読み比べ統計力学
強磁性イジング模型

[T2]: 田崎(著) 統計力学II ↳ 物理学科の学生向けの統計力学.
[KH]: 黒田・樋口(共著) 統計力学 ～相転移の数理～
↳ 確率論の視点で書かれた統計力学.

[T2]でのイジング模型のアプローチ.

- イジング模型の導入 ‥ スピン配位, エネルギー固有値, 確率分布
- 絶対零度でのふるまい ‥ $\beta \to \infty$ での確率分布
- 無限体積極限

スピン配位 ([KH]: スピン配置空間という確率空間)
↳ 電子が持つ磁極の向き

"d次元立方格子"

$$\Lambda := \{ i=(i_1,\dots,i_d) \in \mathbb{Z}^d \mid |i_1| \le L_1, \dots, |i_d| \le L_d \}$$

(多重添字 $i = (-L_1,-L_1), (-L_1,-L_1+1), \dots, (0,0)$

スピン配位 ⇒ 確率空間 $(\Omega_\Lambda, \mathcal{F}_\Lambda, P_\Lambda^{\beta,h})$ の導入 $P_\Lambda^{\beta,h}$: 有限Gibbs測度
物理的には『電子のスピンが磁石』
上向き(+1), 下向き(−1)がΛ上の各格子点で定義される.

確率論的なモチベーション: 以下の並びは確率的に起きやすいか

磁気モーメント

$$\begin{matrix} \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow \end{matrix}$$

⇑ 外部磁場H

↓

起こりやすさ/にくさを与える確率空間は何か

$$\left(p = e^{-\beta H} / \sum e^{-\beta H} \quad \text{と} \quad I(p) = -\sum p \log p \right)$$

スピン配位 (spin configuration) 確率空間の元(事象)

$$\omega : \Lambda \to \{+1, -1\}$$
$$i \mapsto \omega(i)$$

$\Uparrow$

スピン配置空間 (spin configuration space) Ω_Λ
$:= \{ \Lambda$ 上の spin configuration $\}$

$\mathcal{F}_\Lambda := \mathrm{Pow}(\Omega_\Lambda)$ (Ω_Λ の部分集合族)
↳ σ-algebra $\quad \mathcal{F}_\Lambda \ni \Omega_\Lambda$, $A \in \mathcal{F}_\Lambda \Rightarrow A^c \in \mathcal{F}_\Lambda$,
$A_1, A_2, \ldots, \in \mathcal{F}_\Lambda \Rightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{F}_\Lambda$

確率測度 $P(\omega)$: カノニカル分布

$\beta > 0$ と エネルギー(固有値)とよばれる確率変数 $H_\Lambda^h(\omega)$ を用いて

$$P_\Lambda^{\beta,h}(\omega) = \frac{e^{-\beta H_\Lambda^h(\omega)}}{\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^h(\omega)}}$$

で与える. ここで

$$H_\Lambda^\beta(\omega) = -\frac{1}{2} \sum_{i \in \Lambda} \sum_{j \in \Lambda} J(i-j)\, \omega(i) \omega(j) - h \sum_{i \in \Lambda} \omega(i)$$

相互作用: $J(i) = J(-i)$ 　　磁気モーメント × 外部磁場

β : 逆温度
($\beta = \frac{1}{k_B T}$; k_B : ボルツマン定数 ; T : 温度)

$A \in \mathcal{F}_\Lambda$ における確率測度 : 有限 Gibbs 測度

$$Z_\Lambda^{\beta,h} = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp(-\beta H_\Lambda^h(\omega)) \quad \text{(分配関数)}$$

$$P_\Lambda^{\beta,h}(A) = \frac{1}{Z_\Lambda^{\beta,h}} \sum_{\omega \in A} \exp(-\beta H_\Lambda^h(\omega))$$

Remark : $\beta \to 0$ のとき $P_\Lambda^{0,h}$ はエネルギーに依存しない

Remark : 強磁性イジングモデル

$$J(i-j) = \begin{cases} J & (|i-j| = 1) \\ 0 & (|i-j| \neq 1) \end{cases}$$

↪ 隣接するスピンの状態がそろう方がエネルギーが小さい

⇓

同一方向にスピンをそろえる作用が働くはず…
数学的にどう扱うか..

