数理工学者・統計学者のための統計物理入門

マルコフ場とメトロポリス的モンテカルロ法を中心にして

Version 1.00

統計数理研究所

伊庭幸人

目次

1 統計力学の基礎概念 **3**

1.1 ギブス分布 . . . 3
1.2 例 . . . 4
1.2.1 ２状態系（イジングスピン） . . . 4
1.2.2 イジング模型 . . . 4
1.2.3 調和振動子とその変形 . . . 5
1.3 熱力学的極限と巨視的変数 . . . 5
1.4 ゆらぎと感受率 . . . 6

2 マルコフ過程と緩和 **7**

2.1 マルコフ過程と定常分布 . . . 7
2.2 例 . . . 8
2.2.1 ２状態遷移模型 . . . 8
2.2.2 メトロポリス法と熱浴法 . . . 9
2.2.3 動的イジング模型 . . . 10
2.3 メトロポリス的なモンテカルロ法 . . . 10

3 相転移 **12**

3.1 ２次元イジング模型の相転移 . . . 12
3.2 相転移とダイナミクス . . . 13
3.3 平均場近似 . . . 13
3.4 １次転移と２次転移 . . . 15
3.5 例 . . . 15
3.5.1 反強磁性イジング模型 . . . 15
3.5.2 ANNNI 模型 . . . 16
3.5.3 ポッツ模型 . . . 16
3.5.4 離散ガウス模型・ＳＯＳ模型 . . . 16
3.5.5 平面回転子模型 . . . 17

4 ランダム系の統計物理 **18**

4.1 ランダム系の物理 . . . 18
4.2 例 . . . 18
4.2.1 スピングラス模型 . . . 18
4.2.2 ランダム磁場模型 . . . 19
4.3 ランダム系の平均場理論 . . . 19
4.3.1 空間ゆらぎを完全に無視した場合 . . . 19
4.3.2 ランダムネスの空間ゆらぎを残した場合 . . . 20
4.3.3 相互作用の範囲を無限大にした場合 . . . 20

1　統計力学の基礎概念

ここでは，熱平衡統計力学の基礎概念といくつかのモデルについて論じる．前者の内容のかなりの部分は，普通の統計学のなかにも指数分布族の理論などの形で含まれていると思われるが，その部分は用語の説明と理解されたい．

以下では，系の内部状態を定めるものに対しても，外から与えるものに対しても「変数（variable）」という言葉を用いた．混乱を避けるために，後者を特に「外部変数（external variable）」と呼ぶことにする．「パラメータ（parameter）」という言葉は，統計との関係を論ずるためにとっておくことにした．

1.1　ギブス分布

平衡統計力学の基礎は，温度 T の熱浴と接触している系が状態 α にある確率 P_α が $\exp(-E_\alpha/T)$ に比例するということにある．ここで E_α は状態 α のエネルギーである．これは，

$$Z = \sum_\alpha \exp(-E_\alpha/T) \tag{1}$$

を用いて，

$$P_\alpha = \frac{\exp(-E_\alpha/T)}{Z} \tag{2}$$

と書くこともできる．これをギブス分布（Gibbs distribution）と呼ぶ．

規格化定数 Z を分配関数（partition function），その対数に温度をかけて負号をつけたもの

$$F = -T\log Z \tag{3}$$

を自由エネルギーという．

温度 T が大きいときはエネルギーの値によらずどの状態もほぼ同じ確率で出現するが，T が小さくなると分布はエネルギーの小さいところに集中する．最低エネルギーの状態（基底状態）がひとつしかない場合，ギブス分布は $T \to 0$ でその上の δ 分布になる．

量 A のギブス分布による期待値を $\langle A\rangle$ と書くと，

$$\langle A\rangle = \frac{\sum_\alpha A_\alpha \exp(-E_\alpha/T)}{\sum_\alpha \exp(-E_\alpha/T)} \tag{4}$$

となる．

外部から操作できる変数 a があって，エネルギーが

$$E_\alpha = E_\alpha^0 - aA_\alpha \tag{5}$$

と書けるとき，変数 A と a は共役（conjugate）であるといわれる（たとえば，このあとの例では磁化を A とすると，磁場が a にあたる）．このとき，(1), (3), (5) の各式より，(4) 式の右辺は自由エネルギー F の微分であらわせて，

$$\langle A\rangle = -\frac{dF}{da} \tag{6}$$

となる．

同様にして，エネルギーの期待値については，逆温度 $\beta = 1/T$ を用いて

$$\langle E\rangle = \frac{d}{d\beta}\left(\frac{F}{T}\right) \tag{7}$$

が成り立つ．

ギブス分布 (2) はたとえば，$\sum_\alpha P_\alpha = 1$ のもとで ，

$$L_g(\{P_\alpha\}) = \sum_\alpha P_\alpha E_\alpha + T\sum_\alpha P_\alpha \log P_\alpha \tag{8}$$

を最小にする分布 $\{P_\alpha\}$ として導くことができる．このとき，L_g の最小値は，自由エネルギー F に一致する．

$$F = L_g\left(\left\{\frac{e^{-E_\alpha/T}}{Z}\right\}\right) \tag{9}$$

統計学と統計物理との関連についてはいろいろな視点から論じられているが，そのなかには，(8) 式に着目するもの（最大エントロピー法）もある．われわれはこれと違って，統計物理を高次元の非ガウス分布を扱う技術および概念の集合体として捉えるので，むしろ (2) 式を出発点と考えることにする．

1.2 例

以下の説明で使うため，典型的な物理系の例をあげる．

1.2.1 2 状態系（イジングスピン）

最も簡単な例として，2 つの状態しかもたない系を考える．一方の状態にいるときのエネルギーを $+1$，もう一方の状態にいるときのエネルギーを -1 としよう．2 つの状態のどちらにいるかを 2 値変数 $S = \pm 1$ であらわすことにすると，エネルギー E は

$$E(S) = -hS \tag{10}$$

とかける．

すると系が $S = +1$ に存在する確率 $P(1)$ と $S = -1$ に存在する確率 $P(-1)$ は $\exp(h/T)$ 対 $\exp(-h/T)$ であり，

$$Z = \exp(h/T) + \exp(-h/T) \tag{11}$$

$$P(1) = \frac{\exp(h/T)}{\exp(h/T) + \exp(-h/T)} \tag{12}$$

$$P(-1) = \frac{\exp(-h/T)}{\exp(h/T) + \exp(-h/T)} \tag{13}$$

となる．

このような 2 状態系のことをイジングスピン（Ising spin）と呼ぶことがある（3 状態以上の以上のときはポッツスピン（Potts spin）という）．スピンという名は磁性理論に由来するが，本論文の範囲では単に局所的変数という意味と考えて良い．イジングやポッツは人名である．なお，磁性理論では h が磁場（magnetic field）にあたり，$p(1) - p(-1)$ が磁化（magnetization）に当たる．

1.2.2 イジング模型

こんどは，多数の 2 状態系 $\{S_i\}$ が大きさ $L \times L$ の正方格子上に配列している系を考えよう．i でラベルされた格子点の上に，$S_i = +1$ ならば黒い碁石が，$S_i = -1$ の時白い碁石が，それぞれのっていると考えればよい（図 1）．

2 状態系の間に相互作用が無ければ，この系は単に多数のイジングスピンをよせ集めたのと変わらない．そこで，スピン間に相互作用のあるモデルのうち最も簡単なものとして，各スピンが隣接する 4 個とのみ相互作用し，相互作用の形が格子上の位置によらないモデルを考えよう．

エネルギーを式で書くと，

$$E(\{S_i\}) = -J \sum_{nn} S_i S_j - h \sum_i S_i \tag{14}$$

となる．$\sum_{nn}$ は正方格子上で隣接する (i, j) 対に関する和を表わす．このモデルをイジング模型，正確には 2 次元正方格子上の最隣接相互作用のイジング模型と呼ぶ．

ここで境界条件が問題になるが，単純に打ち切る（自由境界条件），周囲のスピンを固定する（固定境界条件），上下左右をつなげてトーラス状にする（周期境界条件）などいくつかの決め方が可能で，目的によって使い分ける．以下，本稿では特に問題になる場合のみ境界条件について触れる．

このエネルギーから導かれるギブス分布は，

$$P(\{S_i\}) = \frac{\exp(-\frac{J}{T}\sum_{nn} S_i S_j - \frac{h}{T}\sum_i S_i)}{Z} \tag{15}$$

$$Z = \sum_{config.} \exp(-\frac{J}{T}\sum_{nn} S_i S_j - \frac{h}{T}\sum_i S_i) \tag{16}$$

となる．ここで，$\sum_{config.}$ は可能な 2^{L^2} 個の $\{S_i\}$ に関する和を意味するものとする．

分配関数 Z の計算はこの場合極めて難しくなる．このような系を調べるひとつの方法は，乱数を使ったシミュレーションである．その方法については 2節 で扱う．また，さまざまな近似解法も知られている．そのうち，もっとも簡単な近似法である平均場近似については 3節 で触れる．

