

異方性をもつハイゼンベルグモデルのモンテカルロ法

京都大学 情報学研究科 原田 健自¹

共同研究者 都立大 理学部物理 川島直輝

本講演では、われわれの取り組んでる Cubic 異方性をもつハイゼンベルグモデルのモンテカルロシミュレーションにどういった困難があるのかという点について報告し、その打開策として、われわれが取り組んでいる弱いグラフをもちいたループアルゴリズムの紹介を行う。

1 はじめに

量子スピン系のモンテカルロシミュレーションに用いられるループアルゴリズムには緩和時間か非常に小さいなどのさまざまな利点があり、優れたループアルゴリズムを構成できるメリットは大きい。

一部の異方性をもつハイゼンベルグモデル（例えば、量子 $S = m/2$ スピン XYZ モデル）についても、等方的なハイゼンベルグモデルとおなじ種類のグラフによって優れたループアルゴリズムが構成できることが知られているが、他の異方性をもつモデルについて、そういったアルゴリズムが構成可能かどうかはよくわかっていない。

講演では、最初に Cubic 異方性をもつハイゼンベルグモデルについて紹介をし、その後、ループアルゴリズムとその問題点および弱いグラフの導入について報告をする。

2 Cubic 異方性

Cubic 異方性は結晶場による異方で臨界現象に対する影響などから古典系についても量子系についても古くから研究されている²。Cubic 異方性をもつハイゼンベルグモデルのハミルトニアンは次式で定義され、その D 項が Cubic 異方性を表す。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - D \sum_i (\mathbf{S}_i)^4 \quad (1)$$

$$(\mathbf{S}_i)^4 = (S_i^x)^4 + (S_i^y)^4 + (S_i^z)^4 \quad (2)$$

¹ E-mail: harada@acs.i.kyoto-u.ac.jp

² 例えば [1] 参照

摂動論などによる解析から $S=2$ 量子スピン系では、 $T=0$ で D 項が強い領域で、 $((S^x)^2 - 2), ((S^y)^2 - 2), ((S^z)^2 - 2)$ のような Quadrupolar 秩序相への非磁性的な相転移が おこることが予想されており、こういった量子相転移を数値的に調べる目的でモンテカルロシミュレーションをおこなっている。

3 量子スピン ($S > 1/2$) 系のループアルゴリズム

川島らの $S > 1/2$ スピン系の一般化 [2] と Beard らの連続時間化 [3]などを統合すると、 $S > 1/2$ スピン系に対するループアルゴリズムの構成法は一般的に次のようになる。

- $S = 1/2$ スピン系への分解

$$\mathbf{S} = \sum_{k=1}^{2S} \sigma_k \text{ により、} \mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}}$$

- 虚数時間方向の境界条件 (対称化演算子 P)

$$\tilde{\text{Tr}} \exp(-\beta P \tilde{\mathcal{H}} P) = \tilde{\text{Tr}} P \exp(-\beta \tilde{\mathcal{H}})$$

- ハミルトニアングラフ分解

$$\tilde{\mathcal{H}}_{ij} = \alpha_0 I - \sum_k \alpha_k \Delta(G_k)$$

モデルごとに変わるのはグラフ分解の際に用いるグラフの種類である。式中の $\Delta(G_k)$ がグラフ G_k を表すオペレーターであり、グラフによって行き来できるスピン状態に対応する行列要素が1、それ以外が0となっている。たとえば、一般の XYZ モデルの場合、図1のような3種類のグラフでハミルトニアンを分解することができる。そして、この場合、緩和が非常に速いことが実験的に知られている。

