ＭＣＲＧによるランダム磁場 Ising モデルのＲＳＢ相の検出

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター　板倉 充洋 [1]

ＲＳＢ相の存在の可能性が指摘されている三次元ランダム磁場 Ising モデルについて温度交換モンテカルロ法とモンテカルロ繰り込みを用いて調べた。その結果レプリカ間相互作用に対応する物理量が高温相で異常な振舞をすることが分かった。

1 Self-averagingness/繰り込まれたランダムネス

ランダム系において、系を大きくしていった時ある物理量の熱平均Xのアンサンブル揺らぎがアンサンブル平均値に対して小さくなっていく時、Xは self-averaging である、という。

$$\lim_{L\to\infty} A(X) = 0 \tag{1}$$

$$A(X) \equiv \frac{[X^2]-[X]^2}{[X]^2} \tag{2}$$

たとえばスピンの相関長が有限なら、磁化などの物理量は独立な確率変数の和になるので、大数の法則から self-averaging になる。self-averaging にならないのは物理量の熱平均に長距離の揺らぎがある場合に限られる。

例として希釈スピン系を考える。出発点のハミルトニアンでは各スピンの長さがランダムに1か0になっている。ここで大きさ L^d のブロック上で定義されたブロックスピン ϕ_b を考えてみる。$<\phi_b^2>$ も長さが場所やアンサンブルによって異なる。その不均一さの目安として $A(<\phi_b^2>)$ を考える。この量はスケール b で繰り込んだハミルトニアンの、スピンの長さの不均一さをあらわしている。もしこの量が繰り込んで行った時に臨界点で０に収束するならランダムネスが irrelevant、有限値に収束するなら relevant である、と言える。図１に希釈立方格子上のイジングモデルで $A(<M^2>)$ を逆温度に対してプロットしたものを示す。サイズを大きくすると転移点で一定値に収束し、それ以外では０に収束していく様子が分かる。

常識的に考えれば、スピンに長距離揺らぎがなければあらゆる物理量は self-averaging になるはずである。したがって普通は物理量が self-averaging にならないのはランダムネスが relevant である相転移点に限られる。しかし何か隠れた秩序あるいは揺らぎがある場合、スピンに長距離相関がないにも関わらず self-averaging でない物理量が出てくる。このような系の候補としてスピングラスの低温相や [1]、ランダム磁場イジングモデルの高温相が挙げられている [2]。

