

平成 27 年 5 月 30 日現在

機関番号：32619

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540413

研究課題名(和文)スピングラス低温相に臨界線は存在するか

研究課題名(英文) Does a critical line exist in a spin-glass phase?

研究代表者

中村 統太 (Nakamura, Tota)

芝浦工業大学・工学部・教授

研究者番号：50280871

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)：複雑系のプロトタイプと言われるランダム磁性体「スピングラス」、その理論的研究は実験結果との矛盾等、初めから苦難の連続でした。それを象徴するのが「臨界線」存在の可能性です。本研究課題では、これを明らかにする過程で、数値計算上の困難を一つ一つ解決し、信頼に足る数値データから次の結論を得ました。ハイゼンベルグスピングラスモデルは、臨界指数等の対応する実験を矛盾なく説明できる。先行研究で矛盾が存在した理由は「短距離・長距離相関のクロスオーバー」によること。臨界線は、データの精度の問題で疑似的に見える。スケール補正の現れともいえる。また、今回開発した理論解析法はランダム系に広く応用が期待される。

研究成果の概要(英文)：Spin glasses (SG) are known as a prototype of many complex systems. The study began with a discovery of the canonical SG materials. However, the theoretical analyses have not been so successful in explaining the experiments. There are many contradictory results among which many debates have been held. Consequently, there is a possibility of a critical line, which is a main topic of this grant. We developed several new methods to overcome the difficulties in numerical simulations. We performed gigantically large simulations, collected very precise data and reached the following conclusions.

(1) The $\pm J$ Heisenberg SG model can explain the canonical SG experiment including values of critical exponents. (2) Numerical simulations with small sizes are plagued by the size crossover, which is an origin of many contradictions. (3) Critical lines are observed due to insufficient data precisions. New methods developed in this grant will be applicable to many complex systems, and are very promising.

研究分野：物性理論

キーワード：スピングラス モンテカルロシミュレーション ベイズ推定 相関長 スケールリング 非平衡緩和解析

1. 研究開始当初の背景

(1) スピングラスとは、異なる磁性原子を混ぜ合わせたランダム磁性体です。ランダムな状態が時間方向に凍結する相転移を起こします。しかし、低温相の描像や相転移の普遍性などは、いまだ解明されていません。その理由は、モンテカルロシミュレーションにおいて、平衡状態への緩和が非常に遅くなる「スロウダイナミクス」の存在、得られたデータに存在する非常に大きな「有限サイズ効果」、この時間方向・空間方向の困難のため決定的な研究がなされていないことによります。数々の先行研究によって得られた相転移温度や臨界指数は、ある値の周りに連続的に分布しており、あたかも「連続臨界相」が存在するかのように見えます。これが本研究テーマである「臨界線」です。

(2) これまでの数値計算の大部分に該当する不具合が 2009 年に Hukushima and Campbell によって指摘されました。それは、有限サイズ効果にはサイズクロスオーバーが存在し、そのサイズ(一辺の長さ $L=24$)の上下で、サイズ外挿の向きが異なるというものです。また、同年にハイゼンベルグスピングラス模型の研究において、ほぼ同程度のサイズデータを異なるサイズ外挿を用いたことにより、全く逆の結論を導いた 2 つの論文が提出されました。これらにより、先行研究における矛盾点を解決するには、理論的・数値計算技術的にブレークスルーが必要であることがわかってきていました。

2. 研究の目的

(1) 研究の目的を達成するためには、上記背景に到った数々の数値計算上の困難を解決しなければなりません。そこで、数値計算技法と理論解析技法の両方を新たに開発することにしました。前者については、GPU 計算機の導入とプログラム最適化を、後者については情報統計分野で注目されている「ベイズ推定」を積極的に活用しました。

(2) スピングラス相転移の普遍性をまず明らかにすることから始めました。ここでは、スピンの対称性(イジング型とハイゼンベルグ型)の違い、ランダム分布の違い($\pm J$ 型と Gauss 型)に注目しました。特に、ハイゼンベルグ型では、スピン自由度とカイラル自由度の分離不分離問題が、長く解決されないうまになっています。この問題に決着をつけることを目的としました。