なお，(15,16) 式のモデルで $h = 0$ の場合については，非常に巧妙な方法を用いて $L \to \infty$ の極限での $\log Z$ の漸近形を評価することができる．このような「厳密解」は非常に特別な場合にしか得られないが，相転移の研究などでは重要な役割を演じてきた．

格子上の確率場で，各格子点に場所によらない一定の近傍が定まっていて，ある変数がとる値の確率分布がその近傍の変数の値を固定すれば決まるものを，一般にマルコフ場と呼ぶ．正方格子上の最隣接相互作用をするイジング模型はその最も簡単な例である．マルコフ場の条件は統計物理の言葉でいえば相互作用が局所的で，エネルギーが局所的なものの和でかけることを意味している．

1.2.3 調和振動子とその変形

連続変数のモデルの内でもっとも簡単なものは，調和振動子の集まりである．

1 個の調和振動子に関しては，

$$E = \frac{J}{2}x^2 \tag{17}$$

となる．但し運動エネルギーの部分は無視してある．

沢山の質点を，ばねで鎖あるいは網状に結び合わせたものについては，やはり，運動エネルギーの部分を無視すると，

$$E = \frac{J}{2}\sum_{nn}(x_i - x_j)^2 \tag{18}$$

となる．

なお，ベイズ統計に良く出てくる滑らかさを表わす事前分布に対応するエネルギーは，もうひとつ高階の差分を考えたもので，鎖の場合でいえば，

$$E = \frac{J}{2}\sum_{i}(x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1})^2 \tag{19}$$

の形のものである．

これらのエネルギーはすべて x_i の 2 次形式なので，生成されるギブス分布は高次元のガウス分布になり，いろいろな量をたやすく計算することができる．

連続モデルと離散モデルの関係について考えるために (18) 式のモデルを変形して，

$$E = \frac{J}{2}\sum_{nn}(x_i - x_j)^2 + \sum_{i} f(x_i) \tag{20}$$

$$f(x_i) = -2Jx_i^2 + \lambda(x_i^2 - 1)^2 \tag{21}$$

というモデルを考えてみる．

このモデルは 4 次の非線型項を含んでいるので，ϕ^4 モデルともいわれるが，イジング模型はここで非線型性を強くした極限 ($\lambda \to \infty$) に相当している．イジング模型はエネルギーに S_i の 2 次の項しか含んでいないが，連続モデルの極限としてみれば，非ガウス性の非常に強い場合にあたっていることが分かる．

1.3 熱力学的極限と巨視的変数

統計物理では，系の大きさが大きい極限での性質を問題にすることが多い．これを熱力学的極限と呼ぶ．

もっとも簡単な例として，相互作用のないイジングスピンの集まり $\{S_i\}$ を考える．この場合，系の大きい極限とはスピンの数 $N \to \infty$ を意味している．物理量として，1 スピンあたりの磁化 $m = (1/N)\sum_i S_i$ を考えると，(12)，(13) 式から，

$$\langle m \rangle = \tanh(h/T) \tag{22}$$

となる．ここで，$\langle\ \rangle$ はギブス分布による期待値を表わす．また，2 項分布の分散の公式から，ゆらぎは

$$\sqrt{\langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle} = 2\sqrt{\frac{p(1)p(-1)}{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\frac{1}{\sqrt{\cosh^2(h)}} \tag{23}$$

と表わせる．

N が小さいときでもこれらの式は意味をもつが，その場合には，(22) 式の左辺はあくまで期待値として意味を持つにすぎない．これに対して，N が非常に大きい場合，m のゆらぎは $\sqrt{1/N}$ のオーダーになるので，m はほぼ確定値をとることになる．このような場合に m は巨視的な変数 (マクロな変数) であるという．これに対して，ひとつひとつのスピンは微視的な変数 (ミクロな変数) である．

独立な系の集まり以外でも，同様にして熱力学的極限，巨視的変数の概念を定義できる．たとえば，2 次元イジング模型の場合，$N = L^2$ として $N \to \infty$ を考えればよい．この場合，1 スピンあたりの磁化のゆらぎが漸近的に

$1/\sqrt{N}$ に比例することは自明でないが，もし格子上で十分離れた場所のスピンがほぼ独立と見なせるなら，成り立つと考えられる（中心極限定理）．

相転移がある場合は若干複雑になるが，普通の相転移の場合は境界条件などに注意すれば，「秩序相」でもこのことは成立する．ただし，ちょうど（2次）相転移のおこる点だけは例外である．この場合も熱力学極限，巨視的変数は定義できるが，その分布は漸近的にガウス分布に近付かず，ゆらぎの減少のしかたも $1/\sqrt{N}$ にならない（中心極限定理の不成立）．これについては，相転移のところでまた触れる．

ガウス分布をする N 次元の変数 $\{X_i\}(i = 1..N)$ については，X_i の期待値 $\langle X_i \rangle$ と N 次元空間での確率分布の最頻値（モード）を与える $\{X_i\}$（以下 $\{X_i^{opt.}\}$ とする）が一致する．したがって，$(1/N)\sum_i X_i$ のような量が巨視的変数と見なせるときは，これを $(1/N)\sum_i X_i^{opt.}$ でおきかえてもよい．

しかし，これはガウス分布の特別な性質で一般には成り立たないことに注意すべきである．たとえば，相互作用のないイジングスピンの集まりの場合，$h/T > 0$ がどんなに小さくても，最頻値 $\{S_i^{opt.}\}$ は $\{\forall i S_i = 1\}$ になる．この状態の1スピン当り磁化は1で，もちろん（22）式で与えられる値とは一致しない．

1.4 ゆらぎと感受率

変数 A が，それと共役な外部変数 a を変化させたときどう変わるかを考えてみる．これは（4），（5）式よりすぐ計算できて，

$$\frac{d\langle A \rangle}{da} = \frac{1}{T}(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \geq 0 \tag{24}$$

となる．

（24）式は系に外場をかけた時の感受率（左辺）をゆらぎ（右辺）で表わす式と解釈できる．これはいわゆる線型応答理論のもっとも簡単な例になっている．シミュレーションの場合，左辺を計算するためには，a をいろいろ変化させて数値微分を行う必要があるが，右辺はその必要がなく便利である．

なお，（24）式の右辺がつねに非負であることを用いると，（6）式より，自由エネルギーの凸性

$$\frac{d^2 F}{da^2} \leq 0 \tag{25}$$

がいえる．

相互作用のないイジングスピンの場合，（24）式が成り立っていることは，（22），（23）式から，$(\tanh(x))' = 1/\cosh^2(x)$ より，すぐにわかる．

2　マルコフ過程と緩和

以上述べた範囲（熱平衡統計力学）では，どのようにしてギブス分布が実現され，維持されるかというダイナミカルな側面には全く触れなかった．この節ではそれを考えよう．

統計的情報処理の問題ではもっぱら確率分布を扱うのでダイナミクスは関係ないように思われる．しかし，高次元で非ガウスの分布をどう計算するかというところまで考えると，ダイナミクスの考察は大変重要なことがわかる．

マルコフ過程に関する一般論は統計物理に固有の内容とはいえないが，系を大きくしたときの緩和時間の漸近形などは，物理で特によく調べられている．また，統計物理で発達した手法であるメトロポリス的なモンテカルロ法は，本論文の内容からみてとくに重要なので，詳細に説明した．

2.1　マルコフ過程と定常分布

物理の問題としては，系のダイナミクスは決定論的な力学（ニュートンの運動方程式あるいはシュレディンガー方程式）から導かれるべきものであるが，普通これは難しい．実際の問題を扱うのに有効な立場のひとつは，はじめから確率を含んだ過程（粗視化された過程）から出発することである．この場合，状態 $\{\alpha\}$ とその間の遷移確率 $\{W(\alpha \to \beta)\}$ を与えることによって決まるマルコフ過程を用いたモデルが重要な手段になる．

定常分布がギブス分布 $\{P_\alpha^\infty\} = \{\frac{\exp(-E_\alpha/T)}{Z}\}$ になるようなマルコフ過程を作るには，$\{W(\alpha \to \beta)\}$ を次の条件（詳細釣合条件）をみたすように定めればよい．

$$P_\alpha^\infty W(\alpha \to \beta) = P_\beta^\infty W(\beta \to \alpha) \tag{26}$$

有限系の場合，(26) のほかに，$W(\alpha \to \beta) \neq 0$ なる (α, β) を結んだグラフが連結であるなどの条件（あとの注参照）がみたされれば，定常分布が唯一に定まり，$\{P_\alpha^\infty\}$ に一致することが示せる．

(26) 式は，

$$\frac{P_\alpha^\infty}{P_\beta^\infty} = \frac{W(\beta \to \alpha)}{W(\alpha \to \beta)} \tag{27}$$

とも書けるが，これだけからは $\{W(\alpha \to \beta)\}$ は一意には定まらない．

そこで，可能な W の中から物理的に自然なものを選ぶわけであるが，状態を定義する変数のうち同時に変化するのは 1 つもしくは少数のみとするのが普通である（局所的なダイナミクス）．W でいえば，$W(\alpha \to \beta)$ のうちほとんどを零とし，状態 α と β が「近い」ごく少数のもののみを非零とするわけである．具体的な例はあとに示す．

