

Ising モデルの Monte Carlo シミュレーション

KEK 計算科学センター・柴田章博、松古栄夫

Ver.1.0.2, 2 June 2008

Abstract

Ising モデルという簡単な系を通して、統計力学の Monte Carlo シミュレーションの基本的な方法を学ぶ。

1 統計物理と Ising モデル

1.1 分配関数と熱力学量

相互作用がハミルトニアン H で記述される系があるとする。自由度を一般に ϕ_i ($i=1,2,\dots$), 系のパラメータを K_a ($a=1,2,\dots$) とする。例えば、強磁性体の場合、 ϕ としては各格子点上のスピン自由度、 K はスピン間の結合定数や、外からかけた磁場 H などを表す。

$$H[\phi; K] = - \sum_{i,j} J_{ij} \phi_i \cdot \phi_j - H \sum_i \phi_i \quad (1)$$

J_{ij} は格子点 i と j のスピン間の結合定数である。

系の熱力学の性質は、統計力学によって記述される。統計力学では、ミクロカノニカル・アンサンブル (エネルギー、粒子数一定の下で等重率の原理に基づく)、カノニカル・アンサンブル (熱浴と接触した系)、グランドカノニカル・アンサンブル (熱浴、粒子浴と接触) のような方法があるが、Eq. (1) のような系の場合、カノニカル・アンサンブルとして扱うのが適している。

カノニカル・アンサンブルでは、系の物理量 A に関する統計力学的平均値 $\langle A \rangle$ は、アンサンブル平均、

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(A e^{-\beta H[\phi]}) \quad (2)$$

によって与えられる。ここで $\beta = 1/k_B T$, k_B は Boltzmann 定数、 T は温度。Tr の演算は、系の自由度のすべての場合についての和をとることを表す。系の自由度の値を 1 セット定めたものを、系の配位とよぶ。Tr 演算は、系のすべての配位について和を取ることを意味している。 $Z[K]$ は分配関数と呼ばれる量で、

$$Z[K] = \text{Tr} e^{-\beta H[\phi; K]} \quad (3)$$

で与えられる。系の熱力学の性質は自由エネルギー F によって記述されるが、これは分配関数によって次のように表される。

$$F[K] = -k_B T \log Z[K] \quad (4)$$

$Z[K]$ を K の関数として求めることが出来れば、自由エネルギーを求めることが出来、従って種々の熱力学量を求めることができる。例えば、

磁化

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{1}{V} \langle \phi \rangle \quad (5)$$

比熱

$$C = \frac{T}{V} \frac{\partial S}{\partial T} = -\frac{T}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{1}{V} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (6)$$

等温磁化率

$$\chi_T = \frac{\partial M}{\partial H} = -T \frac{1}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{1}{k_B T} \frac{1}{V} [\langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2] \quad (7)$$

ここで、 $E = H[S]$ は系のエネルギー、 $\phi = \sum_i \phi_i$ である。

これらの熱力学関数に加えて、相関関数という量が重要である。これは、系の自由度同士の相関が距離に従ってどのように変化するかを表している。

$$G(r; K) = \langle \phi_i \phi_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\phi_i \phi_{i+r} e^{-\beta H[\phi; K]}] \quad (8)$$

相関関数 G が指数関数的に振る舞う場合、即ち $G(r) \propto \exp(-r/\xi)$ と書ける場合、 ξ を相関距離と呼ぶ。相関関数が指数関数的かどうかは、熱力学極限が取れるためには重要である。相関関数が巾乗的に振る舞う ($G(r) \propto r^{-a}$) ような場合、系の次元によっては、熱力学極限で自由エネルギー密度が有限にならない場合がある。

1.2 Ising モデル

Ising モデルは、強磁性体の性質を表す、最もシンプルなモデルである。スピン自由度は各格子点 (サイト) 上にあり、 $S_i = \pm 1$ の値を取る。スピン間の相互作用は、隣り合う格子点 (最近接格子点) 間のみで働き、結合定数 J で表される。また、外場 H が掛かっているものとする。ハミルトニアンは、

$$H[H, J] = - \sum_{\langle i, j \rangle} J S_i \cdot S_j - H \sum_i S_i. \quad (9)$$

ここで $\langle i, j \rangle$ は最近接格子点のペアを表している。

次の章では、1次元の場合に実際に Ising モデルの分配関数を求める。Ising モデルは、磁性体をモデル化したものとしては、最も簡単な形をしている。しかしながら、それでも解析的に解くことができるのは、1次元の場合と、2次元で外場が無い場合だけであり、2次元で外場のある場合、3次元以上の場合などは解くことができない。強磁性体の性質を定性的に明らかにする手法として、3章で扱う平均場理論がある。しかしながら、平均場理論では、後に述べる臨界指数などを正しく求めることができない。これは、揺らぎの効果を正しく取り入れていないことによる。より一般的に相転移現象を調べる手法として、Monte Carlo 法による数値シミュレーションの方法を紹介するのが、このノートの目的である。

1.3 相転移

相転移現象は、液体の固化、気化や磁性体の常磁性から強磁性への転移など、系の温度や外場などを変化させた時に状態が大きく変化する現象である。より正確には、相転移現象は、系を特徴づける自由エネルギーなどの熱力学関数が、非解析的となる点として定義される。

