



Title	The monomer-dimer models in two and three dimensions: Tensor renormalization group study
Author(s)	大塚, 高弘
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/87816
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

論文内容の要旨

氏名 (大塚 高弘)

論文題名

The monomer-dimer models in two and three dimensions: Tensor renormalization group study (2次元、および、3次元におけるモノマー・ダイマーモデル: テンソル繰り込み群を用いた研究)

論文内容の要旨

二原子分子 (dimer) を重なりを禁止した上で空間上に配置する場合の数を数え上げる問題を dimer問題と呼ぶ。dimer問題は、格子上で pure dimer model (PDM) として定義され、2次元モデルについては解析解が知られている。PDMは最も単純なモデルの一つであり、その単純さゆえに、様々な物理と関連し広く研究されている。

例えば、PDMとIsingモデルの間には一対一の対応関係があることが知られている。

また、PDM自身も格子の形状に応じて臨界現象を示すなど、普遍性クラスの分類という観点からも興味深い対象となっている。PDMはdimerだけでなく単原子分子 (monomer) を含む monomer-dimer model (MDM) にも拡張することができる。MDMではPDMとは異なり、2次元であっても解析解は存在せず、MDMの性質の理解は不十分な段階にある。

本論文では、DMRGと特異値分解に基づくテンソルネットワーク計算法である高次テンソル繰り込み群 (HOTRG) を用いて、2次元および3次元格子上のMDMの臨界現象を研究する。臨界現象はエントロピーやモノマー密度などの物理量にべき乗からのずれとして反映される。この振る舞いを解析することで、MDMの臨界現象を明らかにし、臨界指数を決定することで普遍性クラスからMDMを分類することができる。同時に、計算手法であるHOTRGに対しても、高次元系に対するアルゴリズムの最適化を行う。また、HOTRGの精度を示す指標となる特異値分布の漸近的振る舞いについても言及する。

最初に、DMRGとHOTRGを用いて、2次元MDMの臨界的振る舞いを解析する。

MDMと磁場入りイジングモデルの間には対応関係があると考えられているが、普遍性クラスの観点からは議論されていない。そこで、モノマー密度に現れる臨界的振る舞いかた臨界指数を決定し、MDMとIsingモデルの普遍性クラスが異なることを明らかにする。

次に、3次元MDMの臨界振る舞いを調べる。

3次元系の例である、有限の層数の層状モデルと無限系の大きく分けて2つのモデルを解析する。

層数が少ない有限層の二部格子モデルに対しては、2層系はnon-critical、3層系はcriticalであることをDMRGによって示す。3次元無限系に対しては莫大な消費メモリが必要となるため、最初に3次元HOTRGのアルゴリズムの最適化を行う。具体的には、テンソルの縮約の順序の変更とテンソル成分を異なるコアに割り当てるアルゴリズムを導入することでメモリコストの低減を行う。これらのアルゴリズムを用いることで、PDMの残留エントロピーを計算し、MDMの臨界的振る舞いを解析する。残留エントロピーの値は先行研究のTN計算よりも高い精度で計算できたが、臨界指数を決定するには精度が不十分であった。

最後に、HOTRGのスペクトル (特異値) の漸近的振る舞いをBaxterによって導入されたCTM像に基づき解析する。

HOTRGのスペクトルの漸近形とDMRGのスペクトルの漸近形を比較し、非臨界領域における可積分モデルに成立する関係を導く。

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (大塚高弘)		
	(職)	氏 名
論文審査担当者	主 査	教授 菊池誠
	副 査	教授 越野幹人
	副 査	准教授 吉野元
	副 査	准教授 湯川諭
	副 査	神戸大学・准教授 西野友年

論文審査の結果の要旨

格子上に二量体を敷き詰める純ダイマー模型(PDM)は巨視的な残留エントロピーを持ち、統計物理学の基本モデルとして古くから研究が行われてきた。この模型は二次元系では bipartite 格子で臨界的、それ以外の格子では臨界的でないと考えられている。また、二次元正方格子 PDM は Fisher 格子上のイジング模型と等価であり、厳密解が知られている。その拡張として、空孔を許したモノマー・ダイマー模型(MDM)を考えると、bipartite 格子では PDM の極限で臨界現象を示すと考えられているが、MDM には厳密解がなく、詳細は明らかではなかった。さらに、多層系や三次元系の性質はあまり調べられていない。

申請者は、高次テンソル繰り込み群(HOTRG)と密度行列繰り込み群(DMRG)の方法を用いてこの問題に取り組んだ。テンソル・ネットワークは統計力学の分配関数や量子系の波動関数を数値的に近似する手法として、近年物理学の様々な分野で使われている。その中でも HOTRG は高次元系に適用可能な手法である。また、DMRG は低次元系で精度のよい計算法として広く使われている。

申請者はまず二次元 bipartite 格子上の PDM に対して DMRG と HOTRG で計算を行い、厳密解と比較することにより、両手法が精度よい計算法であることを確認した。特に HOTRG の有効性を確認したことが重要である。次に厳密解が存在しない MDM の計算を行い、PDM の極限で臨界現象が見られることを確認するとともに、その臨界指数を精度よく求めて、これが二次元イジングモデルとは異なる普遍性クラスに属することを明らかにした。

同様の手法で二層系が非臨界的であることと三層系が臨界的であることを見出した。通常系では有限層系は本質的に二次元系と同じ臨界現象を示すが、この系では層の数によって臨界現象が異なることが明らかになった。次に三次元の PDM と MDM の残留エントロピーを HOTRG を用いて精度よく求めることに成功した。これは HOTRG の有効性を示す結果である。これら一連の結果は PDM と MDM についての新しい知見をもたらすものである。

また、HOTRG の固有値スペクトル分布を理論的に議論し、数値計算によって確認した。特に、可積分系と非可積分系で固有値分布の振る舞いが異なることを指摘した。これは HOTRG の基礎に関する知見を与えている。

計算手法の面では、HOTRG を三次元系に適用するにあたって大きな問題となるメモリー制約を解決するために、並列計算の手法を開発した。これは今後他の系に HOTRG を使う際にも有用な手法である。

以上、申請者の研究は PDM および MDM に関する多くの新しい知見を与えるとともに、HOTRG の適用範囲を広げることにも成功しており、意義が大きい。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。