

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：32702

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25400387

研究課題名(和文) 格子ガラスモデルにおける位相空間分割転移

研究課題名(英文) Phase Transition with an Ergodicity Breaking in Lattice Glass Models

研究代表者

佐々木 志剛 (Sasaki, Munetaka)

神奈川大学・工学部・准教授

研究者番号：80400282

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：最初に、格子ガラスモデルにおいて効率的な状態更新を可能とするモンテカルロ法を開発した。次に、位相空間分割転移を直接的に検出できるシミュレーション手法を開発した。また、この手法をランダムグラフ上のBiroli-Mezard (BM) 格子ガラスモデルに適用し、cavity法の結果と比較することで、手法の有用性を示した。さらに、BM格子ガラスモデルに磁場と磁化を導入し、外場応答のエイジング現象について調べた。その結果、一定磁場の下での磁化の非単調な時間変化など、幾つかの興味深い結果を得ることができた。

研究成果の概要(英文)：I invented an efficient Monte-Carlo method for lattice glass models. I also invented a numerical method of directly detecting ergodicity breaking in glassy systems. To examine the validity of the method, I applied it to the Biroli-Mezard (BM) lattice glass model on a regular random graph. As a result, I found that our method detects an ergodicity breaking at an occupation density predicted by the cavity method. I also studied aging phenomena of response to an external field in the BM lattice glass model by introducing magnetization and magnetic field to the model. As a result, I obtained several curious results such as nonmonotonous time-dependence of magnetization in a constant field.

研究分野：数物系科学

キーワード：ガラス エルゴード性の破れ 位相空間分割転移 スピングラス レプリカ対称性の破れ エイジング
非平衡ダイナミクス

1. 研究開始当初の背景

ガラスの性質を理解することは物理学における重要な未解決問題の1つである。そして、Biroli と Mézard は純粋に静的(熱力学的)なガラス転移を起こす格子ガラスモデル(以降 BM モデルと略す)を考案し、大きな注目を浴びている。

他方、ガラスのダイナミクスでは、遅い2段階緩和や新規な履歴現象、動的不均一性など、様々な興味深い現象が観測されているが、これらの現象を理解する上で1つのキーポイントになると考えられるのが、位相空間分割転移である。図1に示したように、位相空間分割転移とは、低密度では1つの巨大なクラスターとなっている位相空間が、ある密度を境に複数のクラスターに分割される転移である。この転移が起こると、系は高密度側で、位相空間上の全ての点を動き回ることができなくなるため、この転移はエルゴード-非エルゴード転移と呼ぶこともできる。一般に、位相空間分割転移は検出が非常に難しいため、これまであまり研究が行われてこなかった。しかし、ランダムグラフ上の BM モデルでは、cavity 法と呼ばれるある種の近似的解析手法により、位相空間分割転移の存在を強く示唆する結果が得られている。これは非常に興味深い結果ではあるが、位相空間分割転移を直接的に検出するところまでは至っていない。また、cavity 法はランダムグラフ上のモデルに対しては非常に有効であるが、通常の有限次元格子上的の問題に対しては有効でなく、その点も問題である。

また、位相空間分割転移はガラスのスローダイナミクスと深い関連があると考えられるが、そもそも位相空間分割転移自体がこれまでにあまり研究されてこなかったため、両者の関連についても、ほとんど研究が行われてこなかった。

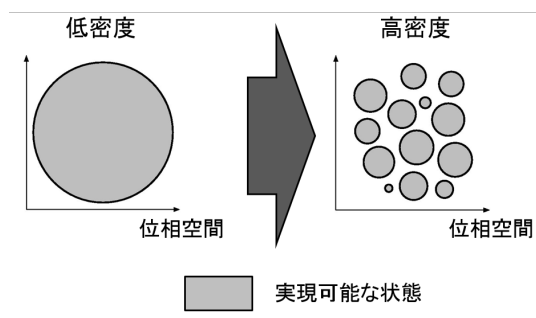


図1：位相空間分割転移の概念図

2. 研究の目的

このような状況を踏まえ、本研究では以下の課題を研究目的とした。

(1) 位相空間分割転移を直接的に検出できるシミュレーション手法の開発

同じ初期状態からスタートして、2つのレプリカの重なり(オーバーラップ)を測定することで、位相空間分割転移が起こっているかどうかを判定するシミュレーション手法を開発する。

また、ガラスは転移点に近づくにつれて急激に緩和が遅くなるため、エルゴード性の破れをシミュレーションで検出する場合、「実際にはエルゴード性が破れていないのに、緩和が遅いため、位相空間をエルゴード的に回ることには失敗した」という可能性が常に付きまとう。この危険性をできる限り低減するため、緩和の速い効率的なモンテカルロ法の開発も同時に行う。

