Spin系の統計力学とMetropolis法

計算機アルゴリズム特論：2017年度

只木進一

2

Spin系

- 磁性を有する固体
- 各原子の磁石をモデル化：スピン
- 磁性の仕組みを理解するモデル
- Spin間の相互作用はPauli排他律などの量子力学的力
  - 磁気的力ではない
  - 単純にN極とS極が引き合うのではない

磁性の種類

- 強磁性(ferromagnetism)
  - 系全体として特定の向きに磁化する
  - 低温で実現する
- 反強磁性(anti-ferromagnetism)
  - 隣接するspinが逆向きに配向する
  - 低温で実現する
- 常磁性(paramagnetism)
  - 系全体として磁化していない

例：鉄

- 鉄は通常の強磁性
  - 磁石に付く
- 770°C (Curie点) 以上で常磁性
  - 磁石に付かない
- Curie点の上下で強磁性から常磁性に変化する
  - 相転移:Phase Transition

統計力学
Statistical Mechanics

- 18世紀に始まった産業革命(Industrial Revolution)
  - 熱を動力に変えることで産業構造を大きく変革
- 熱を効率良く動力に変換するために、熱現象の理解が必要
  - 熱力学(thermodynamics)と呼ばれる学問が発生
- 熱現象を微視的視点から理解しようとするのが、19世紀末に始まった統計力学(statistical mechanics)

統計力学
Statistical Mechanics

- 多粒子系（気体、液体、固体など）の巨視的性質（比熱、状態方程式、相転移など）が対象
- 系の力学的構造（エネルギー構造など）から巨視的性質を導出
- 熱力学を基礎づける

統計力学の拡張

- 非平衡系への拡張(緩和過程、化学反応など)
- 統計力学の中で使われてきた手法や概念の応用
  - 相転移、対称性の破れ、繰り込み、臨界現象など
- 非物理的対象への拡張
  - 生物・生態：伝染病、食物連鎖、遺伝、進化と絶滅
  - 社会・経済：株価、交通流、人の流れ
  - ネットワーク

小正準集合(Micro-canonical Ensemble)

- 力学と統計力学の関係を調べる
- 孤立した系(粒子数、体積、エネルギーが一定)
- 位相空間(phase space)
  - 系の力学状態を一意に示す力学変数が作る空間
  - 点粒子からなる系ならば、位置座標と運動量 $(\vec{q}, \vec{p})$
  - 系の運動は位相空間内の交わらない軌道

等重率の原理 (Principle of equal *a priori* probability)

- 可能な全ての微視的状態が等確率で実現される
  - 小正準集合の場合には、エネルギーが等しい状態
- 系のエネルギー:$E \leq H \leq E + \Delta E$
- 対応する位相空間の体積:$W(E, E + \Delta E)$
- 位相空間上の実現確率密度
  - $\rho = W^{-1}(E, E + \Delta E)$

正準集合(Canonical Ensemble)

- 二つのシステムが弱く相互作用
  - $E = E_A + E_B + E_{AB} \simeq E_A + E_B = \mathrm{const.}$
  - $\rho(E) = \rho_A(E_A) \times \rho_B(E_B) = \mathrm{const.}$

- 二つの系の粒子数及び体積は一定
- 全体を小正準集合として扱う

- エネルギーの微小変化を考える
- エネルギーを与えられたときの最大分布

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}E_A} = 0 = \rho_B\left(E_B\right)\frac{\mathrm{d}\rho_A}{\mathrm{d}E_A} + \rho_A\left(E_A\right)\frac{\mathrm{d}\rho_B}{\mathrm{d}E_B}\frac{\mathrm{d}E_B}{\mathrm{d}E_A}$$

$$= \rho_B\left(E_B\right)\frac{\mathrm{d}\rho_A}{\mathrm{d}E_A} - \rho_A\left(E_A\right)\frac{\mathrm{d}\rho_B}{\mathrm{d}E_B}$$

Boltzmann分布

$$\frac{1}{\rho_A(E_A)}\frac{\mathrm{d}\rho_A}{\mathrm{d}E_A} = \frac{1}{\rho_B(E_B)}\frac{\mathrm{d}\rho_B}{\mathrm{d}E_B} = -\frac{1}{\Theta} = \text{const.}$$

$$\rho_i(E_i) = \exp\left[\left(\Psi_i - E_i\right)/\Theta\right]$$

- Ψ_i：規格化のための定数
  - Helmholtz自由エネルギーとも呼ぶ
- Θ：温度に相当

Ensembleの考え方

- 平均はensemble平均である。
  - 初期状態の異なる多数の系に関する平均
- 平衡状態：分布の安定
  - 十分な時間の後、初期状態とは無関係に平衡が成り立つ
  - 長時間の挙動は初期状態とは無関係
  - エルゴード性(ergodicity)
- 長時間平均とensemble平均の一致

