

博士学位論文

断熱的二温度系における  
適応的進化の統計力学的研究

Statistical mechanical study of  
adaptive evolution  
in partially annealed systems

東京大学大学院 総合文化研究科  
広域科学専攻 相関基礎科学系

坂田 綾香

## 謝辞

本博士論文は、駒場における5年間の研究成果をまとめたものです。ここに至るまで、多くの方々に暖かいご支援をいただきました。

本博士論文は、指導教官の福島孝治先生によるご指導のもとに完成いたしました。本研究で用いたアイデアや手法は、福島さんとの議論を通して得たものです。鋭い指摘や的確なコメントをいただき、たくさんのごことを勉強させていただきました。この5年間で、研究者として必要なものを身につけられたことは、全て福島さんのおかげです。これまで暖かく見守っていただいたことに感謝しております。

本研究のテーマを選ぶにあたっては、金子邦彦先生に大きな影響を受けました。目先の計算結果にとらわれがちな私に対し、金子さんは直観的に物事を見ることの大切さを教えてくださいました。金子さんの見ているものに触れ、それを自分の言葉で解釈し、証明する方法を考えることは、とても刺激的な経験でした。

本研究の原点は、学部の卒業研究にあります。卒業研究を通して、研究の楽しさを知りました。卒研の指導教官であった、守真太郎先生が駒場への進学を勧めてくださらなければ、この博士論文は存在しませんでした。

特定領域研究 DEX-SMI(情報統計力学の深化と展開) 構成員の、岡田真人先生、樺島祥介先生、田中和之先生、田中利幸先生、西森秀稔先生に感謝を申し上げます。様々な研究会において勉強させていただき、また研究発表の機会を与えていただきました。菊池誠先生、時田恵一郎先生、ACC Coolen 先生には、セミナーなどの研究発表の機会を与えていただき、多くの助言をいただきました。

福島研の構成員であった中島千尋さん、中島哲也さんには、何度も議論を重ねていただき、多くのことを勉強させていただきました。最後に、井上雅世さん、岩田真実さん、大関真之さん、太田洋輝さん、小淵智之さん、北島顕正さん、斉藤稔さん、沢辺剛さん、中田豊さん、平間毅さん、松田佳希さん、観山正道さん、安田宗樹さんに感謝いたします。その他にも、福島研、金子研、佐々研をはじめとする駒場の皆様、西森研、樺島研の皆様、お世話になった全ての方々に感謝いたします。

( ´ ` )つ≡♡

本研究は，日本学術振興会特別研究員奨励費 (20・10778) による支援を受けています．

# 目次

第 1 章	はじめに	1
1.1	進化学の歴史 . . . . .	1
1.2	複雑系, スピングラスと進化 . . . . .	6
1.3	Partial Anneal 系 . . . . .	11
1.4	本論文の目的と構成 . . . . .	13
第 2 章	Sakata-Hukushima-Kaneko model	17
2.1	導入 . . . . .	17
2.2	モデルの定義 . . . . .	18
2.3	結果 . . . . .	20
2.4	適応度地形 . . . . .	31
2.5	まとめ . . . . .	33
第 3 章	Coupled mean-field model	36
3.1	導入 . . . . .	36
3.2	モデルの定義 . . . . .	38
3.3	レプリカ法による解析 . . . . .	39
3.4	結果 . . . . .	41
3.5	まとめ . . . . .	47
第 4 章	partial anneal 系の進化におけるレプリカ対称性の破れ	51
4.1	導入 . . . . .	51
4.2	モデルの定義 . . . . .	52
4.3	レプリカ法による解析 . . . . .	53
4.4	結果 . . . . .	57
4.5	まとめ . . . . .	65
第 5 章	まとめ	67
5.1	本博士論文のまとめ . . . . .	67

---

5.2	今後の展望 . . . . .	73
付録 A	SHK model に関する補足	77
A.1	数値計算の手法 . . . . .	77
A.2	適応度地形 . . . . .	79
付録 B	coupled mean-field model に関する補足	82
B.1	AT 安定性条件の導出 . . . . .	82
B.2	フラストレーション秩序変数の導出 . . . . .	83
B.3	数値計算 . . . . .	84
付録 C	4 章に関する補足	90
C.1	$t \sim O(1)$ の場合 . . . . .	90
C.2	ターゲット間のオーバーラップと非ターゲット間のオーバーラップ . . . . .	90
C.3	有効ハミルトニアンに関する規格化定数の導出 . . . . .	91
C.4	秩序変数の物理的な意味 . . . . .	92
C.5	秩序変数とターゲット磁化の振る舞い . . . . .	93
C.6	AT 安定性条件の導出 . . . . .	94
C.7	フラストレーション秩序変数の導出 . . . . .	96
付録 D	partial anneal 系の Viana-Bray model	98
D.1	モデルの定義 . . . . .	98
D.2	レプリカ法による解析 . . . . .	99
D.3	結果 . . . . .	102
D.4	まとめ . . . . .	106
参考文献		108

# 第 1 章

## はじめに

本章では、学問としての進化の歴史をまとめる。自然淘汰と中立進化を物理法則とする進化という現象が確立されるまでと、その後の発展について説明する。ここではいわゆる複雑系における進化の研究、中でも適応度地形という概念を用いた研究に重点を置く。その中で本研究の立場を明確にし、この研究を通して目指すこと、研究を完成させることで得られるであろう知見をまとめる。

### 1.1 進化学の歴史

#### 1.1.1 種の起源

進化という現象は、現在では事実として受け入れられているが、宗教的な価値観が支配的であった中世では、生物は創造説に基づいて形作られ、時間的に不変のものであると考えられてきた。しかし、18 世紀ごろまでに確立した地質学、古生物学により、生物が変化してきた証拠が現れるようになった。この変化の仕組みを、進化として初めて科学的に議論したのは、Lamarck であった。Lamarck は、前進的発達、用不用の法則、獲得形質の遺伝という 3 つの要素が進化を生む機構であると考えた。前進的発達とは、生物自身が備え持つ前進への欲求、ある種の生命力に従って、完成形を目指して自発的に変化していくことを意味する。用不用の法則とは、必要な器官は発達し、不必要な器官は退化するという法則である。また獲得形質の遺伝とは、用不用の法則により獲得された形質が、次の世代に遺伝することを指す。Lamarck の進化論は、そもそも進化という概念を受け入れる土壌が整っていなかった時代であったため、激しい反発に合い、また彼の説自体も、実験的に裏づけられることはなかった。Lamarck の説は、現在では誤った進化論として認識されている。

Darwin による「種の起源」が出版されたのは、Lamarck の説が発表されてから 50 年後である。Darwin は、品種改良など的人為的な淘汰を受けて、飼育栽培されている動植物の中に、

自然界の種とは異なるものが存在している事実に気づいた。そして、同じような淘汰が自然界でも起こっているのではないかと考えた。測量船ビーグル号による世界一周の航海や、育種の注意深い観察から得た膨大な資料に基づき、Darwin は「種の起源」の中で、進化とは遺伝的な変異の蓄積と、そこへかかる淘汰により起こる物理的な過程であることを示した。しかし当時は、遺伝を支配する法則は未知のものであったため、Darwin は幾つかの反論に答えることが出来なかった。その中の一つに、多様性に関する反論があった。これは、Darwin が主張するように、ある世代の特徴を混ぜ合わせたものを次の世代が受け継ぐのであれば、最終的に均一になり、多様性がなくなるのではないかという疑問であった。

「種の起源」が自然科学に与えた影響の大きさは、Boltzmann の記述からはかることもできる。Boltzmann は、生物の進化における Darwin の考え方を受け、文化の進化を人々の脳内で起こる物理的なプロセスとして捉えることで、Darwin の理論を文化に対して適用することを考えていた [McGuinness (1974)]\*<sup>1</sup>。

### 1.1.2 Mendel の法則

Darwin が「種の起源」を発表した後、1866年に Mendel がエンドウを用いた実験結果を発表した。Mendel は、種子の形や草丈などの目に見える形質（表現型）に着目し、対立する形質を持つ個体同士を掛け合わせ、子世代、孫世代の形質の分布を観察した。その結果、丸い種子を持つ個体と、対立形質であるしわの種子を持つ個体を掛け合わせると、次の世代では全て丸い種子を持つ個体が生まれ、さらに次の世代では、丸い種子を持つ個体としわの種子を持つ個体が約 3 対 1 で得られた。Mendel は、遺伝情報をもつ粒子状の因子の存在を仮定し、表現型はこの因子により決まると考えた。さらにその因子が 2 つの法則に従うと考えると、実験結果が説明できるということを主張した。これは、メンデルの第一法則（分離の法則）、メンデルの第二法則（独立の法則）と呼ばれる [Crow (1983)]\*<sup>2</sup>。分離の法則とは、遺伝情報を持つ因子は対を形成しており、次の世代に受け渡されるときに分離され、片方の因子だけが伝わるという法則である。また分離の法則に加え、優性・劣性遺伝という特徴も発見した。そして、独立の法則とは、異なる形質に対応する因子が、互いに独立であるという法則である。たとえば上記の種子の例に関して、形だけではなく色に関する対立形質も考慮して交配すると、孫世代では形、色とも独立に約 3 対 1 で分布する\*<sup>3</sup>。

Mendel の研究は、確率的なモデルを用いた進化の研究の先駆けであったと言える。しかし、

\*<sup>1</sup> 文化の進化に関しては、Dawkins による議論が挙げられる。Dawkins は、人々の間で複製・伝達される文化的な情報を持つ因子を、遺伝子 (gene) にかけて meme と呼び、meme の進化として文化の進化を議論している [Dawkins (1976)]。

\*<sup>2</sup> メンデルの法則の分類の仕方にはいくつかあり、優劣の法則を第一法則、分離の法則を第二法則、独立の法則を第三法則とすることもある。ここでは Crow の分類に従った [Crow (1983)]。

\*<sup>3</sup> 分子生物学的な知見から考えると、異なる形質に対応する遺伝子が同一の染色体上に存在していれば、一緒に次の世代に受け渡されることになり、各形質の分布が独立にならないことが明らかである。メンデルが着目した形質に対応する遺伝子は、偶然同一染色体上に存在していなかったと考えられる。

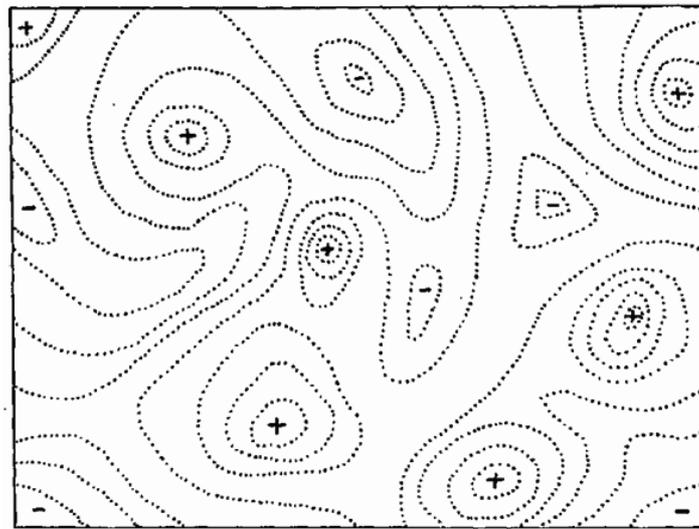


図 1.1 Wright が導入した適応度地形を示す．文献 [Wright (1932)] より抜粋した．

存在を仮定した因子の正体は，依然不明であった．また，この遺伝情報の粒子性は，Darwin が答えられなかった多様性の維持に対する疑問の答えになっていた．

### 1.1.3 集団遺伝学

1900 年になると，Mendel の法則は de Vries，Correns，Tschermak により，独立に再発見された．これを契機として始まった，統計学的・数学的理論を用いた Darwin の理論と Mendel の法則の融合が集団遺伝学である．Mendel の法則の再発見以降，遺伝情報を持つ粒子状の因子は，遺伝子 (gene) と呼ばれるようになった．集団遺伝学は，自由交配可能な集団 (主に有性生殖集団・Mendel 集団と呼ぶ) を考え，集団内の遺伝子頻度に着目し，その分布の性質や時間発展を理論的に表すことで，進化の理解を目指す学問である．遺伝子頻度とは，Mendel 集団が持つ全ての遺伝子 (遺伝子プール) 内に，ある対立遺伝子が存在する割合である．集団遺伝学においては，突然変異，自然淘汰，遺伝子流動，遺伝的浮動という 4 つの要素が進化の本質であると考えられている．遺伝子流動とは異なる集団間での遺伝子のやり取りを意味し，遺伝的浮動とは遺伝子分布の揺らぎを意味する．遺伝的浮動は初期の集団遺伝学においては重視されておらず，その重要性は分子遺伝学の発展後に明らかになった．古典的な集団遺伝学は，Fisher，Haldane，Wright らの研究により 1930 年代までに整い，また結果として統計学的手法の発展をもたらした [Fisher (1930), Frank (1997)] ．

古典的な集団遺伝学の理論は，遺伝子頻度の揺らぎを無視したものであった．したがって，考慮している集団のサイズが十分大きい場合，あるいは淘汰が十分に強く働いており，揺らぎが発生してもすぐに抑えられる場合という理想的な状況では，良い近似を与える理論である．現在でも集団遺伝学は，特定の人種などの大きな集団において遺伝子の分布を明らかにする研

究や、また動植物の遺伝的な操作の基礎理論として重要である\*4。集団遺伝学の発展により、全ては自然淘汰が作り上げたという自然淘汰万能論 (Neo Darwinism, あるいは進化の総合説) が成立した。

一連の集団遺伝学の研究の中で、興味深いものとして 1932 年の Wright の研究が挙げられる [Wright (1932)]。この研究の中で Wright は、後に適応度地形と呼ばれる概念を導入した。適応度とは、ある遺伝子を持つ個体が環境に適応している度合いを意味する。図 1.1 に、Wright が導入した適応度地形を示す。これは、遺伝子型 (遺伝子の配位) がある適応度を持つと考え、高次元空間である遺伝子型空間上で、適応度の高さを二次元的に表現したものである。Wright は適応度地形を、谷により隔てられた複数のピークを持つ、でこぼこな (rugged な) 地形であると考えた。そして、このような地形上で、ある局所的なピークにいる Mendel 集団が、より高いピークに到達するためには、何らかの trial & error の機構が必要であり、この機構を解明することが進化の理解につながると考えた。Wright は、集団内の交配と集団間の交配がバランスを保ち、その結果として得られる集団内の多様性が、この機構をもたらすと結論付けた。

この時代においても、遺伝子の本体が明らかになっていなかったため、集団遺伝学においては、目に見える表現型を対象とした理論的な研究が行われた。

#### 1.1.4 分子遺伝学と中立説

DNA 自体は 19 世紀には発見されていたが、これが遺伝情報を持つものだと明らかになるのは、分子生物学が発展した 1950 年代であった。まず 1952 年の Hershey と Chase のバクテリオファージを用いた実験により、DNA が遺伝物質であることが明らかになった。さらに 1953 年に、Watson と Crick により DNA の二重らせん構造が発見された。これにより、遺伝子の本体や構造が明らかになった。また Crick は、遺伝情報が DNA → RNA → タンパク質という順に伝わるとし、この概念をセントラルドグマと呼んだ。これは Lamarck が主張した獲得形質の遺伝、すなわちタンパク質から DNA に情報が伝わることを否定するものでもある。

進化学においても、分子生物学的手法を取り入れた分子遺伝学が盛んになった。表現型レベルではなく、分子 (遺伝子) レベルで様々な種の比較が出来るようになった結果、分子進化には、一定性と保守性という特徴があることが明らかになった。分子の進化とは、DNA 塩基が置き換わることを意味する。分子進化の一定性とは、表現型レベルで急速に進化する生物でも、そうでない生物でも、DNA 塩基が置き換わる時間スケールはほぼ一定という性質である。この性質は、各生物が用いるタンパク質の比較を通して明らかになった。また保守性とは、重要な機能をもたない分子ほど進化が速いという性質である。つまり、DNA 塩基の置換は、重

\*4 興味深い研究の例として、集団の遺伝子分布が平衡状態にあると仮定し、遺伝的な疾患を引き起こす突然変異率と、その変異が淘汰される確率に関する詳細釣り合いの関係から、突然変異率を推定する問題がある [木村 (1988)]。

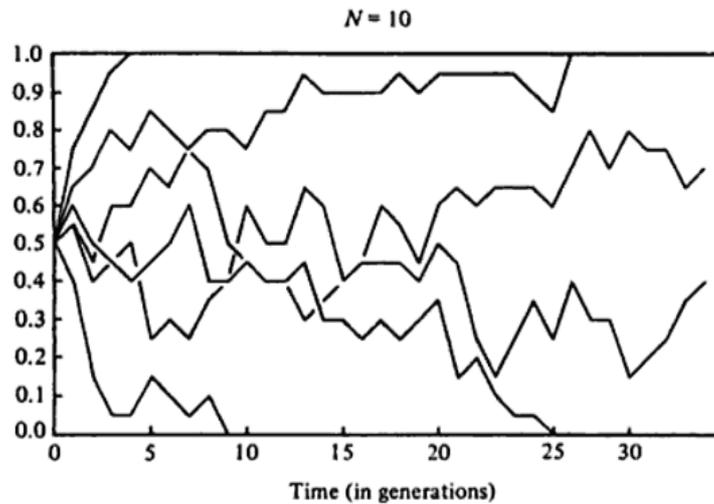


図 1.2 遺伝的浮動による遺伝子頻度の変化について，[Kimura (1983)] より抜粋した図を示す．10 個体からなる集団において，ある遺伝子の頻度に着目し，その時間変化をモンテカルロシミュレーションにより追った．初期条件は 0.5 としており，6 サンプルの結果を示している．

要な機能を保持したまま行われることから，保守性と呼ばれている．これらの性質は，自然淘汰だけでは説明できない．まず一定性に関しては，自然淘汰のみに基づいて変異が定着するのであれば，種によって，また同種でも異なる環境に生息するものによって，分子進化の時間スケールが異なるはずである．また保守性に関しては，機能的に重要ではない分子は自然淘汰を受けないため，淘汰による進化は起きない．そこで，これらの分子進化の性質を説明するものとして，中立進化説が発表された [Kimura (1968), Kimura (1983)]．自然淘汰に中立な，すなわち適応度を変化させない突然変異が起これば，変異遺伝子に対しては淘汰が働かないので，遺伝子頻度の時間発展は確率的に決まる．有限サイズの集団では，世代を経るごとに遺伝子頻度は大きく揺らぎ，有限確率で変異遺伝子が集団内に定着しうる．これを中立進化と呼んだ．つまり従来の集団遺伝学においては重要視されていなかった，遺伝的浮動が進化において重要であるという考えである．図 1.2 に，Kimura が示した，遺伝的浮動による遺伝子変化のモンテカルロシミュレーションの例を示す．これは，遺伝子頻度 0.5 であった遺伝子が，遺伝的浮動により集団内に定着（遺伝子頻度 1.0）したり，消滅（遺伝子頻度 0.0）したりする例を示している．中立説は，自然淘汰万能論が主流であった時代に多くの論争を巻き起こしたが，これは Darwin の考え方と対立するものではなく，またその後 1970 年代に多く行われた実験において，中立説が正しいことを保障する結果が確認された．これにより，淘汰による適応と，中立進化を法則とする現象としての進化が確立されたと言える．

## 1.2 複雑系，スピングラスと進化

進化に関する数理的な研究は，コンピューターの発達に伴い，多様性を増していった．1970年代になると，Eigen と Schuster により，適応度地形と遺伝子型の配位空間が同時に考えられるようになった．彼らは，各遺伝子型に対してある規則に従って適応度を与え，遺伝子型空間の写像として適応度地形を構成した．一般に，遺伝子型と表現型および適応度との対応関係を明らかにすることは，実験的には非常に難しい問題である．Eigen と Schuster は，この対応関係をモデル化して適応度地形を構成し，進化において起こりうる現象を予測することを考えた．彼らは擬種の方程式と呼ばれる微分方程式を用いて，適応度地形上での進化を議論した．ここでの種とは，同じ遺伝子型を持つ個体の集合であり，一方で擬種とは，似た遺伝子型を持つ個体の集合を意味する．擬種の方程式は，適応度地形上において，淘汰と突然変異により駆動される擬種のダイナミクスを記述する．研究の結果，適応度のピークの幅が狭いとき，適応状態を壊す突然変異の閾値が存在することがわかり，この現象は error catastrophe と呼ばれている [Eigen and Schuster (1978)] ．

この他にも，力学的な進化の研究が行われてきた．例えば，進化ゲーム理論におけるレプリケーター方程式や，生態系における Lotka-Volterra 方程式を用いた研究が挙げられる [Nowak (2006)] ．また，遺伝的アルゴリズムを用いて，数値的に進化のダイナミクスを追う研究も盛んに行われている．このように進化の動力学に着目した研究がある一方で，適応度地形の静的な性質を明らかにすることで，進化の理解を目指す研究もある．

### 1.2.1 NK model

Kauffman による NK model は，進化という動的な現象に対して，適応度地形の解析から理解を得ることを試みた研究の一つであると言える．Kauffman は，0, 1 の二値をとる  $N$  個の遺伝子を用意し，その配位を遺伝子型とした．この二値は，対立遺伝子に対応していると考えてよい．そして，遺伝子型の状態空間を遺伝子型空間と定義した．つまり遺伝子型空間は， $2^N$  の遺伝子型からなる．遺伝子型空間上での距離は，遺伝子型間の Hamming 距離で定義し，各遺伝子型は  $N$  個の再近接遺伝子型を持つ．そして，各遺伝子型に対して，まずはランダムに適応度を割り当て，遺伝子型空間の写像として適応度地形を構成した．このとき得られる適応度地形は，相関のない地形である．つまり，遺伝子型空間において近距離に位置する遺伝子型が，全く異なる適応度を持つ地形である．このような適応度地形上で進化するには非現実的な時間が要求されるため，ランダムな適応度地形上で進化してきた複雑な系は存在しないと結論付けた．

そこで，相関のある適応度地形をもたらし，さらに相関をコントロールできるモデルの構成

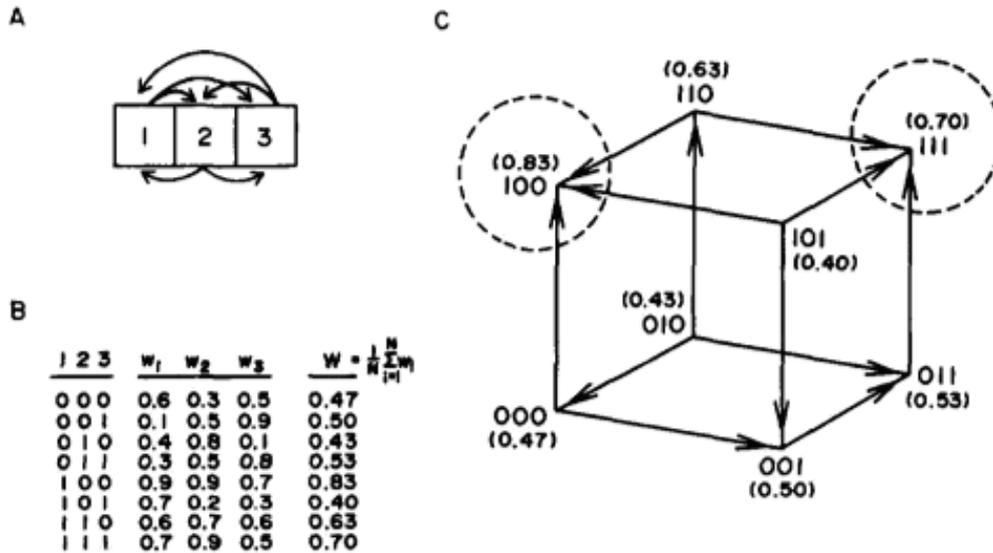


図 1.3 NK model の説明を示す . [Kauffman (1995)] から抜粋した . A は , 1, 2, 3 という三つの遺伝子と , その間の相互作用を矢印で示している . B は , 各遺伝子の状態と , 適応度寄与率  $w_i$  , 適応度  $W$  の例を示す .  $w_i$  の値は , ランダムに与えている . C は , 遺伝子型空間を表しており , 各頂点が遺伝子型に対応している . また括弧の中に , B の表から求めた各遺伝子型の適応度を示している .

が試みられた . これが , スピングラス模型の進化学版とも言える , NK model である\*<sup>5</sup> . NK model のアイデアを Kauffman に与えたのは , Anderson , Palmer , Stein とのスピングラス模型に関する議論だったという [Kauffman (1995)] . NK model においても , 二値をとる  $N$  個の遺伝子が作る遺伝子型の状態空間を考える . その適応度の割り当て方は , 次の規則に従う . まず  $i$  番目の遺伝子を  $S_i$  と表し , また全遺伝子の配位 (遺伝子型) を  $S$  と表しておく . そして , 各遺伝子型の適応度  $W(S)$  は , 全遺伝子の配位から決まるとする . この適応度は , 各遺伝子の適応度寄与率  $w_i$  の平均として与える . 適応度寄与率は , 自身の状態と , あらかじめ決められた  $K$  個の別の遺伝子の状態に依存する\*<sup>6</sup> . つまり各遺伝子の適応度寄与率は ,  $2^{K+1}$  通りの値をとる .  $i$  番目の適応度寄与率を  $w_i(S_i, S_{K_i})$  と表記すると , 適応度は次のように表される .

$$W(S) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i(S_i, S_{K_i}) \tag{1.1}$$

$S_{K_i}$  は ,  $i$  番目の遺伝子に影響を与える ,  $K$  個の遺伝子の集合である .  $S_{K_i}$  の選び方は重要ではなく , また  $K$  は 0 から  $N - 1$  の整数をとることが出来る . そして  $w_i(S_i, S_{K_i})$  ( $i = 1, \dots, N$ ) に対してランダムに値を与え , 適応度地形を構成した .  $N = 3, K = 2$  の場合の NK model

\*<sup>5</sup> NK model という名前は , ここで説明する様々な適応度地形を実現するモデル以外に , 同じく Kauffman により導入されたセルオートマトンのモデルに対しても使われることがある .

\*<sup>6</sup> このように , 各遺伝子の適応度寄与率が , 別の遺伝子の状態に依存するという遺伝子間の相互作用を , epistatic 相互作用という .

を図 1.3 に示す． $K$  は，各遺伝子に対する制約と考えることができ，NK model の適応度地形は， $K$  によりコントロールされる．すなわち，ある遺伝子  $i$  の適応度寄与率  $w_i$  を上げるような  $S_{K_i}$  の配位は，別の遺伝子  $j$  にとっては適応度寄与率  $w_j$  を下げる配位でありうる． $K$  が増えるほど，各遺伝子の制約条件間に競合が起こり，この競合は適応度地形に rugged な構造を与える． $K = 0$  は，各遺伝子の制約が対立しない，滑らかな適応度地形に対応し，一方で  $K = N - 1$  は，各遺伝子型に対してランダムに適応度を割り与えた，相関のない適応度地形に対応する．適応度地形の  $K$  依存性を議論した結果， $K = 2$  において，適応度地形は特殊な性質を持つことが明らかになった． $K = 2$  の適応度地形上には， $K = 0$  とは異なり，高さの異なる複数の適応度ピークが存在するものの，最も高いピークは  $K = 0$  より高かった．また，適応度ピークは互いに隣接しており，最も高い適応度ピークから遠くに位置する局所的なピークほど，適応度が低いことがわかった．そして，適応度ピークの幅の広さはピークの高さに比例し，最も高い適応度ピークは，最も広い幅を持っていた．したがって，error catastrophe は起こらないと予想される．このように， $K = 2$  で得られる適応度地形には，最も高い適応度ピークへ向かう大域的な構造が存在し，変異に対する頑健性が得られていることが明らかになった [Stein (1992)] ．

NK model は，適応度地形を遺伝子型空間の写像と捉えるだけでなく，適応度地形の構造を，遺伝子にかかる制約条件の数でコントロールした点で，より発展したモデルであると言える．また  $K$  個の遺伝子との相互作用は， $p$  体相互作用のスピングラス模型 [Gross and Mezard (1984)] を連想させ，特に  $K = N - 1$  の極限は， $p \rightarrow \infty$  で得られる random energy model と対応すると考えられる [Derrida (1981)] ．また  $K = 2$  を境に適応度地形の性質が変化するという結果は， $p = 2$  を境に 1 step replica symmetry breaking を示す  $p$  体スピングラス模型との関係を示唆するものであると考えられる．複雑なエネルギー地形をもたらすモデルとしてのスピングラス模型に着目し，進化における適応度地形の問題に導入して定量的に議論したという点で，NK model が与えた影響は非常に大きい．

### 1.2.2 表現型と遺伝子型の断熱的な系としての進化

Ancel と Fontana は，遺伝子型から適応度への写像に対して，新たな考え方を取り入れた [Ancel and Fontana (2000)] ．彼らは，進化を研究するモデルとして RNA を用いた．U, A, C, G の 4 種類の塩基からなる RNA 配列を遺伝子型とし，その配列から決まる二次構造を表現型とした．ここでの遺伝子型，表現型という単語は，従来の集団遺伝学的な用法よりも一般化した表現であり，ある形を構成する情報を持つものを遺伝子型と呼び，遺伝子型の情報をもとに構成された形を表現型と呼んでいる．RNA の 4 種類の塩基は，水素結合により U-A と C-G というペアを作る．この結合により，一次元の RNA 鎖は，図 1.4 のような二次構造をとる．ただし，ペアの形成は必ずしも正しく行われるとは限らず，異なるペアを形成したり，結合相手が存在しているにもかかわらず結合しなかったりする．二次構造の形は，行列  $S$  で

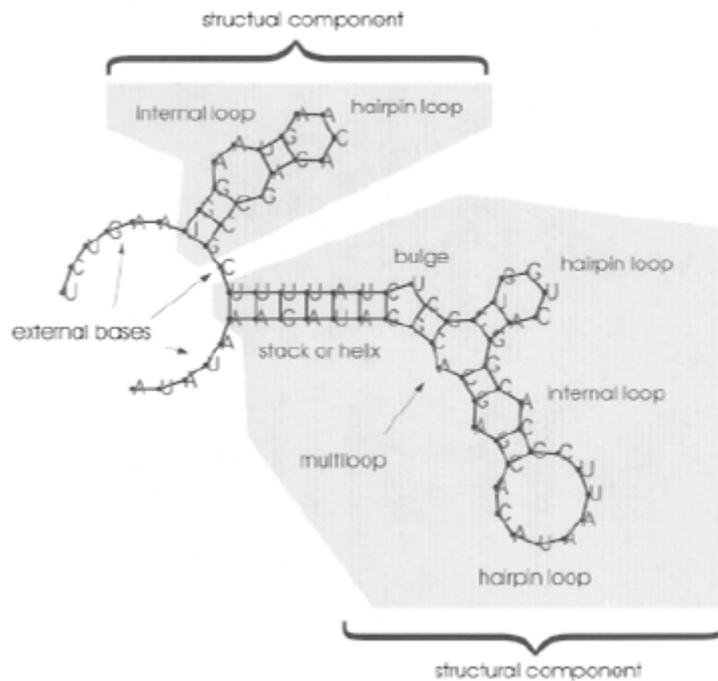


図 1.4 RNA の二次構造の例を示す．[Ancel and Fontana (2000)] から抜粋した．

指定される．ペアを成す二つの塩基は ( ) で表現し，ペアを形成しない塩基は  $\cdot$  で表す．したがって二次構造の形は， $S = \{(((((((((\cdot\cdot\cdot))))))\cdot(((\cdot\cdot\cdot))))\cdot))\}$  などのように表現される．図 1.4 に示すように，二次構造には局所的な構造が存在しており，これらの構造は互いに競合していることが知られている．Ancel と Fontana は，RNA に関するパッケージ<sup>\*7</sup>を用い，長さ  $N$  の RNA 配列  $J$  が与えられたときの，二次構造  $S$  のエネルギー  $E(S|J)$  を得た．

彼らは，遺伝子型  $J$  と表現型  $S$  間の関係について，simple map と plastic map という考え方を導入した．図 1.5 は，simple map と plastic map を説明するものである．simple map では，遺伝子型である RNA 配列を指定すると，その表現型である二次構造は，エネルギー最小に対応する  $S_0$  のみが生ずると考える．そして，遺伝子型  $J$  の適応度  $W(J)$  は，表現型  $S_0$  の“質”を表す selective value,  $w(S_0)$  から決まる．したがって，simple map における遺伝子型  $J$  の適応度  $W_{\text{simple}}(J)$  は次のように与えられる．

$$W_{\text{simple}}(J) = w(S_0) \quad (1.2)$$

一方，plastic map では，1 つの RNA 配列から複数の表現型が実現する．実現する表現型は，エネルギー最小を与える  $S_0$  と，エネルギー最小から  $5k_B T$  以内のエネルギーを持つ表現型とし，これらを plastic repertoire と呼ぶ．plastic map における遺伝子型の適応度  $W_{\text{plastic}}$  は，

<sup>\*7</sup> Vienna RNA folding package (<http://www.tbi.univie.ac.at/ivo/RNA/RNALib.html>)

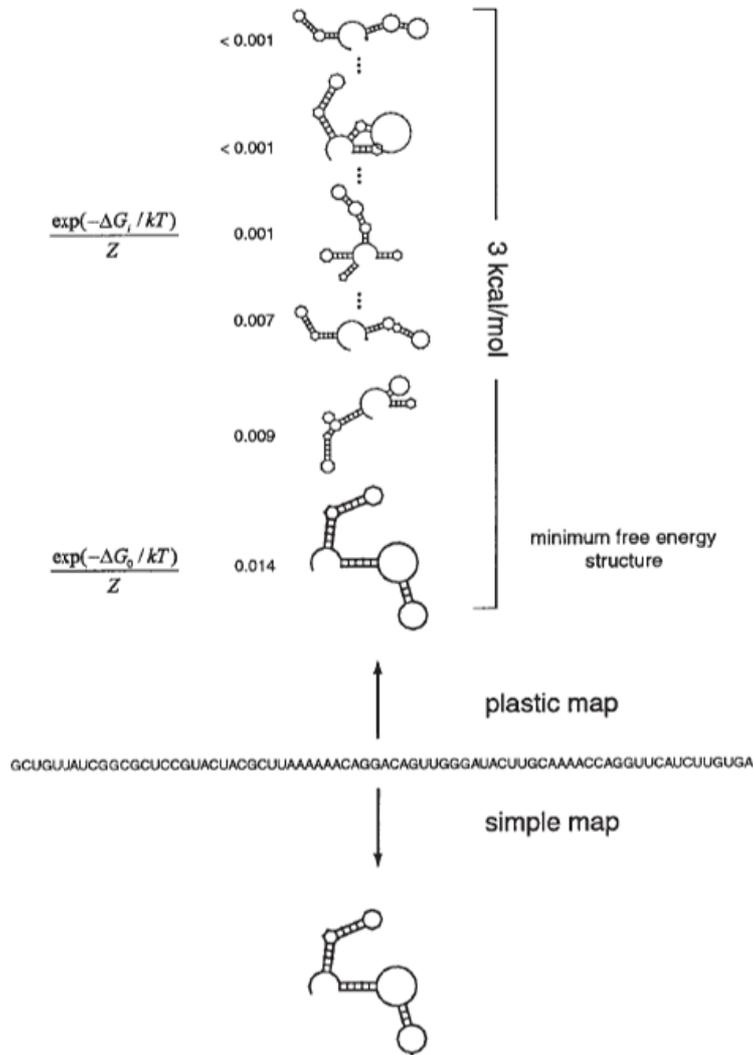


図 1.5 simple map と plastic map について，[Ancel and Fontana (2000)] より抜粋した図を示す．下側は，simple map を示しており，最も低いエネルギーに対応する二次構造のみが実現すると考えている．上側は，plastic map で，最低エネルギーのものだけでなく，最低エネルギーから  $5k_B T$  の範囲内の表現型も考慮して適応度を計算する．

plastic repertoire 内の selective value の平均として，次のように与えられる．

$$W_{\text{plastic}}(\mathbf{J}) = \sum_{\{S | (E(S|\mathbf{J}) - E_0) \leq 5k_B T\}} w(S) \frac{\exp(-E(S|\mathbf{J})/k_B T)}{Z} \quad (1.3)$$

ここで  $E_0$  は最小エネルギーとした ( $E_0 = E(S_0|\mathbf{J})$ )．plastic repertoire の実現確率はボルツマン分布に従うとされ，また  $Z$  は規格化定数である． $T \rightarrow 0$  極限では  $W_{\text{plastic}}(\mathbf{J}) = W_{\text{simple}}(\mathbf{J})$  である．

このように，simple map と plastic map に基づく，二種類の異なる適応度地形を構成し，その上で RNA 配列を進化させることを試みた．RNA が最もよく機能する二次構造を  $\tau$  として指定し， $\tau$  と  $S$  の Hamming 距離  $d(\tau, S)$  を用いて，selective value  $w(S)$  を次のように定

義した．

$$w(\mathbf{S}) = \frac{1}{0.01 + d(\mathbf{S}, \tau)/N} \quad (1.4)$$

$N$  は RNA 配列の長さである．遺伝子型の進化ダイナミクスには Gillespie アルゴリズムが用いられ，適応度を上昇させるように，すなわち表現型が  $\tau$  に近づくように，RNA 配列の集団を進化させた．その結果，simple map と plastic map の大きな違いは，最小エネルギーを与える配列と，その他の plastic repertoire の類似性に見られた．simple map では，最小エネルギーの配列  $S_0$  はターゲット二次構造との Hamming 距離  $d(S_0, \tau)$  が最も小さかったが，少しでもエネルギーが高い配列は Hamming 距離が長く，またその距離は大きく揺らいでいた．一方で plastic map では，最小エネルギー配位の  $d(S_0, \tau)$  と，その他の plastic repertoire の  $d(S, \tau)$  は，ほとんど変化がなかった．さらに，plastic map 上で進化した集団は，異なる遺伝子型を持ちながらも，似たような表現型を発現していた．このような性質は canalisation と呼ばれ，変異に対する頑健性と同義であると言える [Waddington (1957)]．すなわち，遺伝子型に対して変異が加わっても，変異後の遺伝子型は変異前とほぼ同じ plastic repertoire を持つため，変異の影響を受けにくい．Ancel と Fontana の研究は，plastic map により構成された適応度地形上の進化により，変異に対する頑健性を獲得する様子を示した研究であった．

彼らの研究では強調されなかったが，plastic map を導入することは，遺伝子型と表現型の断熱的な二変数系として進化を捉えることと同じである．つまり，遺伝子型から表現型が，何らかの力学的な過程を経て発現するが，遺伝子型の 1 単位時間内で表現型が緩和し，表現型の平衡分布に基づいて遺伝子型の適応度が決まる，という状況を表している．すなわち遺伝子型の進化と，表現型の発現という二つのダイナミクスの時間スケールが分離している．彼らの研究は，進化ダイナミクスに注目しており，ダイナミクスの中で起こるイベントについて，simple map と plastic map を比較するという立場であった．

### 1.3 Partial Anneal 系

plastic map における表現型と遺伝子型のように，時間スケールの離れた二つの変数から成る系は，スピングラス模型において定式化されている．時間スケールの速い変数を断熱的に消去する数学的な枠組みは，非平衡系においても多く議論されているが [Kaneko (1981)]，この考え方をスピングラスに導入したのが partial anneal 系であると言える．partial anneal 系は，速い変数である神経細胞の発火パターンを元に，遅い変数であるシナプス結合が変化するというニューラルネットワークの問題として提案され [Shinomoto (1987)]，その後，スピングラス模型を用いて，断熱的な二温度系としての枠組みが整えられた [Penney et al. (1993), Dotsenko et al. (1994)]．Penney, Dotsenko らの導入した partial anneal 系は次の通りである． $N$  個のイジングスピン  $S = \{S_i\}$  の二体の全結合模型 (Sherrington-Kirkpatrick 模型) を考える．相互作用変数は  $J = \{J_{ij}\}$  とする．クエンチ系であれば，相互作用変数はある分布関

数に従って独立に生成され， $J$  を固定したままスピン変数の熱力学的情報（自由エネルギー）を計算し，それを  $J$  に関して平均化するという操作を行う．一方 partial anneal 系では，相互作用変数も力学変数であると見なされる．ただし，相互作用の時間スケールは，スピンと比べて十分に遅いとする．つまり，相互作用の単位時間内でスピンは緩和すると見なし，スピンの平衡分布は，クエンチ系と同じように相互作用変数と温度で決まるボルツマン分布であるとする．

$$P(\mathbf{S}|\mathbf{J}) = \frac{\exp(-\beta_S H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J}))}{Z_S(\mathbf{J})} \quad (1.5)$$

ここで  $H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J})$  は，相互作用配位が  $J$  に固定されたときのスピンのハミルトニアンであり， $Z_S(\mathbf{J})$  は相互作用配位が  $J$  であるときの分配関数である．またスピンの温度として  $T_S = 1/\beta_S$  を導入した．そして相互作用変数は，次のランジュバン方程式に従って時間発展すると考える．

$$\frac{d}{dt} J_{ij} = -\frac{\partial}{\partial J_{ij}} \mathcal{H} + \xi_{ij}(t) \quad (1.6)$$

ここで  $\xi_{ij}(t)$  は Gaussian 白色ノイズ， $\langle \xi_{ij}(t) \xi_{kl}(t') \rangle = 2T_J \delta((ij), (kl)) \delta(t - t')$  とする． $T_J$  は相互作用の温度である．また  $\mathcal{H}$  を相互作用のハミルトニアンと呼び，Penney らは次のように与えた．

$$\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S) = F(\mathbf{J}; T_S) - T_J \log P_0(\mathbf{J}) \quad (1.7)$$

$\mathcal{H}$  はスピンの自由エネルギー  $F(\mathbf{J}; T_S) = -T_S \log Z_S(\mathbf{J})$  を含む．つまり， $\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S)$  はスピンの平衡状態で決まる関数であり，この設定はスピンと相互作用という二変数の時間スケールの分離を意味している．また  $P_0(\mathbf{J}) = \prod_{i < j} P_0(J_{ij})$  は，クエンチ系において相互作用が従う分布関数である．このダイナミクスの結果，相互作用は次の分布関数で与えられる平衡状態に到達する．

$$P(\mathbf{J}; T_S, T_J) = \frac{\exp(-\beta_J \mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S))}{Z_J} \quad (1.8)$$

ここで  $\beta_J = 1/T_J$  とした． $Z_J$  は規格化定数であり， $T_S/T_J = n$  とすると  $Z_J = [Z_S^n(\mathbf{J})]_0$  と表される．ここで  $[\dots]_0$  は  $P_0(\mathbf{J})$  による平均を意味する．したがって， $\mathcal{H}$  を (1.7) のように選んだ partial anneal 系は，二温度の比をレプリカ数と見なすと，有限レプリカ数の系に対応する．

Penney ら，Dotsenko らの研究は，二温度系という非平衡な系の 0 次近似を，平衡統計力学的なモデルに対応させた研究であるといえる．partial anneal 系は，ガラスのモデル [Allahverdyan et al. (2000)]，荷電粒子系のモデル [Mamasakhlishov et al. (2008)]，スピン - 格子ガスのモデル [Nakajima and Hukushima (2008)]，ニューラルネットワークのモデル [Uezu et al. (2009)]，タンパク質のモデル [Rabello et al. (2008)]，液晶のモデル

[Carmo et al. (2010)] などにも用いられている．また，Penney ら，Dotsenko らは，相互作用のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  を (1.7) のように決めたモデルを partial anneal 系と呼んでいたが，以下ではより一般的に，スピンの平衡状態で決まる関数である  $\mathcal{H}$  をもとに相互作用が時間発展する系を partial anneal 系と呼ぶ．また，相互作用が  $\mathcal{H}$  を参照して変化することを，partial annealing と呼ぶ．そこで，より一般的な形に  $\mathcal{H}$  を再定義しておく．

$$\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S) = H_J(\mathbf{J}; T_S) - T_J \log P_0(\mathbf{J}) \quad (1.9)$$

$H_J(\mathbf{J}; T_S) = F(\mathbf{J}; T_S)$  とすると，Penney ら，Dotsenko らの導入した partial anneal 系と一致する．

## 1.4 本論文の目的と構成

### 1.4.1 partial anneal 系で進化を議論する

partial anneal 系は，plastic map を用いた進化に関する，統計力学的なモデルであると言える．partial anneal 系を，表現型と遺伝子型の進化モデルと見なすと，変数やパラメータは次のように対応付けられる．まず速いスピン変数  $S$  は表現型，遅い相互作用変数  $J$  は遺伝子型である．そしてスピンの平衡分布 (1.5) は，遺伝子型  $J$  が与えられたとき，表現型  $S$  が発現する確率を意味する．すなわち，遺伝子型が与えるポテンシャル地形の上でのダイナミクスとして，表現型の発現ダイナミクスを捉えていることになる．その発現過程で受ける揺らぎが，温度  $T_S$  に対応する．そして  $H_J(\mathbf{J}; T_S)$  は，遺伝子型の時間発展を支配する適応度である．適応度は表現型の平衡状態の情報を含む．すなわち，遺伝子型の進化の時間スケールは，表現型の発現ダイナミクスの時間スケールより十分遅い．適応度地形は，各遺伝子型  $J$  の適応度  $H_J(\mathbf{J}; T_S)$  からなる地形であり，その高さは表現型の温度  $T_S$  にも依存する．また温度  $T_J$  は，遺伝子型の進化ダイナミクスにおける揺らぎであり，淘汰圧である．つまり，温度  $T_J$  が高いときは，適応度  $H_J$  が低い遺伝子型でも存在できるが， $T_J$  が低くなるほど  $H_J$  の高い遺伝子型のみが生き残る．

本博士論文では，速い変数である表現型と，遅い変数である遺伝子型からなる断熱的な二温度系において，ある特定の表現型を獲得することが，進化という現象の本質であると見なす．つまり，特定の表現型が発現するか否かが，遺伝子型の生存に大きく影響すると考える．そして partial anneal 系を用いて進化をモデル化し，進化の平衡統計力学的側面を議論する．具体的には，適応度地形の  $H_J$  および  $T_S$  依存性，そして進化後の平衡状態（遺伝子型の分布）に着目する．もちろん，進化という現象は適応度地形上での動的な現象であり，動的な側面，静的な側面を合わせて理解することが重要である．しかし本博士論文では，静的な性質をまずは明らかにし，それを基礎とした動的な性質の理解を目指すという立場をとる．また本研究では，いくつかの理想的な状況を考える．まず，相互作用の1単位時間内でスピンが完全に緩和し，平衡状態が実現するという点である．相互作用の与えるポテンシャル地形に，rugged な構造

