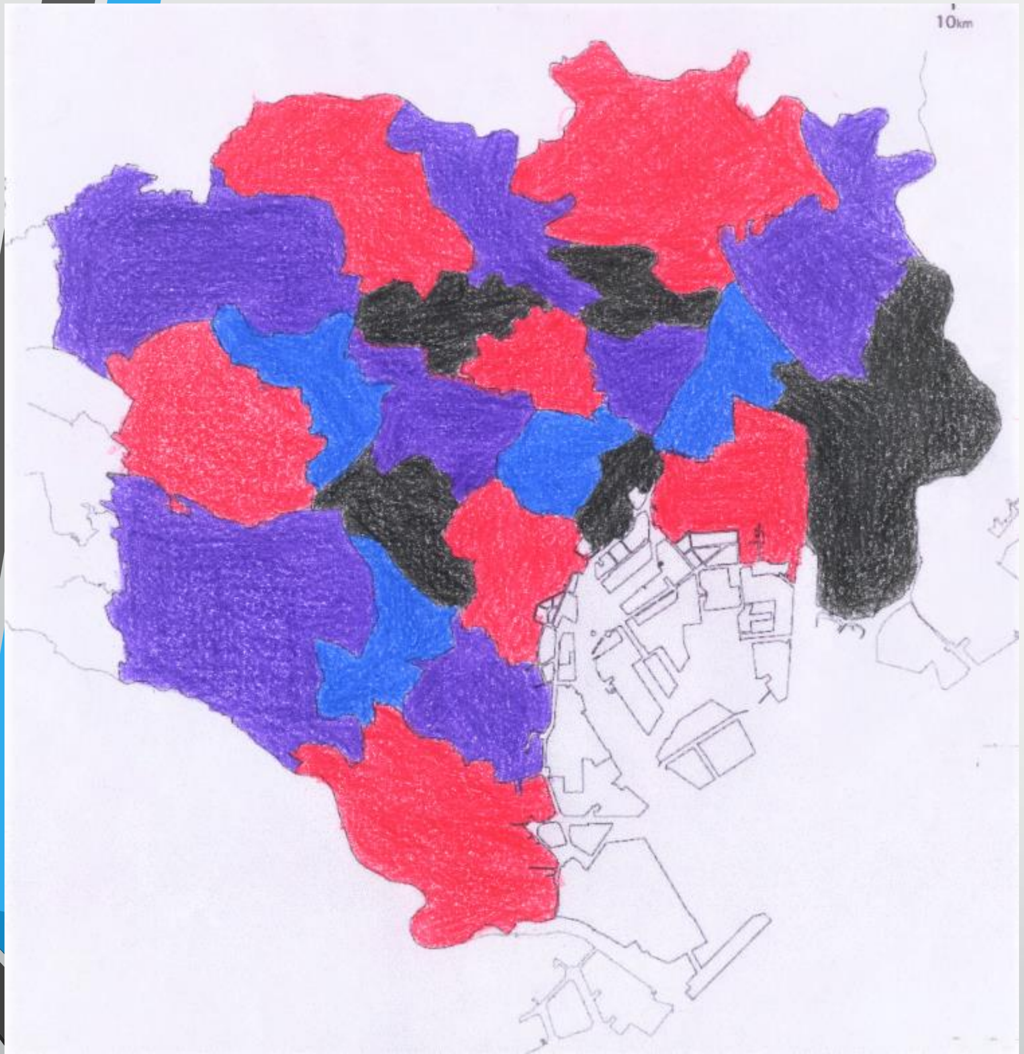
