

新しいモンテカルロ法の試みのあれこれ

東京都立大学理学研究科 岡部 豊¹, 富田 裕介, 山口 智明

新しいモンテカルロ法の手法としてクラスターアルゴリズムと拡張アンサンブル法の2つの方向がある。ここでは、クラスターアルゴリズムの方法の拡張版として、臨界点を自動的に決定できる確率変動クラスターアルゴリズムについて述べる。また、拡張アンサンブル法の中からブロードヒストグラム法（フラットヒストグラム法）を紹介する。

1 統計力学におけるモンテカルロ法とその拡張

モンテカルロ法は多体系の問題を研究する標準的な手法として広く使われている。しかし、シミュレーションを実行する上で、時間スケールが長くなる問題にしばしば出くわす。臨界点近傍における critical slowing down, 低温における相分離ダイナミクス, ランダム系やフラストレート系における遅いダイナミクスなど, 多くの現象にこの問題が現れる。

長い時間スケールの問題を克服する試みは多くあるが, これを2つのグループに分類することができる。1つ目は, クラスターアルゴリズムで, 代表的なものは Swendsen-Wang アルゴリズム [1] や Wolff アルゴリズム [2] である。もう1つは, 拡張アンサンブル法と呼ばれる方法で, マルチカノニカル法 [3], 交換モンテカルロ法 [4], ブロードヒストグラム法 [5], フラットヒストグラム法 [6] などがその例である。

Metropolis により導入されたモンテカルロ法を統計力学で状態和 $\sum_n e^{-\beta E_n}$ の評価に用いる場合には, 基本的には

1. 配置を確率過程により $e^{-\beta E_n}$ に比例して作り出すことによりカノニカルアンサンブルを扱う
2. 1つのスピンの状態を更新するシングルスピントリップの過程を行う

ことが通常の手法である。クラスターアルゴリズム [1, 2] では複数のスピンを同時に更新するが, クラスタを決める際に, Kasteleyn-Fortuin (KF) [7] 変換を用いる。この変換を用いることにより, 熱的な相転移の問題が幾何学的な相転移の問題にマップされる [7]。拡張アンサンブル法では, 直接的にはカノニカルアンサンブル以外のアンサンブルを得るが, 重みの付け替え (reweighting) [8] でカノニカル平均を求めることができる。

ここでは, クラスターアルゴリズムの方法の拡張版として, 我々が最近提唱した, 臨界点を自動的に決定できる確率変動クラスターアルゴリズム [9] について述べる。また, 拡張アンサンブル法の中からブロードヒストグラム法 [5], あるいはフラットヒストグラム法 [6] を紹介する。

¹ E-mail: okabe@phys.metro-u.ac.jp

2 確率変動クラスターアルゴリズム

モンテカルロ法で臨界点を決定する場合には、多くのパラメータ（例えば温度）に関して測定を行い、物理量の温度依存性から臨界点を決めるのが、標準的な手順である。これに対して、クラスターアルゴリズムを応用して、1回の測定で自動的に臨界点を決定する方法が、Machta 等 [10] により提案された。このアルゴリズムは侵入型クラスター (invaded cluster (IC)) アルゴリズムと呼ばれている。この IC アルゴリズムは臨界点の決定、臨界点近傍の物理量の計算にある程度有効であることが示されたが、そのアンサンブルでは明らかでない。また、ボトルネックの問題として、エネルギー分布に広いすそがあることが知られている。

富田-岡部 [9] は、臨界点を自動的に決定する新しいクラスターアルゴリズムを提案した。これは、Swendsen-Wang アルゴリズム [1] を拡張したもので、確率変動クラスター (probability-changing cluster (PCC)) アルゴリズムと呼ぶことにする。PCC アルゴリズムの基本的なアイデアは、モンテカルロのスピンの状態更新の過程で KF クラスターを作る際に、同じタイプのスピンをつなぐ確率 $p = 1 - e^{-J/k_B T}$ を変動させる所にある。ここで、例として q 状態ポッツモデルを念頭におき、 J は最近接相互作用の値である。なお、 $q = 2$ はイジングモデルに対応する。PCC アルゴリズムの具体的なスピン更新の手続きは次のようになる。

1. 初期条件として、あるスピン配置とある確率 p から始める。
2. 確率 p に基づいて KF クラスターを作り、系が浸透しているかどうかを判定する。スピン状態は、Swendsen-Wang アルゴリズムと同様に、任意の KF クラスター上のすべてのスピン状態を q 状態の内の1つに更新する。
3. 前項のテストで浸透していれば (いなければ)、確率 p を $\Delta p (> 0)$ だけ減少 (増加) させる。
4. プロセス 2 に戻る。