(2) 位相空間分割転移とスローダイナミクスの関係についての研究

位相空間分割転移を示すモデルのスローダイナミクスを調べることで、両者の関係を明らかにすることがこの研究の目的である。両者の関係を明らかにするため、位相空間分割転移の転移密度近傍での緩和時間を精密に測定する。また、ガラス系のスローダイナミクスに関する実験では、外場応答が測定されることが多いので、格子ガラスモデルに外場とそれに対応する応答を導入し、外場応答のスローダイナミクスについても研究を行う。

3. 研究の方法

「研究の目的」欄で述べた研究を遂行するため、以下の手法を開発・使用した。

(1) List Referring Monte-Carlo (LRMC) 法の開発

「研究の目的」欄でも述べたように、エルゴード性の破れを精度良く検出するためには、位相空間を効率的に探索するシミュレーション手法が必要であるが、この目的のために開発したのが LRMC 法である。BM 格子ガラスモデルでは、「各粒子の最近接粒子数は高々 p 個」という、粒子配置に関する制限が課せられる。そのため、粒子密度が高くなると、空孔への粒子の挿入を試みても、「粒子配置に関する制限に引っかかって棄却される」というイベントが頻発するようになる。そこで LRMC 法では、「粒子挿入が可能な空孔のリストを常に保持し、その空孔にだけ粒子の挿入を試みる」ということを行う。リストを保持するためには計算コストが必要だが、制約条件に反する無駄な試行を避けられるため、転移密度近傍などの高密度領域ではシミュレーション効率が向上する。また LRMC 法では、シミュレーション効率をさらに向上するため、「粒子と空孔の交換」も状態遷移の素過程として取り入れた。この過程は棄却率 0 で行うことが可能である。

(2) 位相空間分割転移を検出するシミュレーション手法の開発

このシミュレーション手法の基本的なアイデアを示したのが図2である。この手法では、粒子密度に対して ρ_L ρ_U という制限を課す。また、位相空間分割転移がおこる粒子密度を ρ_d とする。最初に $\rho_L < \rho_d$ の場合(図2(a)参照)系は ρ_d よりも低い粒子密度になることが可能であり、そこでは位相空間がエルゴード的であるため、系は位相空間上の全ての点を動き回ることが可能である。それに対して $\rho_L > \rho_d$ の場合(図2(b)参照)系はエルゴード的な ρ_d の領域に達することができないため、最初の谷(図の灰色の領域)から逃れることができない。

より具体的には、2つのレプリカを用意して、同じ初期条件からスタートして、2つのレプリカの重なり(オーバーラップ) q の分布関数 $P(q)$ を測定する。また、粒子密度の下限値 ρ_L は色々な値に対してシミュレーションを行うが、上限値 ρ_U は常にある値に固定する。そして、 $P(q)$ の測定は、この固定された上限の密度 ρ_U において行う(図2参照)。そのため、もし $P(q)$ の測定結果に違いが生じれば、それは ρ_L の変化によって生じたエルゴード性の破れが原因であると言える。

また、 ρ_L ρ_U を満たす位相空間上の領域(図2の灰色の部分)を系が効率的に動き回れるようにするため、Wang-Landau 法によってこの密度領域の状態密度 $\Omega(\rho)$ を測定し、 $W_{eq}(\rho) = 1/\Omega(\rho)$ として $P(q)$ の測定を行った。ここで $W_{eq}(\rho)$ は、密度 ρ の状態の平衡分布の重み。こうすると、系が密度 ρ の状態を取る確率 $P(\rho) = \Omega(\rho) \times W_{eq}(\rho)$ が密度に依らず一定になり、系が位相空間を効率的に探索することが可能となる。

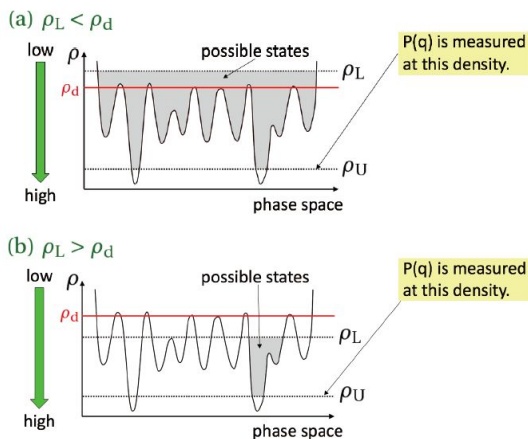


図2：位相空間分割転移を検出するシミュレーション手法の基本的アイデア。灰色の領域は粒子配置の制約条件を満足する、可能な粒子配置を表す。 $\rho_L < \rho_d$ の低密度領域はエルゴード的、系は位相空間上を自由に動き回ることができる。

