

令和元年6月7日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05493

研究課題名(和文) クラスタ非平衡緩和法の量子モンテカルロ計算への応用

研究課題名(英文) Application of the cluster nonequilibrium relaxation method to quantum Monte Carlo calculations

研究代表者

野々村 禎彦 (NONOMURA, yoshihiko)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・主幹研究員

研究者番号：30280936

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：相転移現象を数値計算で調べようとする、相転移点近傍では緩和が遅くなり平衡状態に達するのは難しい。大域的な状態更新で緩和を加速する手法と、初期緩和から情報を抽出して平衡化を行わない手法が知られていたが、我々は大域的な状態更新の初期緩和から情報を抽出する、さらに効率的な融合手法を開発した。本研究はその手法を、量子ゆらぎで相転移が起こるより複雑な系にも拡張したものである。またこの手法の正当化はこれまでは数値計算結果に頼っていたが、仮想的だが数学的に解けるモデルの解を足掛かりに、一般的な状況でも現象論的に導出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子ゆらぎで相転移が起こる系は、空間次元に加えて仮想的な次元も導入しないと数値計算ができないため、扱える系の大きさに厳しい制約があり、効率的な計算手法の開発が望まれてきた。本研究で提案した手法は、緩和が極端に遅い系や、不純物のさまざまな分布を平均しないと振舞がわからない系など、従来の計算手法では絶望的だと思われてきた状況になるほど強みを発揮する。

研究成果の概要(英文)：We generalized the cluster nonequilibrium relaxation method to the standard quantum Monte Carlo scheme, namely the continuous-time loop algorithm, and investigated the Neel-dimer quantum phase transition in the two-dimensional dimerized $S=1/2$ antiferromagnetic Heisenberg model. With the scaling analysis based on the stretched-exponential ordering from the isolated dimer state, we estimated the quantum critical point and critical exponents accurately. In order to establish the theoretical basis of the present scheme, we obtained the exact solution of the nonequilibrium relaxation process in the infinite-range Ising model based on the Swendsen-Wang cluster algorithm, and derived the stretched-exponential relaxation formula phenomenologically based on a dynamical relation settled in this exact solution. Furthermore, we generalized the “temperature scaling”, which scales off-critical data during nonequilibrium relaxation in local-update algorithms, to that in cluster-update algorithms.

研究分野：物性基礎理論・計算物理学

キーワード：計算物理学 数理物理学 量子モンテカルロ法 非平衡緩和法 クラスタアルゴリズム スケーリング理論

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) スピン多体系の相転移研究では、動的モンテカルロ法を用いた数値計算が大きな役割を果たしてきたが、二次相転移を伝統的な局所更新アルゴリズムで計算すると相転移温度で緩和時間が発散し（緩和の関数型が指数関数から冪に代わり）、計算が困難になる。この臨界緩和の困難を解決するために提案されたのが、系をパーコレーション問題に変換し、パーコレートしたクラスターごとの大域的更新で臨界緩和を加速するクラスター更新法と、臨界緩和過程の情報から相転移温度や臨界指数を推定し、平衡化を回避する非平衡緩和法である。

(2) 臨界緩和を加速して平衡化を実現するクラスター更新法と、臨界緩和の遅さを逆用して平衡化を回避する非平衡緩和法の併用は困難という常識を超えて融合を達成したのが、本課題で用いるクラスター非平衡緩和法である。その本質は、相転移温度における物理量の時間依存性は引き伸ばされた指数関数型になることであり、冪緩和を前提に構成された通常の非平衡緩和法をこの関数型に沿って再構成すれば、クラスター更新法の緩和の速さを活かせる。

(3) 量子スピン多体系のエネルギーは局所的に計算できないが、量子モンテカルロ法は系を余剰次元方向に n 分割して古典スピン多体系に近似的に射影する ($n \rightarrow \infty$ の極限で厳密になる)。この極限を定式化の段階で取る連続時間量子モンテカルロ法が現在は標準的に用いられるが、この定式化はクラスター更新法の量子版に相当するループアルゴリズムが前提になっている。

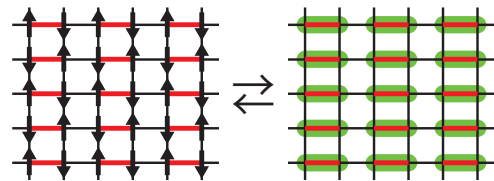
2. 研究の目的

(1) 非平衡緩和法を用いて量子スピン多体系の相転移研究を行う際には、従来は量子モンテカルロ計算にあえて局所更新アルゴリズムを導入して、臨界緩和が遅くなるように調整していた。だが、クラスター非平衡緩和法を量子モンテカルロ計算に拡張することができれば、標準的で効率も良い連続時間量子モンテカルロ法に基づいて非平衡緩和法を用いた相転移研究を行えるようになる。この定式化を行い、具体的なモデルで実証することが最大の課題である。

