

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名 西川宜彦

統計物理学や物性理論で扱う多体問題の数値計算技法にマルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov chain Monte Carlo method, MCMC 法) がある。MCMC 法は各種近似計算と対比して非摂動的な方法であるが、常に有限サイズの系の計算しか行えず、熱力学極限を直接研究することは実質的に不可能である。特に、興味深い相転移現象は熱力学関数の特異性そのものであり、統計力学の文脈では熱力学極限ではじめて存在する現象である。この相転移現象を正しく捉えるためには可能な限り大きなサイズの計算が必要となる。しかし、大きなサイズの計算は高次元空間の確率分布を扱うことになり、一般に「次元の呪い」と呼ばれる計算困難さを伴う。本博士論文では、カイラル磁性体と呼ばれる物理系を対象として、物理系の特性を反映した MCMC 法の改良や実装を行うことにより相転移現象の解明を目指している。本論文は大きく三部から構成されている。第一部では MCMC 法のアルゴリズムに関することがまとめられ、第二部ではカイラル磁性体の相転移に関する大規模 MCMC 計算の研究、第三部では二次元空間でのスキルミオン結晶の融解についての MCMC 計算の研究が議論されている。

第一部では、MCMC 法の基礎となるマルコフ連鎖の概念が説明され、マルコフ連鎖が唯一の定常分布を持つための条件が丁寧に解説されている。次に MCMC 法の効率低下の原因である遅い緩和現象を回避するためのこれまでの研究を概観し、古典スピン系に対するクラスターモンテカルロ法、拡張アンサンブル法、そして詳細つりあいを破る方法までの主要なアルゴリズムが説明されている。近年、粒子系で開発された Event-chain モンテカルロ法は詳細つりあいを破る MCMC 法の一つであるが、ここではその方法の古典スピン系への拡張が議論され、典型的なスピン系への応用例が示されている。多くのモデルでこれまでの詳細つりあいを満たす方法より効率が良くなることを示し、特に強磁性モデルでは動的臨界指数が減少することが見出されている。一方、スピングラスのようにより複雑な系では必ずしも効率がよくなることも示された。

第二部では、一軸方向にジャロシンスキー・守谷 (DM) 相互作用のある三次元ハイゼンベルグ模型の大規模 MCMC 計算についての研究がまとめられている。この模型は低温・無磁場下において螺旋状の磁気秩序であるヘリカル構造が形成され、磁場中ではカイラルソリトンと呼ばれる興味深い磁気構造の実現が示唆されている。この系に関して前述の Event-chain モンテカルロ法を適用し、 10^6 のスピンの MCMC 計算に成功した。まず、磁場のないときの相転移は対称性の観点から XY 模型と同じ普遍性クラスに属すると考えられるが、MCMC 法による計算結果を有限サイズスケーリングにより解析することでそのことを確認した。磁場中でも同様の計算・解析を行い、弱磁場の相転移は XY 模型と同じ普遍性クラスであることを示唆する結果を得た。さらに、強磁場での相転移は弱磁場とは全く異なり、熱容量や一様磁化率の強い発散を示すことが見出された。二次転移を仮定したときの臨界指数は弱磁場とは大きく異なっており、XY 模型とは異なる普遍性クラスに属することが示唆される。

第三部では、二軸方向の DM 相互作用のある正方格子上的二次元ハイゼンベルグ模型の

MCMC 計算の結果がまとめられている。この系ではスキルミオンと呼ばれる特異な渦状の励起構造が安定に存在し、粒子のように振る舞うことが期待されるが、その統計力学的性質が詳しく議論されている。これまでに観測されているスキルミオンの実験結果や関連する二次元粒子系の融解理論のレビューを行った後に、ここで行われた GPU を用いた MCMC 法の手順が詳しく説明されている。特に、スキルミオンを点粒子とみなしたときの位置や配向に関する相関関数を丁寧に計算することにより、低温での位置秩序は準長距離相関しか持たないことが示された。これは、スキルミオン粒子は結晶状態にあるのではなく、スキルミオン固体が実現していることを意味している。その状態から温度を上げると、この固体は一度だけの転移を介して液体状態に至ることを示唆する結果を得た。これは二次元粒子系における周期ポテンシャル中の融解転移の理論と整合している。つまり、スキルミオンは粒子とみなせるが、一方でその構成要素であるスピンの格子に定義されていることを反映して、スキルミオンは格子の周期ポテンシャルの影響を受けていると解釈される。

なお、本論文の第一部の内容は、福島孝治氏、W.Krauth 氏、M.Michel 氏と、第二部の内容は福島氏との共同研究であり、それぞれ学術論文として出版されており、第三部の内容は福島氏と W.Krauth 氏の共同研究として投稿中である。いずれも論文提出者が主体となり行われた研究であると判断される。

以上のように、本論文の内容には MCMC 法の開発と実装に関する計算物理学の発展と、その応用を通じた相転移現象の統計力学的な理解に大きな寄与が認められる。したがって、本論文は博士 (学術) の学位を授与するにふさわしい内容であると審査委員会は全員一致で判定した。