イジングモデル秩序変数の相関係数化による
組み合わせ最適化問題解法

斉藤　晃（akira311049@gmail.com）

要約

任意の相互作用パラメータを持つイジングモデルの秩序変数を相関係数で表すことができた。これにより検定力分析で決まるサンプル数によって、ある精度の条件下で、秩序変数を求めることができる。温度 0 でのイジングモデルの秩序変数は、組み合わせ最適化問題の解となることが知られている。各秩序変数により yes なのか no なのかを知りたいだけであれば、サンプル数で求まる秩序変数で判断することができる。つまり、組み合わせ最適化問題を、計算ステップ数 T 、入力サイズ N に対して$T\sim \mathcal{O}(N^k)$で解くことができる可能性がある。このことは NP 困難問題を多項式時間で解ける可能性を示しており、P=NP を暗示している。

1　前書き

未解決問題で、P=NP なのか P≠NP なのかという問題がある。ここで、通常のコンピュータのように解を逐次的に探索する決定性計算機によって多項式時間で解ける問題がクラス P(Polynomial）、各計算ステップで Q 個の分岐を許し，n ステップにおいて分岐した Q^n 個の解を同時に処理可能な仮想的な計算機（非決定性計算機）を用いて多項式時間で解ける問題の集合がクラス NP(Nondeterministic Polynomial)である。評価関数の最小化或いは最大化を扱う最適化問題が対象となる分類として NP 困難がある。例えば、巡回セールスマン問題において，複数の都市と都市間の距離が与えられたとき，全ての都市を 1 度訪問する巡回路の中で移動距離が最小の経路を求める問題は NP 困難に属し，移動距離が目標値以下の経路が存在するかを答える問題は NP 完全に属する。巡回セールスマン問題の NP 困難バージョンが解ければ NP 完全バージョンに即座に回答することができる。また、多くの NP 困難問題がイジングモデルの基底状態探索として表現できることが知られており、また全ての NP 問題がイジングモデルの基底状態探索に多項式時間還元可能である。イジングモデルの温度 0 での秩序変数がステップ数~ $\mathcal{O}(N^k)$で求まることの価値は大きい。[2]

2　結果

イジングモデルの秩序変数を共分散（または相関係数）で表せた。（n は 1 または 0 ）

$$\frac{\partial\langle n_x\rangle}{\partial t}=-H_{(\lambda_{(x)})}$$

$$-H_{(\lambda_{(x)})}=\sum_{i=1}^{N}h_i\lambda_{(x,ii)}+\sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2}J_{i,j}\lambda_{(x,ij)}$$

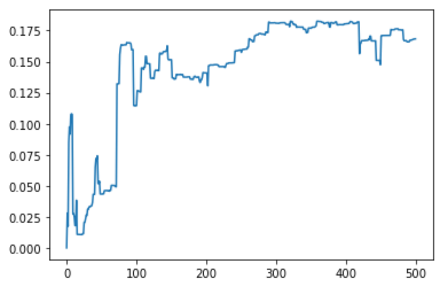
$$\lambda_{(x,ij)} = \langle n_x n_i n_j \rangle - \langle n_x \rangle \langle n_i n_j \rangle \text{（共分散）}$$

$$\rho_{(x,ij)} = \frac{\lambda_{(x,ij)}}{s_{(x)} s_{(ij)}} \text{（相関係数）}$$

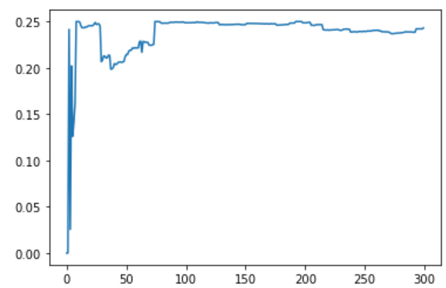
$$s_{(x)} = \sqrt{\langle n_x \rangle (1 - \langle n_x \rangle)} \quad s_{(ij)} = \sqrt{\langle n_i n_j \rangle \left(1 - \langle n_i n_j \rangle\right)} \text{（標準偏差）}$$

相関係数は検定力分析により決まるサンプル数での計算で代替できる。厳密な秩序変数の値ではなく、相互作用の結果 0 になるか 1 になるかのみを知りたい場合は、すべての状態和を行う必要がなく、サンプルでの計算で結果を知ることができる。入力サイズ（ネットワーク要素の数）N での共分散 $\lambda_{(x,ij)}$の値は次のようにある状態和の数で収束する。

N=12

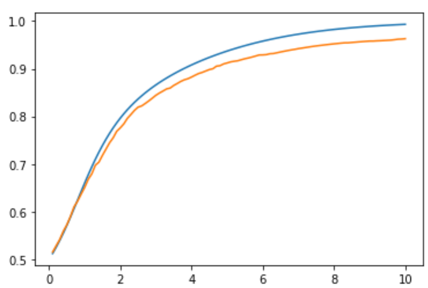


N=100



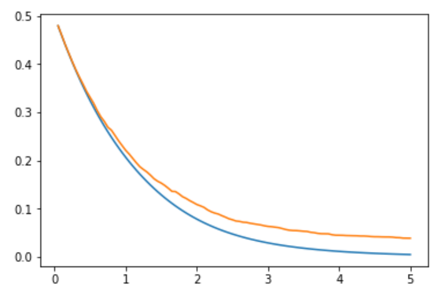
サンプル数 $N_S = 404$ での結果（赤）と厳密解（青、状態和数N_{all}）との比較は以下の通り

