

S K 模型の数值解析

北大 理 根本幸児 京大 基研 高山一

§1 序 スピングラス(SG)状態が一種の協力現象、相転移現象であるという立場から、EdwardsとAndersonによってその平均場理論が提起されて以来、新しいタイプの秩序相としてその理論的研究が精力的に行われてきた。特にSGの平均場理論の基本的解析は、Sherrington-Kirkpatrick(SK)模型を通して発展してきている。SK模型は次のハミルトニアンで記述される¹⁾。

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (S_i = \pm 1) \quad (1)$$

ここで $\{J_{ij}\}$ は各々分散が N^{-1} (N は全スピン数)平均が(簡単な為には)零のガウス分布に従って、全2のスピン間に確率的に与えられる相互作用であり、 h は一様外部磁場である。

SK模型の解析はレプリカ法によるところが大きい。レプリカ法の枠組では、SG相はレプリカ対称性の破れ(replica symmetry breaking:RSB)によって特徴づけられるが、有限の h でのSG転移はこれによって発見された(h - T 面の相境界は特に発見者の名を冠してAT線とよばれる²⁾)。SG相を記述する為には適切なRSBを仮定しなければならないが、現在知られている唯一の成功例はParisiによるRSB仮説である³⁾。そしてこの仮説が致命的欠陥を指摘されてはいないという意味において、SK模型のレプリカ法による定式化は一応の結着がたったと考えられている。

これを受けて、物理的意味の不明瞭なRSBを、実スピン空間における事象、即ち多数の局所安定状態の発現(このことは所謂TAPの自由エネルギーの解析から知られている⁴⁾)と結びつけて解釈する試みがなされている^{5),6)}。この対応関係が妥当なものであるかは直接的な解析の困難な後者をレプリカ法を通して調べることでできるので非常に興味深い考え方である。それだけにその妥当性を調べておくことは意味のあることである。これまで、計算機実験⁷⁾、基底状態の数值解析⁸⁾、さらに我々によるTAPの自由エネルギーの数值解析^{9),10)}等との比較から、対応関係の一部についてはこれを支持する結果がでている。しかしまだ十分なものとはいえず、さらなる検討が望まれる所である。一方ParisiのRSB仮説による表式の具体的な解(Parisi解)もそれほど知られている訳ではない。これは数值計算からも難しい部類の問題であるが、上述の比較検討の為に系統的にその解をおさえておく必要がある。このような事情で、我々は、大抵的ではあるが、 h - T 面上でのParisi解による物理量、秩序変数の振舞を数値的に求めたので、ここではその結果を紹介したい。なお、レプリカ法とParisiによるRSB仮説、及び実スピン空間との対応解釈についての概略は文献¹¹⁾を参照して頂くとして、ここでは省かせて頂きます。

§2 Parisi 解の解法 Parisi の RSB 仮説によれば, $\{J_{ij}\}$ について平均化された自由エネルギーは次のように与えられる。³⁾

$$f = \text{Max}_g f_P[g]$$

$$f_P[g] = -\frac{\beta}{4} \left\{ 1 - 2g(1) + \int_0^1 dx g(x)^2 \right\} - \int_{-\infty}^{\infty} dy (2\pi g(0))^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(y-k)^2}{2g(0)}} g(0, y) \quad (2)$$

ここで, $g(x)$ は $0 \leq x \leq 1$ で定められる秩序関数, $g(x, y)$ ($0 \leq x \leq 1, -\infty < y < \infty$) は次の偏微分方程式の解として与えられる変数関数である。

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{dg}{dx} \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + \beta x \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)^2 \right\}, \quad g(1, y) = T \log 2 \cosh \beta y \quad (3)$$