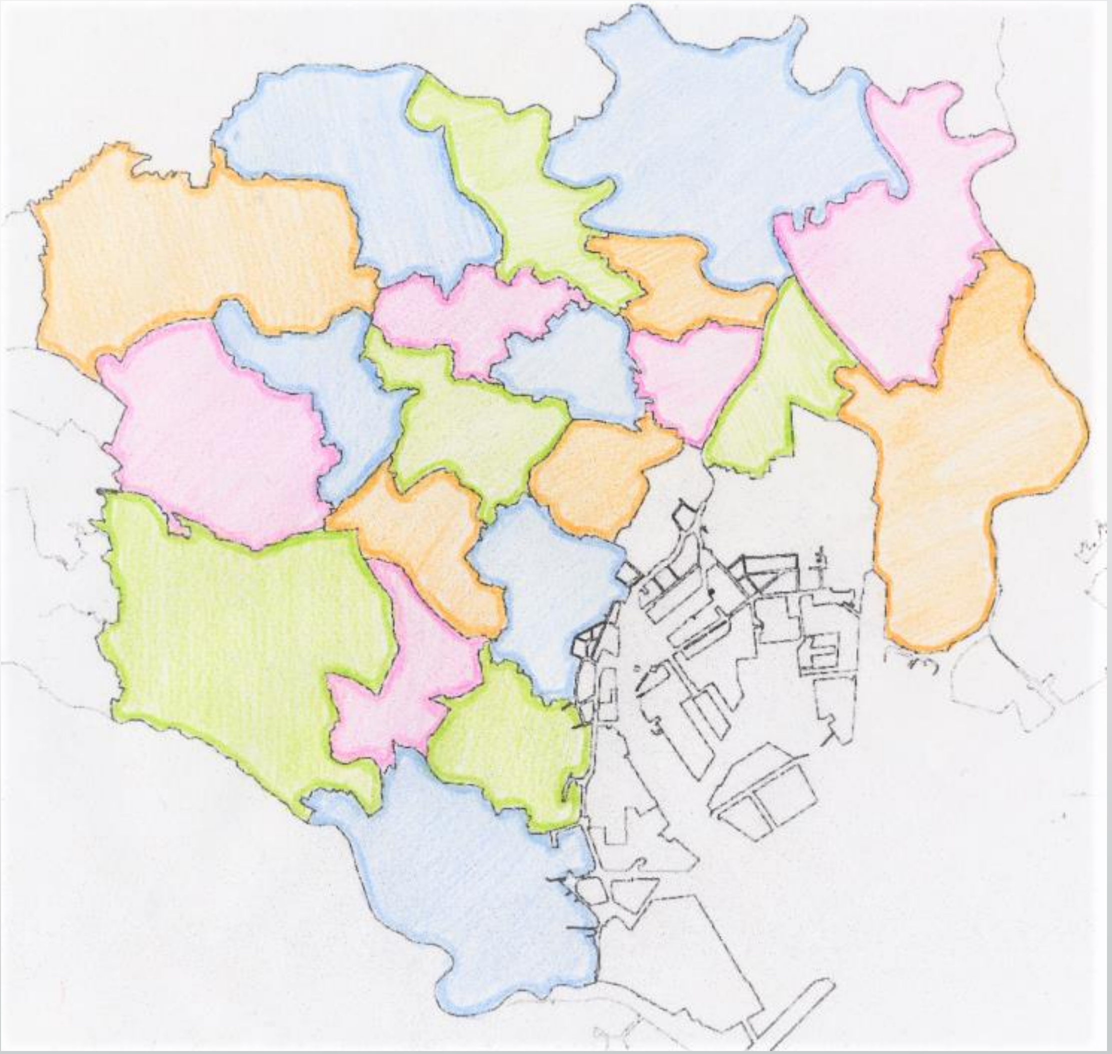
モンテカルロ法による ポッツモデルのシミュレーション