N=9



$N_S = 404$ $N_{all} = 512$

N=12



$N_S = 404$ $N_{all} = 4096$

全ての状態和の数はべき乗で増えるのに対してサンプル数N_S一定値でも 0 または 1 の判断は可能であることがわかる。結果、あるネットワーク上の要素の秩序変数$\langle n_x \rangle$の温度 0 のときの 0 または 1 の判断（組み合わせ最適化問題の解）は以下のステップ数で求まる。

$$N_{step} = N_t N_S N^2 \sim \mathcal{O}(N^2)$$

N_tは判断のつくまでの温度のステップ数、N_sは共分散を求めるサンプル数である。

3　理論

イジングモデル秩序変数の相関係数表示は以下のように導ける。

$$n_x = 0\ or\ 1$$

の状態を持つネットワークノードが相互作用をしており、系のハミルトニアンが以下で表せるとする。（イジングモデルは一般に $n_x = -1\ or\ 1$ だが簡単な計算で $n_x = 0\ or\ 1$ として扱うことができる）

$$-H_{(n)} = \sum_{i=1}^{N} h_i n_i + \sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2} J_{i,j} n_i n_j$$

秩序変数 $\langle n_x \rangle$ は以下で求まる。

$$\langle n_x \rangle = \frac{Z_{(n_x=1)}}{Z}$$

$$Z = \sum_{\{n\}} e^{-H_{(n)}t}$$

$$t = \frac{1}{k_B T}$$

Z は分配関数であり、$Z_{(n_x=1)}$ はn_xが 1 に固定された分配関数である。 $n_x = 0\ or\ 1$ であることから分子は $n_x = 1$ の項のみが残るためである。

ここで t での微分を行うと

$$\frac{\partial \langle n_x \rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{Z_{(n_x=1)}}{Z}$$

$$= \frac{1}{Z} \frac{\partial Z_{(n_x=1)}}{\partial t} - \frac{1}{Z^2} Z_{(n_x=1)} \frac{\partial Z}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} -H_{(n)} n_x e^{-H_{(n)}t} - \langle n_x \rangle \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} -H_{(n)} e^{-H_{(n)}t}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} \left(\sum_{i=1}^{N} h_i n_i + \sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2} J_{i,j} n_i n_j \right) n_x e^{-H_{(n)}t} - \langle n_x \rangle \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} \left(\sum_{i=1}^{N} h_i n_i + \sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2} J_{i,j} n_i n_j \right) e^{-H_{(n)}t}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} h_i \left(\frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} n_x n_i e^{-H_{(n)}t} - \langle n_x \rangle \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} n_i e^{-H_{(n)}t} \right)$$

$$+ \sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2} J_{i,j} \left(\frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} n_x n_i n_j e^{-H_{(n)}t} - \langle n_x \rangle \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} n_i n_j e^{-H_{(n)}t} \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} h_i(\langle n_x n_i n_i\rangle - \langle n_x\rangle\langle n_i n_i\rangle) + \sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2} J_{i,j}\left(\langle n_x n_i n_j\rangle - \langle n_x\rangle\langle n_i n_j\rangle\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} h_i \lambda_{(x,ii)} + \sum_{i<j}^{\frac{1}{2}N^2} J_{i,j}\lambda_{(x,ij)}$$

秩序変数の微分形が共分散で表せた。また、同様の計算で標準偏差は

$$s_{(x)} = \sqrt{\langle n_x\rangle(1-\langle n_x\rangle)} \quad s_{(ij)} = \sqrt{\langle n_i n_j\rangle\left(1-\langle n_i n_j\rangle\right)}$$

と求まるので、相関係数を使って表すこともできる。

$$\rho_{(x,ij)} = \frac{\lambda_{(x,ij)}}{s_{(x)}s_{(ij)}} \quad \textit{（相関係数）}$$

4　考察

多くの組み合わせ最適化問題はイジングモデルに還元できる。その解は温度 0 での各秩序変数の値がオンであるかオフであるかによって決まる。今、秩序変数の微分形が共分散（相関係数）によって表せた。共分散（相関係数）は全状態和によって厳密解となるが、検定力分析によりある精度の下、サンプル数によって代替できる。組み合わせ最適化問題の解のためには、厳密な共分散（相関係数）の値は必要なく、ある程度の温度で反転することのないオンかオフかの判断ができる値さえ得られれば十分である。このコントロール可能な、サンプル数をN_sと、温度のステップ数N_tにより、$N_t N_s N^2 \sim \mathcal{O}(N^2)$で秩序変数が求まる。つまり、組み合わせ最適化問題の解が$\sim \mathcal{O}(N^k)$で得られる可能性を示しており、NP 困難問題を多項式時間で解け、P=NP が成り立つ可能性がある。また、統計力学だけでなく、多くの分野に応用が可能な複雑ネットワークへの貢献が期待できる。それはこの世界を作る、相互作用ネットワークの解析手段への一歩であるかもしれない。

5　引用文献

[1] H. Tazaki: *Statistical mechanics 2* (Chiyoda, Tokyo, 2008). 6nd ed., Vol. 11, Chap. 2, p. 430.

[2] Okada Shuntaro: 大規模な組合せ最適化問題に対する量子アニーリングマシンの活用方法に関する研究 (Tohoku University, 2021)