

角転送行列繰り込み群による 古典スピン系のスナップショット生成

神戸大学 自然科学研究科

上田 幸治¹, 大谷 両太, 西尾 幸暢, Andrej Gendiar, 西野 友年²

1 はじめに

「スナップショット」とは熱平衡状態で起こるスピン配列の一つである。モンテカルロ法ではいつも持っているスピン配列に対応する [1].

角転送行列繰り込み群 (CTMRG) [5] (密度行列繰り込み群 (DMRG) [3, 4] の一種) を使ってスナップショットを得る方法を開発した [6]. 図 1 は, 2 次元イジング模型に対して得たスナップショットの一例である。スナップショットの利点は, 「系の様子を直接見る」ことを可能にすることである。

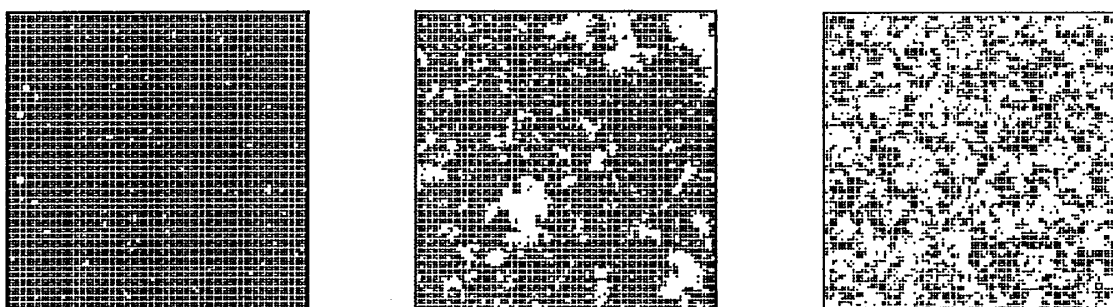


図 1: イジング模型のスナップショット. (a) $T = 1.5J/k < T_C$, (b) $T = 2.27J/k \gtrsim T_C$, (c) $T = 3.0J/k > T_C$. ブロックスピン変数の自由度は $m = 40$ (後の記述を参照). J はイジング模型の相互作用係数, k はボルツマン定数を示す.

2 スナップショット生成

図 1 は大きな系の中心付近の小さな領域 ($L \times L$ サイト) の 1 つのスピン配列である。大きな L に対しては, スピン配列は $2^{L \times L}$ 個あって, これらのスピン配列から一つを選び出す作業は困難である。そこで, 1 つ 1 つのスピンについて確率的に状態を決めて, 最終的に 1 つのスピン配列を得ることを行う。この作業を CTMRG によって行う。

¹E-mail: ueda@kobe-u.ac.jp

²E-mail: nishino@kobe-u.ac.jp

2.1 中心サイトのスピンの確率的な固定

系の分配関数 Z は, Baxter の角転送行列 C (CTM) の4つの積で求まる [2].

$$Z = \sum_{\xi, \nu, \eta, \mu, \sigma} C(\xi, \nu; \sigma) C(\nu, \eta; \sigma) C(\eta, \mu; \sigma) C(\mu, \xi; \sigma), \quad (1)$$

グラフ的には図2で示す [5]. ここで, ギリシャ文字 ξ, ν, η, μ は複数のスピン変数をまとめた「ブロックスピン変数」を示す (図2参照). 以降, 「ギリシャ文字」はブロックスピン変数とする (σ は除く).

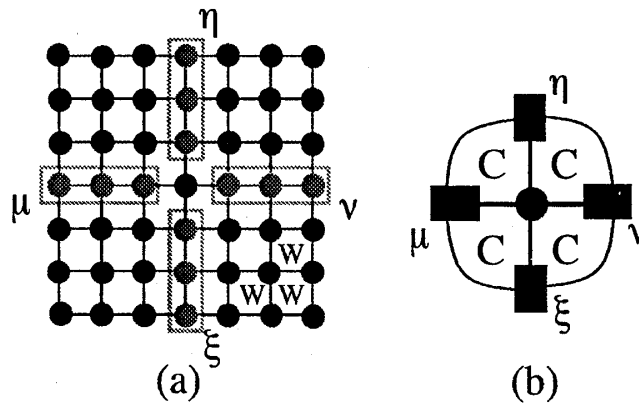


図 2: 分配関数のグラフ表示. (a) 7×7 の系の分配関数. W は, 4つのスピンの囲まれた部分のボルツマンウェイトを示す. (b) 角転送行列 (CTM) の4つの積のグラフ表示. 複数のスピン変数をまとめた「ブロックスピン変数」を四角で示す (ここでは3つのスピンを含む). 黒く塗りつぶしたスピンは状態の和を取ったことを示す.