～東京23区を4色に塗り分ける～

中央大学物理学科香取研究室

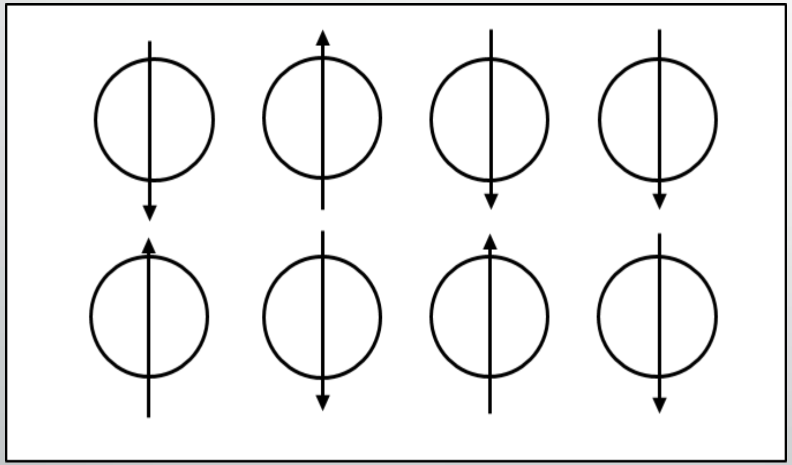
宮嶋 啓


10km

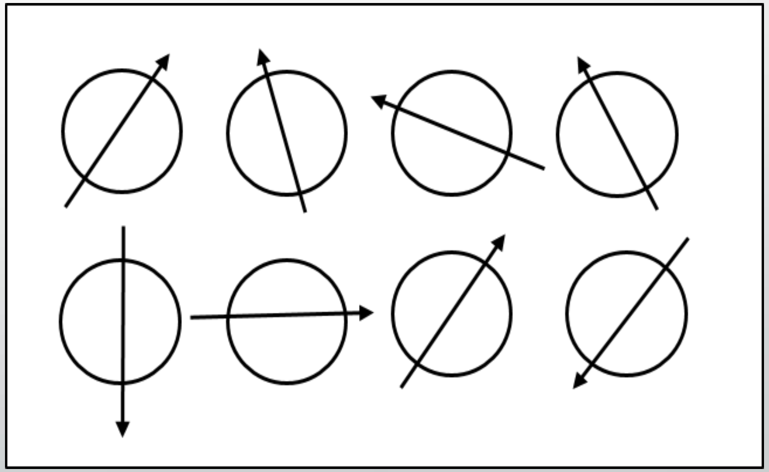


ポッツモデルとは

- 統計物理学におけるもっとも基本的なモデル「イジングモデル」の応用で、スピン方向が離散的に変化するモデル。



イジングモデル



ポッツモデル

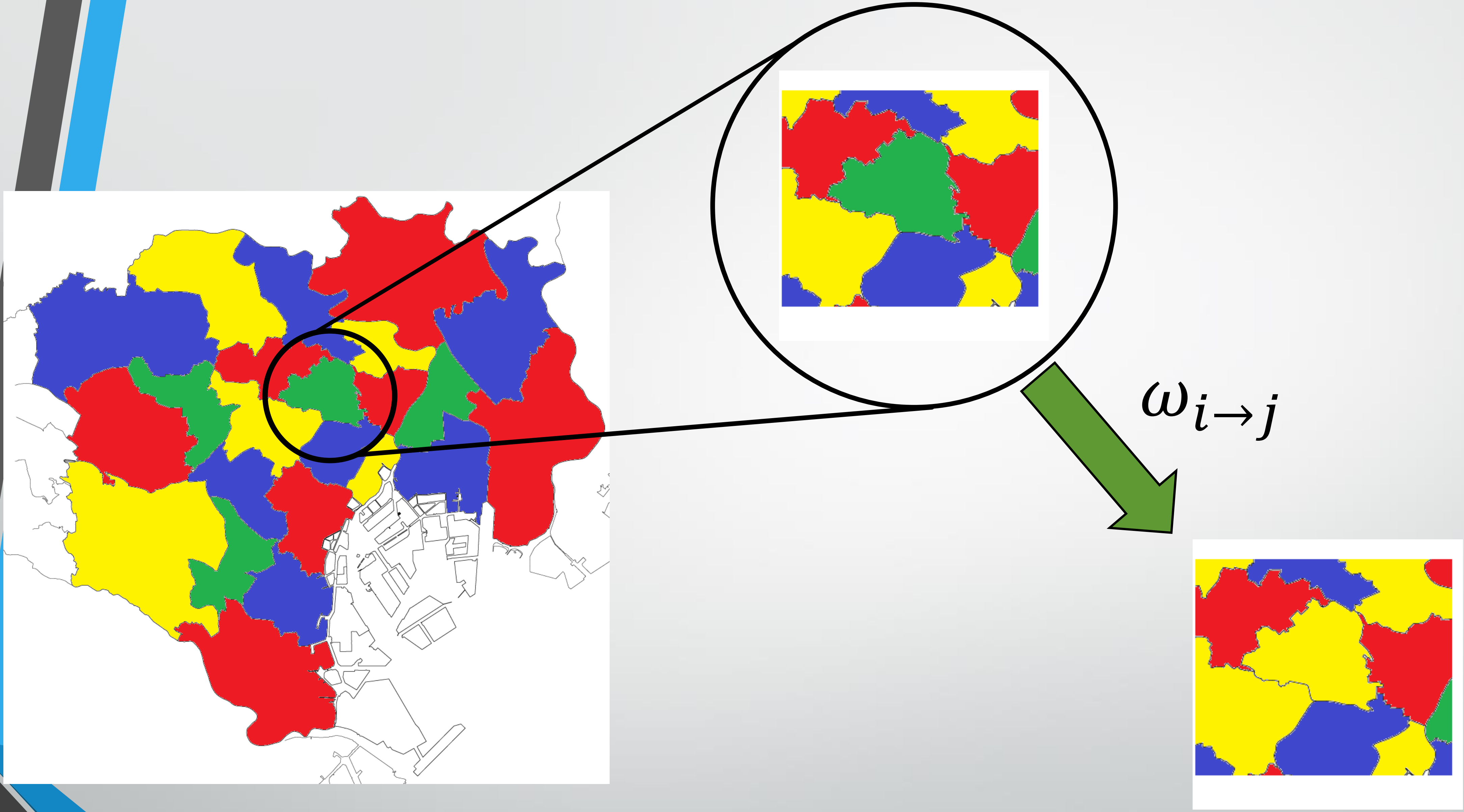
モンテカルロステップ

＜シングルモンテカルロ＞

1,すべてのサイトの中から、フリップさせる一つを決める

2,フリップ先の値を決める

3,0～1の範囲で乱数を発生させ、その値が遷移確率$\omega_{(\sigma_i \to \sigma_j)}$より小さければフリップ


$\omega_{i \to j}$

マルコフ鎖とマスター方程式

$P(s_i, t)$：時刻tでの状態s_iの出現確率

$\mathbb{P}(t)$: $\mathrm{P}(\mathrm{s_i}, \mathrm{t})$を$s_i$について縦に並べた行列

$\omega_{i\to j}$：s_iからs_jへの単位時間当たりの遷移確率

$$P(s_i, t+\Delta t) = -\Sigma_{j\neq i} P(s_i, t)\omega_{i\to j}\Delta t + \Sigma_{j\neq i} P\left(s_j, t\right)\omega_{j\to i}\Delta t + P(s_i, t)$$

これを行列で表すと

$$\underline{\mathbb{P}(t+\Delta t) = \mathbb{A}\mathbb{P}(t)}$$

ここで、$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1M} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{M1} & \cdots & a_{MM} \end{pmatrix}$であり、

$$a_{ij} = \omega_{j\to i}\Delta t$$

$$a_{ii} = 1 - \Sigma_{j\neq i}\,\omega_{i\to j}\Delta t$$

ここで、時間tは離散的に変化するとして$\Delta t = 1$とする。

$$\underline{\mathbb{P}(t+1) = \mathbb{A}\mathbb{P}(t)}$$