4. 研究成果

本研究では、「研究の目的」欄で述べた課題について、以下の成果を得ることができた。

(1) LRMC 法の開発(「主な発表論文等」欄における雑誌論文5にて発表)

「研究の方法」欄で述べた LRMC 法を開発し、その有効性の検証を行った。その結果、位相空間分割転移の転移密度近傍では、LRMC 法の緩和時間は通常の方法の約 1/1000 となることが示された。他方、LRMC 法の1ステップあたりの計算時間は通常の方法の約7倍であった。従って、1ステップあたりの計算時間の違いを考慮しても、LRMC 法は通常の方法より、はるかに効率的であると言える。

また、LRMC 法の導入により、レプリカ交換法や Wang-Landau 法といった拡張アンサンブル法の効率がどのように変化するかについても調べた。その結果、例えばサイト数 1024 のランダムグラフ上の BM モデルでは、LRMC 法の導入により、レプリカ交換法のエルゴード時間(各レプリカの化学ポテンシャルが最低値から最高値に達し、再び最低値に戻るまでの平均ステップ数)が約 1/100 になることが示された(図3参照)。また Wang-Landau 法に関しては、「状態更新の方法として、通常の方法を採用すると状態密度の学習に失敗するが、LRMC 法を用いると学習可能になる」というケースが数多く観測された。これらの結果は、ローカルな状態更新の効率が、拡張アンサンブル法の効率にも大きな影響を及ぼすことを示している。

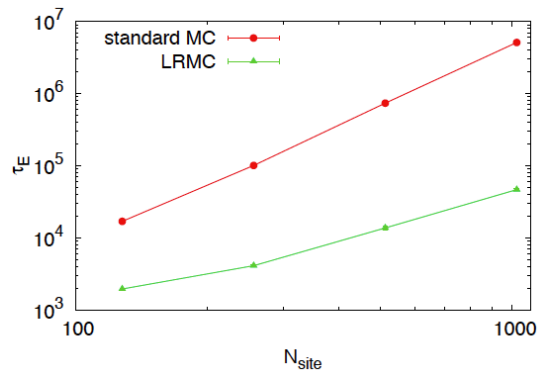


図3：レプリカ交換法におけるエルゴード時間のサイズ依存性。状態更新の方法として通常のモンテカルロ法を用いたのが赤丸のデータ、LRMC 法を用いたのが緑の三角のデータ。

(2) 位相空間分割転移を検出するシミュレーション手法の開発(「主な発表論文等」欄における雑誌論文1にて発表)

「研究の方法」欄で述べたシミュレーション法を実装し、ランダムグラフ上の BM モデルに適用することで手法の妥当性を検証した。具体的には、ランダムグラフの次数が3、各粒子の最近接粒子数が1以下の BM モデル

を適用対象とした。cavity 法を用いた研究では、このモデルの位相空間分割転移密度 ρ_d は 0.5708、静的転移密度 ρ_s は 0.5725 と評価されている。検証の結果を示しているのが、図 4 である。「研究の方法」欄の(2)で述べたように、系の粒子密度 ρ_L は ρ_U に制限している。また、 ρ_L は 0.565 から 0.572 まで 0.001 刻みで変えているが、 ρ_U は 0.573 に固定している。また、 $P(q)$ は常に $\rho_U=0.573$ で測定している。 ρ_L の値が 0.565 から 0.569 の $P(q)$ はきれいに重なっているが、 $\rho_L=0.570$ で $P(q)$ の形が突然変化し、 $\rho_L=0.571, 0.572$ では $q \approx 1$ のピークだけが生き残っている。このことは、 $\rho_L \approx 0.570$ の近傍でエルゴード性が破れ、図 2 の(a)の状況から(b)の状況に変化したことを示している。状況が変化した密度は cavity 法により評価された位相空間分割転移密度 $\rho_d=0.5708$ より若干小さいが、これは有限サイズ効果によるものと考えられる。この結果は、本手法により位相空間分割転移を正しく検出できることを強く示唆している。

