

2007年度修士論文

シナプスが時間変化する
ニューラルネットワークモデルの
統計力学的研究

奈良女子大学大学院 人間文化研究科 博士前期課程
物理学専攻 複雑系の物理学研究室

阿部 啓

目次

1	Introduction	3
1.1	ニューラルネットワーク	4
1.2	ニューロンの構造	4
1.3	ニューロンの情報処理	5
1.3.1	ニューロンを伝える信号	5
1.3.2	シナプスにおける信号伝達	6
1.4	ニューロンの数理モデル	7
1.5	シナプスの可塑性と Hebb 則	8
1.6	ニューラルネットワークの種類	9
1.6.1	階層型ニューラルネットワーク	9
1.6.2	相互結合型ニューラルネットワーク	9
1.7	連想記憶	10
2	モデル	11
2.1	Hopfield model	11
2.1.1	$\frac{p}{N} \equiv \alpha = 0$ の場合 ([2])	15
2.1.2	$\alpha > 0$ の場合 ([2])	18
2.2	Partial Annealing	25
2.2.1	時間発展則	25
2.2.2	鞍点方程式	29
3	相転移温度	30
3.1	一次相転移	31
3.2	二次相転移	33
4	AT 線	36
4.1	Hopfield Attractor	37
4.1.1	ヘシアン固有値 (1)	39
4.1.2	ヘシアン固有値 (2)	42
4.1.3	ヘシアン固有値 (3)	44
4.2	Mixed state ($p = 3$)	46
4.2.1	ヘシアン固有値 (1)	49
4.2.2	ヘシアン固有値 (2)	53
4.2.3	ヘシアン固有値 (3)	56
5	数値結果	58
5.1	数値計算の方法	58
5.2	Hopfield model と Partial Annealing との理論結果の比較	60
5.3	理論とシミュレーションの比較	62

5.3.1	Hopfield Attractor	62
5.3.2	Mixed state	63
5.3.3	オーダーパラメーター q の理論とシミュレーションの比較	64
5.4	相図	66
5.4.1	$T-\epsilon$	66
5.4.2	$T-\tilde{T}$	70
5.5	Partial Annealing によって生成される相互作用について	72
6	考察	74
7	謝辞	75
8	Appendix	76
8.1	Hopfield model	76
8.1.1	式 (1) は式 (2) を減少させることを確かめる	76
8.1.2	式 (19) から式 (23),(24) を導く	76
8.1.3	鞍点法	78
8.1.4	式 (35) を導く	78
8.1.5	式 (37) を導く	79
8.1.6	式 (42) から式 (44) を導く	79
8.2	Partial Annealing	83
8.2.1	ランジュバン方程式を書き直す	83
8.2.2	式 (56) を導く	83
8.2.3	\tilde{Z}_β の各項の計算	84
8.2.4	\tilde{Z}_β の計算	85
8.2.5	鞍点方程式を導く	87
8.3	相転移温度	88
8.3.1	微分を求める	88
8.4	AT 線	92
8.4.1	式 (104)~(106) を導く	92
8.4.2	式 (107)~(113) を導く	93
8.4.3	式 (138) と式 (140) が等しいことを示す	93
8.4.4	固有方程式の下半分すべての行で式 (159) が成り立つ	94
8.4.5	λ_3 の独立なベクトルの数 ${}_nC_2 - n$ を示す	95
8.4.6	式 (206) と式 (207) が等しいことを示す	97
8.4.7	式 (209) と式 (210) が等しいことを示す	98

1 Introduction

脳は、多数(約 10^{10} 個)の神経細胞(ニューロン)からなり、それらがつながってネットワークを構成している(図1)。それによって記憶想起などの脳の高次機能が実現している。脳のこのような機能を解析するために提案されたものがニューラルネットワークモデルである。ニューラルネットワークは、比較的単純な要素に相互作用を与えて組み合わせたもので、これによって、脳内でおこなわれている様々な働きの再現が試みられている。ニューラルネットワークについては、記憶、学習等様々な機能について、これまでに数々の理論的研究がなされている。

ニューラルネットワークモデルでは、通常、ニューロンが時間変化し、相互作用(シナプス結合荷重)は一定と考えるが、本研究では、ニューロンとともにシナプス結合荷重もゆっくり変化するモデル(Partial Annealing)を、統計力学的手法を用いて解析し、記憶状態の安定性や想起過程の変化等について述べる。

まずはじめに、ニューラルネットワークの基本要素となっているニューロンの構造や機能について述べる。また、ニューロンの観察をもとに、ニューロンの機能をモデル化する方法についてまとめる。さらに、ニューラルネットワークの種類を簡単にまとめる。

次に、モデルについて述べる。本研究の対象となる Hopfield model についてまとめ、その後 Partial Annealing について解説する。

さらに、Partial Annealing の相転移温度について、1次相転移、2次相転移それぞれについて議論する。

続いて、解の安定性を調べるため AT 線の理論について、アトラクタごとにまとめる。

また、定常状態の理論的、および数値的なシミュレーション結果の比較をおこなう。Hopfield model に Partial Annealing をおこなって、学習の効果 ϵ を増やすと、安定領域や想起過程はどのように変化するかを議論する。また、相図を描き、 ϵ を増やすことによって相転移の種類が変化すること、記憶相、非記憶相の存在領域の変化について述べる。さらに、Partial Annealing によって生成される相互作用の特性について議論する。

最後に、考察をおこなう。

また、Appendix では、本文中に証明なしで記した式の導出と、詳細な計算を記す。

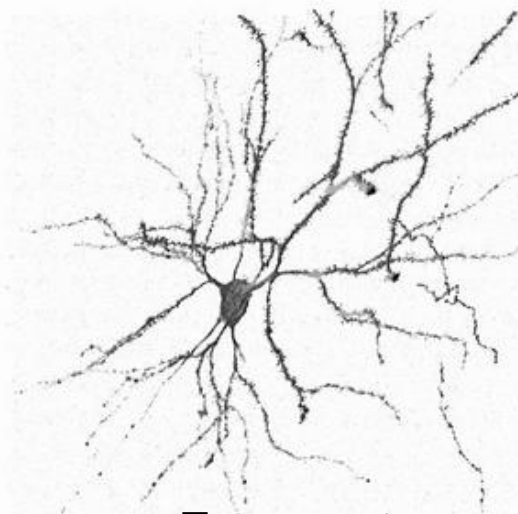


図 1: ニューロン。

1.1 ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークの考え方は、神経生理学からスタートしたものであり、ニューロン(神経細胞)の観察からモデルが構築され、ニューラルネットワーク研究が開花した。ニューラルネットワークの日本語訳は、神経回路網であり、ニューラルネットワークは文字どおり、神経細胞が網状につながったシステムのことである [1]。人間の脳にはおよそ 10^{10} 個ものニューロンがあり、このニューロンが結合してできた大規模システム(ニューラルネットワーク)によって我々は様々な情報処理をおこなっている。

ここでは、まず、生物の情報処理をおこなう基本要素としてのニューロンを取り上げ、その構造や機能についてまとめ、ニューロンの機能をモデル化する方法について述べる [2][3]。

1.2 ニューロンの構造

我々の脳を構成するニューロンは、その大きさ・形は多種多様であるが、その生理学的構造はほぼ同じであると考えられている。

ニューロンは、図2に模式的に示した構造の細胞であり、全体がひとつづきの細胞膜で囲まれる単一の細胞である。ニューロンは、細胞体と呼ばれる本体の部分、本体から突き出した多数の突起からなる樹状突起、他の細胞へつながる軸索からなる。本体中央には核がある。軸索は長いものでは一メートル近くに達し、十から数百に分岐している。その末端は、ふくらんで他のニューロンの樹状突起や細胞体そのものについている。この軸索と他のニューロンとの結合部分をシナプスという。ひとつの細胞は、シナプスを介して数多くの細胞につながっている。

ここで、それぞれの機能と信号の伝わりかたについて述べると、まず、樹状突起または細胞体で入力信号を受け、細胞体で信号処理し、軸索を通して出力信号を出している。そして、ひとつの細胞の出力は、シナプスを介して他の細胞に伝えられる。1つの細胞が受けるシナプス結合の数は、数百から数万に及び、これらすべてのシナプス結合がニューロン間の信号の伝達に寄与している。すなわち、樹状突起は信号入力装置であり、シナプスで他のニューロンからの信号を入力し、軸索は信号出力装置であるといえる。

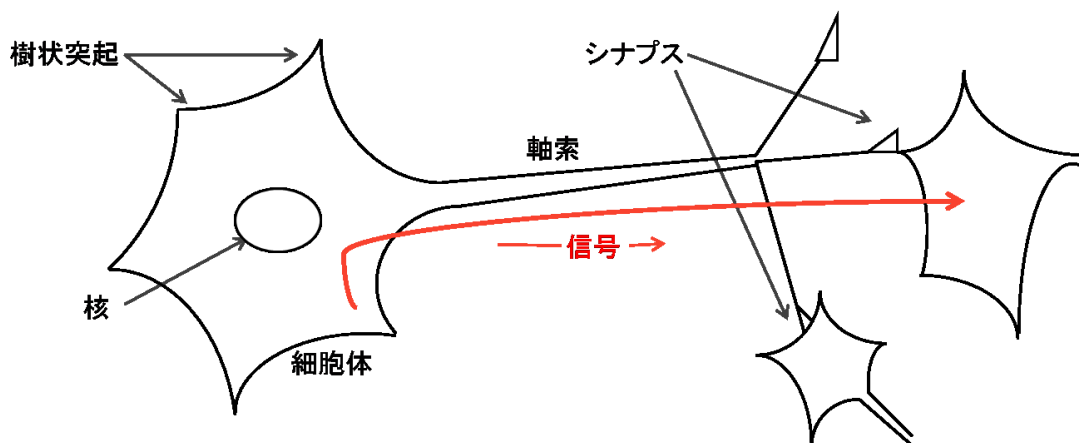


図 2: ニューロンの構造。

1.3 ニューロンの情報処理

1.3.1 ニューロンを伝わる信号

前節で述べてきた，伝わる”信号”とは何なのかについてここでまとめる．

ニューロンの中を流れる信号は細胞の外部に対する内部の電位差 (膜電位) としてとらえることができる．すなわち，細胞は細胞膜で外部と隔てられているため，細胞内部は外部と異なった電位をもつことができるのである．

入力信号のないときの膜電位を静止膜電位といい，これは通常約 -70mV に保たれている．入力信号がシナプスを介して細胞に達すると，その影響により膜電位が変化する．そして膜電位が静止膜電位よりも 15mV ほど高くなって，約 -55mV (これをニューロンの閾値という) を越えると，その細胞は活性化し，膜電位が静止膜電位に比べてほぼ 1ms の間 100mV ほど自発的に高くなり，その後，膜電位は急激に落ち込んでもとの値に戻る (図 3)．このときニューロンは興奮 (または発火) したという．また，正になったときの膜電位を活動電位という．

興奮の結果，電気パルスが発生し，このパルスが軸索を伝わって他の細胞に伝えられていく．しかし，膜電位の上昇が閾値を越えない限り，細胞は興奮せず，軸索には何の出力信号も出ない．

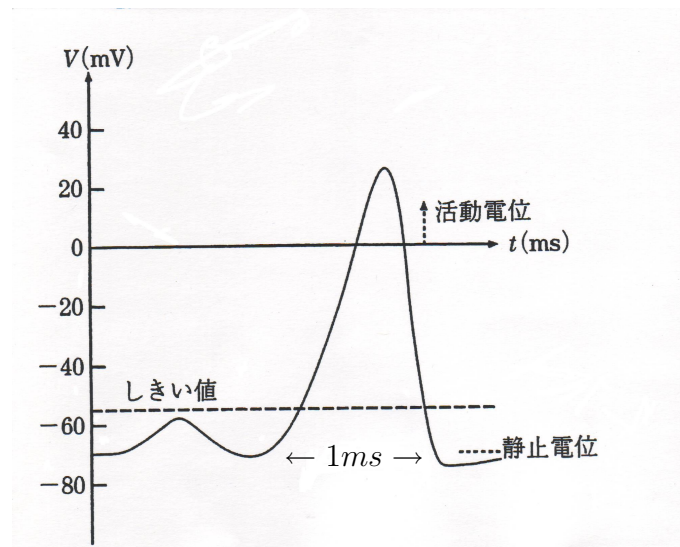


図 3: 静止電位と活動電位．([1] を改変)

細胞膜で一度パルスが発生すると，その直後にはいくら膜電位が高くなって，新たなパルスが発生することができない．このようなパルス発生直後でニューロンが興奮できなくなる期間を絶対不応期といい，この間ニューロンの閾値は ∞ となっている．

また，絶対不応期が終わっても，しばらくの間は，興奮の閾値は通常よりも高くなり，神経は興奮しにくくなる．この期間を相対不応期という．一度高くなった閾値は，この期間に徐々にもとの値に戻っていき，不応期を過ぎると，ふたたび興奮前の状態へ戻る．ちなみに，絶対不応期は 1ms 程度，相対不応期は数 ms 程度である．

1.3.2 シナプスにおける信号伝達

ニューロンの興奮によって生成された電気パルスは、軸索を伝わって、他のニューロンとの結合点であるシナプスへ到着する。ここで、シナプスでの信号伝達のしくみをもう少し詳しく見てみることにする。

シナプスにおいては、出力側神経細胞(シナプス前神経細胞)の軸索末端は、入力側神経細胞(シナプス後神経細胞)の樹状突起または細胞体に、非常に狭い間隔で向かい合っている(図4)。

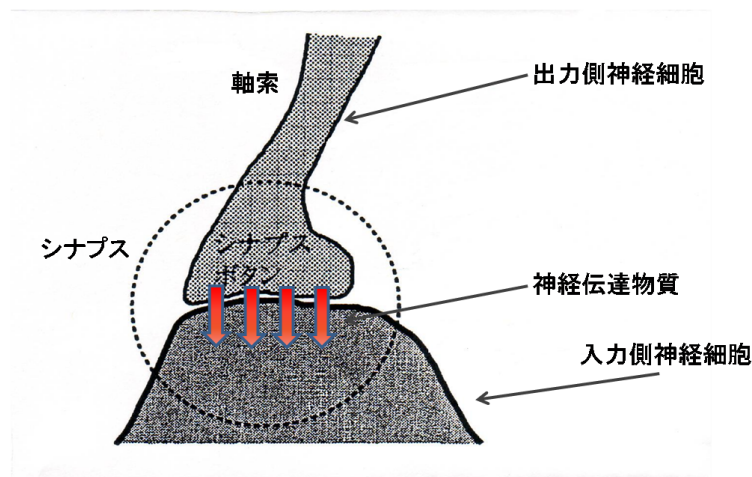


図4: シナプス結合。

この軸索の末端部分をシナプスボタンという。軸索を伝わってきた電気パルスがシナプスボタンまで達し、その結果シナプスボタンで電位が上昇すると、シナプスボタンにあるシナプス小胞の中から化学物質(神経伝達物質)が放出される。神経伝達物質は、入力側神経細胞の細胞膜表面にある受容体に結合して、細胞膜のイオン透過性を変化させる。すると、イオンが細胞膜を透過し、入力側神経細胞の膜電位の変動が起きる。

シナプスには性質上2つのタイプがある。1つは、入力側の細胞の膜電位を高める(興奮しやすくする)伝達物質を放出する興奮性シナプスで、もう1つは膜電位を低める(興奮しにくくする)抑制性シナプスである。ほとんどの入力側神経細胞は興奮性か抑制性かのどちらかの作用だけを出力側神経細胞に引き起こす。したがって、ニューロン自身を興奮性のものと抑制性のものとに分類することができるが(Daleの法則)、どちらとももつものもある。シナプスが興奮性になるか、抑制性になるかは神経伝達物質の種類によって決まっている。

このように、信号は、電気パルスの形で軸索を伝わり、シナプスで化学信号になり、ふたたび電気信号に戻って入力側神経細胞に伝わっていくのである。

以上のようなニューロンの働きを単純化すれば、ニューロンは、多数の入力を受けてその総和を計算し、閾値と比較して次の瞬間に興奮するかどうかを決定する、多入力-出力の非線形素子であるということができる。

1.4 ニューロンの数理モデル

ここでは、これまで見てきたニューロンの機能のモデルを導入することを考える。ニューロンのすべてをモデル化することは不可能なので、どの性質をモデル化するかを明確にする必要がある。考えられる立場としては、次の二つがある。

- a. ひとつのニューロンの電気パルスの発生、その伝搬機構などの性質をモデル化するミクロな立場
- b. ニューロンの内部のミクロ的性質にとらわれずに、多数のニューロンの集団的性質をモデル化するマクロな立場

a のミクロな立場としては、軸索の膜電位変化を記述するホッジキン-ハックスレーの方程式がある。軸索で観察される現象は、この方程式でほぼ完璧に記述できると言われており、ホッジキンとハックスレーはこの研究によりノーベル賞を受賞している。

しかしここでは、全体としてどのような機能をもつのかを知るとというのが研究の方向になるので、b のマクロな立場でのモデル化について述べる。

これまで見てきたように、各々のニューロンは、他のニューロンから受け取った信号を重み付きの荷重和という形で総和し、その結果興奮するかしらないかを決めている。この性質をもとにして、ニューロンの機能を単純化した数理モデルをつくることができる。よって、モデル化するとき最も大きなポイントとなる部分は、

- シナプスを介して他の多数のニューロンからの入力を受け取り、各入力信号の重み付きの和が閾値を越えると自らも信号を出すようになる。

ということである。

ニューロンを多入力-出力の情報処理素子とみれば、図 5 に示すように、 N 個の入力信号 x_1, x_2, \dots, x_N を受け取り、それをもとに演算をして出力 y を答えとして出す素子である。

ここで、ニューロン i からニューロン j へのシナプス結合の強さ、すなわちシナプス結合荷重を w_{ij} とする。 $w_{ij} > 0$ なら j 番目のニューロンは興奮性であり、 $w_{ij} < 0$ なら j 番目のニューロンは抑制性であるということになる。また、 θ は興奮の閾値である。

時刻 t での i 番目のニューロンの膜電位 $u_i(t)$ は、入力信号全体の影響は重みつきで足しあわされて次のように表せる。

$$u_i(t) = \sum_{j=1}^N w_{ij} x_j(t).$$

今、興奮の閾値 θ をさしひいたものを、

$$u = \sum_{j=1}^N w_{ij} x_j - \theta,$$

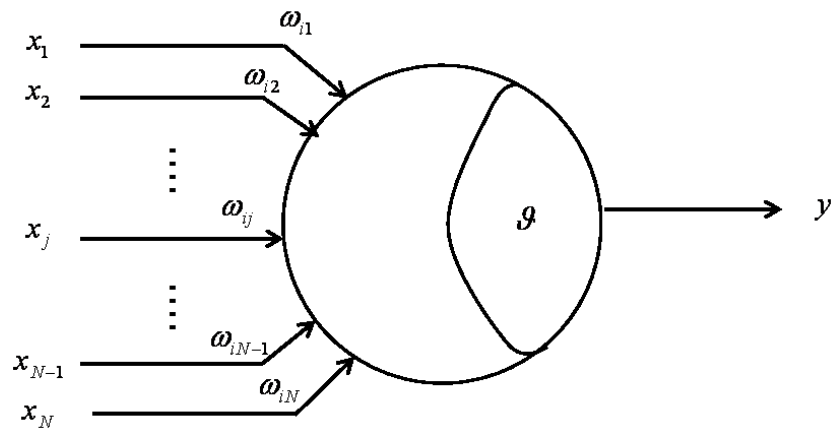


図 5: i 番目のニューロンの様子を模式的に示したもの。

とし，出力関数 f は，

$$f(u) = \begin{cases} 1 & (u > 0 \text{ のとき}) \\ 0 & (u \leq 0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

で表されるステップ関数とする．すなわち，ニューロンの状態は大きく分けると，興奮しているかいないかの 2 種類であり，興奮していると 1，興奮していないと，0 とするものとする．すると出力値 y は，

$$y = f\left(\sum_{i=1}^N w_{ij}x_i - \theta\right),$$

で与えられる．

このモデルがニューラルネットワークの研究の基礎となっている．

1.5 シナプスの可塑性と Hebb 則

シナプス結合荷重が入力との関係で変化できることをシナプスの可塑性という．すなわち，新しいシナプスの形成や，シナプスの消失を含め，シナプス結合の強さが変化するという性質である．ニューロン間の信号の伝わりやすさを決めるシナプス結合が，より強くなると学習が可能になると考えられ，このシナプス結合荷重の変化の規則を具体的に表したのが Hebb 則である．

Hebb 則は，脳での記憶の素過程として，心理学者の D. O. Hebb によって提案されたものである [4]．具体的には，あるニューロン A が興奮したとき，そこに刺激を与えたニューロン B からニューロン A へのシナプス結合荷重 w_{AB} が強化され，刺激が伝わりやすくなるというものである．

Hebb 則は，ニューラルネットワークのモデルの基本概念であり，ほとんどのニューラルネットワークの数理モデルで，学習則として Hebb 則を変形したものが用いられている．

本研究でも，この Hebb 則を用いる．

1.6 ニューラルネットワークの種類

ニューラルネットワークは、その形態によって、階層型ニューラルネットワークと相互結合型ニューラルネットワークの2種類に大きく分けることができる。各ニューラルネットワークの模式図を図6に示す。以下ではそれぞれについて簡単にまとめる。

1.6.1 階層型ニューラルネットワーク

階層型ニューラルネットワーク (layered neural network, 図6左) は、入力層と出力層の間に1つ以上の中間層と呼ばれる中間的な層をもっている。外部からの入力を入力層のニューロンが受け、中間層は入力層または上流の中間層のニューロンから入力を受けて下流の中間層または出力層のニューロンに出力を出し、さらに出力層のニューロンが外部に出力を出す仕組みになっている。情報の流れは一方方向である。

この形態は、パターン認識のため、心理学者 F.Rosenblatt により提案されたパーセプトロン (perceptron) がもととなっている [5][6]。また、この階層型ニューラルネットワークは、後に D.E.Rumelhart らにより誤差逆伝搬 (back propagation) 法へと発展した [7]。さらに、出力を入力層に戻す階層型ニューラルネットワークが提案され、パターンの系列を記憶させる等のために利用されている。視覚情報処理に利用されているコグニトロン (Cognitron) がこの構造をもっている [8]。

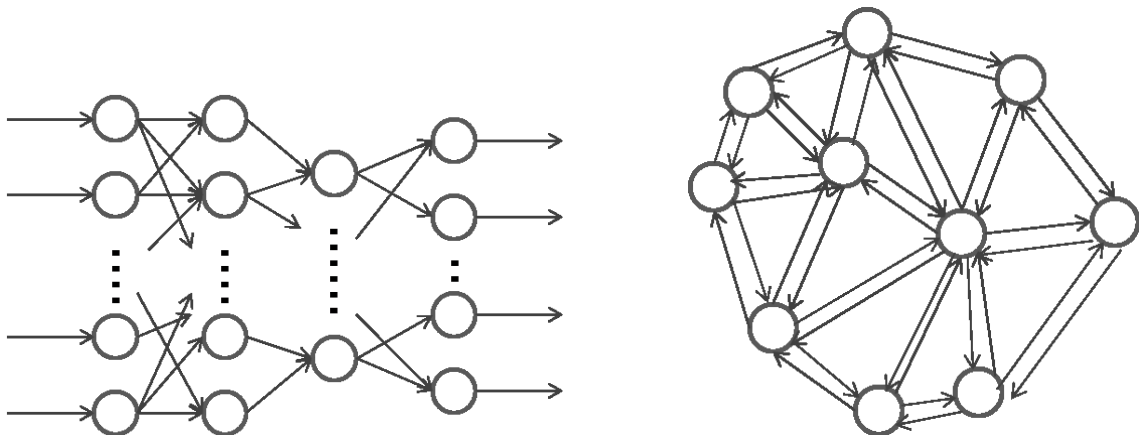


図6: ニューラルネットワークの形態による分類。左図は階層型ニューラルネットワーク。右図は相互結合型ニューラルネットワーク。

1.6.2 相互結合型ニューラルネットワーク

ニューロンがたくさん集まって、図6右のようなネットワークを組んでいるものを相互結合型ニューラルネットワーク (Interconnected neural network) という。各ニューロンは、非常に多くの他のニューロンから入力を受けていることになる。そして、すべてのニューロンが入力を受け、出力を出している。

物理学者 J.J.Hopfield により電子スピンに関する物理学の知見が相互結合型ニューラルネットワークに導入され [9]，組合せ最適化問題の解法として注目された [10]．このニューラルネットワークは，エネルギーを小さくするように自ら状態変化する．この Hopfield model に確率的手法を導入して情報処理能力を向上させたボルツマンマシン (Boltzmann machine) などもある [11][12]．

また，相互結合型ニューラルネットワークは，記憶装置として動作する．

1.7 連想記憶

我々は，自分の脳に蓄積されている情報を，連想によって思い出している．これまで，この連想記憶を実現するニューラルネットワークの研究がおこなわれてきた．連想記憶 (associative memory) とは，複数ある入力パターンのうちひとつを入力したとき，対応する出力パターンを出力するように，入出力パターンを記憶することである．

入力パターンと出力パターンが同じベクトル空間となる連想記憶を自己相関連想記憶という．例えば，ワープロの文字や数字を記憶し，手書きの文字や数字を入力したとき，それが記憶しているもののどれに一番近いかを答えるようなものである．

一方，入力パターンと出力パターンが異なるベクトル空間となるものを相互相関連想記憶という．例えば「チョコレート」から「あまい」を連想するように，入力と出力の関係を記憶しておいて，与えられた入力に対してふさわしい出力を出すことに対応する．

次章では，この自己相関連想記憶に適用された Hopfield model について述べる．

2 モデル

ここでは、本研究のもととなっているホップフィールドモデルと、本研究の本題であるパーソナルアニーリングについて述べる。

2.1 Hopfield model

1982年に、アメリカの物理学者 J. J. Hopfield が導入したニューラルネットワークのモデルでは、多数のニューロンで構成され、各ニューロンは他のすべてのニューロンから入力を受け、出力を出す [9]。この構造は、相互結合型ニューラルネットワークの代表例であり、図7のように図示される。

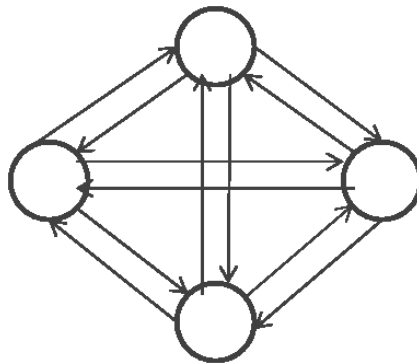


図 7: ホップフィールドニューラルネットワーク。

Hopfield model の特徴を以下に示す。

1. ニューラルネットワークにエネルギー関数を導入し、エネルギー関数の極小化に向けてニューラルネットワークの各ニューロンの内部状態変化を起こさせる。
2. ニューロン間のシナプス結合荷重が対称である。つまり、 j 番目のニューロンから i 番目のニューロンへのシナプス結合の強さ (シナプス結合荷重) を J_{ij} 、 i 番目のニューロンから j 番目のニューロンへのシナプス結合を J_{ji} とすると、次式が成り立つ。

$$J_{ij} = J_{ji}.$$

3. ニューロン i から自分自身のニューロン i への入力は 0 である。

$$J_{ii} = 0.$$

4. 各ニューロンの内部状態変化が非同期的である。つまり、ある時刻においては、1つのニューロンのみが他のニューロンからの入力を受けて内部状態変化し、そしてその内部状態に応じた出力を出す。

i 番目のニューロン S_i が興奮している状態を $S_i = 1$ に対応させ、興奮していない状態を $S_i = -1$ に対応させる。非同期更新では、まず N 個のニューロンからランダムにニューロンを1つ選ぶ。

i 番目のニューロンへの入力信号の総和 h_i は、

$$h_i = \sum_j J_{ij} S_j,$$

とかけ、また、 i 番目のニューロンの状態は以下のように更新される。ここで閾値 θ_i は0とした。

$$S_i = \text{sgn}(h_i) = \text{sgn}\left(\sum_j J_{ij} S_j\right). \quad (1)$$

ここで $\text{sgn}(x)$ は、 $x > 0$ のときは $+1$ を出力し、 $x < 0$ のとき -1 を出力する符号関数である。ここでハミルトニアン (エネルギー関数) を次のように定義する。

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j. \quad (2)$$

和は、 $i = j$ を除くすべての i と j の組合せについてとる。 i と j の間の結合が対称 ($J_{ij} = J_{ji}$) のとき、式 (1) は式 (2) のエネルギーを減少させる。(Appendix 8.1.1 参照)

エネルギーが減少する様子を絵で描くと、図 8 のようになる。任意の初期状態から開始して式 (1) によって非同期更新により状態更新を繰り返していくと、エネルギーは単調に減少し、初期状態に最も近い極小に達する。その後は、いくら式 (1) を適用しても変化しない。

エネルギー

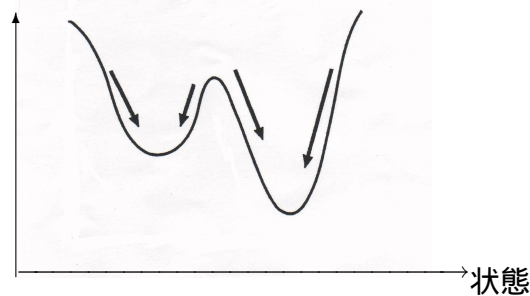


図 8: 状態の関数としてのエネルギー。

極小値はアトラクタを表し、系はアトラクタの1つに向かって移動し、平衡状態に陥る。連想記憶モデルでは、この平衡状態に記憶パターンを埋め込むことを考える。

結合荷重 J_{ij} は Hebb 則によって次のように決められる。

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu. \quad (3)$$

ここで ξ_i^μ は、 μ 番目のパターンにおける i 番目のニューロンの状態を表し、 $\xi_i^\mu = \pm 1$ をとる。Hebb 則では、まず個々の記憶パターンの自己相関を計算し、それらを足し合わせることで結

合荷重を求める．ここで p は，モデルが記憶するパターンの個数であり， N はモデルを構成するニューロン数である．1ニューロンあたりの記憶パターン数は，

$$\alpha = \frac{p}{N},$$

で表され，これを記憶率と呼ぶ．

さて，エネルギー関数 (2) が単調に減少して極小に達すると動きが止まるというのは，絶対零度の物理過程に相当している．そこで，温度 T が 0 でないとうなるのかを考えてみる．統計力学では，温度が 0 でないとエネルギーは必ずしも単調に減少せず，ある確率で増加するようになる．この場合，エネルギー E だけでなくエントロピー S (系のランダムさの度合) も考慮した自由エネルギー $F = E - TS$ が平衡状態で最小値をとる．

ニューラルネットワークの研究の動機として，エネルギーの増加を許すことにはどのような意味があるのだろうか．シナプス部分での信号の伝達はとても複雑であり，同じ信号が軸索から到達したとしても，常に同じ効果が信号を受ける側のニューロンに現れるとは限らない．この信号の不確実性が確率的な動作によって表現され，ときにはエネルギー関数の値の増加をもたらすと考える．そこで，式 (1) に形式的な温度 T により表される確率的なパラメーター

$$\beta = \frac{1}{T}, \quad (4)$$

を導入し， $S_i = \pm 1$ となる確率を以下のように与える．

$$\begin{aligned} \text{Prob}[S_i = \pm 1] &= \frac{1}{1 + e^{\mp 2\beta h_i}} \\ &= \frac{e^{\beta h_i}}{e^{\beta h_i} + e^{\mp \beta h_i}} \\ &= \frac{1 \pm \tanh(\beta h_i)}{2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Hopfield model の平衡状態を統計力学的に議論する． $\text{Prob}[S_i = +1]$ は $\beta \rightarrow \infty$ の極限では，ステップ関数 ($h_i > 0$ で 1, $h_i < 0$ で 0) になる． $\text{Prob}[S_i = +1]$ は次の瞬間に，ニューロンが興奮する確率だから，入力信号 h_i が正なら必ず興奮し，負なら必ず静止することになる．こうして式 (5) は $\beta \rightarrow \infty (T = 0)$ では式 (1) に帰着する．

このような遷移確率をもつ系の平衡状態では，特定の S が実現する確率は，エネルギー関数 (2) から求められるボルツマン因子 $\exp(\beta H)$ に比例することが次のようにして分かる．時刻 t にニューロンの状態が $S = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ である確率 $P_t(S)$ の時間変化を調べる．まず， k 番目のニューロンの状態を反転させる作用素 F_k を次のように定義する．

$$\begin{aligned} F_k S &= F_k(S_1, S_2, \dots, S_k, \dots, S_N) \\ &= (S_1, S_2, \dots, -S_k, \dots, S_N). \end{aligned}$$

S から $F_k S$ への単位時間あたりの遷移確率を，

$$w_k(S) = \frac{1 - S_k \tanh(\beta h_k(S))}{2}, \quad (6)$$

とする．時刻 t にニューロンの状態が S である確率 $P_t(S)$ は，マスター方程式，

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(S) = \sum_{k=1}^N w_k(F_k S) P_t(F_k S) - \sum_{k=1}^N w_k(S) P_t(S), \quad (7)$$

に従って時間変化する．

右辺第1項は， k 番目のニューロンが現在と逆の状態から現在の状態に変化すること ($-S_k \rightarrow S_k$) による確率 $P_t(S)$ の増加を表している．一方，右辺第2項は，現在の状態のうち， k 番目のニューロンが反転した状態への変化 ($S_k \rightarrow -S_k$) による確率の減少を表す．平衡状態では P_t は時間変化しないので，左辺は0であるので，

$$0 = \sum_{k=1}^N \left\{ w_k(F_k S) P_e(F_k S) - w_k(S) P_e(S) \right\}, \quad (8)$$

となる．また，各状態でつりあいが成り立つという詳細均合の原理より，次式を得る．

$$0 = w_k(F_k S) P_e(F_k S) - w_k(S) P_e(S). \quad (9)$$

ここで P_e は平衡状態での確率分布である．よって，式 (9) より，

$$\frac{P_e(F_k S)}{P_e(S)} = \frac{w_k(S)}{w_k(F_k S)}, \quad (10)$$

が成り立たなければならない．式 (10) の右辺は，

$$\begin{aligned} \frac{w_k(S)}{w_k(F_k S)} &= \frac{1 - S_k \tanh(\beta h_k(S))}{1 - (-S_k) \tanh(\beta h_k(F_k S))} \\ &= \frac{1 - S_k \tanh(\beta h_k)}{1 + S_k \tanh(\beta h_k)} \\ &= \frac{e^{-\beta h_k S_k}}{e^{\beta h_k S_k}} \\ &= e^{-2\beta h_k S_k}, \end{aligned} \quad (11)$$

