

情報統計力学

2006年 前期
伊庭幸人

講義の目的

統計科学・情報科学の研究者向けに、
学部～修士程度の統計物理の基礎を講義する

レプリカ法, 符号, 組み合わせ最適化など,
いわゆる「情報統計力学」の内容には触れない

確率論などほかの分野との関連に留意する

講義の予定

I. カノニカル分布（ギブス分布）の導出

- ・リウビルの定理と等確率の原理
- ・エルゴード性とカオスなど(少しだけ)
- ・熱浴と温度, 1次相転移
- ・大数の法則, 大偏差
- ・1次元系の相転移の非存在

II. イジング模型とその周辺

- ・シミュレーション, 2次相転移とは
- ・相転移の存在証明
- ・平均場近似
- ・ランダウの現象論と繰り込みの考え方
- ・厳密解と双対性
- ・イジング模型のさまざまなバリエーション

目標

前半

- ・カノニカル分布の物理的な根拠を理解する
- ・1次相転移について理解する

後半

- ・イジング模型を例として統計物理のさまざまな考え方や手法について理解する
- ・現象の定性的なモデル化について理解する

平衡統計物理の意義(1)

■ 高次元確率分布を扱う技術

伊庭の世代の研究者が主張してきたこと
⇒ MCMC, 変分的手法, 「情報統計力学」

この講義では特に強調されない

平衡統計力学の意義(2)

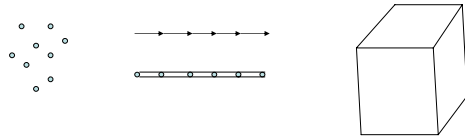
物理現象のイメージによって
数理的な問題に対する直観が補強される.

随時そういう話を挿入

平衡統計物理の意義(3)

■ Beyond i.i.d. & Markov Chain

この講義の主題(?)



Cf. 情報理論におけるスペクトル論的方法

平衡統計物理の意義(4)

■ 確率が「作られる」メカニズム

「エルゴード問題」(定式化を含めて)未解決
どんなものかを知っておくのは有意義
カオス理論の故郷のひとつ

この講義では少しだけ触れる

独立性

「独立性」の概念 : 確率論の特徴
(⇔「測度論一般」)

コルモゴロフ流の枠組みでは「独立性の公理
というものは無い 公理でなく定義

実世界の中に独立性を探す⇒ 確率モデル

確率論の内と外(1)

数学としての確率論はi.i.d. (独立同分布)
が基本になっている

i.i.d. ⇒ マルコフ連鎖 ⇒ ブラウン運動

世の中はそう簡単ではないのでは?

「確率論」の内と外(2)

まったくi.i.d.的でないものは理解できない(?)

@ 統計科学・学習理論

データの有限性⇒ 何を「独立同分布とするか」
モデリング, モデル選択, 正則化

@ 統計物理

非ガウスで無限次元⇒ システムの各部分が
どこまで独立かはシステムが自分で決める
相転移, 協力現象

数学としての確率論

i.i.d. ⇒ マルコフ連鎖・ブラウン運動
→→ マルコフ場・ガウス場 →

@統計物理の数理解 → 未来の確率論?
現代数学とオイラー時代の数学のようなもの?

@統計科学は違う(と思う)
本質的に数学の内側に含まれないものを含んでいる

相補的な面がある

平衡統計力学

$E(x)$ 「力学」でいうエネルギー

$\mathbb{E}(x)$ ← この講義では期待値はこちらを使う

x 離散変数: 量子系 (もしくは「粗視化」した古典系→要注意)

$$P(x) \propto \exp(-E(x)/k_B T)$$

T 絶対温度 k_B ボルツマン定数

連続変数 古典系

p, x 連続変数 古典系

$$p(p, x) dp dx \\ \propto \exp(-E(p, x)/K_B T) dp dx$$

p, x 運動量, 座標 でなくてはならない

例 2準位系

$$x \in \pm 1$$

$$E(x) = -hx \quad h: \text{const.}$$

$$P(x) = \frac{\exp(hx/T)}{\exp(h/T) + \exp(-h/T)}$$

以下しばらく $k_B = 1$

例 イジング模型

$$\{x_i\} \in \{+1, -1\}^N$$

$$E(\{x_i\}) = -J \sum_{(ij)} x_i x_j \quad J: \text{const.}$$

$$P(\{x_i\}) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{1}{T} \sum_{(ij)} J x_i x_j\right)$$

