74}$$

として求めることができる。また、エントロピーは単位神経素子あたり

$$s = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right) = \log 2 \cosh(\beta m) - \beta m \tanh(\beta m) = \beta(e - f) \tag{75}$$

である。図 11 に単位素子あたりの重なり m , 自由エネルギー f , 内部エネルギー e , 及び、エントロピー s のノイズレベル T 依存性を載せた。

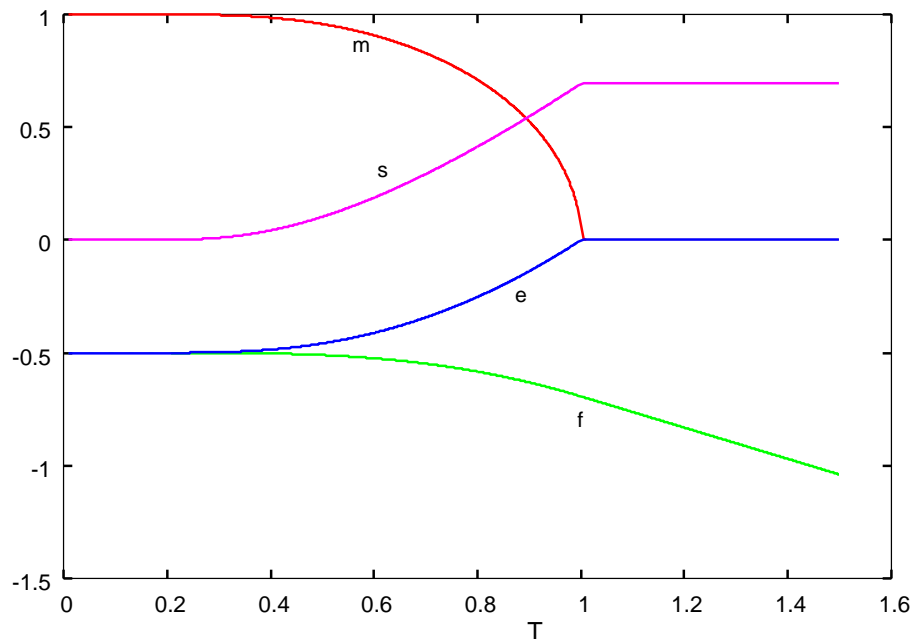


図 11: 単位素子あたりの重なり m , 自由エネルギー f , 内部エネルギー e , 及び, エントロピー s のノイズレベル T 依存性.

2.3.2 自由エネルギーの展開式と 2 次相転移の現象論

図 12 にいくつかのノイズレベルの値に対する自由エネルギー f の重なり依存性を載せた¹. 回路網の状態は重なり m で決定され, その重なり m は方程式 $(\partial f / \partial m) = 0$ から求められたわけであるから, 実際に回路網の取りうる状態は自由エネルギーを重なり m の関数としてみた場合, その極小点を与えるものでなければならない. ところで, $T = 1.2 > 1$ では自由エネルギーの極小点は $m = 0$ であるが, ノイズレベルを徐々に下げていくと $T = 1$ で $m \neq 0$ 以外の極小点が 2 つ出現し, $m = 0$ は不安定化する (極小ではなく極大となる). この分かれ目の $T = 1$ というノイズレベルは転移点であり, 解が $m = 0$ から, $m \neq 0$ へと移行する. このような相転移では図に見たように, m がゼロから有限値に連続的に変化し, 2 次の相転移と呼ばれる相転移現象である.

ところで, システムの対称性という観点からこの相転移現象をみってみると, $m = 0$ という状態は回路網を構成する神経素子が ± 1 の値をランダムにとっており, 全体として $+1$ の方に偏っていると, その逆に -1 に偏っているというわけではないので, 空間的にはとても「対称性の高い状態」とみることができる. 一方, m が有限であるということは, ± 1 どちらか一方に偏っているわけであり, その意味で「対称性が破れた状態である」と言える. 上にみたようにノイズを徐々に下げていくと, m はゼロから有限値をとるようになるが, このことはシステムが対称性の高い相から低い相へ自発的に変化したことを意味するのであり, このような対称性の変化を自発的対称性の破れと呼んでいる². 従って, ここでみたような相転移は自発的対称性の破れを伴った相転移であり, m が不連続に変化する 1 次の相転移ではこのようなことは起こらないので

¹ 正しく言えば f は「単位神経素子あたりの自由エネルギー」であるが, 以下では面倒なので単に自由エネルギーと呼ぶことにする.

² では, 自発的でない対称性の破れはどのような場合であるか, というのが気になるが, これは例えば個々の神経素子が発火するようなバイアス効果をエネルギー関数に加え, $E = -(1/N) \sum_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i$ とすれば, h を十分大きくとることにより $T > 1$ であろうがシステムは対称性は破れる. これは明らかに「手で」対称性を破っているわけであり, ここで議論している自発的対称性の破れとは本質的に異なる.

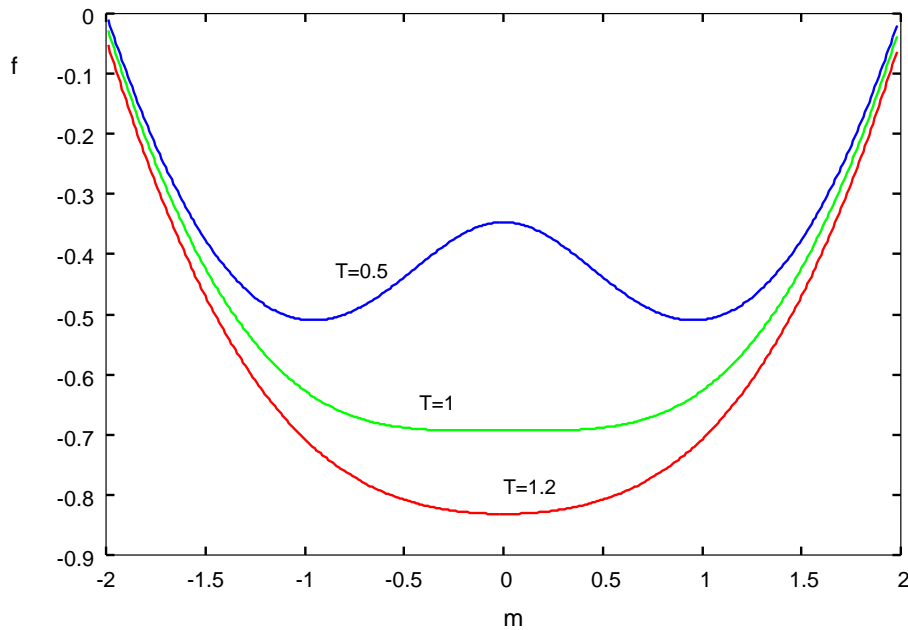


図 12: 自由エネルギー f の重なり m 依存性. ノイズレベルは $T = 0.5, 1.0, 1.2$ とそれぞれ選んだ. $T > T = 1$ では f の極小は $m = 0$ のみであるが, $T = 1$ を境にして $T < 1$ では $m \neq 0$ の極小が出現する.

³, 自発的対称性の破れの有無をもって, その相転移が 1 次か 2 次かを区別することもできる.

ところで, ここで議論している 2 次転移ではノイズレベル $T = 1$ 近傍で m は連続的にゼロから有限値に移行するわけであるから, 自由エネルギー f を $m = 0$ のまわりで展開してみよう. すると多くの示唆に富んだ情報が得られる.

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} \log 2 \left\{ 1 + \frac{1}{2}(\beta m)^2 + \frac{1}{24}(\beta m)^4 + \dots \right\} \\
 &\simeq \frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} \log 2 - \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2}(\beta m)^2 + \frac{1}{24}(\beta m)^4 + \dots \right\} + \frac{1}{2\beta} \left\{ \frac{1}{2}(\beta m)^2 + \dots \right\} + \dots \\
 &= -T \log 2 + \left(\frac{T-1}{2T} \right) m^2 + \frac{1}{12T^3} m^4 + \mathcal{O}(m^6) \\
 &= \mathcal{F}_0(T) + \mathcal{F}_2(T)m^2 + \mathcal{F}_4(T)m^4 + \mathcal{O}(m^6)
 \end{aligned} \tag{76}$$

ここで $\mathcal{F}_0(T) \equiv -T \log 2, \mathcal{F}_2(T) \equiv (1-T)/2T, \mathcal{F}_4(T) \equiv 1/12T^3$ と置いたことに注意しておく. 2 次転移の場合には常に転移点近傍で上記のように重なり (一般にこのようなシステムの対称性を反映するようなマクロな量のことを秩序変数と呼んでいる) で展開することができる. m に関する奇数次の項は現れず, $\mathcal{F}_0, \mathcal{F}_2, \mathcal{F}_4$ の関数形は個々のケース (問題) で異なるとは言え, 常に (76) 式のような形に展開することができる.

さて, 図 12 より明らかに相転移を起こすノイズレベル T は m^2 の係数 $\mathcal{F}_2(T)$ の符号で決まると言ってもよい. つまり, この神経系の場合には $\mathcal{F}_2(T) > 0$, つまり, $T > 1$ でシステムは非想起相にあり, 逆に $\mathcal{F}_2(T) < 0$, つまり, $T < 1$ でシステムは想起相にある. 両者の境界である転移点は $\mathcal{F}_2(T) = 0$ の解で与えられ, この神経系の連想記憶の問題の場合には $T = 1$ が転移点であることがわかる.

³ 1 次転移では自由エネルギーに双安定な状態が共存し, 相転移はその双安定な状態間の変化とみることができる. 2 次転移ではここで見たように 1 つの安定状態が不安定に転じ, 新たに現れる安定状態へシステムが移行することで起こる.