があれば、準安定状態に長時間トラップされ、適応度はその準安定状態内の情報しか持たないという状況は容易に予想される。しかし、本研究では、どのような相互作用においても平衡状態が実現するものとする。同様の理想化は、相互作用の進化ダイナミクスに対しても課す。 $H_J$  の関数型、また  $T_S$  によっては、適応度地形も rugged な構造をとり得るが、ここでも相互作用は必ず平衡状態に到達すると考える。準安定状態の存在による遅い緩和現象が進化にもたらす影響を議論することは重要であるが、ここでは立ち入らない。本研究では、まずは理想的な状況を記述する partial anneal 系における遺伝子型の進化の理論を、第0次の理論として構成する。

partial anneal 系において、遺伝子型と表現型の進化をモデル化する際の自由度は、スピンのハミルトニアン  $H_S$  と適応度  $H_J$  の選び方である。本博士論文で扱うモデルでは、スピンのハミルトニアン  $H_S$  は、2体相互作用とする。その理由としては、動的な問題が起こりにくいと予想されること、また2体の epistatic 相互作用だけで記述できる系が示されており [Matsuura et al. (2009)]、十分現実的であると考えられること、という二点が挙げられる。本研究は、遺伝子型が駆動される真の  $H_J$  を知るということを目的としない。ある  $H_J$  を、本当の生物が採用しているのかという問いは、本研究で対象とする問題とは全く別の問題である。 $H_J$  と温度  $T_S$  を通して適応度地形を変化させ、それらの適応度地形上での遺伝子型の進化を議論し、適応度地形と進化の関係から帰納的に、断熱的二温度系としての進化を明らかにすることが本研究の目的である。生命もある種の人工物も階層的に構成されており、そして進化という現象は、全ての階層で見られる物理的な現象である。適応度地形上の進化という描像は、全ての階層で有効な普遍的描像であり、遺伝子型の平衡統計力学、すなわち適応度地形の平衡統計力学的研究を行うことは、進化の普遍性を理解する一つの方向性であると考えられる。

### 1.4.2 明らかにすべきこと

本研究において、まず明らかにしなくてはならないことは、表現型の温度  $T_S$  が進化に及ぼす影響である。Ancel と Fontana の研究では、温度をパラメータとして動かすという試みは行われていない。本研究では、遺伝子型の進化において有意な表現型の揺らぎ  $T_S$  を特徴づけることを目指す。表現型の揺らぎと遺伝子型の進化の関係は実験的にも計測されるようになり、揺らぎのもたらす影響が議論されている [Landry et al. (2007), Sato et al. (2003), Kaern et al. (2005)]。また理論的な研究としては、Kaneko や Ciliberti らの、遺伝子調節ネットワークに関する研究が挙げられる [Kaneko (2007), Ciliberti et al. (2007)]。Kaneko の研究では、本研究と同様に、表現型と遺伝子型という二自由度の系として進化を表したモデルが導入されている。Kaneko のモデルでは、表現型発現に対して、遺伝子型から決まる微分方程式を与える。この発現過程は、ノイズが加わった確率的な過程である。そして、ある時間ステップ間において発現する表現型のパターンから適応度を求める。遺伝子型については、 $N$  個の遺伝子型集団を導入し、適応度が高い  $N_S$  個の遺伝子型を選択することで進化を行って

る．その結果，ある程度以上の揺らぎが加わった環境下での進化では，適応度の低い変異種を持つ遺伝子型が除去され，頑健性が獲得されることが明らかになり，表現型発現における揺らぎの効果が示唆された [Kaneko (2007)] ．

本博士論文では，Kaneko の研究と根本的なアイデアの一部は共有しつつも，平衡統計力学のモデルを導入するという点で，異なる立場から温度  $T_S$  の効果について議論する．Kaneko のモデルでは，表現型発現ダイナミクスについて，ある時間ステップまでを考慮に入れており，ダイナミクスが緩和しているのかどうか，また結果がそのステップ数に依存するのかについて詳しく議論されていない．また，遺伝子型の進化ダイナミクスに関しても，別のアルゴリズムを進化ダイナミクスとして導入した際に，同じ結果が得られるのかという点も明らかではない．本研究では，恣意的なパラメータを排除した平衡統計力学のモデルを導入することで， $T_S$  の効果により起こる現象を取り出すことを目指す．

本研究は，進化を partial anneal 系と見なしてモデル化するため，スピングラス理論に立脚した，より普遍的で簡単な表現を用いて進化を議論することができると考える．Eigen, Kauffman, Kaneko らがいわゆる力学系，複雑系の文脈で語った概念について，スピングラス理論との関係から説明を与えることを目指す．非常に抽象的な概念を，スピングラス理論における相転移やレプリカ対称性の破れと結びつけて理解することで，これまで様々なモデルごとに得られていた知見が整理されると考える．また Ancel と Fontana や，Kaneko の研究で示されたように，partial anneal 系の進化モデルにおいても，頑健性が獲得されるのかという点は明らかにすべき点である．進化を通して頑健性を獲得するという結果は，いくつかの研究で示されてきたが，その仕組みについては，これまで十分な説明が得られているとは言いがたい．本研究においても，進化を通して頑健性が獲得されるのであれば，その温度領域を明らかにした上で，頑健性が獲得される仕組みを適応度地形の解析から説明しなくてはならない．

また，これまでの partial anneal 系の研究においては，相互作用配位の性質に関する解析はほとんど行われていない．partial anneal 系については，レプリカ法において現れる，有限レプリカ数の系に対して説明を与えるモデルという位置づけが主であったため，相互作用を構成するモデルとしては注目されてこなかった．本研究では，partial anneal 系の相互作用配位に対して，遺伝子型という明確な意味を持たせているため，進化によって得られた相互作用配位を特徴づけ，各温度領域でどのような相互作用が得られるのかを明らかにすることが必要である．相互作用配位を適切なパラメータで特徴づけた上で，スピンと相互作用という二つの変数に関する転移の関係性についても，明らかにしなければならない．さらに， $H_J$  が自由エネルギー以外の partial anneal については，これまで全く調べられていない．本研究においては， $H_J$  は遺伝子型の適応度に対応するため，進化の  $H_J$  依存性を明らかにしなくてはならない．そのためには， $H_J$  が自由エネルギーではない partial anneal 系を扱う手法を提案し，それを用いることで進化について議論する必要がある．

### 1.4.3 構成

本博士論文の構成は次の通りである．2章では，Sakata-Hukushima-Kaneko model (SHK model) を導入する．このモデルは，一部のスピンの配位から決まる適応度を用いた partial anneal 系である． $H_J$  を通して一部の相互作用のみにパターンを埋め込むことを考える．このとき，パターンに寄与しないスピン配位，およびパターン部分以外の相互作用配位がどのように変化するか注目する．進化した相互作用の特徴づけや，適応度地形の構造について議論する．3章では，coupled mean-field model を導入する．SHK model では， $H_J$  を通して一部の相互作用にパターンを埋め込むことを考えるが，このモデルでは，あらかじめ相互作用にパターンを埋め込んでおく．その上で， $H_J$  を自由エネルギーとした場合の partial anneal 系が，coupled mean-field model である．この場合の解析方法は，すでに Penney ら，Dotsenko らにより提案されている．ここでの目的は，その解析方法を用いて，相図の  $T_S$ ,  $T_J$  依存性や，相互作用の性質とスピングラス転移の関係について議論することである．そして相互作用の進化を，スピングラス理論から説明することを試みる．4章では，SHK model の性質を持つ，解析可能な partial anneal 系のモデルを導入する．その目的は，3章でまとめた， $H_J$  が自由エネルギーの場合の相互作用の進化と， $H_J$  が別の関数の場合の進化を比較すること，また SHK model の結果をスピングラス理論により説明することである．5章では，3つの partial anneal 系のモデルにおける結果を比較し，まとめと今後の展望について述べる．

## 第 2 章

# Sakata-Hukushima-Kaneko model

本章では，Sakata-Hukushima-Kaneko model と呼ぶ，partial anneal 系のモデルを導入する [Sakata et al. (1) (2009), Sakata et al. (2) (2009)] . このモデルでは，局所的なスピン配位に関する適応度を設定し，それを用いて相互作用を進化させる．表現型と遺伝子型について二重のモンテカルロ計算を行い，進化後の相互作用の状態について分類する．これらの相互作用をフラストレーションを用いて特徴付け，その頑健性を調べる．その結果，ある中間スピン温度  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  において，フラストレーションが少なく，頑健な相互作用が得られることを示す．この結果を，適応度地形の温度依存性から説明する．

### 2.1 導入

生物の持つ様々な機能や性質は，遺伝子型が持つ情報をもとに，ある種のダイナミクスを経て発現した表現型によりもたらされる．この発現過程は揺らぎを受けた確率的なダイナミクスである．したがって，ある遺伝子型から常に同じ表現型が発現するとは限らない．近年では実験的にも，同じ遺伝子を持つ個体の集合を用いて，それら個体の表現型分布が調べられるようになった [Landry et al. (2007), Sato et al. (2003), Li et al. (2004)] . partial anneal 系における進化のモデルでは，遺伝子型  $J$  を与えると，ボルツマン分布に従い表現型  $S$  が発現する．この温度  $T_S$  は，表現型が発現ダイナミクスにおいて受ける揺らぎの大きさであると考えられることができる．

このように環境からの揺らぎを受ける，確率的な発現過程を通して表現型が実現するのであれば，発現過程は揺らぎに対して頑健でなくてはならないだろう．つまり，発現過程で受けた揺らぎにより，質の悪い表現型が発現することは避けるべき問題である [Alon et al. (1999)] . このような発現過程の揺らぎに対する頑健性は，タンパク質の折り畳み問題においても議論されてきた．タンパク質は，一次構造であるアミノ酸配列がアミノ酸残基間の相互作用によ

り折り畳まれることによって機能する．この折り畳みダイナミクスには，大域的な安定状態に到達するという特徴がある．これを，アミノ酸残基間の相互作用に矛盾がないという意味で consistency principle [Go (1983)] と呼び，またこのようなダイナミクスを支配する地形をファンネル地形と呼ぶ [Bryngelson et al. (1987), Onuchic and Wolynes (2004)]．これはランダムに構成した高分子にはない性質であり，進化を通して獲得されたと考えられる．折り畳みダイナミクスは，アミノ酸残基間の相互作用により支配されることから，アミノ酸配列を遺伝子型とし，折り畳まれた形を表現型とする，タンパク質の断熱的二温度系の進化モデルも提案されている [Saito et al. (1997)]．タンパク質において，ファンネル地形を与えるアミノ酸配列が進化を通して獲得されたという事実は，その他の断熱的二温度系と見なせる系においても，同様の性質が存在している可能性を示唆している．

生物が安定に機能を維持するためには，表現型発現過程に要求される揺らぎに対する頑健性に加えて，遺伝子型の変異に対する頑健性も要求されるだろう．二つの頑健性の関係性，また進化を通して獲得される仕組みの理解を目指して，理論モデルを用いた研究が行われている [Ciliberti et al. (2007), Wagner (2005), Kaneko (2007)]．そこでまず本章では，partial anneal 系における進化モデルを導入し，表現型発現の揺らぎに対する頑健性，遺伝子型の変異に対する頑健性が，進化を通してどのように獲得されるのかを明らかにする．その仕組みを，温度  $T_S$  依存性や適応度地形の構造から理解することを目指す．

本章の構成は次の通りである．2.2 節では本章で扱う Sakata-Hukushima-Kaneko model を導入する．2.3 節では，モデルの振る舞いを数値的に観察した結果について示す．ここではまず，エネルギーや適応度の温度依存性について明らかにする．そして，進化した相互作用をフラストレーションを用いて特徴付けることを考える．ここで導入するフラストレーション秩序変数を用いて，相互作用を 3 種類に分類し，それぞれが得られる温度領域を相として定義する．そして，これらの相互作用の性質について，頑健性に着目して議論する．また 2.3.5 節では，モデルのサイズ依存性について議論する．2.4 節では，適応度地形の温度依存性から，頑健性の獲得など，数値的に得られた結果を説明する．最後に 2.5 節では，まとめと今後の展望を示す．

## 2.2 モデルの定義

Sakata-Hukushima-Kaneko model (SHK model) は，次のように定義されるモデルである [Sakata et al. (1) (2009), Sakata et al. (2) (2009)]． $N$  個のスピンからなる，全結合モデルを考える．スピンを  $S_i$  ( $i = 1, \dots, N$ )，スピン間相互作用を  $J_{ij}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ) と表記する．二つの変数は，どちらも  $\pm 1$  の二値をとる．また，相互作用行列は対称行列 ( $J_{ij} = J_{ji}$ ) とする．スピンのハミルトニアンは次のように定義される．

$$H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J}) = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \quad (2.1)$$

ここで，スピン配位と相互作用配位を  $S = \{S_i\}$ ， $J = \{J_{ij}\}$  と表記した． $N^{-1/2}$  は，ハミルトニアン の示量性を保障するための係数である．このとき，スピンの平衡分布関数は，次のように与えられる．

$$P(S|J; T_S) = \frac{1}{Z_S(\mathbf{J}; T_S)} \exp(-\beta_S H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J})) \quad (2.2)$$

$T_S = 1/\beta_S$  はスピンの温度であり，また  $Z_S(\mathbf{J}; T_S) = \text{Tr} \exp(-\beta_S H(\mathbf{S} | \mathbf{J}))$  は規格化定数である．

相互作用のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は，次のように定義される．

$$\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S) = -\Psi(\mathbf{J}; T_S) - T_J \log P_0(\mathbf{J}) \quad (2.3)$$

したがって，(1.9) において  $H_J = -\Psi$  とした．このとき，相互作用の平衡分布関数は，モデルの定義から次のように与えられる．

$$P(\mathbf{J}; T_S, T_J) = \frac{\exp(-\beta_J \mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S))}{Z_J(T_S, T_J)} = \frac{P_0(\mathbf{J}) \exp(\beta_J \Psi(\mathbf{J}; T_S))}{Z_J(T_S, T_J)}, \quad (2.4)$$

$$Z_J(T_S, T_J) = [\exp(\beta_J \Psi(\mathbf{J}; T_S))]_0$$

ここで  $\beta_J = 1/T_J$  とした． $Z_J(T_S, T_J)$  は規格化定数であり， $[\dots]_0$  は分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  による相互作用平均を意味する．適応度  $\Psi(\mathbf{J}; T_S)$  は次のように定義される．

$$\Psi(\mathbf{J}; T_S) = \left\langle \prod_{i < j \in t} \delta(S_i, S_j) \right\rangle \equiv \langle \psi \rangle \quad (2.5)$$

$\langle \dots \rangle$  は，スピンの平衡分布関数 (2.1) による平均を意味し， $\delta$  はクロネッカーデルタである．また，ベクトル  $t$  は， $N$  個のスピンのうち  $t$  個のスピンを指定するものである． $t$  で指定されるスピンをターゲットスピンと呼ぶ．適応度  $\Psi(\mathbf{J}; T_S)$  とは，相互作用配位  $\mathbf{J}$  と温度  $T_S$  で与えられるスピンの平衡状態において，ターゲットスピンが揃う確率を意味する．このターゲットスピンが揃う配位を，ターゲット配位と呼ぶ．ここではターゲットスピンが全て揃う配位だけを考えるが，ゲージ変換の考え方から，ターゲットに対してどのような配位を課しても，本章と同様の議論が可能であることは明らかである [Nishimori (2001)]．また，全結合モデルであるため，モデルの振る舞いはターゲットスピンの選び方に依存しない．相互作用の分布関数 (2.4) から， $T_J$  が有限であれば，適応度の高い相互作用ほど実現確率が高くなり，特に  $T_J = 0$  では最も適応度の高い相互作用のみが実現することがわかる．一方， $T_J \rightarrow \infty$  では， $P(\mathbf{J})$  は分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  に一致する．この極限はクエンチ系のスピングラス模型と一致し，相互作用はスピンの影響を受けずに， $P_0(\mathbf{J})$  に従って独立に分布している．この意味で，分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  をベア (bare) 分布関数と呼び，ここでは次のように定義する．

$$P_0(\mathbf{J}) = \prod_{i < j} P_0(J_{ij}) = \prod_{i < j} \frac{1}{2} \left( \delta(J_{ij}, 1) + \delta(J_{ij}, -1) \right) \quad (2.6)$$

進化の文脈で説明すると, SHK model は, 生存において有意な機能を担う表現型 (ターゲット配位) を発現しやすいように, 遺伝子が増える様子をモデル化している. また, 表現型に顕わに寄与しない非ターゲットスピンを設けており, 冗長性をもつモデル設定となっている. 次節以降では, ターゲットスピンの配位で決まる適応度に従う partial annealing により, 非ターゲットスピン部分の相互作用がどのように変化するかを明らかにしていく.

## 2.3 結果

### 2.3.1 適応度とエネルギー

上記のモデルについて, モンテカルロ・シミュレーションを行った. 数値計算手法は次の通りである. まず相互作用配位  $J$  を固定したまま, 温度  $T_S$  でスピンの平衡状態を得る. 平衡状態を得ることのみを目的とするため, ここでは交換モンテカルロ法を用いたサンプリングを行う [Hukushima and Nemoto (1996)]. そして, この平衡状態で相互作用の適応度を求め, その値にしたがって相互作用を更新する. より詳細な説明は付録 A.1 に示す.

図 2.1 は, 適応度 (a) と 1 スピンあたりのエネルギー (b) の温度依存性である. 系のサイズは  $N = 15$  とし, ターゲットのサイズは  $t = 3$  とした. サイズとターゲット数依存性は, 2.3.5 節で議論する. ここで観察している適応度とエネルギーは, それぞれ次のように表される.

$$\Psi(T_S, T_J) = [\Psi(\mathbf{J}; T_S)]_J, \quad e(T_S, T_J) = \frac{E}{N} = \frac{1}{N} [\langle H_S(\mathbf{S} | \mathbf{J}) \rangle]_J, \quad (2.7)$$

ここで  $[\dots]_J$  は, 平衡分布関数  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J)$  による相互作用の平均を意味する.  $J$  の分布関数が  $T_J$  依存性を持つため, 適応度, エネルギーとも  $J$  平均を取ることで  $T_J$  依存性を持つようになる. 図 2.1(a) に示されるように, 全てのスピン温度  $T_S$  において, 相互作用温度  $T_J$  を増加させると適応度は減少する. しかし, その減少率はスピン温度  $T_S$  に大きく依存する.  $T_S$  が十分低いとき, 適応度は広い  $T_J$  領域で高い値を持ち, また  $T_J$  増加に対して緩やかに下がる.  $T_S$  が上昇するにしたがい, 適応度が上昇する  $T_J$  領域は狭くなる.

また, 図 2.1(b) に示されるように, エネルギーの振る舞いは  $T_S$  に大きく依存する. 高温の  $T_J$  では, エネルギーは  $T_S$  の単調増加関数であるが, 低温の  $T_J$  では非単調な振る舞いを示し,  $T_S \simeq 2.0$  で最小の値を持つ. この温度領域では適応度も高いため, つまり, ターゲット配位が実現し, そのエネルギーを下げる相互作用配位が,  $T_S \simeq 2.0$  で実現していることになる. このような負の比熱 (エネルギーの  $T_S$  微分) は, クエンチ系のように相互作用が固定されているスピン系においては見られない. しかしこのモデルでは, 相互作用は温度  $T_S$  と  $T_J$  に依存して決まるため, 負の比熱が観測される. 具体的に熱容量を求めると, 次のように表される.

$$\frac{dE(T_S, n)}{dT_S} = \beta_S^2 \left\{ [\sigma_E^2]_J + \beta_J \text{Cov}_J \left( \langle H_S \rangle, \text{Cov}_S(\psi, H_S) \right) \right\}, \quad (2.8)$$

ここで  $\text{Cov}_J(A, B) = [AB]_J - [A]_J[B]_J$  は物理量  $A$  と  $B$  の, 相互作用分布に関する共分散を意味し,  $\text{Cov}_S(A, B) = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$  は, 物理量  $A$  と  $B$  のスピンの平衡分布に関する共

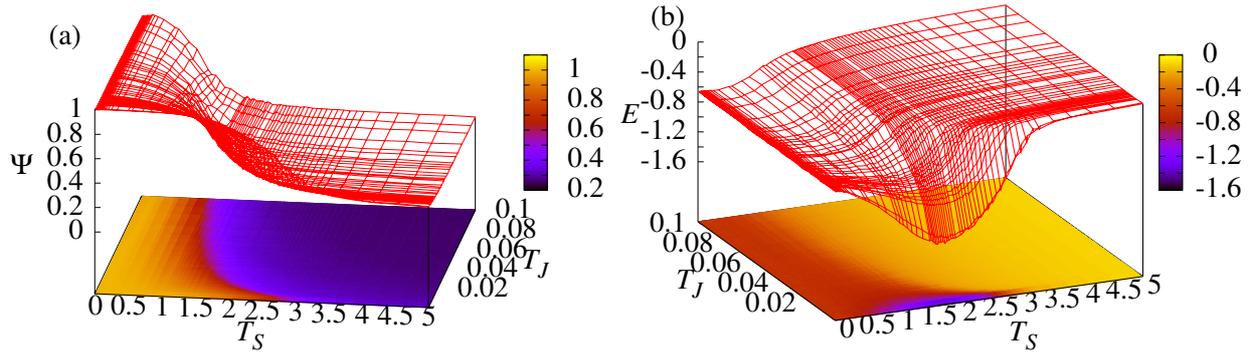


図 2.1 適応度の温度依存性 (a) とエネルギーの温度依存性 (b) を示す．系のサイズは  $N = 15$  とし，ターゲットのサイズは  $t = 3$  とした．各相互作用  $J$  に対して，1500 ステップでスピンを緩和させ，その後の 1500 ステップでスピン平均をとり， $\Psi(J; T_S)$  と  $\langle H \rangle(S|J)$  を求めた．また相互作用平均に関しては，十分長いステップで緩和させ，その後 1000 ステップで平均をとった．

分散を意味する．また  $\sigma_E^2 = \langle H_S^2 \rangle - \langle H_S \rangle^2$  は，相互作用をある配位に固定したときのエネルギーの分散である．(2.8) の第一項  $[\sigma_E^2]_J$  は，クエンチランダム系一般の比熱である．各相互作用について，エネルギーの分散  $\sigma_E^2$  は正の値をもつため，分散の相互作用平均  $[\sigma_E^2]_J$  も正の値を持つ．しかし，第二項は負の値をとることができるため，この項の寄与により負の比熱が観察されうる．

### 2.3.2 フラストレーション

以上の数値実験から，中間温度領域では，高い適応度を持ち，低いエネルギーを与える相互作用が実現することがわかった．そこで，この中間温度領域ではどのような相互作用が実現しているのか，その相互作用の特徴づけについて考える．エネルギーの減少は，フラストレーションの減少と言い換えることができる．ハミルトニアン (2.1) より，1 スピンあたりのエネルギー最小値は， $-_N C_2 / \sqrt{N}$  である．ここで  $_N C_2$  はスピンのペアの数である．しかし，ある 3 つのスピンの  $i, j, k$  間の相互作用が  $J_{ij} J_{jk} J_{ki} < 0$  という関係を満たすとき，どのようなスピン配位を与えても，エネルギーの最小値を実現することは出来ない．このような相互作用は，フラストレーションを持つという [Nishimori (2001), Mézard et al. (1987), Toulouse (1977)]．一方，すべての相互作用の組について関係式  $J_{ij} J_{jk} J_{ki} > 0$  が満たされ，フラストレーションが存在しないとき， $S_i S_j = J_{ij}$  を満たすスピン配位は，エネルギーの最小値  $-_N C_2 / \sqrt{N}$  を与える．そこで，フラストレーションを用いた相互作用の特徴づけを考える．特にこの模型においては，模型の設定上，ターゲットスピンがある種の“外場”を受けており，ほかのスピンと区別されるべきである．そこで，ターゲットスピンを中心にフラストレーションを定義する．

まず，相互作用  $J$  を次の 3 種類に分類する．一つ目は，ターゲットスピン間の相互作用  $J_{tt}$  ( $\{J_{ij} \mid i, j \in t\}$ )，二つ目は，ターゲットスピンと非ターゲットスピン間の相互作用

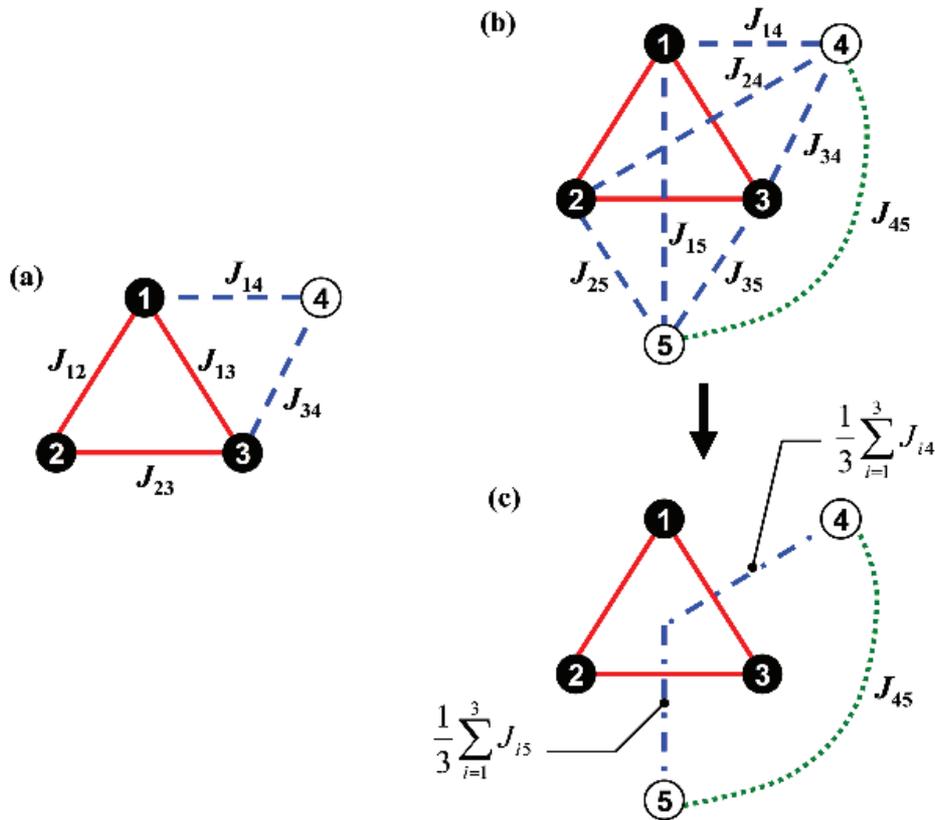


図 2.2 ターゲット数  $t = 3$  の場合の，フラストレーション秩序変数の定義を図示する．ここでは  $S_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) をターゲットスピンとし，残りを非ターゲットスピンとする．実線はターゲットスピン間の相互作用 ( $\in J_{tt}$ )，破線はターゲットと非ターゲットスピン間の相互作用 ( $\in J_{to}$ )，点線は非ターゲットスピン間の相互作用 ( $\in J_{oo}$ ) を意味する． $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  は三つのターゲットスピンに関する条件つきで定義される．(a) は，三本の  $J_{tt}$  相互作用からなるループと，一本の  $J_{tt}$  と二本の  $J_{to}$  からなるループを示している． $\Phi_1$  は  $J_{tt}$  相互作用について，強磁性相互作用の割合として定義される．また  $J_{to}$  については，ターゲットスピン 1 と 3 が揃うとき， $J_{14}J_{34} = 1$  であればエネルギーが下がる． $\Phi_2$  は，このような条件を満たす  $J_{to}$  の割合として定義される．(b) は，すべての種類の相互作用からなる，三種類の相互作用ループを同時に示している．このうち， $S_4$  に関する三本の  $J_{to}$  相互作用， $J_{14}, J_{24}, J_{34}$  を一本の相互作用  $(J_{14} + J_{24} + J_{34})/3$  として一点鎖線で表した図が (c) である． $S_4, S_5$  に関する  $J_{to}$  相互作用と， $J_{45}$  の作る相互作用ループとして， $\Phi_3$  を定義している．

$J_{to}$  ( $\{J_{ij} \mid i \in t, j \notin t\}$ )，三つ目は非ターゲットスピン間の相互作用  $J_{oo}$  ( $\{J_{ij} \mid i, j \notin t\}$ ) である．これらすべての種類の相互作用に対して条件つきフラストレーションを定義する．条件  $J_{ij}J_{jk}J_{ki} > 0$  は，エネルギーを下げるスピン配位を一意に定めない．しかしこのモデルでは，ターゲット配位の実現を目的としているため，ターゲット配位に関する情報を含むように，フラストレーションを定義する．つまり，ここで定義するフラストレーションは，ターゲット配位のエネルギーを下げる相互作用配位が実現しているのかを確かめる指標である．これを条件つきフラストレーションと呼んでいる．

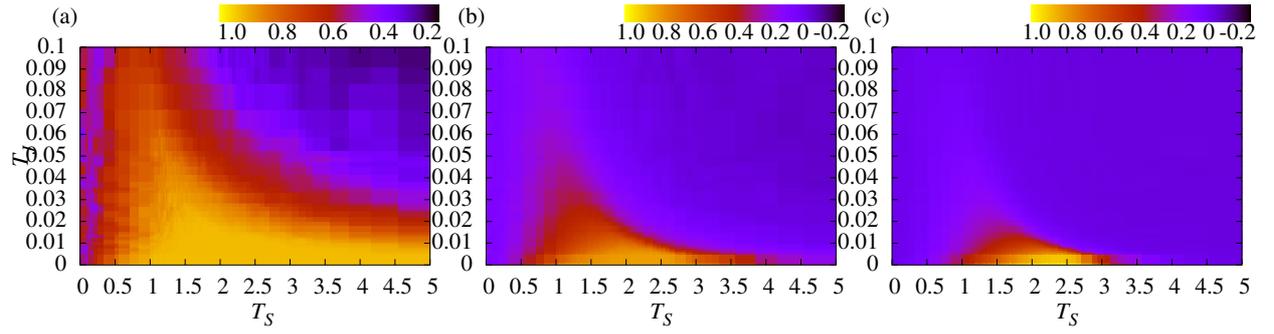


図 2.3  $N = 15$ ,  $t = 3$  における, 条件つきフラストレーションの  $T_S - T_J$  依存性を示す. (a) は  $\Phi_1$ , (b) は  $\Phi_2$ , (c) は  $\Phi_3$  である. このデータは, 温度  $T_S, T_J$  で進化した 150 サンプルの相互作用  $J$  について平均化したものである.

この条件つきフラストレーションの定義について, 図 2.2 を用いて説明する. (a) は, ターゲット間の相互作用  $J_{tt}$  により作られる最小の相互作用ループと,  $J_{tt}$  と  $J_{to}$  により作られる最小の相互作用ループを表している. また (b), (c) は全ての種類の相互作用から作られる相互作用ループを表している. まず, フラストレーション秩序変数  $\Phi_1$  を, ターゲットスピン間の相互作用における, 強磁性相互作用の割合として, 次のように定義する.

$$\Phi_1(T_S, T_J) = \frac{2}{t(t-1)} \left[ \sum_{(i<j) \in t} J_{ij} \right]_J \quad (2.9)$$

ターゲット間の相互作用がすべて強磁性相互作用であれば  $\Phi_1 = 1$  であり, このときターゲット配位のエネルギーは低くなる (図 2.2(a)).

次に, ターゲットスピンと非ターゲットスピンをつなぐ相互作用  $J_{to}$  のフラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  を, 次のように定義する.

$$\Phi_2(T_S, T_J) = \frac{2}{t(t-1)(N-t)} \left[ \sum_{(i<j) \in t} \sum_{k \notin t} J_{ik} J_{jk} \right]_J, \quad (2.10)$$

係数  $t(t-1)(N-t)/2$  は, 二つのターゲットスピンと一つの非ターゲットスピンの選び方である.  $\Phi_2 = 1$  であれば, ターゲット配位が実現したとき, すなわち  $S_i = S_j$  のとき,  $J_{to}$  部分のエネルギーが下がる.

最後に, 非ターゲットスピン間相互作用  $J_{oo}$  のフラストレーション秩序変数として,  $\Phi_3$  を次のように定義する.

$$\Phi_3(T_S, T_J) = \frac{1}{N-t C_2} \left[ \sum_{(k<l) \notin t} \left( \frac{1}{t} \sum_{i \in t} J_{ik} \right) J_{kl} \left( \frac{1}{t} \sum_{j \in t} J_{jl} \right) \right]_J, \quad (2.11)$$

係数  ${}_{N-t}C_2$  は, 非ターゲットスピンのペアの数である.  $\Phi_3$  の定義を図 2.2(b), (c) を用いて説明する. 相互作用は全結合なので, 1 つの非ターゲットスピンは, すべてのターゲットスピンと相互作用しており,  $t$  本の  $J_{to}$  タイプ相互作用を持つ. 図 2.2(b) では, 非ターゲッ

トスピン  $S_4$  は、三本の  $J_{to}$  相互作用  $J_{14}, J_{24}, J_{34}$  を持つ。  $S_5$  についても同様である。これらすべての相互作用を足し合わせて、重み  $\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 J_{i4}$  をもつ一本の相互作用でターゲット部分とつながると見なす。このターゲットをつなぐ相互作用と  $J_{45}$  が作るループの積は、 $\frac{1}{9} (\sum_{i=1}^3 J_{i4}) J_{45} (\sum_{j=1}^3 J_{5j})$  である (図 2.2(c))。これを、スピン 4, 5 だけでなく、すべての非ターゲットスピンについて和をとったものが、(2.11) で定義される  $\Phi_3$  である。  $\Phi_3$  が 1 に等しいとき、非ターゲット間相互作用  $J_{oo}$  はフラストレーションを持たない。したがって、 $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 1$  を満たす相互作用は、フラストレーションが大域的に存在しない、Mattis model [Mattis (1976)] である。この相互作用はゲージ変換により強磁性体に変形できる\*<sup>1</sup>。

図 2.3 に、温度  $T_S, T_J$  で進化した相互作用  $J$  のフラストレーション秩序変数  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  の温度依存性を示す。(a) は  $\Phi_1(T_S, T_J)$ , (b) は  $\Phi_2(T_S, T_J)$ , (c) は  $\Phi_3(T_S, T_J)$  の結果である。十分低い  $T_J$  では、フラストレーション秩序変数は、中間温度  $T_S$  で最大値 1 に上昇しており、この温度領域でフラストレーションが大きく減少していることがわかる。一方で低温の  $T_S$  と高温の  $T_S$  では、フラストレーションが存在している。この中間温度領域を、フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  が最大値 1 をとる温度領域として、 $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  と定義する (図 2.7(b))。この上限温度と下限温度はどちらも温度  $T_J$  に依存するので、これらを  $T_S^{c1}(T_J)$ ,  $T_S^{c2}(T_J)$  と表記する。まとめると、十分低温の  $T_J$  ( $\lesssim 0.05$ ) において得られる相互作用は、三種類に分類される。まず一つ目は、 $T_S < T_S^{c1}(T_J)$  で実現する、適応度が高く、フラストレーションが多い相互作用である。この相互作用は、フラストレーション秩序変数を用いると  $\Phi_1 < 1, \Phi_2 < 1, \Phi_3 < 1$  として定義される。このような相互作用をスピングラス状態と呼ぶ。二つ目は、 $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  で実現する、適応度が高く、フラストレーションが少ない相互作用である。フラストレーション秩序変数を用いると、 $\Phi_1 = \Phi_2 = 1, \Phi_3 \leq 1$  として定義される。 $\Phi_2 = 1$  で  $\Phi_3 < 1$  のとき、フラストレーションはターゲットと非ターゲットスピン間相互作用  $J_{to}$  からは除かれているが、非ターゲットスピン間相互作用  $J_{oo}$  からは、完全には除かれていない。これは Mattis model とは異なる状態であり、局所的にフラストレーションが消えていることから、このような相互作用配位を local Mattis 状態と呼ぶ。また、Mattis model に対応する相互作用配位を Mattis 状態と呼ぶ。三つ目は、 $T_S > T_S^{c2}$  で得られる、適応度が低く、フラストレーションを持つ相互作用である。これは  $\Phi_1 \leq 1, \Phi_2 < 1, \Phi_3 < 1$  として定義される\*<sup>2</sup>。このような相互作用を常磁性状態と呼ぶ。

以下では、スピングラス状態、local Mattis 状態、常磁性状態という三種類の相互作用が支配的である温度領域を、それぞれスピングラス相、local Mattis 相、常磁性相と定義する。local Mattis 相の温度領域を定義する  $T_S^{c1}, T_S^{c2}$  の  $T_J$  依存性を、図 2.4 に示す。local Mattis 相の  $T_S$  温度領域は、 $T_J$  が増加するにしたがって狭くなる。そして十分高温の  $T_J$  では、常磁性相からスピングラス相への直接の“転移”が起こる。

\*<sup>1</sup> 正確には、今のモデルの場合は、ターゲット部分についてはゲージ変換が許されない。

\*<sup>2</sup> フラストレーション秩序変数  $\Phi_i$  は、 $T_S \rightarrow \infty$  極限において 0 に収束する。 $\Phi_1$  の値は、図 2.3 に示されている温度領域では  $T_S > T_S^{c2}$  においても 1 であるが、 $T_S \sim 5.0$  で減少し始める。

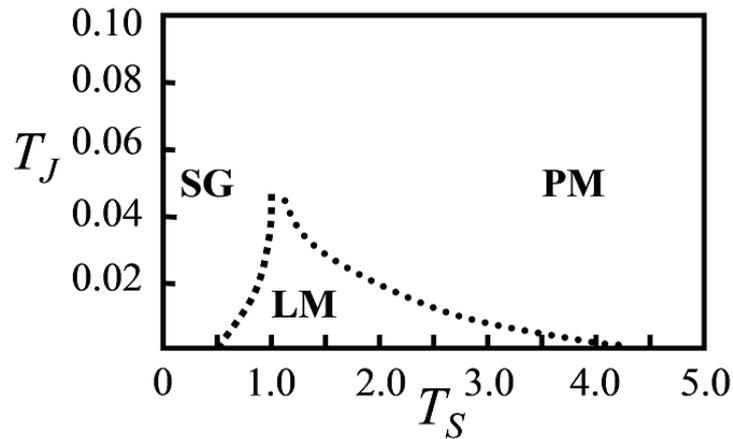


図 2.4 進化の結果として実現した相互作用  $J$  に関する相図を示す．適応度と  $\Phi_2$  の値により相互作用を三種類に分類した．PM, SG, LM はそれぞれ，常磁性状態，スピングラス状態，local Mattis 状態が得られる温度領域を意味する．これらの相互作用の特徴は，後の節における議論と合わせて表 2.1 にまとめる．

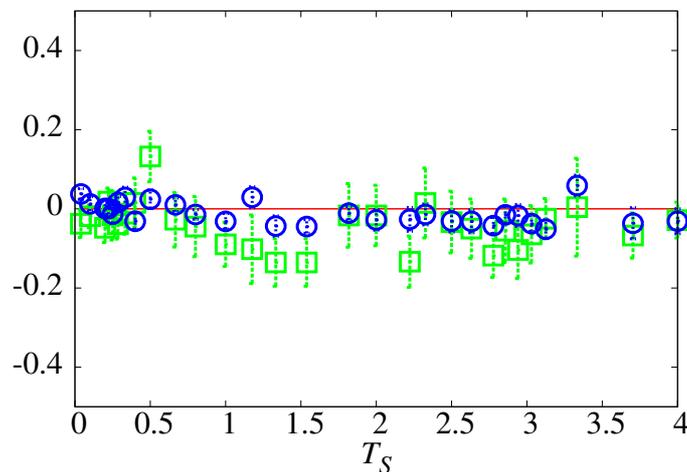


図 2.5  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  における，相互作用の和の平均  $\overline{J_{to}}$  ( $\square$ ) と  $\overline{J_{oo}}$  ( $\circ$ ) の  $T_S$  依存性を示す．

最後に，相互作用  $J_{to}$ ,  $J_{oo}$  の持つ性質について述べる． $\Phi_1 > 0$  のとき，ターゲット配位は低いエネルギーを与えるため，実現確率が高くなる．このような状況は，ターゲット間相互作用に，ターゲット配位が埋め込まれていると表現される．これとは対照的に， $J_{to}$  と  $J_{oo}$  に属す  $J_{ij}$  の和は，どのような温度  $T_S$  においても，0 の周りで揺らぐ．図 2.5 に，十分低い  $T_J$  ( $0.5 \times 10^{-3}$ ) における  $\overline{J_{to}} = [\sum_{i \in t, j \in o} J_{ij}]_J$  と  $\overline{J_{oo}} = [\sum_{i \in o, j \in o} J_{ij}]_J$  を示す．この結果は，ターゲットスピン以外には，どのようなパターンも埋め込まれていないことを意味する．

### 2.3.3 緩和ダイナミクス

ここまで，交換モンテカルル法を用いて，平衡状態の性質について議論してきた．しかし，一般のモンテカルル法を用いた場合，特に低温で平衡状態を得るためには，非常に長いモンテ

カルロステップが要求される．本節では，温度  $T_S, T_J$  で得られた相互作用の緩和ダイナミクスについて考えてみる．観察する物理量は，ターゲット磁化  $m_t = |\frac{1}{t} \sum_{i \in t} S_i|$  とする． $|\dots|$  は絶対値である．ある相互作用の適応度が 1 であれば，その相互作用が与える平衡状態において，ターゲット磁化は 1 に一致する．このターゲット磁化の緩和を，交換モンテカルロ法を用いずに，通常モンテカルロ法を用いて観察する．このような数値実験を行うことで，適応した相互作用の典型的なエネルギー地形を得ることを目的とする．具体的には，温度  $T_S, T_J$  での相互作用の平衡分布  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J)$  から相互作用を生成し，各相互作用についてターゲット磁化  $m_t$  の緩和ダイナミクスを観察し，そして相互作用について平均化する．緩和においては，共通の “working temperature”  $T'_S (= 10^{-5})$  を導入する．地形の構造を顕わに観察するため，working temperature は極端に低い温度に設定した．図 2.6(a) は，平均ターゲット磁化  $\langle\langle m_t \rangle\rangle$  の， $T_S = 10^{-3} (\leq T_S^{c1})$  と  $T_S = 2.0 (T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2})$  における緩和ダイナミクスを示す．どちらの場合も，相互作用温度は十分低温  $T_J (= 10^{-3})$  に固定した．すなわち，平衡分布から生成される典型的な相互作用は，高い適応度を持つ．ここで  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  は，スピンの初期条件と，確率分布  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J)$  にしたがって生成された相互作用に関する平均を意味する．図 2.6 に示されるように，低温  $T_S$  における  $\langle\langle m_t \rangle\rangle$  の緩和は，中間温度  $T_S$  における緩和より遅い．さらに，低温  $T_S$  では，ターゲット磁化は 1 より小さいある値  $m_t^*$  に収束してしまう．特に  $t = 3$  の場合， $m_t$  がとりうる値は 1 と  $1/3$  の二値であり，前者はターゲット配位が実現した場合，後者はターゲット配位が実現しなかった場合に対応する．したがって，ターゲット磁化  $\langle\langle m_t \rangle\rangle$  の 1 からのずれは，ターゲット配位にたどり着けない初期条件の割合を表す．実際，緩和ダイナミクスは初期条件に強く依存する．ある初期条件からの緩和においては，スピンは局所的な安定状態にとらわれてしまい，ターゲット配位に到達できない<sup>\*3</sup>． $T_S > T_S^{c1}$  では，このようなターゲット磁化の初期条件依存性は見られず， $\langle\langle m_t \rangle\rangle = 1$  へと素早く緩和する．

図 2.6(b) に，ターゲット磁化の収束値  $m_t^*$  と緩和時間  $\tau$  の温度依存性を示す．緩和時間  $\tau$  は，関数  $\langle\langle m_t \rangle\rangle(s) = m_t^* + c \exp(-s/\tau)$  を用いて緩和ダイナミクスをフィッティングして求めた． $s$  はスピンのモンテカルロステップである．図 2.6(b) から，温度  $T_S$  が  $T_S^{c1}$  以下になると  $\tau$  は増加し始め，そして  $m_t^*$  は 1 から減少し始めることがわかる<sup>\*4</sup>．これらの結果から， $T_S < T_S^{c1}$  においては，スピングラスのように rugged なエネルギー地形をもつ相互作用が支配的であり，一方で  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  では，ターゲット配位が大域的安定状態に対応した滑らかな地形が支配的であることがわかる．

定義から，local Mattis 状態は  $\Phi_1 = \Phi_2 = 1, \Phi_3 \neq 1$  であるため，相互作用  $J_{oo}$  にはフラストレーションが存在している．したがって，local Mattis 状態の与えるエネルギー地形には， $J_{oo}$  部分のフラストレーションに起因する凹凸が存在していると考えられる．しかし，こ

<sup>\*3</sup> 進化した温度  $T_S$  と同じ working temperature での緩和の後には，十分に長い時間の後で， $\langle\langle m_t \rangle\rangle$  は平衡状態での値である 1 に近づく．

