

数理科学演習問題集

非線形力学系と統計力学

Contents

0	この演習について	2
1	非線形力学系	3
1.0	常微分方程式の数値積分方法	4
1.1	線形安定性解析、非線形振動	6
1.1.1	線形安定性解析	6
1.1.2	非線形振動	7
1.2	非線形振動子における引き込み現象	8
1.3	神経細胞の興奮現象と Hodgkin-Huxley 方程式	9
1.3.1	Hodgkin-Huxley 方程式の解析	9
1.3.2	HH 方程式の縮約	9
1.4	カオス	11
2	モンテカルロ法	14
2.1	乱数生成	14
2.1.1	乱数とは？	14
2.2	ランダムウォーク	16
2.2.1	ランダムウォークとは？	16
2.3	Langevin 方程式	17
2.4	[自由課題] パーコレーション	17
2.5	Ising モデル	18
2.5.1	Metropolis 法	19
2.5.2	Finite Size Scaling	22
2.5.3	Binder parameter	23
3	モデリング（自由研究）	24

0 この演習について

概要

担当先生 畠山哲央

作成者 陳柏源

本資料は、2023年度冬学期に行われた数理科学演習Iの課題資料を再構成したものである。

内容

統計物理学、非線形科学に関連した課題のシミュレーションをおこなう。以下の3つのトピックを順番におこなう。

1. 非線形力学系: 約4週
具体的には、分岐現象、引き込み現象、カオスに取り組む。
2. モンテカルロ法: 約4週
具体的には、Isingモデル、パーコレーションに取り組む。
3. 各種現象のモデリング（自由研究）：約4週
これまでに行ってきたことの応用を、多自由度力学系、統計物理、非平衡現象、生命現象に見出し、実際にモデルをつくって研究する。

1 非線形力学系

単振動（調和振動子）のような線形微分方程式は手計算で解を求めることができますが、一般に非線形の場合には手計算で解を求めることはできません（現在の人類の数学の能力では解く事ができない）。二つの研究の仕方として、数値計算を用いて解の挙動を観察する方法がある。

この演習では、非線形力学系の理論的基礎についての講義は行わない。非線形微分方程式系のある程度の部分は、数値計算を実際にして初めて理解が進む場合が多い。この演習ではそのような側面を取り扱う。

内容

- 線形安定性解析、非線形振動
- 非線形振動子の同期現象
- 神経細胞の興奮現象
- カオス系の解析

参考書

1. ベルジェ、ポモウ、ビダル『カオスの中の秩序』産業図書
2. Ott, “Chaos in Dynamical Systems,” Cambridge Univ. Press
3. ニコリス、プリゴジン『散逸構造』岩波書店
4. 林初男『神経システムの非線形現象』コロナ社
5. 長島弘幸、馬場良和『カオス入門』培風館
6. ウィンフリー『生物時計』東京化学同人

1.0 常微分方程式の数値積分方法

この章では、以下のように表される微分方程式の解を数値的に求めることを目指す。

$$\frac{dx}{dt} = f(t, \mathbf{x}) \quad (1)$$

非線形微分方程式の解を解析的に求めることは一般的にはできず、そのため計算機で数値的に解を求める必要がある。微分積分を厳密に取り扱うには極限操作が必要になるが、無限の計算リソースはあり得ないので、微分方程式を数値的に解く際には近似して漸化式を得る必要がある。微分方程式の数値解法法に用いられる方法としては、主に以下のようなものがある（実際には無限に方法があり得るが、実用上使われるのは通常の用途であれば以下のようなものである）。

Euler法

精度は Δt （刻み時間）の1次。以下 Δt を h とする。

$$x_{n+1} = x_n + f(t_n, x_n)h \quad (2a)$$

$$t_{n+1} = t_n + h \quad (2b)$$

2次 Runge-Kutta 法

精度は h の2次。

Heun法

$$\mathbf{k}_1 = f(t_n, x_n)h \quad (3a)$$

$$\mathbf{k}_2 = f(t_n + h, x_n + \mathbf{k}_1)h \quad (3b)$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \quad (3c)$$

$$t_{n+1} = t_n + h \quad (3d)$$

中点法

$$\mathbf{k}_1 = f(t_n, x_n)h \quad (4a)$$

$$\mathbf{k}_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{\mathbf{k}_1}{2}\right)h \quad (4b)$$

$$x_{n+1} = x_n + \mathbf{k}_2 \quad (4c)$$

$$t_{n+1} = t_n + h \quad (4d)$$

4次 Runge-Kutta 法

精度は h の4次。精度の良さと計算量の手頃さから、実用上最もよく使われる。本演

習でも基本的には4次の Runge-Kutta 法を用いるのが好ましい,

$$\mathbf{k}_1 = f(t_n, x_n)h \quad (5a)$$

$$\mathbf{k}_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{\mathbf{k}_1}{2}\right)h \quad (5b)$$

$$\mathbf{k}_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{\mathbf{k}_2}{2}\right)h \quad (5c)$$

$$\mathbf{k}_4 = f(t_n + h, x_n + \mathbf{k}_3)h \quad (5d)$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \quad (5e)$$

$$t_{n+1} = t_n + h \quad (5f)$$

(注：多変数関数の微分方程式を数値積分する際は、全ての変数を同時に計算し更新しなければならない。偏微分方程式の数値解法でも同様。)

演習 1.0.0

以下の調和振動子を Euler 法と4次の Runge-Kutta 法で数値的に解け。

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x \quad (6)$$

刻み時間を変化させ、それぞれの解法で解いた場合の相空間での軌道がどのように変化するか比較せよ。また、 $x^2 + \left(\frac{dx}{dt}\right)^2$ の値が時間と共にどのように変化するか確かめよ。

1.1 線形安定性解析、非線形振動

非線形微分方程式の解を解析的に求めることは一般的にできない。そのため、対象とする非線形現象の理解のためには解の安定的な挙動を理解することが重要となる。ここでは相空間での解の挙動の観察方法の基礎を学ぶ。

1.1.1 線形安定性解析

以下のような2変数非線形微分方程式を考える。

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = f(X, Y), \\ \frac{dY}{dt} = g(X, Y) \end{cases} \quad (7)$$

この方程式が固定点 $\dot{X} = \dot{Y} = 0$ をみたす (X_0, Y_0) を持つ場合には、固定点のまわりで展開することで、以下のような線形化された微分方程式を得ることができる。

