

課題名 (タイトル) :

並列化量子モンテカルロ法の開発とリング状超流動の臨界現象

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

世界線量子モンテカルロ法の大規模並列可能なワームアルゴリズム (PMWA) の開発を目的とする。PMWA では解くべきモデルハミルトニアンにワームのソース場を人為的に付加することで複数のワームを導入する。全ワームの数はソース場によって調節できる。ワームは世界線の不連続点に対応しており、ワームが世界線の配位空間を動き回ることによって世界線配置が更新される。PMWA では配位空間のドメイン分割を施し、各プロセッサにドメインを割り当てることで並列化を実現するが、複数のワームのおかげでドメイン分割しても各ドメインが更新される仕組みになっている。ただし元の解くべきハミルトニアンでの物理量を知るには、ソース場を 0 に外挿する必要がある。この外挿則はソース場の大きさによっては相の状態によって変化することもあり、ソース場の応答を理解することが不可欠となる。本プロジェクトでは PMWA の外挿プロセスを省略したアルゴリズムの開発を目的とした。

外挿プロセスをなくすにはフラットヒストグラムによる拡張アンサンブルが候補として考えられる。具体的には実際のハミルトニアンとは異なる計算しやすいハミルトニアンを計算する代わりに人為的に重みを操作し、物理量の統計平均をとる際にときたいハミルトニアンとの重みの比を考慮することを行う。

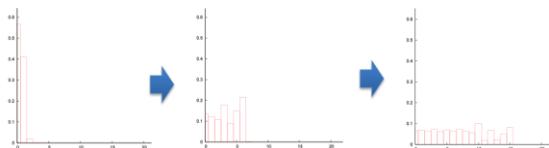


図 1 : フラットヒストグラムの例

本プロジェクトは一般課題 G15037 と関連している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ソース場を理解するために、基本的なモデルであるハードコアボース粒子モデルを取り上げ、ハードコアボース粒子が持つ 3 つのパラメータのうち相互作用項を単位に取り、ホッピング及び化学ポテンシャルを、またワームのソース場の 3 つを軸に基底状態相図を調べた。本プロジェクトでは $L = 16 \sim 64$ の比較的小さなサイズで、帯磁率などを測定し、有限サイズスケールングを行った。また、世界線の不連続点であるワームが相関関数に及ぼす影響も調べるために、2 点グリーン関数も測定した。

3. 結果

ホッピングが 0 になる点は横磁場イジング模型に立て磁場も入ったものと等価になるが、本プロジェクトでは特にこの面を念入りに計算し、相転移点を高い精度で見積もることができた。また、グリーン関数を調べることで、相関関数が平均ワーム間距離を超えたところで鈍ることがわかった。

4. まとめ

ソース場の応答を詳しく調べることで、拡張アンサンブルのための準備計算をすることができた。PMWA でグリーン関数を計算する際の問題点も明らかになった。

5. 今後の計画・展望

拡張アンサンブルにより外挿をしなくてもよいアルゴリズムの開発を引き続き進める。これにより、グリーン関数の測定時の問題も解決できると見込まれる。