また、転移点 $T = 1$ 近傍での重なり m の振る舞いは、自由エネルギーの極値条件: $(\partial f / \partial m) = 0$ から

$$2\mathcal{F}_2(T)m + 4\mathcal{F}_4(T)m^3 = 0 \tag{77}$$

すなわち

$$m = \left\{ -\frac{\mathcal{F}_4(T)}{2\mathcal{F}_2(T)} \right\}^{\frac{1}{2}} \simeq (1-T)^{\frac{1}{2}} \tag{78}$$

のようにして得ることができる。これは前節で既に見た結果と一致する。

このように、2 次の相転移に対しては、システムの対称性を反映する秩序変数 m に関し、対称相 ($m = 0$)、と非対称相 ($m > 0$) の境界: $m \sim 0$ で自由エネルギーを展開し、得られる m に関する偶数次の冪のみを含む展開式 (76) を調べることにより、相転移に関する有益な情報を引き出すことができる。このような方法論を相転移に関する現象論、あるいは提案者の名をとってランダウ理論と呼んでいる。

2.3.3 マクロな量を指定した場合の分配関数

ここでは分配関数を求める別な方法を紹介しておこう。この方法はやや技巧的ではあるが我々が今後取り組む 2 分割問題のエネルギー最小値の導出に際しても役立つものである。まず、重なり の定義から神経系のエネルギー関数が次のように書けることに注目する。

$$E(S_1, S_2, \dots, S_N) = -\frac{Nm^2}{2} \tag{79}$$

従って、分配関数は

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dm \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\frac{\beta Nm^2}{2}} \delta\left(m - \frac{1}{N} \sum_i S_i\right) \tag{80}$$

ここで、 $\delta(x)$ はデルタ関数と呼ばれ、次の性質を満たす。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x - a) = f(a) \tag{81}$$

従って、(80) は (67) と同値である。

さて、デルタ関数はフーリエ変換表示することができて

$$\delta\left(m - \frac{1}{N} \sum_i S_i\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dM}{\sqrt{2\pi}} e^{iM(m - \frac{1}{N} \sum_i S_i)} \tag{82}$$

が成り立つことに注意すれば (80) 式は

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dmdM}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{\beta Nm^2}{2} + imM} \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{-\frac{iM}{N} \sum_i S_i} \tag{83}$$

と書き直すことができるが、 $-iM/N = \hat{m}$ なる変数変換を施せば

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-i\infty}^{i\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{m}dm}{i\sqrt{2\pi}} e^{\frac{\beta Nm^2}{2} - Nm\hat{m}} \left\{ \sum_{S_1=\pm 1} e^{\hat{m}S_1} \right\} \dots \left\{ \sum_{S_N=\pm 1} e^{\hat{m}S_N} \right\} \\ &= \int_{-i\infty}^{i\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{m}dm}{i\sqrt{2\pi}} e^{\frac{\beta Nm^2}{2} - Nm\hat{m}} \{2 \cosh(\hat{m})\}^N = \int_{-i\infty}^{i\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{m}dm}{i\sqrt{2\pi}} e^{N\Phi(m, \hat{m})} \end{aligned} \tag{84}$$

が得られるが、前に行ったように m, \hat{m} に関する積分を $\Phi(m, \hat{m})$ の極値で評価する鞍点法を用いれば分配関数は次の鞍点方程式:

$$\frac{\partial \Phi(m, \hat{m})}{\partial \hat{m}} = -m + \tanh(\hat{m}) = 0 \quad (85)$$

$$\frac{\partial \Phi(m, \hat{m})}{\partial m} = \beta m - \hat{m} = 0 \quad (86)$$

を満たす m, \hat{m} を用いて

$$Z = e^{N\Phi(m, \hat{m})} \quad (87)$$

のように評価することができる。これらは明らかに我々が以前導いた

$$Z = e^{N\Phi(m)} \quad (88)$$

$$\Phi \equiv -\frac{\beta}{2}m^2 + \log 2 \cosh(\beta m) \quad (89)$$

$$m = \tanh(\beta m) \quad (90)$$

と一致する。ここで述べたように、調べたいマクロな量 $g = G(S_1, \dots, S_N)$ を指定することにより、その制約条件をデルタ関数 (あるいはクロネッカ・デルタ) に関する恒等式:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dg \delta(g - G(S_1, \dots, S_N)) = 1 \quad (91)$$

で分配関数の中に取り込むことにより、 g に関する情報を引き出すことができる。線形計画問題などの組み合わせ最適化問題では様々なミクロな変数 (S_1, \dots, S_N) 間の制約条件がマクロな量に関する関係式で与えられる場合が多いので、この方法は有効である。実際、以下に説明する 2 分割問題の解析評価ではこの方法を用いることになる。

2.4 2 分割問題の統計力学

ここからは、いよいよ我々が調べたかった問題、つまり、2 分割問題を今まで学んできた統計力学の知識を足がかりにして調べていくことにしよう。はじめにプロ野球の分配ドラフトの例で紹介したように、与えられた制約下で考え得る限りの最善の選択をしないではいけないという状況に、我々は日常的にでくわす。今やこの「最適化」あるいは「組み合わせ最適化」というキーワードは自然科学のみならず社会科学の諸分野においても極めて重要な概念になっている。これらの問題は既に見たように、個々の解の候補を適当な変数の組によってコードし、最適化すべき事項をこれらの変数の関数である「エネルギー関数」「目的関数」「コスト関数」という形で表現し、その最小値を与える変数を求めるためのアルゴリズムを構築するという一連の手続きにより「数理モデル」として扱うことが可能になり、従って、数理工学の対象となる。

さて、与えられた問題に対し、その解の良し悪しの判定は多くの場合にエネルギー関数を用いて行われるが、個々の問題に対し、どのような側面に着目し、具体的にどのようなエネルギー関数を作ったらよいか、は重要な問題である。ここで扱う 2 分割問題のように問題の性格と目的に応じて「手で」エネルギー関数を組み立てる場合もあるし、また、後に見るようにベイズ推定における事後確率 (の対数) のように自然な形で現れる場合もある⁴。

ここからは、今までの準備を踏まえて組合せ最適化問題に対し、統計力学の方法がどのように用いられ、どのようなことがわかるのか、をマクロな量の平均的評価を通じて説明する。つまり、ここでは 2 分割問題のエネルギー関数の最小値を統計力学により評価する方法を紹介する。また、これに加えて、最適化問題の

⁴ この場合にも事前確率を手で入れることになるので、その意味では自然であると言えないかもしれないが。

表 1: 商品の山分けの仕方. 上は最適解. 下はそうでない解. E は A_1 , A_2 の獲得商品額の差.

	6	5	4	4	3	E	Remark
A_1	A_1	A_1	A_2	A_2	A_2	0	最適解
A_1	A_2	A_2	A_1	A_2	A_2	2	非最適解

難度の指標の一つである準最適解数をエネルギーの関数として求める方法を説明する. なお, これ以降の講義の主眼はどのように統計力学的解析が行われるのかという例を紹介することであるため, どうしても込み入った話にならざるを得ないが, この方法を実際に他の問題に用いようとする場合には丁寧に以下の議論を追ってやることをお勧めする. また, こちらとしても, それぞれの関係式の導出に関しては可能な限りその過程も省略せず書くことを心がけた.

2.4.1 制約つき最小エネルギーの評価

問題は次のような単純なものであった. N 個の正の実定数 $\{a_1, a_2, \dots, a_N\}$ が与えられたとき, それらを A_1 と A_2 の 2 つの組に分けて

$$\left| \sum_{a_j \in A_1} a_j - \sum_{a_j \in A_2} a_j \right| \tag{92}$$

を最小にする問題を考える. これはプロ野球の分配ドラフトのような非日常的な事例ではなくとも, 例えば次のような日常の意志決定の数理モデルと考えることができるであろう.

A_1 さんと A_2 さんは正月休みに二人して福袋を買いに行った. 二人は 1 万円のその福袋に各自 5 千円ずつ出資し, その中の商品を山分けすることにした. 袋の中には 5 つの商品が入っており, それぞれの価格が $\mathcal{A} = (6, 5, 4, 4, 3)$ (単位千円) であったとする. このとき, でき得る限り不公平のないように商品を山分けしたい. ではどうするか? ^a

^a もちろん, 互いの「品物の合計金額差」を最小にするという意志決定が必ずしも一般的であるわけではない. 現実的には個々の商品についての個人的な「趣味」等が我々の意志決定を左右する場合も少なくない. しかし, このような付帯条件をさらに考慮して, 問題を「多制約最適化問題」にすることも可能であるが, 問題自体は格段に難しくなる.

表 1 に最適解およびそうでない解を載せる. この表を見て「簡単ではないか」と思う人がいるかも知れない. それは, この例では 5 つのアイテム (商品) を分割するという小さいサイズの問題であったからであり, アイテムの個数が大きくなるにつれてこの最適な分割は困難さを増してくる. 「山分けはドンブリ勘定でいいよ」という心の広い人が相手ならば, 何も問題はないであろう. しかし, ここで扱うのはあくまで, 「最適な山分け」に固執する人が相手なのである.

