

要旨

モンテカルロ法は古典統計力学の期待値を計算するためによく使われる手法であり、主に、マルコフ過程を用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法が使われる。マルコフ連鎖モンテカルロ法には計算効率を改善するために、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などの拡張アンサンブルモンテカルロ法と呼ばれる手法群が提案されている。多次元レプリカ交換モンテカルロ法は、レプリカが相転移線を回り込む効果を期待することができ、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に役立つ方法であるが、レプリカ交換の効率を向上させるためのパラメータの設定や交換スケジュールに関する研究がほとんどなされていない。そこで、多次元レプリカ交換モンテカルロ法のレプリカ交換効率を改善する手法として、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を多次元レプリカ交換モンテカルロ法に拡張した。さらに、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良い手法として、交換確率一定法とレプリカ交換モンテカルロ法のレプリカ遷移を改善させる手法である Bittner らによる PT_T アルゴリズムを組み合わせた手法を提案した。

提案手法の性能評価には spin-1 Blume-Capel モデルを用いた。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レプリカを配置したときでも概ね交換確率を等しくするパラメータの設定を実現した。また、レプリカの遷移についても、交換確率一定法で設定したパラメータと PT_T アルゴリズム組み合わせることによって改善することを示した。よって、交換確率一定法と PT_T アルゴリズムを組み合わせた提案手法は、優れた多次元レプリカ交換モンテカルロ法の実装法であると考えられる。

また、多次元状態密度を推定する問題として、tatami タイリングとよばれるタイリングの状態数を推定した。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、領域サイズ $l \times l$ の正方領域での状態数が $2^{l-1}(3l-4)+2$ となることが知られている。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でも詳細に状態数を推定する手法を確立した。

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を組み合わせたレプリカ系の構成を提案し、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であるが熱力学的性質を解析した。

本研究で提案した多次元レプリカ交換モンテカルロ法の交換確率一定法と PT_T アルゴリズムを組み合わせる手法やレプリカ交換モンテカルロ法のレプリカの構成法として強磁性と反強磁性と組み合わせる方法は、多次元状態密度推定に有効に使えることが期待できる。

Abstract

Monte Carlo method is a well used method for expectation value calculation in classical statistical mechanics. Markov chain Monte Carlo method using the Markov process is a typical Monte Carlo method. Various Markov chain Monte Carlo methods are proposed, for example, replica exchange Monte Carlo and multi-dimensional replica exchange Monte Carlo, etc. Multi-dimensional replica exchange Monte Carlo is a way to sample from a system with multiple interactions. However, in this method, it has not been studied for replica exchange and a practical way to determine suitable set of coupling constants. We extend Hukushima's iterative constant exchange probability method for replica exchange Monte Carlo to determine coupling constants for multi-dimensional replica exchange Monte Carlo. Therefore, we develop constant probability method of multi-dimensional replica exchange Monte Carlo for improving probability of replica exchange. Bittner *et al.*'s PT_τ algorithm is a way to set to maximize the number of round-trips in given parameters with replica exchange Monte Carlo. Moreover, we propose a method with multi-dimensional replica exchange Monte Carlo that combines the constant exchange probability method and PT_τ algorithm.

We measure efficiency of the proposed combined method for spin-1 Blume-Capel model. We distribute a coupling constant set in a region with a phase transition line. Then the set is iteratively updated with the constant exchange probability method. We further show that replica exchange probability becomes constant and the number of round-trips is maximized when the constant exchange probability method and PT_τ algorithm are combined. We suggest that the proposed combined method is applicable to general systems.

We consider estimation of multi-dimensional density of states of so-called tatami tiling. Tatami tiling is subject to the constraint that no four corners meet at a point when tatami mats are spread. The number of tatami tilings is $2^{\ell-1}(3\ell - 4) + 2$ on size $\ell \times \ell$ square regions by combinatorics. However, the number of tilings with given number of constraints and any tatami mats is not known. Further, the number of tatami tilings with rectangular regions and complex shape regions is not known. So, we establish a technique of estimation of the number of the tatami tilings by replica exchange Monte Carlo and multi-dimensional replica exchange Monte Carlo.

In the one-dimensional replica exchange Monte Carlo, we employ a temperature set which includes both positive and negative temperatures, or equivalently a parameter set with both ferromagnetic and anti-ferromagnetic coupling constants. In the multi-dimensional replica exchange Monte Carlo, proposed constant exchange probability method is directly applied. By the estimated density of states, we estimate the asymptotic form of the number of low excited states.

The proposed method and technique are expected to improve the efficiency of Monte Carlo study of models in wide areas.