[1] E-mail: ita@koma.jaeri.go.jp

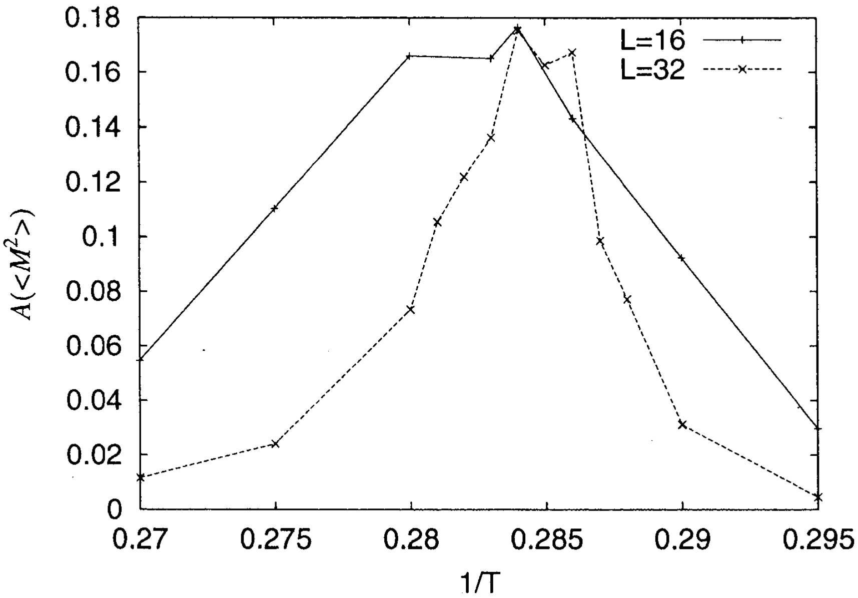

図 1: 希釈 Ising モデル $(p=0.8)$ の $A(<M^2>)$

2　ランダム磁場イジングモデル

ランダム磁場イジングモデル [2] として以下のハミルトニアンを考える。

$$H = J\sum_{<ij>} S_i S_j + \sum_i h_i S_i, \quad S_i = \pm 1 \tag{3}$$

第一項は最近接サイトのペアについて和をとる。第二項の h_i は各サイトに働くランダムな磁場で、本研究では各 h_i はそれぞれ相関のない平均０、標準偏差 h のガウス分布にしたがう変数を考える。このモデルの物理的由来は、ランダムに希釈された反強磁性体に一様磁場をかけた系である。したがって J は変わらないが h の大きさはいろいろ変えることができる。以下では $J=1$ に固定する。三次元系の温度 T と h の相図は図２のようになることが分かっている。低温では通常の Ferro 相が出現するが、転移点付近でレプリカ対称性が破れているＲＳＢ相が出現する可能性が指摘されている [2]。

3　レプリカ変換とＲＳＢ

ＲＳＢ相がモンテカルロシミュレーションでどう見えるか考察するために、レプリカの意味についてまず簡単に述べる。ランダム系の理論的解析では並進対称性のない系をそのまま扱うのは不可能なので、以下のレプリカトリックと呼ばれる手法が用いられる。

$$-F = [\log Z] = \lim_{n\to 0}[(Z^n - 1)/n]$$

ここで $[\cdots]$ はランダム磁場に関するアンサンブル平均を表す。こうして求めた F を外場で微分することにより、物理量の熱平均をとってからアンサンブル平均をとった量が計算できる。$[Z^n]$

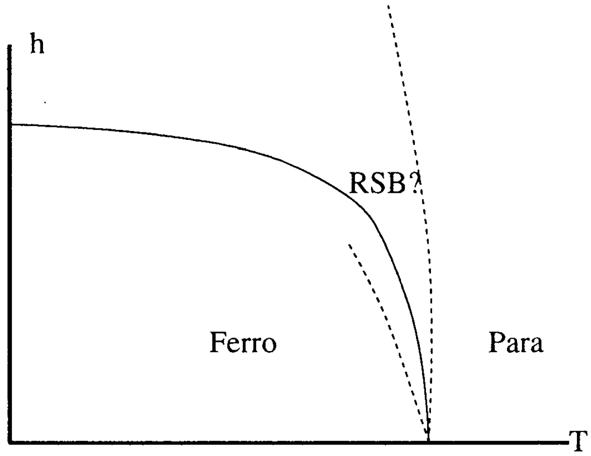

図 2: ランダム磁場 Ising モデルの相図

は同じ系を n 個用意したものの分配関数を計算してからアンサンブル平均をとったものであり、以下のように計算できる。

$$
\begin{aligned}
[Z^n] &= \int P(h_i)dh_i \sum_{S_i^1=\pm1} \cdots \sum_{S_i^n=\pm1} \exp(\sum_\alpha H(h_i, S_i^\alpha)/T) & (4) \\
&= \sum_{S_i^1=\pm1} \cdots \sum_{S_i^n=\pm1} \exp(\sum_\alpha H(0, S_\alpha)/T + H_R/T) & (5) \\
H_R &= h^2 \sum_{\alpha,\beta,i} S_i^\alpha S_i^\beta & (6)
\end{aligned}
$$

ただし

$$H(h_i, S_i) = \sum_{<i,j>} S_i S_j + \sum_i h_i S_i$$

とおいた。式 (5) では各スピンを固定してランダム磁場に関する積分を先に実行している。この積分によって系は並進対称になり、おつりとして初めは相互作用のなかった各レプリカの間に相互作用 H_R が出てくる。

h_i の分布がガウス分布からずれる場合、H_R にはさらに高次の相互作用が含まれる。四次の項までを考えると以下のような ϕ^4 モデルになる。

$$
\begin{aligned}
& (\nabla\phi_\alpha)^2 + m\phi_\alpha^2 + u_1\phi_\alpha^4 & (7) \\
+ \quad & h^2\phi_\alpha\phi_\beta + u_2\phi_\alpha^3\phi_\beta + u_3\phi_\alpha^2\phi_\beta^2 + u_4\phi_\alpha^2\phi_\beta\phi_\gamma + u_5\phi_\alpha\phi_\beta\phi_\gamma\phi_\delta & (8)
\end{aligned}
$$

