

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 22 日現在

機関番号：55101

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2014

課題番号：24654064

研究課題名(和文)非摂動くりこみ群によるマルチスケールアプローチ

研究課題名(英文)Multiscale approach by Non perturbative Renormalization group

研究代表者

小林 玉青 (Kobayashi, Tamao)

米子工業高等専門学校・その他部局等・講師

研究者番号：60506822

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：自然界には、ミクロの素粒子からマクロの宇宙まで、数十桁の複数スケール(マルチスケール)にわたる階層性がある。各スケールで似た形式の物理法則が繰り返し現れる。従来、各スケールの物理現象に対し、個別の理論や解析手法が提案され、各学問分野でタコツボ化して発展してきた。

本研究では、ミクロスケールの自由度からマクロスケールの物理量を横断的に取り扱う手法を開発した。具体的には、非摂動くりこみ群の手法を用いて、ミクロとマクロを繋ぐ自由度の変換を定式化する。これにより、長距離相互作用のあるイジング模型や量子散逸系について、目的とするスケールの物理を定量的かつ摂動論に依らずに解析することが可能となった。

研究成果の概要(英文)：In the laws of nature, there is the hierarchy among several energy scales (multiscale) from micro elementary particles to macro universe. The physical laws of similar form repeatedly appear at each scale. So far separate theories and analysis methods are proposed to the physical phenomenon of each scale in separated fields of study. In this research, we develop the cross-sectional methods to calculate physical quantities from micro degrees of freedom. We formulate the transformation between macro and micro degrees of freedom with non-perturbative renormalization group methods. Then we are able to analyze an intended macro scale physics quantitatively and non-perturbatively, especially in terms of long range Ising model and quantum dissipative systems.

研究分野：素粒子論、量子力学

キーワード：非摂動くりこみ群 イジング模型 量子散逸系 二重井戸ポテンシャル 相転移現象

1. 研究開始当初の背景

物理法則はスケールによって完全に異なるわけではなく、似たような形の法則が各スケールに現れる(階層的対称性)。しかしながら、従来の研究においては、各学問分野で、各エネルギースケールに応じた理論や手法が提案されてきた。もちろん、あるスケールで有効なモデルを構築し、実験的に実証していくことは物理現象の理解の基本であるが、現代物理学の最先端では、素粒子論領域のみならず、物性領域においても、複数スケール(マルチスケール)の理論やモデルを統一して理解し、現実問題と照らし合わせる必要性に迫られている。例えば、素粒子・原子核理論領域においては、各スケールの物理現象・理論を繋ぐ手法が確立されれば、核子とクォーク、量子ゆらぎと重力、量子散逸と摩擦といった素粒子論周辺の諸問題が、マルチスケールアプローチという新しい観点から解明される。一方では、ペタスケールコンピュータをトップとする計算機を用いた数値計算・シミュレーションの発展が、膨大が計算量を要するマルチスケール物理を取り扱うことを可能にしている。

マルチスケール間の関係性を正しく把握するためには、違うスケールでの理論的根拠の異なる計算を個別に比較するだけではなく、各スケールの法則が定量的にどうスケール変化するのか明確にする必要がある。理論や法則に含まれるパラメータや相構造が、マルチスケールでどのように進化するか直接解析すべきである。ところが、マルチスケールの数値計算では、1例として、方程式のステップ性に起因する困難がある。マイクロがあまりにも小さい時、数値計算は有限の時間では終了せず、マイクロの自由度を解析結果に取り入れることは困難になる。結果、見たいマクロスケールでの物理が正しく得られない。各スケールの物理現象に対して個別に開発されてきた既存の理論や解析手法だけでは、階層的対称性は説明できないというわけである。マイクロの情報からマクロスケールでの有効な情報を取り出して、マルチスケール間の理論を結びつけることが不可欠である。

ここで、くりこみ群は本質的に、マイクロの無数の情報からマクロの有限かつ有効な情報だけを取り出す理論的枠組みである。1940年代に朝永・Feynmanらにより構築されたくりこみ理論は、70年代に非摂動くりこみ群として概念的変革を遂げ、比較的マイクロの物理学である素粒子論分野や物性分野で発展してきた。非摂動くりこみ群(NPRG)方程式はマイクロとマクロの関係を定量的に明確に出来る。NPRGは本質的にその能力を持つほぼ唯一の理論・手法だと期待される。科学的理論研究は、長く摂動論が有効であった。しかし、現代では、多くの分野で摂動では取り扱えないダイナミクスや系が主役となる段階に入っている。現代物理の諸問題においては、摂動近似を基本とした従来の手法では系

