電気･通信･電子･情報工学実験D

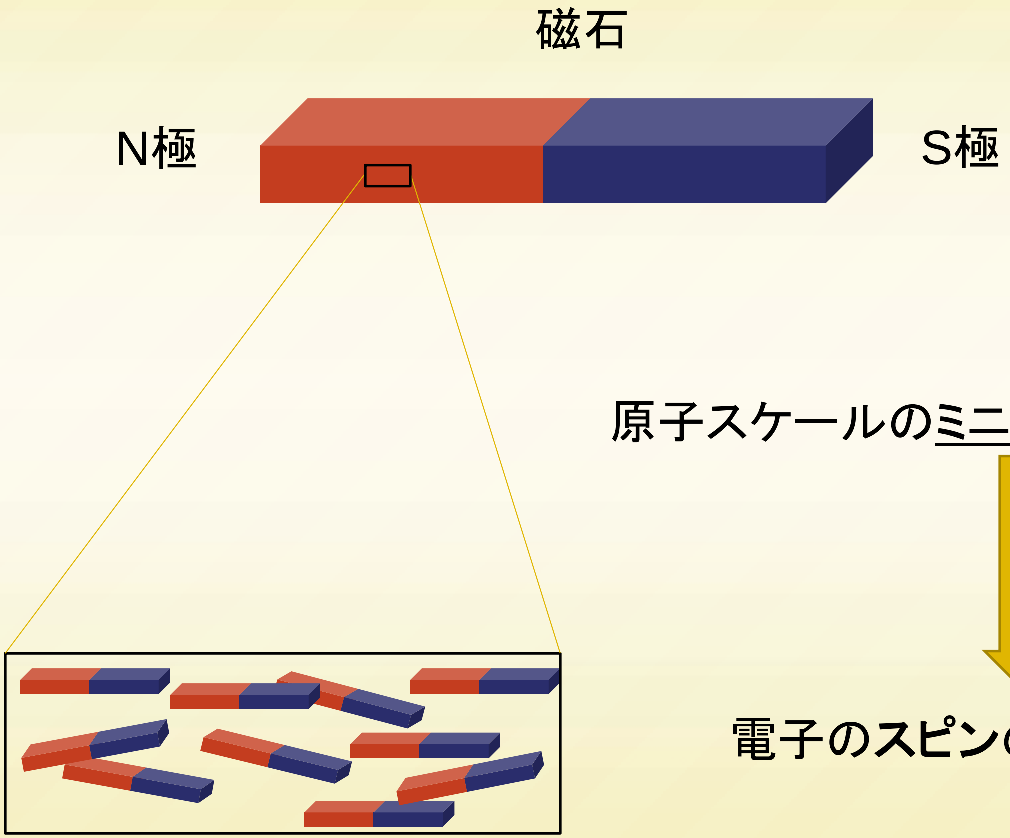
統計力学

~Ising Modelを学ぶ~

東北大院情報科学
安田　宗樹

磁性体

磁性体



原子スケールのミニ磁石が沢山つまっていると考える

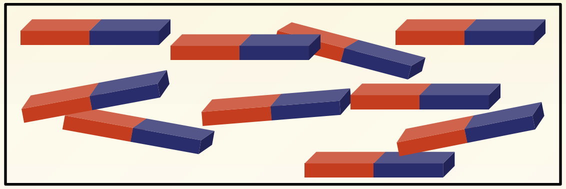
↓

電子の**スピン**の方向がミニ磁石

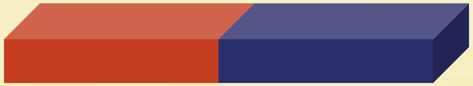
※スピンの磁気モーメントそのものは磁石ではないが，直観的理解のためミニ磁石と表現している

方向が大体そろってる

秩序がある

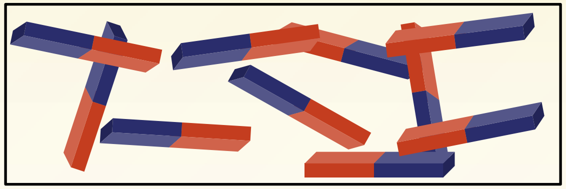


全体として磁化をもつ



方向がバラバラ

秩序がない



ミニ磁石同士が打ち消しあい
全体として磁化をもたない

磁性体の種類

強磁性体

- 外部磁場がなくとも勝手に磁化をもつ（自発磁化をもつ）物質
- 通常磁性体といったら強磁性体を指すことが多い

常磁性体

- 勝手に磁化をもつことはなく，外部磁場を印加すると
  磁場の方向に弱く磁化をもつ物質

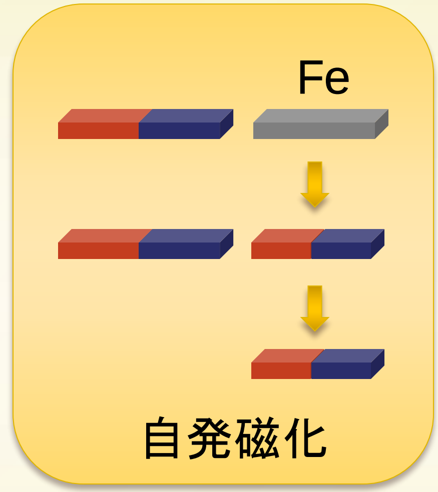
反強磁性体

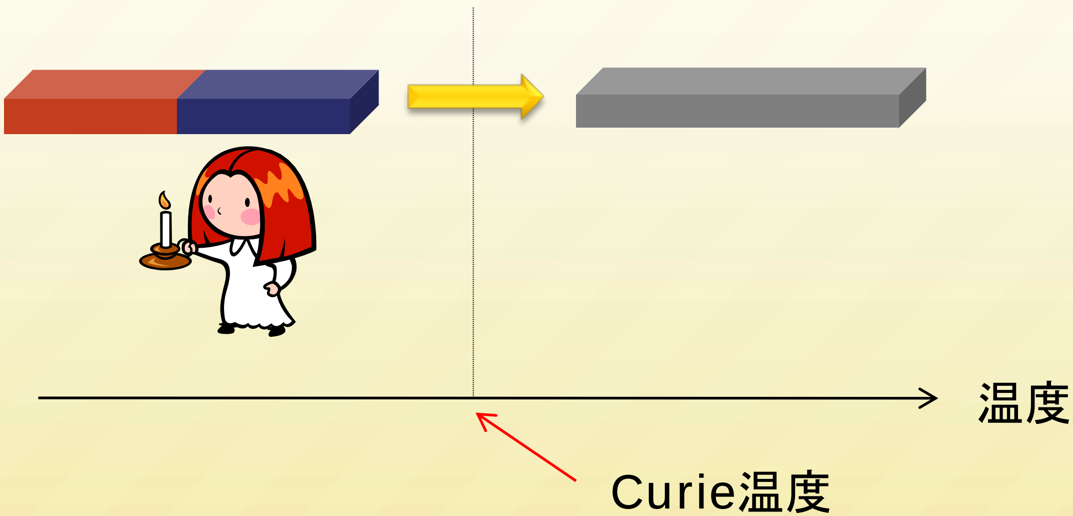
- 基本的に磁化をもたない物質

強磁性体

常温で強磁性を示す物質： 鉄, コバルト, ニッケル, ガドリウム

- スピン（ミニ磁石）の方向がそろいやすい物質
- ある温度（Curie温度）以下で自発磁化をもつ



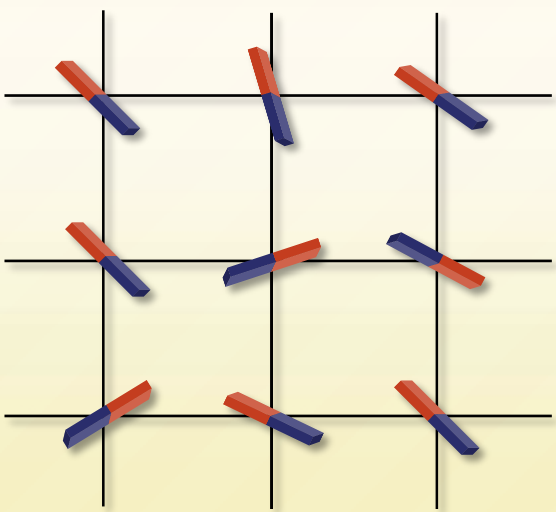


強磁性体の物理モデル

強磁性体の統計力学

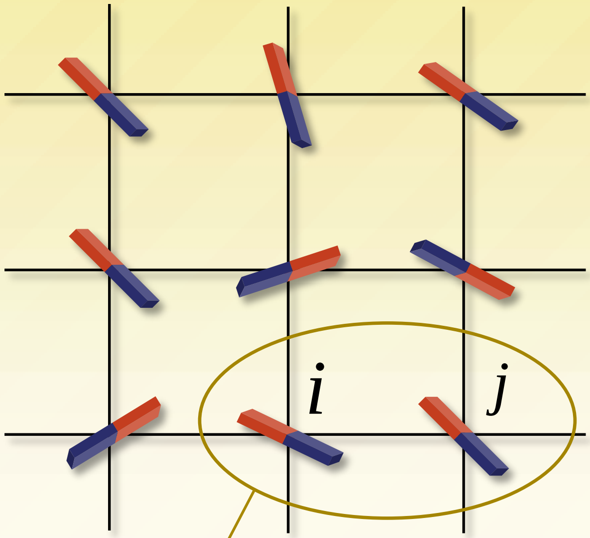
統計力学：　**ミクロ**な物理法則から**マクロ**な物理現象を導く物理学

スピン → 磁性体



- スピンの位置（サイト）は適当な規則で固定されているとする（左図は2次元正方格子の例）
- 近い（隣りの）スピン同士を線（ボンド）で結ぶ
- ボンドで結ばれたスピン同士は直接影響し合うとする（**相互作用**）