(7) だけなら通常の ϕ^4 モデルで、(8) がレプリカ間の相互作用を表している。二次の項が二種類あることは、ϕ_α が既訳表現の基底ではなく、$\sum_\alpha \phi_\alpha$ と、残りの $n-1$ 成分に分解されることを示している。例えば $n=2$ の場合、規約表現は $\phi_1+\phi_2$ と $\phi_1-\phi_2$ になる。この場合 $\phi_1+\phi_2$ が通常の Para–Ferro 相転移に関係したオーダーパラメータで、$\phi_1-\phi_2$ がレプリカ対称性の破れを表すパラメータであることが分かる。しかし $n=0$ の場合このような規約表現への分解は自明でない。

このモデルの 6 次元からの展開をすると、u_3 が繰り込んでいった時に高温相で発散するという研究が最近なされた [3]。この現象が三次元でも起こるなら、高温相で何か自明でないことが起こ

る。これがモンテカルロシミュレーションでどう見えるかここで考えてみる。(上記 ϕ^4 モデルを直接シミュレーションできれば良いが、$n=0$ の場合をやらなければいけないので不可能である)

H_R を加えたハミルトニアンの下での熱平均を $<\cdots>_R$ と書く。すると

$$< X >_R = [< X >]$$

となる。u_3 に共役な量は

$$< \sum_{\alpha,\beta} \phi_\alpha^2 \phi_\beta^2 >_R = \sum_\alpha [< \phi_\alpha^4 >] + \sum_{\alpha\neq\beta} [< \phi_\alpha^2 >< \phi_\beta^2 >] \tag{9}$$

$$= \quad n[< \phi^4 >] + n(n-1)[< \phi^2 >^2] \tag{10}$$

ここに ϕ はブロックスピン変換などで繰り込まれたスピンとする。特に系全体を一つのブロックと見なした場合、ϕ は磁化 M になる。$[< M^2 >] = 1$ となるようスピンを定数倍して再定義すれば [4]、10は $A(< M^2 >)$ と Binder パラメータで書き表せる。つまり u_3 の発散に対応して $A(< M^2 >)$ が異常な振舞をすることが予想される。

4 モンテカルロシミュレーションの実際

以下では実際のモンテカルロシミュレーションの詳細を述べる。ランダム磁場イジングモデルの大きな特徴として、スピン反転 $S \to -S$ に関してハミルトニアンが対称でないことがあげられる。＋相と－相はそれぞれ異なるエネルギーとエントロピーを持つので、物理量（特にスピンの奇数次のモーメント）を正しく計算するには両方を盛んに行き来することが必要になる。しかし通常のアルゴリズムでは転移点より低温では緩和時間がサイズとともに指数的に増大するので、非常に困難である。転移点より高温の領域においても、サンプルによってはすでに低温相になっている系もあるので、緩和が非常におそくなる。実際、文献 [5] において 16^3 の系では緩和に 10^6 のオーダーのメトロポリスステップが必要だったと述べられている。緩和の判定には、スピンが全て＋１の状態と全て－１の状態から始めて、両方で物理量の熱平均が誤差の範囲で等しくなるという条件が用いられている。

本研究では当初通常のメトロポリスアルゴリズムを用いていたが、研究会の後温度交換法を使用してみて、緩和が劇的に加速されるのを確認した。サイズ 16^3 の系では 4×10^4 ステップの計算ですでに前述の条件を満たしていたので、１０倍以上加速したことになる。三次元系ではスピン 24^3 個の系の計算が現在のところ最大であるが [6]、温度交換法によりさらに大きい系の計算も可能であると思われる。ちなみに文献 [6] では温度交換法よりも複雑なクラスター交換法を用いているが、計算コストに対して緩和がそれほど速くならず、ＣＰＵ時間で計れば通常のメトロポリス法の方が速いという結果になっている。しかし温度交換法なら計算コストは無視できるほど小さいので、この系に関しては温度交換法がもっともコストパフォーマンスがよいと考えられる。また方法が簡単でコーディングにかかるワークロードが非常に小さいのも利点である。実際通常のメトロポリス法のコードを温度交換法に書き換えてデバッグを終るまでに三日しか要しなかった。

