

シミュレーション物理

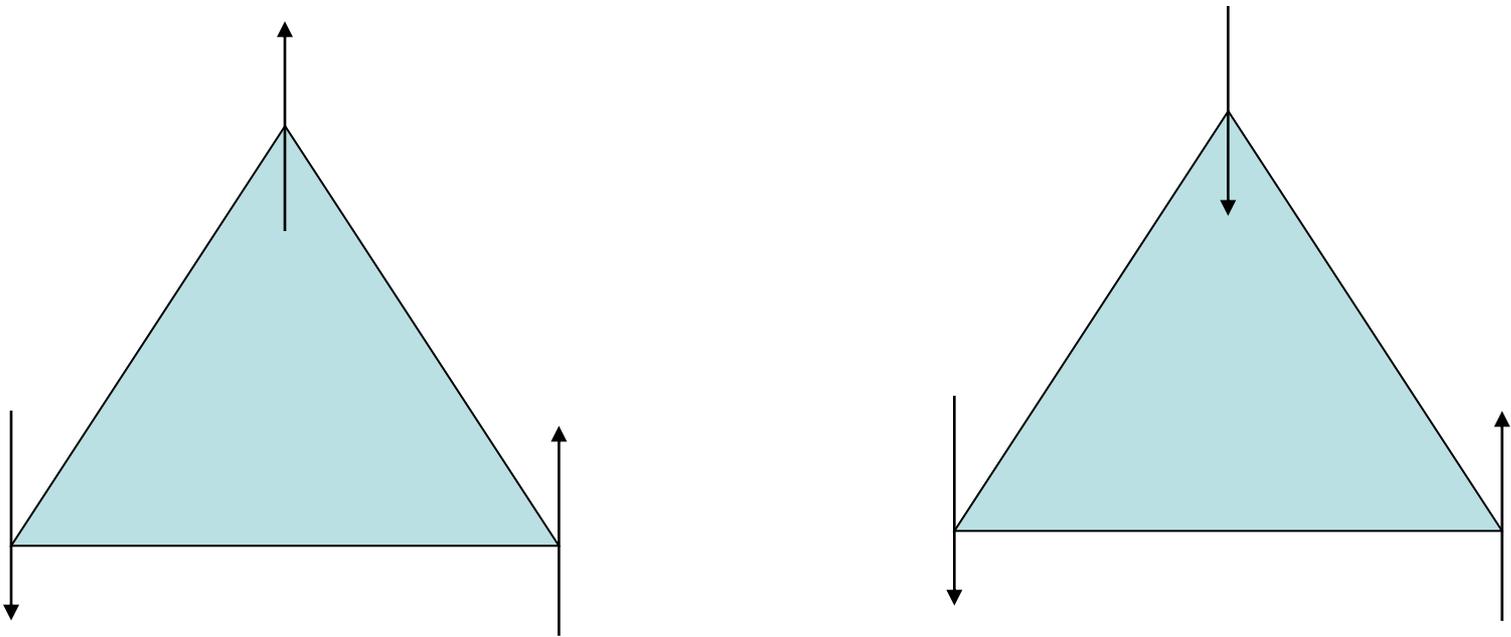
スピニングラスなどについて

強磁性や反強磁性

- 最低エネルギー状態が簡単に分かる。
- 強磁性の場合, すべてのスピンの向き
- 反強磁性の場合, 立方格子の場合, すべてのスピンの互い違いなら最低エネルギー

では三角格子では

- 反強磁性で三角格子の場合，基底状態が必ずしも簡単には分からない。下の二つはおなじエネルギー



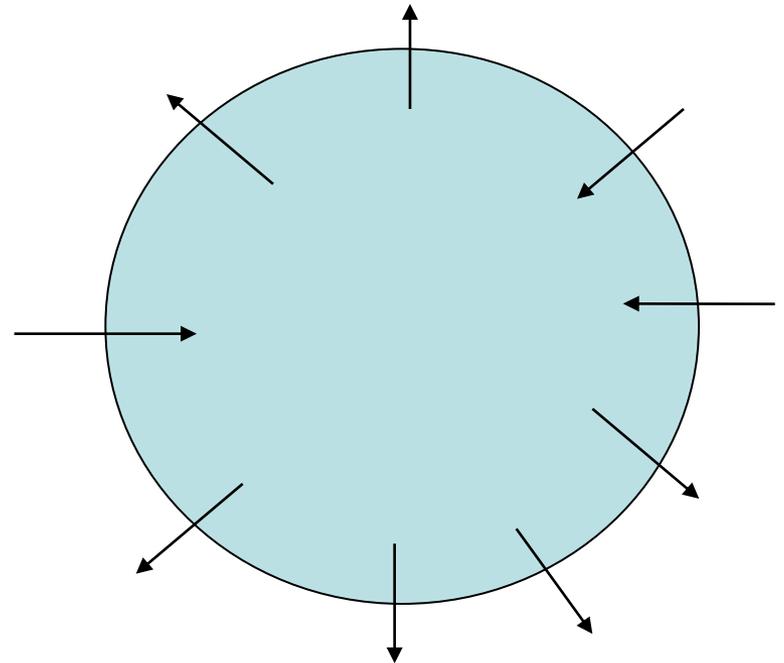
正方格子では起きないか？

- 強磁性と反強磁性がランダムに混じった場合、同じように基底状態が自明ではない
- しらみつぶしに探そうとすると、 $2^{\text{スピン}}$ の数という膨大な場合を調べなければいけない