となる．ここで， ΔH を F_k の作用による H の変化を表すとすると，

$$\begin{aligned} \Delta H &= H(F_k S) - H(S) \\ &= -(-S_k - S_k) h_k \\ &= 2S_k h_k, \end{aligned} \quad (12)$$

となるので，式 (10) の左辺は，

$$\frac{P_e(F_k S)}{P_e(S)} = \exp(-\beta \Delta H) = e^{-2\beta S_k h_k}, \quad (13)$$

となり，式 (10) が成立することが分かる．すなわち，平衡状態の性質を調べるにはボルツマン因子を出発点にして統計力学を適用すればよいことが明らかになった．

1つのスピンは、2状態をとるので N 個のスピン全体では 2^N 個の状態をとる。これらの状態に1から 2^N までの順番をふり、それを α で表す。平衡状態において状態 α をとる確率 $P(\alpha)$ は、ハミルトニアンが与えられたとき、

$$P(\alpha) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta H(\alpha)], \quad (14)$$

$$Z = \sum_{\alpha} \exp[-\beta H(\alpha)], \quad (15)$$

となる。式(15)は分配関数と呼ばれ、系の自由エネルギー F は分配関数から決定することができる。

$$F = -T \log Z. \quad (16)$$

系の平衡状態は自由エネルギーの極小値で与えられる。ここでは、ボルツマン定数 k_B は $k_B = 1$ としている。

2.1.1 $\frac{p}{N} \equiv \alpha = 0$ の場合 ([2])

ここでは、記憶パターン数 p がニューロン数 N に対して有限の数である場合 ($\alpha = 0$) の Hopfield model の平衡状態について述べる。

まず、分配関数は、

$$Z = \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{-\beta H}, \quad (17)$$

であるが、ここでは $\text{Tr}_{\mathbf{S}}$ は次のようなものである。

$$\text{Tr}_{\mathbf{S}} = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} .$$

また、ハミルトニアン H は式(3)の結合荷重を用い、また、式(2)を少し拡張して、

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{N} \sum_{\mu} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu} S_i S_j - \sum_{\mu} h^{\mu} \sum_i \xi_i^{\mu} S_i \\ &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mu} \left(\sum_i \xi_i^{\mu} S_i \right)^2 + \frac{p}{2} - \sum_{\mu} h^{\mu} \sum_i \xi_i^{\mu} S_i, \end{aligned} \quad (18)$$

とする。よって、式(18)を式(17)に代入すると、

$$Z = e^{-\frac{\beta p}{2}} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left[\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu} \left(\sum_i S_i \xi_i^{\mu} \right)^2 + \beta \sum_{\mu} h^{\mu} \sum_i \xi_i^{\mu} S_i \right], \quad (19)$$

となる。ここでハーバード・ストラトノヴィチ変換を用い、

$$\mathbf{m} = (m^1, m^2, \dots, m^p), \quad (20)$$

$$\mathbf{h} = (h^1, h^2, \dots, h^p), \quad (21)$$

$$\boldsymbol{\xi}_i = (\xi_i^1, \xi_i^2, \dots, \xi_i^p), \quad (22)$$

とすると,

$$Z = \left(\frac{\beta N}{2\pi}\right)^{\frac{p}{2}} \int d\mathbf{m} e^{-\beta N f(\beta, \mathbf{m})}, \quad (23)$$

$$f(\beta, \mathbf{m}) = \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{m}^2 - \frac{1}{\beta N} \sum_i \log(2 \cosh[\beta(\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i]), \quad (24)$$

となる．式 (19) から式 (23) の詳細な計算は Appendix8.1.2 参照．

$N \rightarrow \infty$ の極限において (N は非常に大きな数だから, 理論的に無限大になる極限を考えてもさほど大きな誤差は生じない), 式 (23) の積分は鞍点法 (saddle point method) で求めることができる．(鞍点法については Appendix8.1.3 参照．)

$$-\frac{1}{N} \ln Z = \beta \min_{\mathbf{m}} f(\beta, \mathbf{m}).$$

1 ニューロンあたりの自由エネルギーは, 式 (16) より,

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{N} \frac{1}{\beta} \ln Z,$$

であるので, これらを比較すると,

$$\frac{F}{N} = \min_{\mathbf{m}} f(\beta, \mathbf{m}),$$

となる．すなわち, $\min_{\mathbf{m}} f(\beta, \mathbf{m})$ は 1 ニューロンあたりの自由エネルギーを与える．式 (24) に出てくる m_μ は, 積分 (23) の鞍点でないといけないので,

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial f}{\partial m^\mu} &= m^\mu - \frac{1}{\beta N} \sum_i \frac{2 \sinh[\beta(\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i] \beta \xi_i^\mu}{2 \cosh[\beta(\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i]} \\ &= m^\mu - \frac{1}{N} \sum_i \xi_i^\mu \tanh[\beta(\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i], \\ \therefore m^\mu &= \frac{1}{N} \sum_i \xi_i^\mu \tanh[\beta(\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i]. \end{aligned} \quad (25)$$

$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N$ はニューロン i に関して独立な確率変数 ξ_i^μ に関する平均操作だから, 自己平均性 (self-averaging) を用いると, 鞍点方程式は次のようになる．

$$m^\mu = \langle\langle \xi^\mu \tanh[\beta(\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}] \rangle\rangle. \quad (26)$$

ここで $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ はパターン $\xi^1 \dots \xi^p$ についての平均を表す．また, m_μ はニューロンの状態と μ 番目の埋め込みパターンとのオーバーラップを表している．

$$m_\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \xi_i^\mu. \quad (27)$$

μ 番目のパターンを完全に思い出していれば、全ての i で $S_i = \xi_i^\mu$ だから $m_\mu = 1$, S_i と ξ_i^μ の間に相関がなければ、 $S_i \xi_i^\mu$ が 1 をとる確率と -1 をとる確率が等しいから $m_\mu = 0$, 少しでも思い出していれば $m_\mu > 0$ になる. 従って、想起が可能かどうかを調べるためには、鞍点方程式 (26) が $m_\mu > 0$ という解を持つ条件を調べることが大切になる.

例えば、第 1 番目のパターンだけを思い出しているという解を、鞍点方程式 (26) がもつかどうかをしてみる. 1 番目についてだけ $m_1 \equiv m > 0$ で、その他の μ では $m_\mu = 0$ とすると、式 (26) は、

$$m = \tanh \beta m, \quad (28)$$

となる. ξ^μ は現れないので $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ は必要がない. 式 (28) は図 9 左から分かるように、 β が 1 より大きいときのみ 0 でない解をもつ. 式 (28) の正または 0 の解を $T (= \frac{1}{\beta})$ の関数として図示したのが図 9 右である. 温度 T が 1 以上 ($\beta < 1$) だと、 $m = 0$ しか解がない. すなわち、温度 T は、シナプスでの信号伝達の不確実性を表すので、このときはノイズが大きすぎて正しく想起できないのである.

T が 1 以下 ($\beta > 1$) になると、 m が 0 から連続的に立ち上がり、想起が可能になる. そして絶対零度 $T = 0$ では $m = 1$ になる. こうして、ノイズレベルが低い ($T < 1$) と、想起が可能であることが分かった.

これは、何番目のパターンをとってもあてはまることである. すなわち、どのパターンも想起可能である.

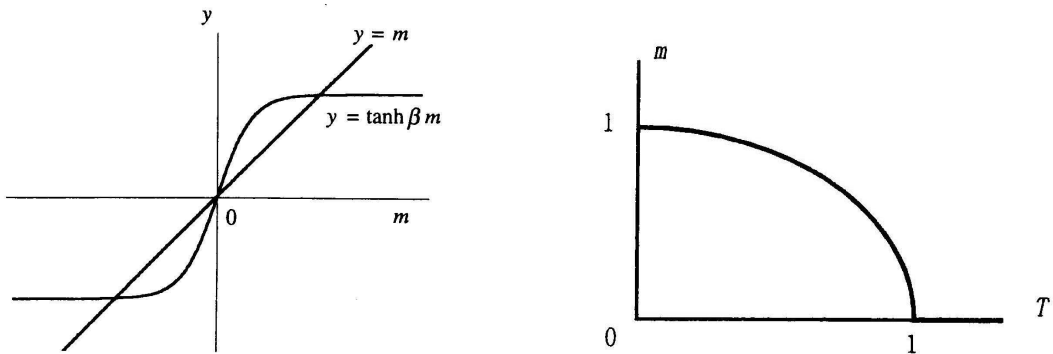


図 9: 左図は $m = \tanh \beta m$ は $\beta > 1$ のとき 0 でない解をもつ様子を表したもの.

右図は想起の程度を表すパラメータ m と温度 T の関係. ([13] より引用)

式 (26) は複数のパターンを同時に思い出しているような解 (例えば $m_1 = m_2 = m_3 \neq 0$) ももっていることが分かる. しかし、記憶させたパターン数 p が有限である限り、1 つだけ思い出している状態が自由エネルギーが低く 1 番安定である.

2.1.2 $\alpha > 0$ の場合 ([2])

ここでは、記憶パターン数 $p = \alpha N, \alpha > 0$ の場合の平衡状態についてまとめる。

式 (23) の積分表示は、 p が N と共に大きくなると多重積分の積分変数の数が増えるため、鞍点法が適用できなくなる。式 (16) より、自由エネルギーのパターン ξ に関する平均は、

$$\langle\langle F \rangle\rangle = -T \langle\langle \log Z \rangle\rangle,$$

と表される。 $\log Z$ を直接計算することは非常に困難であるが、 Z の自然数べきの配位平均は比較的容易に実行することができることから、恒等式

$$\log Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n},$$

を用いる。同じパターンをもつ、レプリカと呼ばれる系を n 個用意して、それらの分配関数の積の配位平均をとる。これをレプリカ法 (replica method) という。この系のハミルトニアンと分配関数は、簡単のため $h_\mu = 0$ として

$$\begin{aligned} H_n &= \sum_{\rho=1}^n H\{S_i^\rho\} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\rho=1}^n \sum_{i,j} J_{ij} S_i^\rho S_j^\rho, \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} Z_n &= \text{Tr} \mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n e^{-\beta H_n} \\ &= \text{tr} \mathbf{S}^1 e^{-\beta H_n} \dots \text{tr} \mathbf{S}^n e^{-\beta H_n} \\ &= \left(\text{Tr} \mathbf{S} e^{-\beta H} \right)^n \\ &= Z^n, \end{aligned} \quad (30)$$

となるから、 Z のべきの配位平均は、

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= \exp\left(-\frac{\beta p n}{2}\right) \langle\langle \text{Tr} \mathbf{S} \prod_{\mu=1}^p \prod_{\rho=1}^n \int dm_\rho^\mu \left(\frac{\beta N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\beta}{2} N (m_\rho^\mu)^2 + \beta m_\rho^\mu \sum_i \xi_i^\mu S_i^\rho \right) \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (31)$$

p 個のうち、特定の s 個 ($\mu = 1, \dots, s$) については想起しているとして、 $m_\rho^\mu = \mathcal{O}(1)$ とおき、残り ($\mu > s$) は想起していないとして $m_\rho^\mu \ll 1$ とする。まず、 $\mu (> s)$ の部分について考える。式 (31) のパターン平均のうち、パターンは最後の項にしか含まれていないので、その部分を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle\langle \prod_{\rho} \exp\left(\beta m_\rho^\mu \sum_i \xi_i^\mu S_i^\rho\right) \rangle\rangle &= \prod_i \langle\langle \exp\left(\beta \xi_i^\mu \sum_{\rho} m_\rho^\mu S_i^\rho\right) \rangle\rangle \\ &= \prod_i \cosh\left(\beta \sum_{\rho} m_\rho^\mu S_i^\rho\right) \\ &= \exp\left[\sum_i \log \cosh\left(\beta \sum_{\rho} m_\rho^\mu S_i^\rho\right)\right]. \end{aligned} \quad (32)$$

$\log(\cosh(x)) = \log(1 + \frac{1}{2}x^2 + \dots) \simeq \frac{x^2}{2}$ ($x \ll 1$) を使って,

$$\begin{aligned} \exp \left[\sum_i \log \cosh \left(\beta \sum_\rho m_\rho^\mu S_i^\rho \right) \right] &\simeq \exp \left[\frac{1}{2} \sum_i \left(\beta \sum_\rho m_\rho^\mu S_i^\rho \right)^2 \right] \\ &= \exp \left(\frac{\beta^2}{2} \sum_{i\rho\sigma} m_\rho^\mu m_\sigma^\mu S_i^\rho S_i^\sigma \right), \end{aligned} \quad (33)$$

となる.

ここで, $n \times n$ 行列 $\tilde{\Lambda}_{\rho\sigma}$ を次のように定義すると,

$$\tilde{\Lambda}_{\rho\sigma} \equiv \delta_{\rho,\sigma} - \frac{\beta}{N} \sum_i S_i^\rho S_i^\sigma. \quad (34)$$

式 (31) の exponential の項は, $\mu > s$ について,

$$\begin{aligned} &\langle \langle \prod_\rho e^{-\frac{1}{2}\beta N(m_\rho^\mu)^2 + \beta m_\rho^\mu \sum_i \xi_i^\mu S_i^\rho} \rangle \rangle \\ &\equiv E = e^{-\frac{\beta N}{2} \sum_{\rho\sigma} \tilde{\Lambda}_{\rho\sigma} m_\rho^\mu m_\sigma^\mu}, \end{aligned} \quad (35)$$

とおくことができるから (Appendix8.1.4), n 次元のガウス積分,

$$\int dx_1 \cdots dx_n e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij} x_i x_j} = \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{|\det A|}},$$

を用いて,

$$\begin{aligned} \int \left[\prod_{\rho=1}^n dm_\rho^\mu \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right] E &= \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{n}{2}} \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{|\det \tilde{\Lambda}| (\beta N)^n}} \\ &= (\det \tilde{\Lambda})^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

となる.

$s < \mu$ の全ての寄与を考えると, $p - s \simeq p$ ($p \sim N$) として,

$$\begin{aligned} (\det \tilde{\Lambda})^{-\frac{(p-s)}{2}} &\simeq \exp \left[\log (\det \tilde{\Lambda})^{-\frac{p}{2}} \right] \\ &= \exp \left[-\frac{p}{2} \log (\det \tilde{\Lambda}) \right] \\ &= \exp \left[-\frac{p}{2} \log \prod_\rho \tilde{\lambda}_\rho \right] \\ &= \exp \left[-\frac{p}{2} \sum_\rho \log \tilde{\lambda}_\rho \right]. \end{aligned}$$

ここで $\tilde{\lambda}_\rho$ は $\tilde{\Lambda}$ の固有値である.

さらに $\Lambda_{\rho\sigma}$ を次のように定義する .

$$\Lambda_{\rho\sigma} \equiv (1 - \beta)\delta_{\rho\sigma} - \beta q_{\rho\sigma}. \quad (36)$$

ここで ,

$$q_{\rho\sigma} = \begin{cases} \frac{1}{N} \sum_i S_i^\rho S_i^\sigma & (\rho \neq \sigma) \\ 0 & (\rho = \sigma) \end{cases}$$

である . 従って , $\Lambda_{\rho\sigma} = \tilde{\Lambda}_{\rho\sigma}$ となる .

$\tilde{\Lambda}$ の固有値 $\tilde{\lambda}_\rho$ の関数を $G\{\tilde{\lambda}_\rho\}$ とすると ,

$$G\{\tilde{\lambda}_\rho\} = \int \left[\prod_{(\rho\sigma)} dq_{\rho\sigma} \delta\left(q_{\rho\sigma} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^\rho S_i^\sigma\right) \right] \times G\{\lambda_\rho\}.$$

ここで $\{\lambda_\rho\}$ は Λ の固有値である . また , $\prod_{(\rho\sigma)} dq_{\rho\sigma} = \prod_{\rho < \sigma} dq_{\rho\sigma}$ であり , 積は $\frac{n(n-1)}{2}$ 個の変数の積をとる .

デルタ関数について ,

$$\delta(x) = \int_{-1\infty}^{i\infty} \frac{d\tilde{y}}{2\pi i} e^{-\tilde{r}x}, \quad (37)$$

より (Appendix8.1.5 参照) ,

$$G\{\tilde{\lambda}_\rho\} \propto \int \left[\prod_{(\rho\sigma)} dq_{\rho\sigma} dr_{\rho\sigma} \exp\left(-N\alpha\beta^2 r_{\rho\sigma} q_{\rho\sigma} + \alpha\beta^2 r_{\rho\sigma} \sum_i S_i^\rho S_i^\sigma\right) \right] G\{\lambda_\rho\}.$$

ここでは , $\tilde{r}_{\rho\sigma} = N\alpha\beta^2 r_{\rho\sigma}$ とおきかえた .

$$G\{\lambda_\rho\} \equiv e^{-\frac{p}{2} \sum_\rho \log \tilde{\lambda}_\rho},$$

とおき , $\mu \leq s$ の部分も入れると , 式 (31) は ,

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &\propto e^{-\frac{\beta pn}{2}} \int \left(\prod_{\mu\rho} dm_\rho^\mu \left(\frac{\beta N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \right) \left(\prod_{(\rho\sigma)} dq_{\rho\sigma} dr_{\rho\sigma} \right) \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2} \beta N \sum_\rho \sum_{\mu=1}^s (m_\rho^\mu)^2 - \frac{\alpha N}{2} \sum_\rho \log \lambda_\rho - \frac{1}{2} N \alpha \beta^2 \sum_{\rho \neq \sigma} r_{\rho\sigma} q_{\rho\sigma} \right] \\ &\times \left\langle \left\langle \text{Tr} \mathbf{S} \exp \left(\beta \sum_{\rho=1}^n \sum_{\mu=1}^s m_\rho^\mu \sum_i \xi_i^\mu S_i^\rho + \frac{1}{2} \alpha \beta^2 \sum_{i, \rho \neq \sigma} r_{\rho\sigma} S_i^\rho S_i^\sigma \right) \right\rangle \right\rangle. \quad (38) \end{aligned}$$

下線部は $\mu = 1 \sim s$ であり , それ以外は $\mu = s+1 \sim p$ である . μ の和の部分は今 , $\mu = 1, \dots, s$ の和をあらわす .

最後の行に関して ,

$$\begin{aligned}
X &\equiv \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left(\sum_i H\{\xi_i, S_i\} \right). \\
&= \prod_i \text{Tr}_{S_i} \exp H\{\xi_i, S_i\} \\
&= \exp \left(\sum_i \log \text{Tr}_{S_i} \exp H\{\xi_i, S_i\} \right) \\
&= \exp \left(N \langle \langle \log \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp H\{\xi_i, S_i\} \rangle \rangle \right). \tag{39}
\end{aligned}$$

$H\{\xi_i, S_i\}$ は

$$H\{\xi_i^1, \dots, \xi_i^s, S_i^1, \dots, S_i^n\} = \beta \sum_{\rho\mu} m_\rho^\mu \xi_i^\mu S_i^\rho + \frac{\alpha\beta^2}{2} \sum_{\rho\neq\sigma} r_{\rho\sigma} S_i^\rho S_i^\sigma,$$

のことで , 最後の等式は自己平均性を用いて , i に依らない式となった .
よって $\langle \langle Z^n \rangle \rangle$ は次式のようになる .

$$\langle \langle Z^n \rangle \rangle \propto e^{-\frac{\beta p n}{2}} \int \left(\prod_{\mu\rho} dm_\rho^\mu \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \left(\prod dq_{\rho\sigma} dr_{\rho\sigma} \right) e^{-N\beta f(\{m_\rho^\mu, q_{\rho\sigma}, r_{\rho\sigma}\})}. \tag{40}$$

ここで ,

$$\begin{aligned}
f(\{m_\rho^\mu, q_{\rho\sigma}, r_{\rho\sigma}\}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\rho} (m_\rho^\mu)^2 + \frac{\alpha}{2\beta} \sum_{\rho} \log \lambda_\rho + \frac{1}{2} \alpha\beta \sum_{\rho\neq\sigma} r_{\rho\sigma} q_{\rho\sigma} \\
&\quad - \frac{1}{\beta} \left\langle \left\langle \log \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left(\beta \sum_{\mu\rho} m_\rho^\mu \xi^\mu S^\rho + \frac{1}{2} \alpha\beta^2 \sum_{\rho\neq\sigma} r_{\rho\sigma} S^\rho S^\sigma \right) \right\rangle \right\rangle, \tag{41}
\end{aligned}$$

である . 1ニューロンあたりの自由エネルギーを考えると ,

$$\begin{aligned}
\frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta N} \langle \langle \log Z \rangle \rangle &= -\frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\langle \langle Z^n \rangle \rangle - 1) \\
&= -\frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \langle \langle Z^n \rangle \rangle \\
&= -\frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{\beta p}{2} n - N\beta \min f(\{m_\rho^\mu, q_{\rho\sigma}, r_{\rho\sigma}\}) \right\} \\
&= \frac{\alpha}{2} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \min f(\{m_\rho^\mu, q_{\rho\sigma}, r_{\rho\sigma}\}). \tag{42}
\end{aligned}$$

ここで , レプリカ指標にオーダーパラメータが依存しない , というレプリカ対称性 ,

$$\begin{aligned}
m_\rho^\mu &= m^\mu \quad (\mu = 1, \dots, s), \\
q_{\rho\sigma} &= q, \\
r_{\rho\sigma} &= r,
\end{aligned}$$

を仮定すると、式 (41) は次のように書ける。

$$f(\mathbf{m}, q, r) = \frac{1}{2}n\mathbf{m}^2 + \frac{\alpha}{2\beta} \sum_{\rho} \log \lambda_{\rho} + \frac{1}{2}n(n-1)\alpha\beta r q + \frac{1}{2}n\alpha\beta r - \frac{1}{\beta} \left\langle \left\langle \log \text{Tr}_{\mathcal{S}} \exp \left[\beta \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} \sum_{\rho} S^{\rho} + \frac{1}{2} \alpha \beta^2 r \left(\sum_{\rho} S^{\rho} \right)^2 \right] \right\rangle \right\rangle. \quad (43)$$

ここで、 $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ は、パターン ξ^1, \dots, ξ^s についての平均を表す。また、 $\mathbf{m} = (m^1, \dots, m^s)$ 、 $\boldsymbol{\xi} = (\xi^1, \dots, \xi^s)$ である。

それぞれの計算をおこなうと (詳細は Appendix 8.1.6 参照)、最終的な 1 ニューロンあたりの自由エネルギーは次のように表される。

$$\frac{F}{N} = \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{m}^2 + \frac{\alpha}{2\beta} \left(\log [1 - \beta(1 - q)] - \frac{\beta q}{1 - \beta(1 - q)} \right) + \frac{1}{2}\alpha\beta r(1 - q) - \frac{1}{\beta} \left\langle \left\langle \log [2 \cosh \beta(\sqrt{\alpha r} z + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi})] \right\rangle \right\rangle. \quad (44)$$

よって、

$$\frac{\partial f}{\partial m^{\mu}} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial q} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial r} = 0,$$

から鞍点方程式は次式となる。

$$m^{\mu} = \langle \langle \xi^{\mu} \tanh \beta(\sqrt{\alpha r} z + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi}) \rangle \rangle \quad (\mu = 1, \dots, s), \quad (45)$$

$$q = \langle \langle \tanh^2 \beta(\sqrt{\alpha r} z + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi}) \rangle \rangle, \quad (46)$$

$$r = \frac{q}{[1 - \beta(1 - q)]^2}. \quad (47)$$

これらは、 $\alpha = 0$ のときの式 (26) より、はるかに複雑になる。状態を特徴付けるパラメータとして、 m に加えて次式によって定義される q と r の 2 つが必要となった。

$$q = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle^2, \quad r = \frac{1}{\alpha} \sum_{\mu > s} m^{\mu 2}.$$

q はスピングラスの秩序パラメータと呼ばれる量であり、各ニューロンの状態が固定しているかどうかの目安を与えるパラメータである。これに対して r は、思い出そうとしているパターン以外のパターンがネットワークの状態にどれだけの影響を与えるかを示す量である。

鞍点方程式 (45),(46),(47) を解いて得られる解には次のような種類がある。

- P : $q = 0, m_{\mu} = 0$ パラ相 (常磁性相)
- SG : $q > 0, m_{\mu} = 0$ スピングラス相
- R : $q > 0, m > 0$ 想起相
- Hopfield Attractor ($T = 1$ 以下で存在)
1 つの埋め込みパターンが、低温でほぼ完全に想起される。

- 3 patterns Mixed state ($T = 0.46$ 以下で存在)
3つの埋め込みパターンのオーバーラップが等しく，他のものは想起されない．

図 10 は想起の様子を表したものである．左図は，ニューロンの状態が埋め込んだパターンに近付いていく様子 (想起過程) を表している．中央図の，定常状態において，ニューロンの状態がパターンに重なっているものが，きちんと想起できていることを表す．一方，右図は定常状態でパターンとニューロンのベクトルがばらばらの方向を向いていることから P, SG を表しており，埋め込んだパターンをニューロンは想起できなかったことを示している．

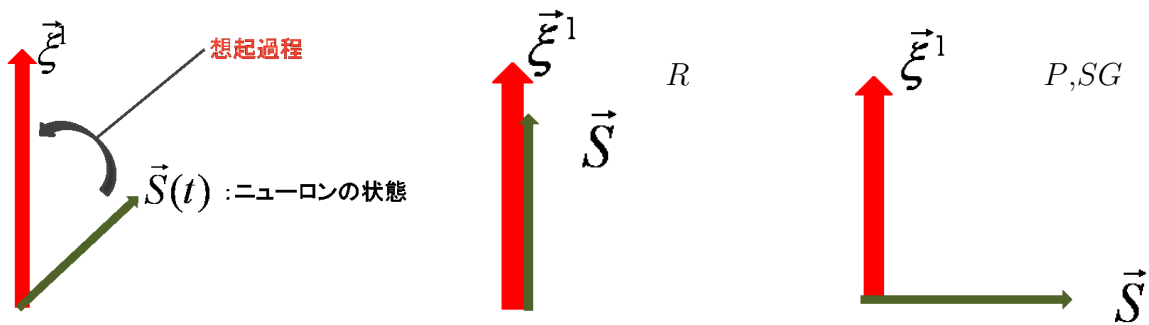


図 10: \vec{S} をニューロンの状態， $\vec{\xi}$ を埋め込んだパターンであるとし，想起過程をベクトルで表したものと， R (中央図)， P ， SG (右図) の定常状態のそれぞれの様子．

また，図 11 は，鞍点方程式を解いて得られる結果を相図にしたものである．まず，温度が高いときには β が小さいので，式 (6) は入力 h_i によらず $\frac{1}{2}$ に近い値をとる．つまり，次の瞬間に $S_i = 1$ になる確率と $S_i = -1$ になる確率がほとんど等しい．このため，どのニューロンも次々に状態を変えていき，一定のパターンを思い出すことなどとてもできない．これが図 11 の上の方にある P 相 (常磁性相) である．

一方，温度が低くパターン数も小さい，図 11 の左下の領域では $m > 0$ となる解が存在し，これが R 相 (想起相) である．すなわち，埋め込んだパターンは自由エネルギーの極小状態になっていて，適切な初期条件から出発するとネットワークは自由エネルギーに単調に減少させながら変化していき，絶対零度では極小値に達して停止する．また，低温領域では Hopfield Attractor と 3 patterns Mixed state が共存している．この 2つのアトラクタは，温度の低いところ (理論では $T = 0.46$ 以下) で共存し，ニューロンの初期状態によって現れるアトラクタが異なる．絶対零度では，想起相が $\alpha = 0.14$ まで伸びている． α が 0 から増えると，想起相が安定な温度領域は次第に縮小し， $\alpha = 0.14$ で消失する．

図 11 の中間温度領域は SG 相 (スピングラス相) と呼ばれる． $q > 0$ であるということはニューロンの状態は何かを思い出してはいるが， $m = 0$ だから特定のパターンを思い出しているわけ

でもない．教えてもない状態に頭が引っかかって動かなくなっているのである．

温度 T を 1 以下の値に一定に保ち， α を 0 から増やすように図 11 を横に見ていくと，あるところで R 相から SG 相に急激に変化する．これが相転移である．やたらにたくさん覚え込もうとすると，ある日突然全てを忘れてしまい，思い出せるのは教えてもないことだけ，という感じである．

図 12 は， α が小さいと埋め込んだパターンを思い出すことができるが， α を増やしていくと偽記憶が出現し，さらに α が大きくなると，パターンは不安定になる様子を示している．

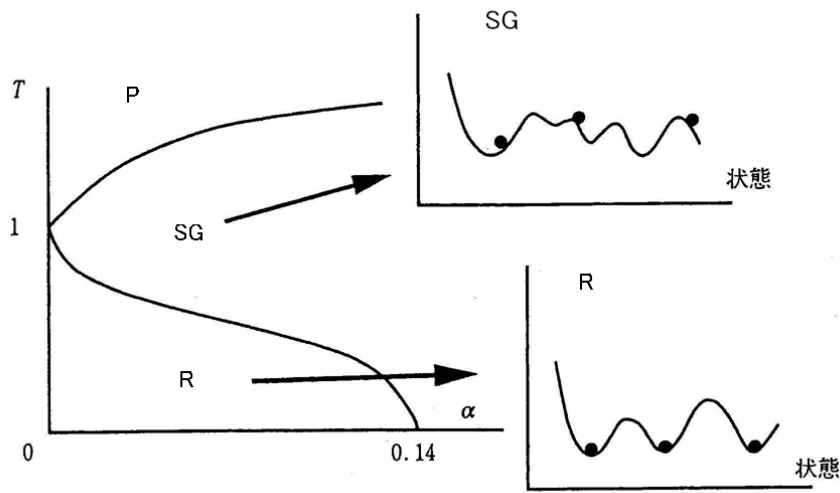


図 11: パターン数 p がニューロン数 N に比例するときの相図．

縦軸: 温度 $T (= \frac{1}{\beta})$ ， 横軸: 1 ニューロンあたりのパターン数 $\alpha (= \frac{p}{N})$ ． 黒丸は埋め込んだ

パターンがどこにあるかを表す． ([13] を改変)

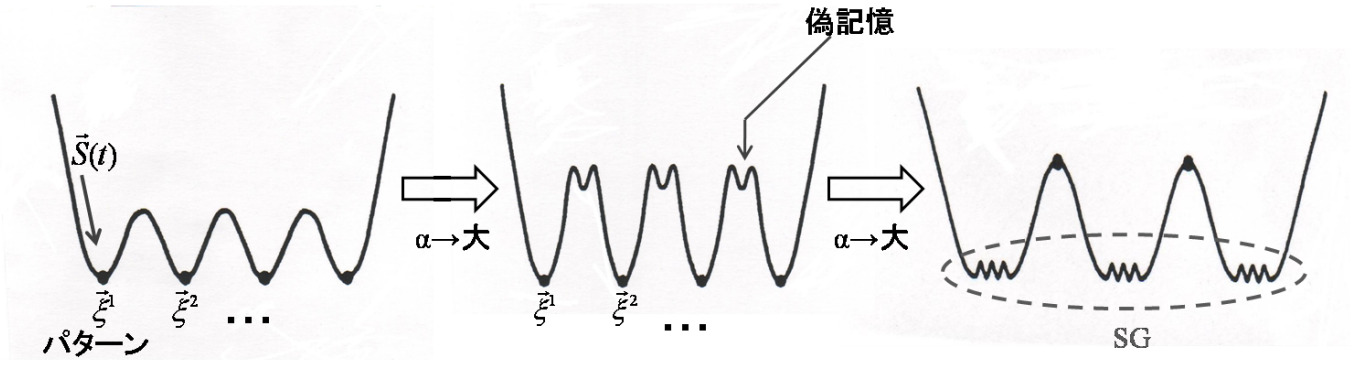


図 12: α を増やしていったときの自由エネルギーのふるまい。

2.2 Partial Annealing

本研究では、ニューロンとシナプス荷重のダブルダイナミクスを考える。すなわち、ニューロンとシナプス荷重が共に変化し、その変化の仕方がシナプス荷重に比べてニューロンのほうが非常に速い極限について解析する。シナプス荷重が変化しない場合は、クエンチ(急冷)系であり、シナプス荷重がニューロンとともに変化する場合は、アニール(徐冷)系である。今の場合、シナプス荷重は変化するが、ニューロンの変化に比べて非常にゆっくり変化するプロセスであるため、パーシャルアニーリングと呼ばれる。すなわち、シナプスが有意に変化する前に、ニューロンは準平衡状態になっている。

シナプス荷重は、ニューロンの発火状態を用いたヘブ的な学習あるいは反学習をおこなうことができる。本研究では学習について述べる。そして十分時間が経過して定常状態に達したときの、ニューロンの発火状態やシナプス荷重について解析する。ここでは、Partial Annealing の理論について述べる。前節での Hopfield model と同様にレプリカ法を用い、鞍点方程式を導く。

2.2.1 時間発展則

J_{ij} はシナプス結合荷重、 σ_i はニューロンの状態を表し、 $\sigma_i = \pm 1$ とする。シナプス結合荷重 J_{ij} は次のランジュバン方程式に従うものとする [14][15]。

$$\tau \frac{d}{dt} J_{ij} = \frac{1}{N} (\epsilon \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{sp} + K_{ij}) - \mu J_{ij} + \eta_{ij}(t) \sqrt{\frac{\tau}{N}}. \quad i < j = 1 \dots N \quad (48)$$

これは、ヘブ的な学習に対応している学習と、ノイズ $\eta_{ij}(t)$ の効果の入っている微分方程式である。また、 K_{ij} は Hopfield model に従うと考え、次のようにおく。

$$K_{ij} = \frac{K}{\sqrt{p}} \sum_{\nu=1}^p \xi_i^\nu \xi_j^\nu. \quad (49)$$

ノイズ η_{ij} は、ホワイトガウシアンノイズと呼ばれるもので、平均 0、共分散

$$\langle \eta_{ij}(t) \eta_{kl}(t') \rangle = 2\tilde{T} \delta_{ik} \delta_{jl} \delta(t - t'), \quad (50)$$