なお，(27) 式の左辺が比の形になっているために，遷移確率の表式は計算の難しい分配関数 Z を含む必要がないことを注意しておく．計算技術としてマルコフ過程が有効なのはこのおかげである．

マルコフ過程で重要なのは，緩和（relaxation）の概念である．以下，W は単位時間の遷移確率として連続時間モデルで考えるが，本質的には離散時間でも同じである．適当な初期分布 P_α^0 から出発して，t 時間後に状態 α にいる確率を P_α^t とすると，これは

$$\frac{dP_\alpha^t}{dt} = \sum_\beta P_\beta^t W(\beta \to \alpha) - P_\alpha^t \sum_\gamma W(\alpha \to \gamma) \tag{28}$$

をみたす．リウビル演算子 L を

$$L_{\alpha\beta} = W(\beta \to \alpha) - \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma W(\alpha \to \gamma) \tag{29}$$

と定義すれば，(29) 式は

$$\frac{dP(t)}{dt} = LP(t) \tag{30}$$

と書ける．ただし，$P(t)$は各状態に系が存在する確率を成分とするベクトル$\{P_\alpha^t\}$ をあらわす．

この解は L の固有値 $\{\lambda_i\}$ と対応する固有ベクトル $\{V_i\}$ によって定まり，

$$P(t) = P^\infty + \sum_{i=1,2\ldots} a_i V_i \exp(\lambda_i t) \tag{31}$$

となる（$\{a_i\}$ は初期状態に依存する定数）．

ここで，$\{\lambda_i\}$ のなかで最大のものはギブス分布 P^∞ を固有ベクトルとして持つ $\lambda_0 = 0$ である．また，詳細釣合の条件などを考慮すると，λ_0 以外の $\{\lambda_i\}$ はすべて負の実数であることがわかる（あとの注参照）．これは，定常分布が一意で，ギブス分布になることの数学的表現になっている．

そこで，緩和時間スペクトル $\{\tau_i\} = \{-1/\lambda_i\}$ を定義すると，$\{\tau_i\}$ はすべて正の実数で，大ざっぱにいえば，そのうち最大のもの τ_1 が系が記憶を失う（緩和する）時間を決める．これは，系の状態がマルコフ過程に従って変化するとき，初期状態から τ_1 以上時間がたったのちに，τ_1 より十分大きい時間間隔でサンプルをぬきだせば，これらは定常分布（ここではギブス分布）からランダムに選んだものと見なせるということを意味している．

巨視的変数は，初期状態から τ_1 のオーダーの時間で偏りがなくなり，そのあとギブス分布での期待値のまわりで小さな振幅で揺らぐ（系に対称性がある場合は，巨視的変数の対称性によって，τ_1 以外の τ_i が効くこともある）．

$\{\lambda_i\}$ の性質は次のようにして分かる．

まず $\exp(tL)$ が確率行列であることと遷移のグラフの連結性から，$\exp(tL)$ の固有値は絶対値が 1 以下の複素数であり，特に定常状態に対応する $\exp(\lambda_0 t) = 1$ は単純根である．そこで，リウビル演算子 L の固有値 $\{\lambda_i\}$ は，$\lambda_0 = 0$ を除いてすべて実部が負になる．

詳細釣合の式（26）は確率ベクトルの空間に定義された内積

$$(P, Q)_G = \sum_\alpha P_\alpha Q_\alpha \exp(E_\alpha/T) \tag{32}$$

のもとで，L がエルミートであることを示している．そこで，これがみたされる場合は，$\{\lambda_i\}$ はすべて実数であることがわかる．これは物理的には，詳細釣合条件をみたす系の緩和は振動的ではありえないことを意味する．

離散時間の場合もほとんど同じ議論ができるが，周期 2 の振動的な緩和が原理的にはありうる．また，定常状態の一意性をいうためには付加的な条件がいる．たとえば，最低 1 つの α について $W(\alpha \to \alpha) \neq 0$ となれば十分である．以下であげる例はすべてこの条件を満たしている．まったく条件なしでは，詳細釣合の条件のもとでも周期 2 の非減衰振動がおこりうる．

次に，系の大きさ N を変えたとき，緩和時間がどう変わるかを考える．以下では，局所的なダイナミクスを仮定し，系の大きさを変えた時に単位時間の遷移確率が，物理現象として自然なようにスケールされるものとする．単位時間の遷移確率の定義によっては，以下の τ_1 は τ_1/N に読みかえなくてはならない．この違いは，離散時間の場合には，マルコフ過程のステップ数を N で割ったものと割らないものの違いに対応している．あとで述べるモンテカルロ法では前者をモンテカルロステップ数（MCS），後者をスピンフリップ数または試行回数として区別している．

普通，系の大きさ N が大きくなると，系のとりうる状態の数（あるいは状態空間の体積）は N の指数関数で増えるが，緩和時間は指数関数的に増えるとは限らない．これは系の各部分がすべて密接に関連しているとは限らないためである．たとえば，格子上のモデルの場合，ある程度以上はなれた部分の相関は指数関数的に失われるのが普通である．このような場合，格子の 1 辺の大きさ L（$N = L^d$，d は次元）が相関距離以上になると，

$$\tau_1 \sim const. \tag{33}$$

となると思われる．

格子上のモデルでも例外的な場合には，もっと緩和が遅いことがある．たとえば，あとでででてくる正方格子上の動的イジング模型（磁場なし，固定境界条件）の場合，「無秩序相」では（33）式のようになるが，相転移点直上および「秩序相」では，

$$\tau_1 \sim L^z \tag{34}$$

のようになる．べき z は前者では $z = 2.13..$，後者では $z = 2$ となると信じられている．

さらに遅い場合としては，

$$\tau_1 \sim \exp(L^z) \tag{35}$$

も考えられる．このような場合の例はあとで示そう．

スピンがネットワーク上に配置されているモデルのように，要素同士が「ほぼ全部つながっている」モデルの場合も，多くの場合，全部の状態をまわるのに要する時間より局所的なダイナミクスのもとでの緩和時間の方がはるかに短い．これはやはり，必ずしもすべての要素が強く相関しているわけではないからである．

2.2 例

2.2.1 2 状態遷移模型

もっとも簡単な場合として，1 個のイジングスピンを考えよう．ギブス分布（13），（14）を実現するためのひとつの方法は，

$$W(+1 \to -1) = \exp(-2h/T) \tag{36}$$

$$W(+1 \to +1) = 1 - \exp(-2h/T) \tag{37}$$

$$W(-1 \to +1) = 1 \tag{38}$$

$$W(-1 \to -1) = 0 \tag{39}$$

とすることである（$h > 0$ の場合）．これが（13），（14）の分布に関して詳細釣合の条件（26）をみたしていることはすぐわかる．W の別の選びかたとしては，

$$W(+1 \to -1) = \frac{\exp(-2h/T)}{1 + \exp(-2h/T)} \tag{40}$$

$$W(+1 \to +1) = \frac{\exp(+2h/T)}{1 + \exp(+2h/T)} \tag{41}$$

$$W(-1 \to +1) = \frac{\exp(+2h/T)}{1 + \exp(+2h/T)} \tag{42}$$

$$W(-1 \to -1) = \frac{\exp(-2h/T)}{1 + \exp(-2h/T)} \tag{43}$$

というのも可能である．

2.2.2 メトロポリス法と熱浴法

1個のイジングスピンの場合を一般化すると，ギブス分布を定常分布として持つマルコフ過程の簡単な作り方として，次の2つが考えられる．

いずれの場合も，遷移のグラフが連結であるのに必要なだけ多くの $\alpha \to \beta$ について $W(\alpha \to \beta) \neq 0$ としなければならない．また，$W(\alpha \to \beta) = 0$ のときはかならず，$W(\beta \to \alpha) = 0$ としなければならない．

- 方法A（狭義のメトロポリス法）
  $W(\alpha \to \beta) \neq 0$ で $\alpha \neq \beta$ のとき $W(\alpha \to \beta)$ を

  if $\triangle E_{\alpha\beta} \leq 0$

  $$W(\alpha \to \beta) = \frac{1}{K} \tag{44}$$

  if $\triangle E_{\alpha\beta} > 0$

  $$W(\alpha \to \beta) = \frac{1}{K} \exp(-\triangle E_{\alpha\beta}/T) \tag{45}$$

  のように決める．ただし，

  $$\triangle E_{\alpha\beta} = E_\beta - E_\alpha \tag{46}$$

  である．K は定数．

  K と $W(\alpha \to \alpha)$ は，離散時間の場合，確率の和が1になるようにとる．

- 方法B（熱浴法）
  $W(\alpha \to \beta) \neq 0$ のとき $W(\alpha \to \beta)$ を

  $$W(\alpha \to \beta) = \frac{1}{K} \quad \frac{\exp(-\triangle E_{\alpha\beta}/T)}{1 + \exp(-\triangle E_{\alpha\beta}/T)} \tag{47}$$

  のように決める．ここで $\triangle E_{\alpha\beta}$，$K$ の意味はAの場合と同じ．

  この場合，Aの場合とことなり，行先 β をいったん決めたら自分が α，β のどちらにいるかは忘れて，あらためて α と β の内から次の状態を選ぶとも見られる（式40と式43，式41と式42を参照）．