そこで, こうした人との山分けの難しさを定量的に判定するために, アイテムの個数 N とともに得られる最小エネルギー, つまり, 両者の獲得商品の総額の差がどのように振舞うかを見ていくことにしよう. 上の問題は個々のアイテム (商品) a_j に離散変数: $s_j \in \{+1, -1\}$ を割り当てることにより次の量を最小化する問題に書き換えることができる.

$$E(s) = \left| \sum_{j=1}^N a_j s_j \right| \tag{93}$$

そこで、問題をもう少し一般化して次のマクロな量：

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j \tag{94}$$

を導入し、 $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$ に属するアイテムの数の差を指定したときの最小エネルギーを評価することにしよう。

$m = 1$ の場合は全ての商品をどちらか一方が独り占めにするケースであり、このときのエネルギーは簡単に

$$E(s) = \left| \sum_j a_j s_j \right| = \left| \sum_j a_j \right| = N \cdot \frac{1}{N} \sum_j a_j = N \int_0^1 ada = \frac{N}{2} \tag{95}$$

となり、 $\mathcal{O}(N)$ のエネルギーが最小エネルギーである。ここで、各アイテム a_j は $[0, 1]$ 間の一様分布に従うとし、最後の式変形は大数の法則を用いた。

m の大きさを変えて行ったとき、 $\mathcal{O}(N)$ のエネルギーが最小エネルギーのままであるならば適当に制約 (95) を満たす分割を作れば、それは最適値とそれほど離れておらず (最適値からのずれは高々 N の前の係数程度)、従って、この準最小値から高々 $\mathcal{O}(N)$ の計算で最小エネルギーに到達できる。この場合問題は「簡単である」と言って良い。

一方、 m がゼロに極めて近くなると \mathcal{A}_1 と \mathcal{A}_2 は同数のアイテムをとらなくてはならず、問題としては格段に難しくなる。そして、最低エネルギーはもはや N のオーダーではなく、はるかに小さなオーダーであり、このように小さなエネルギー値のミクロな配列 (S_1, S_2, \dots, S_N) の周りには非常に多くのローカルミナマが出現し、アルゴリズムの観点から我々はこれらをかき潜って、この小さなエネルギーに到達しなくてはならない。このケースは明らかに「難しい」。

2.4.2 制約なし最小エネルギーの荒い評価

本格的に問題に取り組む前に、 m に関する制約が無い場合の最小エネルギーを荒い考察で評価しておくことにする。 a_j を $\sum_{j=1}^N a_j^2 = 1$ を満たすランダム変数： $s_j \in \{-1, 1\}$ とすると、 $|\sum_{j=1}^N a_j s_j|$ のゼロからの偏差は次のように評価される。

$$\left| \sum_{j=1}^N a_j s_j \right| = \left| a_1 s_1 + a_2 s_2 + \dots + a_N s_N \right| \leq \mathcal{O}(\sqrt{N})$$

ところで、この $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ の間隔の中には $\mathcal{O}(2^N)$ の状態が存在するので、この \sqrt{N} を状態の数 2^N で割ったものが最小エネルギーのオーダーとしてよい (つまり、 \sqrt{N} の間隔に 2^N 個のエネルギー準位が等間隔で存在し、そのエネルギーは下から $\sqrt{N}/2^N, \sqrt{N}/2^N \times 2, \dots, \sqrt{N}/2^N \times (2^N - 1), \sqrt{N}$ であると仮定する)。従って、

$$\left| \sum_{j=1}^N a_j s_j \right| = \left| a_1 s_1 + a_2 s_2 + \dots + a_N s_N \right| \leq \mathcal{O}(2^{-N} \sqrt{N}) < \mathcal{O}(\sqrt{N})$$

よって、最小エネルギーのオーダーは $\mathcal{O}(2^{-N} \sqrt{N})$ であることがわかった。ただし、上の議論は明らかに m に関する制約がない場合にのみ可能なものなのであり、 m の大きさによる制約がある場合への適用は不可能であることを覚えておこう⁵。

2.4.3 感度分析

制約のある問題に戻ろう。既に述べたように最適化問題の制約条件の変化に対し、最適解がどのように振舞うかを考察することを数理計画の分野では感度分析と呼び、極めて重要な作業とみなされているが、以下

⁵ もちろん、ここで示した結果を統計力学の方法を用いて最導出することもできる。それに関しては後に詳しく見ていく。

ではこの感度分析を統計力学的な手法を用いて行なうことになる。

$a_j (j = 1, 2, \dots, N)$ の出現分布による平均を $\langle \dots \rangle$ で表すことにすれば、最小エネルギーは統計力学の処方せんに従うと

$$\tilde{E}_m = \lim_{T \rightarrow 0} F_m(T) = -\lim_{T \rightarrow 0} T \langle \ln \mathcal{Z}_m \rangle \quad (96)$$

$$\mathcal{Z}_m(T) = \sum_{\mathbf{s}} \delta \left(Nm, \sum_j s_j \right) \exp \left[-\frac{E(\mathbf{s})}{T} \right] \quad (97)$$

で与えられる (熱力学的関係式: $F_m(T) = E_m(T) - TS_m(T)$ を思い出すこと). ただし, m は $m = -1, -1 + 2/N, \dots, -1 + 2 \cdot k/N, \dots, +1$ をとる整数である. $\delta(\cdot)$ はクロネッカ・デルタである. 従って, 以前, 2 体系の簡単な例で見たように, $T \rightarrow 0$ では $E(\mathbf{s})$ を最小とする配列のみが分配関数 \mathcal{Z}_m に寄与することになる.

さて, 通常このような場面で問題になるのは, $\langle \ln \mathcal{Z}_m \rangle$ の統計処理である. 残念ながら現段階では, この統計処理を厳密に遂行することはできていない. そこで, ここでは Jensen の不等式を用いた最小エネルギーの下限評価法を紹介することにしよう.

離散自由度を持つ系ではエントロピー $S_m = -(\partial F_m / \partial T)$ は任意のノイズレベルで正の値を取らなければならない, 従って F_m は T の減少関数でなくてははいけない. よって, 不等式 $\tilde{E}_m = F_m(0) = E_m(0) \geq E_m(T) - TS_m(T) = F_m(T)$ が成り立つ.

ところで, ミクロ変数 (s_1, s_2, \dots, s_N) とアイテム配列 (a_1, a_2, \dots, a_N) は正しくは異なる時間スケール内で変化する変数である. 後者は前者と比べて圧倒的に変化が遅い. つまり, 福袋の中の各アイテムの金額が決まらない限り, どちらの品物をどちらが頂くのかを決めることなどできないわけである. 従って, エネルギー関数のようなマクロな量のアイテム配列の分布に関する平均を求める場合にはアイテム配列をある組に固定した場合にマクロな量の母関数である自由エネルギー $\log \mathcal{Z}_m$ を計算し, その量に関してアイテム配列について平均操作 $\langle \log \mathcal{Z}_m \rangle$ を行わなければならない. しかし, ここでは, (s_1, s_2, \dots, s_N) と (a_1, a_2, \dots, a_N) が同じ時間スケール内で変化するものとしてシステムを考える (このようなシステムをアニール系と呼んでいる). この近似の下で自由エネルギーは

$$F_m^a(T) = -T \ln \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle \quad (98)$$

と書けるから, Jensen の不等式:

$$\ln \langle \mathcal{Z}_m \rangle \geq \langle \ln \mathcal{Z}_m \rangle \quad (99)$$

を用いると (98)(99) 式から直ちに不等式:

$$F_m^a(T) \leq F_m(T) \leq \tilde{E}_m \quad (100)$$

が得られ, 従って $F_m^a(T)$ はエネルギーの最小値 \tilde{E}_m の下限を与えることとなるが, 最もタイトな下限は $F_m^a(T)$ を最大にするノイズレベルを T_m^* , つまり, $(\partial F_m^a / \partial T)|_{T_m^*} = 0$ を満たす T_m^* を用いて

$$\tilde{E}_m^a \equiv F_m^a(T_m^a) \quad (101)$$

で与えられる. そこで, 以下では $F_m^a(T)$ を計算する.

まずは $Z_m(T)$ のアイテム配列 (a_1, a_2, \dots, a_N) に関する平均が

$$\begin{aligned}
 \langle Z_m(T) \rangle &= \prod_j \int_0^1 da_j \sum_{\mathbf{s}} \delta \left(Nm, \sum_j s_j \right) \exp \left[-\frac{E(\mathbf{s})}{T} \right] \\
 &= \prod_j \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^1 da_j \delta \left(x - \left| \sum_j a_j s_j \right| \right) \sum_{\mathbf{s}} \delta \left(Nm, \sum_j s_j \right) e^{-\frac{|x|}{T}} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx d\hat{x}}{2\pi} \int_0^1 \prod_j da_j \sum_{\mathbf{s}} \delta \left(Nm, \sum_j s_j \right) e^{i\hat{x}(x - |\sum_j a_j s_j|)} e^{-\frac{|x|}{T}} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx d\hat{x}}{2\pi} e^{ix\hat{x} - |x|/T} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\hat{m}}{2\pi} e^{iNm\hat{m}} \prod_j \int_0^1 da_j \sum_{s_j=\pm 1} e^{-is_j(a_j\hat{x} + \hat{m})} \quad (102)
 \end{aligned}$$

と書けることに注意する. ここで, デルタ関数とクロネッカ・デルタの積分表示を用いた. そこで, はじめに (102) 式で x についての積分は

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix\hat{x} - \frac{|x|}{T}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx [\cos(x\hat{x}) + i\sin(x\hat{x})] e^{-\frac{|x|}{T}} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(x\hat{x}) e^{-\frac{|x|}{T}} + i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(x\hat{x}) e^{-\frac{|x|}{T}} \quad (103)
 \end{aligned}$$

と書けるば, 上の最後の表式で $\sin(x\hat{x})$ は奇関数, $\exp(-|x|/T)$ は偶関数であるから, 対称性より積分の虚数部分は落せることに注意する. すると

