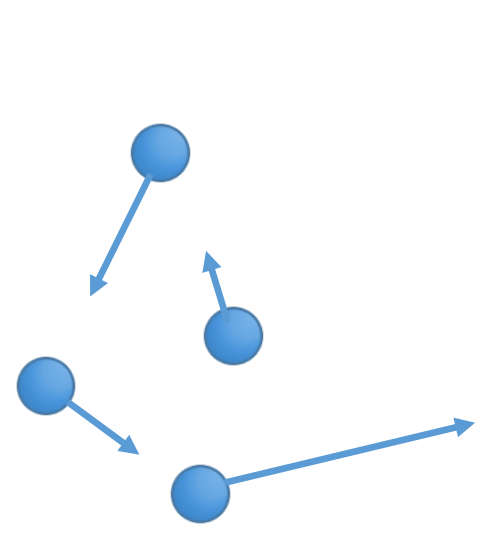


藤堂研究室TODOGROUP

—統計力学と計算機で迫る相互作用多体系物理—

粒子の法則

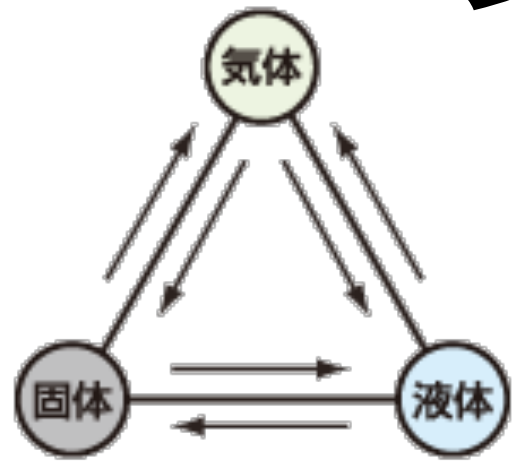


$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}(\vec{x})$$

