

確率変動クラスターアルゴリズムの 3D q -state Potts モデルへの適用

都立大院理 富田裕介, 岡部豊

確率変動クラスター (PCC) アルゴリズム [1] は系の臨界点を前もって知らなくても, 系の温度を自動的に相転移温度に近づけ, そこでカノニカルアンサンブルするアルゴリズムである. 臨界点でのデータが欲しいとき従来の方法では,

1. 臨界点をはさむように何点か取ってシミュレーションをする.
2. 異なるシステムサイズで同様にシミュレーションをする.
3. Binder パラメータ等で臨界点を評価する.
4. 臨界点でシミュレーションをする.

もう少し効率のよい方法が他にあるが (reweighting method など), 従来の方法においては計算時間のほとんどが手順 4. に至るまでに費やされている. それに対し PCC アルゴリズムはいきなり手順 4. から始められるアルゴリズムであり, 相転移点が自明でない系や相転移点がサンプルに依存するランダムスピン系などでは特に有効である. PCC アルゴリズムの原理については本報告書の「新しいモンテカルロ法のあれこれ」(岡部豊, 富田裕介, 山口智明) を参照してもらうことにして, 本稿では 3 次元 Potts モデルと 2 次元希釈イジングモデルへの適用を応用例として紹介したい.

1. 3D q -state Potts モデル

q -state Potts モデル [2] のハミルトニアンは以下のように記述される.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1).$$

$\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ は Kronecker デルタで $\sigma_i = \{1, \dots, q\}$ である. 3 次元では $q = 1, 2$ のとき 2 次相転移, $q = 3$ 以上で 1 次相転移することが知られている.

まず, $q = 2$ Potts モデルのシミュレーション結果を示す. 図 1 は PCC アルゴリズムによって評価された臨界点 $T_c(L)$ のシステムサイズ L 依存性である. 有限サイズスケーリング解析 [3] から,

$$T_c(L) = T_c + aL^{-1/\nu}(1 + bL^{-\omega}),$$

という関係式が得られる. non-linear fitting から, $T_c = 4.5118(8), 1/\nu = 1.64(12)$ と評価された. この結果は Ferrenberg と Landau [4] による最近の結果, $T_c = 4.51142(6), 1/\nu = 1.5887(4)$ とコンシステントである. 図 2 はシステムサイズ L に対する磁化 m の log-log プロットである. $T = T_c(L)$ における磁化のシステムサイズ依存性は下の式のように温

度を含まない形で書ける.

$$\langle |m|(L) \rangle = aL^{-\beta/\nu}(1 + bL^{-\omega}).$$

この式から（無限系の）臨界温度 T_c とは独立にオーダーパラメータの臨界指数を決定することができる. これは PCC アルゴリズムを使う 1 つの利点である. fitting の結果 $\beta/\nu = 0.517(8)$ が得られ, 最近の結果 $\beta/\nu = 0.518(7)$ と極めて近い値を出した. 図 3 に磁化の分布関数の生データとスケーリングプロットを示す. β/ν は上で評価した値を用いた. 磁化の分布関数に関してもよくスケーリングされていることがわかる.

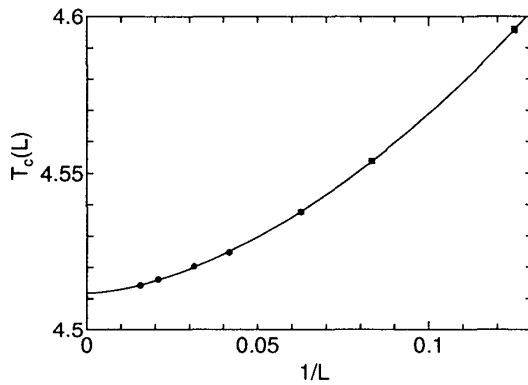


図 1: 有限系の $T_c(L)$ のシステムサイズ L 依存性. 実線は non-linear fitting の結果.

