

第2章

逐次らせん法の適用

第2章 逐次らせん法の適用

2.1 転送行列と固有値

逐次らせん法を次式のハミルトニアンで定義される外部磁場がない場合の q 状態ポッツ模型に適用する.

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \quad (1.2)$$

ただし, $\sigma_i = 0, 1, 2, \dots, q-1$. [28]

転送行列を作るために, KramersとWannierが行なったのと同様に逐次らせん法に従って, ボルツマン因子を考慮すると, 2次元ポッツ模型に対して次式を得る. [2]

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_0=0,1,\dots,q-1} \exp[2K\{\delta(\sigma_l, \sigma_{l-1}) + \delta(\sigma_l, \sigma_0)\}] \mathbf{A}(\sigma_{l-1}, \dots, \sigma_0) \\ = \Lambda \mathbf{A}(\sigma_l, \dots, \sigma_1) \end{aligned} \quad (2.1)$$

また, 3次元ポッツ模型に対して次式を得る.

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_0=0,1,\dots,q-1} \exp[2K\{\delta(\sigma_{lm}, \sigma_{lm-1}) + \delta(\sigma_{lm}, \sigma_{l(m-1)}) + \delta(\sigma_{lm}, \sigma_0)\}] \mathbf{A}(\sigma_{lm-1}, \dots, \sigma_0) \\ = \Lambda \mathbf{A}(\sigma_{lm}, \dots, \sigma_1) \end{aligned} \quad (2.2)$$

ただし, $\mathbf{A}(\dots)$ はスピン配置 $\dots$ に対する確率である. [15] 前節で示した逐次らせん法の周期的境界条件

$$\text{2次元格子: } \sigma_{lm+1} = \sigma_1, \quad (m \rightarrow \infty)$$

$$\text{3次元格子: } \sigma_{lmn+1} = \sigma_1, \quad (n \rightarrow \infty)$$

を考慮して, (2.1)式, (2.2)式から固有値方程式を求めると,

$$\mathbf{M}(K) \mathbf{A}(K) = \Lambda(K) \mathbf{A}(K) \quad (1.14)$$

となる．但し， $\mathbf{M}(K)$ は転送行列， $\mathbf{A}(K)$ は固有ベクトル， $\Lambda(K)$ は固有値である．このとき，転送行列は2次元 $q^l \times q^l$ ，3次元 $q^{lm} \times q^{lm}$ のスパース行列となる．また， q が偶数のとき，行列のサイズをそれぞれ $q^{l-1} \times q^{l-1}$ ， $q^{lm-1} \times q^{lm-1}$ に縮小することが可能である．[32] 任意のスピン状態数に対する2次元と3次元の転送行列を(2.3)式，(2.4)式に具体的に示す．

$$\mathbf{M}(K) =$$

$$\begin{bmatrix} \begin{matrix} x^2 & x & \cdots & x & \cdots & x^2 & x & \cdots & x \\ & & & & & & & & \end{matrix} & \begin{matrix} x & 1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & x & 1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\ & & & & & & & & & & \end{matrix} & \cdots & \begin{matrix} x & 1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & x & 1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\ & & & & & & & & & & \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 & x & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 & x & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\ & & & & & & & & & & \end{matrix} & \begin{matrix} x & x^2 & x & \cdots & x & \cdots & x & x^2 & x & \cdots & x & \cdots \\ & & & & & & & & & & \end{matrix} & \cdots & \begin{matrix} 1 & x & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 & x & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\ & & & & & & & & & & \end{matrix} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \begin{matrix} 1 & \cdots & 1 & x & \cdots & 1 & \cdots & 1 & x & \cdots & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 & x & \cdots \\ & & & & & & & & & & & & & & & \end{matrix} & \begin{matrix} 1 & \cdots & 1 & x & \cdots & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 & x & \cdots & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 & x & \cdots \\ & & & & & & & & & & & & & & & & & \end{matrix} & \cdots & \begin{matrix} x & \cdots & x & x^2 & \cdots & x & \cdots & x & x^2 & \cdots & x & \cdots & x & x^2 & \cdots \\ & & & & & & & & & & & & & & \end{matrix} \end{bmatrix}$$

(2.3)

ただし， $x = e^{2K}$ ．

$$\mathbf{M}(K) = \begin{bmatrix}
\begin{array}{c} \mathbf{A}_1 \quad \mathbf{B}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{B}_1 \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{B}_1 \quad \mathbf{C}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{C}_1 \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{B}_1 \quad \mathbf{C}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{C}_1 \end{array} \\
\begin{array}{c} \mathbf{C}_2 \quad \mathbf{B}_2 \quad \mathbf{C}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{C}_2 \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{B}_2 \quad \mathbf{A}_2 \quad \mathbf{B}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{B}_2 \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{C}_2 \quad \mathbf{B}_2 \quad \mathbf{C}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{C}_2 \end{array} \\
\begin{array}{c} \mathbf{C}_q \quad \cdots \quad \mathbf{C}_q \quad \mathbf{B}_q \quad \mathbf{C}_q \quad \cdots \quad \mathbf{C}_q \quad \mathbf{B}_q \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{C}_q \quad \mathbf{B}_q \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{B}_q \quad \cdots \quad \mathbf{B}_q \quad \mathbf{A}_q \end{array}
\end{bmatrix} \quad (2.4)$$

ただし $\mathbf{A}_i$, $\mathbf{B}_i$, $\mathbf{C}_i$ は, 次式で定義されるサブマトリクスである.

