

ベクトル秩序パラメータをもつ系への 新しいアルゴリズムの応用

東京都立大学理学研究科 岡部 豊¹, 富田 裕介, Tasrief Surungan

我々が提唱した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ベクトル秩序パラメータをもつ系への応用する。また、相関関数の比の有限サイズスケーリングの性質を用いた確率変動クラスターアルゴリズムの一般化について述べる。さらにその一般化アルゴリズムの量子 XY モデルへの応用を紹介する。

1 PCC アルゴリズムの 2 次元 XY モデルとクロックモデルへの応用

最近、富田-岡部 [1] は、臨界点を自動的に決定する新しいクラスターアルゴリズムを提案した。これは、Swendsen-Wang アルゴリズム [2] を拡張したもので、確率変動クラスター (probability-changing cluster (PCC)) アルゴリズムと呼ぶことにする。PCC アルゴリズムの基本的なアイデアは、モンテカルロのスピン状態更新の過程で Kasteleyn-Fortuin タイプのクラスターを作る際に、同じタイプのスピンをつなぐ確率 $p = 1 - e^{-J/k_B T}$ を系が浸透しているかどうかに応じて変動させる所にある (ポッツモデルを念頭に置いて説明している)。負のフィードバックにより、自動的にサイズに依存した臨界点 $p_c(L)$ に近づいていく。系が浸透する確率 E_p は、臨界点近傍で有限サイズスケーリング

$$E_p(p, L) \sim X(\xi/L), \quad t = (p_c - p)/p_c \quad (1)$$

に従う。ここで L は系の 1 次元的なサイズで、 ξ は相関距離、 p_c は無限系 ($L \rightarrow \infty$) における臨界点である。 $p_c(L)$ のサイズ依存性から、(1) 式を用いて p_c を求めることができる。また $p_c = 1 - e^{-J/k_B T_c}$ の関係式を用いて臨界温度 T_c を決定できる。

PCC アルゴリズムの応用について次のような点に興味をもたれる。

1. XY モデルのようなベクトル秩序パラメータをもつ系に応用できるか?
2. Kosterlitz-Thouless (KT) 転移の解析に使えるか?
3. 2 つ以上の相転移を示す系に使えるか?

実際にこれらのことは可能である [3]。ベクトル秩序パラメータをもつ系に対しては、Wolff の埋め込みクラスターのアイデア [4] を用いることができる。すなわち、XY モデルの問題の場合には、ある軸に XY スピンを投影して、2 つのイジングスピンのように表し、その浸透の性質を調べる。それにより PCC アルゴリズムをベクトル秩序パラメータをもつ系に応用できることになる。

¹ E-mail: okabe@phys.metro-u.ac.jp

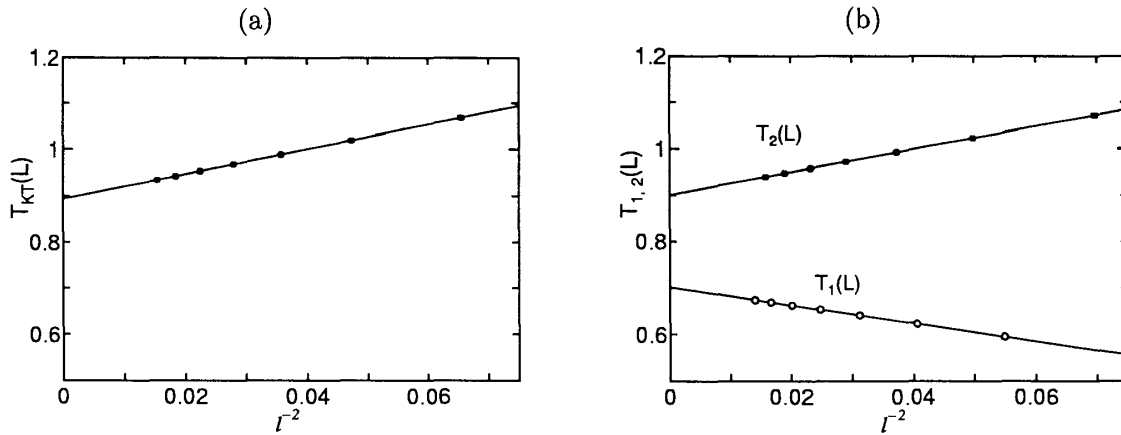


図 1: (a) 2 次元古典 XY モデルの $T_{KT}(L)$ (b) 2 次元 6 状態クロックモデルの $T_1(L), T_2(L)$ のサイズ依存性. $l = \ln bL$ でパラメータは最適値を選んである. 系のサイズは $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512$.