系が大きいときは, ブロックスピン変数の状態数が莫大になるので計算が困難になる. 「繰り込み変換」と組み合わせた計算手法である角転送行列繰り込み群 (CTMRG) [5] を用いると, 十分大きな系でも計算が可能となる. CTMRG ではブロック変数の状態数を m に抑える.

CTMRG により, 十分大きな系の中心サイトのスピン σ が上 (下) 向きとなる確率 $P(\sigma)$ が求まる.

$$P(\sigma) = \sum_{\xi, \nu, \eta, \mu} C(\xi, \nu; \sigma) C(\nu, \eta; \sigma) C(\eta, \mu; \sigma) C(\mu, \xi; \sigma) / Z, \quad (2)$$

確率 $P(\sigma)$ に従って, スピン σ の状態が確率的に固定できる.

$$P(\sigma = \uparrow) \begin{cases} \leq r, & : \text{スピン} \sigma \text{ 上向き} \\ > r, & : \text{下向き} \end{cases} \quad (3)$$

ここで r は一様乱数 $[0, 1]$ [7] である.

2.2 1列のスピンの確率的な固定

1列に並んだ L 個のスピン $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L)$ の確率的な決定も CTMRG によってできる. 図3に, 1列のスピンの確率のグラフ的表現を示した. この図で, 「 P 」は HRTM (Half-row transfer matrix)

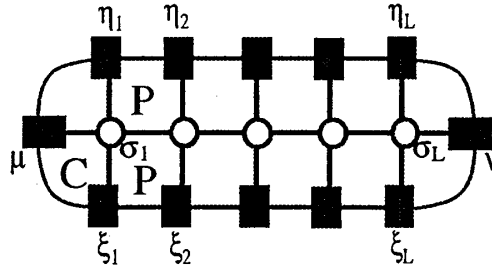


図 3: 系の中心付近における 1 列のスピ数列に対応する確率のグラフ表示. C は CTM, P は HRMT を示す. 塗りつぶしてないスピンは状態の和を取っていないことを示す.

であり, 転送行列 T を半分に分けたものである.

$$T(\eta, \sigma, \xi; \eta', \sigma', \xi') = P(\eta, \sigma, \sigma', \eta') P(\xi', \sigma', \sigma, \xi), \quad (4)$$

スピンを左から順に一つずつ確率的に固定する. 左端のスピンの確率 $P(\sigma_1)$ は

$$P(\sigma_1) = \frac{\sum_{\{\xi\}, \{\eta\}} \sum_{\sigma_2, \dots, \sigma_L} L \prod_{i=1}^{L-1} T_i R}{\sum_{\{\xi\}, \{\eta\}} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L} L \prod_{i=1}^{L-1} T_i R} \quad (5)$$

である (図 4(a) 参照). ここで, ブロックスピン変数 $\{\xi\} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_L)$, $\{\eta\} = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_L)$ を

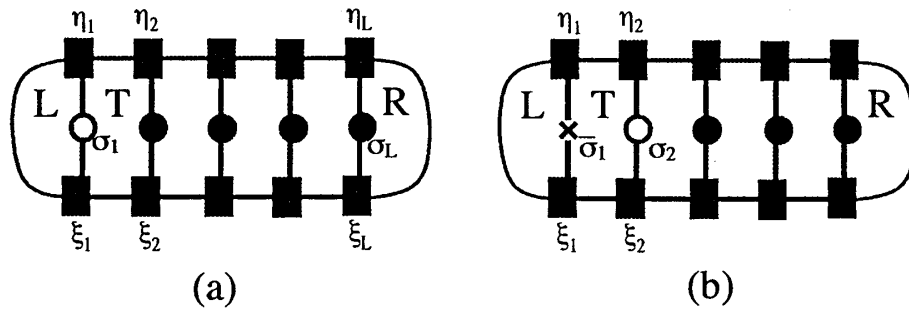


図 4: 確率のグラフ表示. (a) 確率 $P(\sigma_1)$. (b) 確率 $P(\sigma_2)$. \times 印は固定されたスピン変数を示す.