 スピン（ミニ磁石）

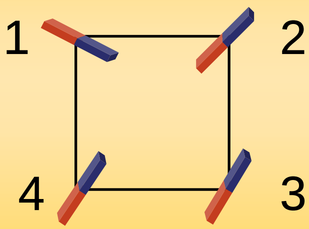


- N 個のスピンがあるとする
- 各サイトに異なる番号を割り当てる
- i 番目のサイト上のスピンの状態を
  変数 S_i であらわす　$(\, i \;=\; 1, 2, \cdots, N\,)$

$(i, j) \leftarrow$ ボンドで結ばれているサイトの組をあらわすラベル
（i 番目と j 番目のサイトが結ばれていることをあらわす）

$B = \Big($すべての異なるボンド(i, j)の集合$\Big)$

ex.) $B = \{(1,2),(2,3),(3,4),(1,4)\}$

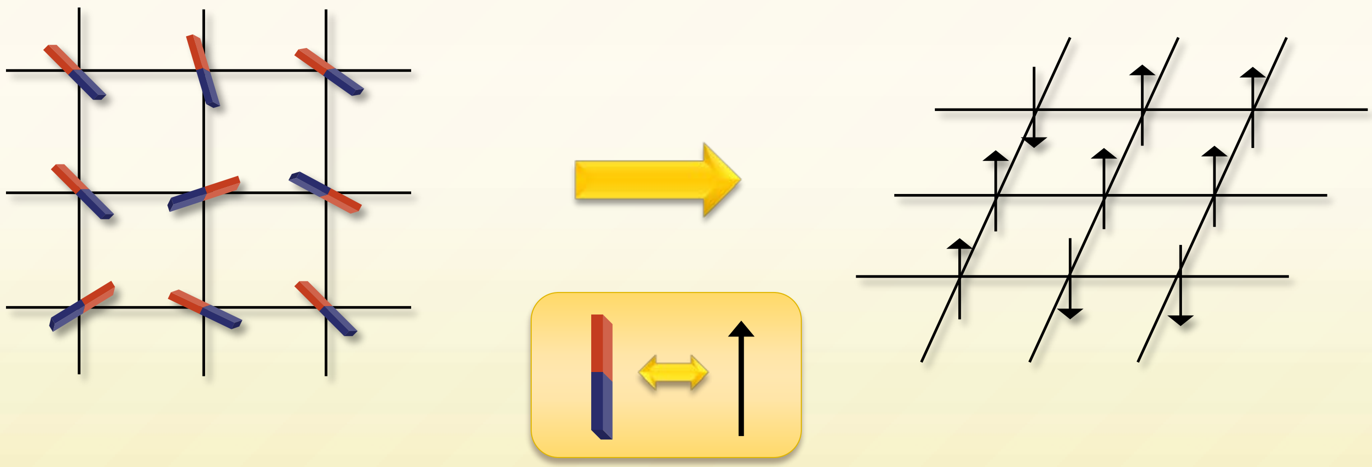


$(i, j) = (\, j, i)$は同じラベルを指すとする

本質だけを抽出

磁性体ではスピンがそろうか否かが問題　→　そろう or そろわないのみに注目
（程度の具合の情報は無視）

スピンは上向きか下向きの2通りの状態しかとらないとする



上向き状態を$+1$，下向き状態を-1に対応させる：$S_i \in \{\pm 1\}$

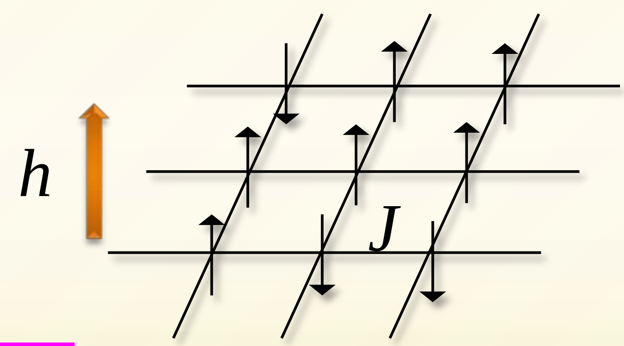
エネルギー関数の定義

なにがともあれまずはエネルギー関数（ハミルトニアン）を定義しなくてはならない

エネルギー関数：　低い方がシステム的に安定になるように設計される

強磁性体の要請

- 外部磁場の方向を向きやすい
- 隣り同士のスピンはそろいやすい



$$E(\boldsymbol{S}) := -h\sum_{i=1}^{N} S_i - J\sum_{(i,j)\in B} S_i S_j$$

h ：外部磁場（上向きなら正，下向きなら負）
$J>0$ ：交換相互作用

※交換相互作用の本質は決して磁気的なものではなく，量子力学の立場から解釈されるものである

統計力学の処方箋（カノニカル集団）

スピンは熱的な揺らぎによって**常に**フリップを繰り返している

スピン配位の確率分布（Gibbs-Boltzmann分布）

$$\boxed{P(\boldsymbol{S}) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E(\boldsymbol{S})\right)}$$

分配関数 : $Z := \sum_{S_1=\pm1}\sum_{S_2=\pm1}\cdots\sum_{S_N=\pm1}\exp\left(-\beta E(\boldsymbol{S})\right) = \sum_{\boldsymbol{S}}\exp\left(-\beta E(\boldsymbol{S})\right)$

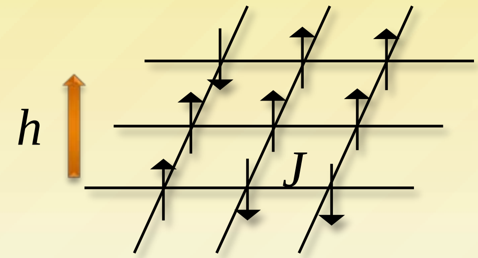
逆温度 : $\beta = \dfrac{1}{k_B T} > 0$

T : 絶対温度

k_B : Boltzmann定数 $1.38\times10^{-23}[\mathrm{JK}^{-1}]$

エネルギーが低い配位が確率的に出現しやすい

Isingモデル



以上より強磁性体のスピン配位は次であらわされる

$$\boxed{P(\boldsymbol{S}) = \frac{1}{Z}\exp\beta\left(h\sum_{i=1}^{N} S_i + J\sum_{(i,j)\in B} S_i S_j\right)}$$

いま注目したい物理量　→　**磁化**（スピンの秩序をあらわす指標）

$$\boxed{M(h,J,\beta,N) := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\boldsymbol{S}} S_i P(\boldsymbol{S}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle S_i\rangle}$$

$M > 0$：スピンは全体的に大体上向きになっている

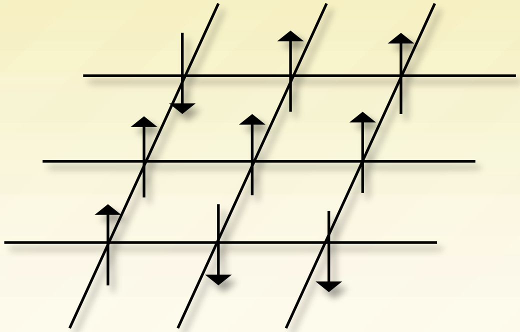
$M < 0$：スピンは全体的に大体下向きになっている

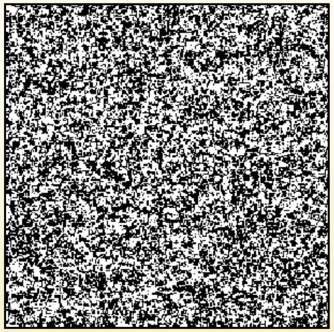
$M = 0$：スピンはバラバラ（秩序がない状態）

Isingモデルのスピン配位の（ある瞬間）の例

正方格子上のスピンで磁場なし (h = 0)

マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法で作成





高温

バラバラ

低温

結構そろう

Isingモデルで自発磁化は説明できるか？

自発磁化:　外部磁場がないのに磁化をもつ状態　（ $h=0,\ M\neq 0$ ）

強磁性体のスピン配位の分布から

$$P(-\boldsymbol{S})=\frac{1}{Z}\exp\left(\beta J\sum_{(i,j)\in B}(-S_i)(-S_j)\right)=\frac{1}{Z}\exp\left(\beta J\sum_{(i,j)\in B}S_iS_j\right)=P(\boldsymbol{S})$$