(2) 他方、クラスター非平衡緩和法における引き伸ばされた指数関数型の臨界緩和の導出は、これまでの研究では専ら数値的に行われてきた。この導出を理論的にも行うことで、方法論の基礎をさらに固め、さらなる発展の土台を作ることも重要な課題である。

3. 研究の方法

(1) クラスター非平衡緩和法の量子モンテカルロ計算への拡張には、適切な量子スピンモデルを選んで定式化を進める必要がある。本研究の出発点としてダイマー化した2次元量子反強磁性ハイゼンベルクモデルのネール-ダイマー量子相転移を扱う。異方性のある1次元系は複雑な補正項を持ち扱いにくい。

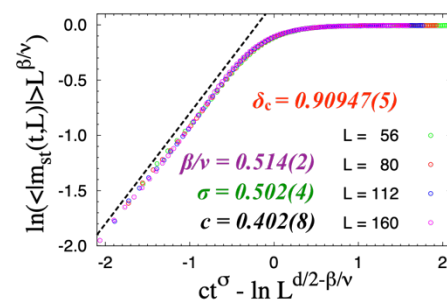


右図の赤いボンドがダイマー化しており、ダイマー化が弱ければ左のようにネール状態が基底状態になるが、ダイマー化が強くなるとダイマー化したボンドに局在する singlet が強まってネール秩序は消える。ネール状態は自発的対称性を破っているがダイマー状態は自発的対称性を破っておらず、ネール状態が古典系の低温相に相当する通常の二次相転移が起こる。この系を調べる際に重要なのは、シミュレーション時の温度をサイズとともにスケールして基底状態に系統的に近づく手法と、クラスター非平衡緩和の出発点になる状態の取り方である。

(2) 他方、クラスター非平衡緩和法の理論的基礎付けは、解析的な取り扱いが可能な無限レンジジグリングモデルを出発点とする。総てのスピン同士が同じ強さで結合し、エネルギーの示量性を保つために個々の結合は J/N (N は全スピン数) に取る特殊なモデルであり、物理量の振舞も有限次元系とは異なるかもしれないが、上部臨界次元以上の系では臨界現象は平均場理論と一致すると考えられており、これを通じて有限次元系との対応が付けられる。また、この系で得られた解析的な表式を出発点にして、有限次元系の現象論を構築することもできる。

4. 研究成果

(1) $k_B T = 1/L$ と温度をサイズ増加に応じて下げてゆき、ダイマー化したボンドに孤立した singlet が乗っている状態からクラスター非平衡緩和を始めると、上記のモデルの基底状態が系統的に得られる。この計算は完全無秩序状態からの秩序形成過程 $\langle |m_{st}(t)| \rangle \sim \exp(ct^\sigma)$ に相当し、さらにランダムウォーク型の磁化のサイズ依存性も考慮すると、右図のようにきれいにスケールする。ダイマー化の割合 $1+\delta$ の量子相転移点 δ_c は先行研究と完全に一致し、磁化の臨界指数 β/ν と緩和指数 σ も3次元ハイゼンベルクモデルとよく一致している。



ただし、研究過程では Binder 比に基づいた解析に拘り、この手法が査読者に理解されなかった（スケール性が良すぎるために「スケール性の悪化」で相転移点の誤差範囲を決めることは難しく、推定値の変動から決める経験的な手法に説得力が不足していた）ため、論文として纏めるのは遅れ、当初計画していたより複雑な量子相転移への応用は間に合わなかった。上記のように 3次元ハイゼンベルグモデルの解析に準ずる方向で論文を準備中である。

(2) 他方、クラスター非平衡緩和法の基礎付けは大きく進展した。無限レンジイジングモデルの Swendsen-Wang アルゴリズムによるクラスター非平衡臨界緩和の磁化と相関長の時間依存性の厳密解が得られ、その関数型は $tN^{1/4}$ の組で特徴付けられる。冪的緩和を示す非平衡臨界緩和では tL^z という組が現れ、 $N=L^d$, $z=1$ を示唆するが、上部臨界次元の 4次元系で数値計算を行うと SW アルゴリズムの非平衡臨界緩和でも $z=1$ の冪緩和が得られ、この見立てが確かめられた。また無限レンジモデルの相関長の厳密解は $d\xi(t)/dt=S(t)\xi(t)$ という微分方程式を満たすが、有限次元系の $S(t)$ は t で展開されると仮定すると、主要項が $S(t)=1/(zt)$ の場合に限って解は $\xi(t)\sim t^{-1/2}$ という冪緩和型になり、それ以外の場合は $S(t)=c\sigma t^{\sigma-1}$ という一般型 ($\sigma\neq 0$) に対して $\xi(t)\sim \exp(ct^\sigma)$ が解となり、引き伸ばされた指数関数型の臨界緩和が現象論的に導かれた（論文刊行済）。