の本質には迫ることが出来ない場合が往々にして立ちはだかっているのである。

そこで、本研究代表者は、マクロの摩擦とマイクロの量子力学的エネルギー散逸を繋ぐ新しい枠組みを提唱した。

Finite-Range Scaling Method to Analyze Systems with Infinite-Range Interactions, K-I. Aoki, T. Kobayashi and H. Tomita, Prog. Theor. Phys. 119-3 (2008)509.

ここではマイクロ相互作用だけを使って、マクロ摩擦への相転移点を NPRG とスケールリング則から推測する。まさに NPRG がスケール間の繋がりを定量的に解析するマルチスケールアプローチとなることに着目したものである。従来、各スケールの物理現象に対して有効な理論や解析手法が個別に開発され、各学問分野として発展してきたが、マルチスケールを扱う場合、分野横断的な着想が必要である。本研究代表者は多分野で汎用性が高い量子力学系・統計系に対して上記のような新しいくりこみ群計算手法を開発してきた知見があった。

2. 研究の目的

本研究課題では、マルチスケールでの物理現象を統一的に解明することを目的とした。マルチスケールの物理に内在する階層的対称性を非摂動くりこみ群を用いて探索する。非摂動くりこみ群の手法によれば、マイクロスケールの自由度とマクロの物理現象の間の繋がりを摂動論に依らず定式化し、定量的に取り扱うことが可能である。従来の研究のように、特定のスケールにターゲットを限るのではなく、各スケール間の理論を NPRG 方程式によって結びつける。各スケールでの物理現象に最適な非摂動くりこみ群的計算手法を理論的及び数値的の両面から開発し、マルチスケールでの解析を一気に行う。

主たる目的として以下の2つを挙げる。

(1) 従来アプローチ困難な系への挑戦

マルチスケールの物理を定量的に繋ぐこれまでにない方法を提供し、従来の方法ではアプローチが困難であった系に適用する。その結果、マイクロとマクロのスケール間の普遍的対称性が明らかになり、各スケールの物理が個別の理論としてではなく、一気に理解される。マイクロに起源を持つはずであるが、マクロスケールの物理との関係が明確でない系である、長距離相互作用のある統計系や摩擦の起源である量子散逸系を主に対象とする。

(2) 新規マルチスケール計算手法の開発

計算リソースや労力も画的にローコストで、現実的な結果を得ることが可能な、新規マルチスケール計算手法を開発する。研究の目的で挙げた本研究代表者の研究では、数値計算量がシミュレーションと比べて非常に少ない。それにも関わらず、モンテカルロ

シミュレーションの結果と 0.1%の精度で一致しており、驚くべきことである。非摂動くりこみ群では、くりこみ群方程式自体の導出やその解析手法に多くの有効な可能性があり、理論計算と数値計算を組み合わせる強力にマルチスケール計算を行えるためである。NPRG の手法では、その本質は行列積や微分方程式で表される。これらの形式は、理論的に汎用性が高い形式であるだけでなく、計算機による大規模計算でも取り扱い易い。そのため、ペタスケールスーパーコンピュータを必要とするような素粒子・物性分野のシミュレーションにおいても有用である。

3. 研究の方法

マイクロとマクロの物理法則間の普遍的双対性を、以下の手順で非摂動くりこみ群を用いて解明した。本研究課題においては、行列積で定式化されるくりこみ変換の理論的定式化と、それを従来の方法ではアプローチ尾困難な物理現象に適用することに重点を置いた。

(1) 理論的枠組みの構築

非摂動くりこみ群(NPRG)を用いて、マクロ理論を記述するパラメタである有効相互作用を、マイクロの無限自由度のみから直接導く理論的枠組みを新たに提唱した。

くりこみ変換は有効相互作用のスケール変化を表すが、マイクロの無限自由度から非摂動的な効果を十分引き出すためには有効相互作用空間を適切に定義しなければならない。どのような有効相互作用空間が本質的であり、その重要な相互作用空間を記述できる NPRG 方程式はどのような形式であるか詳細に検討を行った。