対称性がある

⇓

$$\langle S_i\rangle=0\Rightarrow M(0,J,\beta,N)=0$$

自発磁化をもたないことが確認されてしまった．．．＼(^o^)／

Isingモデルではダメなの？

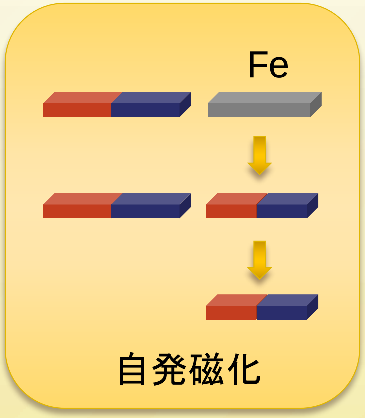
どうかな…
何かを見落としてるかも知れないよ

熱力学的極限

原子は超沢山ある　→　スピンも超沢山

スピンが無数にあるという事実を考慮に入れる

無数の要素が引き起こす普遍的なマクロの性質を議論したい　→　無限という概念
（熱力学的極限）



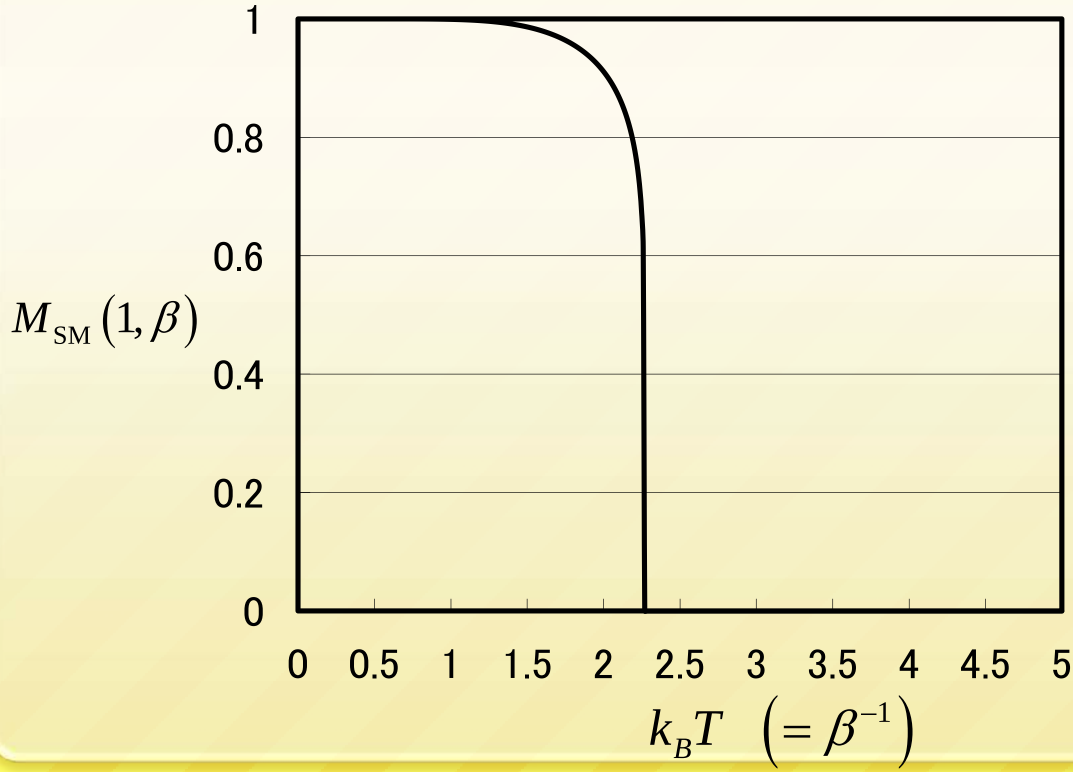
$$M_{\mathrm{SM}}\left(J,\beta\right) := \lim_{h\to+0}\left(\lim_{N\to\infty} M\left(h,J,\beta,N\right)\right)$$

熱力学的極限ではどうなるか？

2次元正方格子上のIsingモデルの熱力学的極限

Onsager's exact solution (1944)

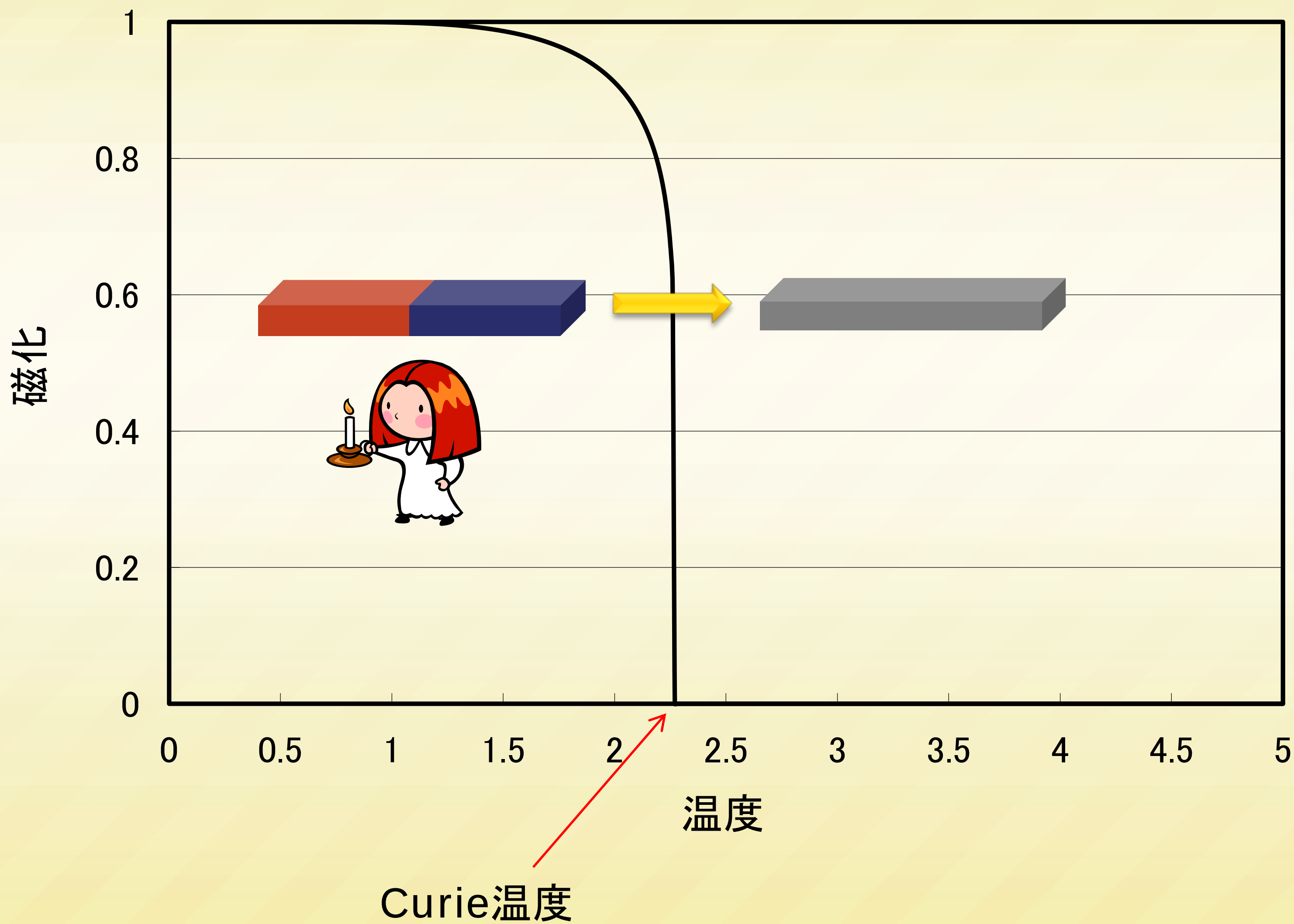
$$M_{\mathrm{SM}}(J,\beta)=\begin{cases}\left(1-\dfrac{1}{\sinh^4 2\beta J}\right)^{1/8} & (\sinh 2\beta J \geq 1)\\ 0 & (\sinh 2\beta J < 1)\end{cases}$$



自発磁化が出現した

自発的対称性の破れ

強磁性体の性質を再現している！



More is Different

有限のサイズ ⟷ 熱力学的極限

自発磁化が出現しない

自発磁化が出現する

質的に大きな隔たり

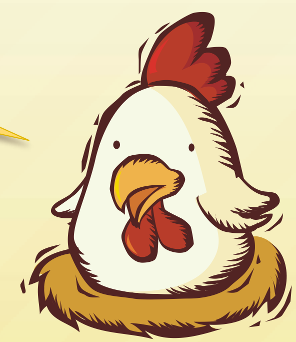
より数が多いということは，ただそれだけで異質である

P. W. Anderson

Isingモデルいけてるじゃないですか！

ところでIsingモデルなら必ず自発磁化が出るのかな？

それはモノによるね，例えば1次元のIsingモデルは
自発磁化を有限温度ではもたないことが知られているよ



More is Difficult ?

