

研究会報告

1998年度後期 基礎物理学研究所研究会

「モンテカルロ法の新展開」

1998年2月24~25日

(於：京都大学基礎物理学研究所 研究棟2階 K206 会議室)

(2000年2月4日受理)

世話人 菊池誠(阪大理)
伊庭幸人(統数研)
福島孝治(東大物性研)
高野宏(慶大理工)

「高次元位相空間の分布とダイナミクスの解析法」

位相空間における分布の形やその動的な変化をシミュレーションデータから記述・解析することは簡単ではない。従来、モンテカルロ法などの解析では、物理的な議論から考えられた少数の物理量を測定して、それらを解析するという手法が行われてきた。これに対して、多数の物理量を測定して、そこから半自動的にシステムの特徴を抽出するという方法が考えられる。具体的には、

- スピングラスのクラスターのシミュレーションデータからの検出
- 有限温度の準安定状態の自動検出
- シミュレーションデータからの近似的な緩和モードの計算、

などがその例である。このセッションでは、この種の方法論についてまとめた発表と討議を行った。

伊庭 幸人 (統数研)

「解析法」のイントロダクション 115

根本 幸児 (北大理)

感受率の固有モード解析によるスピングラスの研究 122

高野 宏 (慶大理工)

リウビル演算子の固有モードのシミュレーションデータからの近似計算 125

伊庭 幸人 (統数研) 福島 孝治 (東大物性研)	
有限混合分布モデルによる有限温度の準安定状態の表現	134
小西 哲郎 (名大理)	
リヤプノフベクトルによる多自由度カオスの解析	143
笹井 理生 (名大人情)	
大自由度分子系の運動の記述	152

「拡張アンサンブル」

マルチカノニカル法、Simulated Tempering 法、交換モンテカルロ法など、与えられた分布(族)を拡張または合併したものからサンプリングする手法(拡張アンサンブル法と総称する)が注目を集めている。この手法は、緩和の促進、自由エネルギーの計算、「珍しい」event の解析などに威力を発揮することが確かめられているが、今後さらに発展させる余地があるものと思われる。このセッションでは、拡張アンサンブル法を用いた研究の事例を紹介するとともに、今後の展望について討論した。

菊地 誠 (阪大理)	
「拡張アンサンブル」のイントロダクション	155
岡本 祐幸 (分子研)	
拡張アンサンブル法で探る蛋白質の折り畳み機構	159
中村 春木 (生物分子工学研)	
マルチカノニカル法によるタンパク質の自由エネルギー地形の解析	171
千見寺 浄慈 (阪大理)	
格子タンパク質模型に対する新しい拡張アンサンブル法	
-Multi-Self-Overlap Ensemble 法 -	172
佐々木 志剛 (北大理)	
交換モンテカルロ法の巡回セールスマン問題への適用	181
福島 孝治 (東大物性研)	
交換法のランダムスピン系への応用	188
伊庭 幸人 (統数研)	
まとめと展望	194