とする．ここで \tilde{T} は，ノイズの強さ (“ノイズの温度”) を表す．

$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{sp}$ はニューロンの相関の期待値を表していて，次の H をハミルトニアンとするカノニカル分布を用いて計算されるとする．ここで， J_{ij} は，時刻 t での値を用いる．

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{sp} \equiv \frac{1}{Z_\beta} \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} \sigma_i \sigma_j, \quad (51)$$

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j = -\sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (52)$$

$$Z_\beta = \text{Tr}_{\{\sigma\}} e^{-\beta H}. \quad (53)$$

Z_β はニューロンの分配関数である． \mathcal{H} を次のように定義する (Appendix 8.2.1 参照) ．

$$\mathcal{H} = -\sum_{i < j} K_{ij} J_{ij} + \frac{\mu N}{2} \sum_{i < j} J_{ij}^2 - \frac{\epsilon}{\beta} \ln Z_\beta. \quad (54)$$

すると，ランジュバン方程式は，

$$\tau \frac{dJ_{ij}}{dt} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_{ij}} + \eta_{ij}(t) \sqrt{\frac{\tau}{N}}, \quad (55)$$

と書ける．

式 (54) を式 (49) を使って書き直すと，

$$\mathcal{H} = -\frac{K}{\sqrt{p}} \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\nu=1}^p \xi_i^\nu \xi_j^\nu + \frac{\mu N}{2} \sum_{i < j} J_{ij}^2 - \frac{\epsilon}{\beta} \ln Z_\beta,$$

となる．式 (55) の定常状態で $\{J_{ij}\}$ をもつ確率 $P(\{J_{ij}\})$ は，

$$P(\{J_{ij}\}) \propto e^{-\tilde{\beta} \mathcal{H}}, \quad (56)$$

$$\tilde{\beta} = \frac{1}{\tilde{T}}, \quad (57)$$

となる (Appendix 8.2.2 参照) ．

従って，全系の分配関数 $\tilde{Z}_{\tilde{\beta}}$ は次のように表される．

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{\tilde{\beta}} &= \int d\mathbf{J} e^{-\tilde{\beta} \mathcal{H}} \\ &= \int d\mathbf{J} e^{-\tilde{\beta} \left\{ -\frac{K}{\sqrt{p}} \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\nu=1}^p \xi_i^\nu \xi_j^\nu + \frac{N\mu}{2} \sum_{i < j} J_{ij}^2 \right\}} e^{\tilde{\beta} \frac{\epsilon}{\beta} \ln Z_\beta} \\ &= \int d\mathbf{J} Z_\beta^n e^{-\frac{\tilde{\beta}}{2} N\mu \sum_{i < j} J_{ij}^2 + \frac{\tilde{\beta} K}{\sqrt{p}} \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\nu=1}^p \xi_i^\nu \xi_j^\nu}. \end{aligned} \quad (58)$$

ここで， $d\mathbf{J} = \prod_{i < j} dJ_{ij}$ ， $n = \epsilon \frac{\tilde{\beta}}{\beta}$ である． Z_β^n は， n を自然数と考えてレプリカ法で計算する． n 個のレプリカ $\sigma_i^1, \sigma_i^2, \dots, \sigma_i^n$ を導入すると， Z_β^n は次のように書ける．

$$\begin{aligned} Z_\beta^n &= \prod_{\alpha=1}^n \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{-\beta H(\{\sigma_i^\alpha\})} \\ &= \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha + \beta \sum_{\nu,i} h_\nu \xi_i^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha}. \end{aligned} \quad (59)$$

式 (58) に式 (59) を代入し , ガウス積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0),$$

を用いて計算すると ,

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{\tilde{\beta}} &= \int d\mathbf{J} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[-\frac{\tilde{\beta}N\mu}{2} \sum_{i<j} J_{ij}^2 + \sum_{i<j} J_{ij} \left\{ \frac{\tilde{\beta}K}{\sqrt{p}} \sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu + \beta \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right\} + \beta \sum_{\nu,i} h_{\nu} \xi_i^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \right] \\ &= \int d\mathbf{J} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[-\frac{\tilde{\beta}N\mu}{2} \sum_{i<j} \left\{ J_{ij} - \frac{1}{\tilde{\beta}N\mu} \left(\frac{\tilde{\beta}K}{\sqrt{p}} \sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu + \beta \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right) \right\}^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\tilde{\beta}N\mu} \left(\frac{\tilde{\beta}K}{\sqrt{p}} \sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu + \beta \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right)^2 + \beta \sum_{\nu,i} h_{\nu} \xi_i^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\tilde{\beta}N\mu}} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\frac{1}{2\tilde{\beta}N\mu} \sum_{i<j} \left(\frac{\tilde{\beta}K}{\sqrt{p}} \sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu + \beta \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right)^2 + \beta \sum_{\nu,i} h_{\nu} \xi_i^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\tilde{\beta}N\mu}} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\frac{1}{2\tilde{\beta}N\mu} \sum_{i<j} \left\{ \frac{\tilde{\beta}^2 K^2}{p} \left(\sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu \right)^2 + \frac{2\beta\tilde{\beta}K}{\sqrt{p}} \sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \beta^2 \left(\sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right)^2 \right\} + \beta \sum_{\nu,i} h_{\nu} \xi_i^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \right]. \end{aligned} \quad (60)$$

式 (60) の exponential の中の各項について計算すると ,

$$\begin{aligned} \sum_{i<j} \left(\sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu \right)^2 &= \frac{N(N-p)p}{2}, \\ \sum_{i<j} \left(\sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right)^2 &= N^2 \sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} Nn(N-n), \\ \sum_{i<j} \sum_{\nu} \xi_i^\nu \xi_j^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\nu} N^2 (m_{\nu}^{\alpha})^2 - \frac{1}{2} Npn, \end{aligned}$$

となる (8.2.3 参照) . ここでオーダーパラメーター ,

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta, \quad (61)$$

$$m_{\nu}^{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu, \quad (62)$$

を導入した . これらを $\tilde{Z}_{\tilde{\beta}}$ に代入する .

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{\tilde{\beta}} &= \sqrt{\frac{2\pi}{\tilde{\beta}N\mu}} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\frac{1}{2\tilde{\beta}N\mu} \left\{ \frac{\tilde{\beta}^2 K^2}{p} \frac{N(N-p)p}{2} + \frac{2\beta\tilde{\beta}K}{\sqrt{p}} \left(\frac{1}{2} \sigma_{\alpha,\nu} N^2 (m_{\nu}^{\alpha})^2 - \frac{1}{2} Npn \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \beta^2 \left(N^2 \sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} Nn(N-n) \right) \right\} + \beta \sum_{\nu,i} h_{\nu} \xi_i^\nu \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{2\pi}{\tilde{\beta}N\mu}} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 (N-p) + \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} N \sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha,\beta}^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{\beta^2 n(N-n)}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K}{2N\mu\sqrt{p}} \left\{ \sum_{\alpha,\nu} N^2 (m_\nu^\alpha)^2 - Npn \right\} + N\beta \sum_{\alpha,\nu} h_\nu m_\nu^\alpha \right].
\end{aligned}$$

これは, $\int dq_{\alpha\beta} \delta(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta) = 1$ と $\int dm_\nu^\alpha \delta(m_\nu^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu) = 1$ を用いると, 次のようになる.

$$\begin{aligned}
\tilde{Z}_\beta &= \sqrt{\frac{2\pi}{\tilde{\beta}N\mu}} \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \int dq_{\alpha\beta} \delta\left(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta\right) \int dm_\nu^\alpha \delta\left(m_\nu^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu\right) e^{NG_1} \\
&= \sqrt{\frac{2\pi}{\tilde{\beta}}} N\mu \int \frac{iN}{2\pi} d\hat{q}_{\alpha\beta} \int \frac{N}{2\pi i} d\hat{m}_\nu^\alpha e^{N(G_1+G_2+G_3)}, \tag{63}
\end{aligned}$$

$$G_1 = \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 + \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{\beta^2 n}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K}{2\mu\sqrt{p}} \sum_{\alpha,\nu} (m_\nu^\alpha)^2 + \beta \sum_{\alpha,\nu} h_\nu m_\nu^\alpha, \tag{64}$$

$$G_2 = - \sum_{\alpha<\beta} \hat{q}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha m_\nu^\alpha, \tag{65}$$

$$\begin{aligned}
G_3 &= \frac{1}{N} \ln \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha<\beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu} \right\} \\
&= \frac{1}{N} \sum_i \ln \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha<\beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu} \right\} \\
&= \left[\ln \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha<\beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sigma^\alpha \sigma^\beta - \sum_{\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma^\alpha \xi^\nu} \right\} \right]. \tag{66}
\end{aligned}$$

p は有限で $N \gg 2^p$ であるので, $\frac{1}{N} \sum_i$ は, パターン $\{\xi\}$ の平均 $[\dots]$ で置き換えられる. すなわち, 自己平均性を使っている.

ここで, レプリカ対称性を次のように仮定する.

$$\begin{aligned}
q_{\alpha\beta} &= q, \\
m_\nu^\alpha &= m_\nu, \\
\hat{q}_{\alpha\beta} &= \hat{q}, \\
\hat{m}_\nu^\alpha &= \hat{m}_\nu. \tag{67}
\end{aligned}$$

すると,

$$G_1 = \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 + \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}} \frac{n(n-1)}{4} q^2 + \frac{\beta^2 n}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K}{2\mu\sqrt{p}} n \sum_\nu m_\nu^2 + \beta n \sum_\nu h_\nu m_\nu, \tag{68}$$

$$G_2 = -\frac{n(n-1)}{2} \hat{q} q + n \sum_\nu \hat{m}_\nu m_\nu, \tag{69}$$

$$G_3 = -\hat{q} \frac{1}{2} n + \left[\ln \int Dx \left\{ \cosh \left(\sqrt{\hat{q}} x - \sum_\nu \hat{m}_\nu \xi^\nu \right) \right\}^n \right] + n \ln 2, \tag{70}$$

$$\left(\int Dx = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \right) \tag{71}$$

となる (詳細な計算は Appendix 8.2.4 参照).

2.2.2 鞍点方程式

$G = G_1 + G_2 + G_3$ とすると, 鞍点方程式は次のように求まる (詳細な計算は Appendix8.2.5 参照) .

$$\frac{\partial}{\partial q} G = 0, \quad \Longrightarrow \quad \hat{q} = \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}} q. \quad (72)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{q}} G = 0, \quad \Longrightarrow \quad q = \left[\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi \left\{ \int Dx \cosh^n \Xi \right\}^{-1} \right]. \quad (73)$$

$$\frac{\partial}{\partial m_\nu} G = 0, \quad \Longrightarrow \quad \hat{m}_\nu = - \left(\frac{\beta K}{\mu\sqrt{p}} m_\nu + \beta h_\nu \right). \quad (74)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{m}_\nu} G = 0, \quad \Longrightarrow \quad m_\nu = \left[\xi^\nu \int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi \left\{ \int Dx \cosh^n \Xi \right\}^{-1} \right]. \quad (75)$$

ここで, Ξ は

$$\begin{aligned} \Xi &= \sqrt{\hat{q}} x - \sum_\nu \hat{m}_\nu \xi^\nu \\ &= \beta \left\{ \sqrt{\frac{q}{\mu\tilde{\beta}}} x + \sum_\nu \left(\frac{K}{\mu\sqrt{p}} m_\nu + h_\nu \right) \xi^\nu \right\}, \end{aligned} \quad (76)$$

である .

以下では, $h_\nu = 0$ とし, $J = \frac{K}{\mu\sqrt{p}}$, $\kappa = \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}}$ とおくと, 次のようになる .

$$\hat{q} = \kappa q, \quad (77)$$

$$q = \left[\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi \left\{ \int Dx \cosh^n \Xi \right\}^{-1} \right], \quad (78)$$

$$\hat{m}_\nu = -\beta J m_\nu, \quad (79)$$

$$m_\nu = \left[\xi^\nu \int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi \left\{ \int Dx \cosh^n \Xi \right\}^{-1} \right]. \quad (80)$$

$$\Xi = \sqrt{\kappa q} x + \beta \sum_\nu J m_\nu \xi^\nu. \quad (81)$$

今, $p = 3$ とおくと, 次の種類の解があることが分かる .

- P : $q = 0$, $m_\mu = 0$
- SG : $q > 0$, $m_\mu = 0$
- H : $q > 0$, $m_1 \neq 0$, $m_2 = m_3 = 0$
- $2M$: $q > 0$, $m_1 = m_2 \neq 0$, $m_3 = 0$
- $3M$: $q > 0$, $m_1 = m_2 = m_3 \neq 0$

本研究で主に調べたのは, Hopfield Attractor (H) と, パターン三つの Mixed state の 3M である .

3 相転移温度

鞍点方程式を解いて求まった状態が，どのような温度で存在するかを知るため，ここでは相転移温度について議論する．

まず，表記を簡略化するために，上つきのバー ($\overline{\quad}$) を次のように定義する．

$$\overline{f(\Xi)} \equiv \Omega^{-1} \int Dx \cosh^n(\Xi) f(\Xi), \quad (82)$$

$$\Omega \equiv \int Dx \cosh^n(\Xi), \quad (83)$$

$$\Xi = \beta \left\{ \sqrt{\frac{q}{\mu\tilde{\beta}}} x + \frac{K}{\mu\sqrt{p}} \sum_{\nu} m_{\nu} \xi^{\nu} \right\}. \quad (84)$$

y が， q や m_{ν} をとるとすると，

$$\frac{\partial}{\partial y} \overline{f(\Xi)} = n \left\{ \overline{\tanh(\Xi) f(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y}} - \overline{\tanh(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y} f(\Xi)} \right\} + \overline{f'(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y}}, \quad (85)$$

となる．具体的に計算すると，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q} \overline{f(\Xi)} &= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) f(\Xi)} - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) f(\Xi)} \right. \\ &\quad \left. + n \overline{\tanh(\Xi) f'(\Xi)} + \overline{f''(\Xi)} \right\}, \end{aligned} \quad (86)$$

$$\frac{\partial}{\partial m_{\mu}} \overline{f(\Xi)} = \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^{\mu} \left\{ n \overline{\tanh(\Xi) f(\Xi)} - n \overline{\tanh(\Xi) f(\Xi)} + \overline{f'(\Xi)} \right\}. \quad (87)$$

φ ， ψ_{ν} を次のように定義する．

$$\varphi = \overline{\tanh^2(\Xi)}, \quad (88)$$

$$\psi_{\nu} = \overline{\xi^{\nu} \tanh(\Xi)}. \quad (89)$$

これらの微分はそれぞれ次のようになる．

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q} \varphi &= \left[\frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh^2(\Xi)} \right] \\ &= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 3n + 6) \overline{\tanh^4(\Xi)} + 2(n-4) \overline{\tanh^2(\Xi)} \right. \\ &\quad \left. + 2 - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (90)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q} \psi_{\nu} &= \left[\xi^{\nu} \frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh(\Xi)} \right] \\ &= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 2n + 2) \overline{\xi^{\nu} \tanh^3(\Xi)} + (n-2) m_{\nu} \right. \\ &\quad \left. - n(n-1) \overline{\xi^{\nu} \tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right\}. \end{aligned} \quad (91)$$

$$\frac{\partial}{\partial m_{\mu}} \varphi = \left[\frac{\partial}{\partial m_{\mu}} \overline{\tanh^2(\Xi)} \right]$$

$$= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-2) \left[\xi^\mu \overline{\tanh^3(\Xi)} \right] - n \left[\xi^\mu \overline{\tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right] + 2m_\mu \right\}. \quad (92)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial m_\mu} \psi_\nu &= \left[\xi^\nu \frac{\partial}{\partial m_\mu} \overline{\tanh(\Xi)} \right] \\ &= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1) \left[\xi^\nu \xi^\mu \overline{\tanh^2(\Xi)} \right] - n \left[\xi^\nu \xi^\mu \overline{\tanh(\Xi)}^2 \right] + \delta_{\mu\nu} \right\}. \end{aligned} \quad (93)$$

詳細な計算は Appendix8.3.1 参照のこと .

3.1 一次相転移

一次相転移では , 解が突然出現するのでもとの状態とは無関係である . よって次の 3 種類の 1 次相転移について考える .

- (1) $P \rightarrow H$
- (2) $P \rightarrow 3M$
- (3) $P \rightarrow SG$

1 次相転移温度を知るためには , 自由エネルギーを調べて , 安定性を考える必要がある .

- (1) $P \rightarrow H$ の 1 次相転移温度

P から H に 1 次相転移が起こるということは ,

$$\begin{aligned} q &= \varphi(q, m_1, 0, 0), \\ m_1 &= \psi_1(q, m_1, 0, 0). \end{aligned}$$

が , $q > 0, m_1 > 0$ で同時に解を持つということである .

$$\begin{aligned} f_1 &= q - \varphi(q, m_1, 0, 0), \\ f_2 &= m_1 - \psi_1(q, m_1, 0, 0). \end{aligned}$$

とおくと , これらがどこかで触れるためには , ∇f_1 と ∇f_2 が平行 , すなわち $\det(\nabla f_1, \nabla f_2) = 0$ とならなければならない . ここで , $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial m_1} \right)^T$ である .

$$\begin{aligned} \nabla f_1 &= \left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial q}, -\frac{\partial \varphi}{\partial m_1} \right)^T, \\ \nabla f_2 &= \left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial q}, 1 - \frac{\partial \psi_1}{\partial m_1} \right)^T. \end{aligned}$$

より ,

$$|\nabla f_1, \nabla f_2| = \begin{vmatrix} 1 - \frac{\partial \varphi}{\partial q} & -\frac{\partial \varphi}{\partial m_1} \\ -\frac{\partial \psi_1}{\partial q} & 1 - \frac{\partial \psi_1}{\partial m_1} \end{vmatrix} = 0,$$

となる．よって，安定性の式は次のようになる．

$$\left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial q}\right) \left(1 - \frac{\partial \psi_1}{\partial m_1}\right) - \frac{\partial \varphi}{\partial m_1} \frac{\partial \psi_1}{\partial q} = 0. \quad (94)$$

これと，

$$q = \varphi(q, m_1, 0, 0) \quad , \quad m_1 = \psi_1(q, m_1, 0, 0)$$

より， H への 1 次相転移温度が求まる．

(2) $P \rightarrow 3M$ の 1 次相転移温度

(1) と同様の議論ができる．

$$\begin{aligned} f_1 &= q - \varphi(q, m, m, m), \\ f_2 &= m_1 - \psi_1(q, m, m, m). \end{aligned}$$

とおくと，式 (94) において，

$$\left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial q}\right) \left(1 - \frac{\partial \psi_1}{\partial m}\right) - \frac{\partial \varphi}{\partial m} \frac{\partial \psi_1}{\partial q} = 0, \quad (95)$$

となり， $\frac{\partial \varphi}{\partial q}$ ， $\frac{\partial \psi_1}{\partial q}$ は同じであるが， $\frac{\partial \psi_1}{\partial m}$ ， $\frac{\partial \varphi}{\partial m}$ は次のようになる．

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_1}{\partial m} &= \frac{\partial}{\partial m} \psi_1(q, m, m, m) \\ &= \frac{\partial \psi_1}{\partial m_1} + \frac{\partial \psi_1}{\partial m_2} + \frac{\partial \psi_1}{\partial m_3} = \frac{\partial \psi_1}{\partial m_1} + 2 \frac{\partial \psi_1}{\partial m_2}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial m} &= \frac{\partial \varphi}{\partial m_1} + \frac{\partial \varphi}{\partial m_2} + \frac{\partial \varphi}{\partial m_3} = 3 \frac{\partial \varphi}{\partial m_1}. \end{aligned}$$

これと，

$$q = \varphi(q, m, m, m) \quad , \quad m = \psi_1(q, m, m, m)$$

より $3M$ への 1 次相転移温度が求まる．

(3) $P \rightarrow SG$ の 1 次相転移温度

安定性の式 (94) において， $m_1 = 0$ のときが SG である．このとき， $\frac{\partial \psi_1}{\partial q} = 0$ なので，

$$\left(1 - \frac{\partial \varphi}{\partial q}\right) = 0,$$

となるべきであるので，

$$\frac{\partial \varphi}{\partial q} = 1.$$

これと，

$$q = \varphi(q, 0, 0, 0) > 0$$

より， P から SG への 1 次相転移温度が求まる．

3.2 二次相転移

次の3種類の2次相転移について考える．

- (1) $P \rightarrow SG$
- (2) $P \rightarrow H, 3M$
- (3) $SG \rightarrow H, 3M$

それぞれの場合について，2次相転移温度を考えていく．

- (1) $P \rightarrow SG$ の2次相転移温度

P から SG になるということは $m_\mu = 0$ で， $q = 0$ から $q > 0$ に変化するということである．式(88)より，

$$q = \varphi(q, \{m_\mu\}) = \left[\tanh^2(\Xi) \right],$$

において， $(q, m_1, m_2, m_3) = (0, 0, 0, 0) \equiv \mathbf{0}$ のまわりで Taylor 展開する．

$$\begin{aligned} q &= \frac{\partial \varphi}{\partial q} q + \sum_\mu \frac{\partial \varphi}{\partial m_\mu} m_\mu \\ &= \frac{\beta^2}{\mu \tilde{\beta}} q. \end{aligned} \quad (96)$$

ここではじめの等式の右辺第2項は $\frac{\partial \psi}{\partial m_\mu} = 0$ である．これは，式(90),(92)において $\Xi = 0$ であることから導かれた．

よって，式(96)で両辺の係数が等しくなればよいので，

$$1 = \frac{\beta^2}{\mu \tilde{\beta}},$$

$$\therefore T_{P \rightarrow SG}^{2nd} = \frac{1}{\sqrt{\mu \tilde{\beta}}} = \sqrt{\frac{\tilde{T}}{\mu}}. \quad (97)$$

q が0から連続的に正の値をとっていくところになるので， P から SG への2次相転移温度となる．

- (2) $P \rightarrow H, 3M$ の2次相転移温度

P から H になるということは， $m = 0$ から $m > 0$ に変化することである． $m > 0$ のとき，自動的に $q > 0$ となる．従って，式(89)より，

$$m_\nu = \psi_\nu(q, \{m_\mu\}) = \left[\xi^\nu \overline{\tanh(\Xi)} \right],$$

において0のまわりで Taylor 展開する .

$$\begin{aligned} m_\nu &= \frac{\partial \psi_\nu}{\partial q} q + \sum_\mu \frac{\partial \psi_\nu}{\partial m_\mu} m_\mu \\ &= \sum_\mu \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \delta_{\mu\nu} m_\mu = \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} m_\nu. \end{aligned} \quad (98)$$

ここで, $\frac{\partial \psi_\nu}{\partial q} = 0$ を用いた .

よって, 式 (98) で両辺の係数が等しくなればよいので,

$$1 = \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}},$$

$$\therefore T_{P \rightarrow H}^{2nd} = \frac{K}{\mu\sqrt{p}}.$$

m が 0 から非負の値をとっていくところなので, 3M state でも同じになる .

$$\therefore T_{P \rightarrow 3M}^{2nd} = T_{P \rightarrow H}^{2nd} = \frac{K}{\mu\sqrt{p}}. \quad (99)$$

(3) $SG \rightarrow H, 3M$ の 2 次相転移温度

SG から H になるとき, $q > 0$ で $m = 0$ から $m > 0$ に変化する . 式 (89) より,

$$m_\nu = \psi_\nu(q, \{m\}) = [\xi^\nu \overline{\tanh(\Xi)}],$$

において $(q, 0, 0, 0)$ のまわりで Taylor 展開する .

$$\begin{aligned} m_\nu &= \psi_\nu(q, \{m\}) \\ &= \psi_\nu(q, \mathbf{0}) + \sum_\mu \frac{\partial \psi_\nu}{\partial m_\mu} m_\mu. \end{aligned} \quad (100)$$

ここで, 右辺第 1 項は 0 であり, 第 2 項は, 式 (93) より,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_\nu}{\partial m_\mu} &= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1)\delta_{\mu,\nu} q - n\delta_{\mu\nu} \overline{\tanh \Xi}^2 + \delta_{\mu\nu} \right\} \\ &= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1)q + 1 \right\} \delta_{\mu\nu}, \end{aligned}$$

となるので, 式 (100) は,

$$m_\nu = \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1)q + 1 \right\} m_\nu,$$

となり, 両辺の係数が等しいことから,

$$1 = \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1)q + 1 \right\}.$$

$$\therefore T_{SG \rightarrow H}^{2nd} = \frac{K}{\mu\sqrt{p}} \{(n-1)q + 1\}.$$

ここで $n = \epsilon \frac{T}{\tilde{T}}$ より,

$$T_{SG \rightarrow H}^{2nd} = \frac{K}{\mu\sqrt{p}} \left\{ \left(\epsilon \frac{T_{SG \rightarrow H}^{2nd}}{\tilde{T}} - 1 \right) q + 1 \right\}.$$

これは 3M state も同じなので,

$$T_{SG \rightarrow 3M}^{2nd} = T_{SG \rightarrow H}^{2nd} = \frac{K}{\mu\sqrt{p}} \left\{ \left(\epsilon \frac{T_{SG \rightarrow H}^{2nd}}{\tilde{T}} - 1 \right) q + 1 \right\}. \quad (101)$$

ここで求めた相転移温度は第 5 章数値結果で相図にした。

4 AT線

レプリカ対称性 ($q_{\alpha\beta} = q$, $m_\alpha = m$) はあくまで仮定であり, その正当性はきちんと検証されなければならない. レプリカ対称解が信頼できるための必要十分条件は, レプリカ対称解からのずれに対して自由エネルギーが増加することである. 自由エネルギーは,

$$\tilde{f}_{\tilde{\beta}} = -\frac{1}{N} \frac{1}{\tilde{\beta}} \ln \tilde{Z}_{\tilde{\beta}} = -\frac{G}{\tilde{\beta}}, \quad (102)$$

と表される. レプリカ対称解の安定性は, 相図上の AT 線と呼ばれる線のところで変化する. レプリカ対称解のまわりの微小変位,

$$\begin{aligned} m_\nu^\alpha &= m_\nu + \epsilon_\nu^\alpha, \\ q_{\alpha\beta} &= q + \eta_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

について G を 2 次まで展開する. ϵ^α と $\eta_{\alpha\beta}$ についての 2 次形式の係数行列を \mathcal{G} とする. \mathcal{G} はヘシアンと呼ばれる. レプリカ対称解の安定条件より, \mathcal{G} の固有値がすべて負である必要がある.

$$G = G_{RS} + \frac{1}{2} \sum_{(\alpha\nu)(\beta\mu)} \mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\mu)} \epsilon_\nu^\alpha \epsilon_\mu^\beta + \frac{1}{2} \sum_{(\alpha\nu)(\beta\gamma)} \mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\gamma)} \epsilon_\nu^\alpha \eta_{\beta\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} \mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} \eta_{\alpha\beta} \eta_{\gamma\delta}. \quad (103)$$

$$G_{RS} = G \Big|_{q_{\alpha\beta}=q, m_\nu^\alpha=m_\nu}.$$

ここで G_{RS} は, レプリカ対称解における G の値である. 式 (103) の 2 項目以降がズレの部分となる. このズレの部分を負のところ RS 解は安定であると言える.

各アトラクタごとに計算する前に, まずは一般式をここに示す (詳細な計算は Appendix 8.4.1 参照).

$$\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} = \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\gamma\delta}} = -\kappa \left\{ \delta_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} - \kappa \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\gamma \sigma^\delta \rangle + \kappa \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \langle \sigma^\gamma \sigma^\delta \rangle \right\}. \quad (104)$$

$$\mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\mu)} = \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial m_\mu^\beta} = -\beta J \left\{ \delta_{(\alpha\nu)(\beta\mu)} - \beta J \left[\xi^\nu \xi^\mu \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle - \xi^\nu \langle \sigma^\alpha \rangle \xi^\mu \langle \sigma^\beta \rangle \right] \right\}. \quad (105)$$

$$\mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\gamma)} = \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial q_{\beta\gamma}} = \kappa \beta J \left[\langle \sigma^\beta \sigma^\gamma \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle - \langle \sigma^\beta \sigma^\gamma \rangle \langle \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle \right]. \quad (106)$$

ここで, $[\dots]$ はパターン ξ 平均を, $\langle \dots \rangle$ は,

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle &= \frac{\text{Tr} \boldsymbol{\sigma} e^{\tilde{H}} \dots}{\text{Tr} \boldsymbol{\sigma} e^{\tilde{H}}}, \\ \tilde{H} &= \kappa \sum_{\alpha < \beta} (q_{\alpha\beta})^2 \sigma^\alpha \sigma^\beta + \beta J \sum_{\alpha\nu} m_\nu^\alpha \sigma^\alpha \xi^\nu \\ &= \kappa q^2 \sum_{\alpha < \beta} \sigma^\alpha \sigma^\beta + \beta J \sum_{\alpha\nu} m_\nu^\alpha \sigma^\alpha \xi^\nu, \end{aligned}$$

を表す．また，式中出现してきたものは次のようなものである．ここで，上つきのバー ($\overline{\quad}$) は期待値をとることを意味する．

$$\begin{aligned}\langle \sigma \rangle &= \int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi \cdot \Omega^{-1} = \overline{\tanh \Xi}, \\ \Omega &= \int Dx \cosh^n \Xi \quad (\Xi = \sqrt{\kappa q}x + \beta \sum_{\nu} Jm_{\nu} \xi^{\nu}), \\ \langle \sigma^{\alpha} \sigma^{\beta} \rangle &= \overline{\tanh^2 \Xi}.\end{aligned}$$

4.1 Hopfield Attractor

まず， \mathcal{G} の行列要素を列挙する．

ϵ の 2 次の係数は，対称要素と非対称要素の 2 種類の値だけをとることが分かる．以下で， $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ はレプリカ指標で， μ, ν はパターンの指標である．

$$\mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\alpha\nu)} \equiv \frac{\partial^2 G}{\partial m_{\nu}^{\alpha 2}} = -\beta J[1 - \beta J(1 - m^2)] = A. \quad (107)$$

$$\mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\nu)} \equiv \frac{\partial^2 G}{\partial m_{\nu}^{\alpha} \partial m_{\nu}^{\beta}} = (\beta J)^2 (q - m^2) = B \quad (\alpha \neq \beta). \quad (108)$$

次に η の 2 次の係数には 3 種類ある．対角要素と 2 種類の非対角要素である．非対角要素のうち 1 つは，レプリカ番号が 1 つだけ一致するもの，もう 1 つはレプリカ番号がすべて異なるものである．

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\beta)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\beta}} = -\kappa[1 - \kappa(1 - \langle \sigma^{\alpha} \sigma^{\beta} \rangle_{RS}^2)] \\ &= -\kappa[1 - \kappa(1 - q^2)] = P \quad (\alpha \neq \beta).\end{aligned} \quad (109)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\gamma)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} = \kappa^2[\langle \sigma^{\beta} \sigma^{\gamma} \rangle - \langle \sigma^{\alpha} \sigma^{\beta} \rangle_{RS}^2] \\ &= \kappa^2[q - q^2] = Q \quad (\alpha \neq \beta, \alpha \neq \gamma).\end{aligned} \quad (110)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\gamma\delta}} = \kappa^2[\langle \sigma^{\alpha} \sigma^{\beta} \sigma^{\gamma} \sigma^{\delta} \rangle - \langle \sigma^{\alpha} \sigma^{\beta} \rangle^2] \\ &= \kappa^2[\overline{\tanh^4 \Xi_1} - q^2] = R\end{aligned} \quad (111)$$

($\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は全て異なる).

ここで， $\Xi_1 = \sqrt{\kappa q}x + \beta Jm$ としている．

最後に ϵ と η のクロス項には 2 種類ある．

$$\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\nu)} \equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_{\nu}^{\alpha}} = \kappa \beta J m (1 - q) \delta_{\nu 1} = C \delta_{\nu 1} \quad (\alpha \neq \beta). \quad (112)$$

$$\mathcal{G}_{(\beta\gamma)(\alpha\nu)} \equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\beta\gamma} \partial m_{\nu}^{\alpha}} = \kappa \beta J [\overline{\tanh^3 \Xi_1} - qm] \delta_{\nu 1} = D \delta_{\nu 1} \quad (\alpha \neq \beta, \alpha \neq \gamma). \quad (113)$$

以上で \mathcal{G} の要素は出尽くしている (詳細な計算は Appendix8.4.2 参照) .