(3) 相転移について転移温度や普遍性を明らかにしたうえで、「臨界線」の存在を検証しました。不存在の場合、なぜそれが存在するように見えたのかを、また先行研究での数値計算結果の矛盾点を明らかにすることを目的としました。

3. 研究の方法

(1) モンテカルロシミュレーションの動的緩和関数データを解析する手法である非平

衡緩和法を用います。特に、筆者が過去に開発した、帯磁率データを相関長データでスケールする「動的相関長スケール法」を用います。これにより、有限サイズ効果の問題を解決し、熱力学的極限を正しくとることによって、スピングラス相転移を明らかにしました。

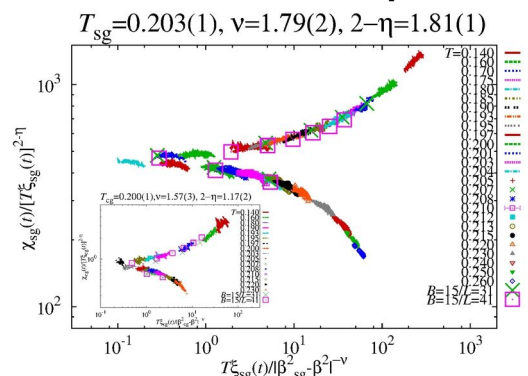
(2) 計算環境として、GPU 計算を実現しました。これにより、過去の科研費で導入したクラスター計算機(CPU 計算)に GPU ボードを追加するだけで 10-20 倍の計算量が可能となりました。これを 50 台整備しました。

(3) ビッグデータ解析として近年注目されているベイズ推定を用いて、臨界状態の判定を行いました。これは、原田(PRE 2011)によって転移温度と臨界指数を求めるスケール解析に応用され、多大な成功を収めています。得られた臨界温度のもっともらしさが数値として求まるため、臨界状態が点なのか線なのかの判断をこの推定によって行いました。また、この推定法は新たな展開を見せ、新たな物理量計算法として本研究課題の成果の一つとなりました。

4. 研究成果

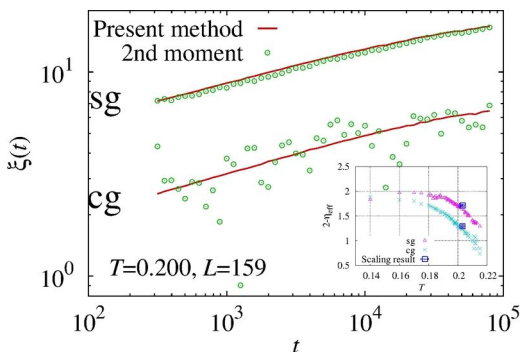
前半では手法の開発について、後半では得られた物理的成果について述べます。

(1) **Window 測定法の開発**: 強い有限サイズ効果の問題を解決する手法を考案しました。通常、物理量の測定はシミュレートした系全体で行います。そのため、境界の影響などを含むデータとなります。この測定を系の中心の部分系のみで行います。部分系の大きさを色々変えると、データのサイズ依存も大きく変わります。これらを、部分系で測定した相関長でスケールすると、ひとつの普遍的なデータ列となることを見出しました。このデータ列は、全体系のサイズや平衡状態・非平衡状態にも依らないことがわかりました。この手法を用いてハイゼンベルグスピングラスの相転移解析に応用しました。[発表論文]



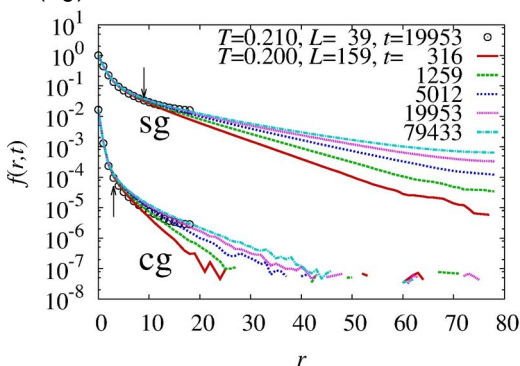
上の図がスケール解析の結果です。 $L=159$ の非平衡計算の結果(線及び点)と $L=31, 41$ の平衡計算の結果(大きな \times と \square) が重なり合い、普遍的なスケールングとなっています。これにより、目的(2)の解決に向けて重要な一歩を記すことができました。