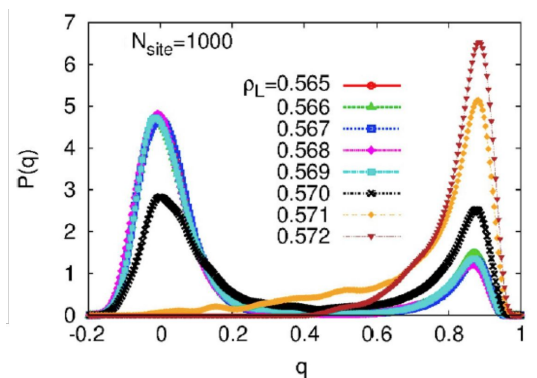


図 4: 重なり q の分布関数 $P(q)$ の ρ_L 依存性。サイト数は 1000。粒子密度の上限値 ρ_U は 0.573。ランダムグラフに対する平均は 100 サンプルに対して取っている。

(3) 外場応答のエージング現象に関する研究(「主な発表論文等」欄における学会発表 1・2 にて発表)

「研究の目的」欄の(2)に対応する研究として、ランダムグラフ上の BM モデルに対して外場とそれに応答する物理量を導入し、外場応答のエージング(履歴)現象に関する研究を行った。具体的には、各サイトに対して磁化に相当する量 m_i を導入し、各サイトの化学ポテンシャルを $\mu_i = \mu(1 + Hm_i)$ とした。ここで m_i は、+1 にするか -1 にするか、確率 1/2 でランダムに決める。また H は磁場に相当する量、 μ は $H=0$ の時の化学ポテンシャル。このモデルに正の磁場をかけると、磁化 m_i が正のサイトの方が負のサイトより化学ポテンシャルが高くなり、粒子の存在確率が高くなる。そして外場 H に対する応答量として、 $M = (\sum_i n_i m_i) / N_{\text{site}}$ を測定した。ここで n_i は、サ

イト i に粒子があれば 1、そうでなければ 0 となる変数。また N_{site} はサイト数。

最初に、スピングラスで良く測定される磁場中冷却磁化 M_{FC} とゼロ磁場冷却磁化 M_{ZFC} の測定結果を示したのが図 5 である。レプリカ交換法を用いて測定した熱平衡磁化 M_{eq} のデータも一緒に示している。横軸の化学ポテンシャル μ は逆温度に対応し、大きな μ が低温に対応する点に注意。 M_{FC} の測定では、磁場 H をかけながら μ を一定の速度で増やし、磁化を μ の関数として測定している。 μ の増加が冷却に対応している。それに対して M_{ZFC} の測定では、最初ゼロ磁場で μ を一定の速度で増加し、その後磁場をかけながら μ を同じ速度で減少し、その途中で磁化を測定している。 M_{FC} と M_{eq} は大きな μ (低温に相当) でほぼ一定となっているが、 M_{ZFC} は転移点より大きな μ で、 μ に対して単調に減少している。これはスピングラスの実験結果と定性的に良く一致している。

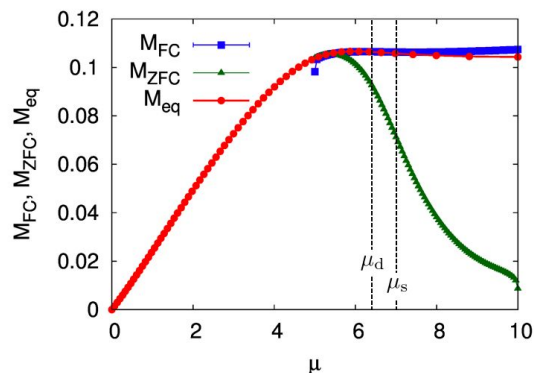


図 5: ランダムグラフ上の BM モデルにおける磁場中冷却磁化 M_{FC} 、ゼロ磁場冷却磁化 M_{ZFC} 、熱平衡磁化 M_{eq} の μ 依存性。ランダムグラフの次数は 3、最近接粒子数は 1 以下、外場 H は 0.1。ランダムグラフに対する平均は 1000 サンプルに対して取っている。また μ_d と μ_s は、 $H=0$ のモデルにおける位相空間分割転移点と静的転移点を表す。

次に M_{FC} の測定において、冷却 (μ の増加) を一時的に中断し、中断からの経過時間 t の関数として磁化を測定した結果が図 6 である。冷却を中断した後も磁場はかけたままである。また図の縦軸 $M(t) = M(t) - M(0)$ は、中断直後の磁化との差を表す。経過時間 t が増えるにつれ、最初磁化は増加するが、その後減少に転じている。これと同様の実験はスピングラスでも行われており、冷却中断温度が転移温度近傍の場合は同様の結果が得られている。しかし、磁化が時間に対して非単調に変化する原因は現在のところ不明であり、それを明らかにするのは今後の研究課題である。