Ising モデルについて、高温の場合と低温の場合に、それぞれどのような状態 (相) が実現されそうか、考えてみる。外場 H はゼロとする。まず低温 ($T \simeq 0$) では、分配関数 (3) は、エネルギー最低の配位が支配的な寄与をする。Hamiltonian (1) が最小になるのは、全てのスピンの上向き、あるいは下向きに揃った状態である。このような状態では、スピンの磁場がお互いに協力しあって、自発磁場を生じる。このような現象を協力現象と呼ぶ。一方、高温 ($T \gg 0$) では、どのような配位についても Boltzmann 因子が 1 に近くなり、分配関数に同じように寄与する。このため、高温では乱雑なスピンの状態が実現されていると考えられる。熱力学の言葉で言うと、エントロピーが支配的であることを意味する。

ある温度において、なんらかの急激な系の変化によって、これらの一方の状態から他方の状態に移るような現象が起こることが予想される。実際には、必ずしも熱力学関数が非解析的となるような変化 (相転移の定義) が起こる場合だけではない。例えば液体から気体へは、相転移ではなく、緩やかな変化によって移るような場合が、ある温度、圧力の領域では存在する。系がどのように転移するかは、その系を記述する Hamiltonian の性質によって決まる。

分配関数は Boltzmann 因子の和であり、Hamiltonian は正則なので、Tr 操作の各項は解析的な関数である。従って、分配関数も解析的であり、非解析的なふるまいである相転移現象は起こり得ないように思われる。これは有限系では正しいが、無限系では必ずしも成り立たず、体積無限大の極限 (熱力学的極限) を取った場合において、相転移現象が表れる。ただし、ゼロ温度の場合には、レベル交差という現象を通して相転移が起こり得、この場合は一次相転移となる。

相転移の種類について、よく用いられるのが、Ehrenfest による分類である。これは、自由エネルギーの n 次微分が不連続の場合に、この相転移を n 次の相転移と呼ぶものである。一次相転移では、相転移点において自由エネルギーは連続だが、その一次微分、即ち傾きが不連続に変化する。潜熱を伴う相転移はこの一次相転移である。

一般に臨界現象、あるいは二次相転移と呼ばれるのは、自由エネルギーの一次微分が連続な場合の相転移であるが、Ehrenfest による分類は正確には正しくない。これは、二次微分に対応する比熱や磁化率などの量 (これらは揺らぎに関係する) が、実際には相転移点で (不連続ではなく) 発散する場合があるからである。このため、連続的相転移と呼ばれることもある。

1.4 臨界指数

臨界現象、あるいは連続的相転移の場合、相転移点近傍での物理量の振舞いを表すのに、臨界指数と呼ばれる量が用いられる。これらは例えば磁性体の場合の呼び方では、(等積) 比熱 C_V 、磁化 M 、磁化率 χ_T などに対して、次のように定義される。

$$C_V \propto |T - T_c|^{-\alpha} \quad (10)$$

$$M \propto |T - T_c|^\beta \quad (11)$$

$$\chi_T \propto |T - T_c|^{-\gamma} \quad (12)$$

$$H \propto M^\delta \quad (13)$$

最後の関係式は、相転移温度 T_c 近傍で外場 H を微小量入れた時の磁化の振舞を表す。また、相関関数に関係する量として次の二つが定義される。

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu} \quad (14)$$

$$G(r) \propto r^{-(d-2+\eta)} \quad (15)$$

実験的に、臨界指数が同じ値になるような系が存在する。このことを理論的に説明するのが、K. G. Wilson による、繰り込み群の理論である。これによると、系はユニバーサリティ・クラスと呼ばれるクラスに分類され、それぞれのクラスに属する系は同じ臨界指数を持つ。ユニバーサリティ・クラスを特徴づけているのは、Hamiltonian の対称性、次元、相互作用が短距離かどうか、という、わずか3つの性質である。

2 1次元 Ising モデル

2.1 転送行列

1次元 Ising モデルは、転送行列の方法を使って解くことができる。($H = 0$ の場合には簡単に解く方法もあるが、重要な手法なので転送行列を用いる。) N -自由度系を考え、周期的境界条件: $S_{N+1} = S_1$ とする。

$$Z_N(h, K) = \text{Tr} \exp \left[h \sum_i S_i + K \sum_i S_i S_{i+1} \right] \quad (16)$$

ここで、 $K = J/k_B T$ 、 $h = H/k_B T$ 。因子の積で表すと、

$$Z_N(h, K) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} [e^{\frac{h}{2}(S_1+S_2)+KS_1S_2}] [e^{\frac{h}{2}(S_2+S_3)+KS_2S_3}] \cdots [e^{\frac{h}{2}(S_N+S_1)+KS_NS_1}] \quad (17)$$

ここで、それぞれの項を、行列の要素とみなす。例えば、

$$T_{S_1 S_2} = [e^{\frac{h}{2}(S_1+S_2)+KS_1S_2}] \quad (18)$$

即ち、 S_1, S_2 が次のような行列 \mathcal{T} のラベルであると解釈する。

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} T_{1,1} & T_{1,-1} \\ T_{-1,1} & T_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{h+K} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{-h+K} \end{pmatrix} \quad (19)$$

このとき、

$$\mathcal{T} = S \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} S^{-1} \quad (20)$$

と相似変換を行うことが出来る。ここで、 λ_1, λ_2 は、 \mathcal{T} のふたつの固有値とし、 $\lambda_1 \geq \lambda_2$ とする。これらは容易に次のように求まる。

$$\lambda_{1,2} = e^K \left[\cosh(h) \pm \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4K}} \right] \quad (21)$$

