

1 序論

モンテカルロ (MC) 法は、乱数を用いて系の状態をサンプリングすることにより平衡状態での物理量の平均値の近似値を求める計算手法である。MC 法で複雑な系を低温状態でシミュレーションするとエネルギー障壁を越えて真の平衡状態へ到達するのに長時間を要することになる。問題は、エネルギー障壁をいかにうまく乗り越えて平衡状態を実現させるかということにある。そこで提案されたのが交換 MC 法である。これにより系は、エネルギー障壁をうまく越えることが可能となり、平衡状態に到達するまでの時間を短縮できる。本卒業研究では通常の MC 法と交換 MC 法を用いて、イジングモデルのシミュレーションを行い、これらの方法の比較を行った。

2 交換 MC 法のアルゴリズム

MC 法と交換 MC 法について解説する。具体的な系として N 個の スピンからなるイジング模型を用いる。交換 MC 法では、系のレプリカを M 個用意する。 m 番目のレプリカはつねに温度 $T_m = (k_B \beta_m)^{-1}$ の熱浴と熱の授受をする。交換 MC 法は MC 法の一様なので、まず通常のレプリカ 1 個の MC 法について説明する。通常 MC 法では、メトロポリス法を用いてスピン反転を行い系は時間発展する。 N 回のスピン反転のトライアルを 1 モンテカルロステップ (MCS) と言う。メトロポリス法とはスピン反転でのエネルギー変化 ΔE に従い $\Delta E < 0$ ではスピン反転を採用して、 $\Delta E > 0$ では確率 $P = e^{-\beta \Delta E}$ で反転する。この方法により、十分長い時間の後、系の確率分布はカノニカル分布 $P_{eq}(X, \beta)$ で与えられることにする。交換 MC 法では、 M 個のレプリカを用意し l 番目 ($1 \leq l \leq M$) のレプリカの温度は β_l とする。そして各々のレプリカで温度 β_l のメトロポリス法に従い時間発展を数 MCS 行う。その後ランダムに 2 つのレプリカ $l, l+1$ を選びそれらの状態を交換する。この遷移確率を $W(X, \beta_l | X', \beta_{l+1})$ と書くことにする。複合系の確率分布を

$$P(\beta_1, X_1; \beta_2, X_2; \dots; \beta_l, X_l; \dots; \beta_M, X_M)$$

と書き、この遷移確率が詳細釣り合いの原理

$$P(\dots; X, \beta_l; \dots; X', \beta_{l+1}; \dots)W(X, \beta_l | X', \beta_{l+1}) \\ = P(\dots; X', \beta_l; \dots; X, \beta_{l+1}; \dots)W(X', \beta_l | X, \beta_{l+1})$$

をみたすようにすると、各レプリカはそれぞれ指定された温度でのカノニカル分布に従うことが分かる。複合系の確

率分布は各レプリカのカノニカル分布の積

$$P(\{X, \beta\}) = \prod_m^M P_{eq}(X_m, \beta_m)$$

で与えられるようになる。詳細釣り合いの条件を満たすには W は次のように選ばれば良い。

$$W(X, \beta_l | X', \beta_{l+1}) = \begin{cases} 1, & \Delta < 0 \\ \exp(-\Delta), & \Delta > 0 \end{cases}$$

ここで、 $\Delta = (\beta_{l+1} - \beta_l)(\mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X'))$

この、ふたつの作業を交互に行うことによって低温で重みをもつマイクロ状態を、準安定状態に拘束されることなく、効率よくサンプリングできる。

3 結果と考察

イジング模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = - \sum J \sigma_i \sigma_j$$

である。交換相互作用 J を $J = 1$ とし、イジングスピン変数 σ は $\sigma = +1$ がスピン上向き -1 が下向きの状態とする。MC 法と交換 MC 法を使ってイジングスピン系のシミュレーションを行い、系の磁化を求め比較した。適当なサンプル数を決め、系の温度を $\beta > \beta_c$ と臨界温度以下に設定する。この温度での磁化の平均値を $\pm m_s(\beta)$ としよう。2 つの方法でそれぞれ磁化を求めると MC 法では、局所最小にハマってしまい $\pm m_s$ のマクロな状態での転移が起これずに片側に集まってしまい磁化の平均はゼロにならない。しかし、交換 MC 法ではエネルギー障壁を素早く飛び越えるためサンプル数が少なくても磁化の山が 2 つでき磁化の平均がゼロとなる。MC 法と交換 MC 法の磁化の臨界温度近傍での振舞いを図 1 に示した。

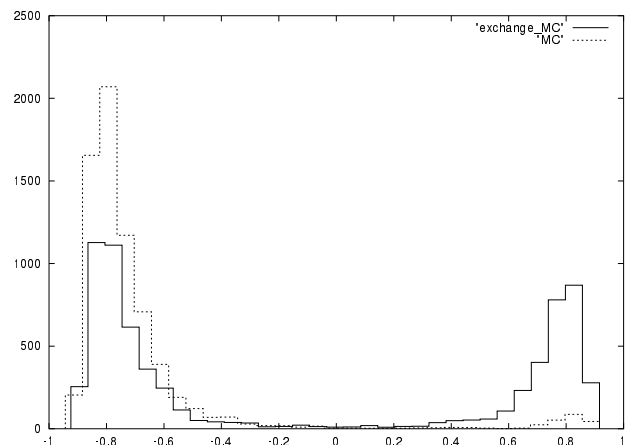


図 1: MC 法と交換 MC 法でのイジングモデルの臨界温度近傍での磁化の振舞い 横軸:磁化、縦軸:データ数