

スピングラスと Jarzynski 等式の違い

難問をコンピュータに解かせる汎用アルゴリズムは応用上とても重要である。巡回セールスマン問題に代表されるような組み合わせ最適化問題に対する汎用的解法であるシミュレートドアニーリング (SA) は物理学が実社会に直接役立つ貢献をした著しい例である。解くべき最適化問題に対して与えられるコスト関数をエネルギーとみなして、その値が最小の状態を物理的なプロセスを用いて到達するというのがそのアイデアである。高温の状態にあるとき、熱揺らぎの効果が大きいためエネルギーの障壁を越えて色々な状態を探索する。段々と温度を下げていくと、エネルギーの低い状態にとどまる確率が高まり、ゆっくりと温度を下げた場合には、エネルギーの最小の状態へ高い確率で到達できる。つまりコンピュータ上の仮想的な冒険家が山を駆けずり回って、谷底にあるといわれている宝物を探してくれるというわけだ (図1)。エネルギーの低いところを重点的に探しているうちに見つかるという期待を冒険家はもっているのだ。

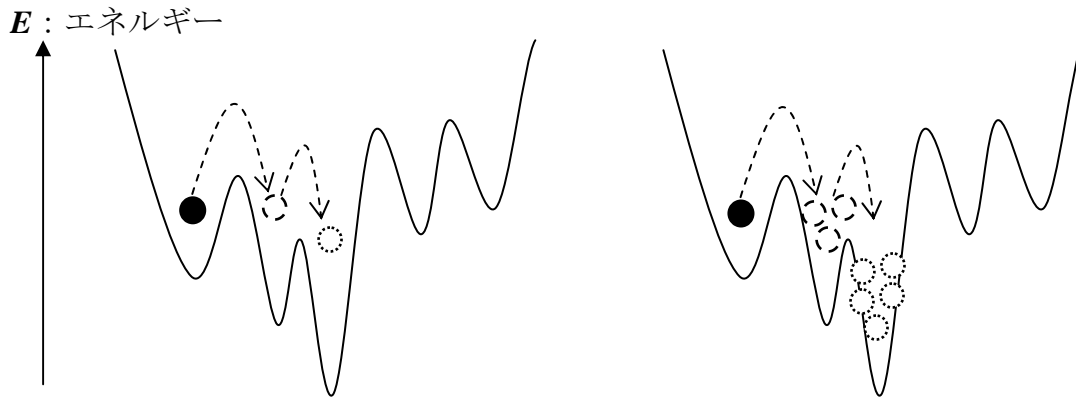


図1：ひとりで山を駆けずり回る冒険家 (SA) と集団で探索する冒険家たち (PA)

この時、冒険家の数は増やせないだろうか？上記のプロセスを並列的に行う事を考えよう。その際、エネルギーが下がった場合は、その並列数を増やしていくという作戦である (図1)。確率的な要素と探索数を増やす事によってより効率化を目指すというこの手法は、ポピュレーションアニーリング (PA) と呼ばれる。この手法は物理として見直すと、非平衡統計力学の基礎として有名となった Jarzynski 等式の中に一端を垣間見る事ができる。Jarzynski 等式は、ある決められた操作を繰り返して得られた仕事の値の指数関数の実現値を重みとして持つ平均が、驚くべき事にその操作の始めと終わりのパラメータに対応するそれぞれの平衡状態を結びつけるという構造をしている。有名な応用としては自由エネルギーの差を計算するというものであろう。先ほどの PA に対応させると、冒険家を増やす数が仕事、即ちエネルギーの差によって決まるというわけだ。多くの冒険家たちの報告を総合して平均をとると、平衡状態が明らかとなるという手法となっている。十分低温の平衡状態であれば、基底状態にほとんどの冒険家は到達している。

最近、京都大学の関と東京工業大学の西森らはこの PA をスピングラス模型に適用する場合について検討を行い、いくつかの厳密な関係式を得た。この関係式は後に述べるようにスピングラスの平衡状態を調べるための新たな手法としての可能性を秘めており、日本物理学会が発行

する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)の 2010 年 7 月号に掲載された。

スピングラスとは、磁性体の中に混入した不純物の効果によって、内部に非一様な相互作用を持つ磁性体的一种である。この不純物の効果を取り入れた解析は非常に困難であり、スピングラスの研究は実験的、数値的な手法を用いることが多い。スピングラスの中にはマイクロな自由度のスピンの向きを平行にそろえようとする強磁性相互作用と反平行にそろえようとする反強磁性相互作用による効果が競合するという特徴がある。そのためスピングラスの物性を調べるために、実験的、もしくは数値的なシミュレーションで平衡状態を調べようとしても非常に長い時間を有する事が知られている。

特に興味をもたれている、スピンの向きがバラバラのまま固まっている、スピングラス相の性質を調べるのは非常に困難とされている。しかしながらゲージ対称性と Jarzynski 等式を駆使した厳密な関係式では、我々に、いや冒険家たちに新しい道筋を示してくれる。

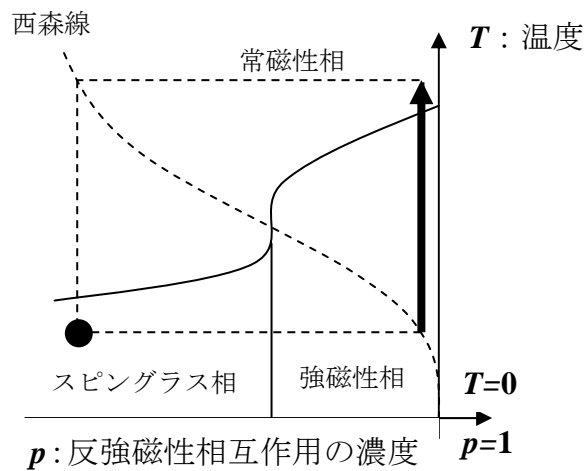


図 2 : スピングラスの典型的な相図と本論文に示された特別な PA の関係。

上記で紹介した組み合わせ最適化問題の一群はスピングラス模型に対応させて考える事ができる。つまり本論文で解析された結果は、PA をスピングラス模型に対して行うという事に対応している。冒険家にスピングラス模型の平衡状態を調べてもらおうというわけだ。図 2 に示すように矢印のように、なんと温度を上げていくと、黒丸で示されたところの平衡状態が調べられることが本論文で示す等式からわかった。これは具体的に言えば、難しいスピングラス相に入り込まないで、比較的易しい常磁性相、及び強磁性相内で冒険家たちは働いてもらえばよいという不思議な関係を示している。実際にこの性質を利用して、スピングラス相の性質を調べる事や他の分野への応用など発展的な研究が望まれる。そういう意味で本論文は、極めて解析的な要素は強いものの、将来へ向けた基礎的で重要な知見を提供している。

論文掲載 J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) No.8, p.084003

電子版 <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/79/084003> (7 月 26 日公開済)

<情報提供：大関 真之（京都大学）、西森 秀稔（東京工業大学）>