

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
新奇的な臨界現象の探索

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

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法 (以下 QMC) のワームアルゴリズムは磁場中での効率低下の問題などがあるループアルゴリズムなどと比べ汎用性が高く、格子ボース粒子モデルや量子スピンモデルなどの量子格子モデルの厳密な数値解析に広く用いられている。特に、解析的には困難な相転移の臨界現象の研究のための非常に強力なツールとなる。

相転移点近傍 (= 臨界領域) ではその相転移を特徴付ける相関長が発達するため、正確な物理現象を調べるためには相関長よりも大きな系の計算が必要となる。1つのコアに乗り切らないような大きさの系の計算には一般的な手段として系の並列化が解決策として考えられる。しかしワームアルゴリズムはアルゴリズムの性質上並列化が非自明であり、アルゴリズムが考案された時から15年以上並列化は成し遂げられてこなかった。しかし我々の先行研究により、並列化マルチワームアルゴリズム (Parallelized Multi-Worm Algorithm、以下 PMWA) が考案され、臨界領域から離れた場所でのベンチマーク計算で従来のアルゴリズム大きく上回るサイズの約 $1万 \times 1万$ 格子点の計算を成功させた。しかし、並列化のために導入された「ワーム」と呼ばれる世界線の不連続点が相関長を断ち切ることが判明し、臨界領域への適用はさらなる課題として残されていた。

本研究では、PMWA をランダム場が入った格子やフラストレートした格子上のボース粒子系へ適用し、未解明な臨界現象を理論的に明らかにすることを最終目的とし、本年度は PMWA のための臨界現象のスケーリング則を考案し、実際に大規模な格子ボース粒子系へ適用することを目標とした。

また、関連するプロジェクト G16029 において、2次元正方格子上 $S=1/2$ 量子スピンモデルの励起現象明らかにすることを目的とした課題にも取り組んだ。交替磁場中のスピン相関を実験と定量的に比較するための計算で PMWA を用いた。このモデルは二重占有を禁止したボース粒子系と等価であり、さらに PMWA で導入するワームは交替横磁場に対応するためこの計算も行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

PMWA を用いて二重占有を禁止したボース粒子系の計算を行った。具体的には、臨界現象を計算できる手法開発においてはベンチマークとして、3次元立法格子系の連続転移である超流動転移及び固体転移の計算を行った。相転移では大きな系の計算のデモンストレーションのために非自明並列化を適用した。

また、2次元正方格子上 $S=1/2$ 量子スピンモデルの励起現象の研究では PMWA で虚時間スピン相関関数の計算を実行した。この課題では虚時間相関にバイアスのない数値解析接続を施すことで励起スペクトルを求めるが、そのためにはできる限り QMC 計算の統計誤差を小さくすることが本質的になる。よってこの課題ではシングルコアに載るサイズの系に対し自明な並列化 (乱数並列) 計算を大規模に実行した。様々な波数や温度で計算した。

3. 結果

臨界現象を計算できる PMWA の開発においては、まず準備としてくりこみ群解析から予想される有限サイズスケーリング法を改良し、ワームのソース場をスケーリング場として取り入れられる式を考案した。ワームのソース場が有意に働く相転移 (例として超流動転移) と有意ではない場合

(固体転移)の両方のケースにこの方法を適用した。どちらの場合もシングルプロセッサでは困難なサイズの系に対して PMWA で計算を行い、共同研究者が開発したベイジアン推定を利用したスケーリング解析ツールを用いることで、精密な相転移温度の見積もりができた。(論文投稿準備中)

また 2 次元正方格子 $S=1/2$ 量子スピン模型の励起現象の研究では、中性子散乱実験により得られているスペクトルと定量的に非常によく再現することができた。さらに実験の分解能を超える精度でスペクトルを調べることができた。この系はこれまでスピン波理論によって記述される励起が本質的であると考えられてきたが、高エネルギー側の特定の波数において、実験で指摘されているような従来の理論では説明できない励起の性質をさらに支持する結果を、高い精度で初めて数値的に得ることができた。(論文投稿準備中)

4. まとめ

QMC 法の大規模並列可能なワームアルゴリズムである PMWA を臨界領域で適用できるための開発を行った。考案した有限サイズスケーリング法をワームのソース場が有意となる超流動転移と有意でない固体転移の臨界現象に対して適用し、転移温度を見積もった。従来よりも大きなサイズの計算ができるようになったため、従来のワームアルゴリズムよりも高い精度で転移温度を見積もれるようになった。

また 2 次元正方格子 $S=1/2$ 量子スピン模型の励起現象調べた。大規模計算により高い精度の虚時間相関を PMWA で計算することにより、中性子散乱実験を定量的に再現できた。さらに、これまでの数値解析では不可能であったバイアスのない手法を用いることで、高い精度で従来の理論で説明できない励起現象の存在を示唆する結果を得られた。

5. 今後の計画・展望

今年度までの研究において PMWA で臨界現象の計算ができるようになった。これをこれまで計算を進めてきたランダム磁場格子での相転移や、近年注目されているトポロジカル相が期待できる

格子でのボース粒子模型へ実際に適用していく。

量子スピン模型の励起現象ではより量子揺らぎが強い格子系やスピンの大きい系へ適用し、系統的に調べることで、非自明な励起の存在をより詳しく調べていく予定である。

平成 28 年度 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

- ① 正木晶子、川島直輝：“並列化量子モンテカルロ法の開発と格子ボース系への応用”、物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会「計算物質科学の今と未来」、柏、4月(2016)（招待講演）。
- ② 正木晶子、川島直輝：“並列化量子モンテカルロ法と熱力学極限／ゼロ磁場極限への外挿手法”、日本物理学会秋季大会、金沢、9月(2016).
- ③ 正木晶子、白川知功、A. S. Mishchenko、柚木清司：“Numerical Study of Excitation Dynamics of $S=1/2$ Square Lattice Antiferromagnetic Heisenberg Models”、ポスト「京」重点課題 (7)サブ課題 G 第 5 回連続研究会「低次元量子相のスペクトロスコーピー ～計算と実験の協奏～」、葛飾、2月(2017)（招待講演）。
- ④ 正木晶子、原田健自、川島直輝：“並列化量子モンテカルロ法による relevant field を含む有限サイズスケーリング”、日本物理学会第 72 回年次大会、大阪、3月(2017).