(2) **ベイズ推定による相関長評価法の開発**:本研究期間の半ばにおいて、Window 測定を用いても解決しないサイズ効果に直面しました。それは、相関長が非常に小さいにもかかわらず、サイズ効果が出てしまう問題でした。ゆえに、相関長 ξ と系のサイズ L の比を $\xi/L=1/10$ 以下に設定しなければなりません。その場合、従来の相関長評価法によると $0/0$ の数値不安定性が現れます。そのような場合でも非常に精度よく相関長を求められる方法を開発しました。ここでは、各時刻における相関関数の生データを用い、その各々が相関関数のスケール関係式を満たすように相関長をベイズ推定します。転移温度と臨界指数を推定する原田考案の手法と同じプログラムで実現できます。



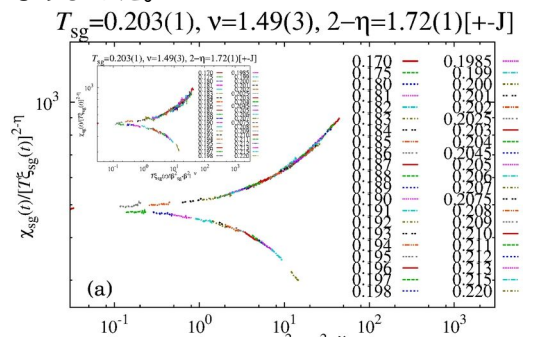
上の図がその結果の一例です。2nd moment というのが従来法です。値の大きなスピングラス (sg) 相関長ではどちらも同じ結果が出ます。一方、値の小さいカイラルガラス (cg) 相関長は、従来法ではバラバラな値となっていますが、新しい方法 (Present method) では安定して緩和関数が求められています。[論文は現在投稿中]

(3) **サイズクロスオーバー**:相関関数から相関長を評価する手法を開発した時に、発見したのがサイズクロスオーバーの原因でした。背景でも述べたとおり、もともと 2009 年に Hukushima and Campbell によってイジングスピングラスにおいて指摘されていましたが、それが起きる原因は明らかにされていませんでした。本研究課題において、ハイゼンベルグスピングラスのカイラルガラス帯磁率においてその存在を追認 [論文番号 1] し、その原因を明らかにしました。[論文は現在投稿中]それはおおよ次のようになります。下の図は、スピングラス (sg) とカイラルガラス (cg) の相関関数のデータです。



r は距離 t は時間です。まず、色違いの線で表したのが、温度 $T=0.200$ サイズ $L=159$ における各時刻におけるデータです。この直線の傾きの逆数が相関長に対応し、それが時間とともに増大していく様が見てとれます。印で示したのは、ずっと小さなサイズで異なる温度でのデータです。本来、全く異なるはずのものですが、sg では最初の距離 10 までのデータは重なります。cg では距離 3 までです。この、サイズにも温度にも時間にも依存しない短距離相関部分には、相転移などの有益な物理情報は何も含まれていないと考えられます。重要なのは、長距離部分です。この「無意味な短距離部分がスピングラスでは距離 10 にも及ぶ」ということが、これまで誰も気が付いていなかった「不可解な有限サイズ効果の原因」であることを発見しました。[論文は現在投稿中]周期的境界条件を用いるなら、その 2 から 3 倍のサイズを用意しないと、有益な情報が得られないことになります。ところが、 $L=20-30$ というサイズはこれまで、扱われる最大サイズであって、本来最少サイズであるべきだったことが、これまでのスピングラスに存在した数々の矛盾点の本質的原因であったのです。カイラルガラスはこのクロスオーバー距離が 3 くらいで、必要な最小サイズも $L=6-8$ 程度であるので、これまでの小規模な計算でも相転移を簡単に観測できていたといえます。