即ち, $g(0, y)$ が上式を通して $g(x)$ に依存しているのだ。このままでは $f_P[g]$ の停留問題を数値的に解くことは非常に困難である。そこで Lagrange の未定乗数法を用いることが考え出された。¹²⁾ 未定乗数を $P(x, y)$ ($0 \leq x \leq 1, -\infty < y < \infty$) とすれば, 新しい関数

$$\tilde{f}_P = f_P[g] - \int_{-\infty}^{\infty} dy P(1, y) \{ g(1, y) - T \log 2 \cosh \beta y \} + \int_0^1 dx \int_{-\infty}^{\infty} dy P(x, y) \left[\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{dg}{dx} \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + \beta x \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)^2 \right\} \right] \quad (4)$$

の g, P に関する停留問題に帰着する。 $P(x, y), P(1, y)$ についての汎関数微分から (3) が導かれるが, $M(x, y) \equiv \frac{\partial g}{\partial y} g(x, y)$ を定義しておくと都合がよい。そうすると結局

$$\frac{\partial M}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{dg}{dx} \left\{ \frac{\partial^2 M}{\partial y^2} + 2\beta x M \frac{\partial M}{\partial y} \right\}, \quad M(1, y) = \tanh \beta y \quad (5)$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{dg}{dx} \left\{ \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} - 2\beta x \frac{\partial}{\partial y} MP \right\}, \quad P(0, y) = (2\pi g(0))^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(y-k)^2}{2g(0)}} \quad (6)$$

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy P(x, y) M(x, y)^2 \quad (7)$$

となって, これらの連立方程式を自己無撞着に解けばよろしいことになる。実際の数値計算では, (5), (6) を線型項のグリーン関数を用いて積分方程式に変換してから, x について 20 点, y について 100 点を分割して, (5) \rightarrow (6) \rightarrow (7) \rightarrow (5) の順で反復代入により解を求めている。

§3 計算結果 Parisi 解の大概的な振舞を調べる為、前節の方法を用いて $0.2 \leq T \leq 0.9$ (0.1 キロミ) , $0.0 \leq h \leq 0.5$ (0.1 キロミ) の範囲において数値解を求めた。特にここで示したいのはエントロピー S と磁化 m である。これらは g, M, P を用いて次のように表わされる。

$$S = -\frac{\beta^2}{4} \{1 - g(1)\}^2 + \int_{-\infty}^{\infty} dy P(1, y) \{ \log 2 \cosh \beta y - \beta y \tanh \beta y \} \quad (8)$$

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} dy P(x, y) M(x, y) \quad , \quad x\text{-independent} \quad (9)$$

(9) が x に依存しないことは (5), (6) から容易に知られる。その結果が図1, 図2である。これを見ると Parisi-Toulouse (PaT) 仮説⁽³⁾ がよく成り立っているようにみえる。PaT