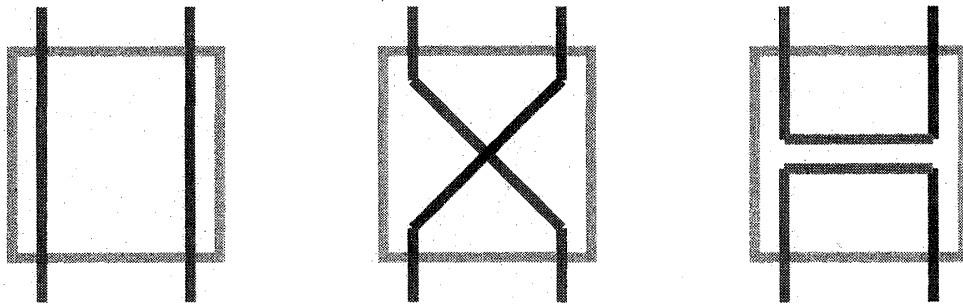


図 1: XYZ モデル

4 Cubic 異方性のグラフ分解

$S = 2$ を $S = 1/2$ 系に分解すると 1 つのサイトに 4 つのスピンの存在することになり、Cubic 異方性の行列要素は上下 8 つのスピンのあつまったプラケットとして表現できる。前節にあるように、このプラケット上のグラフに適当な重み α_k を掛け足しあわせることで Cubic 異方性のグラフオペレータによる書き換えができれば、ループアルゴリズムが構成できることがわかる。

まず、horizontal binding (図 2) となづけたグラフのみで Cubic 異方性を分解すると次式のようになる。

$$(\mathbf{S}_i)^4 = 18I + 3(\Delta(G_{H_1}) + \Delta(G_{H_2})) \quad (3)$$

ここで、 $\Delta(G_{H_i})$ はともに horizontal binding のグラフオペレータである。ただし、各々は、プラケットの上下に 0 個もしくは 4 個のアップスピンの状態に作用するものと 2 個のアップスピンの状態に作用するものを表す。

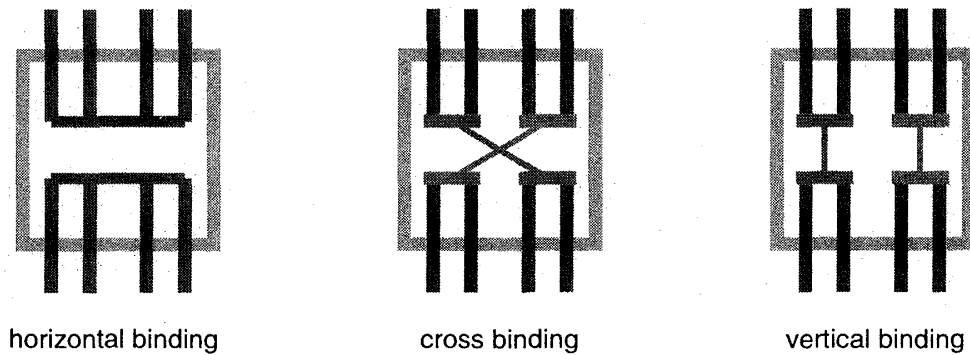


図 2: Cubic 異方性に対するさまざまなグラフ

式 (3) にしたがって、偶数個のアップスピンが続いている区間（セグメント）には、強度 3 のポアソン過程で、horizontal binding を置くことでループアルゴリズムを構成できる。しかし、図 3(左)にあるように、4 つのスピンをバインドする horizontal binding によって、まったく遷移できないか、もしくは、低温では指数関数的に遷移できない状態の組み合わせが存在し、シミュレーションを行った場合、低温で緩和が遅くなり、サンプリングが困難になる。

このような問題に対処するため、horizontal binding のように 4 つをまとめるのではなく、2 つずつのスピンを bind する cross または vertical binding などのグラフ (図 2) を考える。これらの binding は、各々、horizontal binding と同じく、グラフオペレータ ($\Delta(G_{C_k})$ 、 $\Delta(G_{V_k})$) の和によって表現でき、さらに異なる binding 間の間に次の等式が成立する。

$$\sum_k \Delta(G_{H_k}) = \sum_k \Delta(G_{C_k}) = \sum_k \Delta(G_{V_k}) \quad (4)$$

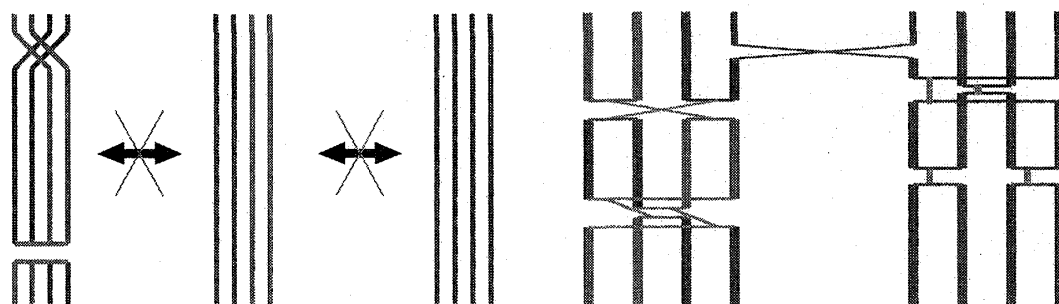


図 3: エルゴート性の問題

従って、これら3つの異なる binding を任意の割合で混合することによっても、Cubic 異方性のグラフ分解が可能である。

しかし、例えば、cross と vertical binding のみを同じ割合で混合すると、低温では、図 3 (右) のようにペアリングをランダムに複数回同じサイトに行うため、結局、4つのスピンを bind したのとかかわらない結果になる。そのため、この場合でも、実際、低温では緩和はふたたび遅くなるということが観測された。

