数理解析研究所講究録
第853巻 1993年 99-107

クラスター変分法とメービウス反転公式

東北大大学院　情報科学研究科　　守田　徹

(Tohru Morita)

イジング模型の統計力学的研究に用いられる近似理論の1つとしてクラスター変分法という方法がある[1]。そこでは変分関数が多数の分布関数で表され、分布関数間の無矛盾の条件の下での変分計算が行なわれる[2]。ラグランジュ未定係数を用いた変分計算の結果は簡単なものであるが、導き方は見通しのよいと言えるものではなかった[3,4]。メービウス反転公式を用いることにより、これが極めて見通しのよいものになった[5,6]。その定式化について説明する。

イジング模型では、格子例えば正方格子を考え、その各格子点が上向き、下向きの2つの状態をとるものとする。格子点の数をLとすると、2^L個の状態を考えることになる。i番目の格子点の状態を確率変数s_iで表す。上向き、下向きに応じて$s_i=+1$, $s_i=-1$とする。L個の格子点の状態を確率変数$\{s_i\}$で表す。状態$\{s_i\}$の確率は

$$\rho\{s_i\} = \exp[(F - E\{s_i\})/k_B T] \quad (1)$$

で与えられるとする。ここで k_B はボルツマン定数、T は温度である。$E\{s_i\}$ は状態 $\{s_i\}$ のエネルギーであり、F は規格化定数で

$$\exp(-F/k_B T) = \sum_{\{s_i\}} \exp[-E\{s_i\}/k_B T] \quad (2)$$

で定まる。ここで、和は系のすべての状態についての和である。$E\{s_i\}$ を与えて F を求めることが、イジング模型の統計力学の基本的な課題になっている。

このFは自由エネルギーと呼ばれる量で、変分原理

$$F = \mathop{\mathrm{Min}}_{\rho\{s_i\}} F(\rho\{s_i\}) \quad (3)$$

$$F(\rho\{s_i\}) = \sum_{\{s_i\}} \rho\{s_i\} E\{s_i\} - TS(\rho\{s_i\}) \quad (4)$$

をみたす。ただし $S(\rho\{s_i\})$ は確率分布 $\rho\{s_i\}$ に対応するエントロピーで、

$$S(\rho\{s_i\}) = -k_B \sum_{\{s_i\}} \rho\{s_i\} \ln\rho\{s_i\} \quad (5)$$

である。(3) で、変分は束縛条件

$$1 = \sum_{\{s_i\}} \rho\{s_i\} \quad (6)$$

の下で行なわれる。

クラスター変分法では、格子点の集合をクラスターと呼ぶ。

クラスター変分法での近似は、考えるクラスターの集合によって決まる。例えば、正方格子上の体系に対する四角近似では、クラスターとして格子を構成する単位の正方形の周りの4つの格子点の集合、格子上で隣り合う格子点の対、と単独の格子点を考える。以上に加えて、格子全体からなるクラスターを考え、これを**1**と呼ぶ（図1）。2つのクラスターαと

