

博士論文

モンテカルロ法による多次元状態密度推定の研究

2016年7月

龍谷大学大学院 理工学研究科

博士後期課程 数理情報学専攻

T16R501 木村 健治

目次

1	はじめに	1
1.1	はじめに	1
1.2	論文構成	2
2	モンテカルロ法	3
2.1	マルコフ連鎖モンテカルロ法	3
2.1.1	マルコフ連鎖モンテカルロ法	3
2.1.2	シングルヒストグラム再重法	5
2.2	レプリカ交換モンテカルロ法	5
2.2.1	レプリカ交換モンテカルロ法	6
2.2.2	マルチヒストグラム再重法	9
2.2.3	熱力学的積分法	9
2.2.4	レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法	10
2.2.5	PT _{τ} アルゴリズム	11
2.2.6	レプリカ交換モンテカルロ法による状態密度推定の実行手順	12
2.3	多次元レプリカ交換モンテカルロ法	13
2.3.1	多次元レプリカ交換モンテカルロ法	13
2.3.2	マルチパラメータマルチヒストグラム再重法	15
2.3.3	多次元レプリカ交換モンテカルロ法による状態密度推定の実行手順	16
3	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効率の改善	17
3.1	はじめに	17
3.2	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	17
3.3	提案手法	21
3.4	Spin-1 Blume-Capel モデルへの応用	22
3.4.1	Spin-1 Blume-Capel モデル	22
3.4.2	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検証	22
3.4.3	提案手法の検証	32
3.5	まとめ	38
4	Tatami タイリングシステムの解析	39
4.1	はじめに	39
4.2	Tatami タイリングシステム	40
4.2.1	Tatami タイリングシステム	40
4.2.2	モンテカルロ法による状態数推定法	41
4.3	レプリカ交換モンテカルロ法による解析	42
4.3.1	状態数推定結果	43
4.3.2	漸近形の推定	44
4.4	多次元レプリカ交換モンテカルロ法による解析	49
4.5	熱力学的性質の解析	53

4.6	まとめ	54
5	まとめ	56

1 はじめに

1.1 はじめに

モンテカルロ法 (マルコフ連鎖モンテカルロ法) は 1950 年代の初期に統計物理に導入された計算手法である [1]. 1980 年代には, Simulated Annealing[2] などの手法が開発されて, 統計物理以外の分野にも応用範囲を広げていった. 今日において, モンテカルロ法の応用範囲は多岐に渡り, 本来の開発目的であった物理シミュレーションや数値積分だけでなく, 機械学習や囲碁, 将棋に代表されるゲーム理論分野, 組合せ論の数え上げ問題などの幅広い分野で利用されている.

マルコフ連鎖モンテカルロ法の計算効率を改善する取り組みは, 計算物理において重要な課題の一つである. 現在までに, 特に 1990 年代以降に, マルコフ連鎖モンテカルロ法の計算効率を改善する様々な方法が提案されている. マルコフ連鎖モンテカルロ法を使うためには釣り合い条件と呼ばれる条件を満たす必要があり, この条件によって計算効率を改善する取り組みは大きく二つの群に分けることができる.

一つは詳細釣り合い条件と呼ばれる条件を満たす方法群である. 多くのマルコフ連鎖モンテカルロ法のアルゴリズムでは詳細釣り合い条件を満たすことが容易であることから詳細釣り合い条件が使われている. そのため, 詳細釣り合い条件を満たすモンテカルロ法のアルゴリズムの研究は盛んに行われてきた. そして, 拡張アンサンブルモンテカルロ法と呼ばれる手法群として, レプリカ交換モンテカルロ法 [3, 4] や Simulated Tempering[5], マルチカノニカル法 [6, 7], 多次元レプリカ交換モンテカルロ法 [8, 9] といった様々な方法が提案された. さらに, 現在においてはこれらの拡張アンサンブルモンテカルロ法を効率よく実行する手法がいくつも提案されている [10, 11, 12, 13, 14, 15]. また, スピン系においてはクラスターアルゴリズム [16, 17] や GPU 実装法 [18, 19] のような並列計算のためのアルゴリズムも提案されている.

もう一つは全体釣り合い条件と呼ばれる条件を満たす方法群である. 詳細釣り合い条件はマルコフ連鎖モンテカルロ法を使う上での十分条件であるので, 実はあまり計算効率の良い条件ではないことが知られている. しかし, 詳細釣り合い条件以外の条件を用いることは簡単ではないとされていたため, ほとんどの場面において詳細釣り合い条件が使われてきた. ところが近年において, 詳細釣り合い条件を満たさず, 全体釣り合い条件を用いたアルゴリズムが提案され始めた [20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]. これらのアルゴリズムは, 全体釣り合い条件を用いることによって, モンテカルロ法による状態の更新の棄却をなくすることができるため, 計算効率を大きく向上させることができる.

ここで紹介したように様々な手法開発が行われていることは, モンテカルロ法の計算効率の改善が重要であることを示していると考えられる. また, 近年のモンテカルロ法の研究では詳細釣り合い条件を破るモンテカルロ法がよく議論されるようになってきているが, 系に依存した方法がほとんどであるため, どのような系にも使える詳細釣り合い条件を満たすモンテカルロ法の効率の改善も重要な課題であると考えられる.

本研究はモンテカルロ法による状態密度推定についての研究である. モンテカルロ法による状態密度推定は, 数学的に解くことが困難な問題や計算時間の観点から数え上げることが難しい問題について, 状態数を推定する有力な手段である [29]. そして, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法は多次元状態密度を推定する手段として優れた方法である. それは,

温度や結合定数などのパラメータについて多次元にレプリカを配置することによって、レプリカ交換におけるレプリカの移動に着目したときに相転移を避けて回り込む効果を期待することができるからである。しかし、多次元レプリカ交換モンテカルロ法の計算効率を改善するパラメータの設定法は提案されていない。そこで、本研究では多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いて効率よく多次元状態密度を推定する手法について研究を行った。

本研究では多次元状態密度をより効率良く推定するための多次元レプリカ交換モンテカルロ法における手法を提案する。多次元レプリカ交換モンテカルロ法は複数の相互作用エネルギーをもつ系からサンプリングするとき役立つ方法であるが、計算効率向上のためのパラメータの設定やレプリカ交換のスケジュールについて、レプリカ交換モンテカルロ法のような研究がほとんどなされていない。そこで、Hukushima によ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 [10] を多次元レプリカ交換モンテカルロ法に拡張することによって、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開発した。さらに、交換確率一定法とレプリカ交換モンテカルロ法の交換効率を改善させる手法である Bittner らによる PT_τ アルゴリズム [12] 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計算効率のよい手法として提案した [30]。

また、多次元状態密度を推定する問題として、tatami タイリング [31] とよばれるタイリングの状態数を推定し、tatami タイリングにおける熱力学的性質の解析を行った。Tatami タイリングとは畳を畳の四隅が集まらないように敷き詰める問題である。この問題は組合せ論から、サイズ $l \times l$ の正方領域での状態数が $2^{\ell-1}(3\ell-4)+2$ となることが知られている [32]。しかし、長方形領域や複雑な形状における状態数は知られていない。そこで、レプリカ交換モンテカルロ法と多次元レプリカ交換モンテカルロ法による多次元状態密度を推定する手法を用いることで、どのような形状の領域についても詳細に状態数を推定する手法を確立した [33]。

1.2 論文構成

本論文の構成は以下の通りである。第 1 章では、研究背景を示す。第 2 章では、モンテカルロ法とモンテカルロ法による状態密度推定法を解説する。第 3 章では、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効率を改善する手法として、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と PT_τ アルゴリズムを組み合わせた手法について述べる。第 4 章では、tatami タイリングシステムの解析結果について述べる。第 5 章では、本論文のまとめを述べる。

2 モンテカルロ法

モンテカルロ法とは乱数を用いてシミュレーションを行う手法のことである。ここではモンテカルロ法を用いて状態密度を推定する手法について議論する。さらに、拡張アンサンブルモンテカルロ法としてレプリカ交換モンテカルロ法 [3] と多次元レプリカ交換モンテカルロ法 [8, 9] を紹介する。

2.1 マルコフ連鎖モンテカルロ法

一様ランダムに状態をサンプリングする単純なモンテカルロ法は、高次元空間の中から一様ランダムにサンプリングすることが難しいことや、対象となる空間で意味のある値をとる領域が小さいときに精度が低下する問題が知られている。そこで、一様ランダムなサンプリングをするのではなく、マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いて重要な箇所を重点的にサンプリングする方法 (重点サンプリング) を考える。

2.1.1 マルコフ連鎖モンテカルロ法

マルコフ連鎖モンテカルロ法とは、マルコフ連鎖を用いて多変量の状態 x の確率分布 $P(x)$ に比例するように重点サンプリングする手法である。ここでのマルコフ連鎖とは、現在の状態 x^t が直前の状態 x^{t-1} にのみ依存する確率過程のことである。マルコフ連鎖モンテカルロ法では、状態 x を逐次的に更新していき、すべての状態 x について次を満たす定常分布 $P(x)$ となることを要請する。

$$P(x) = \int dx' P(x') W(x', x). \quad (2.1)$$

ここで、 $W(x', x)$ は釣り合い条件を満たす遷移確率で、 x' から x に移る確率を表す。

マルコフ連鎖モンテカルロ法を実装する上で必要なことは二つだけである。一つはエルゴード条件を満たすことである。ここでのエルゴード条件とは、ある状態から他の全ての状態に有限回の遷移で到達可能であることである。もう一つは釣り合い条件をみたす遷移であることである。釣り合い条件とはいくつかの状態があったときに他のすべての状態からある状態 x に移る量とある状態 x から他のすべての状態に移る量が等しくなる条件のことである。つまり、釣り合い条件は状態 x から出て行く量と入ってくる量が同じになることを要請する。釣り合い条件の設定として良く用いられるのが詳細釣り合い条件であるが、近年においては詳細釣り合い条件ではなく全体釣り合い条件を用いる手法も考案されている [20, 21, 22, 23, 24, 27, 28]。ここでは、詳細釣り合い条件について紹介する。

釣り合い条件から詳細釣り合い条件を考える。釣り合い条件は出て行く量と入ってくる量が等しいという条件であることから次の式が成立する必要がある。

$$\int dx' P(x) W(x, x') = \int dx' P(x') W(x', x). \quad (2.2)$$

この式 (2.2) を満たす最も簡単な形として次の詳細釣り合い条件を導くことができる。

$$P(x) W(x, x') = P(x') W(x', x). \quad (2.3)$$

詳細釣り合い条件は図 2.1 のような 2 つの状態 x と x' についての条件で, それぞれの出入流量が等しいことを要請する条件である. マルコフ連鎖モンテカルロ法を実装するには釣

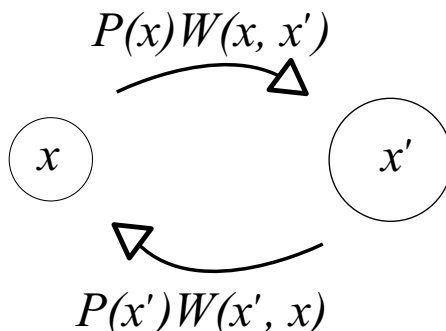


図 2.1: 詳細釣り合い条件のイメージ. 詳細釣り合い条件では状態 x から状態 x' に出て行く量と状態 x' から状態 x に入る量は等しいことを要請する.

り合い条件 (2.2) や詳細釣り合い条件 (2.3) を満たす遷移確率 W を用意する必要がある.

詳細釣り合い条件を満たす遷移確率 W はいくつか提案されている. ここではメトロポリス法とよばれる方法を紹介する¹.

メトロポリス法は詳細釣り合い条件 (2.3) の単純な変形から導出できる. 詳細釣り合い条件 (2.3) を次のように変形する.

$$\frac{W(x, x')}{W(x', x)} = \frac{P(x')}{P(x)}. \quad (2.4)$$

遷移確率 W は式 (2.4) を満たせば良い. ここで, 遷移確率 W として次を採用する方法がメトロポリス法である.

$$W_{\text{metropolis}}(x, x') = \min\left(1, \frac{P(x')}{P(x)}\right). \quad (2.5)$$

平衡統計物理において, ある状態 x の確率分布はその状態のエネルギーを与えるハミルトニアン $\mathcal{H}(x)$ とボルツマン重みを用いて次のカノニカル分布として定義される.

$$P(x) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(x)}}{Z(\beta)}. \quad (2.6)$$

ここで, β は逆温度, Z は分配関数とよばれる規格化定数である². 分配関数は次のように定義される.

$$Z(\beta) = \sum_x e^{-\beta\mathcal{H}(x)}. \quad (2.7)$$

カノニカル分布においてメトロポリス法の遷移確率は式 (2.5), (2.6) より次のようになる.

$$W_{\text{metropolis}}(x, x') = \min\left(1, e^{-\beta(\mathcal{H}(x') - \mathcal{H}(x))}\right) \quad (2.8)$$

¹他には熱浴法 (ギブスサンプリング) やメトロポリス・ヘイスティング法などが知られている.

²分配関数を計算することができれば, そこから様々な物理量を計算することが可能である. しかし, 大きな系の問題になると計算時間の観点から分配関数を計算することは不可能となる. そこで, 効率よく分配関数を推定する手段としてマルコフ連鎖モンテカルロ法が用いられる.

2.1.2 シングルヒストグラム再重法

ここではマルコフ連鎖モンテカルロ法を実行することで得られたエネルギーヒストグラムからエネルギー E ごとの状態密度 $g(E)$ を推定する方法 [34] を紹介する. エネルギーヒストグラムは 2.1.1 節で紹介したメトロポリス法のような釣り合い条件を満たす遷移確率で状態を更新し続け, 状態の更新の適当なタイミングごとにエネルギーヒストグラムを更新することによって得ることができる³.

まず, 分配関数 Z は次のように状態密度 $g(E)$ を用いて表される.

$$Z(\beta) = \sum_x e^{-\beta\mathcal{H}(x)} = \sum_E g(E)e^{-\beta E}. \quad (2.9)$$

ここで, ある逆温度 β_0 のエネルギー E に関する確率分布を $P_{\beta_0}(E)$ とすると,

$$g(E)e^{-\beta_0 E} \propto P_{\beta_0}(E) \quad (2.10)$$

となる関係が成立する. したがって, 状態密度 $g(E)$ は次のように表すことができる.

$$g(E) \propto \frac{P_{\beta_0}(E)}{e^{-\beta_0 E}}. \quad (2.11)$$

さらに $P_{\beta_0}(E)$ をシミュレーションから得た頻度分布 $H_{\beta_0}(E)$ に置き換えると,

$$g(E) \propto \frac{H_{\beta_0}(E)}{e^{-\beta_0 E}} \quad (2.12)$$

となり, 定数倍を除いた状態密度をシミュレーションの結果から得ることができる. また, β_0 の結果をもとにして, 次のようにある逆温度 β での確率分布 $P_\beta(E)$ を導くこともできる.

$$P_\beta(E) \propto g(E)e^{-\beta E} = g(E)e^{-\beta_0 E}e^{-(\beta-\beta_0)E} \propto P_{\beta_0}(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}. \quad (2.13)$$

2.2 レプリカ交換モンテカルロ法

マルコフ連鎖モンテカルロ法には遅い緩和の問題とよばれる問題が存在する. この問題はマルコフ連鎖モンテカルロ法をエルゴード条件を満たすマルコフ過程で設計したとしても, 分布 (2.6) が多峰性であれば遷移する確率が極めて低くなる状態があることから発生する (図 2.2 を参照). また, 単純なマルコフ連鎖モンテカルロ法は系の緩和が遅いという問題も存在する. すなわち, 実際のマルコフ連鎖モンテカルロ法のシミュレーションでは, 高速に全ての状態を遷移することが難しいという問題を抱えている. そのため, これらの問題を解消し, 系の高速な緩和を可能とした拡張アンサンブルとよばれる手法群が提案された. その中でも実装が容易であるレプリカ交換モンテカルロ法 [3]⁴ について紹介する.

³メトロポリス法で遷移させた分布が目的の分布に収束することは保証されているが, 初期状態が低い確率の領域にありすぎると分布が正しく評価されなくなることがある. したがって, サンプルの初期部分は捨てるのが一般的である. これを焼き入れ (burn-in) とよぶ.

⁴Parallel Tempering とよばれる [4].

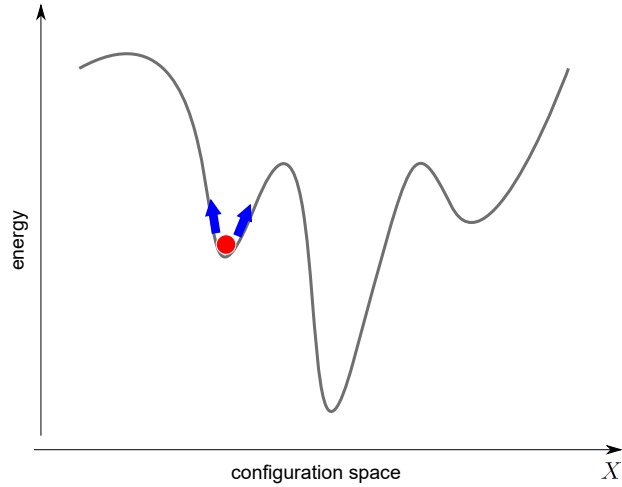


図 2.2: マルコフ連鎖モンテカルロ法における状態遷移のイメージ. 横軸は状態, 縦軸はエネルギー, 曲線は各状態におけるエネルギー, 赤点が現在の状態を表す. あるエネルギー極小状態になると現在のエネルギーよりも高い状態に移る必要があるため, 他のエネルギー極小状態に遷移することが難しい.

2.2.1 レプリカ交換モンテカルロ法

レプリカ交換モンテカルロ法では M 個の異なる温度をもつ, 相互作用のない M 個のレプリカ (コピー) から系が構成される. それぞれのレプリカと温度は 1 対 1 対応が成り立つ. M 個の状態や逆温度について, $\{x\} = \{x_1, x_2, \dots, x_M\}$ のように書くこととすると系全体の確率分布 $P(\{x\}; \{\beta\})$ は次のように個々のレプリカの確率分布の直積から定義される.

$$P(\{x\}; \{\beta\}) = \prod_m P(x_m, \beta_m) = \prod_m \frac{e^{-\beta_m \mathcal{H}(x_m)}}{Z(\beta_m)}. \quad (2.14)$$

ここで, $P(x_m, \beta_m)$ は逆温度 β_m での確率分布である.

レプリカ交換モンテカルロ法では, 個々のレプリカの分布が定常分布であるとして, 個々のレプリカの状態をメトロポリス法などの方法で個別に更新する. それに加えて, 適当なタイミングで 2 つのレプリカの状態を交換する. この手続をレプリカ交換とよぶ. レプリカ交換モンテカルロ法を用いることで, 図 2.3 のように状態は自動的にヒーティングやアニリングし, エネルギー極小状態からの脱出手段を得ることになる. この効果によって, レプリカを増やすことによる計算コストが増加する以上に系の緩和を速める効果があるとされる.

レプリカ交換モンテカルロ法はレプリカの状態を交換することによって系の緩和を促進する手法であるが, デタラメにレプリカ交換を実行してはいけない. レプリカ交換についても釣り合い条件を満たす必要があり, 釣り合い条件を満たす交換確率でレプリカ交換を実行する必要がある.

ではレプリカ交換の遷移確率を考えてみよう. レプリカ交換モンテカルロ法におけるレプリカ交換では, 分布 (2.14) を定常分布とした遷移を考える. レプリカ交換についても釣

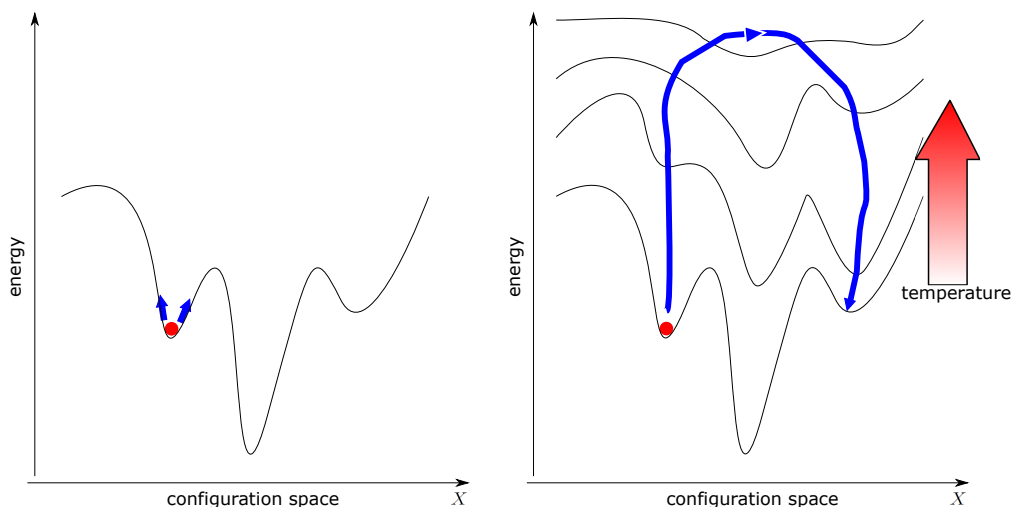


図 2.3: (左) マルコフ連鎖モンテカルロ法と (右) レプリカ交換モンテカルロ法の状態遷移のイメージ。横軸は状態, 縦軸はエネルギー, 赤点は現在の状態, (左) 曲線はある温度での各状態におけるエネルギー, (右) 各曲線は各温度での各状態におけるエネルギーを表す。レプリカ交換モンテカルロ法ではレプリカ交換によるエネルギー極小状態からの脱出手段をもつ。

り合い条件が成立する必要があることから, 次の式が成立する必要がある。

$$\sum_{\{x'\}} P(\{x\}; \{\beta\}) W(\{x\}; \{x'\}) = \sum_{\{x'\}} P(\{x'\}; \{\beta\}) W(\{x'\}; \{x\}). \quad (2.15)$$

ここで $W(\{x\}; \{x'\})$ は状態 $\{x\}$ と $\{x'\}$ の交換確率である。式 (2.15) を満たす簡単な形はやはり次の詳細釣り合い条件であろう⁵。

$$P(\{x\}; \{\beta\}) W(\{x\}; \{x'\}) = P(\{x'\}; \{\beta\}) W(\{x'\}; \{x\}). \quad (2.16)$$

このレプリカ交換の詳細釣り合い条件を具体的に m 番目と n 番目のレプリカの交換で考えてみよう。まず, 詳細釣り合い条件 (2.16) を交換に関するレプリカ m, n について具体的に書くと次のようになる。

$$P(\{\dots, x_m, \dots, x_n, \dots\}; \{\beta\}) W(x_m, x_n) = P(\{\dots, x_n, \dots, x_m, \dots\}; \{\beta\}) W(x_n, x_m). \quad (2.17)$$

ここで $W(x_m, x_n)$ はレプリカ m, n の交換確率である。これをメトロポリス法として扱うことを考え次のように変形する。

$$\frac{W(x_m, x_n)}{W(x_n, x_m)} = \frac{P(\{\dots, x_n, \dots, x_m, \dots\}; \{\beta\})}{P(\{\dots, x_m, \dots, x_n, \dots\}; \{\beta\})}. \quad (2.18)$$

⁵詳細釣り合いを満たさない交換の方法も提案されている [25].

