

課題名 (タイトル) :

並列化量子モンテカルロ法の開発と不均一格子上ボース粒子系における新奇な臨界現象の探索

利用者氏名 : 正木 晶子

所属 : 柚木計算物性物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

(1) 並列化量子モンテカルロ法の開発

ファインマンの経路積分表示に基づく世界線量子モンテカルロ (QMC) 法は量子格子模型に対して有限温度で比較的大きなサイズの系をバイアスなしに統計誤差の範囲内で厳密に解ける数値計算手法であり、量子磁性体や格子ボース模型に対して有効な強力なツールである。世界線の配置更新のためのアルゴリズムの中でもワームアルゴリズムは大域的な更新ができ、汎用性の高いアルゴリズムである。近年我々によって空間分割できる非自明なワームアルゴリズム (PMWA) が発表された。PMWA は図 1 にあるように世界線配置を更新するためのワームを複数挿入する。ワームの物理的意味はスピン系の言葉で言うと横磁場 (世界線の不連続点に対応するもの) であり、PMWA では解くべき模型に対し人為的に横磁場を付加し、計算終了後に横磁場 0 への外挿を行う。外挿法則は相の状態によって異なるため、解くべき模型の横磁場に対する応答を知ることが不可欠となる。

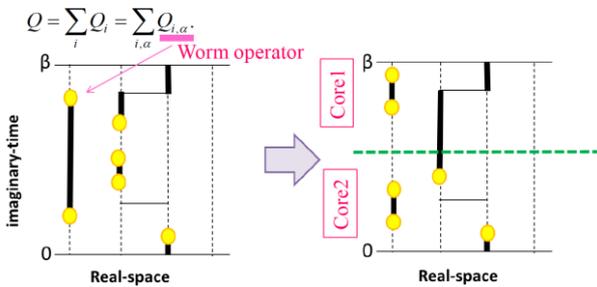


図 1 : 世界線配位空間の空間分割の概念図。世界線 (黒太線) を更新する因子となるワーム (黄色丸) が複数存在する空間を分割し、各プロセッサに割り当てる。

本プロジェクトではプロジェクト番号 G15248 と

関連して、このアルゴリズムの外挿過程を無くすための、ワームの重みに関する拡張アンサンブルを開発することをプロジェクトの目標とした。また、githubu 上でのコードの公開のための整備も目的の一つとした。

(2) 不均一ボース粒子系の臨界現象

PMWA を用いて不均一格子上のボース粒子模型の臨界現象を明らかにすることを 2 つ目の目標とした。電子系では無限小の不均一性により誘発されるアンダーソン局在がよく知られているが、相互作用ボース粒子系では、不均一性を強くしていくと超流動-ボースグラス転移が誘発されることが知られている。ボースグラス相とは格子の不均一性によって粒子が局在化した圧縮性の相である。QMC 計算は臨界現象を調べるのに適した数値計算手法であるが、超流動-ボースグラス転移では不均一格子を生成する際の乱数の偏りを無くすために多くの計算資源を費やす必要があることから、系の大きさが本質的となる相転移現象においても十分に大きなサイズの数値計算はされてこなかった。そのため、未だに誰も納得いく臨界指数は求められていない。我々は超流動-ボースグラス転移の動的臨界指数を大規模計算により明らかにすることを具体的な目的とした。実験でも観測可能な物理量にスポットを計算対象とする。

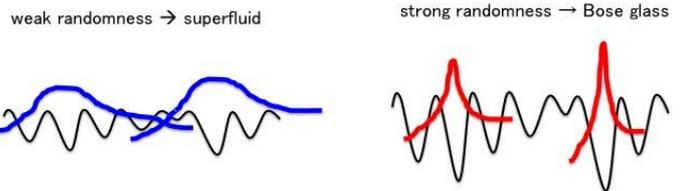


図 2 : 超流動とボースグラスの概念図

2. 具体的な利用内容、計算方法

(1) 並列化量子モンテカルロ法の開発

本年度はワームの横磁場に対する応答を明ら

かにするため、基本的な例として 2 重占有を禁止したハードコアボース粒子系

$$\mathcal{H}_{BH} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + V \sum_i n_i n_j - \sum_i \mu_i n_i,$$

を取り上げ、この系の横磁場入り模型

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{BH} - \Gamma \sum_i (b_i^\dagger + b_i) \quad (1)$$