従って分配関数は、

$$Z_N(h, K) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} T_{S_1 S_2} T_{S_2 S_3} \cdots T_{S_N S_1} \quad (22)$$

$$= \text{Tr}[\mathcal{T}^N] = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (23)$$

これより、自由エネルギー密度は、 $N \rightarrow \infty$ の極限で、

$$\begin{aligned} f \equiv \frac{F}{N} &= -\frac{k_B T}{N} \log Z_N[h, K] \\ &= -J - \frac{k_B T}{N} \log \{ \lambda_1^N (1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N) \} \end{aligned} \quad (24)$$

$$\rightarrow -J - k_B T \log \left[\cosh(h) + \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4K}} \right] \quad (25)$$

となる。

$T > 0$ では、実の h 、 K に対して f は解析的、即ち相転移は存在しない。非解析的になるのは、2 乗根の中がゼロとなり、 $\lambda_1 = \lambda_2$ となる場合か、 $\lambda_1 = 0$ となる場合であるが、これは、次の Perron の定理によって斥けられる。

Perron-Frobenius の定理:

$N \times N$ 行列 ($N < \infty$) A で $A_{ij} > 0$ (for all i, j) について、その最大の固有値は次の性質を持つ: (a) 実、正定値、(b) 非縮退、(c) A_{ij} の解析的関数。

これによって、 $T > 0$ では相転移が起こらないことが結論づけられる。これは、1 次元の場合の特徴である。1 次元では転送行列は 2×2 行列であったが、2 次元以上の場合には、転送行列は熱力学極限では $\infty \times \infty$ の行列となり、Perron-Frobenius の定理は適用できない。

1 次元で $T \rightarrow 0$ 、従って $K \rightarrow \infty$ の場合を考える。この時、 $\lambda_1 = e^K [\cosh(h) + |\sinh(h)|] = e^K e^{|h|}$ であるので、

$$F = -N(J + |H|). \quad (26)$$

$T = 0$ では、 h に対し、 $h = 0$ で F は非解析的。磁化は、

$$M = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \begin{cases} 1 & \text{for } H > 0 \\ -1 & \text{for } H < 0 \end{cases} \quad (27)$$

まず、 $H = 0$ の場合。このとき、自由エネルギーは、

$$F = -k_B T N [K + \log(1 + e^{-2K})] \quad (28)$$

内部エネルギー

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = -N J \tanh(\beta J) \quad (29)$$

比熱

$$C = -\frac{dE}{dT} = -\frac{N J^2}{k_B T^2} \text{sech}^2(J/k_B T) \quad (30)$$

磁化

$$M = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\sinh h}{\sinh^2 h + w^2} \quad (31)$$

とそれぞれなる。ここで、 $w = e^{-4K}$ は、すべて上 (あるいは下) 向きのスピンの配位に対して、ひとつのスピンだけがフリップした状態の相対確率に対応する。等温磁化率 χ_T は次の式で定義される。

$$\chi_T \equiv \frac{\partial M}{\partial H} \quad (32)$$

h が小さい時、 $\sinh h \simeq h$ より、

$$M \simeq e^{2K} \frac{H}{k_B T} \quad (33)$$

この近似の時、磁化率 χ_T は、

$$\chi_T = \frac{e^{2J/k_B T}}{k_B T} \quad (34)$$

高温と低温での極限では、

$$\chi_T \simeq \begin{cases} 1/k_B T & \text{as } T \rightarrow \infty: \quad \text{Curie's law} \\ \frac{e^{2J/k_B T}}{k_B T} & \text{as } T \rightarrow 0 \end{cases} \quad (35)$$

2.2 2点相関関数

2点相関関数は次のように定義される。

$$G(i, j) \equiv \langle (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \rangle \quad (36)$$

転送行列の方法で求めるには、まず、 $\langle S_i \rangle$ を次のように表す。

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} [T_{S_1 S_2} \cdots T_{S_{i-1} S_i} S_i T_{S_i S_{i+1}} \cdots] \quad (37)$$

ここで、

$$\sum_{S_i} T_{S_{i-1} S_i} S_i T_{S_i S_{i+1}} = \left[T \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} T \right]_{S_{i-1} S_{i+1}} = [T \sigma_z T]_{S_{i-1} S_{i+1}} \quad (38)$$

ここで σ_z は Pauli 行列の z 成分。 $T' = S^{-1} T S$ を対角行列とする相似変換を T に対して行い、この変換行列 S に対して

$$S^{-1} \sigma_z S = \begin{pmatrix} e & g \\ f & h \end{pmatrix} \quad (39)$$

とする。 e, f, g, h は S が T の固有ベクトルから構成されることからあらわに計算出来る。このとき、

$$\langle S_i \rangle = \frac{\text{Tr}[S^{-1} \sigma_z S (T^N)]}{\text{Tr}[(T^N)]} \quad (40)$$

$$= \frac{e \lambda_1^N + h \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \quad (41)$$

$N \rightarrow \infty$ の熱力学的極限では、分子の第 1 項のみが寄与する。

同様に、

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [(S^{-1} \sigma_z S) (T')^j (S^{-1} \sigma_z S) (T')^{N-j}] \quad (42)$$

$$= \frac{1}{Z} \text{Tr}(\lambda_1)^N \left[e^2 + fg \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^j + h^2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \quad (43)$$

$N \rightarrow \infty$ の熱力学的極限では、第 1、2 項のみが寄与し、

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle - \langle S_i \rangle^2 = fg \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^j = fg \exp \left[-j \log \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \right] \quad (44)$$