式 (2.18) の右辺は、式 (2.14) より、次のようにできる。

$$\begin{aligned}
 R.H.S &= \frac{P(x_1, \beta_1)P(x_2, \beta_2) \cdots P(x_n, \beta_m) \cdots P(x_m, \beta_n) \cdots P(x_M, \beta_M)}{P(x_1, \beta_1)P(x_2, \beta_2) \cdots P(x_m, \beta_m) \cdots P(x_n, \beta_n) \cdots P(x_M, \beta_M)} \\
 &= \frac{P(x_n, \beta_m)P(x_m, \beta_n)}{P(x_m, \beta_m)P(x_n, \beta_n)} \\
 &= \frac{e^{-\{\beta_m \mathcal{H}(x_n) + \beta_n \mathcal{H}(x_m)\}}}{e^{-\{\beta_m \mathcal{H}(x_m) + \beta_n \mathcal{H}(x_n)\}}} \\
 &= e^{-(\beta_n - \beta_m)(\mathcal{H}(x_m) - \mathcal{H}(x_n))}
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

したがって、メトロポリス法におけるレプリカ m, n の交換確率は、

$$W_{RE}(x_m, x_n) = \min(1, e^{-\Delta}) \tag{2.20}$$

$$\Delta = (\beta_n - \beta_m)(\mathcal{H}(x_m) - \mathcal{H}(x_n)) \tag{2.21}$$

となる。ここで Δ は交換のコスト関数とよぶ。実際のシミュレーションでのレプリカの交換はレプリカ $m, m+1$ のように隣り合っているレプリカで実行する。図 2.4 にレプリカ交換モンテカルロ法の概念図を示す。

レプリカ交換の規則については、ランダムに交換するレプリカ対を選んだり、文献 [3] にあるように、次のように交互に交換する規則が用いられる。

1. すべての奇数の m について、 m 方向についてのレプリカ $m, m+1$ の交換を試みる、
2. すべての偶数の m について、 m 方向についてのレプリカ $m, m+1$ の交換を試みる。

この二つのステップを繰り返し、二つのステップの間で局所更新を実行する。

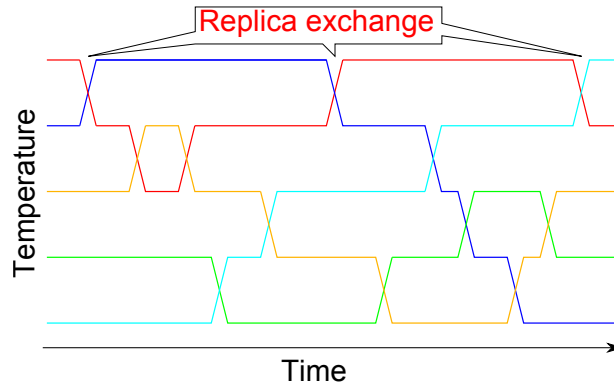


図 2.4: レプリカ交換法のイメージ。各色の線がレプリカの移動を表し、二つの色線が交わってるところがレプリカ交換が起きていることを表す。

2.2.2 マルチヒストグラム再重法

レプリカ交換モンテカルロ法を実行することによって得られる M 個のエネルギーヒストグラムから状態密度を推定する方法を紹介する [35]. もちろんシングルヒストグラム再重法でも状態密度を推定することができるが, この方法のほうが複数の逆温度の分布から推定することになるので, より正確な状態密度を推定することができる.

ある逆温度 β_m での分配関数 $Z(\beta_m)$ はエネルギー E ごとの状態密度 $g(E)$ より,

$$Z(\beta_m) = \sum_E g(E)e^{-\beta E} \quad (2.22)$$

となる. また, 状態密度はシミュレーションから得た逆温度 β_m ごとのエネルギー E についての規格化された頻度分布 $H_m(E)$ を用いて,

$$g(E) = \frac{\sum_m H_m(E)}{\sum_m e^{-\beta_m E} / Z(\beta_m)} \quad (2.23)$$

となる. 式 (2.22), (2.23) を全てのエネルギー E についての状態密度 $g(E)$ が収束するまで反復して計算することによって状態密度 $g(E)$ を推定する. この方法により, 定数倍を除いてシングルヒストグラム再重法より正確な状態密度を推定することができる.

さて, シミュレーションの結果から頻度分布 $H_m(E)$ は得られるが, 分配関数 Z が未知であるので状態密度 $g(E)$ を計算することはできない. そこで, 実際の実行において, 分配関数 Z は適当な初期値を設定して実行する.

2.2.3 熱力学的積分法

再重法とは別の状態密度を推定する手法として熱力学的積分法を使った方法を紹介する. 熱力学的積分法とは古くから統計物理で知られている自由エネルギーの計算手法である.

まず, 分配関数の値を計算する方法を考える. 式 (2.7) で定義した分配関数の対数をとって逆温度 β で微分すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) &= \frac{1}{Z(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_x \left(-\mathcal{H}(x) e^{-\beta \mathcal{H}(x)} \right) \\ &= \sum_x \frac{-\mathcal{H}(x) e^{-\beta \mathcal{H}(x)}}{Z(\beta)} \\ &= -\langle \mathcal{H}(x) \rangle_\beta \end{aligned} \quad (2.24)$$

となり, エネルギーの期待値で表せることがわかる. ここで $\langle \cdot \rangle_\beta$ は逆温度 β での期待値を表す. したがって, 逆温度 β_0 から β_* までの, 逆温度についての 1 次元積分は次のようにかける.

$$\log Z(\beta_*) - \log Z(\beta_0) = - \int_{\beta_0}^{\beta_*} \langle \mathcal{H}(x) \rangle_\beta d\beta. \quad (2.25)$$

つまり、エネルギーの期待値を積分することによって、分配関数を求めることができる。しかし、エネルギーの期待値は直接計算できない。そこで、必要な分点での期待値をシミュレーションで推定することにして、式 (2.25) を離散化した

$$\log Z(\beta_*) - \log Z(\beta_0) = - \sum_m \langle \mathcal{H}(x) \rangle_{\beta_m} \Delta\beta \quad (2.26)$$

などから分配関数の値を計算する⁶。ここで、 $\Delta\beta = \beta_{m+1} - \beta_m$ である。この分点についての期待値が一度のシミュレーションによって評価できるので、レプリカ交換モンテカルロ法と相性が良い。

次に、分配関数から状態密度を推定する方法を考える。式 (2.9) の β を $\beta \rightarrow \infty$ とすることを考えると、

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z(\beta) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \sum_E g(E) e^{-\beta E} = g(0) \quad (2.27)$$

となり、 $g(0)$ の値を得ることができる。よって、 $Z(\beta_0)$ が既知であるならば、熱力学的積分法で基底状態の状態密度を推定することができる。ただし、実際には逆温度が無大までの分点についてのエネルギーの期待値を計算することは不可能なので、状態がほとんど変化しない大きさの逆温度までについての積分を実行することになる。

2.2.4 レプリカ交換モンテカルロ法における交換確率一定法

レプリカ交換モンテカルロ法を実行する上で温度の設定は重要である。温度の間隔が離れすぎていると交換確率が低下してしまう。さらに、相転移付近では温度間隔を十分に小さくとらないと交換確率が急激に低下してしまう。これらの問題により、レプリカ交換が起きなくなってしまう、レプリカ交換モンテカルロ法が状態の混合に寄与しなくなってしまう。つまり、レプリカ交換モンテカルロ法による計算効率の向上が期待できなくなってしまう。

様々な観点からこれらの問題を解決する方法 [10, 11, 12, 13, 14, 15, 25] が考えられているが、ここでは最も一般的である Hukushima によるレプリカ交換の交換確率を一定にする設定方法 [10] を紹介する。

レプリカ m, n のレプリカ交換の交換確率はメトロポリス法であればコスト関数 (2.21) から計算される。このコスト関数が隣り合う 3 つのレプリカ $m-1, m, m+1$ の交換で等しくなることを考える。

まず、コスト関数からレプリカ $m-1, m$ の交換とレプリカ $m, m+1$ の交換において次の関係が成立するとする。

$$\begin{aligned} (\beta_{m-1} - \beta_m)[E(\beta_{m-1}) - E(\beta_m)] &= C, \\ (\beta_m - \beta_{m+1})[E(\beta_m) - E(\beta_{m+1})] &= C. \end{aligned} \quad (2.28)$$

ここで $E(\beta)$ は逆温度 β でのエネルギーの期待値、 C は定数である。また、 $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_m \leq \dots \leq \beta_M$ であるとする。式 (2.28) から C を消去し、整理すると、

$$\frac{\beta_{m-1}E(\beta_{m-1}) - \beta_{m+1}E(\beta_{m+1}) - E(\beta_m)(\beta_{m-1} - \beta_{m+1})}{E(\beta_{m-1}) - E(\beta_{m+1})} = \beta_m \quad (2.29)$$

⁶台形近似やシンプソン公式の方が良いであろう。この離散化についてはいくつかの方法が議論されている [36, 37]。

となる. 式 (2.29) の左辺を関数 $f(\beta_m)$ とおき, $\beta_m = f(\beta_m)$ を反復して解くことを考える. 関数 $f(\beta_m)$ は $f(\beta_{m-1}) = \beta_{m+1}$, $f(\beta_{m+1}) = \beta_{m-1}$ と周期 2 の周期点をもつので, $f(\beta_m)$ は反発的固定点をもつ関数であると考えられる. したがって, 次の計算を繰り返し, β_m が収束するまで反復することで, レプリカ $m-1, m$ とレプリカ $m, m+1$ の交換確率を一定にする逆温度 β_m とすることができる.

$$\beta_m^{t+1} = \frac{1}{2} [\beta_m^t + f(\beta_m^t)]. \quad (2.30)$$

ここで添字 t は反復回数を意味する. 実際に温度を調節するときには, 式 (2.30) を逆温度 β_m の添字 m に関して全ての偶数番目と全ての奇数番目を交互に収束するまで実行する.

エネルギーの期待値を評価する方法を考えておこう. エネルギーの期待値はモンテカルロシミュレーションのサンプル平均で評価できるが, この方法では逆温度を更新するたびにモンテカルロシミュレーションを実行する必要があるため, 更新のたびに相当な計算時間が必要となる. そこで, エネルギーの期待値は, エネルギー E についての状態密度 $g(E)$ から評価することにしよう. ここでの状態密度 $g(E)$ は短いモンテカルロシミュレーションを実行した結果から再重法で求めておくことにする. 具体的なエネルギーの期待値計算は, 式 (2.24) の和を状態 x ではなく, 式 (2.9) の最右辺のエネルギー E の和に書き換えた次の式を用いて計算する.

$$E(\beta) = \langle \mathcal{H}(x) \rangle_\beta = \sum_E \frac{E g(E) e^{-\beta E}}{Z(\beta)}. \quad (2.31)$$

2.2.5 PT_τ アルゴリズム

2 次相転移を含む範囲でレプリカ交換モンテカルロ法を実行し, あるレプリカの軌跡として $t - \beta$ 図を描いたときに, ブロック構造ができてしまうことが Bittner らによって指摘された [12]. ここで, t はレプリカ交換回数 (時間), β は逆温度である. この構造は, レプリカ交換の確率が十分に高く, レプリカ交換が頻繁に起こっていても, レプリカの逆温度空間の移動で見ると相転移点付近でレプリカの移動が反射してしまうことによって発生する. ここではブロック構造を解消するために, レプリカ交換のスケジュールに Bittner らによる PT_τ アルゴリズム [12] を用いる方法を紹介する.

PT_τ アルゴリズムの要請は, レプリカ交換を試みるまでの局所更新回数を $N_{\text{local}}(\beta) \times \text{MCS}^7$ としたときに, $N_{\text{local}}(\beta)$ をその逆温度 β での自己相関時間 $\tau(\beta)$ に比例するように設定することである. つまり, レプリカ交換までの局所更新のスケジュールとして, $N_{\text{local}}(\beta) = A\tau(\beta)$ と設定することである. ここで, A は定数である. ある程度の大きさの定数 A を設定することで, ブロック構造をなくすことができる. ただし, 転移点付近では自己相関時間が増大することから計算時間が大きく増加してしまうことになるため, 計算時間との兼ね合いで定数 A を設定する必要がある.

自己相関時間を簡単に説明する. ある物理量 O の自己相関関数 $C(t)$ は次のように時間 t で減少することが知られている.

$$C(t) \simeq e^{-t/\tau}. \quad (2.32)$$

⁷MCS はモンテカルロステップのこと. 1MCS は系のすべての確率変数の数の回数の局所更新をする手続きのこと.

ここでの τ が自己相関時間である。つまり、自己相関時間 τ とは相関の減少を特徴づけるパラメータである。

さらに、自己相関時間をシミュレーションより推定する方法を紹介する [38]。まず、自己相関関数 $C(t)$ は次の式から推定できる。

$$\overline{C(t)} = \frac{1}{N - |t|} \sum_{s=1}^{N-|t|} (O_s - \overline{O}) (O_{s+|t|} - \overline{O}). \quad (2.33)$$

ここで、 N は総サンプル数、 O_* は時間 $*$ のサンプル、 t は時間である。また、 \overline{O} は次のようにサンプル平均で評価した値である。

$$\overline{O} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N O_t. \quad (2.34)$$

式 (2.33) の自己相関関数を次のように規格化する。

$$\overline{\rho(t)} = \frac{\overline{C(t)}}{\overline{C(0)}}. \quad (2.35)$$

この規格化した自己相関関数を用いて、次のように自己相関時間を計算できることが知られている [39]。

$$\overline{\tau_{\text{int}}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\alpha \overline{\tau_{\text{int}}}} \overline{\rho(t)}. \quad (2.36)$$

ここで、 α は適当な小さな数 (4 や 5 のような) である。 $\overline{\tau_{\text{int}}}$ は計算前には不明な値であるので、実際には値がある程度収束するまで和を実行することになる。また、次の式を使った方法でも計算できる。

$$\overline{\tau_{\text{exp}}} = \frac{t}{|\log |\overline{\rho(t)}||}. \quad (2.37)$$

この式 (2.37) の t がある程度の大きさのところを推定値とする。ただし、必要以上に t が大きいと大きなノイズが出てしまうので、 t を大きく取り過ぎないように注意する必要がある。なお、一般には真の τ と τ_{int} , τ_{exp} には $\tau \geq \tau_{\text{exp}} \geq \tau_{\text{int}}$ の関係が成立するとされる。

2.2.6 レプリカ交換モンテカルロ法による状態密度推定の実行手順

レプリカ交換モンテカルロ法による状態密度 $g(E)$ を推定する手順を以下に述べる。

1. 全てのレプリカの状態を初期化し、温度を設定する。
2. 各レプリカをマルコフ連鎖モンテカルロ法で更新し、適当なタイミングでレプリカ交換を実行する。
3. 各温度ごとのエネルギー E についてのヒストグラムを適当なタイミングで更新する。
4. 2 と 3 を繰り返す。
5. 得られたヒストグラムから再重法や熱力学的積分法で状態密度を推定する。

以上の手順で推定する。必要に応じて、1. の温度の設定で交換確率一定法を予備実験として実行し、2. で PT_τ アルゴリズムを用いる。

2.3 多次元レプリカ交換モンテカルロ法

レプリカ交換モンテカルロ法は、温度ごとの状態をレプリカ交換によって混ぜることで系の高速な緩和を実現し、目的とするエネルギーの分布から効率的にサンプリングする手法であった。レプリカ交換モンテカルロ法では、目的とする分布が多次元で複数の結合定数などのパラメータをもつような系の分布となったときに、ある結合定数に大きく依存するような状態をサンプルすることは難しい。また、レプリカ交換モンテカルロ法では、設定した温度（パラメータ）の範囲に転移点があると転移点付近ではレプリカ交換が上手く機能しないとされている。そこで、レプリカ系を構成するパラメータの空間を多次元に拡張することによって、目的とした多次元分布からサンプルする効率を向上させる多次元レプリカ交換モンテカルロ法を紹介する。

多次元レプリカ交換モンテカルロ法では、レプリカがレプリカ交換によってパラメータ空間を移動する際に転移線を回り込む効果を期待することができるため、レプリカ交換が上手く機能しない問題を避けることができ、レプリカ交換の計算効率改善の効果を期待することができる。なお、転移線を回り込む効果がある他の拡張アンサンブルモンテカルロ法としては Simulated Tempering を多次元に拡張した方法が知られている [40, 41]。

2.3.1 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る。次のハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H}(x, J_1, \dots, J_K) = \sum_{k=1}^K J_k E_k(x). \quad (2.38)$$

ここで、 x は状態、 J_k は結合定数、 E_k は相互作用エネルギーである。ここでは温度を固定し、結合定数の組 $\vec{J} = (J_1, \dots, J_K)$ が異なる多次元レプリカ系を考える。多次元レプリカ交換モンテカルロ法では、相互作用のない $M_1 \times M_2 \times \dots \times M_K$ 個のレプリカで系が構成され、個々のレプリカはそれぞれ異なる結合定数の組 $\vec{J}_{m_1, \dots, m_K} = (J_{1m_1, \dots, m_K}, J_{2m_1, \dots, m_K}, \dots, J_{Km_1, \dots, m_K})$ をもつ。もちろんレプリカに対して結合定数の組は 1 対 1 対応する。

ここ以降は $m = m_1, n = m_2$ とし、2次元で考えることとし、次のハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H}(x, J_1, J_2) = J_1 E_1(x) + J_2 E_2(x). \quad (2.39)$$

ここでの多次元レプリカ系は $M \times N$ 個の異なる結合定数をもつ相互作用のない $M \times N$ 個のレプリカで構成される。そして、図 2.5 の右図のようにパラメータ空間に 2次元的にレプリカが配置される。

ハミルトニアン (2.39) がもつ結合定数 J_1, J_2 について、 J_1 に M 個、 J_2 に N 個、合計 $M \times N$ 個のレプリカをもつ多次元レプリカ系を構成することを考えよう。ここでは、状態 x_{mn} のように、あるレプリカ (m, n) を添字 mn で表すこととし、 $M \times N$ 個の状態などについて、 $\{x\} = \{x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1N}, x_{21}, \dots, x_{MN}\}$ のように書くことにする。レプリカ交換モンテカルロ法のとくと同様に系全体の確率分布 $P(\{x\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})$ は次のように個々の

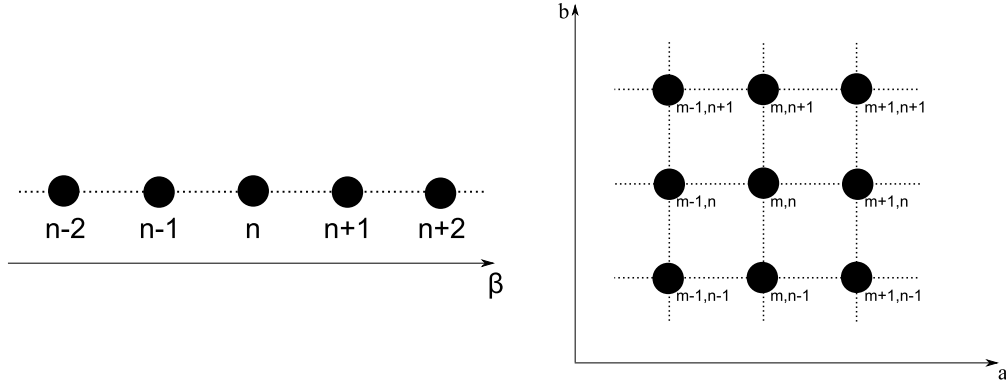


図 2.5: (左) レプリカ交換モンテカルロと (右) 多次元レプリカ交換モンテカルロ法のレプリカの配置のイメージ. レプリカ交換モンテカルロ法では温度空間に対して 1 次元に配置されるのに対して, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法では複数のパラメータについて (ここではパラメータ a, b) 多次元に配置される.

レプリカの確率分布の直積から定義される.

$$P(\{x\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\}) = \prod_{m,n}^{M,N} P(x_{mn}, \beta, J_{1mn}, J_{2mn}) = \prod_{m,n}^{M,N} \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn})}}{Z(\beta, J_{1mn}, J_{2mn})}. \quad (2.40)$$

ここで $P(x_{mn}, \beta, J_{1mn}, J_{2mn})$ はレプリカ (m, n) の確率分布, $\mathcal{H}(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn})$ はレプリカ (m, n) のハミルトニアン, $Z(\beta, J_{1mn}, J_{2mn})$ はレプリカ (m, n) の分配関数を表す.

レプリカ交換の遷移確率はレプリカ交換モンテカルロ法のととき同様の議論が成り立つ. よって, ここでの系の詳細釣り合い条件から, レプリカの交換確率を考えてみることにする⁸. まず, 詳細釣り合い条件は分布 (2.40) から次のようになる.

$$P(\{x\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})W(\{x\}; \{x'\}) = P(\{x'\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})W(\{x'\}; \{x\}). \quad (2.41)$$

この詳細釣り合い条件を具体的にレプリカ (m, n) とレプリカ (m', n') についての交換について考える. 式 (2.41) を交換に関して具体的に書くと次のようになる.

$$\begin{aligned} & P(\{\dots, x_{mn}, \dots, x_{m'n'}, \dots\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})W(x_{mn}, x_{m'n'}) \\ & = P(\{\dots, x_{m'n'}, \dots, x_{mn}, \dots\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})W(x_{m'n'}, x_{mn}). \end{aligned} \quad (2.42)$$

ここで $W(x_{mn}, x_{m'n'})$ はレプリカ (m, n) と (m', n') の交換確率である. これをメトロポリス法として扱うことを考え次のように変形する.

$$\frac{W(x_{mn}, x_{m'n'})}{W(x_{m'n'}, x_{mn})} = \frac{P(\{\dots, x_{m'n'}, \dots, x_{mn}, \dots\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})}{P(\{\dots, x_{mn}, \dots, x_{m'n'}, \dots\}; \beta; \{J_1\}; \{J_2\})}. \quad (2.43)$$

⁸詳細釣り合いを満たさない方法も考案されている [26].

式 (2.43) の右辺は、式 (2.40) より次のようにできる。

$$\begin{aligned}
R.H.S &= \frac{P(x_{11}, \beta, J_{111}, J_{211}) \cdots P(x_{m'n'}, \beta, J_{1mn}, J_{2mn}) \cdots}{P(x_{11}, \beta, J_{111}, J_{211}) \cdots P(x_{mn}, \beta, J_{1mn}, J_{2mn}) \cdots} \\
&\quad \times \frac{P(x_{mn}, \beta, J_{1m'n'}, J_{2m'n'}) \cdots P(x_{MN}, \beta, J_{1MN}, J_{2MN})}{P(x_{m'n'}, \beta, J_{1m'n'}, J_{2m'n'}) \cdots P(x_{MN}, \beta, J_{1MN}, J_{2MN})} \\
&= \frac{P(x_{m'n'}, \beta, J_{1mn}, J_{2mn}) P(x_{mn}, \beta, J_{1m'n'}, J_{2m'n'})}{P(x_{mn}, \beta, J_{1mn}, J_{2mn}) P(x_{m'n'}, \beta, J_{1m'n'}, J_{2m'n'})} \\
&= \frac{e^{-\beta\{\mathcal{H}(x_{m'n'}, J_{1mn}, J_{2mn}) + \mathcal{H}(x_{mn}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'})\}}}{e^{-\beta\{\mathcal{H}(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn}) + \mathcal{H}(x_{m'n'}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'})\}}} \\
&= e^{-\beta\{\mathcal{H}(x_{m'n'}, J_{1mn}, J_{2mn}) + \mathcal{H}(x_{mn}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'}) - \mathcal{H}(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn}) - \mathcal{H}(x_{m'n'}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'})\}}.
\end{aligned} \tag{2.44}$$

したがって、メトロポリス法におけるレプリカ (m, n) と (m', n') の交換確率は、

$$W_{\text{MDRE}}(x_{mn}, x_{m'n'}) = \min(1, e^{-\Delta}), \tag{2.45}$$

$$\begin{aligned}
\Delta &= \beta\{\mathcal{H}(x_{m'n'}, J_{1mn}, J_{2mn}) + \mathcal{H}(x_{mn}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'}) \\
&\quad - \mathcal{H}(x_{mn}, J_{1mn}, J_{2mn}) - \mathcal{H}(x_{m'n'}, J_{1m'n'}, J_{2m'n'})\}
\end{aligned} \tag{2.46}$$

となる。ここで Δ は交換のコスト関数とよぶ。実際のシミュレーションにおいてはレプリカ (m, n) と $(m+1, n)$ やレプリカ (m, n) と $(m, n+1)$ のように隣り合っているレプリカで交換を実行する。

レプリカ交換の交換規則については文献 [8, 9] では議論されていないので、交換するレプリカ対をランダムに選んだり、適当な交換規則を作ることが考えられる。本研究におけるレプリカ交換の実行手順は、次の規則によって実行する (図 2.6 を参照)。

1. すべての奇数の n について、 m 方向についてのレプリカ (m, n) と $(m+1, n)$ の交換を試みる、
2. すべての偶数の n について、 m 方向についてのレプリカ (m, n) と $(m+1, n)$ の交換を試みる、
3. すべての奇数の m について、 n 方向についてのレプリカ (m, n) と $(m, n+1)$ の交換を試みる、
4. すべての偶数の m について、 n 方向についてのレプリカ (m, n) と $(m, n+1)$ の交換を試みる。

そして、各ステップの間で局所更新を実行する。

2.3.2 マルチパラメータマルチヒストグラム再重法

多次元レプリカ交換モンテカルロ法を実行することによって得られた $M \times N$ 個の相互作用エネルギーのヒストグラムから多次元状態密度を推定する方法を紹介する [35, 42, 43]。

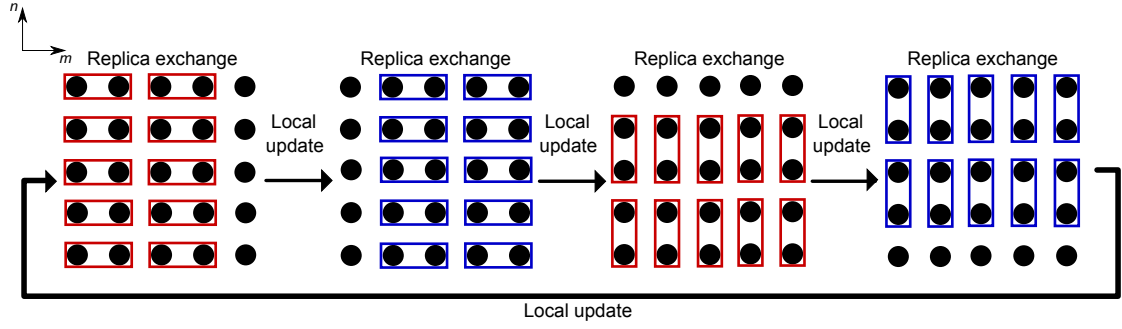


図 2.6: 多次元レプリカ交換モンテカルロ法におけるレプリカ交換の試行の実行順. 黒点がレプリカを表す. レプリカ交換をするときは赤や青の四角形の中にある全てのレプリカ対のレプリカ交換を試みる.