(2) NPRG 方程式の導出

上で述べた理論的枠組みは、有効相互作用のスケール変化を記述する行列積 (Iteration RG=IRG) もしくは、汎関数微分方程式型の非摂動くりこみ群 (Functional RG=FRG) 方程式に集約される。スピンの代表される離散的な統計系では、有効相互作用のスケール変化を表すくりこみ変換は、行列積 (IRG) で表現される。一方、連続自由度を持つ場の理論においては、有効相互作用のスケール変化は、汎関数微分 (FRG) 方程式として得られる。これらが非摂動くりこみ群 (NPRG) 方程式である。

特に具体的に IRG について理論的定式化に重点的に取り組んだ。IRG では、無限次元のヒルベルト空間に広がった相互作用空間のうち、本質的な部分空間のみを取り出す手法を用いた IRG ではマイクロの無限自由度から非摂動的な効果を十分引き出すため、有効相互作用を適切に定義しなければならない。相互作用空間の対称性の維持が重要である。ここで有効相互作用を記述する行列が定まれば、くりこみ変換も決定

される。マイクロの理論を決定する相互作用は、系の対称性から許されるものはすべて取り入れることが可能である。

以上の NPRG の構成において重要なことは、NPRG を構成する手順は相互作用の摂動展開には依らないということである。したがって、摂動論では原理的に捉えられない相互作用の変化を記述し、マルチスケールでの普遍的な双対性を取り出すことが出来た。

(3) 具体的な系への適用

マイクロ・マクロ物理現象及び理論のセットに対して、(1)(2)で新たに提唱した NPRG の手法を適用し、方法論の有効性をマルチスケールで実証した。そして、得られた各スケールの有効相互作用から、マルチスケール間の双対性を定量的に評価した。

4. 研究成果

研究成果は大きく以下の2点にまとめられる。

(1) 量子散逸系での量子古典相転移における臨界指数の定量的評価

「摩擦」のマイクロの起源を探索する。ありふれたものである摩擦は、マイクロでの非最近接相互作用に起因するとされるが、マイクロ量子力学から如何にしてマクロ摩擦が生じるか未だ明らかでない。量子情報分野では、波束にはたらく摩擦、「量子散逸」を如何に抑制するかが技術的課題である。しかし、最近接以外の相互作用があると、くりこみ変換後のマクロスケールでは、有効相互作用距離が無制限まですぐに到達してしまう。これがマルチスケールでの解析を困難なものとしてきた。

本研究では、2. 研究の目的で取り上げた本研究代表者の論文で提唱した有限レンジスケールリングの手法を応用した。量子散逸二重井戸系を離散化し、イジングスピンの有効相互作用をマップすれば、IRG に持ち込める。計算されるマクロ有効相互作用を用いて、マイクロの量子散逸がマクロの摩擦を生み出す量子古典相転移の解析を行った。

本研究では、特に二重井戸系に対して、イジングモデルとの双対性を利用した二状態近似のみならず、より数値多重積分の寄与の大きい本質的な量子状態を抜き出して数値計算を行った。有限レンジスケールリングの手法においては、有限レンジ系をくりこみ群による方法で評価し、無限レンジの場合の感受率の発散点から相転移の臨界点を得る。量子散逸系の場合に得られた結果は、長距離相互作用のダンピング指数の関数として臨界指数を定量的に与えており、モンテカルロシミュレーションの結果とも精度よく一致した。これにより、マイクロからマクロの「摩擦」がいかにして現れるかを量子古典相転移のパラメータとして追うことが出来た。また、量子

情報分野などの応用を考慮すると、波束にはたらくミクロ摩擦をいかに制御するかが技術的課題であり、今後この点にも、本研究の結果が寄与することも期待される。

これらの解析の際、大規模行列積、大規模行列対角化などの数値計算が必要となった。本研究において新たに導入した PC クラスタを活用し、その上での C++ 及び Intel Math Kernel Library を用いた。くりこみ群の手法を用いて本質的な自由度に計算を絞り込むことで、小規模な計算コストで大規模シミュレーションと匹敵する高精度の結果を出すことが可能となった。

