計算物理学B

第9回

野垣 康介、藤本 悠輝

講義予定

10/07 両名：四則演算
10/14 野垣：制御文(for, if)
10/21 野垣：関数
10/28 藤本：配列(numpy)
11/04 藤本：可視化(matplotlib)
11/11 野垣：数値微分
11/18 藤本：数値積分

～中間レポート～

12/09 野垣：モンテカルロ1
12/16 野垣：モンテカルロ2
12/23 藤本：微分方程式1
01/13 藤本：微分方程式2
01/20 藤本：微分方程式3
01/27 野垣：最適化
02/03 藤本：機械学習

～期末レポート～

はじめに

授業で用いるリンクをまとめておきます。

Google Colab

https://colab.research.google.com/?hl=ja

GitHub

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B

GitHub（今週の教材）

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week9

はじめに

GitHubからGoogle Colabへのノートブックの取り込みについて

Colabの画面で
[ファイル]→[ノートブックを開く]→タブ[GitHub]をクリック

GitHub上のノートブックのurlを打ち込むと、直接取り込めます。

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week9/week9.ipynb

[注意!]この状態では、GitHub上のファイルを開いただけで、
個人のドライブに保存されていません!
[ファイル]→[ドライブにコピーを保存]を実行すること。

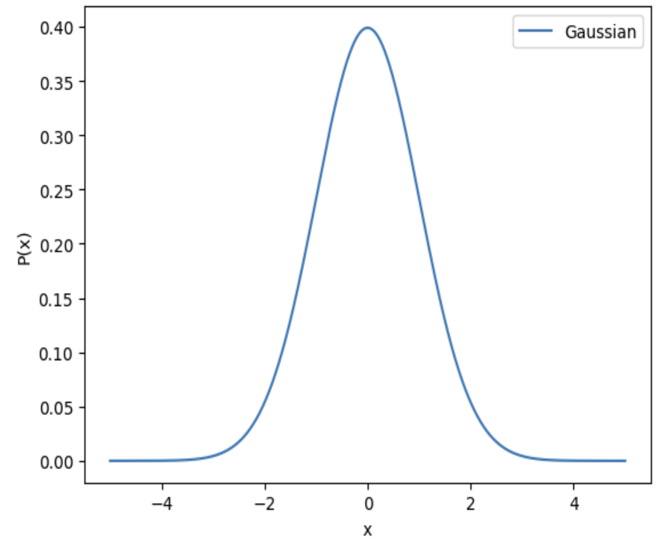
メトロポリス法(復習)

以下の確率分布を再現したい。

$$P(x) = \frac{e^{-\beta H(x)}}{Z}$$

$H(x)$だけ知っていて、

$P(x)$に従う乱数を生成したい。



メトロポリス法

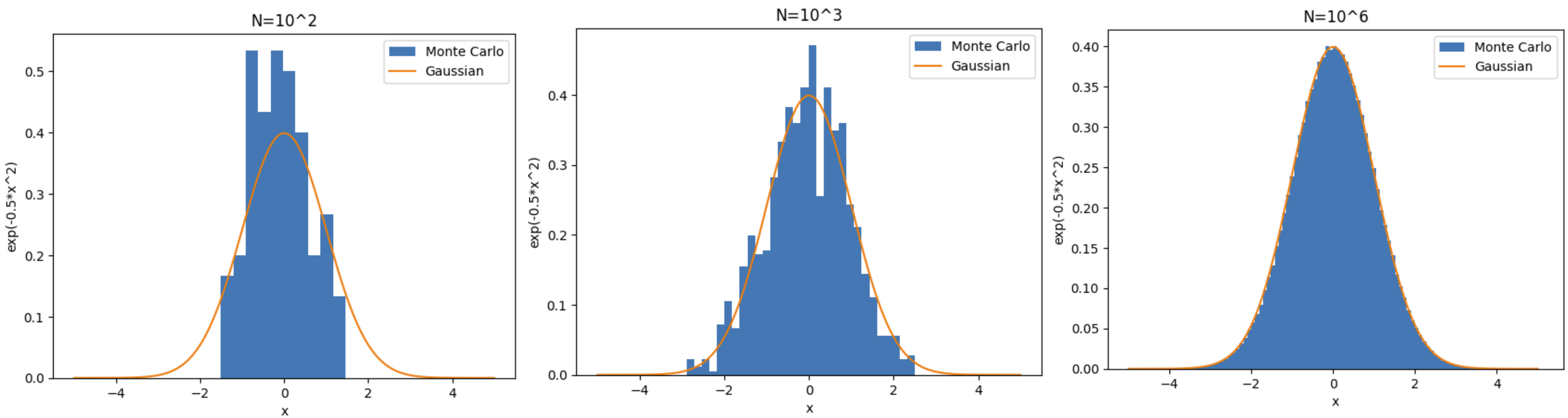
① 乱数 Δx を用いて、$x' = x_k + \Delta x$ を x_{k+1} の候補として提案。