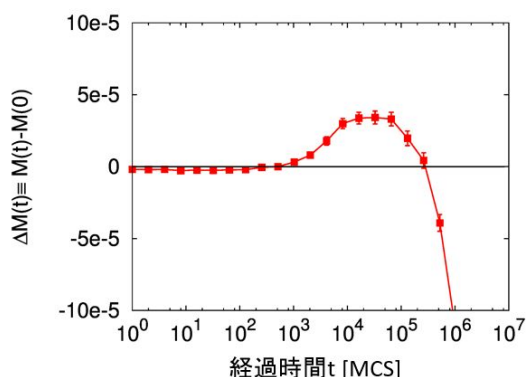


図6：中断を含む磁場中冷却磁化 M_{FC} の経過時間依存性。化学ポテンシャルの増加を $\mu = 9.0$ で中断し、そこから経過時間の関数として磁化を測定している。ランダムグラフに対する平均は 10000 サンプルに対して取っている。その他の条件は図5の場合と同じ。

最後に、磁場および磁化を導入した BM モデルの熱平衡状態を詳細に調べてみたところ、磁場が強くなるにつれてレプリカ対称性の破れ方が 1-step から full step へ変化する振る舞いが観測された。温度変化によりレプリカ対称性の破れ方が変わる例はスピングラス等においてこれまでに幾つか報告されているが、外場変化によりレプリカ対称性の破れ方が変わる例はこれまでに報告例がなく、興味深い結果であると言える。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計5件)

1. Munetaka Sasaki and Koji Hukushima, 「Numerical Detection of Ergodicity Breaking in a Glass Model」, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **85**, (2016), pp. 074602-1-5, 査読あり, DOI:10.7566/JPSJ.85.074602
2. Eishin Endo, Yuta Toga, and Munetaka Sasaki, 「Parallelized Stochastic Cutoff Method for Long-Range Interacting Systems」, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **84**, (2015), pp. 074002-1-7, 査読あり, DOI:10.7566/JPSJ.84.074002
3. Katsuyoshi Matsushita and Munetaka Sasaki, 「Design of Domain Wall Spin Torquemeter」, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **84**, (2015), pp. 043801-1-5, 査読あり, DOI:10.7566/JPSJ.84.043801

4. Yohei Kota, Hiroshi Imamura, and Munetaka Sasaki, 「Enhancement of Spin Correlation in Cr_2O_3 Film Above Néel Temperature Induced by Forming a Junction With Fe_2O_3 Layer: First-Principles and Monte-Carlo Study」, IEEE Transactions on Magnetics **50**, (2014), pp. 2505404-1-4, 査読あり, DOI:10.1109/TMAG.2014.2324014

5. Munetaka Sasaki and Koji Hukushima, 「A List Referring Monte-Carlo Method for Lattice Glass Models」, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **82**, (2013), pp. 094003-1-15, 査読あり, DOI:10.7566/JPSJ.82.094003

[学会発表](計7件)

1. Munetaka Sasaki, 「Aging Phenomena of Response to an External Field in the Biroli-Mézard Lattice Glass Model」, International Workshop on Glasses and Related Nonequilibrium Systems, March 22 2017, 大阪大学 (大阪)
2. 佐々木志剛, 「Biroli-Mézard 格子ガラスモデルにおける外場応答のエージング現象」, 日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 16 日、金沢大学 (金沢)
3. 佐々木志剛, 「Irreversible モンテカルロ法の改良への試み」, 統計物理の新展開 2016、2016 年 3 月 25 日、大阪大学 (大阪)
4. 佐々木志剛, 「レプリカ間遷移の抑制による、Irreversible MC 法の改良」, 日本物理学会第 71 回年次大会、2016 年 3 月 20 日、東北学院大学 (宮城)
5. 佐々木志剛, 「温度により想起パターンが異なるニューラルネットワークの構成」, 統計物理の新展開 2015、2015 年 6 月 21 日、ラフォーレ伊東 (静岡)
6. 遠藤栄進、梅裕太、佐々木志剛, 「長距離相互作用系におけるモンテカルロ計算の並列処理 確率的カットオフ法とグラフ彩色問題を用いて」, 日本物理学会第 70 回年次大会、2015 年 3 月 24 日、早稲田大学 (東京)
7. 遠藤栄進、梅裕太、佐々木志剛, 「長距離相互作用系におけるモンテカルロ計算の並列処理 確率的カットオフ法とグラフ彩色問題を用いて」, 日本物理学

会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 8 日、
中部大学（愛知）

6 . 研究組織

(1)研究代表者

佐々木 志剛(SASAKI, Munetaka)

神奈川大学・工学部物理学教室・准教授

研究者番号：8 0 4 0 0 2 8 2

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

なし