(Helmholtz)自由エネルギー

$$f\left(h,J,\beta,N\right) := -\frac{1}{N\beta}\ln Z = -\frac{1}{N\beta}\ln\sum_{\mathbf{s}}\exp\beta\left(h\sum_{i=1}^{N}S_i + J\sum_{(ij)\in B}S_iS_j\right)$$

自由エネルギー (free energy) は非常に大切な物理量である

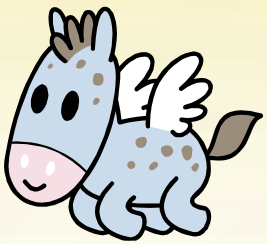
自由エネルギー → 系の主要な情報のほとんど全てをもっている

ex.) $$M\left(h,J,\beta,N\right) = -\frac{\partial}{\partial h}f\left(h,J,\beta,N\right)$$

自由エネルギーが計算できればその系をほぼ掌握できる

じゃあ自由エネルギーを計算すればいいんだね！

まぁ，それはそうなんだけどね…



自由エネルギーの厳密計算はかなり大変

$$Z = \sum_{\mathbf{S}} \exp\beta\left(h\sum_{i=1}^{N} S_i + J\sum_{(ij)\in B} S_i S_j \right)$$

2^N 個の項の和

- 一般的な解析計算法は知られていない
- 項が多すぎるので真面目に書き下すことはまず不可能

厳密な自由エネルギーが計算できる系

- サイズが非常に小さい系（ $N =$ ～30 程度 ）
- 極々限られた特別な系 (ボンドループのない系など)

サイズが大きくなるとほとんど手が出なくなる

困ったなぁ
つまりほとんどの場合は計算できないってことなんだろ？

まぁ・・・そうだね
だいたいこういうときは以下の2つの方針が考えられるね

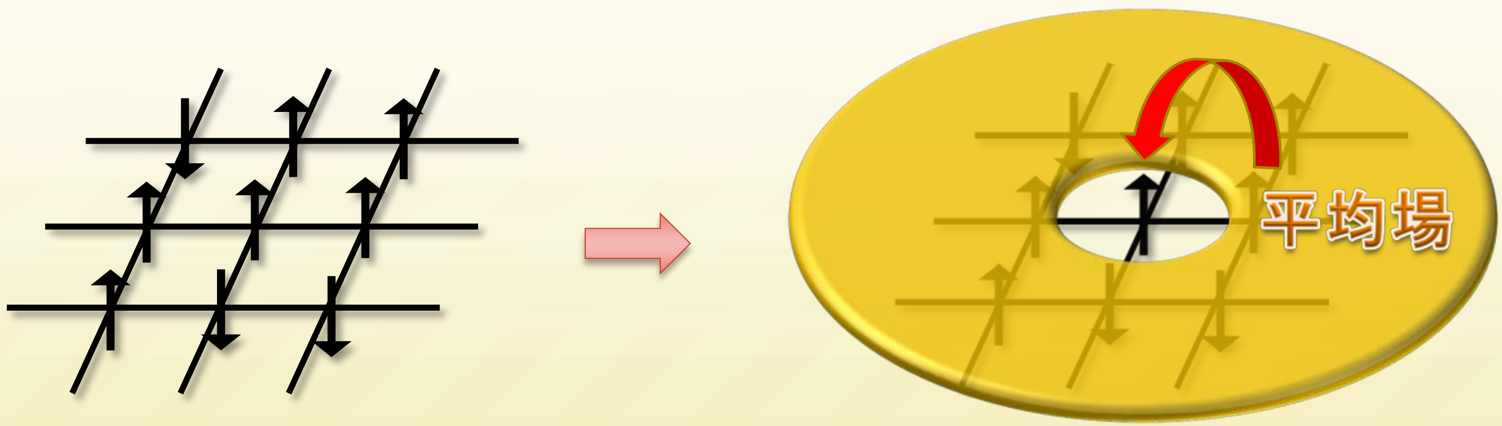
- <u>近似計算で解析する</u>（平均場理論）
- <u>厳密に解析できる場合で試してみる</u>

Isingモデルの近似計算

平均場近似の考え方

ここでは，近似計算で解析をすることを考えよう

一番有名で，一番基本的な近似法である
「平均場近似」
からはじめるよ



中心スピンへのまわりのスピンからの影響は平均的なもの（平均場）であると考える

中心のスピン i に注目する

$$E(\boldsymbol{S}) = -h\sum_{i=1}^{N} S_i - J\sum_{(i,j)\in B} S_i S_j = -hS_i - JS_i \sum_{j\in\partial(i)} S_j + (i\ \text{に関係ない項})$$

$\partial(i)$:スピンにつながっているスピンの集合

中心のスピン i のまわりは平均化

$$E_i^{\mathrm{MF}}(S_i) := -hS_i - JS_i \sum_{j\in\partial_i} \langle S_j \rangle + \langle (i\ \text{に関係ない項}) \rangle$$ 平均場

$$= -\left(h + J\sum_{j\in\partial(i)} m_j\right) S_i + \mathrm{const} \qquad \left(m_j := \langle S_j \rangle\right)$$

まわりが平均化された中心のスピン i の分布

$$P_i^{\mathrm{MF}}(S_i) := \frac{\exp\left(-\beta E_i^{\mathrm{MF}}(S_i)\right)}{\sum_{S_i=\pm 1} \exp\left(-\beta E_i^{\mathrm{MF}}(S_i)\right)} = \frac{\exp\left\{\beta\left(h + J\sum_{j\in\partial(i)} m_j\right) S_i\right\}}{\sum_{S_i=\pm 1} \exp\left\{\beta\left(h + J\sum_{j\in\partial(i)} m_j\right) S_i\right\}}$$

中心のスピン i の平均値

$$\sum_{S_i=\pm 1} S_i P_i^{\mathrm{MF}}(S_i) = \tanh \beta\left(h + J \sum_{j \in \partial(i)} m_j \right)$$

スピン i の平均値は一応書けたみたいだけど...
m_j が分からないから結局計算できないじゃん？？

うん，このままでは確かにそうだね．

実はこれから
「**自己無撞着の関係**」ってのを使ってこれを方程式にするんだ

もともと m_j はスピン j の平均値として導入されたでしょ？
だとしたら上で出てきたスピン i の平均値もやはり m_i にならないと
つじつまが合わないよね！

自己無撞着の関係

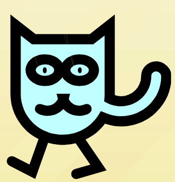
$$\underbrace{\sum_{S_i=\pm 1} S_i P_i^{\mathrm{MF}}(S_i)}_{m_i} = \tanh\beta\left(h + J\sum_{j\in\partial(i)} m_j\right)$$

平均場方程式

$$\boxed{m_i = \tanh\beta\left(h + J\sum_{j\in\partial(i)} m_j\right)}$$

N 元非線形連立方程式である

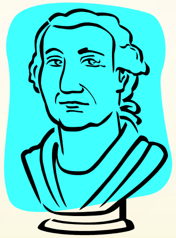
⇨ 数値的にこの連立方程式を解く(代入法 etc.)



平均場方程式を解いて勝手に導入した $\boldsymbol{m}$ を求めるんだニャー

まわりを全部平均にしちゃうなんて…
またずいぶんとザックリした近似ね

確かに簡単だけど，こんなのでホントにいいの？



いいかどうかは知りたいものによるけど

例えばIsingモデルが自発磁化を持つかどうかの現象だけを調べるだけならそこそこの効果を発揮するよ

空間的に一様な場合の平均場近似

格子が規則的に無限に広がっている場合（場所によって特徴がない場合）

すべてのスピンは統計的には同様の振る舞いをするはずである

したがって，すべてのスピンの平均値は一致すると考えられる

$$m_1 = m_2 = \cdots = m$$

$$\downarrow$$

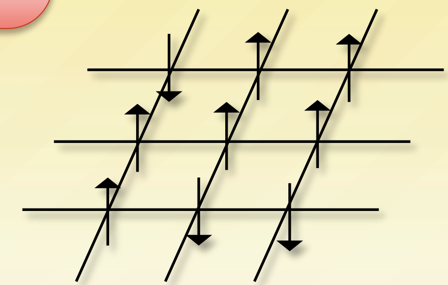
$$\boxed{m = \tanh \beta \left(h + Jzm \right)}$$

