

15. モンテカルロによるCAM

東大 理 伊藤伸泰 鈴木増雄

モンテカルロ法を使って、大きなクラスターの分子場近似を解くことを試みる。分子場近似として、Weiss型のもものとBethe型をモンテカルロ向きに改良したもの2種類を試みた。系はイジングモデルである。2次元の場合に、大きなクラスターの場合のCAMスケールリングを確認した。そして、帯磁率の臨界指数 γ を 1.79 ± 0.09 と評価できた。

§ 1 はじめに

大自由度系を研究する場合、モンテカルロ法は強力な手段である。厳密解が求まっていない場合に、大きな系の振舞を調べ得る信頼性の高い方法である。

モンテカルロ法を使う場合の長所としては、スピンの数が大きい系（例えば、イジングスピンが $\sim 10^7$ 個）でも、あらゆる物理量を計算できるということである。しかし、値に誤差をとまなうという短所がある。このため、系を調べる時には、自分の欲しい情報が統計誤差に埋れてしまわないように工夫しなくてはならない。

臨界現象の研究にCAM (1)を使って臨界点と臨界指数とを計算する場合に、従来は、主に解析的手法が使われてきた。ここでは、モンテカルロ法とCAMとを組合せる事により、両手法の長所を生かす方法を考えたい。

§ 2 分子場近似

2-1 カノニカル近似について

CAMが機能する近似列をカノニカル近似とよぶ。それでは、どういう近似を作ったら、カノニカル近似となるのであろうか。この問題をここで詳しく議論する事はしないが、以下の条件が必要であらう。

① 近似を上げていったときに、自由エネルギー F が正しいものに収束する。

これは、揺らぎを正しく取りこむ、という事を表わす。

② 近似の臨界点が真の臨界点に収束する。

これは、自己無どう着条件が正しい事を表わす。

経験的には、この2つの条件が満たされれば十分なようであるが、本当に十分条件であるかどうかについては、いまだ不明である。

2-2 計算のためのいくつかの補題

イジングモデルのクラスター分子場近似を考える。計算に必要な量はある物理量 A の平均値 $\langle A \rangle$ をハミルトニアンに 1 次式の形で入っているパラメータ（温度の逆数や有効場）で微分した量である。これらの計算を見通しよく行なうために役立つことを以下にまとめる。

<補題 1> イジングスピンからなる系を考え、そのハミルトニアンを H とする。 H は因子 $-\beta$ を含むとする。 H に含まれるパラメータ α を考え、 A を α によらない演算子とする。すると、

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \alpha} = \langle A D \rangle - \langle A \rangle \langle D \rangle \quad \text{が成立つ。ここで、} D = \frac{\partial H}{\partial \alpha} \quad \text{とした。}$$

<定義>
$$\begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} := (-1)^{n-1} \langle A_1 \rangle \cdots \langle A_n \rangle$$

<補題 2> p を n 次対称群の元とすると、定義より明らかに、

$$\begin{bmatrix} A_{p(1)} \\ \vdots \\ A_{p(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} \quad \text{がなりたつ。}$$

<補題 3> 補題 1 を使うと、 $A_1, \dots, A_n$ が α に依存しないならば、

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_1 \\ D A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} + \cdots + \begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_{n-1} \\ D A_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \\ D \end{bmatrix} \quad \text{が成立つ。}$$

この補題 3 を使う事により、 $\langle A \rangle$ の高階の微分を見通しよく計算する事が出来る。使い方の具体例は、以下に示す。

2-3 Weiss近似

クラスター Ω の境界のスピンに、遊んでいるボンドの数だけ分子場をかけ、 Ω の中心のスピン期待値と分子場とが等しくなるべしという自己無どう着条件を科す (2)。

$-\beta$ の因子を含んだハミルトニアンは、

$$H = K A + \beta h B + K h_{eff} C$$

$$A = \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ i, j \in \Omega}} S_i S_j, \quad B = \sum_{i \in \Omega} S_i, \quad C = \sum_{i \in \Omega} z_i S_i$$