多粒子になると解けない
(ex.1000個の変数の1000個の連立方程式)

より大雑把に

多粒子系の法則



$$PV = nRT$$

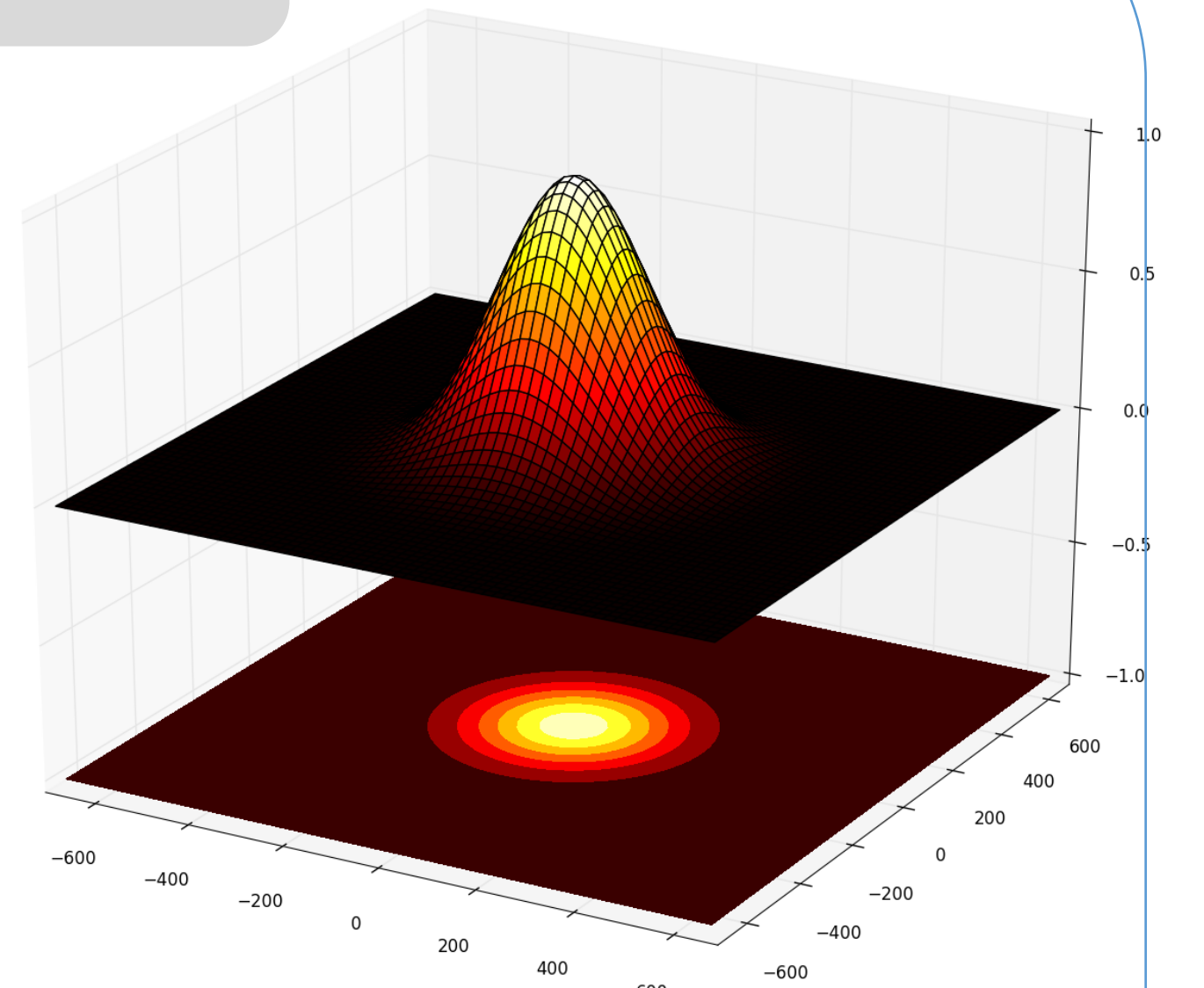
粒子の状態を完全に知る必要はない
(粒子の法則を解かなくてもわかる)