(2) 2次元イジング模型のドメイン・ウォールくりこみ群による解析

2次元以上のイジング模型は本質的に長距離相互作用を含む。そのため、イジング模型とはいっても従来の方法ではアプローチは容易ではない。そこで、スピンの配位を、隣合うスピンの間のドメインウォールの有無で表現し、ドメインウォールの有無を変数として系を表現することとする。精度の高い計算手法として知られているテンソルネットワーク繰り込み群の手法を参考に、このドメインウォール変数に対するくりこみ群、すなわちドメインウォールくりこみ群 (DWRG) を定義する。すると、2次元イジング模型の強磁性相転移点における臨界指数は、磁場を導入することなく、最初の2状態近似において、厳密解とのずれが2%以内である。従来のくりこみ群の粗視化の方法では、最初の近似における厳密解とのずれが約36%と大きいことを考えると、破格というべき成果である。また、DWRGにおいては、今のところ分かっている限り、2種類の方法で磁場を導入し、相転移現象を定量的に議論することが可能である。より複雑な系にDWRGを展開することを考慮すると、高次の近似への対応、磁場を導入した際の臨界現象の高精度解析の2点を重点的に、今後も研究を続けるべきである。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計3件)

Phase transition of the dissipative double-well quantum mechanics, Ken-Ichi Aoki, Tamao Kobayashi, Mod. Phys. Lett. B, 26 (2012) 1250202 (14p), 査読有

散逸二重井戸系における相転移の解析, 青木健一, 小林玉青, 素粒子論研究, 17(2014)138-141, 査読無

Domain Wall Renormalization Group Approach to the 2d Ising Model with External Magnetic Field, Ken-Ichi Aoki, Yasuhiro Fujii, Tamao Kobayashi, Daisuke Sato and Hiroshi Tomita,

"Applications of Renormalization Group Methods in Mathematical Sciences" RIMS Koukyuroku, 1904(2014)13-30, 査読無

〔学会発表〕(計9件)

Block Decimation Renormalization Group and Finite Range Scaling Analysis of Dissipative Double Well Quantum Mechanics, Ken-Ichi Aoki, Tamao Kobayashi, 2012.09.05, ERG2012 (Centre of Paul Langevin, Aussois, France)

長距離相互作用を持つ量子系のブロックくりこみ群と有限レンジスケールリングによる相転移の解析, 青木健一, 小林玉青, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012.09.11 (京都産業大学)

長距離相互作用を持つ量子系の full-MC-BDRG による解析, 青木健一, 小林玉青, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013.03.29 (広島大学)

散逸二重井戸系における相転移の解析, 青木健一, 小林玉青, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」2013.08.26 (京都・基礎物理学研究所)

Domain Wall Renormalization Group Approach to the 2d Ising Model with External Magnetic Field, Ken-Ichi Aoki, Yasuhiro Fujii, Tamao Kobayashi and Hiroshi Tomita, Applications of RG Methods in Mathematical Sciences, 2013.09.11 (RIMS, Kyoto)

長距離相互作用のある二重井戸量子力学系の full-BDRG による解析, 青木健一, 小林玉青, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013.09.23 (高知大学)

実空間くりこみ群による局在化相転移の解析, 小林玉青, 島根大学素粒子論研究室セミナー, 2013.01.31 (島根大学)

外部磁場中の2次元イジング模型のドメイン・ウォールくりこみ群による解析, 青木健一, 藤井康弘, 小林玉青, 佐藤大輔, 富田洋, 吉村友佑, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014.03.30 (東海大学)

Domain Wall Renormalization Group Approach for 2d Ising spin model, Ken-Ichi Aoki, Tamao Kobayashi, Tomohiko Yasoyama and Yusuke Yoshimura, 2014.09.24, ERG2014 (Ionian Blue in Lefkade inland, Greece)

〔その他〕

ホームページ等

<https://www.yonago-k.ac.jp/center/upload/555590bba1fb5.pdf>

6. 研究組織

(1)研究代表者

小林 玉青 (KOBAYASHI, Tamao)

米子工業高等専門学校・教養教育科・講師

研究者番号：60506822

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

青木 健一 (AOKI, Ken-ichi)

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：00150912