まず, ある逆温度 β とある結合定数の組 (J_{1mn}, J_{2mn}) での分配関数 $Z(\beta, J_{1mn}, J_{2mn})$ は相互作用エネルギー E_1, E_2 ごとの状態密度 $g(E_1, E_2)$ より,

$$Z(\beta, J_{1mn}, J_{2mn}) = \sum_{E_1, E_2} g(E_1, E_2) e^{-\beta(J_{1mn}E_1 + J_{2mn}E_2)} \quad (2.47)$$

となる. また, 状態密度はシミュレーションから得た結合定数の組 (J_{1mn}, J_{2mn}) ごとの相互作用エネルギー E_1, E_2 についての規格化された頻度分布 $H_{mn}(E_1, E_2)$ を用いて,

$$g(E_1, E_2) = \frac{\sum_{m,n} H_{mn}(E_1, E_2)}{\sum_{m,n} e^{-\beta(J_{1mn}E_1 + J_{2mn}E_2)} / Z(\beta, J_{1mn}, J_{2mn})} \quad (2.48)$$

となる. これらの式 (2.47), (2.48) を収束するまで反復することによって, 定数倍を除いた状態密度を推定することができる.

2.3.3 多次元レプリカ交換モンテカルロ法による状態密度推定の実行手順

多次元レプリカ交換モンテカルロ法による状態密度 $g(E_1, E_2)$ を推定する手順を以下に述べる.

1. 全てのレプリカの状態を初期化し, 結合定数を設定する.
2. 各レプリカの状態をマルコフ連鎖モンテカルロ法で更新し, 適当なタイミングでレプリカ交換を実行する.
3. 各結合定数ごとの相互作用エネルギー E_1, E_2 のヒストグラムを適当なタイミングで更新する.
4. 2 と 3 を繰り返す.
5. 得られたヒストグラムから再重法で状態密度を推定する.

以上の手順で推定する. 必要に応じて, 2. で PT_τ アルゴリズムを用いる.

3 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効率の改善

3.1 はじめに

レプリカ交換モンテカルロ法は容易に実装することができ、かつ、サンプリング効率を大きく改善することができるので、同一計算時間における計算精度を高める手法であるが、より精度を高めるには各レプリカの温度などのパラメータの設定と交換スケジュールが重要である。そのためレプリカ交換モンテカルロ法の利用に関して、様々なパラメータの設定法や交換スケジュールを最適にする方法が研究されている [10, 11, 12, 13, 14, 15]。もちろん、レプリカ交換モンテカルロ法の単純な拡張である多次元レプリカ交換モンテカルロ法も、各レプリカのパラメータの設定や交換スケジュールは重要である。しかし、多次元レプリカ交換モンテカルロ法ではパラメータの設定法やレプリカ交換に関する研究はほとんどなされていない。多次元レプリカ交換モンテカルロ法のレプリカ交換の効率を改善する手法としては、レプリカ置換法 [25] を多次元レプリカ交換モンテカルロ法に拡張した手法 [26] が知られているが、効率のよいパラメータの設定法については議論されていない。そこで、多次元レプリカ交換モンテカルロ法において交換確率を一定にするパラメータの設定手法を開発し、その手法と Bittner らの提案した交換スケジュールである PT_τ アルゴリズム [12] を組み合わせた手法を提案する。

3.2 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

2.2.4 節で紹介した Hukushima によ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 [10] 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で交換確率一定とするパラメータの設定を実現する。2.2.4 節では逆温度 β を再設定することによってレプリカ交換の交換確率を一定にしていたが、ここでは結合定数の組を再設定することによって交換確率を一定にする。

ここでは、次の二つの結合定数 J_1, J_2 をもつハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H} = J_1 E_1 + J_2 E_2. \quad (3.1)$$

ここで、 E_1, E_2 は相互作用エネルギーを表す。このハミルトニアンの結合定数 J_1, J_2 について多次元レプリカ系を構成することを考える。結合定数 J_1 について M 個、結合定数 J_2 について N 個、全体で $M \times N$ 個のレプリカの系としよう。そして、あるレプリカ (m, n) のハミルトニアンを次のように表すことにする。

$$\mathcal{H}_{mn} = J_{1m,n} E_{1m,n} + J_{2m,n} E_{2m,n}. \quad (3.2)$$

ここで、 $J_{1m,n}, J_{2m,n}$ はレプリカ (m, n) の結合定数、 $E_{1m,n}, E_{2m,n}$ はレプリカ (m, n) の相互作用エネルギーである。さらに、結合定数と相互作用エネルギーを $\vec{J}_{m,n} = (J_{1m,n}, J_{2m,n})$, $\vec{E}_{m,n} = (E_{1m,n}, E_{2m,n})$ とベクトルで表すことにする。また、 $J_{11,n} \leq J_{12,n} \leq \dots \leq J_{1M,n}$ と $J_{2m,1} \leq J_{2m,2} \leq \dots \leq J_{2m,N}$ が成立しているとする。

さて、Hukushima による交換確率一定法 [10] を多次元レプリカ交換モンテカルロ法に拡張することを考えよう。 m 方向について、レプリカ $(m-1, n), (m, n), (m+1, n)$ を用い

て、レプリカ (m, n) の結合定数を更新することを考える。まず、隣り合う3つのレプリカ $(m-1, n)$, (m, n) , $(m+1, n)$ の交換において、 $(m-1, n)$ と (m, n) の交換確率と、 (m, n) と $(m+1, n)$ の交換確率が同じであると考え。ここで、交換確率を等しくするレプリカ (m, n) の結合定数を $\vec{J}_{m,n}$ とする。多次元レプリカ交換モンテカルロ法のコスト関数より、次が成立すると考える。

$$\begin{aligned} & (\vec{J}_{m-1,n} \cdot \vec{E}_{m-1,n} + \vec{J}_{m,n} \cdot \vec{E}'_{m,n} - \vec{J}_{m,n} \cdot \vec{E}_{m-1,n} - \vec{J}_{m-1,n} \cdot \vec{E}'_{m,n}) \\ & = (\vec{J}_{m,n} \cdot \vec{E}'_{m,n} + \vec{J}_{m+1,n} \cdot \vec{E}_{m+1,n} - \vec{J}_{m+1,n} \cdot \vec{E}'_{m,n} - \vec{J}_{m,n} \cdot \vec{E}_{m+1,n}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

ここで、相互作用エネルギー \vec{E} は期待値として評価する。式 (3.3) を整理して次のようにする。

$$(\vec{E}_{m+1,n} - \vec{E}_{m-1,n}) \cdot \vec{J}_{m,n} = (\vec{E}_{m+1,n} - \vec{E}'_{m,n}) \cdot \vec{J}_{m+1,n} - (\vec{E}_{m-1,n} - \vec{E}'_{m,n}) \cdot \vec{J}_{m-1,n}. \quad (3.4)$$

この式 (3.4) だけでは $\vec{J}_{m,n}$ について解くための条件が不足している。そこで、 $\vec{J}_{m,n}$ は現在の $\vec{J}_{m,n}$ から、レプリカ $(m-1, n)$, $(m+1, n)$ の結合定数のなす直線に、平行に移動した位置にあるとして、次の式を条件として付け加える。

$$\vec{J}_{m,n} = \vec{J}_{m,n} + s(\vec{J}_{m+1,n} - \vec{J}_{m-1,n}). \quad (3.5)$$

ここで、 s は実数パラメータである。式 (3.4), (3.5) を s について解くと次のようになる。

$$s_{m*} = \frac{(\vec{E}_{m+1,n} - \vec{E}'_{m,n}) \cdot \vec{J}_{m+1,n} - (\vec{E}_{m-1,n} - \vec{E}'_{m,n}) \cdot \vec{J}_{m-1,n} - (\vec{E}_{m+1,n} - \vec{E}_{m-1,n}) \cdot \vec{J}_{m,n}}{(\vec{E}_{m+1,n} - \vec{E}_{m-1,n}) \cdot (\vec{J}_{m+1,n} - \vec{J}_{m-1,n})}. \quad (3.6)$$

式 (3.5) に式 (3.6) を代入することとし、それを次のように関数 \vec{f}_m と定義する。

$$\vec{J}_{m,n} = \vec{f}_m(\vec{J}_{m,n}) = \vec{J}_{m,n} + s_{m*}|_{\vec{E}'=\vec{E}} \cdot (\vec{J}_{m+1,n} - \vec{J}_{m-1,n}) \quad (3.7)$$

ここで、 $\vec{E}'_{m,n}$ は求めることができないので $\vec{E}_{m,n}$ を用いることとする。関数 \vec{f}_m は図 3.1 のように式 (3.3) と式 (3.5) を満たす $\vec{J}_{m,n}$ を計算する。さらに、 n 方向のときも同様の議論から次の関数 \vec{f}_n を定義する。

$$\vec{J}_{m,n} = \vec{f}_n(\vec{J}_{m,n}) = \vec{J}_{m,n} + s_{n*}|_{\vec{E}'=\vec{E}} \cdot (\vec{J}_{m,n+1} - \vec{J}_{m,n-1}), \quad (3.8)$$

$$s_{n*} = \frac{(\vec{E}_{m,n+1} - \vec{E}'_{m,n}) \cdot \vec{J}_{m,n+1} - (\vec{E}_{m,n-1} - \vec{E}'_{m,n}) \cdot \vec{J}_{m,n-1} - (\vec{E}_{m,n+1} - \vec{E}_{m,n-1}) \cdot \vec{J}_{m,n}}{(\vec{E}_{m,n+1} - \vec{E}_{m,n-1}) \cdot (\vec{J}_{m,n+1} - \vec{J}_{m,n-1})}. \quad (3.9)$$

関数 \vec{f}_m , \vec{f}_n は結合定数の更新に関する三つのレプリカの結合定数の組が一直線上に存在するのであれば周期 2 の固定点をもつ関数となるが、結合定数が一直線上とは限らないため、結合定数の大小関係が保たれなくなることが考えられる。そこで、次の位置補正関数 \vec{f}_{corr} を定義する。

$$\vec{f}_{\text{corr}}(\vec{J}_{m,n}) = \frac{1}{4} \left(\vec{J}_{m-1,n} + \vec{J}_{m+1,n} + \vec{J}_{m,n-1} + \vec{J}_{m,n+1} \right). \quad (3.10)$$

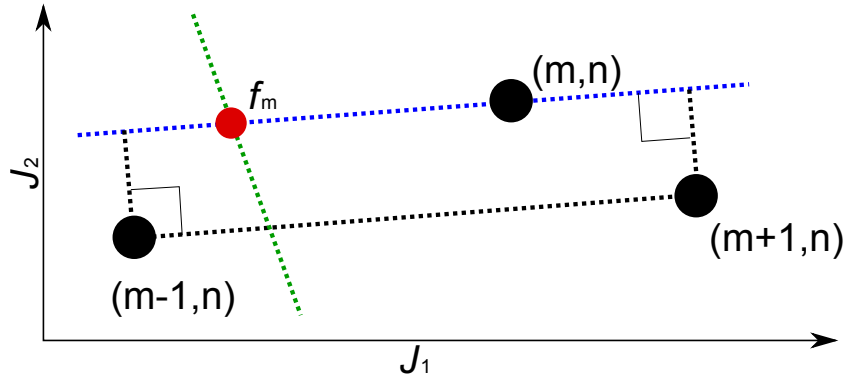


図 3.1: 関数 f_m から計算される $\vec{J}_{m,n}^t$ のイメージ. 緑線は式 (3.3), 青線は式 (3.5) を満たす位置を表す. 結果的に赤点の位置が計算される.

これら三つの関数 (3.7), (3.8), (3.10) を用いて, 次の計算を繰り返し, $\vec{J}_{m,n}$ を更新する (図 3.2 を参照).

$$\vec{J}_{m,n}^{t+1} = \frac{1}{2} \vec{J}_{m,n}^t + \frac{1}{2} \left\{ (1-w) \frac{\vec{f}_m(\vec{J}_{m,n}^t) + \vec{f}_n(\vec{J}_{m,n}^t)}{2} + w \vec{f}_{\text{corr}}(\vec{J}_{m,n}^t) \right\}. \quad (3.11)$$

ここで添字 t は更新回数, w は $0 \leq w \leq 1$ の値をとる定数パラメータである. 基本的には $w = 0$ とするが, 結合定数を更新していく途中で, 結合定数の値を調節したい範囲から大きく外れることがあれば, w の値を調節する. 式 (3.11) を繰り返し, $\vec{J}_{m,n}$ が収束するまで

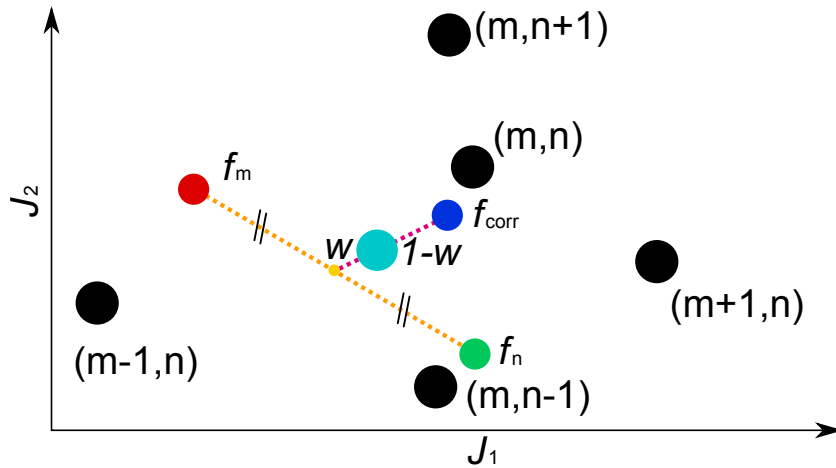


図 3.2: 式 (3.11) の波括弧部分で計算される位置のイメージ. 三つの関数 f_m , f_n , f_{corr} より水色の点が計算され, 現在の位置と水色の点の midpoint が更新位置として提案される.

実行することで, レプリカ $(m-1, n), (m, n)$ でのコスト関数とレプリカ $(m, n), (m+1, n)$ でのコスト関数, レプリカ $(m, n-1), (m, n)$ でのコスト関数とレプリカ $(m, n), (m, n+1)$ でのコスト関数をそれぞれ等しくする $\vec{J}_{m,n}$ に調節する. また, レプリカ (m, n) が m 方向

や n 方向の端であったときの更新は, m 方向の端のとき,

$$\vec{J}_{m,n}^{t+1} = \frac{1}{2} \left\{ \vec{J}_{m,n}^t + \vec{f}_n(\vec{J}_{m,n}^t) \right\}, \quad (3.12)$$

n 方向の端のとき,

$$\vec{J}_{m,n}^{t+1} = \frac{1}{2} \left\{ \vec{J}_{m,n}^t + \vec{f}_m(\vec{J}_{m,n}^t) \right\}, \quad (3.13)$$

を用いて, 収束するまで $\vec{J}_{m,n}$ を更新する.

結合定数の更新をするときは, 図 3.3 に示すようにチェッカーボードのようにレプリカを白と黒などの 2 色に色分けすることを考える. 更新は 2 色に塗り分けたレプリカについて色ごとに交互に結合定数が収束するまで実行する. その結果, n を固定したときの m 方向,

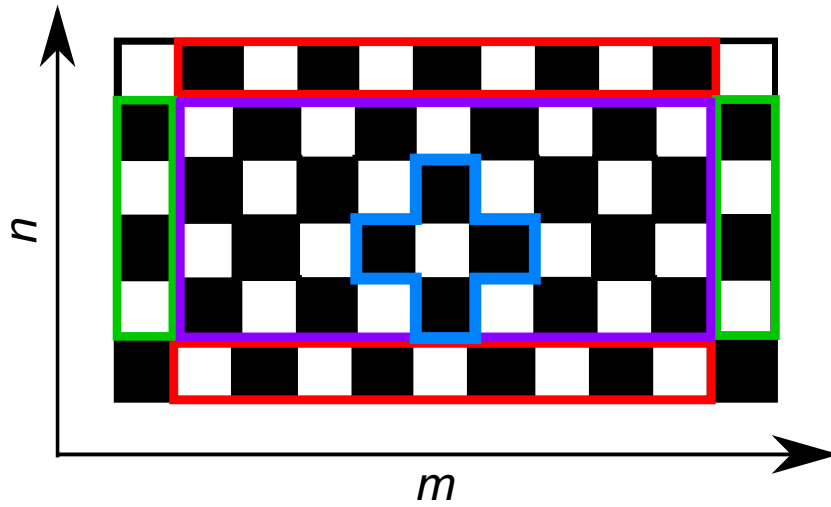


図 3.3: レプリカの色分け. それぞれの白と黒のセルには 1 つのレプリカが対応する. 紫色の枠内では式 (3.11) で青色の枠内の白セルのように隣接しているレプリカの結合定数の組を用いて更新する. 緑色の枠内は式 (3.12), 赤色の枠内は式 (3.13) で更新する. 四隅は更新を実行しない.

n を固定したときの m 方向についての交換確率を一定にすることができる. また, 相互作用エネルギーは, 短いシミュレーションを実行した結果から再重法で状態密度を求めておき, その状態密度から期待値で評価する.

詳しく結合定数 J_1, J_2 についての相互作用エネルギーを評価する方法を考えてみる. まず, 分配関数 Z は次のように相互作用エネルギー E_1, E_2 についての状態密度 $g(E_1, E_2)$ から計算することができる.

$$Z(\beta, J_1, J_2) = \sum_{E_1, E_2} g(E_1, E_2) e^{-\beta(J_1 E_1 + J_2 E_2)}. \quad (3.14)$$

次に, 次の式で定義される自由エネルギー F を導入する.

$$F(\beta, J_1, J_2) = -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta, J_1, J_2). \quad (3.15)$$

自由エネルギー F を J_1 で微分すると,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial J_1} F(\beta, J_1, J_2) &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_1} \log Z(\beta, J_1, J_2) \\
&= -\frac{1}{\beta Z(\beta, J_1, J_2)} \frac{\partial}{\partial J_1} Z(\beta, J_1, J_2) \\
&= -\frac{1}{\beta Z(\beta, J_1, J_2)} \frac{\partial}{\partial J_1} \sum_{E_1, E_2} g(E_1, E_2) e^{-\beta(J_1 E_1 + J_2 E_2)} \\
&= \frac{1}{Z(\beta, J_1, J_2)} \sum_{E_1, E_2} E_1 g(E_1, E_2) e^{-\beta(J_1 E_1 + J_2 E_2)} \\
&= \sum_{E_1, E_2} \frac{E_1 g(E_1, E_2) e^{-\beta(J_1 E_1 + J_2 E_2)}}{Z(\beta, J_1, J_2)} \\
&= \langle E_1 \rangle
\end{aligned} \tag{3.16}$$

となり, ある結合定数と逆温度のもとでの相互作用エネルギー E_1 の期待値を求めることができる. 同様に, 自由エネルギー F を J_2 で微分すると, 相互作用エネルギー E_2 の期待値を求めることができる.

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の実行手順を以下に示す.

1. 全てのレプリカの状態を初期化し, 結合定数を設定する.
2. モンテカルロシミュレーションを実行する.
3. 再重法で状態密度を計算する.
4. 状態密度から相互作用エネルギーの期待値を計算する.
5. 提案手法でレプリカの位置を更新する. このとき 2 色に塗り分けたレプリカの結合定数を色ごとに交互に更新する.
6. 4 と 5 を結合定数が収束するまで繰り返す.

以上の手順により, 結合定数を更新することによって, レプリカ交換の交換確率を一定にする結合定数の設定を実現する.

3.3 提案手法

多次元レプリカ交換モンテカルロ法のレプリカ交換効率を改善する方法を考える. 2.2.5 節で紹介したように, レプリカ交換モンテカルロ法において交換確率を一定にしてもレプリカの軌跡を見たときに, レプリカが転移点付近で反射してしまうことが知られている [12]. この現象は 2.2.5 節で紹介した Bittner らによる PT_τ アルゴリズムで解消させることができる. 多次元レプリカ交換モンテカルロ法でもレプリカ交換モンテカルロ法と同様にレプリカの移動が転移線付近で反射してしまうことが考えられる. そこで, 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と PT_τ アルゴリズムを組み合わせた手法を提案する.

具体的な方法は次のとおりである.

1. 全てのレプリカの状態を初期化し, 結合定数を設定する.
2. 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実行する.
3. 2. で得た結合定数についての自己相関時間を計算する.
4. 本走を実行する. その際, 3. で得た自己相関時間を用いて PT_r アルゴリズムを用いる.

この方法が本研究で提案する手法である.

3.4 Spin-1 Blume-Capel モデルへの応用

ここでは spin-1 Blume-Capel モデル [44, 45] を用いて, 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がレプリカ交換の交換確率を一定にする結合定数設定を実現するかを検証し, 提案手法のレプリカ交換の効率についてレプリカの往復時間 (τ_{rt}) を用いて議論する. ここでは逆温度 $\beta = 1$ としている.

3.4.1 Spin-1 Blume-Capel モデル

Spin-1 Blume-Capel(BC) モデルは古典スピン系のモデルであり, Blume によって提案され [44], Capel によって発展した [45] モデルである. BC モデルのハミルトニアンは次のように定義されている.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + D \sum_i \sigma_i^2. \quad (3.17)$$

ここで, J, D は結合定数 (D はシングルスピン異方性パラメータともよばれる), σ は $-1, 0, 1$ の値をとるスピン変数である. また, 式 (3.17) の右辺第一項の和は, 全ての最近傍スピンペアの和をとることを表している. BC モデルについては平均場理論 [44, 45], モンテカルロ法 [46, 47, 48], 高温展開と低温展開 [49], くりこみ群理論 [50], 有限サイズスケールリング [51, 52] などの様々な方法で研究されており, 図 3.4 の相図のように, 1 次転移線, 2 次転移線, 3 重点をもち, 転移線によって強磁性 (秩序) 相と常磁性相に分かれていることが知られている.