まとめて表示した. また, $T_i = T(\eta_i, \sigma_i, \xi_i; \eta_{i+1}, \sigma_{i+1}, \xi_{i+1})$ であり, L, R は

$$L = \sum_{\mu} C(\eta_1, \mu; \sigma_1) C(\mu, \xi_1; \sigma_1), \quad (6)$$

$$R = \sum_{\nu} C(\xi_L, \nu; \sigma_L) C(\nu, \eta_L; \sigma_L), \quad (7)$$

である. 確率 $P(\sigma_1)$ を使って, 式 (3) に従って, スピン σ_1 を確率的に固定する. 固定された状態を「 $\bar{\sigma}_1$ 」で表す. 以下では, 「上バー付きのスピン変数」は確率的に固定されたものとする.

次に, 右隣のスピンの σ_2 を考える. 確率 $P(\sigma_2)$ は,

$$P(\sigma_2) = \frac{\sum_{\{\xi\}, \{\eta\}} \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \dots, \sigma_L} \delta(\sigma_1, \bar{\sigma}_1) L \prod_{i=1}^{L-1} T_i R}{\sum_{\{\xi\}, \{\eta\}} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_L} \delta(\sigma_1, \bar{\sigma}_1) L \prod_{i=1}^{L-1} T_i R} \quad (8)$$

である(図4(b)も参照). この確率は, スピン σ_1 が固定されたことを反映している. スピン σ_2 の状態の固定も, スピン σ_1 の時と同様にして, 確率 $P(\sigma_2)$ と式(3)から固定した状態 $\bar{\sigma}_2$ を求める.

以降, 同様にして, σ_3 から σ_L まで順に確率的に状態を固定する. こうして求めたスピン配列 $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \dots, \bar{\sigma}_L)$ は, スナップショットを得る領域 $(L \times L)$ の中の1列のスピン配列が求めたことに対応する. さらに, 2列目, 3列目のスピンに対しても同様に求めることでスナップショットを得る[6].

3 検証

イジング模型のスナップショットから対相関関数の平均値を見積もり, CTMRGによる値と一致することを確かめる. 結果は図5に示す. CTMRGとスナップショットによる値が確かに一致した.

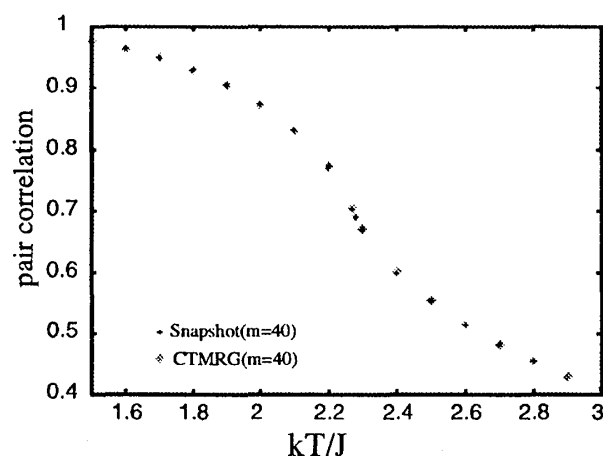


図5: 対相関関数の平均値の温度変化. スナップショットとCTMRGから得た結果の比較. J はイジングの相互作用係数, k はボルツマン定数を示す. $m = 40$. スナップショットからの計算には, 1000×999 個のサンプルで平均をした.

4 まとめ

角転送行列繰り込み群によって, 古典スピン模型の熱平衡状態のスピン配列の1つとしてのスナップショットを得る方法を解説した. 今回述べた方法で得たスナップショットは以下の特徴がある.

- CTMRGが扱える系に対しては付加的に得ることができる.
- 同じ条件(系の温度など)で, 2枚以上のスナップショットを得た場合, それら同士は無相関である.(これはモンテカルロ法と異なる).

参考文献

- [1] K. Binder, "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction", Springer Series in Solid-State Sciences **80** (Springer Berlin, 2002).
- [2] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982), p.363.
- [3] S. R. White, Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863 ; S. R. White, Phys. Rev. B 48 (1993) 10345.
- [4] T.Nishino, J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 3599.
- [5] T. Nishino and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 891 ; J. Phys. Soc. Jpn. 66(1997) 3040.
- [6] K. Ueda, R. Otani, Y. Nishio, A. Gendiar, and T. Nishino, to appear in JPSJ supplement. (cond-mat/0409445)
- [7] 伏見正則, 乱数 (東京大学出版会, 1989).