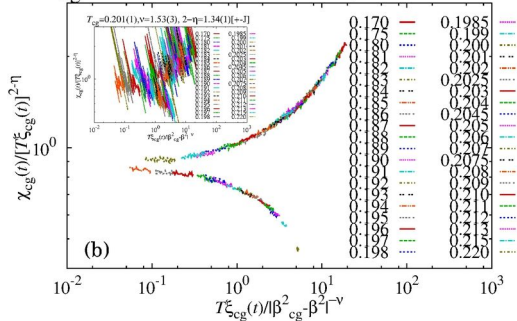
(4) **ハイゼンベルグスピングラス相転移の結果**: 以上の新規手法を用いて、ハイゼンベルグスピングラスの相転移と普遍性を明らかにしました。計算規模は、サイズ $L=159$ の立方格子、温度点数は 42、トータルのランダム配位数は 1168 です。各ランダム配位に対して異なる 30 (一部低温では 48) 個のレプリカを用意し、レプリカオーバーラップからスピングラス秩序変数を求めました。この全計算量は約 3×10^{15} 状態更新で、2002 年に行った申請者自身の論文における計算の約 50000 倍です。相転移温度と臨界指数を決定したスケールリングプロットは以下の通りになりました。



スピングラスの転移温度は、 $T=0.203$ となり、スピンとカイラルの同時転移を主張する先行研究の結果と矛盾しません。臨界指数は、Window 測定のもの (研究成果 (1), 論文番号 1) とは一致しませんが、より計算精度が向

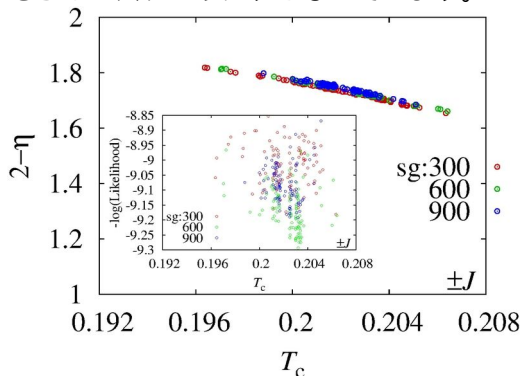
上したためこちらの方が妥当と考えます。図のインセットには相関長評価の従来法による結果を図示していますが、矛盾ない結果となっており、

$$T_{cg}=0.201(1), \nu=1.53(3), 2-\eta=1.34(1)[+J]$$



カイラルガラス相転移の結果がこの図です。まず、インセットの従来法では全くスケーリング解析が不能となりますが、新しい手法では、非常に綺麗なスケーリングとなっています。得られた結果は、相転移温度と臨界指数はスピングラス転移とほぼ同じ。一方、臨界指数は異なりますので、同じ普遍性ではありませんが、同時転移を強く支持する結果になっています。

(5) **臨界線：**では、ハイゼンベルグスピングラス相転移の臨界線はどうなっているのか？下の図は、臨界指数が温度とともに変化する様子が描かれており、臨界線の存在を示唆するようです。実は、これはスピングラス (sg) の転移温度を見積もったベイズ推定の尤もなもの以外の推定候補値をプロットしたものです。図中のインセットが尤もらしさを数値化した対数尤度です。下に行くほど尤もらしいスケーリングとなっています。



温度とともに臨界指数が変化しているのは、尤もらしくない推定の結果であり、 $T=0.203$ に向かってどんどん対数尤度が下がっています。この対数尤度の違いは、スケーリングプロットを目で見ても、区別はつきません。よって、ベイズ推定等の理性的な判断によってスケーリングを行わない限り、臨界線が見えてしまうことになります。これと同様の振る舞いはイジングスピングラスの相転移でもみられました。対数尤度による収束判定を緩くすると転移温度と臨界指数は連続的に分布しますが、この判定条件を厳しくすると、最低対数尤度近傍の1点に