である。 z_i は、境界のスピン S_i から出ている遊んでいるボンドの数を表わす。 K は、 J/kT である。自己無どう着条件は、

$$\langle S_0 \rangle = h_{eff}$$

である。 S_0 は、 Ω の中の一点で、中心付近を選ぶ。 $\langle S_0 \rangle$ を $h = h_{eff} = 0$ のまわりで展開する：

$$\langle S_0 \rangle = \sum a_{ij} h^i h_{eff}^j$$

$$a_{ij} = \frac{\partial^i \partial^j \langle S_0 \rangle}{\partial h^i \partial h_{eff}^j} \quad h = h_{eff} = 0$$

臨界点をきめる式は、 $a_{01} = 1$ となる。

また、自発磁化 m 、帯磁率 χ は、

$$m = \sqrt{\frac{1 - a_{01}}{a_{03}}} \quad \text{および} \quad \chi = \frac{a_{10}}{1 - a_{01}}$$

となる。よって、CAM係数は、

$$m = \sqrt{\frac{b}{a_{03}}} \quad \text{および} \quad \chi = \frac{a_{10}}{b} \quad \text{ただし} \quad b = - \left. \frac{\partial a_{01}}{\partial K} \right|_{K=K_c}$$

これらを計算するために、2-2の補題3を使う。

この場合は、

$$\frac{\partial H}{\partial h_{eff}} = KC \quad \text{および} \quad \frac{\partial H}{\partial h} = \beta B$$

であるから、例えば、

$$a_{01} = \left. \frac{\partial \langle S_0 \rangle}{\partial h_{eff}} \right|_{h=h_{eff}=0} = \left\{ [S_0 KC] + \left[\begin{smallmatrix} S_0 \\ KC \end{smallmatrix} \right] \right\}_{h=h_{eff}=0}$$

$$= K \langle S_0 C \rangle \quad (\langle C \rangle_{h=h_{eff}=0} = 0 \text{より})$$

$$a_{03} = \left. \frac{\partial^3 \langle S_0 \rangle}{\partial h_{eff}^3} \right|_{h=h_{eff}=0} = K \frac{\partial}{\partial h_{eff}} \left\{ [S_0 C] + \left[\begin{smallmatrix} S_0 \\ C \end{smallmatrix} \right] \right\}_{h=h_{eff}=0}$$

$$= (\text{微分を繰返す。}) = K^3 \{ \langle S_0 C^3 \rangle - 3 \langle S_0 C \rangle \langle C^3 \rangle \}$$

同様に、容易に

$$a_{10} = \beta \langle S_0 B \rangle, \quad b = \langle S_0 C \rangle + K \{ \langle S_0 C A \rangle - \langle S_0 C \rangle \langle A \rangle \}$$

と計算できる。

2-4 変形 Bethe 近似

Bethe 近似は、境界の各スピンにかける分子場を区別し、各スピンが中心のスピンと等しくなるように自己無どう着条件を課す。しかし、この方法ではクラスターが大きくなると必要な相関関数の数が非常に多くなる。また、モンテカルロシミュレーションの結果得られる誤差付きのデータをつかうと、結果の誤差が大きくなる事も予想される。このため、Bethe 近似の良さを生かしてかつ計算の容易な近似法が望ましい。そのために、以下の様な変形 Bethe 近似を導入した。この方法は、Weiss 近似よりも近似が良いことがわかった。超有効場近似 (3) による計算にも応用できる。

クラスター Ω の境界のスピンに、遊んでいるボンドの数だけ分子場をかけ、 Ω の中心のスピン期待値と境界のスピン期待値の平均値とが等しくなるべしという自己無どう着条件を科す。

$-\beta$ の因子を含んだハミルトニアンは、

$$H = K A + \beta h B + K h_{eff} C$$

である。これは、2-3 と同じである。さらに、

$$D = \sum_{i \in \partial \Omega} S_i$$

を導入する。自己無どう着条件は、

$$\langle S_0 \rangle = \frac{1}{N_b} \langle D \rangle, \quad N_b = \# \partial \Omega \quad (\partial \Omega \text{ のスピンの数})$$

である。ここで、

$$\frac{1}{N_b} \langle D \rangle = \sum_{i+j} b_{ij} h^i h_{eff}^j$$

$$b_{ij} = \frac{1}{N_b} \frac{\partial^{i+j} \langle D \rangle}{\partial h^i \partial h_{eff}^j} \bigg|_{h=h_{eff}=0}$$