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = Ax + By, \\ \frac{dy}{dt} = Cx + Dy \end{cases} \quad (8)$$

ここで、 (x, y) は固定点からの微小な変化を意味するように $((X, Y) = (X_0 + x, Y_0 + y))$ 。得られた線形化方程式の挙動を調べることで、元の非線形微分方程式の固定点のまわりでの局所的な性質を理解することができる。このような方法は **線形安定性解析** と呼ばれる。

平衡点の分類 式 (8) は、次のような線形2階微分方程式として書き直すことも出来る。

$$\frac{d^2x}{dt^2} - (A + D)\frac{dx}{dt} + (AD - BC)x = 0 \quad (9)$$

この微分方程式の解は、 (x, y) 平面上を時間的に動く点として捉えることができる。一般にこの点の集合を軌道、軌道がその上を動く空間を **相空間** という。

固定点 $(x, y) = (0, 0)$ のまわりでの微分方程式の解の振舞いは、パラメーター A, B, C, D の値によって変化する。固定点の性質は次の特性方程式

$$\lambda^2 - (A + D)\lambda + (AD - BC) = 0 \quad (10)$$

の根によって、安定渦状態 (stable focus), 不安定渦状態 (unstable focus), 安定結節点 (stable node), 不安定結節点 (unstable node), 中心 (center), 鞍点 (saddle) に分類することが出来る。

演習 1.1.1

1. 上の6種類の固定点それぞれパラメータ A, B, C, D のどのような条件で得られるか整理してみよ (homework)。
2. それぞれの条件に合う微分方程式を作り、計算機で数値的に解いて、相空間の軌跡を図示せよ。
3. 調和振動子、減衰振動子はそれぞれどのように分類されるか。

1.1.2 非線形振動

非線形振動の典型的な例として van der Pol 方程式が挙げられる。

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0 \quad (11)$$

ただし $\mu > 0$ 。ここでは、上記の van der Pol 方程式を変数変換した以下の方程式を扱う。

$$\frac{d^2x}{dt^2} - (\epsilon - x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0 \quad (12)$$

(細かい注： μ は正の数であるが、 ϵ は実数であるため、変数変換が成り立つのは $\epsilon > 0$ の領域だけ。)

演習 1.1.2

van der Pol 方程式 (12) に対し、

1. 線形安定性解析を行い、固定点の安定性を調べよ。
2. 計算機を用いて解いてみる。時間発展、および相空間上の解軌道を描いてみよう。様々な初期条件から出発したときの軌道の様子を観察せよ。 ϵ の値によって、解の定性的な振舞いはどのように変化するか。
3. 相空間を適当な断面で輪切りにして、その断面上で解軌道が通過する点の挙動を追うことで相空間構造の特徴をうまく捉えることができる場合がある（このような平面を **Poincaré断面** と呼ぶ）。 $x = 0$ の Poincaré断面（今の場合は直線）をとって、軌道の振舞いを様々な初期条件について観察せよ。
4. Poincaré断面上における離散化された軌道（Poincaré写像）を $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ とする（ここで、点列は Poincaré断面を同一方向に横切る点のみで構成する）。横軸に x_n 、縦軸に x_{n+1} をプロット（リターンマップ）し、その関数の形や、 $n \rightarrow \infty$ での点の漸近挙動を様々な初期条件について数値的に観測せよ。その漸近する状態は何に対応するか考察し、さらにその状態の線形安定性と唯一性を数値的に説明せよ。
5. $\epsilon = 0$ の場合には安定なリミットサイクルが出現する（**Hopf分岐**）。 ϵ が十分小さい場合に、リミットサイクルの振幅はパラメータ ϵ にどのように依存するか、 ϵ に対するオーダーを評価せよ。また、その依存性を解析的に説明せよ。

1.2 非線形振動子における引き込み現象

非線形振動子の興味深い振舞いは、周期的な外力を与えたときに見られる。例えば van der Pol 方程式に対し、次のように周期的外力を加えてみる。

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1-x^2)\frac{dx}{dt} + x = F \sin \omega t \quad (13)$$

$\epsilon > 0$ を考える。ここで左辺は式 (11) を適当に変数変換すれば得られる。ある条件の元では、非線形振動子の元の周期数が外力の周期数と少し異なっているが、外力周期数に同調して振動するようになる。これを **引き込み現象** という。特に、外力周期数への同調という意味で、**強制引き込み** ともいう。線形振動子に周期的外力を加えた場合、うなりを生ずるが引き込みを起こさない。引き込みは非線形振動子の重要な特徴である。

演習 1.2.0

1. 適当な μ について、 F と ω を様々に変えたときの振舞いを観察せよ。
2. リミットサイクルの外力に対する相対的な周期で、引き込みを特徴づける。適当な F に対して、 ω に対するリミットサイクルの相対周期の変化を観察せよ。
3. 横軸 F 、縦軸 ω にして、引き込みの起こるパラメータ領域を相図として表現してみよ (**Arnoldの舌** を観察せよ)。
4. μ とともに F, ω 依存性がどのように変わってゆくか観察せよ。
5. $u = \omega t$ なる変数を導入すると、系は 1変数の 1階微分方程式になる。 $u(t + 2\pi/\omega) = u(t)$ とすると、強制引き込みを T^2 トーラス上の運動として捉えることができる。適当な上下 Poincaré断面を取り、解の挙動を観察せよ。リターンマップを構成し、得られた写像の振舞いから ω に対するアトラクタの振る舞いを議論せよ。また、この写像の振る舞いはトーラス上での解軌道とどのように対応するか。
6. 振動子の引き込み現象を 1次元写像でモデル化したものに以下のような写像がある。

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \Omega - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi\theta_n) \quad (14)$$

この写像は **circle map** と呼ばれる。これは位相 ϕ で表される 2つの振動子の引き込みを表しており、結合していないときの周波数をそれぞれ、 $P(\phi)$, Ω , $P(\phi) = P(\psi)$, $\theta_n = \phi/2\pi$ とする。

振動子を周期外力と見なせば、前項までで解析した結果との対応を考えることができる。

$K < 1$ の領域に注目し、パラメータ Ω, K に対する系の振る舞いを調べよ。前問で構成したリターンマップと比較し、物理的な対応を考えよ (**Arnoldの舌**, **悪魔の階段** を観察せよ)。

