

令和元年6月6日現在

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K05205

研究課題名(和文) カーネル法による動的スケーリング解析の改良と非平衡緩和法の新展開

研究課題名(英文) Improvement of dynamics scaling analysis by means of the kernel method and new development for the nonequilibrium relaxation method

研究代表者

尾関 之康 (Ozeki, Yukiyasu)

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：70214137

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)：カーネル法による動的スケーリングの改良が成功し、スケーリング関数はカーネル関数によって表現され、試行錯誤の過程が排除された。共役勾配法による最適化の導入によって、効率の良い高速な評価法が実現した。作業がほぼ自動化され、様々な応用への道が開きつつある。緩和データの多さを利用したBootstrap法により、評価誤差の大幅な改善が見込まれる。緩和時間の関数形を変えた複数のスケーリングや関数形を仮定しないスケーリングを比較し、転移の種類の判別が可能になった。スケーリングの補正項の導入も容易になり、精度が飛躍的に向上した。KT転移のようなトポロジカル相転移において信頼性の高い解析法が確立した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

相転移や臨界現象における臨界普遍性の確立は、繰り込み群の提案依頼の課題だが、確認するための道具は不十分で、近年の数値計算でも満足な結果は得られていない。シミュレーションによる臨界指数の評価は年々向上しているが、フラストレーション系、提示原型、ランダム系等では遅い緩和によりしばしば困難に直面する。非平衡緩和法はそのような状況を打破する可能性を秘めており、今回の動的スケーリングの改良による解析精度の向上と解析作業の効率化は、今後の分野の発展に大きく貢献することが期待される。

研究成果の概要(英文)：We succeed an improvement of the dynamical scaling by means of the kernel method, by which a scaling function can be expressed by the kernel functions avoiding some trial and error processes. An efficient and fast estimation method is realized by means of the conjugate gradient method for optimization. The process for scaling is almost automatized providing various applications. The bootstrap method by the use of huge number of data points provides a remarkable improvement for the accuracy of estimations. Comparing dynamical scaling methods with assuming several patterns for asymptotic forms of relaxation time and that without any assumption for the form, we develop a method to discriminate the transition types. We also establish the reliable analysis for topological phase transitions such as the KT one.

研究分野：統計物理学

キーワード：非平衡緩和法 カル相転移 動的スケーリング解析 カーネル法 臨界普遍性 Kosterlitz-Thouless転移 トポロジ

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

繰りこみ群の登場以来、臨界普遍性の検証は統計物理学における主要な課題である。臨界普遍性を直接検証するには、複数の模型や臨界点について、系統的な臨界指数の高精度評価が必要になる。KT 転移や SG 転移は、その存在の判定でしばしば論争が起きるが、ほとんどの場合数値解析による解決は難かしかつた。平衡シミュレーションでは難かしかつたこのような解析も、非平衡緩和法による動的スケール解析は、緩和が遅くシミュレーションの平衡化作業に困難のある体系でさえ有効に働くことが示されてきた。

非平衡緩和法による動的スケール解析は強力である。有限サイズスケールと比べデータ点が非常に多いので、本来精度等において有利に作用すると期待されるが、旧法は以下に述べるような問題点があり、この分野の進展を阻害していた。

- i) 未知のスケール関数に多項式モデル等を仮定するため、設定の可否の検証が必要になる。
- ii) スケールの最適化はこのカーブをガイドに行われていたので、クロスオーバーの観測が必須であった。転移温度近傍では長時間を要し、緩和の遅い系では近傍での計算が難かしかつた。
- iii) 計算機による最適化作業は最小二乗法が中心だが、一部の非線形性のために、多くのパラメーターを扱うのが難しく、手間も掛かり、応用の自由度も少なかつた。

2. 研究の目的

非平衡緩和法の動的スケール解析は緩和の遅い系に有効であり、積極的に臨界普遍性、動的臨界現象、KT 転移の判別等に応用したいのだが、上述の問題のために多重の最適化を伴うこの種の解析は、作業が重く困難さを伴っていた。この問題を解決するために、有限サイズスケールに提案された方法の動的スケールへの拡張を試みる。ベイズ推定によって、スケール関数の構築にはカーネル法を利用し、最適化には共役勾配法を利用する。