5 弱いグラフによるループアルゴリズム

緩和を早めるためには、グラフをおいた後に独立なループの数が多いことが望ましい。しかし、通常のループアルゴリズムにあるように、最初にグラフ分解をしたときの重みをつかって各場所ごとに独立にグラフをおいていくと、前節にのべたようにループの数かなりすくなくなってしまう場合が頻繁にでてくる。そこで、ループの数を減らさないように、順次、グラフを決定していくというアルゴリズムを提案する。

まず、horizontal, cross, vertical binding すべてを表す弱いグラフを定義する。弱いというのはこれらの binding を区別しないということを意味する。したがって、通常のグラフでは表現できない。式 (4) により、どの種類のグラフもすべて同等に扱えるので、なんらかの binding を置く場所だけを弱い binding によって表すことができる。このような弱いグラフによるループアルゴリズムは以下のようなステップからなる。

1. 弱いグラフと強磁性交換相互作用を表すグラフを配置。
2. 弱いグラフではセグメント（虚数時間方向に連続するスピン線）は切れているとして、クラスター（互いに結合したセグメントの集合）の同定を行なう。
3. 弱いグラフを順にみていき、上下8本のセグメントができるだけ1つのクラスターにならないように binding を決定していく。

4. 全ての弱いグラフが通常の binding に置き換わったら、再度ループの同定をおこない、ループごとに独立に確率 $1/2$ でフリップする。

上記のような binding の決定にさいして、特定のアルゴリズム（ここではクラスターが減らないような選択をする）を採用しても、詳細釣り合い条件を満たすかをチェックする必要がある。しかし、このことは、binding の決定の際、スピン状態に関する情報をまったく用いないことから次に述べるように容易に示すことができる。

ループアルゴリズムはスピンとグラフ空間という 2 つの空間を交互に行きかうことで時間発展する。その間の遷移確率は弱いグラフを含む場合のアルゴリズムでは、次式のようにになっている。

$$\begin{cases} P(S \rightarrow G) = \frac{P_{\text{algorithm}}(G) \cdot W(S, G)}{\sum_{G'} W(S, G')} \\ P(G \rightarrow \tilde{S}) = \frac{W(\tilde{S}, G)}{\sum_{S'} W(S', G)} \end{cases} \quad (5)$$

ただし、

$$\text{ボルツマン重み } W(S) = \sum_G W(S, G) = \sum_G \alpha(G) \Delta(G, S) \quad (6)$$

式 (5) にある $P_{\text{algorithm}}(G)$ は弱いグラフから binding を決定するアルゴリズムによって定まり、この遷移確率がスピン状態の情報をまったく含んでいないので、次式の詳細釣り合い条件が常に成立することがわかる。

$$P(S \rightarrow G)P(G \rightarrow \tilde{S})W(S) = P(\tilde{S} \rightarrow G)P(G \rightarrow S)W(\tilde{S}) \quad (7)$$

ループ数が最大とするような binding 決定アルゴリズムがもっとも望ましいが、そのためには最適化問題をとかなければならない。最適解を求める時間が多項式でおさまるのかはよくわかっていないので、現状では、上記のように順番に弱いグラフを処理する欲張り法の一つをもちいている。

このような欲張り法による binding 決定アルゴリズムでも、低温でかなりの改善がみられるようになったが、まだ、相転移領域の検証には不十分であるのでさらなる改良をつづけている。さらに、今後、弱いグラフに拡張されたループアルゴリズム自身のさらなる発展にも期待している。

参考文献

- [1] M. Dudzinski, G. Fath, J. Sznajd, Phys. Rev. B **59**, 13764 (1999).
- [2] N. Kawashima and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. Lett. **73**, 1295 (1994).
- [3] B. B. Beard and U. J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77**, 5130 (1996).