3.4.2 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検証

BC モデルのハミルトニアンの結合定数 J, D について, J は M 個, D は N 個, 合計 $M \times N$ 個のレプリカからなる多次元レプリカ系を構成する. また, 交換確率一定法における相互作用エネルギー E_1, E_2 と結合定数 J_1, J_2 については, BC モデルのハミルトニアンから次のように定義する.

$$E_1 = \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad E_2 = \sum_i \sigma_i^2, \\ J_1 = J, \quad J_2 = D.$$

スピンは 2 次元の周期境界をもつ正方格子の頂点に配置される. サイズ $l \times l$ の正方格子のとき, E_1 の範囲は $-2l^2 \leq E_1 \leq 2l^2$ となり, E_2 の範囲は $0 \leq E_2 \leq l^2$ となる.

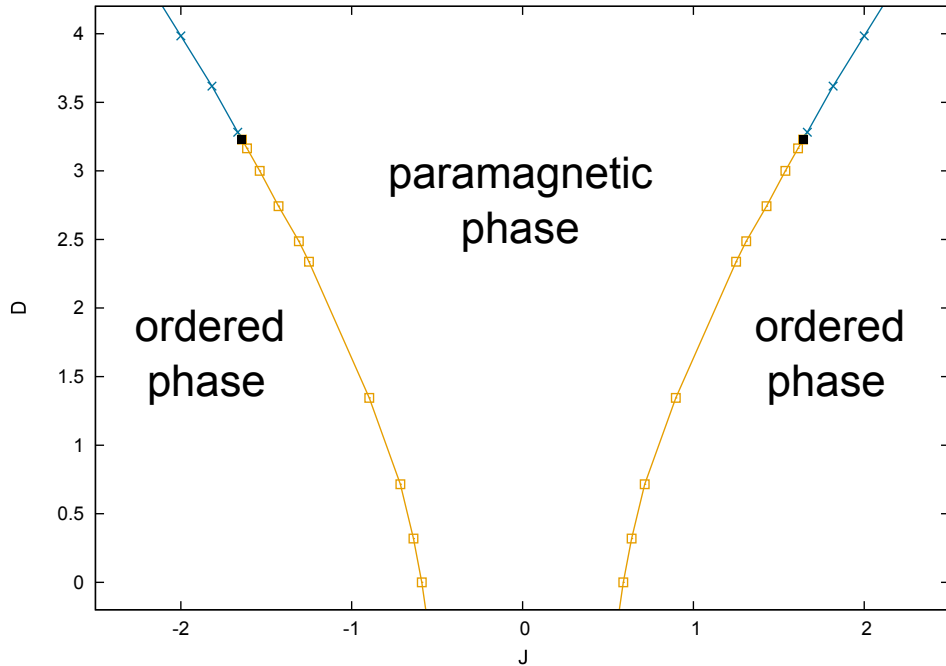


図 3.4: Spin-1 Blume-Capel モデルの逆温度 $\beta = 1$ とした結合定数 J, D についての相図 [47, 51, 52]. 青線は 1 次転移線, 黄線は 2 次転移線, 黒点は 3 重点を表す.

サイズ 10×10 の BC モデルで, 1 次転移と 2 次転移の両方を含む領域 I と 2 次転移だけを含む領域 II の 2 通りの場合について交換確率一定法を評価する. BC モデルは結合定数 J について $J = 0$ で対称な系であるが, J の正負によって相互作用エネルギー E_1 の期待値の符号が変わる. ここでは全ての相互作用エネルギー状態を考えると, J の範囲は正負に渡ってとり, 初期値が $J = 0$ のレプリカの結合定数を式 (3.12) で更新することにする.

領域 II 2 次転移だけを含む範囲について交換確率一定法を適用する. ここでは, $M = 25$, $N = 15$, 合計 375 個のレプリカを $J_{\max} = 1.6$, $J_{\min} = -1.6$, $D_{\max} = 3.1$, $D_{\min} = -0.25$ の範囲に長形状に結合定数を等間隔に設定した (図 3.5 を参照) 等間隔設定を用いる. 等間隔設定で多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いて 10^5 MCS 回, 1MCS ごとにレプリカ交換ステップを実行したモンテカルロシミュレーションの結果から再重法で状態密度を求めておく (図 3.6 を参照). その状態密度を用いて相互作用エネルギー E_1, E_2 の期待値を図 3.7 のように求め, 定数パラメータ $w = 0$ として交換確率一定法を実行する. 交換確率一定法を 2×10^3 程度繰り返すことによって結合定数は収束し, 結合定数の交換確率一定設定 (図 3.8 を参照) を得た.

等間隔設定と交換確率一定設定で交換確率を見てみよう. ここでの交換確率はそれぞれの結合定数の設定における多次元レプリカ交換モンテカルロ法のシミュレーションで, m 方向, n 方向についての番号が偶数奇数について, それぞれ 5×10^4 回交換を試みたときの結果である. まず, 等間隔設定での交換確率は図 3.9 に示す結果となった. 転移線上で大きく交換確率が低下しており, この設定でのレプリカ交換の効果が小さいことが予想される.

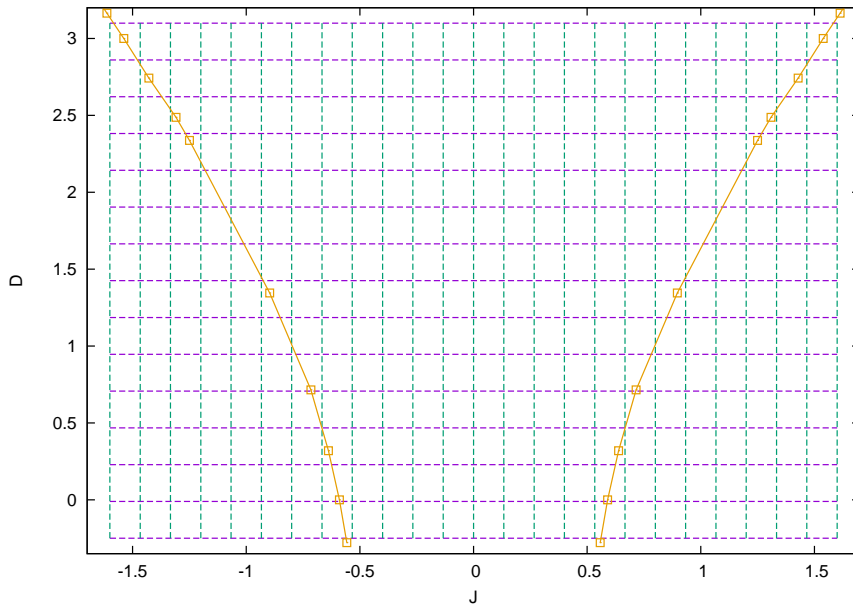


図 3.5: 結合定数を等間隔に設定した初期設定. レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 黄線は 2 次転移線を表す.

次に, 交換確率一定設定での交換確率は図 3.10 に示す結果となった. m 方向, n 方向のどちらの方向についても概ね交換確率を等しくすることができていて, レプリカ交換の効果を改善することが期待される.

次に別の初期設定で交換確率一定法で結合定数を調節したときを見てみよう. 結合定数の範囲を変えずに, 等比数列的に結合定数を設定した (図 3.11 を参照) 初期設定として用いることにし, 等間隔設定のときと同様の手順で結合定数の設定を調節する. この場合の結果は図 3.12 のようになり, 秩序相で若干の差が出るものの, 同じような結合定数に調整された. この設定での交換確率は等間隔配置を提案手法で調節した配置での交換確率である図 3.10 とほぼ同じ結果となった. このことは, 交換確率一定法によって各 m 方向や n 方向について交換確率を等しくする結合定数の設定は一意に定まらないことを意味するが, 交換確率を等しくするという観点からは結合定数の初期設定はあまり重要でないことを示唆している. ただし, 初期設定でシミュレーションした結果から状態密度を推定し, その状態密度から相互作用エネルギーを計算しているのので, 初期設定で極端な偏りがある結合定数の設定を用いてしまうと, 精度の良くない状態密度を評価してしまうことになり, 相互作用エネルギーの期待値の精度が期待できなくなる. よって, ある程度精度の良く状態密度を推定できるような結合定数の初期設定を用いるか, 設定の調節中に再度状態密度を推定するかするなどの注意が必要であると考えられる.

領域 I 1 次転移を含む範囲について交換確率一定法を適用する. ここでは, $M = 35$, $N = 10$, 合計 350 個のレプリカを $J_{\max} = 2.3$, $J_{\min} = -2.3$, $D_{\max} = 4$, $D_{\min} = 1.5$ の範囲に長形状に結合定数を等間隔に設定した (図 3.13 を参照) 等間隔設定を用いる. 等間隔設定で多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いて 10^5 MCS 回, 1MCS ごとにレプリカ

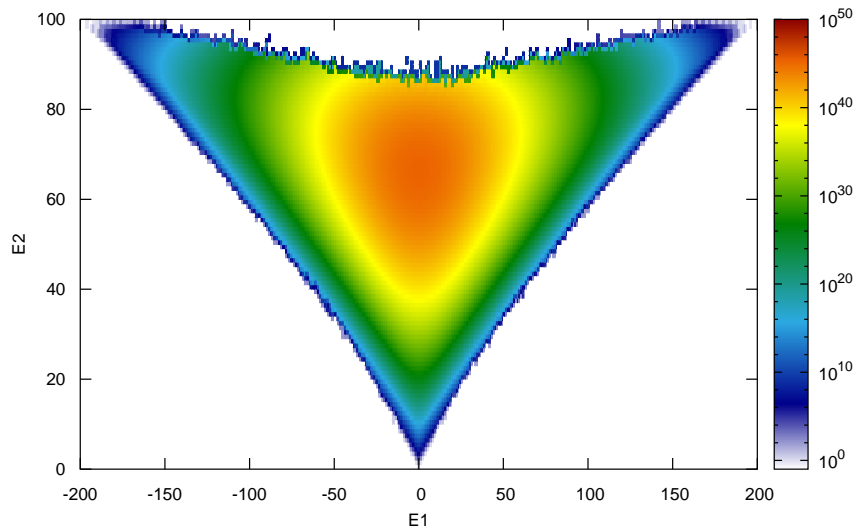


図 3.6: 2 次転移だけ含む範囲での等間隔設定においてモンテカルロ法と再重法で状態密度 $g(E_1, E_2)$ を求めた結果のヒートマップ. ここでは $g(E_1, E_2)/g(0, 0)$ として規格化している. 白色の空間は状態数がゼロであることを表す.

交換を実行したモンテカルロシミュレーションの結果から再重法で状態密度を求めておく (図 3.14 を参照). ここで定数パラメータ $w = 0.0$ として交換確率一定法を実行すると, 図 3.15 のように結合定数の大小関係が崩れてしまい, さらに, 結合定数が収束しなくなってしまうので, 定数パラメータ $w = 0.1$ として交換確率一定法を実行する. 交換確率一定法を 2×10^3 程度繰り返すことによって結合定数は収束し, 結合定数の交換確率一定設定 (図 3.16 を参照) を得た.

また, 等間隔設定と交換確率一定設定によるレプリカ交換の交換確率は図 3.17, 3.18 に示す結果となった. 比較すると等間隔設定では転移線付近で交換確率が低下しているが, 交換確率一定設定では 1 次転移線付近で交換確率に差ができてはいるが交換確率を概ね等しくできている. しかし, 領域 II のときと比較すると交換確率の一定化が十分ではない. これは, $w = 0.1$ にしていることが原因であると考えられる.

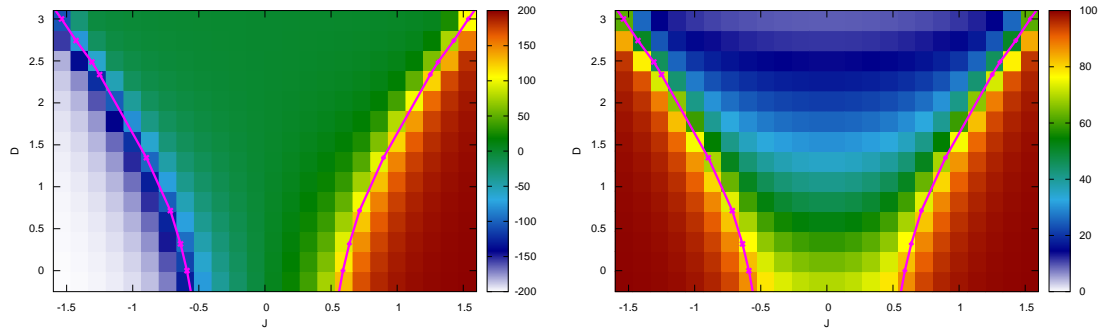


図 3.7: 結合定数 J, D についての相互作用エネルギー E_1, E_2 の期待値の推定結果. (左) 相互作用エネルギー E_1 の期待値. (右) 相互作用エネルギー E_2 の期待値. 紫線は 2 次転移線を表す.

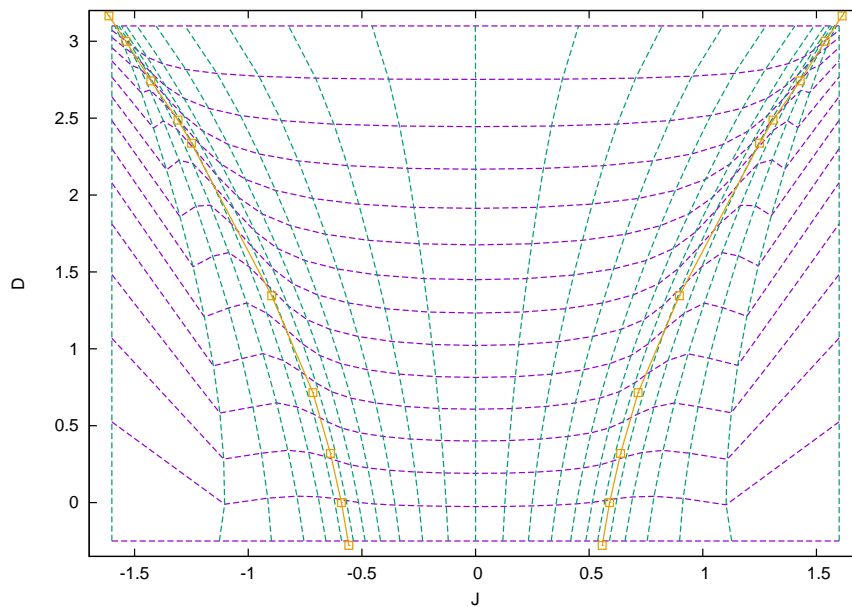


図 3.8: 交換確率一定法で調節した結合定数を設定. レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 黄線は 2 次転移線を表す.

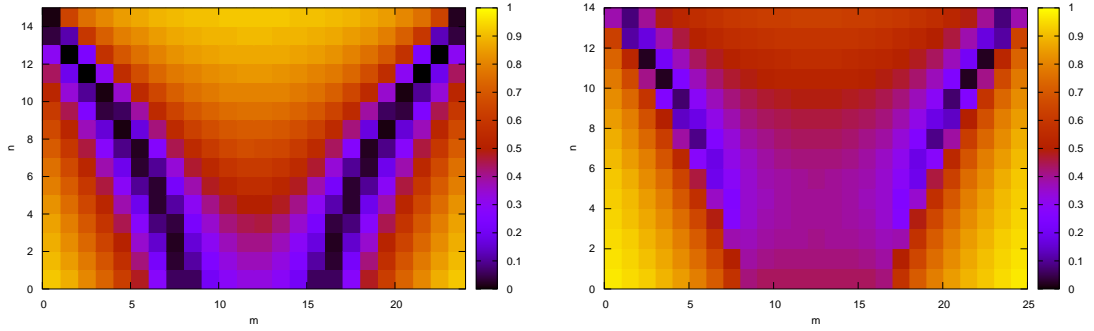


図 3.9: 等間隔設定での交換確率. (左) m 方向の交換確率. (右) n 方向の交換確率. 転移線に近づくとも交換確率が低下し, 転移線上で交換確率が大きく低下している.

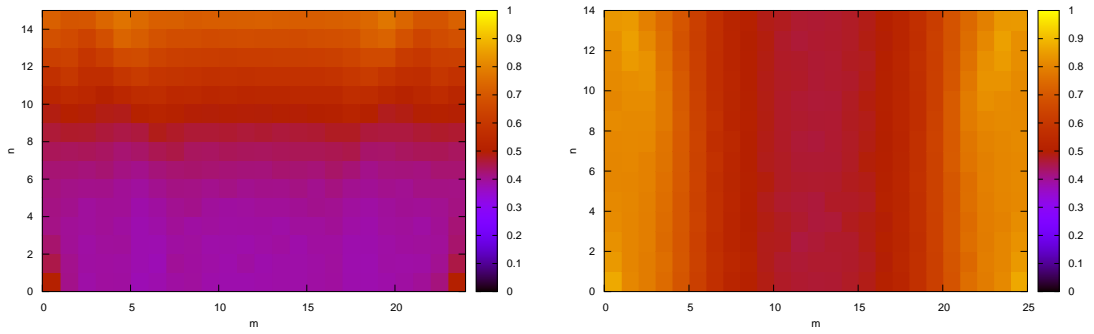


図 3.10: 交換確率一定設定での交換確率. (左) m 方向の交換確率. (右) n 方向の交換確率. 概ね等しい交換確率が実現できている.

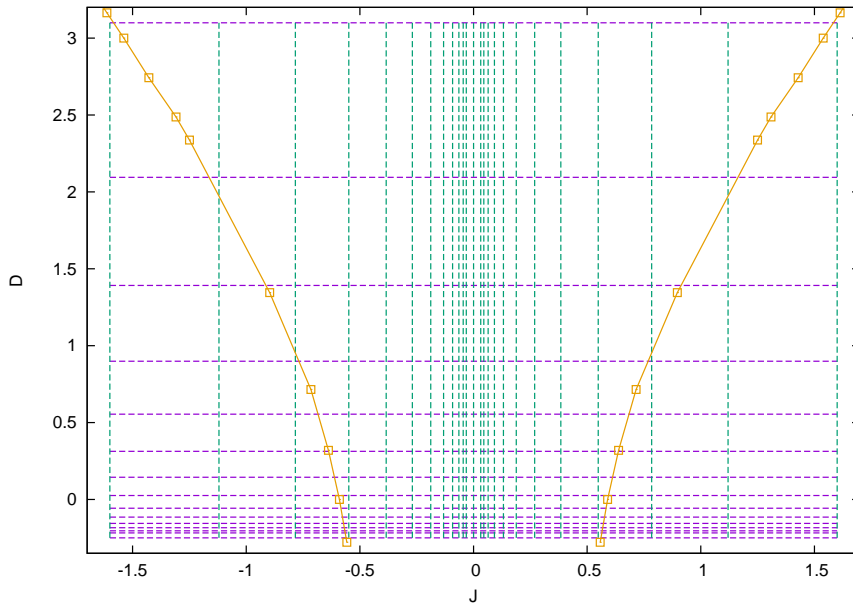


図 3.11: 結合定数を等比数列的に設定した初期設定. レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 黄線は 2 次転移線を表す.

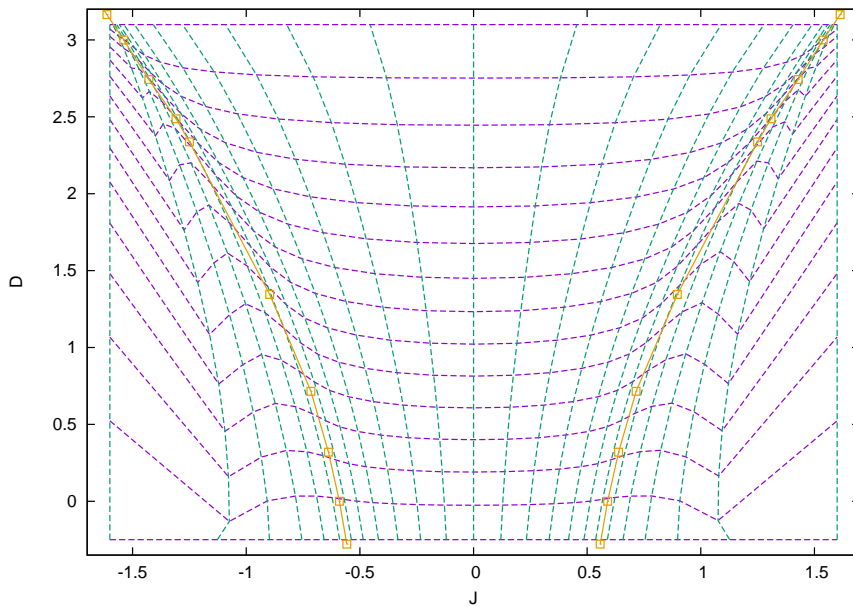


図 3.12: 結合定数を等比数列的に設定した初期設定を交換確率一定法で調節した設定. レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 黄線は 2 次転移線を表す.

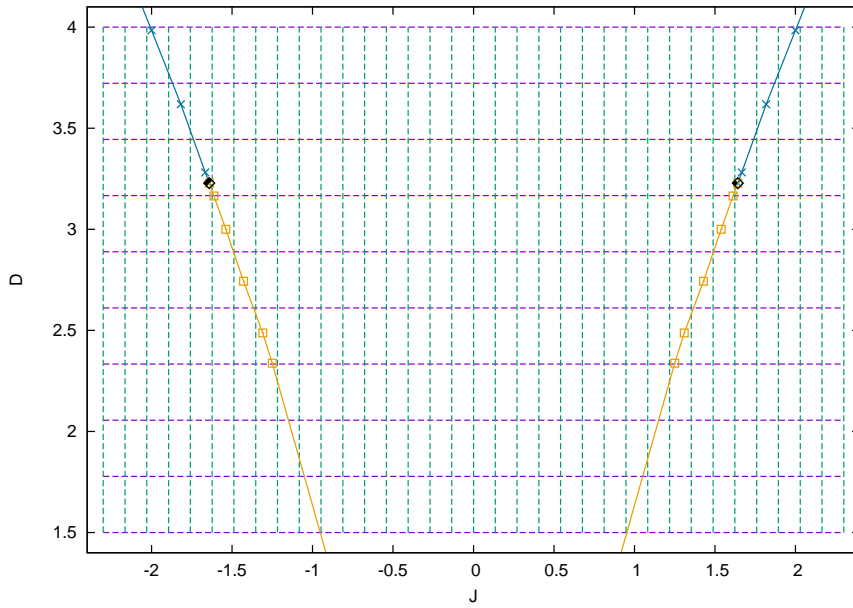


図 3.13: 結合定数を等間隔に設定した初期設定. レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 青線は 1 次転移線, 黄線は 2 次転移線, 黒点は 3 重点を表す.

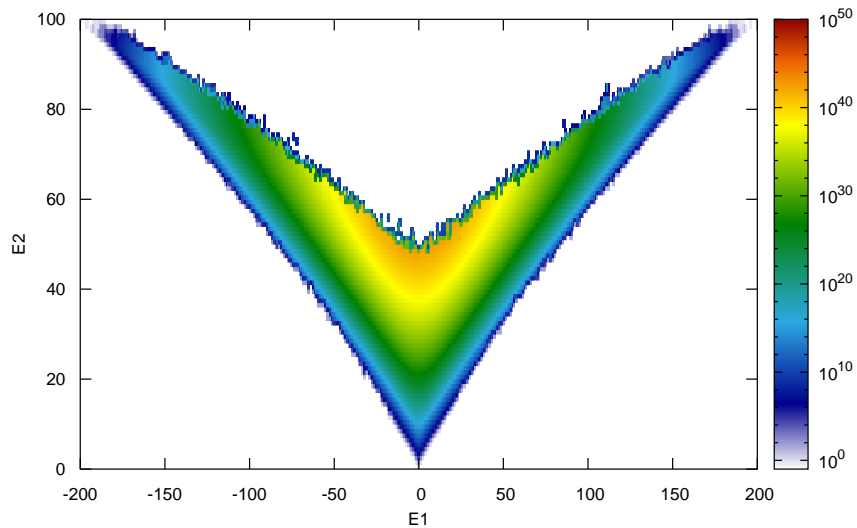


図 3.14: 1 次転移を含む範囲での等間隔設定においてモンテカルロ法と再重法で状態密度 $g(E_1, E_2)$ を求めた結果のヒートマップ. ここでは $g(E_1, E_2)/g(0, 0)$ として規格化している. 白色の空間は状態数がゼロであることを表す.