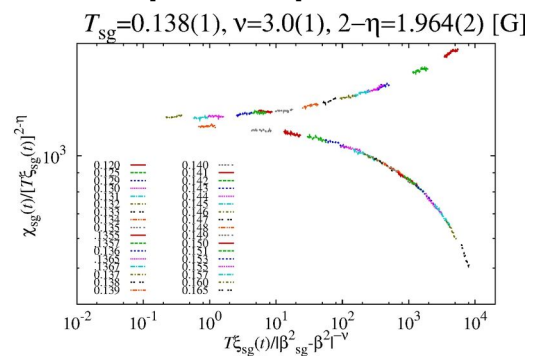
スケーリング結果は凝縮します。転移温度と臨界指数は、 $T=1.193(3)$, $\nu=1.40(1)$, $2-\eta=0.170(3)$ となりました。この結果、臨界指数については、ハイゼンベルグ型と非常に近い値となり、何かの普遍性を暗示します。

(6) **カノニカルスピングラス実験を説明：**ももとのスピングラスの理論研究は、カノニカルスピングラス実験を説明することから始まりました。実験では、スピングラス相転移が観測され、臨界指数も求められていますが、初期の理論研究ではこれが再現できていませんでした。今回、詳細かつ大規模なシミュレーションによって、臨界指数の高精度評価が可能となりました。得られた結果は、実験結果と驚くべき一致を見ました。

	実験	本研究結果
ν	1.30(15) - 1.40(16)	1.49(3)
$2-\eta$	0.4(1) - 0.46(10)	0.28(1)

いずれも、ほぼ誤差の範囲内に入っています。つまり、 $\pm J$ 型ハイゼンベルグスピングラスモデルで実験が十分説明できる事を示している。これは、スピングラス研究 40 年の歴史の中でも画期的なことです。

(7) **分布の違い：**ランダムボンドの分布の仕方を $\pm J$ 型からガウス型に変えた計算を試してみました。通常、分布の違いは臨界普遍性に影響を及ぼさないと考えられています。つまり、臨界指数は変わらないはずであると。ところが、以下に示すように、 ν も異なることがわかりました。特に $2-\eta$ は2倍の開きがあります。これらの値は、実験結果とも矛盾します。[投稿準備中]



(8) **今後の展望：**実は、当初の計画が実現できていないものがあります。磁場中スピングラス相転移の有無、磁気異方性のある場合の相転移、量子スピングラスの相転移です。スピングラスシミュレーションの諸問題の解決のため、これらの問題は研究期間中に取り組むことができませんでした。しかし、非常に有効な研究手段を開発することが出来た現在、引き続きこれらの問題に取り組むことは、その成功が十分に期待されます。これにより、スピングラス研究の諸問題が一気に解決するものと思われます。

(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 1件)

Tota Nakamura and Takayuki Shirakura, Window Measurements of Simulations in Random Systems, Journal of the Physical Society of Japan, **84**, 013701-1-013701-4 (2015). 査読有
Doi:
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.84.013701>

[学会発表](計 5件)

中村統太：3次元ハイゼンベルグスピングラスのスピカイラル相転移とボンド分布、日本物理学会第70回年次大会、2015年3月24日、「早稲田大学早稲田キャンパス(東京都新宿区)」

中村統太：ベイズ推定を用いた相関長評価法、日本物理学会2014年秋季大会、2014年9月10日、「中部大学春日井キャンパス(愛知県春日井市)」

中村統太：3次元ハイゼンベルグスピングラスのスピカイラル転移、日本物理学会2014年秋季大会、2014年9月7日、「中部大学春日井キャンパス(愛知県春日井市)」

中村統太：3次元ハイゼンベルグスピングラスのWindow測定と相関長スケールリング、日本物理学会2013年秋季大会、2013年9月28日、「徳島大学常三島キャンパス(徳島県徳島市)」

中村統太：3次元ハイゼンベルグスピングラスモデルの動的相関長スケールリング、日本物理学会2012年秋季大会、2012年9月19日、「横浜国立大学常盤台キャンパス(神奈川県横浜市)」

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中村 統太 (NAKAMURA, Tota)
芝浦工業大学・工学部・教授
研究者番号：50280871