<sup>\*4</sup> 絶対零度近傍における緩和時間の減少は，指数関数によるフィッティングが適切でないことを意味している．

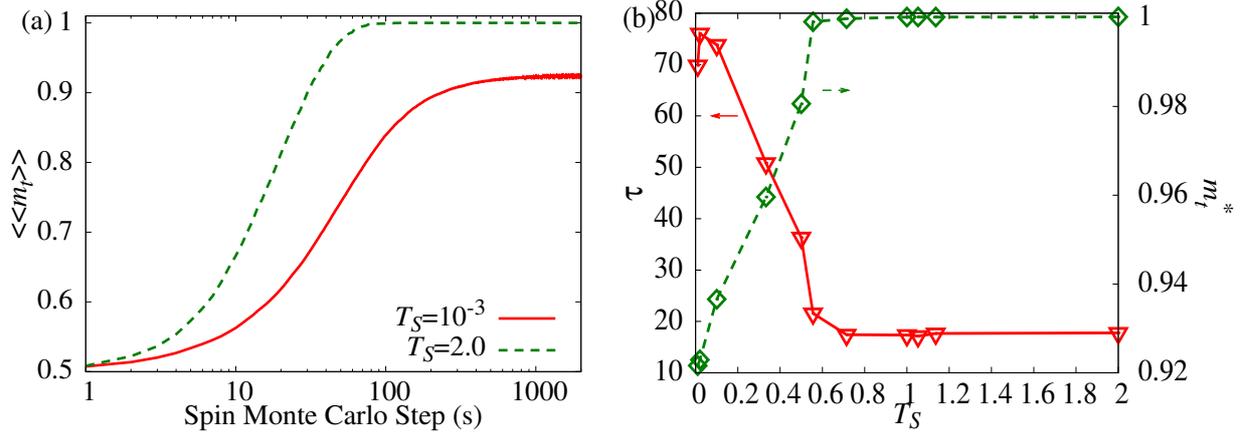


図 2.6 (a) 平均ターゲット磁化  $\langle\langle m_t \rangle\rangle$  の緩和ダイナミクスの  $T_S$  依存性を示す．実線で  $T_S = 10^{-3}$ ，破線で  $T_S = 2.0$  での結果を示している．温度  $T_S$ ， $T_J$  の平衡分布  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J = 10^{-3})$  に従って，相互作用を 1000 サンプル生成して相互作用平均をとり，さらに各相互作用について 30 の初期条件に関する平均をとった．  
(b) ターゲット磁化  $\langle\langle m_t \rangle\rangle$  の収束値  $m_t^*$  の温度  $T_S$  依存性を右軸に，緩和時間の温度依存性を左軸に示す．緩和時間は，指数関数を用いたフィッティングから見積もった．

の数値実験の結果から，エネルギー地形上には， $J_{oo}$  が与える凹凸より大きなスケールでターゲット配位へと至る，大域的な構造が存在していることが示された．このような性質は，タンパク質の折り畳みにおいては，ファンネル地形として知られている<sup>\*5</sup>．

### 2.3.4 変異に対する頑健性

この節では，進化した相互作用の，変異に対する頑健性について議論する．変異は，進化した相互作用の配位がランダムに変わることに対応する．進化した相互作用の変異相互作用を構成し，進化により獲得された性質が，変異によってどのように変化するかを議論する．まず，分布関数  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J)$  に従って生成させた相互作用  $\mathbf{J}$  について，ランダムに  $J_{ij}$  の要素を選び，ある突然変異率  $\mu$  で符号を反転させて相互作用  $\mathbf{J}'(\mathbf{J}, \mu)$  を構成する．表記  $(\mathbf{J}, \mu)$  は，相互作用配位  $\mathbf{J}$  に突然変異率  $\mu$  で変異を加えたという意味である．この相互作用  $\mathbf{J}'$  を変異した相互作用とし，そのアンサンブルを構成する．そして  $\mathbf{J}'(\mathbf{J}, \mu)$  の平均適応度を，極低温の working temperature  $T'_S$  を用いて求める<sup>\*6</sup>．これは次のように表される．

$$[\Psi(\mathbf{J}'(\mathbf{J}, \mu); T'_S)]_{J(T_S, T_J)} = \text{Tr} P(\mathbf{J}; T_S, T_J) \frac{\text{Tr} \psi e^{-\beta'_S H(\mathbf{S} | \mathbf{J}'(\mathbf{J}, \mu))}}{Z(\mathbf{J}'(\mathbf{J}, \mu); T'_S)}, \quad (2.12)$$

<sup>\*5</sup> 類似の結果は，タンパク質の進化モデルなどでも見られている [Saito et al. (1997)]．しかし，相互作用の配位に着目し，フラストレーションの減少とファンネルの関係を指摘したのは，本研究が初めてである．

<sup>\*6</sup> 極端に低温の working temperature を用いる理由は，変異由来の適応度変化を顕わに得るためである．

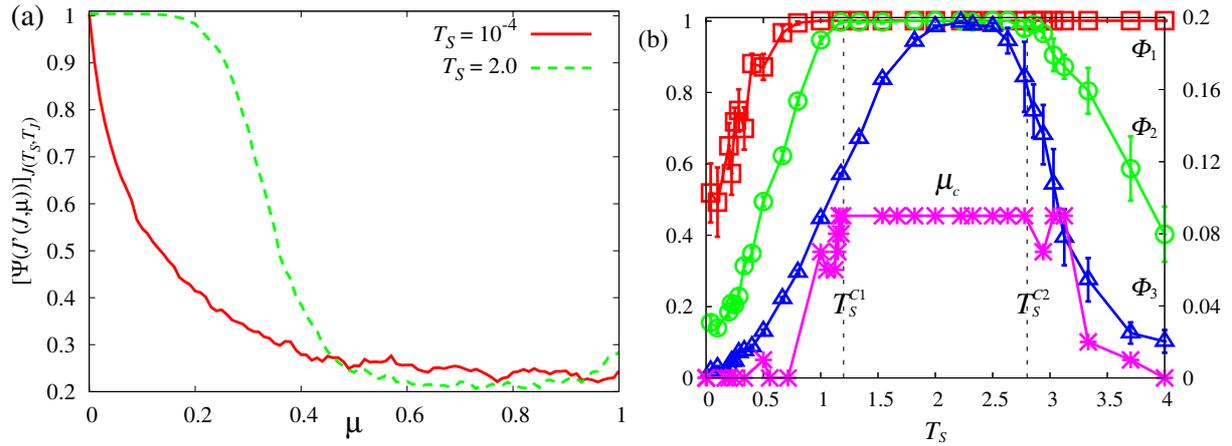


図 2.7 (a) 変異した相互作用の適応度の、突然変異率依存性を示す。  $T_S < T_S^{c1}$  の代表例として  $T_S = 10^{-4}$  (実線),  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  の代表例として  $T_S = 2.0$  (点線) の結果を示す。適応度が 1 から下がり始める突然変異率として  $\mu_c$  を定義する。

(b)  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  における,  $\mu_c$  (\*) の温度  $T_S$  依存性を右軸に示す。同時に, フラストレーション秩序変数  $\Phi_1$  ( $\square$ ),  $\Phi_2$  ( $\circ$ ),  $\Phi_3$  ( $\triangle$ ) の温度依存性を左軸に示す。このデータは, 温度  $T_S$  で得られた 150 の相互作用サンプルに対して平均化している。破線で示されている温度  $T_S^{c1}$  と  $T_S^{c2}$  は,  $\Phi_2$  が 1 からずれる温度として見積もられている。

ここで  $\beta'_S = 1/T'_S$  であり, また  $Z(J'; T'_S) = \text{Tr} e^{-\beta'_S H(S|J')}$  である。ブラケット  $[\dots]_{J(T_S, T_J)}$  は, これまで用いてきた表記  $[\dots]_J$  と同じ意味であるが, 相互作用が進化した温度  $T_S$ ,  $T_J$  の分布関数に従って相互作用平均をとる, つまり working temperature とは異なる, ということを強調している\*7。

以下では, 相互作用温度は  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  として固定し\*8,  $T_S < T_S^{c1}$  と  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  で得られる相互作用を代表して,  $T_S = 10^{-4}$  と  $T_S = 2.0$  で得られた相互作用の頑健性を調べる。変異相互作用の適応度の, 突然変異率依存性を図 2.7(a) に示す。working temperature は  $T'_S = 10^{-5}$  とした。  $T_S = 10^{-4}$  では, 突然変異率が有限になると, 適応度が急激に減少することがわかる。一方, 温度  $T_S = 2.0$  では, 突然変異率がある値に到達するまで, 適応度は減少しない。そこで, 温度  $T_S$  で適応した相互作用の, 適応状態が壊れる突然変異率を  $\mu_c(T_S)$  と定義し, その温度依存性を観察した。図 2.7(b) は,  $\mu_c(T_S)$  の  $T_S$  依存性を示したものである。同時にフラストレーション秩序変数  $\Phi_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) も示している。 $\mu_c$  の値は,  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  において一定の値をとる。 $\mu_c$  の値が有限であるとき, 変異に対して頑健であると定義すると, local Mattis 状態が得られる温度領域 ( $\Phi_2 = 1$  の温度領域) では, 変異に対する頑健性が獲得されていることがわかる。まとめると, 中間温度領域  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  で得られる相互作用は, 高い適応度を持ち, フラストレーションを局所的に解消しており, そして

\*7  $\mu = 0, T'_S = T_S$  であれば, (2.7) で定義されている適応度は, 通常の適応度と一致する。すなわち  $[\Psi(J'(\mu = 0); T'_S = T_S)]_{J(T_S, T_J)} = \Psi(T_S, T_J)$  である。

\*8  $T_J$  を低温に設定することで,  $\mu = 0$  での適応度値は 1 となる。

State	Adaptation	Frustration	Landscape	Robustness
SG	Adapted	Frustrated	Rugged	Not robust
LM	Adapted	Not frustrated	Funnel	Robust
PM	Not adapted	Frustrated	Rugged	Not robust

表 2.1  $T_J$  低温で得られる 3 種類の相互作用—スピングラス状態 (SG), local Mattis 状態 (LM), 常磁性状態 (PM)—の性質についてまとめる。これらは, フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  により定義されており, 得られる温度領域は図 2.4 に示すとおりである。各相互作用の適応度とフラストレーションについては, 前節で議論されている。エネルギー地形と頑健性については, working temperature  $T'_S$  を用いて, 本節で観察されたものである。 $T_S < T_S^{c1}$  で進化した相互作用はスピングラス状態と呼ばれ, 高い適応度を持つが, フラストレーションを多く含む。この相互作用の地形は rugged であり, ターゲット配位への緩和が困難である。 $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  で進化した相互作用は local Mattis 状態と呼ばれ, 高い適応度を持ち, 同時にフラストレーションが減少している。この相互作用は表現型に対する揺らぎに対しても変異に対しても頑健であり, そのエネルギー地形はファンネル型である。 $T_S > T_S^{c2}$  で進化した相互作用は常磁性状態と呼ばれ, 適応度は低く, フラストレーションを多く持つ。

変異に対して頑健であることが明らかになった。

ここまでの議論で明らかになった, このモデルで得られる三種類の相互作用とその性質を, 表 2.1 にまとめる。これらの相互作用が獲得される温度領域は, 図 2.4 の通りである。相互作用は, フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  で特徴付けられ, それぞれ異なるエネルギー地形や, 頑健性を持つ。

### 2.3.5 サイズとターゲット数依存性

中間温度における local Mattis 状態の実現と, それに伴う頑健性の獲得に関する議論の一般性を確認するため, まず本節ではサイズ  $N = 15, 20, 30$  という 3 つの系に対して, ターゲット数を  $t/N = 0.2$  を満たすよう設定し, 数値実験を行ってみる。図 2.8 に, 3 つのサイズの適応度 (a), エネルギー (b), フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  (c) の温度依存性の比較を示す。相互作用温度は  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  で固定した。図 2.8 に示されるように, これらの量の振る舞いは, すべてのサイズで定性的には一致している。特に  $\Phi_2 = 1$  のプラトーはすべてのサイズにおいて見られ, local Mattis 状態が実現していることがわかる。温度  $T_S^{c1}, T_S^{c2}$  は各サイズで異なるが, スピン温度  $T_S$  を  $\sqrt{N}$  でリスケールすると,  $T_S^{c2}$  以下ではすべてのサイズの結果が重なる (図 2.8 の挿入図)。つまり, 温度  $T_S^{c1}$  は, サイズに対して  $T_S^{c1}(N)/\sqrt{N}$  とスケールする。

リスケールの係数  $\sqrt{N}$  は, 中間スピン温度において, エネルギーのオーダーが  $O(N)$  から  $O(N^{3/2})$  へと変化することに由来する。スピンのハミルトニアン (2.1) は, 相互作用が

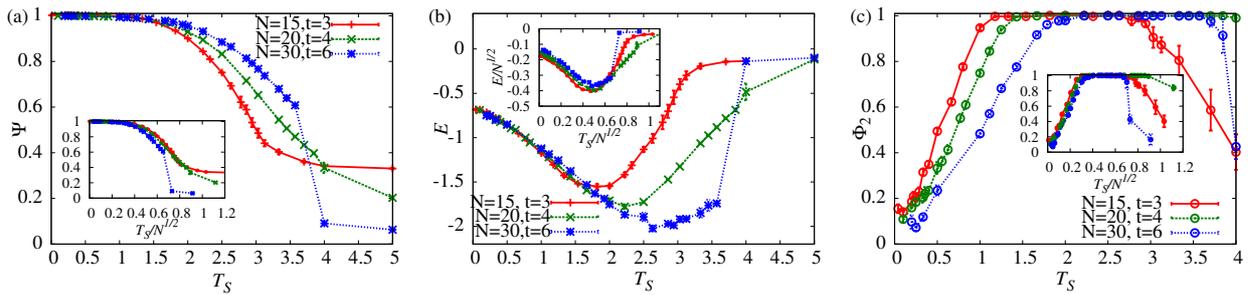


図 2.8  $N = 15$  ( $t = 3$ ),  $N = 20$  ( $t = 4$ ),  $N = 30$  ( $t = 6$ ) における (a) 適応度, (b) エネルギー, (c) フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  の  $T_S$  依存性を示す. 相互作用温度  $T_J$  は,  $0.5 \times 10^{-3}$  に固定した. 各図の挿入図は, 横軸を  $\sqrt{N}$  でリスケールしたものである. また (b) は, 縦軸も  $\sqrt{N}$  でリスケールされている.

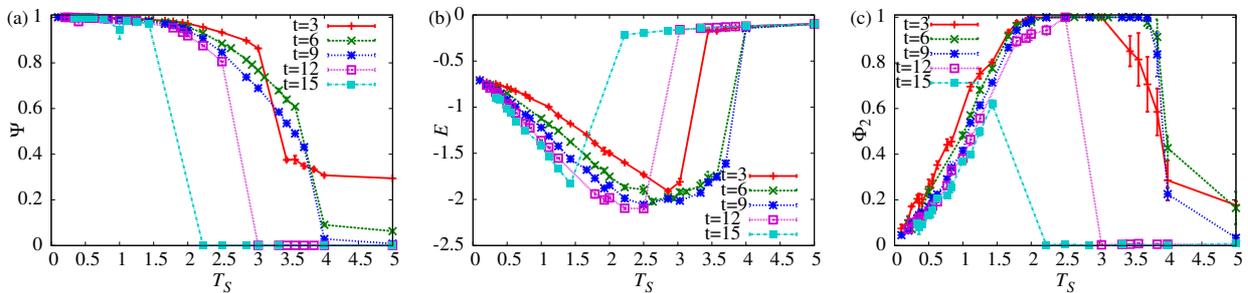


図 2.9  $N = 30$  としてターゲット数を変化させた場合の (a) 適応度, (b) エネルギー, (c)  $\Phi_2$  の温度  $T_S$  依存性を示す. ターゲット数は  $t = 3, 6, 9, 12, 15$  とした. 相互作用温度  $T_J$  は,  $0.5 \times 10^{-3}$  に固定されている. (a) について, 適応度が  $T_S \rightarrow \infty$  で収束する値は  $2^{-t+1}$  である.

ランダムに分布している場合の示量性を保障するため, 係数を  $1/\sqrt{N}$  として定義している. しかし中間温度において local Mattis 状態の実現確率が高くなると, エネルギーのオーダーは  $O(N^{3/2})$  となり, 結果として温度  $T_S^{c1}(N)$  も  $\sqrt{N}$  に比例すると考えられる\*9.

次に, 系のサイズを  $N = 30$  に固定したまま, 様々なターゲットスピンのサイズ  $t$  に対して数値実験を行った. 図 2.9 は, (a) 適応度, (b) エネルギー, (c) フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  の,  $N = 30, 3 \leq t \leq 15$  での結果である. 図 2.9(a) より, ある温度  $T_S$  で適応度の値が急速に減少し始めることがわかる. この温度はターゲット数が 9 に達するまで上昇し, それ以上のターゲット数では減少する. またエネルギーは図 2.9(b) に示されるように, 温度  $T_S$  に関して非単調な振る舞いを示す. すなわち local Mattis 状態の存在が示唆されている. 適応度の値において観察された, 適応度が急激に下がる  $T_S$  と同様に, エネルギーの最小値が得られる温度も, ターゲット数  $t$  に対して非単調な振る舞いを示す. さらに図 2.9(c) より,  $\Phi_2 = 1$  のプラトーの広さは,  $t = 7 \sim 8$  で最大化され, そして少なくとも  $t = 12$  でプラトーは消えことがわかる. そして適応度の低い相互作用 (常磁性状態) が得られる温度領域は,  $t$  が増えるほど

\*9 次の章で示すように, 相互作用が連続値をとる場合は, 全てのスピン温度でエネルギーの示量性が保たれる.

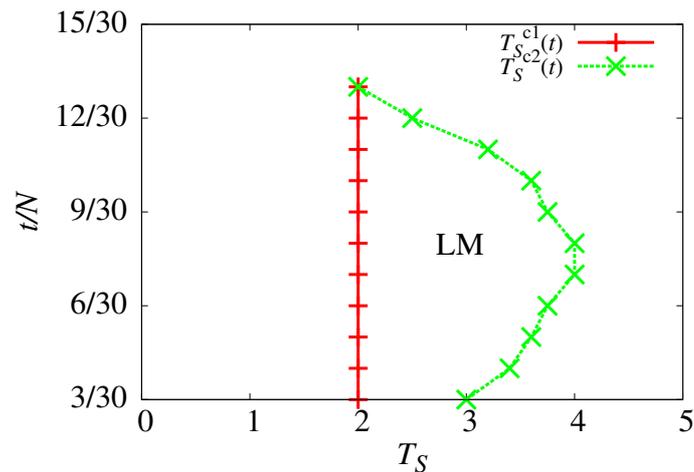


図 2.10  $N = 30$ ,  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  において local Mattis 状態が得られる  $t/N - T_S$  領域を示す．図 2.9(c) において  $\Phi_2$  が 1 から落ちる温度  $T_S$  を見積もった．実際に数値的に得た温度を  $\times$ ,  $+$  で示している．

低温側に広がり，local Mattis 状態が得られる温度領域は狭くなっていく．具体的には，LMS は  $t \lesssim 0.4N$  で存在することが示され，そして  $t > 0.4N$  では，スピングラス相から常磁性相への直接の“転移”が起こる．この結果は，あるターゲットサイズ以上で local Mattis 状態が得られないこと，そして広い温度領域で local Mattis 状態を得るには，最適な  $t$  が存在することを示唆している．数値計算の結果から得た，local Mattis 状態が実現する温度のターゲット数依存性を図 2.10 に示す<sup>\*10</sup>．この図においては，サイズ  $N$  を 30 とし，温度  $T_J$  を  $0.5 \times 10^{-3}$  に固定している．

## 2.4 適応度地形

変異に対する頑健性が中間温度  $T_S$  で得られるという，数値的に明らかにされた事実に対して，その仕組みの説明を試みる．変異に対する頑健性は，相互作用の配位空間上で，適応した相互作用の周辺に存在する相互作用の適応度から定義されている．したがって，頑健性を議論するためには，相互作用がつくる適応度地形の構造を把握しなくてはならない．そこで，統計力学的な解析を用いて，適応度地形の概形を得ることを試みる．まず， $T_S \rightarrow 0$  における適応度の表式を考えてみる．各相互作用が与える第  $n$  励起状態の配位数を  $W(E_n(J))$ ，そのうちターゲット部分のスピンの揃ったターゲット配位数を  $W_{\Psi}(E_n(J))$  とすると， $T_S \rightarrow 0$  での適

\*10 相互作用の平衡化に必要なとされる時間も，ターゲット数に依存する．ある固定された  $T_J$  において，系のサイズ  $N$  を固定させたままターゲット数  $t$  を増やすと，緩和時間は増加する．この増加は特にスピングラス状態が得られる温度領域において顕著である．

応度は次のように与えられる．

$$\Psi(\mathbf{J}, T_S) = \frac{\sum_n W_\Psi(E_n(\mathbf{J}))e^{-\beta_S E_n(\mathbf{J})}}{\sum_n W(E_n(\mathbf{J}))e^{-\beta_S E_n(\mathbf{J})}} \equiv \frac{Z_\Psi(\mathbf{J}, T_S)}{Z(\mathbf{J}, T_S)} \xrightarrow{T_S \rightarrow 0} \frac{W_\Psi(E_0(\mathbf{J}))}{W(E_0(\mathbf{J}))}. \quad (2.13)$$

したがって、 $T_S \rightarrow 0$  での最大適応度 1 を実現するのは、 $W_\Psi(E_0(\mathbf{J})) = W(E_0(\mathbf{J}))$  という条件を満たす相互作用であることがわかる．これらの相互作用は、適応度地形上に、適応度 1 の“平面”を形成している．local Mattis 状態の相互作用は条件 (2.13) を満たし、 $T_S \rightarrow 0$  で最大適応度 1 を獲得することがわかる．しかし、local Mattis 状態以外の、フラストレーションを含む相互作用も条件 (2.13) を満たし、その数は local Mattis 状態に比べて非常に多い．したがって、 $T_S \rightarrow 0$  では local Mattis 状態の寄与はほとんど無く、フラストレーションを多く持つ相互作用の性質が支配的になることがわかる．このような状態数の関係が、 $T_S$  低温におけるフラストレーションの増加という結果をもたらすと考えられる．

適応した相互作用の周辺に位置する相互作用の適応度を見るため、条件 (2.13) を満たす、数種類の相互作用配位の適応度を書き下し、その適応度が変異に対してどのように変化するかを観察した．解析の詳細は付録 A.2 に示す．その結果、(2.13) を満たす相互作用により形成される適応度 1 の平面は、適応度 0 の平面と接していることが明らかになった．模式図を図 2.11 に示す．したがって、適応度 1 の平面上で、その端に存在する相互作用は、変異が加わることで、適応度が 0 まで下がってしまう<sup>\*11</sup>．このような相互作用配位は、変異に対して頑健ではない．しかし、頑健ではない相互作用も、最大適応度を獲得しているため、進化を通して獲得されてしまう．言い換えると、頑健性と適応度の高さに相関がないため、適応度にかかる淘汰を通して頑健性を獲得することができない．このような適応度地形の存在が、 $T_S$  低温における頑健性の獲得を不可能にしていたことがわかる．

一方、中間温度の  $T_S$  では、適応度地形上に縮退は存在しない<sup>\*12</sup>．この温度では、local Mattis 状態の適応度が最も高く、変異に対して緩やかに適応度を下げる (図 2.11)．具体的な解析は付録 A.2 に示す．その下げ幅は local Mattis 状態が最も緩やかであり、つまり local Mattis 状態は変異に対して最も頑健である．適応度地形上に、local Mattis 状態を頂点とする緩やかな山が存在することにより、適応度と変異に対する頑健性の間に正の相関が生まれる．その結果、高い適応度への進化を通して、変異に対する頑健性を獲得することができる． $T_S$  中間温度で、フラストレーションが少なく、変異に対して頑健な相互作用が得られるという結果の背景には、このような適応度地形の存在があったことがわかる．

適応度地形の模式図 (図 2.11) は、一部の典型的な相互作用配位に関する議論から得た．議論の正当性を確かめるために、適応した相互作用と、その周辺に存在する相互作用について、数値的に適応度分布を観察した．図 2.12 に、適応した相互作用  $J$  から、突然変異率  $\mu = 0.1$  で変異した相互作用の適応度分布を示す．サイズは  $N = 15$ 、 $t = 3$  とし、温度  $T_S = 10^{-3}$  と

\*11 完全に適応度 1 に縮退するのは  $T_S \rightarrow 0$  極限であるが、ここでの議論は十分に低い温度では成立し、変異に対する頑健性は、低温のスピングラス相では獲得されないということが予想される．

\*12 ゲージ対称性による縮退は除く．

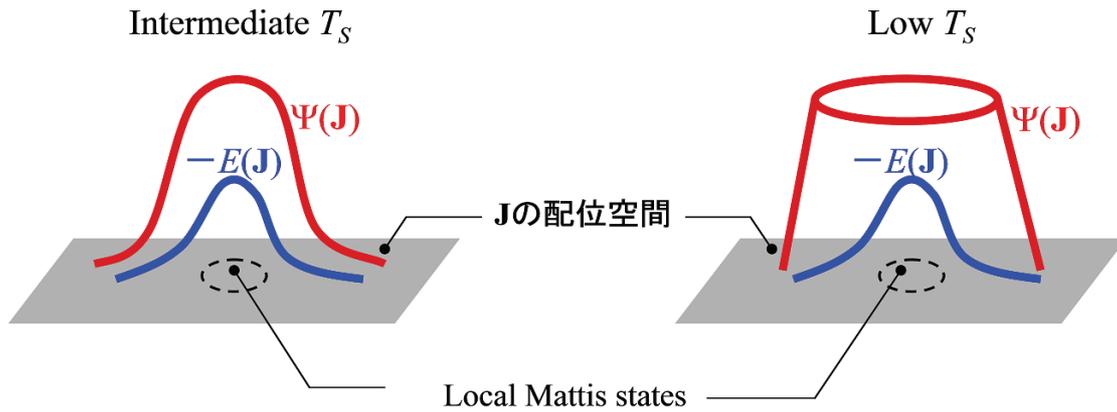


図 2.11 適応度地形の模式図を示す。

低温  $T_S$  では、条件  $W_\Psi(E_0(\mathbf{J})) = W(E_0(\mathbf{J}))$  を満たす相互作用が適応度 1 の平面を形成する。local Mattis 状態もこの平面上に存在しているが、フラストレーションが高い相互作用のほうが状態数が多いため、寄与率が小さい。そして、この平面は、適応していない相互作用と“崖”を通して接している (図 A.1(b))。適応度 1 平面の端に位置している相互作用は、少しの変異で適応度 0 になり、変異に対する頑健性が低い。local Mattis 状態は、この平面の中央に位置している。

温度  $T_S$  が中間温度  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  のとき、低温  $T_S$  で見られた縮退は解け、local Mattis 状態が最も高い適応度を持つ。local Mattis 状態の適応度は、変異に対して連続的に減少する。この温度では、適応度と頑健性に相関があり、最も高い適応度を持つ local Mattis 状態は最も変異に対して頑健である。そして、適応度に対して淘汰がかかり、頑健な相互作用が優先的に選択される。

$T_S = 2.0$  での適応度の分布を示している。図 2.12 に示されているように、変異した相互作用の適応度分布は、 $T_S = 10^{-3}$  では  $\Psi = 1$  と 0 にピークがある。したがって、いくつかの変異は中立である (適応度の値を変化させない) が、いくつかの変異は、適応度を最小値へと減少させる。一方、 $T_S = 2.0$  における変異した相互作用の適応度は、約 0.8 の周りで分布している。この結果から、図 2.11 は実際の適応度地形を矛盾無く予想していると言える。

## 2.5 まとめ

本章では、 $t$  個のターゲットスピンから決まる適応度  $\Psi(\mathbf{J}; T_S)$  に従って、相互作用を partial annealing により進化させる SHK model を導入した。相互作用  $J$  の適応度は、 $J$  と温度  $T_S$  で決まるスピンの平衡状態において、ターゲットが揃う確率として与えた。相互作用の平衡状態は、温度  $T_J$  と  $H_J = -\Psi(\mathbf{J}; T_S)$  で決まるボルツマン分布により与えた。このような適応度を用いた partial annealing により、特にターゲット部分以外の相互作用がどのように変化するかに着目した。

数値計算の結果、相互作用温度  $T_J$  が低温のとき、ある中間スピン温度で、低いエネルギーと高い適応度を与える相互作用が進化することが示された。そこで、相互作用  $J_{tt}$ ,  $J_{to}$ ,  $J_{oo}$  に対して、ターゲットスピンに関する条件つきフラストレーション秩序変数  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ ,  $\Phi_3$  を定

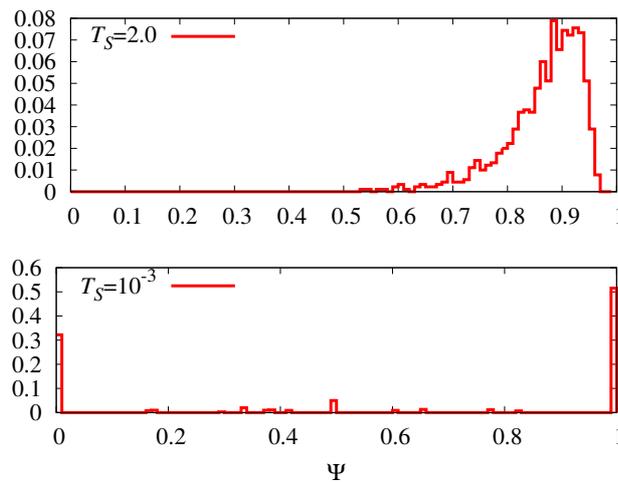


図 2.12 突然変異率  $\mu = 0.1$  で変異した相互作用  $J$  の適応度分布． $T_S = 10^{-3}$  と  $T_S = 2.0$  で進化した相互作用について比較している．この分布は，100 サンプルの変異した相互作用から得た．

義し，温度依存性を観察した．その結果，中間温度領域で進化する相互作用は， $\Phi_1 = \Phi_2 = 1$  であることがわかった．すなわち，中間温度で得られる相互作用は， $J_{tt}$ ， $J_{to}$  からフラストレーションが減った相互作用であった．このように， $\Phi_1 = \Phi_2 = 1$  として特徴付けられる相互作用配位を local Mattis 状態と呼び，また local Mattis 状態が得られる中間温度領域を  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  と定義した．加えて， $T_S < T_S^{c1}$  で進化した相互作用をスピングラス状態， $T_S > T_S^{c2}$  で進化した相互作用を常磁性状態と呼んだ．

進化した相互作用が与える，スピンに関するエネルギー地形の  $T_S$  依存性を観察した結果，local Mattis 状態は特徴的なエネルギー地形を持つことがわかった．中間温度  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  で進化した local Mattis 状態が与えるエネルギー地形上では，スピンの平衡状態は素早く実現し，準安定状態にトラップされることなく適応状態が得られる．local Mattis 状態が与えるエネルギー地形は，ファンネル地形に近いと考えられる．つまり，大域的安定状態であるターゲット配位周辺にはフラストレーションが存在しないが，その他の部分にフラストレーションが存在している地形である．一方で， $T_S < T_S^{c1}$  で進化したスピングラス状態は，エネルギー地形上に多数の準安定状態を持ち，スピンの平衡状態への緩和に長い時間を要する．また，ある確率で適応状態を実現することが出来ない．これはクエンチ系のスピングラスにおける rugged な地形と同じ性質である．したがって  $T_S < T_S^{c1}$  では，partial annealing を通して相互作用の持つエネルギー地形が大きく変化しないと言える．

また，進化した相互作用に変異を加え，適応度変化から相互作用の頑健性を議論した．フラストレーションの少ない local Mattis 状態は，ある突然変異率  $\mu_c$  以下の変異であれば，適応した状態が維持された．一方で，スピングラス状態と常磁性状態は，微小の変異により適応度が急激に下がった．以上の結果から，local Mattis 状態は変異に対して頑健であることが明ら

かになった．変異に対する頑健性が中間温度領域において獲得される仕組みは，統計力学的な議論から得た適応度地形により説明される．中間温度  $T_S$  では，適応度と変異に対する頑健性の間に，正の相関を与える適応度地形が得られる．すなわち，適応度が高い相互作用ほど，変異に対して頑健である．そして，最大適応度を持つ相互作用は，local Mattis 状態であった．したがって，このような適応度地形上で，適応度を上げる方向に進化することで，高い適応度を獲得すると同時に，変異に対する頑健性を獲得することができる．このような相関は，十分低温の  $T_S$  では存在しない．低温の  $T_S$  では，local Mattis 状態，スピングラス状態が全て適応度 1 に縮退する．スピングラス状態は状態数が多いため，低温  $T_S$  で支配的になり，またこれらの相互作用の一部は，変異に対して非常に脆弱である．しかし，これらの相互作用も高い適応度を獲得しているために淘汰されず， $T_S$  低温では変異に対する頑健性が獲得できない．以上の解析から，変異に対する頑健性が，ある程度の温度揺らぎが存在する環境下での淘汰を通して獲得されることが明らかになった．

以上の結果のサイズ依存性を明らかにするため，全スピン数  $N$  とターゲット数  $t$  依存性を数値的に観察した．その結果，local Mattis 状態を広い温度領域で得るには，最適なターゲットスピン数が存在することが示唆された．非ターゲットスピンの数  $N - t$  は，系の冗長性をコントロールするパラメータである． $t$  が非常に小さいとき，ターゲット配位は非ターゲットスピンによる摂動を受けやすく，適応状態は熱揺らぎに対しても頑健ではなくなると考えられる．そして， $t$  が大きいときは，高い適応度をもつ相互作用配位は，全ての相互作用配位のうちの限られた一部に過ぎなくなり，変異によって適応状態が壊されやすいということが考えられる．冗長性と進化可能性の関係性は，様々な考察から指摘されているが，その定量的な議論は未だ行われていない [Wagner (2005)]．今回示された結果は，このような方向性の研究に対して大きな意味を持つと考える．

SHK model は，partial anneal 系における進化の 1 つの例であり，本研究をもって断熱的な二温度系における進化が全て理解できたというわけではない．本研究で得られた，適応度に駆動される進化を通して，中間温度で頑健性を獲得するという進化のシナリオは，適応度の関数形により異なると考えられる．その他の  $H_J$  を持つ partial anneal 系の性質と比較することで，本章で示したシナリオが成立するために  $H_J$  に課される条件や，中間温度領域の意味が明らかになると考える．次節では，このような動機に基づき，適応度として自由エネルギーを選び，その partial anneal 系における進化を議論する．

本章の結果は，全て数値的に観察したものであり， $T_S^{c1}$ ， $T_S^{c2}$  で相転移が起きているのか，という疑問に対しては十分に答えることが出来ない．転移の有無や，local Mattis 状態の熱力学的な定義を明らかにするためには，SHK model の性質を持つ，partial annealing 系の新たなモデルを導入する必要がある．特に，スピングラス理論におけるレプリカ対称性の破れなどの概念と，SHK model で得られた結果の関係性は，興味深い問題である．

## 第 3 章

# Coupled mean-field model

本章では，partial anneal 系の coupled mean-field model と呼ぶ模型について解析する [Sakata and Hukushima (2010)]．この模型は，スピンのハミルトニアン  $H_S$  に局所性が存在し，SHK model と同じグラフ構造を持つ．適応度  $H_J$  を自由エネルギーとし，レプリカ法を用いて，適応状態の安定性が partial annealing によりどのように変化するかを議論する．模型の特徴的な性質として，リエントラント転移について触れ，その転移が温度や系のパラメータにより変化する様子を示す．また，進化した相互作用の特徴づけを行い，SHK model と異なる相互作用配位が進化により得られることを示す．この理由を，適応度地形の構造から説明する．

### 3.1 導入

前章の SHK model では，適応度  $H_J = -\Psi$  による進化を通して，ターゲット部分に局所的に，ターゲット配位を埋め込む問題を考えた．中間スピン温度  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  で得られた相互作用配位，local Mattis 状態の相互作用は，ターゲットと非ターゲットをつなぐ相互作用にフラストレーションを持たず，ターゲット配位に対して低いエネルギーを与えていた．このような相互作用の進化は，当然  $H_J$  の関数形に依存すると考えられる．本章では，SHK model のような，スピンに関する物理量の期待値として与えられる適応度による相互作用の進化と，Penney ら，Dotsenko らが導入した自由エネルギーで与えられる適応度による相互作用の進化を比較して考えたい．SHK model では  $H_J$  に局所性を取り入れたが，局所性の入れ方に着目すると，partial anneal 系では  $H_J$  と  $H_S$  に自由度がある．そこで，本章では  $H_S$  に対してあらかじめ局所的なパターン（スピン配位）を埋め込み，SHK model と同じグラフ構造を実現する．その上で  $H_J$  を自由エネルギーとして相互作用を進化させ，局所的に埋め込んだパターンの安定性の  $T_S$  依存性や，相互作用の性質をまとめる．

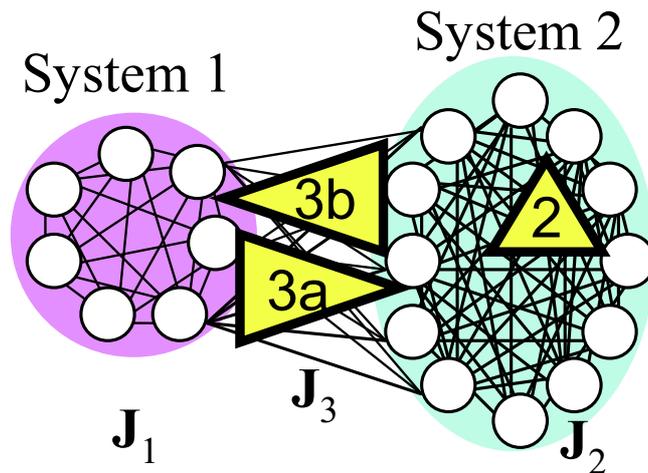


図 3.1 Coupled mean-field model の模式図． と線は、それぞれスピンと相互作用を表す．3つの三角形は、3.5節で導入する、フラストレーション秩序変数を表す．

$H_S$  に局所性を持つ模型として、本章では Takayama により導入された coupled mean-field model を取り上げる [Takayama (1988), Takayama (1992)]．この模型は、実際のスピングラス物質において見られる、相互作用分布の偏りがもたらす現象に関する平均場模型を構成するという目的で導入された．強磁性相互作用を持つ全結合系 1 と、スピングラス相互作用を持つ全結合系 2 を、スピングラス相互作用を通して結合させ、相互作用分布の偏りを表現している．この強磁性相互作用を持つ系 1 は、局所的に埋め込まれた強磁性パターンと見なすことができる．そして、スピングラス相互作用を持つ系 2、および系 1 と系 2 をつなぐ相互作用には、どのようなパターンも埋め込まれていない．Takayama の研究では、クエンチ系におけるモデルの振る舞いが解析されている．クエンチ系では、相互作用はある分布関数に従って独立に生成され、固定されている、本研究では、クエンチ系ではなく、系 1 の強磁性相互作用以外が断熱的にスピンの揺らぎを受けて変化する、partial anneal 系に着目する．そのうえで、自由エネルギーの適応度を用いた partial annealing による相互作用の進化により、埋め込まれた強磁性秩序の安定性がどのように変化するかを明らかにする．

本章の構成は次の通りである．3.2 節では、本章で扱う coupled mean-field model を導入する．3.3 節では、 $H_J$  を自由エネルギーに設定し、レプリカ法を用いた解析を行う．そしてスピンに関する相を明らかにし、特にリエントラント転移に着目して、モデルのパラメータ依存性について議論する．3.4 節では、進化した相互作用の平衡状態について議論し、解析する．最後に、3.5 節では結果をまとめ、SHK model との比較を行う．

## 3.2 モデルの定義

Coupled mean-field model は、 $N$  個のイジングスピンから構成される全結合モデルを、 $N_1$  個のスピンから構成される系 1 と、 $N_2$  個のスピンから構成される系 2 に分けたモデルである。系 1、系 2 のスピンを、それぞれ  $\{S_{1,i}\}(i = 1, \dots, N_1)$  と  $\{S_{2,i}\}(i = 1, \dots, N_2)$  とし、スピンをまとめて  $S$  と表記すると、ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$H(S|\mathbf{J}) = - \sum_{p=1}^2 \sum_{i<j} J_{p,ij} S_{p,i} S_{p,j} - \sum_{i,j} J_{3,ij} S_{1,i} S_{2,j} \quad (3.1)$$

模式図を図 3.1 に示す。(3.1) の第一項は、系 1、系 2 内のスピンに関する二体相互作用を表している。系 1 のスピン  $S_{1,i}$  と  $S_{1,j}$  をつなぐ相互作用を  $J_{1,ij}$ 、系 2 のスピン  $S_{2,i}$  と  $S_{2,j}$  をつなぐ相互作用を  $J_{2,ij}$  とした。以下では、 $\{J_{1,ij}\}$  と  $\{J_{2,ij}\}$  をそれぞれ  $J_1, J_2$  と表す。(3.1) の第二項は、系 1 のスピンと系 2 のスピンについての二体相互作用を表している。系 1 のスピン  $S_{1,i}$  と系 2 のスピン  $S_{2,j}$  をつなぐ相互作用を  $J_{3,ij}$  とした。 $J_1, J_2$  と同様に、二つの系をつなぐ相互作用  $\{J_{3,ij}\}$  を  $J_3$  と表記する。相互作用は、 $J_1, J_2, J_3$  とも対称行列 ( $J_{p,ij} = J_{p,ji}$ ,  $p = 1, 2, 3$ ) とする。

本章では  $\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S)$  を次のように設定する [Penney et al. (1993), Dotsenko et al. (1994)]。

$$\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S) = F(\mathbf{J}; T_S) - T_S \log P_0(\mathbf{J}), \quad (3.2)$$

これは (1.9) において  $H_J = F(\mathbf{J}; T_S)$  としたものである。 $F(\mathbf{J}; T_S)$  は  $F(\mathbf{J}; T_S) = -T_S \log Z(\mathbf{J}; T_S)$  として定義される自由エネルギーで、 $P_0(\mathbf{J})$  はベア分布関数  $P_0(\mathbf{J}) = \prod_{i<j} P_0(J_{ij})$  である。このとき、相互作用の平衡分布関数  $P(\mathbf{J})$  とその規格化定数は、次のように表される。

$$P(\mathbf{J}) = \frac{1}{Z_J} \exp(-\beta_J \mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S)) = \frac{1}{Z_J} P_0(\mathbf{J}) Z^n(\mathbf{J}; T_S), \quad Z_J = [Z^n(\mathbf{J}; T_S)]_0 \quad (3.3)$$

$n$  は二つの温度の比  $n = T_S/T_J$  であり、 $[\dots]_0$  はベア分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  による相互作用平均を意味する。 $n = 0$  のとき、分布関数  $P(\mathbf{J})$  はベア分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  と一致し、すなわちクエンチ系に一致する。温度比  $n$  と  $\beta_J$  が有限のときは、(3.3) から明らかなように、低い自由エネルギーを持つ相互作用の実現確率が高くなる。また、クエンチ系における相互作用の分布関数であるベア分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  は、平均  $J_{0,p}$ 、分散  $J_p$  ( $p = 1, 2, 3$ ) のガウス分布とする。

$$P_0(J_{p,ij}) = \sqrt{\frac{N_p}{2\pi J_p^2}} \exp \left\{ -\frac{N_p}{2J_p^2} \left( J_{p,ij} - \frac{J_{0,p}}{N_p} \right)^2 \right\}, \quad (3.4)$$

ここで相互作用  $J_{p,ij}$  のオーダーは、ハミルトニアンの示量性のために  $N_p^{-1/2}$  とした。また  $N_3$  は、 $N_1$  と  $N_2$  の相乗平均、 $N_3 = \sqrt{N_1 N_2}$  としておく [Takayama (1992)]。

ここでは特に，あるパターンが系 1 に埋め込まれており，一方で，系 2 及び二つの系をつなぐ相互作用には何も埋め込まれていない状態を考える．これは次のように表される．

$$\begin{aligned} J_{0,1} &= J_0 (> 0), \quad J_{0,2} = J_{0,3} = 0, \\ J_1 &= 0, \quad J_2 = J_3 = J (> 0) \end{aligned} \quad (3.5)$$

このような設定により，coupled mean-field model は SHK model と同じグラフ構造を持つ．すなわち，局所的にパターンを埋め込まれた系 1 は，SHK model におけるターゲットスピン部分に対応している．SHK model と異なる点は，このモデルでは相互作用  $J_1$  を強磁性相互作用で固定したまま，相互作用  $J_2$  と  $J_3$  に partial annealing の効果を取りこむ点である<sup>\*1</sup>．また二つの系のサイズ比  $r$  を次のように定義する．

$$N_1/N_2 = 1/r^2, \quad (3.6)$$

$N = N_1 + N_2$  なので，これにより  $N_1 = N/(1+r^2)$ ， $N_2 = Nr^2/(1+r^2)$  となる． $r = 0$  は Husimi-Temperley model に対応し， $r = \infty$  は Sherrington-Kirkpatrick model に対応する．

### 3.3 レプリカ法による解析

$H_J$  を自由エネルギーに設定すると，(3.3) から明らかなように，平衡状態は有限レプリカ数の系に対応する [Mézard et al. (1987), Nishimori (2001)]．したがって，系の振る舞いはレプリカ法を用いて解析的に把握することが出来る．そこでレプリカ法の手続きに従い， $n$  を正の整数として  $[Z^n]_0$  を解析し，その結果を実数の  $n$  へと接続する．レプリカ対称性 (replica symmetry, RS) を仮定すると，1 スピンあたりの自由エネルギー  $f$  は，秩序変数  $q_1, q_2, m_1$  と，その共役変数  $\hat{q}_1, \hat{q}_2, \hat{m}_1$  を用いて，次のように表される．

$$\begin{aligned} f(T_S, T_J) &= -\frac{1}{\beta_S} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log [Z^n(\mathbf{J})]_0 \\ &= -T_S \left[ -\sum_{p=1}^2 \left\{ n_p \left( \frac{n(n-1)}{2} q_p \hat{q}_p \right) \right\} - n_1 n m_1 \hat{m}_1 \right. \\ &\quad + \frac{J_0 \beta_S n_1 n}{2} m_1^2 + \frac{J^2 \beta_S^2 n_2 n(n-1)}{4} q_2^2 + \frac{J^2 \beta_S^2 n_2}{4} + \frac{\hat{n}_3 J^2 \beta_S^2 n(n-1)}{2} q_1 q_2 + \frac{J^2 \beta_S^2 n \hat{n}_3}{2} \\ &\quad \left. + n_1 \log \int Dz 2 \cosh^n(\sqrt{\hat{q}_1} z + \hat{m}_1) - \frac{\hat{q}_1 n n_1}{2} + n_2 \log \int Dz 2 \cosh^n(\sqrt{\hat{q}_2} z) - \frac{\hat{q}_2 n n_2}{2} \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

<sup>\*1</sup> 分散  $J_1 = 0$  とすると，ペア分布関数は  $J_{1,ij} = J_0/N_1$  にピークを持つデルタ関数となり，partial annealing による修正が加わらない．

ここで  $n_p = N_p/N$  ( $p = 1, 2$ ), また  $\hat{n}_3 = N_3/N$  とした. また  $\int Dz = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2/2}/\sqrt{2\pi}$  である. 秩序変数は, 次の自己無撞着方程式から決まる.

$$q_p(T_S, n) = \frac{\int Dz \tanh^2 \Xi_p \cosh^n \Xi_p}{\int Dz \cosh^n \Xi_p} \quad (3.8)$$

$$m_1(T_S, n) = \frac{\int Dz \tanh \Xi_1 \cosh^n \Xi_1}{\int Dz \cosh^n \Xi_1} \quad (3.9)$$

ここで  $\Xi_1 = \sqrt{\hat{q}_1}z + \hat{m}_1$ ,  $\Xi_2 = \sqrt{\hat{q}_2}z$  とした. また共役変数  $\hat{q}_1$ ,  $\hat{q}_2$ ,  $\hat{m}_1$ , は次のように与えられる.

$$\hat{q}_1 = \beta_S^2 J^2 (r q_2), \quad \hat{q}_2 = \beta_S^2 J^2 (q_1/r + q_2), \quad \hat{m}_1 = \beta_S J_0 m_1. \quad (3.10)$$

これらの式を解くと, 常磁性解 ( $q_1 = q_2 = m_1 = 0$ ), 強磁性解 ( $q_1 > 0, q_2 > 0, m_1 > 0$ ), スピングラス解 ( $q_1 > 0, q_2 > 0, m_1 = 0$ ) の3種類の解が得られる. 常磁性解が安定な相を常磁性相, 強磁性解が安定な相を強磁性相, スピングラス解が安定な相をスピングラス相と呼ぶ. 相の間の転移温度は次のように与えられる.

$$T_S^{\text{SG-FM}} = J_0 (1 + (n-1)q_1) \quad (3.11)$$

$$T_S^{\text{PM-SG}} = \sqrt{(1 + \sqrt{5})/2} J \equiv \sqrt{\alpha} J \quad (3.12)$$

$$T_S^{\text{PM-FM}} = J_0 \quad (3.13)$$

PM, FM, SG はそれぞれ常磁性相, 強磁性相, スピングラス相を意味し, 例えば  $T_S^{\text{SG-FM}}$  は強磁性相からスピングラス相への転移温度を意味する.