なお，メトロポリス法（Metropolis algorithm），熱浴法（heat bath algorithm）というのは，これらのダイナミクスをシミュレーションの方法として使った場合の名称である（（2.3）節で説明する）．

2.2.3 動的イジング模型

正方格子上のイジング模型の場合，いちばん簡単なダイナミクスの入れ方は状態 α ， β がひとつのスピンを除いて一致する場合以外は $W(\alpha \to \beta) = 0$ とすることである (1 spin flip) ．

この場合， $\alpha = \{S_i^\alpha\}$ とし， α ， β で違っているスピンを S_x とすると，

$$\triangle E_{\alpha\beta} = -2JS_x^\alpha \sum_{j \in nn(x)} S_j^\alpha \tag{48}$$

とかける．ただし， $nn(x)$ は x の 4 個の隣接格子点を表わす．

これを用いて，メトロポリス法あるいは熱浴法のダイナミクスを構成することができる．それらを離散時間の場合について手続き的に説明しよう．

- 狭義のメトロポリス法

  1. 乱数を用いてスピンを選ぶ．
  2. そのスピンが符号を変えたとき増えるエネルギー $\triangle E$ を
     (48) 式から計算する．
  3. (0,1) の一様乱数 RND を発生し，
     $RND < \exp(-\triangle E/T)$ なら，
     注目しているスピンの符号を反転する．

  これを繰り返す．

- 熱浴法

  1. 乱数を用いてスピンを選ぶ．
  2. そのスピンが $+1$ のときと -1 のときのエネルギー差 $\tilde{\triangle E}$ を (48) 式から計算する．
  3. (0,1) の一様乱数 RND を発生し，
     $RND < \exp(-\tilde{\triangle E}/T)/(1 + \exp(-\tilde{\triangle E}/T))$ なら ，
     注目しているスピンを $+1$ で，
     そうでなければ -1 で置き換える．

  これを繰り返す．

なお，前にイジング模型はマルコフ場モデルの一種だと書いたが，これは，格子上の確率場の空間的性質について述べたものであり，ここで論じているマルコフ過程は時間方向の性質なので，混同してはならない．

2.3 メトロポリス的なモンテカルロ法

統計物理のモデルで生成されるギブス分布の性質を明らかにするための方法として，定常分布がギブス分布になるマルコフ過程を乱数を用いてシュミレートするのは極めて有効な手段である．

これは，いわゆる inportance sampling を用いたモンテカルロ法の一種とも考えられるが，規格化された分布が近似的にわかっていなくても使えるという点に特長がある．高次元になってくると，よい重み関数をあらかじめ知ることは非常に難しい．

この方法は，普通，モンテカルロ法とかメトロポリス法とか呼ばれているが，前者では意味が広すぎるし，後者は逆に特定の種類のダイナミクスを指すことがあるので，本論文ではメトロポリス的なモンテカルロ法と呼ぶことにする．

メトロポリス的なモンテカルロ法では，緩和時間より長い間隔で抜き出したサンプルが，ギブス分布からのランダムサンプルと見なせることを利用して，任意の量の期待値，周辺分布を計算するわけであるが，これには弱点があって，分配関数や自由エネルギーはもともと期待値の形に書かれていないので直接計算できない．

これを計算するもっとも簡単な方法のひとつは，(7) 式を用いて，

$$\frac{F(T)}{T} = (\frac{F}{T})_{T=\infty} + \int_0^{1/T} \langle E(T') \rangle d(\frac{1}{T'}) \tag{49}$$

とし，各 T での $\langle E(T) \rangle$ の計算に帰着させることである．大部分のモデルで，$(F/T)_{T=\infty}$ は簡単に計算できる．

以下では一般の場合に役立つ注意をいくつか述べる．

1. メトロポリス的な方法は，

   (a) 動かすことを試みるスピン (変数) を選ぶ．

   (b) どう動かすかを決める．

   (c) 動かした場合のエネルギーの変化から動かす確率を計算する．

   (d) 乱数で実際に動かすかどうか決める．

   の各ステップからなっている．

   動的イジング模型の場合は，スピンが 2 状態しかなかったので，(c) の段階がなかったが，スピンが 3 つ以上の値を持ちうる場合は，次にどこに動かすかの候補を乱数を引くなどして決める段階が入る．

   連続スピン (連続変数) の場合も同様である．この場合，最も簡単な方法は，$\triangle X$ を $(0, \epsilon)$ の一様乱数として，現在の値 X から $X + \triangle X$ に動かすことを試みることである．この場合，ϵ は X に依存しない定数でなければならない．そうでない場合は，動かす確率のほうをよほどうまく調節しない限り，詳細釣合条件を破ってしまう．

   ϵ の大きさは，緩和時間を決める重要な要素である．経験的には「動く割合 (acceptance ratio) 」が５０％前後となるようにするのが良いといわれている．acceptance ratio が大きすぎても緩和が悪くなることに注意されたい．

   変数の動く範囲が不等号で制約されていることもある．不等号に対処するもっとも簡単な方法は，制約のない場合の過程を構成した上で，単純に「はみ出す場合は動かさない」とすることである．制約のない場合に詳細釣合条件がみたされていれば，こうして作った過程も詳細釣合条件をみたす．

2. いくつかのマルコフ過程を合成することによって，メトロポリス的モンテカルロ法を構成することができる．この場合，ひとつひとつの過程が詳細釣合条件をみたせば，合成された過程もみたす．また，連結性の条件の方は合成された過程がみたせば十分である．

   このことは，複雑な系のメトロポリス的モンテカルロ法を構成するのに役立つ．たとえば，系が 2 種類のスピン $\{\psi_i\}$，$\{\phi_i\}$ からなるときは，$\{\psi_i\}$ を動かすサブルーチンと $\{\phi_i\}$ を動かすサブルーチンを別々に作って，交互に呼べばよい．

   また，同じ理由から，動かすスピンをランダムに選ばず，決まった順番で選んでもよい．

   たとえば，正方格子の場合，格子を市松模様に塗り分けて一方の色の格子点上のスピンを一通り動かしたのち，別の色の格子点にうつる方法 (checkerboard updation) も許される．これは並列化しやすい．

3. 実際の物理系の緩和との対応がつかなくてもよいなら，なにも局所的なダイナミクスにこだわる必要はないように思われる．最近，この考えに従って ，さまざまな非局所的ダイナミクスが提案されている．

4. 期待値を計算する場合，ゆらぎの小さい巨視的な変数の場合はサンプル平均をたくさんとるよりもむしろ，はじめを十分捨てることが肝心である．

   また，系の緩和はほとんどすべての初期条件に関して最長の緩和時間 τ_1 に支配されると書いたが，実際には，定量的な緩和は初期条件に強く依存することに注意しなくてはならない．(理論的にはこれは (31) 式の $\{a_i\}$ の効果である．)

5. 実は，どんな量の期待値でも計算できるというのは正確な表現ではない．普通の物理量なら，必ずしも巨視的な量でなくても計算できるが，状態空間の一部で異常に (指数的に) 大きくなる量の期待値はうまく収束しないことがある．

   分配関数 Z を無理やりギブス分布での期待値の形にかくと

$$Z = \frac{\text{全状態数}}{\langle \exp(E/T) \rangle} \tag{50}$$

   と書けるが，このときの右辺の分母はこのような量の例となっている．

3　相転移

ここでは相転移 (phase transition) について入門的解説をする．相転移は統計物理で最も重要なトピックのひとつである．本論文では相転移自体を取り扱うことはないが，非ガウス的な高次元の分布を考える場合，相転移の知識は背景として必要と思われる．また，統計物理の諸概念や近似法には相転移の問題をめぐって発達したものも多いので，それらの説明をするのもここの目的のひとつである．(3.5) 節ではいくつかのマルコフ場模型を取り上げて，相転移の観点から解説する．

3.1　2 次元イジング模型の相転移

正方格子上で最隣接のみ相互作用するイジング模型を考える (式 (15)) ．いま磁場 h が零の場合を考えると外部からかえられる変数は J/T だけである．

この場合，ギブス分布からランダムに選んだパターン (snapshot) を観察すると，J/T が小さい場合はパターンは確率 $\frac{1}{2}$ で黒と白をでたらめにばらまいたものに近いが，J/T が大きくなるにしたがって黒同士，白同士集まる傾向が強まり，同色の大きなかたまり (cluster) ができる．さらに結合 J を強く，あるいは温度 T を低くすると，$J/T = 0.4407..$ のあたりでクラスターの大きさが急激に大きくなり，系全体に広がるようになる (図 2) ．

この点を相転移点または臨界点 (critical point) ，これより弱結合の側を無秩序相 (disordered phase) ，強結合の側を秩序相 (ordered phase) という．

