

平成 21 年 4 月 10 日現在

研究種目： 基盤研究（C）  
 研究期間： 2006～2008  
 課題番号： 18540379  
 研究課題名（和文） モンテカルロ法による複雑なスピン系の動的・静的臨界現象の研究  
 研究課題名（英文） Studies on Static and Dynamical Critical Phenomena for Complex Spin Systems Using the Monte Carlo Methods  
 研究代表者  
 岡部 豊（OKABE YUTAKA）  
 首都大学東京・理工学研究科・教授  
 研究者番号： 60125515

研究成果の概要：新しいモンテカルロアルゴリズムを用いて、困難とされてきたランダム系、フラストレート系などの問題に取り組んだ。具体的に、反強磁性3状態ポッツモデルにおける交替分極場の効果、立方対称性をもつ2次元スピン系の相転移、ランダム希釈系の相転移、Kosterlitz-Thouless 転移を示す系における自由渦の問題などを取り上げた。我々が提唱した非平衡 reweighting 法の応用、ナノ磁性体のダイナミクス、交換バイアスの問題も扱った。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,800,000	0	1,800,000
2007年度	800,000	240,000	1,040,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,400,000	480,000	3,880,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：モンテカルロ法、ランダムスピン系、双対性、ナノ磁性体、画像処理

## 1. 研究開始当初の背景

最近の物性物理学の研究の発展において、研究対象の広がり、新しい複雑な現象の出現が顕著であり、種々の物質系が示す多様な物理現象を理解する上で、計算機シミュレーションの果たす役割が一層増している。熱平衡状態だけでなく、動的な過程への関心が増し、ランダム系、複雑系などにおいては、緩和の時間スケールが非常に長くなる問題に興味を持たれている。一方、この問題は、しばしば計算機シミュレーションを困難にする。スローダイナミクスの示す物理的問題の本質を解明すると共に、スローダイナミクス

を克服する新しいシミュレーション手法を提案することが急務の問題となっている。

2003年に50周年を迎えた、Metropolis法とよばれるモンテカルロアルゴリズムは、1粒子ごとに状態を更新し、カノニカルアンサンブルに基づいて状態を確率的に発生させることを基本とする。Metropolis法は通常条件では有効な方法であるが、上記のスローダイナミクスの問題と関連して、状態更新が非常に遅くなるのが問題となる。新しいモンテカルロアルゴリズムとして、クラスターアルゴリズムと拡張アンサンブルの方法の2つの方向がある。前者は1粒子ごとではなく、粒子のクラスターについて状態を更新す

る方法で、後者はカノニカルアンサンブルではないアンサンブルにより状態を発生させ、後で重みの付け替えでカノニカル平均を求める方法である。我々は、臨界点を自動的に決定できる確率変動クラスターアルゴリズムを提案し[Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 572]、ランダムスピン系の研究や Kosterlitz-Thouless (KT) 転移の研究に極めて有効であることを示した。一方、拡張アンサンブル法の一つである Wang-Landau 法を反強磁性ポッツモデルの研究に応用し、さらにクラスターアルゴリズムと拡張アンサンブル法を組み合わせた新しい方法を提案してきた[Phys. Rev. E 66 (2002) 036704]。一方、系の動的性質をモンテカルロ法を用いて行う研究が益々広がりを見せているが、従来平衡系のシミュレーションで有効であった温度重みの付け替えを行う reweighting 法を、非平衡の場合に拡張すること(非平衡 reweighting 法)に、成功した[Phys. Rev. E 71 (2005) 015102(R)]。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、これらの新しいモンテカルロアルゴリズムを用いて、これまで困難とされてきたランダム系、フラストレート系、非平衡定常状態転移などの問題に取り組むと共に、さらに有効なモンテカルロアルゴリズムを開発することにある。