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_1 & \mathcal{G}_2 \\ \mathcal{G}_3 & \mathcal{G}_4 \end{pmatrix} \tag{114}$$

とおくと, それぞれの成分は次のようになっている .

$$\mathcal{G}_1 = \begin{matrix} & \nu = 1 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu = 2 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu = 3 & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mu = 1 & \left(\begin{array}{cccccccccccc} A & B & \cdots & B & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & B & A & B & \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & B & \ddots & B & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & B & \cdots & B & A & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \mu = 2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & A & B & \cdots & B & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & B & \ddots & B & \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \vdots & B & \ddots & B & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & B & \cdots & B & A & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \mu = 3 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & A & B & \cdots & B \\ \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & B & \ddots & B & \vdots \\ \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \vdots & B & \ddots & B \\ \vdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & B & \cdots & B & A \end{array} \right) \\ \end{matrix} .$$

$$\mathcal{G}_2 = \begin{matrix} & (1,2) & (1,3) & \cdots & (1,n) & (2,3) & \cdots & (2,n) & (3,4) & \cdots & \cdots & \cdots & (n-1,n) \\ \mu = 1 & \left(\begin{array}{cccccccccccc} C & C & \cdots & C & D & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & D \\ \vdots & C & D & \cdots & D & C & \cdots & C & D & \cdots & \cdots & \cdots & D \\ \vdots & & & & & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & & & \\ \mu = 2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & & & \\ \mu = 3 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & & & \end{array} \right) \\ \end{matrix} .$$

$$\mathcal{G}_3 = \mathcal{G}_2^T = \begin{matrix} & \nu=1 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots \\ \begin{matrix} (1,2) \\ (1,3) \\ \vdots \\ \vdots \\ (2,3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ (n-1,n) \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccccccccccc} C & C & D & \cdots & \cdots & D & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ C & D & C & D & \cdots & D & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ D & C & C & D & \cdots & D & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{array} \right) \end{matrix}.$$

$$\mathcal{G}_4 = \begin{matrix} & (1,2) & (1,3) & (1,4) & \cdots & (1,n) & (2,3) & (2,4) & \cdots & (2,n) & (3,4) & \cdots & (3,n) & (4,5) & \cdots & (n-1,n) \\ \begin{matrix} (1,2) \\ (1,3) \\ \vdots \\ \vdots \\ (2,3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ (n-1,n) \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccccccccccc} P & Q & \cdots & \cdots & Q & Q & \cdots & \cdots & Q & R & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & R \\ Q & P & Q & \cdots & Q & Q & R & \cdots & R & Q & \cdots & Q & R & \cdots & R \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ Q & Q & R & \cdots & R & P & Q & \cdots & Q & Q & \cdots & Q & R & \cdots & R \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ (n-1,n) & & & & & & \vdots & & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \end{array} \right) \end{matrix}.$$

4.1.1 ヘシアン固有値 (1)

一般の場合の固有値と固有ベクトルを求める。行列 \mathcal{G} の次元は ϵ_ν^α の空間と $\eta^{\alpha\beta}$ の空間次元の和の、 $3n + {}_n C_2 = 3n + \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n(n+5)}{2}$ であることに注意しておく。

固有方程式を次のように書くことにする。

$$\mathcal{G}\mu = \lambda\mu. \quad (115)$$

また、この固有ベクトルは次のようなものである。

$$\mu = \begin{pmatrix} \{\epsilon^\alpha\} \\ \{\eta^{\alpha\beta}\} \end{pmatrix}. \quad (116)$$

$\{\epsilon^\alpha\}$ の部分にはそれぞれの μ において ϵ^1 から ϵ^n が、 $\{\eta^{\alpha\beta}\}$ の部分には η^{12} から $\eta^{n-1,n}$ が縦に並ぶ。

まず，固有ベクトルが次のようなときを考える．また，この固有値を $\lambda_1^{(1)}$ とする．

$$\mu_1^{(1)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (n-1,n) \\ a & \cdots & a & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & b & \cdots & b \end{pmatrix}.$$

すなわち， $\epsilon_1^\alpha = a$ ， $\epsilon_2^\alpha = 0$ ， $\epsilon_3^\alpha = 0$ ， $\eta^{\alpha\beta} = b$ の形の解 $\mu_1^{(1)}$ を調べる． \mathcal{G} の第 1 行目は $(A \ B \ \cdots \ B \ 0 \ \cdots \ 0 \ C \ \cdots \ C \ D \ \cdots \ D)$ であるから，固有方程式 (115) の第 1 行目は，

$$\{A + (n-1)B\}a + \{(n-1)C + {}_{n-1}C_2D\}b = \lambda_1^{(1)}a, \quad (117)$$

となる．

一方，同じ固有方程式の下の部分 ($\{\eta^{\alpha\beta}\}$ に相当する部分) は， \mathcal{G} の該当する行が $(C \ C \ D \ \cdots \ D \ 0 \ \cdots \ 0 \ P \ Q \ \cdots \ Q \ R \ \cdots \ R)$ であるから，

$$\{2C + (n-2)D\}a + \{P + 2(n-2)Q + {}_{n-2}C_2R\}b = \lambda_1^{(1)}b, \quad (118)$$

である．最初の C の前の 2 は $(\alpha\beta)$ を固定したとき $\mathcal{G}_{\alpha(\alpha\beta)}$ と $G_{\beta(\alpha\beta)}$ がともに C であることからくる． D の前の $(n-2)$ は、 $\mathcal{G}_{\gamma(\alpha\beta)} = D$ を与えるレプリカ γ の数に対応する． Q の前の $2(n-2)$ は $\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\gamma)}$ になるレプリカの選びかたの数，最後の ${}_{n-2}C_2 = \frac{(n-2)(n-3)}{2}$ も同様である．これら 2 式 (117),(118) が a ， b ともに 0 でない解をもつための条件から，

$$\begin{pmatrix} A + (n-1)B - \lambda_1^{(1)} & (n-1)C + \frac{(n-1)(n-2)}{2}D \\ 2C + (n-2)D & P + 2(n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R - \lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0. \quad (119)$$

ここで次のようにおくことにする．

$$\alpha = A + (n-1)B, \quad (120)$$

$$\beta = (n-1)C + \frac{(n-1)(n-2)}{2}D, \quad (121)$$

$$\gamma = 2C + (n-2)D, \quad (122)$$

$$\delta = P + 2(n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R. \quad (123)$$

すると，

$$\begin{vmatrix} \alpha - \lambda_1^{(1)} & \beta \\ \gamma & \delta - \lambda_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (124)$$

となり，これより

$$\begin{aligned} (\alpha - \lambda_1^{(1)})(\gamma - \lambda_1^{(1)}) - \beta\gamma &= 0, \\ \lambda_1^{(1)2} - (\alpha + \gamma)\lambda_1^{(1)} + \alpha\delta - \beta\gamma &= 0, \end{aligned}$$

となる．よって固有値 $\lambda_1^{(1)}$ は次のようになる．

$$\begin{aligned}\lambda_1^{(1)\pm} &= \frac{1}{2}\{\alpha + \delta \pm \sqrt{(\alpha + \delta)^2 - 4(\alpha\delta - \beta\gamma)}\} \\ &= \frac{1}{2}\{\alpha + \delta \pm \sqrt{(\alpha - \delta)^2 + 4\beta\gamma}\} \\ &= \frac{1}{2}\{X \pm \sqrt{Y^2 + Z}\}.\end{aligned}\tag{125}$$

ここで， X, Y, Z は，それぞれ次のような量である．

$$X = \alpha + \delta = A + (n-1)B + P + 2(n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R,\tag{126}$$

$$Y = \alpha - \delta = A + (n-1)B - P - 2(n-2)Q - \frac{(n-2)(n-3)}{2}R,\tag{127}$$

$$\begin{aligned}Z &= 4\beta\gamma \\ &= 4\left\{(n-1)C + \frac{(n-1)(n-2)}{2}D \times \{2C + (n-2)D\}\right\} \\ &= 2(n-1)\{2C + (n-2)D\}^2.\end{aligned}\tag{128}$$

同様に，固有ベクトルが次のようなときを考える．このとき，固有値を $\lambda_1^{(2)}$ とする．

$$\mu_1^{(2)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (n-1,n) \\ 0 & \cdots & 0 & a' & \cdots & a' & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\{A + (n-1)B\}a' = \lambda_1^{(2)}a',\tag{129}$$

より，

$$\lambda_1^{(2)} = A + (n-1)B,\tag{130}$$

となる．

さらに，固有ベクトルが次のようなときを考える．このとき，固有値を $\lambda_1^{(3)}$ とする．

$$\mu_1^{(3)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (n-1,n) \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & a' & \cdots & a' & b & \cdots & b \end{pmatrix}.$$

さきほどと同様に，次のような固有値をもつ．

$$\lambda_1^{(3)} = \lambda_1^{(2)} = A + (n-1)B.\tag{131}$$

これは2重縮退している．よってここでは固有ベクトルが全部で4つ見つかった．

4.1.2 ヘシアン固有値 (2)

次に, ある特定のレプリカ θ で $\epsilon^\theta = c_1$, ほかは d_1 であり, さらに α あるいは β が θ に等しいとき $\eta^{\alpha\beta} = f$, そうでないときは $\eta^{\alpha\beta} = g$ となるような次のような解 $\mu_2^{(1)}$ を考察する.

$$\mu_2^{(1)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \dots & \dots & \dots & \nu=2 & \dots & \dots & \nu=3 & \dots & \dots & (1,2) & \dots & (1,n) & (2,3) & \dots & (n-1,n) \\ c_1 & d_1 & \dots & d_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & f & \dots & f & g & \dots & g \end{pmatrix}.$$

$\theta = 1$ として一般性を失わない.

ところで, 前節で求めた $\mu_1^{(1)}$ といま議論している $\mu_2^{(1)}$ は異なるものという直交性の条件を満たす必要がある. $\mu_1^{(1)}$ と $\mu_2^{(1)}$ の上半分 ($3n$ 次元の分) の内積が 0 であり, しかも下半分の内積も 0 であれば十分なので, まず上半分は,

$$a\{c_1 + (n-1)d_1\} = 0, \quad (132)$$

より,

$$c_1 + (n-1)d_1 = 0. \quad (133)$$

同様に下半分は,

$$b\{(n-1)f + {}_{n-1}C_2g\} = 0, \quad (134)$$

より,

$$f + \frac{n-2}{2}g = 0. \quad (135)$$

行列 G の 1 行目は, $(A \ B \ \dots \ B \ 0 \ \dots \ 0 \ C \ \dots \ C \ D \ \dots \ D)$ という形である. B と C はともに $n-1$ 個, D は ${}_{n-1}C_2$ 個現れる. ベクトル $\mu_2^{(1)}$ は d_1 , f が $n-1$ 個, g は ${}_{n-1}C_2$ 個続くので, 固有方程式 $G\mu_2^{(1)} = \lambda_2^{(1)}\mu_2^{(1)}$ の第 1 行目は,

$$Ac_1 + (n-1)Bd_1 + (n-1)Cf + {}_{n-1}C_2Dg = \lambda_2^{(1)}c_1. \quad (136)$$

ここで直交条件の式 (133), (135) を用いて d_1 と g を消去すると次のようになる.

$$\begin{aligned} c_1A - c_1B + (n-1)fC - (n-1)fD &= \lambda_2^{(1)}c_1 \\ c_1(A-B) + (n-1)(C-D)f &= \lambda_2^{(1)}c_1, \\ \therefore (A-B - \lambda_2^{(1)})c_1 + (n-1)(C-D)f &= 0. \end{aligned} \quad (137)$$

今度は固有方程式の下半分 ($\{\eta^{\alpha\beta}\}$ に相当する部分) を考察する. まず, (1,2) 行目を考えると, 関係する G の行は $(C \ C \ D \ \dots \ D \ 0 \ \dots \ 0 \ P \ Q \ \dots \ Q \ R \ \dots \ R)$ である. ここで D は $n-2$ 個, Q は $2(n-2)$ 個, R は ${}_{n-2}C_2$ 個並んでいる. よって固有方程式 $G\mu_2^{(1)} = \lambda_2^{(1)}\mu_2^{(1)}$ の (1,2) 行目は,

$$Cc_1 + Cd_1 + (n-2)Dd_1 + \{P + (n-2)Q\}f + \{(n-2)Q + {}_{n-2}C_2R\}g = \lambda_2^{(1)}f, \quad (138)$$

であることが分かる．式 (133),(135) を使うと式 (138) は，

$$\frac{n-2}{n-1}(C-D)c_1 + \{P + (n-4)Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)}\}f = 0, \quad (139)$$

と書ける．

同様に (2,3) 行を考えると，

$$Dc_1 + 2Cd_1 + (n-3)Dd_1 + \{2Q + (n-3)R\}f + \{P + 2(n-3)Q + {}_{n-3}C_2R\}g = \lambda_2^{(1)}g, \quad (140)$$

となる．しかしこれは Appendix8.4.3 より，式 (139) と等しくなることが分かる．

よってふたつの独立な式 (137),(139) が 0 でない解をもつ条件より，固有値は次のように求まる．

$$\lambda_2^{(1)\pm} = \frac{1}{2}\{X \pm \sqrt{Y^2 + Z}\}, \quad (141)$$

$$X = A - B + P + (n-4)Q - (n-3)R, \quad (142)$$

$$Y = A - B - P - (n-4)Q + (n-3)R, \quad (143)$$

$$\begin{aligned} Z &= 4(n-1)(C-D)\frac{n-2}{n-1}(C-D) \\ &= 4(n-2)(C-D)^2. \end{aligned} \quad (144)$$

θ の値は， n 個あるが，各 θ に対応する固有ベクトルを $\mu_2^{(1)\pm}(\theta)$ とするとき， $\sum_{\theta=1}^n \mu_2^{(1)\pm}(\theta) = 0$ となるため， $\lambda_2^{(1)\pm}$ は各々 $(n-1)$ 重に縮退している．

同様に，固有ベクトルが次のようなときを考える．このとき，固有値を $\lambda_2^{(2)}$ とする．

$$\mu_2^{(2)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (n-1,n) \\ 0 & \cdots & 0 & c_2 & d_2 & \cdots & d_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

であるとすると， $\mu = 2$ の 1 行目は次のようになる．

$$c_2A + (n-1)d_2B = \lambda_2^{(2)}c_2. \quad (145)$$

ここで $\mu_1^{(2)}$ と $\mu_2^{(2)}$ との直交条件を課すと次式が得られる．

$$c_2 + (n-1)d_2 = 0. \quad (146)$$

よって式 (146) を使って式 (145) を書き直すと，

$$\lambda_2^{(2)} = A - B, \quad (147)$$

となる．これも， $(n-1)$ 重に縮退していることが分かる．

さらに，固有ベクトルが次のようなときを考える．このとき，固有値を $\lambda_2^{(3)}$ とする．

$$\mu_2^{(3)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (n-1,n) \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_3 & d_3 & \cdots & d_3 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

さきほどと同様に，次のような固有値をもつ．

$$\lambda_2^{(3)} = A - B. \quad (148)$$

これも $(n-1)$ 重に縮退している．

ここでは $(n-1)$ 重縮退が 4 つ見つかったので，固有ベクトルは $4(n-1)$ 個あることになる．結局，固有ベクトル μ_1 と μ_2 は合わせて $4n$ 次元の空間を張る．

4.1.3 ヘシアン固有値 (3)

3 種類目の固有ベクトルとして，特定の 2 つのレプリカ θ, ν について $\epsilon^\theta = h_1, \epsilon^\nu = h_1$ ，他は $\epsilon^\alpha = h_2$ ，また $\eta^{\theta\alpha} = \eta^{\nu\alpha} = v$ で他は $\eta^{\alpha\beta} = w$ となるような固有ベクトル

$$\mu_3 = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & (1,2) & (1,3) & \cdots & (1,n) & (2,3) & \cdots & (2,n) & (3,4) & \cdots & (n-1,n) \\ h_1 & h_1 & h_2 & \cdots & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & u & v & \cdots & v & v & \cdots & v & w & \cdots & w \end{pmatrix},$$

を探す．一般性を失わずに $\theta = 1, \nu = 2$ とする．

まず $\mu_1^{(1)}$ との直交性の十分条件より次のようになる．まず ϵ 部分は

$$2h_1 + (n-2)h_2 = 0, \quad (149)$$

となり，同様に， η 部分は次のようになる。

$$u + 2(n-2)v +_{n-2}C_2w = 0. \quad (150)$$

同じようにして， $\mu_3^{(1)}$ と $\mu_2^{(1)}$ との直交性の十分条件は，次のようになる．

まず ϵ 部分において，

$$c_1h_1 + d_1h_1 + (n-2)d_1h_2 = 0, \quad (151)$$

となり， η 部分は次のようになる．

$$fu + (n-2)fv = 0, \quad (152)$$

$$(n-2)gv +_{n-2}C_2gw = 0. \quad (153)$$

また, μ_1 と μ_2 の直交条件である式 (133) より, $c_1 = (1 - n)d_1$ を式 (151) に代入すると,

$$h_1 = h_2, \quad (154)$$

が求まる. また, 式 (152) 式 (153) よりそれぞれ

$$u + (n - 2)v = 0, \quad (155)$$

$$v + \frac{(n - 3)}{2}w = 0, \quad (156)$$

となるのでこれを式 (149) に代入すると, $nh_1 = 0$ となり, $n \neq 0$ より $h_1 = 0$ となる. よって式 (154) より

$$h_1 = h_2 = 0. \quad (157)$$

この関係式より, 固有方程式 $\mathcal{G}\mu_3 = \lambda_3\mu_3$ の上半分 ($\{\epsilon^\alpha\}$ の部分) は恒等式 $0 = 0$ となり, 自動的に満たされることが分かる. 固有方程式の下半分は \mathcal{G} の関係した行が

$$\left(C \ C \ D \ \dots \ D \ 0 \ \dots \ 0 \ P \ Q \ \dots \ Q \ R \ \dots \ R \right),$$

であり,

$$\mu_3 = \left(\begin{array}{cccccccccccc} \nu=1 & \dots & \nu=2 & \dots & \nu=3 & \dots & (1,2) & (1,3) & \dots & (2,n) & (3,4) & \dots & (n-1,n) \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & u & v & \dots & v & w & \dots & w \end{array} \right).$$

であるので, 固有方程式の下半分の 1 行目である (1,2) 行は,

$$Pu + 2(n - 2)Qv + {}_{n-2}C_1Rw = \lambda_3^{(1)}u, \quad (158)$$

より, 式 (155),(156) を使うと,

$$\lambda_3 = P - 2Q + R, \quad (159)$$

となる. また, 固有方程式の下半分すべての行で $\lambda_3 = P - 2Q + R$ が成り立つ (Appendix8.4.4 参照).

λ_3 の縮退度 (独立なベクトルの数) は ${}_nC_2 - n$ である (Appendix8.4.5 参照). λ_1, λ_2 の縮退度と合わせると $\frac{n(n+5)}{2}$, つまりこれで固有値をすべて尽くしていることが分かる.

固有値がすべて分かったので, それぞれの固有値が負になる条件を調べればよい.

4.2 Mixed state ($p = 3$)

まず, \mathcal{G} の行列要素を列挙する .

$$\mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\alpha\nu)} \equiv \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^{\alpha 2}} = -\beta J + (\beta J)^2 \left\{ 1 - [(\overline{\tanh \Xi_m})^2] \right\} = A_1. \quad (160)$$

ここで, Mixed state は $m_1 = m_2 = m_3 = m$ より,

$$\Xi = \sqrt{\kappa q} x + \beta J \sum_\nu m_\nu \xi_\nu \quad (161)$$

$$= \sqrt{\kappa q} x + \beta J m (\xi_1 + \xi_2 + \xi_3) \quad (162)$$

$$\equiv \Xi_m. \quad (163)$$

となるため, この量は ν によらないので, A_1 としている .

以下, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \delta$, $\mu \neq \nu$ としている .

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\alpha\mu)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial m_\mu^\alpha} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ [\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \xi^\nu \xi^\mu \rangle] - [\langle \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle \langle \sigma^\alpha \xi^\mu \rangle] \right\} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ [\xi^\nu \xi^\mu] - [\langle \sigma^\alpha \rangle^2 \xi^\mu \xi^\nu] \right\} \\ &= -(\beta J)^2 [(\overline{\tanh \Xi_m})^2 \xi^\mu \xi^\nu] \\ &= A_2 \quad (\mu, \nu \text{ によらない}). \end{aligned} \quad (164)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\nu)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial m_\nu^\beta} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ [\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle] - [\langle \sigma^\alpha \rangle \xi^\nu \langle \sigma^\beta \rangle \xi^\nu] \right\} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ [\overline{\tanh^2 \Xi_m}] - [(\overline{\tanh \Xi_m})^2] \right\} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ q - [(\overline{\tanh \Xi_m})^2] \right\} \\ &= B_1 \quad (\nu \text{ によらない}). \end{aligned} \quad (165)$$

最後の式変形は次の関係を用いている .

$$q = [\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle] = [\overline{\tanh^2 \Xi_m}], \quad (166)$$

$$m_\nu^\alpha = [\langle \sigma^\alpha \rangle \xi^\nu] = [\overline{\tanh \Xi_m} \xi^\nu] = m_\nu = m. \quad (167)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{(\alpha\nu)(\beta\mu)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial m_\mu^\beta} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ [\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \xi^\nu \xi^\mu] - [\langle \sigma^\alpha \rangle \langle \sigma^\beta \rangle \xi^\nu \xi^\mu] \right\} \\ &= (\beta J)^2 \left\{ \overline{\tanh^2 \Xi_m} \xi^\nu \xi^\mu - [(\overline{\tanh \Xi_m})^2 \xi^\mu \xi^\nu] \right\} \\ &= B_2. \end{aligned} \quad (168)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\nu)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\nu^\alpha} \\
&= \kappa\beta J \left[\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle - \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \langle \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle \right] \\
&= \kappa\beta J \left\{ \overline{[\tanh \Xi_m \xi^\nu]} - \overline{[\tanh^2 \Xi_m \cdot \tanh \Xi_m \xi^\nu]} \right\} \\
&= \kappa\beta J \left\{ m - \overline{[\tanh^2 \Xi_m \cdot \tanh \Xi_m \xi^\nu]} \right\} \\
&\equiv C \quad (\nu \text{ によらない}). \tag{169}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\nu\gamma)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\nu^\gamma} \\
&= \kappa\beta J \left[\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\gamma \xi^\nu \rangle - \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \langle \sigma^\gamma \xi^\nu \rangle \right] \\
&= \kappa\beta J \left\{ \overline{[\tanh^3 \Xi_m \xi^\nu]} - \overline{[\tanh^2 \Xi_m \cdot \tanh \Xi_m \xi^\nu]} \right\} \\
&\equiv D \quad (\nu \text{ によらない}). \tag{170}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\beta)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta}^2} \\
&= -\kappa + \kappa^2 \left\{ 1 - \langle (\sigma^\alpha \sigma^\beta)^2 \rangle \right\} \\
&= -\kappa + \kappa^2 \left\{ 1 - \overline{[(\tanh^2 \Xi_m)^2]} \right\} \\
&\equiv P. \tag{171}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\alpha\gamma)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} \\
&= \kappa^2 \left[\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\alpha \sigma^\gamma \rangle - \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle^2 \right] \\
&= \kappa^2 \left\{ \overline{[\tanh^2 \Xi_m]} - \overline{[(\tanh^2 \Xi_m)^2]} \right\} \\
&= \kappa^2 \left\{ q - \overline{[(\tanh^2 \Xi_m)^2]} \right\} \\
&\equiv Q. \tag{172}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} &\equiv \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\gamma\delta}} \\
&= \kappa^2 \left[\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\gamma \sigma^\delta \rangle - \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle^2 \right] \\
&= \kappa^2 \left\{ \overline{[\tanh^4 \Xi_m]} - \overline{[(\tanh^2 \Xi_m)^2]} \right\} \\
&\equiv R. \tag{173}
\end{aligned}$$

以上で \mathcal{G} の要素は出尽くしている。
これらを行列で表すと次のようになる。

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_1 & \mathcal{G}_2 \\ \mathcal{G}_3 & \mathcal{G}_4 \end{pmatrix}.$$

とおくと、それぞれの成分は次のようになっている。

であるから，固有方程式 (115) の $n + 1$ 行目は，

$$\begin{aligned} \{A_2 + (n - 1)B_2\}a_1 + \{A_1 + (n - 1)B_1\}a_2 + \{A_2 + (n - 1)B_2\}a_3 \\ + \{(n - 1)C + {}_{n-1}C_2D\}b = \lambda_1^{(1)}a_2, \end{aligned} \quad (175)$$

となる．

\mathcal{G} の第 $2n + 1$ 行目は，

$$\left(A_2 \ B_2 \ \dots \ B_2 \ A_2 \ B_2 \ \dots \ B_2 \ A_1 \ B_1 \ \dots \ B_1 \ C \ C \ D \ \dots \ D \right),$$

であるから，固有方程式 (115) の $2n + 1$ 行目は，

$$\begin{aligned} \{A_2 + (n - 1)B_2\}a_1 + \{A_2 + (n - 1)B_2\}a_2 + \{A_1 + (n - 1)B_1\}a_3 \\ + \{(n - 1)C + {}_{n-1}C_2D\}b = \lambda_1^{(1)}a_3, \end{aligned} \quad (176)$$

となる．

一方，同じ固有方程式の下の部分 ($\{\eta^{\alpha\beta}\}$ に相当する部分) は， \mathcal{G} の該当する行が

$$\left(C \ C \ D \ \dots \ D \ C \ C \ D \ \dots \ D \ C \ C \ D \ \dots \ D \ P \ Q \ \dots \ Q \ R \ \dots \ R \right),$$

であるから，

$$\begin{aligned} \{2C + (n - 2)D\}a_1 + \{2C + (n - 2)D\}a_2 + \{2C + (n - 2)D\}a_3 \\ + \{P + 2(n - 2)Q + {}_{n-2}C_2R\}b = \lambda_1^{(1)}b, \end{aligned} \quad (177)$$

となる．

ここで $\frac{1}{3}\{(174) + (175) + (176)\}$ を計算し， $\tilde{a} \equiv \frac{a_1 + a_2 + a_3}{3}$ とすると，次のように書ける．

$$\{A_1 + (n - 1)B_1\}\tilde{a} + 2\{A_2 + (n - 1)B_2\}\tilde{a} + \left\{(n - 1)C + \frac{(n - 1)(n - 2)}{2}D\right\}b = \lambda_1^{(1)}\tilde{a}. \quad (178)$$

式 (177) も書き直すと，

$$3\{2C + (n - 2)D\}\tilde{a} + \{P + 2(n - 2)Q + {}_{n-2}C_2R\}b = \lambda_1^{(1)}b, \quad (179)$$

となる．ここで，

$$A \equiv A_1 + (n - 1)B_1, \quad (180)$$

$$B \equiv \frac{2\{A_2 + (n - 1)B_2\}}{n - 1}, \quad (181)$$

とすると，式(178)は次のようになる．

$$A\tilde{a} + (n-1)B\tilde{a} + (n-1)Cb + \frac{(n-1)(n-2)}{2}Db = \lambda_1^{(1)}\tilde{a}. \quad (182)$$

これら 2 式(179)(182) が \tilde{a}, b ともに 0 でない解をもつための条件から，

$$\begin{pmatrix} A + (n-1)B - \lambda_1^{(1)} & (n-1)C + \frac{(n-1)(n-2)}{2}D \\ 3\{2C + (n-2)D\} & P + 2(n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R - \lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a} \\ b \end{pmatrix} = 0. \quad (183)$$

ここで次のようにおくことにする．

$$\alpha = A + (n-1)B, \quad (184)$$

$$\beta = (n-1)C + \frac{(n-1)(n-2)}{2}D = \frac{(n-1)}{2}\{2C + (n-2)D\}, \quad (185)$$

$$\gamma = 3\{2C + (n-2)D\}, \quad (186)$$

$$\delta = P + 2(n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R. \quad (187)$$

さらに

$$X = \alpha + \delta = A + (n-1)B + P + 2(n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R, \quad (188)$$

$$Y = \alpha - \delta = A + (n-1)B - P - 2(n-2)Q - \frac{(n-2)(n-3)}{2}R, \quad (189)$$

$$Z = 4\beta\gamma = 6(n-1)\{2C + (n-2)D\}^2. \quad (190)$$

とすると，固有値 $\lambda_1^{(1)}$ は次のように書ける．

$$\lambda_1^{(1)} = \frac{1}{2}\{X \pm \sqrt{Y^2 + Z}\}. \quad (191)$$

さらに，式(182)より \tilde{a} と b の関係が分かる．

$$\tilde{a} = -\frac{(n-1)\{2C + (n-2)D\}}{2\{A + (n-1)B - \lambda_1^{(1)}\}}b. \quad (192)$$

もうひとつの式(179)は自動的に満たされる．また， $a_1 + a_2 + a_3 = 3\tilde{a}$ より， $a_3 = 3\tilde{a} - a_1 - a_2$ を式(174)に代入すると，

$$\begin{aligned} & \{A_1 + (n-1)B_1\}a_1 + \{A_2 + (n-1)B_2\}a_2 \\ & + \{A_2 + (n-1)B_2\}\{3\tilde{a} - a_1 - a_2\} + \left\{(n-1)C + \frac{(n-1)(n-2)}{2}D\right\}b = \lambda_1^{(1)}a_1, \\ & \{A_1 + (n-1)B_1 - A_2 - (n-1)B_2 - \lambda_1^{(1)}\}a_1 \\ & = -\frac{(n-1)}{2}\{2C + (n-2)D\}b - 3\tilde{a}\{A_2 + (n-1)B_2\}. \end{aligned} \quad (193)$$

ここで式 (193) 右辺を $\Lambda(a, b)$ とおくと, 次のようになる.

$$\left\{A - \frac{(n-1)}{2}B - \lambda_1^{(1)}\right\}a_1 = \Lambda(a, b). \quad (194)$$

ここで式 (175) も同様な計算をおこなうと,

$$\left\{A - \frac{(n-1)}{2}B - \lambda_1^{(1)}\right\}a_2 = \Lambda(a, b). \quad (195)$$

式 (194),(195) より,

$$a_1 = a_2 = \frac{\Lambda(a, b)}{A - \frac{(n-1)}{2}B - \lambda_1^{(1)}}. \quad (196)$$

式 (192) を用いて b を消去すると,

$$\begin{aligned} \Lambda(a, b) &= -\frac{(n-1)}{2}\{2C + (n-2)D\}b - 3\tilde{a}\{A_2 + (n-1)B_2\} \\ &= \{A + (n-1)B - \lambda_1^{(1)}\}\tilde{a} - 3\tilde{a}\{A_2 + (n-1)B_2\} \\ &= \tilde{a}\{A + (n-1)B - \lambda_1^{(1)} - 3A_2 - 3(n-1)B_2\} \\ &= \tilde{a}\{A + (n-1)B - \lambda_1^{(1)} - \frac{3}{2}(n-1)B\} \\ &= \tilde{a}\left\{A - \frac{(n-1)}{2}B - \lambda_1^{(1)}\right\}. \end{aligned} \quad (197)$$

式 (197) を式 (196) に戻すと, $a_1 = a_2 = \tilde{a}$ となり, また $a_3 = 3\tilde{a} - a_1 - a_2$ より,

$$\therefore a_1 = a_2 = a_3 = \tilde{a}. \quad (198)$$

また, 式 (192) より, b を与えると解が一意に決まることが分かる.

よって, Mixed state 的な解として

$$\boldsymbol{\mu}_1^{(1)\pm} = \begin{pmatrix} \nu = 1 & \cdots & \nu = 2 & \cdots & \nu = 3 & \cdots & (1, 2) & \cdots & (n-1, n) \\ \tilde{a} & \cdots & \tilde{a} & \cdots & \tilde{a} & \cdots & b & \cdots & b \end{pmatrix},$$

が求まった.

同様に, 固有ベクトルが次のようなときを考える. このときの固有値を $\lambda_1^{(2)}$ とする.

$$\boldsymbol{\mu}_1^{(2)} = \begin{pmatrix} \nu = 1 & \cdots & \cdots & \nu = 2 & \cdots & \cdots & \nu = 3 & \cdots & \cdots & (1, 2) & \cdots & (n-1, n) \\ a'_1 & \cdots & a'_1 & a'_2 & \cdots & a'_2 & a'_3 & \cdots & a'_3 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\{A_1 + (n-1)B_1\}a'_1 + \{A_2 + (n-1)B_2\}(a'_2 + a'_3) = \lambda_1^{(2)}a'_1. \quad (199)$$

これと同様に添え字をサイクリックに入れかえた式も成り立つ． $\tilde{a} = \frac{1}{3}(a_1 + a_2 + a_3) = 0$ であるべきなので， $a_1 \neq 0$ と仮定すると， $a_2 + a_3 = -a_1$ ．これより，式(199)から，

$$\lambda_1^{(2)} = A_1 - A_2 + (n-1)(B_1 - B_2), \quad (200)$$

が求まった．これはサイクリックに見たされる．ゆえに， $a'_1 \neq 0$ より，

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ a'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

の二つが考えられる．よってここでは， $\lambda_1^{(1)}$ と $\lambda_1^{(2)}$ 合わせて固有ベクトルが全部で4つ見つかった．

4.2.2 ヘシアン固有値 (2)

次のような解 $\mu_2^{(1)}$ を考察する．

$$\mu_2^{(1)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (1,n) & (2,3) & \cdots & (n-1,n) \\ c_1 & d_1 & \cdots & d_1 & c_2 & d_2 & \cdots & d_2 & c_3 & d_3 & \cdots & d_3 & f & \cdots & f & g & \cdots & g \end{pmatrix}.$$

ところで，前節で求めた $\mu_1^{(1)}$ といま議論している $\mu_2^{(2)}$ は異なるものという直交性の条件を満たす必要がある． $\mu_1^{(1)}$ と $\mu_2^{(1)}$ の上半分 ($3n$ 次元の分) の内積が0であり，しかも下半分の内積も0であればよいので，まず上半分は， i がそれぞれの ν の値をとるとすると

$$c_i + (n-1)d_i = 0. \quad (201)$$

ここで，

$$\tilde{c} = \frac{1}{3}(c_1 + c_2 + c_3), \quad \tilde{d} = \frac{1}{3}(d_1 + d_2 + d_3),$$

とにおいて，式(201)の $i = 1 \sim 3$ で足して3で割ると，次式が求まる．

$$\tilde{c} = (1-n)\tilde{d}. \quad (202)$$

同様に下半分は，

$$(n-1)f +_{n-1}C_2g = 0,$$

より，

$$f = \frac{2-n}{2}g. \quad (203)$$

行列 \mathcal{G} の第 1 行目は ,

$$\left(A_1 \ B_1 \ \dots \ B_1 \ A_2 \ B_2 \ \dots \ B_2 \ A_2 \ B_2 \ \dots \ B_2 \ C \ C \ D \ \dots \ D \right)$$

であり , 第 $n+1$ 行目 , $2n+1$ 行目は A_1, B_1, \dots の位置がずれるだけであるから , 固有方程式 (115) の第 $n(i-1)+1$ 行目 ($i=1, 2, 3$) は ,

$$A_1 c_i + (n-1)B_1 d_i + A_2(c'_i + c''_i) + (n-1)B_2(d'_i + d''_i) + (n-1)Cf + {}_{n-1}C_2 Dg = \lambda_2^{(1)} c_i. \quad (204)$$

となる . ここで c_i, c'_i, c''_i は (c_1, c_2, c_3) をサイクリックにおきかえたものである . 例えば , $i=2$ なら $c_i, c'_i, c''_i = (c_2, c_3, c_1)$ である . さらに行列 $n(i-1)+2$ 行目は ,

$$B_1 c_i + \{A_1 + (n-2)B_1\}d_i + B_2(c'_i + c''_i) + \{A_2 + (n-2)B_2\}(d_i + d''_i) + \{C + (n-2)D\}f + \{(n-2)C + {}_{n-2}C_2 D\}g = \lambda_2^{(1)} d_i. \quad (205)$$

ここで $\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (204)$, $\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (205)$ を計算すると , それぞれ次のようになる .

$$(A_1 + 2A_2)\tilde{c} + (n-1)(B_1 + 2B_2)\tilde{d} + (n-1)Cf + {}_{n-1}C_2 Dg = \lambda_2^{(1)}\tilde{c}. \quad (206)$$

$$(B_1 + 2B_2)\tilde{c} + \{A_1 + (n-2)B_1 + 2A_2 + 2(n-2)B_2\}\tilde{d} + \{C + (n-2)D\}f + \frac{(n-2)}{2}\{2C + (n-3)D\}g = \lambda_2^{(1)}\tilde{d}. \quad (207)$$

ここで直交条件の式 (202),(203) を使うと , 式 (206),(207) は等しく ,

$$\{A_1 - B_1 + 2(A_2 - B_2) - \lambda_2^{(1)}\}\tilde{d} + \frac{(n-2)}{2}(C - D)g = 0, \quad (208)$$

となる (Appendix8.4.6 参照) .