以下の作業や学術的進展を目指す。

- a) KT 転移の動的スケール解析において、ベイズ推定とカーネル法による改良を定式化し、共役勾配法と共に計算機上に実装する。さらに、この方法を SG 転移にも拡張する。
- b) スケール解析を自動化して Bootstrap 法を導入し、解析精度の向上を図る。
- c) KT 転移の存在を数値的に判別する方法を確立し、その検証が難しい諸問題に応用する。
- d) KT 転移系の動的臨界普遍性の検証とランダム KT 転移系の静的・動的臨界普遍性の検証。
- e) SG 転移の臨界普遍性の検証とランダム系の臨界普遍性の統一的描像の確立。

3. 研究の方法

始めにカーネル法による動的スケールの改良を定式化する。共役勾配法と組み合わせ、最適化作業を自動化し、高信頼性・高効率化を図る。この成果によって、緩和データの多さを前提とした Bootstrap 法の適用が実現し、統計誤差を縮小する。また、KT 転移と二次相転移の緩和時間の違いをスケールによって数値的に判定する方法を確立する。以上の基礎研究を基にして、KT 転移の判別の具体的な応用や、KT 転移の動的臨界普遍性の詳細な調査、SG 転移系の臨界普遍性の構造の研究に繋げる。

4. 研究成果

(1) 動的スケールの改良

ベイズ推定とカーネル法による動的スケールの改良が成功し、スケール関数はカーネル関数によって表現され、試行錯誤の過程が排除され、モデル関数に頼らない曖昧さの無い構築が可能になった。共役勾配法による最適化の導入によって、効率の良い高速な評価法が実現した。スケールのフィッティング作業がほぼ自動化され、複数のスケールを繰り返すような様々な応用への道が開きつつある。緩和データの多さを利用した Bootstrap 法により、スケールに使用するデータのサンプリングを複数回行い誤差を求め、評価誤差の大幅な改善が可能になった。。

(2) 転移の種類判別法の確立

転移によって異なる緩和時間の漸近形それぞれについてスケールを行い得られた緩和時間の温度依存性と、関数形を仮定せずデータの存在する温度毎の緩和時間を全てパラメータ化したスケールの結果を比較し、仮定から得られた緩和時間と仮定しないで得られた緩和時間の比較してより近いものを選択することによって、転移の種類判別が可能になった。

(3) 補正項の導入による高精度化

補正項を導入して試験的に調べた 2 次元 Ising 模型における転移温度や動的臨界指数は、評価精度が格段に向上した。この性質の汎用性を確認するためより詳細な調査を他の模型で実施した。この解析の KT 転移への拡張の可能性を模索した。有効性を確認するためには Ising 模型同様に KT 転移における厳密な転移温度の情報を持つ模型が必要だが、その候補が見つかり解析を行なった。

(4) 応用 I: 2次元フルフラストレート XY 模型

Kosterlitz-Thouless(KT)転移のようなトポロジカル相転移において信頼性の高い解析法が確立した。難問と言われる2次元フルフラストレート XY 模型(反強磁性三角格子模型及び正方格子 FF 模型)のカイラル転移とKT転移の相転移描像について、解析精度を向上させこの問題の解決に向けた大きな進展を得た。揺らぎの緩和による臨界指数の評価は、以前の結果が観測時間の短さによる欠点を指摘されていたが、今回の長時間の観測により、以前得られた漸近評価が長時間観測でも踏襲され、批判の根拠が否定された。これにより、この2つの系のカイラル転移(二次転移)が同じ普遍性クラスに属し、2次元 Ising 系と異なることがより確かになった。