より詳細に

統計力学

$$P(\vec{x}, \vec{v}) \propto \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

ex.空気の $|\vec{v}|$ の期待値=音速
空気の \vec{v} の期待値=0



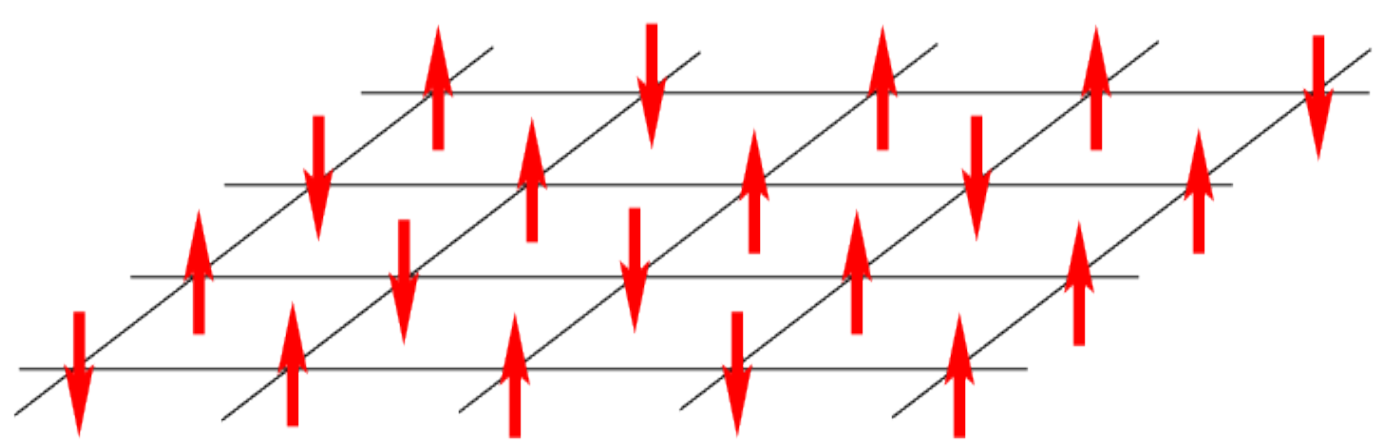
室温中の粒子の速度分布

ある温度で取りうる粒子の状態は
確率的に分布している(と考える)
→多粒子系の物理量は期待値として現れる

相互作用多体系の見える物理

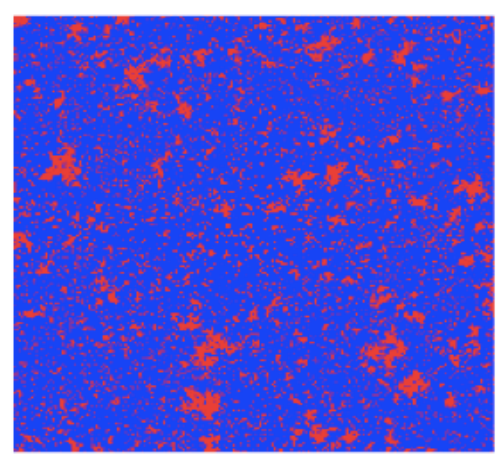
相転移

系全体の状態が突然変化する

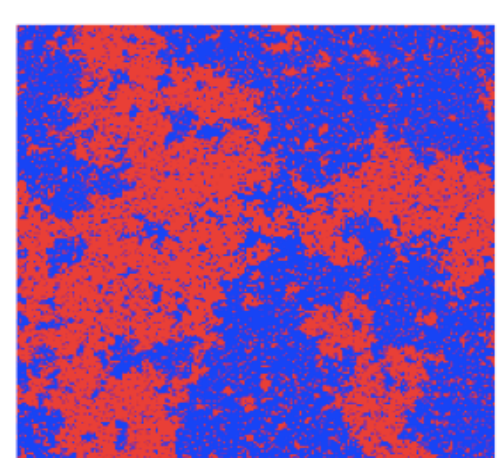


ex.隣接間で向きが揃うとエネルギーが
低くなる上下しか向かない矢印モデル
(Ising model)

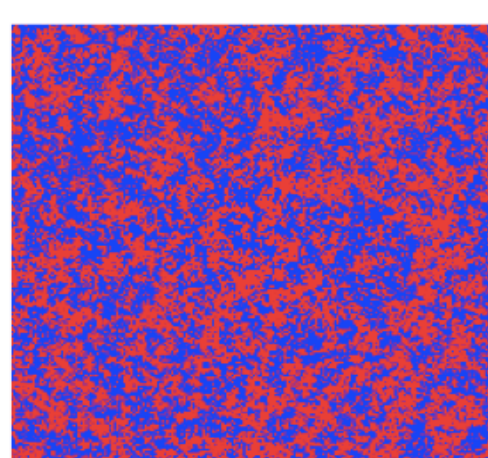
form.:arXiv:1402.6837 [cond-mat.stat-mech]



$T=0.995T_c$
秩序状態 (磁石)



$T=T_c$
臨界点 (キュリー点)

