

学位審査結果報告書

学位申請者: 木村健治 (学籍番号 T13D001)

学位の種類: 博士 (理学)

論文題目: モンテカルロ法による多次元状態密度推定の研究

1. 論文内容の要旨

古典統計系において温度などの与えられた外部変数のもとでの期待値を計算することを考えるとき、外部変数の双対パラメタ (エネルギーなど) に対する密度関数が求まれば、任意の外部変数の値に対しての期待値を一度の計算で得ることができる。本論文は、古典統計系の多次元状態密度関数をモンテカルロ法により推定する方法に関して、精度を改善する手法を提案している。多次元レプリカ交換モンテカルロ法において反復的にパラメタ配置を改良して交換確率の低いパラメタ領域を減らし、また適切な頻度でレプリカ交換を行うというものである。この手法をいくつかの古典統計系に適用し、性能評価を行っている。

論文の構成は以下の通りである。

第1章は序論として、本研究の背景を述べるとともに研究目的を示している。統計物理の分野で考案されたマルコフ連鎖モンテカルロ法が、様々な分野で利用される重要な計算手法となっていることを指摘し、その計算効率と適用範囲の拡大が必要であることを述べている。

第2章はモンテカルロ法と題し、以降の論述のための準備として、統計物理における数値計算手法であるマルコフ連鎖モンテカルロ法、拡張アンサンブルモンテカルロ法とくにレプリカ交換法、状態密度推定のための再重法について、用語を定義し、既知の事実の導出を説明し、説明を加えている。

第3章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の改善と題し、計算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、および、これと PT_{τ} アルゴリズムを組み合わせた手法について述べている。マルコフ連鎖モンテカルロ法のレプリカ交換法は、温度パラメタだけが異なる同一の複数の系を、一定の頻度で状態を交換しつつシミュレートする方法である。その温度パラメタの組を計算効率がよくなるように選ぶ方法としては、Hukushima(1999)の交換確率一定法などが知られている。多次元レプリカ交換モンテカルロ法においては、温度パラメタの組に相当するのがパラメタベクトルの組となる。パラメタがベクトルであるとき、ベクトルの各成分を別個に考えて交換確率一定法を単純に拡張することはできないため、この組を調整して計算効率を改善する方法は知られていなかった。本論文では、ひとつの拡張として、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いう実行可能な手順を提案している。また、計算効率を改善する状態交換の頻度の設定のひとつとして、Bittner-Nußbaumer-Janke(2008)による PT_{τ} アルゴリズムが知られている。これを多次元の場合に拡張して用いることを提案している。さらに、提案された組と頻度の設定方法を評価するため、この方法を2次元の古典統計系であるスピン1 Blume-Capel 模型の解析に応用している。この系は、レプリカ交換モンテカルロ法の適用が困難な1次相転移を持つ系であるが、この場合に状態密度が求まることを示し、従来手法と比べて、ベンチマークである往復時間が改善することを数値実験により示している。

第4章は tatami タイリングシステムの解析と題し、第3章の手法を、Knuth(2011)の提案した興味深い組合せ論的対象である tatami タイリングの状態数え上げに応用している。本論文では、

tatami タイリングは、2次元古典統計系であるモノマー-ダイマー系にある種の拘束条件を加えたものと等価であることを指摘し、この形で、第3章で提案され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を適用している。この状態数は、領域が正方形の場合については Erickson-Schurch(2012) によって組合せ論的方法で、長方形の場合については Erickson-Ruskey-Woodcock-Schurch(2011) によって転送行列法で、それぞれ求められているが、一般の形状の領域やその無限領域極限については調べられていなかった。本手法を用いることにより、状態数を正確に推定できることを数値的に示している。

第5章では、本研究で得られた成果について総括が述べられている。

2. 論文審査結果の要旨

以上の論文内容に関して次の点について審査した。

2-1. 新規性と独創性

多次元レプリカ交換モンテカルロ法は、1次元レプリカ交換モンテカルロ法に比べて手続きが複雑で、よいパラメタベクトルの組の配置を見つける手続きを定式化する試みはされていなかった。本論文に述べられた研究では、複数のパラメタについて同時に反復的に配置を改善していく手順が提案されており、この手続きはたいへん独創的なものである。

また、レプリカ交換モンテカルロ法では1次相転移付近の解析が困難であることが知られている。本論文に述べられた研究では、スピン1 Blume-Capel 模型について、パラメタの多次元化がこの困難を回避する効果を持つことを初めて実証している。

数え上げの組み合わせ論的問題を古典統計系として定式化し、拘束条件をハミルトニアンにペナルティ項として加え、拘束条件を緩めたところから解析を進める方法はよく知られているが、本論文で採用している計算方法は、拘束条件とは別のペナルティ項と結合定数を加え、分布をコントロールして状態密度を計算する方法であり、独創的である。

組合せ論の対象である tatami タイリングに対し、いくつかの種類の場合の数の推定を初めて与え、また任意の領域の場合の数の推定を行うアルゴリズムを初めて提案している。

2-2. 寄与と発展性

多次元レプリカ交換モンテカルロ法は、特に化学物理の分野で様々な系の解析に用いられているが、計算量的には高価な方法である。パラメタベクトルの組の設定によって、効率のよい計算が可能となれば、より多くの現実の系の解析が可能となり、物質科学の研究に寄与するものと考えられる。

本論文では、 n 次元パラメタベクトルの一般論を述べ、2次元パラメタベクトルの場合に実際の計算を行っているが、 n 次元の場合を具体的に調べることで、多くの現実の系への適用が今後可能になると考えられる。また、本論文ではパラメタベクトルが格子状に配置されたケースのみを考えているが、より一般の配置を考えることが今後重要となる。この問題を考えるための基盤として、この論文で述べられた研究は重要である。

なお、本論文に記載された成果の一部は1編の査読付き英語共著論文として採択されている。さらに、学会等で、3件の英語口頭発表、6件の日本語口頭発表、7件のポスター発表として報告されている。

以上の審査の結果, 本論文は, 博士 (理学) の学位を授与されるに相応しいものと認められる.

3. 口述試験結果の要旨

2016年7月20日, 審査員および口述試験委員出席のもと, 学位申請者に対して論文の内容およびこれに関連する事項について試問を行い, 合格と判定した.

4. 学位授与の可否

以上の結果, 学位申請者 木村健治は, 博士 (理学) の学位を授与される資格があるものと認める.

2016年7月27日

審査員 (主査) 理工学部教授 松木平 淳太

審査員 (副査) 理工学部教授 國府 宏枝

審査員 (副査) 理工学部教授 飯田 晋司

審査員 (副査) 理工学部講師 樋口 三郎

口述試験委員 理工学部准教授 高橋 隆史

口述試験委員 理工学部講師 阪井 一繁