例 調和振動子

$$(x, p) \in \mathbb{R}^2$$

$$E(p, x) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{a}{2} x^2$$

$$p(p, x) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(-\frac{1}{T} \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{T} \frac{a}{2} x^2\right)$$

例 気体, 液体・・

$$\{(x_i, p_i)\} \in \mathbb{R}^{6N}$$

$$E(\{p_i\}, \{x_i\}) = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + \sum_{i>j} U(x_i, x_j)$$

$$p(\{p_i\}, \{x_i\}) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(-\frac{1}{T} \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \frac{1}{T} \sum_{i>j} U(x_i, x_j)\right)$$

状態は高次元空間の点であることに注意

例 理想気体

$$\{(x_i, p_i)\} \in \mathbb{R}^{6N}$$

$$E(\{p_i\}, \{x_i\}) = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2$$

$$p(\{p_i\}, \{x_i\}) = \frac{1}{(2\pi m T)^{N/2}} \exp\left(-\frac{1}{T} \sum_i \frac{p_i^2}{2m}\right)$$

導出？ その1 十分統計量

定常状態の物質の塊

→ 状態の確率は保存量にのみ依存 (仮定)

保存量 → エネルギー, 運動量, 角運動量

このうち「箱の中に入った」系で

意味のあるのはエネルギーだけ

$$P(x) = f(E(x))$$

導出？ その2 積と和

「ほとんど関係がない」2つの系を考える

エネルギー 和

確率 独立なので 積

$$f(E_1 + E_2) = f(E_1)f(E_2)$$

$$f(E) \propto \exp(-\beta E)$$

導出？ その3 定数

定数 β の正体は？

→ 何か既知のものを計算してみればよい

理想気体のエネルギー → ガウス積分

$$\int \cdots \int \left\{ \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \right\} \left\{ \frac{1}{(2\pi m T)^{N/2}} \exp\left(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}\right) \right\} \prod_i dp_i$$

$$= \frac{N}{2\beta} \Leftrightarrow \frac{N}{2} k_B T \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

統計力学の「シンボルグラウンディング問題」

歴史的には統計力学に先行して
「熱力学」が完成されていた

「温度」概念もその中で既に研究されていた
⇒ ある1個の問題で接点があればよい

もしゼロから「物理」をやるなら沢山のモデルを
計算して調べる ⇒ 経験的な「温度」との一致

原子の存在

実験&熱力学でわかるのは

一定個数 N_A の原子からなる気体の性質
 N_A は未知の定数 $\Rightarrow k_B$ 決まらない

「原子は見えない」ということ

重力場中のコロイド粒子

$$p(x) \propto \exp\left(-\frac{mgx}{k_B T}\right)$$

エネルギーの単位と温度の単位

- 以下では k_B は1とする.
- 温度とエネルギーは同じ単位
- 人類が無知だったので「摂氏」とか「華氏」ができた. 本来は「ジュール」とかではかるのが正しい(ジュール/原子, ジュール/自由度)

情報理論の導出(?)

出現確率が独立な2つのメッセージ

(最短)符号長 直観的に 和

確率 独立性 積

$$P(L_1 + L_2) = P(L_1)P(L_2)$$

$$P(x) \propto \exp(-\beta L(x))$$

$$\Rightarrow L(x) = \text{const.} \log P(x)$$

しかし

定数をきちんと決めるのは

クラフトの不等式 & 符号化の実行
などが必要

「符号長」の意味もこれだけでは
はっきりしない
きちんとした展開が必要

根本的な疑問1

物理の基本法則

(ニュートン力学, 量子力学)との関係は?

決定論的なニュートン力学から確率の出てくる
仕組みは一体何か? なぜ十分統計量が
保存量になるのか? その条件は?

なぜ基準となる測度は $dp dx$ か?

根本的な疑問2

「定常状態」といっているが, どのような状態か.
熱力学でいう平衡状態

$\Rightarrow$ 統計力学の内部での特徴付けは?

$$P(x) \propto \exp(-\beta E(x))$$

というが, エネルギーは保存量だから一定では
そもそも, どのような系を記述しているのか?