平衡系の相転移の問題については、我々の提唱した確率変動クラスターアルゴリズムの方法や、拡張アンサンブルの方法を、種々のフラストレート系、ランダム系に適用していく。具体的には、正方格子上的反強磁性 3 状態ポッツモデルにおける交替分極場の効果、立方対称性をもつ 2 次元スピン系の相転移などをとりあげる。ランダム希釈系の相転移を調べ、特に双対性に基づいた転移温度に関する理論的予測の式が正しいかどうかを議論する。また、Kosterlitz-Thouless 転移を示す系における自由渦の生成の問題を新しいモンテカルロ法を用いて議論する。

非平衡系については、我々が提唱した非平衡 reweighting 法を応用することをめざす。イジング系を多成分系に拡張すること、Metropolis ダイナミクス以外のダイナミクスの場合に拡張すること、driven diffusive 系などの非平衡定常相転移を示す系へ応用することなどがあげられる。

さらに、応用問題として、ナノ磁性体のダイナミクス、交換バイアスの問題などの問題もとりあげる。

## 3. 研究の方法

モンテカルロ法による数値的計算が、本研究の主たる研究手法である。特に、我々自身の開発したものを含めて、新しいモンテカルロアルゴリズムを適用する。問題に応じて、クラスターアルゴリズム、拡張アンサンブル法などを用いる。相転移点近傍の性質を調べるか、基底状態の性質を調べるか、あるいは、動的な性質を調べるかなど、注目点に対応して、それにふさわしいアルゴリズムを選択することが重要である。

## 4. 研究成果

(1) 正方格子上的反強磁性 3 状態ポッツモデルにおける交替分極場の効果: 正方格子上的反強磁性 3 状態ポッツモデルの基底状態は Gaussian universality に属する臨界状態にあり、様々な摂動により、低対称の相に転移する。以前にこのモデルに交替分極場が加わった系を転送行列法を用いて議論したが、本研究では、Wang-Landau タイプのモンテカルロ法を用いて、同じ問題を調べた。大きなサイズの系を直接扱えること、スピン配置や order parameter の分布関数などを直接に調べることができるなどの利点がある。精度の高いモンテカルロ計算を行い、相図を求め(図 1)、強磁性 3 状態ポッツ universality class に属する相とイジング universality class に属する相への 2 つの相転移を確認した。転送行列法による結果と定量的に一致し、さらに、エネルギー状態密度の詳細な検討を行った。

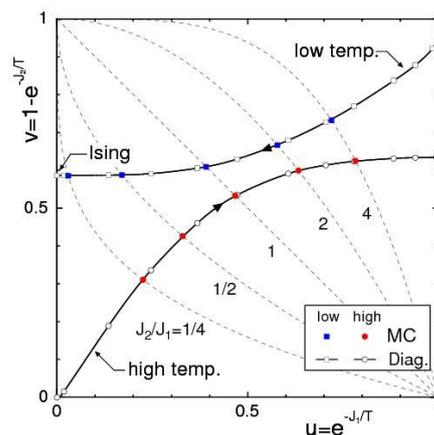


図 1: 交替分極場のある正方格子上的反強磁性 3 状態ポッツモデルの相図。

(2) 立方対称性をもつ 2 次元スピン系の相転移: 2 次元古典スピン系の相転移について多くの研究がなされているが、本研究ではその中で、立方対称性を持つモデルを考えた。具

体的には、取り得るスピンの向きが立方体の6つの面心方向のみとなるような強磁性系の6状態のモデルを扱い、6状態立方モデルと呼ぶことにする。これは Heisenberg モデルの離散モデルとして考えることもできる。比較的簡単なモデルであるが、これまで調べられてこなかった。ここでは、モンテカルロ法のクラスターフリップを用いた方法でこのモデルの相転移を調べ、有限サイズスケリングの観点から臨界現象を論じた。6状態立方モデルの持つ対称性に注目し、対称性と universality class の関係について調べた。