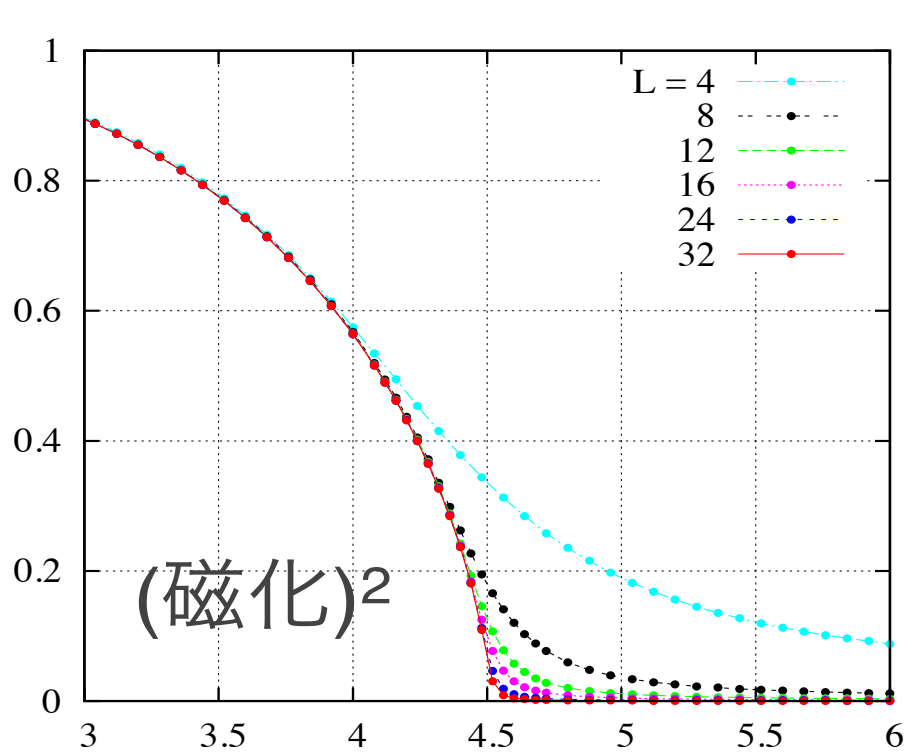
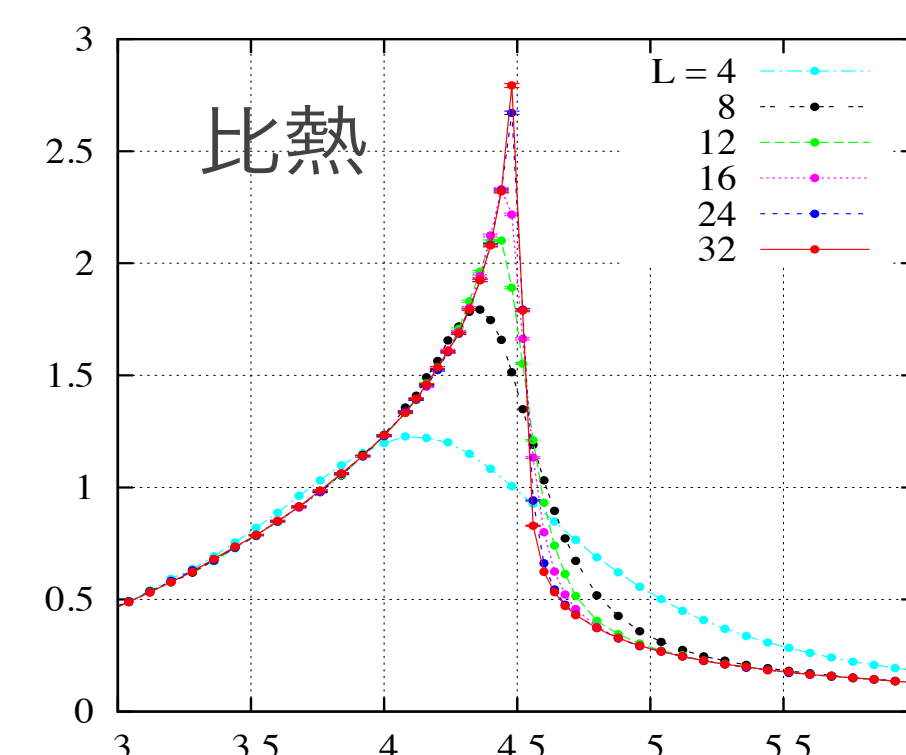


$T=1.05T_c$
無秩序状態 (磁石でない)

臨界現象

相転移に伴う物理量の急激な変化

- 相転移点の近くでは様々な物理量 (比熱、磁化) が異常を示す (臨界現象)



- 小さな系ではなめらかに変化する ⇒ 相転移や秩序状態は非常にたくさんの原子 (アボガドロ数) が集ってはじめて現われる!
- スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションが必要

分布について積分する

(ex. サイコロなら $1 \times \frac{1}{6} + \dots + 6 \times \frac{1}{6} = \frac{7}{2}$)