(3.12) と (3.13) から明らかなように, 常磁性相とスピングラス相の相境界, 及び常磁性相と強磁性相の相境界は, この模型の特徴的なパラメータである  $r$  と  $n$  に依存しない. したがって, 全ての相境界が交わる三重臨界点  $(J_0/J, T_S/J) = (\sqrt{\alpha}, \sqrt{\alpha})$  も  $r$  と  $n$  に依存しない. これらの事実は, クエンチ系においても見られる性質である.

RS 解に対して de Almeida と Thouless の議論を適用させると, 解が安定であるための条件 (AT 安定性条件) は次のように求められる [de Almeida and Thouless (1978)].

$$1 - \beta_S^2 J^2 (1 - 2q_2 + r_2) - \beta_S^4 J^4 (1 - 2q_1 + r_1)(1 - 2q_2 + r_2) > 0 \quad (3.14)$$

ここで

$$r_p = \frac{\int Dz \tanh^4 \Xi_p \cosh^n \Xi_p}{\int Dz \cosh^n \Xi_p}, \quad (p = 1, 2) \quad (3.15)$$

とした. AT 安定性条件の導出は, 付録 B.1 に示す.

## 3.4 結果

### 3.4.1 相図

ここでは、 $T_S^{\text{SG-FM}}$  に注目し、 $r$  と  $n$  依存性について議論する。 $J_0/J - T_S/J$  平面の全ての領域で  $T_S^{\text{SG-FM}}$  を得るには、秩序変数の方程式 (3.8) と (3.9) を数値的に解かなくてはならない。しかし三重臨界点近傍と絶対零度  $T_S = 0$  近傍では、秩序変数を展開することで、強磁性 - スピングラス転移温度を見積もることが出来る。相図を示す前に、この二つの領域での転移温度を考えてみる。

#### 絶対零度近傍

十分低い  $T_S$  では、スピングラス秩序変数  $q_p$  ( $p = 1, 2$ ) は次のように振舞う。

$$q_p(n) \simeq \begin{cases} 1 - 4 \exp(-2\beta_S^2 J^2 c_p (n-1)) & \text{for } n > 1 \\ 1 - \frac{\exp(-\beta_S^2 J^2 n^2 c_p / 2)}{(1-n)\beta_S J \sqrt{c_p}} & \text{for } n < 1 \end{cases} \quad (3.16)$$

ここで  $c_1 = r$ ,  $c_2 = 1 + r^{-1}$  とした。これらを (3.11) に代入すると、 $J_0 = T_S = 0$  近傍では、転移温度は  $r$  に依存せずに  $T_S^{\text{SG-FM}} = nJ_0$  となることがわかる。また、 $T_S = 0$  まわりの RS 解は常に AT 安定性条件 (3.14) を満たすことがわかる。したがって、 $n > 0$  においては、どのような  $J_0$  においても、 $T_S = 0$  では強磁性解が安定である。 $n = 0$  では強磁性解は不安定化し、Takayama らの結果に帰着する [Takayama (1992)]。このような、 $T_S = 0$  近傍における、 $J_0, r$  の値によらない強磁性秩序の安定性は、partial anneal 系 coupled mean-field model の特徴の 1 つである。

#### 三重臨界点近傍

三重臨界点付近では、スピングラス秩序変数は次のように表される。

$$q_1(n) \simeq \begin{cases} \frac{2(2\alpha - 1)}{(2-n)(\alpha - 1)(\alpha c_2 - 1)} (T_S - \sqrt{\alpha}) & \text{for } n < 2, \\ \sqrt{\frac{6r^2(2\alpha - 1)}{r^2(\alpha - 1) + \alpha^3}} (T_S - \sqrt{\alpha})^{1/2} & \text{for } n = 2, \end{cases} \quad (3.17)$$

$$q_2(n) \simeq \frac{q_1(n)\alpha}{r}. \quad (3.18)$$

スピングラス秩序変数の臨界指数は、 $n < 2$  では 1 で、 $n = 2$  では  $1/2$  である<sup>\*2</sup>。また  $n > 2$  では、一次転移であるため、初等的な展開により秩序変数の漸近的振る舞いを求めることは困

<sup>\*2</sup>  $n = 2$  では、自由エネルギーに対して、秩序変数の 3 次の項は寄与しない。

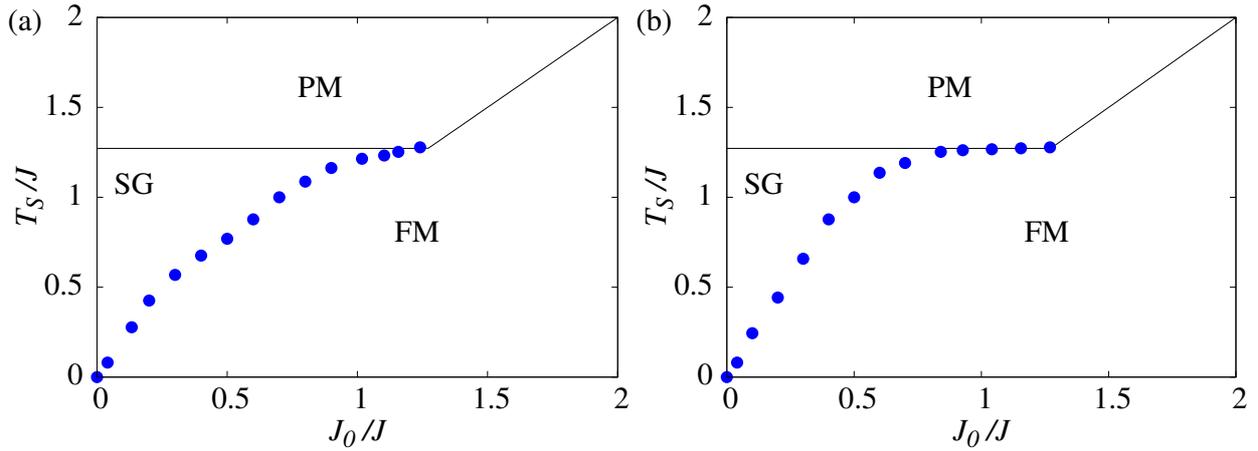


図 3.2  $n = 2.0$  における相図を示す．(a) は  $r = 1/3$ ，(b) は  $r = 3$  である．PM, FM, SG はそれぞれ常磁性相，強磁性相，スピングラス相を意味する．●で示された点は，鞍点方程式を数値的に解いて得られた転移温度  $T_S^{\text{SG-FM}}$  を意味する．

難である．(3.11) と合わせると， $T_S = 0$  での結果と異なり，三重臨界点近傍の相境界は， $n$  だけでなく  $r$  にも依存することがわかる．

$n = 2$  における  $r = 1/3$  と  $r = 3$  の相図を図 3.2 に示す．どちらの相図も，相のトポロジーは  $r$  に依らない． $J_0/J > \sqrt{\alpha}$  では，常磁性相から強磁性相への転移が  $T_S^{\text{PM-FM}}$  で起き，また  $J_0/J < \sqrt{\alpha}$  のとき， $T_S^{\text{SG-FM}} < T_S < T_S^{\text{PM-SG}}$  でスピングラス相が現れる． $n > 1$  で現れるすべての相は，AT 安定性条件 (3.14) を満たす．相図のトポロジーは  $r$  に依存しないものの， $r = 3$  においてスピングラス相に対応するパラメータ領域は， $r = 1/3$  に比べて狭くなっている．つまり，三重臨界点付近の転移温度  $T_S^{\text{SG-FM}}$  は， $r = 1/3$  のときの方が， $r = 3$  のときより低い． $r = 3$  とは，スピングラス相互作用を持つ系 2 のサイズが，強磁性相互作用を持つ系 1 のサイズの 9 倍である状況に対応する．したがって， $r$  が大きくなるほどスピングラス相は小さくなるという結果は，直観に反するものである．この点は，後ほど議論する．

$n < 1$  では， $n > 1$  における相に加えて混合相が現れる．混合相とは，AT 安定性条件 (3.14) を破る  $m_1 > 0$  の相である． $n < 1$  における典型的な振る舞いとして， $n = 0.1$  での相図を，図 3.3 に示す． $n = 2.0$  での結果と同様， $r = 1/3$  と  $r = 3$  の場合について示す．混合相は，強磁性相とスピングラス相の間に存在しており， $r$  が増加するほど混合相は広くなる．スピングラス相全体の広さも， $r$  を大きくすると広くなる．中間温度  $T_S$  領域では，混合相とは異なる，磁化  $m_1 = 0$  でレプリカ対称性の破れたスピングラス相 (RSB) も現れる<sup>\*3</sup>．このようなスピングラス相の広さと  $r$  の関係は， $n = 2$  における結果とは逆の関係性である．また  $r = 3$

\*3 図 3.3 において， $J_0/J < \sqrt{\alpha}$  で RS 相と RSB 相の境界が  $J_0/J$  に依らない理由は，このパラメータ領域では磁化が有限の値を持たず，AT 安定性条件が  $J_0$  に依らないためである．

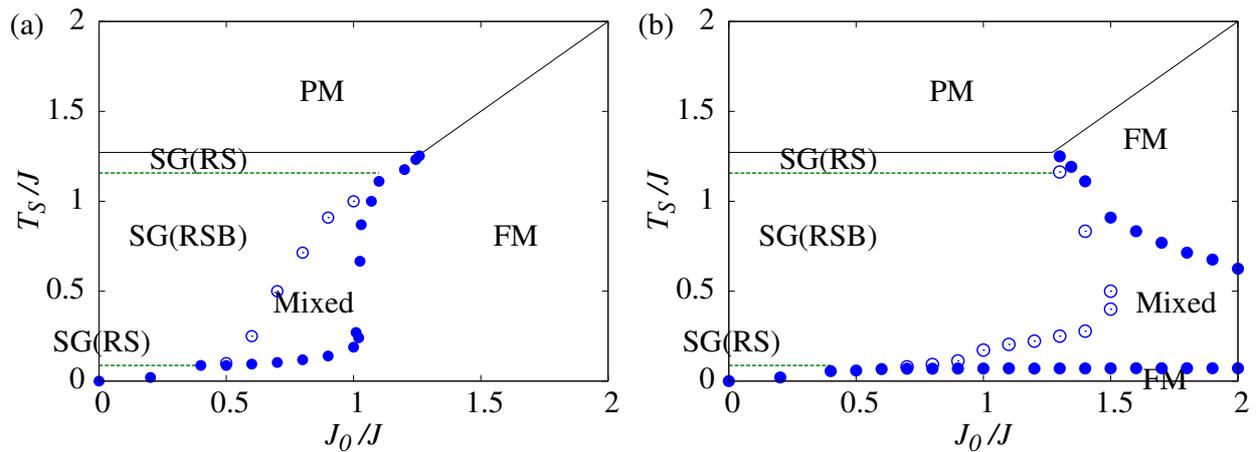


図 3.3  $n = 0.1$  における相図を示す．(a) は  $r = 1/3$ ，(b) は  $r = 3$  である． $\circ$  はレプリカ対称性の破れたスピングラス相 (RSB) と混合相 (Mixed) の相境界を表し， $\bullet$  は強磁性相と混合相の相境界を表す．点線はレプリカ対称なスピングラス相 (RS) と RSB スピングラス相の相境界を表す．

では，常磁性相 強磁性相 混合相というリエントラント転移が， $J_0/J > \sqrt{\alpha}$  において起きる．さらに，スピングラス相または混合相から強磁性相への転移が，より低い  $T_S$  において起きる．したがって，ここでは常磁性相 強磁性相 混合相 強磁性相という三回の転移が  $J_0/J > \sqrt{\alpha}$  において見られる．

### 3.4.2 リエントラント転移

Coupled mean-field 模型の特徴的な性質は， $T_S = 0$  近傍に加えて，三重臨界点近傍にも見られる．図 3.3(b) に示されるように， $J_0/J > \sqrt{\alpha}$  において，三重臨界点近傍では，強磁性相から混合相とスピングラス相へのリエントラント転移が見られる．これは， $T_S$  減少に伴い，系 1 の強磁性秩序が不安定化することを意味している．このようなリエントラント転移は，クエンチ系 ( $n = 0$  極限) においても報告されている [Takayama (1992)]．ここでは，partial anneal 系，すなわち有限レプリカ数の系における強磁性秩序の安定性について考えてみる．

三重臨界点における，強磁性 - スピングラス転移温度  $T_S^{\text{SG-FM}}$  の勾配は，リエントラント転移の指標と見なすことができる．すなわち， $T_S^{\text{SG-FM}}$  が三重臨界点において負の傾きを持つてば，リエントラント転移が起こる\*4．この条件は，次のように表される．

$$\left. \frac{dJ_0^c(T_S)}{dT_S} \right|_{\text{MCP}} < 0 \tag{3.19}$$

ここで  $J_0^c(T_S) = T_S / (1 + (n - 1)q_1(T_S))$  であり，また “MCP” は三重臨界点を意味する．秩

\*4 逆方向は成立しない．三重臨界点より低温側でリエントラント転移が起こる可能性もある．

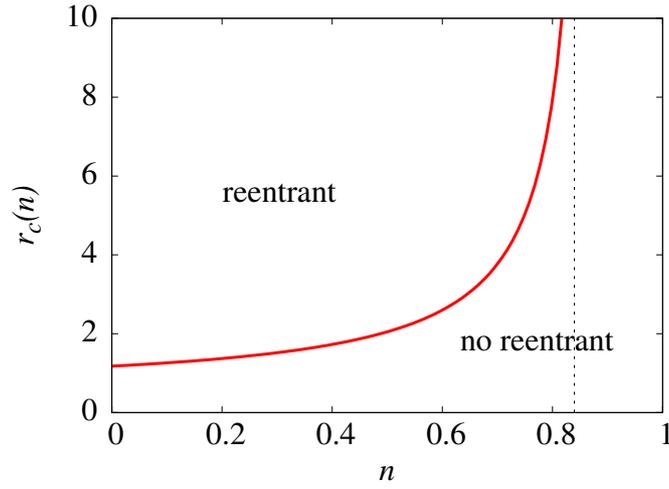


図 3.4 臨界比  $r_c$  の  $n$  依存性を示す．温度比が  $n = T_S/T_J$  のとき， $r > r_c(n)$  においてリエントラント転移が起こる．破線で示されている  $n_c \simeq 0.8396 \dots$  は， $r_c$  が発散する点である． $n > n_c$  ではリエントラント転移が起きない．

序変数  $q_1$  は温度  $T_S$  の関数である．RS 解は常に三重臨界点近傍で AT 安定性条件 (3.14) を満たすため，三重臨界点近傍の振る舞いを知るには，RS の解析で十分である．(3.19) 式より，リエントラント転移が起こる領域  $r$  は次のように求められる．

$$r > r_c(n), \quad \text{for } n < n_c \simeq 0.8396 \dots \quad (3.20)$$

$$r < r_c(n), \quad \text{for } n_c < n < 2 \quad (3.21)$$

ここで臨界比  $r_c(n)$  は次のように与えられる．

$$r_c(n) = \frac{(2-n)(1+\alpha)}{2(1-n)(2\alpha-1) - (2-n)(\alpha-1)} \quad (3.22)$$

$n > n_c$  においては， $r_c(n)$  は負であるため，物理的な領域 ( $r > 0$ ) ではリエントラント転移は起きないことがわかる<sup>\*5</sup>．図 3.4 に，臨界比  $r_c(n)$  の  $n$  依存性を示す． $r_c(n)$  は， $n$  が小さくなると減少する．特にクエンチ極限においては， $r_c$  は  $1.618 \dots$  であり，これは Takayama の結果と一致している [Takayama (1992)]．さらに， $n > n_c$  では，三重臨界点におけるスピングラス - 強磁性相境界の勾配  $dJ_0^c(T_S)/dT_S$  は， $r$  に関して単調増加関数であることが分かる．したがって  $n > n_c$  では， $r$  が増加するほどスピングラス相が狭くなる．図 3.2 と図 3.3 で示唆された相図の  $r$  依存性は， $n_c$  において大きく変化することが明らかになった．

ここで，partial anneal 系における相互作用  $J_3$  の性質を踏まえながら，臨界比  $r_c(n)$  および  $n_c$  の意味について考えてみる．partial anneal 系の相互作用の平衡分布  $P(J)$  を最大にす

<sup>\*5</sup> 臨界比  $r_c(n)$  の導出は，転移を二次転移であると仮定して行っている．実際， $n \leq 2$  においては二次転移であり， $n_c$  は二次転移の領域に含まれるため，この仮定は妥当である．したがって，リエントラント転移は  $n < n_c$  のみで起こると結論付けてよいだろう．

る相互作用配位は,  $J_{ij} = n\langle S_i S_j \rangle$  を満たす配位である. 系2の秩序変数  $q_2$  が, 十分低温の  $T_S$  で有限の値をとると, 系1のスピンは, 系2由来の有効場を受ける. この有効場は大きさ  $r\sqrt{q_2}$  であり, 系1と系2をつなぐ相互作用  $J_3$  を通して, 系1にもたらされる.  $n < n_c$  では, 相互作用  $J_3$  の分布関数に対する自由エネルギーの寄与が弱く,  $J_3$  は  $P(\mathbf{J}_0)$  に従うランダムな配位をとると考えられる. したがって, 系2から系1への有効場はランダムな外場であると予想される. このランダムな有効場は系1の強磁性秩序を補助せず, そして  $r$  が増えるほどランダムな外場が強くなり, スピングラス相が得られる温度領域が広がる. このような  $r$  の効果と, 強磁性相互作用の強さ  $J_0$  の競合により,  $n < n_c$  においては  $r > r_c$  でリエントラント転移が見られると考えられる. 一方,  $n > n_c$  では, 相互作用  $J_{3,ij}$  は  $\langle S_{1,i} S_{2,j} \rangle$  と同じ符号になりやすい. したがって, 系2から系1への有効場はランダムではなく, 系1の強磁性秩序をサポートするものになると考えられる.  $r$  が増加して, 外場が強くなるほど, 系1の強磁性秩序は安定化されるため,  $n > n_c$  においてはどのような  $r$  でもリエントラント転移は起きないと予想される.

以上の, リエントラント転移に関する解釈が正しいことは, 次節の議論により確認される.

### 3.4.3 フラストレーションの局所構造

本節では, coupled mean-field model の平衡状態の性質について, 相互作用配位に注目して議論する. フラストレーションは, スピングラス模型において相互作用を特徴付ける量であると言える. 2章で議論したように, 相互作用の最小ループの積  $J_{ij} J_{jk} J_{ki}$  からフラストレーションを定義する. Coupled mean-field model も, SHK model と同じようにターゲット部分(系1)が存在しているため, 相互作用は三種類に分類され, それぞれに対してフラストレーション秩序変数を導入する必要がある. そこで三通りの相互作用の積を考える.

$$\Phi_{(2)} = \sum_{i < j < k} [J_{2,ij} J_{2,jk} J_{2,ki}]_n \equiv [\phi_{(2)}]_n \quad (3.23)$$

$$\Phi_{(3a)} = \sum_{i < j, k} [J_{1,ij} J_{3,jk} J_{3,ki}]_n \equiv [\phi_{(3a)}]_n \quad (3.24)$$

$$\Phi_{(3b)} = \sum_{i, j < k} [J_{3,ij} J_{2,jk} J_{3,ki}]_n \equiv [\phi_{(3b)}]_n \quad (3.25)$$

添え字は, 図3.1の三角形に対応している. また  $[\dots]_n$  は, 温度比  $n = T_S/T_J$  における相互作用の平衡分布関数,  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J)$  に従う相互作用平均の意である.  $\Phi_{(2)}$  は  $J_2$  の相互作用のループ,  $\Phi_{(3a)}$  は一本の  $J_1$  と二本の  $J_3$  からなる相互作用のループ,  $\Phi_{(3b)}$  は, 一本の  $J_2$  と二本の  $J_3$  からなる相互作用ループの積の平均値である.  $T_S$  を有限にとめたまま,  $n \rightarrow 0$  とするクエンチ極限をとると, 相互作用の分布関数はベア分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  と一致し,  $[\dots]_n$  はランダム平均  $[\dots]_0$  に帰着する. この極限におけるフラストレーション秩序変数は, あらゆる  $T_S$  で0である. したがって, フラストレーション秩序変数が有限であるとき, 相互作用の分布関数はランダム系のベア分布関数と異なる.

ベア分布関数がガウス分布関数であることを利用すると,フラストレーション秩序変数は,部分積分を用いて,スピンの秩序変数により表現されることがわかる [Dotsenko et al. (1994)]. 解析の詳細は付録 B.2 に示す. 三つのフラストレーション秩序変数は,次のように求められる.

$$\Phi_{(2)} = \beta_S^3 \{ \lambda_2^3 + (n-1)\mu_2^3 \} \quad (3.26)$$

$$\Phi_{(3a)} = \beta_S^2 n J_0 \lambda_2 m_1^2 \quad (3.27)$$

$$\Phi_{(3b)} = \beta_S^3 \{ \lambda_1 \lambda_2^2 + (n-1)\mu_1 \mu_2^2 \} \quad (3.28)$$

ここで  $\lambda_p = 1 + (n-1)q_p$  と  $\mu_p = 1 - q_p$  は,  $Q_p$  行列の固有値である.  $Q_p$  行列とは, 各成分が  $q_{\alpha\beta}^p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_p} [\langle S_{p,i}^\alpha S_{p,i}^\beta \rangle]$  に対応する  $n \times n$  行列で, RS 仮定のもとでは対角成分は 1 で, 非対角成分は  $q_p$  である. また RSB 解を用いたフラストレーション秩序変数を導出することも出来るが, 定性的な変化は非常に小さい [Sakata et al. (3) (2009)]. このようにフラストレーション秩序変数を書き下すことで, スピンに関する相図から, 相互作用の性質が明らかになる. まず (3.26), (3.28) から明らかのように, 常磁性 - スピングラス転移点  $T_S^{\text{PM-SG}}$  より高温では,  $\Phi_{(2)}$  と  $\Phi_{(3b)}$  は温度に対して  $n\beta_S^3$  とスケールする. すなわち, 常磁性相においても,  $\Phi_{(2)}$  と  $\Phi_{(3b)}$  は, 温度減少に対して緩やかに上昇することがわかる. このようなフラストレーションの緩やかな変化は, partial annealing の効果により相互作用間に短距離的な秩序が生じることに起因すると考えられる. 一方, (3.27) に示すように  $\Phi_{(3a)}$  は磁化に比例しているため, 常磁性相では 0 である. そしてフラストレーション秩序変数の本質的な変化は, スピンの相転移に付随して起こる.  $q_1 > 0, q_2 > 0, m_1 = 0$  というスピングラス相では, フラストレーション秩序変数のうち  $\Phi_{(2)}$  と  $\Phi_{(3b)}$  は大きく増加し,  $n^3\beta_J^3$  へとクロスオーバーする. しかし  $\Phi_{(3a)}$  はゼロのままである. つまり, 相互作用  $J_2$  の全てと,  $J_3$  の一部からフラストレーションは減少するが, 残りの  $J_3$  にはフラストレーションが残り, ランダムに構成された配位のままになっている. このようにフラストレーションが不均一に分布しているとき, 相互作用  $J_2$  と  $J_3$  は, 系 2 のフラストレーションを減少させる配位をとるため, 系 1 の強磁性秩序と競合してしまう. 一方, 強磁性相においては,  $q_p$  に加えて  $m_1$  も有限の値をとるため, すべてのフラストレーションパラメータが有限の値をとる. この場合,  $J_2$  と  $J_3$  の配位は, 系 1 の強磁性状態のエネルギーを減少させる. つまり系 2 から系 1 への有効場は, 系 1 の強磁性秩序を安定化するものである. このような相互作用は Mattis model に近い [Mattis (1976)]. これらのフラストレーションに関する観察は, 前節での  $r_c(n)$  と  $n_c$  に対する解釈が正しいことを示唆するものである. 図 3.5 に, 例として  $n = 2.0, r = 3.0, J_0/J = 1.0$  における, フラストレーション秩序変数の振る舞いを示す. すべて転移温度より高温で 0 となるように, 次のよ

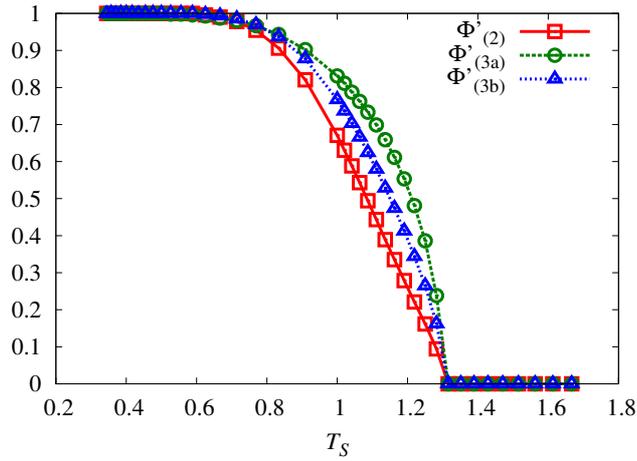


図 3.5  $n = 2.0$ ,  $r = 3.0$ ,  $J_0/J = 1.0$  における，規格化されたフラストレーション秩序変数の温度依存性を示す．

うに規格化したものを示している．

$$\Phi'_{(x)} \equiv \frac{\Phi_{(x)} - n\beta_S^3}{n^3\beta_S^3 - n\beta_S^3}, \quad x = 2, 3b \quad (3.29)$$

$$\Phi'_{(3a)} \equiv \frac{\Phi_{(3a)}}{n^3\beta_S^3} \quad (3.30)$$

最後に，フラストレーション秩序変数のオーダーについて考えてみる．相互作用はペア分布関数においては  $O(N^{-1/2})$  で定義されていた．もし相互作用のオーダーが保たれたままフラストレーションが消えると，フラストレーション秩序変数のオーダーは，定義より  $O(N^{3/2})$  になる．しかし，相互作用に関する平均が取られたフラストレーション秩序変数は，(3.26)，(3.27)，(3.28) から明らかなように，どのような温度  $T_S$  においても  $O(1)$  の量である．これはつまり，partial anneal 系においては， $J_{ij}$  のオーダーが  $O(N^{-1})$  へと修正されることを意味している．そして，すべての温度領域で，エネルギーや自由エネルギーのような熱力学量の示量性が保たれることになる．これは相互作用のペア分布関数がガウス分布関数である partial anneal 系の大きな特徴である．

### 3.5 まとめ

本章では，partial anneal 系における coupled mean-field model を扱った．系 1 にパターンを埋め込み，系 2 のスピングラス相互作用  $J_2$  と，系 1 と系 2 の間をつなぐスピングラス相互作用  $J_3$  に partial annealing の効果を取り込むことで，どのような相互作用配位が得られるかを調べた．ここでは，スピンの自由エネルギーを適応度として相互作用を進化させた．これにより系の平衡状態は，スピン  $S$  と相互作用  $J$  の温度比  $T_S/T_J$  がレプリカ数に対応する，

Phase	Adaptation( $m_1$ )	$\Phi_{(2)}$	$\Phi_{(3a)}$	$\Phi_{(3b)}$
SG	$m_1 = 0$	finite	0	finite
FM	$m_1 > 0$	finite	finite	finite
PM	$m_1 = 0$	finite	0	finite

表 3.1 この模型において得られた 3 種類の相互作用のまとめを示す．スピンの相に対応した 3 種類の相互作用が得られた．SG はスピングラス相，FM は強磁性相，PM は常磁性相を表す．埋め込んだパターンが想起されたとき，磁化は  $m_1 > 0$  となるので，これをもって「適応」と呼んでいる．フラストレーション秩序変数は，3.4.3 節の解析から導かれたものである．

有限レプリカ数の系と一致する．そこで，レプリカ法を用いて系の振る舞いを解析した結果，スピングラス相，強磁性相，常磁性相という 3 つの相の存在が明らかになった．特に，強磁性相とスピングラス相の転移温度  $T_S^{\text{SG-FM}}$  は，モデルのパラメータである  $r$  と  $n$  に大きく依存することが示された． $r$  は，パターンを埋め込んだ系 1 に対する，系 2 の大きさを意味している．また，AT 安定性条件を導出し， $n = T_S/T_J > 0$  のとき，絶対零度では常にレプリカ対称解が安定であることが明らかになった．

この強磁性 - スピングラス転移温度  $T_S^{\text{SG-FM}}$  が， $r, n$  にどのように依存するかを明らかにするため，注意深く解析を行った．まず  $J_0/J - T_S/J$  平面上の  $(J_0/J, T_S/J) = (0, 0)$  近傍では， $T_S^{\text{SG-FM}}$  は  $n$  のみに依存し，また必ず強磁性相が安定であった．そして， $(J_0/J, T_S/J) = (\sqrt{\alpha}, \sqrt{\alpha})$  に位置する三重臨界点付近では，転移温度  $T_S^{\text{SG-FM}}$  の傾きが，ある臨界温度比  $n_c$  で変わることがわかった．この傾きが負であるとき，三重臨界点近傍でリエントラント転移が起こる． $n < n_c$  では  $T_S^{\text{SG-FM}}$  の傾きが負であり，リエントラント転移が起きることが明らかになった．この結果は，系 1 と系 2 の間をつなぐ相互作用  $J_3$  の性質に由来すると考え，次のように解釈した． $n < n_c$  では， $J_3$  に対して partial annealing による修正が十分加わらず， $J_3$  はもとのランダムな相互作用の性質を強く持つ．系 2 から系 1 への有効場は，相互作用  $J_3$  を通してもたらされる．相互作用  $J_3$  がランダムであるとき，この有効場はランダムな外場であると考えられる．したがって， $n < n_c$  では系 2 の大きさ  $r$  が大きくなるほど，系 2 由来のランダムな外場により系 1 の強磁性秩序が不安定化し，強磁性相互作用  $J_0$  との競合が起こる．これがリエントラント転移をもたらしていると考えた．一方， $n > n_c$  では，相互作用  $J_3$  は，partial annealing により十分に修正され，系 1 の強磁性秩序と競合しない配位を持つと考えられる．このとき，系 2 から系 1 への有効場は，系 1 の強磁性秩序を安定化させる． $r$  が大きくなるほど有効場は強くなり，強磁性秩序はさらに安定化される．したがって， $r$  が増えるほど，スピングラス相は狭くなる．

また，3 つのフラストレーション秩序変数， $\Phi_{(2)}$ ， $\Phi_{(3a)}$ ， $\Phi_{(3b)}$  を導入し，相互作用を特徴付けた．これらのフラストレーション秩序変数は，スピンに関する秩序変数で記述される．この

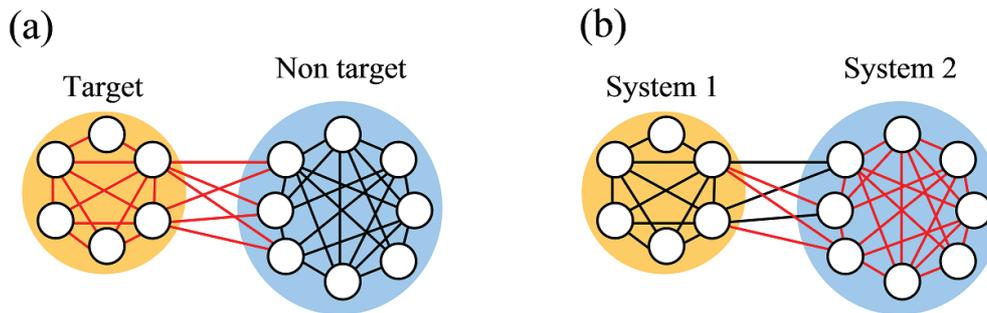


図 3.6 (a) SHK model における local Mattis 状態と (b) coupled mean-field model のスピングラス相で得られた相互作用の比較を示す．フラストレーションが減った部分を赤線で表している．(a) では，ターゲット部分と非ターゲット部分をつなぐ相互作用からフラストレーションが減少しているが，(b) では系 2 からフラストレーションが一様に減少するが，系 1 と系 2 をつなぐ相互作用に，部分的にフラストレーションが残る．

モデルにおいて得られる相互作用は，フラストレーション秩序変数を用いて 3 種類に分けられ，それぞれスピンの相に対応していた．3 種類の相互作用の性質を表 3.1 にまとめる．スピングラス相においては，フラストレーションが局所的に存在する相互作用配位が得られた．そして，強磁性相においては，Mattis model に近い，全ての相互作用からフラストレーションが減少した相互作用が得られた．常磁性相では，ランダムな相互作用が得られた．スピングラス相で得られた相互作用が持つ，特徴的なフラストレーション分布は，系 1 の強磁性秩序を補助しない．つまり，系 1 に埋め込まれたパターンとは関係なく，系 2 のエネルギーを下げるように， $J_2$  と  $J_3$  からフラストレーションが取り除かれたということの意味する．この結果は，前章で扱った SHK model とは大きく異なる [Sakata et al. (1) (2009), Sakata et al. (2) (2009)] ．SHK model の local Mattis 状態と，coupled mean-field model のスピングラス相で得られる相互作用の比較を図 3.6 に示す．SHK model では，局所的に埋め込まれたパターンは，その周りを囲む相互作用によりエネルギー的に安定化され，ターゲット部分と，ターゲットと非ターゲットをつなぐ部分からフラストレーションが減っていた．一方，ターゲット以外の部分にはフラストレーションが存在していた．どちらのモデルも，系の一部にあるパターンを埋めこみ，残りの部分には，何もパターンを埋め込まないという共通のグラフ構造を持つ．しかし， $H_J$  の違いにより，パターン部分をエネルギー的に補助する相互作用と，補助しない相互作用という異なる相互作用が得られることがわかった．本章で導入したフラストレーション秩序変数を用いると，local Mattis 状態は  $\Phi_{(2)} = 0$ ， $\Phi_{(3a)} > 0$ ， $\Phi_{(3b)} = 0$  として特徴付けられる．したがって，フラストレーション秩序変数に関する解析から，coupled mean-field model において local Mattis 状態と同じ性質を持つ相互作用を得るには，系 1 と系 2 の転移が，それぞれ異なる温度で起きる必要があることがわかる．しかし，この模型ではそのような転移は起こらないため，local Mattis 状態が得られない．

また，前章と本章の結果で大きく異なる点は，フラストレーションが最も少なくなる温度

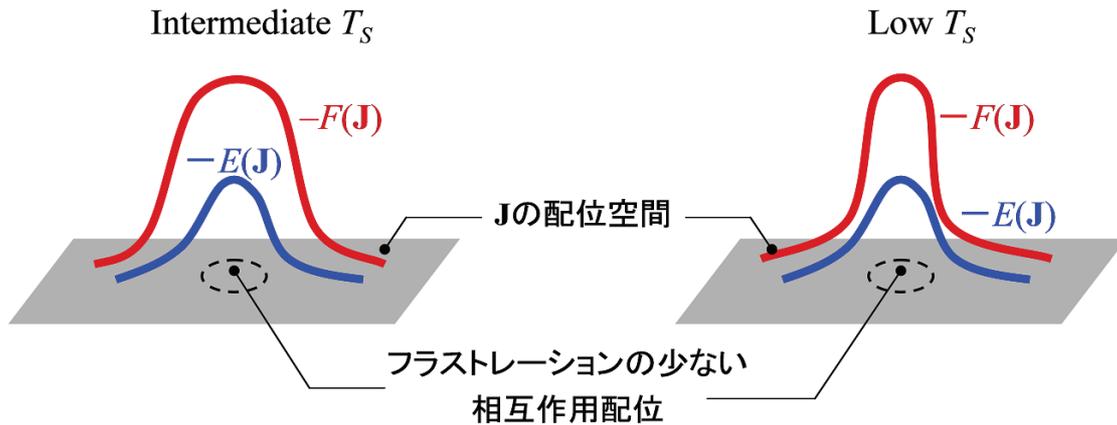


図 3.7 coupled mean-field model における適応度地形の  $T_S$  依存性を示す．温度が低くなるほど，エネルギーの低い（フラストレーションの少ない）相互作用の自由エネルギーは低くなる．

である．SHK model においては，中間温度領域  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  でフラストレーションが少ない相互作用が得られていた．一方の coupled mean-field model では，最もフラストレーションが少ない相互作用は強磁性相で得られた．強磁性相は低温のスピンの温度で実現することから，低温で最もフラストレーションが減少していたと言える．この温度依存性の違いは，SHK model の適応度地形と，coupled mean-field model の適応度地形を比較することで明らかになる．図 3.7 は，coupled mean-field model の適応度地形（自由エネルギーの  $J$  依存性）の  $T_S$  依存性を示している．SHK model の適応度地形（図 2.11）とは異なり，温度を下げるほど，フラストレーションの少ない相互作用の適応度が上がり，多く選択される．したがって温度を下げるほど，フラストレーションが少なくなることがわかる．

以上の考察から，partial anneal 系は，自由エネルギーのようにスピンのエネルギーに関する情報を含む関数を適応度とした場合と，SHK model のように，スピンに関するある配位が実現する確率を適応度とした場合で，相互作用の進化が大きく異なることが予想される．そして，その違いを理解することが，断熱的二温度系としての進化の理解につながると考える． $H_J$  が自由エネルギーではない場合の partial anneal 系の理論的な取り扱いと，スピングラス理論による説明は，未だ不十分である．partial anneal 系における相互作用の構成を理解するためには，解析可能なモデルを構成し， $H_J$  の依存性に関する枠組みを整える必要がある．この点については，次の章で詳しく議論する．

## 第 4 章

# partial anneal 系の進化におけるレプリカ対称性の破れ

本章では,  $H_J$  が自由エネルギーではない partial anneal 系のモデルを導入する. 適応度の形を適切に決めることで, レプリカ法による解析が可能であることを示す. 系の振る舞いは 3 つのスピングラス秩序変数により記述され, 適応に関する転移は, そのうちの 1 つの秩序変数に関する転移と一致する. そして, 相互作用温度が  $T_J < 1$  のとき, ある中間温度  $T_S$  において, レプリカ対称なスピングラス相が現れることを示す. さらにエネルギーを導出し, 相互作用をフラストレーション秩序変数を用いて特徴づけることで, SHK model における local Mattis 相が, レプリカ対称なスピングラス適応領域と対応することを示す.

### 4.1 導入

2 章で扱った SHK model, 3 章で扱った coupled mean-field model の結果から,  $H_J$  としてスピンに関する配位の実現頻度を選んだ場合と, 自由エネルギーを選んだ場合で, 相互作用の進化が大きく変化することがわかった. 特に, エネルギー (フラストレーション) のスピン温度依存性が異なり, SHK model では  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  という中間温度で最もエネルギー的に安定な適応状態が実現していたが, coupled mean-field model では, スピン温度が低くなるほど, 適応状態のエネルギーが低くなった. 3 章で示したように,  $H_J$  が自由エネルギーの partial anneal 系は, レプリカ法を用いて分配関数のモーメントを計算することで, 平衡状態の性質を把握することができた. しかし, 自由エネルギー以外の  $H_J$  を用いた partial anneal 系についての解析方法は, これまで示されていない. 進化の  $H_J$  依存性を明らかにするためには, 自由エネルギー以外の  $H_J$  を持つ解析可能なモデルを新たに導入する必要がある.

本章では,  $H_J$  が自由エネルギーではない partial anneal 系の 1 つで, 解析的に扱えるモデル

を導入する．このモデルは，SHK model における適応度の対数関数を，新たに適応度としており，SHK model と同じ適応度地形の温度依存性 (図 2.11) を示すと考えられるモデルである．次節以降で示すように，対数関数を用いて適応度を定義することで，レプリカ法を用いてモデルの性質を解析することができる．これを利用し， $H_J$  が自由エネルギーではない場合の partial anneal 系の熱力学的な性質について，スピングラス理論を用いて解析し，特に SHK model において数値的に示された結果との対応関係を明らかにする．温度に関するエネルギーの非単調性や，local Mattis 相が熱力学的に定義されるのかを議論する．

本章の構成は次の通りである．4.2 節では，本章で扱うモデルの説明を行う．4.3 節では，モデルをレプリカ法により解析する．特殊なレプリカ対称性を仮定することで複数の秩序変数を導入し，これら秩序変数の振る舞いを理解することで，モデルの性質が明らかになることを示す．4.4 節では，解析の結果を示し，スピンに関する相図をまとめる．SHK model のように，エネルギーが低い中間温度領域が実現し，この領域がレプリカ対称解が安定な領域として特徴付けられることを示す．また，相互作用の配位がどのように進化したかを見るために，フラストレーション秩序変数を書き下す．最後に 4.5 節で本章の議論をまとめる．

## 4.2 モデルの定義

本章で扱うモデルは，次のように定義される． $N$  個のスピンからなる全結合モデルを考える．スピン変数を  $S_i$  ( $i = 1, \dots, N$ )，相互作用変数を  $J_{ij}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ) として表す．スピン変数は  $\pm 1$  の二値をとり，相互作用行列は対称で，連続値をとる．スピンのハミルトニアン  $H_S$  は，次のように与えられる．

$$H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J}) = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} J_{ij} S_i S_j \quad (4.1)$$

また相互作用のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は，次のように定義される．

$$\mathcal{H}(\mathbf{J}; T_S) = -\log \Psi(\mathbf{J}; T_S) - T_J \log P_0(\mathbf{J}). \quad (4.2)$$

つまり  $H_J(\mathbf{J}; T_S) = -\log \Psi(\mathbf{J}; T_S)$  とした．相互作用のペア分布関数  $P_0(\mathbf{J})$  は，平均 0，分散 1 のガウス分布とする． $\Psi(\mathbf{J}; T_S)$  は次のように定義される関数である．

$$\Psi(\mathbf{J}; T_S) = \left\langle \delta\left(\mu, \frac{1}{t} \sum_{i \in t} S_i\right) \right\rangle \equiv \langle \psi(\mathbf{S}) \rangle \quad (4.3)$$

ここで  $\delta$  はクロネッカーデルタ， $\langle \dots \rangle$  はスピン変数に関する平均を意味する．以下では， $\psi$  を適応関数と呼ぶ．つまり  $\Psi(\mathbf{J})$  とは， $\mathbf{J}$  が与えるスピンの平衡状態において，ベクトル  $t$  で指定されるターゲットスピンの磁化が  $\mu$  になる確率である．以下では， $t = \{1, 2, \dots, t\}$  とし，これらのスピンの磁化が  $\mu$  となるスピン配位を適応配位と呼ぶ．このとき，相互作用の平

平衡状態は、定義より次の分布関数で与えられる．

$$P(\mathbf{J}) = \frac{1}{Z_J} P_0(\mathbf{J}) \Psi(\mathbf{J})^{\beta_J} \quad (4.4)$$

ここで  $Z_J$  は規格化定数であり、 $Z_J = [\langle \psi \rangle^{\beta_J}]_0$  となる． $[\cdots]_0$  はベア分布関数による  $J$  平均を意味する．相互作用の逆温度  $\beta_J$  は、相互作用の分布関数に対する適応度の寄与の強さを表しており、特に  $\beta_J = \infty$  では  $\langle \psi \rangle = \mu$  の相互作用のみが存在する．また  $\beta_J = 0$  で Sherrington-Kirkpatrick (SK) 模型に一致する． $\mu = 1$  とした場合、この模型は SHK model において  $\Psi$  に関する  $\beta_J$  次の寄与を見ていることになると考えられる．正確には、SHK model と本章で扱うモデルでは  $\Psi$  の関数型が異なるが、どちらもターゲットが揃う頻度を適応度としている．また対数関数は単調増加関数であるため、本章のモデルにおける適応度地形の定性的な性質も、SHK model と同じであると期待される．また、 $\mu = 0$  とすると、SK 模型と一致する．

### 4.3 レプリカ法による解析

$J$  の分布の規格化定数  $Z_J$  は、 $\beta_J$  を整数とすると、 $\beta_J$  個の実レプリカを用いて次のように表すことができる．

$$Z_J = [\langle \psi \rangle^{\beta_J}]_0 = \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J}) \frac{\text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^{\beta_J}} \prod_{\alpha=1}^{\beta_J} \psi_{\alpha} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} H_{\alpha})}{\text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^{\beta_J}} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} H_{\alpha})}, \quad (4.5)$$

ここで、 $\alpha$  番目のレプリカの適応関数とハミルトニアンを、それぞれ  $\psi_{\alpha} (\equiv \psi(\mathbf{S}^{\alpha}))$ 、 $H_{\alpha} (\equiv H(\mathbf{S}^{\alpha}|\mathbf{J}))$  と表記した．(4.5) はレプリカ法により、

$$Z_J = \lim_{n \rightarrow 0} \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J}) \frac{\text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H_{\alpha})}{\text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H_{\alpha})}, \quad (4.6)$$

として計算することが出来る．すなわち、 $\beta_J + 1$  番目から  $n$  番目のレプリカを新たに導入し、 $\beta_J$  を有限に止めたまま  $n \rightarrow 0$  極限をとることで、相互作用の分布関数の規格化定数が得られる．ここで、 $\beta_J$ 、 $n$  とも実数へと接続する．また、1 番から  $\beta_J$  番までのレプリカに対しては、項  $\psi_{\alpha}$  ( $\alpha = 1, \dots, \beta_J$ ) が存在しているが、 $\beta_J + 1$  番から  $n$  番のレプリカには存在していない点に注意が必要である．ベア分布関数に従って、相互作用に関する和をとると、次の表式が得られる．

$$Z_J = \lim_{n \rightarrow 0} \int d\mathbf{q} d\hat{\mathbf{q}} d\hat{\boldsymbol{\mu}} \exp \left[ N \left\{ - \sum_{\alpha < \beta}^n q_{\alpha\beta} \hat{q}_{\alpha\beta} - \frac{t}{N} \mu \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \hat{\mu}_{\alpha} + \frac{\beta_S^2 n}{4} + \frac{\beta_S^2}{2} \sum_{\alpha < \beta}^n q_{\alpha\beta}^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \left( 1 - \frac{t}{N} \right) \log \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \Xi + \frac{t}{N} \log \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \Xi_t \right\} \right] \quad (4.7)$$

ここで

$$\Xi = \sum_{\alpha < \beta}^n \hat{q}_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta, \quad \Xi_t = \Xi + \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \hat{\mu}_\alpha S^\alpha \quad (4.8)$$

とした．変数  $q = \{q_{\alpha\beta}\}$  ( $\alpha, \beta = 1, \dots, n$ ) はデルタ関数  $\delta(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)$  により導入され，またその共役変数  $\hat{q} = \{\hat{q}_{\alpha\beta}\}$  は，デルタ関数の積分表示により導入された．変数  $\hat{\mu}$  は，(4.4) の適応度を定義する  $\mu$  の共役変数である．

(4.7) においてスピンに関する和をとる際には， $t$  のオーダーにより場合分けを行う必要がある．ここでは  $t \sim O(N)$  の場合を扱う． $t \sim O(1)$  の場合の解析は，付録 C.1 に示す． $t \sim O(N)$  のとき， $\mu$  および  $\hat{\mu}$  の影響により，変数  $q$  と  $\hat{q}$  は SK 模型と異なる鞍点を持つ． $p \equiv t/N$  として  $p$  を定義し， $p$  を有限としたうえで熱力学的極限をとると， $q_{\alpha\beta}$  と  $\hat{q}_{\alpha\beta}$  の鞍点方程式は次のように与えられる．

$$q_{\alpha\beta} = (1-p) \langle\langle S^\alpha S^\beta \rangle\rangle + p \langle\langle S^\alpha S^\beta \rangle\rangle_t \quad (4.9)$$

$$\hat{q}_{\alpha\beta} = \beta_S^2 q_{\alpha\beta}, \quad (4.10)$$

ここで  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  と  $\langle\langle \dots \rangle\rangle_t$  は，(4.8) で与えられる有効ハミルトニアン  $\Xi$ ， $\Xi_t$  による平均

$$\langle\langle \dots \rangle\rangle = \frac{\text{Tr} \dots e^\Xi}{\text{Tr} e^\Xi}, \quad \langle\langle \dots \rangle\rangle_t = \frac{\text{Tr} \dots e^{\Xi_t}}{\text{Tr} e^{\Xi_t}} \quad (4.11)$$

を意味する．鞍点方程式 (4.9) の第一項と第二項は，それぞれ非ターゲットスピンとターゲットスピンに由来することが示される (付録 C.2)．そこで，(4.9) から，非ターゲット秩序変数  $q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  とターゲット秩序変数  $q_{\alpha\beta}^{\text{t}}$  を次のように定義しておく．

$$q_{\alpha\beta} = (1-p) q_{\alpha\beta}^{\text{nt}} + p q_{\alpha\beta}^{\text{t}}, \quad q_{\alpha\beta}^{\text{nt}} = \langle\langle S^\alpha S^\beta \rangle\rangle, \quad q_{\alpha\beta}^{\text{t}} = \langle\langle S^\alpha S^\beta \rangle\rangle_t \quad (4.12)$$

また共役変数  $\hat{\mu}_\alpha$  は，次の鞍点方程式から陰的に求まる．

$$\mu = \langle\langle S^\alpha \rangle\rangle_t, \quad \alpha \leq \beta_J \quad (4.13)$$

左辺の  $\mu$  は適応度の定義から与えられ，右辺は  $\hat{\mu}$  の関数である．

### レプリカ対称性の仮定

有効ハミルトニアン (4.8) から明らかのように，1 番から  $\beta_J$  番のレプリカについては，項  $\psi_\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, \beta_J$ ) が存在している．一方， $\beta_J + 1$  番から  $n$  番までのレプリカには存在していない．このようなレプリカ間の非同一性を考慮し，次のようにレプリカ対称性を仮定する (RS 仮定)．

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} q_1, & \text{if } \alpha \leq \beta_J, \beta \leq \beta_J \\ q_2, & \text{if } \alpha \leq \beta_J, \beta > \beta_J \text{ or } \alpha > \beta_J, \beta \leq \beta_J \\ q_3, & \text{if } \alpha > \beta_J, \beta > \beta_J \end{cases} \quad (4.14)$$

$$Q = \begin{pmatrix} \xrightarrow{\beta_J} & & \xleftarrow{n - \beta_J} \\ q_1 & & q_2 \\ \hline q_2 & & q_3 \end{pmatrix}$$

図 4.1  $Q$  行列に対して, 3 つの秩序変数を用いたレプリカ対称性を仮定する.  $Q$  行列は  $n \times n$  行列で, 各成分は  $q_{\alpha\beta}$  である.