温度 T をかえたときのこのような変化は非ガウス性のあらわれである．実際，ガウス分布の場合，相関は温度 T に単純に比例して強くなるだけである．

もっと定量的な見方を 2 つ紹介する．

ひとつの方法では，スピン 1 個当りの磁化 m を考える．この場合，磁場 h が零の有限系では，黒と白の対称性から，m のギブス分布での期待値 $\langle m \rangle$ は常に零である．ただし，境界条件が黒と白の対称性を破っていれば別である．いま，境界条件を周囲が全部黒 ($+1$) の固定境界条件としよう．すると，無秩序相では，系の一辺の長さ L を無限大にした時，$\langle m \rangle \to 0$ となるが，秩序相ではこれが有限値にとどまる，すなわち $\langle m \rangle \to m_\infty > 0$ となることがわかる．まわりを白 (-1) に固定すれば，当然 $\langle m \rangle \to -m_\infty < 0$ となる．定量的にいうと，m_∞ は J/T が大きくなると図 3 のように増大し，J/T が無限大のとき 1 になる．

秩序相では熱力学極限が 2 つあるとでもいうべき状況がおこっているわけで，これを自発的な対称性の破れ (spontaneous symmetry breaking) という．また，$\pm m_0$ を自発磁化という．いまの場合，秩序相は自発磁化のある相 (強磁性相，ferromagnetic phase) として特徴付けられるわけである．一般に，相転移に際して磁化 m のような役割を演ずる巨視的変数を秩序変数 (order parameter) という．

別の見方として，スピン間の空間相関関数

$$\tilde{C}(i,j) = \langle S_i S_j \rangle \tag{51}$$

をもとに議論することもできる．

$\tilde{C}(i,j)$ の値は無秩序相ではスピン i とスピン j の距離 d を無限に大きくすると指数関数的に零に収束する．

$$\tilde{C}(d) \sim \exp(-d/\xi) \tag{52}$$

このときの ξ を相関距離といい，臨界点に近付くと大きくなり，臨界点で発散する．ξ は大ざっぱにいえばクラスターの大きさの目安となる量である．

これに対して，秩序相では $\tilde{C}(i,j)$ は有限の値に収束する．

$$\tilde{C}(d) \sim const. \tag{53}$$

臨界点は異常な点である．たとえば，相関関数を

$$C(i,j) = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \tag{54}$$

と定義しなおすと，これは無秩序相でも秩序相でも，(熱力学極限の取り方に注意すれば) 指数関数的に零に収束する．しかし，臨界点の直上は例外で，零への収束はべき的になる．これに関連して，ゆらぎに関する中心極限定理が成立しない，磁場に対する感受率 (帯磁率，susceptibility) が発散する，snapshot がある意味でフラクタル的になる，などいろいろ特異なことがおきる．臨界点の異常性の探求は１９７０年代の統計物理の中心テーマであり，今日でも興味深い問題であるが，ここではこれ以上触れない．

3.2 相転移とダイナミクス

動的イジング模型の場合に相転移はどう見えるだろうか．周期境界条件ないし自由境界条件の有限系を考えよう．ダイナミクスとしては局所的なものを考える．

無秩序相の側から臨界点に近付くと，緩和時間は急激に長くなる．snapshot でみると，クラスターの大きさが大きくなり，それらが時間的にゆっくりと変化する．

さらに結合を強くして，臨界点の直上から秩序相にはいるあたりでは，1 つのクラスターが系全体をおおう程度に大きくなる．系が主として黒のスピンでおおわれる時期と白でおおわれる時期が短い過渡期をはさんで交代で出現する．このときの磁化の時間的振舞いを（図４）に示す．

秩序相における緩和時間 τ_1 と系の一辺の長さ L との関係は，周期境界条件，自由境界条件の場合，

$$\tau_1 \sim \exp(L^{d-1}) \tag{55}$$

となると考えられている．これは，黒っぽい状態と白っぽい状態との間を動くのに要する時間が局所的ダイナミクスのもとでは非常に長くなることに対応しており，自発的対称性の破れのダイナミクスへの反映である．

固定境界条件（周囲を黒に固定）の場合，

$$\tau_1 \sim L^2 \tag{56}$$

となると考えられている．こんどは，「行ったり来たり」はないが，系の真中に大きな白いクラスタができる可能性があり，これが消えるのにある程度時間を要するのでべきの発散があらわれる．

前に述べた通り，無秩序相では

$$\tau_1 \sim const. \tag{57}$$

である．

これらのこと（及びあとの注）からからわかるように，秩序相ではメトロポリス的なモンテカルロ法の緩和が遅くなるので，十分注意をしなければならない．とくに，無秩序相から秩序相に突入するように外部変数を動かすシュミレーションのやり方は危険である．いまの場合には，ランダムな初期条件を避けて，黒または白に揃った状態を初期条件として用いることでほぼうまくいくが，秩序相の様子が未知の場合やあとで述べる 1 次転移の場合にはそう簡単に対処できない．

周期境界条件，自由境界条件の場合，固定境界条件の場合からの類推で，3 番目の固有値について，

$$\tau_2 \sim L^2 \tag{58}$$

となるように思われるが，実際は，

$$\tau_2 \sim L^3 \tag{59}$$

となると考えられている．これは「橋」ないし「帯」のようなスピン配置（図５）の影響であるが，この状態の存在は実際上も緩和を妨げる最大の原因になっている．

3.3 平均場近似

イジング模型の振舞い，とくに相転移を理解するために簡単な近似的取扱いを試みる．スピン S_i の磁化の期待値を m_i とおく．スピン間の相互作用 J が場所によらないイジング模型（15）では，m_i は i によらないので，以下これを m と書く．

$$\langle S_i \rangle = m \tag{60}$$

さて，

$$E(\{S_i\}) = -J \sum_{nn} S_i S_j - h \sum_i S_i \tag{61}$$

において，S_j を期待値で置き換え，

$$E(\{S_i\}) = -J \sum_{nn} S_i m - h \sum_i S_i = -\sum_i (4Jm + h) S_i \tag{62}$$

と近似することを考える．S_i が黒（白）なら，S_i の近くのスピンは普通より黒（白）である確率が高いはずだが，いまの近似はこのような空間相関を無視して，すべてを 1 個のスピンについての確率（１体の周辺分布）で表わすことにあたっている．

(62) 式は S_i が，外場とまわりの 4 個のスピンの影響を加えた「平均場」 $4m + h$ のもとにある単独のスピンとして振舞うことを意味しているから，(22) 式より，

$$\langle S_i \rangle = \tanh(\frac{4Jm + h}{T}) \tag{63}$$

となる．

ここで，$\langle S_i \rangle = m$ でなければならない (60式) ことを思い出すと，自己無撞着方程式 (self consistent equation)

$$m = \tanh(\frac{4Jm + h}{T}) \tag{64}$$

を得る．以上のような近似法を，平均場近似 (mean field approximation) または分子場近似 (molecular field approximation) という．

$h = 0$ の場合は (64) 式は，

$$m = \tanh(\frac{4J}{T}m) \tag{65}$$

となる．この式は，

$$\frac{J}{T} > \frac{1}{4} \tag{66}$$

のとき，自明な解 $m = 0$ 以外に非零の 2 解 $m = \pm m_\infty (\neq 0)$ を持つ．

$$\frac{J}{T} \leq \frac{1}{4} \tag{67}$$

のときは解は $m = 0$ のみである．

前者 ($J/T > 1/4$) の場合， $m = 0$ は (65) 式を逐次代入でとく場合，不安定解となる．あとで示すように，この解は自由エネルギーの極大値にあたる非物理的な解である．

これを除くと，自己無撞着方程式の解は図 3 と似た様子を示し， $J/T > 1/4$ が秩序相， $J/T < 1/4$ が無秩序相に対応する．臨界点は $J/T = 1/4 = 0.25$ である．

この臨界点の値は真の値 $J/T = 0.4407..$ に比して，かなり弱結合側 (高温側) にかたよっており，2 次元系では平均場近似による相転移の記述があまり正確でないことを示している．一般に平均場近似は次元が高いほど良い．

平均場近似は自由エネルギーに対する近似としても定式化できる．方程式 (64) は次の式の極値をあたえる．

$$\frac{F_{MF}}{N} = -\frac{4Jm^2}{2} - hm + T\{p \log p + (1-p)\log(1-p)\} \tag{68}$$

但し，p はスピンが黒である確率で

$$m = p - (1-p) = 2p - 1 \tag{69}$$

である．

(68) 式を理解する最もよい方法は，ギブス分布を特徴付ける (8) 式の近似式と考えることである．(68) 式と (8) 式の違いは，2 番目の項 (「エントロピー項」) にある．平均場近似は，(8) 式の 2 番目の項で P_α をスピン 1 個に関する確率の積で近似することに当たっている (相関の無視) ．

(8) 式にそれを最小にする分布であるギブス分布を代入すると，自由エネルギーになることから，(68) 式に自己無撞着方程式の解を代入したものは自由エネルギーの近似値を与えると考えられる．(68) 式をグラフにしたものを図 6 にしめす．秩序相では，図 6 の右のように，2 つの最小と 1 つの最大 (自明解に対応) があり，無秩序相では図 6 の左のように最小が 1 つだけある．このあいだにある分岐点が相転移点に対応するわけである．