十分大きなnに対して任意の初期分布$\mathbb{P}(0)$は定常分布$\mathbb{P}_{eq}$へ収束。

$$\underline{\mathbb{A}^n\mathbb{P}(0) \to \mathbb{P}_{eq}}$$

また、

$$\mathbb{A}\mathbb{P}_{eq} = \mathbb{P}_{eq}$$

つまり、

$$\Sigma_j a_{ij} P(j) = P\,(i)$$

$$\Sigma_{i\neq j}\omega_{(i\to j)}P(j) + a_{ii}P(i) = P(i)$$

$$\Sigma_{i\neq j}\omega_{(i\to j)}P(j) + \left(1 - \Sigma_{i\neq j}\omega_{i\to j}\right)P\,(i) = P(i)$$

$$\Sigma_{i\neq j}\left(\omega_{i\to j}P(j) - \omega_{j\to i}P(i)\right) = 0$$

この式を満たす十分条件として

$$\omega_{i\to j}P(j) = \omega_{j\to i}P\,(i)\text{(詳細釣り合い)}$$

ポッツモデルでのモンテカルロ法

- ポッツモデルのハミルトニアンは

$$\varkappa = -J \sum_{<ij>} \delta(\sigma_i, \sigma_j)$$

ここで、i番目の粒子σ_iについて$\sigma_\alpha \to \sigma_\beta$のシングルフリップを考える。

$\sigma_i = \sigma_\alpha$の時の状態をS_i、$\sigma_i = \sigma_\beta$の時の状態をS_jとすると、

詳細釣り合いは

$$\omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)} e^{-\beta \varkappa(S_i)} = \omega_{(\sigma_\beta \to \sigma_\alpha)} e^{-\beta \varkappa(S_j)}$$

$$\frac{\omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)}}{\omega_{(\sigma_\beta \to \sigma_\alpha)}} = e^{-\beta\left(\varkappa(S_j) - \varkappa(S_i)\right)}$$