図 4.1 に, レプリカ対称仮定における  $Q$  行列 ( $q_{\alpha\beta}$  行列) を模式的に示す. このとき,  $q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$ ,  $q_{\alpha\beta}^{\text{t}}$  に対してもレプリカ対称性が仮定されたことになり,  $q_i = (1-p)q_i^{\text{nt}} + pq_i^{\text{t}}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) である. また, 補助場  $\hat{\mu}_\alpha$  については, どのような  $\alpha \leq \beta_J$  についても  $\hat{\mu}_\alpha = \hat{\mu}$  とする.

この RS 仮定のもとで, スピングラス秩序変数は次のように求められる.

$$q_1 = (1-p)\langle\langle \tanh^2(\sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh^2(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle\rangle_t \quad (4.15)$$

$$q_2 = (1-p)\langle\langle \tanh(\sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh W(u, v) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh W(u, v) \rangle\rangle_t \quad (4.16)$$

$$q_3 = (1-p)\langle\langle \tanh^2 W(u, v) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh^2 W(u, v) \rangle\rangle_t, \quad (4.17)$$

したがって, 非ターゲット, ターゲット秩序変数は次のように与えられる.

$$q_1^{\text{nt}} = \langle\langle \tanh^2(\sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle\rangle, \quad q_1^{\text{t}} = \langle\langle \tanh^2(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle\rangle_t \quad (4.18)$$

$$q_2^{\text{nt}} = \langle\langle \tanh(\sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh W(u, v) \rangle\rangle, \quad q_2^{\text{t}} = \langle\langle \tanh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh W(u, v) \rangle\rangle_t \quad (4.19)$$

$$q_3^{\text{nt}} = \langle\langle \tanh^2 W(u, v) \rangle\rangle, \quad q_3^{\text{t}} = \langle\langle \tanh^2 W(u, v) \rangle\rangle_t \quad (4.20)$$

ここで

$$W(u, v) = \sqrt{\frac{\hat{q}_2^2}{\hat{q}_1}}u + \sqrt{\frac{\hat{q}_1\hat{q}_3 - \hat{q}_2^2}{\hat{q}_1}}v \quad (4.21)$$

であり<sup>\*1</sup>, また有効ハミルトニアンによる平均  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  と  $\langle\langle \dots \rangle\rangle_t$  は, それぞれ次のように与

えられる確率分布  $P(u, v)$  と  $P_t(u, v)$  に従う変数,  $u$  と  $v$  による積分に置き換えられる.

$$P(u, v) = \frac{1}{Z_{u,v}} e^{-\frac{1}{2}(u^2+v^2)} \left( \frac{\cosh(\sqrt{\hat{q}_1}u)}{\cosh W(u, v)} \right)^{\beta_J} \quad (4.22)$$

$$P_t(u, v) = \frac{1}{Z_{u,v}^t} e^{-\frac{1}{2}(u^2+v^2)} \left( \frac{\cosh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u)}{\cosh W(u, v)} \right)^{\beta_J} \quad (4.23)$$

$Z_{u,v}$  と  $Z_{u,v}^t$  はそれぞれの分布の規格化定数である. ここまでの解析の詳細は, 付録 C.3 に示す.

また,  $\hat{\mu}$  を決める鞍点方程式は次のように求められる.

$$\mu = \langle \langle \tanh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle \rangle_t, \quad (4.24)$$

これらの秩序変数を用いると, 1 スピンあたりのレプリカ対称自由エネルギーは, 次のように与えられる.

$$\begin{aligned} f &\equiv - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_J \\ &= \frac{\beta_S^2}{2} \left( \frac{\beta_J(\beta_J - 1)}{2} q_1^2 - \beta_J^2 q_2^2 + \frac{\beta_J(\beta_J + 1)}{2} q_3^2 \right) + pm\beta_J\hat{\mu} + \frac{\beta_J\beta_S^2}{2}(q_1 - q_3) \\ &\quad - (1 - p) \log Z_{u,v} - p \log Z_{u,v}^t. \end{aligned} \quad (4.25)$$

### 秩序変数の物理的意味

ここで, 解析において導入された, 三つの秩序変数  $q_1, q_2, q_3$  の物理的な意味について考えてみる. 相互作用温度  $T_J$  における分布関数  $P(J)$  による相互作用平均を  $[\dots]_{\beta_J}$  と表すと, 3つの秩序変数は次のように表されることがわかる (付録 C.4).

$$q_1 = \frac{1}{N} \sum_i \left[ \frac{\langle \psi_1 \psi_2 S_i^1 S_i^2 \rangle_2}{\langle \psi_1 \rangle \langle \psi_2 \rangle} \right]_{\beta_J} \quad (4.26)$$

$$q_2 = \frac{1}{N} \sum_i \left[ \frac{\langle \psi_1 S_i^1 S_i^2 \rangle_2}{\langle \psi_1 \rangle} \right]_{\beta_J} \quad (4.27)$$

$$q_3 = \frac{1}{N} \sum_i [\langle S_i^1 S_i^2 \rangle_2]_{\beta_J}, \quad (4.28)$$

ここで  $\langle \dots \rangle_2$  は, 二つの実レプリカによるスピン平均

$$\langle \dots \rangle_2 = \frac{\text{Tr}_{S^1, S^2} \dots \exp(-\beta_S(H_1 + H_2))}{\text{Tr}_{S^1, S^2} \exp(-\beta_S(H_1 + H_2))} \quad (4.29)$$

\*1 ここで  $q_2 \leq \sqrt{q_1 q_3}$  を仮定して, 鞍点方程式を導出している.  $q_2 > \sqrt{q_1 q_3}$  の解は, 自由エネルギーの大小関係から排除される.

を意味する．したがって，これら秩序変数は二つの実レプリカを用いて，数値的に観測することも出来る．

関数  $\psi$  は，ターゲット磁化が  $\mu$  の場合だけ 1，その他の場合は 0 をとるので，二つの実レプリカが共に適応配位をとる場合の配位の重なり方が  $q_1$  に対応している．そして  $q_2$  は，二つの実レプリカのうち，片方のレプリカにおいて適応配位が実現している場合の，配位の重なり方を意味している．もう片方の実レプリカは，適応配位であるかどうかは問わない． $q_3$  は，適応配位であるかどうかに関係なく，二つの実レプリカの配位の重なりを意味している．

## 4.4 結果

### 4.4.1 相図

以下では  $\mu = 1$  の結果について示す．つまり，ターゲットの磁化が 1 と一致する確率が高い相互作用ほど，進化を通して獲得されやすい．そして， $\mu$  に対する補助変数  $\hat{\mu}$  は，(4.24) において  $\mu = 1$  を与えるために十分大きい値で固定させる．まずは，スピングラス転移温度を求める．秩序変数の中で，転移を起こすものは  $q_2$  と  $q_3$  である． $q_1$  に対応する 1 番から  $\beta_J$  番のレプリカには，適応関数が磁場として存在するため， $q_1$  は転移を示さない．この二つの秩序変数の転移温度を，それぞれ  $T_S^{q_2}$ ， $T_S^{q_3}$  と表記する．秩序変数の表式 (4.19)，(4.20) の右辺を秩序変数で展開すると，転移温度は次のように求められる．

$$T_S^{q_2} = \begin{cases} \sqrt{1 - (1 - \beta_J)q_1 - (1 + \beta_J)q_3 + (1 - \beta_J^2)\{(1 - p)q_1^{nt}q_3^{nt} + pq_1^tq_3^t\}} & \text{for } T_J > 1 \\ \sqrt{1 + (\beta_J - 1)q_1} & \text{for } T_J \leq 1 \end{cases} \quad (4.30)$$

$$T_S^{q_3} = \begin{cases} 1 & \text{for } T_J > 1 \\ \sqrt{1 + (\beta_J - 1)q_1} & \text{for } T_J \leq 1 \end{cases} \quad (4.31)$$

転移温度は  $T_J$  により異なり， $T_J > 1$  では  $q_3$  の転移温度は  $T_J$  に依存せず常に 1 であるが， $q_2$  の転移温度は  $T_J$  および  $q_1$ ， $q_3$  により決まる．一方  $T_J \leq 1$  では， $q_2$ ， $q_3$  は同じ温度で転移を起こし，特に  $T_J = 1$  での転移温度は  $T_S^{q_2} = T_S^{q_3} = 1$  である．また  $T_J = 1$  では，どのような  $p$ ， $\mu$ ， $T_S$  においても，秩序変数  $q_2$  と  $q_3$  は一致することが示され，次のように与えられる<sup>\*2</sup>．

$$q_2 = q_3 = \int Du \tanh^2(\sqrt{\hat{q}}u) \equiv q, \quad (4.32)$$

ここで  $\hat{q} = \hat{q}_2 = \hat{q}_3 = \beta_S^2 q$  である．この  $q$  は，SK model のクエンチ系におけるスピングラス秩序変数と一致する．

<sup>\*2</sup>  $q_2$  と  $q_3$  の鞍点方程式 (4.16) と (4.17) は異なる形をしているが， $T_J = 1$  のときは，積分変数に関して偶関数部分が一致する．

また，秩序変数に加えて，ターゲット磁化  $m_t$  を次のように定義する．

$$m_t = \left[ \left\langle \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t S_i \right\rangle \right]_{\beta_J} \quad (4.33)$$

ターゲット磁化は，適応関数の期待値  $[\langle \psi(S) \rangle]_{\beta_J}$  よりも扱いやすく，また  $m_t = 0$  であるとき  $[\langle \psi(S) \rangle]_{\beta_J} = 0$  であることが言える．したがって，ここでは  $m_t$  の値が有限であれば適応相であると見なす．ここで定義された  $m_t$  は，適応度を定義する  $\mu (= 1)$  とは異なるものである\*<sup>3</sup>．ターゲット磁化は，レプリカ法を用いると次のように表される．

$$\begin{aligned} m_t &= \frac{1}{Z_J} \left[ \frac{\text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^{\beta_J+1}} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} m_t^{\beta_J+1} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^{\beta_J+1} H_\alpha)}{\text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^{\beta_J+1}} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^{\beta_J+1} H_\alpha)} \right]_0 \\ &= \frac{1}{Z_J} \lim_{n \rightarrow 0} \left[ \text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} m_t^{\beta_J+1} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H_\alpha) \right]_0 \\ &= \frac{1}{Z_J} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n - \beta_J} \sum_{\gamma=\beta_J+1}^n \left[ \text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} m_t^\gamma \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H_\alpha) \right]_0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

つまり，ターゲット磁化は， $\alpha > \beta_J$  番目のレプリカにおける磁化の，レプリカ平均に対応する\*<sup>4</sup>．そこで， $\alpha > \beta_J$  番目のレプリカの磁化に共役な変数  $h$  を導入すると，分配関数

$$\tilde{Z}_J(h) \equiv \left[ \text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} \exp\left\{-\beta_S \left( \sum_{\alpha=1}^n H_\alpha - h \sum_{\alpha=\beta_J+1}^n \sum_{i \in t} S_i^\alpha \right)\right\} \right]_0, \quad (4.35)$$

から，ターゲット磁化は次のように求められる．

$$\begin{aligned} m_t &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{t(n - \beta_J)\beta_S} \frac{\partial}{\partial h} \log \tilde{Z}_J(h) \Big|_{h=0} \\ &= \langle \langle \tanh W(u, v) \rangle \rangle_t. \end{aligned} \quad (4.36)$$

(4.36) より， $q_2 = 0$  のときターゲット磁化  $m_t$  は 0 であることがわかる．図 4.2 に，例として  $p = 0.2$ ， $T_J = 1.25$  における秩序変数とターゲット磁化の  $T_S$  依存性を示す．この図から明らかのように，ターゲット磁化が有限の値を持ち始める温度は， $q_2$  の転移点と一致する．その他の  $T_J$  における秩序変数とターゲット磁化の振る舞いは，付録 C.5 に示す．

ここまでの議論はレプリカ対称性を仮定している．レプリカ対称解が安定であるための条

\*<sup>3</sup> 磁化が  $\mu$  になる確率が高い相互作用をサンプリングするが，一般にはターゲット磁化は  $\mu$  と一致しない．

\*<sup>4</sup> ターゲット磁化に限らず，実際の物理量は  $\alpha > \beta_J$  番目のレプリカにおける物理量のレプリカ平均であることがわかる．一方，適応度を定義する  $\mu$  は， $\alpha \leq \beta_J$  番目のレプリカにおけるターゲット磁化の平均であることが示される．

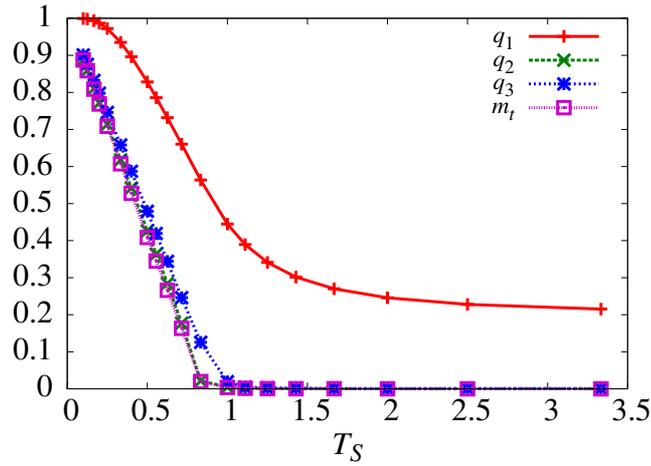


図 4.2  $p = 0.2$ ,  $T_J = 1.25$  における, スピングラス秩序変数  $q_1$ ,  $q_2$ ,  $q_3$  とターゲット磁化  $m_t$  の温度依存性を示す.

件, AT 安定性条件は,  $q_1$ ,  $q_2$ ,  $q_3$  に対応して 3 つ与えられる.

$$\text{AT}_1 \equiv 1 - \beta_S^2(1 - 2q_1 + r_{11}) > 0 \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} \text{AT}_2 \equiv & \left\{ 1 - \beta_S^2 \left( 1 - (\beta_J + 4)q_3 + (\beta_J + 3)r_{33} \right) \right\} \\ & \times \left\{ \beta_J + 1 - \beta_S^2 \left( (\beta_J + 1)(1 - q_3) + (\beta_J - 1)(q_1 - r_{22}) \right) \right\} \\ & + 2\beta_J(\beta_J + 2)\beta_S^4(q_2 - r_{23})^2 > 0 \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\text{AT}_3 \equiv 1 - \beta_S^2(1 - 2q_3 + r_{33}) > 0 \quad (4.39)$$

ここで,

$$r_{11} = (1 - p)\langle\langle \tanh^4(\sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh^4(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \rangle\rangle_t \quad (4.40)$$

$$r_{22} = (1 - p)\langle\langle \tanh^2(\sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh^2 W(u, v) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh^2(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh^2 W(u, v) \rangle\rangle_t \quad (4.41)$$

$$r_{23} = (1 - p)\langle\langle \tanh(\sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh^3 W(u, v) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1}u) \tanh^3 W(u, v) \rangle\rangle_t \quad (4.42)$$

$$r_{33} = (1 - p)\langle\langle \tanh^4 W(u, v) \rangle\rangle + p\langle\langle \tanh^4 W(u, v) \rangle\rangle_t \quad (4.43)$$

とした. AT 安定性条件の導出は, 付録 C.6 に示す.

以上の結果を合わせ,  $p = 0.01$  と  $p = 0.2$  における相図を図 4.3 に示す<sup>\*5</sup>. 適応相を特徴付けるターゲット磁化は,  $q_2$  のスピングラス転移温度以下で有限の値を持つ. 適応相の中でも, RS Adaptation は, レプリカ対称解が安定な適応相, RSB Adaptation はレプリカ対称解が不安定な適応相を意味する.  $T_J > 1$  では,  $p = 0.01, 0.2$  とも,  $q_3$  が  $T_S = 1$  で有限の値を持

<sup>\*5</sup>  $p = 0.2$  は, 2 章で扱った SHK model において, 主に調べていたターゲットサイズと一致している.

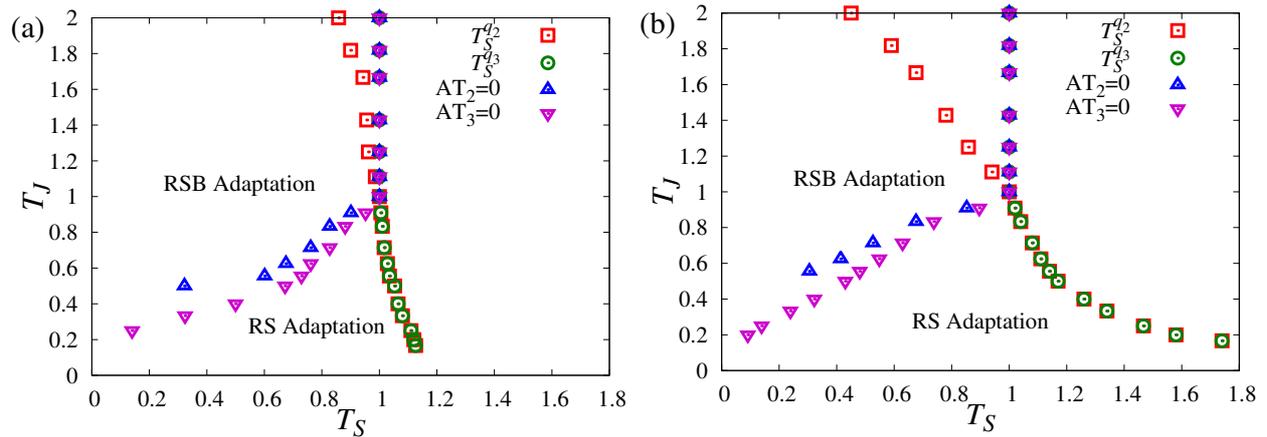


図 4.3 (a)  $p = 0.01$  と (b)  $p = 0.2$  における,  $T_S - T_J$  平面上での相図を示す.  $\square$  は  $q_2$  のスピングラス転移温度,  $\circ$  は  $q_3$  のスピングラス転移温度,  $\triangle$  は二つ目の AT 安定性条件が破れる温度,  $\nabla$  は 3 つ目の AT 安定性条件が破れる温度を示す. この二つの  $p$  においては, 1 つ目の AT 安定性条件は破れない. また適応相は  $q_2$  が有限の値を持つ領域であり, レプリカ対称な適応相を RS Adaptation, レプリカ対称性が破れた適応相を RSB Adaptation としている.  $p \rightarrow 0$  で, 全ての線は  $T_S = 1$  で重なる.

ち始める. このとき同時に, 2 つの AT 条件  $AT_2, AT_3$  が破れ, レプリカ対称解が安定ではなくなるのがわかる. すなわち,  $q_2$  に関しては, 転移が起こる前にレプリカ対称性が破れているため,  $T_J > 1$  における適応相は, 常に AT 不安定である. この  $T_J > 1$  における  $q_2$  の転移温度は,  $p$  が減少するほど  $T_S = 1$  に近づき,  $p = 0$  で  $T_S = 1$  に一致する. 一方,  $T_J < 1$  では,  $q_2$  と  $q_3$  の転移は同じ温度で起こるが, AT 安定性条件  $AT_2$  と  $AT_3$  の破れる温度が異なる.  $T_J < 1$  で  $T_S$  を減少させると, スピングラス転移が起こった後まず  $AT_3$  が負になり, さらに低温で  $AT_2$  が負になる. したがって, スピングラス転移温度と,  $AT_3$  が破れる温度の間の領域では, レプリカ対称なスピングラス相 (適応相) が得られることがわかる. この温度領域を新たに  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  として定義しておく.  $T_S^{\text{RSB}}$  は  $AT_3$  が破れる温度,  $T_S^{\text{RS}}$  は  $q_2, q_3$  の転移点である ( $T_S^{\text{RS}} = T_S^{q_2} = T_S^{q_3}$  for  $T_J < 1$ ). この RS 適応相は,  $p$  が減少するほど狭くなり,  $p = 0$  では,  $T_S^{\text{RSB}}, T_S^{\text{RS}}$  とも  $T_S = 1$  になる\*6.

中間温度領域  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  は, SHK model における, local Mattis 状態が得られる中間温度領域  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  との対応が期待される. local Mattis 状態とは, 高い適応度を持ち, フラストレーションが少なく, ファンネル型の地形を持つ相互作用であった (表 2.1). そして,  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  には, エネルギーの極小点が存在していた. SHK model における中間温度領域を, レプリカ対称なスピングラス相であると解釈すると, 地形に関する議論については整合性がとれる. つまり, レプリカ対称なスピングラス相とは, 大域的な安定状態が存在している状態であり, これは local Mattis 状態と同じ性質である. 以下の節では, エネルギーとフラストレーションの振る舞いを明らかにし, local Mattis 状態がレプリカ対称スピ

\*6  $p = 0$  では,  $q_1 = q_2 = q_3$  となり, 系の振る舞いは  $T_J$  に依存せず常に SK model と一致する.

グラス相として熱力学的に定義できるのかを考える．

#### 4.4.2 エネルギーの極小点

次のように定義される 1 スピンあたりの平均エネルギーを，レプリカ対称仮定の下で導出する．

$$e = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N^{3/2}} \sum_{i < j} [J_{ij} \langle S_i S_j \rangle]_{\beta_J} \quad (4.44)$$

(4.44) に対し，ターゲット磁化を導出した際の議論を適用する．つまり，エネルギーが次のように表されることを利用する．

$$\begin{aligned} e &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} [\langle H(\mathbf{S}|\mathbf{J}) \rangle]_{\beta_J} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{NZ_J} [\langle \psi(\mathbf{S}) \rangle^{\beta_J} \langle H(\mathbf{S}|\mathbf{J}) \rangle]_0 \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{NZ_J} \sum_{\gamma=\beta_J+1}^n \left[ \text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} H_\gamma \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H_\alpha) \right]_0 \end{aligned}$$

このように  $\alpha > \beta_J$  番目のレプリカの平均エネルギーが，実際のエネルギーに対応する．このレプリカ平均されたエネルギーを求めるために， $\alpha > \beta_J$  番目のレプリカに対して共役な外場を持つ分配関数を導入する．

$$\tilde{Z}_J(h_1, h_2) = \left[ \text{Tr}_{\mathbf{S}^1 \dots \mathbf{S}^n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} \exp \left( -\beta_S \left( \sum_{\alpha=1}^n H_\alpha + h_1 \sum_{\alpha=\beta_J+1}^n H_\alpha + h_2 \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} H_\alpha \right) \right) \right]_0. \quad (4.45)$$

これを用いると，エネルギーは次のように求められる\*7．

$$e = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta_S(n - \beta_J)} \frac{\partial}{\partial h_1} \log \tilde{Z}_J(h_1, 0) \Big|_{h_1=0} = -\frac{\beta_S}{2} \{ \beta_J(q_2^2 - q_3^2) + (1 - q_3^2) \}. \quad (4.46)$$

$\beta_J = 0$  極限では， $q_3$  はクエンチ系の SK モデルのスピングラス秩序変数  $q$  と一致し，エネルギーの表式はクエンチ系と一致する．また， $\beta_J = 1$  においても， $q_2 = q_3 = q$  であるため，クエンチ系のレプリカ対称エネルギーと一致し，特に  $T_S = 0$  での値は  $-0.798$  になる [Mézard et al. (1987)] ．

図 4.4 に， $T_J < 1$  におけるエネルギーの振る舞いの典型例として， $T_J = 0.2$  における結果を示す．全ての  $p$  において，エネルギーの極小点が存在していることがわかる．この極小点は，いずれも RS 適応相 ( $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$ ) に存在している．これは，SHK model におい

\*7 この方法のほかに，Bray-Moore relation などと呼ばれる，相互作用の物理量を，部分積分を用いてスピンの物理量平均として求める方法を適用して，エネルギーを求めることもできる [Guerra (1996)] ．

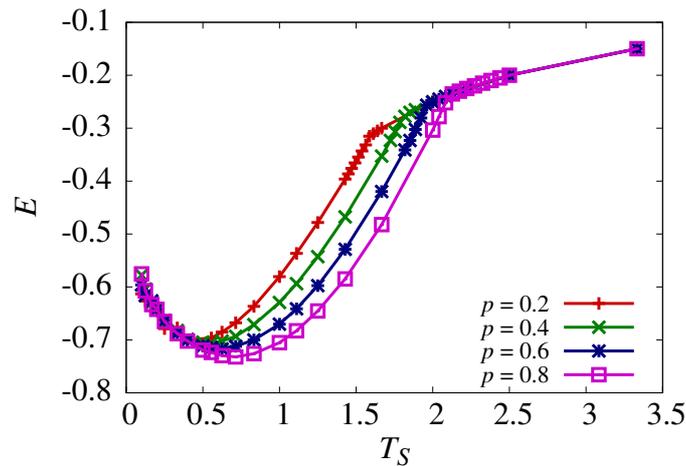


図 4.4 レプリカ対称解に基づくエネルギーの温度依存性． $T_J = 0.2$  とし， $p = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  の結果を示す．

て中間温度の local Mattis 相にエネルギー極小点が存在していたことと対応すると考えられる．また，エネルギーの極小点が得られる理由は，レプリカ対称性を仮定した秩序変数の振る舞いから明らかになる．十分低温の  $T_S$  で， $q_2, q_3$  とともに線形的に 1 に近づく場合，絶対零度のレプリカ対称エネルギー (4.46) は有限の値に収束する．一方， $q_2, q_3$  が指数関数的に 1 に近づく場合，レプリカ対称エネルギーの絶対零度における値は 0 になる．有限の  $T_S$  において，エネルギーは負の値をとるため，絶対零度において 0 に収束することは，ある温度でエネルギーの極小点が存在することを意味する．クエンチ系では，低温においてスピングラス秩序変数は線形的に振舞うが，ここでは partial annealing により，秩序変数は指数関数的に振舞う．このようなクロスオーバーが，エネルギーの極小点をもたらしていたことが明らかになった．したがって，エネルギーの極小点自身は，スピングラス転移やレプリカ対称性の破れなどの熱力学的な意味を持つものではないことがわかる．

#### 4.4.3 フラストレーション秩序変数

最後に，相互作用に関する秩序変数を導入し，partial annealing により，相互作用がどのように変化したかを議論する．前節で見たように，エネルギー極小点が存在していることから，フラストレーション秩序変数を用いて相互作用を特徴づける．ただし SHK model における議論と同様に，ターゲットスピンに関する条件付きの，フラストレーション秩序変数を導入する．このモデルでは，相互作用のベア分布関数をガウス分布で与えたため，相互作用に関する物理量は，スピンに関する物理量に置き換えることができる．これを利用し，レプリカ対称性が正しい領域で，相互作用に関する秩序変数の振る舞いを観察する．ここで導入する相互作用の秩序変数について，詳しい導出は付録 C.7 で説明する．

まず，ターゲットスピン間の相互作用を特徴付ける． $\mu = 1$ ，つまりターゲットスピンの揃えば適応，という状況を考えているので，ターゲットスピン間相互作用が強磁性相互作用であれば，適応配位はエネルギー的に安定である．そこで， $\Phi_1$  をターゲットスピン間相互作用の平均として定義する．

$$\Phi_1 \equiv \frac{1}{{}_t C_2} \sum_{i < j \leq t} [J_{ij}]_{\beta_J} \quad (4.47)$$

${}_t C_2$  は，ターゲット間相互作用の本数である． $\Phi_1 = 0$  であれば，ターゲットスピン間相互作用はランダムに分布しており， $\Phi_1 > 0$  であれば，強磁性相互作用が支配的である． $\Phi_1$  は， $\mu (= 1)$  とターゲット磁化  $m_t$  を用いて，次のように表される．

$$\Phi_1^{\text{RS}} = \frac{\beta_S \beta_J}{\sqrt{N}} (\mu^2 - m_t^2) \quad (4.48)$$

添え字の RS は，レプリカ対称な領域で正しい解であるという意味を表す．係数  $N^{-1/2}$  は，partial annealing により，相互作用のオーダーが  $O(N^{-1/2})$  に変化したことを示す．

また，ターゲットスピン間以外の相互作用についても，平均値を求めることができる．ターゲット - 非ターゲットスピン間相互作用，非ターゲット内相互作用の平均値は，それぞれ次のように与えられる．

$$\frac{1}{t(N-t)} \sum_{i=1}^t \sum_{j=t+1}^N [J_{ij}]_{\beta_J} = \frac{\beta_S \beta_J}{\sqrt{N}} (\mu \mu_{nt} - m_t m_{nt}) = 0 \quad (4.49)$$

$$\frac{1}{{}_{N-t} C_2} \sum_{t < i < j} [J_{ij}]_{\beta_J} = \frac{\beta_S \beta_J}{\sqrt{N}} (\mu_{nt}^2 - m_{nt}^2) = 0 \quad (4.50)$$

ここで

$$\mu_{nt} = \langle \langle \tanh(\sqrt{\hat{q}} u) \rangle \rangle \quad (4.51)$$

$$m_{nt} = \langle \langle \tanh W(u, v) \rangle \rangle \quad (4.52)$$

とした． $\mu_{nt}$ ， $m_{nt}$  はどちらも常に 0 である．よって，ターゲット - 非ターゲット間相互作用と，非ターゲット内相互作用には，どのようなパターンも埋め込まれていないことがわかる．

次に，ターゲット - 非ターゲット間相互作用に対して，フラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  を導入する．

$$\Phi_2 \equiv \frac{1}{{}_t C_2 (N-t)} \sum_{i < j \leq t} \sum_{k=t+1}^N [J_{ij} J_{jk}]_{\beta_J} \quad (4.53)$$

ターゲットスピン  $S_i$ ， $S_j$  が揃っているとき，非ターゲットスピン  $S_k$  との相互作用が  $J_{ij} J_{jk} > 0$  を満たしていれば，ターゲット配位のエネルギーは低くなる． $\Phi_2 > 0$  であれば，ターゲット - 非ターゲットスピン間相互作用からフラストレーションが減っていることに

なる．相互作用がランダムに分布していれば， $\Phi_2 = 0$  である．スピングラス秩序変数を用いて， $\Phi_2^{\text{RS}}$  は次のように与えられる．

$$\Phi_2^{\text{RS}} = \frac{\beta_S^2 \beta_J}{N} \{ (\beta_J - 1) q_1^{nt} \mu^2 - 2\beta_J q_2^{nt} \mu m_t + (\beta_J + 1) q_3^{nt} m_t^2 + (\mu^2 - m_t^2) \} \quad (4.54)$$

最後に，非ターゲット間相互作用に対して，フラストレーション秩序変数  $\Phi_3$  を定義する\*8．

$$\Phi_3 \equiv \frac{1}{N-t} C_2 t \sum_{i=1}^t \sum_{t < j < k} [J_{ij} J_{jk} J_{ki}]_{\beta_J} \quad (4.55)$$

これは，2本のターゲット - 非ターゲット間相互作用と，1本の非ターゲット内相互作用からなる相互作用ループの平均値である． $\Phi_3 > 0$  であれば，非ターゲット部分の相互作用も，ターゲット配位のエネルギーを減少させる．RS 仮定の下で， $\Phi_3$  は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} \Phi_3^{\text{RS}} = \frac{\beta_S^3 \beta_J}{N^{3/2}} \{ & (\beta_J - 1)(\beta_J - 2) q_1^{nt^2} q_1^t - \beta_J(\beta_J - 1)(2q_1^{nt} q_2^{nt} q_2^t + q_2^{nt^2} q_1^t) \\ & + \beta_J(\beta_J + 1)(q_2^{nt^2} q_3^{nt} + 2q_3^{nt} q_2^{nt} q_2^t) - (\beta_J + 1)(\beta_J + 2) q_3^{nt^2} q_3^t \\ & + (\beta_J - 1)(q_1^{nt^2} + 2q_1^{nt} q_1^t) - 2\beta_J(q_2^{nt^2} + 2q_2^{nt} q_2^t) + (\beta_J + 1)(q_3^{nt^2} + 2q_3^{nt} q_3^t) \} \end{aligned} \quad (4.56)$$

図 4.5 に， $T_J = 0.2$  における (a)  $\Phi_1$ ，(b)  $\Phi_2$ ，(c)  $\Phi_3$  の温度依存性を示す．それぞれ縦軸を  $\sqrt{N}$  倍， $N$  倍， $N^{3/2}$  倍しており， $p = 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  における結果を示している．全ての  $p$  において，スピングラス転移点より高温では， $\Phi_1$  は同じ温度依存性を示す．そして  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  ともスピングラス転移点でピークを持ち，それより低温では温度を下げるにつれて減少する．したがって，スピングラス転移点周辺の間温度領域が，最もフラストレーションの少ない領域であり，一方で低温ではフラストレーションが多く存在していることがわかる．この結果は，前節のエネルギーの振る舞いとも矛盾しない．

このモデルでは，相互作用を連続変数としているため， $\Phi_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) の最大値は 1 ではない．したがって，2章のように， $\Phi_2 = 1$  のプラトーをもとに local Mattis 状態を定義することはできない．しかし，地形，フラストレーション，エネルギーについての状況証拠から，SHK model における local Mattis 相は，本章のモデルにおけるレプリカ対称なスピングラス相  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  と対応すると考えられる．SHK model と異なる点は，フラストレーションの  $p$  依存性である．この模型では， $p$  (ターゲット数) が増加するほど， $\Phi_i$  の最大値は減少する．したがって，SHK model で見られたような，local Mattis 状態を得るために最適なターゲットサイズが存在しない．この違いの原因としては様々な可能性が考えられるが，次

\*8  $\Phi_1, \Phi_2$  の定義は 2 章と同じであるが， $\Phi_3$  の定義は異なる．

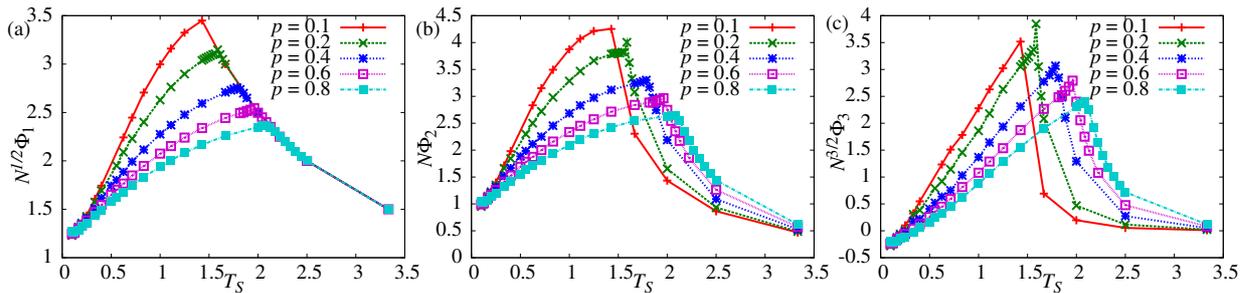


図 4.5  $T_J = 0.2$  における，フラストレーション秩序変数の温度依存性を示す．(a) は  $\sqrt{N}\Phi_1$ ，(b) は  $N\Phi_2$ ，(c) は  $N^{3/2}\Phi_3$  の温度依存性である． $p = 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  全てにおいて，スピングラス転移点でピークを持ち，低温では温度に対して単調減少である．

の二つの可能性については検証することが出来る．まず一つ目は，SHK model において見られていた結果は，有限サイズ効果によるものであるという可能性である．これを検証するためには，SHK model において，より大きなサイズに対して数値実験を行い，local Mattis 状態の得られる領域のサイズ依存性を観察しなければならない．そして二つ目は，相互作用の違いによる可能性である．SHK model では，相互作用のペア分布関数が， $\pm 1$  の二値に関する二項分布であったため，local Mattis 状態が現れる温度領域で示量性が破れていた．しかし本章のモデルではペア分布関数はガウス分布であり，示量性は常に保たれている．よって，SHK model の“転移”温度が示量性の破綻の影響を受けて，ターゲット数により非単調に変化していた可能性がある．これを検証するためには，本章のモデルについて，ペア分布関数を二項分布にしたうえで，数値実験を行わなくてはならない．また，このモデルでは， $H_J$  を自由エネルギーとした coupled mean-field model とは異なり，低温側でフラストレーションが増加するという現象が起きていることがわかる．図 3.5 と図 4.5 を比較すると，スピングラス転移点より低温側における振る舞いの違いは明らかである．

## 4.5 まとめ

本章では，自由エネルギー以外の  $H_J$  を持ち，レプリカ法により解析できる partial anneal 系であるモデルを導入した．SHK model と同様に， $t$  個のターゲットスピンから決まる適応度に従い，相互作用を進化させた．相互作用の適応度は，相互作用配位  $J$  と温度  $T_S$  で決まるスピンの平衡状態において，ターゲット配位が揃う確率の対数として与えた．このモデルは，SHK model において，適応度の  $\beta_J$  次の寄与を取り出したモデルということができる．

レプリカ対称性を仮定した解析において， $q_1, q_2, q_3$  という 3 つのスピングラス秩序変数を導入した．そして，適応相を特徴付けるターゲット磁化  $m_t$  を導入した．これらの秩序変数を観察した結果， $T_J = 1$  を境に，系の性質が大きく変化することが明らかになった． $T_J > 1$  では， $q_3$  の転移温度  $T_S^{q_3}$  は常に  $q_2$  の転移温度  $T_S^{q_2}$  より高温であったが， $T_J < 1$  では二つの転移温度は一致した．また， $T_J$  に依存せずに， $q_2$  と  $m_t$  の転移点は常に一致することが明らか

になった．したがって，適応相は  $q_2$  に関するスピングラス相であった．以上のレプリカ対称自由エネルギーに基づく解析が正しい領域を特定するため，3 つの AT 安定性条件を書き下した．その結果， $T_J < 1$  では， $T_S$  中間温度に，レプリカ対称なスピングラス相（適応相）が存在していることがわかった．この温度領域を  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  として定義した．レプリカ対称な適応相は， $p$  が大きくなるほど広がるが， $p = 0$  では  $T_S^{\text{RSB}} = T_S^{\text{RS}} = 1$  となり，この相は消失する．

またエネルギーを観察した結果，レプリカ対称な適応相  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  において，エネルギー極小点が存在することがわかった．このような振る舞いは，秩序変数に関するクロスオーバーが原因であることが明らかになった．十分低温において，秩序変数  $q_2, q_3$  が指数関数的に振舞うとき，エネルギーには極小点が生まれる．さらに，この結果を踏まえ，フラストレーション秩序変数を導入し，温度依存性を観察した．SHK model と同様に，ターゲット内，ターゲット - 非ターゲット間，非ターゲット内の各相互作用に対して秩序変数  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  を導入し，そのレプリカ対称領域における表式を得た．その結果， $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  とも，スピングラス転移点において最大値を持ち，それ以下の低温では温度に対して単調減少な関数であった．すなわち，このモデルではスピングラス転移点において最もフラストレーションが減少しており，低温ではフラストレーションが多く存在していることがわかった．

以上の結果を踏まえ，SHK model における local Mattis 相を，レプリカ対称なスピングラス相（適応相）として再解釈した．また，ここで扱った解析手法は，SHK model に即した形の適応度だけではなく，スピンに関する任意の物理量を適応度とする系に対して適用できる．そして  $H_J$  が自由エネルギーではない場合の partial annealing を，スピングラス理論から理解し，この系特有の現象を転移として捉えたことで，partial anneal 系としての進化の理解が一段階進歩したといえる．任意の適応度を用いた partial anneal 系が，今回のモデルと同じように  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  というレプリカ対称な領域を持つのかは，今後明らかにしなくてはならない問題である．また，本章では進化した相互作用に関する頑健性については議論が不十分である．頑健性をどのような指標で定義して扱うのか，また頑健性とスピングラス転移，レプリカ対称性との関係などは今後の課題である．

## 第5章

# まとめ

本章では，ここまでの結果をまとめ，本博士論文における結論を述べる．それを踏まえ，今後行うべき研究や，partial anneal 系の応用など，今後の展望について触れる．