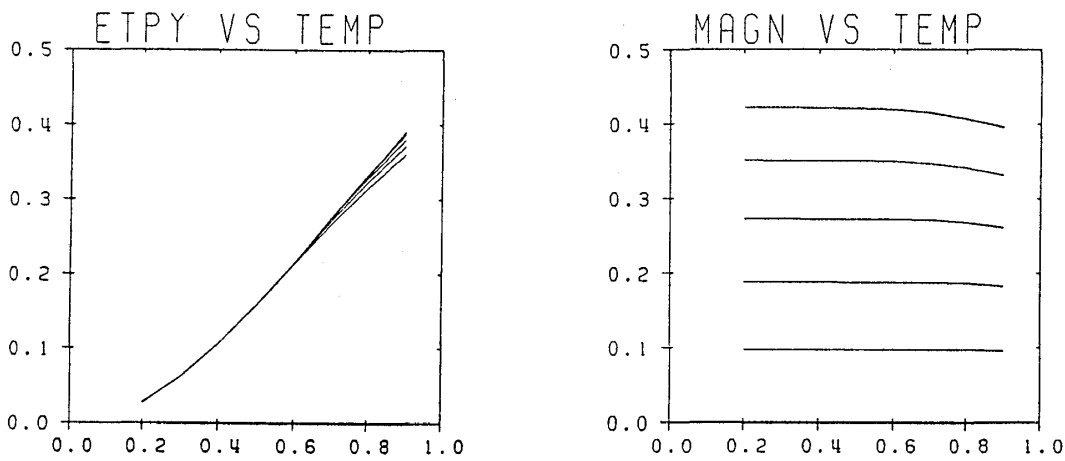


図1 エントロピー(左)と磁化(右)の温度依存性 $h = 0.0 \sim (0.1) \sim 0.5$

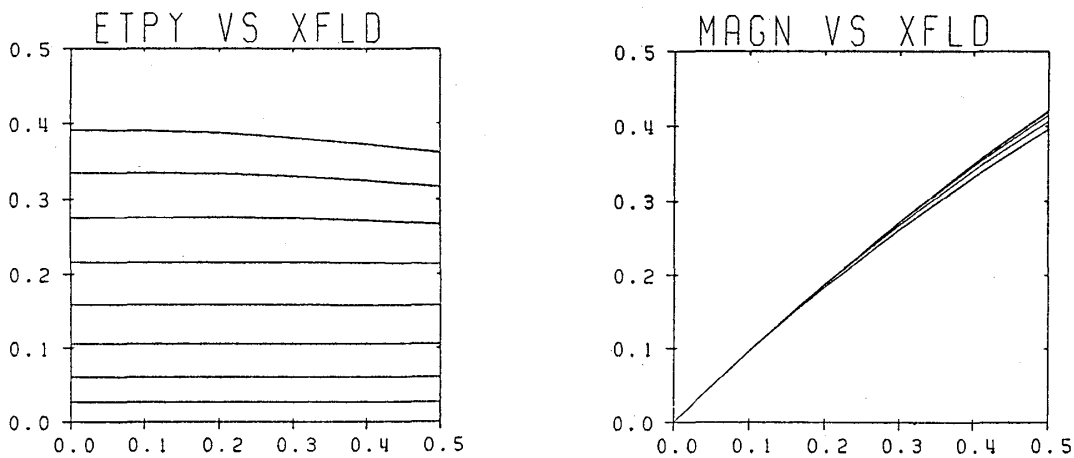


図2 エントロピー(左)と磁化(右)の磁場依存性 $T = 0.2 \sim (0.1) \sim 0.9$

仮説とは、SG相において自由エネルギーが $f(T, h) = f_1(T) + f_2(h)$ となり、従って、 $\partial m / \partial T = \partial s / \partial h = 0$ が成り立つとする予想である。もしこの仮説が正しければ $h-T$ 面上のSG相の様子がAT線上の情報だけで知る = とが出来る訳だが、図はそのことを物語っている。

次に $g(x)$, $M(x, y)$, $P(x, y)$ の振舞いについて述べてみよう。図3に典型的な磁場依存性の例を示す。このような図を色々な h について気になった点を列挙してみる。

i) $g(x)$ は図式的に図4のような関数形をもつ。すなわち、

$$g(x) = \begin{cases} g_0(h) & \text{for } 0 \leq x \leq x_0 \\ Q(x/T) & \text{for } x_0 \leq x \leq x_1 \\ g_1(T) & \text{for } x_1 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (10)$$