乱数を用いた数値計算

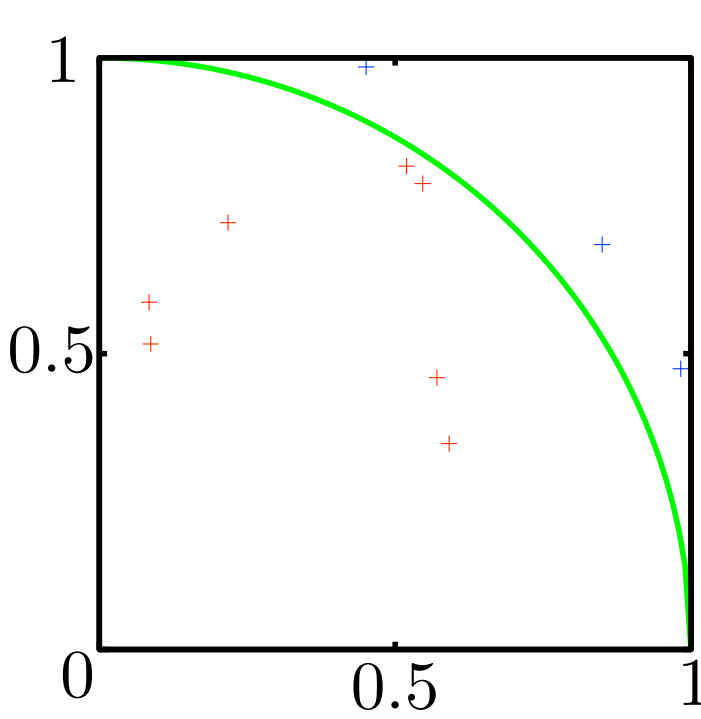
分布を満たす乱数を起こす

(ex. サイコロなら何万回とふる)

モンテカルロ積分法

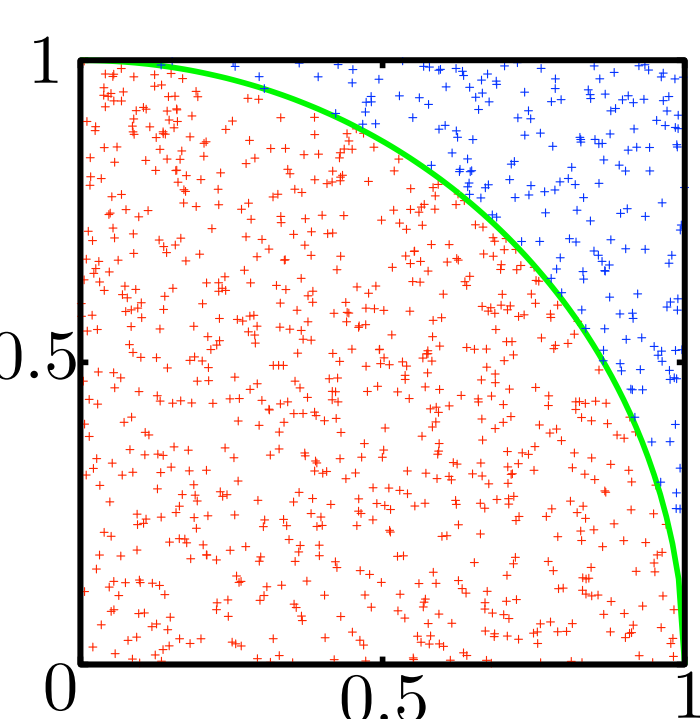
ex. $\pi = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx$