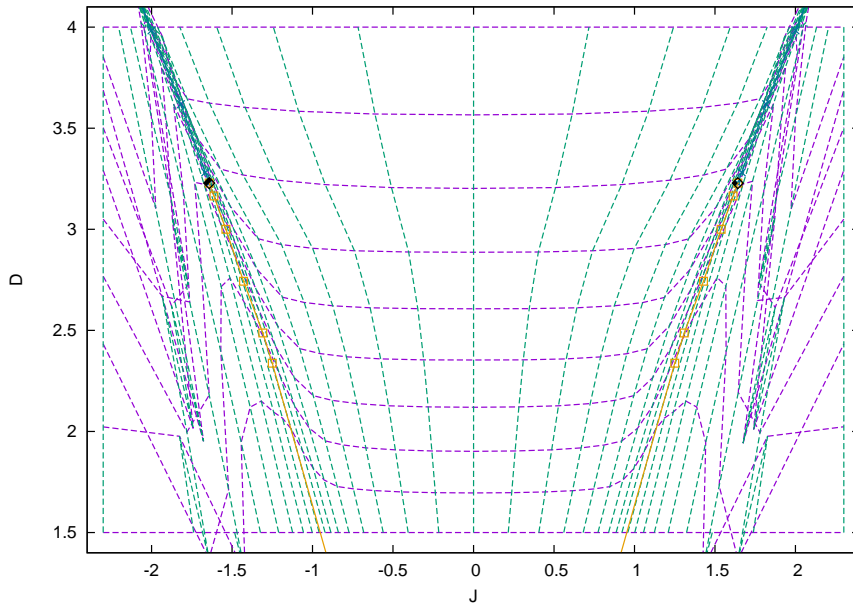


図 3.15: 交換確率一定法で調節した結合定数の設定 ($w = 0.0$). レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 青線は 1 次転移線, 黄線は 2 次転移線, 黒点は 3 重点を表す. 結合定数の大小関係が崩れている.

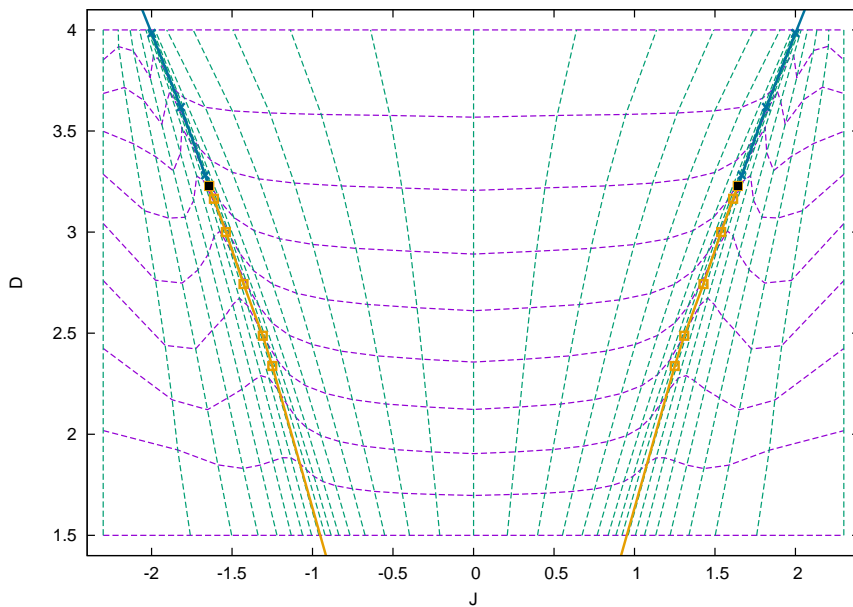


図 3.16: 交換確率一定法で調節した結合定数の設定 ($w = 0.1$). レプリカは紫線 (m 方向) と緑線 (n 方向) の交点の位置に配置されている. 青線は 1 次転移線, 黄線は 2 次転移線, 黒点は 3 重点を表す.

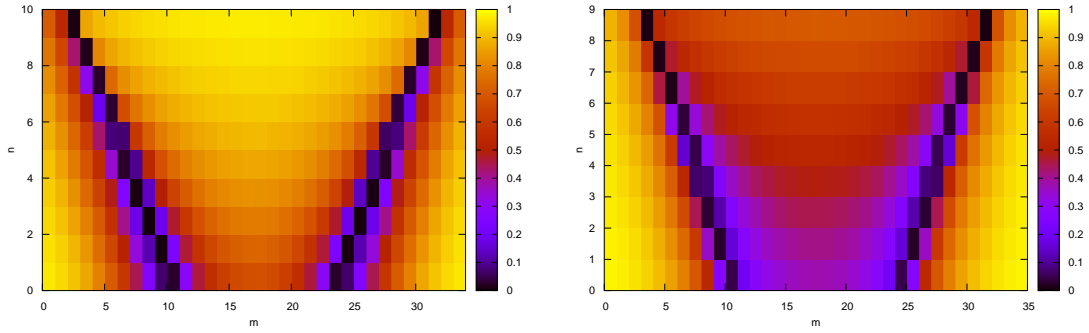


図 3.17: 等間隔設定での交換確率. (左) m 方向の交換確率. (右) n 方向の交換確率. 転移線に近づくと交換確率が低下し, 転移線上で交換確率が大きく低下している.

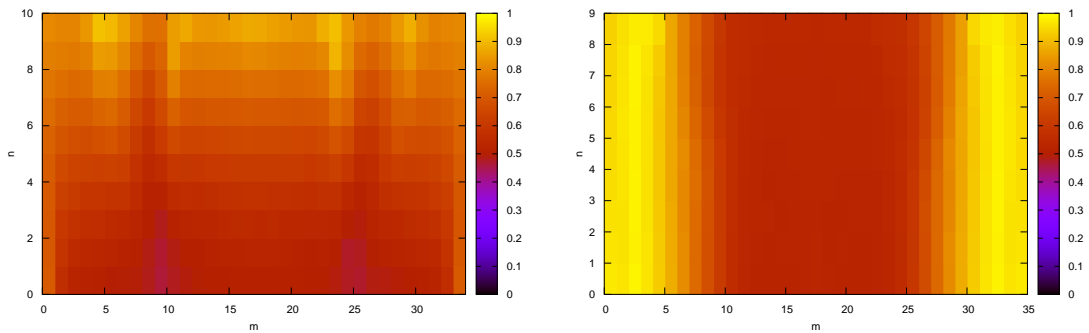


図 3.18: 交換確率一定設定での交換確率. (左) m 方向の交換確率. (右) n 方向の交換確率. 概ね等しい交換確率が実現できているが, 1次転移線付近では交換確率に差がでてしまう.

3.4.3 提案手法の検証

さて、交換確率はほぼ一定にすることができたので、等間隔設定と交換確率一定設定について、レプリカ交換が効率的に機能しているか調べることにしよう。そのために、多次元レプリカ交換によるレプリカの結合定数 J, D のユークリッド平面上の遷移を考える。ここではレプリカ交換を結合定数 J, D についての遷移とみなし、レプリカの JD 平面上の遷移を評価にする。なお、特に断りがないときは局所更新回数を 1MCS, つまり、 $N_{\text{local}}(J, D) = 1$ (2.2.5 節を参照) としている。

領域 II 結合定数の設定として、等間隔設定と交換確率一定設定の両者の場合を比較する。等間隔設定と交換確率一定設定について、結合定数 J と D についてのレプリカの遷移は、それぞれ図 3.19, 3.20 のようになった。等間隔設定と交換確率一定設定の両方において、

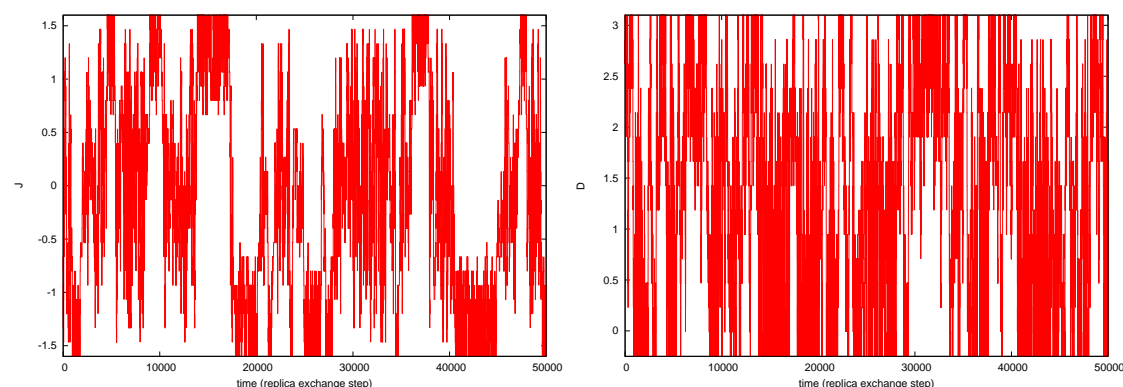


図 3.19: 等間隔設定の結合定数についてのレプリカ遷移。横軸はレプリカ交換回数 (時間) である。(左) 等間隔設定での J 方向の遷移。(右) 等間隔設定での D 方向の遷移。 J, D どちらについてもレプリカの遷移が反射する部分があり、ブロックができてしまっている。

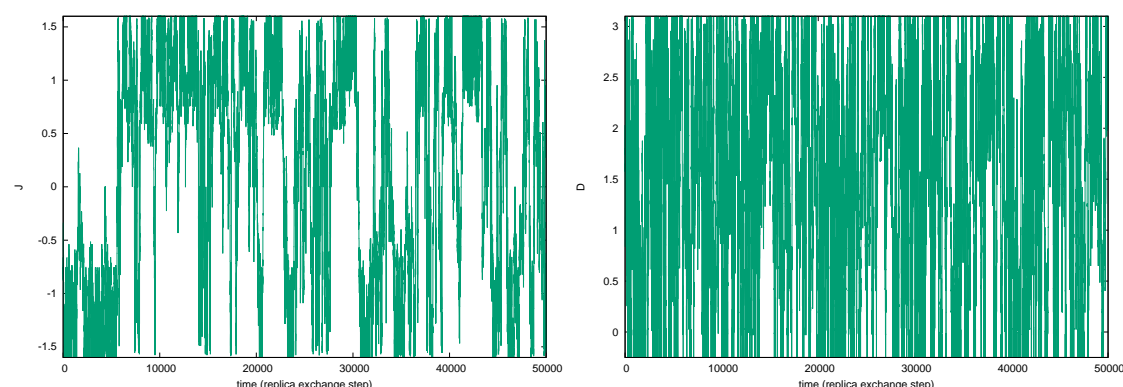


図 3.20: 交換確率一定設定の結合定数についてのレプリカ遷移。横軸はレプリカ交換回数 (時間) である。(左) 交換確率一定設定での J 方向の遷移。(右) 交換確率一定設定での D 方向の遷移。 J についてレプリカの遷移が反射する部分があり、ブロックができてしまっている。

レプリカの遷移に転移線が原因と考えられるブロック構造ができる結果となってしまっている。

転移線とレプリカの遷移の関係を詳しくみるために、転移線との符号付き距離 d の時間変化を調べてみることにする。ここでの転移線との符号付き距離は、転移線も含めて $J = 0$ で対称な領域での遷移を調べるので、レプリカが $J < 0$ ときは J が負の領域にある転移線、 $J \geq 0$ のときは J が正の領域の転移線との距離を見ることにする。図 3.21 に示すように、どちらの結合定数の設定についても転位線付近でレプリカの遷移が反射していることがわ

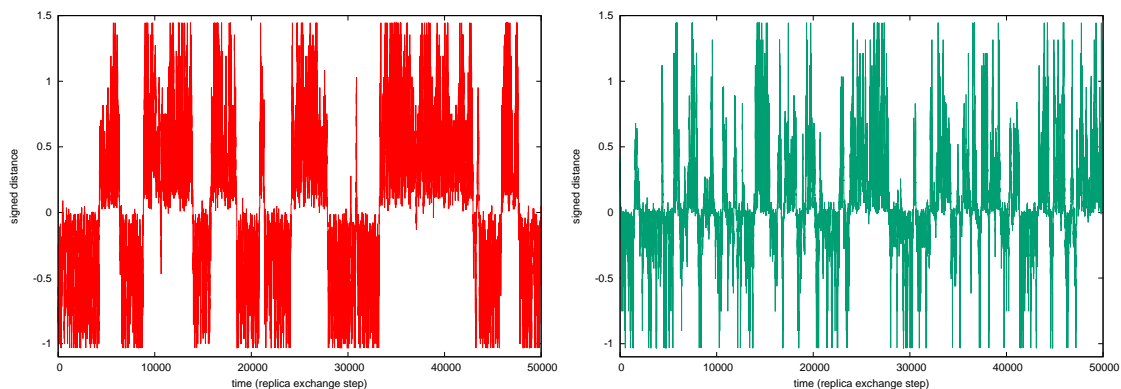


図 3.21: 転移線との符号付き距離 d についてのレプリカ遷移。縦軸は符号付き距離 d 、横軸はレプリカ交換回数 (時間) である。(左) 等間隔設定。(右) 交換確率一定設定。どちらの設定についても転移線付近でレプリカの遷移が反射している。

かる。この結果は多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いるときに交換確率一定設定で実行しても、転移線の影響で系全体の緩和の改善に十分に貢献していないことを意味する。

では PT_τ アルゴリズムを用いて、転移線付近でのレプリカの遷移の反射が改善するかを確かめる。 PT_τ アルゴリズムを使うためには自己相関時間が必要となるので、ハミルトニアン \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} を用いる。等間隔設定、交換確率一定設定の MCS についての \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} は図 3.22 に示す結果となった。この自己相関時間 τ_{exp} を局所

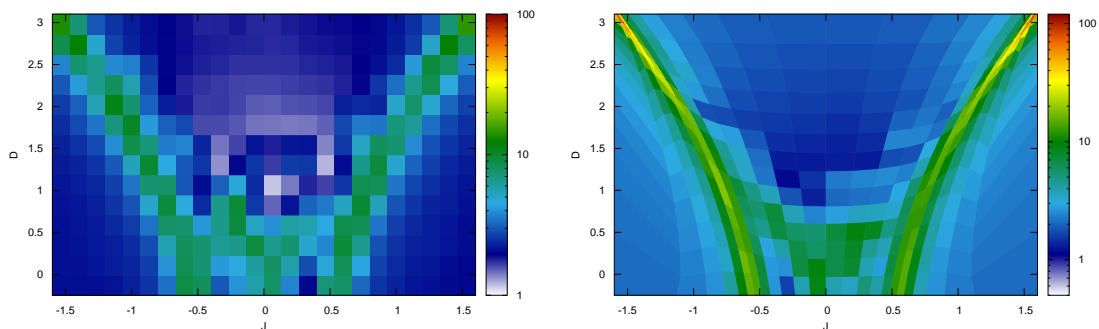


図 3.22: (左) 等間隔設定での \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} 。(右) 交換確率一定設定での \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} 。

更新の更新回数に適用する。つまり、2.2.5 節における N_{local} を $N_{\text{local}}(J, D) = \tau_{\text{exp}}(J, D)$ として、多次元レプリカ交換モンテカルロ法を実行する。図 3.23 に PT_τ アルゴリズムを用いたときの結果を示す。等間隔設定、交換確率一定設定どちらについても転移線付近で

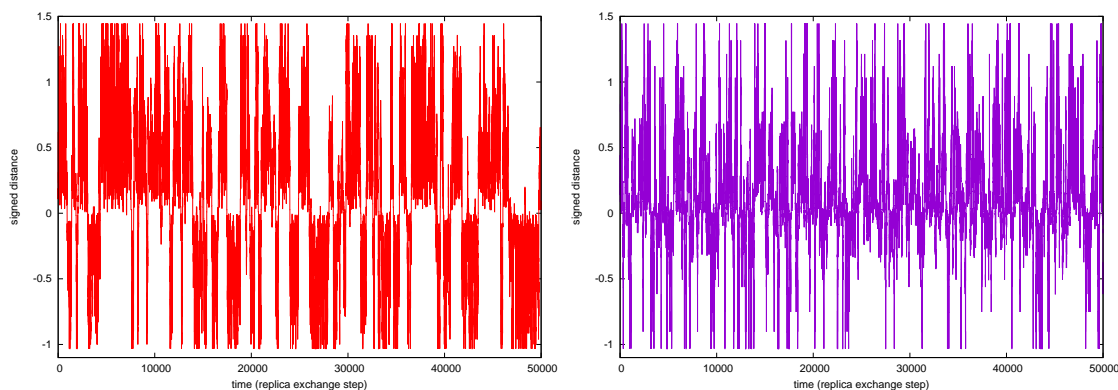


図 3.23: PT_τ アルゴリズムを用いた転移線との符号付き距離 d についてのレプリカ遷移。縦軸は符号付き距離 d 、横軸は交換回数 (時間) である。(左) 等間隔設定。(右) 交換確率一定設定 (提案手法)。転移線付近でレプリカの遷移が反射される現象が解消されている。

反射されている現象が解消されている。特に交換確率一定設定であると効率良くレプリカが遷移している様子が観察できる。さらに、交換確率一定設定と PT_τ アルゴリズムを組み合わせた手法の効率を調べるために、結合定数の設定を交換確率一定設定として、図 3.10 での交換確率でランダムウォークさせたときレプリカの遷移と PT_τ アルゴリズムの $N_{\text{local}}(J, D) = A \tau_{\text{exp}}(J, D)$ としたときの定数 A を変化させたときのレプリカの遷移を比較する。ここでのランダムウォークとは 2.3.1 節に示した交換順で、図 3.10 に示した結果から与えられる交換確率のみに従ってレプリカを移動 (交換) させることである。このランダムウォークの結果が最良の結果であると考えられる [12]。これらのあるレプリカについての結果を図 3.24 に示す。定数 $A = \frac{1}{2}$ のときについては若干転移線付近で反射している様子が見受けられるが、全ての結果において転移線付近におけるレプリカの遷移の反射を失くすことができている。このことは、提案手法が効率の良く多次元レプリカ交換モンテカルロ法を扱う方法であることを示唆している。

さて、レプリカ交換効率を転移線との符号付き距離 d についてのレプリカ遷移の図で評価する方法では、提案手法を用いたときにブロック構造がなくなっていることからレプリカ交換効率が改善していることを示していた。しかし、その図から定量的に判断することは難しい。そこで、レプリカの遷移が遷移する空間について端から端まで行って端に戻ってくるまでかかる時間である往復時間 (round trip time, τ_{rt}) を導入する。Spin-1 Blume-Capel モデルの結合定数 J, D の空間では転移線は D 方向に横断するように伸びているので、 J 方向の往復時間 $\tau_{\text{rt}, J}$ を調べることにしよう。もちろん、往復時間 $\tau_{\text{rt}, J}$ が小さい方がレプリカが高速に混合していると考えられる。

等間隔設定と交換確率一定設定に PT_τ アルゴリズムを適用したときと適用しないときの結果を表 3.1 にまとめる。等間隔設定と交換確率一定設定の結果を比較すると、交換確率一定設定の方が良い結果が得られている。また、ランダムウォークの結果と提案手法を比較するとほぼ同程度の結果となっていることから、 PT_τ アルゴリズムを定数 $A = 1$ とし

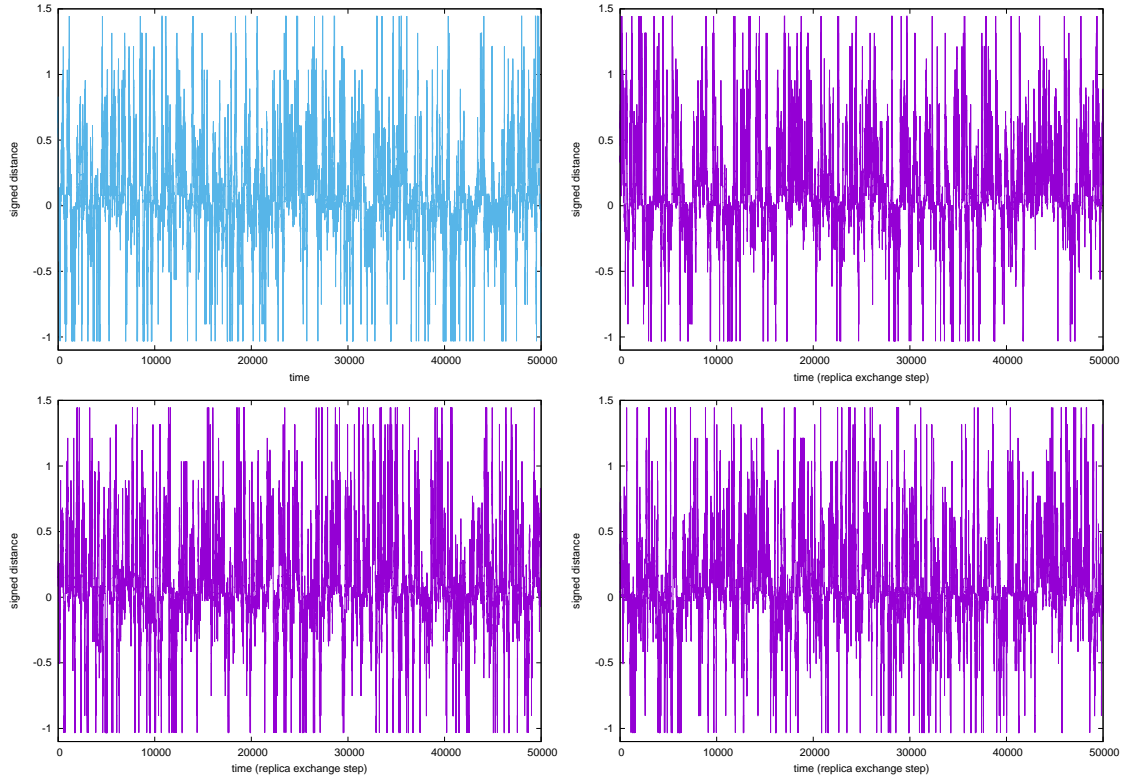


図 3.24: レプリカ遷移. 縦軸は符号付き距離 d , 横軸はレプリカ交換回数 (時間) である. (左上) 交換確率一定設定で図 3.10 の交換確率でランダムウォーク. (右上) 交換確率一定設定 ($N_{\text{local}} = \frac{1}{2}\tau_{\text{exp}}$). (左下) 交換確率一定設定 ($N_{\text{local}} = 2\tau_{\text{exp}}$). (右下) 交換確率一定設定 ($N_{\text{local}} = 4\tau_{\text{exp}}$).

て実装することで, 転移線の影響を失くすことができると考えられる. この結果は提案手法を用いることが多次元レプリカ交換モンテカルロ法を効率よく扱う方法であることを示している.

領域 I 領域 II の結果は, 転移線が 2 次転移線であれば提案手法でレプリカ交換効率を改善することを示していた. しかし, 1 次転移線では自己相関時間が無限大になってしまうため, τ_{exp} を工夫なく用いることは現実的ではない. そこで, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法の回り込みの効果を期待することにして, PT_τ アルゴリズムにおける 1 次転移線付近の $N_{\text{local}}(J, D)$ は 2 次転移線付近の自己相関時間の最大値を用いることにする. つまり, 2 次転移線付近での最大の自己相関時間 $\tau_{\text{exp}}^{\text{II}}$ を閾値として, $\tau_{\text{exp}}^{\text{II}}$ より大きくなる自己相関時間については, $\tau_{\text{exp}}^{\text{II}}$ を $N_{\text{local}}(J, D)$ に用いることにする.

さて, レプリカの遷移が 1 次転移線を 3 重点側から回りこみ, 2 次転移線側を横断していることを捉えたいので, 転移線との距離 d のレプリカの遷移を調べることは良い指標とはなり得ない. そこで, 1 次転移線が結合定数 JD の空間に対してほぼ直線となることから, 1 次転移線と, 3 重点とあるレプリカの結合定数のとる点を結んだ直線のなす角 θ について調べることで, レプリカが結合定数 JD の空間を遷移し, 回り込む様子を捉えることにす

表 3.1: 手法ごとの往復時間 $\tau_{rt,J}$. ここでは 2×10^5 回レプリカ交換を実行したときの全レプリカの結果から評価している.