1.3 神経細胞の興奮現象と Hodgkin-Huxley 方程式

1.3.1 Hodgkin-Huxley 方程式の解析

Hodgkin-Huxley 方程式 (HH 方程式) は以下のように表される。

$$\begin{cases} I &= C_M \frac{dV}{dt} + \bar{g}_K n^4 (V - V_K) + \bar{g}_{Na} m^3 h (V - V_{Na}) + \bar{g}_L (V - V_L), \\ \frac{dn}{dt} &= \alpha_n - (\alpha_n + \beta_n) n, \\ \frac{dm}{dt} &= \alpha_m - (\alpha_m + \beta_m) m, \\ \frac{dh}{dt} &= \alpha_h - (\alpha_h + \beta_h) h, \\ \alpha_n &= \frac{0.01(V+55)}{\exp(\frac{V+55}{10}) - 1}, \quad \beta_n = 0.125 \exp\left(\frac{-V-65}{80}\right), \\ \alpha_m &= \frac{0.1(V+40)}{\exp(\frac{V+40}{10}) - 1}, \quad \beta_m = 4 \exp\left(\frac{-V-65}{18}\right), \\ \alpha_h &= 0.07 \exp\left(\frac{-V-65}{20}\right), \quad \beta_h = \frac{1}{\exp(\frac{V-35}{10}) + 1}. \end{cases} \quad (15)$$

但し、 $C_M = 1.0[\mu\text{F}/\text{cm}^2]$, $V_{Na} = 50[\text{mV}]$, $V_K = -77[\text{mV}]$, $V_L = -54.4[\text{mV}]$, $\bar{g}_{Na} = 120[\text{mS}/\text{cm}^2]$, $\bar{g}_K = 36[\text{mS}/\text{cm}^2]$, $\bar{g}_L = 0.3[\text{mS}/\text{cm}^2]$.

演習 1.3.1

HH 方程式をシミュレーションして、神経興奮現象を再現する。

1. 実際のニューロンで見られるような閾値、活動電位、不応期などの性質を観察してみる。初期条件を少しずつ変えたとき、膜電位の時間変化にどのような違いが現れるか、 $V-t$ 平面上に軌跡を表示してみよ。一定周期で入るステップ的な刺激 $I(t)$ に対し、膜電位 V はどのように振舞うか？
2. 膜電位以外の変化を観察し、膜電位の挙動がどのように生じているか考えてみよ。
3. 膜電流 $I = 0$ のときには、活動電位が出る出ないに関わらず、ある時間が経つと膜電位は静止値に落ちるまで、その状態が安定である。ところが、ある一定の大きさの膜電流を与え続けると、活動電位が一定のリズムで持続する周期解が見つかるはずである。このような周期解がパラメータ I のどのような範囲で見つかるか調べよ。
具体的には、膜電位の変化に応じた解の定性的な変化を把握するために、分岐図を描いてみる。例えば、電位が一定の値に落ち着く場合には、パラメータ I に対してその静止膜電位の値をプロットし、周期解が得られる場合には、パラメータ I に対して電位の最大値と最小値をプロットしてみよ。特に解の性質が変化する場所（分岐点）では I を細かくとって詳しく調べよ。

1.3.2 HH 方程式の縮約

HH 方程式は 4 変数からなる微分方程式であるが、これでニューロンの全ての性質を表現できるわけではない。例えば、特定のニューロンで見られる膜電位のゆっくりした変化などを再現するには、Na と K 以外のイオンチャネル等を考慮して、更に変数を増やす必要がある。また、細胞の形態もニューロンの活動に大きく関与している可能性があるため、空間性を考慮したモデルへの拡張が必要である。このようにモデルの変数を次々と増やすことで、現実のニューロンの振舞いを理解しようという構成的な手法がある。

一方、理論的にはできるだけ少ない変数のモデルで現象の本質を理解したい。例えば HH 方程式のように多数の変数やパラメータからなる方程式を、その性質をなるべく保持した形で簡略化（縮約）できないだろうか。

演習 1.3.2

4 変数からなる HH 方程式を 2 変数に縮約することを試みる。そのために、変数 m は他の変数 n, h に比べて非常に早く変化し、すぐに定常状態に達すると仮定する。また、ゆっくりと変化する変数 n, h の和は常に一定である ($n + h = K(\text{const.})$) と仮定する。

1. 二つの仮定の妥当性について、HH 方程式での変数 m, n, h の振る舞いを見ることにより、数値的に考察せよ。
2. 二つの仮定から m と h を消去して、 V と n に関する微分方程式を導け。
3. 得られた式をシミュレーションする ($K = 0.75$ とする)。解軌道、分岐図などを調べてみよ。また、2 次元の力学系を解析する際には、ヌルクラインを書くことが理解のための有益な手段である。分岐に伴ってヌルクラインはどう変化するか、ヌルクラインを書く際には、**Newton 法** を用いると良い。
4. 上記の結果を Hodgkin-Huxley 方程式で得られた結果と比較せよ。
5. 以下の FitzHugh-Nagumo 方程式を計算し、また、ヌルクラインを調べて縮約した HH 方程式と比較せよ。

$$\begin{aligned}\dot{v} &= v - \frac{v^3}{3} - w + I \\ \tau \dot{w} &= v + a - bw\end{aligned}\tag{16-17}$$

1.4 カオス

これまでの章で、非線形力学系の定常的な振る舞いとして、固定点とリミットサイクルの二つを見てきた。また、定常的な振る舞いに至るまでの過渡的 (transient) な振る舞いの例として、興奮系というものが存在し、それが神経細胞の振る舞いを良く表すことが分かった。では非線形力学系によって表されるのは、固定点とリミットサイクル、そしてそれに至るまでの過渡的な過程だけなのだろうか。答えは否である。非線形力学系に見られるもう一つの典型的な振る舞いは、カオスと呼ばれる定常的に不規則な時間発展を示すものである。ここではカオスをいかに解析するかについて学ぶ。

演習 1.4.0

なにはともあれカオスを体感してみる。それぞれリズム現象 (van der Pol 方程式) と比較してみよ。

1. 以下の系の時系列や軌道を観察せよ。

(a) Hénon map

$$\begin{cases} x_{n+1} = y_n + 1 - ax_n^2, \\ y_{n+1} = bx_n. \end{cases} \quad (18)$$