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{|x|}{T}} \cos(x\hat{x}) = 2 \int_0^{\infty} dx e^{-\frac{x}{T}} \cos(x\hat{x}) \quad (104)$$

を計算すればよいことになる.

$$\begin{aligned}
 I &= 2 \int_0^{\infty} (-Te^{-\frac{x}{T}})' \cos(x\hat{x}) dx \\
 &= 2[-Te^{-\frac{x}{T}}]_0^{\infty} - 2 \int_0^{\infty} -Te^{-\frac{x}{T}} \times -\hat{x} \sin(x\hat{x}) dx \\
 &= 2T - 2T\hat{x} \int_0^{\infty} (-Te^{-\frac{x}{T}})' \sin(x\hat{x}) dx \\
 &= 2T - 2T\hat{x} \left\{ [-Te^{-\frac{x}{T}} \sin(x\hat{x})]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} -Te^{-\frac{x}{T}} \hat{x} \cos(x\hat{x}) dx \right\} \\
 &= 2T - (T\hat{x})^2 I \quad (105)
 \end{aligned}$$

であるから, 直ちに

$$I = \frac{2T}{1 + (T\hat{x})^2} \quad (106)$$

を得る. このとき (102) 式は

$$\langle Z_m(T) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{x}}{2\pi} \frac{2T}{1 + (T\hat{x})^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\hat{m}}{2\pi} e^{iNm\hat{m}} \prod_j \int_0^1 da_j \sum_{\{s_j=\pm 1\}} \exp[-is_j(a_j\hat{x} + \hat{m})] \quad (107)$$

と書ける. 次に a_j についての積分を実行する. これは直ちに実行できて

$$\prod_j \int_0^1 da_j \sum_{\{s_j=\pm 1\}} \exp[-is_j(a_j\hat{x} + \hat{m})] = \prod_j \int_0^1 da_j \{e^{i(a_j\hat{x} + \hat{m})} + e^{-i(a_j\hat{x} + \hat{m})}\}$$

$$\begin{aligned}
 &= \prod_j \int_0^1 da_j 2 \cos(a_j \hat{x} + \hat{m}) \\
 &= \left\{ 2 \int_0^1 da_j \cos(a_j \hat{x} + \hat{m}) \right\}^N \\
 &= \left[\frac{\sin(\frac{\hat{x}}{2})}{(\frac{\hat{x}}{2})} \right]^N [e^{-i(\frac{\hat{x}}{2} + \hat{m})} + e^{i(\frac{\hat{x}}{2} + \hat{m})}]^N \quad (108)
 \end{aligned}$$

を得る. 従って, (107) 式は

$$\langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{x}}{2\pi} \frac{2T}{1 + (T\hat{x})^2} \left[\frac{\sin(\hat{x}/2)}{\hat{x}/2} \right]^N \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\hat{m}}{2\pi} e^{iNm\hat{m}} [e^{i\hat{m} + i\hat{x}/2} + e^{-i\hat{m} - i\hat{x}/2}]^N \quad (109)$$

となる. 次に \hat{m} についての積分を実行するため, $[e^{i\hat{m} + i\hat{x}/2} + e^{-i\hat{m} - i\hat{x}/2}]^N$ を 2 項定理を用いて次のように変形しよう.

$$[e^{i\hat{m} + i\hat{x}/2} + e^{-i\hat{m} - i\hat{x}/2}]^N = e^{-Ni\hat{m} - \frac{Nj\hat{x}}{2}} [1 + e^{2i\hat{m} + i\hat{x}}]^N = e^{-Ni\hat{m} - \frac{Nj\hat{x}}{2}} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{2in\hat{m} + in\hat{x}} \quad (110)$$

こうすると (109) 式において \hat{m} についての積分は

$$\begin{aligned}
 &\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\hat{m}}{2\pi} e^{-Ni\hat{x}/2} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{in\hat{x}} e^{i(Nm - N + 2n)\hat{m}} \\
 &= e^{-Ni\hat{x}/2} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\hat{m}}{2\pi} e^{in\hat{x}} e^{i\hat{m}(Nm - N + 2n)} \\
 &= e^{-Ni\hat{x}/2} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} \delta\left(n, \frac{N(1-m)}{2}\right) e^{in\hat{x}} \quad (111)
 \end{aligned}$$

となり, 従って (109) 式は

$$\langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{x}}{2\pi} \frac{2T}{1 + (T\hat{x})^2} \left[\frac{\sin(\hat{x}/2)}{\hat{x}/2} \right]^N \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} e^{-\frac{Nj\hat{x}}{2}} e^{in\hat{x}} \delta\left(n, \frac{N(1-m)}{2}\right) \quad (112)$$

と書き下すことができる. ここで,

$$\left[\frac{\sin(\hat{x}/2)}{\hat{x}/2} \right]^N = e^{N \ln \sin(\hat{x}/2) - N \ln(\hat{x}/2)} \quad (113)$$

より

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{x}}{2\pi} \frac{2T}{1 + (T\hat{x})^2} \binom{N}{\frac{N(1-m)}{2}} \\
 &\times \exp N \left[-\frac{i\hat{x}}{2} + \frac{i(1-m)}{2} \hat{x} + \ln \sin(\hat{x}/2) - \ln(\hat{x}/2) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{x}}{2\pi} \frac{2T}{1 + (T\hat{x})^2} \binom{N}{\frac{N(1-m)}{2}} e^{N[-im\hat{x}/2 + \ln \sin(\hat{x}/2) - \ln(\hat{x}/2)]} \quad (114)
 \end{aligned}$$

となる⁶. そこで簡単のために変数変換 $y = \hat{x}/2$ を行なうと

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} \binom{N}{\frac{N(1-m)}{2}} \exp N \left[-imy + \ln \left(\frac{\sin y}{y} \right) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} \binom{N}{\frac{N(1-m)}{2}} e^{NG_m(y)} \quad (115)
 \end{aligned}$$

⁶ ここからは自然対数を \ln であらわしていることに注意.

$$G_m(y) \equiv imy + \ln\left(\frac{\sin y}{y}\right) \quad (116)$$

と書ける. ここで, $N \rightarrow \infty$ での鞍点を評価するために, スターリングの公式を用いて

$$\left(\frac{N}{\frac{N(1-m)}{2}}\right) = \exp\left[\ln\left(\frac{N}{\frac{N(1-m)}{2}}\right)\right] \quad (117)$$

を評価しよう.

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{N}{\frac{N(1-m)}{2}}\right) &= \ln\frac{N!}{\left[\frac{N(1-m)}{2}\right]!\left[\frac{N(1+m)}{2}\right]!} \\ &\simeq N \ln N - N - \frac{N(1-m)}{2} \ln \frac{N(1-m)}{2} + \frac{N(1-m)}{2} \\ &\quad - \frac{N(1+m)}{2} \ln \frac{N(1+m)}{2} + \frac{N(1+m)}{2} + \mathcal{O}(\ln N) \\ &= -N \left[\left(\frac{1-m}{2}\right) \ln \left(\frac{1-m}{2}\right) + \left(\frac{1+m}{2}\right) \ln \left(\frac{1+m}{2}\right) \right] + \mathcal{O}(\ln N) \end{aligned} \quad (118)$$

ではあるが, $n! \simeq \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$ を用いて $\mathcal{O}(\ln N)$ まで正しく評価すれば, $\mathcal{O}(\ln N)$ の補正項は

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\ln N) &= \ln \sqrt{2\pi} + \ln \sqrt{N} - \ln \sqrt{2\pi} - \ln \sqrt{\frac{N(1+m)}{2}} - \ln \sqrt{2\pi} - \ln \sqrt{\frac{N(1-m)}{2}} \\ &= \ln \sqrt{\frac{2^2}{2\pi N(1-m^2)}} \end{aligned} \quad (119)$$

のように評価されるので

$$\begin{aligned} \exp\left[\ln\left(\frac{N}{\frac{N(1-m)}{2}}\right)\right] &= \exp\left[-N \left\{ \left(\frac{1-m}{2}\right) \ln \left(\frac{1-m}{2}\right) + \left(\frac{1+m}{2}\right) \ln \left(\frac{1+m}{2}\right) \right\}\right] \\ &\quad \times \sqrt{\frac{2^2}{2\pi N(1-m^2)}} \end{aligned} \quad (120)$$

であり, 結局 (115) 式は

$$\begin{aligned} \langle Z_m(T) \rangle &= \frac{2}{\pi \sqrt{2\pi N(1-m^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{2T}{1+(2Ty)^2} \\ &\quad \times \exp\left[G_m(y) - \frac{(1-m)}{2} \ln \frac{(1-m)}{2} - \frac{(1+m)}{2} \ln \frac{(1+m)}{2}\right] \end{aligned} \quad (121)$$

となる. ここで, 関数 $G_m(y)$ の鞍点は $y_s = i\zeta$ と置けば

$$m - \coth \zeta + \frac{1}{\zeta} = 0 \quad (122)$$

の解である. この解に対して $G_m(y_s)$ は

$$G_m(y_s) \equiv G_m = im \times i\zeta + \ln\left(\frac{\sin(i\zeta)}{i\zeta}\right) = -m\zeta + \ln\left(\frac{\sinh \zeta}{\zeta}\right) \quad (123)$$