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} x^3 & x^2 & \cdots & x^2 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & x^3 & x^2 & \cdots & x^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} x^2 & x^3 & x^2 & \cdots & x^2 & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & x^2 & x^3 & x^2 & \cdots & x^2 \end{bmatrix}$$

$\vdots$

$$\mathbf{A}_q = \begin{bmatrix} x^2 & \cdots & x^2 & x^3 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & x^2 & \cdots & x^2 & x^3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} x^2 & x & \cdots & x & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & x^2 & x & \cdots & x \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} x & x^2 & x & \cdots & x & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & x & x^2 & x & \cdots & x \end{bmatrix}$$

$\vdots$

$$\mathbf{B}_q = \begin{bmatrix} x & \cdots & x & x^2 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & x & \cdots & x & x^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C}_1 = \begin{bmatrix} x & 1 & \cdots & 1 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & x & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C}_2 = \begin{bmatrix} 1 & x & 1 & \cdots & 1 & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & 1 & x & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$\vdots$

$$\mathbf{C}_q = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 & x & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & \cdots & 1 & x \end{bmatrix}$$

ただし $x = e^{2K}$.

また、転送行列の最大固有値と第2固有値から、次式によって相関距離が定義される。[11]

$$\xi(K) = \left\{ \ln \frac{\Lambda_0(K)}{\Lambda_1(K)} \right\}^{-1} \quad (2.5)$$

ここで、 $\Lambda_0(K)$ は最大固有値、 $\Lambda_1(K)$ は第2固有値である。ただし、固有値が q 重縮退しているので、第2固有値すなわち、第2番目の最大固有値は $q+1$ 番目である。

2.2. 計算の範囲

転送行列の最大固有値を反復法により、倍精度計算を行ない求めた。このとき、格子サイズが大きな場合には、東京大学大型計算機センターのベクトルスーパーコンピュータ HITAC S-3800/480 を使用した。その他の小規模な計算には、中部大学の大型汎用コンピュータFACOM-M1600 と ワークステーションを用いた。S-3800/480のユーザーが使用可能な記憶容量は1.92GByte、計算速度は約32GFLOPSである。

直接計算可能な格子サイズとスピン状態数との関係は、コンピュータの性能から今のところ、2次元 ($l \times \infty$) 格子および3次元 ($l \times m \times \infty$) 格子に対して

$$q = 2 : l, \quad lm \leq 27, \quad q = 3 : l, \quad lm \leq 16, \quad q = 4 : l, \quad lm \leq 13,$$

$$q = 5 : l \leq 11, \quad lm \leq 10, \quad q = 6 : l, \quad lm \leq 10, \quad q = 7 : l, \quad lm \leq 9.$$

に限られる。本研究では、これら全ての計算を行なった。ただし、1996年3月から東京大学に新しいコンピュータが導入されるので、計算範囲は現在広がっている。

また、相関距離を算出する際のスピン状態数と計算可能な格子サイズの関係は、2次

元格子の場合,

$$q=2:l \leq 11, \quad lm \leq 10 \quad , \quad q=3:l, \quad lm \leq 6 \quad , \quad q=4:l \leq 5, \quad lm \leq 4 \quad ,$$

$$q=5:l, \quad lm \leq 4 \quad , \quad q=6:l, \quad lm \leq 4.$$

である. ここで, 第2固有値は, SSL-IIのハウスホルダ法(直行相似変換)と2段QR法を組み合わせた倍精度計算によって求めた.

2.3 外挿法

3次元の直接計算が不可能な格子サイズの物理量を求める場合, 以下に示す外挿法を用いる. [15,21,22]

あるスピン状態数 q に対して格子サイズ $lm \leq 16$ まで計算可能な場合を例に説明する. 直接計算により求められる結果を $x_{l,m}$, 未知の値を $y_{l,m}$ とすると以下の表となる.

$m \backslash l$	2	3	4	5
2	$x_{2,2}$	$x_{3,2}$	$x_{4,2}$	$x_{5,2}$
3	$x_{2,3}$	$x_{3,3}$	$x_{4,3}$	$x_{5,3}$
4	$x_{2,4}$	$x_{3,4}$	$x_{4,4}$	$y_{5,4}$
5	$x_{2,5}$	$x_{3,5}$	$y_{4,5}$	$y_{5,5}$

未知の値

このとき, 列方向の階差 $\Delta x = x_{l,m} - x_{l-1,m}$ 及び行方向の階差 $\Delta x' = x_{l,m} - x_{l,m-1}$ を全ての格子サイズに対して求めると, $x_{l,2}$ の行から得られる階差 Δx と $x_{l,3}$ の行から得られる階差 Δx から, $x_{l,4}$ の行の未知の値 $y_{5,4}$ が推測できる. 同様に, $x_{2,m}$ の列から得られる階差 $\Delta x'$ と $x_{3,m}$ の列から得られる階差 $\Delta x'$ から, $x_{4,m}$ の未知の値 $y_{4,5}$ が推測できる. 次に,

行方向と列方向の階差が大きく変化しないと仮定すれば、 $y_{s,4}$ と階差から外挿値 $y'_{s,5}$ が得られ、 $y_{4,5}$ と階差から $y''_{s,5}$ 得られる。さらに $y'_{s,5}$ と $y''_{s,5}$ の平均から外挿値 $y_{s,5}$ が求められる。

本研究で、直接に計算して求めた最大格子サイズに対する $K_0(l)$ や最大比熱などの結果と、1974年に Katsumori が $l=m=5$ に対して行なった外挿の結果との誤差は、1% 以下である。[15,21] 大きな格子サイズを用いて有限サイズ効果を予測するとき、この方法は十分有効であると考えられる。