と展開する。さらに、 $c_{ij} = a_{ij} - b_{ij}$ とする。

臨界点をきめる式は、 $c_{01} = 0$ となる。

また、自発磁化 m 、帯磁率 χ は、

$$m = a_{01} \sqrt{-\frac{c_{01}}{c_{03}}} \quad \text{および} \quad \chi = a_{10} - \frac{a_{01} c_{10}}{c_{01}}$$

となる。よって、CAM 係数は、

$$m = a_{01} \sqrt{-\frac{\omega}{c_{03}}} \quad \text{および} \quad \chi = -\frac{a_{10} c_{10}}{\omega} \quad \text{ただし} \quad \omega = -\frac{\partial c_{01}}{\partial K} \bigg|_{K=K_c}$$

b_{ij} は、 a_{ij} の S_0 を D/N_b で置き換えれば得られる。

§3 モンテカルロ

モンテカルロ・アルゴリズムの詳細はここでは省略する (4)。乱数には、トーズワース (250, 103) 列を 20bit 並列発生させて用いた。乱数の検定のために、2 次元イジングモデルの有限系のエネルギーを計算し、解析的に求めたものと比較した。そして、今回のシミュレーションの精度では十分であろうと予想される結果を得た (5)。

§ 4 結果

2次元および3次元の場合について計算した。2次元の結果を以下に示す。3次元の場合は、いまだ十分な精度で計算できていないので、ここでは省略する。正方格子を考え、スピン S_0 を中心として距離が R 以内の格子点からなるクラスターを使った。

臨界点の付近32点で計算し、自己無どう着方程式とCAM係数との温度依存性を最小二乗法で推定した。推定した曲線を使って、臨界点とCAM係数とを求めた。Weiss近似の結果を表1に示す。これらの結果を、より小さいクラスターの場合に解析的に計算した結果(2)とともに図1にプロットした。この図より、両者が互いに一致しており、どちらの計算も正しい事がわかる。Weiss近似の結果から、帯磁率の臨界指数 γ を評価すると表2のようになる。いずれも $\gamma=7/4$ と矛盾しない評価が得られている。

変形Bethe近似の結果を表3に示す。変形Bethe近似の場合は、直径15から31までの結果から、 $\gamma=1.79\pm0.09$ と評価された。

γ の評価には真の臨界点の値を使った。

§ 5 まとめ

モンテカルロシミュレーションにより K_c は精度よく評価でき、また κ もまづまづの精度で求まることがわかった。一方、 m を精度良く決めることは難しい。しかし、相当のステップを費やしているので、分子場近似とCAMによる解析が最適かどうかは疑問である。分子場近似の場合には、中心と表面との相関関数しか使わないため、収束が悪いためである。現在、収束の良い近似法について研究中である。

我々が導入した変形Bethe近似は、Weiss近似よりも良い近似となっている。しかも、従来のBethe近似と比べて計算が容易である。SEFTはBethe型の近似になっているが、この変形Bethe近似を応用して有効な近似を構成する事ができるであろう。

文献

- (1) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 55 (1986) p. 4205.
- (2) M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 56 (1987) p. 3113.
- (3) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 57 (1988) p. 2310.
- (4) N. Ito and Y. Kanada, Supercomputer vol. 5 No. 3 (1988) p. 31.
- (5) N. Ito and Y. Kanada, in preparation.

R	K_c	$\bar{m}$	$\bar{\chi}$	MCS
3	0.292763	1.3973	0.094229	
5	0.32320 ± 0.00021	1.4309 ± 0.0061	0.13025 ± 0.00012	$(1 \times 10^4, 1.6 \times 10^6)$
11	0.37546 ± 0.00026	1.519 ± 0.028	0.2479 ± 0.0012	$(1 \times 10^4, 8 \times 10^5)$
15	0.38742 ± 0.00019	1.602 ± 0.042	0.2982 ± 0.0014	$(5 \times 10^4, 2.1 \times 10^6)$
21	0.40034 ± 0.00014	1.686 ± 0.054	0.3820 ± 0.0027	$(5 \times 10^4, 3 \times 10^6)$
31	0.41117 ± 0.00012	1.760 ± 0.087	0.4792 ± 0.0070	$(1 \times 10^5, 3 \times 10^6)$
41	0.4170 ± 0.0002	1.64 ± 0.10	0.565 ± 0.013	$(1 \times 10^5, 3 \times 10^6)$
51	0.4211 ± 0.0002	1.79 ± 0.12	0.646 ± 0.015	$(1 \times 10^5, 3.6 \times 10^6)$
61	0.4235 ± 0.0002	1.74 ± 0.17	0.718 ± 0.017	$(1 \times 10^5, 3.6 \times 10^6)$