・詳細釣り合いを満たす遷移確率

1,熱浴法

$$\begin{cases} \omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)} = \dfrac{e^{-\beta\varkappa(S_j)}}{\sum_{S_{j'}} e^{-\beta\varkappa(S_{j'})}} \\ \omega_{(\sigma_\beta \to \sigma_\alpha)} = \dfrac{e^{-\beta\varkappa(S_i)}}{\sum_{S_{j'}} e^{-\beta\varkappa(S_{j'})}} \end{cases}$$

2,メトロポリス法

$$\begin{cases} \omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)} = 1 & \varkappa(S_i) > \varkappa(S_j) \\ \omega_{(\sigma_\beta \to \sigma_\alpha)} = e^{\beta\left(\varkappa(S_j) - \varkappa(S_i)\right)} & \varkappa(S_i) > \varkappa(S_j) \end{cases}$$

- 熱浴法について

$$\omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)} = \frac{e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_j)}}{\Sigma_{S_{j'}} e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_{j'})}}$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_j)}}{e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_1)} + e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_2)} + e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_3)} + e^{-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(S_4)}}$$

$T \to \infty$のとき

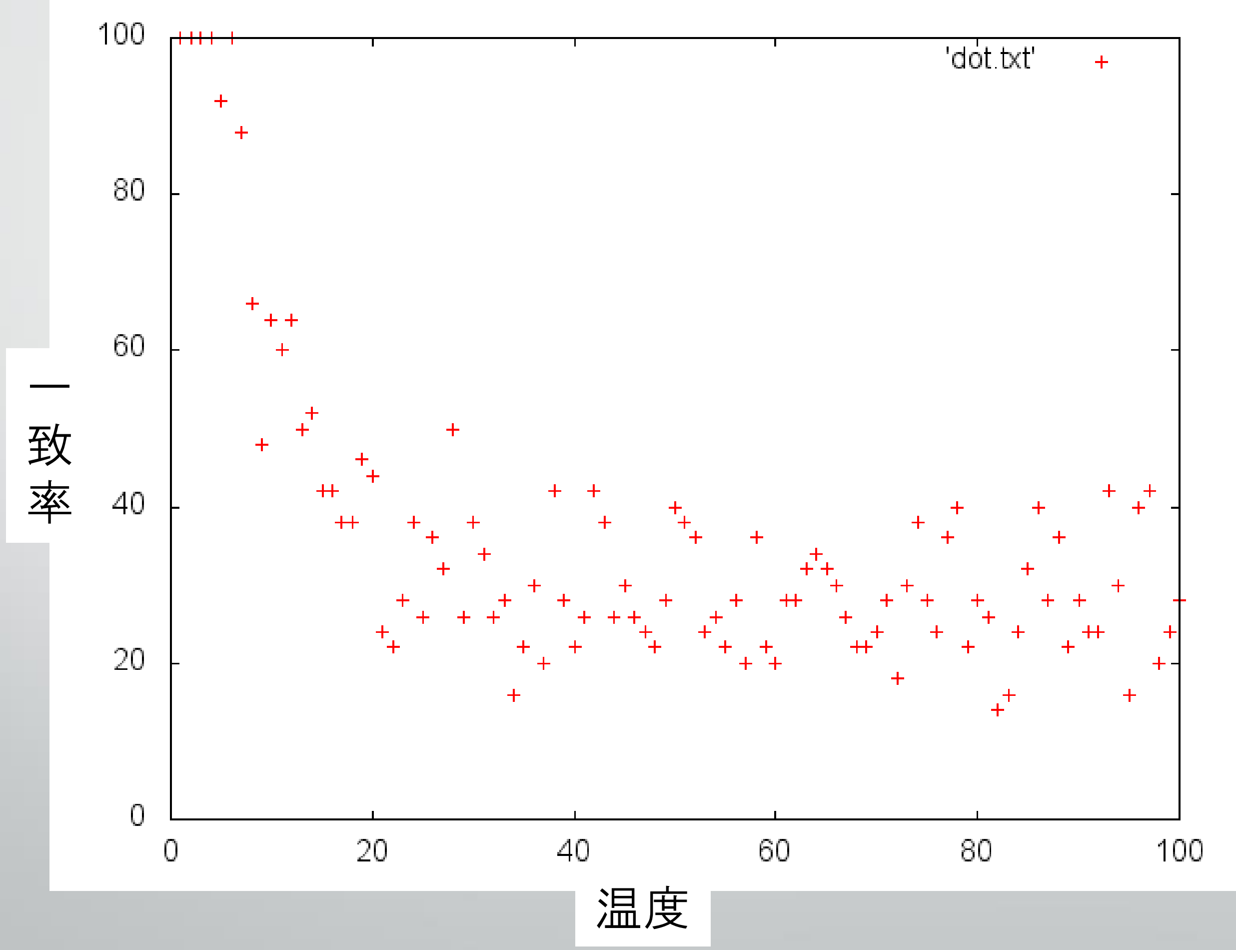
$$\omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)} = \omega_{(\sigma_\beta \to \sigma_\alpha)} = \frac{1}{4}$$