まずは $a = 1.4, b = 0.3$ を試してみよ。相空間の一部を拡大して、アトラクターのフラクタル性を確認せよ。

(b) Lorenz 方程式 (気象のモデル)

$$\begin{cases} \dot{x} = -\sigma x + \sigma y, \\ \dot{y} = -xz + rx - y, \\ \dot{z} = xy - bz. \end{cases} \quad (19)$$

まずは $\sigma = 10, r = 28, b = 8/3$ を試してみよ。

(c) Rössler 方程式 (化学反応のモデル)

$$\begin{cases} \dot{x} = -y - z, \\ \dot{y} = x + ay, \\ \dot{z} = b + xz - cz. \end{cases} \quad (20)$$

まずは $a = b = 0.2, c = 5.7$ を試してみよ。

2. カオスに見られる普遍的な性質として、初期条件への敏感な依存性 (*initial condition sensitivity*) がある。初期条件が僅かに異なる二つの軌道間の距離 (相空間上) の時間発展を調べよ。
3. 適当な微小領域に多くの初期条件をとり、それら点の分布の時間発展を観察せよ。この微小領域の形や面積 (体積) は、時間とともにどのように変化してゆくか、点の集合が引き合併し折りたたみを繰り返すことを観察せよ。

カオスの特徴づけ

演習 1.4.1

1. 先の 3 つのモデルに関して、相空間体積の減少率を解析的に計算し、その結果を数値計算で確認せよ。
2. カオスを生み出すストレンジアトラクタでは、相空間に引き伸ばし折りたたみ構造があることを観察した。これはカオスの重要な性質であり、カオスを生み出す要因になっている。実際、先に見た Hénon map のフラクタル構造はこの効果によって生まれている。では、このようなフラクタル構造の次元を求めることを考えてみる。

box-counting 次元（容量次元）、情報次元、および相関次元を Hénon map について計算してみよ。

集合の次元 d 次元の相空間を幅 ϵ の格子状に分割することを考える。その相空間上での解軌道を適当な時間間隔 τ ごとにサンプリングし、合計 N 個の点列 $(x(t), x(t+\tau), \dots, x(t+(N-1)\tau))$ をつくる。格子で区切られた各立方体のうち、これら点列を内部に含む立方体を適当に番号づけし、そのような立方体の合計数を $\tilde{N}(\epsilon)$ とする。また、各立方体に含まれる点列を数え、各立方体に入る確率を $p_i = N_i/N$ ($i = 1, \dots, \tilde{N}(\epsilon)$) とする。このとき、各次元は以下のように定義される。

box-counting 次元（容量次元）: D_0

$$D_0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log \tilde{N}(\epsilon)}{\log(1/\epsilon)}.$$

情報次元: D_1

$$D_1 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{I(\epsilon)}{\log(1/\epsilon)}, \quad I(\epsilon) = - \sum_{i=1}^{\tilde{N}(\epsilon)} p_i \log p_i.$$

相関次元: D_2

$$D_2 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log \left(\sum_{i=1}^{\tilde{N}(\epsilon)} p_i^2 \right)}{\log(1/\epsilon)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log C(\epsilon)}{\log(1/\epsilon)},$$

ここで $C(\epsilon)$ は

$$C(\epsilon) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \Theta(\epsilon - |x_i - x_j|).$$

$\Theta(x)$ は $\Theta(x) = 1$ ($x \geq 0$), $\Theta(x) = 0$ ($x < 0$) であるような step 関数である。相関次元を実際に計算する際には、 N 個の点列から M 点を抽出して以下の式を使うとよい。

$$C(\epsilon) = \frac{1}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \Theta(\epsilon - |x_i - x_j|).$$

3. カオスを示す最も簡単な例として logistic 写像

$$x_{n+1} = ax_n(1 - x_n) \quad (21)$$

が挙げられる。様々なパラメータ ($0 < a < 4$) に対し軌道を観察せよ。各パラメータに対し、初期条件の微小な異なる軌道間の距離はどう変化するか。

4. Rössler 方程式について、 $x < 0, y = 0$ で Poincaré断面をとり、リターンマップを構成してみよ。その結果を logistic 写像と比較してみよ。また、Rössler アトラクタに見られた引き伸ばし折りたたみ構造は写像の性質としてどのように反映されているか。
5. logistic 写像および Rössler 方程式の分岐図を描いてみよ。(Rössler 方程式では $c^2 > 4ab$ の領域を調べる) 両者の共通点は何か？
6. これまでに観察したように、初期値の微小な差の拡大はカオスの指標となる。この拡大率を特徴づける量としてリャプノフ指数がある。logistic map のリャプノフ指数を求め、分岐図と比較せよ。

2 モンテカルロ法

2.1 乱数生成

2.1.1 乱数とは？

Monte Carlo 法では、種々の乱数を用いる。同一の確率分布にしたがう N 個の確率変数を X_1, \dots, X_N として、その確率分布を $P(X)$ とする。 X の空間の任意の部分集合 A_i に対して

$$P(V_i, X_i \in A_i) = \prod_i P(X_i \in A_i) \quad (25)$$

となるとき確率変数 X_i を独立であると言う。同一の確率分布にしたがう独立な確率変数の実現値のことを乱数という。

計算機ではほんとうの乱数を作り出すことはできない。しかし使用する個数 N より十分に長い周期列を持つ数列で、その個数の範囲で乱数と同一の分布、統計的性質を持つ擬似乱数を生成することができる。以下擬似乱数の生成方法（例えば [1, Volume 2], [2] Ch12 など）を学ぶ。実際に $[0, 1]$ 区間上の一様乱数を生成できれば、任意の確率分布を持つ乱数を生成できる（以下の問題参照）。