手法 ($N_{\text{local}}(J, D)$)	平均 $\tau_{rt,J} \pm$ 誤差
等間隔設定	19255.5 ± 11695.3
等間隔設定+ PT_τ アルゴリズム (τ_{exp})	7147.0 ± 4259.4
交換確率一定設定	6552.2 ± 3902.1
交換確率一定設定+ PT_τ アルゴリズム (τ_{exp})	2603.2 ± 1508.3
交換確率一定設定+ PT_τ アルゴリズム ($\frac{1}{2}\tau_{\text{exp}}$)	2951.5 ± 1702.9
交換確率一定設定+ PT_τ アルゴリズム ($2\tau_{\text{exp}}$)	2418.7 ± 1406.8
交換確率一定設定+ PT_τ アルゴリズム ($4\tau_{\text{exp}}$)	2359.1 ± 1360.8
交換確率一定設定上でのランダムウォーク	2744.2 ± 1641.1

る. ここでのなす角 θ は $J = 0$ は, $J = 0$ で対称な領域での遷移を調べるので, レプリカが $J < 0$ にあるときは J が負の領域にある転移線と, $J \geq 0$ にあるときは J が正の領域にある転移線とのなす角とする.

PT_τ アルゴリズムを用いるために自己相関時間を調べる. 等間隔設定と交換確率一定設定におけるハミルトニアン \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} は図 3.25 に示す結果となった. 等間隔

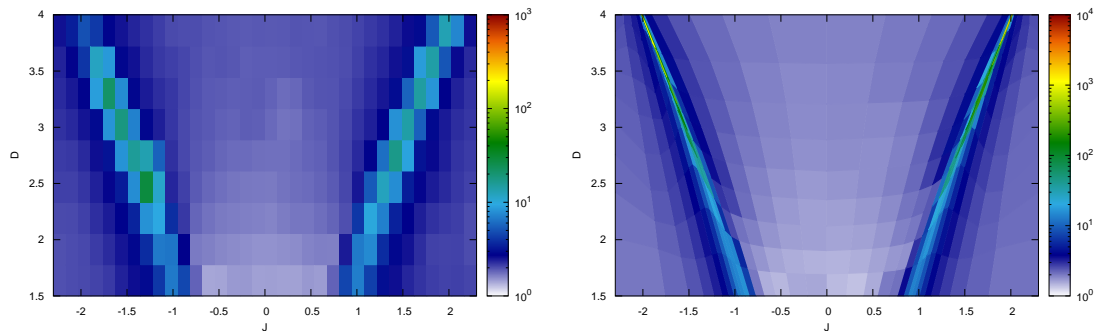


図 3.25: (左) 等間隔設定での \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} . (右) 交換確率一定設定での \mathcal{H} の自己相関時間 τ_{exp} .

設定での自己相関時間 τ_{exp} はあまり大きな値とはなっていないが, これは等間隔設定にしたときに 1 次転移線付近に結合定数が設定されなかったからだと考えられる. この設定ではレプリカ交換の交換確率が低いので, PT_τ アルゴリズムを組み合わせてもレプリカの遷移はあまり改善されないことが予想される. 交換確率一定設定では 1 次転移線付近で自己相関時間 τ_{exp} が非常に大きな値となっていて, PT_τ アルゴリズムをそのまま用いることは計算時間の観点から難しいことがわかる.

それでは実験結果を比較してみよう. 等間隔設定と交換確率一定設定で PT_τ アルゴリズムを用いなかったときと用いたときのあるレプリカについての結果を図 3.26 に示す. ここでは, PT_τ アルゴリズムにおける定数 $A = 1$ としている. PT_τ アルゴリズムを用いな

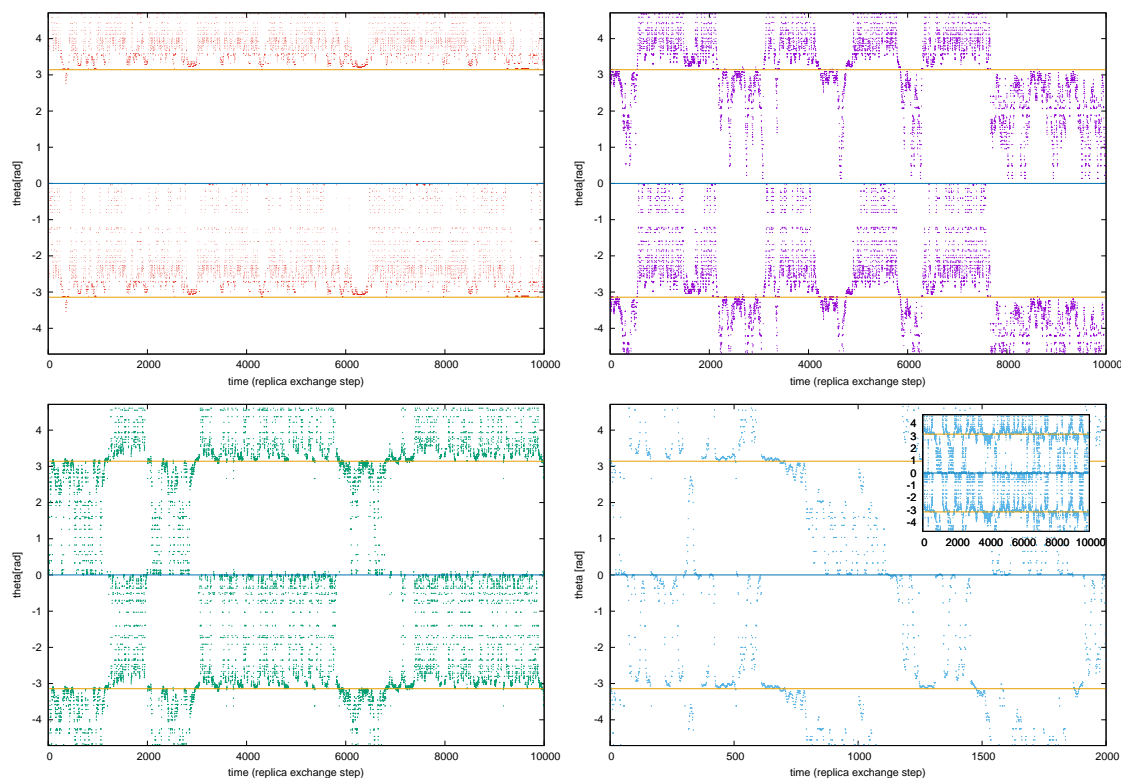


図 3.26: θ についてのレプリカの遷移. 縦軸はなす角 θ , 横軸はレプリカ交換回数 (時間) である. $\theta = 0$ は 1 次転移線付近, $\theta = \pm\pi$ は 2 次転移線付近であることを表す. (左上) 等間隔設定. (右上) 等間隔設定+ PT_τ アルゴリズム. (左下) 交換確率一定設定. (右下) 交換確率一定設定+ PT_τ アルゴリズム (提案手法). 詳細図であり, 挿入図が他の図と同じ時間の長さの図である.

かったときは, どちらの設定についても 2 次転移線を横断することすら難しいことがわかる. PT_τ アルゴリズムを用いたときは, 2 次転移線を横断することができるようになっていて, 等間隔設定より交換確率一定設定でより良くレプリカが遷移している. さらに, 提案手法においては, 1 次転移線すら横断している様子が観察できる. これは, システムサイズが小さいことが起因していると考えられる.

定量的にレプリカ遷移を評価するために, ここでも結合定数 J についての往復時間 $\tau_{rt,J}$ を調べる. 等間隔設定と交換確率一定設定に PT_τ アルゴリズムを適用したときと適用しないときの結果を表 3.2 にまとめる. 交換確率一定設定上のランダムウォークには劣るが, 提案手法が一番良い結果となった. この結果は 1 次転移線を含むような範囲においても, 提案手法を用いると多次元レプリカ交換モンテカルロ法で効率よくサンプリングできることを示唆している.

表 3.2: 手法ごとの往復時間 $\tau_{rt,J}$. ここでは 2×10^5 回レプリカ交換を実行したときの全レプリカの結果から評価している.

手法 ($N_{\text{local}}(J, D)$)	平均 $\tau_{rt,J} \pm$ 誤差
等間隔設定	65086.7 ± 39897.1
等間隔設定+PT $_{\tau}$ アルゴリズム (τ_{exp})	12555.3 ± 7767.2
交換確率一定設定	15906.9 ± 9674.9
交換確率一定設定+PT $_{\tau}$ アルゴリズム (τ_{exp})	3198.1 ± 1872.2
交換確率一定設定上でのランダムウォーク	2869.5 ± 1741.9

3.5 まとめ

本研究では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, spin-1 Blume-Capel モデルを用いて交換確率一定法と提案手法の評価を行った. 交換確率一定法は転移線を含む空間に結合定数を設定したときでも概ね交換確率を等しくすることができる手法であった. また, レプリカの遷移についても, 提案手法を用いることでレプリカ交換効率が改善し, 最良の結果を出すことを示した. これらの結果から, 1次転移線や2次転移線で区切られる空間に結合定数を設定して多次元レプリカ交換モンテカルロ法でモンテカルロシミュレーションを実行するときは, 本研究で開発した交換確率一定法と PT $_{\tau}$ アルゴリズムを組み合わせた提案手法を用いることがサンプリング効率の改善に効果的であると結論する. ただし, 1次転移線も横断する結果を得たことから, さらに大きなシステムサイズで実験する必要がある. また, 今後の課題として, 2次元よりも大きな次元で交換確率一定法を評価する必要があると考えられる.

4 Tatami タイリングシステムの解析

4.1 はじめに

畳は日本の伝統的な敷物である。日本人にとってもあまり知られていないことであるが、畳の敷き方には祝儀敷きとよばれる敷き方と不祝儀敷きとよばれる敷き方の2通りの敷き方がある。祝儀敷きとは畳の四隅が集まらないような敷き方であり、不祝儀敷きとは畳の四隅が集まる箇所があるような敷き方のことである (図 4.1 を参照)。一般的な家庭や祝い

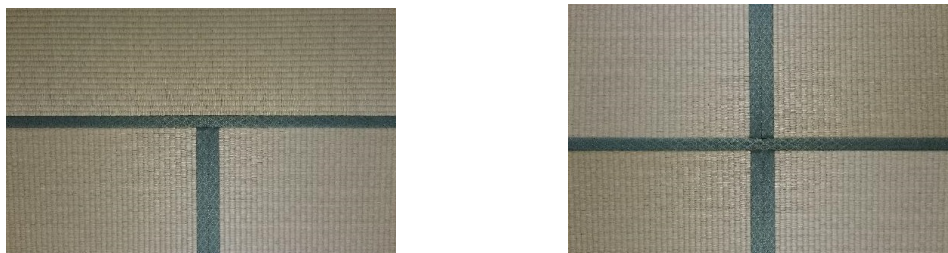


図 4.1: 畳の敷き方. (左) 祝儀敷き. 四枚の畳が接合することはない. (右) 不祝儀敷き. 四枚の畳が接合する部分がある.

事の際には祝儀敷きが用いられ、縁起の悪いことの際には不祝儀敷きが用いられる。

Tatami タイリング [31] とは畳を四隅が集まらないように敷き詰めることであり、祝儀敷きとして敷かれた畳の状態のことである。半畳の畳を monomer, 一畳の畳を dimer だとすると、制約を課した monomer-dimer タイリングの問題と考えることができる。この制約を tatami 条件とよぶことにする。図 4.2 に tatami タイリングの場合と tatami タイリングでない場合の例を示す。

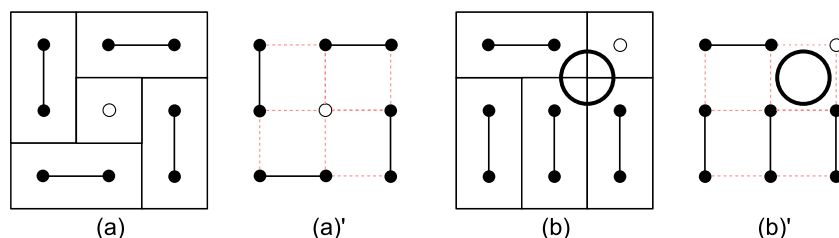


図 4.2: 領域サイズ 3×3 でのタイリング. (a) tatami 条件を満たしているので tatami タイリングである. (b) 丸で示した面において tatami 条件が破れている点があるので tatami タイリングではない. (a)' と (b)' は (a) と (b) を monomer-dimer で表したものである. (a)' と (b)' は黒線が dimer を表し、白丸が monomer を表す.

統計物理や組合せ論では古くからタイリングの状態数を求める研究が行われており、dimer のみのタイリングであるドミノタイリングについては長方形領域やアステカダイヤモンド領域についての状態数が求められている [53, 54, 55]. しかし、monomer-dimer タイリングの状態数は長方形領域さえ依然として知られていない。

では tatami タイリングの状態数についてはどうであろうか。Tatami タイリングについては、Erickson らによって様々なことが調べられている。彼らは転送行列法によって小さ

な長方形領域についての状態数を求めた [56, 57, 58]. また, tatami タイリングの状態数が系の領域の周囲長に依存すると主張している [57]. さらに, 彼らは組合せ論による議論によって, 正方領域についての monomer 数ごとの状態数を明らかにし, 正方領域についての tatami タイリングの状態数を明らかにした [32, 59]. Erickson らによって, 領域サイズ $\ell \times \ell$ の正方領域で, monomer の数 m ($0 \leq m \leq \ell^2$) についての tatami タイリングの状態数 $t_{\ell,\ell}(m)$ は,

$$t_{\ell,\ell}(m) = \begin{cases} m2^m + (m+1)2^{m+1} & (m < \ell, m \equiv \ell \pmod{2}) \\ \ell 2^{\ell-1} & (m = \ell) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (4.1)$$

となり, 全ての m についての和をとったとき,

$$\sum_{m=0}^{\ell^2} t_{\ell,\ell}(m) = 2^{\ell-1}(3\ell - 4) + 2 \quad (4.2)$$

となることが示された. しかし, tatami タイリングの状態数は大きな長方形領域や複雑な形状の領域のときには知られていない. さらに, tatami 条件の違反した数についての状態数や tatami 条件を違反した数と monomer の数を指定したタイリングの状態数は知られていない.

本研究では, ハミルトニアンが tatami 条件を違反した数と dimer の数に依存する tatami タイリングシステムを考案して, それらの数ごとの状態数をレプリカ交換モンテカルロ法 [3] と多次元レプリカ交換モンテカルロ法 [8, 9] を用いて推定した [33]. さらに, tatami タイリングシステムを熱力学的な系と見なし, 状態数の推定結果を用いて熱力学的解析を行った.

4.2 Tatami タイリングシステム

モンテカルロ法で状態数を推定するためには系のデザインが重要である. ここでは, tatami タイリングの状態数を求めるために tatami タイリングシステムを定義し, レプリカ交換モンテカルロ法と多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いて状態数を推定する方法を考える.

4.2.1 Tatami タイリングシステム

本研究では monomer-dimer タイリングの状態 s をマルコフ連鎖モンテカルロ法で遷移させることで tatami タイリングの状態数を推定する. そこで, 次のハミルトニアンを定義する.

$$\mathcal{H}(s, J_t, J_d) = J_t N_t(s) + J_d N_d(s). \quad (4.3)$$

ここで, J_t, J_d は結合定数, $N_t(s)$ は状態 s の tatami 条件の違反数, $N_d(s)$ は状態 s の dimer の数である. この monomer-dimer タイリングにおけるハミルトニアンの系を tatami タイリングシステムと呼称する. 分配関数は次のように定義する.

$$Z(\beta, J_t, J_d) = \sum_{N, M} g(N, M) e^{-\beta(J_t N + J_d M)}. \quad (4.4)$$

ここで, β は逆温度, $g(N, M)$ は tatami 条件の違反数 N , dimer の数 M についての状態数である. さらに, tatami 条件の違反数についての状態数 $g(N)$ を次のように定義する.

$$g(N) = \sum_M g(N, M). \quad (4.5)$$

したがって, $g(0)$ が全ての tatami タイリングの状態数ということになる.

モンテカルロ法による状態数推定手法は形状に依存する手法ではないが, 本研究では主に固定境界の長方形領域とアステカダイヤモンド領域を対象とする. アステカダイヤモンドとは, オーダー ℓ のときに, $2\ell(\ell+1)$ 個の大きさ 1 の正方形を, 正方形の中心を (x, y) としたときに, 全ての正方形が $|x| + |y| < \ell$ の範囲に配置され構成される図形のことである.

これらの領域における tatami タイリングシステムについて考えてみることにしよう. 長方形領域については小さい領域サイズのときの tatami タイリングの状態数が知られており [57], アステカダイヤモンド領域については tatami タイリングの状態数は知られていない. ある領域サイズについての tatami 条件の違反数 N の最大値を N_{\max} , dimer 数の最大値を M_{\max} とする. 領域サイズ $\ell_1 \times \ell_2$ の長方形領域のときは $N_{\max} = (\ell_1 - 1) \times (\ell_2 - 1)$, $M_{\max} = \left\lfloor \frac{\ell_1 \times \ell_2}{2} \right\rfloor$ となり, オーダー ℓ のアステカダイヤモンド領域のときは $N_{\max} = 2\ell^2 - 2\ell + 1$, $M_{\max} = \ell(\ell + 1)$ となる. ここで, $\lfloor \cdot \rfloor$ はガウス記号である.

状態 s が N_{\max} のときと $N_{\max} - 1$ のときの状態数を考えておくことにする. N_{\max} のとき, どちらの領域についても次の状態数となる.

$$g(N_{\max}) = g(N_{\max}, 0) = 1. \quad (4.6)$$

なぜなら, N_{\max} となる状態は全て monomer となる場合しか存在しないからである. さらに, 領域サイズ $\ell_1 \times \ell_2$ の長方形領域については,

$$g(N_{\max} - 1) = g(N_{\max} - 1, 1) = 2(\ell_1 - 1) + 2(\ell_2 - 1) \quad (4.7)$$

となる. これは, 1つの dimer で1つのみ tatami 条件を違反する面を作ろうとすると dimer を領域の端に置けなければならないからである. これらを用いて, モンテカルロ法で状態密度として求めた結果を状態数として規格化する.

4.2.2 モンテカルロ法による状態数推定法

モンテカルロ法で状態 s を遷移させる方法を考えよう. 状態の遷移は Kenyon らの方法 [60] を拡張させた方法を用いる. まず, 一様ランダムに領域から辺を一つ選択する. 次に図 4.3 のように選ばれた辺の状態によって状態を変化させる. そして, 式 (4.3) のハミルトニアンから定まるエネルギーの変化より, メトロポリス法で状態の遷移を受諾するか棄却するかを決定する.

さらに, モンテカルロ法で得た結果から状態数を推定する方法を考える. Tatami タイリングの状態数を推定したいときはエネルギー準位である tatami 条件違反数 N についてのエネルギーヒストグラムを, tatami 条件違反数と dimer 数ごとの状態数を推定したいときはそれぞれのエネルギー準位 N, M についてのエネルギーヒストグラムを作成する. それらのエネルギーヒストグラムからヒストグラム再重法を用いて状態密度を推定する. 推定した状態密度を式 (4.6), (4.7) で規格化することで状態数が得られる.

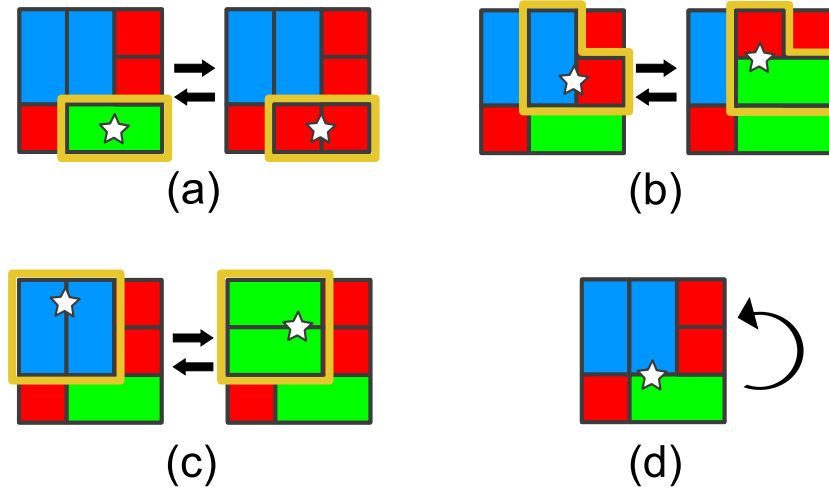


図 4.3: 状態の遷移. (a) dimer の中心にある辺が選択されたときは2つの monomer に分割し, 2つの monomer の間にある辺が選択されたときは dimer に置き換える. (b) monomer と dimer の間にある辺が選択されたときは monomer と dimer を交換する. (c) 平行な2つの dimer の間にある辺が選択されたときはそれらの dimer を回転させる. (d) (c) 以外の2つの dimer の間にある辺が選択されたときは何もしない. (a), (b) の遷移とそれ以外は何もしない方法は Kenyon らの方法 [60] として知られている.

4.3 レプリカ交換モンテカルロ法による解析

レプリカ交換モンテカルロ法 [3] を用いて tatami 条件の違反数 N ごとの状態数 $g(N)$ を推定する. ただし, 単純な実装で状態数を推定することは難しい. $J_t > 0$ のときを考えてみよう. 逆温度 β が大きいとき, すなわち低温のとき, 系は低エネルギー状態となり, tatami タイリングとなる状態をサンプルすることが期待できる. しかし, 高温の極限である $\beta = 0$ を考えると, 全ての状態が平等に出現するだけで, N_{\max} の状態をサンプルすることは困難である. したがって, $J_t = \pm 1$ とし, 強磁性である $J_t = 1$ と反強磁性である $J_t = -1$ のそれぞれについてレプリカ系を構成し, $\beta = 0$ で2つのレプリカ系を繋ぎ, 強磁性と反強磁性を含んだ1つのレプリカ系として扱う方法をとる. この方法は多次元レプリカ交換モンテカルロ法 [8, 9] であるとも言えるであろう.

$J_t = \pm 1, J_d = 0$ とし, 逆温度 β については $\beta_{\min} = 0, \beta_{\max} = 15$ としてレプリカ系を構成することを考える. ここで拡張した逆温度 $\tilde{\beta} = \beta J_t$ を導入し, $\tilde{\beta}$ についてのレプリカ系を構成する. つまり, $\tilde{\beta}_{\min} = -15$ から $\tilde{\beta}_{\max} = 15$ までの負温度を含むようなレプリカ系を扱う. このレプリカ系での m 番目の拡張された逆温度であることは添字 m で表すことにする. ここで, 各レプリカの拡張した逆温度 $\tilde{\beta}$ は交換確率一定法 [10] によって調節する. このレプリカ系についてレプリカ交換モンテカルロ法で各 m ごとの tatami 条件違反数 N についての規格化されたエネルギーヒストグラム $H_m(N)$ を作り, マルチヒストグラム再

重法 [35] より,

$$g(N) = \frac{\sum_m H_m(N)}{\sum_m e^{-\tilde{\beta}_m N} / Z(\tilde{\beta}_m)}, \quad (4.8)$$

$$Z(\tilde{\beta}_m) = \sum_N g(N) e^{-\tilde{\beta}_m N}, \quad (4.9)$$

の二式を収束するまで繰り返すことによって状態数 $g(N)$ を推定する. ただし, このマルチヒストグラム再重法で得られる結果は定数 A 倍された $A \cdot g(N)$ であるので, 式 (4.6), (4.7) で規格化する必要がある.

4.3.1 状態数推定結果

本研究では次に示す実験環境にてシミュレーションを実行する.

- CPU : Xeon E5-2640 ×2
- Memory : 32GB
- OS : Windows 7 Professional
- Compiler : Intel C++ Compiler

なお, 領域サイズが大きくなると tatami 条件の違反数 N , dimer の数 M の最大値が大きくなることから, 再重法の計算過程が倍精度の範囲では扱いきれなくなり, オーバーフローやアンダーフローが発生する. よって, 領域サイズが大きいときには多倍長精度環境である Boost Multiprecision Library を使用する.