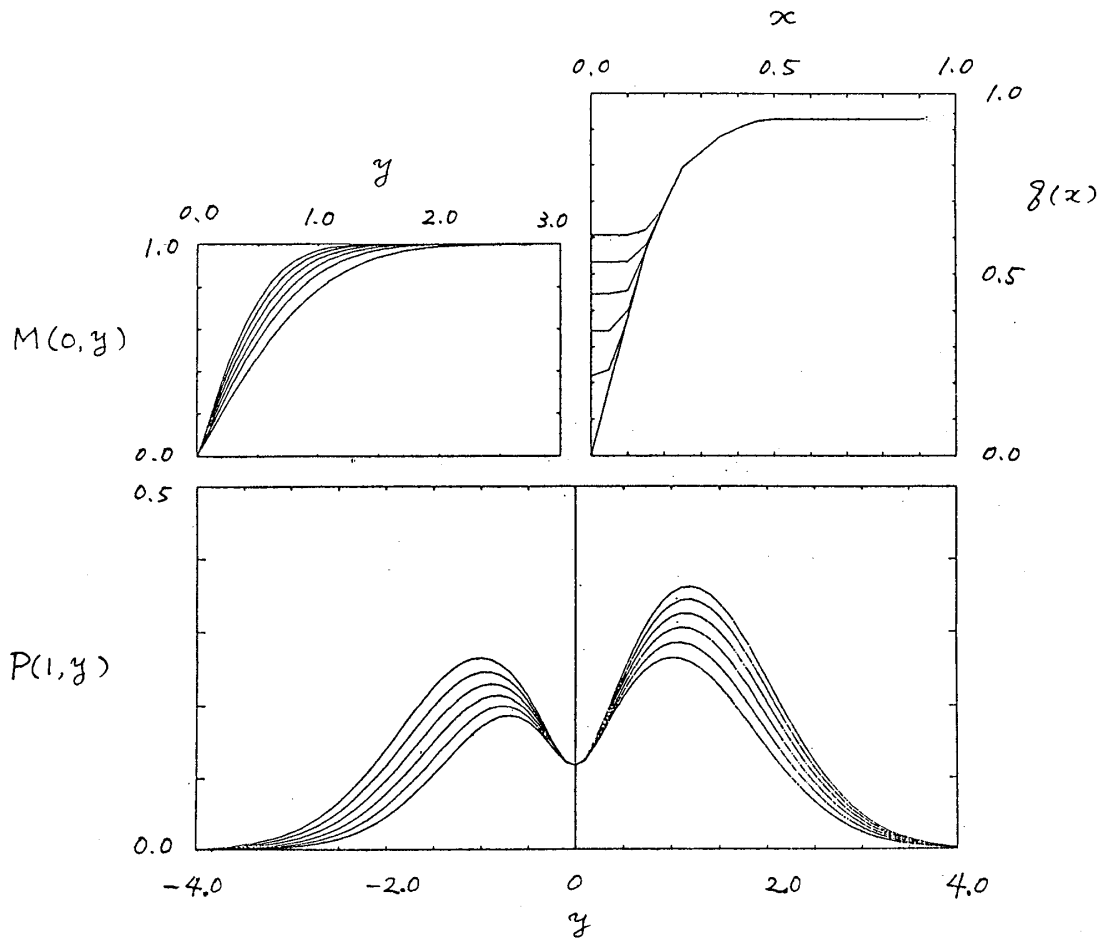


図3 $M(0, y)$ (左上), $g(x)$ (右上), $P(1, y)$ (下)の磁場依存性
 $T = 0.2$, $h = 0.0 \sim (0.1) \sim 0.5$

ここで $Q(z)$ は T, h に依らないスケーリング関数であり、 x_0, x_1 は $Q(x_0/T) = g_0(h)$, $Q(x_1/T) = g_1(T)$ で決定される。AT線は $x_0 = x_1$, 或いは $g_0(h) = g_1(T)$ で特徴づけられる。これは PaT のスケーリング仮説の拡張にほなっている。¹³⁾