z は格子点に隣接する格子点の数 （正方格子の場合 $z = 4$）

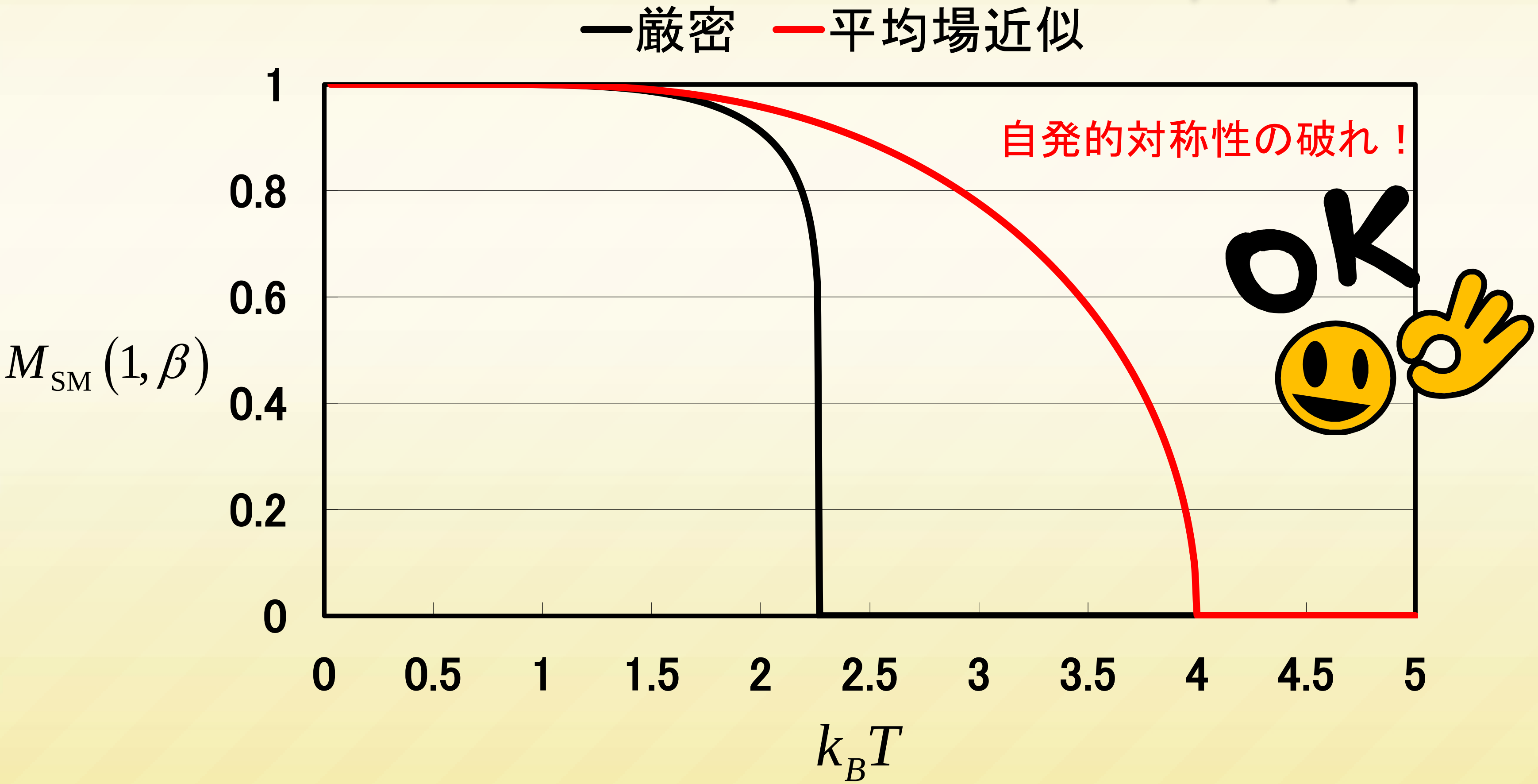
この場合，磁化は m となる： $M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} m_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} m = m$

２次元正方格子上のIsingモデルの熱力学的極限はちょうどこの場合に相当

2次元正方格子上の強磁性Isingモデル



正方格子上のスピンで磁場なし ($h = 0$)

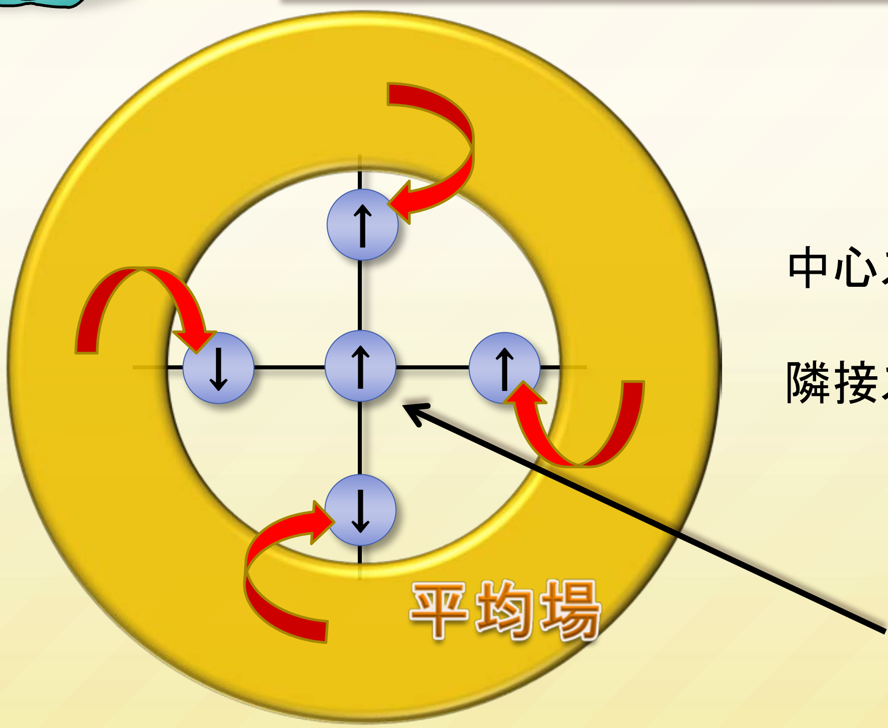


ベーテ近似

今度は平均場近似をひとつ上回る近似を考えよう

ベーテ近似は中心スピンとその隣接スピンまでを
真面目に考慮した近似だよ

前の平均場近似の場合と対応させて考えてね



中心スピンとその隣接スピンまで考慮

隣接スピンのさらに外は平均場とする

中心スピン

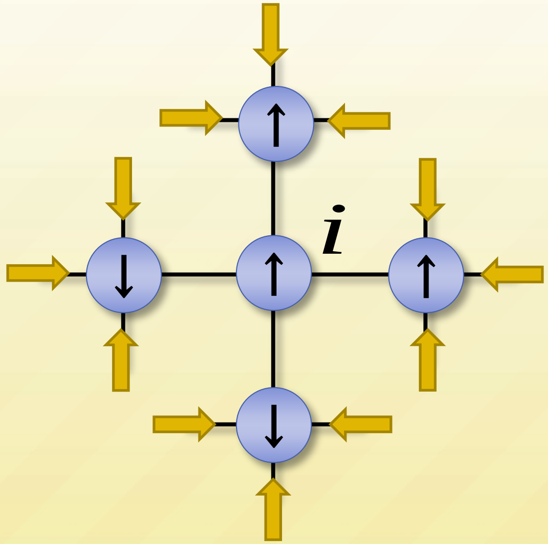
有効(磁)場

スピン i から j への影響 $= \lambda_{i\to j}$

中心スピン i に関するベーテ近似のエネルギー関数

$$E_i^{\mathrm{Bethe}}\left(S_i,\boldsymbol{S}_{\partial(i)}\right):=-hS_i-JS_i\sum_{j\in\partial(i)}S_j-\sum_{j\in\partial(i)}\left(h+\sum_{k\in\partial(i)\backslash i}\lambda_{k\to j}\right)S_j+(\text{平均場})$$

$$\boldsymbol{S}_{\partial(i)}:=\left\{S_j \mid j\in\partial(i)\right\}$$



中心スピンの隣接スピンは
外側からの有効場を通して影響を受ける

注目スピン i と隣接スピンの結合分布

$$P_i^{\text{Bethe}}\left(S_i, \boldsymbol{S}_{\partial(i)}\right) := \frac{\exp\left(-\beta E_i^{\text{Bethe}}\left(S_i, \boldsymbol{S}_{\partial(i)}\right)\right)}{\sum_{S_i}\sum_{\boldsymbol{S}_{\partial(i)}}\exp\left(-\beta E_i^{\text{Bethe}}\left(S_i, \boldsymbol{S}_{\partial(i)}\right)\right)}$$

周辺化による注目スピン i の分布

$$P_i^{\text{Bethe}}\left(S_i\right) = \sum_{\boldsymbol{S}_{\partial(i)}} P_i^{\text{Bethe}}\left(S_i, \boldsymbol{S}_{\partial(i)}\right)$$

$$\propto \exp\beta\left\{hS_i + \frac{1}{\beta}\sum_{j\in\partial(i)}\ln 2\cosh\beta\left(h + \sum_{k\in\partial(j)\backslash i}\lambda_{k\to j} + JS_i\right)\right\}$$