線形合同法 整数の組 (a, c, m, r) に対し次の漸化式によって定義される数列を考える：

$$r_0 = r, \quad (26)$$

$$r_{k+1} = ar_k + c \pmod{m}. \quad (27)$$

このとき、数列 $\{r_k\}$ は、整数値 $0, 1, \dots, m-1$ を「不規則」にとる。その不規則さの程度は (a, r, c, m) に依存する（最善で周期 m での繰り返しになる）。良い乱数を与える組合せとして、例えば

$$(a, c, m) = (1229, 351750, 1664501), \quad (28)$$

$$(a, c, m) = (5^{11}, 0, 2^{31}), \quad (29)$$

$$(a, c, m) = (16807, 0, 2^{31} - 1), \quad (30)$$

$$(a, c, m) = (11^{13}, 0, 2^{48}). \quad (31)$$

などが知られている。列 $s_k = r_k/m$ を考えると、（良い場合には）区間 $[0, 1)$ に値をとる（擬似）一様分布乱数が得られる。

演習 2.1.1

1. 上のアルゴリズムを用いて $[0, 1)$ の一様分布乱数を生成してみよ。
2. ヒストグラムを書いてみよ。
3. 平均、偏差、引き続く 2 変数の相関を計算せよ（使用する処理系の精度、データ型のサイズに注意）。
4. 確率密度関数

$$\rho(x) = \begin{cases} 1 - |x| & (|x| \leq 1), \\ 0 & (|x| > 1) \end{cases} \quad (32)$$

に従う乱数を生成せよ。

5. 任意の（有限の support を持つ）確率密度関数に従う乱数を発生させるアルゴリズムを工夫してみよ（シンプルなものでもよい）。
6. 乱数を使って積分の値を数値的に求めることができる。例として乱数を用いて円周率 π の近似値を求めるプログラムを書け。
7. 現時点で最も有効な擬似乱数発生法として Mersenne Twister と呼ばれる方法がある。
<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/mt.html> を参照し、実際にこのアルゴリズムを用いて一様乱数のヒストグラムを作成せよ。

2.2 ランダムウォーク

2.2.1 ランダムウォークとは？

ランダムウォークは日本語で酔歩とも呼ばれ、ランダムな運動の最も基本的なモデルの一つである。ここでは一人の酔っ払いが、一本道を辿って無事に家にたどり着けるかという問題について考えよう。酔っ払いは最初にいる場所を 0 としよう。この時、酔っ払いはその位置から 100 歩離れたところにあるという事だけを覚えているが、右と左のどちらにいけば良いのかはわからない。酔っ払いは右左のどちらかに等確率で 1 歩歩む事になる。そして、ペロペロに酔っ払っている彼（あるいは彼女）は、1 歩進んだ先で自分がどちらの方向から来たのか完全に忘れてしまう。そのため、またしても右か左のどちらかに等確率で進むことになる。ここで、酔っ払いは 100 歩進めば家に帰れるということだけはかろうじて覚えている。さて、100 歩進んだ後、酔っ払いは無事家まで帰り着けるだろうか。

演習 2.2.1

1. 上記の設定のランダムウォークを実装し、酔っ払いがどのような動きをするのかを確認せよ。また、酔っ払いが m 歩目にいる位置ある確率 $p(m, 100)$ を計算せよ ($\log(p)$, m^2 に対して plot してみよ)。この時、平均、平方二乗変位は m に対してどのような振る舞いを見せるか？
2. Gauss 分布の簡便かつ近似的な生成方法に、 k 個の $[0, 1)$ の値をとる一様分布乱数を生成し、足し合わせてそれを k で割るというものがある（一般に k は 12 などが使われる）。実際にこの方法で近似的な Gauss 分布に従う乱数を生成し、 $p(m, 100)$ の分布と比較せよ (k を増やしていった時にどのように分布の形が変わるか？)。また、なぜこの方法で Gauss 分布を近似的に生成できるのか議論せよ。
3. x, y を $[0, 1)$ の値をとる一様分布乱数とする。このとき、

$$X = \sqrt{-2 \log(1-x)} \cos 2\pi y, \quad (33)$$

$$Y = \sqrt{-2 \log(1-x)} \sin 2\pi y, \quad (34)$$

はいずれも、Gauss 分布

$$\rho(X) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-X^2/2) \quad (35)$$

に従うことを解析的に示せ (Box-Muller 法)。

(Hint. Gauss 積分を計算するトリックを思い出せ) また、実際に Box-Muller 法で乱数を生成し、上記の足し合わせの方法と、 $p(m, 100)$ の分布と比較せよ。

4. Δt 後に Δx 右か左のどちらかに動くような差分方程式

$$p(x, t + \Delta t) = p(x - \Delta x, t)/2 + p(x + \Delta x, t)/2 \quad (36)$$

を考える。この時、左辺を Δt で、右辺を Δx でテイラー展開すると、どのような式になるか。また、上記の事を利用して、拡散方程式を数値的に解いてみよう。

2.3 Langevin 方程式

一次元上で、一つの粒子が時刻 t で位置 $x(t)$ にあるとする。この粒子はポテンシャル $U(x)$ 、温度 T の熱浴にあるとする。この時、粒子の位置の時間発展は Langevin 方程式

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad (37)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\gamma p - \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \xi(t) \quad (38)$$

にしたがう。 γ は粘性係数で熱浴との摩擦によるエネルギー散逸、 $\xi(t)$ は、熱浴からうけるランダムな揺動力を表す。 ξ はホワイトガウシアンノイズと言われる統計性をもつ。

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (39)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\gamma T \delta(t - t') \quad (40)$$

後者のノイズの大きさに T, γ が現れるのは、この方程式が定常状態でカノニカル分布

$$P(p, x) \propto \exp\left(-\frac{p^2}{2T} - \frac{U(x)}{T}\right) \quad (42)$$

に従うべき、という要請からくる（揺動散逸定理）。

演習 2.3.0

1. $U(x) = 0$ の時の Langevin 方程式を実装せよ。時間を離散化するにあたり、 ξ は時間ステップ Δt にどうスケールするかを考えること。この場合、粒子は単純に拡散し、位置の存在確率の関数 $P(x)$ は拡散方程式

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x)}{\partial x^2} \quad (43)$$

にしたがう。数値計算をしてみよ（手でも解ける）。拡散係数 D はどうなるのか？

2. $U(x)$ をいろいろ変えて、カノニカル分布に従うことをたしかめよ。

2.4 [自由課題] パーコレーション

2.5 Ising モデル

もっとも簡単な格子模型である Ising モデルを考える。ある格子 Λ の各 site $i \in \Lambda$ 上に、 $S_i = \pm 1$ の値をとるスピンのついている。Hamiltonian は

$$H(\{S_i\}) = -J \sum_{i,j} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (58)$$