5 シミュレーション結果

計算はサイズ 8^3 の系と 16^3 の系について、$h=1.0$ と $h=2.0$ の場合について行なった。各ランダム磁場について 50000 メトロポリスステップの計算を行ない、120 個のランダム磁場について計算した。以下に $A(<M^2>)$ と Binder パラメータ $U_L=[<M^4>]/[<M^2>]^2$ のプロットを示す。$h=1.0$ と $h=2.0$ のいずれの場合にも、転移点よりもかなり高温の領域において $A(<M^2>)$ が最大値をとり、さらに最大値がサイズとともに増大している。最大値をとる温度では Binder パラメータはすでに 3 に非常に近い値となっており、転移点付近のスケーリング則で記述される温度領域よりも高温側にあることが分かる。さらに高温の領域では $A(<M^2>)$ はサイズに依存しない一定値に収束している。これは高温相では $A(<M^2>)$ が熱揺らぎとアンサンブル揺らぎの比で表されることに起因する。したがって $A(<M^2>)$ の値から自明でない秩序が存在するか判断することはできない。またスピングラスパラメータ $\sum_i <S_i>^2$ はランダム磁場のため常に 0 でない値となるため、これも非自明な秩序の検出には使えない。

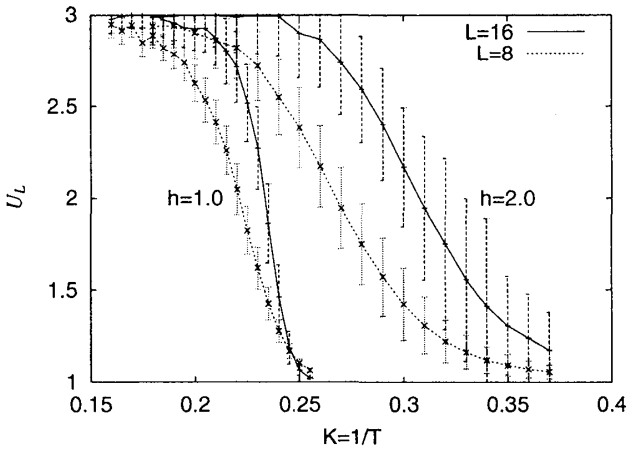

図 3: ランダム磁場 Ising モデルの Binder パラメータ

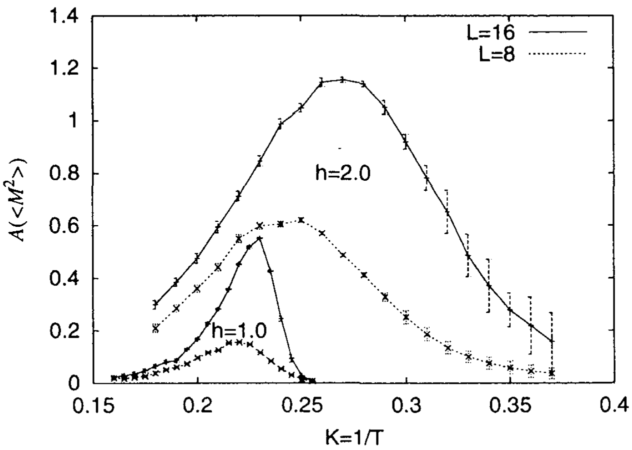

図 4: ランダム磁場 Ising モデルの $A(<M^2>)$

6 結論

本研究ではランダム磁場 Ising モデルの高温相でレプリカ間相互作用に関連した物理量が異常な振舞をすることを示した。これは転移点近傍でのスケーリング則では記述できない振舞であり、別のスケーリング則が必要となる。現在このスケーリング則を研究中である。これによって Para 相と異なるＲＳＢ相があってその間に相転移があるのか、それとも単なるクロスオーバーなのかが判明すると期待している。

参考文献

[1] See for a review: E. Marinari, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, J. Ruiz-Lorenzo, and F. Zuliani, J.Statist.Phys. **98** (2000), 973;cond-mat/9906076.

[2] See for a review: *"Theory of the Random Field Ising Model"* in *"Spin Glasses and Random Fields"*, T.Nattermann, World Scientific;cond-mat/9705295.

[3] E.Brézin and C. De Dominicis, cond-mat/0007457.

[4] M.Itakura, Phys. Rev. E **61** (2000), 5924 ;cond-mat/9905215.

[5] H.Rieger, Phys. Rev. B **52** (1995), 6659;cond-mat/9503041.

[6] J.Machta, M.Newman and L.Chayes, cond-mat/0004125.