実際に 2 次元古典 XY モデルの場合に, このようにして決めたサイズに依存する $T_{KT}(L)$ を図 1(a) に示す. KT 転移の解析には, KT タイプの相関距離の発散の形

$$\xi \propto \exp(c/\sqrt{t}) \quad (2)$$

に基いた有限サイズスケーリングの解析を用いる. 式 (1) と式 (2) から

$$T_{KT}(L) = T_{KT} + \frac{c^2 T_{KT}}{(\ln bL)^2} \quad (3)$$

の関係式が得られるので, 図 1(a) では $T_{KT}(L)$ を l^{-2} ($l = \ln bL$) に対してプロットしてある. T_{KT} の評価値は 0.8933(6) となり, 最近の他の精密な計算結果と良い一致を示す. なお, カッコ内の数字は最終桁の不確定性を表す.

同様の計算は, 取り得る角度の値を $\theta_i = 2\pi p_i/q$ ($p_i = 0, 1, 2, \dots, q-1$) に制限した q 状態クロックモデルの場合にも実行することができる. $q > 4$ の 2 次元クロックモデルの場合には 2 回 KT 転移が起こることが知られているが, $q = 6$ の場合に 2 つの KT 転移温度 T_1, T_2 をプロットしたものを図 1(b) に示す. また, $q=8, 12$ の場合にも計算を行った. T_1, T_2 と臨界指数 η の評価を行い, それらの q 依存性を評価した. 下の KT 転移点 T_1 における η が $\eta = 4/q^2$ となるくりこみ群の予想を系統的に確かめることができた. くわしくは Ref. [3] を参照されたい.

2 相関関数比の有限サイズスケーリングと PCC アルゴリズムの一般化

PCC アルゴリズムでは, 浸透問題に対応させて系が浸透しているかどうかの確率 E_p が 1 変数有限サイズスケーリング [式 (1)] の性質をもつことを利用し, 臨界点を求めてきた. 一方, このような 1 変数有限サイズスケーリングの性質をもつ量として Binder 比が知られ, 広く臨界現象の解析に用いられている. PCC アルゴリズムではスピン配置のスナップショットで確率変動を決

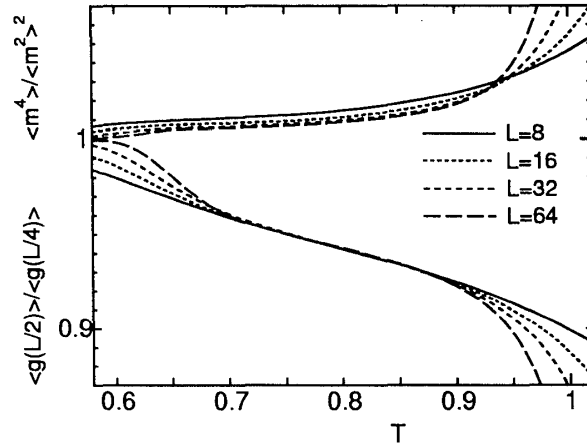


図 2: 2 次元 6 状態クロックモデルのモーメント比 $\langle m^4 \rangle / \langle m^2 \rangle^2$ と相関関数比 $g(L/2)/g(L/4)$ の比較.