② 確率 $\min(1, e^{\beta(H(x_k)-H(x'))})$ で採択。

③ 採択されれば、$x_{k+1} = x'$ 採択されなければ、$x_{k+1} = x_k$

メトロポリス法(復習)

例として、$\beta H(x) = \dfrac{x^2}{2}$ の場合を考える。



初期値x = 0、更新幅は[-1,1]

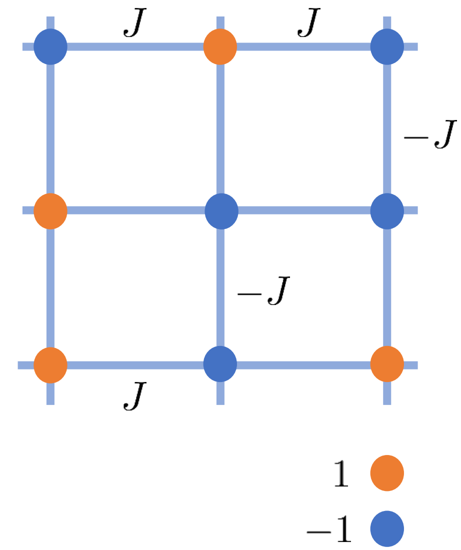
Nの増大と共に、ある確率分布に収束

Ising模型

Ising模型: 磁性体の基本的模型

- 各格子点に2値のスピン変数 $\sigma = \pm$

  それぞれ、上向きスピンと下向きスピン



- 隣り合うスピン同士の相互作用

  スピンの向きが同じなら $-J$

  スピンの向きが逆なら　J

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \underline{h \sum_i \sigma_i}$$

最近接対についての和

以下、磁場は0とする

Ising模型

Ising模型: 磁性体の基本的模型

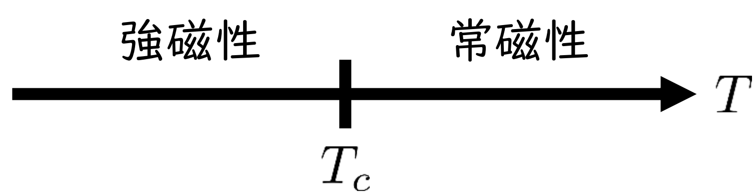
1D: 転送行列法で解析的に解ける。相転移なし

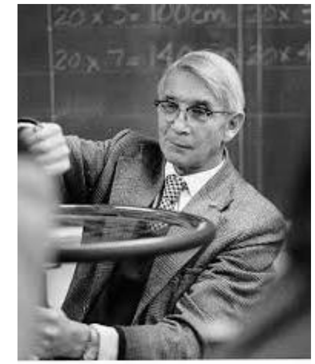
2D: 解析的に解ける。

3D: 解かれていない。

4D: 平均場近似で良い。

相転移あり



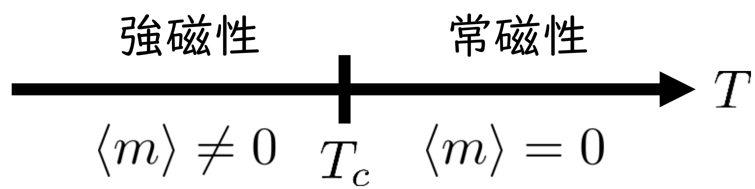


Ernst Ising

Lars Onsager

Ising模型

Ising模型: 磁性体の基本的模型



$$m = \frac{1}{N}\sum_i \sigma_i \quad \text{磁化}$$

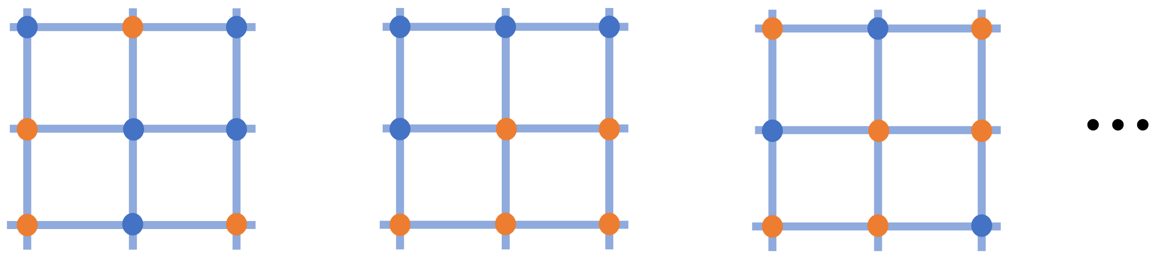
$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z}\mathrm{tr}\left[\frac{1}{N}\sum_i \sigma_i e^{-\beta H}\right] = \frac{1}{Z}\sum_{\{\sigma\}}\left[\frac{1}{N}\sum_i \sigma_i e^{-\beta H}\right]$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2}\cdots\sum_{\sigma_N}\left[\frac{1}{N}\sum_i \sigma_i e^{-\beta H}\right]$$