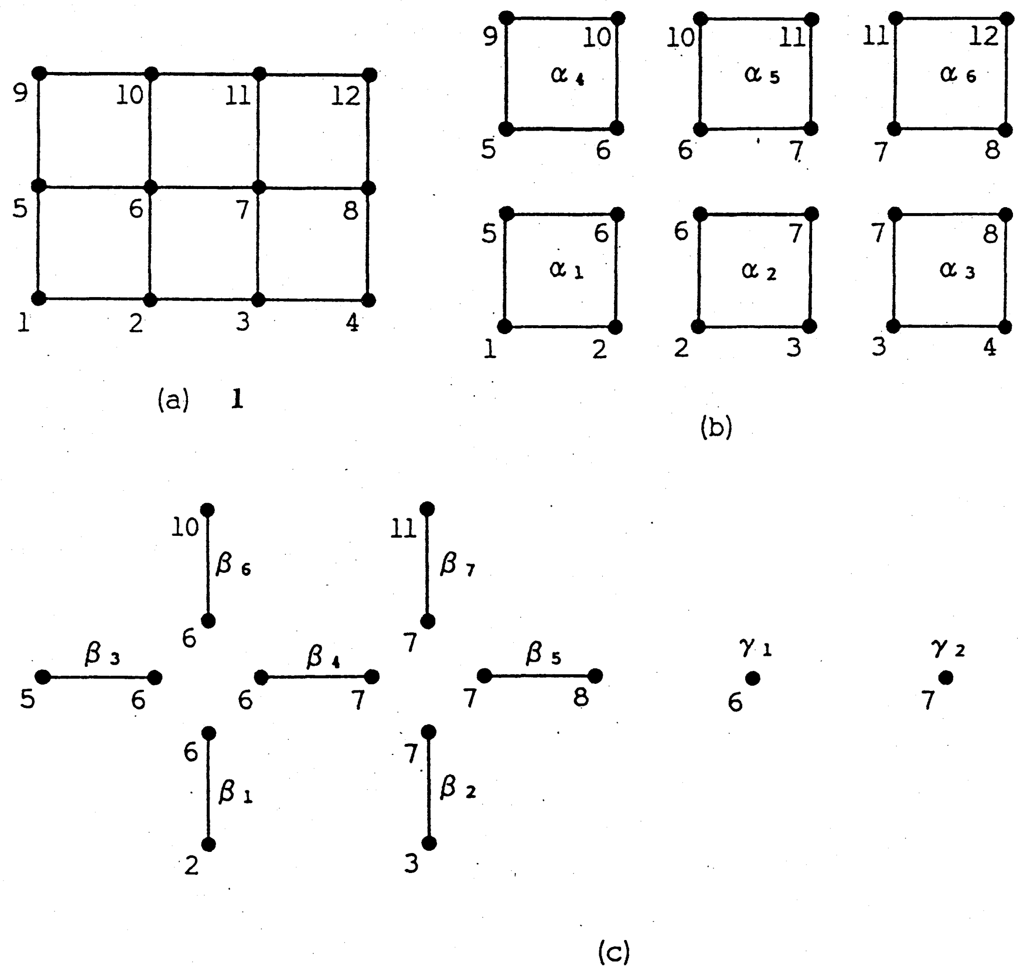

図1．四角近似で考えるクラスター。(a)が全格子**1**とする。

(b)正方形($\alpha_1 \sim \alpha_6$)、対($\beta_1 \sim \beta_7$)と格子点($\gamma_1 \sim \gamma_2$)。

β は、α が β の格子点すべてを含むときに $\beta \leqq \alpha$ と書く。この順序により、上記クラスターの集合 Ω は束をなす。$\beta \leqq \alpha$ が $\beta \neq \alpha$ のとき $\beta < \alpha$ と書く。

全系の分布関数 $\rho\{s_i\}$ を ρ_1 と書くと、1 以外の Ω の要素であるクラスター α の確率分布関数は

$$\rho_\alpha = \mathrm{tr}_{1\backslash\alpha}\ \rho_1 \tag{7}$$

で表される。ここで $\mathrm{tr}_{1\backslash\alpha}$ は 1 に含まれ α に含まれない総ての格子点上のスピン変数についての和を取ることを意味する。定義 (7) から $\beta < \alpha$ のとき

$$\rho_\beta = \mathrm{tr}_{\alpha\backslash\beta}\ \rho_\alpha \qquad (\beta < \alpha) \tag{8}$$

が成り立つ。また、(7) と (6) から

$$1 = \mathrm{tr}_\alpha\ \rho_\alpha \tag{9}$$

が成り立つ。

分布関数 ρ_α が与えられると、エントロピー S_α は

$$S_\alpha = -k_B\ \mathrm{tr}_\alpha\ \rho_\alpha \ln\rho_\alpha \tag{10}$$

で定義される。$\alpha=\{i,j\}$ を考えるとき、$\{i\}$ と $\{j\}$ の相関が強くない系では $\rho_{\{i,j\}}$ は $\rho_{\{i\}}$ と $\rho_{\{j\}}$ の積で近似され、$S_{\{i,j\}}$ は $S_{\{i\}}$ と $S_{\{j\}}$ の和で近似されることになる。この