(3) 量子希釈系の相転移を調べる準備として、ボンド希釈した 2次元イジングモデルの相転移をクラスター非平衡緩和法で調べ、従来手法では困難だった希釈臨界点近傍まで解析を行い、緩和指数 σ はボンド希釈に対して連続的に変化することを見出した。(1)の成果同様、解析手法の問題で論文化は遅れているが、(5)の新規手法なども用いて纏める予定である。

(4) Binder 比に基づいた解析は相転移点の推定法に問題があったが、磁化分布関数の時間発展と併せると、引き伸ばされた指数関数型の臨界緩和が見えている領域はガウス分布で特徴付けられるが、この振舞が飽和すると平衡状態の臨界指数が見え始める、というクラスター非平衡緩和に特徴的な時間発展を反映しており、包括的な視点から纏め直す予定である。

(5) 以上の成果は転移点直上の臨界緩和に関するものだが、転移点から離れた非平衡緩和データについては、局所更新アルゴリズムでは動的スケール理論に基づく「温度スケール」で整理されていたが、クラスター非平衡緩和ではそれに相当する枠組がなかった。だが我々は最近、温度スケールをクラスター更新の場合に拡張した。この定式化は動的スケール理論に基づいた定式化とは相補的であり、局所更新の場合にも従来の温度スケールよりも良いスケール性質を示すことが数値的に確認された。この新手法は量子相転移にも応用が可能であり、今後の幅広い発展が期待される。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 1 件)

- (1) Yusuke Tomita, Yoshihiko Nonomura, Critical nonequilibrium cluster-flip relaxations in Ising models, Physical Review E, 査読有, vol.98, 2018, 052110(1-9)

[学会発表] (計 10 件)

- (1) 野々村 禎彦, 富田 裕介, 磁化分布関数と Binder 比を用いた非平衡初期緩和の数値解析, 日本物理学会第 74 回年次大会, 2019 年 3 月, 九州大学伊都キャンパス
- (2) Yoshihiko Nonomura, Yusuke Tomita, Critical nonequilibrium relaxation in cluster-update quantum Monte Carlo algorithms and its application to quantum phase transitions, APS March Meeting 2018, 2018 年 3 月, Los Angeles Convention Center
- (3) Yusuke Tomita, Yoshihiko Nonomura, Critical nonequilibrium cluster-flip relaxations in Ising models, APS March Meeting 2018, 2018 年 3 月, Los Angeles Convention Center
- (4) 野々村 禎彦, 富田 裕介, 量子相転移をクラスター非平衡緩和で見る II, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年 9 月, 岩手大学上田キャンパス
- (5) 富田 裕介, 野々村 禎彦, 上部臨界次元以下のイジング模型におけるクラスター更新非平衡緩和, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年 9 月, 岩手大学上田キャンパス
- (6) 野々村 禎彦, 富田 裕介, 量子相転移をクラスター非平衡緩和で見る, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月, 大阪大学豊中キャンパス
- (7) 富田 裕介, 野々村 禎彦, 無限レンジ模型におけるクラスター更新非平衡緩和, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月, 大阪大学豊中キャンパス
- (8) Yoshihiko Nonomura, Yusuke Tomita, Critical nonequilibrium relaxation in cluster algorithms using the Binder ratio and its application to bond-diluted Ising models, APS March Meeting 2017, 2017 年 3 月, Ernest N. Morial Convention Center, New Orleans
- (9) 野々村 禎彦, 富田 裕介, クラスター非平衡緩和で見たボンド希釈イジング系の相転移, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月, 金沢大学角間キャンパス
- (10) Yoshihiko Nonomura, Yusuke Tomita, Critical nonequilibrium relaxation in cluster algorithms, STATPHYS 26, 2016 年 7 月, the Centre de Congres de Lyon

〔図書〕（計 0件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

○取得状況（計 0件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：富田 裕介

ローマ字氏名：TOMITA, yusuke

所属研究機関名：芝浦工業大学

部局名：工学部

職名：教授

研究者番号（8桁）：50361663

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。