(3) 希釈ランダムスピン系における双対性: 2次元 XY モデルやそれを離散化したクロックモデルは、Kosterlitz-Thouless (KT) 転移を示すことが知られている。既に希釈と共に浸透閾値で KT 転移が連続的に消失することを示したが、Villain 型の相互作用の場合に成り立つ双対性が希釈系でどのような情報を与えるかに注目した。クラスターフリップを用いた精度の高いモンテカルロ法を用いて、クロックモデルの示す2つの KT 転移温度を求め、両者の間に双対関係式が成り立つか調べた (図2)。その結果、双対関係式は極めてよい近似になっているが、厳密ではない可能性が高いと結論された。この研究結果に刺激され、大関が、双対性をもつランダム系の転移温度に関する展開理論を提唱した。その理論の検証のため、さらに精度の高い数値計算を実行した。この理論は、2次元希釈ポッツモデルについても適用できるので、このモデルについて、精度の高いモンテカルロ計算を実行して、大関理論の妥当性を議論した。その結果、展開の次数を上げると、数値データに近づくことが確かめられた。

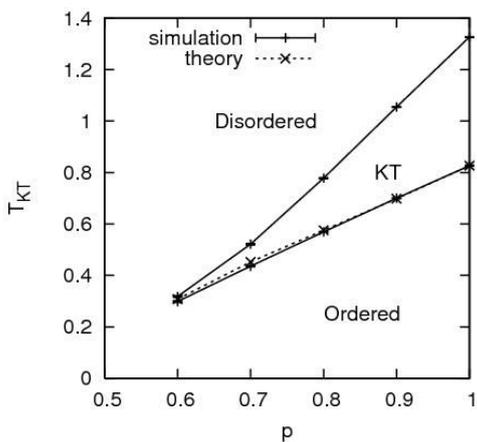


図2: 希釈6状態 Villain モデルの相図。シミュレーションで得た2つのKT転移温度を双対関係式と比較している。

(4) KT 転移における渦密度: KT 転移を示す系では、低温では渦の励起が対を成しているのに対し、高温で自由渦が現れる。周期境界条件では、渦が現れるとすると偶数個になるので、単独の自由渦が出始めるところを見ることができない。以前に、川村-菊池は diagonally antiperiodic (DAP) 境界条件をとることにより、自由渦を調べた。境界条件の違いによるエネルギーや自由エネルギーの差を調べることで、渦密度の性質を調べたが、精度が十分ではなかった。新しいモンテカルロ手法である Wang-Landau 法を用いて、DAP 境界条件の XY (クロック) モデルの精度の高い計算を行い、直接、渦密度を計算した。

(5) 非平衡 reweighting 法の応用: 我々は、平衡系のモンテカルロ法で成功を収めている reweighting 法を非平衡系に拡張することを提案したが、イジングモデルの非平衡緩和に適用すると共に、本質的に非平衡である driven diffusive 系の相転移の問題にも適用できることを示した。また、非平衡 reweighting 法の効率よい計算を行うため、マルチスピンコーディングの手法が適用できることを示した。

(6) ナノ磁性体のダイナミクス: ナノ磁性体を念頭において、磁性体のダイナミクスを記述する Langevin タイプの方程式とモンテカルロ法との関係を議論した。Langevin タイプの取り扱いが長時間の緩和ダイナミクスを記述することが難しいが、一方、単純なモンテカルロ法には時間スケールが実時間と対応していないという問題がある。本研究では両者の欠点を補い合う、一般的な手法を議論した。ドリフト項と拡散項をマッチさせることにより、モンテカルロ法に現れる時間と実時間との関係付ける因子と際差運動のステップを求めた。実際に、単粒子の場合と磁性体の集合体の場合にこの方法の有効性を示した。