これより、相関距離は

$$\xi = \frac{1}{\log(\lambda_1/\lambda_2)} \quad (45)$$

$h = 0$ では $\xi = 1/\log \tanh K$ となる。

$\lambda_1 \neq \lambda_2$ では、 ξ は発散しない。一般に、転送行列の最大固有値が縮退しない限り、 ξ は発散しない。 $h \neq 0$ では、 $\lambda_1 > \lambda_2$ なので、この場合相転移は無い。 $h = 0$ では、 $K = 0$ 即ち $T = 0$ で $\lambda_1 = \lambda_2$ なので、相転移が起こる。

演習問題

Eq. (21) の結果を確認すること。また、比熱、磁化を図示してみる。

3 2次元 Ising モデル

1次元 Ising モデルは、転送行列の方法を使って、一般の温度、外場に対して分配関数を解析的に求めることが出来た。2次元では、状況は異なる。解析的に求めることが出来るのは、 $H = 0$ の場合だけであり、それ以外の場合にはなんらかの近似が必要となる。ここでは平均場近似を用いて、2次元 Ising モデルの相構造の特徴を調べる。

3.1 Weiss の平均場理論

平均場理論では、ある格子点上のスピンは、外から与えられた場 (H) に加えて、系のスピンのつくり出す磁場からの作用を受けるものとする。即ち、格子点 i のスピン S_i は、磁場 $H + \frac{1}{V} \sum_i \langle S_i \rangle$ を受けるものとし、この時の $\langle S \rangle$ の値を self-consistent に求める。

サイト i での局所的磁場を H_i と書くと、

$$H[S, H] = - \sum_i S_i H_i \quad (46)$$

$$H_i = \sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle + \sum_j J_{ij} (S_j - \langle S_j \rangle) \quad (47)$$

ここで、平均場理論では、第2式の右辺第3項、即ち揺らぎの効果をも無視する。d次元の正方格子の場合、

$$H_i = H + 2dJM \quad (48)$$

となる。ここで M は

$$M = \langle S_i \rangle. \quad (49)$$

であり、 M に対する self-consistent な関係式は

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial H} = \tanh \left(\frac{H + 2dJM}{k_B T} \right) \quad (50)$$

となる。外場 H が無い場合でも、自発磁化の効果が第2項に存在する。 $H = 0$ とすると、

$$M = \tanh \left(\frac{2dJM}{k_B T} \right) \quad (51)$$

であるが、これを満たす M は、 $y = M$ と $y = \tanh(2dJM/k_B T)$ との交点として求めることができる (Figure 1 参照)。

$$T_c = \frac{2dJ}{k_B} \quad (52)$$

よりも高い温度 T では、交点は $M = 0$ にしか存在せず、自発磁化は生じない。 $T < T_c$ では $M = 0$ 以外にも、Eq. (51) を満たす M が存在する。

3.2 対称性の自発的破れ

$T < T_c$ では、 $M = 0$ 以外にも Eq. (50) を満たす解が存在することをみた。実際には、どの解が実現するのか。十分低温の場合には、系のエネルギーが最低になるのはすべてのスピンの揃った場合であるので、 $M = 0$ の解は安定とは思われない。一方、分配関数の定義 (3) を思い出すと、系の最低のエネルギーを持つ状態、 $S = 1, -1$ の状態が等しい重みで足し合わされるべきであると考えられる。このことは、有限系の場合には正しいが、熱力学極限では注意が必要である。

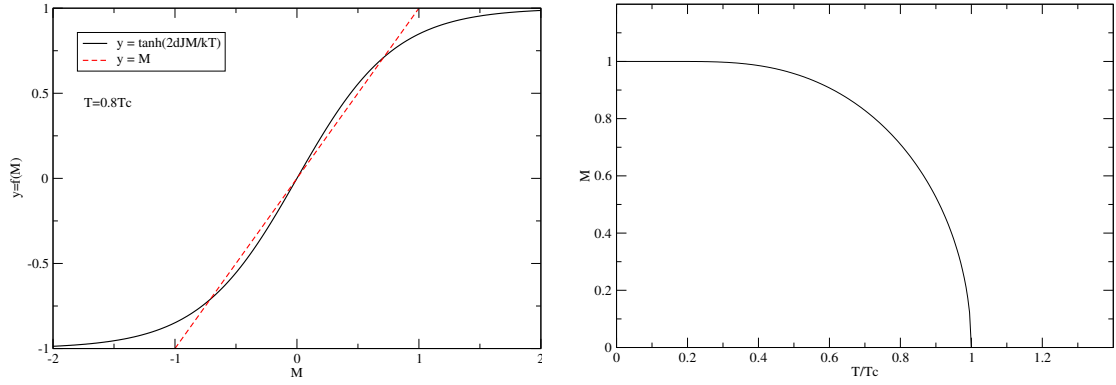


Figure 1: 2次元 Ising モデルの平均場近似による解析。左図は、 $T = 0.8T_c$ の場合について、Eq. (51) を満たす磁化 M を求める様子を示した。右図は T/T_c に対する磁化 M のプロット。

全てのスピンの状態を上向きを A 、下向きの状態を B とする。 $H = 0$ では、系の Hamiltonian $H[\{S_i\}; H]$ はスピン自由度の変換 $S_i \rightarrow -S_i$ (for all i) について対称である。従ってもちろん、 A と B の Boltzmann ウェイトは等しい。