### 5.1 本博士論文のまとめ

本博士論文では，進化という現象を，遅い変数である遺伝子型と，速い変数である表現型の断熱的な二温度系であると見なし，そのような系のスピングラス模型表現である partial anneal 系のモデルを用いて議論してきた．partial anneal 系では，スピングラス模型におけるスピン変数だけではなく，相互作用変数も力学変数として扱う．ただし相互作用の時間スケールはスピンの時間スケールと比べて十分長いとし，相互作用の単位時間内でスピンは緩和すると考える．スピンの平衡状態は，ハミルトニアン  $H_S$  と温度  $T_S$  で与えられるボルツマン分布とする．一方，相互作用についても，平衡状態はハミルトニアン  $\mathcal{H}$  と相互作用  $T_J$  で与えられるボルツマン分布とする．相互作用のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は，適応度  $H_J$  とベア分布関数からなり，適応度はスピンの平衡状態で決まる関数とする．この設定は，スピンと相互作用の時間スケールを分離していることに対応する．このような partial anneal 系において，スピン配位を表現型に，相互作用配位を遺伝子型に対応させた模型を構成した．そして，重要な機能を担う特定の表現型を獲得するように遺伝子型を進化させることを考えた．

partial anneal 系の進化モデルにおいては，適応度  $H_J$  と温度  $T_S$  により，適応度地形の構造が決まる．温度  $T_S$  は表現型発現過程における熱ゆらぎを表し，平衡状態における表現型分布の幅に対応する．また，適応度はこれらの表現型の平均として決まる．一方で温度  $T_J$  は，相互作用の進化における淘汰圧（自然淘汰の強さ）を表す．本研究では， $H_J$  の関数型や温度  $T_S$  により，相互作用がどのような進化を見せるかを，3つのモデルを用いて議論した．2章では SHK model を導入し，3章では coupled mean-field model を導入し，4章では，SHK

model の性質を持つ，解析可能なモデルを導入した．ここで，各章の結果をまとめる．

### 5.1.1 結果のまとめ

#### 2章：SHK model

2章では SHK model を導入した．このモデルでは，ターゲットスピンと呼ばれる特別なスピンを設けた．これらのスピンのみが適応度に顕わに寄与すると考え，ターゲットスピンの特定の配位をとる確率として適応度を定義した．ここではターゲットスピンの全て揃った配位をターゲット配位としたが，モデルの振る舞いはその配位に依存しない．

断熱的二温度系に対する数値計算手法を開発し，これを用いて数値的にモデルの振る舞いを観察した．その結果，相互作用温度  $T_J$  が十分低いとき，中間温度の  $T_S$  で進化させた相互作用は，高い適応度に加えて低いエネルギーを持つことがわかった．相互作用を特徴付けるフラストレーションを導入して調べた結果，この中間温度領域では，ターゲット内の相互作用だけではなく，ターゲットと非ターゲットをつなぐ相互作用からフラストレーションが減少していた．このような特徴的な相互作用を local Mattis 状態と呼び，local Mattis 状態が得られる温度領域を local Mattis 相として  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  と定義した．local Mattis 状態は，表現型の緩和に対してファンネル型の地形を与え，また変異に対して頑健で，ある突然変異率以下の変異に対しては，適応状態を維持することができる．この結果は，全スピン数  $N = 15$  から 30 の系で共通に見られる現象であった．またターゲット数  $t$  を変えてモデルの振る舞いを観察した結果， $t/N = 7/30 \sim 8/30$  で local Mattis 相の温度領域が最大となり，頑健な遺伝子型を獲得するためには，最適なターゲット数が存在することが示唆された．

変異に対する頑健性を持つ local Mattis 状態が中間温度で獲得される仕組みは，適応度地形から説明することができた．解析の結果，中間温度では，変異に対する頑健性と適応度の高さに相関をもたらす適応度地形が実現していた．したがって  $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$  では，適応度による進化を通して，変異に対する頑健性を獲得することが明らかになった．

2章の研究を通して，フラストレーションを用いて相互作用を特徴づけ，相互作用の種類から相を定義し，SHK model における揺らぎの効果を local Mattis 状態の獲得として説明することが出来た．

#### 3章：coupled mean-field model

3章では，適応度としてスピンの自由エネルギーを選んだ．2章では，適応度を通してターゲット部分に局所的なパターンを埋め込むことを考えたが，ここでは相互作用に局所的なパターンを埋め込み，そして  $H_J$  を自由エネルギーとした．つまり，ターゲット部分に対応する相互作用の一部に局所的なパターンを埋め込み，残りの相互作用を partial annealing により修正することで，そのパターンの安定性が受ける影響を明らかにすることを目的とした．この局所的な部位の大きさは  $r$  でコントロールされ， $r$  が小さいほどパターンを埋め込んだ部分が

大きくなる。

適応度が自由エネルギーであるとき，partial anneal 系の平衡状態は有限レプリカ数  $n = T_S/T_J$  の系に対応する．そこでレプリカ法による解析から，スピンの相図を明らかにした．その結果， $n < n_c$  では，クエンチ系と同じように  $r > r_c(n)$  でリエントラント転移が起こるが，それ以上の  $n$  ではリエントラント転移は起こらないことがわかった．また，埋め込んだパターンが安定に想起される強磁性相は， $n < n_c$  では  $r$  が小さいほど広くなり，一方で  $n > n_c$  では  $r$  が大きいほど広くなった． $n = T_S/T_J$  であるので， $T_S < n_c T_J$  ではパターンを埋め込んだ部分が小さいほど，そのパターンが安定化されると言い換えることができる．

SHK model と同様に，相互作用を特徴付けるフラストレーション秩序変数を解析した結果，相互作用の配位はスピンの相と対応して分類されることが分かった．しかし，SHK model で得られた local Mattis 状態の性質を持つ相互作用は得られなかった．また，coupled mean-field model においては，SHK model のようにフラストレーションが減る中間温度領域は存在せず，温度が減るほどフラストレーションが減っていた．この違いは，適応度地形の構造から理解することが出来た．SHK model では， $T_S$  低温ではフラストレーションを持つ相互作用も高い適応度を獲得していたが，coupled mean-field model では，常にフラストレーションの少ない相互作用が高い適応度を獲得しており， $T_S$  低温になるほどこれらの相互作用は有意に選択されていた．これが，SHK model のように適応度がスピンに関する配位の実現確率で与えられるモデルと，自由エネルギーで与えられるモデルの決定的な違いであることがわかった．3章の研究を通して，温度  $T_S$  に対応する揺らぎがもたらす現象は，適応度の選び方により大きく異なることが明らかになった．

#### 4章：partial anneal 系の進化におけるレプリカ対称性の破れ

二つのモデルの比較を受け，partial anneal 系の理解を更に進めるには， $H_J$  が自由エネルギーではない場合の解析を試みる必要があることから，4章では，SHK model と定性的に同じ適応度地形の温度依存性を示すと考えられる，解析可能なモデルを導入した．このモデルの適応度は，SHK model における適応度の対数関数である．

レプリカ法による解析を行い，ターゲット数と全スピンの比を  $p = t/N$  として有限の値に固定し，熱力学極限をとった． $q_1, q_2, q_3$  という3つのスピングラス秩序変数を導入したレプリカ対称性を仮定し，スピンの相図を構成した．また3つの秩序変数に関する AT 安定性条件を導出した．その結果，ターゲットの磁化が有限の値をとる適応相は  $q_2$  の転移温度以下  $T_S < T_S^{\text{RS}}$  で獲得され， $q_2$  に関するスピングラス相と一致することがわかった．さらに  $T_J < 1$  では，中間温度  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  においてレプリカ対称な適応相 (スピングラス相) が得られることが分かった．この領域は， $p$  を増加させるほど広がる．またエネルギー，フラストレーション秩序変数を導出した結果，エネルギーは  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  で極小点を持ち，またフラストレーションはスピングラス転移点周辺で最も減少していた．これらの関係から，SHK model における local Mattis 相は，レプリカ対称なスピングラス相と対応しているとい

うことが示唆された．4章の結果を通して，partial anneal 系の進化について，スピングラス理論，特にレプリカ対称性と温度揺らぎの効果を関連付けて説明することが出来た．

### 5.1.2 本博士論文から得られたこと

以上の結果を踏まえ，本博士論文の研究を通して明らかになったこと，また新たに開発された手法についてまとめる．

機能を発現する頻度による進化と，自由エネルギーによる進化の違い

本博士論文では，進化の  $H_J$  依存性を明らかにするため，機能を担う表現型が発現する頻度を適応度とした進化と，自由エネルギーを適応度とした進化を考えた．前者は SHK model に対応し，後者は coupled mean-field model に対応する．ターゲットスピンが揃う頻度を適応度とした SHK model における進化では，レプリカ対称な適応相が中間温度  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  において得られた．一方で，自由エネルギーを適応度とした進化においては，このような中間温度相は存在せず，適応状態のエネルギーは温度が下がるほど低くなった．つまり，機能を発現する頻度を適応度とする進化では，中間温度に相当する熱揺らぎの存在する環境でも，安定な適応状態を獲得することが出来た．しかし自由エネルギーを適応度とする進化では，熱揺らぎが少ない環境であるほど適応状態が安定であった．

このように，適応度  $H_J$  に何を選ぶかにより，partial anneal 系の性質は大きく変わる．特に注目すべき点は，適応度  $H_J$  とスピンのハミルトニアン  $H_S$  の相関である．適応度を自由エネルギーとした partial anneal 系では，相互作用のエネルギー  $E(\mathbf{J}; T_S) \equiv \langle H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J}) \rangle$  に関する情報が，適応度自身に含まれている．したがって，この適応度を用いて進化させることで，エネルギーが低く，適応度の高い相互作用が得られると予想できる．実際，3章で示したように，適応度が自由エネルギーである場合は，スピン温度  $T_S$  が低くなるほど，エネルギーが低く，適応した相互作用が得られた．一方の SHK model では，適応度とスピンのハミルトニアン間に相関がない．つまり，適応度の高い相互作用が，エネルギーを下げる相互作用であるとは限らない．しかし，このような適応度を用いた進化においても，中間温度領域で進化させることにより，エネルギーが低く，適応度の高い相互作用を得ることができる．

上記の二つの適応度を用いた進化のシナリオに対して，どちらが現実的な進化であるのかということは一概には言えない．SHK model のように，物理量の期待値を適応度とした進化においては，物理量がある機能を表していると考えているため，機能が発現するのかどうかに対して淘汰がかかる．エネルギーと相関のない物理量にかかる淘汰であっても，熱揺らぎの存在する中間温度領域で進化することで，エネルギーが低く，適応度の高い遺伝子型を獲得できるということを，本研究の結果は示唆している．もちろん，この二種類の適応度だけで，partial anneal 系全てが包括的に理解されたわけではない．しかし，本研究を通して，表現型発現を支配する  $H_S$  と適応度との相関が，進化における一つの重要な要素である可能性が示された．

### 変異に対する頑健性と熱揺らぎに対する頑健性の相関

進化を通して変異に対する頑健性を獲得する仕組みの解明は、進化学における一つの課題であると言える。すなわち、変異に対する頑健性とは、適応度地形の大域的な構造からもたらされる性質であるのに対し、適応度を通じた進化では、適応度地形の局所的な性質のみが問われるからである。本博士論文では、変異に対する頑健性を獲得する仕組みについて、適応度地形の解析から考えた。SHK model のように、機能が発現する頻度を適応度とした場合、 $T_S$  中間温度領域における適応度地形は、適応度と変異に対する頑健性の高さに正の相関を与える地形であった。 $T_S$  が低温の場合は、様々な相互作用が適応度 1 を持ち、縮退している。しかし温度  $T_S$  を上昇させるにつれ、その縮退は解け、中間温度における適応度地形に近づいていく。温度上昇に対して適応度減少が鈍い相互作用を、熱揺らぎに対して頑健な相互作用と定義すると、この中間温度領域において適応度の高い相互作用は、熱揺らぎに対して頑健な相互作用である。つまり、中間温度における適応度の高さとは、熱揺らぎに対する頑健性の高さとも言える。したがって、変異に対する頑健性は、変異に対する頑健性という性質そのものにかかる淘汰ではなく、熱揺らぎに対する頑健性にかかる淘汰に基づく進化の副産物として獲得される、という可能性が本研究を通して示された。

### 進化におけるレプリカ対称性

2 章、4 章で示したように、適応度としてターゲットスピンの揃う頻度を用いた partial anneal 系では、 $T_J$  が十分低いとき、中間温度  $T_S^{\text{RSB}} < T_S < T_S^{\text{RS}}$  においてレプリカ対称解が安定な領域が現れた。すなわち、この温度領域における進化では、レプリカ対称性が存在している。進化においてレプリカ対称性が存在しているという事実には、二つの意味があると考えられる。一つ目は、表現型発現の性質の進化である。レプリカ対称性が破れているとき、遺伝子型が与える表現型に関する地形は、多くの準安定状態をもつ rugged な地形である。このとき、まず動的な性質に関しては、2.3.3 節で示したように、表現型が平衡状態に至るまでに非常に長い時間が要求され、その時間は全スピンの数が増えるに従って長くなる。高い適応度を持つ表現型は、低い温度領域においては、生物学的に受け入れられる時間では獲得されないだろう。また、多数の準安定状態に対応して、異なる表現型が発現することも考えられる。すなわち、一つの遺伝子型から全く異なる表現型が発現する可能性があり、ある確率で適応度の低い表現型が発現してしまう。レプリカ対称性が存在する領域で進化するということは、表現型が大域的な安定状態に至りやすい地形が獲得できるということであり、頑健な表現型発現を得ることが出来る。本研究ではそのような地形をファンネル型と呼んだが、ファンネル地形はタンパク質の折りたたみのダイナミクスの地形だけではなく、遺伝子の発現ダイナミクスや [Kaneko (2007), Li et al. (2004)]、多細胞生物の発生においても見られる [Kaneko et al. (2008)]。したがって、本博士論文の議論は、タンパク質の折りたたみを支配するハミルトニアンだけに制限されるものではなく、発生ダイナミクスに対しても一般的に適

用できるだろうと考える．実際，いくつかの遺伝子の調節ネットワークに関する研究においても，ファンネル型のダイナミクスが，熱揺らぎのある環境化で進化することが見られている [Kaneko (2007), Kaneko (2008)]．本博士論文によって，ファンネル地形は，レプリカ対称なパラメータ領域における進化の結果得られたものであるということが示唆された．

レプリカ対称性が持つ二つ目の意味は，遺伝子型の表現型発現における自己平均性である．相互作用に関する物理量  $A(\mathbf{J})$  について，自己平均性が保たれているとき，次の関係式が成立する．

$$G(A) \equiv \frac{[A^2(\mathbf{J})] - [A(\mathbf{J})]^2}{[A(\mathbf{J})]^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (5.1)$$

ここで相互作用に関する平均を  $[\dots]$  と表した．レプリカ対称性が破れているとき，ある物理量に関して自己平均性が破れる．例えばスピングラス秩序変数は，レプリカ対称性が破れているとき，自己平均性が破れる．しかしエネルギーや磁化は，自己平均性が破れない．この自己平均性が，進化の文脈でどのような意味を持つかを考えてみる．議論を明確にするために，遺伝子型の平衡分布に従って生成される遺伝子型を持つ個体の集団を考える．レプリカ対称性が存在するとき，各遺伝子型が発現する表現型は，同一のものであると考えられる．つまり，個体はそれぞれ異なる遺伝子型を持つものの，発現する表現型は同じである．進化におけるレプリカ対称性とは，集団内に遺伝子型レベルの多様性は保ちつつも，表現型レベルでの多様性を失った，canalisation に近い状況に対応すると考える [Waddington (1957)]．今回の研究を通して，遺伝子型に多様性が存在しているにもかかわらず，集団内で同じ表現型を発現する canalisation という能力の獲得を，進化におけるレプリカ対称性として理解することが出来た．

一方で，進化においてレプリカ対称性が破れている状況を考えてみる．このとき各遺伝子型が与える表現型は，同一のものであるとは限らない．つまり，表現型として，スピングラス秩序変数のように自己平均性が破れる物理量を選んだのであれば，各遺伝子が与える表現型は異なる．また表現型として自己平均性が破れない物理量を選んだのであれば，レプリカ対称性が破れている場合でも，各遺伝子型は同じ表現型を与えるだろう．この場合，表現型レベルでは自己平均性が保たれているが，何らかの摂動が集団に加わった場合，その応答についても自己平均性が保たれているかどうかは，本研究だけでは答えることが出来ない．この点については，今後さらに研究していく必要がある．

#### 断熱的二温度系の数値計算手法

本博士論文では，断熱的二温度系に対する，モンテカルロ法を用いた数値計算手法を提案した．特に速い変数のダイナミクスに対しては，交換モンテカルロ法を導入した．これまで，ランジュバン方程式を数値的に解く研究は行われていたが [Penney et al. (1993)]，ここで提案した手法を用いることで多くのサンプルを用いて精度良く計算することが出来る．また相互作用変数の時間発展や平衡分布を数値的に観察することができ，相互作用に関する物理量の計算も出来るようになった．この手法は，整数だけではなく実数のレプリカ数の系や，またどのよ

うな  $H_J$  を持つ系に対しても適用できる．本研究を通して，このような新しい数値計算手法を提案することが出来た．

#### $H_J$ が自由エネルギー以外の解析手法

これまで自由エネルギーを用いた partial anneal 系の解析は行われていたが，今回の研究を通して，初めて  $H_J$  が自由エネルギーではない partial anneal 系のレプリカ解析を行った．スピンに関する物理量の期待値の対数を適応度とするモデルにおいては，解析が行えることが明らかになった．この解析手法は，任意の物理量に対して適用することが出来る．その場合も， $q_1, q_2, q_3$  という3つのスピングラス秩序変数を用いた解析になると考えられる．今回の理論は，partial anneal 系そのものに関する理解をもたらしただけではなく，応用としての partial anneal 系に可能性を与えたと言える．

## 5.2 今後の展望

最後に，本博士論文から更に発展させていくべき問題，そして本研究の流れとは直接結びつかないが，今後考えていかなければいけない進化に関する問題や，本研究で用いた手法が応用できるいくつかの問題について，今後の展望として触れる．

#### 進化における非平衡現象

本博士論文で扱った partial anneal 系の進化モデルは，表現型の影響を考慮した遺伝子型の進化を記述する際に，まずは断熱近似の範囲で理解できることを明らかにするという目的で導入されたものである．そのため，遺伝子型の単位時間内で，必ず表現型は平衡状態に達するという仮定をおいていた．この仮定を破ったときに，本研究で得られた結果がどのように修正されるのかは，明らかにすべき点であると考えられる．このような問題に対して理論的に取り組むためには，遺伝子型，表現型の時間スケール比を考慮した理論を構成する必要がある．

また数値的な問題として，partial anneal 系においては，表現型の平衡状態を効率よく得るために交換モンテカルロ法を用いることができた．交換モンテカルロ法のダイナミクスは，実際の表現型発現ダイナミクスとしての物理的な意味はないため，表現型発現ダイナミクスを顕わにモデル化する場合には，緩和の様子を模した別のアルゴリズムを導入しなくてはならない．このとき，相互作用がランダムな状態に近く，スピン温度が低いとき，緩和に時間を要することが考えられる．特に  $H_S$  がより複雑な場合には，その効果は顕著である．このようなスピンの動的な性質が，進化にどのように影響を与えるかは，明らかにしなくてはならない問題である．

本研究では，適応度と相互作用の温度を固定して相互作用を進化させていた．適応度や相互作用温度は環境から決まると考えると，環境が変化しないという仮定をおいていることになる．一方で，揺らぐ環境の中で適応を獲得する仕組みは，古くから議論されている問題でも

あり、近年では実験的に揺らぐ環境を再現した進化実験も行われている [Acar et al. (2008)] . 断熱的二温度系において環境変化を考慮すると、環境を表す変数を加えた系を構成しなくてはならない。さらに、この3つ目の変数の時間スケールにより、適切な議論を行わなければならない。環境変化の問題に対しても、まずは遺伝子型の進化に対して、断熱的に環境が変わる場合を理解することから考えたい。そこで、遺伝子型が平衡状態に達した状況で環境を変化させることを考え、環境変化に対して系がどのような応答を示すのかを明らかにすることが、環境の効果を取り込む研究の第一歩であると考えられる。その際、前節で触れたレプリカ対称性の破れ、自己平均性の破れが、どのように影響するのかを明らかにする必要がある。

### 適応度地形の定量的な解析

本研究では、適応度地形の構造について、大域的な性質に着目して議論した。実際、今回の研究結果を理解するためには、そのような性質を対象とした解析で十分であった。しかし、適応度地形の凹凸の数やベイスンの広さ、その間の距離など、より詳細な情報を取り出すことも重要である。このような解析に対しては、ランダム系において行われている、状態空間の構造を取り出すことを目的とした解析が応用できるのではないかと考えられる [Tanaka and Edwards (1980)] . 適応度地形の定量的な解析は、地形の構造から進化の動的な側面を捉えるという研究の方向性からも必要なことであるが、工学的な応用に対しても大きな意味を持つ。適応度地形上での進化という描像は、高い機能を持つ高分子を人工的な進化を通して得るといった目的の工学的な実験に対して活用されるだろうと考えられる。断熱的二温度系と見なせる人工進化であれば、適応度  $H_J$  と温度  $T_J$  により作られた適応度地形を理論的に把握することで、実験で対象とする高分子がどの程度の進化能を有するのか、また進化の余地が残る変異方向の特定などの問題に対して、予測を与えることが出来ると期待する。

### 冗長性と頑健性の関係

SHK model を用いた研究においては、変異に対する頑健性について触れた。本博士論文では、冗長性と頑健性の関係性に対しては、明確な結論を示せていない。進化における冗長性と頑健性の関係を明らかにするためには、断熱的二温度系に拘らずに、適切にモデル化していく必要がある。このテーマに対するヒントは、情報統計力学にあると考える。変異に対する頑健性の主な由来が何であるのかには諸説あるが、distributed robustness という考え方は、様々な系において有効な説であると言える [Wagner (2005)] . distributed robustness 説では、頑健性がもたらされる仕組みを次のように考える。互いに異なる機能を持つ、多くの構成要素からなる系において、ある部分が失われたとしても、その他の部分が欠けた機能を補うことが出来る能力を有しており、系の機能が維持される。すなわち、各部分の機能は重複しており、系は冗長に作られているために頑健性を維持できるという考え方である。

distributed robustness は、誤り訂正符号の考え方と類似のものである。誤り訂正符号とは、送信情報に冗長なビット列を加えたものを送信し、通信路のノイズによりエラー

が混入しても、冗長な部分を用いてもとの情報を復元できるという符号化の仕組みである。この際、必要とされる冗長性は、通信路符号化定理により与えられる [Shannon (1949), Cover and Thomas (1991)]。このように、冗長性と頑健性について、ある強さのノイズが加わる環境下で機能を維持するためには、どの程度の冗長性が要求されるのかという問題に対し、誤り訂正符号との類似性に着目してモデル化することで、何らかの理論的な予想を見つけられる可能性があると考えられる。

#### partial anneal 系の疎結合模型

本博士論文では、全結合模型の partial anneal 系のみを扱った。全結合模型の場合、スピンに関する転移と相互作用に関する転移は、全て同じ温度で起きていた。特に相互作用のベア分布関数がガウス分布で与えられているとき、フラストレーション秩序変数がスピンの秩序変数で表されることから、遅い変数と速い変数の転移が同時に起こる事実を、解析的にも確認することができた。このようなスピンと相互作用に関する転移の一致は、ランダムグラフ上のスピングラス模型などの疎結合模型における partial anneal 系においても、同様に見られる現象であるのかは、明らかにすべき問題である。

また、疎結合模型の partial anneal 系は、ネットワークの問題としても興味深い対象である。全結合模型では扱うことの出来なかった、次数分布などの空間的構造が、partial annealing によりどのように変化するのかは、実際に解析的に求めることができる。付録 D に、Erdős-Renyi ランダムグラフ上のスピングラス模型である、Viana Bray model の partial anneal 系の解析を示す [Viana and Bray (1985)]。ここまでの解析により、 $H_J$  を自由エネルギーとした場合、正の次数相関が見られることが分かった。正の次数相関を持つネットワークは assortative mixing と呼ばれ、共著者のネットワークなどの一部のネットワークのみで見られる特徴である [Newman (2002)]。assortativity などの概念に着目して、 $H_J$  を分類することも出来ると考えられる。

#### partial annealing による学習アルゴリズムの提案

本研究で用いた partial anneal 系の解析や手法は、推定の手法として応用できると考える。partial annealing により相互作用を構成するという問題は、一種のパラメトリック推定である。 $H_J$  を自由エネルギーとしたとき、partial anneal 系はボルツマンマシン学習と一致する。ボルツマンマシン学習とは、ある規則で生成されるデータ列  $S$  の分布を推定する問題で、分布は 2 体のスピングラスハミルトニアンで決まるボルツマン分布に従うと仮定する。その相互作用変数  $J$  をパラメータとして、真の分布とボルツマン分布の Kullback-Leibler(KL) divergence を最小化するように  $J$  を学習するのがボルツマンマシン学習である [Ackley et al. (1985), 篠本 (1992)]。この KL divergence を最小化する際に最急降下法を用いると、ボルツマン分布の尤度を最大化する問題となり、これは  $T_J = 0$  の、 $H_J$  が自由エネルギーの場合の partial anneal 系と一致する。

このような対応関係は、学習アルゴリズムとしての partial annealing の可能性を考えさせる。様々な観測データは、何らかの内部構造を反映して出力されるものである。そのデータが従う規則から内部構造を推定する問題を、時間スケールの離れた二自由度系としてモデル化し、推定アルゴリズムとしての partial annealing を提案することができるのではないかと考えられる。そのためには、まず具体的な問題に対して partial annealing を適用し、性能を評価することが必要である。

### スピングラス理論における有限レプリカ数の系

3章で触れたように、 $H_J$  としてスピンの自由エネルギーを選んだ partial anneal 系は、レプリカ法においてレプリカ数 0 極限をとらない、有限レプリカ数の系に対応する。partial anneal 系は、レプリカ法において導入される有限レプリカ数の系に対して、断熱的な二温度系の平衡状態としての物理的な意味を与えるモデルである。有限レプリカ数の系に関する研究には、その系固有の物理現象の解明を目的としたものだけでなく、クエンチ系のスピングラス模型の解析を目的としたものも存在する。例えば、クエンチ系の平均場スピングラス模型における自由エネルギーの大偏差理論 [Parisi and Rizzo (2008)] や、レプリカ数方向の転移としてレプリカ対称性の破れを捉える研究が挙げられる [Nakajima and Hukushima (2009)]。このように、有限レプリカ数の系を解析することで、クエンチ系のスピングラス理論へ新たな理解を与えることもできる。本博士論文の3章では、速いスピン変数と遅い相互作用変数の協同現象として相転移を捉え、レプリカ数を変化させて議論した。このような遅い変数に着目することは、有限レプリカ数の系自体の解析にも異なる視点をもたらすだろう。また今回用いた数値的な手法は、 $H_J$  の分布関数を、原理的には得ることが出来る。実際にはサンプル平均に関する困難さがあるため、改善していく必要があるが、これを有限次元の有限レプリカ数の系に応用させることで有限次元のスピングラスに関する新たな知見が得られる可能性もある。

## 付録 A

# SHK model に関する補足

### A.1 数値計算の手法

スピンと相互作用に関する二重のモンテカルロ法について説明する．ここでの目的は，相互作用の平衡分布  $P(\mathbf{J}; T_S, T_J)$  を数值的に実現し，物理量を得ることである．詳細釣り合いを満たす遷移確率

$$w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij}) = \min\left(1, \exp \beta_J \Delta H_J\right) \quad (\text{A.1})$$

に従って相互作用を更新させることで，平衡分布 (2.4) を得ることが出来る．ここで， $\Delta H_J = H_J(\mathbf{J}) - H_J(\mathbf{J}^{ij})$  とし， $\mathbf{J}^{ij}$  は  $\mathbf{J}$  のうち  $J_{ij}$  のみが反転した配位を表す．関数  $\Psi$  は，スピンに関して平均化された量であるため，相互作用の遷移確率を得るためには，相互作用  $J$  と温度  $T_S$  に対応したスピンの平衡状態  $P(\mathbf{S}|\mathbf{J}; T_S)$  を得る必要がある．効率よくスピンの平衡状態を得るために，交換モンテカルロ法を用いる [Hukushima and Nemoto (1996)]．交換モンテカルロ法は，異なる温度の熱欲に接した  $M$  個の系を用意し，系内での配位の更新と系間の配位の交換を交互に行うことで，状態空間の構造に因る緩和の困難さを解消する方法である．各系の逆温度を  $\beta_S^m$  ( $m = 1, \dots, M$ )，スピン配位を  $\mathbf{S}_m$  ( $m = 1, \dots, M$ ) とし，また相互作用配位は全ての系で共通とする．温度は  $\beta_S^m < \beta_S^{m+1}$  とし，最低温である  $M$  番目の熱欲の逆温度を， $\beta_M = 1/T_S$  としておく．したがって，実際に興味のある系は  $M$  番目の系のみであり，残りの  $M - 1$  個の系は，緩和のために導入されたものである．簡単のため，スピン配位の交換は， $m$  番目と  $m + 1$  番目の系の間でのみ行う．系間の交換確率を設定するため，系  $m$  と系  $m + 1$  の配位を交換する前と交換したあとの同時分布の比を考えると，次のようになる．

$$\frac{P(\mathbf{S}^m, \beta_S^m; \mathbf{S}^{m+1}, \beta_S^{m+1} | \mathbf{J})}{P(\mathbf{S}^{m+1}, \beta_S^m; \mathbf{S}^m, \beta_S^{m+1} | \mathbf{J})} = \exp(-\Delta(\mathbf{J})), \quad (\text{A.2})$$

ここで,  $P(S^m, \beta_S^m; S^{m+1}, \beta_S^{m+1} | J)$  は, 相互作用配位が  $J$  であるとき, 配位  $S^m$  が温度  $\beta_S^m$  で,  $S^{m+1}$  が温度  $\beta_S^{m+1}$  で同時に実現する確率である. また,

$$\Delta(J) = (\beta_S^m - \beta_S^{m+1}) \sum_{\alpha} (H(S^{\alpha, m} | J) - H(S^{\alpha, m+1} | J)) \quad (\text{A.3})$$

とした. したがって, 次の交換確率は平衡状態を導くことができる.

$$w_{\text{exc}}(m, m+1 | J) = \min(1, e^{-\Delta}) \quad (\text{A.4})$$

十分な緩和の後,  $M$  番目の系において適応度  $\Psi$  を計算し, その値を元に, (A.1) にしたがって相互作用を更新する.

また, 各系の温度の設定方法について触れておく. まず  $\beta_S^M$  に加え, 最も高い温度  $\beta_S^1$  もある温度で固定する. ただし, スピングラス転移点より高温とする. 残り  $M-2$  個の系の温度は, 交換が効率よく起こるように, 次の更新則から決める [Hukushima (1999)]. 初期条件として,  $\beta_S^m$  ( $m = 2, \dots, M-1$ ) を,  $\beta_S^1$  から  $\beta_S^M$  の間で等間隔に設定する. すなわち,

$$\beta_S^m(0) = \beta_S^1 + (\beta_S^M - \beta_S^1) \times \frac{m-1}{M-1}, \quad m = 2, \dots, M-1 \quad (\text{A.5})$$

である. この温度を用いて, 通常のモンテカルロ計算を行い, 各温度のエネルギーを粗く見積もる. これを  $E_m(0)$  ( $m = 1, \dots, M$ ) とする. このエネルギーを元に, 次の関係式を満たすように,  $\beta_S^m$  ( $m = 2, \dots, M-1$ ) を更新する.

$$\beta_S^m(t+1) = \frac{1}{2} \{ \beta_S^m(t) + g(\beta_S^m(t)) \} \quad (\text{A.6})$$

ここで

$$g(\beta_S^m(t)) = \frac{1}{E_{m-1}(t) - E_{m+1}(t)} \times \left( \beta_S^{m-1}(t) E_{m-1}(t) - \beta_S^{m+1}(t) E_{m+1}(t) - E_m(t) (\beta_S^{m-1}(t) - \beta_S^{m+1}(t)) \right) \quad (\text{A.7})$$

とした\*1. (A.6) が収束するまで更新を繰り返すと, 次の関係式を満たす温度が得られる.

$$(\beta_S^{m-1} - \beta_S^m)(E_{m-1} - E_m) = (\beta_S^m - \beta_S^{m+1})(E_m - E_{m+1}) \quad (\text{A.8})$$

この関係式は,  $m$  と  $m+1$  の交換と,  $m$  と  $m-1$  の交換が, ほぼ等しい確率で行われることを保障するものである. このように設定した温度を用いて交換法を行うことで, 全ての系が効率よく交換される.

\*1  $\beta_S^m(t)$  におけるエネルギー  $E_m(t)$  は, 初期状態のエネルギーから内挿して得る. また  $E_m(t)$  には, 温度に関して単調減少であることが要求される.

## A.2 適応度地形

頑健性の温度依存性を明らかにするため、代表的な相互作用の適応度を求めることで、適応度地形の構造を解析的に把握することを試みる。

まず、Mattis 状態 ( $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 1$ ) と、local Mattis 状態 ( $\Phi_1 = \Phi_2 = 1, \Phi_3 \neq 1$ )、そしてターゲットスピン間の相互作用にフラストレーションを持つ、target-frustrated 状態 ( $\Phi_1 \neq 1$ ) の適応度を求める。これらの適応度は、“条件つき分配関数”  $Z_\Psi(\mathbf{J})$  と分配関数  $Z(\mathbf{J})$  の比で与えられる ( $\Psi(\mathbf{J}) = Z_\Psi(\mathbf{J})/Z(\mathbf{J})$ )。3 タイプの相互作用の適応度を求めるため、分配関数  $Z(\mathbf{J})$  と条件つき分配関数  $Z_\Psi(\mathbf{J})$  を導出する。

まず、 $x$  個のフラストレートしたループを持つ相互作用の分配関数  $Z(x, T_S)$  は、次のように与えられる。

$$Z(x, T_S) = 2c(x) \sum_{i=0}^x x C_i f(i, N) \quad (\text{A.9})$$

ここで

$$f(i, N) = \left( 4e^{\frac{2\beta_S}{\sqrt{N}}} \sinh\left(\frac{2\beta_S}{\sqrt{N}}\right) \right)^i \sum_{n=i}^{N-i} e^{-\frac{\beta_S}{\sqrt{N}}(N-n)n} {}_{N-2i}C_{n-i} \quad (\text{A.10})$$

とし、また  $c(x) = e^{\beta_S(-2x+C_2^N)/\sqrt{N}}$  である。この表式は、各サイトが最大 1 つのフラストレーションループに属す場合に有効である。したがって、 $x$  は  $N/2$  より小さくなければならない。また (A.9) は、フラストレーション  $x$  が、 $\mathbf{J}_{tt}$ 、 $\mathbf{J}_{to}$ 、 $\mathbf{J}_{oo}$  にどのように分配されても有効である。

分配関数  $Z(\mathbf{J})$  は、フラストレーションが存在する場所に依存しないが、条件つき分配関数  $Z_\Psi(\mathbf{J})$  は依存するため、場合分けして求める必要がある。まず、 $x$  個のフラストレーションループが  $\mathbf{J}_{oo}$  に存在する、local Mattis 状態の条件付分配関数、 $Z_\Psi^{\text{LMS}}(x, T_S)$  を求める。これは次のように与えられる。

$$Z_\Psi^{\text{LMS}}(x, T_S) = 2c(x) \sum_{i=0}^x x C_i f(i, N - t) \quad (\text{A.11})$$

この表式も、各サイトが最大一つのフラストレーションループに属す場合に有効である。したがって、 $x$  は  $(N - t)/2$  以下である。 $x$  のフラストレートした相互作用ループを  $\mathbf{J}_{oo}$  にもつ local Mattis 状態の適応度は、 $Z_\Psi^{\text{LMS}}(x, T_S)/Z(x, T_S)$  として与えられる。さらに、 $x$  個のフラストレーションループを  $\mathbf{J}_{oo}$  に持ち、 $y$  個のフラストレーションループを  $\mathbf{J}_{tt}$  に持つ、target-frustrated 状態の条件つき分配関数  $Z^{\text{TF}}(x, y, T_S)$  を求める。ターゲットスピン間相互作用にフラストレーションが入ったとき、ターゲット配位のエネルギーは  $2/\sqrt{N}$  だけ上がる

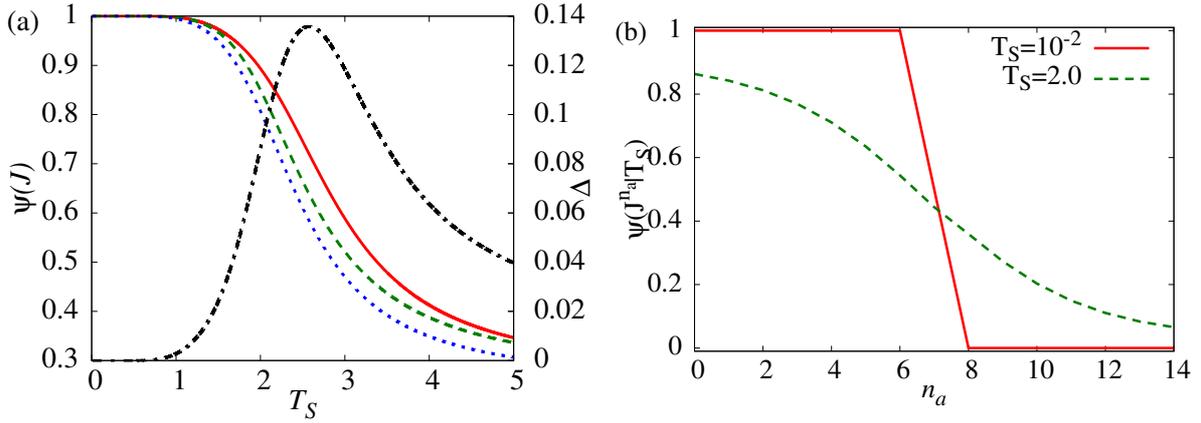


図 A.1 (a) Mattis 状態の適応度の温度  $T_S$  依存性 (実線,  $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 1$ ) と, local Mattis 状態の典型的な適応度の温度依存性 (破線,  $\Phi_1 = \Phi_2 = 1, \Phi_3 = 0.89$ ) と, ターゲットにフラストレーションが入った相互作用の典型的な温度依存性 (点線,  $\Phi_1 = 0.333, \Phi_2 = 1, \Phi_3 = 0.89$ ) を左軸に示す. また, Mattis 状態と target-frustrated 状態の適応度差  $\Delta$  を破点線で右軸に示す.

(b)  $N = 15, t = 3$  における, 相互作用  $\tilde{J}^{n_a}$  の適応度を,  $T_S = 10^{-2}$  (実線) と  $T_S = 2.0$  (破線) について示す.  $n_a$  は, 反転した  $J_{t_o}$  相互作用の数 (フラストレーションの数) を示す.  $T_S = 10^{-2}$  では, 適応度は  $n_a = 7$  において急激に下がるが,  $T_S = 2.0$  では, 連続的に下がる.

ため, (A.10) を用いて次のように求められる.

$$Z_{\Psi}^{\text{TF}}(x, y, T_S) = Z_{\Psi}^{\text{LMS}}(x, T_S) \times e^{-\frac{2\beta_S}{\sqrt{N}}y} \quad (\text{A.12})$$

ここで, 各ターゲットスピンは少なくとも一つのフラストレーションループに属すと考える. したがって  $y = 1, \dots, t/2$  である. target-frustrated 状態の分配関数は,  $Z(x + y, T_S)$  で与えられるので, 適応度は  $Z_{\Psi}^{\text{TF}}(x, y, T_S)/Z(x + y, T_S)$  として与えられる.

図 A.1 は, 典型的な Mattis 状態, local Mattis 状態, target-frustrated 状態の適応度の  $T_S$  依存性を示している. また target-frustrated 状態と Mattis 状態の適応度の差を  $\Delta$  とし,  $T_S$  の関数として示した. 全ての相互作用の適応度は,  $T_S \rightarrow 0$  で 1 に近づく. そして, この縮退は温度  $T_S$  が増加するにつれて解け, フラストレーションの少ない相互作用の方が, 適応度が高くなる. Mattis 状態と target-frustrated 状態の適応度差  $\Delta$  は,  $T_S = 2.0 \sim 3.0$  で最大値を持つ. この二つの状態の確率的な重みの比は  $\exp(\beta_J \Delta)$  で与えられるため,  $\Delta$  が大きい温度領域では, Mattis 状態や local Mattis 状態のように, ターゲット周辺のフラストレーションが低い相互作用が選択されやすいということがわかる.

次に, ターゲットと非ターゲットスピンを繋ぐ相互作用  $J_{t_o}$  に対してフラストレーションを導入した相互作用  $\tilde{J}_t^{n_a}$  を考える. ここで,  $n_a$  はフラストレートした相互作用ループの数を表し, また  $t$  は非ターゲットとターゲットスピンの間の相互作用  $J_{t_o}$  にフラストレーションが存在することを意味する. したがって, 相互作用  $\tilde{J}_t^{n_a}$  の,  $J_{t_o}$  に対するフラストレーション秩序変数  $\Phi_2$  は, 1 以下である. また, 相互作用  $\tilde{J}_t^0$  は, 最大の適応度を持つ Mattis 状態に対応す

る．そして， $n_a = N - 1$  のとき，ゲージ変換により，適応度が最小であること，また  $T_S \rightarrow 0$  では， $\tilde{J}_t^{n_a}$  の適応度は  $n_a \leq N/2$  までは最大適応度をとることがわかる．したがって，Mattis 状態の  $J_{to}$  相互作用に対して， $N/2$  本を反転させる変異が加わっても， $T_S \rightarrow 0$  では適応度 1 が保たれる．このように，図 A.1(a) で扱った相互作用に加えて， $\tilde{J}_t^{n_a}$  ( $n_a \leq N/2$ ) 型の相互作用も， $T_S \rightarrow 0$  では適応度 1 に縮退している．状態空間上で， $T_S \rightarrow 0$  で実現する適応度 1 平面の周辺に存在する相互作用の適応度を把握するため， $J_t^{n_a}$  の適応度を導出し， $n_a$  依存性を調べた．図 A.1(b) に， $T_S = 10^{-2}$  ( $T_S < T_S^{c1}$ ) と  $T_S = 2.0$  ( $T_S^{c1} < T_S < T_S^{c2}$ ) における，相互作用  $\tilde{J}_t^{n_a}$  の適応度の  $n_a$  依存性を示す． $T_S = 10^{-2}$  では， $n_a \leq N/2$  の相互作用は適応度 1 を保つが，それ以上の相互作用が一つでも反転すると，適応度は最小値へと下がってしまう．したがって， $T_S = 10^{-2}$  において実現する適応度 1 の平面は，急激に適応度が下がる“崖”に接していることがわかる．一方， $T_S = 2.0$  においては， $n_a$  の増加に対して， $J_t^{n_a}$  の適応度は緩やかに減少することがわかる．このような解析から得た適応度地形は，図 2.11 のような性質を持つと考えられる．

また， $T_S \rightarrow 0$  で現れる  $\Psi = 1$  の平面上の相互作用配位の数， $N - t$  の非ターゲットスピンの許されるゲージ変換の自由度から，粗く見積もると  $2^{N-t}$  のオーダーであると考えられる．一方，相互作用がとりうる全ての配位数は  $2^{N^2}$  であるため，その比  $2^{N-t}/2^{N^2}$  は，サイズ  $N$  が増えるに伴い，非常に小さくなる．したがって， $T_S$  が低温においては，サイズが大きくなるにつれて，適応度 1 の相互作用を得ることが，数値的に困難になる．

## 付録 B

# coupled mean-field model に関する 補足

### B.1 AT 安定性条件の導出

レプリカ対称解が安定であるために満たすべき条件 (AT 安定性条件) を導出する。手続きとしては、自由エネルギーを、レプリカ対称解の周りの微小変位  $\eta_1^{\alpha\beta} = q_p^{\alpha\beta} - q_p$ ,  $\epsilon_p^\alpha = m_p^\alpha - m_p$  ( $p = 1, 2$ ) に関して二次まで展開し、その二次形式の係数行列 (ヘシアン) の固有値解析を行う。レプリカ対称解が安定であるためには、固有値が正でなければならない [de Almeida and Thouless (1978), Nishimori (2001)]。

ここでは、一般の  $J_{0,p}$ ,  $J_p$  ( $p = 1, 2, 3$ ) について、AT 安定性条件を書き下す。ヘシアンを  $G$  と記述すると、 $\epsilon_p = \{\epsilon_p^\alpha\}$  に関する成分は次のように与えられる。

$$G(\epsilon_p^\alpha, \epsilon_p^\alpha) = -\frac{n_p}{2} \left(1 - \langle S_p^\alpha \rangle^2\right) \equiv A_p \quad (\text{B.1})$$

$$G(\epsilon_p^\alpha, \epsilon_p^\beta) = -\frac{n_p}{2} \left(\langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle_{L_0} - \langle S_p^\alpha \rangle_{L_0} \langle S_p^\beta \rangle_{L_0}\right) \equiv B_p \quad (\text{B.2})$$

ここで、 $G(x, y)$  は、 $x$  と  $y$  による自由エネルギーの微係数を意味する。また  $\langle \dots \rangle_{L_0}$  は、レプリカ対称性を仮定した場合の、有効ハミルトニアンによる平均である。 $\epsilon_p$  に関して、系 1 と系 2 のクロスターム  $G(\epsilon_1^\alpha, \epsilon_2^\beta)$  は次のように与えられる。

$$G(\epsilon_1^\alpha, \epsilon_2^\alpha) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\hat{n}_3 J_{0,3}}{\beta_S D_0}\right) \equiv A_{12} \quad (\text{B.3})$$

$$G(\epsilon_1^\alpha, \epsilon_2^\beta) = 0 \equiv B_{12} \quad (\text{B.4})$$

ここで  $D_0 = J_{0,1}J_{0,2} - n_3 J_{0,3}^2$  とした。また、 $\epsilon_p$  と  $\eta_p = \{\eta_p^{\alpha\beta}\}$  のクロスタームに関する成

分は，次のように与えられる．

$$G(\eta_p^{\alpha\beta}, \epsilon_p^\alpha) = -\frac{n_p}{2} \left( \langle S_p^\beta \rangle_{L_0} - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle \langle S_p^\alpha \rangle_{L_0} \right) \equiv C_p \quad (\text{B.5})$$

$$G(\eta_p^{\alpha\beta}, \epsilon_p^\gamma) = -\frac{n_p}{2} \left( \langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\gamma \rangle_{L_0} - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle \langle S_p^\gamma \rangle_{L_0} \right) \equiv D_p \quad (\text{B.6})$$

$\eta_p$  と  $\epsilon_p$  に関して，系 1 と系 2 のクロスターム  $G(\eta_1^{\alpha\beta}, \epsilon_2^\gamma)$ ， $G(\eta_2^{\alpha\beta}, \epsilon_1^\gamma)$  は 0 である． $\eta_p$  に関する成分は，次のように与えられる．

$$G(\eta_p^{\alpha\beta}, \eta_p^{\alpha\beta}) = -\frac{n_p}{2} \left( \frac{\hat{n}_3 J_2^2}{r \beta_S^2 D} + n_1 (1 - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle^2) \right) \equiv P_p \quad (\text{B.7})$$

$$G(\eta_p^{\alpha\beta}, \eta_p^{\alpha\gamma}) = -\frac{n_p}{2} \left( \langle S_p^\beta S_p^\gamma \rangle_{L_0} - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle_{L_0} \langle S_p^\alpha S_p^\gamma \rangle_{L_0} \right) \equiv Q_p \quad (\text{B.8})$$

$$G(\eta_p^{\alpha\beta}, \eta_p^{\gamma\delta}) = -\frac{n_p}{2} \left( \langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\gamma S_p^\delta \rangle_{L_0} - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle_{L_0} \langle S_p^\gamma S_p^\delta \rangle_{L_0} \right) \equiv R_p \quad (\text{B.9})$$

ここで  $D = J_1^2 J_2^2 - n_3 J_3^4$  とした． $\eta_p$  に関する系 1，系 2 のクロスタームは，次のように与えられる．

$$G(\eta_1^{\alpha\beta}, \eta_2^{\alpha\beta}) = \frac{\hat{n}_3 J_3^2}{2 \beta_S^2 D} \equiv P_{12} \quad (\text{B.10})$$

$$G(\eta_1^{\alpha\beta}, \eta_2^{\alpha\gamma}) = 0 \equiv Q_{12} \quad (\text{B.11})$$

$$G(\eta_1^{\alpha\beta}, \eta_2^{\gamma\delta}) = 0 \equiv R_{12} \quad (\text{B.12})$$

このヘシアン  $G$  について，レプリカ対称性の破れに対応する，レプリコンモードの固有値  $\lambda$  は次のように与えられる．

$$\lambda = \frac{1}{2} \left\{ (U + V) - \sqrt{(U - V)^2 + 4W^2} \right\} \quad (\text{B.13})$$

ここで  $U = R_1 - 2Q_1 + P_1$ ， $V = R_2 - 2Q_2 + P_2$ ， $W = R_{12} - 2Q_{12} + P_{12}$  とした．したがって， $\lambda$  が正になる条件は  $UV > W^2$  であり，これを变形すると (3.14) が導出される．

## B.2 フラストレーション秩序変数の導出

相互作用変数のペア分布関数がガウス分布であるとき，フラストレーション秩序変数は，スピンの秩序変数で記述することが出来る．具体例として， $\Phi_{(2)}$  を導出する．部分積分を用いる

と,  $\Phi_{(2)}$  は次のように表される .

$$\begin{aligned}
\Phi_{(2)} &= \frac{1}{Z_J} \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J}) Z^n(\mathbf{J}) \sum_{i<j<k} J_{2,ij} J_{2,jk} J_{2,ki} \\
&= \frac{1}{Z_J} \sum_{i<j<k} \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J}) \frac{\partial^3}{\partial J_{ij} \partial J_{jk} \partial J_{ki}} Z^n(\mathbf{J}) \\
&= \frac{1}{Z_J} \left( \frac{\beta_S}{N_2} \right)^3 \sum_{i<j<k} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J}) Z^n(\mathbf{J}) \langle S_{2,i}^\alpha S_{2,j}^\alpha S_{2,j}^\beta S_{2,k}^\beta S_{2,k}^\gamma S_{2,i}^\gamma \rangle_{\alpha\beta\gamma} \\
&= \beta_S^3 \sum_{\alpha, \beta, \gamma} q_2^{\alpha\beta} q_2^{\beta\gamma} q_2^{\gamma\alpha} \\
&= \beta_S^3 \text{Tr}_n Q_2^3
\end{aligned} \tag{B.14}$$

ここで  $\langle \dots \rangle_{\alpha\beta\gamma}$  は, 3 つの実レプリカ  $(\alpha, \beta, \gamma)$  からなる系における平均を意味し, また  $\text{Tr}_n$  は  $n \times n$  行列の対角和を意味する . したがって, フラストレーション秩序変数  $\Phi_{(2)}$  は,  $Q_p$  行列の固有値を用いて (3.26) のように表される .  $\Phi_{(3a)}$ ,  $\Phi_{(3b)}$  の導出も同様である .