Ising模型

系の状態はN個の変数σの組（配位）で表現

➡ 2^N通りの組み合わせ（計算量の爆発）



$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_N} \left[\frac{1}{N} \sum_i \sigma_i e^{-\beta H} \right]$$

$$\approx \frac{1}{N_{\mathrm{MC}}} \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right\rangle$$

モンテカルロシミュレーションが有効

メトロポリス法

① N 個のサイトから反転させるサイトをランダムに選ぶ

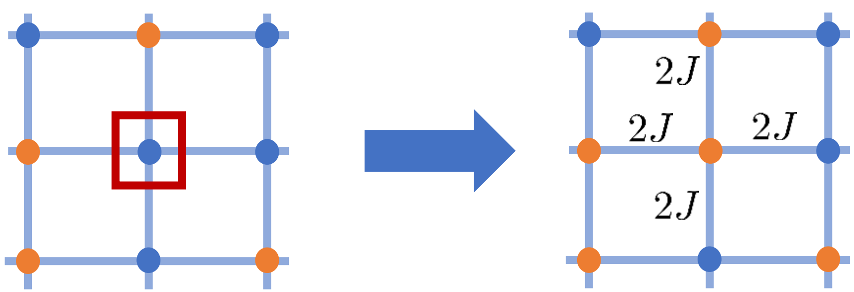
② 反転させた場合のエネルギー差を計算する

$$\begin{aligned}\Delta E &= H(\{\sigma'\}) - H(\{\sigma^i\}) \\ &= 2J\left(\sigma_{i+\boldsymbol{x}} + \sigma_{i-\boldsymbol{x}} + \sigma_{i+\boldsymbol{y}} + \sigma_{i-\boldsymbol{y}}\right)\sigma_i\end{aligned}$$

③ 確率 $T = \min(1, e^{-\beta\Delta E})$ で新しい配位を採択

エネルギーが下がる配位なら100%採択
エネルギーが上がる配位でも一定の確率で採択

$$\{\sigma^1\} \to \{\sigma^2\} \to \cdots \to \{\sigma^N\}$$

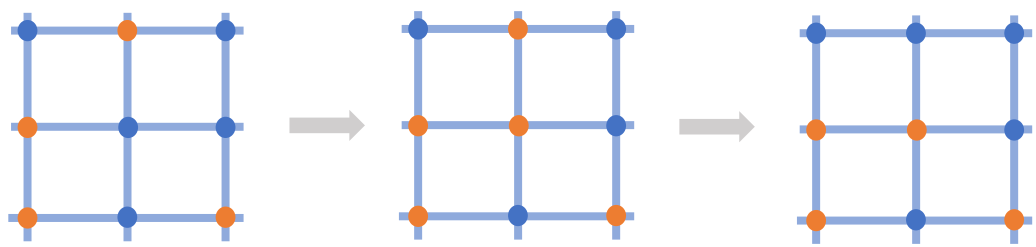


自己相関

モンテカルロ積分におけるサンプルは互いに独立である必要がある

$$\langle m \rangle \approx \frac{1}{N_{\mathrm{MC}}} \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right\rangle$$

スピンを一つ反転させるだけでは、独立な配位とは言えない



マルコフ連鎖モンテカルロにおいて、生成された配位の列が
互いに関係する現象→自己相関

$$\{\sigma^1\} \to \{\sigma^2\} \to \cdots \to \{\sigma^M\} \to \cdots \to \{\sigma^N\}$$