ii) $\bar{g} \equiv \int_0^1 dx g(x)$ なる変数を定義したとき、SG相における関数形が

$$\bar{g} = 1 - A(h) \cdot T \quad (11)$$

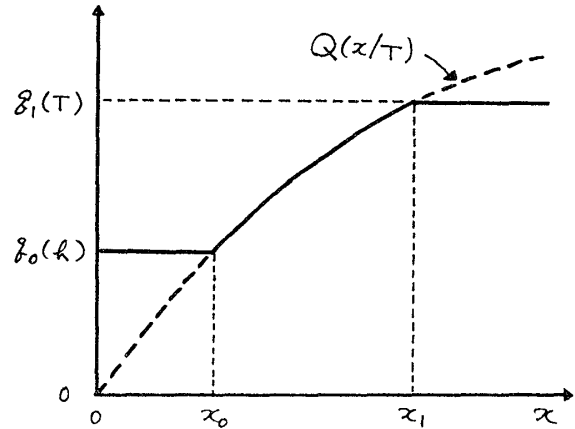


図4 $g(x)$ の模式図

すなわち、 \bar{g} は T に関して高々一次関数である。これは(10)を仮定すると簡単に導出できる。特に $h=0$ では $\partial m / \partial h = \beta(1-\bar{g})$ という関係があるので帯磁率が一定となる。

iii) SG相において $M(0, y)$ は T に依存しない。これは(9)で $x=0$ とすればわかるように、 $\partial m / \partial T$ を保証するより強い予想である。特にAT線を $T_c(h)$ とすれば、 $M(0, y) = \tanh(y/T_c(h))$ と表わされる。

iv) SG相において $P(1, 0)$ は h に依存しない。これはそれほど明瞭な意味をもちないが、低温においては(8)で $T \rightarrow 0$ とすれば $\partial S / \partial h = 0$ との関係があるように思える。

$P(1, y)$ は各スピンの働く内部磁場 y の分布関数と解釈することができ^{9), 12)} (8); (9) において $\tanh \beta y$ を誘起される磁化と考えると理解しやすい。実際TAPの方法による結果から知れる内部磁場分布とある程度の一致をみせている。¹⁰⁾

§4 おわりに 以上、目につく特徴をあげたが、これは数値的にその様に見えるという意味であって解析的に確認されたことではない。(i)~(iv)のいくつかをPaT仮説の拡張として考えてみることは、Parisi解の解析的性質を調べる上で興味深いことである。真にSK模型が、そのParisi解によって、多数の局所安定状態を統計力学的に取り扱うことのできる模型であれば、逆にその視点から何程のことが知れるのだろうか？ 例えば、SG相の局所安定状態が階層性をもっていると予想されている⁹⁾ 一般にその時の動的な振舞(異常緩和現象)等も論じられているが、このような階層性をもつことは、何が本質的なのか、といった問題は、競合するスピン系を理解する上でも重要であると思われる。このような意味で、SK模型を巡る議論は新たな局面を迎えているといえよう。

REFERENCES

- 1) D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1972
- 2) J. R. L. Almeida and D. J. Thouless, J. Phys. A11 (1978) 983
- 3) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1754, J. Phys. A13 (1980) L115, 1101, 1887
- 4) A. J. Bray and M. A. Moore, J. Phys. C13 (1980) L469
- 5) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1946
- 6) M. Mézard, G. Parisi, N. Soulas, G. Toulouse and M. Virasoro, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1156, J. Physique 45 (1984) 843
M. Mézard and M. Virasoro, J. Physique 46 (1985) 1293
- 7) A. P. Young, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 1206
- 8) N. Parga, G. Parisi and M. Virasoro, J. Physique 46 (1984) L1063
- 9) K. Nemoto and H. Takayama, J. Phys. C18 (1985) L529, J. Magn. Magn. Mater. 54-57 (1986) 135
- 10) K. Nemoto and H. Takayama, in preparation
- 11) 高山 一, 日本物理学会誌 41 (1986) 244
- 12) H. J. Sommers and W. J. Dupont, J. Phys. C32 (1984) 5785
- 13) G. Parisi and G. Toulouse, J. Physique Lett. 41 (1980) L361
J. Vanniménus, G. Toulouse and G. Parisi, J. Physique 42 (1981) 565
- 14) e. g., G. Paradin, M. Mézard and C. de Dominicis, J. Physique Lett. 46 (1985) L985