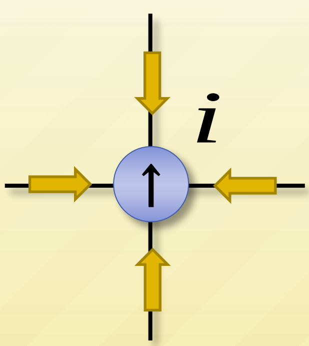
$$\propto \exp\beta\left\{\left(h + \frac{1}{2\beta}\sum_{j\in\partial(i)}\ln\frac{\cosh\beta\left(\Gamma_j^{(i)} + J\right)}{\cosh\beta\left(\Gamma_j^{(i)} - J\right)}\right)S_i\right\}$$

$$\Gamma_j^{(i)} := h + \sum_{k\in\partial(j)\backslash i}\lambda_{k\to j}$$

次は平均場近似のときと同じように
「**自己無撞着の関係**」を利用して勝手に決めた有効場 λ を
計算する方程式を作ればいいんだろうけど…

どうやるのかな～？

有効場はスピンからスピンへの影響として導入したでしょ？
だから例えば「**隣接スピンから中心スピンへの影響も同じように**
有効場で記述されるべき」だと考えるの



$$P_i^{\mathrm{Bethe}}\left(S_i\right) \propto \exp\beta\left\{\left(h+\sum_{j\in\partial(i)}\lambda_{j\to i}\right)S_i\right\}$$

自己無撞着の関係

$$\begin{cases} P_i^{\text{Bethe}}(S_i) \propto \exp\beta\left\{\left(h + \frac{1}{2\beta}\sum_{j\in\partial(i)} \ln\frac{\cosh\beta\left(\Gamma_j^{(i)}+J\right)}{\cosh\beta\left(\Gamma_j^{(i)}-J\right)}\right)S_i\right\} \\ P_i^{\text{Bethe}}(S_i) \propto \exp\beta\left\{\left(h + \sum_{j\in\partial(i)} \lambda_{j\to i}\right)S_i\right\} \end{cases}$$

赤い部分が同じだとするとつじつまが合うネ！

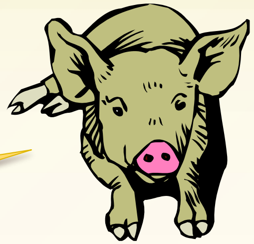
有効場方程式

$$\boxed{\lambda_{j\to i} = \frac{1}{2\beta}\ln\frac{\cosh\beta\left(\Gamma_j^{(i)}+J\right)}{\cosh\beta\left(\Gamma_j^{(i)}-J\right)} = \frac{1}{\beta}\tanh^{-1}\left\{\tanh(\beta J)\tanh\left(\beta\Gamma_j^{(i)}\right)\right\}}$$

スピン i の平均値

$$m_i = \sum_{S_i} S_i P_i^{\mathrm{Bethe}}\left(S_i\right) = \tanh\beta\left(h + \sum_{j\in\partial(i)} \lambda_{j\to i}\right)$$

空間的に一様な場合



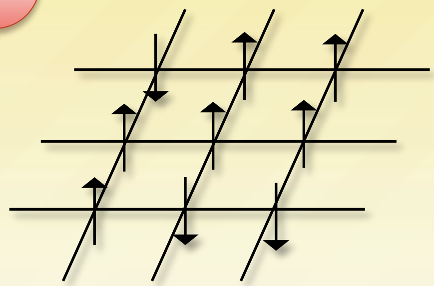
場所ごとに違いがないはずだから
すべての有効場が等しいとするんだブー

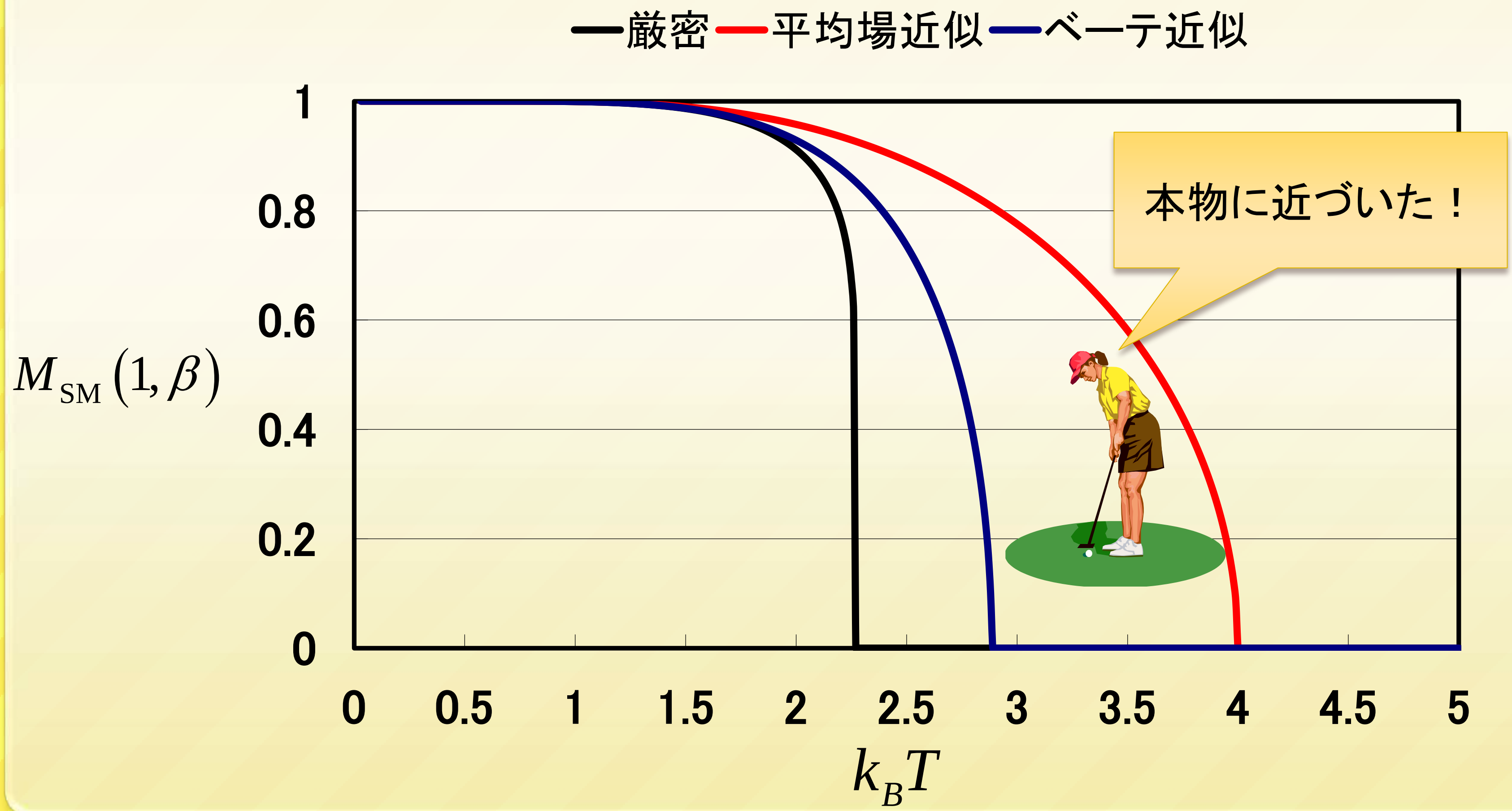
$$\boxed{\lambda = \frac{1}{\beta}\tanh^{-1}\left\{\tanh\left(\beta J\right)\tanh\beta\left(h+\left(z-1\right)\lambda\right)\right\}}$$

磁化: $$M = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} m_i = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\tanh\beta\left(h+z\lambda\right) = \tanh\beta\left(h+z\lambda\right)$$

2次元正方格子上の強磁性Isingモデル

正方格子上のスピンで磁場なし ($h = 0$)



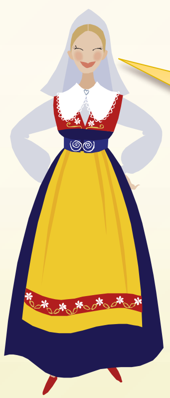


伏見・Temperley モデル

厳密に解析できる系

全てのスピンがそれぞれボンドでつながっているような Ising モデルを考える

$$E(\boldsymbol{S}) = -\frac{J}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N} S_i S_j \qquad J > 0$$



