

## 日本物理学会第 71 回年次大会 での口頭発表

木村 健治  
Kenji KIMURA  
理工学研究科 研究生

### 1. はじめに

私は 2016 年 3 月 19 日から 22 日に開催された日本物理学会第 71 回年次大会に参加した。「多次元レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法の開発」という題目で口頭発表を行い、参加者との討論を行った。

### 2. 多次元レプリカ交換モンテカルロ法

多次元レプリカ交換モンテカルロ法はレプリカ交換モンテカルロ法の単純な拡張であり、複数の相互作用をもつ系から、多次元状態密度を求めることに役立つ手法である。ここでは、次のようなハミルトニアンをもつ系について多次元レプリカ系を構成することを考える。

$$H(x) = J_1 E_1(x) + J_2 E_2(x).$$

ここで、 $x$  は状態、 $E_1$  と  $E_2$  は相互作用エネルギー、 $J_1$  と  $J_2$  は結合定数である。このハミルトニアンの  $J_1$  と  $J_2$  について、 $J_1$  について  $M$  個、 $J_2$  について  $N$  個、全体で  $M \times N$  個の 2 次元レプリカ系を構成する。このとき、 $(m, n)$  番目のハミルトニアンを次のように表すことにする。

$$H(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn}) = J_{1mn} E_1(x_{mn}) + J_{2mn} E_2(x_{mn}).$$

逆温度  $\beta = 1$  とすると、レプリカ  $(m, n)$  と  $(m', n')$  のメトロポリス法による交換確率  $W$  は次のようになる。

$$W = \min(1, e^{-\Delta}).$$

ここで、 $\Delta$  は交換のコスト関数と呼ばれる関数であり、次のようになる。

$$\Delta = H(x_{m'n'}, J_{1mn}, J_{2mn}) + H(x_{mn}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'}) \\ - H(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn}) - H(x_{m'n'}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'}).$$

### 3. 提案手法

レプリカ交換モンテカルロ法や多次元レプリカ交換モンテカルロ法を効率良く使うためにはレプリカ系を構成したときの温度や結合定数などのパラメータの設定やレプリカ交換の交換スケジュールが重要である。レプリカ交換モンテカルロ法については、パラメータの設定方法がいくつか提案されているが、多次元レプリカ交換モンテカルロ法については、パラメータの設定方法については議論されていない。そこで、レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法を多次元レプリカ交換モンテカルロ法に拡張することで、多次元レプリカ交換モンテカルロ法におけるレプリカ交換の交換確率を一定とする結合定数を実現する。

レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法は、交換確率が一定、つまり、コスト関数が等しくなるという条件から漸化式を構築し、その漸化式を繰り返すことによって、交換確率が一定となるパラメータを見つける方法である。

多次元レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法については、レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法のとくと同様に、交換確率が一定となることを条件にした漸化式の構築を目指す。しかし、ここでの 2 次元レプリカ系では、 $J_1$  と  $J_2$  の 2 つのパラメータについての漸化式を構築する必要があり、そのためコスト関数が等しいという条件だけでは条件が十分ではない。そこで、パラメータの更新において、更新するパラメータに隣り合っている 2 つのパラメータからなる直線と平行に移動するという条件を追加する。そして、コスト関数が等しいという条件と平行に移動するという条件から漸化式を構築する。

レプリカ交換の交換スケジュールについては、レプリカ交換モンテカルロ法においてレプリカの遷移を改善させる手法である Bittner の方法を採用する。この方法はレプリカの遷移が交換確率に依らず転移点付近で反射される現象を改善する手法である。

今回開発した手法と Bittner の方法を組み合わせた手法を多次元レプリカ交換モンテカルロ法における効率の良い結合定数の配置と交換スケジュールとして提案する。

#### 4. 結果

提案手法の評価には spin-1 Blume-Capel モデルを用いた。2次元正方格子の spin-1 Blume-Capel モデルは詳しく解析されていて、1次転移線や2次転移線、3重点をもつことが知られている。

多次元レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法は1次転移線や2次転移線を含む空間に結合定数を配置したときでも概ね交換確率を等しくする結合定数の配置を実現した (図1)。

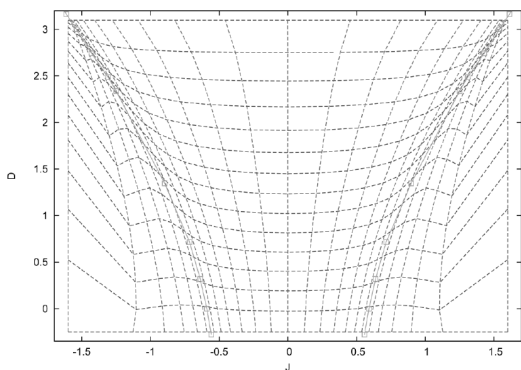


図1 多次元レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法を適用したときの結合定数の配置。破線の交点にレプリカが配置される。実線は2次転移線を表す。

また、レプリカの遷移についても、多次元レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法でのレプリカ配置と Bittner の方法を組み合わせることに

よって改善することを示した (図2)。

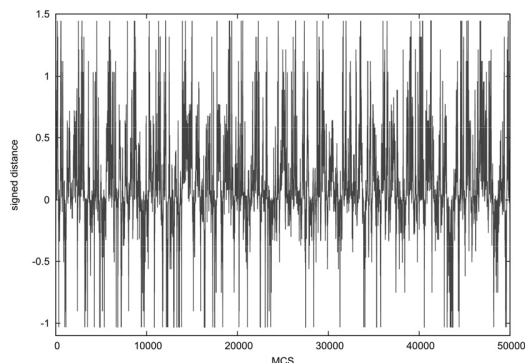


図2 あるレプリカと転移線との符号付き距離の遷移。転移線 (距離が0) 付近を境にした遷移の偏りが無い。

#### 5. まとめ

多次元レプリカ交換モンテカルロ法におけるレプリカ交換の交換確率一定法を開発し、Bittner の方法と組み合わせる手法を提案した。そして、spin-1 Blume-Capel モデルを用いて提案手法の性能評価を行い、レプリカの遷移を改善することを示した。

今後の課題は別のモデルに対して提案手法を適用することとより高次元の多次元レプリカ交換モンテカルロ法で提案手法を検証することである。

#### 6. おわりに

日本物理学会の年次大会という大規模な学会に参加し、発表をすることは、自分の研究を広く知ってもらうことに役立ち、さらに、研究分野に関する見識を広める良い機会であると考えています。そして、今回の口頭講演では、短い時間ながら興味をもっていただける講演ができたと考えています。統計力学を専門としている方々と議論し、貴重な意見をいただくことができ、大変研究の参考になりました。最後に、ご指導いただいた樋口先生に深くお礼申し上げます。