次に , 同じ固有方程式の下の部分 ($\{\eta^{\alpha\beta}\}$ に相当する部分) を考察する . まず , (1,2) 行目を考えると , \mathcal{G} の該当する行は

$$\left(C \ C \ D \ \dots \ D \ C \ C \ D \ \dots \ D \ C \ C \ D \ \dots \ D \ P \ Q \ \dots \ Q \ R \ \dots \ R \right),$$

であるから ,

$$\begin{aligned} & C(c_1 + c_2 + c_3) + \{C + (n-2)D\}(d_1 + d_2 + d_3) \\ & \quad + \{P + (n-2)Q\}f + (n-2)Qg + {}_{n-2}C_2 Rg = \lambda_2^{(1)}, \\ \therefore & 3C\tilde{c} + 3\{C + (n-2)D\}\tilde{d} + \{P + (n-2)Q\}f \\ & \quad + \frac{(n-2)}{2}\{2Q + (n-3)R\}g = \lambda_2^{(1)}f, \end{aligned} \quad (209)$$

となる .

同様に (2,3) 行目を考えると ,

$$\begin{aligned}
& D(c_1 + c_2 + c_3) + \{2C + (n-3)D\}(d_1 + d_2 + d_3) \\
& \quad + \{2Q + (n-3)R\}f + \{P + 2(n-3)Q + {}_{n-3}C_2R\}g = \lambda_2^{(1)}, \\
\therefore \quad & 3D\tilde{c} + 3\{2C + (n-3)D\}\tilde{d} + \{2Q + (n-3)R\}f \\
& \quad + Pg + \frac{(n-3)}{2}\{4Q + (n-4)R\}g = \lambda_2^{(1)}g. \tag{210}
\end{aligned}$$

ここで直交条件の式 (202),(203) を用いて \tilde{c} と f を消去すると , 式 (209) と (210) は等しく ,

$$6(C-D)\tilde{d} + \{P + (n-4)Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)}\}g = 0, \tag{211}$$

となる (Appendix8.4.7 参照) .

よってふたつの独立な式 (208),(211) が 0 でない解をもつ条件より , 固有値は次のように求まる .

$$\lambda_2^{(1)\pm} = \frac{1}{2}\{X' \pm \sqrt{(Y')^2 + Z'}\}, \tag{212}$$

$$X' = A_1 - B_1 + 2(A_2 - B_2) + P + (n-4)Q - (n-3)R, \tag{213}$$

$$Y' = A_1 - B_1 + 2(A_2 - B_2) - P - (n-4)Q + (n-3)R, \tag{214}$$

$$Z' = 12(n-2)(C-D)^2. \tag{215}$$

また , θ の値は n 個あるが , 各 θ に対応する固有ベクトルを $\mu_2^{(1)\pm}(\theta)$ とするとき , $\sum_{\theta=1}^n \mu_2^{(1)\pm}(\theta) = 0$ となるため , $\lambda_2^{(1)\pm}$ は各々 $(n-1)$ 重に縮退している .

同様に , 固有ベクトルが次のようなときを考える . このときの固有値を $\lambda_2^{(2)}$ とする .

$$\mu_2^{(2)} = \begin{pmatrix} \nu=1 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=2 & \cdots & \cdots & \cdots & \nu=3 & \cdots & \cdots & \cdots & (1,2) & \cdots & (n-1,n) \\ c_1 & d_1 & \cdots & d_1 & c_2 & d_2 & \cdots & d_2 & c_3 & d_3 & \cdots & d_3 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

このとき , 式 (209),(210) において $f = g = 0$ より , $\tilde{d} = \tilde{c} = 0$ となるべきなので , まず $d'_i + d''_i = -d_i$ とすると , 式 (205) は ,

$$\{A_1 - B_1 - (A_2 - B_2)\}d_i = \lambda_2^{(2)}d_i, \tag{216}$$

となる . これより固有値が次のように求まる .

$$\lambda_2^{(2)} = A_1 - A_2 - (B_1 - B_2). \tag{217}$$

また ,

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

の2種類を独立にとることができ、また、

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = (1-n)\mathbf{d},$$

である。また、 $\lambda_2^{(2)}$ も各々 $(n-1)$ 重に縮退している。

ここでは $(n-1)$ 重縮退が4つ見つかったので、固有ベクトルは $4(n-1)$ 個あることが分かった。結局、固有ベクトル μ_1 と μ_2 は合わせて $4n$ 次元の空間をはる。

4.2.3 ヘシアン固有値 (3)

3種類目の固有ベクトルとして、次のような固有ベクトルを探す。

$$\mu_3 = \begin{pmatrix} r_1 & r_1 & s_1 & \dots & s_1 & r_2 & r_2 & s_2 & \dots & s_2 & r_3 & r_3 & s_3 & \dots & s_3 \\ u & v & \dots & v & v & \dots & v & w & \dots & w \end{pmatrix}. \quad (218)$$

ここで、 r_1, \dots, s_1 が $\nu=1$ 、 r_2, \dots, s_2 が $\nu=2$ 、 r_3, \dots, s_3 が $\nu=3$ 、それ以降は $(1,2), (1,3), \dots, (1,n), (2,3), \dots, (2,n), (3,4), \dots, (n-1,n)$ が対応している。まず $\mu_{(1)}$ との直交性の十分条件より次のようになる。まず ϵ 部分は

$$2r_i + (n-2)s_i = 0 \quad (i=1 \sim 3), \quad (219)$$

となり、同様に、 η 部分は次のようになる。

$$u + 2(n-2)v + {}_{n-2}C_2 w = 0. \quad (220)$$

同じようにして、 μ_3 と $\mu_2^{(1)}$ との直交性の十分条件は、まず ϵ 部分において、

$$c_i r_i + d_i r_i + (n-2)d_i s_i = 0 \quad (i=1 \sim 3), \quad (221)$$

となり、 η 部分は次のようになる。

$$f u + (n-2) f v = 0, \quad (222)$$

$$(n-2) g v + {}_{n-2}C_2 g w = 0. \quad (223)$$

また、 $\mu_1^{(1)}$ と $\mu_2^{(1)}$ の直交条件である式(202)より $c_i = (1-n)d_i$ と、式(204)を用いる。

Hopfield Attractor との違いは、Hopfield Attractor では式 (219) と式 (221) は $i = 1$ のみであるということであるが、以下 Hopfield Attractor での計算と同様におこなうことができる。よって、

$$\lambda_3 = P - 2Q + R,$$

となる。また、固有方程式の下半分のすべての行で $\lambda_3 = P - 2Q + R$ が成り立つ。

Hopfield Attractor のときと同様に、 λ_3 の縮退度 (独立なベクトルの数) は ${}_nC_2 - n$ である。 λ_1, λ_2 の縮退度と合わせると、 $\frac{n(n+5)}{2}$ 、つまりこれで固有値をすべて尽くしていることが分かる。

固有値がすべて分かったので、それぞれの固有値が負になる条件を調べればよい。

5 数値結果

我々は，パラメータを $K = 1$, $\mu = 1$ と固定し， \tilde{T} , T , ϵ を変化させて，数値計算をおこなった．その結果をここに記す．

5.1 数値計算の方法

平衡状態における理論式は，鞍点方程式 (77)~(80),

$$\begin{aligned}\hat{q} &= \kappa q, \\ q &= \left[\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi \left(\int Dx \cosh^n \Xi \right)^{-1} \right], \\ \hat{m}_\nu &= -\beta J m_\nu, \\ m_\nu &= \left[\xi^\nu \int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi \left(\int Dx \cosh^n \Xi \right)^{-1} \right],\end{aligned}$$

であり，これを非線形連立方程式の解を求めるブレント法 (多次元ニュートン法) を用いて解いた．

また，ランジュバン方程式，

$$\tau \frac{d}{dt} J_{ij} = \frac{1}{N} (\epsilon \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{sp} + K_{ij}) - \mu J_{ij} + \eta_{ij}(t) \sqrt{\frac{\tau}{N}}. \quad i < j = 1 \dots N \quad (48)$$

のシミュレーションを以下の手順でおこなった．

ランジュバン方程式 (48) において，右辺の第 1 項と第 2 項をまとめて $\tau f(\{J_{kl}\})$ とおき，式 (48) を t から $t+h$ まで積分する．

$$J_{ij}(t+h) - J_{ij}(t) = \int_t^{t+h} dt' f(\{J_{kl}(t')\}) + \frac{1}{\sqrt{N\tau}} \int_t^{t+h} dt' \eta_{ij}(t').$$

ここで，右辺の最後の項において，

$$X = \int_t^{t+h} dt' \eta_{ij}(t').$$

とおく．すると， X の平均, 分散は次のようになる．

$$\begin{aligned}\langle X \rangle &= \int_t^{t+h} dt' \langle \eta_{ij}(t') \rangle = 0 \\ \langle X^2 \rangle &= \left\langle \int_t^{t+h} dt' \eta_{ij}(t) \int_t^{t+h} dt'' \eta_{ij}(t'') \right\rangle \\ &= \int_t^{t+h} dt' \int_t^{t+h} dt'' \langle \eta_{ij}(t') \eta_{ij}(t'') \rangle \\ &= \int_t^{t+h} dt' \int_t^{t+h} dt'' 2\tilde{T} \delta(t' - t'') \\ &= \int_t^{t+h} dt' 2\tilde{T} \\ &= 2\tilde{T}h.\end{aligned}$$

よって, X は平均 0 分散 $2\tilde{T}h$ のガウス分布であり, $X = \sqrt{2\tilde{T}h}\xi_{ij}(t)$ とおくと,

$$J_{ij}(t+h) - J_{ij}(t) \simeq hf(\{J_{kl}(t)\}) + \sqrt{\frac{2\tilde{T}h}{N\tau}}\xi_{ij}(t).$$

ここで, $\xi_{ij}(t)$ は平均 0 分散 1 のガウス分布である.

また, スピン変数 $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_{sp}$ は非常に速く変化すると考える.

シミュレーションの具体的な手順を以下に示す. ここで $\tau = 1$ とする.

1. シナプス結合荷重 $\{J_{ij}(0)\}$ を与える.

2. $\{J_{ij}\}$ をとめて, $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_{sp}$ を計算する.

(a) $\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ からランダムに σ_i を選ぶ. その σ_i を $-\sigma_i$ に変える. そして, エネルギーの変化 $\Delta H = H(-\sigma_i) - H(\sigma_i)$ を計算する. 一様乱数 r を発生させ, $r \leq e^{-\beta\Delta H}$ なら $-\sigma_i$ を採用し, $r > e^{-\beta\Delta H}$ なら σ_i のままにする.

この (a) の操作を N 回おこなうことを, 1 モンテカルロステップ (以下, [MCS] とする) と定義する. つまり, 1 つのスピンを反転させるかどうか決める動作 (a) を 1 ミクロステップとすると,

$$1 \text{ [MCS]} = N \text{ [ミクロステップ]}$$

となる.

まず R_1 [MCS] おこない, これは過渡的だと思って捨て, 使わない. 次の R_2 [MCS] で $\sigma_i\sigma_j$ の平均を計算する. これは, 具体的に書くと,

$$\begin{aligned} t &= R_1 + 1 \text{ [MCS]} & S(i, j) &= \sigma_i\sigma_j \\ t &= R_1 + 2 \text{ [MCS]} & S(i, j) &= S(i, j) + \sigma_i\sigma_j \\ & & \vdots & \\ t &= R_1 + R_2 \text{ [MCS]} & \langle\sigma_i\sigma_j\rangle &= \frac{1}{R_2}S(i, j) \end{aligned}$$

のようにするということである.

3. 次式を計算する.

$$J_{ij}(h) = J_{ij}(0) + hf(\{J_{kl}(0)\}) + \sqrt{\frac{2\tilde{T}h}{N\tau}}\xi_{ij}(0), \quad (224)$$

ここで, ξ_{ij} は平均 0, 分散 1 のガウス分布から生成する.

4. 2, 3 を R_3 回繰り返す.

5. $R_3 + 1$ 回から $R_3 + R_4$ 回で, 物理量の平均を計算する.

今回の計算では, $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = 500$ とした.

5.2 Hopfield model と Partial Annealing との理論結果の比較

図 13 に、Partial Annealing における平衡状態についてオーダーパラメータの温度依存性の理論結果を示す．また、図 14 に、Hopfield model の平衡状態の結果を Partial Annealing の結果とともに示す．

ちなみに、図 9 で示した Hopfield model の相転移温度は 1 であったが、今 Partial Annealing のスケールと合わせるため、Hopfield Attractor で $T_c = 0.58$ (Mixed state では $T_c = 0.27$) となっている．つまり、Hopfield model で $J_{ij} = 1$ としていたのが、Partial Annealing での $J = \frac{K}{\mu\sqrt{p}}$ に対応させたからである．

AT 安定性を調べると、Hopfield Attractor の上のブランチ (q, m_μ の大きいもの) は、安定であり、相転移温度は図 13 での存在領域の最大値となるが、Mixed state の上のブランチでは、 $\epsilon = 0.5$ のとき安定なのは $T = 0.38$ までであることが分かった．相転移温度をまとめたものが表 1 である．

図 14、表 1 を見て分かるように、Hopfield model に Partial Annealing をおこなって ϵ の値を増やすと、安定な領域が増えている．このことは、Hopfield Attractor、Mixed state どちらにおいても言うことができる．

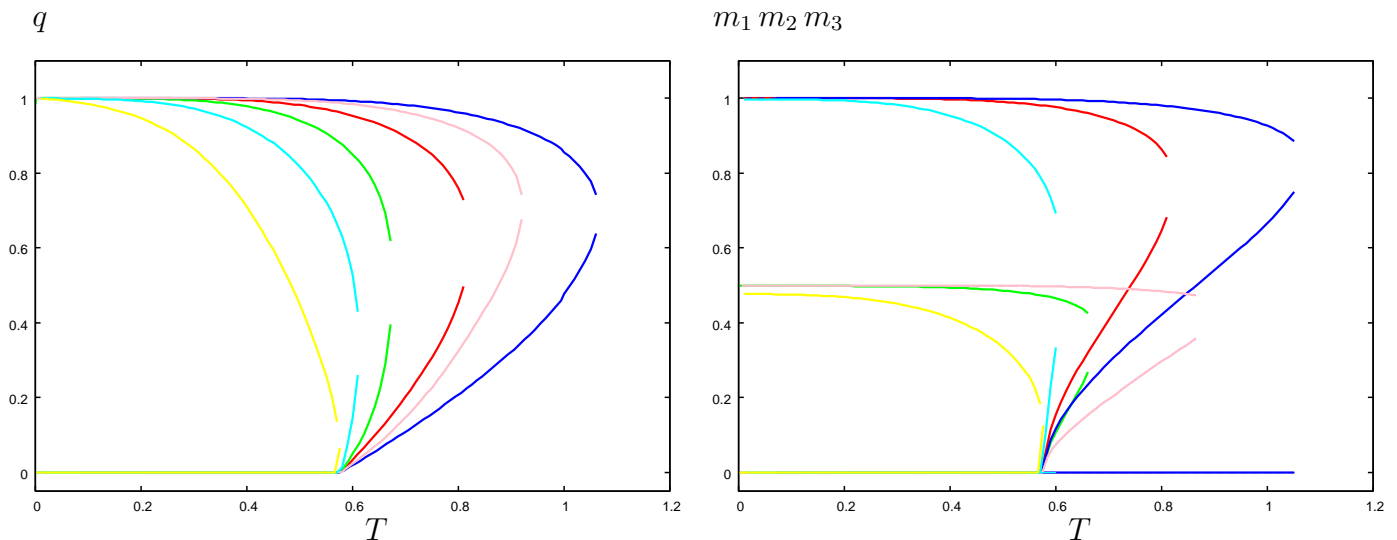


図 13: Partial Annealing 理論曲線 ($\tilde{T} = 0.1, K = 1.0, \mu = 1.0$)

左図 … 横軸：温度 T ，縦軸： q ．

右図 … 横軸：温度 T ，縦軸： m ．

Hopfield Attractor (水色： $\epsilon = 0.5$ ，赤： $\epsilon = 1.0$ ，青： $\epsilon = 1.5$)

Mixed state (黄色： $\epsilon = 0.5$ ，緑： $\epsilon = 1.0$ ，ピンク： $\epsilon = 1.5$)

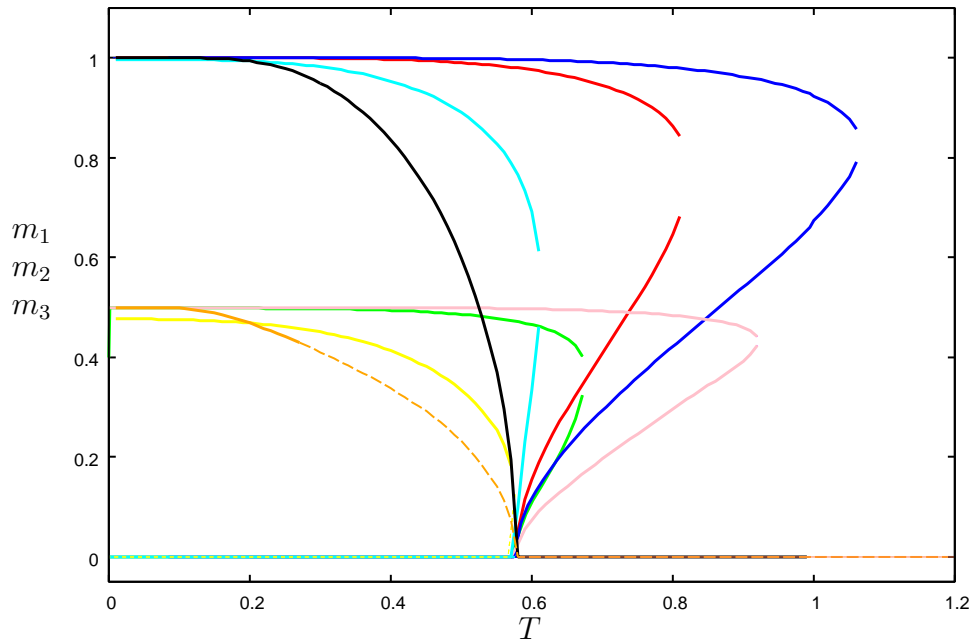


図 14: Partial Annealing 理論 ($\tilde{T} = 0.1, K = 1.0, \mu = 1.0$) と Hopfield model をかさねたもの .
 横軸 : 温度 T , 縦軸 : m .
 Partial Annealing の ϵ ごとの曲線の色は図 13 と同じ . Hopfield model の Hopfield Attractor
 は黒のラインで示したもの , Mixed state はオレンジのラインで示したもの .

	Hopfield Attractor	Mixed state	$\frac{3M}{H}$
Hopfield model	0.58	0.27	0.47
$\epsilon = 0.5$	0.61	0.38	0.62
$\epsilon = 1.0$	0.83	0.68	0.82
$\epsilon = 1.5$	1.07	0.92	0.86

表 1: Hopfield model と Partial Annealing ($\tilde{T} = 0.1, K = 1, \mu = 1.0$) のそれぞれの ϵ に対する
 Hopfield Attractor , Mixed state の相転移温度とその比 .

5.3 理論とシミュレーションの比較

ここでは、Hopfield model と Partial Annealing の理論とシミュレーション結果についてアトラクタごとに比較する。

5.3.1 Hopfield Attractor

まずは、Hopfield Attractor において、Hopfield model と Partial Annealing とともに理論とシミュレーション結果を比較する (図 15)。この結果より、シミュレーション結果がきちんと理論に重なっていることが分かる。シミュレーションでも、Hopfield model に Partial Annealing をおこなって ϵ を増やしていくと、安定領域が増えることを確認することができた。

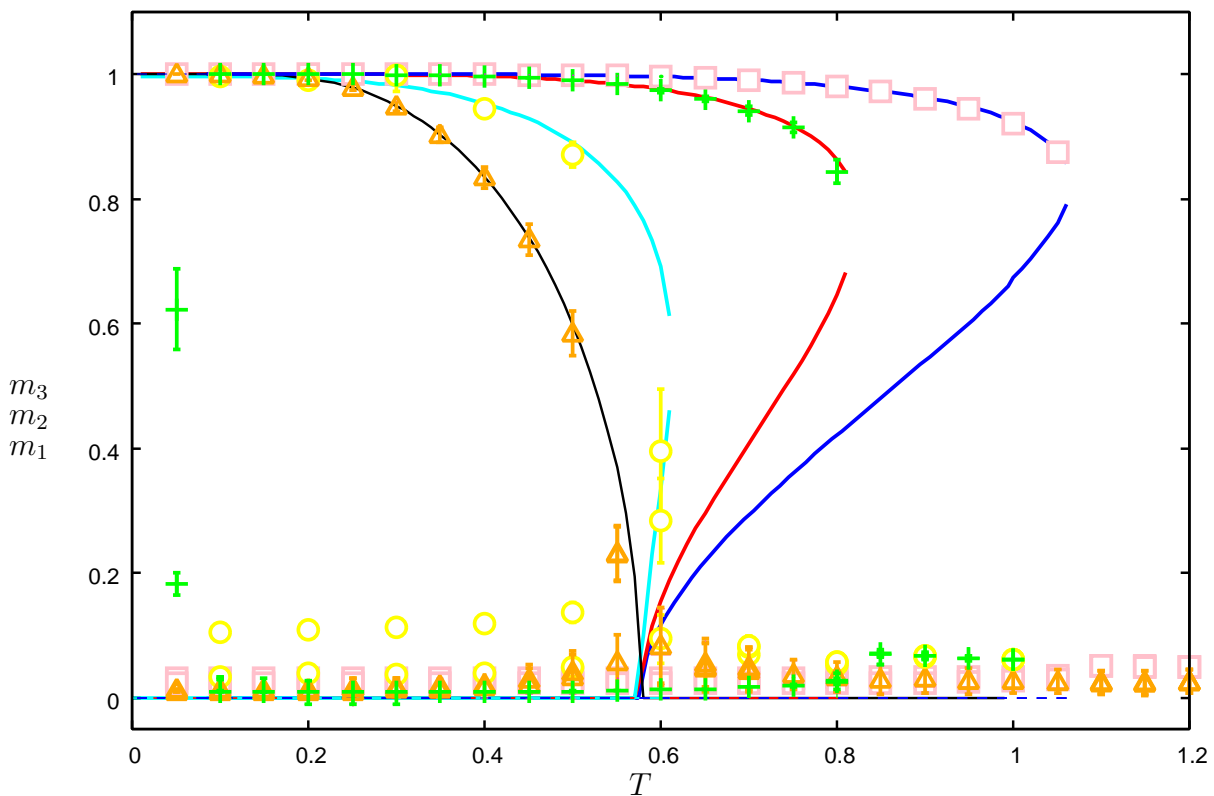


図 15: Hopfield model と Partial Annealing の Hopfield Attractor のシミュレーション結果 .
3つのパターンとのオーバーラップ m_1, m_2, m_3 の温度変化.

横軸：温度 T , 縦軸： m . ($\tilde{T} = 0.1, K = 1.0, \mu = 1.0, N = 400$)

曲線は理論結果 (黒：Hopfield model , 水色： $\epsilon = 0.5$, 赤： $\epsilon = 1.0$, 青： $\epsilon = 1.5$)

記号はシミュレーション結果 (オレンジ：Hopfield model , 黄色： $\epsilon = 0.5$, 緑： $\epsilon = 1.0$,
ピンク： $\epsilon = 1.5$)

5.3.2 Mixed state

次に，Mixed state において Hopfield model と Partial Annealing とともに理論とシミュレーション結果を比較する (図 16) .

Hopfield Attractor 同様，シミュレーション結果がきちんと理論に重なっていることが分かる . Mixed state においても，シミュレーションで Hopfield model に Partial Annealing をおこなって ϵ を増やすと，相転移温度が大きくなり，また m の値も大きくなり，安定領域が増すことを確認できた .

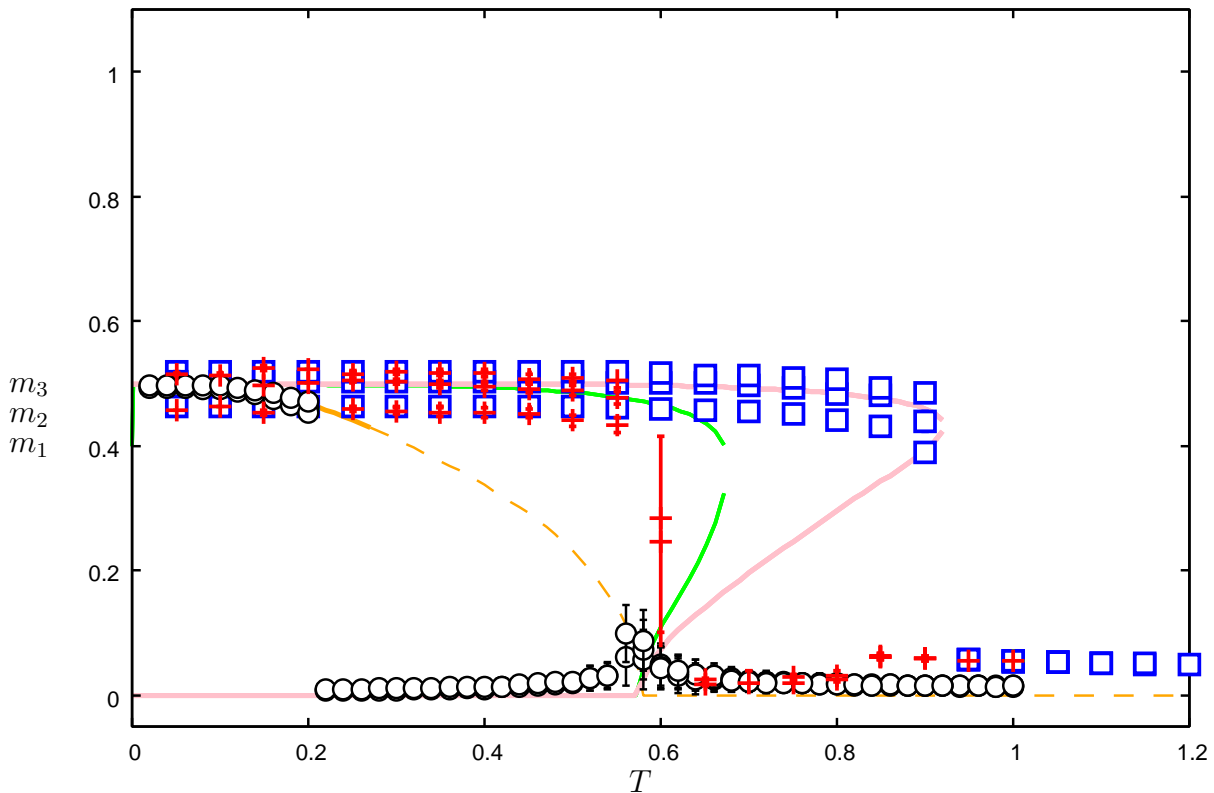


図 16: Hopfield model と Partial Annealing の Mixed state のシミュレーション結果 .
3つのパターンとのオーバーラップ m_1, m_2, m_3 の温度変化 .

横軸 : 温度 T , 縦軸 : m . ($\tilde{T} = 0.1, K = 1.0, \mu = 1.0, N = 500$)

曲線は理論結果 (オレンジ : Hopfield model , 緑 : $\epsilon = 1.0$, ピンク : $\epsilon = 1.5$)

記号はシミュレーション結果 (黒 : Hopfield model , 赤 : $\epsilon = 1.0$, 青 : $\epsilon = 1.5$)

5.3.3 オーダーパラメーター q の理論とシミュレーションの比較

同様に、オーダーパラメーター q についてもシミュレーションをおこなった。その結果が以下の図である。 ϵ の値ごとに示している。

オーダーパラメーター m のシミュレーション結果と同様、これも理論とシミュレーションがきちんと重なっていることが分かる。

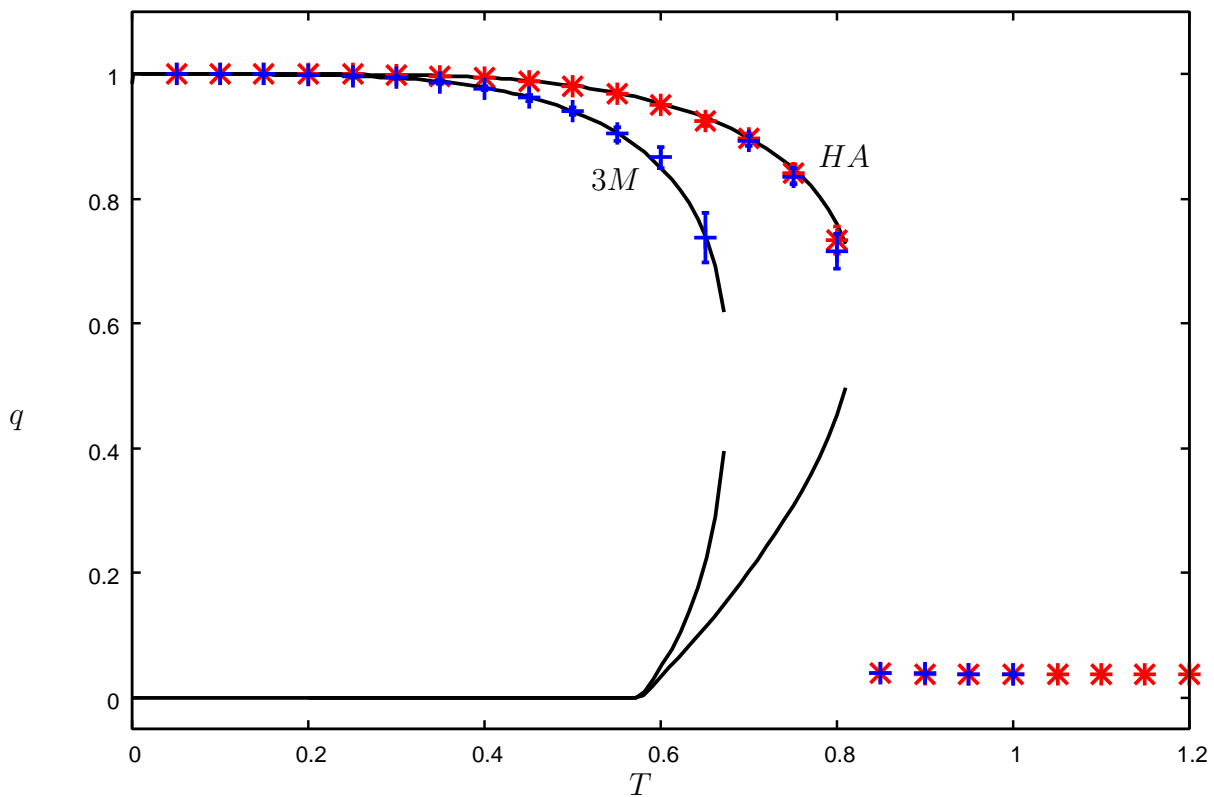


図 17: オーダーパラメーター q のシミュレーション結果。

横軸：温度 T ，縦軸： q ($\epsilon = 1.0$ ， $\tilde{T} = 0.1$ ， $K = 1.0$ ， $\mu = 1.0$ ， $N = 500$)

黒の曲線は理論結果。

記号はシミュレーション結果 (赤：Hopfield Attractor，青：Mixed state)

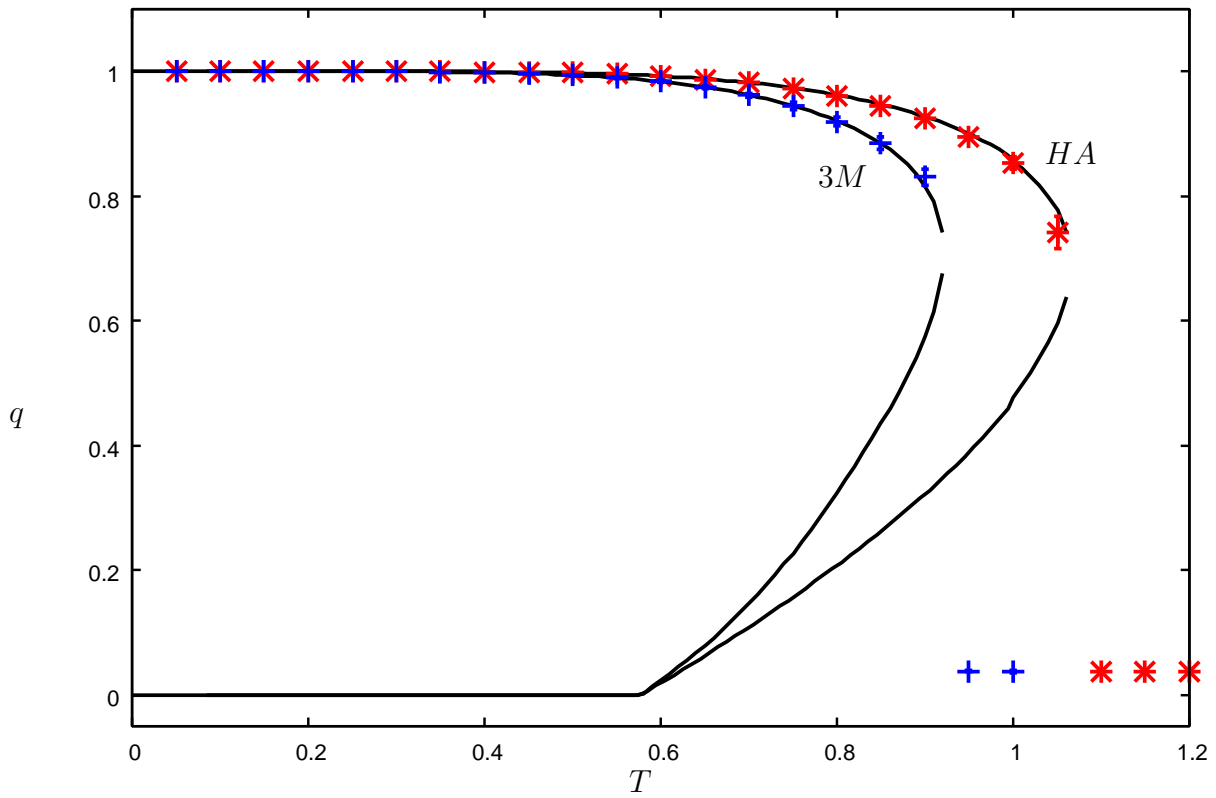


図 18: オーダーパラメーター q のシミュレーション結果 .