で与えられる. 従って (121) 式を y_s で評価すると

$$\begin{aligned} \langle Z_m(T) \rangle &= \frac{2}{\sqrt{2\pi N(1-m^2)}} \frac{2T}{(1-(2T\zeta)^2)} e^{Ng_m} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{N}{2}|G_m''(y-y_s)|^2} \\ &= \frac{2}{\sqrt{2\pi N(1-m^2)}} \frac{2T}{(1-(2T\zeta)^2)} \sqrt{\frac{2\pi}{N|G_m''|}} e^{Ng_m} \\ &= \frac{2}{\pi N} \sqrt{\frac{1}{(1-m^2)|G_m''|}} \frac{2T}{1-(2T\zeta)^2} e^{Ng_m} \end{aligned} \quad (124)$$

$$g_m = G_m - \frac{(1-m)}{2} \ln \frac{(1-m)}{2} - \frac{(1+m)}{2} \ln \frac{(1+m)}{2} \quad (125)$$

が得られる。但し、 G_m'' は G_m の y に関する 2 回微分、すなわち

$$G_m'' = -1 + m^2 + \frac{2m}{\zeta} \quad (126)$$

である。従って、アニール系での自由エネルギー $F_m^a(T)$ は

$$F_m^a(T) = -T \ln \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle \quad (127)$$

で与えられるので、この $F_m^a(T)$ を最大にするノイズレベル T_m^* は

$$\frac{\partial F_m^a(T)}{\partial T} = -\ln \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle - T \frac{\partial}{\partial T} \ln \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle = 0 \quad (128)$$

を満たす。ここで

$$\frac{\partial}{\partial T} \ln \langle \mathcal{Z}_m(T) \rangle = \frac{1}{T} \left[\frac{1 + (2T\zeta)^2}{1 - (2T\zeta)^2} \right] \quad (129)$$

であるから、(128) 式は

$$\ln \langle \mathcal{Z}_m(T_m^*) \rangle + \frac{1 + (2T_m^*\zeta)^2}{1 - (2T_m^*\zeta)^2} = 0 \quad (130)$$

となる。

ここまできて、まずは (130) 式で $\langle \mathcal{Z}_m(T_m^*) \rangle \sim \mathcal{O}(1)$ の場合を考えよう。このとき (124) 式から

$$\langle \mathcal{Z}_m(T_m^*) \rangle = \frac{2}{\pi N} \sqrt{\frac{1}{(1-m^2)|G_m''(\zeta)|}} \frac{2T_m^*}{1 - (2T_m^*\zeta)^2} e^{Ng_m(\zeta)} \quad (131)$$

が満たされるべきであるから、 $N \rightarrow \infty$ で $T_m^* \sim 0$ でなければならない。従って (130) 式より

$$\ln \langle \mathcal{Z}_m(T_m^*) \rangle = -1 \quad (132)$$

から

$$\langle \mathcal{Z}_m(T_m^*) \rangle = e^{-1} \quad (133)$$

となり、(124) 式より

$$\frac{2}{\pi N} \sqrt{\frac{1}{(1-m^2)|G_m''(\zeta)|}} \frac{2T_m^*}{1 - (2T_m^*\zeta)^2} e^{Ng_m(\zeta)} \simeq \frac{2}{\pi N} \sqrt{\frac{1}{(1-m^2)|G_m''(\zeta)|}} 2T_m^* e^{Ng_m(\zeta)} = e^{-1} \quad (134)$$

が得られるが、これからから T_m^* が決まり

$$T_m^* = \frac{\pi N}{4} \sqrt{(1-m^2)|G_m''(\zeta)|} e^{-1 - Ng_m} \quad (135)$$

である。また、 \tilde{E}_m^a は

$$\tilde{E}_m^a = -T_m^* \langle \mathcal{Z}_m(T_m^*) \rangle = T_m^* \quad (136)$$

だから、(101) 式より

$$\tilde{E}_m^a = T_m^* = \frac{\pi N}{4} \sqrt{(1-m^2)|G_m''(\zeta)|} e^{-1 - Ng_m} \quad (137)$$

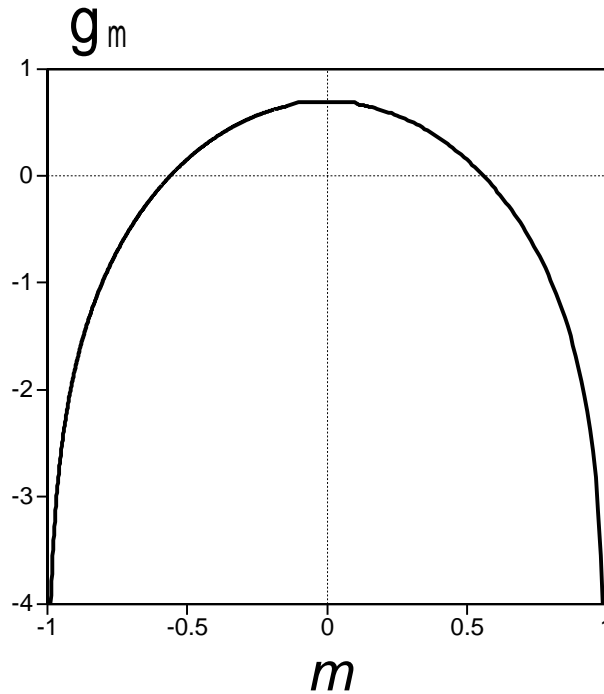


図 13: g_m の振舞い. これは m を与えたときの (122) 式の解を (123)(125) 式に代入して得られたものである.

が得られる.

$g_m > 0$ である限り, $T_m^* \ll 0$ となり, ここでの議論はつじつまが合うが, $g_m < 0$ では議論の整合性が破綻する. g_m の m の関数としてのプロットを図 13 に載せよう. この図より $|m| > 0.56$ で $g_m < 0$ となることがわかる. 従って, $|m| > 0.56$ で (137) のエネルギーは正しい結果を与えない. 次に $m = 0$ (\mathcal{A}_1 と \mathcal{A}_2 に属するアイテム数が等しい) 場合を考察する. この場合には (122)(125) 式から明らかに $\zeta = 0, g_0 = \ln 2$ であり, (126) 式より直ちに $G_0'' = -1/3$ が得られる. 従って, (121) 式から

$$\langle Z_0(T) \rangle = 2^N T \frac{4\sqrt{3}}{\pi N} \tag{138}$$

となる. よって, $\tilde{E}_m^a = F_m^a(T_m^*)$ であるから, $F_m^a(T)$ より $\partial F_m^a / \partial T = 0$ を満たす T_m^* を求めよう.

$$F_m^a(T) = -T \ln \langle Z_0(T) \rangle = -T \ln T - T \ln 2^N \frac{4\sqrt{3}}{\pi N} \tag{139}$$

から

$$\left. \frac{\partial F_m^a}{\partial T} \right|_{T=T_m^*} = -\ln T_m^* - \ln 2^N \frac{4\sqrt{3}}{\pi N} = 0 \tag{140}$$

を T_m^* について解けばよく, T_m^* は

$$T_m^* = \frac{\pi N}{2^N 4\sqrt{3} e} \tag{141}$$

となる. 従って

$$F_m^a(T_m^*) = -T_m^* \ln \langle Z_0(T_m^*) \rangle = \frac{\pi N}{2^N 4\sqrt{3} e} \tag{142}$$

であるから

$$\tilde{E}_m^a = 2^{-N} \frac{\pi N}{4e\sqrt{3}} \simeq \underline{0.167} 2^{-N} N \quad (143)$$

が得られる.

次に $\langle Z_m(T_m^*) \rangle$ が $\mathcal{O}(e^N)$ の場合を考える. このとき (131) 式より $\ln \langle Z_m(T_m^*) \rangle \sim Ng_m$, $T_m^* \sim (2\zeta^{-1})$ であるから

$$\tilde{E}_m^a = F_m^a(T_m) = -T_m^* \ln \langle Z_m(T_m^*) \rangle = -\frac{Ng_m}{2\zeta} \quad (144)$$

を得る. これは $g_m < 0$, つまり, $m > 0.56$ で正しい.

この評価がどの程度良いエネルギーの下限を与えているかを確認するため, $m = 1$ の場合につき, 以下に考察してみる. $m = 1$ の場合 (123) 式は $\zeta \rightarrow \infty$ より

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \frac{G_m}{\zeta} = \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \left(\frac{\ln(\sinh \zeta / \zeta)}{\zeta} \right) - m = -m + \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \ln \left(\frac{\sinh \zeta}{\zeta} \right) - \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \frac{\ln \zeta}{\zeta} \quad (145)$$

であり, $\zeta \rightarrow \infty$ のとき $\sinh \zeta \simeq e^\zeta / 2$ なので

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \frac{\ln \sinh \zeta}{\zeta} \simeq \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \frac{\zeta - \ln 2}{\zeta} = 1 \quad (146)$$

であり, また, $\ln \zeta < \zeta$ より $\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \zeta^{-1} \ln \zeta = 0$ なので

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \zeta^{-1} G_m = -m + 1 = 0 \quad (147)$$

が成り立つ. また

$$\lim_{m \rightarrow 1} \left[\frac{(1+m)}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{(1-m)}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right] = 0 \quad (148)$$

であるから, 結局

$$\tilde{E}_{m=1}^a = \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \frac{g_m}{\zeta} = 0 \quad (149)$$

が得られる.

一方, $m = (1/N) \sum_{j=1}^N s_j = 1$ とは全ての s_j が +1, つまり, \mathcal{A}_1 に属しているということだから, 既に見たように

$$E(\mathbf{s}) = \left| \sum_{j=1}^N a_j s_j \right| = \frac{N}{2} \quad (150)$$

となる. よって

$$E(m=1) = \frac{N}{2} \quad (151)$$

となる. (149) 式より, アニール近似での下限はゼロであったので, これは極めて悪い結果を与えている.

