新奇揺らぎの導入による相転移現象の制御

田村　亮[1]，田中　宗[2]
東大物性研[1]，東大院理[2]

相転移は性質の異なる相同士の境目で起こる物理現象である．例えば，温度や圧力に応じて，H_2O が氷・水・水蒸気といった異なる性質を持つ相へ変化することが相転移である．これらの相の特徴は，いくつかの熱力学的変数で表現され，相転移点ではこの熱力学的変数に特異性が生じる．この特異性によって相転移は分類され，自由エネルギーの一階微分が特異的となる一次相転移（不連続転移）や，二階微分が特異的となる二次相転移（連続転移），トポロジカルな励起に関連するトポロジカル相転移などが存在する．この相転移現象は，系の基底状態や秩序変数の対称性および空間次元によって特徴づけされる．相転移現象は統計力学的模型を用いて解析計算および数値計算によって非常に詳しく調査されており，統計力学の分野における最も重要な研究対象の一つである．

また，相転移現象は情報統計力学の分野においても重要な研究対象である．情報統計力学で扱う問題として最適化問題がある．これら多くの最適化問題に適用することができる汎用的手法として，シミュレーテッドアニーリング法や量子アニーリング法がある．これらの手法は，系に熱揺らぎや量子揺らぎを導入し，これらの揺らぎを徐々に減少させることによって最適解を得る方法である．しかし多くの場合，温度や量子場を導入すると，これらの変化に応じて相転移現象が起こる．この相転移の有無は，最適解を求める際の困難さを大きく左右する一因となる．例えば，一次相転移点近傍において状態が準安定状態にトラップされてしまうことや，二次相転移点における臨界減速が困難さの原因となる．最適化問題では，最終的に得られる結果が重要であり，計算における過程は重要ではない．そのため，基底状態や秩序変数の対称性といった系の本質を変化させずに，相転移の様相を変化させることがもし可能であれば，最適解を求める際の困難さの解消につながる（図１）．そこで我々は，基底状態や秩序変数の性質を本質的に変えることなく，相転移の様相のみを変化させることはできるのかという問題に興味を持ち研究を行ってきた．

本講演では，教科書的に二次相転移（連続転移）が起こることが知られている以下の相転移現象に注目する．

(i) 二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う相転移

(ii) ネットワーク成長模型におけるパーコレーション転移

これらの模型に対して模型の秩序変数を本質的に変えることはない新しいタイプの揺らぎを導入することによって，相転移現象がどのように変化するかについて調べた．実際，前者のモデルに状態に関する余分な揺らぎを，後者のモデルにネットワークの成長過程で生じる選択確率（選択に関する揺らぎ）を導入することによって，相転移の臨界性が変化することを明らかにした．

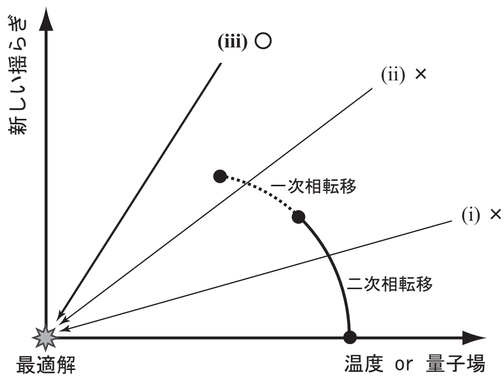

図 1: 新しい揺らぎの導入による相図の例．新しい揺らぎの導入によって，もしこのような相図が得られた場合，最適解の探索において (i) の経路では二次相転移点を通過し，(ii) の経路では一次相転移点を通過する．そのため，これらの経路では最適解を求める際に困難が生じてしまう．しかし，(iii) のような経路が存在したとすると，相転移点を通過しないため，最適解を求める際に困難が生じない．

二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う相転移

ここでは，平衡相転移について考える．離散的対称性の破れを伴う平衡相転移は q-状態強磁性 Potts 模型を用いて非常に詳しく研究が行われている．二次元模型の場合には $q \leq 4$ で二次相転移，$q > 4$ で一次相転移が起こることが知られている [1]．この Potts 模型は，一般化された Ising 模型であり各格子点で q 個のうち一つの値をとることのできる模型である．$q = 2$ の場合は，Ising 模型と等価である．Potts 模型は非常にシンプルであるが，現実物質で起こる相転移（軌道秩序，強誘電性，原子吸着など）や，より複雑な理論模型で起こる相転移を説明することができ，統計力学模型として最も基礎的な模型の一つである．また，グラフ彩色問題や数独は Potts 模型に対応づけることができ，情報統計力学の分野でも頻繁に扱われる模型である．例えば，彩色問題では，色の種類を離散的な値で表現することによって Potts 模型のスピンと対応させることができる．本研究では，模型の性質（基底状態および秩序変数）を本質的に変えることなく，相転移の次数のみを変化させることが可能であるかどうかを調査した．

我々は，通常の二次元強磁性 Potts 模型に，エネルギーに寄与しない余分な状態（透明状態）を複数付け加えたモデルを考察した [2, 3, 4, 5, 6]．この透明状態は，各サイトにおいてとり得る状態の数を増やしており，透明状態を加えることは状態に関する揺らぎの導入に対応している．この透明状態は基底状態の性質（スピン構造および縮退度）を変えずに励起状態における状態密度を変えることができる．したがって，秩序変数は透明状態を加えたとしても元の Potts 模型と変化しない．通常なら二次相転移を示す二次元強磁性 2, 3, 4-状態 Potts 模型に透明状態を付け加えたところ，有限温度一次相転移の存在が確認された．このように，エネルギーに寄与しない状態を付け加えることで相転移の次数を変化させることが可能である．この研究は，模型の本質を変化させることなく，相転移の次数をコントロールすることができる一つの可能性を提示している．本研究は東大物性研川島直輝教授との共同研究である．