## B.3 数値計算

### B.3.1 手法

Coupled mean-field model はレプリカ法による解析が可能であるが, 解析の正当性を確認するためにも, 数値実験を行い, 解析計算の結果と比較することが重要である . 付録 A.1 に示した数値計算方法は,  $H_J$  の形を変更することで coupled mean-field model に対しても適用できるが, ここでは, レプリカ数が整数の場合に有効な, より簡単な数値計算手法について説明する .

レプリカ数  $n = T_S/T_J$  が整数のとき, 相互作用の分布関数の規格化定数  $Z_J = [Z^n(\mathbf{J})]_0$  は,  $n$  枚の実レプリカを用いて次のように表現できる .

$$\begin{aligned}
[Z^n(\mathbf{J})]_0 &= \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J}) \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha\}} \exp \left( -\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H(\mathbf{S}^\alpha | \mathbf{J}) \right) \\
&\equiv \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha, \mathbf{J}\}} \exp(-\beta_S \mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}, \mathbf{J}; \beta_S))
\end{aligned} \tag{B.15}$$

ここで,  $\mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}, \mathbf{J}; \beta_S)$  は次のように与えられる有効ハミルトニアンである .

$$\mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}, \mathbf{J}; \beta_S) = \sum_{\alpha=1}^n H(\mathbf{S}^\alpha | \mathbf{J}) - T_S \sum_{i<j} \log P_0(J_{ij}) \tag{B.16}$$

つまり, レプリカ数が整数の場合, 有限レプリカ数の系は,  $N(N-1)/2$  本の相互作用と  $n \times N$  個のスピンからなるアニール系と等価である . したがって, 相互作用変数をスピン変数と同様に扱うモンテカルロ計算を行うことで, 平衡状態が得られる .

ここでも効率よく平衡状態を得るために、交換モンテカルロ法を用いる。付録 A.1 と同じように、異なる温度の熱浴に接した系を  $M$  個用意するが、ここでは各系に個別に相互作用変数を用意する点異なる。そこで、各系の変数と温度をそれぞれ  $X^m = \{\{\mathbf{S}^\alpha\}^m, \mathbf{J}^m\}$ ,  $\beta_S^m$  ( $m = 1, \dots, M$ ) と表記する。簡単のために  $\beta_S^m < \beta_S^{m+1}$  として、配位の交換は  $m$  番目と  $m+1$  番目の系の間で行うものとする。ここでは  $m$  番目の系内における力学変数の遷移確率を次のように与える。

$$w(X^m \rightarrow X^{m'}) = \min(1, e^{-\beta_S \Delta \mathcal{H}_{\text{total}}(\beta_S^m)}) \quad (\text{B.17})$$

ここで  $\Delta \mathcal{H}_{\text{total}}(\beta_S^m) = \mathcal{H}_{\text{total}}(X^{m'}; \beta_S^m) - \mathcal{H}_{\text{total}}(X^m; \beta_S^m)$  とした。coupled mean-field model では、相互作用変数が連続値をとる。そこで、相互作用変数の更新においては、区間  $[-\delta J, \delta J]$  から一様に乱数を生成し、あるステップの  $J_{ij}$  に対してそれを加えたものを、次のステップにおける  $J_{ij}$  の候補とする。幅  $\delta J$  は、適宜調節する必要がある。

系間の交換については、付録 A.1 における議論と同様に、次の交換確率を用いて平衡状態を導くことができる。

$$w_{\text{exc}}(m, m+1) = \min(1, e^{-\Delta}) \quad (\text{B.18})$$

ここで

$$\begin{aligned} \Delta &= \beta_S^m \left\{ \mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}^m, \mathbf{J}^m; \beta_S^m) - \mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}^{m+1}, \mathbf{J}^{m+1}; \beta_S^m) \right\} \\ &\quad + \beta_S^{m+1} \left\{ \mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}^{m+1}, \mathbf{J}^{m+1}; \beta_S^{m+1}) - \mathcal{H}_{\text{total}}(\{\mathbf{S}^\alpha\}^m, \mathbf{J}^m; \beta_S^{m+1}) \right\} \\ &= (\beta_S^m - \beta_S^{m+1}) \sum_{\alpha} (H(\mathbf{S}^{\alpha, m} | \mathbf{J}^m) - H(\mathbf{S}^{\alpha, m+1} | \mathbf{J}^{m+1})) \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

とした。

### B.3.2 結果

#### 転移温度の同定

レプリカ法により導入されたスピングラス秩序変数と磁化は、次のように数値的に観測することができる。

$$q_p = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} [\langle S_{p,i}^1 S_{p,i}^2 \rangle_2]_n \quad (\text{B.20})$$

$$m_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} [\langle S_{1,i} \rangle]_n \quad (\text{B.21})$$

ここで、 $\langle \dots \rangle_2$  は、二つの実レプリカに関する平均を意味する。また  $[\dots]_n$  は、 $n = T_S/T_J$  の相互作用に関する平均を意味する。スピングラス転移点と強磁性転移点を数値的に見積もる

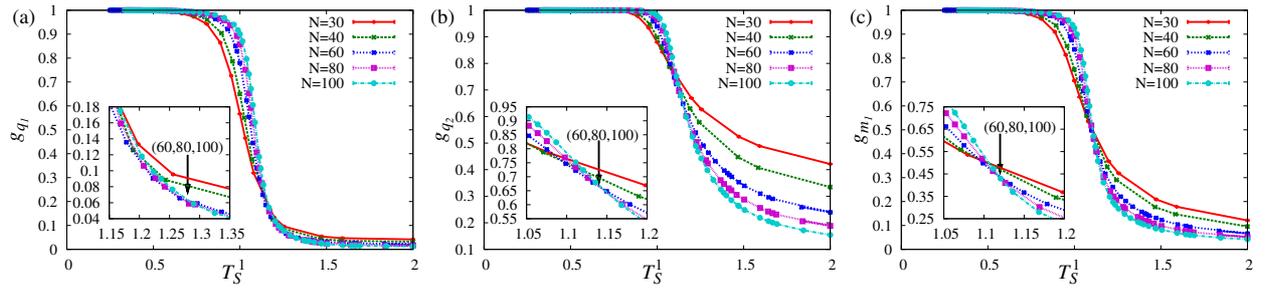


図 B.1  $n = 2, r = 1/3, J_0/J = 1.0$  における, Binder 比のサイズと温度  $T_S$  依存性を示す. (a) は  $q_1$ , (b) は  $q_2$ , (c) は  $m_1$  の Binder 比である. 挿入図に, Binder 比の交点付近を拡大して示す.  $(N_1, N_2, N_3)$  とラベルされた矢印は, サイズ  $N = N_1, N_2, N_3$  のデータから見積もられた転移点である. この結果から, スピングラス転移点と強磁性転移点は, それぞれ  $T_S^{\text{PM-SG}} \simeq 1.27, T_S^{\text{SG-FM}} \simeq 1.12$  と見積もられる. これらは理論値  $T_S^{\text{PM-SG}} = 1.272, T_S^{\text{SG-FM}} = 1.130$  を精度良く予測している.

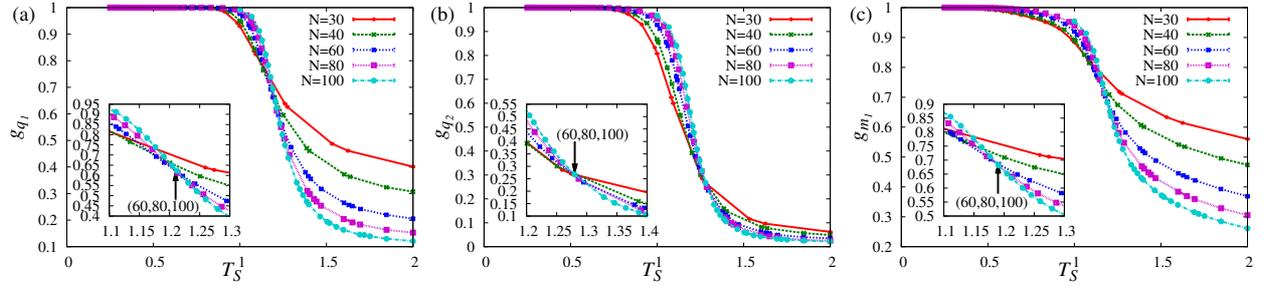


図 B.2  $n = 2, r = 3, J_0/J = 1.0$  における Binder 比のサイズと温度  $T_S$  依存性を示す. (a) は  $q_1$ , (b) は  $q_2$ , (c) は  $m_1$  の Binder 比である. 挿入図に, Binder 比の交点付近を拡大して示す. 矢印の意味は, 図 B.1 と同じである. この結果から, スピングラス転移点と強磁性転移点は,  $T_S^{\text{PM-SG}} \simeq 1.27, T_S^{\text{SG-FM}} \simeq 1.19$  と見積もられる. これらは理論値  $T_S^{\text{PM-SG}} = 1.272, T_S^{\text{SG-FM}} = 1.218$  を精度良く予測している.

ため, サイズ  $N = 30, 40, 60, 80, 100$  における秩序変数の振る舞いを観察し, その Binder 比を計算した. Binder 比は次のように定義される.

$$g_x(T_S, n; N) = \frac{3}{2} \left( 1 - \frac{[\langle x^4 \rangle]_n}{3[\langle x^2 \rangle]_n^2} \right), \quad (x = q_1, q_2, m_1), \quad (\text{B.22})$$

転移点は, 各サイズの Binder 比が重なる温度として見積もられる. 図 B.1 と図 B.2 に, レプリカ数  $n = 2$  の場合の  $r = 1/3, J_0/J = 1.0$  と  $r = 3, J_0/J = 1.0$  における Binder 比の振る舞いを示す. 特に  $N = 60, 80, 100$  の結果について, 交点部分を図の挿入図に示す. 数値的に見積もられた転移点は, 解析的な予想 (図 3.2) と高い精度で一致する.

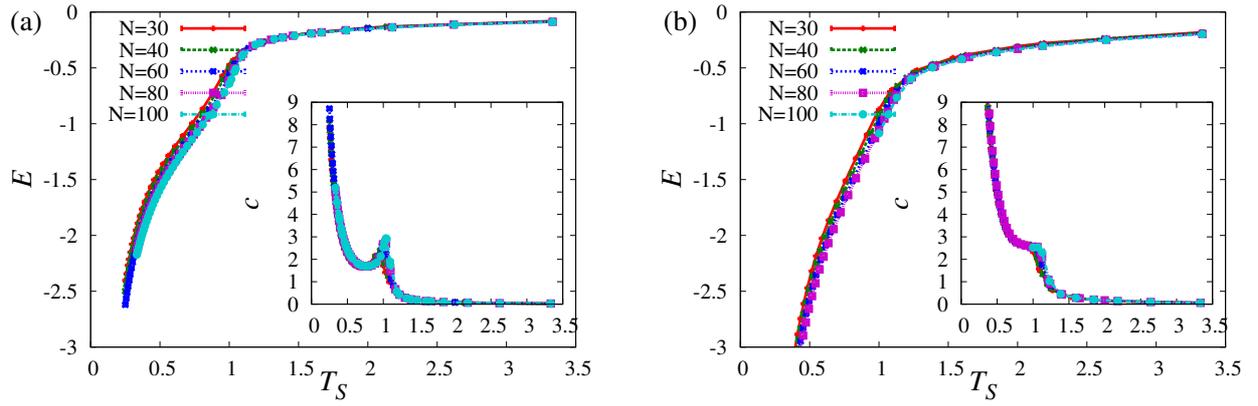


図 B.3 レプリカ数  $n = 2$  における，1 スピンあたりのエネルギーの温度  $T_S$  依存性を示す．(a) は  $r = 1/3$ ，(b) は  $r = 3.0$  における結果である．また挿入図は比熱  $c$  を表す．

### エネルギーの振る舞い

転移温度において，エネルギーは特異的な振る舞いを示す．次のように定義される，1 スピンあたりのエネルギー  $e$  の温度  $T_S$  依存性を (B.3) に示す．

$$e = \frac{1}{N} [\langle E \rangle]_n = \frac{1}{nN} \sum_{\alpha=1}^n [\langle H(S^\alpha | J) \rangle]_n \quad (\text{B.23})$$

(a) は  $n = 2$ ， $r = 1/3$ ， $J_0/J = 1.0$ ，(b) は  $n = 2$ ， $r = 3$ ， $J_0/J = 1.0$  についての結果である．また，挿入図に比熱  $c = d[\langle E \rangle]_n / dT_S$  を示す．レプリカ数が有限のとき，比熱は次のように与えられる．

$$c(T_S, T_J) = \beta_S^2 \{ n([\langle E^2 \rangle]_n - [\langle E \rangle]_n^2) + [\langle E^2 \rangle] - \langle E \rangle^2 \}_n, \quad (\text{B.24})$$

クエンチ極限では，比熱は  $[\sigma_E^2]_0 = [\langle E^2 \rangle] - \langle E \rangle^2$  に一致する．図 B.3 から明らかなように，エネルギーは全ての温度領域で示量性を保つ．そして (a)，(b) とともに，転移点において比熱はカスプを示し，更に低温  $T_S$  で発散する． $T_S \rightarrow 0$  における比熱の発散と，転移温度におけるカスプは，それぞれ (B.24) の第一項と第二項に起因することがわかる．第一項は，スピン平均されたエネルギーの，相互作用に関する分散であり，つまり相互作用に関する揺らぎに対応する項である．そして第二項は，エネルギーのスピンに関する分散の相互作用平均であり，スピンに関する揺らぎに対応する項である．図 B.3 の (a) と (b) の比熱を比較してみると，スピンガラス転移点におけるカスプについては  $r$  依存性が見られないが，低温においては， $r = 3$  の場合は強い発散が見られる．したがって， $r = 3$  においては， $T_S$  低温で見られる，相互作用に関するある種の“転移”が，強く現れていることがわかる．

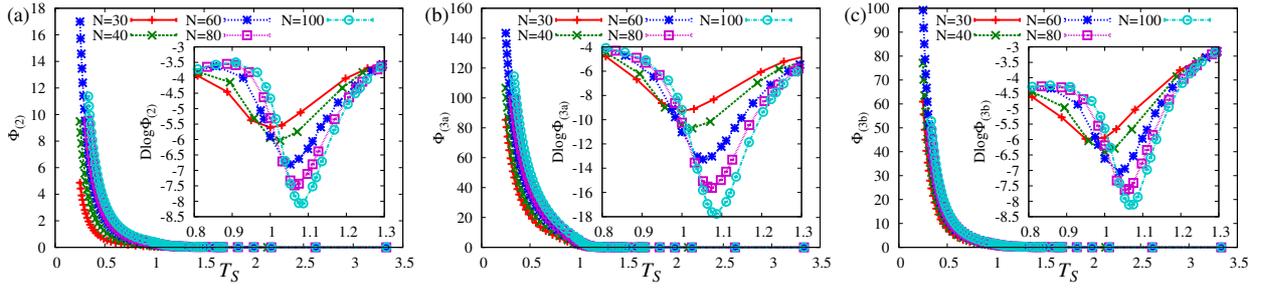


図 B.4  $n = 2, r = 1/3, J_0/J = 1.0$  における、フラストレーション秩序変数  $\Phi(x)$  の温度依存性を示す。スピングラス転移点は  $T_S^{\text{PM-SG}} = 1.272$ 、強磁性転移点は  $T_S^{\text{SG-FM}} = 1.130$  である。(a) は  $\Phi_{(2)}$ , (b) は  $\Phi_{(3a)}$ , (c) は  $\Phi_{(3b)}$  の、 $N = 30, 40, 60, 80, 100$  における結果を示す。挿入図に、 $D\log \Phi(x)$  のピーク付近の拡大図を示す。

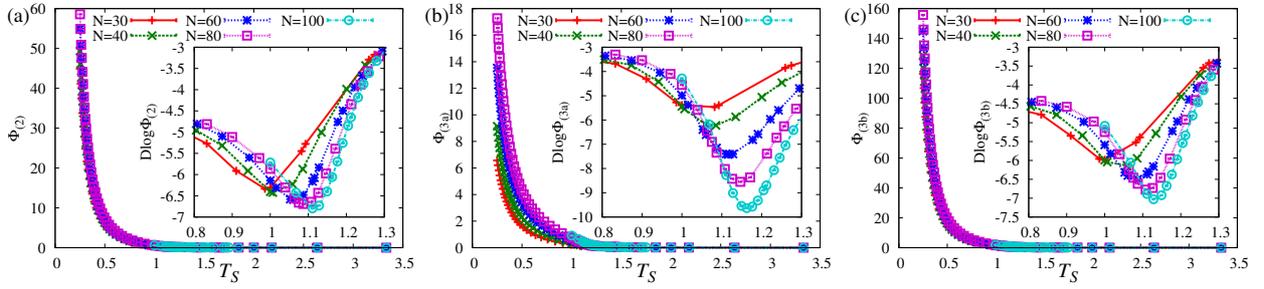


図 B.5  $n = 2, r = 3, J_0/J = 1.0$  におけるフラストレーション秩序変数  $\Phi(x)$  の温度依存性を示す。スピングラス転移点は  $T_S^{\text{PM-SG}} = 1.272$ 、強磁性転移点は  $T_S^{\text{SG-FM}} = 1.218$  である。図の説明は図 B.4 と同じである。

### フラストレーション秩序変数の特異性

最後に、数値的に観察したフラストレーション秩序変数  $\Phi(x)$  ( $x = 2, 3a, 3b$ ) の温度依存性について示す。 $n = 2, J_0/J = 1.0$  における  $r = 1/3$  と  $r = 3$  の結果を、図 B.4 と図 B.5 にそれぞれ示す。フラストレーション秩序変数は、すべて転移点付近から上昇しているように見える。また、十分大きいサイズにおいては、サイズ依存性が見られない。さらに、転移温度付近でのフラストレーション秩序変数の特異性を見るため、 $\log \Phi(x)$  の  $T_S$  微分 ( $D\log \Phi(x)$  と表記する) を挿入図に示す。これは次のように与えられる。

$$\frac{d \log \Phi(x)}{dT_S} = n\beta_S^2 \frac{\text{Cov}[\phi(x), \langle E \rangle]_n}{\Phi(x)} \equiv D \log \Phi(x). \quad (\text{B.25})$$

ここで  $\text{Cov}[A, B]_n$  は共分散  $\text{Cov}[A, B]_n = [AB]_n - [A]_n[B]_n$  を意味する。また  $[\phi(x)]_n = \Phi(x)$  である。 $\Phi(x)$  が有限の値を持ち始める温度で、 $D\log \Phi(x)$  は負の発散を見せる。図 B.4 と図 B.5 を比較すると、 $D\log \Phi(x)$  が発散する温度は、 $r = 3$  の方が高温であることがわかる。特に強磁性転移点において発散する  $D\log \Phi_{(3a)}$  は、 $r = 3$  では、より高温側で発散しており、

3 章で議論した,  $n > n_c$  では  $r$  が大きいほど強磁性転移点が高いという性質と矛盾しない.

## 付録 C

# 4 章に関する補足

### C.1 $t \sim O(1)$ の場合

$t \sim O(1)$  のとき, (4.7) の  $\hat{\mu}$  に関する積分に対しては, 鞍点法を適用させることは出来ない. 残りの  $q_{\alpha\beta}$  と  $\hat{q}_{\alpha\beta}$  に対しては鞍点法を用いることができ, その鞍点は SK 模型と一致する. この場合, 分配関数は次のように与えられる.

$$Z_J = \lim_{n \rightarrow 0} \int d\hat{\mu} \exp \left\{ t \left( -\mu \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \hat{\mu}_\alpha + \log \langle \langle \exp \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \hat{\mu}_\alpha S^\alpha \rangle \rangle \right) \right\} \quad (\text{C.1})$$

$\hat{q}_{\alpha\beta}$  と  $q_{\alpha\beta}$  は次のように与えられる.

$$q_{\alpha\beta} = \langle \langle S^\alpha S^\beta \rangle \rangle, \quad \hat{q}_{\alpha\beta} = \beta_S^2 q_{\alpha\beta} \quad (\text{C.2})$$

$\hat{\mu}_\alpha = \hat{\mu}$ ,  $\hat{q}_{\alpha\beta} = \hat{q}$  としてレプリカ対称性を仮定すると, 分配関数は

$$Z_J = \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{\mu} e^{-t\mu\beta_J\hat{\mu}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} Dz \left( \frac{\cosh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}}z)}{\cosh(\sqrt{\hat{q}}z)} \right)^{\beta_J} \right\}^t \quad (\text{C.3})$$

となり, 秩序変数は

$$q = \int Dz \tanh^2(\sqrt{\hat{q}}z), \quad \hat{q} = \beta_S^2 q \quad (\text{C.4})$$

となる. これは SK 模型におけるスピングラス秩序変数である. ここで  $\int Dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \exp(-z^2/2)$  とした.

### C.2 ターゲット間のオーバーラップと非ターゲット間のオーバーラップ

(4.9) に示すように, スピングラス秩序変数は, 係数  $1-p$  と  $p$  をもつ二項からなる. 式の形から, 第一項は非ターゲットスピンからの寄与, 第二項はターゲットスピンからの寄

与であることが予想される．これを確かめるためには，スピンの状態空間に関する和を， $q_{\alpha\beta}$  を基底としてとるのではなく，ターゲット秩序変数  $q_{\alpha\beta}^t$  と非ターゲット秩序変数  $q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  を基底としてとる必要がある．具体的には，二つのデルタ関数  $\delta(q_{\alpha\beta}^t - \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t S_i^\alpha S_i^\beta)$  と  $\delta(q_{\alpha\beta}^{\text{nt}} - \frac{1}{N-t} \sum_{i=t+1}^N S_i^\alpha S_i^\beta)$  を導入して，レプリカ法による計算を行う． $q_{\alpha\beta}^t$  と  $q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  を用いると，相互作用の分配関数  $Z_J$  は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} Z_J = \lim_{n \rightarrow 0} \int d\mathbf{q}^t d\mathbf{q}^{\text{nt}} d\hat{\mathbf{q}}^t d\hat{\mathbf{q}}^{\text{nt}} d\hat{\mathbf{m}} \exp N \{ & - \sum_{\alpha < \beta} \left( p \hat{q}_{\alpha\beta}^t q_{\alpha\beta}^t + (1-p) \hat{q}_{\alpha\beta}^{\text{nt}} q_{\alpha\beta}^{\text{nt}} \right) \\ & - p\mu \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \hat{\mu}_\alpha + \frac{\beta_S^2 n}{4} + \frac{\beta_S^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q_{\alpha\beta}^t + q_{\alpha\beta}^{\text{nt}})^2 \\ & + (1-p) \log \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta}^{\text{nt}} S^\alpha S^\beta} + p \log \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{\sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \hat{\mu}_\alpha S^\alpha + \sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta}^t S^\alpha S^\beta} \} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

ここで  $\hat{q}_{\alpha\beta}^t$  と  $\hat{q}_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  は，それぞれ  $q_{\alpha\beta}^t$  と  $q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  の共役変数である．鞍点方程式は次のように与えられる．

$$q_{\alpha\beta}^t = \frac{\text{Tr}_{\mathbf{S}} S^\alpha S^\beta \exp(\sum_{\alpha=1}^{\beta_J} S^\alpha + \sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta}^t S^\alpha S^\beta)}{\text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp(\sum_{\alpha=1}^{\beta_J} S^\alpha + \sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta}^t S^\alpha S^\beta)} \quad (\text{C.6})$$

$$q_{\alpha\beta}^{\text{nt}} = \frac{\text{Tr}_{\mathbf{S}} S^\alpha S^\beta \exp(\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta}^{\text{nt}} S^\alpha S^\beta)}{\text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp(\sum_{\alpha < \beta} \hat{q}_{\alpha\beta}^{\text{nt}} S^\alpha S^\beta)} \quad (\text{C.7})$$

また  $q_{\alpha\beta}^t$  と  $q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  の共役変数は， $q_{\alpha\beta}$  の共役変数と等しいことが分かる．

$$\hat{q}_{\alpha\beta}^t = \hat{q}_{\alpha\beta}^{\text{nt}} = \beta_S^2 (q_{\alpha\beta}^t + q_{\alpha\beta}^{\text{nt}}) = \beta_S^2 q_{\alpha\beta}. \quad (\text{C.8})$$

したがって，(C.6) と (C.7) は，それぞれ (4.9) の第一項と第二項と対応し， $q_{\alpha\beta} = (1-p)q_{\alpha\beta}^t + pq_{\alpha\beta}^{\text{nt}}$  と表すことが出来る．

### C.3 有効ハミルトニアンに関する規格化定数の導出

(4.8) で定義された，有効ハミルトニアン  $\Xi$ ， $\Xi_t$  の分配関数  $Z_{u,v} = \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{\Xi}$ ， $Z_{u,v}^t = \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{\Xi_t}$  の導出について説明する．(4.14) のようにレプリカ対称性を仮定すると，

$$Z_{u,v} = e^{-\frac{1}{2}(\beta_J \hat{q}_1 + (n - \beta_J) \hat{q}_3)} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left\{ \frac{\hat{q}_1}{2} \left( \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} S^\alpha \right)^2 + \hat{q}_2 \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} \sum_{\beta=\beta_J+1}^n S^\alpha S^\beta + \frac{\hat{q}_3}{2} \left( \sum_{\beta=\beta_J+1}^n S^\beta \right)^2 \right\} \quad (\text{C.9})$$

となる．これを平方完成し，二つのガウス積分を用いて表すと，スピンに関して一体問題化される．

$$\begin{aligned}
Z_{u,v} &= e^{-\frac{1}{2}(\beta_J \hat{q}_1 + (n-\beta_J) \hat{q}_3)} \exp \left\{ \frac{\hat{q}_1}{2} \left( \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} S^\alpha + \frac{\hat{q}_2}{\hat{q}_1} \sum_{\beta=\beta_J+1}^n S^\beta \right)^2 + \frac{\hat{q}_1 \hat{q}_3 - \hat{q}_2^2}{2\hat{q}_1} \left( \sum_{\beta=\beta_J+1}^n S^\beta \right)^2 \right\} \\
&= e^{-\frac{1}{2}(\beta_J \hat{q}_1 + (n-\beta_J) \hat{q}_3)} \\
&\quad \times \int Du Dv \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left\{ \sqrt{\hat{q}_1} u \sum_{\alpha=1}^{\beta_J} S^\alpha + \left( \sqrt{\frac{\hat{q}_2^2}{\hat{q}_1}} u + \sqrt{\frac{\hat{q}_1 \hat{q}_3 - \hat{q}_2^2}{\hat{q}_1}} v \right) \sum_{\beta=\beta_J+1}^n S^\beta \right\} \quad (\text{C.10})
\end{aligned}$$

ここで， $\hat{q}_2 \leq \sqrt{\hat{q}_1 \hat{q}_3}$  という仮定を用いた． $Du, Dv$  は， $u, v$  に関するガウス積分を表す ( $Du = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} du e^{-u^2/2}$ )．スピンに関する和をとり， $W(u, v) = \sqrt{\frac{\hat{q}_2^2}{\hat{q}_1}} u + \sqrt{\frac{\hat{q}_1 \hat{q}_3 - \hat{q}_2^2}{\hat{q}_1}} v$  とすると，分配関数は次のように与えられる．

$$Z_{u,v} = e^{-\frac{1}{2}(\beta_J \hat{q}_1 + (n-\beta_J) \hat{q}_3)} \int Du Dv \{2 \cosh(\sqrt{\hat{q}_1} u)\}^{\beta_J} \{2 \cosh(W(u, v))\}^{n-\beta_J} \quad (\text{C.11})$$

$$Z_{u,v}^t = e^{-\frac{1}{2}(\beta_J \hat{q}_1 + (n-\beta_J) \hat{q}_3)} \int Du Dv \{2 \cosh(\hat{\mu} + \sqrt{\hat{q}_1} u)\}^{\beta_J} \{2 \cosh(W(u, v))\}^{n-\beta_J} \quad (\text{C.12})$$

三つの秩序変数  $q_1, q_2, q_3$  は，(C.11) と (C.12) を補助変数で微分することで得られる．

## C.4 秩序変数の物理的な意味

三つの秩序変数が，それぞれ (4.26)，(4.27)，(4.28) のように表せることは，次のように確かめることができる． $q_1$  について，(4.26) の左辺を変形すると，次のようになる．

$$\begin{aligned}
\text{L.H.S} &= \frac{1}{Z_J} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[ \prod_{\alpha=1}^{\beta_J} \langle \psi_\alpha \rangle \frac{\langle \psi_1 S_i^1 \psi_2 S_i^2 \rangle_2}{\langle \psi_1 \rangle \langle \psi_2 \rangle} \right]_0 \\
&= \frac{1}{Z_J} \left[ \frac{\text{Tr}_{\mathbf{S}_1 \cdots \mathbf{S}_{\beta_J+1}} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^1 S_i^2 \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^{\beta_J+1} H_\alpha)}{\text{Tr}_{\mathbf{S}_1 \cdots \mathbf{S}_{\beta_J+1}} \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^{\beta_J+1} H_\alpha)} \right]_0 \\
&= \frac{1}{Z_J} \frac{2}{\beta_J(\beta_J - 1)} \lim_{n \rightarrow 0} \sum_{\alpha < \gamma \leq \beta_J} \left[ \text{Tr}_{\mathbf{S}_1 \cdots \mathbf{S}_n} \psi_1 \cdots \psi_{\beta_J} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\gamma \exp(-\beta_S \sum_{\alpha=1}^n H_\alpha) \right]_0 \\
&= \frac{1}{Z_J} \frac{2}{\beta_J(\beta_J - 1)} \sum_{\alpha < \gamma \leq \beta_J} q_1 Z_J = q_1 \quad (\text{C.13})
\end{aligned}$$

二行目から三行目へは，レプリカ法を用い，また三行目から四行目では，レプリカ対称性を仮定した． $q_2, q_3$  についても同様に，(4.27)，(4.28) が成立していることを確かめることができる．

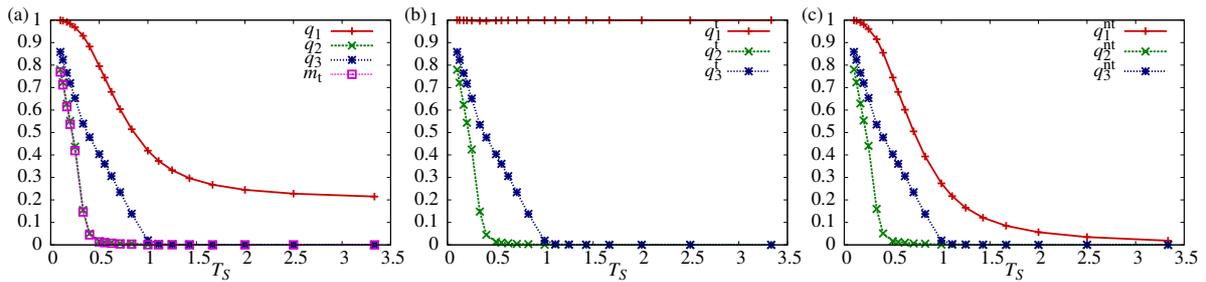


図 C.1  $p = 0.2, T_J = 2.0$  における, (a) スピングラス秩序変数とターゲット磁化, (b) ターゲット部分の秩序変数, (c) 非ターゲット部分の秩序変数の温度  $T_S$  依存性を示す.

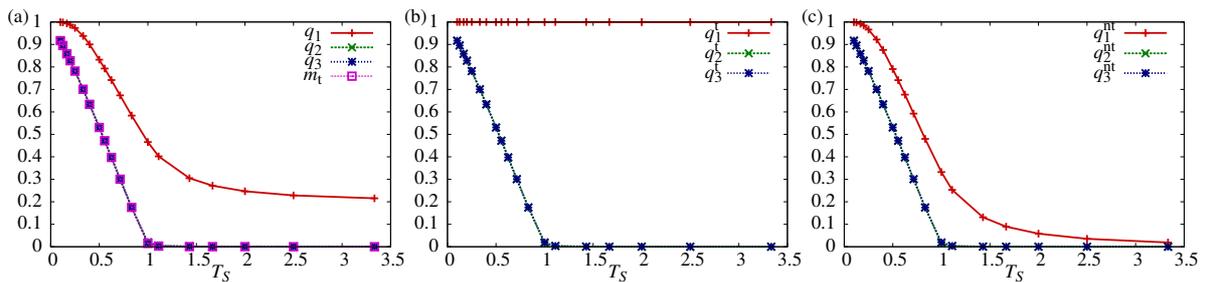


図 C.2  $p = 0.2, T_J = 1$  におけるターゲット部分の秩序変数 (a) と非ターゲット部分の秩序変数 (b) の温度  $T_S$  依存性を示す.  $T_J = 1$  における秩序変数とターゲット磁化の温度  $T_S$  依存性を示す.  $T_J = 1$  では, 全ての転移温度は等しく, また  $p$  に依存しない.

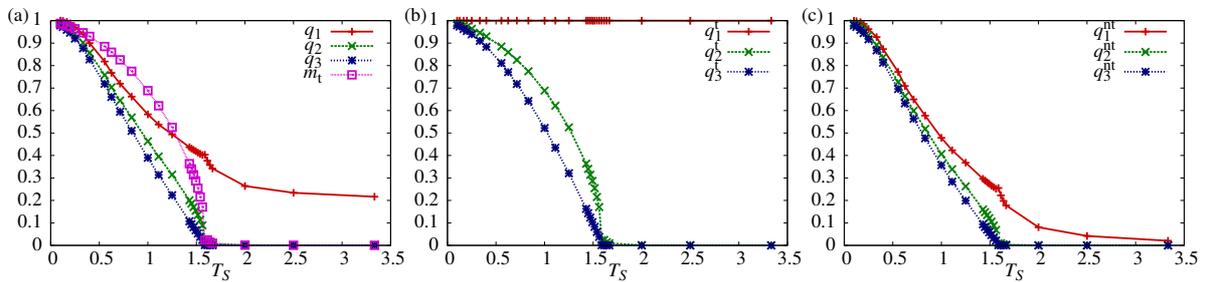


図 C.3  $p = 0.2, T_J = 0.2$  における, (a) スピングラス秩序変数とターゲット磁化, (b) ターゲット部分の秩序変数, (c) 非ターゲット部分の秩序変数の温度  $T_S$  依存性を示す.

### C.5 秩序変数とターゲット磁化の振る舞い

秩序変数  $q_1, q_2, q_3$  およびターゲット磁化  $m_t$  の温度  $T_S$  依存性を示す. その振る舞いは,  $T_J = 1$  を境に大きく変わるため,  $T_J > 1, T_J = 1, T_J < 1$  に分けて示す.

まず,  $T_J > 1$  における振る舞いの典型例として,  $T_J = 2$  における秩序変数とターゲット磁化のスピ温度依存性を図 C.1 (a) に示す.  $T_J > 1$  では,  $q_3$  の転移点は常に  $T_S = 1$  である.

しかし  $q_2$  の転移温度は,  $T_S$  が増加するほど低温になり,  $p$  が有限のとき,  $T_J \rightarrow \infty$  では転移を示さないと考えられる. また, ターゲット磁化  $m_t$  の転移温度は, 常に  $q_2$  の転移温度と等しい. この  $q_2, m_t$  の転移温度は,  $p$  が大きくなるほど下がるが,  $p > 0.1$  では  $p$  依存性は非常に弱い. また, 常に  $q_3 \leq q_2$  という関係が成立している.  $q_1$  は転移を示さず, 温度減少に対して単調に増加する.  $T_S \rightarrow \infty$  における  $q_1$  の値は,  $T_J$  に依存せずに  $p \tanh^2 \hat{\mu}$  である.

また図 C.1(b), (c) に, 秩序変数のターゲット部分 ( $q_1^t, q_2^t, q_3^t$ ) と非ターゲット部分 ( $q_1^{\text{nt}}, q_2^{\text{nt}}, q_3^{\text{nt}}$ ) の温度依存性を示す.  $q_1$  については,  $q_1^t$  は温度によらず 1 をとるのに対し,  $q_1^{\text{nt}}$  は  $T_S \rightarrow \infty$  で 0 であり, 温度上昇に対して緩やかに増加する.  $q_2, q_3$  については,  $q_2^t$  と  $q_2^{\text{nt}}, q_3^t$  と  $q_3^{\text{nt}}$  の振る舞いは一致している.

次に,  $T_J = 1$  における  $q_1, q_2, q_3, m_t$  の  $T_S$  依存性を図 C.2(a) に示す.  $q_2, q_3, m_t$  の転移温度は全て  $T_S = 1$  であり, その振る舞いはあらゆる温度で  $p$  に依存しない. また, ターゲット部分と非ターゲット部分の秩序変数の振る舞いを, 図 C.2(b), (c) に示す.  $T_J > 1$  における結果と同様,  $q_1^t$  は温度に依らず常に 1 をとり,  $q_1^{\text{nt}}$  は温度上昇に対して緩やかに上昇する. また, 全ての温度領域で  $q_2$  と  $q_3$  は一致していたが,  $q_2^t$  と  $q_3^t, q_2^{\text{nt}}$  と  $q_3^{\text{nt}}$  も一致することがわかる.

最後に,  $T_J < 1$  における振る舞いの典型例として,  $T_S = 0.2$  での秩序変数とターゲット磁化の振る舞いを図 C.3(a) に示す.  $q_2, q_3, m_t$  の転移点は全て一致しており, この転移温度は  $p$  が大きいほど高くなる.  $T_J \geq 1$  の場合とは異なり, 全ての温度点で  $q_2 \leq q_3$  である. また,  $q_2, q_3$  の転移点で,  $q_1$  が特異性を持つことがわかる.  $T_J \geq 1$  では,  $q_2, q_3$  の転移点においても  $q_1$  の振る舞いは変化していなかった.  $T_J < 1$  では,  $q_2$  と  $q_3$  の転移が,  $q_1$  の振る舞いに影響を与えることがわかる. また, 図 C.3(b), (c) に, 秩序変数のターゲット部分と非ターゲット部分の温度依存性を示す.  $T_S \geq 1$  の場合と同様,  $q_1^t$  はあらゆる温度で 1 をとる.  $q_1$  に見られた特異性は,  $q_1^{\text{nt}}$  に由来することがわかる.  $q_2^t, q_3^t$  と  $q_2^{\text{nt}}, q_3^{\text{nt}}$  の転移点は一致しているが,  $T_J \leq 1$  とは対照的に, 温度減少に対する増加の速さが大きく異なることがわかる.