で与えられる。ここで第 1 項は、最近接スピン対にわたる和で、スピン間の相互作用をあらわす。第 2 項は、一様な外場 h の効果をあらわす。結合定数 $J > 0$ は強磁性体に対応する（隣接するスピンは同じ向きになりやすい方向にはたらく）。その大きさは、温度の単位に吸収できるので、以下 $J = 1$ とおく。分配関数は、 $\beta = \frac{1}{k_B T}$ として

$$Z = \sum_{\{S_i\} \in C} e^{-\beta H(\{S_i\})}, \quad (59)$$

物理量 A の期待値は

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_{\{S_i\} \in C} A(\{S_i\}) e^{-\beta H(\{S_i\})} \quad (60)$$

である。集合 C はスピンの配位全体の集合（site の数を $N := |\Lambda|$ とすると、 $|C| = 2^N$ ）。重要な物理量として、

$$1 \text{ site あたりの磁化 } M = \langle s \rangle, \quad (61)$$

$$1 \text{ site あたりのエネルギー } u = \frac{1}{N} \langle H \rangle = \frac{1}{N} \left(-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right), \quad (62)$$

$$1 \text{ site あたりの比熱 } c = \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2), \quad (63)$$

$$1 \text{ site あたりの帯磁率 } \chi = \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial h} = \frac{N}{k_B T} (\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2), \quad (64)$$

などがある。ここで

$$s := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N S_j. \quad (65)$$

演習 2.5.0

上の式で非自明な等号を示せよ。また、離れた 2 つの spin の相関を示す量

$$G(i, j) = \langle S_i S_j \rangle \quad (66)$$

は、ふつう

$$G(i, j) \sim \exp(-|i - j|/\xi) \quad (67)$$

のように振舞う。ここで、長さの次元を持つ量 ξ を相関距離という。

$h = 0$ のとき、この系の振舞いを定性的に考えろ。高温では相互作用項の影響は小さく、entropy が勝って各頂点のスピンがばらばらな方向を向いている状態がもっともらしい。すなわち、 $M \simeq 0$ である。この状態は常磁性とよばれ、磁石としての性質を示さない。低温では相互作用項の効果が大きく、わずかな不純物、外場などの影響で対称性が破れて、すべてのスピンが同じ方向を向いた状態が実現する。すなわち、 $|M| > 0$ である。この状態は強磁性とよばれ、磁石となる。

上で考えた $\langle s \rangle$ の定義は、 $h = 0$ なら $S_i \leftrightarrow -S_i$ のもとで対称である。従って、本来は $\langle s \rangle = 0$ となることはない。実際、有限系では常に $\langle s \rangle = 0$ となってしまう。上の意味での無限系での自発磁化は

$$M_{sp} = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} M, \quad \chi_{sp} = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \chi$$

と意味づけられる。

温度を高温から低温に連続的に変化させる過程を考えると、転移温度 $T = T_c$ で 2 つの相の間の転移点が起こると考えられる。統計力学では、この転移点 T_c を求めることや、転移点での物理量の（特異的な）振舞いを知ることが問題となる。具体的には、 $T = T_c$ で

$$\begin{aligned} M &\propto |T - T_c|^\beta, \\ \chi &\propto |T - T_c|^{-\gamma}, \\ \xi &\propto |T - T_c|^{-\nu} \end{aligned}$$

などの、臨界な特異性を持つ（もちろんこの β は温度の β とは別）。転移点 $T = T_c$ 直上では、相関距離は発散し、2 点の相関は中庸となる

$$G(i, j) \sim |i - j|^{-(d-2+\eta)}. \quad (68)$$

これらの指数 β, γ, ν などを決定したい。これらは *hyperscaling*

$$d\nu = 2\beta + \gamma \quad (69)$$

$$2 - \eta = \gamma/\nu \quad (70)$$

で関係している。

1, 2 次元の正方格子上的 Ising モデルには厳密解がある ([5, Chapter 2])。しかし、そのような厳密解のある場合は限られており、以下のような Monte Carlo simulation などの方法で調べることが行なわれる。

2.5.1 Metropolis 法

以下で説明するのは、canonical ensemble に対する Monte Carlo 法である。熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ を求めたいのだが、式 (60) に現れる和は 2^N 項の和であり、これは N が増えると急速に増加し計算を困難にする。そこで、乱数を用いて期待値 $\langle A \rangle$ を近似的に計算することを考える。以下、簡単のため spin の配位 $\{S_i\} \in C$ を $x_a = \{S_i\} \in C$ とかく。

単純 sampling もっとも素朴に思いつくのは、単純 sampling である。すなわち、 2^N 個の配位の中から、 n 個の配位 $\{x_a\}_{a=1, \dots, n}$ を等確率でランダムにとりだし、物理量 A の期待値を

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_{a=1}^n A(x_a) e^{-\beta H(x_a)}}{\sum_{a=1}^n e^{-\beta H(x_a)}} \quad (71)$$

で近似する。

重みつき sampling 上を一般化して、等確率でなく、確率密度 $\rho(x)$ でランダムに $\{x_a\}_{a=1,\dots,n}$ をとりだし、物理量 A の期待値を

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_{a=1}^n \rho(x_a)^{-1} A(x_a) e^{-\beta H(x_a)}}{\sum_{a=1}^n \rho(x_a)^{-1} e^{-\beta H(x_a)}} \quad (72)$$

で近似する。上のように、 $\rho(x_a)$ で割っておけばよいということは、和 \sum_i を積分 $\int \rho(x) dx$ で置き換えてみれば、

$$\int f(x) dx = \int \frac{f(x)}{\rho(x)} (\rho(x) dx) \quad (73)$$

となることからわかる。

誤差 有限個の sample から $\langle A \rangle$ を計算するときには、統計的な誤差が伴う。中心極限定理によれば、確率密度 $\rho(x)$ にしたがう確率変数の列 $\{x_a\}_{a=1,\dots,n}$ に対し、量

$$\frac{1}{n} \sum_{a=1}^n g(x_a) \quad (74)$$

の分布は、 $n \rightarrow \infty$ で

$$\text{平均 } I := \int dx \rho(x) g(x), \quad (75)$$

$$\text{分散 } \sigma^2/n = \frac{1}{n} \left(\int dx \rho(x) (g(x))^2 - \left(\int dx \rho(x) g(x) \right)^2 \right) \quad (76)$$