平均場近似は (8) 式を独立性の制限をつけた部分空間内で最小化しているのに対し，真のギブス分布は無制限の最小化で得られると考えることもできる．このことからすぐ分かるように，平均場近似によって求めた自由エネルギーは真のそれより常に大きい．

平均場近似はスピン間の空間相関を無視した近似なので，画像生成とくにテクスチャー生成のモデルとしては使えない．実際，無秩序相で $h = 0$ の場合，自明な解しか得られない．しかし，このことは平均場近似が画像復元に役立たないことを意味するわけではない．これについてはあとでまた触れる．

平均場理論の定性的な結果，たとえば，臨界点の近くで秩序変数が (上の例でいえば)

$$m \sim (J - J_{critical})^{1/2} \tag{70}$$

のように立ち上がることは，系が少数の秩序変数で記述されることと，系の対称性だけから従うことが知られている（ランダウの現象論）．これは，いわば「カタストロフィー理論」の祖型のような話である．

しかし，詳しい研究によると臨界点の非常に近くでは，平均場理論あるいはランダウの現象論で予言される振舞いは一般には正しくないことが分かる．たとえば，2 次元イジング模型では（70）の代わりに，

$$m \sim (J - J_{critical})^{1/8} \tag{71}$$

となる．これは，臨界点の近傍では現象が本質的に無限次元となることを意味している．これらの振舞いを理解するためには，臨界点のフラクタル的な性質をとりこんだ理論（スケーリング理論，繰り込み群の理論）が必要である．

3.4 1 次転移と 2 次転移

いままで $h = 0$ の 2 次元イジング模型で J/T を変えたときの相転移を例にして説明をしてきたが，これは 2 次の相転移（second order transition）の例であって，相転移にはほかに 1 次の相転移（first order transition）もある．

1 次の相転移の最も簡単な例は，2 次元イジング模型の秩序相（$J/T > 0.4407..$）で J/T を固定して磁場 h の符号を変えたときに起きる転移である．本質的な点は平均場近似に十分あらわれているので，それで説明しよう．

平均場近似の自由エネルギー（68）で，J/T を秩序相（$J/T > 0.25$）の値に固定して h を負 → 零 → 正と動かすと，グラフの概形は（図 7 の左）→（図 7 の中）→（図 7 の右）のように変化する．磁場 h が零を横切るとき，自由エネルギー最小の点（＋）は a から b へ跳躍する．（図 7 ）は 1 スピンあたりの自由エネルギーであり，系の大きさ N が非常に大きい場合を考えていることに注意すると，a と b の高さが僅かに違っても，非常に鋭い変化が起きることがわかる．

一般に熱力学的極限で自由エネルギーの 1 階微分である秩序変数が不連続に変化するような転移を 1 次転移という（式（6）参照）．これに対して $h = 0$ の 2 次元イジング模型で J/T を変えたときの転移のように，自由エネルギーの 2 階微分ではじめて不連続性が表れる場合を 2 次転移という．もっと変わった転移についてはあとで少し触れる．

上の例は外場によって対称性が破れる場合であったが，1 次転移は自発的対称性の破れをともなって起きることもある．すぐあとで出てくるポッツ模型（$q > 4$）はその例である．

1 次転移の転移点（臨界点とはいわない）では，2 次転移の転移点で生ずるような奇妙な熱平衡状態は出現しない．したがって，1 次転移の研究の重点は熱平衡状態の研究ではなくダイナミクスの研究にある．ここではその内容（1 例として結晶成長の理論がある）には触れないが，1 次転移があると，メトロポリス的モンテカルロ法の緩和がひどく悪くなる可能性があることを注意しておく．

図 6 と図 7 を比較すると 1 次転移を「準安定状態（metastable state）と安定状態の交換」，2 次転移を「安定状態の不安定化および別の安定状態の出現」として特徴づけることも可能なように思われる．しかし，平均場近似をしない場合には，図 6 や図 7 のような図は必ずしもよく定義されていない．横軸は無限次元になってしまうし，準安定状態という概念自体ダイナミカルな概念であって，状態間の近さをどう定義するかに依存する．自由エネルギーの n 階微分の不連続性にもとずく定義のほうがその点明確である．

3.5 例

以下では，相転移のいろいろな様子をマルコフ場を例として説明する．それらのモデルの紹介自体も目的のひとつである．

以下のモデルで外部から変えられる変数がひとつしかない場合，その外部変数を変えることと温度を変えることはしばしば等価である．このような場合，たとえば，弱結合は高温と同じ意味になる．このような場合も，本文との兼ね合いから温度と他の外部変数はわけて書くようにした（本文で温度というときは必ず annealing のために artificial にいれたものを指す）．

物理では，上記のような場合に「結合定数を変える」という言い方よりも「温度を変える」という方を好むが，これはもちろん実験で変えやすいのは温度だからである．

3.5.1 反強磁性イジング模型

いままでイジング模型で $J > 0$ の場合のみを考えてきた．磁性体理論ではこれを強磁性（ferromagnetic）という．$J < 0$ の場合（反強磁性（antiferromagnetic）という）の場合はどうなるだろうか．

正方格子で磁場 $h = 0$ の場合，格子を市松模様（奇格子と偶格子）にわけて偶格子のスピンを反転し，同時に $J \to -J$ としてもエネルギーが変わらないことに注意すると，J/T の絶対値が同じ強磁性模型の場合と等価であることが分かる．たとえば，基底状態の対応は図 8 のようになる．もちろん，$h \neq 0$ のときは等価でない．

３角格子の場合はこのような変換がないので，$J > 0$ の場合と $J < 0$ の場合は本質的に違うモデルになる．たとえば強磁性の場合に存在する $h = 0$ での２次相転移は，反強磁性の場合にはない．また，強磁性の場合の基底状態は全部黒と全部白の２つだけだが，反強磁性の場合は基底状態が無限個（$\sim exp(0.338L^2)$ 個）ある．これらの異常性は，格子が２部グラフになっていないことから生ずる．３角形の面のまわりにスピンを配置する場合，四角形の場合と違って，すべての隣合う頂点が違う色になるように黒と白を配置することができないのである（図９）．

一般に，ある面をかこむすべての相互作用を同時に「満足」させる（局所的に最小エネルギーにする）ことができないとき，その面（plaquette）はフラストレート（frustrate）しているという．３角格子上の反強磁性イジング模型は完全にフラストレートしたモデルの例である．

3.5.2 ANNNI 模型

こんどは，最隣接相互作用のみでなく，その次（隣の隣）まで相互作用のあるイジング模型を考える．とくにここでは，正方格子ないし立方格子上で１方向にのみ隣の隣まで相互作用 $-J_2$ があり，その符号が最隣接相互作用 J_1 と反対であるようなモデルを考える．２次元の場合の相互作用を図１０にしめす．このモデルを ANNNI 模型（anisotropic next nearest neighbor Ising model）という．

一見このようなモデルでは，パターンの定性的特徴は J_2/J_1 のみに依存し，温度によらないように思われる．ところが，これは正しくない．

いまの場合，基底状態のパターン（$T = 0$ のパターン）は，J_2/J_1 の値によって図１１に示す２種類のどちらか（もしくはこれらを黒白逆転，平行移動したもの）になる．ところが有限温度ではこのどちらとも違った周期のパターンがあらわれる．

簡単のために，平均場近似の場合を考える．隣の隣の相互作用があるのと直交する方向に層にわけて，各層の１スピン当り磁化を m_l とすると，自己無撞着方程式は，

$$m_l = \tanh(\frac{zJ_1 m_l + J_1 m_{l+1} + J_1 m_{l-1} - J_2 m_{l+2} - J_2 m_{l-2}}{T}) \tag{72}$$

となる．z は２次元で２，３次元で４である．(72) 式の解を数値的にもとめ，対応する自由エネルギーを最小にするものを拾うと図１２のような極めて複雑な相図が得られる．図１２は $z = 4$ の場合で，数字は周期構造の波数，FM は自発磁化が零でない相（強磁性相）を示す．

平均場近似の結果（図１２）がどの程度正しいかは難しい問題である．３次元では図１２の構造のうち大きな部分は存在するが，細かい部分はゆらぎによって消されてしまうと考えられている．２次元ではゆらぎが強すぎて，非自明な周期パターンは相としては存在し得ない．しかし，それらは依然，短距離相関（局部的なパターン）のかたちで見られる．

このようなモデルの相転移を記述するには，非常に多くの秩序変数を用意しなくてはならない．しかし，この場合でも分布を定めるには，たとえば最隣接の相関と隣の隣との相関の２つがあれば十分である．いわゆる十分統計量と秩序変数は全く違う概念であることを注意しておく．

3.5.3 ポッツ模型

イジング模型はスピンが ± 1 の２状態のみをとるいわば単色のモデルであったが，その多色版がポッツ模型として知られているものである．

q 状態のポッツスピン

$$S_i \in \{1, 2.., q\} \tag{73}$$

を用いて，ポッツ模型のエネルギーは，

$$E = -J \sum_{nn} \delta(S_i - S_j) \tag{74}$$

のように書かれる．

ポッツ模型で興味深いのは，２次元の場合，状態数 q が $q \leq 4$ か $q > 4$ で相転移の性質に定性的な違いがあって前者（イジング模型を含む）では２次転移，後者では１次転移になることである．なお，平均場近似では $q > 2$ で１次転移になる．