基本的な平衡系の統計力学

- 系の力学変数の組vに対して、エネルギー$H(v)$が与えられている
- vが実現する確率 $p(v) \propto \exp(-\beta H(v))$
  - $\beta = 1/(k_\mathrm{B} T)$
  - k_B : Boltzmann定数
- βが大きい（Tが小さい）場合、エネルギー最低の状態が指数関数的に高い確率で発生

期待値を求める

- 巨視的量は期待値として得られる
- 規格化定数

$$P(v) = Z^{-1} e^{-\beta H(v)}$$

$$Z = \sum_{v \in V} e^{-\beta H(v)}$$

  - Zは分配関数(partition function)と呼ばれる基本量
  - 巨視的量を求める元になる

16

例：内部エネルギー

$$U = \langle H \rangle = \sum_v H(v) P(v) = \frac{1}{Z} \sum_v H(v) e^{-\beta H(v)}$$

$$= \frac{1}{Z} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \right) \sum_v e^{-\beta H(v)} = \frac{1}{Z} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \right) Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

例：エントロピー

$$
\begin{aligned}
S &= -k_{\mathrm{B}} \sum_{v} P(v) \ln P(v) \\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_{v} Z^{-1} e^{-\beta H(v)} \ln\left[Z^{-1} e^{-\beta H(v)} \right] \\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_{v} Z^{-1} e^{-\beta H(v)} \left(-\ln Z - \beta H(v) \right) \\
&= k_{\mathrm{B}} \frac{1}{Z} \ln Z \sum_{v} e^{-\beta H(v)} + k_{\mathrm{B}} \frac{\beta}{Z} \sum_{v} H(v) e^{-\beta H(v)} \\
&= k_{\mathrm{B}} \ln Z + \frac{1}{T} U
\end{aligned}
$$

平均量を求めるには

- 分配関数を厳密または近似的に求める
  - そこから平均量を計算
  - 一般には困難
- Monte Carlo法
  - 状態をサンプリングして計算

Monte Carlo法による平均量の計算

- 変数のサンプルvを確率$p(v)$から選択
- 物理量$Q(v)$、サンプル数M
- Mが十分に大きいとき、状態vは$Mp(v)$回出現することに注意

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z_{\mathrm{sample}}} \sum_{i=0}^{M-1} Q(v_i) e^{-\beta H(v_i)} p^{-1}(v_i)$$

$$Z_{\mathrm{sample}} = \sum_{i=0}^{M-1} e^{-\beta H(v_i)} p^{-1}(v_i)$$

- 一様な$p(v)$の場合、寄与が指数関数的$e^{-\beta H(v)}$に小さい項ばかりが出てくる
  - 正しい近似にならない

Importance Sampling

- 和への寄与の大きい項を選択的に選ぶ
  - $p(v) = \mathrm{e}^{-\beta H(v)}$とする

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z_{\mathrm{sample}}} \sum_{i=0}^{M-1} Q(v_i) e^{-\beta H(v_i)} p^{-1}(v_i)$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} Q(v_i)$$

スピン系とMetropolis法

- N個のスピン$s_i (0 \le i < N)$
- 簡単のために$s_i = \pm 1$
  - Ising スピン

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j$$

Metropolis法

- 各時刻でランダムにスピンを選ぶ
  - このときの状態をμ、そのスピンを反転した場合の状態をνとする
  - $\Delta E = E_\nu - E_\mu$
- $\Delta E \leq 0$：状態をνへ更新
- $\Delta E > 0$：確率$e^{-\beta \Delta E}$で状態をνへ更新
- スピンs_iの値の変化をΔs_iとする

$$\Delta E = -\Delta s_i \sum_j J_{ij} s_j$$

$$
\begin{tikzcd}
\mu \arrow[r, bend left, "1"] & \nu \arrow[l, bend left, "e^{\beta\Delta E}"]
\end{tikzcd}
\qquad \Delta E \le 0
$$

$$
\begin{tikzcd}
\mu \arrow[r, bend left, "e^{-\beta\Delta E}"] & \nu \arrow[l, bend left, "1"]
\end{tikzcd}
\qquad \Delta E > 0
$$

- 全ての状態を確率的に実現することができる：ergodic
- 遷移確率は、直前の状態だけで決定され、履歴に依らない：Markov 過程

- 平衡状態では詳細つり合いが成り立つ

- 詳細つり合い：隣接する二つの微視的状態の間で状態遷移が釣り合っている
  - $\Delta E \leq 0$
    - $P(\mu) = P(\nu)e^{\beta \Delta E}$
  - $\Delta E > 0$
    - $P(\mu)e^{-\beta \Delta E} = P(\nu)$
- つまり、状態の出現確率はエネルギーのみで決まる：$P(E) \propto e^{-\beta E}$

Importance Samplingのテスト

- 準備$-1 \leq J_{ij} < 1 (J_{ij} = J_{ji}, J_{ii} = 0)$をランダムに生成
- 初期状態をランダムに生成
- 一定時間の緩和
  - 1 Monte Carlo Step = N回の更新
- 観測
  - 各ステップで新しい状態のエネルギーと頻度を計算

結果：16個のスピン、10^6モンテカルロステップ