の正規分布に近づく。したがって、方法 (72) では、分母に

$$\frac{\sigma}{\sqrt{n}} = \frac{1}{\sqrt{n}} \left[\frac{\sum_{a=1}^n (\rho(x_a)^{-1} e^{-\beta H(x_a)})^2}{(\sum_{a=1}^n \rho(x_a)^{-1} e^{-\beta H(x_a)})^2} \right]^{1/2} \quad (77)$$

程度の誤差が期待される。これを小さくするには、もちろん n を大きくすればよいわけだが、他に σ を小さくするような $\rho(x)$ をうまく選ぶという方法がある。実は、

$$\rho(x) = Z^{-1} e^{-\beta H(x)} \quad (78)$$

と選ぶと、 $\sigma = 0$ となる。このとき (72) の右辺は、単に

$$\frac{1}{n} \sum_{a=1}^n A(x_a) \quad (79)$$

となる ($\{x_a\}$ は確率密度 $\rho(x)$ に従うランダムな列)。Monte Carlo simulation では、通常このようにして $\langle A \rangle$ を計算する。すなわち、確率密度 $\rho(x)$ に従うランダムな列 $\{x_a\}$ を生成し、各々について物理量を測定して単純平均を取ることが行なわれる。

演習 2.5.1

1. 単純 sampling の効率が悪い理由を直観的に説明せよ。

Metropolis 法 確率分布 $\rho(x)$ に従うような乱「数」列を生成することを考えよう。ここで x は数とは限らず事象空間の点である。下で扱う Ising モデルの場合は x がひとつのスピン配位である。

遷移確率 $W(x, x')$ の Markov 鎖とは、ランダム変数の列 $\{x_a\}$ で、 $x_i = x$ という条件のもとで $x_{i+1} = x'$ となる条件付き確率が $W(x, x')$ で与えられるようなものである。遷移確率 $W(x, x')$ として適当なものを選ぶと、十分大きい a に対しては $\{x_a\}$ が $\rho(x)$ に従うようにできることが、以下のようにしてわかる。

添字 a を時間 t のようにみなし、遷移確率 $W(x, x')$ をもつ Markov 鎖の時刻 t での確率分布を $\rho(x, t)$ とかく。 $\rho(x, t)$ の時間発展は

$$\frac{d\rho(x, t)}{dt} = - \sum_{x'} W(x, x') \rho(x, t) + \sum_{x'} W(x', x) \rho(x', t) \quad (80)$$

とかける。十分な遷移回数の後、 $\rho(x, t)$ が定常系 $\rho(x, t) = \rho(x)$ になったとき、

$$\sum_{x'} W(x, x') \rho(x) = \sum_{x'} W(x', x) \rho(x') \quad (81)$$

が成立する。したがって、欲しい $\rho(x)$ に対し (81) が成立するように $W(x, x')$ を決めておけば、平衡分布として $\rho(x)$ が得られる。式 (81) を満たすためには、特に、任意の $x, x' \in C$ に対して

$$W(x, x') \rho(x) = W(x', x) \rho(x') \quad (82)$$

が成り立つような W を選んでおけば十分である（しかし必要ではない）。これを「詳細つりあいの条件」という。このような条件を満たす $W(x', x)$ として次のようなものが取れる。

$$W(x, x') = \min\{1, \rho(x')/\rho(x)\}. \quad (83)$$

演習 2.5.1

2. (83) が (82) を満たすことを示せ。

Metropolis 法のステップは次のようになる。

- (a) 乱数を使って x から近い事象 x' を作る。
- (b) $w = \frac{\rho(x')}{\rho(x)}$ を計算する。
- (c) $w \geq 1$ の場合は、 x' を採用する。
- (d) $w < 1$ の場合は乱数を生成して、 $r \leq w$ なら x' を採用し、 $r > w$ なら x を再び採用する。

Ising モデルの場合の Metropolis 法 遷移確率は

$$W(x, x') = \min\{1, \exp(-\beta(H(x') - H(x)))\} \times (\text{規格化定数}) \quad (84)$$

algorithm Ising モデルの場合は Monte Carlo 法で調べる方法は次のようになる。

1. 開始点 $x_0 \in C$ を適当に選ぶ。
2. 配位 x_a から、次のようにして新しい配位 x_{a+1} をつくる。

- (a) $x_a = x_{a,0}$ とする。
- (b) x_a の 1 か所のスピンを反転させ、それを仮に配位 $x_{a,1}$ とする。
- (c) $[0, 1]$ 一様分布乱数 r を得る。
- (d) $r < \min\{1, \exp(-\beta(H(x_{a,1}) - H(x_{a,0})))\}$ なら、仮の新しい配位 $x_a = x_{a,1}$ を採用する。そうでなければ、仮の配位をすて $x_a = x_{a,0}$ とする。
- (e) Step (b) に戻り、スピンを反転させる場所を変えて繰り返す。平均して、すべてのスピンが 1 回ずつ反転（の試み）を経験するまで繰り返す。それが終わったときの配位 $x_a = x_{a+1}$ とする。

3. 物理量を測定する。

4. Step 2 にもどる。

5. 十分な回数だけ loop したら、物理量の測定結果を平均する。

外側の loop 1 回分を 1 Monte Carlo step (=1MCS) という。実際的な注意として、program を作ったら小さい N 、少ない MCS 数でテストしてから大きな計算をすること。

低温相 $T < T_c$ での M, χ の測定 計算機上で、極限 $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty}$ を実際にとることは実用的でない。十分に大きい（系の長さ $L \gg \xi$ ）系では、考慮する configuration を $s > 0$ のものに限ることで、これらの量を効果的に測定できる。すなわち、

$$M' = \langle |s| \rangle,$$

$$\chi' = \frac{N}{k_B T} (\langle s^2 \rangle - \langle |s| \rangle^2)$$

を測定すればよい。

一方、 $T > T_c$ では、 $\chi = \frac{N}{k_B T} (\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2)$ をはかるべきで、 χ' はかるべきでない。 $M = \langle s \rangle = 0$ となる。