$T \to 0$のとき

$\left|\omega_{(\sigma_\alpha \to \sigma_\beta)} - \omega_{(\sigma_\beta \to \sigma_\alpha)}\right|$の値は十分大きくなり、結果に偏りが発生する。

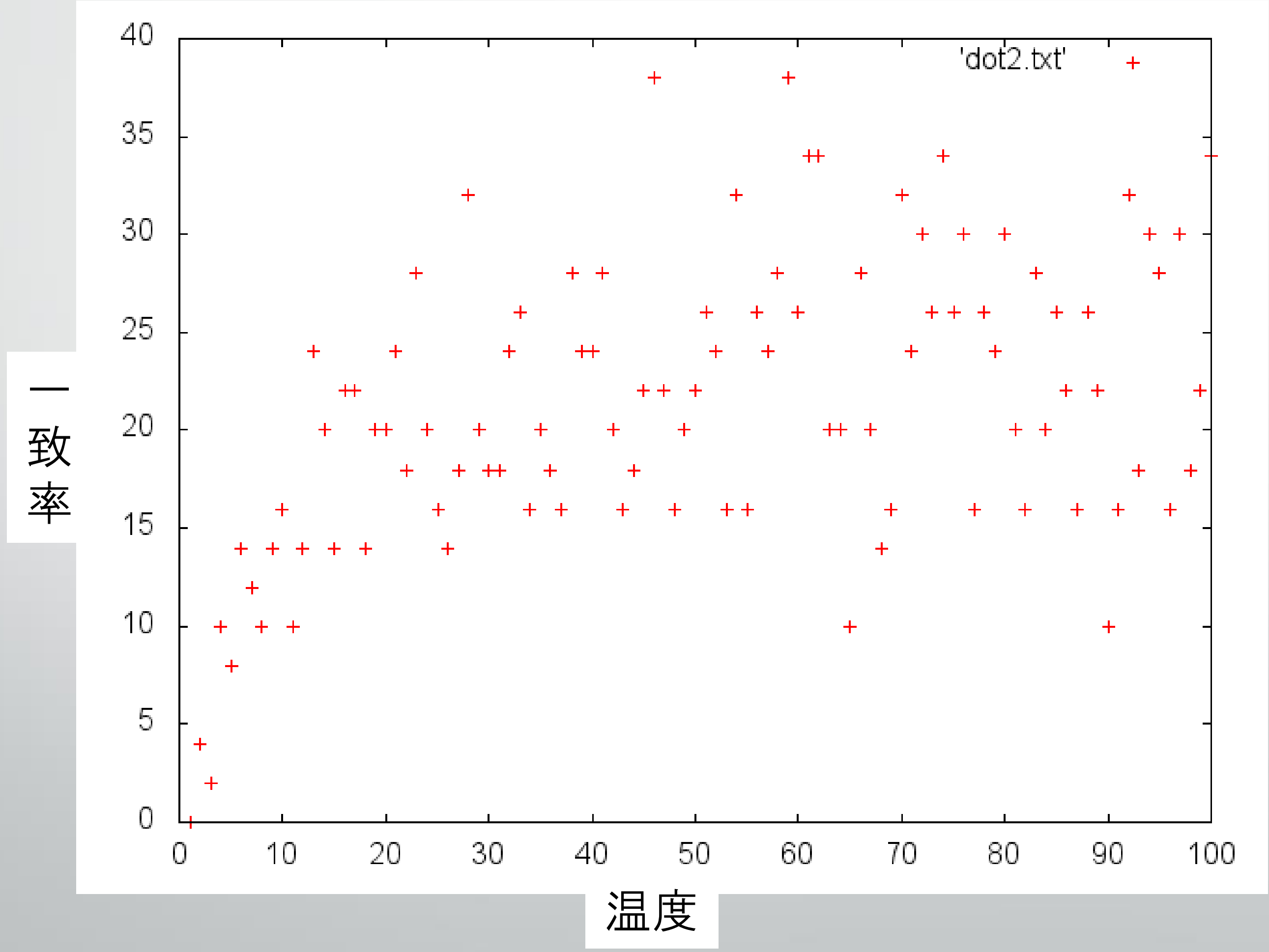
温度と一致率の関係

- $J > 0$の時

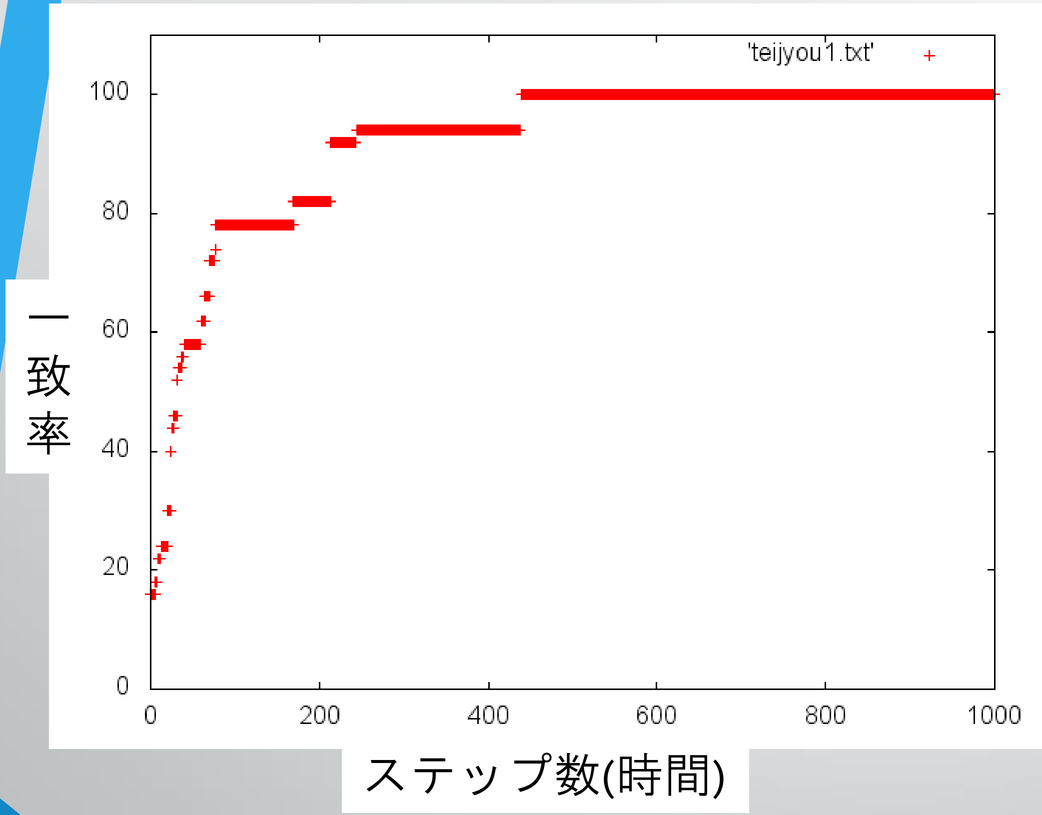


温度と一致率の関係

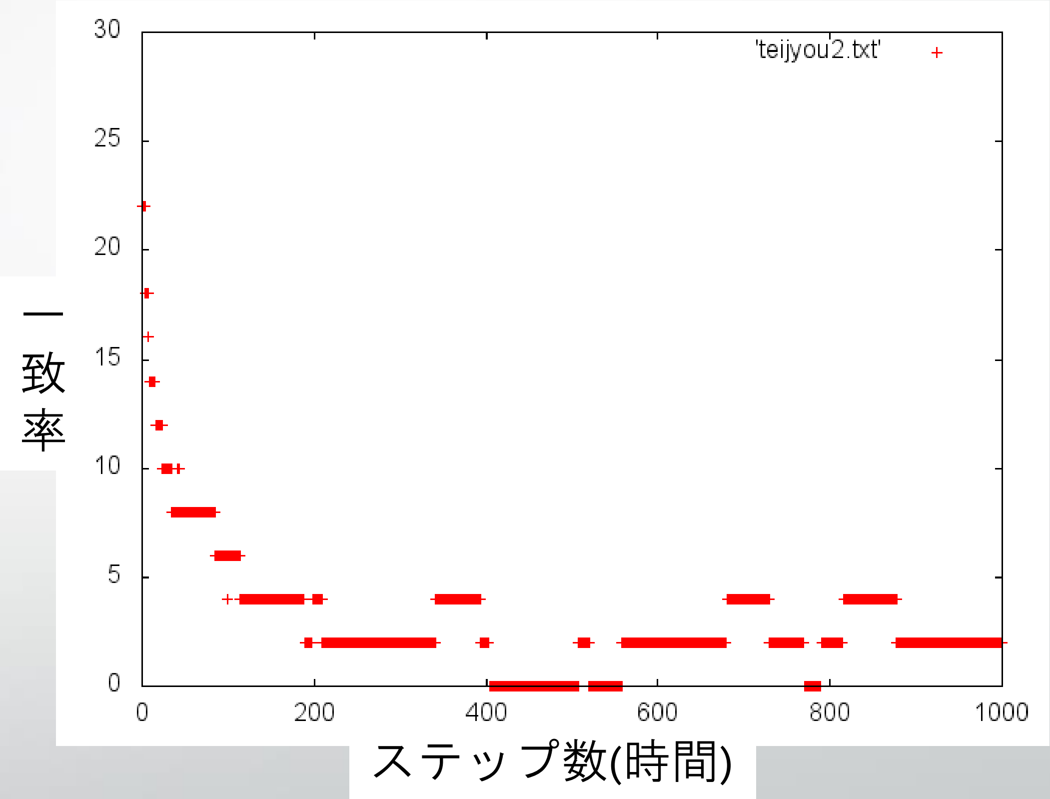
- $J < 0$の時



モンテカルロステップにおける定常分布への移行



$J > 0, T = 1$



$J < 0, T = 1$

残留エントロピー

- 熱力学第三法則

  「絶対零度ではエントロピーは０になる。」