ネットワーク成長模型におけるパーコレーション転移

ここでは，正方格子上のネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移に着目する．簡単のため，ここで考えるネットワーク成長模型の初期状態はすべての要素が繋がっていないとする．ネットワーク成長模型では，これらの要素が時々刻々とあるルールによって繋がっていき，ネットワークが形成される．このネットワークの時間発展に対して，パーコレーション転移点は格子の端から端までをつなぐネットワークが形成された時間で定義される（図２）．この模型は非常に基礎的な模型であり，伝染病の伝搬や森林火災などの自然界における動的現象や，ウェブや送電線といった人工的なネットワークなどの社会現象に対しても適用されており，統計物理学だけでなく，自然界の非平衡現象，情報科学，あるいは社会科学における様々な現象に適用されている模型である．

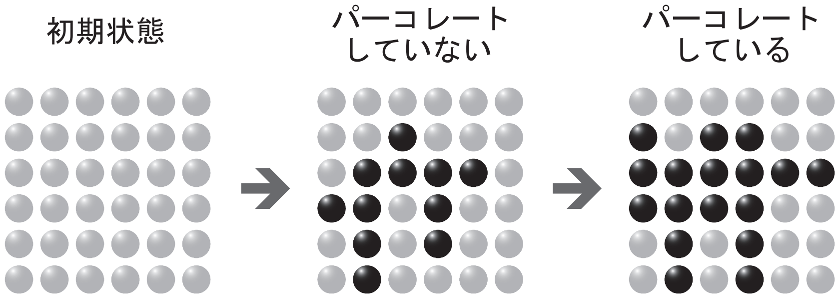

図 2: 正方格子上のネットワーク成長の過程．黒丸がクラスタを形成してる要素である．初期状態，パーコレートしていないクラスタ，およびパーコレートしているクラスタの例をそれぞれ図示している．

一般的な理解では，パーコレーション転移は連続転移である．しかし，特別なルールを用いたネットワーク成長模型では，パーコレーション転移が不連続転移になる（Explosive percolation：爆発的パーコレーション）ことが Achlioptas らによって報告された [7]．連続転移を示す最もシンプルなネットワーク成長模型は，要素同士を完全にランダムに繋ぐことによって成長するものであるが，Achlioptas らが提案したルールは完全にランダムに繋ぐのではなく，大きいクラスタができにくくなるようなルールを採用している．つまり，初期の段階では，小さいクラスタが至る所で徐々に成長し，それらがある程度成長したら，一挙にシステムサイズと同程度の巨大なクラスタが形成されるという，バイアスがかかったルールである．そのため，ネットワークの時間発展においては，小さいクラスタが形成される成長過程が常に選ばれる．この研究以降，ネットワーク成長模型におけるパーコレーション転移は再び注目を集めているが，爆発的パーコレーションの相転移の様相は何なのかについて完璧な理解は得られていない．

我々は，連続転移を示す最もシンプルなネットワーク成長ルールと，Achlioptas らによって提案されたネットワーク成長ルールを連続的に繋ぐことのできる一般化パラメタを導入した [8]．この一般化パラメタにより，成長過程を選ぶ際の選択確率（選択に関する揺らぎ）を導入することができる．つまり，このルールでは，ネットワークの時間発展において，必ずしも小さいクラスタが形成される成長過程が選ばれるとは限らない．この一

般化パラメタに対して，パーコレーション転移の様相がどのように変化するかを網羅的に調べることによって，両者のパーコレーション転移の臨界性の違いを定量的に検討した．結果としては，一般化パラメタがある値の時に，両者のネットワーク成長モデルとは異なるパーコレーション転移点のサイズ依存性がみられた．これは，両者のパーコレーション転移の間で，相転移の臨界性が変化していることを示しており，両者のパーコレーション転移は異なる臨界性を示すことが分かった．また，一般化パラメタに対するパーコレーション転移点直上のフラクタル次元についても検討し，一般化パラメタがある値の時に，フラクタル次元が変化する振る舞いがみられた．

本研究で導入した模型は，ネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移を統一的に理解できる最もシンプルな模型である．また，動的パーコレーション転移は，ネットワークの成長過程のダイナミクスに大きく関連しており，本研究は非平衡研究のパターン形成の観点からも興味深い問題であると考えている．

新しいタイプの揺らぎを導入することにより，基底状態や秩序変数の性質を本質的に変化させずに，相転移の様相を変化させることが可能であることを明らかにした．上で述べたものの他にも多くの揺らぎの導入方法を考えることができる．統計力学は，自然界における様々な揺らぎを説明することに成功してきた．それと同様に今度は情報統計力学において，揺らぎの導入方法とその性質を俯瞰的に捉える理論体系が形成されることが期待される．その結果，相転移の様相を望み通りに制御する方法が確立されたならば，それは情報統計力学のみにとどまらず，より広い（未だ見ぬ新しい）境界領域の形成の礎となると考えている．

参考文献

[1] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).

[2] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. **124**, 381 (2010).

[3] S. Tanaka, R. Tamura, and N. Kawashima, J. Phys.: Conf. Ser. **297**, 012022 (2011).

[4] S. Tanaka and R. Tamura, J. Phys.: Conf. Ser. **320**, 012025 (2011).

[5] S. Tanaka, R. Tamura, I. Sato, and K. Kurihara, To appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: "Summer School on Diversities in Quantum Computation/Information".

[6] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, To appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: "Symposium on Interface between Quantum Information and Statistical Physics".

[7] D. Achlioptas, R. M. D'Souza, and J. Spencer, Science **323**, 1453 (2009).

[8] S. Tanaka and R. Tamura, arXiv:1111.2005.