積分に用いる

自己相関

自己相関のある配位を避けるために、一定のステップをスキップする必要がある

系のサイト数 N

採択確率の平均 $\langle T \rangle$

より、$N/\langle T \rangle$ ステップ程度で、系全体のスピンが更新される

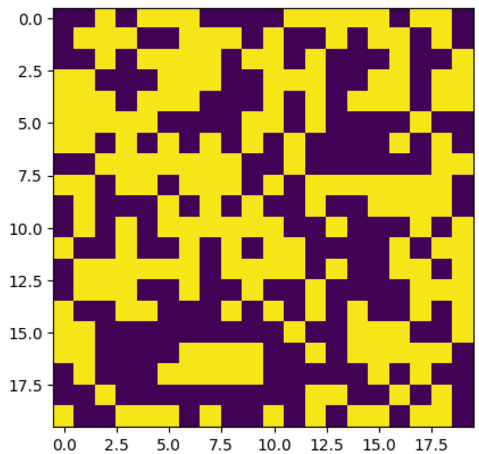
→独立な配位

$N/\langle T \rangle$ ステップ毎の配位を用いると、安全に積分できる。

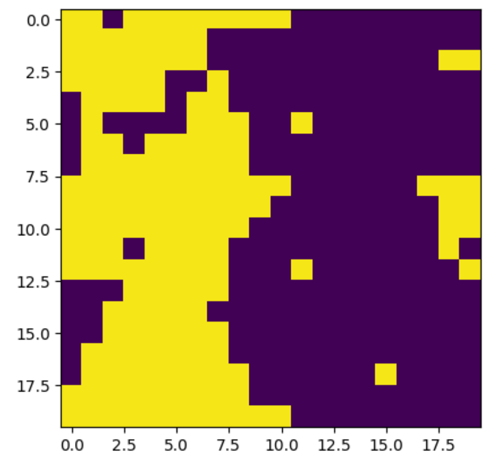
モンテカルロシミュレーション

2次元(20×20)、$\beta = (2J)^{-1}$(強磁性状態)

