

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K03777

研究課題名（和文）クラスター非平衡緩和法の非臨界領域への拡張と応用

研究課題名（英文）Generalization of cluster nonequilibrium relaxation method to off-critical region and its applications

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） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：クラスター更新モンテカルロ計算の非臨界領域の初期緩和データから臨界現象の情報を引き出す、クラスター更新版「温度スケーリング」を提唱し、古典スピン系では3次元ハイゼンベルクモデルの秩序化相転移・量子スピン系ではダイマー化した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で検証した。非平衡-平衡スケーリングに基づいた臨界点直上の結果と合わせると、臨界点とすべての臨界指数を相転移のコントロール・パラメータによる微分で得られるゆらぎの大きな物理量を計算することなく評価できるようになった。特に量子スピン系では、非対角成分を含む物理量を計算する必要がなくなり、計算コストが大きく減った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

モンテカルロ法による相転移の研究は幅広い応用の可能性があり、効率的な計算手法の開発は意義深い。我々は、本来は長時間緩和を要する平衡状態の情報を緩和初期の振舞から得る手法を研究してきた。大域的な状態更新で緩和を加速したアルゴリズムにもこの手法が使えることを我々は示したが、本研究で転移点から外れた緩和データからも情報が得られるようになり、さらに効率化が進んだ。特に本研究の手法を量子系に適用すると、従来手法では量子効果を直接扱うことになり多大なコストを要していた計算が回避されるので非常に効率的である。

研究成果の概要（英文）：In Monte Carlo study of phase transitions in spin systems, information of critical phenomena can be derived merely from initial-time relaxations. Such a Monte Carlo scheme to skip equilibration is called as the nonequilibrium relaxation method. In conventional local-update algorithms, such a scheme was formulated both for critical and off-critical cases, while in cluster-update algorithms, it had been formulated only for critical cases. In the present study we proposed such a scheme for off-critical cases, called as the temperature scaling. This scheme was confirmed in the magnetic phase transition in the 3D classical Heisenberg model and in the Neel-dimer quantum phase transition in the 2D quantum antiferromagnetic Heisenberg model. Coupled with the nonequilibrium-to-equilibrium scaling at the critical point, all the critical exponents can be evaluated efficiently. Especially in quantum spin systems, time-consuming calculations on off-diagonal quantities are not necessary anymore.

研究分野：物性基礎理論

キーワード：温度スケーリング 非平衡緩和法 クラスターアルゴリズム 量子相転移 希釈系

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 動的モンテカルロ法によるスピン多体系の相転移研究では、相転移点で緩和時間が発散する(緩和の計算時間依存性が指数関数から冪に変わる)臨界緩和の困難が問題だが、その解決には二つの方向性がある。ひとつは緩和を速めて系の平衡化を実現する方向で、スピン更新を大域的に行うクラスター更新法が代表的である。もうひとつは臨界緩和を利用して平衡化を回避する方向で、相転移の情報を臨界緩和の初期過程から得る、非平衡緩和法がそれに相当する。我々はクラスター更新法の臨界緩和の計算時間依存性を調べ、局所更新法で広く知られる冪的緩和ではなく、引き伸ばされた指数緩和になっていることを見出した。この知見を用いて非平衡緩和法とクラスター更新法を融合し、さらに計算を効率化したのがクラスター非平衡緩和法である。

(2) 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で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、この定式化で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。従って量子系の相転移を非平衡緩和法で調べる際は、クラスター非平衡緩和法の枠組に沿って解析を行うことになる。我々は、量子相転移を起こす最も単純な等方的スピン系であるダイマー化した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まず扱った。

(3) 古典スピン系・量子スピン系を問わず、クラスター更新に特有の引き伸ばされた指数関数型の緩和は、局所更新の冪的緩和よりも数値的には扱いにくい。そこで我々は、緩和初期の引き伸ばされた指数緩和と平衡状態の有限サイズスケーリングを滑らかにつなぐ「非平衡-平衡スケーリング」を提唱した。これは有限サイズスケーリングの緩和過程全域への拡張であり、古典系としては2次元イジングモデルと3次元ハイゼンベルクモデル、量子系としてはダイマー化した2次元量子反強磁性ハイゼンベルクモデルで、全計算時間領域で成立することを確認した。

## 2. 研究の目的

(1) 非平衡-平衡スケーリングは有限サイズスケーリングの拡張版であり、臨界指数は相関長の指数  $\nu$  で規格化された形で現れ、転移点直上で成立する。転移点を評価する過程で得られる、非臨界領域のデータが再利用されることはなく、また  $\nu$  及び生の臨界指数を評価するには、物理量をパラメータ微分して得られるゆらぎの相関を評価する必要がある、計算精度が落ちるといった問題があった。局所更新に基づいた伝統的な非平衡緩和法の枠組では、動的スケーリング理論に基づいて非臨界データをスケールする手法もあり、この手法を用いるとパラメータ微分で得られる物理量を介さずに生の臨界指数を評価できるが、クラスター更新でこれに相当するものは知られていない。このような手法を開発し具体的なモデルで検証するのが本研究の目的である。

(2) 特に量子スピン系では、パラメータ微分で得られる物理量は非対角成分を持ち、数値計算のコストが一挙に大きくなる。従って、非臨界データをスケールする手法開発が特に重要である。