(5) 応用 II: 三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型

Z2 ボルテックスと呼ばれる、低温で存在が指摘されてきたトポロジカル相転移をKT転移と同様に解析して矛盾が無い事を示し、転移温度の値を従来の評価を修正する高精度に評価し、さらに静的・動的臨界指数の評価から、XY系とは異なる普遍性のKT転移である可能性を指摘した。低温相内での臨界指数の評価を行った。低温相全体における臨界状態の様子は、他の2次元KT転移系と同様の振る舞いを示すことが明らかになり、低温におけるKT相の存在を強く示唆する結果を得た。

(6) 応用 III: 磁場中三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型

一様磁場中の振る舞いも解析をした。この系は、複雑な相図と転移が現れることが従来より指摘されている。各相、相転移における非平衡緩和の初期状態と秩序変数を検討し、相図や臨界指数の決定が可能な環境を構築した。特に、高磁場における相転移が3回対称性の破れを伴う2次相転移と回転対称性の破れを伴う2次相転移の結合したものであるという新しい描像の発見がなされた。これは、2次元系におけるMermin-Wagnerの定理の性質に従っていない(この系には定理は適用出来ない)稀有な例である。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 6件)

Yukiyasu Ozeki, Atsuyuki Matsuda, and Yuki Echinaka, "Dynamical scaling analysis of phase transition and critical properties for the RP2 model in two dimensions", Phys. Rev. E, 査読有, 99 (2019) 012116, DOI:10.1103/PhysRevE.99.012116

Y. Ozeki and R. Tobise, "Nonequilibrium relaxation analysis for critical properties of the antiferromagnetic triangular Heisenberg model", Activity Report 2017 ISSP, 査読無, 1 (2018) 227

Yukiyasu Ozeki and Ryogo Tobise, "Dynamical scaling analysis for the antiferromagnetic triangular Heisenberg model", Activity Report 2016 ISSP, 査読無, 1 (2017) 226

Yuki Echinaka and Yukiyasu Ozeki, "Improved dynamical scaling analysis using the kernel method for nonequilibrium relaxation", Phys. Rev. E, 査読有, 94 (2016) 043312, DOI:10.1103/PhysRevE.94.043312

Yukiyasu Ozeki, "Improvement of dynamical scaling and accurate analysis of nonequilibrium relaxation data", Activity Report 2015 ISSP, 査読無, 1 (2016) 215

Yukiyasu Ozeki and Yuki Echinaka, "Improvement of dynamical scaling by the use of kernel method and its applications to nonequilibrium relaxation analyses", Activity Report 2014 ISSP, 査読無, 1 (2015) 231

[学会発表](計 9件)

飛世峻吾、尾関之康, 動的スケーリング法による2次元フラストレートハイゼンベルグ模型の臨界普遍性の数値解析 II, 日本物理学会, 2018年秋季大会 (2018)

飛世峻吾、尾関之康, 動的スケーリング法による2次元フラストレートハイゼンベルグ模型の臨界普遍性の数値解析, 日本物理学会 第73回年次大会 (2018)

飛世峻吾、尾関之康, 改良された動的スケーリング法による三角格子反強磁性ハイゼンベルグ模型のトポロジカル相転移解析, 日本物理学会, 2017年秋季大会 (2017)

矢島優里、尾関之康, 改良された動的スケーリング法による2次元フラストレートXY模型の非平衡緩和解析, 日本物理学会, 2016年秋季大会 (2016)

Yukiyasu Ozeki, "Dynamical scaling in nonequilibrium relaxation analysis including corrections to scaling", 26th IUPAP international conference on statistical physics Lyon, France (2016)

尾関之康, 改良された動的スケーリングによる臨界普遍性の解析, 統計物理の新展開 2016 (2016)

尾関之康, 2次元古典XZ模型の臨界現象の非平衡緩和解析, 日本物理学会 第71回年次大会 (2016)

尾関之康, カーネル法による非平衡緩和解析の改良: その後, 統計物理の新展開 2015 (2015)

尾関之康, 恵知中悠貴, カーネル法を利用した非平衡緩和解析のさらなる改良, 日本物理学会, 2015 年秋季大会 (2015)

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。