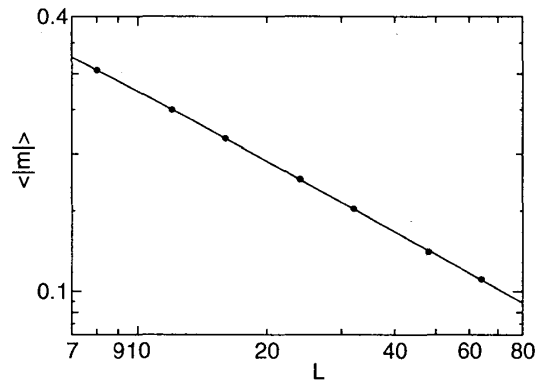


図 2: $T = T_c(L)$ における磁化のシステムサイズ L 依存性. 実線は non-linear fitting の結果.

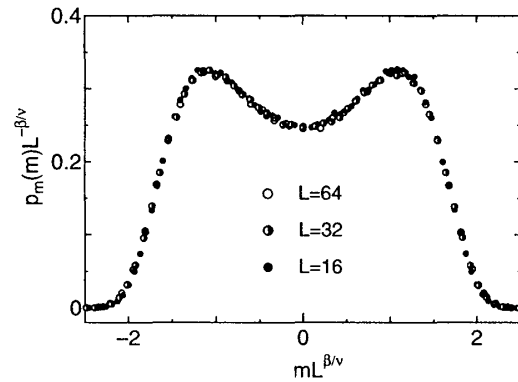
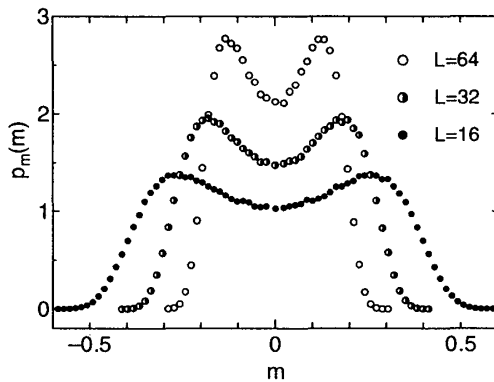


図 3: 磁化の分布の生データ (左) とスケーリングプロットしたもの (右). $\beta/\nu = 0.517$ とした.

図 4 に $q = 3$ Potts モデルのシステムサイズ L と有限系の臨界温度 $T_c(L)$ の関係を示す. 1 次相転移のとき L と $T_c(L)$ は,

$$T_c(L) = T_c + aL^{-(D-1)}$$

の関係を満たすことが知られている [5]. ここで D は空間次元である. この式から $T_c = 1.8152$ と評価され, 最近の結果 [6] $T_c = 1.8163(2)$ に近い値が得られた. しかし, 分布に

関してはカノニカル分布が実現されていないことがわかった。それは次のような理由による。まずスピンのオーダーしている低温からシミュレーションを始めたとする。すると系のクラスターは常にパーコレートしているから、系の温度は次第に高くなる。 $T = T_c$ においてクラスターがパーコレートしている状態からパーコレートしていない状態に移移する確率はシステムサイズと共に急激に小さくなる (single spin flip をしている場合 $\exp(-\sigma L^{D-1})$ ($\sigma = \text{const.}$) に比例する)。その結果 T_c に達してもなお温度を上げ続ける。シミュレーションを高温側から始めたときも同様なことが起き、系の温度は相転移温度をはさむようにしてループを描く (図 5)。従って 1 次相転移の場合には PCC アルゴリズムはカノニカル分布を実現しないが、相転移点がループの間にあることと、ループの幅が $L^{-(D-1)}$ に比例することから相転移温度に関してはある程度よい値が得られることが理解される。