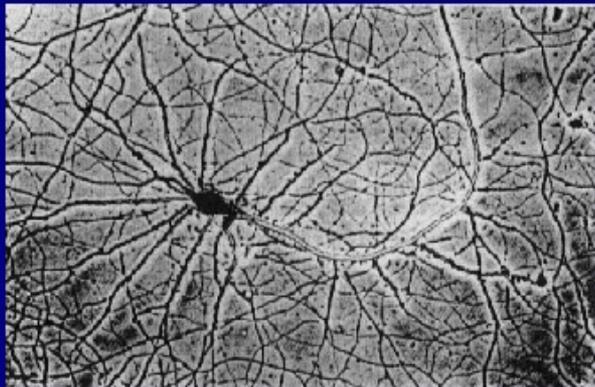
これは特殊な場合か？

- 実際にはこうした競合した系はいくらでもある。
 - ガラス的な構造をもつ固体
 - 利害関係のある経済問題
 - 電車のダイヤグラム
 - 脳の記憶(ニューラルネットワーク)

例：内側を矢印が向いていたら賛成，
外側なら反対。



生物ニューロンの拡大図

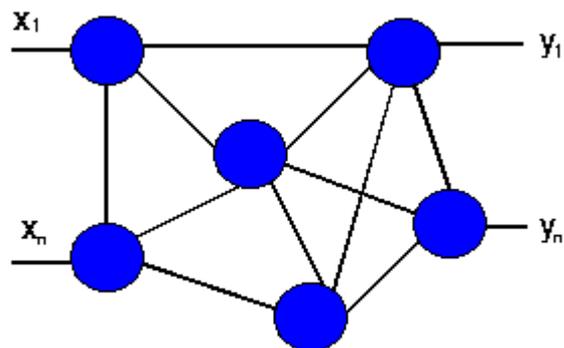
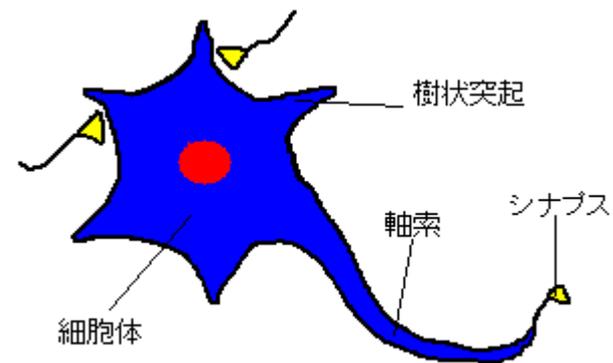


400 倍に拡大した生物ニューロン。手前に樹状突起がある。

(Gary Banker and Aaron Waxman, Univ. of Virginia)

明治大学 阪井和男

4



$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n W_{ij} X_i X_j$$

こうした問題を最適化問題という

- 最適化問題: 場合の数が膨大なため, しらみつぶしは不適當。NP (**Nondeterministic Polynomial**) 問題といわれている。
- どうすればよいか? イジング・モデル, イジング・スピングラスを例にとって調べる。

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{i, j} S_i S_j, J_{i, j} \text{ random, } \pm 1$$

でたらめ法

- スピンをランダムに発生させる
- エネルギーを計算させる
- また, スピンをランダムに発生させる
- もしエネルギーが低ければこれを採用。今までのよりもエネルギーが高いと不採用

効率が悪い

でたらめ法を改良

- エネルギーがある程度低いものがたまたま見つかったら, それをとっておく
- スピンの配置を少しだけ動かす
 - エネルギーが下がれば採用, 上がれば不採用

でたらめ法改良版の欠点

- 実はこれだとすぐに極小値に陥ってしまう
- 本当に欲しいのは極小値でなく, 最小値(最適値)
- そのためには極小値を囲んでいる壁を越えなければならない

ここでは二つの方法を紹介

- シミュレーテッドアニーリング
- 遺伝的アルゴリズム

シミュレーテッドアニーリング

- イジング・モデルのシミュレーション; 自由エネルギー $F = E - TS$ を最小にする。→ 温度を下げていけば基底状態になるはず。
- 高温から始めて, 温度を徐々に下げていく
 - 温度 T で $\{S\}$ を計算, 次にこの $\{S\}$ を初期値として温度 $T - \delta T$ のシミュレーションを行う。これを続けている
 - 物質を高温に熱してから徐々にさますといい物質が出来ることをまねしている

遺伝的アルゴリズム

- 遺伝：親から子どもへ。ある確率で突然変異がおこる。適者生存で進化
- これを応用。
 - でたらめにスピンの配置をたくさん用意する。 $\{S\}_1, \{S\}_2, \{S\}_3, \{S\}_4, \dots \{S\}_{10000}$ くらい
 - ある配置と別の配置を混ぜ合わせる。ある確率でスピンを反転させる(突然変異)。
 - エネルギーが下がったものを残し(適者生存), これらでまた混ぜあわせを行う

参考文献

- スピングラスや最適化問題についてより詳しく勉強したい人は以下の文献が参考になります。
 - スピングラス, 高山一, パリティ物理学コース, 丸善
 - スピングラス理論と情報統計力学, 西森秀稔, 岩波書店

- spinglass.tarをダウンロードして、演算サーバにアップロード
 - => tar xvf spinglass.tar
 - => f90 -c KindNumbers.f90
 - => f90 -c random.f90
 - => f90 -c spinenergy.f90
 - => f90 spinglass.f90 KindNumbers.o random.o spinenergy.o
 - [=>a.out](#)
- これにより、温度を下げていくと系のエネルギーが下がる様子が、energy.txtに出力される。

課題

- スピングラスのプログラムを理解する。
 - 基底エネルギーをシミュレーテッドアニーリングで求める
 - 他に工夫をしてみる。
- 講義全体の課題(プログラムと結果)
 - 円周率, 惑星の軌道
 - 2d , 3d Ising modelの臨界温度を精密に出す
 - 帯磁率の有限サイズスケーリング
 - 最適化したときのエネルギーの値
 - 1月終わりまで