とき、$s_{\{i\}}=\bar{s}_{\{i\}}$ と書き

$$s_{\{i,j\}} = \bar{s}_{\{i\}} + \bar{s}_{\{j\}} + \bar{s}_{\{i,j\}}$$

と書くと $\bar{s}_{\{i,j\}}$ は小さな補正であると考えられる。一般に

$$s_\alpha = \sum_{\beta \leqq \alpha} \bar{s}_\beta \tag{11}$$

としたとき、大きなクラスターβに対する $\bar{s}_\beta$ は小さいという近似が考えられる。

半順序集合 Q の各要素αに量 s_α と $\bar{s}_\alpha$ が対応し、それらの間に関係（11）が成り立つとき、メービウス反転公式により

$$\bar{s}_\alpha = \sum_{\beta \leqq \alpha} s_\beta \ \mu(\beta,\alpha) \tag{12}$$

が成り立つ［7］。ここで $\mu(\beta,\alpha)$ はメービウス関数で

$$\sum_{\substack{\beta \\ \gamma \leqq \beta \leqq \alpha}} \mu(\beta,\alpha) = \delta_{\gamma\alpha} \qquad (\gamma \leqq \alpha) \tag{13}$$

により定義される。（12）で $\alpha=\mathbf{1}$ とし、$\bar{s}_{\mathbf{1}}=0$ という近似を採用すると、（13）により $\mu(\mathbf{1},\mathbf{1})=1$ であることに注意して

$$s_{\mathbf{1}} = -\sum_{\beta<\mathbf{1}} s_\beta \ \mu(\beta,\mathbf{1}) \tag{14}$$

が得られる。四角近似で $\mu(\alpha,\mathbf{1})$ はαが4角のとき -1、αが隣り合う格子点の対 $\{i,j\}$ のとき 1、1つの格子点 $\{i\}$ のとき -1である。

系の状態の確率を決める関数 $E\{s_i\}$ はエネルギーと呼ばれ

る。イジング模型では、その関数は

$$E\{s_i\} = -h\sum_i s_i - J\sum_{<i,j>} s_i s_j \tag{15}$$

で与えられる。右辺第1項の和はすべての格子点についてであり、第2項は隣り合う格子点の対についてである。$\alpha=\{i\}$ のとき $\bar{E}_\alpha=-hs_i$ とし、i と j が隣り合う格子点であるときに $\alpha=\{i,j\}$ に対する $\bar{E}_\alpha$ を $\bar{E}_\alpha=-Js_i\ s_j$ とし、それ以外の α に対して $\bar{E}_\alpha=0$ とする。このとき $\bar{E}_{\mathbf{1}}=0$ である。E_α を

$$E_\alpha = \sum_{\beta\leqq\alpha} \bar{E}_\beta \tag{16}$$

で定義する。このとき、$E\{s_i\}=E_{\mathbf{1}}$ である。メービウス反転公式により

$$\bar{E}_\alpha = \sum_{\beta\leqq\alpha} E_\beta\ \mu(\beta,\alpha) \tag{17}$$

となる。(17) で $\alpha=\mathbf{1}$ とすると、$\bar{E}_{\mathbf{1}}=0$ であり、$\mu(\mathbf{1},\mathbf{1})=1$ であるから

$$E_{\mathbf{1}} = -\sum_{\alpha<\mathbf{1}} E_\alpha\ \mu(\alpha,\mathbf{1}) \tag{18}$$

となる。

(14) と (18) を (4) の右辺に代入すると、

$$F\{\rho_\alpha\} = -\sum_{\alpha<\mathbf{1}} (<E_\alpha>_\alpha - TS_\alpha)\ \mu(\alpha,\mathbf{1}) \tag{19}$$