Remark : 平均場モデル (Curie - Weiss model)

$$J(i-j) = \begin{cases} \frac{1}{|\Lambda|} J_0 & (i, j \in \Lambda) \\ 0 & (i \notin \Lambda \text{ or } j \notin \Lambda) \end{cases}$$

スピンの総和

$$S_\Lambda(\omega) = \sum_{i \in \Lambda} \omega(i)$$

$$H_\Lambda^h(\omega) = -|\Lambda| \left(\frac{1}{2} J_0 \left(\frac{S_\Lambda(\omega)}{|\Lambda|} \right)^2 + h \left(\frac{S_\Lambda(\omega)}{|\Lambda} \right) \right)$$

$\because$ $$\sum_{i \in \Lambda} \sum_{j \in \Lambda} J(i-j) \omega(i) \omega(j) = \frac{J_0}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \sum_{j \in \Lambda} \omega(i) \omega(j) = \frac{J_0}{|\Lambda|} (S_\Lambda(\omega))^2$$

$$\sum_{i \in \Lambda} \omega(i) = S_\Lambda(\omega)$$

$$\begin{aligned} H_\Lambda^h(\omega) &= -\frac{1}{2} \sum_{i \in \Lambda} \sum_{j \in \Lambda} J(i-j) \omega(i) \omega(j) - h \sum_{i \in \Lambda} \omega(i) \\ &= -\frac{1}{2} \frac{J_0}{|\Lambda|} (S_\Lambda(\omega))^2 - h S_\Lambda(\omega) \\ &= -|\Lambda| \left(\frac{1}{2} J_0 \Big(\underbrace{\frac{S_\Lambda(\omega)}{|\Lambda|}}_{\text{スピン平均値}} \Big)^2 - h \left(\frac{S_\Lambda(\omega)}{|\Lambda|} \right) \right) \end{aligned}$$

平衡状態での物理量，(絶対零度)，無限体積の極限

平均場モデルの自発磁化

磁化：スピン和の期待値

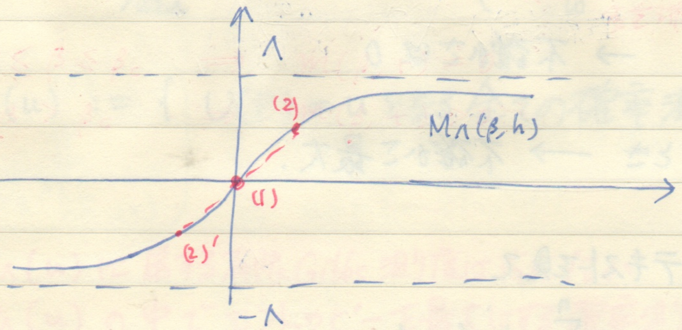
$$X_i(\omega) := \omega(i) \quad , \quad S_\Lambda(\omega) := \sum_{i\in\Lambda} X_i(\omega) = \sum_{i\in\Lambda} \omega(i)$$

$$M_\Lambda(\beta, h) := \int_\Omega P(d\omega)\, S_\Lambda(\omega)$$

比磁化と自発磁化：

$$m(\beta,h) = \lim_{|\Lambda|\to\infty}$$

$$m(\beta, h) := \lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} \frac{1}{|\Lambda|} M_\Lambda(\beta, h)$$



Theorem 1-6

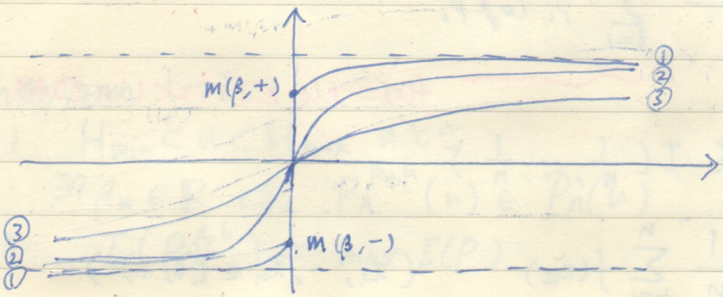
(1) $M_\Lambda(\beta, 0) = 0$

(2) $M_\Lambda(\beta, -h) = -M_\Lambda(\beta, h)$

$|M_\Lambda(\beta, h)| \leq |\Lambda|$

$h\in\mathbb{R}$で単調増加

$h \geq 0$で非負な凸関数



① $\beta > \beta_c$ 自発磁化あり

② $\beta = \beta_c$ 自発磁化なし

③ $\beta < \beta_c$

Gibbsの自由エネルギーと比磁荷

$$g_\Lambda(\beta, h) := \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda^{\beta, h}$$

有限Gibbs測度の特徴付け

→ 孤立系における平衡状態をエントロピーで特徴付ける.