1/4の円の面積 $\frac{\pi}{4}$ = 赤い点/全点



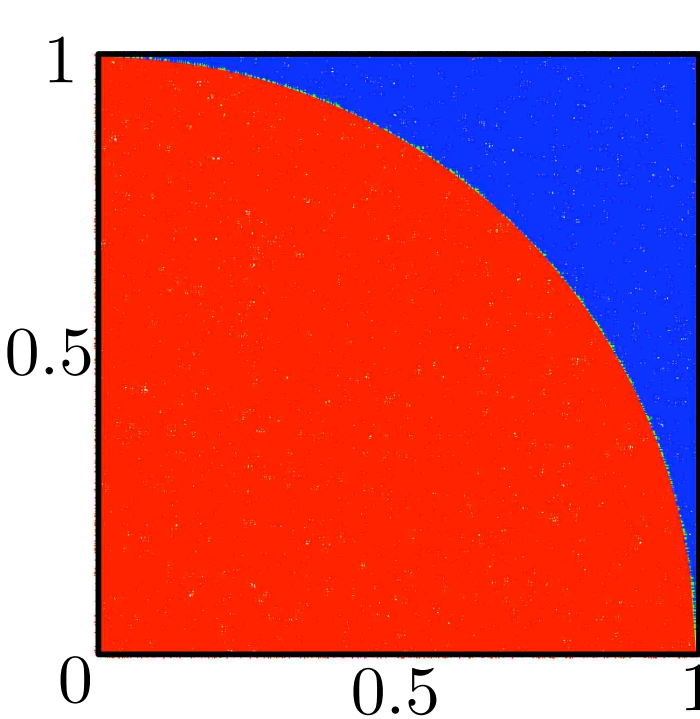
N=10

πの見積もり=2.8



N=1000

πの見積もり=3.176

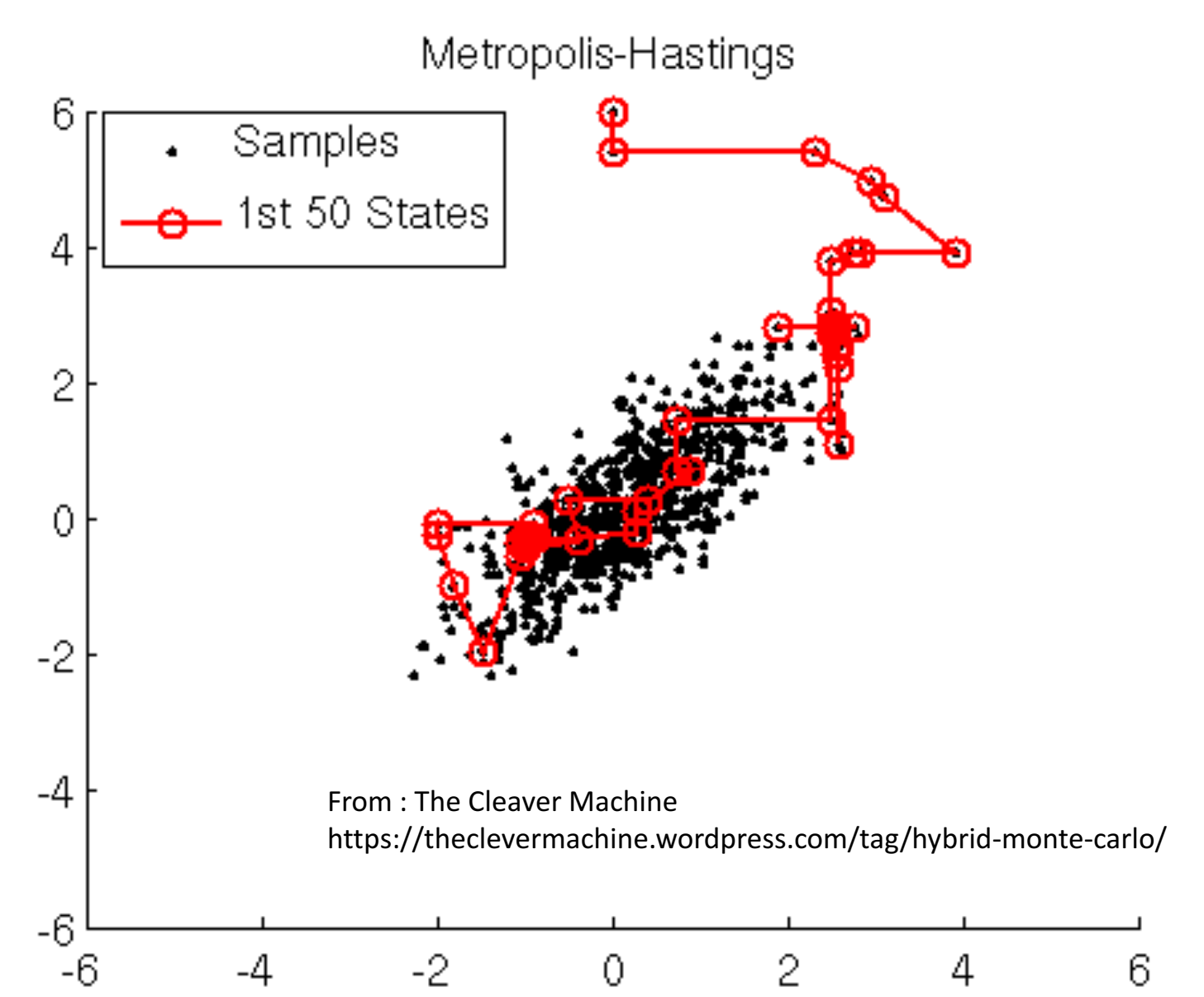


N=100000

πの見積もり=3.14864

マルコフ連鎖モンテカルロ法

初期状態から目的の分布へ
遷移する様子。



状態のとった頻度を表すグラフ。
ステップ数を増やすことで分布
を再現している