3.5.4 離散ガウス模型・ＳＯＳ模型

離散ガウス模型は無限個の離散状態をとる模型である．

$$S_i \in \mathrm{Z} \quad （整数） \tag{75}$$

を用いて，離散ガウス模型のエネルギーは，

$$E = -J \sum_{nn} (S_i - S_j)^2 \quad (76)$$

と書かれる．

ＳＯＳ模型（solid on solid model）はこれと似たモデルで，エネルギーが，

$$E = -J \sum_{nn} | S_i - S_j | \quad (77)$$

となるものである．

これらのモデル（２次元）は，結晶の表面の性質の研究などに使われる．この場合 $\{S_i\}$ は表面の高さを表わす．

これらの特徴は，ラフニング転移と呼ばれる独特の相転移がみられることである．これは物理的には，高温側ではなめらかな結晶表面が存在しなくなることにあたっている．この転移のかわったところは，弱結合相全体が臨界点のような状況になっていることである．ＳＯＳ模型についてのモンテカルロ法の結果を図１３に示す．

3.5.5　平面回転子模型

離散変数のモデルばかり取り上げたので，連続変数のモデルについても触れることにする．統計学にはあまり関係がないが，一般に応用の広い平面回転子模型（planar model，古典 XY 模型ともいう）を取り上げることにしよう．

このモデルのスピンは位相変数

$$S_i \in [0, 2\pi) \quad (78)$$

である．平面内を回転する矢印のようなものが，正方格子や立方格子上に配列していると考えればよい（図１４）．

エネルギーは，

$$E = -J \sum_{nn} \cos(S_i - S_j) \quad (79)$$

という内積の形をとる．やはり，$J > 0$ を強磁性，$J < 0$ を反強磁性という．

３次元（立方格子）の場合，このモデルは普通の 2 次転移を示す．ただ，離散変数の場合と違って，スピンがそろう方向は任意なので，秩序相は無限種類ある．

２次元（正方格子）の場合はもっと奇妙で，普通の 2 次転移の代わりにＫＴ転移（Kosterlitz Thouless transition）と呼ばれる相転移が起きる．ＫＴ転移の場合，強結合側全体が臨界点のような性質をもっていると考えられている．この転移は前に述べたラフニング転移と深い関係があるが，物理的には「渦対の解離」として記述できる（図１４）．

以上は強磁性の場合である．反強磁性でフラストレーションがある場合にも興味深い現象が報告されているが，ここでは触れない．

> 古典 XY 模型はある種の磁性体のモデルの古典極限として考えられたが，S_i を波動関数の位相と考えることで，超伝導や超流動の問題にも応用できる．また，厳密には平衡統計力学の範疇をはみだす例であるが，リミットサイクルを持つ振動子群の雑音中での振舞いもこれに似たモデルで論じることができる．この場合，S_i はリミットサイクルの位相と解釈される．

4　ランダム系の統計物理

ここではいわゆるランダム系の統計物理について，本文に関係のあることを中心に解説する．ランダム系の統計物理は比較的最近発達した分野であるが，統計物理の統計的情報処理への応用を考える上では非常に重要と思われる．

一般にベイズ的な復元問題では，対応するランダム系の問題でランダムに決められる部分に，雑音を含んだデータがはいることが多い (たとえば画像復元問題での「磁場」) ．

4.1　ランダム系の物理

いままで扱ったのは，いわば均質な系の統計物理であった．それに対して，ランダム系とここでいうのは，モデルにはじめから不純物などの不均一性があって，その不均一性が確率的に定められている場合である．

この場合，それらの乱れは最初に一度定めたら動かさないとする．それらの乱れも熱ゆらぎで動くとすれば，乱れを定める変数を含めたギブス分布を考えることに帰着されてしまい，本質的に均質な系の統計物理と変わらなくなってしまう．この点を強調する場合，「凍結された乱れ (quenched randomness) を持つ系」という言葉を使うことがある．以下では凍結された乱れについてのアンサンブル平均を「ランダム平均」と呼び，$\langle\ \ \rangle_{random}$ と書く．これはギブス分布による平均 (「熱平均」) を表わす $\langle\ \ \rangle$ と区別するためである．

多くの場合，実際に実験の対象になるのは 1 個の大きな系である．このような系に関して，ランダム平均が正しい答えを与えるという保証はない．ある量について，ランダム平均が正しい答えをだす場合，その量は self averaging であるという．多くの場合，物理量は self averaging であるが，常にそうだとはいえない．

これに関係して，とくに解析的な手法で研究する際に問題となることであるが，分配関数 Z のランダム平均 $\langle Z\rangle_{random}$ を計算してもあまり意味がないことに注意しておく．物理量は自由エネルギーの微分で書けるので，必要なのは $\log Z$ のランダム平均 $\langle \log Z\rangle_{random}$ である．

> これは，次のように考えてもわかることである．ほとんどお互いに無関係な多数の部分からなる大きな系を考えよう．このとき，Z は各部分の寄与の積になるのに対し，$\log Z$ は各部分の寄与の和になる．系を大きくしたとき，Z の分布は対数正規分布に近付くのに対し，$\log Z$ の分布はガウス分布に近くなる．前者の場合に平均値で全体を代表させるのはあきらかに問題がある．

4.2　例

ここでは，ランダム系の例として，最隣接相互作用をするイジング模型のランダム版を 2 種類あげる．いずれもその特異な性質に興味がもたれ，詳しい研究の対象になっている．

4.2.1　スピングラス模型

まずはじめに，結合定数が $\{J_{ij}\}$ が場所によってランダムに定められる模型を考えよう．

このような模型のうち特に興味がもたれているのは，$\{J_{ij}\}$ が正負両方の値をとる場合で，イジングスピンではない場合も含めて，一般にスピングラス (spin glass) 模型といわれている．このような物理系はたとえば，化学的性質の近い強磁性体と反強磁性体を混ぜ合わせることによって実現できる．

もっとも簡単な場合として，イジング模型で結合定数の絶対値を一定として，符号を確率 p で正，$1-p$ で負となるようにとった場合を考えよう．

式で書くと，イジングスピン $\{S_i\}$ を用いて，

$$E(\{S_i\}) = -\sum_{nn} J_{ij}S_iS_j - h\sum_i S_i \tag{80}$$

$$P_r(J) = p\delta(J-J_0) + (1-p)\delta(J+J_0) \tag{81}$$

$$J_{ij} \leftarrow i.i.d.P_r(J) \tag{82}$$

と書ける．ただし，(82) 式の意味は J_{ij} を各隣接対 (i,j) に対してそれぞれ独立にえらぶという意味である．

このモデルはしばしば $\pm J$ スピングラス模型と呼ばれる．ほかに $P_r(J)$ をガウス分布にとったモデルも考えられている．

これらのモデルの特徴は，図１５のようにフラストレートしている面とそうでない面が混在するため，$\{J_{ij}\}$ に依存するきわめて複雑な基底状態を持つことである．基底状態をもとめる問題に対しては，2 次元 (正方格子) の場合は多項式算法が存在するが，3 次元 (立方格子) の場合には存在しない (いわゆるＮＰ完全問題になる) ．

いま，どの 1 個のスピンを動かしてもエネルギーが大きくなるような状態を準安定状態として定義すると，$\pm J$ スピングラス模型 ($p \sim 0.5, h \sim 0$) には非常に多くの準安定状態が存在する．この様子はしばしば図１６のように表現されるが，横軸は本来無限次元の空間であることに注意しなくてはならない．

局所的なダイナミクスのもとでの緩和時間は J/T が十分大きいときはそれほど長くないが，J/T の大きいところ (低温領域) では非常にくなる．これは，物理的にみると，低温では，熱雑音の大きさが図１６の谷と谷の間を乗り越えるのに十分でなくなるということに対応している．

$\pm J$ スピングラス模型 ($p = 0.5, h = 0$) でなんらかの相転移が起きるか，起きるとしたらどういう相転移か，という問題は，過去１０年盛んに議論された．現在では，2 次元 (正方格子) の場合には相転移がなく，3 次元 (立方格子) の場合には $T/J \sim 1.2$ である種の相転移があると信じられている．

> グラス (glass) といっても，本当のガラスは不純物のために結晶化が妨げられているわけではないので，スピングラスとはあまり似ていない．

4.2.2　ランダム磁場模型

次に磁場 h_i が場所によってランダムな場合を考える．式で書くと，たとえば，

$$E(\{S_i\}) = -J \sum_{nn} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \tag{83}$$

$$P_r(h) = p\delta(h - h_0) + (1-p)\delta(h + h_0) \tag{84}$$

$$h_i \leftarrow i.i.d.P_r(h) \tag{85}$$

となる．これをランダム磁場イジング模型 (random field Ising model) という．以下では $J > 0$ の場合のみ考える．

このモデルも多くの準安定状態を持つ場合がある．その場合，低温での緩和時間が非常に長くなる．基底状態を求める問題は決して自明ではないが，$J > 0$ なら，任意の次元で多項式算法が存在する (あとの注参照)．