$$S = k_B \log(W)/N$$

$T = 0$のとき$W = 1$より、

$$S(0) = k_B \log(1)/N = 0$$

ポッツモデルではどうか

$J > 0$

$T = 0$のとき、すべてのサイトの色が四色の何れかになる

$$W = 4$$

$$\therefore S = \frac{k_B \log(4)}{23} \approx 8.3 \times 10^{-25} \neq 0$$

$J < 0$

$T = 0$のとき、一致率は0になる

東京23区において、一致率が0になるような組み合わせは193612通り

$$W = 193612$$

$$\therefore S = \frac{k_B \log(193612)}{23} \approx 7.3 \times 10^{-24} \neq 0$$

結果

- 東京23区を4色に塗り分けるプログラムの制作に成功。
- $J > 0$について、秩序相と無秩序相の間での相転移を確認。
- $J < 0$にでは、相転移が存在しないことを確認。
- ポッツモデルの残留エントロピーを確認。

参考文献

Giuseppe Mussardo.(2010) “Statistical Field Theory.”
OXFORD UNIVERSITY PRESS.

宮下精二　「物理学基礎シリーズ４,熱・統計力学」　培風館

四色定理の紹介と五色定理の証明 http://mathtrain.jp/fivecolor

謝辞

本研究を行うにあたり、ご指導をいただいた

中央大学理工学部物理学科数理物理学研究室 教授 香取眞理先生

中央大学理工学部物理学科数理物理学研究室 助教 Andraus Sergio先生

に感謝いたします。

また、多くのご指摘や協力をいただいた数理物理学研究室の皆様に感謝いたします。

ご清聴ありがとうございました。