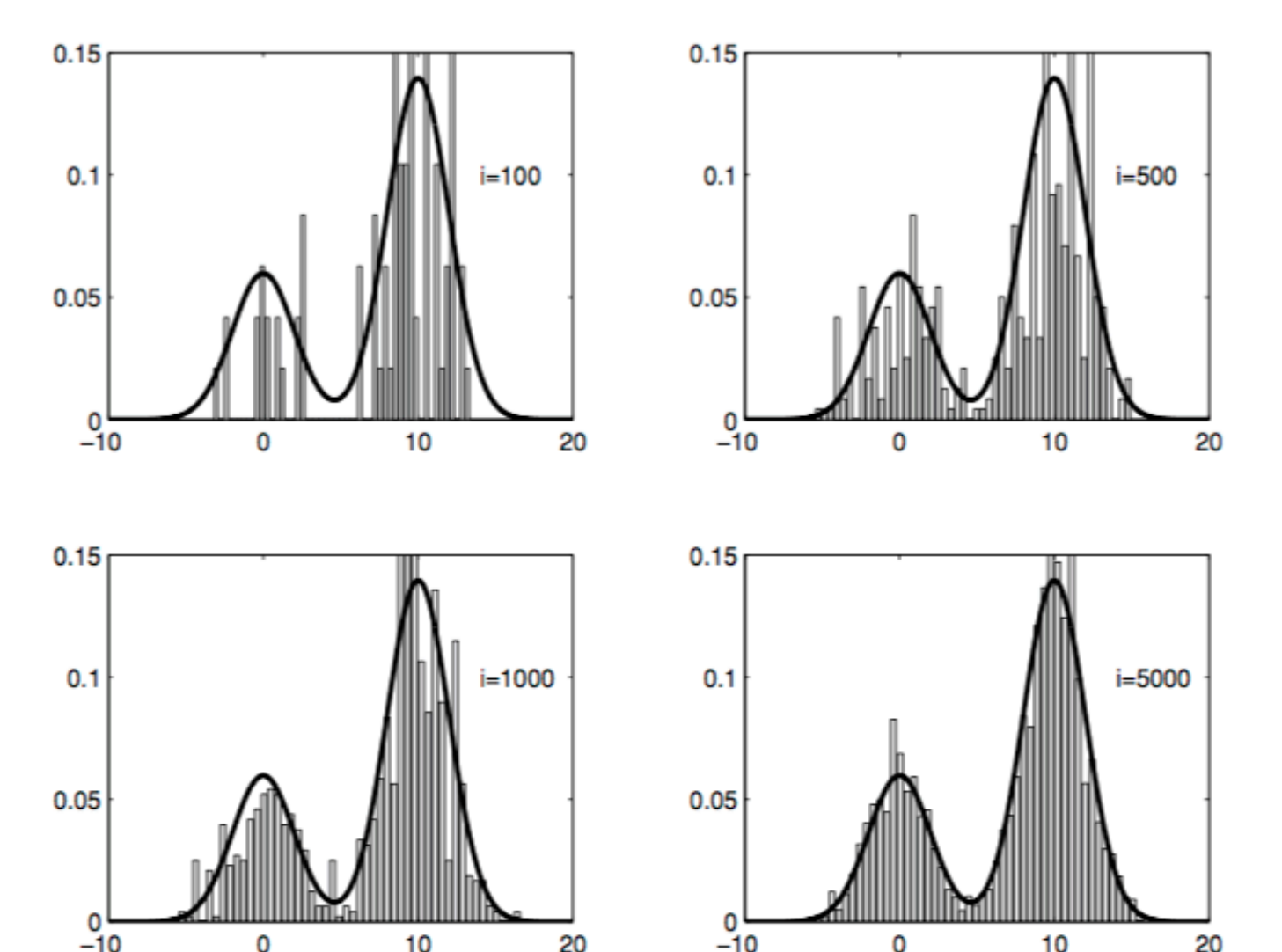


Figure 6. Target distribution and histogram of the MCMC samples at different iteration points.
From : An Introduction to MCMC for Machine Learning

最近の研究

- テンソルネットワーク
- 機械学習
- モンテカルロ法の高速化

[准教授]藤堂眞治
[助教]諏訪秀磨

[学生] 博士:堀田俊樹
修士:足立大樹、島垣凱
山本卓矢、石川文啓