めているので, Binder 比 (本質的には $\langle m^4 \rangle / \langle m^2 \rangle^2$ のモーメントの比) では瞬間の値は常に 1 で, 直接には PCC アルゴリズムに使えない. クラスタ表現のない系に PCC アルゴリズムを一般化するために, 他の量として異なる距離のスピンの相関関数の比を考えることにする. 無限系では, 臨界点において距離 r の相関関数は

$$\langle g(r) \rangle \sim r^{-(D-2+\eta)}, \quad (L = \infty, t = 0) \quad (4)$$

のようなべき的依存性を示すが, 有限系で臨界点をはずれた点では, $r/L, L/\xi$ に依存することになる. しかし, r と r' の 2 つの距離の相関関数を考え, r/L と r'/r を固定して相関関数の比をとれば,

$$\frac{\langle g(r, t, L) \rangle}{\langle g(r', t, L) \rangle} = \tilde{f}(L/\xi) \quad (5)$$

のように 1 変数の有限サイズスケーリングの性質を示す.

例として 2 次元 6 状態クロックモデルの場合に r, r' として $L/2, L/4$ を選んだ相関関数比 $g(L/2)/g(L/4)$ をモーメント比 $\langle m^4 \rangle / \langle m^2 \rangle^2$ と比較したものを図 2 に示してある. 相関関数比は, 中間の KT 相で期待されるような臨界線の性質を小さなサイズの系でも示しており, 相関関数比が KT 転移にも有効であることを示している.

この相関関数比の性質を PCC アルゴリズムにおける系の温度を上昇させるか下降させるかの判定に用いることができる. これにより, クラスタ表現をもたない系へも PCC アルゴリズムを一般化することができ, PCC アルゴリズムの適用範囲が大幅に広がる.

3 一般化 PCC アルゴリズムの量子 XY モデルへの応用

前節で一般化した PCC アルゴリズムを量子シミュレーションへ応用してみよう. 具体的にスピン $1/2$ の 2 次元量子 XY モデルを取り上げ, 連続時間ループアルゴリズムを用いて計算する. 相

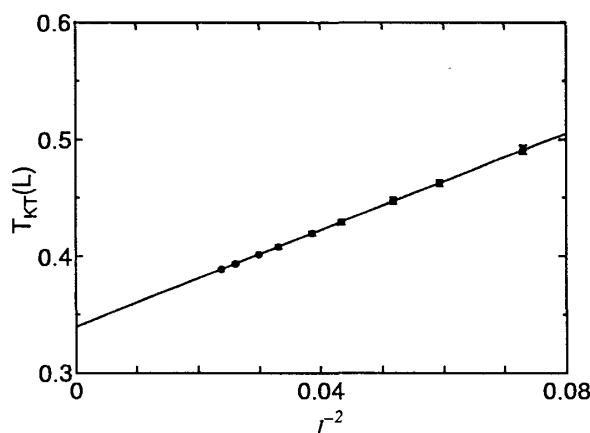


図 3: 2次元スピン 1/2 量子 XY モデルの $T_{KT}(L)$ のサイズ依存性. $l = \ln bL$ でパラメータは最適値を選んである. 系のサイズは $L = 8, 12, 16, 24, 32, 48, 64, 96, 128$.

関数比 $g(L/2)/g(L/4)$ がある値 R_c より大きいかどうかによって温度を変化させる. 実際このようにして $T_{KT}(L)$ を求め, 古典 XY モデルの場合と同様の取り扱いをしたものを図 3 に示してある. なお, R_c としては 0.8 をとってある. このようにして求めた量子 XY モデルの T_{KT} の評価値は 0.340(1) で, これも他の精密な評価値と良い一致を示す.

4 フラストレート XY モデルへの Wang-Landau アルゴリズムの応用

フラストレートした XY モデルあるいはクロックモデルにおけるカイラリティーの秩序の転移と KT 的な転移のふるまいに多くの興味もたれている. 我々は一般化した PCC アルゴリズムをこのようなフラストレート系に適用すると共に, 他の手法としてエネルギー状態密度を精密に計算できる拡張アンサンブル法の一つである Wang-Landau アルゴリズム [5] の応用を行っている. しかし, 紙面の制限もあるので, この報告は別の機会に譲りたい.

参考文献

- [1] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 572; J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 1570.
- [2] R. H. Swendsen and J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 86.
- [3] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. B **65** (2002), 184405.
- [4] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 361.
- [5] F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 2050; Phys. Rev. E **64** (2001) 056101.