横軸 : 温度 T , 縦軸 : q ($\epsilon = 1.5$, $\tilde{T} = 0.1$, $K = 1.0$, $\mu = 1.0$, $N = 500$)

曲線は理論結果 .

記号はシミュレーション結果 (赤 : Hopfield Attractor , 青 : Mixed state) .

5.4 相図

ここでは、第3章で求めた相転移温度を相図にしてそれぞれ描く。

5.4.1 T - ϵ

まずはじめに、温度 T と、学習の強さ ϵ との関係を示す。

それが図19のふたつ(上図: $\tilde{T} = 0.1$, 下図: $\tilde{T} = 0.5$)である。

図で、実線は2次相転移線、点線は1次相転移線である。2次相転移線について、

赤: $SG \leftrightarrow P$

青: $M \leftrightarrow P$

緑: $SG \leftrightarrow M$

である。ここで M は Hopfield Attractor と Mixed state を意味する。1次相転移線については、

水色: HA

ピンク: $3M$

オレンジ: SG

である。

まず、図19の上図を説明する。 ϵ の値が0.3あたりより小さくなると、1次相転移は起こらず、2次相転移のみ起こる。一方、 ϵ の値が0.3あたりより大きくなると、温度の高い方から低い方へ見ていったとき(グラフで右から左に見ていく)、はじめに1次相転移が起こり、2次相転移は起こらないことが分かる。この結果より、 ϵ が大きくなると、相転移の種類が2次から1次へと変わることが分かる。

また、この相図19上図で、 $\epsilon = 1.0$ のラインに注目してみる。 $\epsilon = 1.0$ のラインに沿って温度の高い方から低い方へと見ていくと、まず Hopfield Attractor への1次相転移が起こり、さらに温度を下げていくと Mixed state への1次相転移が起こり、さらに SG への1次相転移が起こることが分かる。図20に、 $\epsilon = 1.0, \tilde{T} = 0.1$ におけるオーダーパラメータの温度変化を示す。このときの相転移温度は、図20の1次相転移が起こっているときの温度に対応する。はじめに、Hopfield Attractor, Mixed state への1次相転移が起こっているのので、図19上図での青いラインにおける温度、すなわち $P \leftrightarrow M$ の2次相転移の温度が図20で、Hopfield Attractor と Mixed state が $q = 0, m = 0$ となる温度と対応する。さらに、 SG の1次相転移と2次相転移が図19上図と図20で、きちんと対応していることが確認できる。

次に、相図19上図で $\epsilon = 0.5$ のラインに注目してみる。ちなみに、この条件に対応しているのが図21である。相図19上図で $\epsilon = 0.5$ のラインに沿って温度の高い方から低い方へ見ていくと、まず Hopfield Attractor への1次相転移が起こる。次に見える $P \leftrightarrow M$ の2次相転移の温度は、図21で Hopfield Attractor と Mixed state が $q = 0, m = 0$ となる温度に対応する。前にも述べたとおり、 $\epsilon = 0.5, \tilde{T} = 0.1$ のときの Mixed state の AT 安定な領域は $T = 0.38$ まで

であったので、図 21 で、 $T = 0.38$ より高温側では、Mixed state は不安定である。さらに図 19 上図の $\epsilon = 0.5$ のラインで温度を下げると、 $P \leftrightarrow SG$ への 2 次相転移が起こるが、これよりも高温ですでに M となっていることから、不安定であると思われる。SG への 1 次相転移は起こらず、2 次相転移が起こっている様子は図 21 から分かる。

次に、 \tilde{T} の値を今より大きくして、 $\tilde{T} = 0.5$ としたときの相図を図 19 の下図に示す。図 19 上図と図 19 下図を比較すると、 \tilde{T} が大きくなると、1 次相転移の起こらない ϵ の小さな領域では $SG \leftrightarrow P$ の 2 次相転移が $P \leftrightarrow M$ の 2 次相転移よりも先に起こる。また、図 19 下図でも $\epsilon = 1.0$ のラインに注目し、温度の高い方から低い方へ見ていくと、 $P \leftrightarrow SG$ の 2 次相転移が起こり、次に Hopfield Attractor への 1 次相転移、 $SG \leftrightarrow M$ の 2 次相転移が起こることがわかる。

さらに、 $\epsilon = 0.5$ のラインに注目すると、1 次相転移は起こらず、はじめに $SG \leftrightarrow P$ の 2 次相転移が起こる。次に $M \leftrightarrow P$ の 2 次相転移があるが、すでに SG が安定になっているので、これは不安定であると思われる。

ϵ の値が 1.5 あたりより大きくなると、1 次相転移のみ起こることが分かる。さらに、 $\tilde{T} = 0.1$ のときは $SG \leftrightarrow M$ の 2 次相転移は ϵ が負の領域にしかなかったが、 $\tilde{T} = 0.5$ になると、 ϵ が正の領域で現れる。

以上は、AT 安定性を考慮していない相図となっている。予備的計算では $\tilde{T} = 0.1$ で、AT 安定性を考慮すると、図 19 上図で示した Hopfield Attractor の相転移温度は変わらないが、Mixed state では ϵ が小さくなると、不安定化し、相転移温度が下がるということが分かっている。すなわち、Mixed state では、学習の強さである ϵ を入れて増やしていくことによって、安定な存在領域が増えると言える。

また、 SG で AT 安定性を調べると、存在領域のすべてで不安定なことが分かった。

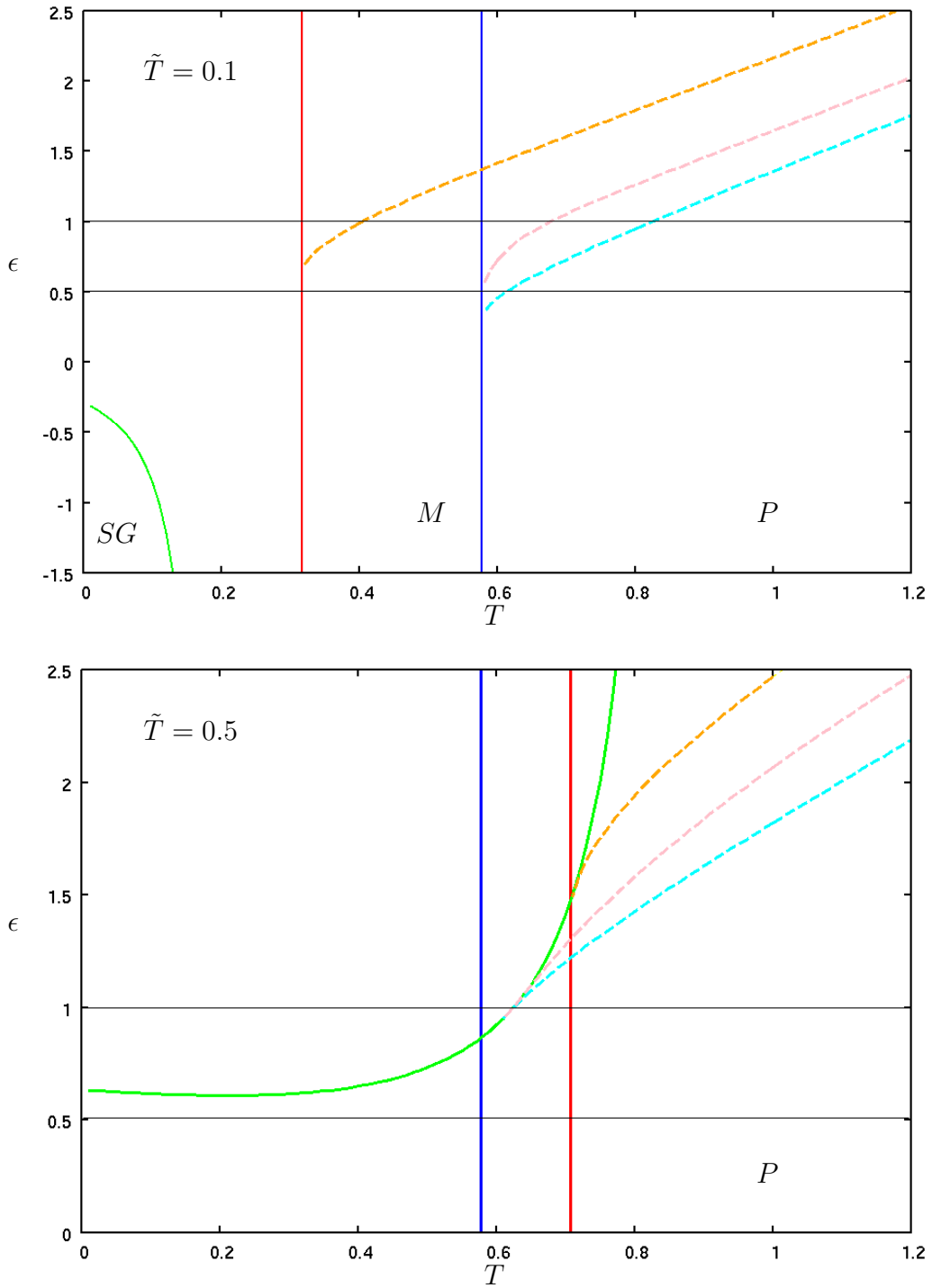


図 19: \tilde{T} を固定して $K = 1.0$, $\mu = 1.0$ で描いた相図．横軸：温度 T ，縦軸： ϵ ．

上図は $\tilde{T} = 0.1$ ．下図は $\tilde{T} = 0.5$ ．

2次相転移 (赤： $SG \leftrightarrow P$ ，青： $M \leftrightarrow P$ ，緑： $SG \leftrightarrow M$)

1次相転移 (水色： HA ，ピンク： $3M$ ，オレンジ： SG)

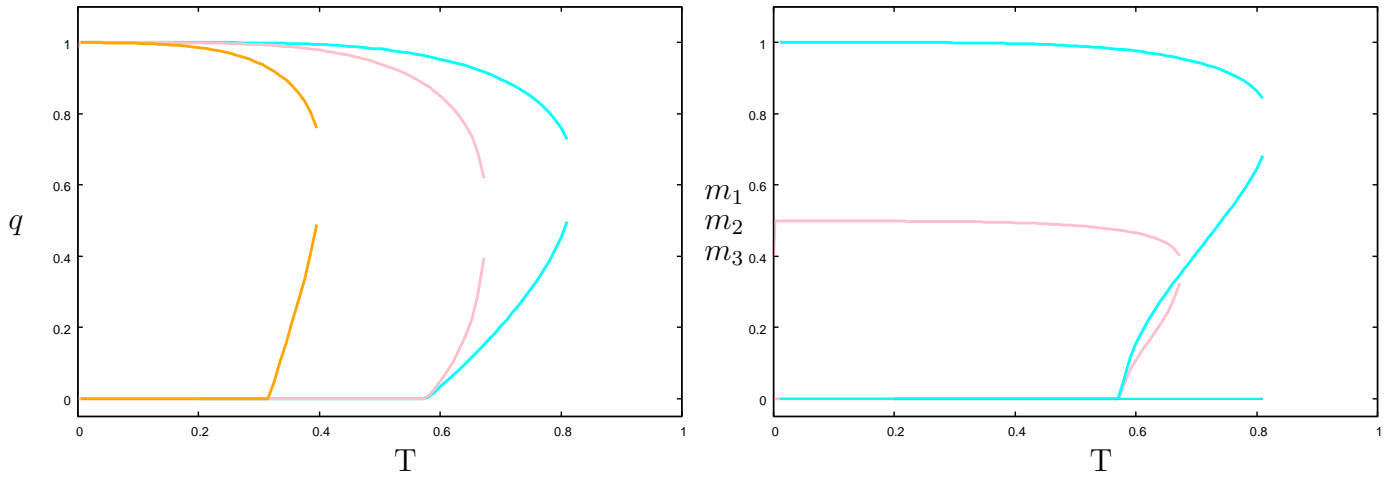


図 20: $\epsilon = 1.0, \tilde{T} = 0.1$ のとき, 左図は q を, 右図は m を描いたもの.
 水色: HA , ピンク: $3M$, オレンジ: SG

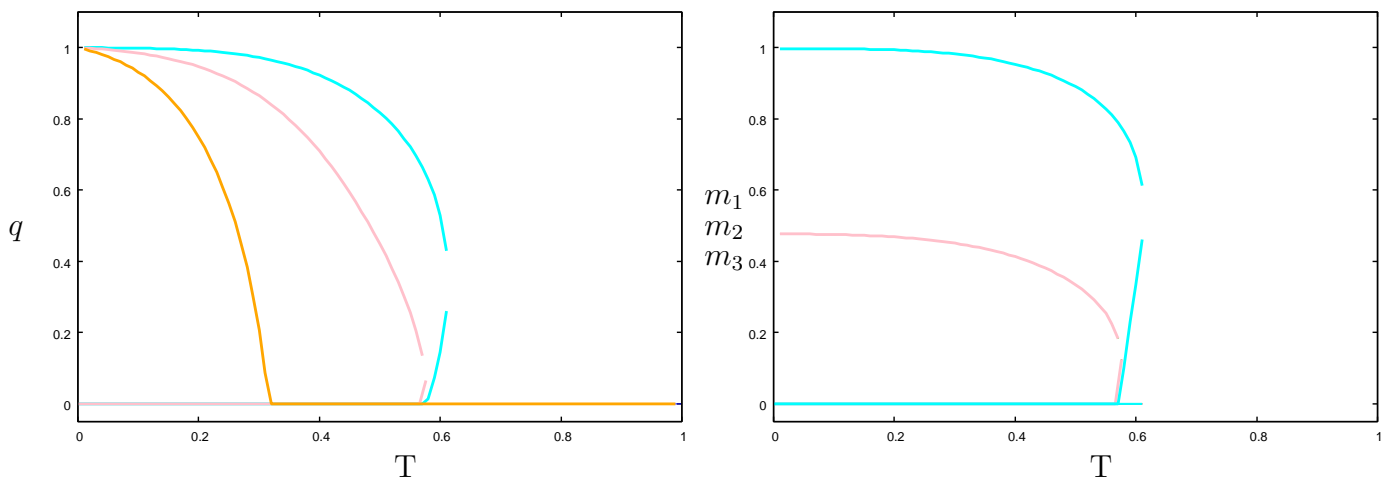


図 21: $\epsilon = 0.5, \tilde{T} = 0.1$ のとき, 左図は q を, 右図は m を描いたもの.
 水色: HA , ピンク: $3M$, オレンジ: SG

5.4.2 $T-\tilde{T}$

次に、 ϵ の値を固定して $T-\tilde{T}$ で相図を描いたものが、図 22 である。

図 22 と、図 19 との対応を見る。まず、図 22 で $\tilde{T} = 0.1$ のラインを温度の高い方から低い方へ見ていく。すると、はじめに Hopfield Attractor への 1 次相転移が起こり、次に Mixed state への 1 次相転移が起こるのが図 19 上図と対応している。さらに温度を下げると、実際には見えない、 $M \leftrightarrow P$ 、 $SG \leftrightarrow P$ の 2 次相転移が対応していることが分かる。

同様に、図 22 で $\tilde{T} = 0.5$ のラインを見る。1 次相転移は起こらず、まず $SG \leftrightarrow P$ の 2 次相転移が出現し、さらに $SG \leftrightarrow M$ の 2 次相転移があり、 $M \leftrightarrow P$ の 2 次相転移があるのが図 19 下図ときちんと対応している。

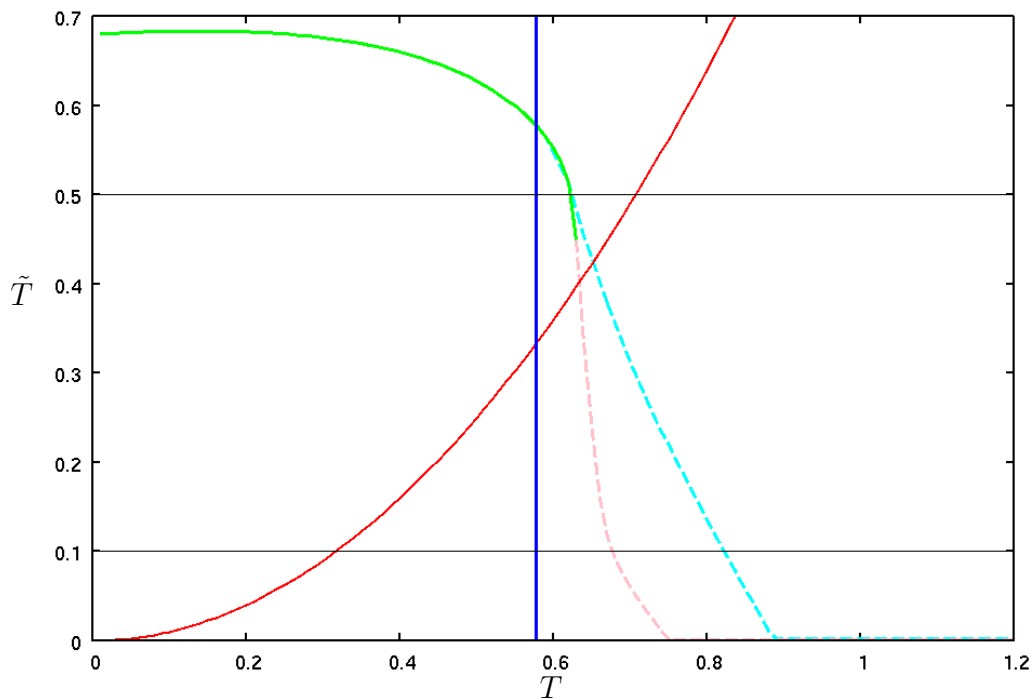


図 22: $\epsilon = 1.0$, $K = 1.0$, $\mu = 1.0$ での相図。横軸：温度 T , 縦軸： \tilde{T} .

2 次相転移 (赤： $SG \leftrightarrow P$, 青： $M \leftrightarrow P$, 緑： $SG \leftrightarrow M$)

1 次相転移 (水色： HA , ピンク： $3M$)

ここでは、図 19 と同様に、AT 安定性を考慮していない相図となっている。

次に、図 23 は、 $\epsilon = 1.0$ と $\epsilon = 3.0$ で $T-\tilde{T}$ の相図を重ねて描いたものである。 $SG \leftrightarrow P$ の 2 次相転移線と $M \leftrightarrow P$ の 2 次相転移線は、 ϵ に依らないので共通の線となっている。この図 23 を見ても分かるように、同じ \tilde{T} で ϵ が大きくなると、安定領域が増えていっている。

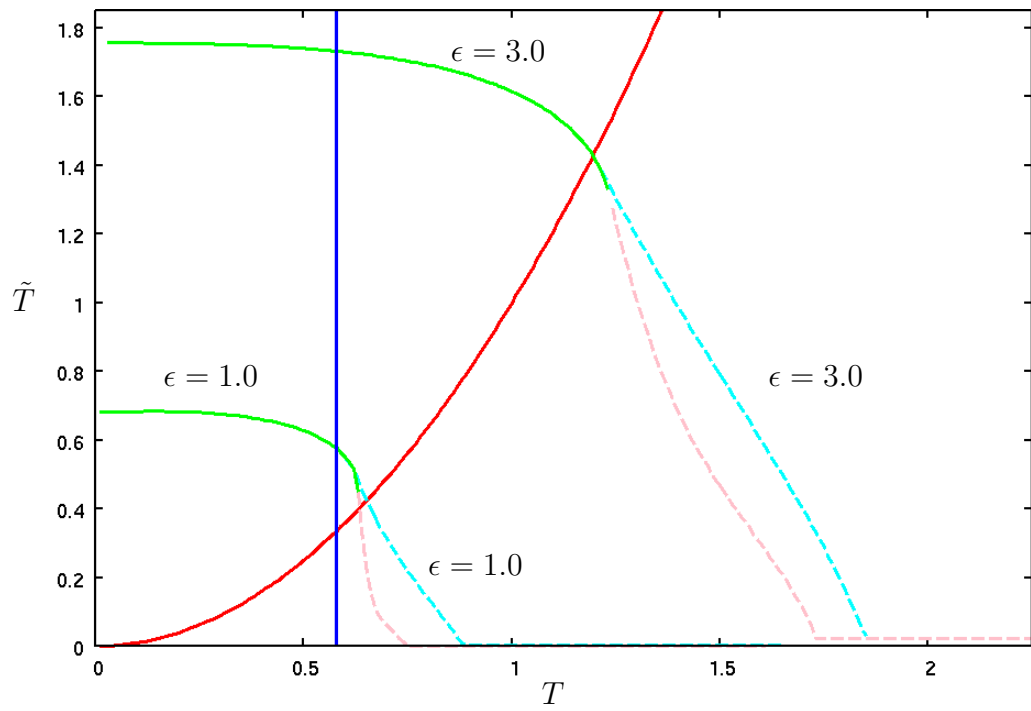


図 23: $\epsilon = 1.0$ と $\epsilon = 3.0$ を重ねて描いた相図 ($K = 1.0$, $\mu = 1.0$) .

横軸 : 温度 T , 縦軸 : \tilde{T} .

2次相転移 (赤 : $SG \leftrightarrow P$, 青 : $M \leftrightarrow P$, 緑 : $SG \leftrightarrow M$)

1次相転移 (水色 : HA , ピンク : $3M$)

5.5 Partial Annealing によって生成される相互作用について

Partial Annealing をおこなって出てきた J_{ij} は Hopfield Attractor と Mixed state とでは異なるはずである．そこで，式 (48) を数値的にシミュレーションし，相互作用を Partial Annealing で学習させて Hopfield Attractor になった $\{J_{ij}^H\}$ と，Mixed state になった $\{J_{ij}^M\}$ のアトラクタを調べた．すなわち， $\{J_{ij}^H\}$ で，初期条件を Hopfield Attractor ，Mixed state にしてそれぞれでシミュレーションをおこなう． $\{J_{ij}^M\}$ でも同じことをする．以下はその結果である．

まず，図 24 は，特定の温度で m の時間変化を見たものである．初期条件を Mixed state にしても， $\{J_{ij}^H\}$ の場合は Hopfield Attractor に収束し，同様に，初期条件を Hopfield Attractor にしても $\{J_{ij}^M\}$ の場合は Mixed state に収束する様子が分かる．

図 25 の上下ともに，赤で描かれているのは Partial Annealing 理論曲線である．緑が Partial Annealing により Hopfield Attractor に収束した場合で，その $\{J_{ij}^H\}$ を用いて初期条件が Hopfield Attractor でモンテカルロシミュレーションしたのがピンク，初期条件が Mixed state でモンテカルロシミュレーションしたのが青で示したものである．そして，水色が Partial Annealing により Mixed state に収束した場合で，その $\{J_{ij}^M\}$ を用いて初期条件が Hopfield Attractor でモンテカルロシミュレーションしたのが黄色，初期条件が Mixed state でモンテカルロシミュレーションしたのが黒で示したものである

これらを見て分かるように，初期条件を Hopfield Attractor ，Mixed state としてモンテカルロシミュレーションをおこなうと， $\{J_{ij}^H\}$ のときは Hopfield Attractor が出現し，Mixed state は出てこない．同様に $\{J_{ij}^M\}$ のときは，Mixed state が出現し，Hopfield Attractor は出てこない．

この結果は，Partial Annealing が出現するアトラクタを強め，もともと共存していた他のアトラクタを弱めていることを意味する．

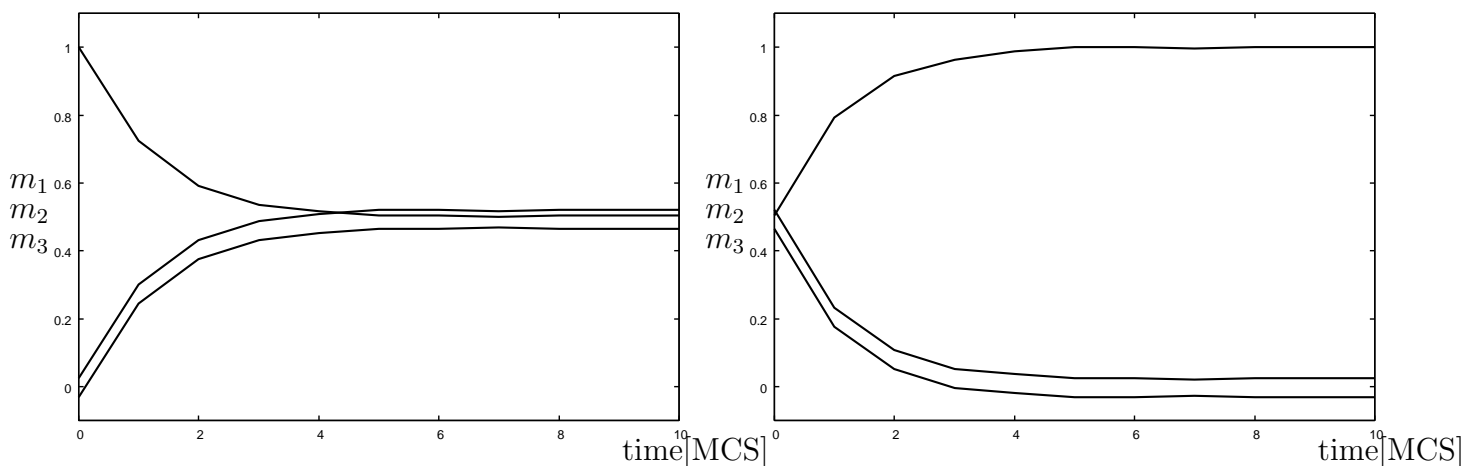


図 24: m の時間変化を見たもの． $\epsilon = 1.5$, $\tilde{T} = 0.1$, $N = 500$, $T = 0.4$.

左図は， $\{J_{ij}^{3M}\}$ を用いて初期条件を Hopfield Attractor にしてシミュレーションしたもの．
右図は， $\{J_{ij}^H\}$ を用いて初期条件を Mixed state にしてシミュレーションしたもの．

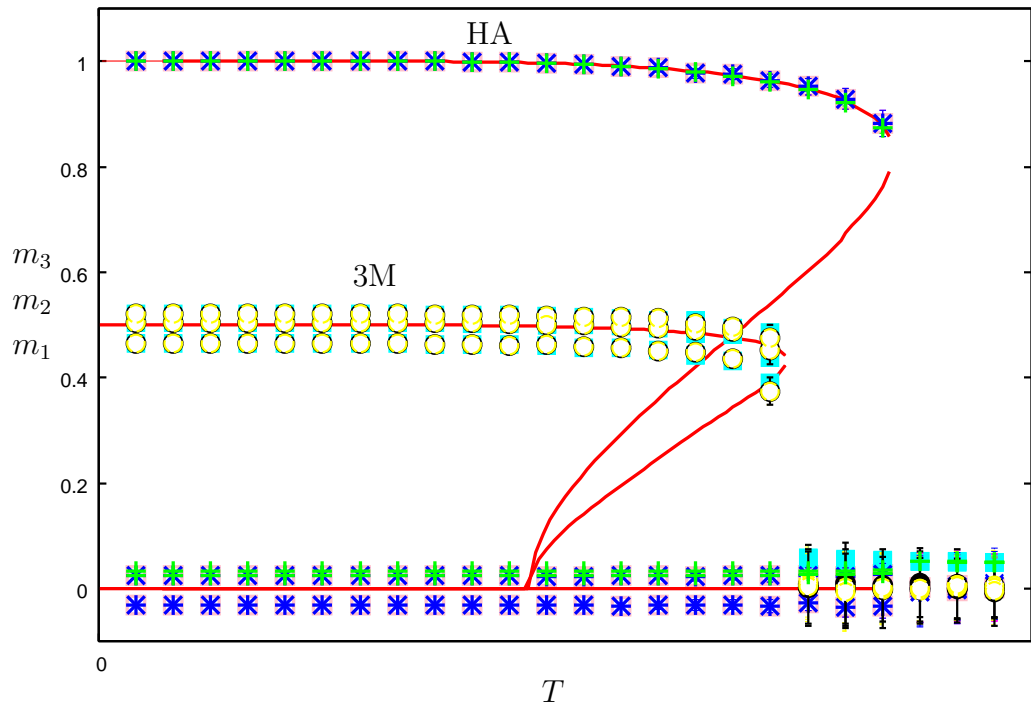
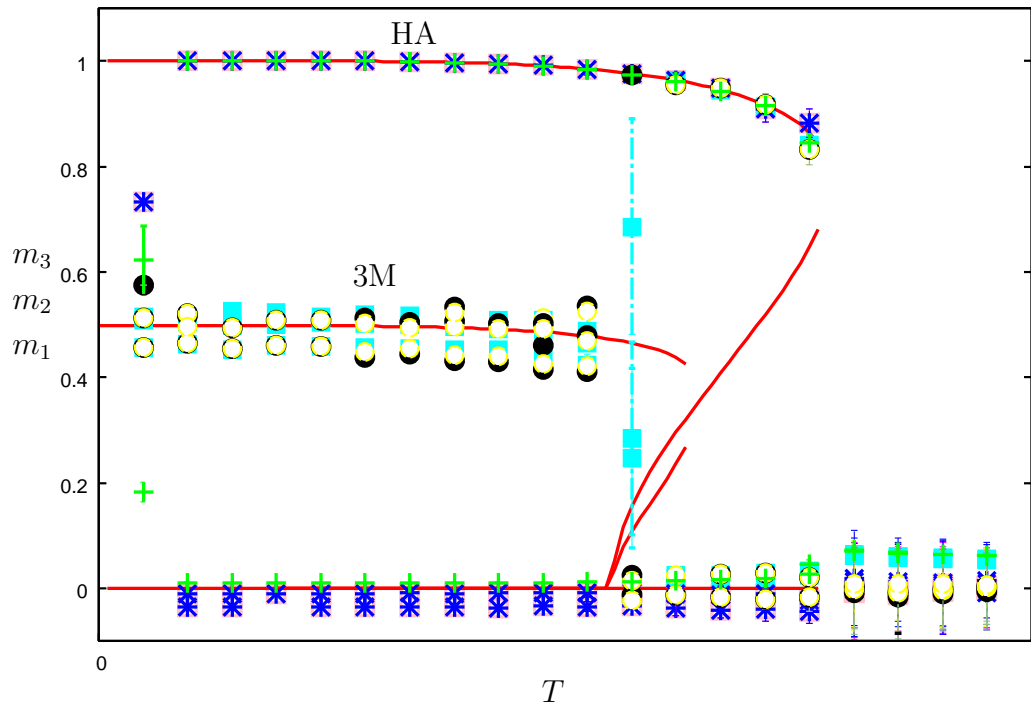


図 25: 実線は理論結果, 記号はシミュレーション結果.
 3つのパターンとのオーバーラップ m_1, m_2, m_3 の温度変化.
 上図: $\epsilon = 1.0, \tilde{T} = 0.1, N = 500$.
 下図: $\epsilon = 1.5, \tilde{T} = 0.1, N = 500$.