## 3. 研究の方法

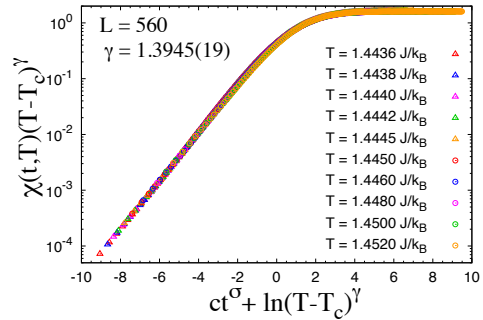
(1) クラスター更新に基づく非臨界領域のデータをスケールする手法を開発する。闇雲な試行錯誤ではなく、クラスター更新に基づく転移点直上のデータをスケールした非平衡-平衡スケーリングの導出法を参照して、その非臨界領域版を導出する。このクラスター更新版「温度スケーリング」(古典スピン系の相転移のコントロール・パラメータは温度であることに由来する呼称)が得られたら具体的なモデルで検証する。非平衡-平衡スケーリングに基づく、 $\nu$  で規格化された臨界指数が既に得られている系が望ましく、古典スピン系では3次元ハイゼンベルクモデル、量子スピン系ではダイマー化した2次元量子反強磁性ハイゼンベルクモデルを扱う。

(2) 非平衡-平衡スケーリングは、初期緩和の計算時間依存性と物理量の有限サイズスケーリング形を、発散を打ち消した形で等置すると得られる。局所更新版「温度スケーリング」は、動的スケーリング理論の表式の相関長を温度に関する発散形  $\xi \sim (T - T_c)^\nu$  に置き換えることで得られる。これらを参照してクラスター更新版温度スケーリングを導出する。

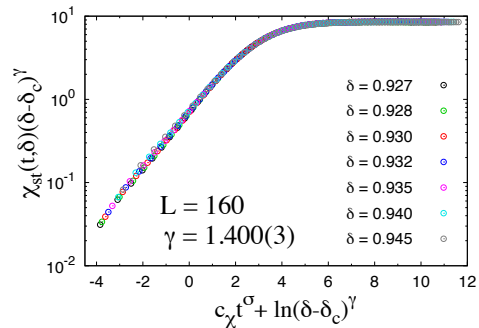
#### 4. 研究成果

(1) クラスタ更新版温度スケールリングを導出した。例えば帯磁率を完全無秩序状態から計算すると、初期緩和の計算時間依存性  $\chi \sim \exp(ct^\sigma)$  と平衡状態の温度に関する発散形  $\chi \sim (T - T_c)^\gamma$  を発散を打ち消した形で等置すると、 $\chi(t, T)(T - T_c)^\gamma \sim f_{sc}[ct^\sigma + \ln(T - T_c)^\gamma]$  が得られる。

(2) 上式は一見トートロジーのようだが、左辺の発散が打ち消されるのは平衡状態近傍、右辺のスケールリング関数は初期緩和の表式の指数関数の中に温度依存性を代入する形で得られ、決して自明ではない。3次元ハイゼンベルクモデルの転移点近傍のさまざまな温度における緩和データを非平衡-平衡スケールリングから得られた転移点  $T_c$  を用いてスケールすると、全データが同一曲線上に乗り、臨界指数  $\gamma$  が精度良く得られた。非平衡-平衡スケールリングで得られた  $\gamma/\nu$ ,  $\beta/\nu$  と組み合わせると臨界指数  $\nu$ ,  $\beta$  も評価され、他の臨界指数はスケールリング関係式を通じて得られる。サイズが有限（一辺  $L=560$ ）なので臨界点に近づきすぎると発散は鈍り、臨界点から遠ざかりすぎても鈍るが、フィッティングの残差を追いかければスケールリング領域は曖昧さなく評価できる。



(3) 同様の相転移の評価を、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で行った。ダイマー化した結合とそれ以外の結合強度の比を  $(1 + \delta):1$  とし、転移点近傍のさまざまな  $\delta$  の値における緩和データを、非平衡-平衡スケールリングから得られた転移点  $\delta_c$  を用いてスケールすると、全データが同一曲線上に乗り、臨界指数  $\gamma$  が評価できた。この量子相転移の普遍性クラスは3次元ハイゼンベルクモデルと同じであることが知られており、得られた臨界指数も整合的である。量子相転移の非平衡緩和解析では、シミュレーション温度や出発点の状態の取り方は自明ではないが、非平衡-平衡スケールリングによる解析同様、逆温度  $1/T = L$  と取り、ダイマー化した結合に **singlet** が局在した状態から出発してこの結果が得られた。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yoshihiko Nonomura and Yusuke Tomita	4. 巻 102
2. 論文標題 Temperature scaling in nonequilibrium relaxation in three-dimensional Heisenberg model in the Swendsen-Wang and Metropolis algorithms	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 052118(1-7)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.102.052118	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件/うち国際学会 2件）

1. 発表者名 野々村禎彦、富田裕介
2. 発表標題 クラスター非平衡緩和温度スケーリングの量子相転移への応用
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 野々村禎彦、富田裕介
2. 発表標題 クラスター非平衡緩和温度スケーリングの量子相転移への応用
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshihiko Nonomura, Yusuke Tomita
2. 発表標題 “Temperature scaling” in quantum phase transitions with cluster-update quantum Monte Carlo
3. 学会等名 APS March Meeting 2021（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野々村禎彦、富田裕介
2. 発表標題 2次元 $S=1/2$ 希釈量子反強磁性体のクラスター非平衡緩和法による解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshihiko Nonomura and Yusuke Tomita
2. 発表標題 Cluster nonequilibrium relaxation study of non-frustrated random quantum spin systems
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshihiko Nonomura and Yusuke Tomita
2. 発表標題 Efficient MC Scheme for Phase Transitions
3. 学会等名 WPI-MANA International Symposium 2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野々村禎彦、富田裕介
2. 発表標題 2次元 $S=1/2$ 希釈量子反強磁性体のクラスター非平衡緩和法による解析II
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	富田 裕介  (Tomita Yusuke)  (50361663)	芝浦工業大学・工学部・教授    (32619)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------