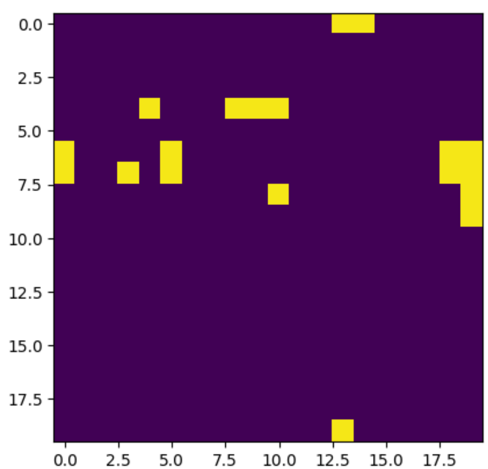
初期状態



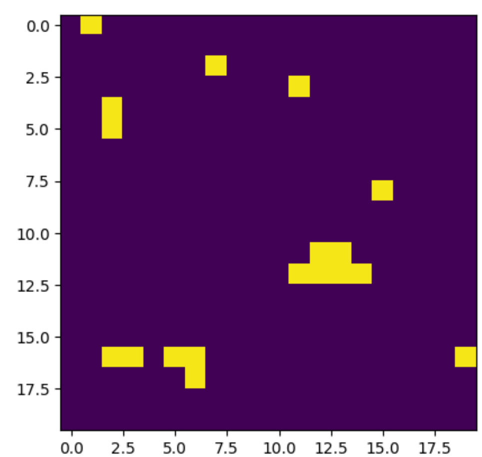
30000ステップ



60000ステップ

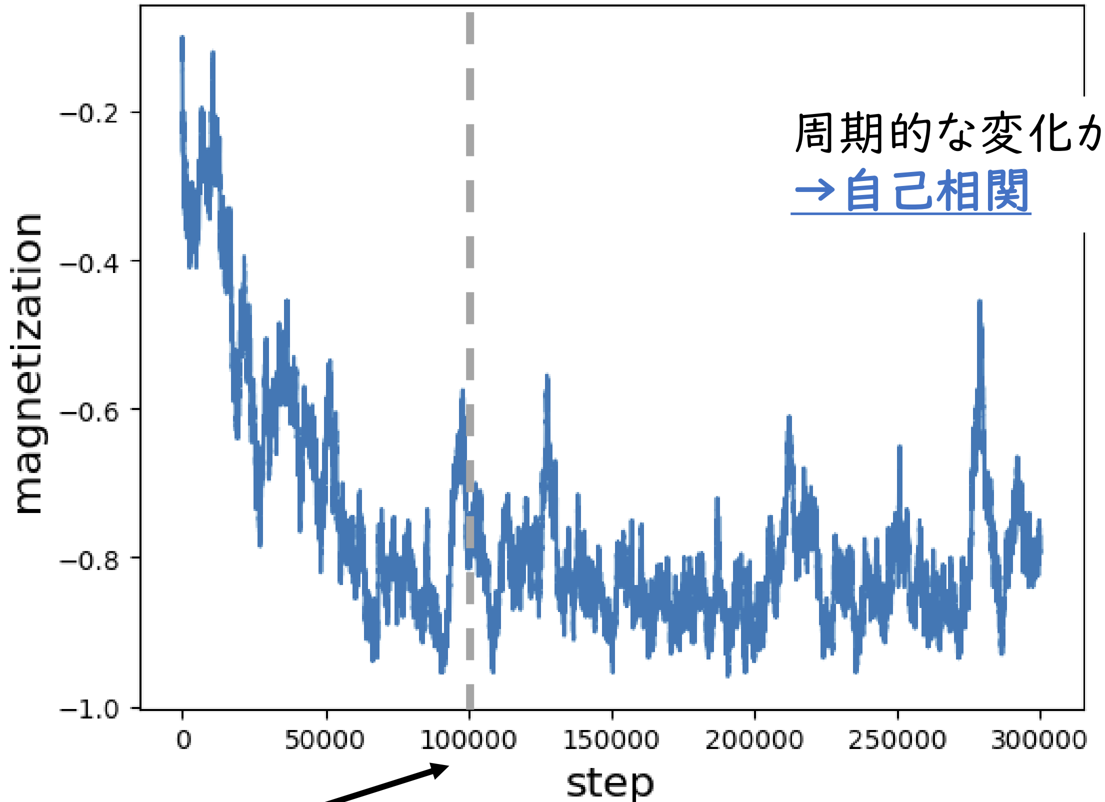


90000ステップ



モンテカルロシミュレーション

2次元（20×20）、$\beta = (2.2J)^{-1}$（強磁性転移付近）



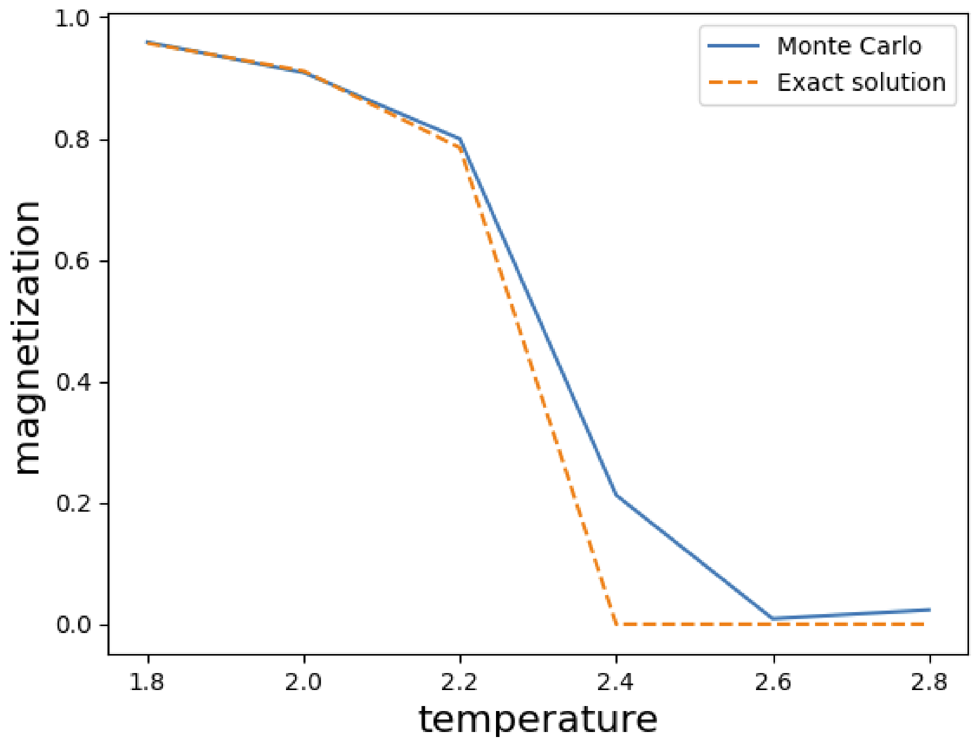
周期的な変化が見られる
→自己相関

初期状態の影響が消える
＝熱平衡化

モンテカルロシミュレーション

2次元(20×20)、磁化の温度変化

$$m = \begin{cases} \left(1 - \sinh^{-4} \frac{2J}{k_\mathrm{B}T}\right)^{\frac{1}{8}} & T \le T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases} \qquad k_\mathrm{B}T_c \approx 2.269J$$



転移点付近でのズレは有限サイズ効果

実習タイム

例題

- Ising模型において、磁化の分散の平均値 $\langle m^2 \rangle$ の温度依存性を計算せよ

- 比熱 $C = \beta^2(\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)/N$ の温度依存性を計算せよ