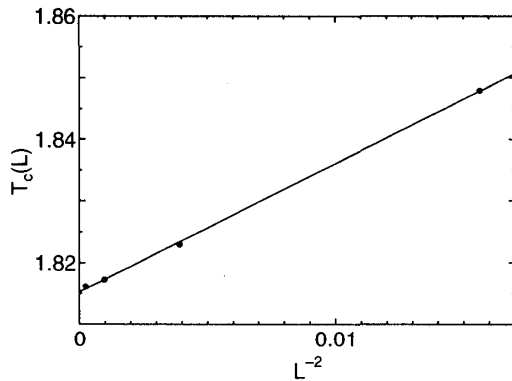


図 4: 有限系の $T_c(L)$ のシステムサイズ L 依存性。
実線は $T_c(L) = T_c + aL^{-2}$ の直線。

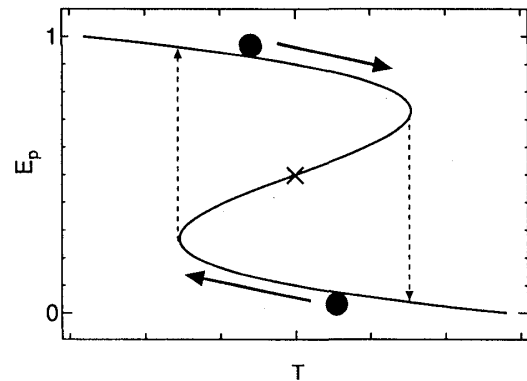


図 5: 1 次相転移に PCC アルゴリズムを適用したときの模式図。

2. 2D 希釈 Ising モデル (random spin 系への応用として)

random spin 系への応用として 2D サイト希釈 Ising モデル [7] への適用を紹介する。ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_i S_i \epsilon_j S_j$$

であたえられる。 $S_i (= \pm 1)$ は Ising スピンで $\epsilon_i (= 0, 1)$ はクエンチされたランダム変数である。 $\epsilon_i = 0$ ($\epsilon_i = 1$) のときサイト i には空孔 (スピン) が入る。一般に有限系では臨界温度はサンプルに依存し分布する。臨界温度は比熱や磁化率のピーク、あるいは浸透確率や Binder パラメータなどがある値を取るところなどで定義される。Aharony と Harris [8] はくりこみ群の計算から臨界温度の分布に関して次の結果を得た。

$$\begin{aligned} (\Delta T_c(L))^2 &= [T_c(L)^2] - [T_c(L)]^2 \\ &\propto \begin{cases} L^{-D} & (\text{純粋系の固定点}) \\ L^{-2/\nu} & (\text{ランダム固定点}) \end{cases} \end{aligned}$$

ここで角括弧はランダムサンプルに関する平均である．この結果を検証するために臨界温度の分布を計算した．通常のアプローチではそれぞれのランダムサンプルに対して臨界温度を評価するのは非常に困難であるが，PCC アルゴリズムではそれぞれのサンプルに依存する臨界温度に自動的に近づくので臨界温度の分布を簡単に計算することができる．図 6 はシステムサイズに対する臨界温度の分散のグラフである．図中の p はサイトを占めているスピンの濃度を表している．グラフの傾きから臨界温度の分散は L^{-2} に比例することがわかり，希釈イジングモデルの臨界現象が純粋系のユニバーサリティクラスに属していることがわかる．また Aharony と Harris はある物理量の熱平均値 X の分散に関して次の結果を得た．

$$R_X = \frac{[X^2] - [X]^2}{[X]^2} \propto \begin{cases} L^{(\alpha/\nu)_{\text{pure}}} & (\text{純粋系の固定点}) \\ w^* (= \text{const.} \neq 0) & (\text{ランダム固定点}) \end{cases}$$