6 考察

我々は、ニューロンとともにシナプス結合荷重もゆっくり変化するモデルである、Partial Annealing を考えた。本研究により、Partial Annealing の特徴と、記憶容量や想起過程の変化が明らかになった。

ランジュバン方程式に従う Partial Annealing の定常状態をレプリカ法で解析し、Hopfield model に比べ、学習の効果である ϵ の値が大きくなると、安定な領域が増えるということが分かった。これは、Hopfield Attractor、Mixed state どちらに対しても言えることである。また、Hopfield Attractor と Mixed state への相転移温度の比 $\frac{3M \text{ の相転移温度}}{H \text{ の相転移温度}}$ をとると、 ϵ が大きくなると、その比は大きくなることも分かった。

この理論とシミュレーション結果は一致し、シミュレーションでも ϵ を大きくすると、記憶容量が増すことが確認できた。

また、相図を描き、Partial Annealing による記憶相と非記憶相の理解を深めた。これによって、Hopfield model では2次相転移であったのが、Partial Annealing をおこなって ϵ を大きくすることによって1次相転移に相転移の種類が変わることが分かった。すなわち、2次相転移から1次相転移に相転移の種類が変わることにより、安定な領域が増えるという結果になった。さらに、ノイズの強さ \tilde{T} の値を大きくすると、1次相転移から2次相転移へと相転移の種類が変わる。記憶相の領域も小さくなることも分かった。

さらに、Partial Annealing をおこなって得られたシナプス結合荷重 $\{J_{ij}\}$ を用いて数値的にシミュレーションをおこなった。Partial Annealing は、出現するアトラクタをより強め、もともと共存していた他のアトラクタを弱めていることが分かった。

AT 安定性を考えると、Hopfield Attractor は調べた範囲では、 ϵ の値に依らず安定であるということが確認できた。一方、Mixed state では ϵ が小さいとき不安定化し、 ϵ を入れて大きくすることによって安定になり、存在領域が増えることが分かった。

Partial Annealing で $\tilde{T} = 0, \epsilon = 0$ とすると、Hopfield model になる。ノイズである \tilde{T} が大きくなると、不安定化し、学習の強さ ϵ が大きくなると、安定化すると言える。

ϵ とともに、 \tilde{T} を変化させることで、安定領域や想起過程にどのような変化をもたらすのかも、大変興味深い。今後の課題としては、学習の強さ ϵ とノイズ \tilde{T} とのかねあい、すなわち ϵ に対して最適な \tilde{T} があるかどうかを探してみたい。そのためには、AT 安定性をくわしく調べる必要がある。さらに、スピングラスの AT 安定性を調べ、シミュレーションもおこないたい。

7 謝辞

わずか1年間でしたが，ニューラルネットワークの研究を一から丁寧にお教えくださり，また，本研究を進めるにあたり，指導を根気強くしてくださった，指導教官である複雑系研究室の上江洩達也教授に深く心より感謝いたします．また，適切なお導きにより，本論文をまとめあげることができるまでになりました．ここに厚く御礼申し上げます．

本研究室の戸田幹人准教授と，狐崎創助教には，コンピューターの知識などで数々のご助言をいただきました．ここに心より感謝いたします．

また，本研究の共同研究者として様々な助言をしてくださいました，東京大学大学院 新領域創成科学研究科の岡田真人教授と，神戸高等専門学校 電子工学科の三好誠司教授に深く感謝いたします．

本研究室のみなさまにも大変お世話になりました．また，私のわがママを聞いてくださった原子核理論研究室のみなさまにも大変感謝いたしております．ここに深く御礼申し上げます．

最後に，奈良女子大学大学院での二年間を全面的に支えていただいた家族，友人に心より感謝いたします．

本当にありがとうございました．

8 Appendix

8.1 Hopfield model

8.1.1 式(1)は式(2)を減少させることを確かめる

式(1)より, k 番目のニューロンが状態更新し, ニューロンの状態が S_k から S'_k に変化したとする. まず, ハミルトニアン H を, k を含む部分と k を含まない部分 H' に分けて書くと,

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_{j(\neq k)} J_{kj} S_k S_j - \frac{1}{2} \sum_{i(\neq k)} J_{ik} S_i S_k + H' \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{j(\neq k)} (J_{kj} S_k S_j + J_{jk} S_j S_k) + H' \\ &= -\sum_{j(\neq k)} J_{kj} S_k S_j + H', \end{aligned}$$

となる. k 番目のニューロンの状態が S_k から S'_k に変化したときのハミルトニアンの変化 ΔH_k は次のように書ける.

$$\begin{aligned} \Delta H_k &= H(S'_k) - H(S_k) \\ &= -\sum_{j(\neq k)} J_{kj} S'_k S_j - \left(-\sum_{j(\neq k)} J_{kj} S_k S_j \right) \\ &= -\sum_{j(\neq k)} J_{kj} (S'_k - S_k) S_j \\ &= -\sum_{j(\neq k)} J_{kj} \Delta S_k S_j \\ &= -\Delta S_k h_k. \end{aligned}$$

ここで, $h_k \geq 0$ のとき $S'_k = +1$ より $\Delta S_k = S'_k - S_k \geq 0$ となり, また, $h_k < 0$ のとき $S'_k = -1$ より $\Delta S_k = S'_k - S_k \leq 0$ となるので, $\Delta H_k \leq 0$ となり, 式(1)は式(2)を減少させる.

8.1.2 式(19)から式(23),(24)を導く

式(19)は,

$$Z = e^{-\frac{\beta p}{2}} \text{Tr} \mathbf{S} \exp \left[\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu} \left(\sum_i S_i \xi_i^{\mu} \right)^2 + \beta \sum_{\mu} h^{\mu} \sum_i \xi_i^{\mu} S_i \right], \quad (19)$$

ハーバード・ストラトノヴィチ変換とは, 次のようなものである.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} e^{\frac{b^2}{4a}} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}.$$

1つ目の等式は, $-ax^2 + bx = -a\left(x - \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{b^2}{4a}$ より $y = x - \frac{b}{2a}$ とおいたものである.
 これより, $a = \frac{\beta N}{2}$, $b = \beta \sum_i S_i \xi_i^\mu$ とおくと,

$$\begin{aligned} \frac{b^2}{4a} &= \frac{1}{2\beta N} \left(\beta \sum_i S_i \xi_i^\mu \right)^2 \\ &= \frac{\beta}{2N} \left(\sum_i S_i \xi_i^\mu \right)^2, \end{aligned}$$

となる. 従って,

$$e^{\frac{\beta}{2N} (\sum_i \xi_i^\mu S_i^\mu)^2} = \int dm_\mu \sqrt{\frac{1}{\pi} \frac{\beta N}{2}} e^{-\frac{\beta N}{2} m_\mu^2 + \beta (\sum_i S_i \xi_i^\mu) m_\mu},$$

となり, 分配関数は次のようになる.

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\frac{\beta p}{2} \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{p}{2}}} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \prod_{\mu=1}^p \left[\int dm^\mu e^{-\frac{\beta}{2} N (m^\mu)^2 + \beta (m^\mu + h^\mu) \sum_i \xi_i^\mu S_i} \right] \\ &= e^{-\frac{\beta p}{2} \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{p}{2}}} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \int d\mathbf{m} e^{-\frac{\beta}{2} N \mathbf{m}^2 + \beta \sum_i (\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i S_i} \\ &= e^{-\frac{\beta p}{2} \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{p}{2}}} \int d\mathbf{m} e^{-\frac{\beta}{2} N \mathbf{m}^2} \prod_i \text{Tr}_{S_i} e^{\beta (\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i S_i}. \end{aligned}$$

ただし, $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_\mu)$, $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_p)$, $\boldsymbol{\xi} = (\xi_i^1, \dots, \xi_i^p)$.

ここで, 係数 $e^{-\frac{\beta p}{2}}$ について exponential の肩は,

$$\frac{\beta p}{2} = \frac{\beta N}{2} \frac{p}{N} = \frac{\beta N}{2} \alpha = 0 \quad (\because \alpha = 0),$$

となる. また,

$$\begin{aligned} \sum_{S=\pm 1} e^{aS} &= e^a + e^{-a} = 2 \cosh(a), \\ \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{\sum_i a_i S_i} &= \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{a_1 S_1} e^{a_2 S_2} \dots e^{a_N S_N} \\ &= \prod_{i=1}^N (2 \cosh(a_i)) \\ &= \exp \left[\sum_i \ln 2 \cosh(a_i) \right] \\ &= \exp \left[N \cdot \frac{1}{N} \sum_i \ln 2 \cosh(a_i) \right], \end{aligned}$$

を用いると,

$$Z = \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{\frac{p}{2}} \int d\mathbf{m} e^{-\beta N f(\beta, \mathbf{m})}, \quad (23)$$

$$f(\beta, \mathbf{m}) = \frac{1}{2} \mathbf{m}^2 - \frac{1}{\beta N} \sum_i \log(2 \cosh[\beta (\mathbf{m} + \mathbf{h}) \cdot \boldsymbol{\xi}_i]), \quad (24)$$

が求まる.

8.1.3 鞍点法

次のような形の1次元の積分を考える．

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-Ng(x)}. \quad (225)$$

$x = x_0$ で $g(x)$ は最小になるとすると, $g(x)$ は次のように書ける．

$$g(x) = g(x_0) + g'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!}g''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

$g'(x_0) = 0$, $g''(x_0) > 0$ なので, これを式 (225) に代入すると,

$$\begin{aligned} I &= \int dx \exp \left[-N \left\{ g(x_0) + \frac{1}{2!}g''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \right\} \right] \\ &\simeq e^{-Ng(x_0)} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{N}{2}g''(x_0)(x-x_0)^2} \\ &= e^{-Ng(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{Ng''(x_0)}}, \end{aligned}$$

となる．これはガウス積分を用いて計算した．

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N} \log I &= g(x_0) - \frac{1}{N} \frac{1}{2} \log \frac{2\pi}{g''(x_0)N} \\ &= g(x_0) + \frac{1}{2N} \left(\log g''(x_0) - \log 2\pi + \ln N \right) \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} g(x_0). \end{aligned}$$

よって, この x_0 を求めなければならない．また, この x_0 は, 複素平面で馬の鞍のようになっているので, 鞍点 (saddle point) と呼ばれる．

8.1.4 式 (35) を導く

$$\begin{aligned} &-\frac{\beta N}{2} \sum_{\rho\sigma} \tilde{\Lambda}_{\rho\sigma} m_{\rho}^{\mu} m_{\sigma}^{\mu} \\ &= -\frac{\beta N}{2} \sum_{\rho\sigma} \left\{ \delta_{\rho\sigma} - \frac{\beta}{N} \sum_i S_i^{\rho} S_i^{\sigma} \right\} m_{\rho}^{\mu} m_{\sigma}^{\mu} \\ &= -\frac{\beta N}{2} \left[\sum_{\rho} (m_{\rho}^{\mu})^2 - \frac{\beta}{N} \sum_{i\rho\sigma} S_i^{\rho} S_i^{\sigma} m_{\rho}^{\mu} m_{\sigma}^{\mu} \right] \\ &= -\frac{\beta N}{2} \sum_{\rho} (m_{\rho}^{\mu})^2 + \frac{\beta^2}{2} \sum_{i\rho\sigma} S_i^{\rho} S_i^{\sigma} m_{\rho}^{\mu} m_{\sigma}^{\mu}. \end{aligned}$$

8.1.5 式 (37) を導く

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dr e^{ixr},$$

において, $i\tilde{r} = r, dr = id\tilde{r}$ とおくと,

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi} \int_{i\infty}^{-i\infty} id\tilde{r} e^{-\tilde{r}x} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{i\infty} d\tilde{r} e^{-\tilde{r}x}. \end{aligned}$$

8.1.6 式 (42) から式 (44) を導く

式 (42) の変形について:

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= 1 + (\langle\langle Z^n \rangle\rangle - 1) \\ \log \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= \log \{1 + (\langle\langle Z^n \rangle\rangle - 1)\} \\ &= \langle\langle Z^n \rangle\rangle - 1. \end{aligned}$$

($\because n \ll 1$ として Taylor 展開)

式 (36) の $n \times n$ 行列 $\Lambda_{\rho\sigma}$ について,

$$\Lambda_{\rho\sigma} = \begin{cases} 1 - \beta & (\rho \neq \sigma) \\ -\beta q & (\rho = \sigma) \end{cases}$$

なので, まずこの行列の固有値を求める.

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 - \beta & -\beta q & \cdots & -\beta q \\ -\beta q & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & -\beta q \\ -\beta q & \cdots & -\beta q & 1 - \beta \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a & b & \cdots & b \\ b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & b \\ b & \cdots & b & a \end{pmatrix},$$

とおくと, 固有方程式より $|\Lambda - \lambda E| = 0$ なので, $a = 1 - \beta, b = -\beta q$ として $|\Lambda - \lambda E|$ を変形する.

$$|\Lambda - \lambda E| = \begin{vmatrix} a - \lambda & b & \cdots & b \\ b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & b \\ b & \cdots & b & a - \lambda \end{vmatrix} \stackrel{1}{=} \begin{vmatrix} a - \lambda - b & b - a + \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ b & a - \lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ b & b & \cdots & b & a - \lambda \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= (a-b-\lambda) \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ b & a-\lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ b & b & \cdots & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&\stackrel{2}{=} (a-b-\lambda) \begin{vmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ b & a+b-\lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & 2b & a-\lambda & b & \vdots \\ \vdots & \vdots & b & \ddots & b \\ b & 2b & b & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&\stackrel{3}{=} (a-b-\lambda) \begin{vmatrix} a+b-\lambda & b & \cdots & \cdots & b \\ 2b & a-\lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ 2b & b & \cdots & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&\stackrel{4}{=} (a-b-\lambda) \begin{vmatrix} a-b-\lambda & b-a+\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 2b & a-\lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ 2b & b & \cdots & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&= (a-b-\lambda)^2 \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 2b & a-\lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ 2b & b & \cdots & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&\stackrel{5}{=} (a-b-\lambda)^2 \begin{vmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 2b & a+2b-\lambda & b & \cdots & b \\ \vdots & 3b & a-\lambda & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ 2b & 3b & b & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&\stackrel{6}{=} (a-b-\lambda)^2 \begin{vmatrix} a+2b-\lambda & b & \cdots & b \\ 3b & a-\lambda & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & b \\ 3b & b & b & a-\lambda \end{vmatrix} \\
&= \dots
\end{aligned}$$

$$\therefore |\Lambda - \lambda E| = (a - b - \lambda)^k \begin{vmatrix} a + kb - \lambda & b & \cdots & b \\ (k+1)b & a - \lambda & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & b \\ (k+1)b & b & b & a - \lambda \end{vmatrix},$$

と書ける．ここで、各等式での変形について説明する．

1. 1行目から2行目をひく
2. 2列目において、2列目 + 1列目とする
3. 1行目で展開する
4. 1行目において、1行目 - 2列目とする
5. 2列目において、2列目 + 1列目とする
6. 1行目で展開する

ここでの行列の成分は $(n - k) \times (n - k)$ 個あることになる．ここで $k = n - 2$ とおくと、

$$\begin{aligned} |\Lambda - \lambda E| &= (a - b - \lambda)^{n-2} \begin{vmatrix} a + (n-2)b - \lambda & b \\ (n-1)b & a - \lambda \end{vmatrix} \\ &\stackrel{7}{=} (a - b - \lambda)^{n-2} \begin{vmatrix} a - b - \lambda & b - a + \lambda \\ (n-1)b & a - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (a - b - \lambda)^{n-2} (a - b - \lambda) \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ (n-1)b & a - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (a - b - \lambda)^{n-1} (a + (n-1)b - \lambda) = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \lambda_1 &= a + (n-1)b = 1 - \beta - (n-1)\beta q, \\ \lambda_2 &= a - b = 1 - \beta(1 - q). \end{aligned}$$

よって、 λ_1 は1重、 λ_2 は $(n - 1)$ 重に縮退している．ここで、等式7においては、1列目で1列目 - 2列目とした．

次に、この固有値の \log の和をとる．

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{\rho} \log \lambda_{\rho} &= \frac{1}{n} \log \{1 - \beta - (n-1)\beta q\} + \frac{n-1}{n} \log \{1 - \beta(1 - q)\} \\ &= \log \{1 - \beta(1 - q)\} \\ &\quad + \frac{1}{n} \left[\log \{1 - \beta + \beta q - n\beta q\} - \log \{1 - \beta(1 - q)\} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \xrightarrow{n \rightarrow 0} \log \{1 - \beta(1 - q)\} + \frac{1}{n} \frac{-n\beta q}{1 - \beta(1 - q)} \\
& = \log \{1 - \beta(1 - q)\} - \frac{\beta q}{1 - \beta(1 - q)}.
\end{aligned} \tag{226}$$

さらに S のトレースをとるために、ガウス積分、

$$\exp \left[\frac{1}{2} \alpha \beta^2 r \left(\sum_{\rho} S^{\rho} \right)^2 \right] = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} x^2 + \beta \sqrt{\alpha r} x \sum_{\rho} S^{\rho} \right],$$

を用いる。ちなみにこれは、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 \pm bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}},$$

で $a = \frac{1}{2}$ をとり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} \pm bx} = \sqrt{2\pi} e^{-\frac{b^2}{2}},$$

において両辺 $\sqrt{2\pi}$ で割り、 $b = \sqrt{\alpha r} \beta \sum_{\rho} S^{\rho}$ とおいたものである。

式 (43) のトレース部分を $X \equiv \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp[\dots]$ とおくと、

$$\begin{aligned}
X &= \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left[\beta \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} \sum_{\rho} S^{\rho} \right] \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2} + \beta \sqrt{\alpha r} x \sum_{\rho} S^{\rho}} \\
&= \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \prod_{\rho} e^{\beta (\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} + \sqrt{\alpha r} x) S^{\rho}} \\
&= \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left\{ 2 \cosh \beta (\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} + \sqrt{\alpha r} x) \right\}^n \\
&= \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \exp \left[n \log \left\{ 2 \cosh \beta (\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} + \sqrt{\alpha r} x) \right\} \right],
\end{aligned}$$

となる。さらに、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n} \langle \langle \log X \rangle \rangle &= \frac{1}{n} \langle \langle \log \left[\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left\{ 1 + n \log \left[2 \cosh \beta (\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} + \sqrt{\alpha r} x) \right] + \mathcal{O}(n^2) \right\} \right] \rangle \rangle \\
&= \frac{1}{n} \langle \langle \log \left[1 + n \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \log \left[2 \cosh \beta (\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} + \sqrt{\alpha r} x) \right] + \mathcal{O}(n^2) \right] \rangle \rangle \\
&= \frac{1}{n} \langle \langle n \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \log \left[2 \cosh \beta (\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi} + \sqrt{\alpha r} x) \right] + \mathcal{O}(n^2) \rangle \rangle \\
&= \langle \langle \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \log \left[2 \cosh \beta (\sqrt{\alpha r} x + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi}) \right] + \mathcal{O}(n) \rangle \rangle \\
&\xrightarrow{n \rightarrow 0} \langle \langle \log \left[2 \cosh \beta (\sqrt{\alpha r} x + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi}) \right] \rangle \rangle.
\end{aligned} \tag{227}$$

ここでの $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ は, $\mu = 1 \sim s$ のパターン平均と $\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ の積分を意味する. よって, 式 (42) に式 (43), (226), (227) を代入すると, 式 (44) が得られる.

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} &= \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\mathbf{m}^2 + \frac{\alpha}{2\beta} \left(\log[1 - \beta(1 - q)] - \frac{\beta q}{1 - \beta(1 - q)} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2}\alpha\beta r(1 - q) - \frac{1}{\beta} \langle\langle \log[2 \cosh \beta(\sqrt{\alpha r}z + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\xi})] \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (44)$$

8.2 Partial Annealing

8.2.1 ランジュバン方程式を書き直す

ランジュバン方程式 (48) のノイズの項を除いた部分が次のようになる \mathcal{H} を求める.

$$-\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_{ij}} = \frac{1}{N} K_{ij} - \mu J_{ij} + \frac{\epsilon}{N} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{sp}.$$

上式の右辺第3項を計算する.

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{sp} &= \frac{1}{Z_\beta} \frac{1}{N} \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} \sigma_i \sigma_j \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \frac{1}{N} \text{Tr} \left(-\frac{\partial H}{\partial J_{ij}} \right) e^{-\beta H} \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \frac{1}{N} \text{Tr} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} e^{-\beta H} \frac{1}{\beta} \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} \left\{ \frac{1}{N} \text{Tr} e^{-\beta H} \right\} \frac{1}{\beta} \\ &= \frac{1}{\beta Z_\beta} \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} Z_\beta \\ &= \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} \ln Z_\beta. \end{aligned}$$

$$\therefore -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_{ij}} = \frac{1}{N} K_{ij} - \mu J_{ij} + \frac{\epsilon}{\beta N} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} \ln Z_\beta.$$

これより,

$$\mathcal{H} = -\sum_{i < j} K_{ij} J_{ij} + \frac{\mu N}{2} \sum_{i < j} J_{ij}^2 - \frac{\epsilon}{\beta} \ln Z_\beta. \quad (54)$$

8.2.2 式 (56) を導く

時刻 t で $\{J_{ij}\}$ をもつ確率を $P_t(\{J_{ij}\})$ とすると, $P_t(\mathbf{J})$ ($\{J_{ij}\}$ を \mathbf{J} とする) は, フォッカー-プランク方程式,

$$\frac{\partial P_t(\mathbf{J})}{\partial t} = \sum_{i < j} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} \left\{ \left(\frac{1}{N\tau} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_{ij}} \right) P_t(\mathbf{J}) \right\} + \frac{\tilde{\beta}^{-1}}{N\tau} \sum_{i < j} \frac{\partial^2}{\partial J_{ij}^2} P_t(\mathbf{J}), \quad (228)$$

に従う．式 (228) の定常解を求める．

$t \rightarrow \infty$ より，左辺 = 0 なので，

$$\begin{aligned} \sum_{i < j} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} \left[\frac{1}{N\tau} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J_{ij}} P_{eq}(\mathbf{J}) + \frac{\tilde{\beta}^{-1}}{N\tau} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} P_{eq}(\mathbf{J}) \right] &= 0 \\ \nabla_{\mathbf{J}} \cdot \left[\frac{1}{N\tau} P_{eq}(\mathbf{J}) \nabla_{\mathbf{J}} \mathcal{H} + \frac{\tilde{\beta}^{-1}}{N\tau} \nabla P_{eq}(\mathbf{J}) \right] &= 0 \\ \frac{1}{N\tau} \nabla_{\mathbf{J}} \cdot \left[P_{eq}(\mathbf{J}) \nabla_{\mathbf{J}} \mathcal{H} + \tilde{\beta}^{-1} \nabla P_{eq}(\mathbf{J}) \right] &= 0 \\ P_{eq}(\mathbf{J}) \nabla_{\mathbf{J}} \mathcal{H} + \tilde{\beta}^{-1} \nabla P_{eq}(\mathbf{J}) &= \mathbf{C} \end{aligned}$$

$\mathbf{J} \rightarrow \infty$ で $P_{eq} \rightarrow 0$ より， $\mathbf{C} = \mathbf{0}$ ．

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{J}} \mathcal{H} + \tilde{\beta}^{-1} \frac{1}{P_{eq}(\mathbf{J})} \nabla P_{eq}(\mathbf{J}) &= \mathbf{0} \\ \nabla_{\mathbf{J}} \mathcal{H} + \tilde{\beta}^{-1} \nabla (\ln P_{eq}(\mathbf{J})) &= \mathbf{0} \\ \nabla \{ \mathcal{H} + \tilde{\beta}^{-1} \ln P_{eq}(\mathbf{J}) \} &= \mathbf{0} \\ \mathcal{H} + \tilde{\beta}^{-1} \ln P_{eq}(\mathbf{J}) &= D \\ \ln P_{eq}(\mathbf{J}) &= -\tilde{\beta} \mathcal{H} + \tilde{\beta} D \\ P_{eq}(\mathbf{J}) &= e^{\tilde{\beta} D} e^{-\tilde{\beta} \mathcal{H}} \end{aligned}$$

$$\therefore P_{eq}(\mathbf{J}) \propto e^{-\tilde{\beta} \mathcal{H}}.$$

8.2.3 $\tilde{Z}_{\tilde{\beta}}$ の各項の計算

$$\begin{aligned} \sum_{i < j} \left(\sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu} \right)^2 &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left(\sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j} \left(\sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu} \right)^2 - \sum_i \left(\sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_i^{\nu} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j} \sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu} \sum_{\mu} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu} - \sum_i p^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[N^2 \sum_{\mu\nu} \frac{1}{N} \sum_i \xi_i^{\mu} \xi_i^{\nu} \frac{1}{N} \sum_j \xi_j^{\mu} \xi_j^{\nu} - Np^2 \right] \\ &= \frac{N(N-p)p}{2}. \end{aligned}$$

ここで， $\frac{1}{N} \sum_i \xi_i^{\mu} \xi_i^{\nu} = \delta_{\mu\nu}$ を用いた．これは， $N \gg 2^p$ のときに成立する．

$$\sum_{i < j} \sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu} \sum_{\alpha} \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha} = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{i,j} \sum_{\nu} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu} \sum_{\alpha} \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha} - \sum_i \sum_{\nu} \sum_{\alpha} 1 \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha, \nu} \left(\sum_i \xi_i^\nu \sigma_i^\alpha \right)^2 - Npn \right\} \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha, \nu} N^2 (m_\nu^\alpha)^2 - Npn \right\} \quad (\because \text{式 (62) より}) \\
&= \frac{1}{2} N^2 \sum_{\alpha, \nu} (m_\nu^\alpha)^2 - \frac{1}{2} Npn. \\
\sum_{i < j} \left(\sum_\alpha \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right)^2 &= \sum_{i < j} \left(\sum_\alpha \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right) \left(\sum_\beta \sigma_i^\beta \sigma_j^\beta \right) \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta \sum_{i < j} \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{2} \left(\sum_{i, j} - \sum_{i=j} \right) \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{2} \left\{ \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \sum_j \sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta - \sum_i 1 \right\} \\
&= \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{2} \left\{ \left(\sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right)^2 - N \right\} \\
&= \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\beta} \left(\sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right)^2 - \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{2} N \\
&= \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right)^2 + \frac{1}{2} n N^2 - \frac{1}{2} N n^2 \\
&= \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right)^2 + \frac{1}{2} N n (N - n) \\
&= \sum_{\alpha < \beta} N^2 q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} N n (N - n) \quad (\because \text{式 (61) より}) \\
&= N^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} N n (N - n).
\end{aligned}$$

8.2.4 $\tilde{Z}_{\tilde{\beta}}$ の計算

式 (63) の σ に対するトレースを計算するために, δ 関数を積分表示する.

$$\begin{aligned}
&\delta \left(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right) \delta \left(m_\nu^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\alpha \right) \\
&= \int \frac{N}{2\pi} d\hat{q}_{\alpha\beta} \int \frac{N}{2\pi} d\hat{m}_\nu^\alpha e^{iN\hat{q}_{\alpha\beta} \left(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right) + iN\hat{m}_\nu^\alpha \left(m_\nu^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\alpha \right)} \\
&= \int \frac{iN}{2\pi} d\hat{q}_{\alpha\beta} \int \frac{N}{2\pi i} d\hat{m}_\nu^\alpha e^{-N\hat{q}_{\alpha\beta} \left(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right) + N\hat{m}_\nu^\alpha \left(m_\nu^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\alpha \right)}.
\end{aligned}$$

ここで $\{\sigma_i^\alpha\}$ に関係のある部分を考える .

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{i,\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu \right] \\
&= \exp \left\{ \ln \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{i,\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu} \right\} \\
&= \exp \left\{ N \cdot \frac{1}{N} \ln \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{i,\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu} \right\} \\
&= e^{N \ln \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{i,\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu} \right\}^{\frac{1}{N}}}.
\end{aligned}$$

よってもとに戻すと ,

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} \delta \left(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right) \delta \left(m_\nu^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu \right) \\
&= \int \prod_{\alpha < \beta} \frac{iN}{2\pi} d\hat{q}_{\alpha\beta} \int \prod_{\alpha\nu} \frac{N}{2\pi i} d\hat{m}_\nu^\alpha e^{-N(\hat{q}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} - \hat{m}_\nu^\alpha m_\nu^\alpha)} \\
&\quad \cdot \exp \left[N \ln \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma_i^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta - \sum_{\alpha\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sum_i \sigma_i^\alpha \xi_i^\nu} \right\}^{\frac{1}{N}} \right].
\end{aligned}$$

式 (64) をレプリカ対称性 (67) を用いて α における和の部分それぞれ n で表し , 書き直すと ,

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 + \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{\beta^2 n}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K}{2\mu\sqrt{p}} \sum_{\alpha,\nu} (m_\nu^\alpha)^2 + \beta \sum_{\alpha,\nu} h_\nu m_\nu^\alpha. \\
&= \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 + \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \cdot \frac{n(n-1)}{2} q^2 + \frac{\beta^2 n}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K p^{-\frac{1}{2}}}{2\mu} \cdot n \sum_\nu m_\nu^2 + \beta n \sum_\nu h_\nu m_\nu \\
&= \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 + \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}} \frac{n(n-1)}{4} q^2 + \frac{\beta^2 n}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K}{2\mu\sqrt{p}} n \sum_\nu m_\nu^2 + \beta n \sum_\nu h_\nu m_\nu.
\end{aligned}$$

式 (65) も同様に , レプリカ対称性 (67) を用いて α における和の部分それぞれ n で表し , 書き直すと ,

$$\begin{aligned}
G_2 &= - \sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha m_\nu^\alpha. \\
&= - \frac{n(n-1)}{2} \hat{q} q + n \sum_\nu \hat{m}_\nu m_\nu.
\end{aligned}$$

式 (66) も , レプリカ対称性 (67) を用いて書き直すと ,

$$\begin{aligned}
G_3 &= \left[\ln \left\{ \text{Tr}_{\{\sigma^\alpha\}} e^{\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} \sigma^\alpha \sigma^\beta - \sum_{\alpha,\nu} \hat{m}_\nu^\alpha \sigma^\alpha \xi^\nu} \right\} \right] \\
&= \left[\ln \text{Tr}_{\{\sigma^\alpha\}} e^{\hat{q} \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha,\beta} \sigma^\alpha \sigma^\beta - \sum_\alpha (\sigma^\alpha)^2 \right\} - \sum_\alpha \left(\sum_\nu \hat{m}_\nu \xi^\nu \right) \sigma^\alpha} \right] \\
&= \left[\ln \text{Tr}_{\{\sigma^\alpha\}} e^{\hat{q} \frac{1}{2} \left(\sum_\alpha \sigma^\alpha \right)^2 - \hat{q} \frac{1}{2} n - \sum_\alpha \left(\sum_\nu \hat{m}_\nu \xi^\nu \right) \sigma^\alpha} \right] \\
&= \left[\ln \text{Tr}_{\{\sigma^\alpha\}} e^{-\hat{q} \frac{1}{2} n} \int Dx e^{\sqrt{\hat{q}} \sum_\alpha \sigma^\alpha x - \sum_\alpha \left(\sum_\nu \hat{m}_\nu \xi^\nu \right) \sigma^\alpha} \right] \\
&\quad \because e^{-\frac{a^2}{2}} = \int Dx e^{ax}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[\ln \left\{ e^{-\hat{q}\frac{1}{2}n} \int Dx \{ 2 \cosh(\sqrt{\hat{q}}x - \sum_{\nu} \hat{m}_{\nu} \xi^{\nu}) \}^n \right\} \right] \\
&= -\hat{q}\frac{1}{2}n + \left[\ln \int Dx \left\{ \cosh \left(\sqrt{\hat{q}}x - \sum_{\nu} \hat{m}_{\nu} \xi^{\nu} \right) \right\}^n \right] + n \ln 2.
\end{aligned}$$

ここで $[\dots]$ は、パターン $\{\xi\}$ の平均をとることを意味する。

8.2.5 鞍点方程式を導く

式 (72),(73),(74),(75) を求める。

$$\begin{aligned}
G &= G_1 + G_2 + G_3 \\
&= \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 + \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}} \frac{n(n-1)}{4} q^2 + \frac{\beta^2 n}{4\mu\tilde{\beta}} + \frac{\beta K}{2\mu\sqrt{p}} n \sum_{\nu} m_{\nu}^2 + \beta n \sum_{\nu} h_{\nu} m_{\nu} \\
&\quad - \frac{n(n-1)}{2} \hat{q} q + n \sum_{\nu} \hat{m}_{\nu} m_{\nu} \\
&\quad - \hat{q}\frac{1}{2}n + \left[\ln \int Dx \left\{ \cosh \left(\sqrt{\hat{q}}x - \sum_{\nu} \hat{m}_{\nu} \xi^{\nu} \right) \right\}^n \right] + n \ln 2.
\end{aligned}$$

式 (72):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial q} G &= \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}} \frac{n(n-1)}{4} 2q - \frac{n(n-1)}{2} \hat{q} \\
&= \frac{\beta^2 n(n-1)}{2\mu\tilde{\beta}} q - \frac{n(n-1)}{2} \hat{q} = 0. \\
\iff &\frac{n(n-1)}{2} q = \frac{\beta^2 n(n-1)}{2\mu\tilde{\beta}} q. \\
\therefore &\hat{q} = \frac{\beta^2}{\mu\tilde{\beta}} q.
\end{aligned}$$

式 (73):

$$\frac{\partial}{\partial \hat{q}} G = -\frac{n(n-1)}{2} q - \frac{n}{2} + \left[\frac{\int Dx n \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \frac{\partial \Xi}{\partial q}}{\int Dx \cosh^n \Xi} \right].$$

ここで、右辺第3項の分子について考える。

$$\begin{aligned}
&n \int Dx \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{\hat{q}}} \\
&= \frac{n}{2\sqrt{\hat{q}}} \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \left\{ -\frac{d}{dx} e^{-\frac{x^2}{2}} \right\} \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \\
&= \frac{n}{2\sqrt{\hat{q}}} \left\{ \left[-\frac{e^{-\frac{x^2}{2}} \sqrt{2\pi}^{n-1}}{\cosh} \Xi \sinh \Xi \right]_{-\infty}^{\infty} + \int Dx \frac{d}{dx} \{ \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \} \right\} \\
&= \frac{n}{\sqrt{\hat{q}}} \int Dx \left\{ (n-1) \cosh^{n-2} \Xi \sinh^2 \Xi \times \frac{\partial \Xi}{\partial x} + \cosh^n \Xi \frac{\partial \Xi}{\partial x} \right\} \\
&= \frac{n}{2} \left\{ (n-1) \int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi + \int Dx \cosh^n \Xi \right\}.
\end{aligned}$$

もとに戻すと,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \hat{q}} G &= -\frac{n(n-1)}{2}q - \frac{n}{2} + \left[\frac{1}{2} \left\{ (n-1) \frac{\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi}{\int Dx \cosh^n \Xi} + 1 \right\} \right] \\
&= -\frac{n(n-1)}{2}q + \frac{n(n-1)}{2} \left[\frac{\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi}{\int Dx \cosh^n \Xi} \right] = 0. \\
\iff \frac{n(n-1)}{2}q &= \frac{n(n-1)}{2} \left[\frac{\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi}{\int Dx \cosh^n \Xi} \right]. \\
\therefore q &= \left[\int Dx \cosh^n \Xi \tanh^2 \Xi \left\{ \int Dx \cosh^n \Xi \right\}^{-1} \right].
\end{aligned}$$

式 (74):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial m} G &= \frac{\beta K}{1\mu\sqrt{p}} n 2m_\nu p + \beta n h_\nu p + n p \hat{m}_\nu \\
&= \frac{\beta K}{\mu\sqrt{p}} m_\nu + \beta h_\nu + \hat{m}_\nu = 0. \\
\therefore \hat{m}_\nu &= -\left(\frac{\beta K}{\mu\sqrt{p}} m_\nu + \beta h_\nu \right).
\end{aligned}$$

式 (75):

$$\frac{\partial}{\partial \hat{m}} G = -\frac{n(n-1)}{2}q - \frac{n}{2} + \left[\frac{\int Dx n \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \frac{\partial \Xi}{\partial \hat{q}}}{\int Dx \cosh^n \Xi} \right].$$

ここで, 右辺第2項の分子について考える.

$$\begin{aligned}
&n \int Dx \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \frac{\partial \Xi}{\partial \hat{m}_\nu} \\
&= -n p \xi^\nu \int Dx \cosh^{n-1} \Xi \sinh \Xi \\
&= -n p \xi^\nu \int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi.
\end{aligned}$$

もとに戻すと,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \hat{m}_\nu} G &= n p m_\nu - n p \left[\xi^\nu \frac{\int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi}{\int Dx \{ \cosh \Xi \}^n} \right] = 0. \\
\therefore m &= \left[\xi^\nu \int Dx \cosh^n \Xi \tanh \Xi \left\{ \int Dx \cosh^n \Xi \right\}^{-1} \right].
\end{aligned}$$