しかし, E_m がアイテム数に比例する場合 ($E_m \sim \mathcal{O}(N)$) 場合には, 次のような厳密計算が可能である. 分配関数は

$$Z_m(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx d\hat{x}}{2\pi} e^{ix\hat{x} - \beta|x|} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\hat{m}}{2\pi} e^{iNm\hat{m}} \prod_j \sum_{\{s_j = \pm 1\}} e^{-is_j(a_j \hat{x} + \hat{m})} \quad (152)$$

であり, エネルギーを $\mathcal{O}(N)$ にするために, 次の変数変換: $\hat{x} \rightarrow i\beta\hat{x}, \hat{m} \rightarrow i\beta\hat{m}, x \rightarrow Nx$ を施せば

$$\mathcal{Z}_m(T) = N\beta^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{i\infty}^{-i\infty} \frac{id\hat{x}}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{\beta i}}^{\frac{\pi}{\beta i}} \frac{id\hat{m}}{2\pi} e^{-N\beta(x\hat{x}+|x|+m\hat{m})} \prod_j \sum_{\{s_j=\pm 1\}} e^{\beta s_j(a_j\hat{x}+\hat{m})} \quad (153)$$

と変形できる. ここで $\ln 2\cosh(\dots)$ の自己平均に注意すれば

$$\begin{aligned} \prod_j \sum_{\{s_j=\pm 1\}} e^{\beta s_j(a_j\hat{x}+\hat{m})} &= \prod_j 2\cosh[\beta(a_j\hat{x} + \hat{m})] \\ &= \exp \left[\sum_j \ln 2\cosh\beta(a_j\hat{x} + \hat{m}) \right] \\ &= \exp \left[N \times \frac{1}{N} \sum_j \ln 2 \cosh \beta(a_j\hat{x} + \hat{m}) \right] \\ &= \exp \left[N \int_0^1 da \ln 2\cosh\beta(a\hat{x} + \hat{m}) \right] \end{aligned} \quad (154)$$

が得られるので, 結局

$$\mathcal{Z}_m(T) = N\beta^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{i\infty}^{-i\infty} \frac{id\hat{x}}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{\beta i}}^{\frac{\pi}{\beta i}} \frac{id\hat{m}}{2\pi} e^{-N\beta(x\hat{x}+|x|+m\hat{m})} \exp \left[N \int_0^1 da \ln 2\cosh\beta(a\hat{x} + \hat{m}) \right] \quad (155)$$

であり, 従って

$$\bar{f}_m = x\hat{x} + |x| + m\hat{m} - \frac{1}{\beta} \int_0^1 da \ln 2\cosh\beta(a\hat{x} + \hat{m}) \quad (156)$$

の鞍点を評価すればよい. $\partial \bar{f}_m / \partial \hat{m} = 0, \partial \bar{f}_m / \partial \hat{x} = 0, \partial \bar{f}_m / \partial x = 0$ のそれぞれから

$$m = \int_0^1 da \tanh \beta(a\hat{x} + \hat{m}) \quad (157)$$

$$x = \int_0^1 da a \tanh \beta(a\hat{x} + \hat{m}) \quad (158)$$

$$\hat{x} = -\text{sgn}(x) = -1 \quad (159)$$

が得られるので, (159) 式を (157) 式に代入し, 積分を $\beta \rightarrow \infty$ で評価すれば

$$m = \int_0^1 da \tanh\beta(-a + \hat{m}) \simeq \int_0^{\hat{m}} da - \int_{\hat{m}}^1 da = 2\hat{m} - 1 \quad (160)$$

従って

$$\hat{m} = \frac{1}{2}(1 + m) \quad (161)$$

が得られる. 一方, (159) 式を (158) 式に代入することにより

$$x = \int_0^1 ada \tanh \beta(-a + \hat{m}) = \int_0^{\hat{m}} ada - \int_{\hat{m}}^1 a da = \hat{m}^2 - \frac{1}{2} = \frac{1}{4}(1 + m)^2 - \frac{1}{2} \quad (162)$$

が得られるが, $x = |\sum_j a_j s_j| \geq 0$ より

$$m \geq \sqrt{2} - 1 \simeq 0.414 \quad (163)$$

で上の計算は正しい. このとき, 自由エネルギーは $\beta \rightarrow \infty$ で

$$x\hat{x} + m\hat{m} = -\frac{1}{4}(1+m)^2 + \frac{1}{2} + m \times \frac{1}{2}(1+m) = \frac{1}{4}(1+m)^2 \quad (164)$$

$$\frac{1}{\beta} \int_0^1 da \ln 2 \cosh \beta(-a + \hat{m}) \simeq \frac{1}{\beta} \int_0^1 da \ln 2 \times \frac{e^{\beta(-a + \hat{m})}}{2} = \int_0^1 da(-a + \hat{m}) = \frac{1}{4}(1+m^2) \quad (165)$$

であるから

$$\bar{f}_m = |x| = \frac{1}{4}(1+m)^2 - \frac{1}{2} = \frac{\bar{E}_m}{N} \quad (166)$$

となり, 従って

$$\bar{E}_m = \frac{N}{2} \left[\frac{1}{2}(1+m)^2 - 1 \right] \quad (167)$$

が最終的に得られる. ただし, $m \geq \sqrt{2} - 1 \simeq 0.414$ で正しい (もちろん, $m = 1$ の場合は $E = N/2$ となり, 正しい).

2.4.4 制約なし最小エネルギーの統計力学による評価

先に荒い評価を行った m に関する制約が無く, どのような制約をも許す場合の最小エネルギーを統計力学の方法を用いて計算する. つまり

$$\langle Z_u(T) \rangle = \sum_m \langle Z_m(T) \rangle = \sum_m \binom{N}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{NG_m(y)} \quad (168)$$

$$n = N \left(\frac{1-m}{2} \right) \quad (169)$$

$$G_m(y) = imy + \ln \left(\frac{\sin y}{y} \right) \quad (170)$$

を計算する.

$$\begin{aligned} \langle Z_m(T) \rangle &= \binom{N}{N \left(\frac{1-m}{2} \right)} \int_0^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{N\{imy + \ln(\sin y/y)\}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{N \ln(\sin y/y)} \binom{N}{N \left(\frac{1-m}{2} \right)} e^{Nimy} \end{aligned} \quad (171)$$

であるから

$$\sum_m \langle Z_m(T) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{N \ln(\sin y/y)} \sum_m \binom{N}{N \left(\frac{1-m}{2} \right)} e^{Nimy} \quad (172)$$

となり, 我々は

$$I_u \equiv \sum_m \binom{N}{N \left(\frac{1-m}{2} \right)} e^{Nimy} \quad (173)$$

$$m = -1, -1 + \frac{2 \cdot 1}{N}, \dots, -1 + \frac{2 \cdot k}{N}, \dots, -1 + \frac{2 \cdot N}{N} = 1 \quad (174)$$

を計算しなくてはならない.

そこで, I_u は次のように書き直せることに注意する.

$$I_u = \sum_{k=0}^N \binom{N}{\frac{N}{2}\{1 - \{-1 + \frac{2k}{N}\}\}} e^{Niy(-1+2k/N)} = e^{-Niy} \sum_{k=0}^N \binom{N}{N-k} (e^{2iy})^k \quad (175)$$

ここで, 恒等式:

$$\binom{N}{N-k} = \binom{N}{k} \quad (176)$$

に着目するれば

$$I_u = e^{-Niy} (1 + e^{2iy})^N = 2^N e^{N \ln \cos y} \quad (177)$$

が得られるので, (177) 式を (171) 式に代入して

$$\begin{aligned} \sum_m \langle Z_m(T) \rangle &= 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{N(\frac{\sin y}{y})} e^{N \ln \cos y} \\ &= 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{N \ln(\frac{\sin y \cos y}{y})} \\ &= 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{N \ln(\frac{\sin 2y}{2y})} \end{aligned} \quad (178)$$

が得られるので

$$\langle Z_u(T) \rangle = \sum_m \langle Z_m(T) \rangle = 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\pi} \frac{2T}{1 + (2Ty)^2} e^{NG_u(y)} \quad (179)$$

$$G_u(y) = \ln\left(\frac{\sin 2y}{2y}\right) \quad (180)$$

と書ける. この積分を $N \rightarrow \infty$ の鞍点で評価する. $y_s = 0$ が鞍点であるので ($\tan y = y$ が鞍点方程式), $y_s = 0$ の近傍で $G_u(y)$ は

$$G_u(y) \simeq \ln\left(\frac{2y - \frac{1}{6}(2y)^3}{2y}\right) \simeq \ln\left(1 - \frac{2}{3}y^2 + \mathcal{O}(y^4)\right) \simeq -\frac{2}{3}y^2 + \mathcal{O}(y^4) \quad (181)$$

のように振舞うことがわかる.

$$G_u(y_s = 0) = 0 \quad (182)$$

$$\left. \frac{\partial^2 G_u(y)}{\partial y^2} \right|_{y=0} = -\frac{4}{3} \quad (183)$$

であるので

$$\langle Z_u(T) \rangle = 2^N \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{N}{2} |-\frac{4}{3}|y^2} = 2^N \frac{2T}{\pi} \sqrt{\frac{3\pi}{2N}} = 2^N T \sqrt{\frac{6}{\pi N}} \quad (184)$$

が得られ, 自由エネルギーはノイズレベルの関数として

$$F_m^a(T) = -T \ln \langle Z_u(T) \rangle = -T \ln \left(2^N T \sqrt{\frac{6}{\pi N}} \right) = -T \ln 2 - T \ln T - T \ln \sqrt{\frac{6}{\pi N}} \quad (185)$$