表1 正方格子イジングモデルのWeiss近似の結果。MCSは、モンテカルロのステップ数を表わす。(N, M)は、初期条件からNステップを空回しして、続くMステップを計測に使った事を表わす。

variable	used cluster	γ
K	21~61	1.785 ± 0.024
K	31~61	1.713 ± 0.061
T	21~61	1.730 ± 0.023
$\tanh K$	21~61	1.71 ± 0.06

表2 Weiss近似の結果から評価した臨界指数 γ の値。 $K = J / k T$ である。

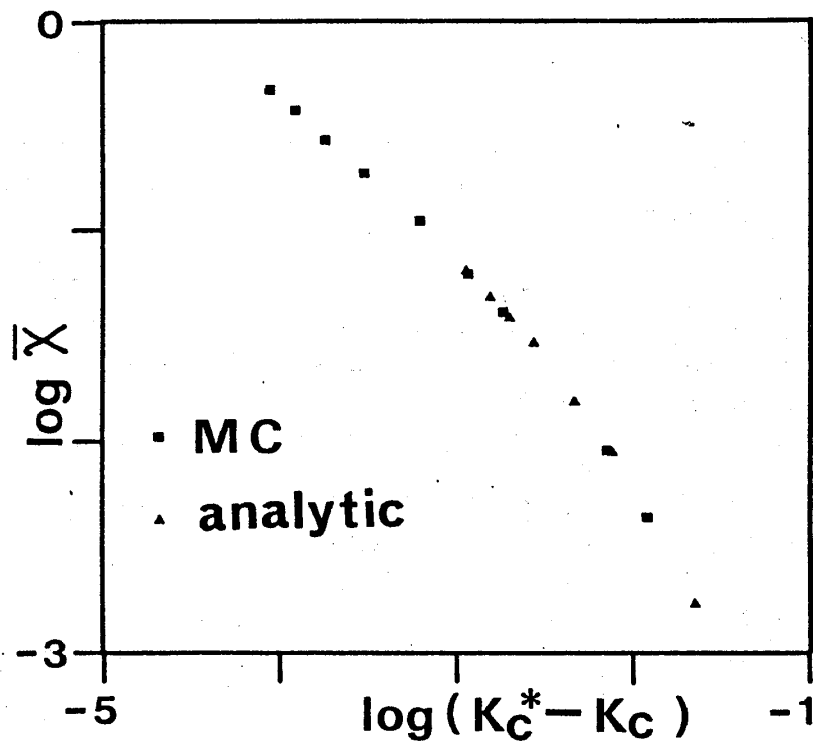


図1 Weiss近似による x のプロット。
解析的な結果(2)も示す。

R	K_c	$\bar{m}$	$\bar{x}$
3	0.34657	1.63280	0.173287
5	0.37102 ± 0.00082	1.798 ± 0.014	0.24164 ± 0.00078
11	0.40705 ± 0.00037	2.228 ± 0.048	0.4671 ± 0.0034
15	0.41227 ± 0.00035	2.390 ± 0.038	0.5694 ± 0.0050
21	0.41974 ± 0.00026	2.78 ± 0.15	0.7252 ± 0.0089
31	0.42512 ± 0.00022	3.057 ± 0.075	0.919 ± 0.012
41	0.4286 ± 0.0001	3.25 ± 0.12	
51	0.4310 ± 0.0001	3.28 ± 0.96	
61	0.4317 ± 0.0001	3.79 ± 0.14	

表3 正方格子イジングモデルの変形
Bethe近似の結果。