演習 2.5.1

- 3. 例えば、 $N = 4^2$, $k_B T = 0.5, 5$ ($J = 1$ を単位として) で、200MCS までの $s, |s|$ を測定し、MCS の関数としてどのように変化するか観察せよ。
- 4. 磁化、帯磁率、内部エネルギー、比熱などを温度の関数として測定せよ。転移点 T_c の位置を推定せよ ($k_B T = 1.5 \sim 3$ あたりにある)。後の考察の便利のため、 $M = \langle s \rangle, M' = \langle |s| \rangle, \langle s^2 \rangle, \langle s^4 \rangle, \langle H \rangle, \langle H^2 \rangle$ などを記録しておくこと。
- 5. いくつかの格子のサイズについて同じ測定を行い、サイズによる違いを考察せよ。

2.5.2 Finite Size Scaling

転移点付近の simulation は難しい。どんなに大きな（しかし有限な）サイズ L の simulation をおこなっても、温度 T を T_c に近づけていくと、どこかで $L \gg \xi$ となってしまう、そこから先では、相互作用の効果を正しく取り扱えない。有限の大きさ L の系の振舞いを調べ、 L 依存性から $L \rightarrow \infty$ での性質を引き出すことを考える L 。

finite size scaling hypothesis サイズ L , 温度 T で、磁化 $s = \frac{1}{N} \sum S_i$ の configuration が現れる確率を $p(s, L, T)$ としよう。この確率が

$$p(s, L, T) = \xi^{\beta/\nu} P(L/\xi, s\xi^{\beta/\nu}) \quad (85)$$

のように、 T によらない 2 変数関数 P でかけるよう、というのが finite size scaling の仮説である。言い替えれば、温度依存性が ξ を通じてのみ現れる、ということである。組み合わせ $L/\xi, s\xi^{\beta/\nu}$ を scaling 変数という。この関数 P の形は、温度やサイズにはよらない universal なものである。ただし、境界条件などにはよるかもしれない。前の factor $\xi^{\beta/\nu}$ は、 $P(x, y)$ が、第 2 変数 y について確率分布になっている ($\int dy P(x, y) = 1$) ようにするためのものである。

また、

$$\xi^{\beta/\nu} P(L/\xi, s\xi^{\beta/\nu}) = L^{\beta/\nu} \tilde{P}(L/\xi, sL^{\beta/\nu}) \quad (86)$$

で定義される \tilde{P} も用いられる。

この形を用いると、

$$\begin{aligned} \langle |s| \rangle_{L,T} &= L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L/\xi), \\ \langle \chi \rangle_{L,T} &= L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L/\xi), \end{aligned}$$

となることがわかる。 $\tilde{M}, \tilde{\chi}$ は、上の意味で universal な関数。これらの関数も求めたい情報である。

このことから、臨界指数を求める有効な有力手段があることがわかる。これらの universal な指数は、 $T = T_c$ 直上では ($\xi = \infty$ なので)、 $M(0), \chi'(0)$ と L によらない定数になってしまう。したがって、 $T = T_c$ 直上で異なるサイズの data を log plot すれば、比 $\beta/\nu, \gamma/\nu$ が求まる。いったんそれが求まれば、 $\tilde{M}, \tilde{\chi}$ の関数形が求まる。具体的には、 x 軸を $|T - T_c|\xi^{1/\nu}$, y 軸を $ML^{\beta/\nu}$ として M のグラフを描けば、すべてのサイズ L の data が一つの曲線上にのってみえるはずである。

2.5.3 Binder parameter

上の話では、臨界温度 T_c は既に厳密に求まったものとしていた。臨界温度を求めるのに有用なのが Binder parameter

$$U_L(T) := 1 - \frac{\langle s^4 \rangle_L}{3\langle (s^2) \rangle_L^2} \quad (87)$$

である。これは $T > T_c$ では、 $U_L \rightarrow 0$ as $L \rightarrow \infty$ 。 $T < T_c$ では、 $U_L \rightarrow 2/3$ as $L \rightarrow \infty$ 。とするまう。Finite size scaling を仮定すると、universal な関数 $\tilde{\chi}_2, \tilde{\chi}_4$ により、

$$U_L(T) = 1 - \frac{\tilde{\chi}_4(L/\xi)}{3\tilde{\chi}_2(L/\xi)^2} \quad (88)$$

と振舞うはずで、 $U_L(T)$ は、 $T = T_c$ では、 L によらない一定値 U^* をとる。すなわち、graph の共通交点として、 T_c が求まる。

演習 2.5.3

1. Binder parameter を用いて、 T_c を正確に求めよ。
2. 転移点直上の data の size 依存性を解析して、 $\beta/\nu, \gamma/\nu$ を求めよ。

3. x -軸を $|T - T_c| \times L^{1/\nu}$, y -軸を $ML^{\beta/\nu}$ として M のグラフを描け。 x -軸を $|T - T_c| \times L^{1/\nu}$, y -軸を $\chi L^{-\gamma/\nu}$ として χ のグラフを描け。全ての size の data が同じ曲線にのるように、 ν の値を定めよ。
4. 他の境界条件（例えば自由端）などについて調べてみよ。
5. Finite size scaling の仮説のもとで、関係

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \left(\frac{dU_L}{dL} / \frac{dU_{bL}}{dL} \right)}{\log b},$$

$$\frac{\gamma}{\nu} = \frac{\log(\chi(bL)/\chi(L))}{\log b}.$$

を示せ。これを用いて $1/\nu, \gamma/\nu$ を求めよ。具体的には、固定された L について、横軸を $1/\log b$, 縦軸を $\log \left(\frac{dU_L}{dL} / \frac{dU_{bL}}{dL} \right)$ などとして plot すると直線になるはず。理想的には、すべての L についてそのような直線を描いた時、 $1/\log b = 0$ のところですべての直線が交わる。

参考 2-dim Ising on square lattice では、

$$d = 2, \beta = 1/8, \nu = 1, \gamma = 7/4, \eta = 1/4, \quad (89)$$

$$\frac{1}{k_B T_c} = \beta_c = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1), \quad k_B T_c = 2.26919 \quad (90)$$

なお、

$$\begin{aligned} &\text{triangular, } e^{2\beta_c} = \sqrt{3}, \\ &\text{hexagonal, } e^{2\beta_c} = 2 + \sqrt{3}. \end{aligned}$$

3 モデリング（自由研究）

これまでに学んだ非線形力学系、モンテカルロ法を踏まえて、興味がある（自然）現象について自由に研究を行なえ。