のように求めることができる。よって, $\partial F_m^a / \partial T = 0$ は

$$\ln T = \ln 2^{-N} + \ln e^{-1} + \ln \sqrt{\frac{6}{\pi N}} \quad (186)$$

つまり

$$T^* = \frac{1}{2^N e} \sqrt{\frac{\pi N}{6}} \quad (187)$$

であるから, 最小エネルギーは

$$\tilde{E}_u^a = -T^* \ln \langle \mathcal{Z}_u(T^*) \rangle = -\frac{1}{2^N e} \sqrt{\frac{\pi N}{6}} \ln \left(2^N \frac{1}{2^N e} \sqrt{\frac{\pi N}{6}} \sqrt{\frac{6}{\pi N}} \right) = \frac{1}{2^N e} \sqrt{\frac{\pi N}{6}} \quad (188)$$

すなわち

$$\tilde{E}_u^a = 2^{-N} \sqrt{\frac{\pi N}{6e^2}} \simeq \underline{0.266} 2^{-N} \sqrt{N} \quad (189)$$

が得られる。これは前に見たラフな評価で見積もられたオーダーと一致する。

長かった。結果をまとめておこう。

2 分割問題の最小エネルギー :

$$\tilde{E}_m^a = \begin{cases} \frac{\pi N}{4} \sqrt{(1-m^2)|G_m''|} e^{-1-Ng_m} & (|m| < 0.560) \\ -\frac{Ng_m}{2\zeta} & (0.560 \leq |m|) \\ \frac{N}{2} \left[\frac{1}{2}(1+m)^2 - 1 \right] & (\text{エネルギーが } \mathcal{O}(N) \text{ かつ } |m| \geq 0.414 \text{ の場合の評価}) \end{cases}$$

m による制約なしの場合 :

$$\tilde{E}_u^a = \underline{0.266} 2^{-N} \sqrt{N}$$

2.4.5 準安定状態数の評価

ここまでで議論したように, 組合せ最適化問題の難しさを「最小エネルギーの深さ」で計ることもできるが, 「最適解の周りに準安定状態 (準最適解) がどの程度存在するのか」という尺度もまた, この最適化問題の難しさを反映する。

そこで, ここでは統計力学の方法を用いて 2 分割問題における準安定状態の数 (準最適解の数) をエネルギー E の関数として求めておくことにしよう。

まず, エネルギーが $E = |t|$ のときの準安定状態の個数は次のように定義される。

$$\langle \mathcal{M}(t) \rangle = \left\langle \sum_{\mathbf{s}} \delta(t - \sum_j s_j a_j) \prod_j \Theta(|t - 2s_j a_j| - |t|) \right\rangle \quad (190)$$

ここで, $\Theta(\dots)$ は階段関数である。この式の意味するところは, つまるところ, ある変数 s_j についてのシングル・フリップ ($s_j \rightarrow -s_j$) でエネルギーが $|t|$ より増加するような配列 (s_1, s_2, \dots, s_N) を 1 でカウントしたとき, システム全体でのこのカウント総数を準安定状態の個数と定義する, ということである。ここで, このシングル・フリップという「ダイナミクス」をいくつかの s_j で同時にフリップするクラスタ・フリッ

プに換えれば, この個数は変化する. 従って, このようにして定義された準安定状態数はアルゴリズムのダイナミクスを反映したものになっていることに注意すべきである.

さて, 上の表示でデルタ関数を積分表示すれば

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \prod_j \sum_{\{s_j = \pm 1\}} \int_0^1 da_j e^{-i\hat{t}s_j a_j} \Theta(|t - 2s_j a_j| - |t|) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \prod_j \left\{ \int_0^1 da_j e^{-i\hat{t}a_j} \Theta(|t - 2a_j| - |t|) + \int_0^1 da_j e^{-i\hat{t}a_j} \Theta(|t + a_j| - |t|) \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \prod_j \{I_1 + I_2\} \end{aligned} \quad (191)$$

と書き直すことができるので, まずは $E = |t| < 1$ の場合を考えよう. このとき, 上の a_j についての積分 I_1, I_2 は次のように実行される.

$$I_1 = \int_t^1 da_j e^{-i\hat{t}a_j} = \left[\frac{1}{-i\hat{t}} e^{-i\hat{t}a_j} \right]_t^1 = \left(\frac{e^{-i\hat{t}} - e^{-i\hat{t}t}}{-i\hat{t}} \right) \quad (192)$$

$$I_2 = \int_0^1 da_j e^{i\hat{t}a_j} = \left[\frac{1}{i\hat{t}} e^{i\hat{t}a_j} \right]_0^1 = \left(\frac{e^{i\hat{t}} - 1}{i\hat{t}} \right) \quad (193)$$

従って, (191) 式は

$$\langle \mathcal{M}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \prod_j \left(\frac{e^{-i\hat{t}t} + e^{i\hat{t}} - e^{-i\hat{t}} - 1}{i\hat{t}} \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \left(\frac{e^{-i\hat{t}t} + e^{i\hat{t}} - e^{-i\hat{t}} - 1}{i\hat{t}} \right)^N \quad (194)$$

となる.

次に $E = |t| \geq 1$ の場合を考えよう. この場合は直ちに

$$I_1 = 0 \quad (195)$$

$$I_2 = \left(\frac{e^{i\hat{t}} - 1}{i\hat{t}} \right) \quad (196)$$

がわかるので

$$\langle \mathcal{M}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \left(\frac{e^{i\hat{t}} - 1}{i\hat{t}} \right)^N = 0 \quad (197)$$

である. 上の積分結果がゼロになるという式は任意の N について成立する. 以下にそれを示しておこう.

まず, $\langle \mathcal{M}(t) \rangle$ を次のように書き直しておく.

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} (i\hat{t})^{-N} \sum_{m=0}^N \binom{N}{m} (-1)^m e^{i\hat{t}t} \\ &= \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \frac{e^{i\hat{t}(t+n)}}{(i\hat{t})^N} \equiv \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} (-1)^n \mathcal{I}(N, n) \end{aligned} \quad (198)$$

ここで明らかに

$$\mathcal{I}(1, n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \frac{e^{i\hat{t}(t+n)}}{i\hat{t}} = \Theta(t+n) \quad (199)$$

である. 次に $\mathcal{I}(2, n)$ について考えてみると

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(2, n) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \frac{e^{i\hat{t}(t+n)}}{(i\hat{t})^2} \\ &= \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \left(\frac{-1}{i\hat{t}} \right)' e^{i\hat{t}(t+n)} \\ &= \frac{1}{i} \left[\frac{-1}{i\hat{t}} e^{i\hat{t}(t+n)} \right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \frac{-1}{i\hat{t}} \times i(t+n) e^{i\hat{t}(t+n)} \\ &= (t+n) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \frac{e^{i\hat{t}(t+n)}}{i\hat{t}} \\ &= (t+n)\Theta(t+n) \end{aligned} \tag{200}$$

であり, これを繰り返し用いることにより, $\mathcal{I}(N, n)$ は次のようになる.

$$\mathcal{I}(N, n) = \frac{(t+n)^{N-1}}{(N-1)!} \Theta(t+n) \tag{201}$$

従って, $\langle \mathcal{M}(t) \rangle$ は

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \frac{1}{(N-1)!} \sum_{n=0}^N (-1)^n \binom{N}{n} (t+n)^{N-1} \Theta(t+n) \tag{202}$$

となるが, 和についての公式:

$$\sum_{k=0}^N (-1)^k \binom{N}{k} (\alpha+k)^{n-1} = 0 \quad (N \geq n \geq 1, N, n \in \mathbb{N}^+) \tag{203}$$

を用いるとこれはゼロである.

従って, 以下では $E = |t| < 1$ の場合のみを考える. このとき (191) 式は

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \left[\frac{(e^{i\hat{t}} - e^{-i\hat{t}}) - (1 - e^{-i\hat{t}t})}{i\hat{t}} \right]^N \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \left[\frac{2\sin\hat{t}}{\hat{t}} - \frac{e^{i\hat{t}t/2} - e^{-i\hat{t}t/2}}{i\hat{t}e^{i\hat{t}t/2}} \right]^N \\ &= 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \left[\frac{\sin\hat{t}}{\hat{t}} - e^{-i\hat{t}t/2} \frac{\sin(\hat{t}t/2)}{\hat{t}} \right]^N \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \exp N \left\{ \ln 2 + \ln \left[\frac{\sin\hat{t}}{\hat{t}} - e^{-i\hat{t}t/2} \frac{\sin(\hat{t}t/2)}{\hat{t}} \right] \right\} + \mathcal{O}(N^{-1}) \end{aligned} \tag{204}$$

と書けるが, ここで

$$H(\hat{t}) = \ln 2 + \ln \left[\frac{\sin\hat{t}}{\hat{t}} - e^{-i\hat{t}t/2} \frac{\sin(\hat{t}t/2)}{\hat{t}} \right] \tag{205}$$

とおくと, 鞍点は

$$\frac{\partial H(\hat{t})}{\partial \hat{t}} = 0 \tag{206}$$

つまり

$$\frac{\cos\hat{t} - \frac{t}{2}e^{-i\hat{t}t}}{\sin\hat{t} - e^{-\frac{i\hat{t}t}{2}} \sin(\hat{t}t/2)} - \frac{1}{\hat{t}} = 0 \tag{207}$$

を満たす. ここで, $\hat{t} = -i\xi$ とおけば (207) 式は

$$\frac{2\cosh\xi - te^{-\xi t}}{\sinh\xi - e^{-\xi t/2}\sinh(\xi t/2)} - \frac{2}{\xi} = 0 \quad (208)$$