1つのスピンが他の全てのスピンとつながっている場合ね！

この模型は伏見・テンパリ モデルとよばれる
強磁性体のIsingモデルの中でもっとも有名な
モデルの一つなんだよ

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ①

$$f\left(h,J,\beta,N\right)=-\frac{1}{N\beta}\ln\sum_{s}\exp\beta\left(h\sum_{i=1}^{N}S_i+\frac{J}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}S_iS_j\right)$$

$$=-\frac{1}{N\beta}\ln\sum_{s}\exp\beta\left(h\sum_{i=1}^{N}S_i+\frac{J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N}S_i\right)^2-\frac{J}{2N}\sum_{i=1}^{N}S_i^2\right)$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N}a_i\right)^2=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}a_ia_j=\sum_{i=1}^{N}a_i^2+2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}a_ia_j$$

$$S_i^2=1$$

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ②

$$f\left(h, J, \beta, N\right) = -\frac{1}{N\beta}\ln\sum_{s}\exp\left(\beta h\sum_{i=1}^{N}S_i + \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\beta J}{N}}\sum_{i=1}^{N}S_i\right)^2 - \frac{\beta J}{2}\right)$$

$$= \frac{\beta J}{2} - \frac{1}{N\beta}\ln\sum_{s}\exp\left(\beta h\sum_{i=1}^{N}S_i + \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\beta J}{N}}\sum_{i=1}^{N}S_i\right)^2\right)$$

$$= \frac{\beta J}{2} - \frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\sum_{s}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2}x^2 + \left(\beta h + x\sqrt{\frac{\beta J}{N}}\right)\sum_{i=1}^{N}S_i\right)\mathrm{d}x$$

ハバート・ストラトノビッチ変換

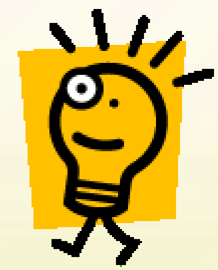
ガウス積分の変形を利用した変換公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\lambda}{2}(x-\mu)^2\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}}$$

ガウス積分公式

$$(\lambda > 0)$$

$$\boxed{\exp\left(\frac{\lambda}{2}\mu^2\right) = \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\lambda}{2}x^2 + \lambda\mu x\right) \mathrm{d}x}$$



これを利用すると

$$\exp\left(\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\beta J}{N}}\sum_{i=1}^{N} S_i\right)^2\right) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2 + x\sqrt{\frac{\beta J}{N}}\sum_{i=1}^{N} S_i\right) \mathrm{d}x$$

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ③

$$f\left(h,J,\beta,N\right)=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\sum_{s}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2}x^{2}+\left(\beta h+x\sqrt{\frac{\beta J}{N}}\right)\sum_{i=1}^{N}S_{i}\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{\beta NJ}{2\pi}}\sum_{s}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\beta\left(-\frac{NJ}{2}m^{2}+\left(h+Jm\right)\sum_{i=1}^{N}S_{i}\right)\mathrm{d}m$$

変数変換: $x\rightarrow\sqrt{\beta NJ}\,m$

$$=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{\beta NJ}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{s}\exp\beta\left(-\frac{NJ}{2}m^{2}+\left(h+Jm\right)\sum_{i=1}^{N}S_{i}\right)\mathrm{d}m$$

順序逆転 ！

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ④

$$f(h,J,\beta,N)=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{\beta NJ}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{\boldsymbol{s}}\exp\beta\left(-\frac{NJ}{2}m^2+(h+Jm)\sum_{i=1}^{N}S_i\right)\mathrm{d}m$$

$$=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{\beta NJ}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\beta NJ}{2}m^2\right)\sum_{\boldsymbol{s}}\exp\left(\beta(h+Jm)\sum_{i=1}^{N}S_i\right)\mathrm{d}m$$

$$=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{\beta NJ}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\beta NJ}{2}m^2\right)\left(2\cosh\beta(h+Jm)\right)^N\mathrm{d}m$$

$$\sum_{\boldsymbol{s}}\exp\left(\alpha\sum_{i=1}^{N}S_i\right)=\left(\sum_{S_1=\pm1}\exp(\alpha S_1)\right)\cdots\left(\sum_{S_N=\pm1}\exp(\alpha S_N)\right)$$

$$=\left(\sum_{S=\pm1}\exp(\alpha S)\right)^N=\left(2\cosh(\alpha)\right)^N$$

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ⑤

$$f\left(h,J,\beta,N\right)=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\sqrt{\frac{\beta NJ}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\beta NJ}{2}m^{2}\right)\left(2\cosh\beta\left(h+Jm\right)\right)^{N}\mathrm{d}m$$

$$=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\int_{-\infty}^{\infty}\exp N\left(-\frac{\beta J}{2}m^{2}+\ln 2\cosh\beta\left(h+Jm\right)\right)\mathrm{d}m$$

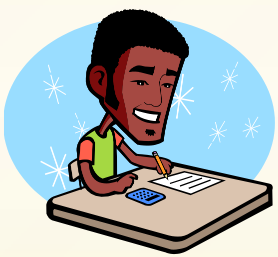
$$+\frac{1}{2N\beta}\ln\frac{\beta NJ}{2\pi}$$

$$\alpha=\exp\left(\ln\alpha\right)$$

お疲れ様でした♪

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ⑥

$$f\left(h,J,\beta,N\right)=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\int_{-\infty}^{\infty}\exp N\left(-\frac{\beta J}{2}m^2+\ln 2\cosh\beta\left(h+Jm\right)\right)\mathrm{d}m$$
$$+\frac{1}{2N\beta}\ln\frac{\beta NJ}{2\pi}$$



これで終わり．．．？

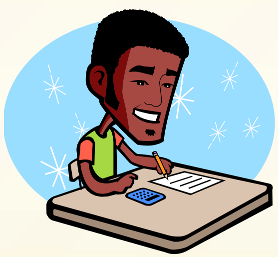
とりあえずはね

この式をみると，<u>N の値に関わらず一定の（有限）計算量で自由エネルギーを評価できる</u>ことがわかるでしょ？

こういう形にできれば「解けた」といっても問題ないのだよ

伏見・テンパリ モデルの自由エネルギー ⑦

$$f\left(h,J,\beta,N\right)=\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{N\beta}\ln\int_{-\infty}^{\infty}\exp N\left(-\frac{\beta J}{2}m^{2}+\ln 2\cosh\beta\left(h+Jm\right)\right)\mathrm{d}m$$
$$+\frac{1}{2N\beta}\ln\frac{\beta NJ}{2\pi}$$



まぁ 確かに パソコン で数値的に1次元積分すれば評価できるね
でも，$N\to\infty$ はどうするのさ？　パソコンで計算できないよね？

そうね　最終的に評価したいのは<u>熱力学的極限での値</u>

でも大丈夫よ！ $N\to\infty$ の場合には「鞍点法」という数学の定理

を利用することができて，結果的に積分しなくてよくなるの

鞍点法（saddle point method）

$$\boxed{\int \exp\left(Ng\left(x\right)\right)\mathrm{d}x = \exp\left(Ng\left(\hat{x}\right)\right) \qquad \left(N \to \infty\right)}$$

$$\hat{x} = \arg\max_{x} g\left(x\right)$$

鞍点法を利用すると

$$\lim_{N\to\infty} f\left(h, J, \beta, N\right)$$

$$= \frac{\beta J}{2} - \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N\beta} \ln \int_{-\infty}^{\infty} \exp N\left(-\frac{\beta J}{2} m^2 + \ln 2\cosh\beta\left(h + Jm\right)\right)\mathrm{d}m + \underbrace{\lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N\beta} \ln \frac{\beta N J}{2\pi}}_{=0}$$

$$= \frac{\beta J}{2} - \frac{1}{\beta}\left(-\frac{\beta J}{2}\hat{m}^2 + \ln 2\cosh\beta\left(h + J\hat{m}\right)\right)$$

$$\hat{m} = \arg\max_{m}\left(-\frac{\beta J}{2} m^2 + \ln 2\cosh\beta\left(h + Jm\right)\right)$$

伏見・テンパリ モデルの磁化

$$M_{\mathrm{SM}}(J,\beta)=\lim_{h\to+0}\left(\lim_{N\to\infty}M(h,J,\beta,N)\right)$$

$$\boxed{M(h,J,\beta,N)=-\frac{\partial}{\partial h}f(h,J,\beta,N)}$$

$$=-\lim_{h\to+0}\frac{\partial}{\partial h}\left\{\frac{\beta J}{2}-\frac{1}{\beta}\left(-\frac{\beta J}{2}\hat{m}^2+\ln 2\cosh\beta\left(\beta h+Jm\right)\right)\right\}$$

$$=\lim_{h\to+0}\tanh\beta\left(h+J\hat{m}\right)=\lim_{h\to+0}m$$

$$\boxed{\hat{m}=\arg\max_{m}\left(-\frac{\beta J}{2}m^2+\ln 2\cosh\beta\left(h+Jm\right)\right)}\;\Rightarrow\;\boxed{\hat{m}=\tanh\beta\left(h+Jm\right)}$$