8.3 相転移温度

8.3.1 微分を求める

$$\frac{\partial}{\partial y} \overline{f(\Xi)} = \left(\frac{\partial}{\partial y} \Omega^{-1} \right) \int Dx \cosh^n(\Xi) f(\Xi) + \Omega^{-1} \frac{\partial}{\partial y} \int Dx \cosh^n(\Xi) f(\Xi)$$

$$\begin{aligned}
&= -\Omega^{-2} \frac{\partial \Omega}{\partial y} \int Dx \cosh^n(\Xi) f(\Xi) \\
&\quad + \Omega^{-1} \int Dx \left\{ n \cosh^{n-1}(\Xi) \sinh(\Xi) f(\Xi) + \cosh^n(\Xi) f'(\Xi) \right\} \frac{\partial \Xi}{\partial y} \\
&= -\Omega^{-2} \frac{\partial \Omega}{\partial y} \int Dx \cosh^n(\Xi) f(\Xi) \\
&\quad + \Omega^{-1} \int Dx \cosh^n(\Xi) \left\{ n \tanh(\Xi) f(\Xi) + f'(\Xi) \right\} \frac{\partial \Xi}{\partial y} \\
&= -\Omega^{-2} n \int Dx \cosh^n(\Xi) \tanh(\Xi) \frac{\partial}{\partial y} \int Dx \cosh^n(\Xi) f(\Xi) \\
&\quad + \Omega^{-1} \int Dx \cosh^n(\Xi) \left\{ n \tanh(\Xi) f(\Xi) + f'(\Xi) \right\} \frac{\partial \Xi}{\partial y} \\
&\qquad\qquad\qquad \left(\because \frac{\partial \Omega}{\partial y} = n \int Dx \cosh^n(\Xi) \tanh(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y} \right) \\
&= -n \overline{\tanh(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y} f(\Xi)} + \overline{\left\{ n \tanh(\Xi) f(\Xi) + f'(\Xi) \right\} \frac{\partial \Xi}{\partial y}} \\
&= n \left\{ \overline{\tanh(\Xi) f(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y}} - \overline{\tanh(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y} f(\Xi)} \right\} + \overline{f'(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial y}}.
\end{aligned}$$

ここで, $y = q$ について計算をする. 次の関係を使うと, それぞれの値が以下のように計算できる.

$$\frac{\partial}{\partial q} \Xi = \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x} \right)^{-1} x.$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Omega}{\partial q} &= \overline{n \tanh(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial q}} \\
&= n \int Dx \cosh^n(\Xi) \tanh(\Xi) \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x} \right)^{-1} x \\
&= \frac{n\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \int Dx \left\{ (n-1) \cosh^{n-2}(\Xi) \sinh^2(\Xi) + \cosh^n(\Xi) \right\} \\
&= \frac{n\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \Omega \left\{ 1 + (n-1) \overline{\tanh^2(\Xi)} \right\}. \\
\overline{\tanh(\Xi) f(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial q}} &= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x} \right)^{-1} \overline{\tanh(\Xi) f(\Xi) x} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x} \right)^{-1} \Omega^{-1} \int Dx \cosh^{n-1}(\Xi) \sinh(\Xi) f(\Xi) x \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \Omega^{-1} \int Dx \cosh^n(\Xi) \times \left\{ (n-1) \tanh^2(\Xi) f(\Xi) + f(\Xi) + \tanh(\Xi) f'(\Xi) \right\} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) f(\Xi)} + \overline{f(\Xi)} + \overline{\tanh(\Xi) f'(\Xi)} \right\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overline{f'(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial q}} &= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x} \right)^{-1} \overline{f'(\Xi)x} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left(\frac{\partial \Xi}{\partial x} \right)^{-1} \Omega^{-1} \int Dx \cosh^n(\Xi) f'(\Xi)x \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \Omega^{-1} \int Dx \{ n \cosh^n(\Xi) \tanh(\Xi) f'(\Xi) + \cosh^n(\Xi) f''(\Xi) \} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \{ n \overline{\tanh(\Xi) f'(\Xi)} + \overline{f''(\Xi)} \}.
\end{aligned}$$

よって、次式を得ることができる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial q} \overline{f(\Xi)} &= n \left\{ \overline{\tanh(\Xi) f(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial q}} - \overline{\tanh(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial q} f(\Xi)} \right\} \\
&\quad + \overline{f'(\Xi) \frac{\partial \Xi}{\partial q}} \\
&= n \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) f(\Xi)} + \overline{f(\Xi)} + \overline{\tanh(\Xi) f'(\Xi)} \right\} \\
&\quad - \frac{n\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} (1 + (n-1) \overline{\tanh^2(\Xi)}) \overline{f(\Xi)} \\
&\quad + \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \{ n \overline{\tanh(\Xi) f'(\Xi)} + \overline{f''(\Xi)} \} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) f(\Xi)} - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) f(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. + n \overline{\tanh(\Xi) f'(\Xi)} + \overline{f''(\Xi)} \right\}.
\end{aligned}$$

次に、 $\frac{\partial}{\partial q} \varphi = \left[\frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh^2(\Xi)} \right]$ と $\frac{\partial}{\partial q} \psi_\nu = \left[\xi^\nu \frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh(\Xi)} \right]$ を計算するため、期待値の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh^2(\Xi)} &= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ n(n-1) \overline{\tanh^4(\Xi)} - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi)^2} \right. \\
&\quad \left. + 2n \overline{\tanh(\Xi)^2 (1 - \tanh^2(\Xi))} + \overline{(2 - 8 \tanh^2(\Xi) + 6 \tanh^4(\Xi))} \right\}. \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 3n + 6) \overline{\tanh^4(\Xi)} + 2(n-4) \overline{\tanh^2(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. + 2 - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi)^2} \right\}. \\
\frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh(\Xi)} &= \frac{\beta}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ n(n-1) \overline{\tanh^3(\Xi)} - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) \tanh(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. + n \overline{\tanh(\Xi) (1 - \tanh^2(\Xi))} - \overline{2 \tanh(\Xi) - \tanh^3(\Xi)} \right\} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 2n + 2) \overline{\tanh^3(\Xi)} + (n-2) \overline{\tanh(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. - n(n-1) \overline{\tanh^2(\Xi) \tanh(\Xi)} \right\}.
\end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial q} \varphi &= \left[\frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh^2(\Xi)} \right] \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 3n + 6) \overline{\tanh^4(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. + 2(n-4) \overline{\tanh^2(\Xi)} + 2 - n(n-1) \overline{\langle \tanh^2(\Xi)^2 \rangle} \right\} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 3n + 6) \overline{\tanh^4(\Xi)} + 2(n-4)q \right. \\
&\quad \left. + 2 - n(n-1) \overline{\langle \tanh^2(\Xi)^2 \rangle} \right\}. \\
\frac{\partial}{\partial q} \psi_\nu &= \left[\xi^\nu \frac{\partial}{\partial q} \overline{\tanh(\Xi)} \right] \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 2n + 2) \overline{\xi^\nu \tanh^3(\Xi)} + (n-2) \overline{\xi^\nu \tanh(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. - n(n-1) \overline{\xi^\nu \tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right\} \\
&= \frac{\beta^2}{2\mu\tilde{\beta}} \left\{ (n^2 - 2n + 2) \overline{\xi^\nu \tanh^3(\Xi)} + (n-2)m_\nu \right. \\
&\quad \left. - n(n-1) \overline{\xi^\nu \tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right\}.
\end{aligned}$$

となる.

同様に, $y = m_\mu$ のときも考える. 次の関係を使うと, それぞれの値が以下のように計算できる.

$$\frac{\partial}{\partial m_\mu} \Xi = \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^\mu.$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Omega}{\partial m_\mu} &= n \overline{\tanh(\Xi)} \frac{\partial \Xi}{\partial m_\mu} \\
&= \frac{nK\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^\mu \overline{\tanh(\Xi)}. \\
\frac{\partial}{\partial m_\mu} \overline{\tanh^2(\Xi)} &= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^\mu \left\{ \overline{n \tanh^3(\Xi)} - \overline{n \tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. + 2 \overline{\tanh(\Xi) (1 - \tanh^2(\Xi))} \right\} \\
&= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^\mu \left\{ (n-2) \overline{\tanh^3(\Xi)} - \overline{n \tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right. \\
&\quad \left. + 2 \overline{\tanh(\Xi)} \right\}. \\
\frac{\partial}{\partial m_\mu} \overline{\tanh(\Xi)} &= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^\mu \left\{ \overline{n \tanh^2(\Xi)} - \overline{n \tanh(\Xi)^2} + 1 - \overline{\tanh^2(\Xi)} \right\} \\
&= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \xi^\mu \left\{ (n-1) \overline{\tanh^2(\Xi)} - \overline{n \tanh(\Xi)^2} + 1 \right\}.
\end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial m_\mu} \varphi &= \left[\frac{\partial}{\partial m_\mu} \overline{\tanh^2(\Xi)} \right] \\
&= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-2) \left[\xi^\mu \overline{\tanh^3(\Xi)} \right] - n \left[\xi^\mu \overline{\tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right] + 2 \left[\xi^\mu \overline{\tanh(\Xi)} \right] \right\} \\
&= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-2) \left[\xi^\mu \overline{\tanh^3(\Xi)} \right] - n \left[\xi^\mu \overline{\tanh(\Xi) \tanh^2(\Xi)} \right] + 2m_\mu \right\}. \\
\frac{\partial}{\partial m_\mu} \psi_\nu &= \left[\xi^\nu \frac{\partial}{\partial m_\mu} \overline{\tanh(\Xi)} \right] \\
&= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1) \left[\xi^\nu \xi^\mu \overline{\tanh^2(\Xi)} \right] - n \left[\xi^\nu \xi^\mu \overline{\tanh(\Xi)^2} \right] + \left[\xi^\nu \xi^\mu \right] \right\} \\
&= \frac{K\beta}{\mu\sqrt{p}} \left\{ (n-1) \left[\xi^\nu \xi^\mu \overline{\tanh^2(\Xi)} \right] - n \left[\xi^\nu \xi^\mu \overline{\tanh(\Xi)^2} \right] + \delta_{\mu\nu} \right\}.
\end{aligned}$$

8.4 AT線

8.4.1 式(104)~(106)を導く

鞍点方程式(77),(79)より, レプリカ対称性を仮定する前に鞍点方程式を用いて $\hat{q}_{\alpha\beta}$, \hat{m}_ν^α を $q_{\alpha\beta}$, m_ν^α で表す.

$$\begin{aligned}
G &= G_1 + G_2 + G_3 \\
&= \frac{1}{4\mu} \tilde{\beta} K^2 - \frac{\kappa}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q_{\alpha\beta})^2 + \frac{\kappa n}{4} - \frac{\beta J}{2} \sum_{\alpha\nu} (m_\nu^\alpha)^2 + \left[\ln \left\{ \text{Tr}_{\boldsymbol{\sigma}} e^{\kappa \sum_{\alpha < \beta} (q_{\alpha\beta}) \sigma^\alpha \sigma^\beta + \beta J \sum_{\alpha\nu} m_\nu^\alpha \sigma^\alpha \xi^\nu} \right\} \right].
\end{aligned}$$

まず, G を $q_{\alpha\beta}$ で微分すると,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G}{\partial q_{\alpha\beta}} &= -\kappa q_{\alpha\beta} + \kappa \left[\frac{\text{Tr}_{\boldsymbol{\sigma}} e^{\tilde{H}} \sigma^\alpha \sigma^\beta}{\text{Tr}_{\boldsymbol{\sigma}} e^{\tilde{H}}} \right] \\
&= -\kappa \left\{ q_{\alpha\beta} - [\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle] \right\},
\end{aligned}$$

より, これをさらに $q_{\gamma\delta}$ で微分すると式(104)が, m_ν^α で微分すると式(106)が得られる. ここで,

$$\tilde{H} = \kappa \sum_{\alpha < \beta} (q_{\alpha\beta})^2 \sigma^\alpha \sigma^\beta + \beta J \sum_{\alpha\nu} m_\nu^\alpha \sigma^\alpha \xi^\nu.$$

また, G を m_ν^α で微分すると,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G}{\partial m_\nu^\alpha} &= \beta J m_\nu^\alpha + \left[\beta J \frac{\text{Tr}_{\boldsymbol{\sigma}} e^{\tilde{H}} \sigma^\alpha \xi^\nu}{\text{Tr}_{\boldsymbol{\sigma}} e^{\tilde{H}}} \right] \\
&= \beta J m_\nu^\alpha + \left[\beta J \langle \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle \right] \\
&= \beta J \left\{ m_\nu^\alpha - [\xi^\nu \langle \sigma^\alpha \rangle] \right\},
\end{aligned}$$

より, これをさらに m_μ^β で微分すると, 式(105)が得られる.

8.4.2 式(107)~(113)を導く

Hopfield Attractor では, $m_1 = m$, $m_2 = m_3 = 0$ なので,

$$\begin{aligned}\langle \sigma \rangle &= \overline{\tanh \Xi} = \overline{\tanh \Xi_1} = [\xi_1 \overline{\tanh \Xi_1}] = m, \\ \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle &= \overline{\tanh^2 \Xi} = \overline{\tanh^2 \Xi_1} = q, \\ \Xi_1 &= \sqrt{\kappa q x} + \beta J m \quad (\xi_1 = 1),\end{aligned}$$

である. これを使うと, 式(105)は,

$$\frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial m_\mu^\beta} = -\beta J \left\{ \delta_{(\alpha\nu)(\beta\mu)} - \beta J [\xi^\nu \xi^\mu q] + \beta J [\xi^\nu \langle \sigma^\alpha \rangle] [\xi^\mu \langle \sigma^\beta \rangle] \right\},$$

となる. よって, 次のように式(107)(108)が得られる.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^{\alpha 2}} &= -\beta J [1 - \beta J (1 - m^2)] \quad (\nu = \mu = 1, \alpha = \beta), \\ \frac{\partial^2 G}{\partial m_1^\alpha \partial m_\nu^\beta} &= 0 \quad (\nu \neq 1), \\ \frac{\partial^2 G}{\partial m_\nu^\alpha \partial m_\nu^\beta} &= (\beta J)^2 (q - m^2) \quad (\alpha \neq \beta).\end{aligned}$$

次に, 式(109),(110),(111)は, 式(104)からすぐに求めることができる. 最後に, 式(106)とり, 式(112),(113)はそれぞれ次のようになる.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\nu^\alpha} &= \kappa \beta J [\langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle - \beta J \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \langle \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle] \\ &= \kappa \beta J [\langle \sigma^\beta \xi^\nu \rangle - \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \langle \sigma^\alpha \xi^\nu \rangle] \\ &= \kappa \beta J [\xi^\nu \xi^1 m - q m \xi^1 \xi^\nu] \\ &= \kappa \beta J m (1 - q) \delta_{\nu 1}. \\ \frac{\partial^2 G}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\nu^\gamma} &= \kappa [\beta J \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \sigma^\gamma \xi^1 \rangle - \beta J \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle \langle \sigma^\gamma \xi^\nu \rangle] \\ &= \kappa \beta J [\xi^\nu \overline{\tanh^3 \Xi_1} \xi^1 - q m \xi^1 \xi^\nu] \\ &= \kappa \beta J [\overline{\tanh^3 \Xi_1} - q m] \delta_{1\nu}.\end{aligned}$$

8.4.3 式(138)と式(140)が等しいことを示す

式(133),(135)を使って, 式(138),(140)をそれぞれ書き直す.

式(138):

$$C c_1 + \frac{1}{1-n} \{C + (n-2)D\} c_1 + \{P + (n-2)Q\} f$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2}{2-n} \left\{ (n-2)Q + {}_{n-2}C_2R \right\} f - \lambda_2^{(1)} f = 0 \\
\left\{ \frac{2-n}{1-n}C + \frac{n-2}{1-n}D \right\} c_1 + \left\{ P + (n-2)Q + \frac{2}{2-n} \left\{ (n-2)Q + \frac{(n-2)(n-3)}{2}R \right\} - \lambda_2^{(1)} \right\} f = 0 \\
& \frac{n-2}{n-1} (C-D)c_1 + \left\{ P + (n-2)Q - 2Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)} \right\} f = 0 \\
\therefore \frac{n-2}{n-1} (C-D)c_1 + \left\{ P + (n-4)Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)} \right\} f = 0.
\end{aligned}$$

式 (140):

$$\begin{aligned}
Dc_1 + \frac{1}{1-n} \left\{ 2C + (n-3)D \right\} c_1 + \left\{ 2Q + (n-3)R \right\} f \\
+ \frac{2}{2-n} \left\{ P + 2(n-3)Q + {}_{n-3}C_2R - \lambda_2^{(1)} \right\} f = 0 \\
\frac{1}{1-n} \left\{ (1-n)D + 2C + (n-3)D \right\} c_1 \\
+ \frac{1}{n-2} \left\{ 2Q(n-2) + (n-2)(n-3)R - 2P - 4(n-3)Q - (n-3)(n-4)R + 2\lambda_2^{(1)} \right\} f = 0 \\
- \frac{1}{n-1} (2C - 2D)c_1 + \frac{1}{n-2} \left\{ -2P + (-2n+8)Q + (n-3)R(n-2-n+4) + 2\lambda_2^{(1)} \right\} f = 0 \\
\therefore \frac{n-2}{n-1} (C-D)c_1 + \left\{ P + (n-4)Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)} \right\} f = 0.
\end{aligned}$$

よって, 式 (140) は式 (138) と等しく, 式 (139) になることを示すことができた.

8.4.4 固有方程式の下半分すべての行で式 (159) が成り立つ

ここでは固有方程式の下半分の (2,3) 行, (3,4) 行についても考えてみる.

(1,3) 行:

$$\begin{aligned}
Qu + \left\{ Q + (n-3)R + P + (n-3)Q \right\} v + \left\{ (n-3)Q + {}_{n-3}C_2R \right\} w = \lambda_3 v \\
(2-n)Qv + \left\{ P + (n-2)Q + (n-3)R \right\} v + (n-3) \left\{ Q + \frac{n-4}{2}R \right\} \frac{2}{3-n}v = \lambda_3 \\
(\because \text{式 (155), (156) より}) \\
P + (2-n+n-2-2)G + (n-3-n-4)R = \lambda_3 \\
\therefore \lambda_3 = P - 2Q + R.
\end{aligned}$$

(3,4) 行:

$$\begin{aligned}
Ru + \left\{ 2Q + (n-4)R + 2Q + (n-4)R \right\} v + \left\{ P + 2(n-4)Q + {}_{n-4}C_2R \right\} w = \lambda_3 w \\
\frac{(2-n)(3-n)}{2}Rw + \left\{ 4Q + 2(n-4)R \right\} \frac{3-n}{2}w + \left\{ P + 2(n-4)Q + \frac{(n-4)(n-5)}{2}R \right\} w = \lambda_3 w \\
(\because \text{式 (155), (156) より})
\end{aligned}$$

$$P + \{2(3-n) + 2(n-4)\}Q + \left\{ \frac{(2-n)(3-n)}{2} + (n-4)(n-3) + \frac{(n-4)(n-5)}{2} \right\}R = \lambda_3$$

$$P - 2Q + \frac{1}{2}\{(1-2+1)n^2 + (-5+14-9)n + 6-24+20\}R = \lambda_3$$

$$\therefore \lambda_3 = P - 2Q + R.$$

8.4.5 λ_3 の独立なベクトルの数 ${}_nC_2 - n$ を示す

λ_3 の固有ベクトル (列ベクトル) を横に並べた, ${}_nC_2 \times {}nC_2$ の対称行列

$$\mathcal{M}_n = \left(\begin{array}{cccc} \boldsymbol{\mu}_{(1,2)} & \boldsymbol{\mu}_{(1,3)} & \cdots & \boldsymbol{\mu}_{(n-1,n)} \end{array} \right),$$

を考える. そして ${}_nC_2$ 個の $\boldsymbol{\mu}_{(1,2)} \cdots \boldsymbol{\mu}_{(n-1,n)}$ のうち独立なものは何個あるかを調べる.

ここで, $\boldsymbol{\mu}(\gamma)$ は γ を含むところのみ 1 で他は 0 の列ベクトル (全成分で ${}_nC_2$ 個) であり, $\boldsymbol{\mu}(\bar{\gamma})$ は,

$$\boldsymbol{\mu}(\bar{\gamma}) = \boldsymbol{\mu}_E - \boldsymbol{\mu}(\gamma),$$

とする. $\boldsymbol{\mu}_E$ は 1 が ${}_nC_2$ 個並んだ列ベクトルである.

a. まず, $(\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)}, \boldsymbol{\mu}_{(\gamma)}) = 0$ を示す. すなわち, $\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)}$ と $\boldsymbol{\mu}_{(\gamma)}$ が独立であることを示す.

$\gamma = \alpha$ または $\gamma = \beta$ のときは, $(\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)}, \boldsymbol{\mu}_{(\gamma)}) = u + (n-2)v = 0$ となる.

次に $\gamma \neq \alpha, \gamma \neq \beta$ のときを考える. $(\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{(\gamma\gamma)} \equiv 0$ と定義し, また, $(\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{\gamma\delta} = (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{\delta\gamma}$ として, (γ, γ) 成分がないことに注意すると,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)}, \boldsymbol{\mu}_{(\gamma)}) &= (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{(\gamma,1)} + (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{(\gamma,2)} + \cdots + (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{(\gamma,n)} \\ &= (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{(\gamma,\alpha)}v + (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)})_{(\gamma,\beta)}v + (n-3)w \\ &= 2v + (n-3)w \\ &= 0. \end{aligned}$$

ここでは式 (155), (156) より,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)}, \boldsymbol{\mu}_{(\alpha)}) &= u + (n-2)v = 0, \\ (\boldsymbol{\mu}_{(\alpha,\beta)}, \boldsymbol{\mu}_{(\bar{\alpha})}) &= (n-2)v + {}_{n-2}C_2w = 0, \end{aligned}$$

を使った.

b. 次に, $(\boldsymbol{\mu}_{(1)} \cdots \boldsymbol{\mu}_{(n)})$ は独立であることを示す. すなわち,

$$C_1\boldsymbol{\mu}_{(1)} + C_2\boldsymbol{\mu}_{(2)} + \cdots + C_n\boldsymbol{\mu}_{(n)} = 0, \quad (229)$$

より, $C_i = 0$ を示せばよい. 式 (229) より,

$$\begin{pmatrix} C_1 + C_2 \\ C_1 + C_3 \\ \vdots \\ C_{n-1} + C_n \end{pmatrix} = 0,$$

となるので,

$$\begin{array}{rcl}
 C_1 + C_2 = 0 & \implies & C_2 = -C_1 \\
 C_1 + C_3 = 0 & \implies & C_3 = -C_1 \\
 \vdots & & \vdots \\
 C_1 + C_n = 0 & \implies & C_n = -C_1 \\
 C_2 + C_3 = 0 & \implies & C_3 = -C_2 = C_2 \\
 \vdots & & \vdots
 \end{array}$$

よって, $C_1 = C_2 = \dots = C_n = 0$ となるので, 独立であるといえる.

よって, a, b より $\mu_{(\alpha, \beta)}$ と $\mu_{(\gamma)}$ が独立であり, また $\mu_{(1)}, \dots, \mu_{(n)}$ も独立であることが言えた. いま, $\mu_{(1,2)}, \dots, \mu_{(n-1,n)}$ で張られる空間 X_n の次元を m とする. X_n の基底を e_1, \dots, e_m とすると, これと $\mu_{(1)}, \dots, \mu_{(n)}$ は独立である. これ以外に独立なものがあると仮定し, それを \tilde{f} とする. このとき f から $e_1, \dots, e_m, \mu_{(1)}, \dots, \mu_{(n)}$ と直交して 0 でないベクトル f をつくれる. このとき, 次の 2 つの条件が満たされる. それぞれ α, β は任意である.

$$(f, \mu_{(\alpha, \beta)}) = 0, \quad (230)$$

$$(f, \mu_{(\alpha)}) = 0. \quad (231)$$

f の成分を $f_{\alpha\beta}$ とする. ここで, $\beta < \alpha$ について, $f_{\alpha\beta} = f_{\beta\alpha}$ と定義する. また, $f_{\alpha\alpha} = 0$ とする. 式 (230) より,

$$f_{\alpha\beta}u + \left(\sum_{\gamma=1}^n f_{\gamma\alpha} - f_{\beta\alpha} \right)v + \left(\sum_{\delta=1}^n f_{\delta\beta} - f_{\alpha\beta} \right)v + \sum_{\gamma < \delta} f_{\gamma\delta}w = 0. \quad (232)$$

式 (232) 左辺の最後の項について書き下すと,

$$\begin{aligned}
 \sum_{\gamma < \delta} f_{\gamma\delta} &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\gamma, \delta} f_{\gamma\delta} - \sum_{\gamma} f_{\gamma\alpha} - \sum_{\gamma} f_{\gamma\beta} - \sum_{\delta} f_{\alpha\delta} - \sum_{\delta} f_{\beta\delta} + 2f_{\alpha\beta} \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\gamma, \delta} f_{\gamma\delta} - 2 \sum_{\gamma} f_{\gamma\alpha} - 2 \sum_{\gamma} f_{\alpha\beta} + 2f_{\alpha\beta} \right\}.
 \end{aligned}$$

よって式 (232) は,

$$f_{\alpha\beta}(u - 2v + w) + \sum_{\gamma=1}^n f_{\gamma\alpha}(v - w) + \sum_{\delta=1}^n f_{\delta\beta}(v - w) + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta} f_{\gamma\delta}w = 0. \quad (233)$$

次に式 (231) について考える.

$$\sum_{\gamma=1}^n f_{\alpha\gamma} = 0.$$

よってこれより，式 (233) は $(u - 2v + w)f_{\alpha\beta} = 0$ となる． $f_{\alpha\beta}$ の係数を式 (155),(156) を使って変形すると，

$$\begin{aligned}
u - 2v + w &= (2 - n)v - 2v + \frac{2v}{3 - n} \\
&= v\left\{\frac{2}{3 - n} - n\right\} \\
&= \frac{v}{3 - n}\{2 - n(3 - n)\} \\
&= \frac{v}{3 - n}(n^2 - 3n + 2) \\
&= \frac{2(n - 1)(n - 2)}{3 - n}.
\end{aligned}$$

$n \neq 1, 2, 3$ とすると， $u - 2v + w \neq 0$ となる．よって $f_{\alpha\beta} = 0$ となってしまう，仮定と矛盾するので，ベクトル \tilde{f} は存在しない．

ゆえに， $\mu_{\alpha\beta}$ の全体と， $\mu_{(1)}, \dots, \mu_{(n)}$ 以外に独立なベクトルはない．従って， $\mu_{(\alpha,\beta)}$ 全体のうち，独立な固有ベクトルは， ${}_nC_2 - n$ 個となる．

8.4.6 式 (206) と式 (207) が等しいことを示す

式 (206),(207) を式 (202),(203) を用いて変形し，これらが等しく，式 (208) になることを示す．

式 (206):

$$\begin{aligned}
&(A_1 + 2A_2)\tilde{c} + (n - 1)(B_1 + 2B_2)\tilde{d} + (n - 1)Cf + {}_{n-1}C_2Dg = \lambda_2^{(1)}\tilde{c} \\
&(A_1 + 2A_2)(1 - n)\tilde{d} + (n - 1)(B_1 + 2B_2)\tilde{d} + \frac{(n - 1)(2 - n)}{2}Cg + {}_{n-1}C_2Dg = \lambda_2^{(1)}(1 - n)\tilde{d} \\
&\hspace{15em} (\because \text{式 (202), (203) より}) \\
&(1 - n)\{A_1 + 2A_2 - (B_1 + 2B_2)\}\tilde{d} + \left\{-\frac{(n - 1)(n - 2)}{2}C + {}_{n-1}C_2D\right\}g = \lambda_2^{(1)}(1 - n)\tilde{d} \\
\therefore \quad &\{A_1 - B_1 + 2(A_2 - B_2) - \lambda_2^{(1)}\}\tilde{d} + \frac{(n - 2)}{2}(C - D)g = 0.
\end{aligned}$$

式 (207):

$$\begin{aligned}
&(B_1 + 2B_2)\tilde{c} + \{A_1 + (n - 2)B_1 + 2A_2 + 2(n - 2)B_2\}\tilde{d} \\
&\quad + \{C + (n - 2)D\}f + \frac{(n - 2)}{2}\{2C + (n - 3)D\}g = \lambda_2^{(1)}\tilde{d} \\
&(B_1 + 2B_2)(1 - n)\tilde{d} + \{A_1 + (n - 2)B_1 + 2A_2 + 2(n - 2)B_2\}\tilde{d} \\
&\quad + \{C + (n - 2)D\}\frac{(2 - n)}{2}g + \frac{(n - 2)}{2}\{2C + (n - 3)D\}g = \lambda_2^{(1)}\tilde{d} \\
&\hspace{15em} (\because \text{式 (202), (203) より}) \\
&\{A_1 + 2A_2 + (B_1 + 2B_2)(1 - n + n - 2)\}\tilde{d} + \frac{n - 2}{2}\{2C + (n - 3)D - C - (n - 2)D\}g = \lambda_2^{(1)}\tilde{d} \\
\therefore \quad &\{A_1 - B_1 + 2(A_2 - B_2) - \lambda_2^{(1)}\}\tilde{d} + \frac{(n - 2)}{2}(C - D)g = 0.
\end{aligned}$$

よって，式(206)は式(207)と等しく，式(208)になることを示すことができた．

8.4.7 式(209)と式(210)が等しいことを示す

式(209),(210)を式(202),(203)を用いて変形し，これらが等しく，式(211)になることを示す．

式(209):

$$\begin{aligned}
& 3C\tilde{c} + 3\{C + (n-2)D\}\tilde{d} + \{P + (n-2)Q\}f + \frac{(n-2)}{2}\{2Q + (n-3)R\}g = \lambda_2^{(1)}f \\
& 3\{(1-n)C + C + (n-2)D\}\tilde{d} + \frac{n-2}{2}\{-P - (n-2)Q + 2Q + (n-3)R\}g = \lambda_2^{(1)}\frac{(2-n)}{2}g \\
& \hspace{15em} (\because \text{式(202), (203) より}) \\
& 3(2-n)(C-D)\tilde{d} + \frac{2-n}{2}\{P + (n-4)Q - (n-3)R\}g = \lambda_2^{(1)}\frac{(2-n)}{2}g \\
& \therefore 6(C-D)\tilde{d} + \{P + (n-4)Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)}\}g = 0.
\end{aligned}$$

式(210):

$$\begin{aligned}
& 3D\tilde{c} + 3\{2C + (n-3)D\}\tilde{d} + \{2Q + (n-3)R\}f + Pg + \frac{(n-3)}{2}\{4Q + (n-4)R\}g = \lambda_2^{(1)}g \\
& 3\{(1-n)D + 2C + (n-3)D\}\tilde{d} \\
& + \frac{1}{2}\{2(2-n)Q + (2-n)(n-3)R + 2P + (n-3)\{4Q + (n-4)R\}\}g = \lambda_2^{(1)}g \\
& \hspace{15em} (\because \text{式(202), (203) より}) \\
& 6(C-D)\tilde{d} + \frac{1}{2}\{2P + (4-2n+4n-12)Q + (n-3)(2-n+n-4)R\}g = \lambda_2^{(1)}g \\
& 6(C-D)\tilde{d} + \frac{1}{2}\{2P + (2n-8)Q - 2(n-3)R\}g = \lambda_2^{(1)}g \\
& \therefore 6(C-D)\tilde{d} + \{P + (n-4)Q - (n-3)R - \lambda_2^{(1)}\}g = 0.
\end{aligned}$$

よって，式(209)は式(210)と等しく，式(211)になることを示すことができた．

参考文献

- [1] 吉富 康成 著, “ニューラルネットワーク” 朝倉書店 (2002)
- [2] John Hertz , Anders Krogh , Richard G. Palmer ,
“*INTRODUCTION TO THE THEORY OF NEURAL COMPUTATION*” (1991)
- [3] 甘利 俊一 著, “神経回路網の数理” 産業図書 (1978)
- [4] D. O. Hebb, *The organization of behavior*, Wiley , New York (1949)
- [5] F. Rosenblatt, “*The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain*,” *Psychological review* , **65**, 386-408, (1958)
- [6] F. Rosenblatt, *Principles of neurodynamics*, Spartan books, (1962)
- [7] D. E. Rumelhart et al, Learning internal representation by error propagation, *Parallel Distributed Processing, Exploration in the Microstructures of Cognition*, **1**, MIT Press, 318-362,(1986)
- [8] K. Fukushima, *Cognitron: a self-organizing multilayered neural network*, *Biol. Cybern*, **20** 121-136, (1975)
- [9] J. J. Hopfield, “*Neural Networks and Physical Systems with Emergent Computational Abilities*,” *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA*, **79** (1982) 2554
- [10] J. J. Hopfield, D. W. Tank, “*Neural computation of decisions in optimization problems*,” *Biol. Cybern*, **52** 141-152, (1985)
- [11] S. E. Fahlman et al, Massive parallel architectures of AI: NETL, thistle, and Boltzmann machines, *Proc. of the National Conf. on Artificial Intelligence*, **AAAI-83** 109-113, (1983)
- [12] D. H. Ackley, et al, “*A learning algorithm for Boltzmann machines*,” *Cognitive Science*, **9** 147-169, (1985)
- [13] 西森 秀稔 著, “ニューラルネットワークの統計力学” 丸善株式会社 (1995)
- [14] R. Penney and D. Sherrington, “*Slow interaction dynamics in spin-glass models*,” *Journal of Physics A : Mathematical and General*, vol. 27, No.12, pp. 4027-4041, June, 1994.
- [15] T. Uezu and A. C. C. Coolen, “*Hierarchical self-programming in recurrent neural networks*,” *Journal of Physics A : mathematical and general*, vol. 35, No.35, pp. 2761-2809, March, 2002.
- [16] 西森 秀稔 著, “スピングラス理論と情報統計力学” 岩波書店 (1999)

- [17] K. Binder , D. W. Heermann ,
“*Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*” Springer(2002)
- [18] 甘利 俊一 編著, “ニューラルネットの新展開” サイエンス社 (1993)