この2つの状態の Boltzmann ウェイトの比を考える。今微小な外場 $H > 0$ を入れると、

$$\frac{P_A}{P_B} = \frac{e^{-\beta(-HNM)}}{e^{-\beta(HNM)}} = e^{-2\beta(HNM)} \quad (53)$$

N は系のスピン自由度数。ここで熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ を取ると、

$$\frac{P_B}{P_A} \rightarrow 0 \quad (54)$$

逆に $H < 0$ とすれば P_B/P_A がゼロになる。即ち、微小な外場を導入し、熱力学極限を取った後で $H \rightarrow 0$ とすると、基底状態の2つの状態の現れる確率は片方がゼロとなる。一方で有限系の場合には、 $H = 0$ では状態 A と B は同じウェイトで分配関数に寄与するため、磁化 M はゼロとなる。従って、外場 $H \rightarrow 0$ の極限と、熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ は交換しない。

系に自発磁化があった場合、この磁化は外場同様、系のスピンの向きを固定する効果がある。熱力学極限では従って、一度どちらかの状態となっている系に対して、 $S_i \rightarrow -S_i$ の系は出現確率はゼロとなる。このように、Hamiltonian のレベルでは対称な状態が、統計力学的に非対称に現れるような現象を、対称性の自発的破れ (spontaneous symmetry breaking) とよぶ。

状態 A が実現されているとき、状態 B が現れないことは、次のように理解できる。系の全てのスピンの上を向いた状態から、下を向いた状態へ移行するためには、ある領域で下を向いたスピンの生じ、その領域が広がってゆく必要がある。系のエネルギーを増加させているのは、この領域の表面の、スピンの反並行になっている部分である。2次元系の場合には、下向きスピン領域の表面 (周長) が広がってゆく必要があるが、無限系の場合にはこのエネルギーが無限大とならなければ全てのスピンの下向きへの遷移が起こらないことになる。

1次元系では状況は異なる。上向きスピン領域と下向きスピン領域の表面は常にひとつの反並行スピン・ペアとなる。周期的境界条件の場合には、これが2箇所存在する。従って、系のエネルギーをそれ以上増加させることなく、スピンの逆向きの領域が広がってゆくことができる。この効果のため、有限の温度では、対称性の自発的破れは起こらない。

Exponent	Mean-field	Experiment	Ising (d=2)	Ising (d=3)
α	0(discontinuity)	0.110–0.116	0 (log)	0.110(5)
β	1/2	0.316–0.327	1/8	0.325± 0.0015
γ	1	1.23–1.25	7/4	1.2405± 0.0015
δ	3	4.6–4.9	15	4.82(4)
ν	1/2	0.625±0.010	1	0.630(2)
η	0	0.016–0.06	1/4	0.032±0.003

Table 1: Ising ユニバーサリティ・クラスの臨界指数。

3.3 平均場理論の限界

平均場近似による解析は、Ising モデルでスピン間の協力現象によって自発磁化が生じる機構を自然な形で説明できた。しかしながら、平均場近似では、スピンに作用する相互作用を、文字通り「平均場」として扱うために、スピン間の相関による揺らぎの効果が取り入れられていない。このため、このような効果が重要となる、相転移近傍での物理量の振舞いを正しく記述できない。このことは、臨界指数を見ることによって明確になる。

Table 1 は、Ising モデルと同じユニバーサリティ・クラスに属する系の臨界指数である [1]。平均場近似の結果は、これまでに説明した解析法から、熱力学関数を相転移点の近くで $(T - T_c)/T_c$ について展開することによって得られる。相関関数に関する臨界指数については、これらの平均場理論の本質的な効果を取り出し、秩序変数を自由度とする Hamiltonian で系を記述する、Landau 理論の解析によって得られる。これらの平均場理論による臨界指数は、次元に依らない。

Table 1 で ‘Experiment’ の列は、Ising モデルと同じユニバーサリティ・クラスに属する 3 次元の流体系の実験から得られた数字で、実験誤差が示されている。 ν と δ は他の臨界指数との関係から得られた数字である。最後の 2 つの列は、Ising ユニバーサリティ・クラスの臨界指数の理論的な数値である。2 次元での数値は Onsager (1944) による解析解からのものであり [2]、3 次元での数値は繰り込み群の方法を使った解析の結果である [5]。

これらを見ると、平均場理論による臨界指数は、実験やより正確な理論的計算の結果を定性的には再現しているが、定量的なレベルでは明らかな違いがある。これは既に述べたように、臨界現象で重要な役割を果たす揺らぎの効果が含まれていないためである。これを正しく取り入れた計算法は、K. G. Wilson によって開発された繰り込み群の理論によって与えられた。

演習問題

平均場近似のもとで、Eq. (50) を解いて与えられた外場 H と温度 T に対して磁化を求めるプログラムを作成すること。

4 Monte Carlo シミュレーション

Monte Carlo 法とは、一般には乱数を用いた数値計算法を意味する。しかしながら、これから扱う統計力学系のシミュレーションでは、いきなり乱数を振って欲しい確率分布に従うような系の状態を作ることとは出来ない。分かっているのは、系の状態が与えられた際の Hamiltonian だけである。従って、最終的に Boltzmann ウェイト (重み) に従うような系のアンサンブル

を、任意の初期状態からスタートして得るようなアルゴリズムが必要となる。この章では、そのようなアルゴリズムを構成するための原理を解説し、実際に Ising モデルの場合に適用してプログラムを作成する。