状態数を推定した結果を示す. レプリカ交換モンテカルロ法を実行すると図 4.4 のようなエネルギーヒストグラムが得られる. このヒストグラムについてマルチヒストグラム再重法を実行すると, 図 4.5, 4.6 のような tatami 条件違反数 N についての状態数を得ることができる. これらの図に示した結果の $g(0)$ が tatami タイリングとなる状態数である. 正方領域とアステカダイヤモンド領域についての tatami タイリングの状態数推定結果を表 4.1, 4.2 にまとめる. これらの結果は 16 回実行⁹した結果の平均と統計誤差である.

正方領域については厳密な状態数が知られているので推定した結果と比較してみることにする. ある程度の領域サイズまでであるなら高い精度で状態数を推定できているが, 領域サイズが大きくなるとあまり精度良く推定できていない. 精度を出すためには領域サイズが大きくなるにしたがって MCS 数を増やす必要があるが, 領域サイズを増やすと確率変数の数も増えることから MCS も増加する. ここでの領域サイズ 128×128 の正方領域でのレプリカ交換モンテカルロ法の実行と再重法の実行は 1 回の実行で 30 時間程度の計算時間を必要とした. よって, 本研究の環境ではこれ以上精度を良くすることは計算時間の観点から難しい.

アステカダイヤモンド領域については厳密な状態数は知られていないので, 数え上げ [61] の結果と推定した結果を比較する. 数え上げの結果は計算時間の観点から小さい領域サイ

⁹何度か再重法を使うときは, 前回推定した分配関数や状態数を初期値として再重法を実行することで反復回数を少なくすることができる.

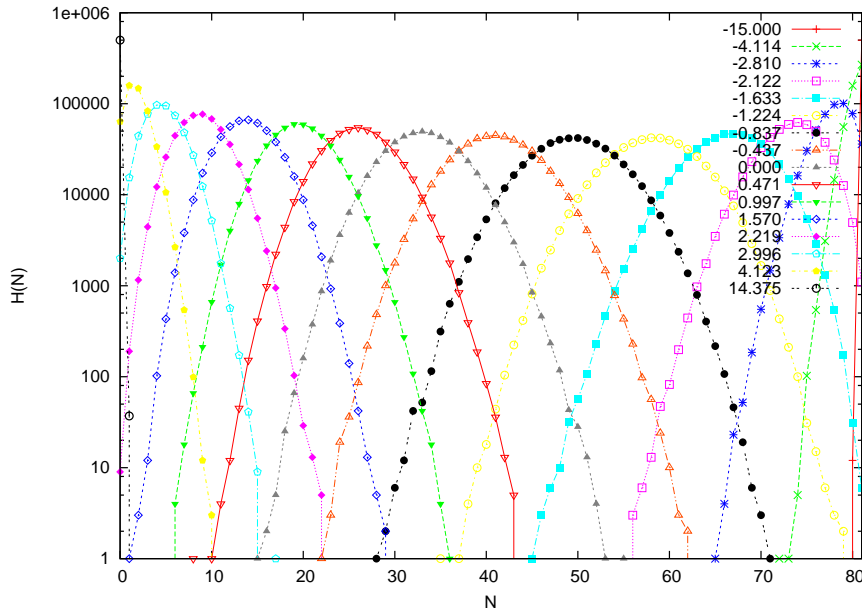


図 4.4: サイズ 10×10 の正方領域で 5×10^5 回サンプルした結果のエネルギーヒストグラム $H(N)$. 各色の線それぞれが 1 つの β に対応する. ここでは規格化はしていない.

ズについてしか得られていないが, その領域サイズでは数え上げの結果とほぼ同じとなる状態数を高い精度で推定できている. また, 大きな領域サイズについても小さな誤差で状態数を推定することができている. このことは, 数え上げが困難な大きな領域サイズでも高い精度で状態数が推定できていることを示唆している.

4.3.2 漸近形の推定

正方領域については厳密な tatami タイリングの状態数が得られているが, tatami 条件を違反した数ごとの状態数は知られていない. よって, tatami 条件の違反数ごとの漸近形を考察することにする. 領域サイズ $l \times l$ の正方領域の tatami 条件違反数が 1 と 2 のときの状態数 $g(N)$ ($N = 1, 2$) の推定結果は図 4.7 に示す結果である. $\log g(N)$ が領域サイズ $l \times l$ の l について tatami タイリングの状態数と似た傾向の増加をしていることから, これらの l についての状態数のオーダーを tatami タイリングの状態数 $2^{\ell-1}(3\ell-4)+2$ から考えてみる.

ここでスピン系の理論である低温展開のような考え方を導入し, 状態を $N = 0$ から $N = 1$ にすることを考える. Tatami タイリングである $N = 0$ から $N = 1$ になることを考えると, 図 4.8 のように端にある dimer を 2 つの monomer に分割する方法と, 図 4.9 のように領域の内部にある 1 点を tatami 条件が違反するように組み替える方法が考えられる. よって, $N = 0$ から $N = 1$ にするとき, 図 4.8 の方法は領域の周囲長に依存して状態数が増え, 図 4.9 の方法は面積に依存して状態数が増えると考えられる. したがって, $N = 1$ のときの状態数は $N = 0$ の状態数 $2^{\ell-1}(3\ell-4)+2$ から l の多項式オーダー倍で近似できると考えられる. そこで, $N = 1$ のとき, $2^{\ell-1}(A_3\ell^3 + A_2\ell^2 + A_1\ell + A_0)$ でフィッティ

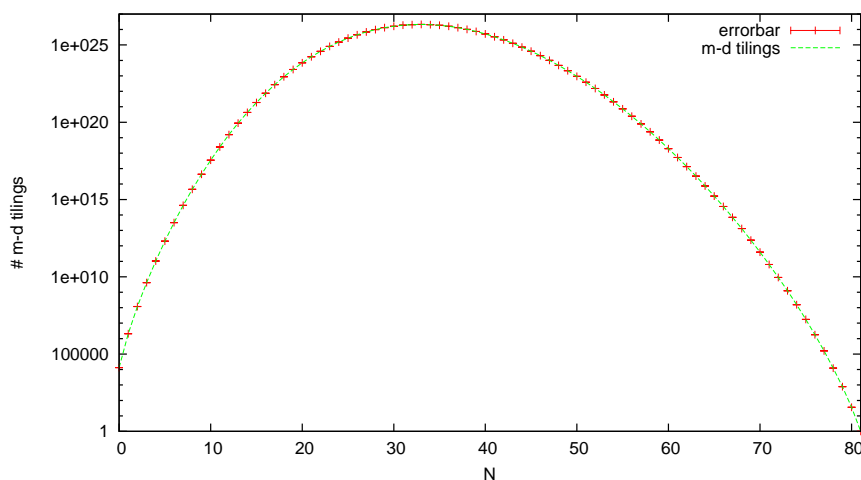


図 4.5: サイズ 10×10 の正方領域で状態数 $g(N)$ を推定した結果. ここでは $g(N)/g(81)$ として規格化している.

ングすることにする. ここで, A_0, A_1, A_2, A_3 はフィッティングパラメータである. 同様に $N = 2$ のとき, $2^{\ell-1}(B_5\ell^5 + B_4\ell^4 + B_3\ell^3 + B_2\ell^2 + B_1\ell + B_0)$ でフィッティングする. ここで, $B_0, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5$ はフィッティングパラメータである. フィッティングしてグラフを描いた結果を図 4.7 に示す. 領域サイズが小さいところでズレが生じているが, 大きな領域サイズでは推定値に近い値をとることができる.

さらに, 図 4.10 にいくつかの領域形状の周囲長 p についての tatami タイリング状態数の推定結果を示す. ここで, 長方形領域のときは $p = 2(\ell_1 + \ell_2)$ で, アステカダイヤモンド領域のときは $p = 4\ell$ である. この結果から $\log g(0)$ は $C \cdot p + D$ で近似できると予想され, C は形状に依存せず, D だけが形状に依存する項であると考えられる. すなわち, 図 4.10 は tatami タイリングの状態数が周囲長に依存することを示唆している.

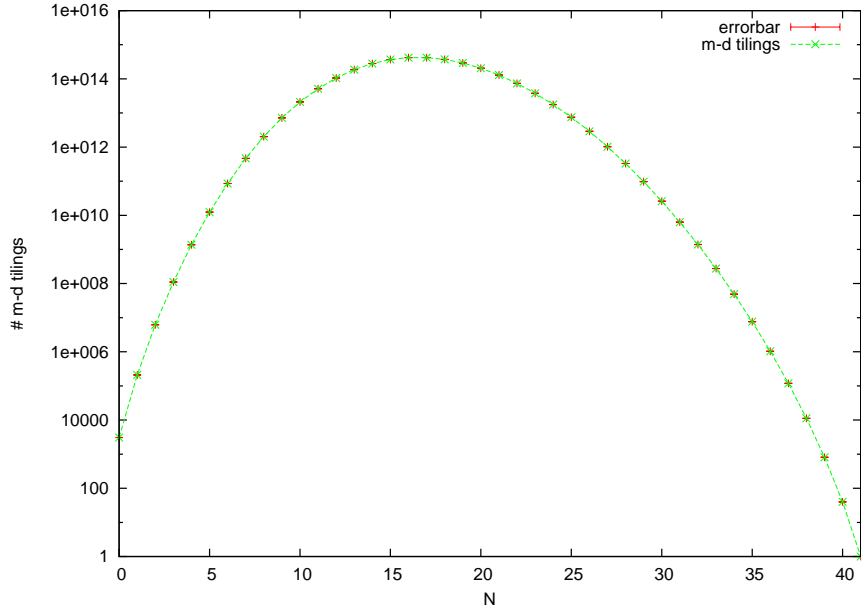


図 4.6: オーダー $\ell = 5$ のアステカダイヤモンド領域で状態数 $g(N)$ を推定した結果. ここでは $g(N)/g(41)$ として規格化している.

表 4.1: 正方領域についての tatami タイリングの状態数 $g(0)$ の推定結果と厳密解との比較.

Size $\ell \times \ell$	Exact[32] $(2^{\ell-1}(3\ell - 4) + 2)$	MC result	MCS \times # of replica
6×6	450	$(4.49 \pm 0.03) \times 10^2$	$(3.0 \times 10^5) \times 48$
7×7	1090	$(1.09 \pm 0.01) \times 10^3$	$(3.0 \times 10^5) \times 48$
8×8	2562	$(2.57 \pm 0.02) \times 10^3$	$(4.0 \times 10^5) \times 48$
9×9	5890	$(5.89 \pm 0.07) \times 10^3$	$(4.0 \times 10^5) \times 48$
10×10	13314	$(1.33 \pm 0.02) \times 10^4$	$(5.0 \times 10^5) \times 48$
11×11	29698	$(2.96 \pm 0.04) \times 10^4$	$(6.0 \times 10^5) \times 48$
12×12	65538	$(6.56 \pm 0.06) \times 10^4$	$(8.0 \times 10^5) \times 48$
15×15	671746	$(6.70 \pm 0.07) \times 10^5$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$
20×20	29360130	$(2.93 \pm 0.04) \times 10^7$	$(5.0 \times 10^6) \times 48$
25×25	1191182338	$(1.19 \pm 0.01) \times 10^9$	$(2.0 \times 10^7) \times 48$
32×32	197568495618	$(2.00 \pm 0.07) \times 10^{11}$	$(1.0 \times 10^6) \times 96$
40×40	63771674411010	$(6.38 \pm 0.20) \times 10^{13}$	$(2.0 \times 10^6) \times 96$
48×48	$1.9703248369746 \times 10^{16}$	$(2.04 \pm 0.12) \times 10^{16}$	$(2.0 \times 10^6) \times 96$
64×64	$1.7339939429287 \times 10^{21}$	$(1.69 \pm 0.16) \times 10^{21}$	$(2.0 \times 10^6) \times 96$
128×128	$6.4653649714978 \times 10^{40}$	$(1.79 \pm 1.18) \times 10^{41}$	$(2.0 \times 10^6) \times 96$

表 4.2: アステカダイヤモンド領域についての tatami タイリングの状態数 $g(0)$ の推定結果と数え上げ結果との比較.

Order ℓ	Enumeration	MC result	MCS \times # of replica
2	80	$(8.00 \pm 0.04) \times 10^1$	$(4.0 \times 10^4) \times 48$
3	392	$(3.92 \pm 0.03) \times 10^2$	$(5.0 \times 10^4) \times 48$
4	1200	$(1.20 \pm 0.01) \times 10^3$	$(1.0 \times 10^5) \times 48$
5	3080	$(3.08 \pm 0.03) \times 10^3$	$(2.0 \times 10^5) \times 48$
6	7312	$(7.32 \pm 0.06) \times 10^3$	$(4.0 \times 10^5) \times 48$
7	16712	$(1.68 \pm 0.02) \times 10^4$	$(6.0 \times 10^5) \times 48$
8	37424	$(3.75 \pm 0.05) \times 10^4$	$(1.0 \times 10^6) \times 48$
10	181392	$(1.81 \pm 0.02) \times 10^5$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$
12	—	$(8.51 \pm 0.13) \times 10^5$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$
16	—	$(1.78 \pm 0.04) \times 10^7$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$
24	—	$(6.57 \pm 0.34) \times 10^9$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$
32	—	$(2.30 \pm 0.17) \times 10^{12}$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$
48	—	$(2.17 \pm 0.27) \times 10^{17}$	$(2.0 \times 10^6) \times 48$

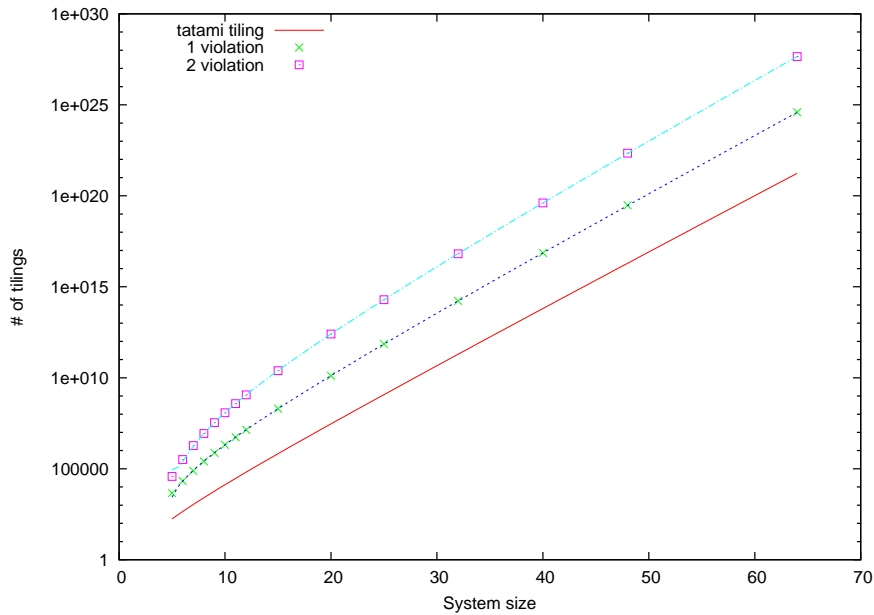


図 4.7: tatami 条件違反数 1, 2 のときの状態数推定結果と tatami タイリングの厳密な状態数. ここで横軸は領域サイズ $l \times l$ の l を表す. 青線と水色線はそれぞれ tatami 条件の違反数が 1 のときと 2 のときの推定数にフィッティングした結果を表す.

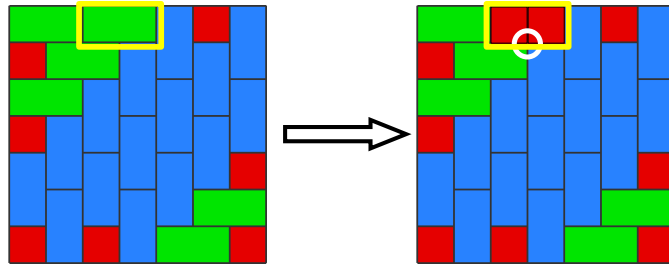


図 4.8: 端にある dimer を 2 つの monomer に分割して $N = 0$ から $N = 1$ となる例.

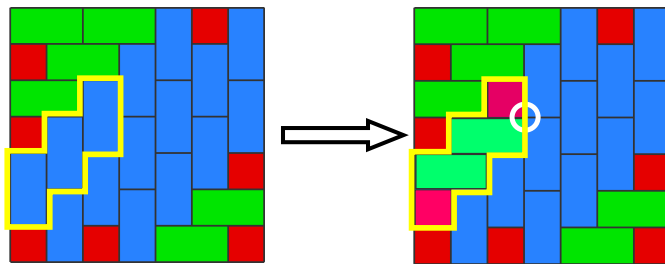


図 4.9: 領域の内部にある 1 点を tatami 条件が違反するように組み替えて $N = 0$ から $N = 1$ となる例.

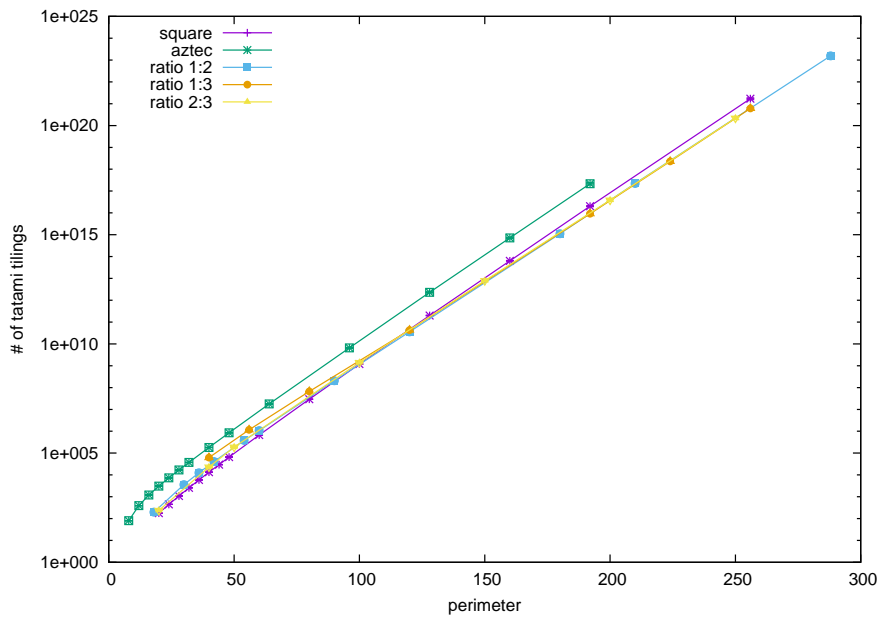


図 4.10: 周囲長に p についての tatami タイリングの状態数の推定結果. ここで, ratio 1:2, ratio 1:3, ratio 2:3 はそれぞれ縦横比 1 : 2, 1 : 3, 2 : 3 の長方形を表す.

4.4 多次元レプリカ交換モンテカルロ法による解析

多次元交換モンテカルロ法 [8, 9] を用いて正方領域についての tatami 条件の違反数 N , dimer 数 M ごとの状態数 $g(N, M)$ を推定する.

逆温度 $\beta = 1$ とし, 結合定数 J_t, J_d について多次元レプリカ系を構成することを考える. 個々の結合定数は J_t については添字 n , J_d については添字 m で $J_{tnm} (= (J_t)_{mn})$ のように表すことにする. このレプリカ系について多次元レプリカ交換モンテカルロ法で tatami 条件違反数 N と dimer 数 M についての規格化されたエネルギーヒストグラム $H_{nm}(N, M)$ を作り, その結果をマルチパラメーターマルチヒストグラム再重法 [35, 42, 43] より,

$$g(N, M) = \frac{\sum_{n,m} H_{nm}(N, M)}{\sum_{n,m} e^{-(J_{tnm} + J_{dnm})} / Z(J_{tnm}, J_{dnm})}, \quad (4.10)$$

$$Z(J_{tnm}, J_{dnm}) = \sum_{N,M} g(N, M) e^{-(J_{tnm} + J_{dnm})}, \quad (4.11)$$

の二式を収束するまで繰り返すことによって状態数 $g(N, M)$ を推定する. ただし, ここで得られる結果は定数 A 倍された結果 $A \cdot g(N, M)$ であるので, 式 (4.6) や式 (4.7) で規格化する必要がある.

結合定数 J_t, J_d について, J_t は 15 個, J_d は 15 個, 合計 225 個のレプリカからなる多次元レプリカ系を構成する. そして, レプリカの結合定数の組を $J_{t\max} = 8, J_{t\min} = -8, J_{d\max} = 8, J_{d\min} = -8$ の範囲に長形状に等間隔に配置し, 3.2 節で提案した交換確率一定法で結合定数を調節する.

モンテカルロ法や再重法の計算時間の観点から大きな領域サイズを実行することは難しく, ここでは領域サイズ $10 \times 10, 11 \times 11$ の正方領域とオーダー $\ell = 5$ のアステカダイヤモンド領域についての結果を示す. 領域サイズ 10×10 について, 交換確率一定法の定数パラメータ $w = 0.0$ として結合定数が収束するまで実行した結果を図 4.11 に示す. この結合定数の設定を用いて, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法を実行する. その結果について, マルチパラメーターマルチヒストグラム再重法を実行することで状態数を推定する.

多次元レプリカ交換モンテカルロ法で 5×10^5 MCS 回実行して推定した平均状態数と誤差を図 4.12, 4.13, 4.14, 4.15 に示す. ここでの誤差は 5×10^5 MCS 回の実行を 16 回実行した結果から統計誤差を評価している. 結果は高い精度で状態数を推定することができている. これらの結果から正方領域 $\ell \times \ell$ のときの $N = 0$ のときを除いた状態数が非ゼロの領域は, NM 平面での 4 直線,

$$N_{\max} - \frac{\ell}{\ell + 1} M - N = 0, \quad (4.12)$$

$$N_{\max} - 2M - N = 0, \quad (4.13)$$

$$M = M_{\max}, \quad (4.14)$$

$$N = 1, \quad (4.15)$$

に囲まれる領域であることを示唆している.

さらに, オーダー $\ell = 5$ のアステカダイヤモンド領域について多次元レプリカ交換モンテカルロ法で 5×10^5 MCS 実行して推定した結果を図 4.16 に示す. 状態数をとる領域が正方領域のときほどに単純な形になっていなく, 領域の形状の影響を受けることを示唆している.

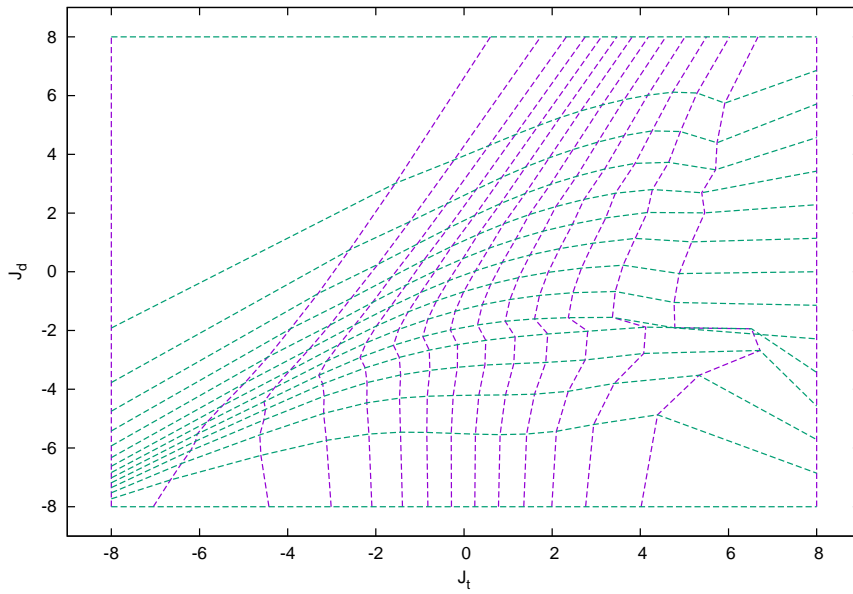


図 4.11: 領域サイズ 10×10 について交換確率一定法で結合定数を調節した設定. レプリカは紫線と緑線の交点の位置に配置されている.