(7) 交換バイアスの平均場理論: 強磁性/反強磁性積層膜では、反強磁性スピンの影響で強磁性体のスピンが固定され、ヒステリシスループのシフトが見られる。この現象を交換バイアスとよぶが、磁化ドメインのサイズ、磁場などのパラメータに対する依存性など、わかっていないことが多い。ここでは、相互作用する反強磁性粒と強磁性膜からなる簡単なモデル系を考え、平均場理論でヒステリシスループのシフトを計算した。磁場やドメインサイズ依存性など、実験で観測されている結果を再現することができた。表面強磁性層と反強磁性層の間の相互作用  $J_1$  が  $-0.5$  と  $0.5$  の場合のヒステリシスループを図3に

示した。64回の独立なシミュレーションを行い、そのエラーバーを示してある。

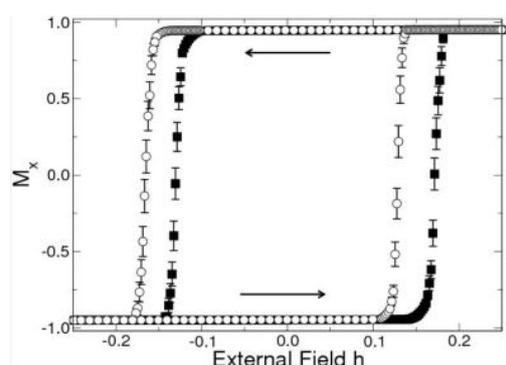


図3: 表面強磁性層と反強磁性層間の交換相互作用  $J_1$  が  $-0.5$  (■) と  $0.5$  (○) の場合のヒステリシスループ。

(8) モンテカルロ法の画像処理問題への応用: これは、新しく取組んだ課題で、画像処理の問題、特に画像領域分割の問題にモンテカルロ法を応用した。従来モンテカルロ法を利用したシミュレーテッドアニーリング法は計算速度が速くなく必ずしも有効でないと考えられていた。しかし、ブロックスピン変換のアイデア、境界のみ効率よく更新する手法などを応用することにより、大幅に計算時間の高速化をはかることができた。

## 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 10 件)

- ① H. Otsuka, Y. Okabe and K. Okunishi, "Crossover of Criticality in a Three-State Potts Antiferromagnet with a Staggered Polarization Field", J. Korea Phys. Soc. 53 (2008) 1280-1285.
- ② T. Surungan, N. Kawashima and Y. Okabe, "Critical properties of the edge-cubic spin model on a square lattice", Phys. Rev. B 77 (2008) 214401-(1-7).
- ③ H. Otsuka, Y. Okabe and K. Okunishi, "Phase diagram and string-density plateau state of the anisotropic triangular antiferromagnetic Ising model", J. Phys.: Condens. Matter 19 (2007) 145236(6pp).
- ④ K. Ohno, T. Sakamoto, T. Minagawa, and Y. Okabe, "Entropy of Polymer Brushes in Good Solvents: A Monte Carlo Study", Macromolecules 40 (2007) 723 - 730.
- ⑤ H. Otsuka, Y. Okabe and K. Nomura, "Global phase diagram and six-state clock

universality behavior in the triangular antiferromagnetic Ising model with anisotropic next-nearest-neighbor coupling: Level-spectroscopy approach", Phys. Rev. E 74 (2006) 011104-(1-7).

⑥ Y. Okabe and H. Otsuka, "Monte Carlo study of the antiferromagnetic three-state Potts model with staggered polarization field on the square lattice", J. Phys. A 39 (2006) 9093-9105.

⑦ H. K. Lee, Y. Okabe and D. P. Landau, "Convergence and refinement of the Wang-Landau algorithm", Comp. Phys. Commun. 175 (2006) 36-40.

⑧ H. K. Lee and Y. Okabe, "Multispin Coding Technique for Nonequilibrium Reweighting", Int. J. Mod. Phys. C 17 (2006) 157-166.

⑨ X. Z. Cheng, M. B. A. Jalil, H. K. Lee and Y. Okabe, "Precessional and thermal relaxation dynamics of magnetic nanoparticles: A time-quantified Monte Carlo approach", J. Appl. Phys. 99 (2006) 08B901 (1-4).