4.1 重点サンプリング

一般に系の自由度 ϕ に対し Hamiltonian H で記述される系があるとする。カノニカル・アンサンブルに対し、ある物理量 A の期待値は、次のように表される。

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\text{states}} A[\phi] e^{-\beta H[\phi]} \quad (55)$$

ここで、 ϕ は系の自由度、 H はその Hamiltonian、 A はある物理量とする。和は、すべての状態について取る。Ising モデルの場合には、 ϕ は 各格子点のスピン $S_i = \pm 1$ 、 A としては磁化や比熱、相関関数などとなる。 N 個のスピンからなる Ising 系では、状態数は 2^N 個となり、 N が小さい場合を除いて、すべての状態について実際に和を評価することは現実的ではない。

一方、上の式で、Boltzmann 因子 $e^{-\beta H[\phi]}$ は、確率測度として解釈することができる。この場合、系の配位 $\{\phi\}_i$ をこの Boltzmann 因子に等しい出現確率で生成することができれば、その各配位に対して物理量 $A[\phi]$ を計算して平均することによって、 A の統計力学的平均値 $\langle A \rangle$ を得ることが出来る。即ち、

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_i A[\phi_i] \quad (56)$$

ここで ϕ_i は、 $e^{-\beta H[\phi]}$ の確率で生成される、 i 番目の場の配位である。この方法では、 $\langle A \rangle$ への寄与が大きい配位、つまり Boltzmann ウェイトが大きい配位を集中的に生成することによって、効果的に計算を行なうことができる。このような方法を、重点サンプリング (important sampling) と呼んでいる。

4.2 Markov 過程

重点サンプリングを実行するには、Boltzmann ウェイトに等しい確率分布で場の配位を作る必要があるが、これをいきなり与えることは一般に出来ない。従って、まず系に対してある初期状態を用意し、そこから系に対してある操作を加えながら、出現確率が Boltzmann ウェイトに等しいような状態のシリーズを作ってゆくアルゴリズムが必要となる。

このような過程のうち、Markov 過程と呼ばれる過程が重要である。これは、次に生成される状態が、現在の状態のみに依存するような過程である。この場合、系の状態を何ステップも前に遡って保存する必要はない。Markov 過程によって、初期状態から十分離れ、生成される状態が Boltzmann ウェイトに従うように、即ち平衡状態に到達すれば、important sampling によって、統計力学的諸量を計算できる。

このような過程を構成するには、下で見てゆくように、系の状態を遷移させてゆくアルゴリズムが「エルゴード性」および「詳細釣り合い条件」とよばれる性質を満たす必要がある。

4.3 マスター方程式とエルゴード性

今、系が有限個の状態 N からなる場合を考える。系の発展を表すために、時間 t を導入する。物理的な時間と一致する必要はなく、シミュレーションの過程を記述するために手で入

れたものと考えてよい。系が時刻 t において状態 i にある確率を、 $P_i(t)$ とすると、確率の保存より、

$$\sum_i P_i(t) = 1 \quad (57)$$

を満たす。Markov 過程に対して、時刻 $t + \Delta t$ (1 ステップ後) での状態 i が出現する確率は、次のマスター方程式と呼ばれる関係式で記述される。

$$P_i(t + \Delta t) = P_i(t) - \sum_{j \neq i} P_i(t) w_{i \rightarrow j} \Delta t + \sum_{j \neq i} P_j(t) w_{j \rightarrow i} \Delta t \quad (58)$$

$w_{i \rightarrow j}$ は単位時間あたりに状態 i から状態 j に遷移する確率を表す。Eq. (58) の右辺第 2 項は状態 i から他の $(N - 1)$ 個の状態へ遷移する過程、右辺第 3 項は他の $(N - 1)$ 個の状態から状態 i へ遷移してくる過程を表す。

行列形式では、Eq. (58) は次のように表される。

$$\vec{P}(t + \Delta t) = L \vec{P}(t) \quad (59)$$

ここで、 $\vec{P}(t)$ は $P_i(t)$ を成分に持つ N 次元ベクトル、 L は $N \times N$ 行列で、次のような成分を持つ。

$$L_{ij} = w_{j \rightarrow i} \Delta t \quad (i \neq j) \quad (60)$$

$$L_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} w_{i \rightarrow j} \Delta t \quad (61)$$

確率の保存より、

$$\sum_i L_{ij} = 1 \quad (62)$$

である。遷移確率の意味から、

$$L_{ij} \geq 0 \quad (63)$$

でなければならない。この二つの条件を満たす行列 L は確率行列と呼ばれている。 s ステップ進んだ時、系の確率分布は、

$$\vec{P}(t + s\Delta t) = L^s \vec{P}(t) \quad (64)$$

で与えられる。

$s \rightarrow \infty$ の極限を考える。このとき、確率分布がある一定の分布、 $P^{(eq)}$ に収束するような Markov 過程を、定常 Markov 過程と呼ぶ。

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L^s \vec{P}(t) = \vec{P}^{(eq)} \quad (65)$$

この時、

$$L \vec{P}^{(eq)} = \vec{P}^{(eq)} \quad (66)$$

が成り立つ。

L の固有値に対して、次のようなことが成り立つ [3]。 L の固有値 λ_i ($i = 1, \dots, N$) について、 $|\lambda_i| \leq 1$ が成り立つ。また、 $\lambda_i = 1$ が常に確率行列 L の固有値であることも示すことができる。このことと、Eq. (65) から、 $\vec{P}^{(eq)}$ が、 L の固有値 1 の (右) 固有ベクトルであることがわかる。もしもこの固有値 1 に対応する状態が非縮退ならば、定常分布 $\vec{P}^{(eq)}$ がユニークに存在することになり、定常 Markov 過程が実現される。