## C.6 AT 安定性条件の導出

レプリカ対称自由エネルギーの安定性条件を導出する. 手続きは, 付録 B.1 と同様である. ただし, ここでは 3 つの秩序変数が存在するため, 各秩序変数のレプリカ対称解周りの安定性を調べる. まずレプリカのペア  $(\alpha, \beta)$  を次のように区分しておく.

$$(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_1, \quad \text{if } \alpha, \beta \leq \beta_J \quad (\text{C.14})$$

$$(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_2, \quad \text{if } \alpha \leq \beta_J, \beta > \beta_J \text{ or } \alpha > \beta_J, \beta \leq \beta_J \quad (\text{C.15})$$

$$(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_3, \quad \text{if } \alpha, \beta > \beta_J \quad (\text{C.16})$$

$C$  の添え字は, 秩序変数の添え字に対応しており,  $(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_x$  のとき,  $q_{\alpha\beta} = q_x$  である. レプリカ対称解周りの微小変異を,  $\eta^{\alpha\beta} = q^{\alpha\beta} - q_x$  ( $(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_x$ ),  $\epsilon^\alpha = \hat{\mu}^\alpha - \hat{\mu}$  ( $\alpha \leq \beta_J$ ) とす

る．ヘシアンは， $\mu^\alpha$  に関する  $\beta_J$  行と， $q_{\alpha\beta}$  に関する  $n(n-1)/2$  行から成る  $\{\beta_J + n(n-1)/2\} \times \{\beta_J + n(n-1)/2\}$  の行列である．まず，ヘシアンの  $\epsilon = \{\epsilon^\alpha\}$  に関する成分は，次のように求められる．

$$G(\epsilon^\alpha, \epsilon^\alpha) = -p(1 - \mu^2) \equiv A \quad (\text{C.17})$$

$$G(\epsilon^\alpha, \epsilon^\beta) = -p(q_1^t - \mu^2) \equiv B \quad (\text{C.18})$$

次に， $\eta = \{\eta^{\alpha\beta}\}$  に関する成分は，次のように求められる．

$$G(\eta^{\alpha\beta}, \eta^{\alpha\beta}) = 1 - \beta_S^2 \left\{ 1 - (1-p)q_x^{\text{nt}2} + pq_x^{\text{t}2} \right\} \equiv P_x, \quad (\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_x \quad (\text{C.19})$$

$$G(\eta^{\alpha\beta}, \eta^{\alpha\gamma}) = -\beta_S^2 \left\{ q_z - \left( (1-p)q_x^{\text{nt}} q_y^{\text{nt}} + pq_x^{\text{t}} q_y^{\text{t}} \right) \right\} \equiv Q_{x,y}^z \quad (\text{C.20})$$

,  $(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_x, (\alpha, \gamma) \in \mathbf{C}_y, (\beta, \gamma) \in \mathbf{C}_z$

$$G(\eta^{\alpha\beta}, \eta^{\gamma\delta}) = -\beta_S^2 \left\{ r_{xy} - \left( (1-p)q_x^{\text{nt}} q_y^{\text{nt}} + pq_x^{\text{t}} q_y^{\text{t}} \right) \right\} \equiv R_{x,y}, \quad (\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_x, (\gamma, \delta) \in \mathbf{C}_y \quad (\text{C.21})$$

ここで

$$r_{xy} = (1-p)\langle\langle S^\alpha S^\beta S^\gamma S^\delta \rangle\rangle + p\langle\langle S^\alpha S^\beta S^\gamma S^\delta \rangle\rangle_t, \quad (\alpha, \beta) \in \mathbf{C}_x, (\gamma, \delta) \in \mathbf{C}_y \quad (\text{C.22})$$

とした． $Q_{x,y}^z$  について， $x = y = 1$  および  $x = y = 3$  のときは，それぞれ  $z = 1, z = 3$  であることが自明なので，このとき  $z$  は省略する．また， $\epsilon$  と  $\eta$  のクロス項は次のように求められる．

$$G(\epsilon_\alpha, \eta_{\alpha\beta}) = -p\beta_S\mu(1 - q_1^t) \equiv C_1, \quad \gamma \leq \beta_J \quad (\text{C.23})$$

$$G(\epsilon_\alpha, \eta_{\alpha\beta}) = -p\beta_S(m_t - \mu q_2^t) \equiv C_2, \quad \gamma > \beta_J \quad (\text{C.24})$$

$$G(\epsilon_\alpha, \eta_{\beta\gamma}) = -p\beta_S(t_x - \mu q_x^t) \equiv D_x, \quad (\beta, \gamma) \in \mathbf{C}_x \quad (\text{C.25})$$

ここで，

$$t_x = (1-p)\langle\langle S^\alpha S^\beta S^\gamma \rangle\rangle + p\langle\langle S^\alpha S^\beta S^\gamma \rangle\rangle_t, \quad \alpha \leq \beta_J, (\beta, \gamma) \in \mathbf{C}_x \quad (\text{C.26})$$

とした．このヘシアンにおいて，負の値をとり得る固有値は，次の三つである．

$$\lambda_1 = P_1 - 2Q_{11} + R_{11} \quad (\text{C.27})$$

$$\lambda_2 = \frac{X - \sqrt{X^2 - 4Y}}{2} \quad (\text{C.28})$$

$$\lambda_3 = P_3 - 2Q_{33} + R_{33} \quad (\text{C.29})$$

ここで

$$X = (\beta_J + 1) \left( P_3 - (\beta_J + 4)Q_{33} + (\beta_J + 3)R_{33} + (P_2 - Q_{22}^3) \right) + (\beta_J - 1)(Q_{22}^1 - R_{22}) \quad (\text{C.30})$$

$$Y = \{P_3 - (\beta_J + 4)Q_{33} + (\beta_J + 3)R_{33}\} \cdot \{(\beta_J + 1)(P_2 - Q_{22}^3) + (\beta_J - 1)(Q_{22}^1 - R_{22})\} + 2\beta_J(\beta_J + 2)(Q_{23} - R_{23})^2 \quad (\text{C.31})$$

とした．この3つの固有値が正であるという条件から，AT 安定性条件 (4.40)，(4.41)，(4.42) が得られる．

## C.7 フラストレーション秩序変数の導出

フラストレーション秩序変数の表式を導出する．解析の方針は付録 B.2 と同様で，ベア分布関数がガウス分布であることを利用して，部分積分を用いて相互作用に関する物理量をスピンの物理量の平均に置き換える．

まず，ある相互作用  $J_{ij}$  の平均は，次のように与えられる．

$$[J_{ij}]_{\beta_J} = \frac{\beta_S \beta_J}{\sqrt{N}} \left[ \frac{\langle \psi S_i S_j \rangle}{\langle \psi \rangle} - \langle S_i S_j \rangle \right]_{\beta_J} \quad (\text{C.32})$$

$i, j$  について適切な範囲の和をとると， $\Phi_1^{\text{RS}}$  (4.48) およびターゲット - 非ターゲット間相互作用の平均 (4.49)，非ターゲット内相互作用の平均 (4.50) が得られる．また，分散は次のように与えられる．

$$[J_{ij}^2]_{\beta_J} = 1 + \frac{\beta_S^2 \beta_J}{N} \left[ (\beta_J - 1) \left( \frac{\langle \psi S_i S_j \rangle}{\langle \psi \rangle} \right)^2 - 2\beta_J \frac{\langle \psi S_i S_j \rangle \langle S_i S_j \rangle}{\langle \psi \rangle} + (\beta_J + 1) \langle S_i S_j \rangle^2 \right]_{\beta_J} \quad (\text{C.33})$$

したがって，partial annealing により相互作用のオーダーは  $O(N^{-1/2})$  になるものの，分散のリーディングオーダーは 1 のままであることがわかる．

次に，相互作用の二体相関については，次のように与えられる．

$$[J_{ij} J_{jk}]_{\beta_J} = \frac{\beta_S^2 \beta_J}{N} \left[ (\beta_J - 1) \frac{\langle \psi S_i S_j \rangle}{\langle \psi \rangle} \frac{\langle \psi S_j S_k \rangle}{\langle \psi \rangle} - \beta_J \left( \frac{\langle \psi S_i S_j \rangle \langle S_j S_k \rangle}{\langle \psi \rangle} + \frac{\langle \psi S_j S_k \rangle \langle S_i S_j \rangle}{\langle \psi \rangle} \right) + (\beta_J + 1) \langle S_i S_j \rangle \langle S_j S_k \rangle + \frac{\langle \psi S_i S_k \rangle}{\langle \psi \rangle} - \langle S_i S_k \rangle \right]_{\beta_J} \quad (\text{C.34})$$

これを  $i, j, k$  に関して， $i, j \leq t, k > t$  の領域で和をとると  $\Phi_2^{\text{RS}}$  が得られる．

相互作用ループの積の平均は、次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
[J_{ij}J_{jk}J_{ki}]_{\beta_J} &= (\beta_J - 1)(\beta_J - 2) \left[ \frac{\langle \psi^1 \psi^2 \psi^3 S_i^1 S_i^3 S_j^1 S_j^2 S_k^2 S_k^3 \rangle_3}{\langle \psi \rangle^3} \right]_{\beta_J} \\
&\quad - \beta_J(\beta_J - 1) \sum_{(\alpha\beta\gamma)} \left[ \frac{\langle \psi^1 \psi^2 S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\beta S_j^\gamma S_k^\gamma S_k^\alpha \rangle_3}{\langle \psi \rangle^2} \right]_{\beta_J} \\
&\quad + \beta_J(\beta_J + 1) \sum_{(\alpha\beta\gamma)} \left[ \frac{\langle \psi^1 S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\gamma S_k^\beta S_k^\gamma \rangle_3}{\langle \psi \rangle} \right] \\
&\quad + (\beta_J - 1) \left\{ \left[ \frac{\langle \psi^1 \psi^2 S_i^1 S_i^2 S_j^1 S_j^2 \rangle_2}{\langle \psi \rangle^2} \right]_{\beta_J} + \left[ \frac{\langle \psi^1 \psi^2 S_j^1 S_j^2 S_k^1 S_k^2 \rangle_2}{\langle \psi \rangle^2} \right]_{\beta_J} \right. \\
&\quad \quad \left. + \left[ \frac{\langle \psi^1 \psi^2 S_k^1 S_k^2 S_i^1 S_i^2 \rangle_2}{\langle \psi \rangle^2} \right]_{\beta_J} \right\} \\
&\quad - 2\beta_J \left\{ \frac{\langle \psi^1 S_i^1 S_k^1 S_i^2 S_k^2 \rangle_2}{\langle \psi \rangle} + \frac{\langle \psi^1 S_i^1 S_j^1 S_i^2 S_j^2 \rangle_2}{\langle \psi \rangle} + \frac{\langle \psi^1 S_j^1 S_k^1 S_j^2 S_k^2 \rangle_2}{\langle \psi \rangle} \right\} \\
&\quad - (\beta_J + 1)(\beta_J + 2) [\langle S_i^1 S_i^3 S_j^1 S_j^2 S_k^2 S_k^3 \rangle_3]_{\beta_J} \\
&\quad + (\beta_J + 1) [\langle S_i^1 S_i^2 S_j^1 S_j^2 \rangle_2 + \langle S_j^1 S_j^2 S_k^1 S_k^2 \rangle_2 + \langle S_k^1 S_k^2 S_i^1 S_i^2 \rangle_2]_{\beta_J}
\end{aligned} \tag{C.35}$$

ここで  $\langle \dots \rangle_2$ ,  $\langle \dots \rangle_3$  は、それぞれ 2-実レプリカ系、3-実レプリカ系における平均である。この表式を  $i \leq t, j, k > t$  について和をとると、フラストレーション秩序変数  $\Phi_3^{\text{RS}}$  が得られる。

## 付録 D

# partial anneal 系の Viana-Bray model

ここでは、疎結合スピングラス模型の partial anneal 系の例として、Viana-Bray model を取り上げる [Viana and Bray (1985)]。  $H_J$  を自由エネルギーとした場合の解析を示し、特に次数分布や次数相関の二温度依存性について説明する。

### D.1 モデルの定義

Viana-Bray model は、Erdős-Renyi ランダムグラフ上のスピングラス模型である [Viana and Bray (1985)]。  $N$  個のイジングスピン  $\{S_i\}$  から成る系を考える。 Viana-Bray model では、スピンのハミルトニアンは次のように与えられる。

$$H_S(\mathbf{S}|\mathbf{J}, \mathbf{D}) = - \sum_{i<j} D_{ij} J_{ij} S_i S_j \quad (\text{D.1})$$

変数  $D_{ij}$  は 0, 1 の二値をとる変数であり、  $D_{ij} = 0$  であればスピン  $S_i$  と  $S_j$  の間に相互作用は存在しない。 この模型の partial anneal 系では、相互作用の有無を表す変数である  $\{D_{ij}\} \equiv \mathbf{D}$  と、相互作用の重みである  $\{J_{ij}\} \equiv \mathbf{J}$  という二つの変数が遅い変数として扱われる。  $\mathbf{J}, \mathbf{D}$  とも対称行列 ( $J_{ij} = J_{ji}, D_{ij} = D_{ji}$ ) とする。ここでは、遅い変数の適応度として自由エネルギーを選ぶ。

$$\mathcal{H}(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S) = F(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S) - T_J \log P_0(\mathbf{J}) P_0(\mathbf{D}) \quad (\text{D.2})$$

$F(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S)$  はスピンに関する自由エネルギー  $F(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S) = -T_S \log Z(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S)$  であり、  $P_0(\mathbf{J}) = \prod_{i<j} P_0(J_{ij})$ ,  $P_0(\mathbf{D}) = \prod_{i<j} P_0(D_{ij})$  はそれぞれ  $\mathbf{J}, \mathbf{D}$  に関するペア分布関数で

ある．このとき， $J, D$  の同時平衡分布は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} P(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S, T_J) &= \frac{\exp(-\beta_J \mathcal{H}_{J,D})}{Z_J} \\ &= \frac{P_0(\mathbf{J})P_0(\mathbf{D})Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S)}{Z_J}, \quad Z_J = [Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D}; T_S)]_0 \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

$n$  は温度の比  $n = T_S/T_J$  であり，また  $[\dots]_0$  はベア分布関数  $P_0(\mathbf{J})$ ,  $P_0(\mathbf{D})$  による平均を意味する．ここでは，ベア分布関数を次のように与える．

$$P_0(D_{ij}) = \frac{c}{N} \delta(D_{ij}, 1) + \left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta(D_{ij}, 0) \quad (\text{D.4})$$

$$P_0(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp\left(-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2}\right) \quad (\text{D.5})$$

すなわち，クエンチ系では，スピン  $S_i, S_j$  間の相互作用は確率  $p = c/N$  で存在し， $1-p$  で存在しない．したがって，各スピンは平均で  $c$  本の相互作用を持つ．また SK 模型とは異なり，全相互作用の数は  $O(N)$  である．

partial anneal 系の Viana-Bray model の性質を調べるには，3 章の coupled mean-field model と同じように，分配関数のモーメント  $[Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0$  を計算する必要がある．

## D.2 レプリカ法による解析

ランダムグラフ上のスピングラス模型の解析には cavity 法も用いられるが，ここでは有限のレプリカ数の場合を計算する必要があるため，Monasson により導入されたレプリカ法を，有限レプリカ数の系へと拡張する [Monasson (1998), Nishimori (2001)]．レプリカ法の手続きに従い，レプリカ数  $n$  を整数として  $[Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0$  を計算し，実数の  $n$  へと接続する．まずは分配関数を次のように変形する．

$$\begin{aligned} [Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0 &= \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha\}} \text{Tr}_{\mathbf{D}} \int D\mathbf{J} P_0(\mathbf{J})P_0(\mathbf{D}) \exp\left(\beta_S \sum_{i<j} J_{ij} D_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha\right) \\ &= \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha\}} \text{Tr}_{\mathbf{D}} \prod_{i<j} \left\{ P_0(D_{ij}) \exp\left(\frac{(\beta_S J)^2}{2} D_{ij} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha\right)^2 + \beta_S J_0 D_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha\right) \right\} \\ &= \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha\}} \prod_{i<j} \exp\left[\log\left\{1 - \frac{c}{N} + \frac{c}{N} \exp\left(\frac{(\beta_S J)^2}{2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \beta_S J_0 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)\right)\right\}\right] \\ &\sim e^{-\frac{cN}{2}} \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha\}} \prod_{i<j} \exp\left[\frac{c}{N} \exp\left(\frac{(\beta_S J)^2}{2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \beta_S J_0 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

一行目から二行目で  $J$  に関する和をとり，二行目から三行目で  $D$  に関する和をとった．また，ベクトル  $S_i$  はレプリカ方向の  $n$  成分ベクトル， $S_i = \{S_i^1, S_i^2, \dots, S_i^n\}$  を意味する．こ

ここで  $C(\sigma)$  として,  $S_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) のうち配位  $\sigma$  と一致している配列の割合を定義する.

$$C(\sigma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(S_i, \sigma) \quad (\text{D.7})$$

したがって  $\sum_{\mathcal{S}} C(\mathcal{S}) = 1$  である. この関数を用いると, 分配関数は次のように表される.

$$\begin{aligned} [Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0 &= e^{-\frac{cN}{2}} \text{Tr}_{\{\mathcal{S}^\alpha\}} \exp\left(\frac{cN}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} C(\sigma_1)C(\sigma_2) e^{\frac{(\beta_S J)^2}{2}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^2 + \beta_S J_0(\sigma_1 \cdot \sigma_2)}\right) \\ &= e^{-\frac{cN}{2}} \text{Tr}_{\{\mathcal{S}^\alpha\}} \int \prod_{\sigma} \left\{ dC(\sigma) \delta\left(C(\sigma) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\sigma, S_i)\right) \right\} \\ &\quad \times \exp\left(\frac{cN}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} C(\sigma_1)C(\sigma_2) e^{\frac{(\beta_S J)^2}{2}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^2 + \beta_S J_0(\sigma_1 \cdot \sigma_2)}\right) \\ &= e^{-\frac{cN}{2}} \int \{dC(\sigma)\} \exp N \left\{ \frac{c}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} C(\sigma_1)C(\sigma_2) e^{\frac{(\beta_S J)^2}{2}(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^2 + \beta_S J_0(\sigma_1 \cdot \sigma_2)} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\sigma} C(\sigma) \log C(\sigma) \right\} \quad (\text{D.8}) \end{aligned}$$

すなわち, レプリカスピンの配位空間を  $C(\sigma)$  により輪切りし,  $C(\sigma)$  を基底として和をとっている. また  $C(\sigma)$  の定義より,  $C(\sigma)$  の積分領域は  $2^n$  次元の単位球内である. (D.8) に対しては, 鞍点法を適用することができる. ただし  $\sum_{\sigma} C(\sigma) = 1$  という条件つきで鞍点をとらなくてはならない. この条件に関するラグランジュ未定乗数  $\lambda$  を導入すると,  $C(\sigma)$  の鞍点は次のように与えられる.

$$C(\sigma) = \exp\left(-1 - \lambda + c \sum_{\sigma'} C(\sigma') e^{\frac{(\beta_S J)^2}{2}(\sigma' \cdot \sigma)^2 + \beta_S J_0(\sigma' \cdot \sigma)}\right) \quad (\text{D.9})$$

ここで, 次のようにレプリカ対称性を仮定して, スピンに関する和をとる. まず,  $C(\sigma)$  が  $\sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \equiv \mu$  を通して  $\sigma$  に依存すると考える. これにより,  $C(\sigma)$  はレプリカの置換に対して対称になる. また有効場  $p_{\text{RS}}(h)$  を用いて  $C(\sigma)$  が次のように書けるとする.

$$C(\sigma) = \int dh p_{\text{RS}}(h) \prod_{\alpha=1}^n \frac{e^{\beta_S h \sigma_{\alpha}}}{e^{\beta_S h} + e^{-\beta_S h}} = \int dh p_{\text{RS}}(h) \frac{e^{\beta_S h \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{\alpha}}}{(2 \cosh(\beta_S h))^n} \quad (\text{D.10})$$

これを用いると, 分配関数は次のように求められる.

$$\begin{aligned} [Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0 &= \exp\left[\frac{cN}{2} \left\{ \int dh_1 dh_2 p_{\text{RS}}(h_1) p_{\text{RS}}(h_2) \right. \right. \\ &\quad \times \int Dz(J_0, J) \cosh^n(\beta_S z) \{1 + \tanh(\beta_S z) \tanh(\beta_S h_1) \tanh(\beta_S h_2)\}^n \left. \right\} \\ &\quad - N \left\{ -1 - \lambda + c \int Dz(J_0, J) dh dh' p_{\text{RS}}(h) p_{\text{RS}}(h') \right. \\ &\quad \left. \times \cosh^n(\beta_S z) (1 + \tanh(\beta_S \tilde{h}) \tanh(\beta_S h'))^n \right\} \left. \right] \quad (\text{D.11}) \end{aligned}$$

ここで  $\int Dz(J_0, J) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} e^{-(z-J_0)^2/2J^2}$  とし, また,

$$\tilde{h} = \frac{1}{\beta_S} \operatorname{arctanh}(\tanh(\beta_S h) \tanh(\beta_S z)) \quad (\text{D.12})$$

とした. 有効磁場分布  $p_{\text{RS}}(h)$  は, 次の自己無撞着方程式から求められる.

$$\begin{aligned} p_{\text{RS}}(h) &= (2 \cosh(\beta_S h))^n e^{-1-\lambda} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{c^l}{l!} \int \left\{ \prod_{i=1}^l dh_i \frac{p_{\text{RS}}(h_i)}{(2 \cosh(\beta_S h_i))^n} Dz_i(J_0, J) \right\} \\ &\quad \times \prod_{i=1}^l \{2 \cosh \beta_S(z_i + h_i) \cdot 2 \cosh \beta_S(z_i - h_i)\}^{n/2} \\ &\quad \times \delta\left(h - \frac{1}{2\beta_S} \sum_{i=1}^l \log\left(\frac{\cosh \beta_S(z_i + h_i)}{\cosh \beta_S(z_i - h_i)}\right)\right) \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

このような分布関数についての自己無撞着方程式は, population dynamics により数値的に解くことができる [Mézard and Parisi (2001)]. その際, 分布関数を離散的に扱わなければならないため, 刻み幅  $\Delta h$  を調節する必要がある. 方法は次の通りである.

1. 初期条件として, 区間  $[h_{\min}, h_{\max}]$  の一様分布として  $p_{\text{RS}}^0(h)$  を定義する.
2. Poisson 分布に従って整数を生成する. これを  $x$  とする.
3.  $p_{\text{RS}}^0(h)$  にしたがって,  $h$  を  $x$  回生成する. これを  $h_1, \dots, h_x$  と表しておく. 生成方法は次の通りである. まず  $p_{\text{RS}}^0(h)$  に関する累積分布関数  $q_{\text{RS}}^0(h) = \int_{h_{\min}}^h dh p_{\text{RS}}^0(h)$  を用意しておく. そして  $[0,1]$  の乱数を生成し, その乱数が  $q_{\text{RS}}^0(h)$  より大きくなる最小の  $h$  を,  $p_{\text{RS}}^0(h)$  から生成された  $h$  とする.
4. 平均  $J_0$ , 分散  $J$  のガウス分布に従って,  $z$  を  $x$  回生成する. これを  $z_1, \dots, z_x$  としておく.
5. 生成した  $\{h_i\}, \{z_i\}$  ( $i = 1, \dots, x$ ) を用いて,

$$h_{\text{temp}} \equiv \sum_{i=1}^x \log(\cosh \beta_S(z_i + h_i) / \cosh \beta_S(z_i - h_i)) / 2\beta_S$$

を計算する. これは (D.13) のデルタ関数の引数部分である. そして  $h_i - \Delta h < h_{\text{temp}} \leq h_i + \Delta h$  を満たす  $p_{\text{RS}}^1(h_i)$  に対して, (D.13) の係数部分,

$$(2 \cosh(\beta_S h_{\text{temp}}))^n \prod_{i=1}^x \frac{\{\cosh \beta_S(h_i + z_i) \cosh \beta_S(h_i - z_i)\}^{n/2}}{\cosh^n(\beta_S h_i)}$$

を加える.

6. 3~5 を十分繰り返し, 得られた  $p_{\text{RS}}^1(h)$  を規格化し, 新たに  $p_{\text{RS}}^1(h)$  とする.
7. 2~6 の作業を, 分布関数が収束するまで繰り返す.

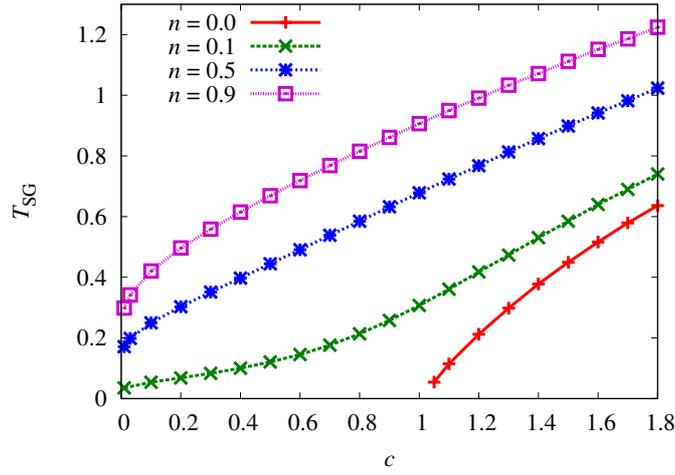


図 D.1  $n = T_S/T_J$  における，スピングラス転移温度  $T_{SG}$  の  $c$  依存性を示す．

## D.3 結果

### D.3.1 スピンに関する転移温度

有効磁場分布の自己無撞着方程式 (D.13) を解くと， $p_{RS}(h) = \delta(h)$  という解と，それ以外の解が得られる．まず，デルタ関数の有効磁場分布が安定な領域を常磁性相と定義する． $p_{RS}(h) = \delta(h)$  の安定性の破れ方には二通りあり，一次モーメントの線形安定性が不安定になる場合と，二次モーメントの線形安定性が不安定になる場合がある．前者を強磁性相への転移，後者をスピングラス相への転移と定義すると，その転移温度は次のように求められる．まず一次モーメント，二次モーメントをそれぞれ  $\epsilon_1, \epsilon_2$  として，次のように定義しておく．

$$\epsilon_x \equiv \int dh h^x \frac{p_{RS}(h)}{(2 \cosh(\beta_S h))^n}, \quad (x = 1, 2) \quad (D.14)$$

$p_{RS}(h) \sim \delta(h)$  として右辺を  $O(h^x)$  まで展開すると，(D.14) は

$$\epsilon_x = \epsilon_x \times c \int Dz(J_0, J) \cosh^n(\beta_S z) \tanh^x(\beta_S z), \quad (x = 1, 2) \quad (D.15)$$

となる．したがって，強磁性転移点  $T_{FM} = 1/\beta_{FM}$ ，スピングラス転移点  $T_{SG} = 1/\beta_{SG}$  はそれぞれ次のように与えられる．

$$c \int Dz(J_0, J) \cosh^n(\beta_{FM} z) \tanh(\beta_{FM} z) = 1 \quad (D.16)$$

$$c \int Dz(J_0, J) \cosh^n(\beta_{SG} z) \tanh^2(\beta_{SG} z) = 1 \quad (D.17)$$

図 D.1 に，いくつかの  $n = T_S/T_J$  における， $J_0 = 0, J = 1$  でのスピングラス転移温度  $T_{SG}$  の平均結合数  $c$  依存性を示す． $J_0 = 0$  のとき，強磁性転移は起こらない．クエンチ系 ( $n = 0$ )

では，スピングラス転移は  $c > 1$  で起こり， $T_S = 0$  のとき  $c = 1$  でパーコレーション転移が起きることが知られている．しかし有限のレプリカ数では，スピングラス転移は  $c > 0$  で起きることがわかる．したがって， $0 < c < 1$  で起こる相転移が， $n > 0$  のレプリカ数の系における特徴的な現象であると言える．

### D.3.2 次数分布

$n = T_S/T_J > 0$  の partial anneal 系で起きる，平均結合数  $0 < c < 1$  におけるスピングラス転移を，相互作用配位の変化，特に空間構造の変化から理解することを試みる．まずは，partial annealing を通して，次数分布がどのように変化されたかを調べる．次数分布  $P(k)$  は，次のように定義される．

$$P(k) \equiv \frac{1}{Z_J} [P_D(k|\mathbf{D}) Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0, \quad P_D(k|\mathbf{D}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i \delta(k, \sum_{j \neq i} D_{ij}) \quad (\text{D.18})$$

すなわち， $P(k)$  とは，全スピンのうち  $k$  本の相互作用を持つスピンの割合である．クロネッカーデルタを積分表示して， $\mathbf{J}$ ， $\mathbf{D}$  について和をとると，次のようになる．

$$\begin{aligned} P(k) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{Z_J} \text{Tr}_{\{\mathbf{S}^\alpha\}, \mathbf{D}} \oint \frac{dz}{2\pi i} z^{-k + \sum_{j \neq i} D_{ij} - 1} P_0(\mathbf{D}) \\ &\quad \times \exp\left(\frac{(\beta_S J)^2}{2} D_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \beta_S J_0 D_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)\right) \\ &\sim \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Z_J} \oint \frac{dz}{2\pi i z^{k+1}} \prod_{1 < i < j} \exp\left(-\frac{c}{N} + \frac{c}{N} e^{\frac{(\beta_S J)^2}{2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \beta_S J_0 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)}\right) \\ &\quad \times \prod_{j=2}^N \exp\left(-\frac{c}{N} + \frac{c}{N} z e^{\frac{\beta_S^2}{2} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \beta_S J_0 (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_j)}\right) \quad (\text{D.19}) \end{aligned}$$

一行目から二行目において，スピンに関する和を 1 番のスピン  $S_1$  で代表した．分配関数の計算と同様に，レプリカ対称性を仮定してスピンに関する和をとる．ただし，特別視した  $S_1$  に関する項にだけ積分変数  $z$  が含まれるため， $S_1$  を含まない  $C_{\setminus 1}(\sigma)$  を次のように定義する．

$$C_{\setminus 1}(\sigma) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N-1} \sum_{i=2}^N \delta(\mathbf{S}_i, \sigma) \quad (\text{D.20})$$

$S_1$  は， $C_{\setminus 1}(\sigma)$  に含めずに，そのまま和をとる． $C_{\setminus 1}(\sigma)$  を用いて分配関数と同様に計算すると，留数定理から，次数分布は次のように求められる．

$$P(k) \propto \frac{c^k}{k!} \int \left\{ \prod_{i=1}^k dh_i p_{\text{RS}}(h_i) \right\} \int \left\{ \prod_{i=1}^k Dz_i(J_0, J) \left( \frac{\cosh(\beta_S z_i)}{\cosh(\beta_S \tilde{h}_i)} \right)^n \right\} \left( 2 \cosh\left(\sum_{i=1}^k \beta_S \tilde{h}_i\right) \right)^n \quad (\text{D.21})$$

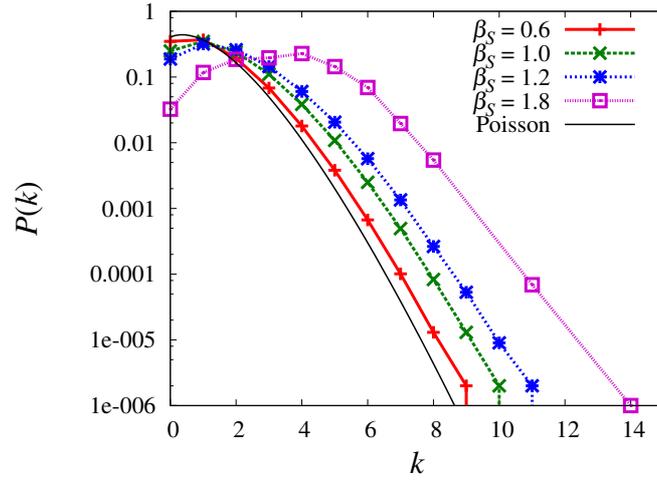


図 D.2  $n = 0.9$ ,  $c = 0.9$  における次数分布の温度  $T_S$  依存性を示す． $J_0 = 0$ ,  $J = 1$  とした．スピングラス転移温度は  $\beta_{SG} \sim 1.16$  である．実線で，平均結合数  $c = 0.9$  の Poisson 分布を同時に示している．温度が下がるほど，高い次数側に分布のピークが現れる．

比例定数部分は省略した．ここで

$$\tilde{h}_i = \frac{1}{\beta_S} \operatorname{arctanh}(\tanh(\beta_S z_i) \tanh(\beta_S h_i)) \quad (\text{D.22})$$

とした． $n \rightarrow 0$  では，次数分布は全ての温度で平均結合数  $c$  の Poisson 分布と一致する．

図 D.2 に， $n = 0.9$ ,  $c = 0.9$  における次数分布の温度依存性を示す． $J_0 = 0$ ,  $J = 1$  とした．(D.21) から明らかなように，スピングラス転移点より高温，つまり  $p_{RS}(h) = \delta(h)$  のときは，次数分布は Poisson 分布を保つ．ただし，その平均結合数は上昇する．これを  $c_{\text{eff}}(n)$  とすると，次のように与えられる．

$$c_{\text{eff}}(n) = c \int Dz(J_0, J) \cosh^n(\beta_S z) \quad (\text{D.23})$$

$n \rightarrow 0$  極限では，平均結合数は  $c$  に一致する．一方，スピングラス転移温度以下では，次数分布は Poisson 分布からずれる．図 D.2 に示すパラメータ領域では，スピングラス転移温度は  $\beta_{SG} \sim 1.16$  である．低温になるほど，次数分布のピークは高い次数側へとシフトすることがわかる．

### D.3.3 次数相関

前節の結果から，partial anneal 系においては，スピングラス転移温度において次数分布が Poisson 分布からずれることが明らかになった．本節では，相互作用の構造に関して，より高次の情報を取り出すことで，partial anneal 系 Viana-Bray model におけるグラフ構造を明確にすることを試みる．具体的には，次数相関に注目する．ある二つのスピながつ

ているとき，その両端のスピンがそれぞれ  $k, l$  である確率として，次数の同時分布  $P(k, l; D = 1)$  を次のように定義する．

$$P(k, l; D = 1) \equiv \frac{1}{Z_J} [P_D(k, l; D = 1) Z^n(\mathbf{J}, \mathbf{D})]_0 \quad (\text{D.24})$$

ここで，

$$P_D(k, l; D = 1) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N C_2} \sum_{i < j} \delta(k, \sum_{j \neq i} D_{ij}) \delta(D_{ij}, 1) \delta(l, \sum_{i \neq j} D_{ij}) \quad (\text{D.25})$$

とした．解析手法は，次数分布の導出と同様である．ただし，ここでは二つのスピンを特別視するため，次の修正された変数を導入する．

$$C_{\setminus 1,2}(\boldsymbol{\sigma}) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N-2} \sum_{i=3}^n \delta(\mathbf{S}_i, \boldsymbol{\sigma}) \quad (\text{D.26})$$

次数分布の導出と同様に， $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$  は  $C_{\setminus 1,2}(\boldsymbol{\sigma})$  に含めずにそのまま和をとり，また留数定理を用いる．その結果，次数相関は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} P(k, l; D = 1) &\propto \frac{c^{k-1}}{(k-1)!} \frac{c^{l-1}}{(l-1)!} \frac{c}{N} \int Dx(J_0, J) \\ &\times \int \left\{ \prod_{i=1}^{k-1} dh_i p_{\text{RS}}(h_i) Dz_i(J_0, J) \right\} \int \left\{ \prod_{i=1}^{l-1} dh'_i p_{\text{RS}}(h'_i) Dz'_i(J_0, J) \right\} \\ &\times \left( \prod_{i=1}^{k-1} \frac{\cosh(\beta_S z_i)}{\cosh(\beta_S \tilde{h}_i)} \prod_{i=1}^{l-1} \frac{\cosh(\beta_S z'_i)}{\cosh(\beta_S \tilde{h}'_i)} \right)^n \\ &\times \left[ 4 \left\{ \cosh(\beta_S \sum_{i=1}^{k-1} \tilde{h}_i) \cosh(\beta_S \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{h}'_i) \cosh(\beta_S x) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sinh(\beta_S \sum_{i=1}^{k-1} \tilde{h}_i) \sinh(\beta_S \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{h}'_i) \sinh(\beta_S x) \right\} \right]^n \end{aligned} \quad (\text{D.27})$$

比例定数は省略した． $n \rightarrow 0$  では， $P(k, l; D = 1)$  は平均  $c$  をもつ二つの Poisson 分布の積  $\times c/N$  ( $D = 1$  になる確率) に収束する．また  $p_{\text{RS}}(h) = \delta(h)$  である常磁性相においては，平均  $c_{\text{eff}}(n)$  の Poisson 分布の積  $\times c_{\text{eff}}(n)/N$  に収束する．図 D.3 に，次数相関

$$\sum_{k,l} kl P(k, l, D = 1) - \sum_k k \sum_l P(k, l, D = 1) \cdot \sum_l l \sum_k P(k, l, D = 1) \quad (\text{D.28})$$

の温度依存性を表す．図 D.3 に示されているパラメータ領域におけるスピングラス転移温度は， $n = 0.7$  のとき  $T_{\text{SG}} \sim 0.769$ ， $n = 0.8$  のとき  $T_{\text{SG}} \sim 0.816$ ， $n = 0.9$  のとき  $T_{\text{SG}} \sim 0.862$  である．次数相関は  $T_S \rightarrow \infty$  では 0 に収束するが，スピングラス転移点付近では負の次数相関を持つ．これは定義 (D.28) より， $c_{\text{eff}}(n)$  が 1 以上の値を持つ場合に起こる．適切な規格化

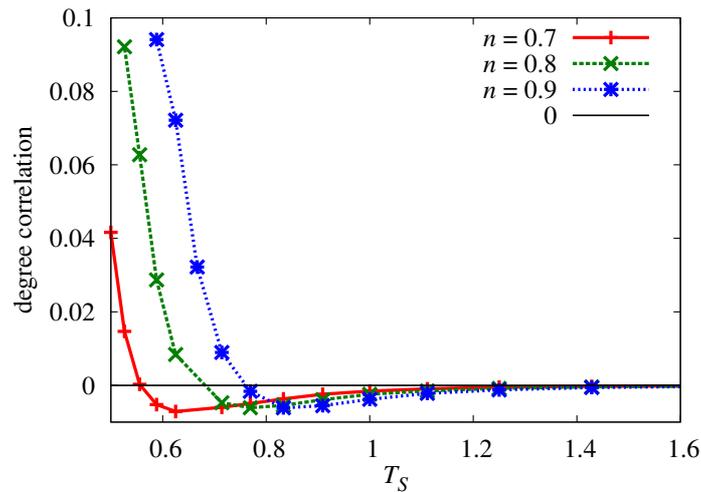


図 D.3  $c = 0.9$  における次数相関の温度依存性を示す．例として， $n = 0.7, 0.8, 0.9$  の場合を示している．また同時に  $0$  を実線で表している．スピングラス転移温度は， $n = 0.7$  のとき  $T_{SG} \sim 0.769$ ， $n = 0.8$  のとき  $T_{SG} \sim 0.816$ ， $n = 0.9$  のとき  $T_{SG} \sim 0.862$  である．スピングラス転移温度より高温でも，次数相関が存在している． $T_S \rightarrow \infty$  で，次数相関は  $0$  に収束する．

を行うと，相関は  $0$  に収束すると考えられる．本質的な点は，低温における次数相関の上昇である．低温においては，次数相関は温度減少に対して連続的に上昇する．前節の結果とあわせて，partial anneal 系の Viana-Bray model では，低温で高い次数を持つスピンが増えるだけでなく，次数の間に相関が存在するという特徴があることが明らかになった．

## D.4 まとめ

partial anneal 系の Viana-Bray model について， $H_J$  を自由エネルギーとした場合の解析を行った．レプリカ法による解析を行い，系の温度比  $n = T_S/T_J$  依存性を明らかにした．クエンチ系では，平均結合数  $c$  が  $1$  以上のときにスピングラス転移が起こるのに対し，partial anneal 系では， $c > 0$  でスピングラス転移が起こることが分かった．そこで，主に  $0 < c < 1$  の領域に着目して結果を示した．partial anneal 系における次数分布を導出した結果，partial anneal 系では，スピングラス転移点より高温では，次数分布は  $c_{\text{eff}}(n) (> c)$  の Poisson 分布に従い，転移点以下では Poisson 分布からずれることが明らかになった．スピングラス転移点以下の次数分布は，より高い次数側にピークを持つ分布であった．さらに高次の情報として，次数相関を導出した．その結果，次数相関はスピングラス転移点より低温では，温度減少に対して連続的に増加することがわかった．したがって，この温度領域で得られる相互作用は，平均次数が高いだけでなく，次数間に相関があるということが明らかになった．

このように，partial anneal 系において，次数相関を持つネットワークが構成できること

が明らかになった．次数相関を持つネットワークは，assortative mixing などと呼ばれる [Newman (2002)]．自由エネルギー以外の関数を適応度とする Viana-Bray model についても，assortativity の進化という点に着目して，更に解析を進める必要がある．また，有限結合数のモデルに対する partial anneal 系をネットワークの問題として考えるには，よりミクロなネットワークの情報を取り出さなくてはならない．そのためには，partial anneal 系における相互作用行列の固有値解析などからネットワークを特徴付けることも考えられる．

## 参考文献

- [Acar et al. (2008)] M. Acar, J. T. Mettetal, and A. van Oudenaarden, *Nature Genetics* **40**, 471 (2008).
- [Ackley et al. (1985)] D. H. Ackley, G. E. Hinton, and T. J. Sejnowski, *Cogn. Sci.* **9**, 147 (1985).
- [Allahverdyan et al. (2000)] A. E. Allahverdyan, T. M. Nieuwenhuizen, and D. B. Saakian, *Euro. phys. J. B* **16**, 317 (2000).
- [de Almeida and Thouless (1978)] J. R. L. de Almeida, and D. J. Thouless, *J. Phys. A: Math. Gen.* **11**, 983 (1978).
- [Alon et al. (1999)] U. Alon, M. G. Surette, N. Barkai, and S. Leibler, *Nature (London)* **397**, 168 (1999).
- [Ancel and Fontana (2000)] L. W. Ancel and W. Fontana, *J. Exp. Zool. (Mol. Dev. Evol.)* **288**, 242 (2000).
- [Bryngelson et al. (1987)] J. D. Bryngelson and P. G. Wolynes, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **84**, 84 (1987).
- [Carmo et al. (2010)] E. do Carmo, D. B. Liarte, and S. R. Salinas, *Phys. Rev. E* **81**, 062701 (2010).
- [Ciliberti et al. (2007)] S. Ciliberti, O. C. Martin, and A. Wagner, *PLoS Comput. Biol.* **3**, e15 (2007).
- [Cover and Thomas (1991)] T. Cover, and J. Thomas, *Elements of Information Theory* (John Wiley & Sons. Inc., New York, 1983).
- [Crow (1983)] J. F. Crow, *Genetic Notes (Eighth edition)* (Burgess Pub., 1983).
- [Dawkins (1976)] R. Dawkins, *The Selfish Gene* (Oxford University Press, Oxford, 1976).
- [Derrida (1981)] B. Derrida, *Phys. Rev. B* **24**, 2613 (1981).
- [Dotsenko et al. (1994)] V. Dotsenko, S. Franz, and M. Mézard, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 2351 (1994).
- [Eigen and Schuster (1978)] M. Eigen, and P. Schuster, *NATURWISSENSCHAFTEN* **65**, 7 (1978).
- [Elowitz et al. (2002)] M. B. Elowitz, A. J. Levine, E. D. Siggia, and P. S. Swain, *Science*

- 297, 1183 (2002).
- [Fisher (1930)] R. A. Fisher, *The Genetical Theory of Natural Selection* (Clarendon Press, Oxford, 1930).
- [Frank (1997)] S. A. Frank, *Evolution* **51**, 1712 (1997).
- [Glauber (1963)] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [Go (1983)] N. Go, *Ann. Rev. Biophys. Bioeng.* **12**, 183 (1983).
- [Gross and Mezard (1984)] D. J. Gross, and M. Mezard, *Nucl. Phys.* **B240**, 431 (1984).
- [Guerra (1996)] F. Guerra, *Int. J. Mod. Phys. B* **10**, 1675 (1996).
- [Hukushima and Nemoto (1996)] K. Hukushima and K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604 (1996).
- [Hukushima (1999)] K. Hukushima, *Phys. Rev. E* **60**, 3606 (1999).
- [Kaern et al. (2005)] M. Kaern, T. C. Elston, W. J. Blake, and J. J. Collins, *Nat. Rev. Genet.* **6**, 451 (2005).
- [Kaneko (1981)] K. Kaneko, *Prog. Theor. Phys.* **66**, 129 (1981).
- [Kaneko (2006)] K. Kaneko, *Life: An Introduction to Complex Systems Biology* (Springer-Verlag, Berlin, New York, 2006).
- [Kaneko (2007)] K. Kaneko, *PLoS ONE* **2**, e434 (2007).
- [Kaneko (2008)] K. Kaneko, *Chaos* **18**, 026112 (2008).
- [Kaneko et al. (2008)] K. Kaneko, K. Sato, T. Michiue, K. Okabayashi, K. Ohnuma, H. Danno, and M. Asashima, *J. Exp. Zool. B* **310**, 492 (2008).
- [Kauffman (1995)] S. Kauffman, *At Home in the Universe: The Search for Laws of Self-Organization and Complexity* (Oxford Univ. Press, Oxford, 1995).
- [Kimura (1968)] M. Kimura, *Nature* **217**, 624 (1968).
- [Kimura (1983)] M. Kimura, *The Neutral Theory of Molecular Evolution* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1983).
- [Landry et al. (2007)] C. R. Landry, B. Lemos, S. A. Rifkin, W. J. Dickinson, and D. J. Hartl, *Science* **317**, 118 (2007).
- [Li et al. (2004)] F. Li, T. Long, Y. Lu, Q. Ouyang, and C. Tang, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101**, 4781 (2004).
- [Mamasakhlisov et al. (2008)] Y. S. Mamasakhlisov, A. Ali, and R. Podgornik, *J. Stat. Phys.* **133**, 659 (2008).
- [Matsuura et al. (2009)] T. Matsuura, Y. Kazuta, T. Aita, J. Adachi, and T. Yomo, *Mol. Sys. Biol.* **5**, 297-1 (2009).
- [Mattis (1976)] D. C. Mattis, *Phys. Lett.* **56**, 421 (1976).
- [Mézard and Parisi (2001)] M. Mézard, and G. Parisi, *Eur. Phys. J. B* **20**, 217 (2001).
- [Mézard et al. (1987)] M. Mézard, G. Parisi, and M. A. Virasoro, *Spin Glass Theory and*

- Beyond* (World Sci. Pub., 1987).
- [McGuinness (1974)] B. F. McGuinness, *Theoretical Physics and Philosophical Problems* (Springer, 1974).
- [Milo et al.(2002)] R. Milo, S. Shen-Orr, S. Itzkovitz, N. Kashtan, D. Chklovskii, and U. Alon, *Science* **298**, 824 (2002).
- [Monasson (1998)] R. Monasson, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 513 (1998).
- [Nakajima and Hukushima (2008)] C. H. Nakajima, and K. Hukushima, *Phys. Rev. E* **78**, 041132 (2008).
- [Nakajima and Hukushima (2009)] T. Nakajima, and K. Hukushima, *Phys. Rev. E* **80**, 011103 (2009).
- [Newman (2002)] M. E. J. Newman, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 208701 (2002).
- [Nishimori (2001)] H. Nishimori, *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction* (Oxford Univ. Pr., 2001).
- [Nowak (2006)] M. Nowak, *Evolutionary Dynamics: Exploring the Equations of Life* (Belknap Press of Harvard University Press, 2006).
- [Onuchic and Wolynes (2004)] J. N. Onuchic and P. G. Wolynes, *Current Opinion in Structural Biology* **14**, 70 (2004).
- [Parisi and Rizzo (2008)] G. Parisi, and T. Rizzo, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 117205 (2008).
- [Penney et al. (1993)] R. W. Penney, A. C. C. Coolen, and D. Sherrington, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 3681 (1993).
- [Rabello et al. (2008)] S. Rabello, A. C. C. Coolen, C. J. Perez-Vicente and F. Fraternali, *J. Phys. A: Math. Theor.* **41**, 285004 (2008).
- [Saito et al. (1997)] S. Saito, M. Sasai, and T. Yomo, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **94**, 11324 (1997).
- [Sakata et al. (1) (2009)] A. Sakata, K. Hukushima, and K. Kaneko, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 148101 (2009).
- [Sakata et al. (2) (2009)] A. Sakata, K. Hukushima, and K. Kaneko, *Phys. Rev. E* **80**, 051919 (2009).
- [Sakata et al. (3) (2009)] A. Sakata, K. Hukushima, and K. Kaneko, *J. Phys.: Conf. Ser.* **197**, 012003 (2010).
- [Sakata and Hukushima (2010)] A. Sakata, and K. Hukushima, arXiv:1010.5346, (2010).
- [Sato et al. (2003)] K. Sato, Y. Ito, T. Yomo, and K. Kaneko, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **100**, 14086 (2003).
- [Shannon (1949)] C. E. Shannon, *A Mathematical Theory of Communication* (Univ. of Illinois Press, Urbana, 1949).
- [Shinomoto (1987)] S. Shinomoto, *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, 1305 (1987).

- [Stein (1992)] D. Stein, *Spin Glass and Biology* (World Scientific Publishing, Singapore, 1992).
- [Takayama (1988)] H. Takayama, Prog. Theor. Phys. **80**, 827 (1988).
- [Takayama (1992)] H. Takayama, J. Phys. Soc. Jpn **61**, 2512 (1992).
- [Tanaka and Edwards (1980)] F. Tanaka, and S. F. Edwards, and J. Phys. F: Met. Phys. **10**, 2769 (1980).
- [Toulouse (1977)] G. Toulouse, Commun. Phys. **2**, 115 (1977).
- [Uezu et al. (2009)] T. Uezu, K. Abe, S. Miyoshi, and M. Okada, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 025004 (2010).
- [Viana and Bray (1985)] L. Viana, and A. J. Bray, J. Phys. C **18**, 3037 (1985).
- [Waddington (1957)] C. H. Waddington, *The Strategy of the Genes* (George Allen & Unwin LTD, Bristol, 1957).
- [Wagner (2005)] A. Wagner, *Robustness and Evolvability in Living Systems* (Princeton University Press, New Jersey, 2005).
- [Wright (1932)] S. Wright, Proc. of The Sixth International Congress of Genetics **1**, 356 (1932).
- [木村 (1988)] 木村 資生, 生物進化を考える (岩波新書 1988).
- [篠本 (1992)] 篠本 滋, 情報の統計力学 (丸善 1992).