いま，$p = 0.5$ の場合を考える．$J = 1$ とおいて，h と温度 T を独立な外部変数と考える．このとき，平均場近似は，十分弱い有限の h について，T を十分小さくすれば，強磁性相 (固定境界条件のもとで 1 スピン当りの磁化 m の熱力学極限が有限) があることを示唆する (4.3.1参照)．これによれば，十分弱いランダム磁場は強磁性相を壊さないということになる．これが事実かどうかは難しい問題であるが，2 次元の場合は誤りである (どんな弱いランダム磁場も長距離秩序を壊す) ことが数学的に証明された．3 次元の場合は正しいと思われている．

> ランダム磁場イジング模型 ($J > 0$) の基底状態を求めることは対応するグラフの最小カットを求める問題に帰着される．後者は多項式算法で解ける．
>
> この対応付けは次のようにして行う．
>
> まず，与えられた格子上の点以外に U と D の 2 点をとる．ランダム磁場が $+h$ の点と U，$-h$ の点と D を結び，これと元の格子を合わせた全体をひとつのグラフと見る．
>
> 次に，このグラフの辺上に流量を割り付けるのだが，格子の各辺にはすべて J を与え，U，D と格子の各点を結ぶ辺には h を与えればよい．
>
> $J < 0$ だと，流量に正負両方の符号が生じてうまくいかない．

4.3　ランダム系の平均場理論

簡単な例ではひとつの概念と見えたものが，問題が難しくなると「縮退」がとけて，いくつもの概念に分裂することは珍しくない．平均場近似の場合も，ランダム系に適用した場合，解釈によっていろいろな近似になりうる．ここではその例をしめす．

4.3.1　空間ゆらぎを完全に無視した場合

ランダム磁場イジング模型の平均場近似を考える．

まず，ギブス分布に関する平均だけでなく，ランダム磁場に関する平均についても空間的ゆらぎを無視する場合を考えよう．

各スピンの磁化のギブス分布による期待値をさらにランダム平均したもの $\bar{m}$ を導入する．ランダム平均を取っているので，この値はどのスピンについても同じである．

$$\bar{m} = \langle\langle S_i \rangle\rangle_{random} \tag{86}$$

すると，モデル（83,84,85）の「平均場近似」は次の自己無撞着方程式をあたえる．

$$\bar{m} = p\tanh(\frac{zJ\bar{m}+h}{T}) + (1-p)\tanh(\frac{zJ\bar{m}-h}{T}) \tag{87}$$

ここで z は最隣接格子点の数．

$p = 0.5$ の場合にこの式及び対応する自由エネルギーから導かれる相図は図１７のようになる（$J = 1$ とおいている）．

4.3.2　ランダムネスの空間ゆらぎを残した場合

同じランダム磁場イジング模型の平均場近似でも，ランダム磁場のゆらぎを残した近似も可能である．

この場合，磁化の期待値としてスピンごとに違う値 m_i を割り当てることになる．自己無撞着方程式は，N（スピン数）個の連立方程式となる．

$$m_i = \tanh(\frac{J\sum_{nn} m_j + h_i}{T}) \tag{88}$$

対応する自由エネルギーは，

$$F_{MF} = -J\sum_{nn} m_i m_j - \sum_i h_i m_i + T\{p_i \log p_i + (1-p_i)\log(1-p_i)\} \tag{89}$$

但し，p_i はスピン S_i が黒である確率で

$$m_i = p_i - (1-p_i) = 2p_i - 1 \tag{90}$$

となる．

自己無撞着方程式（88）の解として得られる m_i は空間相関を持つが，ギブス分布という観点からみると，これらはあくまで一体の確率であり，熱ゆらぎに関してはスピンの空間相関は無視されている．

実際にこの近似で求められたパターン（$T = 0$）を図１８に示す．この場合，磁場 $\{h_i\}$，スピン間の結合 J，１体近似の範囲の熱ゆらぎが協調して図１８のようなパターンができているわけで，画像修復に平均場近似がある程度有効なことが示唆されている．

また，磁場について空間平均してしまう場合と違って，この近似は $T \to 0$ で原理的に正しい基底状態を与える．原理的といったのは，自己無撞着方程式の解が沢山あってどのような解き方をしても解は初期条件に強く依存するからである．基底状態はこれらの多くの解のひとつにすぎない．たとえば，図１８の（ａ），（ｃ）はどちらも同じ系（$\{h_i\}$ がまったく同じ）についての自己無撞着方程式の解であるが，異なる部分がある．

これを見ると，画像処理に応用する場合も準安定状態に悩まされそうであるが，図１８はあくまでデータにあたる $\{h_i\}$ が完全にでたらめな場合なので，実際の画像処理の場合はこんなにひどいことにはならない．

３次元の立方格子の場合にこの近似による相図が作られているが，結果は定性的に図１７に似ている．

4.3.3　相互作用の範囲を無限大にした場合

最後に相互作用の範囲を無限大にしたモデル（いわゆる「全部つながっている」モデル）を考えよう．

「全部つながった」強磁性のイジング模型

$$E(\{S_i\}) = -\frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} S_i S_j \tag{91}$$

の場合，熱力学極限で平均場近似が厳密であることが鞍点法を用いて示せる．

ただしこの場合，J をスピンの数に反比例して減少させつつ熱力学極限をとらなくてはならない．すなわち，J^* を一定として，

$$J = J^*/N \tag{92}$$

とする．

この模型のスピングラス版がいわゆるＳＫ模型（Sherrington Kirkpatrick model）である．

$$E(\{S_i\}) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} J_{ij} S_i S_j \tag{93}$$

$$P_r(J) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{J}^2}} \exp \frac{-(J-J_0)^2}{2\tilde{J}^2} \tag{94}$$

$$J_{ij} \leftarrow i.i.d.P_r(J) \quad (i > j) \tag{95}$$

$$J_{ji} = J_{ij} \tag{96}$$

ただし，こんどは

$$J_0 = J_0^*/N \tag{97}$$

$$\tilde{J} = \tilde{J}^*/\sqrt{N} \tag{98}$$

とする．

このＳＫ模型を解析的に扱う場合に計算すべきものは $\langle \log Z \rangle_{random}$，すなわち，

$$\int \{\log \sum_{config.} \exp(-\sum_{ij} \frac{J_{ij}}{2} S_i S_j)\} \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{J}^2}} \Pi_{i>j} \exp(\frac{(J_{ij}-J_0)^2}{2\tilde{J}^2}) \Pi_{i>j} dJ_{ij} \tag{99}$$

である．$\sum_{config.}$ は 2^N 通りのスピン配位についての和であり，$\int \Pi_{i>j} dJ_{ij}$ は $\frac{N(N-1)}{2}$ 個の結合定数 J_{ij} についての積分である．

（99）式の計算を極めて難しくしているのは和と積分のあいだに入っている log であるが，レプリカ法（replica method）では，

$$\langle \log Z \rangle_{random} = \lim_{n \to 0} \frac{\langle Z^n \rangle_{random} - 1}{n} \tag{100}$$

と書きかえることで，この困難を回避する．

ＳＫ模型では，n が正の整数の場合，$\langle Z^n \rangle_{random}$ の計算はスピンが nN 個あるランダムでない系の分配関数の計算に帰着される．さらに，相互作用の範囲が無限大であることを利用すると，この量の N が大きいときの漸近形を鞍点法によって求めることができる．これで計算できるのは，あくまで n が正の整数の場合に限られるが，それを強引に $n \to 0$ に「解析接続」することで，（99）の右辺を計算しようというわけである．

この場合，もっとも議論されたのは n 個の鞍点の選び方である．これらをすべて同じとして得られた解（SK 解，レプリカ対称解）は低温で非物理的になることがわかり，非常に複雑な鞍点の選び方をした解（Parisi 解）が提案された．この解は全く違う（同じぐらい複雑な）方法で得られた解やシミュレーションの結果と一致するので，正しいと思われている．鞍点の選び方の問題は，図１６のようにたくさんの準安定状態が存在して，それらの間の関係に階層的（ultrametric）な性質があることと関係がある．

解析的研究の結果として，まずわかったのは，この模型の解は，（88）のような型の方程式をみたさないことである．直接結合しているスピンの影響を表わす項でけでなく，もうひとつ高次の効果（反作用場，reaction field）まで考慮しなくてはならない．これは相互作用の範囲が無限大のモデルとしては異常なことである．

最終的な相図としては図１９のようなものが得られている．P は無秩序相（常磁性相），F,F' は強磁性相であり，SG がこのモデル特有の凍結した相（スピングラス相）である．

ＳＫ模型の性質は短距離相互作用をするモデルとはかなり違っているらしい．実験的にスピングラスと呼ばれるものの中には，相互作用の強さが距離の３乗に反比例するものがある（実際にはこちらが先に見つかった）．しかし，この場合も，その性質はＳＫ模型より短距離型のものに近いと考えられている．むしろ，工学にあらわれる組合せ的最適化問題やいわゆる神経回路網模型の中にＳＫ模型に似たのものがある．