となる. この解 ξ に対し, (191) 式は

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{NH(\xi)} e^{-\frac{N}{2}|H''(\xi)|(i-\xi)^2} \\ &= \frac{e^{NH(\xi)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{-\frac{N}{2}|H''(\xi)|(i-\xi)^2} \\ &= \frac{e^{NH(\xi)}}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{N}{2}|H''(\xi)|}} \end{aligned} \quad (209)$$

となる. よって, エネルギーが $E = |t|$ のときの準安定状態の個数 $\langle \mathcal{M}(t) \rangle$ は

$$\langle \mathcal{M}(t) \rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi|H''(\xi)|}} e^{NH(\xi)} \quad (210)$$

と評価できる. 但し, $H(\xi)$ は

$$H(\xi) = \ln 2 + \ln \left[\frac{\sinh\xi}{\xi} - e^{-t\xi} \frac{\sinh(\xi t/2)}{\xi} \right] \quad (211)$$

であり, ξ は次の鞍点方程式の解である.

$$\frac{2\cosh\xi - te^{-\xi t}}{\sinh\xi - e^{-\xi t/2}\sinh(\xi t/2)} - \frac{2}{\xi} = 0 \quad (212)$$

ここで, $H(\xi)$ は $E = |t|$ に関する単調減少関数であり, $H = \ln 2$ ($E = 0, \xi = 0$) から $H = -\infty$ ($E = 1, \xi = -\infty$) まで単調に減少し, $E_c \simeq 0.851$ でゼロとなる. 従って, $E < E_c$ では, 準安定状態の個数は N に関する指数関数で表せるのに対し, $E \geq E_c$ ではその個数は指数関数的に減少し, $E \geq 1$ で消失することがわかる.

次にエネルギー幅 t に依らない平均的な準安定状態の個数を求めておこう. つまり

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \mathcal{M}(t) \rangle \quad (213)$$

を計算する. (194) 式より, エネルギー幅: $t \sim 0$ の近傍の $\langle \mathcal{M}(t) \rangle$ のみが (213) 式の積分に寄与するので, (194) 式の被積分関数を $t \sim 0$ のまわりで展開することにする.

$$\begin{cases} e^{-i\hat{t}t} \simeq 1 - i\hat{t}t + \mathcal{O}(t^2\hat{t}^2) \\ e^{i\hat{t}t} \simeq 1 + i\hat{t}t - \frac{1}{2}\hat{t}^2t^2 - \frac{i\hat{t}^3}{6}t^3 + \mathcal{O}(\hat{t}^4) \\ e^{-i\hat{t}t} \simeq 1 - i\hat{t}t - \frac{1}{2}\hat{t}^2t^2 + \frac{i\hat{t}^3}{6}t^3 + \mathcal{O}(\hat{t}^4) \end{cases} \quad (214)$$

であるので

$$\mu(t, \hat{t}) \equiv \left(\frac{e^{-i\hat{t}t} - e^{-i\hat{t}t} + e^{i\hat{t}t} - 1}{i\hat{t}} \right) \simeq \left(2 - t - \frac{\hat{t}^2}{6} \right) \quad (215)$$

となり, $\mu(t, \hat{t})^N$ は次のように評価される.

$$\begin{aligned} \mu(t, \hat{t})^N &= 2^N \left\{ 1 - \left(\frac{t}{2} + \frac{\hat{t}^2}{12} \right) \right\}^N \\ &= 2^N \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} \left\{ - \left(\frac{t}{2} + \frac{\hat{t}^2}{12} \right) \right\}^n \\ &\simeq 2^N \left\{ 1 - N \left(\frac{t}{2} + \frac{\hat{t}^2}{12} \right) + \frac{N(N-1)}{2} \left(\frac{t}{2} + \frac{\hat{t}^2}{12} \right)^2 \right\} \\ &\simeq 2^N e^{-N(\frac{t}{2} + \frac{\hat{t}^2}{12}) + \frac{N(N-1)}{8}t^2} \end{aligned} \quad (216)$$

従って, (194) 式の \hat{t} に関する積分は次のように実行できる.

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{i\hat{t}t} \mu(t, \hat{t})^N \\ &\simeq 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} \{ \cos(\hat{t}t) + i \sin(\hat{t}t) \} e^{-N(\frac{t}{2} + \frac{\hat{t}^2}{12}) + \frac{N(N-1)}{8} \hat{t}^2} \\ &= 2^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{t}}{2\pi} e^{-\frac{N\hat{t}^2}{12}} e^{-\frac{Nt}{2} + \frac{N(N-1)}{8} \hat{t}^2} \\ &= 2^N \sqrt{\frac{3}{\pi N}} e^{-\frac{Nt}{2} + \frac{N(N-1)}{8} t^2} \end{aligned} \quad (217)$$

従って, $\langle \mathcal{M} \rangle$ は

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \mathcal{M}(t) \rangle = 2^N \sqrt{\frac{3}{\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{Nt}{2} + \frac{N(N-1)}{8} t^2} \quad (218)$$

ここで, $x = Nt/\sqrt{8}$ と変数変換すると

$$\langle \mathcal{M} \rangle = 2^N \sqrt{\frac{3}{\pi N}} \frac{\sqrt{8}}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{x^2 - \frac{\sqrt{8}}{2} x} = 2^N \sqrt{\frac{24}{\pi N}} \frac{1}{N^{3/2}} \sim 2.764 \cdot 2^N N^{-3/2} \quad (219)$$

が得られる.

最後に準安定状態 1 つあたりの典型的なエネルギーの大きさを評価してみよう. つまり

$$E_t = \left\langle \frac{\int dt t \mathcal{M}(t)}{\int dt \mathcal{M}(t)} \right\rangle \quad (220)$$

を計算することになる. しかし, このままでは計算が困難なので, 次のようなアニール近似を用いることにする.

$$E_t = \frac{\int dt t \langle \mathcal{M}(t) \rangle}{\langle \mathcal{M} \rangle} \quad (221)$$

この分母は既に上で計算済みなので, ここでは分子を計算する.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt t \langle \mathcal{M}(t) \rangle = 2^N \sqrt{\frac{3}{\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} dt t e^{-\frac{Nt}{2} + \frac{N(N-1)}{8} t^2} = 2^N \sqrt{\frac{3}{\pi N}} \frac{8}{N^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{x^2 - \frac{\sqrt{8}}{2} x} \quad (222)$$

であるから

$$E_t = \frac{\int dt t \langle \mathcal{M}(t) \rangle}{\langle \mathcal{M} \rangle} = \frac{2^N \sqrt{\frac{3}{\pi N}} \frac{8}{N^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{x^2 - \frac{\sqrt{8}}{2} x}}{2^N \sqrt{\frac{24}{\pi}} N^{-3/2}} = \frac{2}{N} \quad (223)$$

すなわち

$$E_t = \frac{2}{N} \quad (224)$$

を得る.

さて, これらの値は実際にはどれくらいのものであるろう? 比較のため, エネルギー関数が

$$\mathcal{E} = - \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j$$

で定義される SK (Sherrington and Kirkpatrick) モデルと呼ばれるスピングラス磁性模型の最小状態のエネルギーと平均的な準安定状態の個数を載せておこう。ここで、 J_{ij} は平均ゼロ、分散 $1/N$ のガウス分布に従うことに注意する。このスピングラスに関しては後で詳しく述べるが、最小エネルギー状態が非自明であり、その探索には極めて長い計算時間が必要であり、ある意味では大規模最適化問題を解くために開発されるアルゴリズムに対するベンチマークテストとして用いられるべきものである。

$$\begin{cases} \langle \mathcal{M} \rangle & \sim e^{0.199N} \\ E & \sim -0.833N \end{cases}$$

つまり、2 分割問題は SK モデルより多くの準安定状態を有し、その最小エネルギーは SK モデルのそれより深い。

問 9 : 前回学んだ [ノイズを利用したアルゴリズム] を今回扱ったエネルギー関数が

$$E(s_1, s_2, \dots, s_N) = \left| \sum_{j=1}^N a_j s_j \right|$$

で与えられる 2 分割問題に適用できるように拡張したプログラムを作成せよ (m による制約がない場合を考えよ)。また、この具体的にノイズレベル T をアニーリングすることにより、このエネルギー関数の最小エネルギーを $N = 100$ の場合に評価せよ^a。その際、各 a_i は $[0, 1]$ の一様分布から生成して与えること。この際、 a_i の与え方を 10 回程度変えてみて、得られるエネルギーのばらつき (エラーバー) も評価すること。

また、余裕があればアイテム数 N の大きさを様々に変えて最小エネルギーを求めることにより、最小エネルギーの N 依存性を調べ、本稿で与えた $N \rightarrow \infty$ での解析結果 : $\tilde{E}_u^a = 0.266 2^{-N} \sqrt{N}$ と比較せよ。

^a この場合に N 個の変数 (s_1, s_2, \dots, s_N) からなる N 個のシステムからなるアンサンブルを考えることは可能であるが得策ではない。このケースではアンサンブル平均が長時間平均に等しいという事実を用い、 N 個の変数からなる 1 つシステムに対し [ノイズを用いたアルゴリズム] を適用し、システムがノイズレベル T での平衡状態に落ち着いたのを見はからって、その後の τ ステップまでの出力 (s_1, s_2, \dots, s_N) をサンプリングし、 $\bar{A} = (1/\tau) \sum_{t=1}^{\tau} A(s_1(t), s_2(t), \dots, s_N(t))$ でもって物理量 A の期待値を算出するとよい。