ある値よりも大きなステップ数 s について、 L^s のすべての成分が正の値を持つとき、既出の Perron-Frobenius の定理によって、 L の最大固有値は非縮退であり、その他の固有値は $|\lambda| < 1$ となることが証明できる。この条件は、有限のステップ数で、任意の状態から任意の状態への遷移が可能であることを意味する。この性質を「エルゴード性」と呼ぶ。

4.4 詳細釣り合い条件

定常状態では、Eq. (66) が成り立つ。これを成分表示で書くと、

$$L_{ij}P_j^{(eq)} = P_i^{(eq)} \quad (67)$$

となるが、ここに Eqs. (60) および (61) を代入すると、詳細釣り合い (detailed balance) 条件

$$P_{eq}(i)w(i \rightarrow j) = P_{eq}(j)w(j \rightarrow i) \quad (68)$$

を得る。ここで $P_{eq}(i)$ は平衡状態における状態 i の出現確率であり、

$$P_{eq}(i) = \exp[-\beta H(i)] \quad (69)$$

で与えられる。即ち、状態 i から j への遷移確率 $w(i \rightarrow j)$ とその逆に対して、関係式 (68) が成り立つように遷移アルゴリズムを構成すれば、定常 Markov 過程として、Boltzmann ウェイトに従うアンサンブルが得られることになる。

次に、詳細釣り合い条件を満たすような遷移アルゴリズムを構成する方法を二つ、紹介する。

Metropolis 法

Metropolis 法は、詳細釣り合い条件を満たすようなアルゴリズムを構成する一般的な方法である。次に紹介する熱浴法に比べて効率は劣るものの、熱浴法が構成できないような系に対しても適用できるため重要である。

Matropolis 法では、まずアップデートすべき配位 $\{\phi\}$ に対し、候補となるアップデート後の配位 $\{\phi'\}$ を考える。 $\{\phi\}$ と $\{\phi'\}$ それぞれに対して Hamiltonian を計算し、この候補配位 $\{\phi'\}$ を、次の確率

$$P = \min \left\{ 1, e^{-\beta(H[\phi'] - H[\phi])} \right\} \quad (70)$$

で accept、即ちアップデート後の配位とする。もし候補配位 $\{\phi'\}$ が reject された場合には、元の $\{\phi\}$ をアップデート後の配位とする。

熱浴法

Hamiltonian が局所的な項の和として表される場合など、系がある条件を満たすとき、熱浴法 (heat bath method) が構成できる場合がある。熱浴法では、今アップデートしたい自由度を ϕ_i とする時、これと相互作用する自由度を含む局所的な Hamiltonian $H(\phi_i; \phi_{j \neq i})$ を考える。この時、 ϕ_i 以外の自由度を熱浴のように扱い、 ϕ_i を確率 $e^{-\beta H[\phi_i; \phi_{j \neq i}]}$ で生成することが可能であれば、これを熱浴法とよぶ。この局所的なアップデート繰り返す (sweep する) ことによって、全系に対するアップデートを行う。

Ising model の場合、

$$H(S_i; S_{j \neq i}) = S_i \cdot (-H + \sum_{j \in \langle i, j \rangle} S_j) + (\text{indep. of } i) \quad (71)$$

となる。従って、格子点 i の周りのスピン自由度を調べて $R_i = (-H + \sum_{j \in \langle i, j \rangle} S_j)$ を計算し、 $r \in [0, 1)$ 区間の一様乱数 r を振って、 S_i を

$$S_i = \begin{cases} 1 & \text{for } r < e^{-\beta R_i} / (e^{-\beta R_i} + e^{\beta R_i}) \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (72)$$

4.5 シミュレーションの手順

ここで、Ising モデルの場合に、シミュレーションの手順をまとめておく。

初期状態の生成

例えば、cold start の場合、すべての S を $+1$ (あるいは -1) にする。hot start の場合には、乱数によってまったくランダムに $S = \pm 1$ を与える。

Thermalization

系が十分な熱平衡状態に達するまで、sweep を繰り返す。

Sweep を繰り返しながら物理量を測定

測定と測定との間には、十分な sweep を行なうことが望ましい。これが十分でない場合には、測定した値の間に相関が残るため、統計処理が複雑になる。

統計処理

各配位の上で得られた物理量の値を統計処理し、平均値、誤差などを求める。また、物理量によっては、フィットなどの操作が必要な場合 (相関距離など) もある。

この演習では、このようなシミュレーションの例として、2次元の Ising モデルのプログラムを用意している。最も重要な部分は、スピン変数を熱浴法に従って局所的にアップデートしてゆくルーチン (あるいは関数) である。そのアルゴリズムが、実際に Eq. (72) を実現していることを確認されたい。

4.6 物理量の測り方

ここでは、種々の物理量を測る方法についてまとめる。

磁化

Eq. (5) より、

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{1}{V} \sum_i \langle S_i \rangle \quad (73)$$

となる。ここで、 $\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均を表す。

磁化率

Eq. (7) より、

$$\chi_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{1}{k_B T} \frac{1}{V} [\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2] \quad (74)$$