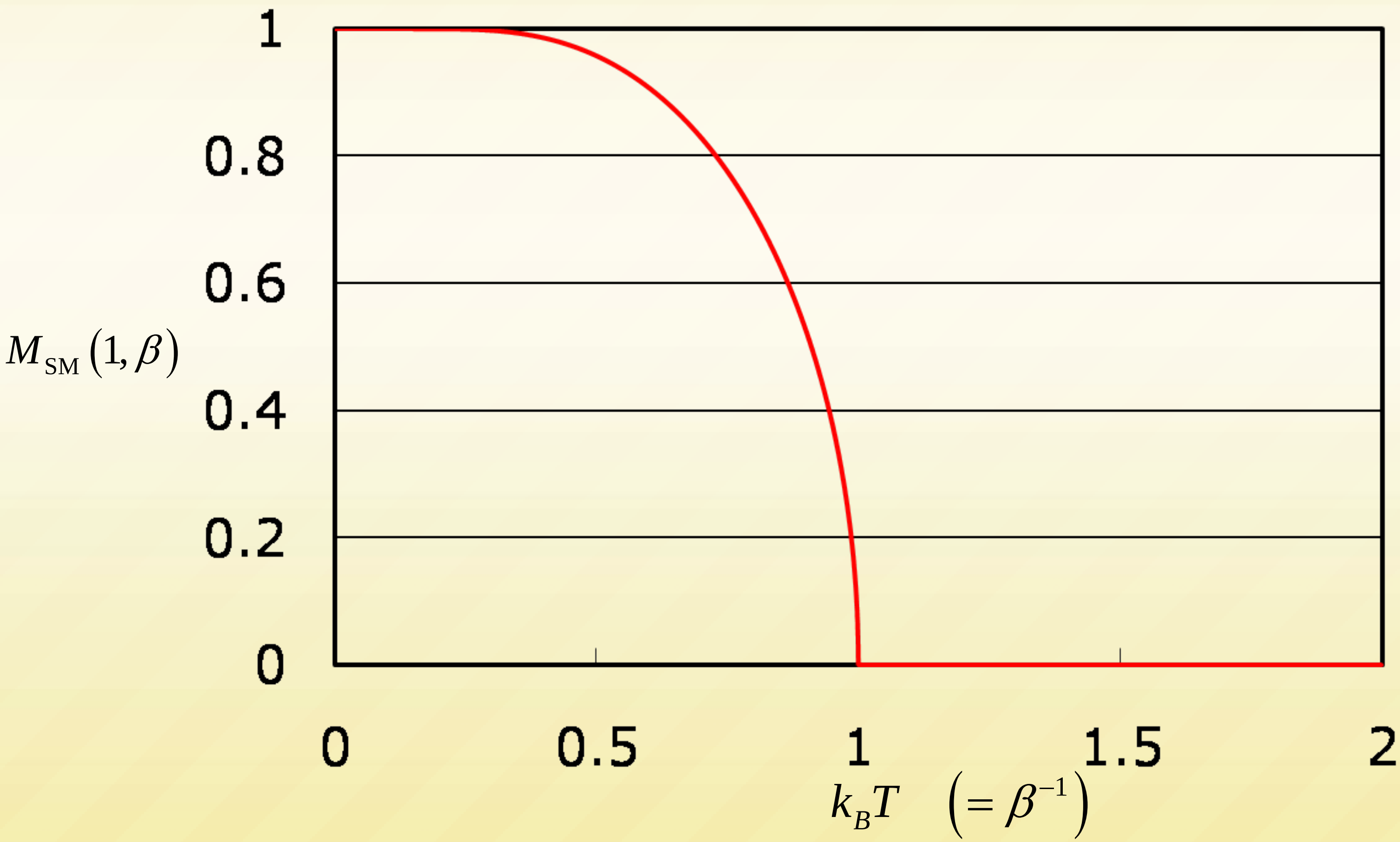
極値条件

要するに. . .

$$M_{\mathrm{SM}}(J,\beta)=\left[\text{方程式}\;\;\hat{m}=\tanh\left(\beta Jm\right)\;\;\text{の解}\right]$$

伏見・テンパリ モデルの磁化

熱力学的極限において自発磁化が発生する
～ More is different ～



おわりに

磁性体モデルの情報工学分野での役割

材料として

磁気記憶装置（HDD），磁気共鳴撮像装置（MRI），モーター，

リニアモータートレイン etc

確率モデルとして

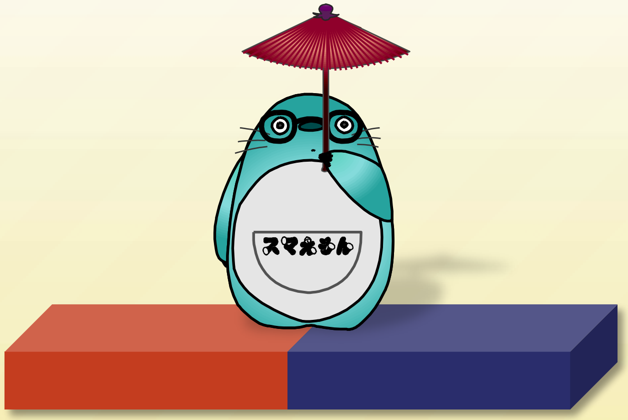
移動体通信・パケット通信信号の変調・復調，誤り訂正符号，

ディジタル画像処理，人工知能（ベイジアンネットワーク），

パターン認識 etc

磁性体モデル　＝　古くて新しい確率モデル

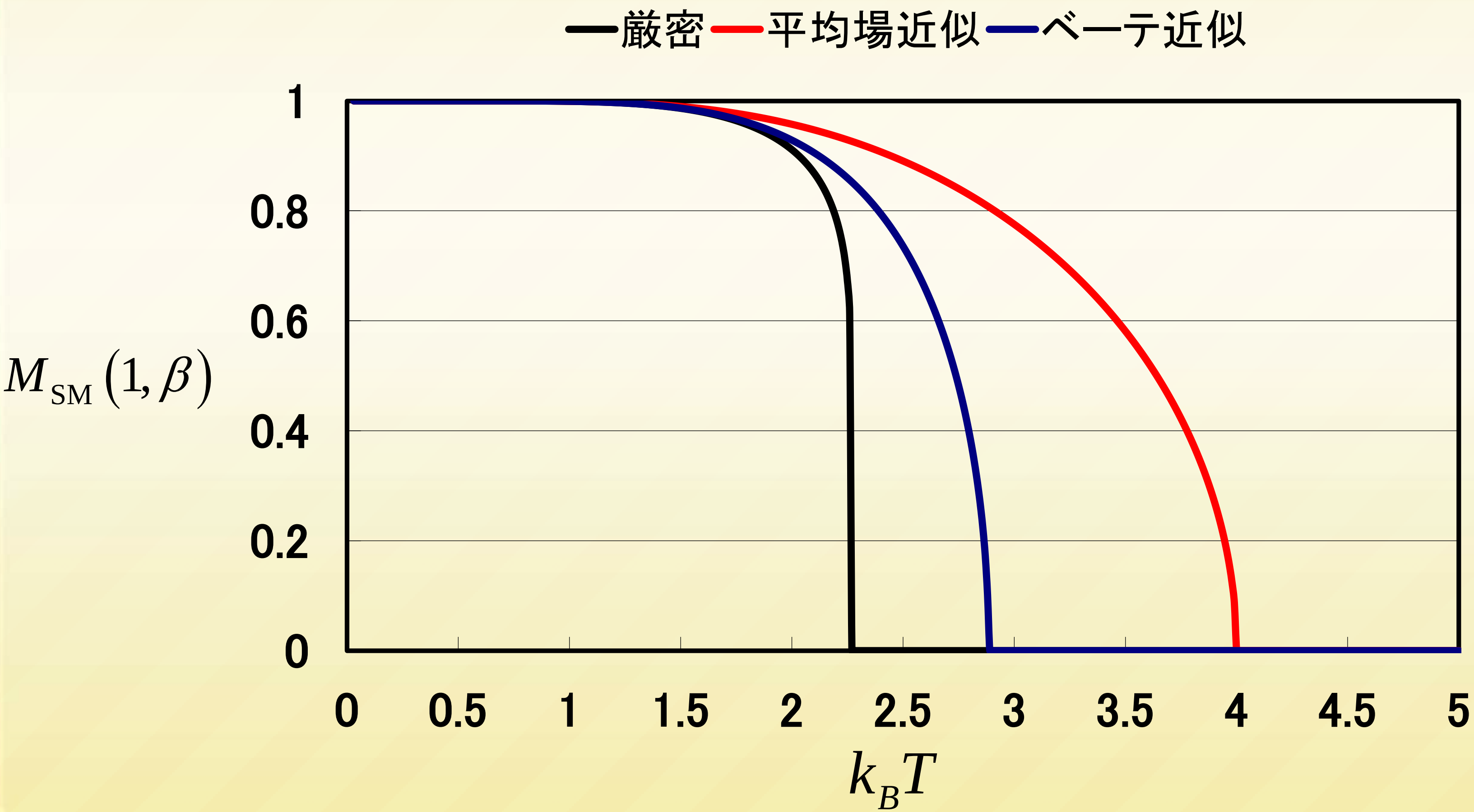
おわり



DRILL

課題1

磁場なし2次元正方格子上の強磁性Isingモデルにおいて
以下の磁化の温度依存性に関するグラフを自分で作成せよ



課題2

課題1のグラフにおいて，自発磁化が発生する温度（**相転移温度**）を数値的もしくは解析的に調べよ