イジングモデル基礎まとめ

須賀勇貴

最終更新日： 2023 年 10 月 29 日

福嶋さんの「基礎からの物理学とディープラーニング入門」の 3 章の 3．3 をまとめたものです．

Ising 模型

Lenz はスピンの向きが上向きと下向きだけに限定された理論模型を考えた．そして Lenz の指導学生だった Ising が，その模型を 1 次元の場合で解き，相転移が存在しないことをしました．それにより現在ではこの模型を Ising 模型と呼ばれている．

Ising 模型では σ_i という量を導入して，i 番目のスピンが上向きなら $\sigma_i = +1$，下向きなら $\sigma_i = -1$ で表す．すべてのスピンを要素にした，$\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N\}$ のことをスピン配位と呼び，それぞれのスピンが ± 1 の値をとるため，独立なスピン配位は全部で 2^N 通りあるということになる．

Ising 模型では，個々のスピン配位 $\boldsymbol{\sigma}$ のエネルギーは

$$E(\boldsymbol{\sigma}) = -J \sum_{i,j \in E(G)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i \in V(G)} \sigma_i \tag{1}$$

で与えられる．第 1 項目はスピン同士の相互作用による寄与で J は結合の強さを表す定数で結合定数と呼ばれる．第 2 項目は外部からの磁場 H によって個々のスピンに働く力の影響による寄与を表している．そしてエネルギー $E(\boldsymbol{\sigma})$ を最小にするようなスピン配位 $\boldsymbol{\sigma}$ がこの模型の基底状態になる．

統計力学では，エネルギーが E である状態が混ざる確率を適当な規格化定数 Z を用いて

$$P(E) = \frac{1}{Z} e^{E/(k_B T)} \tag{2}$$

であるとして，この確率分布をカノニカル分布と呼ぶ．指数の分母に現れる K_B は Boltzmann 定数で，温度をエネルギーに変換するために必要なものである．Boltzmann 定数は温度 T との積の形で出現することが多いため，$\beta = 1/(k_B T)$ で定義される逆温度を導入すると便利である．

式 (2) は特定の模型によらない一般的な表式であったが，Ising 模型ではスピン配位が決まればそのエネルギー $E(\boldsymbol{\sigma})$ が決まるので，以下では $\boldsymbol{\sigma}$ が出現する確率を

$$P(E(\boldsymbol{\sigma})) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\boldsymbol{\sigma})} \tag{3}$$

と書くことにする．ここで，規格化因子である Z は分配関数と呼ばれ，

$$Z = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} e^{\beta E(\boldsymbol{\sigma})} \tag{4}$$

で与えられる．この和は可能なすべてのスピン配位 $\boldsymbol{\sigma}$ についてとっている．スピン配位によって定まる物理量 $O(\boldsymbol{\sigma})$ の期待値は

$$\langle O \rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} O(\boldsymbol{\sigma}) P(\boldsymbol{\sigma}) \tag{5}$$

で与えられる．

例題:2 スピン系の分配関数とスピン期待値

Ising 模型のもっとも簡単な例として，2 つのスピン 1,2 が相互作用する 2 スピン系について考えてみる．このときエネルギーは

$$E(\sigma_1, \sigma_2) = -J\sigma_1\sigma_2 - H(\sigma_1 + \sigma_2) \tag{6}$$

となる．$\sigma_i = \pm 1 = \pm$ と書いて，全ての配位に対するエネルギーを求めると

$$E(+,+) = -J - 2H \tag{7}$$
$$E(+,-) = E(-,+) = J \tag{8}$$
$$E(-,-) = -J + 2H \tag{9}$$

となる．これより分配関数は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1,\sigma_2} e^{-\beta E(\sigma_1,\sigma_2)} \\ &= e^{\beta(J+2H)} + e^{\beta(J-2H)} + 2e^{-\beta J} \\ &= 2e^{\beta J} \cosh(2\beta H) + 2e^{-\beta J} \end{aligned} \tag{10}$$

となる．また，それぞれのスピン配位の確率分布は

$$\begin{aligned} P(+,+) &= \frac{1}{Z} e^{\beta(J+2H)} \\ P(-,-) &= \frac{1}{Z} e^{\beta(J-2H)} \\ P(+,-) &= P(-,+) = \frac{1}{Z} e^{-\beta J} \end{aligned} \tag{11}$$

となる．以上の結果から，式 (5) を用いてスピン期待値を計算してみると

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1,\sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) P(\sigma_1, \sigma_2) \\ &= P(+,+) + P(-,-) \\ &= \frac{e^{\beta(J+2H)} - e^{\beta(J-2H)}}{Z} \\ &= \frac{\sinh(2\beta H)}{\cosh(2\beta H) + e^{-\beta J}} \end{aligned} \tag{12}$$

と導ける．$\langle M\rangle$ を $2\beta J$ の関数としてプロットしたものが，図 1 である．

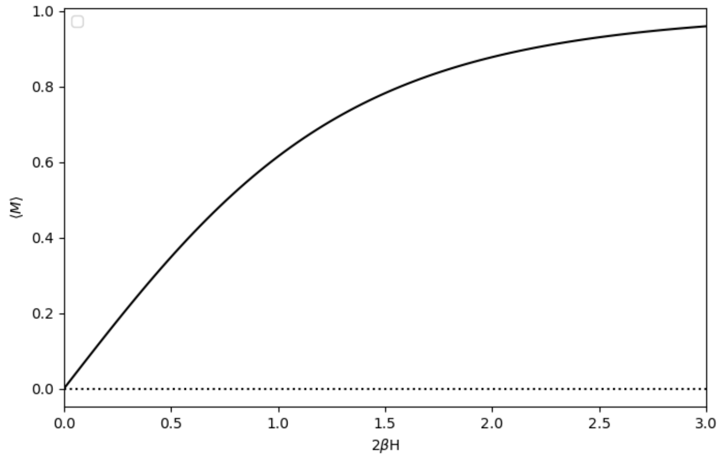

図 1　スピン期待値 $\langle M\rangle$ を $2\beta H$ の関数としてプロット．ただし，$2\beta J = 1.0$ に選んだ

スピン期待値について，見方を変えた計算法を行う．分配関数 (10) の最初の等号の定義式とスピン期待値 (12) の最初の等号の定義式を見比べながら，Z を H で偏微分すると，

$$\frac{\partial Z}{\partial H} = \beta \sum_{\sigma_1,\sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) e^{-\beta E(\sigma_1,\sigma_2)} = 2\beta Z \langle M\rangle \tag{13}$$

となることがわかる．これはよりコンパクトに

$$\langle M\rangle = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln Z \tag{14}$$

と表すことができる．この関係式を使って，分配関数 (10) の再右辺に与えた答えの表式から計算しても，式 (12) と全く同じ $\langle M\rangle$ が得られることを簡単に確かめられる．式 (**??**) のような関係式は 2 スピン系に限らず一般に成り立つ．同様に Z の定義に立ち戻って考えると，β で偏微分すればエネルギー期待値が得られることがわかる，つまり

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} E(\boldsymbol{\sigma}) P(\boldsymbol{\sigma}) \tag{15}$$

が一般的に成り立つ．