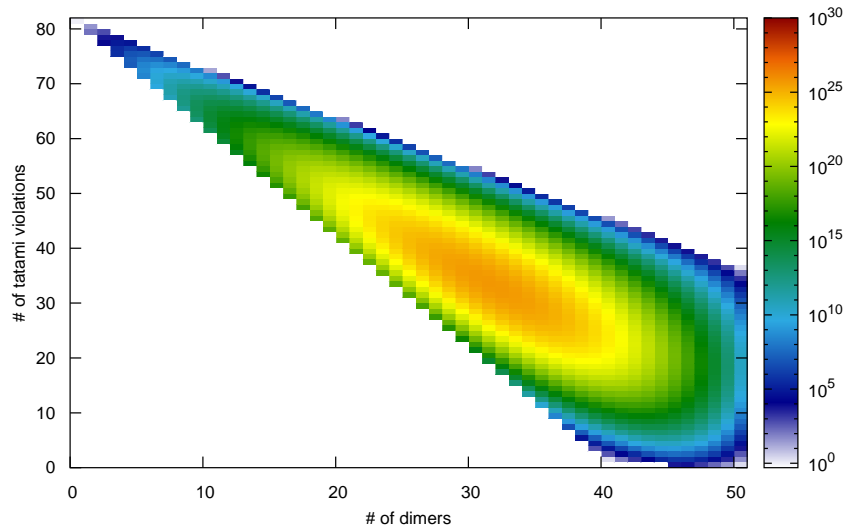


図 4.12: 領域サイズ 10×10 の tatami 条件違反数と dimer 数ごとの状態数 $g(N, M)$ 推定結果のヒートマップ. ここで白色の空間は状態数がゼロであることを表す.

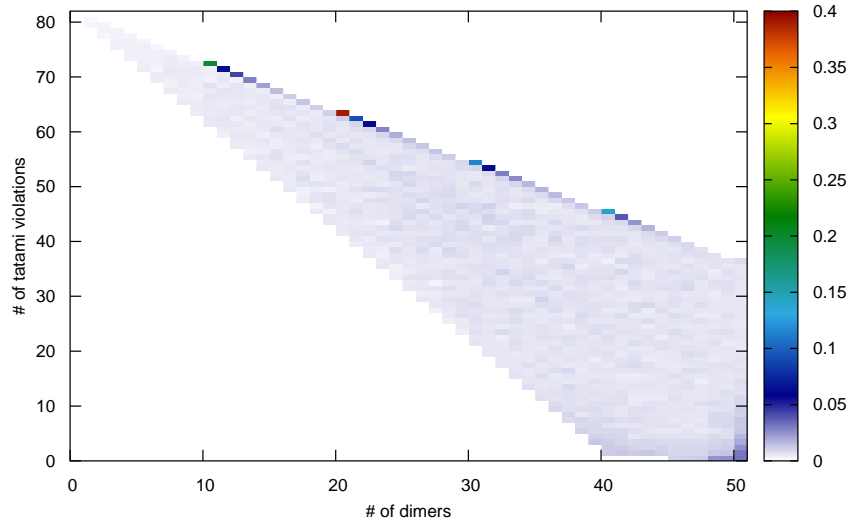


図 4.13: 領域サイズ 10×10 の tatami 条件違反数と dimer 数ごとの状態数推定の相対誤差のヒートマップ.

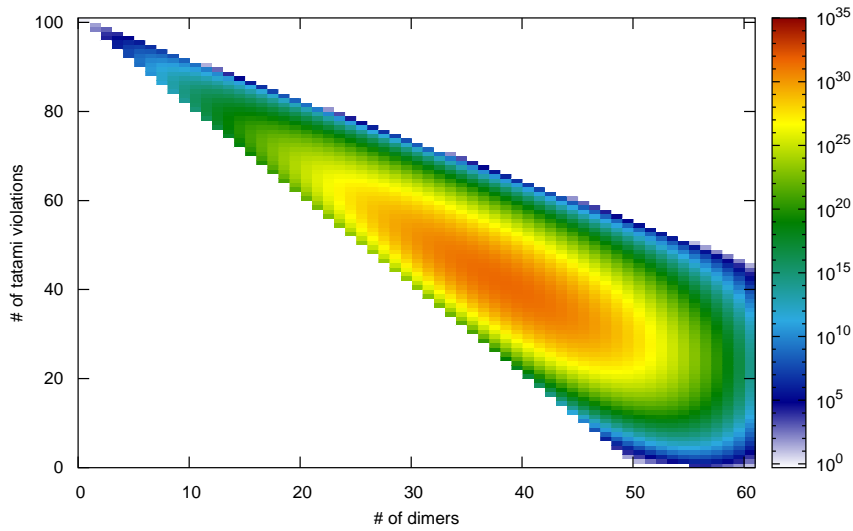


図 4.14: 領域サイズ 11×11 の tatami 条件違反数と dimer 数ごとの状態数 $g(N, M)$ 推定結果のヒートマップ. ここで白色の空間は状態数がゼロであることを表す.

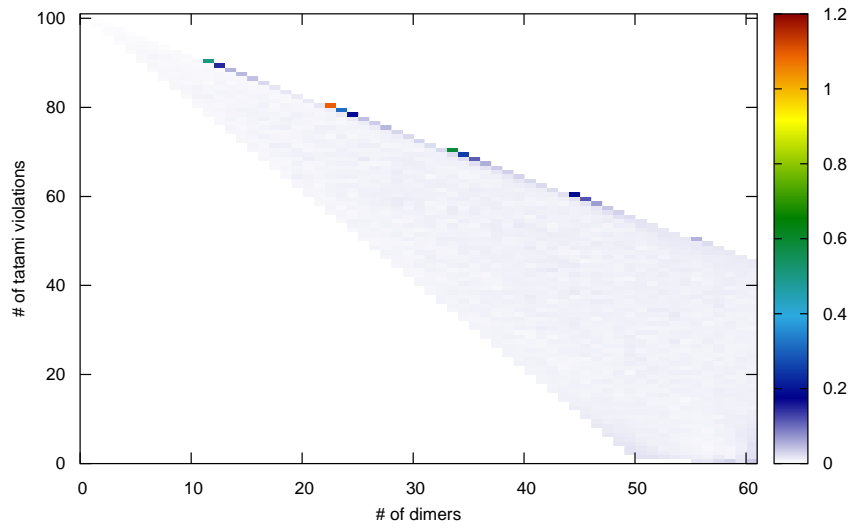


図 4.15: 領域サイズ 11×11 の tatami 条件違反数と dimer 数ごとの状態数推定の相対誤差のヒートマップ.

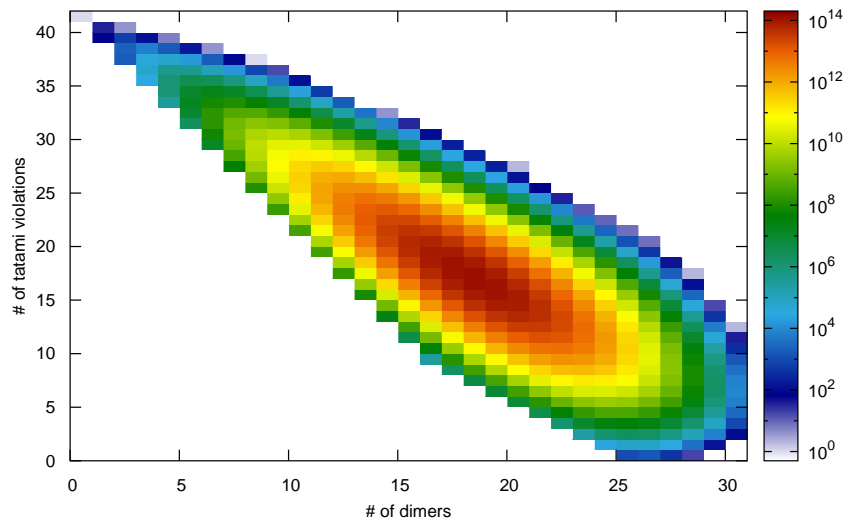


図 4.16: オーダー $\ell = 5$ のアステカダイヤモンド領域の tatami 条件違反数と dimer 数ごとの状態数 $g(N, M)$ 推定結果のヒートマップ. ここで白色の空間は状態数がゼロであることを表す.

4.5 熱力学的性質の解析

Tatami タイリングシステムの tatami 条件違反数 N と dimer 数 M についての状態数 $g(N, M)$ の推定結果を用いて熱力学的性質を調べる. ここでは, 逆温度 $\beta = 1$ とし, 自由エネルギー F を次のように定義する.

$$F(J_t, J_d) = -\log Z(J_t, J_d) = -\log \sum_{N, M} g(N, M) e^{-(J_t N + J_d M)}. \quad (4.16)$$

自由エネルギーを結合定数 J_t で微分すると,

$$\frac{\partial}{\partial J_t} F(J_t, J_d) = \langle N \rangle \quad (4.17)$$

となり, 結合定数 J_d で微分すると,

$$\frac{\partial}{\partial J_d} F(J_t, J_d) = \langle M \rangle \quad (4.18)$$

と tatami 条件違反数 N と dimer 数 N の期待値を得ることができる. さらに, 式 (4.17) を J_t で微分すると,

$$\frac{\partial^2}{\partial J_t^2} F(J_t, J_d) = -(\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2) = -\chi_N \quad (4.19)$$

となり, 式 (4.18) を J_d で微分すると,

$$\frac{\partial^2}{\partial J_d^2} F(J_t, J_d) = -(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = -\chi_M \quad (4.20)$$

となり, N についての感受率 χ_N と M についての感受率 χ_M を得ることができる.

4.4 節で得た状態数の推定結果を用いて, 上記の量を評価する. 簡単のため $\chi'_N = -\chi_N$, $\chi'_M = -\chi_M$ と定義する. 領域サイズ 10×10 , 11×11 で $\langle N \rangle$, $\langle M \rangle$ を評価した結果を図 4.17, 4.18 に示す. どちらの領域サイズでも同じ傾向の期待値の変化をとることがわかる.

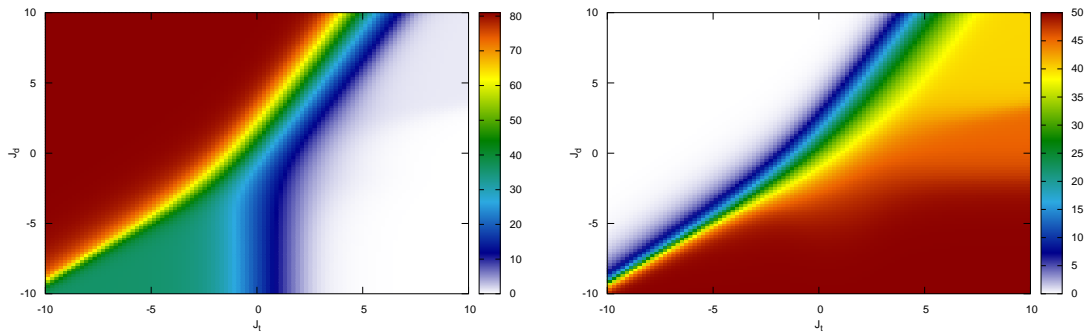


図 4.17: 領域サイズ 10×10 での評価. (左) tatami 条件違反数の期待値 $\langle N \rangle$. (右) dimer 数の期待値 $\langle M \rangle$.

さらに, χ_N , χ_M を評価した結果を図 4.19, 4.20 に示す. 感受率についてもどちらの領域

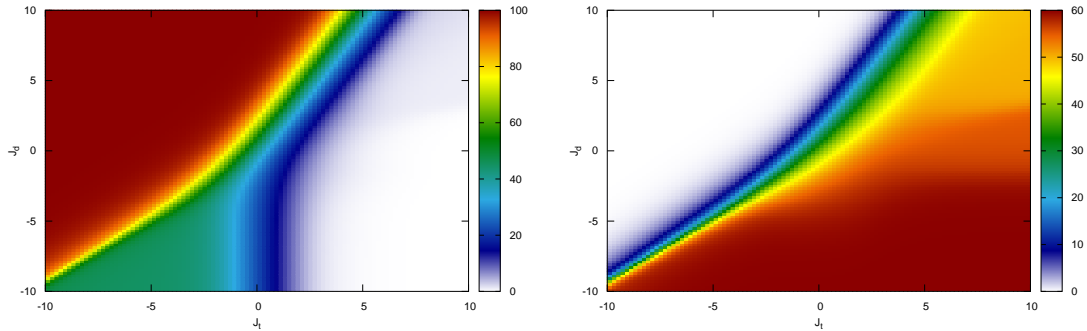


図 4.18: 領域サイズ 11×11 での評価. (左) tatami 条件違反数の期待値 $\langle N \rangle$. (右) dimer 数の期待値 $\langle M \rangle$.

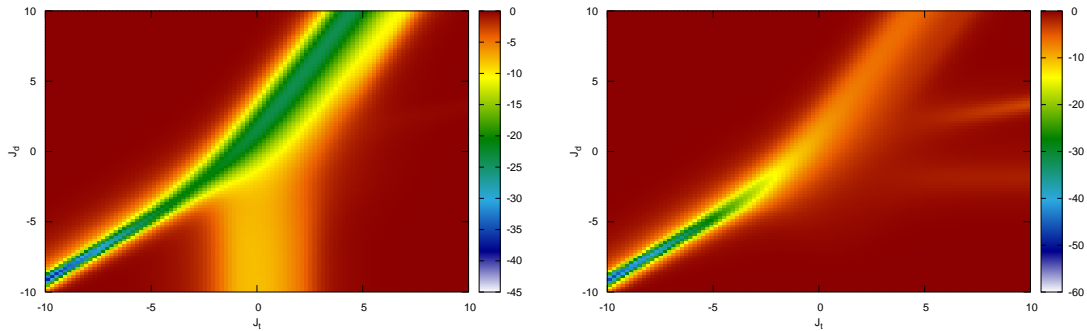


図 4.19: 領域サイズ 10×10 での評価. (左) tatami 条件違反数 N についての χ'_N . (右) dimer 数 M についての χ'_M .

サイズでも同じ傾向の変化をとることがわかる. これらの結果は tatami タイリングシステムの結合定数依存性が正方領域の領域サイズの偶奇に依存しないことを示唆している. また, tatami 条件違反数や dimer 数, 感受率に急激な値の変化が存在しないことがわかる. これは tatami タイリングシステムが相転移をもたないことを示唆している.

ここでの結果は大きな領域サイズでの結果ではないので, 有限サイズ効果を大きく受けていることが考えられる. したがって, さらに領域サイズを大きくした解析が必要であり, スケーリング理論を用いた解析をする必要が考えられる.

4.6 まとめ

本研究ではレプリカ交換モンテカルロ法と多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いて tatami タイリングシステムの状態数を推定した. レプリカ交換モンテカルロ法での推定では強磁性と反強磁性と組み合わせたようなレプリカ系の構成について提案し, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法の推定では交換確率一定法を用いることで効率よく状態数を推定した. 状態数を推定した結果を用いて, tatami 条件違反数が小さいところでの状態数の漸

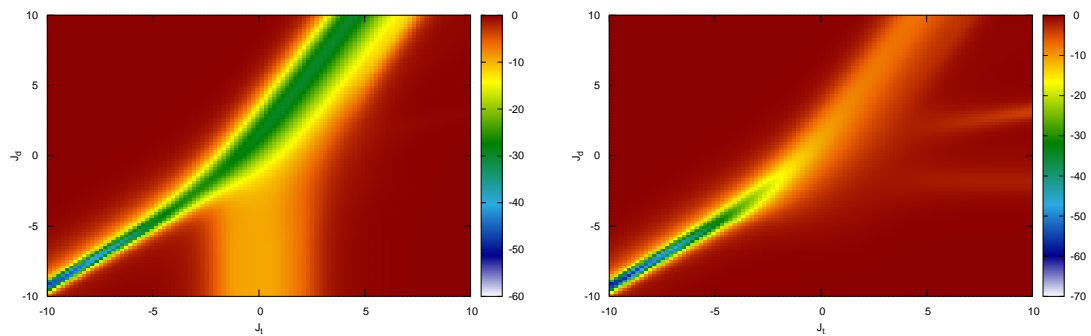


図 4.20: 領域サイズ 11×11 での評価. (左) tatami 条件違反数 N についての χ'_N . (右) dimer 数 M についての χ'_M .

近形を推定した. さらに, 状態数を推定した結果を用いて小さな領域サイズについてであるが熱力学的性質を解析した. 計算時間の観点から, 現状では大きな領域サイズについての試行は難しく, 効率の良い再重法の開発をする必要があると考えられる. 熱力学的性質の解析は, さらに領域サイズを大きくして解析する必要がある.

5 まとめ

本研究では多次元状態密度推定に役立つ手法として多次元レプリカ交換モンテカルロ法の効率の改善をする手法を提案し, 多次元状態密度推定の問題として tatami タイリングシステムを解析した.

本研究では多次元状態密度を精度良く推定するために, 拡張アンサンブルモンテカルロ法の一つである多次元レプリカ交換モンテカルロ法の効率の改善を目指し, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法の交換確率一定法を開発した. さらに, 交換確率一定法と PT_{τ} アルゴリズムと組み合わせた手法を提案し, その手法を用いることで多次元レプリカ交換モンテカルロ法のレプリカ交換効率が大きく改善されることを示した. 本研究で提案した手法は幅広く応用することができると考えられ, 計算物理の発展に貢献する手法であることが期待できる.

また, 本研究では多次元状態密度推定の問題として, tatami タイリングシステムの解析をレプリカ交換モンテカルロ法と多次元レプリカ交換モンテカルロ法を用いて行った. レプリカ交換モンテカルロ法では強磁性と反強磁性を組み合わせる多次元レプリカ系であるようなレプリカ系を扱うことを提案した. また, 多次元レプリカ交換モンテカルロ法では交換確率一定法を用いることで精度良く状態数の詳細を推定することができた.

本研究での成果はモンテカルロ法で多次元状態密度を推定する上で役立つ成果であると期待する.

謝辞

本研究を進めるにあたり、樋口三郎先生には常日頃から熱心にサポート、議論、ご指導していただき感謝を致します。また、松木平淳太先生と飯田晋司先生には有益なご助言をしていただき感謝を申し上げます。学会や研究会で議論をしていただいた方々に感謝します。

参考文献

- [1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.*, 21, 1087 (1953).
- [2] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr., and M. P. Vecchi, *Science*, 220, 671 (1983).
- [3] K. Hukushima and Y. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 65, 1604 (1996).
- [4] E. Marinari and G. Parisi, *Spin Glasses and Random Fields*, 12 (1997).
- [5] E. Marinari and G. Parisi, *Europhys. Lett.*, 19, 451 (1992).
- [6] B. A. Berg and T. Neuhaus, *Phys. Rev. Lett.*, 68, 9 (1992).
- [7] F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.*, 86, 2050 (2001).
- [8] Y. Sugita, A. Kitao, and Y. Okamoto, *J. Chem. Phys.*, 113, 6042 (2000).
- [9] H. Fukunishi, O. Watanabe, and S. Takada, *J. Chem. Phys.*, 116, 9058 (2002).
- [10] K. Hukushima, *Phys. Rev. E*, 60, 3606 (1999).
- [11] H. G. Katzgraber, S. Trebst, D. A. Huse, and M. Troyer, *J. Stat. Mech.*, 03018 (2006).
- [12] E. Bittner, A. Nußbaumer, and W. Janke, *Phys. Rev. Lett.*, 101, 130603 (2008).
- [13] A. J. Ballard and C. Jarzynski, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 106, 12224 (2009).
- [14] M. Hasenbusch and S. Schaefer, *Phys. Rev. E*, 82, 046707 (2010).
- [15] T. Vogel and D. Perez, *Phys. Rev. Lett.*, 115, 1900602 (2015).
- [16] R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.*, 58, 86 (1987).
- [17] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.*, 62, 321 (1989).
- [18] Y. Komura and Y. Okabe, *J. Comput. Phys.*, 231, 1209 (2012).
- [19] Y. Komura and Y. Okabe, *Comput. Phys. Commun.*, 184, 40 (2013).
- [20] H. Suwa and S. Todo, *Phys. Rev. Lett.*, 105, 120603 (2010).

- [21] K. S. Turitsyn, M. Chertkov, and M. Vucelja, *Physica D*, 240, 410 (2011).
- [22] H. C. M. Fernandes and M. Weigel, *Comput. Phys. Commun.*, 182, 1856 (2011).
- [23] E. P. Bernard and W. Krauth, *Phys. Rev. E*, 86, 017701 (2012).
- [24] Y. Sakai and K. Hukushima, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 82, 064003 (2013).
- [25] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Chem. Theory Comput.*, 9, 570 (2013).
- [26] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Comput. Chem.*, 34, 2493 (2013).
- [27] M. Michel, S. C. Kapfer, and W. Krauth, *J. Chem. Phys.* 140, 054116 (2014).
- [28] Y. Nishikawa, M. Michel, W. Krauth, and K. Hukushima, *Phys. Rev. E*, 92, 063306 (2015).
- [29] K. Hukushima, *Comput. Phys. Commun.*, 147, 77 (2002).
- [30] K. Kimura and S. Higuchi, arXiv, <http://arxiv.org/abs/1606.06456> (2016).
- [31] D. E. Knuth *et al.*, *The Art of Computer Programming, Volume 4, Fascicle 1*, Addison-Wesley Professional (2009).
- [32] A. Erickson and M. Schurch, *J. Discrete Algorithms*, 16, 258 (2012).
- [33] K. Kimura and S. Higuchi, *Int. J. Mod. Phys. C*, 27, 1650128 (2016).
- [34] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.*, 61, 2635 (1988).
- [35] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.*, 63, 1195 (1989).
- [36] P. A. Bash, U. C. Singh, R. Langridge, and P. A. Kollman, *Science*, 236, 564 (1987).
- [37] Y. Ogata, *Numer. Math.*, 55, 137 (1989).
- [38] D. J. Amit *et al.*, *Field Theory, the Renormalization Group, And Critical Phenomena: Graphs to Computers*, Third Edition, World Scientific Publishing (2005).
- [39] H. Müller-Krumbhaar and K. Binder, *J. Stat. Phys.*, 8, 1 (1973).
- [40] A. Mitsutake and Y. Okamoto, *Phys. Rev. E*, 79, 047701 (2009).
- [41] T. Nagai and Y. Okamoto, *Phys. Rev. E*, 86, 056705 (2012).
- [42] Z. Fodor and S. D. Katz, *Phys. Lett. B*, 534, 87 (2002).
- [43] S. Ejiri, *Phys. Rev. D*, 69, 094505 (2004).
- [44] M. Blume, *Phys. Rev.*, 141, 517 (1966).
- [45] H. W. Capel, *Physica*, 32, 966 (1966).

- [46] D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* 28, 449 (1972).
- [47] C. J. Silva, A. A. Caparica, and J. A. Plascak, *Phys. Rev. E*, 73, 036702 (2006).
- [48] Y. Yüksel, U. Akıncı, H. Polat, *Phys. Scr.*, 79, 045009 (2009).
- [49] D. M. Saul, M. Wortis, and D. Stauffer, *Phys. Rev. B*, 9, 4964 (1974).
- [50] T. W. Burkhardt, *Phys. Rev. B*, 14, 1196 (1976).
- [51] P. D. Beale, *Phys. Rev. B*, 33, 1717 (1986).
- [52] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, D. P. Lara, and J. A. Plascak, *Phys. Rev. B*, 57, 11575 (1998).
- [53] P. W. Kasteleyn, *Physica*, 27, 1209 (1961).
- [54] H. N. V. Temperley and M. E. Fisher, *Philosophical Magazine*, 6, 1061 (1961).
- [55] N. Elkies, G. Kuperberg, M. Larsen, and J. Propp, *J. of Alg. Comb.*, 1, 111, (1992).
- [56] F. Ruskey and J. Woodcock, *Electronic J. of Comb.*, 16, 126 (2009).
- [57] A. Erickson, F. Ruskey, J. Woodcock, and M. Schurch, *Electron. J. Combin.*, 18, 109 (2011).
- [58] R. J. Mathar, arXiv, <http://arxiv.org/abs/1311.6135> (2013).
- [59] A. Erickson and F. Ruskey, arXiv, <http://arxiv.org/abs/1304.0070> (2013).
- [60] C. Kenyon, D. Randall, and A. Sinclair, *J. Stat. Phys.*, 83, 637 (1996).
- [61] W. Krauth, *Algorithm and computations*, Oxford University Press (2006).