Spin系の統計力学とMetropolis法

計算機アルゴリズム特論：2015年度

只木進一

Spin系

- 磁性を有する固体
  - 各原子が小さな磁石
- 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

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）を調べる
- 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

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
- $v \in V$が実現する確率　$P(v) \propto \exp(-\beta H(v))$
  - $\beta = 1/(k_\mathrm{B} T)$
- 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

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

Monte Carlo法による平均量の計算

- 変数のサンプル$v \in V$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

$$p(v) = e^{-\beta H(v_i)}$$

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

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

スピン系とMetropolis法

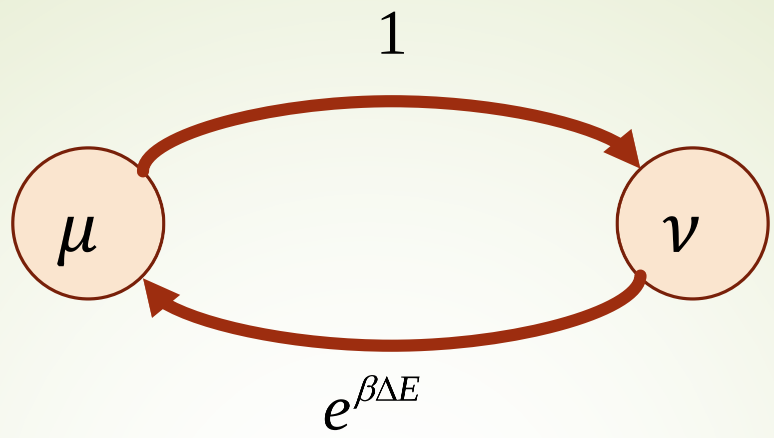
- N個のスピン$s_i (0 \leq i < N)$
- 簡単のために$s_i = \pm 1$
  - Ising スピン

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

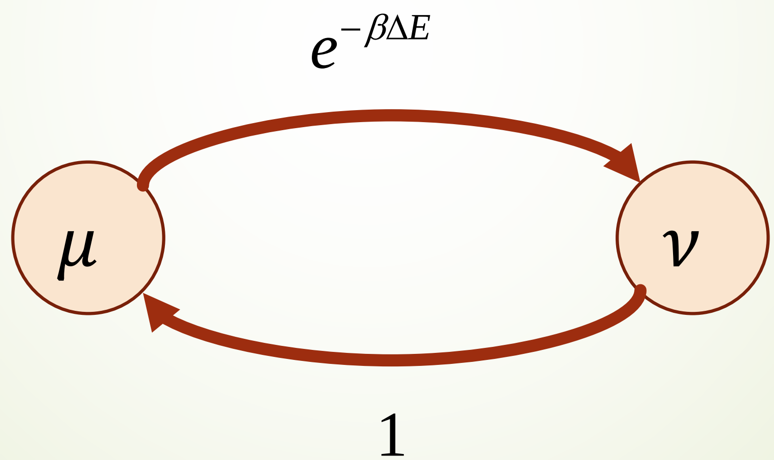
Metropolis法

- 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

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



$\Delta E \leq 0$



$\Delta E > 0$

- 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
- 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