の、化学ポテンシャル (μ) -横磁場 (Γ) -ホッピング (t) を軸にとった 3 次元相図を求めた。ここでは均一な格子を考える。この計算は RICC と HOKUSAI を用いて、課題 G15248 でも行った。相境界は $L=32\sim 256$ までサイズを変えた結果に対し有限サイズスケールリングを行い決定した。各軸パラメータの値が 0 になる面はより細かく点を取った。

(2) 不均一ボース粒子系の臨界現象

ボースグラス相転移の臨界指数を求めめるために、本年度はその足がかりとして、ボースグラス相の深い部分でのシミュレーションのデモンストレーションを HOKUSAI で行った。

ボースグラス相の特徴的振る舞いを捉えるため、横磁場感受率のシステムサイズ L 依存性を調べた。通常は自己平均性により L が大きくなるにつれてランダムポテンシャル (不均一格子) に対する測定量の分布幅が平均値を中心に狭くなっていくところ、ボースグラスの場合は自己平均性が破綻し、逆に広がっていく振る舞いが見られると期待できる。この特徴を捉えるため、いくつか格子点数を変えて計算する必要があった。先行研究では格子点数 32×32 まで計算されており、当初はその再現のための計算と、4 倍の 64×64 で計算する予定であったが、テスト計算が進むにつれ、 128×128 の計算も必要となってきた。この計算では、逆温度を 16 分割、また、 128×128 格子点を 4×4 分割した。さらに不均一格子平均化のために一度に 20 もしくは 10 並列行った。このため、一本の計算で行う並列は $16 \times 4 \times 4 \times 20 = 160$ ノード並列もしくは 80 並列となった。十分低温であることを確認するため逆温度を $\beta = 64 \sim 1024$ の間でシミュレート・アニーリングにより変化させた。

3. 結果

(1) 並列化量子モンテカルロ法の開発

式 (1) の 3 次元基底状態相図を明らかにした。 t 、 μ 、 Γ がそれぞれ 0 になる面は並列化により大きなサイズまで計算できたことで、非常に高い精度で量子相転移点を決定することができた。さらに各物理量の横磁場に対する応答がシステムサイズの逆数よりも小さいところで全て 2 次曲線となっていることを示すことができ、外挿する際の参考となる結果を与えることができた。また、コードの入出力や外挿ツールなどを整備し、github 上でコードを公開している。

(<https://github.com/qmc/dsqss>)

(2) 不均一ボース粒子系の臨界現象

$L = 16, 32, 64, 96$ で横磁場感受率の分布幅を測定した。その結果、まず、低温になるにつれてノーマル相からボースグラス相に入ること、分布の幅が広がる様子を確認することができた。不均一ボース粒子系では動的臨界指数が通常よりも大きく、相転移を調べる際にはシステムサイズの約 2 乗に比例して温度を下げていく必要があるため、非常に大きな配位空間のサイズとなる。 $L = 128$ は今期の間での計算の収束は実現しなかったが、現在引き続き計算中である。先行研究ではこれまで $L = 32$ までのサイズしか計算されていなかった。しかし、PMWA によりさらに大きなサイズを計算できるようになったこと自体、系の大きさが本質的となる相転移現象に関する計算においては非常に大きな意義があると言える。

4. まとめ

PMWA の開発とその応用として不均一格子上のハードコアボース粒子系へ適用した。

基本的な模型の横磁場に対する応答を調べ、相図を作成した。これにより PMWA での外挿についてより理解が深まり、拡張アンサンブルの開発を前進させる足がかりとなった。均一格子上のハードコアボース粒子系の相図は $S=1/2$ スピン系へマップできるため、スピン系の理解の際にもそのまま用いることができる。

また、不均一ボース粒子系ではこれまで計算されてこなかったサイズ・温度の計算が実現できた。温度を下げるに従い、ボースグラス相に入り感受率の分布幅が広がる様子を確認することができた。

5. 今後の計画・展望

PMWA によってこれまでは計算できなかったサイズ不規則格子系を計算できるようになった。QMC 法では世界線の配位空間をデータファイルに保存し、そこから再度計算を再開することができる。またこの際に不規則格子の強さのパラメータを少しずつ変化させていけば (アニーリング)、超流動-ボースグラスの相転移点に近づけることが可能である。本プロジェクトの目標は動的臨界指数を正確に求めることなので、次年度はその目標に向けて計算を再開する予定である。また PMWA についても引き続き拡張アンサンブルの開発を進めていく予定である。

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

投稿準備中

【国際会議、学会などでの口頭発表】

正木 晶子 "DSQSS 講習会", CCMS ハンズオン, 東大物性研 (柏), 12月 (2015年)