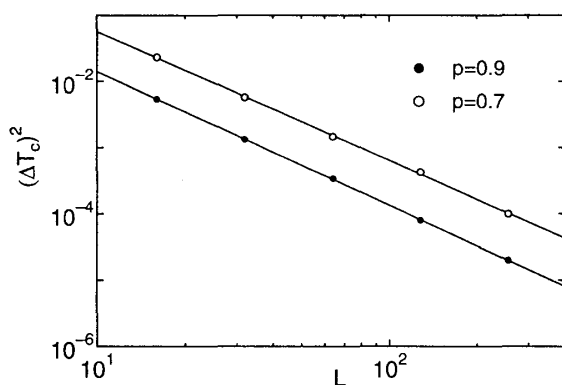


図 6：臨界温度の分散 $(\Delta T_c(L))^2$ のシステムサイズ L 依存性．

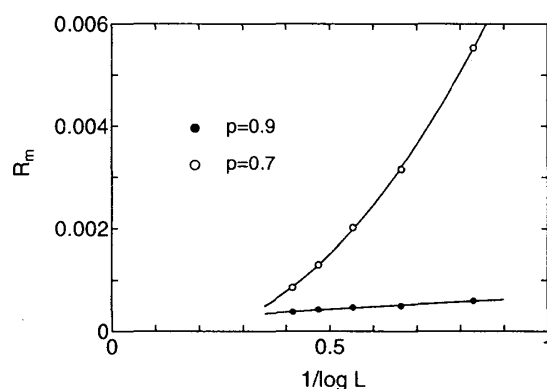


図 7：磁化の分散のシステムサイズ L 依存性．
 $p = 0.7$ のグラフが上に反っているのはパーコレーション固定点との cross over による．

図 7 はそれぞれのサンプルにおける $T_c(L)$ での磁化の分散のグラフである． $L \rightarrow \infty$ で $R_m = 0$ となるように見える．これはシステムサイズ無限大で臨界温度における磁化の値がサンプルに依らず self averaging であることを示している．さらに Aharony と Harris の結果から臨界現象は純粋系と同じ固定点に支配されていることを示している．図 8 に Binder パラメータのシステムサイズ依存性を示す．Binder パラメータは固定点でユニバーサルな値をとることが予想される．グラフから Binder パラメータはシステムサイズ無限大で希釈の度合いによらず pure Ising モデルの値に等しくなることがわかる．

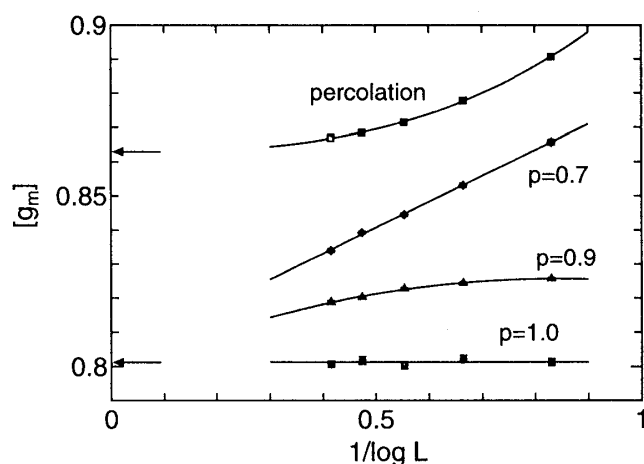


図8: $T = T_c(L)$ における Binder パラメータのシステムサイズ L 依存性. $p = 1.0$ は純粋系の Ising モデルである.

まとめ

PCC アルゴリズムの適用例として 3D q -state Potts モデルと 2D 希釈イジングモデルの解析を紹介した. 連続相転移の場合, PCC アルゴリズムは威力を発揮するが, 1 次相転移への適用にはまだ改良が必要である. これからの応用として, 3D 希釈イジングモデルがある. 2D のときと違い 3D イジングモデルは臨界現象がランダムネスによって影響を受けることが指摘されており, ランダム固定点によって記述される臨界現象を調べることは興味深い. PCC アルゴリズムを適用することができる量子系として, ループクラスターが系に巻き付く温度と相転移温度が一致する 2D 量子 XY モデルがあり, この研究は現在進行中である.

参考文献

- [1] Y. Tomita and Y. Okabe, to appear in Phys. Rev. Lett.
- [2] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982); **55**, 315(E) (1983).
- [3] V. Privman and M. E. Fisher, Phys. Rev. **B30**, 322 (1984).
- [4] A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Phys. Rev. **B44**, 5081 (1991).
- [5] K. Binder and D. W. Heerman, Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: An Introduction (Springer, Berlin (1988)).
- [6] M. Schmidt, Z. Phys. **B95**, 327 (1994).
- [7] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, J. Phys. **A30**, 8379 (1997).
- [8] A. Aharony and A. B. Harris, Phys. Rev. Lett. **77**, 3700 (1996).