ここで、 $S = \sum_i S_i$ である。

比熱

Eq. (6) より、

$$C = -\frac{T}{V} \frac{\partial^2 S}{\partial T^2} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{1}{V} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (75)$$

ここで $E = H[S]$ は系のエネルギー (H と書くと外場とまぎらわしいので、ここでは E と書いた) である。

相関関数

相関関数の定義 Eq. (36) をそのまま計算すればよいが、少し変形した次の形が便利である。

$$G(j) = \frac{1}{V} \sum_i [\langle S_i S_{i+j} \rangle - \langle S_i \rangle^2] \quad (76)$$

4.7 統計処理

4.7.1 平均値と誤差

この節の記述は、文献 [4] に従っている。独立な測定データ A_k ($k = 1, \dots, M$) に対する平均値とその誤差は、次の式で与えられる。

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_k A_k \quad (77)$$

$$\delta \langle A \rangle = \sqrt{\frac{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}{M - 1}} \quad (78)$$

$$= \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{M - 1}} \quad (79)$$

いくつかの物理量 $A^{(a)}$ の関数として表される量 $f(\{A^{(a)}\})$ の誤差を見積もるためには、次の誤差の伝播則を用いる。

$$\delta \langle f(\{A^{(a)}\}) \rangle = \sum_a \left| \left\langle \frac{\partial f}{\partial A^{(a)}} \right\rangle \delta \langle A^{(a)} \rangle \right| \quad (80)$$

しかしながら、複雑な関数 f に対して誤差の伝播則を適用すると、誤差を過大に見積もる場合が多い。また、比熱や磁化率のような、分散が物理量となる場合、Eq. (79) によって誤差を見積もるのは簡単ではない。そのような場合には、次のジャックナイフ法を用いるのが便利である。

4.7.2 ジャックナイフ法

初めに、最も簡単なビン・サイズ 1 のジャックナイフ法を説明する。まず、 k 番目のデータを除いた統計平均を定義する。

$$\langle A \rangle_k \equiv \frac{1}{M - 1} \sum_{l \neq k} A_l \quad (81)$$

A の関数である物理量を $f(A)$ とすると、 f の平均値とその誤差は、次のように計算される。

$$\langle f(A) \rangle = \frac{1}{M} \sum_k f(\langle A \rangle_k) \quad (82)$$

$$\delta \langle f(A) \rangle = \sqrt{(M - 1) \{ \langle f(A)^2 \rangle - \langle f(A) \rangle^2 \}} \quad (83)$$

これらの定義を、 A に適用すれば、Eqs. (78), (79) になることが容易に確認できる。

同様に、ビン・サイズ m のジャックナイフ法は次のような手順となる。まず全データを、 $M_m = M/m$ 個のビンに分割する。それぞれのビンには、 m 個のデータがあることになる。各ビンにラベル b ($b = 1, \dots, M_m$) を割り当て、このビンの要素の集合を B_b で表す。ビン b のデータを取り除いた平均値を、

$$\langle A \rangle_b \equiv \frac{1}{M - m} \sum_{l \notin B_b} A_l \quad (84)$$

これを用いて、 $f(A)$ の平均値と誤差は、次のようになる。

$$\langle f(A) \rangle = \frac{1}{M_m} \sum_{b=1}^{M_m} f(\langle A \rangle_b) \quad (85)$$

$$\delta \langle f(A) \rangle = \sqrt{(M_m - 1) \{ \langle f(A)^2 \rangle - \langle f(A) \rangle^2 \}} \quad (86)$$

ジャックナイフ法の特長は次の通りである。

- 任意の物理量 $f(A)$ に対して誤差が計算できる。
- 磁化率や比熱のような、分散に関係した物理量の誤差を求めることができる。
- 物理量の間の相関を取り入れた誤差評価になっている。例えば、相関距離を $\log[G(j)/G(j+1)]$ によってラフに評価する場合を考える。この時、 $G(j)$ と $G(j+1)$ は強く相関しているため、誤差の伝播則では正しく評価できない。ジャックナイフ法によると、この相関まで含めた誤差の評価になっている。
- ビン・サイズを大きくして行くことによって、測定を行った配位の間の相関 (自己相関、autocorrelation) を評価できる。これは、相関が無い場合には、ジャックナイフ法で評価した誤差はビン・サイズに寄らないため、誤差のビン・サイズに対する依存性をみることによって、相関がどれくらいのステップ数残っているかを見積もることが出来るということである。

一方で、ジャックナイフ法では、通常の誤差評価 Eqs. (78), (79) と同じく、誤差は平均値に対してプラスマイナスに対称な評価である。平均値に対し誤差が十分小さくない場合、プラス方向の誤差とマイナス方向の誤差は一般に異なるが、このような場合はジャックナイフ法では正しく評価できない。そのような場合には、ブートストラップ法などの、より複雑な評価を行う必要がある。

References

- [1] N. Goldenfeld, “*LECTURES ON PHASE TRANSITION AND THE RENORMALIZATION GROUP*” (Addison Wesley, 1992)
- [2] C. Itzykson and J.M. Drouffe, Statistical field theory: 1 and 2 (Cambridge, 1989)
- [3] 夏目雄平、小川建吾、鈴木敏彦、「計算物理 III」(朝倉書店, 2002)
- [4] 青木慎也、「格子上の場の理論」(シュプリンガーフェアラーク東京, 2005)
- [5] J. Jinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena, 4th ed. (Oxford Univ. Press, 1989/2002)