$\boxed{\text{エントロピーとは何か：情報量の期待値}\quad -\sum_{i=1}^{n} p_i \underbrace{\log p_i}_{\text{情報量}}}$

競技の勝者の例：競技者を $1, \cdots, n$ まで番号をつけ.
i 番目の競技者が優勝する事象 A_i

$P(A_i) = p_i$ とする. $p_1 + \cdots + p_n = 1$

$p_i = 1 \ \exists i$ のとき → 不確かさは 0

$p_1 = \cdots = p_n = \frac{1}{n}$ のとき → 不確かさ最大.

詳しくは情報理論のテキストを見て

$$I(p_1, \cdots, p_n) = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i$$

$f(x) = x \log x \ (0 < x < 1)$ の凸性

Claim $I(p_1, \cdots, p_n) \leq I(\frac{1}{n}, \cdots, \frac{1}{n})$

$$f\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k\right) \leq \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k) \qquad (x_1, \cdots, x_n \in [0, 1])$$

$$f\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} p_k\right) \leq \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(p_k)$$

$$\frac{1}{n}\log\frac{1}{n} \leq \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} p_k \log p_k \iff \underset{\substack{\| \\ I(\frac{1}{n}, \cdots, \frac{1}{n})}}{\log n} \geq \underset{\substack{\| \\ I(p_1, \cdots, p_n)}}{-\sum_{k=1}^{n} p_k \log p_k}$$

有限スピン系のエントロピーとカノニカル分布

$$I(P) := -\sum_{\omega\in\Omega_\Lambda} P(\omega)\underbrace{\log P(\omega)}_{\text{情報量}} \quad \left(\begin{matrix}\text{ただし}\\ 0\log 0 = 0\end{matrix}\right)$$

情報量の期待値をエントロピーという

エントロピーを最小にする確率測度は何か

平均エネルギー

$$U(P) := \int_{\Omega_\Lambda} P(d\omega)\, H_\Lambda^h(\omega) \left(= \sum_{\omega} H_\Lambda^h(\omega) P_\Lambda \right)$$

$\mathcal{P}_\Lambda(u) := \{\ U(P) = u$ となる全ての確率測度の集合 $\}$.

(1) $\mathcal{P}_\Lambda(u)$ に属する有限Gibbs測度は存在するか

(2) $\mathcal{P}_\Lambda(u)$ の中でエントロピーを最大にする確率測度は何か

Theorem 1-2

(1) $H_{min} < u < H_{max}$ のとき

$\exists! \beta_u \in \mathbb{R}$ s.t. $P_\Lambda^{\beta_u, h}(u) \in \mathcal{P}_\Lambda(u)$

(2) $I(P_\Lambda^{\beta, h}) = \max I(P)$

相対エントロピー

$$I(P_1 | P_2) := -\sum_\omega P_1(\omega) \log \frac{P_1(\omega)}{P_2(\omega)}$$

を導入して証明する.

※ Kullback-Leibler の相対エントロピーの符号が逆であるもの.

$$I(P_1|P_2) = -\sum_{\omega} P_1(\omega)\log\frac{P_1(\omega)}{P_2(\omega)}$$

Prop 1.3

$$I(P_1|P_2)\leq 0 \quad (I(P_1|P_2)=0 \Leftrightarrow P_1=P_2)$$

∵ $x\log x \geq x-1$ (等号は $x=1$ のみ成立)

$$\frac{P_1(\omega)}{P_2(\omega)}\log\frac{P_1(\omega)}{P_2(\omega)} \geq \frac{P_1(\omega)}{P_2(\omega)} - 1$$ より O.K.

Prop 1.4

(1) $\forall \beta, h$

$$I(P_\Lambda^{\beta,h}) = \beta U(P_\Lambda^{\beta,h}) + \underbrace{\log Z_\Lambda^{\beta,h}}_{\text{Gibbsの自由エネルギー}}$$

→ $I(P_\Lambda^{\beta,h})$が最大 $\Updownarrow$ $\log Z_\Lambda^{\beta,h}$が最大

(2) $\forall P\in \mathcal{P}_\Lambda$

$$I(P) = I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) + \beta U(P) + \log Z_\Lambda^{\beta,h}$$

$I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) = I(P) - \beta U(P) - \log Z_\Lambda^{\beta,h}$ を示せばよい