となる。ここで

$$\langle Q \rangle_\alpha = \mathrm{tr}_\alpha\, Q\, \rho_\alpha \tag{20}$$

である。自由エネルギーFの変分原理(3)は

$$F = \underset{\{\rho_\alpha\}}{\mathrm{Min}}\; F\{\rho_\alpha\} \tag{21}$$

となる。この計算で、(7)を無視し、$\alpha<1$のρ_α間の(8)と規格化条件(9)を付加条件として変分を行なうのがクラスター変分法の近似である。

イジング模型ではクラスターαに属する格子点上のスピンのスピン変数の関数$g\{s_\alpha\}$は

$$g\{s_\alpha\} = \sum_{\substack{\beta\nu \\ (\beta \leqq \alpha)}} s_{\beta\nu} \;\langle s_{\beta\nu}\, g\{s_\alpha\}\rangle_\alpha \tag{22}$$

と展開できる。ここで$\beta\nu$は$\beta\in Q$に属する格子点の集合の部分集合で、$\beta\nu$の要素のすべてがβより小さい$\beta'\in Q$に含まれるものではないとする。$s_{\beta\nu}$は$\beta\nu$に属する格子点上のスピン変数の積

$$s_{\beta\nu} = \prod_{i\in\beta\nu} s_i \tag{23}$$

である。この$s_{\beta\nu}$を用いて、条件(8)は

$$\langle s_{\beta\nu}\rangle_\beta = \langle s_{\beta\nu}\rangle_\alpha \qquad (\beta < \alpha) \tag{24}$$

と書かれる。(24)に対応するラグランジュの未定係数を$h_{\beta\nu,\alpha}$と書き、(9)に対するものをF_αと書くと、変分関数(19)を

$$-\sum_{\alpha<1}(<E_\alpha>_\alpha - TS_\alpha)\ \mu(\alpha,1)$$

$$-\sum_{\beta\nu}\sum_{\substack{\alpha \\ \alpha>\beta}}(<s_{\beta\nu}>_\beta - <s_{\beta\nu}>_\alpha)h_{\beta\nu,\alpha}\ \mu(\alpha,1)$$

$$-\sum_{\alpha}\{1-\mathrm{tr}_\alpha\rho_\alpha(s_\alpha)\}(F_\alpha + k_B T)\ \mu(\alpha,1) \qquad (25)$$

とすることができる。ここで $h_{\beta\nu,\beta}$ を

$$0 = -\sum_{\substack{\alpha \\ \beta\leqq\alpha<1}} h_{\beta\nu,\alpha}\ \mu(\alpha,1). \qquad (26)$$

で定義して、(25) の変分をとると

$$\rho_\alpha = \exp\{(F_\alpha - E_\alpha - \sum_{\substack{\beta\nu \\ \beta\leqq\alpha}} h_{\beta\nu,\alpha}\ s_{\beta\nu})/k_B T\} \qquad (27)$$

となる。メービウス関数を導入することにより、ここでの変分計算は容易になり、しかも簡単な形に表現されたのである。これにより非一様場へのリスポンスを計算して分布関数を一般的に論ずることも可能となった [6] 。

参考文献

[1] R. Kikuchi, A Theory of Cooperative Phenomena.
Phys. Rev. **81** (1951) 988.

[2] T. Morita, Cluster Variation Method of Cooperative Phenomena and Its Generalization I.
J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957), 753.

[3] T. Morita, General Structure of the Distribution Functions for the Heisenberg Model and the Ising Model.
J. Math. Phys. **13** (1972) 115.

[4] T. Morita, Consistent Relations in the Method of Reducibility in the Cluster Variation Method.
J. Stat. Phys. **34** (1984) 319.

[5] T. Morita, Cluster Variation Method and Möbius Inversion Formula.
J. Stat. Phys. **59** (1990) 819.

[6] T. Morita, Cluster Variation Method for Non-Uniform Ising and Heisenberg Models and Spin-Pair Correlation Function.
Prog. Theor. Phys. **85** (1991) 243.

[7] G.-C. Rota, On the Foundations of Combinatorial Theory I. Theory of Möbius Functions.
Z. Wahrsch. **2** (1964) 340.