⑩ H. K. Lee and Y. Okabe, "Exchange Bias with Interacting Random Antiferromagnetic Grains", Phys. Rev. B 73 (2006) 140403(R)-(1-4).

[学会発表] (計 17 件)

- ① Y. Okabe, "Computational Science and Infrastructure for Supercomputing in Japan - Development of an Over Peta Scale Supercomputer -" (invited), CCP 2008, Ouro Preto, Brazil, 2008 年 8 月
- ② Y. Okabe, "Monte Carlo Study of Image Segmentation Problem" (invited) StatPhys-Taiwan-2008, Academia Sinica, Taiwan, 2008 年 7 月
- ③ H. Otsuka and Y. Okabe, "Crossover of Criticality in Three-State Potts Antiferromagnet with Staggered Polarization Field", The 10th Asia Pacific Physics Conference (APPC10), Pohang, Korea, 2007 年 8 月
- ④ Y. Okabe, "Kosterlitz-Thouless transition for diluted system and duality relation" (invited), 3rd International Workshop Hangzhou 2006 on Simulation Physics, Zhejiang University, Hangzhou, China, 2006 年 11 月
- ⑤ Y. Okabe, "Duality and finite-size scaling analysis of the two-dimensional diluted Villain model" (invited), ISSP

International Symposium on Computational Approaches to Quantum Critical Phenomena, ISSP, Kashiwa, 2006 年 8 月

⑥ Y. Okabe, "Duality in diluted spin models" (invited), US-Japan Bilateral Seminar, Simulation of Complex Behavior from Simple Models, Maui, 2006 年 7 月

⑦ Y. Okabe, "Duality in the phase transition of two-dimensional diluted spin models" (invited), StatPhys-Taiwan-2006, Academia Sinica, Taipei, 2006 年 6 月

⑧ 佐次田哲, 岡部豊 「ベイズ理論に基づく画像処理における Wang-Landau 法を用いた尤度関数の計算」日本物理学会, 立教大学, 2009 年 3 月

⑨ 小村幸浩, 岡部豊, 大関真之 「2 次元 q 状態 Potts モデルのボンド希釈の相転移」日本物理学会, 立教大学, 2009 年 3 月

⑩ 佐次田哲, 岡部豊 「モンテカルロ法による画像修復におけるハイパーパラメータ推定」日本物理学会, 岩手大学, 2008 年 9 月

⑪ 小村幸浩, 岡部豊 「2 次元一般化 XY モデルの相転移」日本物理学会, 岩手大学, 2008 年 9 月

⑫ 渡辺博史, 岡部豊 「モンテカルロ法による画像領域分割の拡張」  
日本物理学会, 近畿大学, 2008 年 3 月

⑬ 安田建, 岡部豊, 川島直輝 「 $T_c$  に依存しない有限サイズスケーリング」日本物理学会, 近畿大学, 2008 年 3 月

⑭ 安田建, 岡部豊, 川島直輝 「cubic 対称性をもつ 2 次元スピン系の相転移」日本物理学会, 北海道大学, 2007 年 9 月

⑮ 渡辺博史, 岡部豊 「画像領域分割とモンテカルロ法」日本物理学会, 北海道大学, 2007 年 9 月

⑯ 高山利彦, 岡部豊 「ランダムカイラル Villain モデルの双対性とモンテカルロシミュレーション」日本物理学会, 鹿児島大学, 2007 年 3 月

⑰ 高山利彦, 岡部豊, 笹本智弘, 西森秀稔 希釈 Villain モデルと双対性 II」日本物理学会, 千葉大学, 2006 年 9 月

〔図書〕 (計 1 件)

岡部豊 「熱・統計力学」朝倉書店, 2008 年

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

岡部 豊：首都大学東京・理工学研究科・教授 (研究者番号：60125515)

### (2) 研究分担者

なし

### (3) 連携研究者

なし