∵ (1) $P_\Lambda^{\beta,h} = e^{-\beta H_\Lambda^h}/Z_\Lambda^{\beta,h}$, $I(P_\Lambda^{\beta,h}) = -\sum P_\Lambda^{\beta,h}\log P_\Lambda^{\beta,h}$

$$I(P_\Lambda^{\beta,h}) = -\sum P_\Lambda^{\beta,h}\log P_\Lambda^{\beta,h} = -\sum P_\Lambda^{\beta,h}\left(\log\frac{e^{-\beta H_\Lambda^h}}{Z_\Lambda^{\beta,h}}\right)$$

$$= \beta\underbrace{\sum P_\Lambda^{\beta,h} H_\Lambda^h}_{= U(P_\Lambda^{\beta,h})} + \underbrace{\sum P_\Lambda^{\beta,h}}_{=1}\log Z_\Lambda^{\beta,h}$$

(2) $$I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) \doteq -\sum P\log(P/P_\Lambda^{\beta,h}) = \underbrace{-\sum P\log P}_{= I(P)} + \sum P\log P_\Lambda^{\beta,h}$$

$$I(P) = I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) - \sum P\log P_\Lambda^{\beta,h}$$
$$= I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) + \beta\sum P H_\Lambda^h + \sum P\log Z_\Lambda^{\beta,h}$$

(2) $I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) = -\sum P\log(P/P_\Lambda^{\beta,h})$

$$= -\sum P\log P + \sum P\log P_\Lambda^{\beta,h}$$

$$= I(P) + \sum P\log\left(\frac{e^{-\beta H_\Lambda^h}}{Z_\Lambda^{\beta,h}}\right)$$

$$= I(P) - \beta\sum P H_\Lambda^h - \sum P\log Z_\Lambda^{\beta,h}$$

$$I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) = I(P) - \beta U(P) - \log Z_\Lambda^{\beta,h}$$

Theorem 1-2の証明.

(1) $f(t) := \dfrac{\sum_\omega H_\Lambda^h(\omega)\exp(-tH_\Lambda^h(\omega))}{\sum_\omega \exp(-tH_\Lambda^h(\omega))}$ → $f(t)$の単調減少と中間値の定理

$$f'(t) = -\frac{\sum_\omega (H_\Lambda^h(\omega)-f(t))^2\exp(-tH_\Lambda^t(\omega))}{\sum_\omega \exp(-tH_\Lambda^h(\omega))} < 0$$

$$H_{min} \leq f(t) \leq H_{max}$$

(2) $I(P) = I(P|P_\Lambda^{\beta,h}) + \beta U(P) + \log Z_\Lambda^{\beta,h}$

$P\in\mathcal{P}_\Lambda(u)$ のとき $U(P)=u$ より

$$I(P) = I(P|P_\Lambda^{\beta_u,h}) + \underbrace{\beta_u u + \log Z_\Lambda^{\beta,h}}_{= I(P_\Lambda^{\beta_u,h})}$$

$I(P|P_\Lambda^{\beta_u,h}) \leq 0$ より $I(P) \leq I(P_\Lambda^{\beta_u,h})$

等号は $P=P_\Lambda^{\beta_u,h}$ のみなので o.k.

確率空間のメトリック（参考）

$$P_2 = P_1 + dP_1 \qquad \sum_\omega P_2 = \sum_\omega (P_1 + dP) = 1$$

としてKullback－Leiblerの相対エントロピーを計算する．

$$\sum_\omega P_1 \log \frac{P_1}{P_2} = \sum_\omega P_1 (\log P_1 - \log(P_1 + dP_1))$$

$$= \sum_\omega P_1 (\log P_1 - \log(P_1 + dP_1))$$

$$= \sum P_1 \left(\log P_1 - \log\left(P_1\left(1 + \frac{dP_1}{P_1}\right)\right)\right)$$

$$= -\sum P_1 \log\left(1 + \frac{dP_1}{P_1}\right)$$

$$= -\sum P_1 \left(\frac{dP_1}{P_1} - \frac{dP_1^2}{2P_1^2}\right) \qquad \boxed{\text{Fisher Information}}$$

$$= -\sum dP_1 + \sum \frac{dP_1^2}{2P_1} = \sum \frac{dP_1^2}{2P_1}$$

↳ 正定値2次形式

$$P_1 = x^2 \qquad dP_1 = 2x\,dx$$

$$\sum \frac{dP^2}{2P_1} = \sum \frac{4x^2 dx^2}{2x^2} = 2\sum dx^2$$

情報量 $\tilde{I}(p) = -\log p$

加法性： $\tilde{I}(p_1 p_2) = \tilde{I}(p_1) + \tilde{I}(p_2)$

$\tilde{I}(p) \geq 0$

$\tilde{I}(p) = 0$

$\downarrow$

$I(p_1, \dots, p_n) = -\sum p_i \log p_i$

i.e. 情報量の期待値.