このプロセスを繰り返していくと、我々のモンテカルロサンプルの p の分布は、その平均値が $p_c(L)$ であるガウス分布に近づいていく。ここで $p_c(L)$ とは、系が浸透する確率 E_p が $1/2$ となるような、スピンをつなぐ確率 p である。このガウス分布の幅はプロセス 3 における Δp の選び方に依存するが、 $\Delta p \rightarrow 0$ の極限で、幅は 0 となる。 $p_c(L)$ は系の大きさに依ることに注意する必要がある。系が浸透する確率 E_p は、臨界点近傍で有限サイズスケーリング

$$E_p(p, L) \sim X(tL^{1/\nu}), \quad t = (p_c - p)/p_c \quad (1)$$

に従う。ここで L は系の 1 次元的なサイズで、 p_c は無限系 ($L \rightarrow \infty$) における臨界点である。 $p_c(L)$ のサイズ依存性から、(1) 式を用いて p_c を求めることができる。また $p_c = 1 - e^{-J/k_B T_c}$ の関係式を用いて臨界温度 T_c を決定できる。(1) 式で ν は相関距離の臨界指数である。なお、ここでは $E_p = 1/2$ となるような $p_c(L)$ を選んだが、この値を $1/2$ 以外に変更することも可能である。

浸透を判定する場合には規則を決める必要がある。我々の浸透の判定の際にどのような規則も用いることができるが、有限サイズスケーリング関数が規則に依存するので、 $p_c(L)$ は規則に依存することになる。ここでは、extension 規則と topological 規則を用いる。前者の規則は、 d 次元系で d 方向の内の少なくとも 1 つの方向にあるクラスターの最大の長さが L を超えるとき、浸

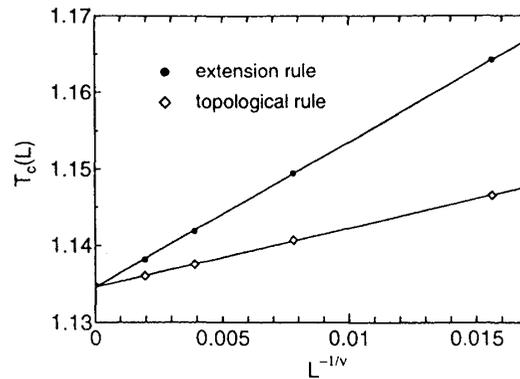


図 1: 2次元イジングモデル ($q = 2$) の $T_c(L)$ のサイズ依存性. $L^{-1/\nu}$ の関数としてプロット. 但し, $\nu=1$. また系のサイズは $L = 64, 128, 256, 512$.

透しているとみなす. 後者の規則は, 少なくとも 1つの方向にあるクラスターが巻きつくときに浸透しているとみなすものである.

我々のアルゴリズムには 1つ自由パラメータがある. プロセス 3 における p の変動量 Δp である. $\Delta p \rightarrow 0$ の極限でカノニカルアンサンブルに近づくので, Δp が小さい方がよいが, 小さな Δp では平衡化するのに長い時間がかかる. 実際的には比較的大きな Δp から始めて, p の変動をチェックしながら徐々に小さな Δp に変化させていくのが効率的である. 平衡化の過程には少ないステップで十分である.

この方法の有効性を示すため, 2次元強磁性 2 状態ポッツモデル (イジングモデル) の結果を示す. 系のサイズとしては, $L = 64, 128, 256, 512$ を扱う. Δp の値としては 0.01 から始めて, 徐々に減少させて最終的な値にする. この Δp の最終的な値としては $1/(20 \times L^2)$ を選んだ. 最終的な Δp の値を用いて平均をとるステップ数は 100,000 ステップとして, それぞれのサイズに対して数回の計算を繰り返し, 統計誤差のチェックを行った.

$T_c(L)$ のサイズ依存性を 1 図に示す. extension 規則と topological 規則の両方の結果を示しており, 温度の単位として J/k_B を用いる. p の平均から $p_c(L)$ を決定し, $p_c(L) = 1 - e^{-J/k_B T_c(L)}$ の関係から $T_c(L)$ を求めた. このプロットでは, ν の値として知られている厳密な値 $\nu = 1$ を用いた. 最小 2 乗法を用いて T_c が extension (topological) 規則の場合に 1.1344(2) (1.1346(2)) と評価される. これは厳密な値 $[\ln(1 + \sqrt{2})]^{-1} = 1.1346$ と良い一致を示す. なお, カッコ内の数字は最終桁の不確定性を表す. ここでは例示のために ν の値として既知の値を用いたが, 決めるべきパラメータとして扱うことももちろんできる.

PCC アルゴリズムで得られたエネルギーヒストグラム $f(E)$ を 2 図に示す. topological 規則による $L = 64$ の場合である. 温度一定の計算により得られたエネルギーヒストグラムを 2 図に実線で示してある. ここで温度として PCC アルゴリズムで求められた $T_c(L)$ を選んである. PCC アルゴリズムで得られる p は $p_c(L)$ のまわりに非常に鋭い分布を示すので, 結果的に得られるエネルギーヒストグラムは温度一定の計算と区別つかないものになっている. すなわち, 我々のアンサンブルが Δp が 0 になる極限でカノニカルアンサンブルに近づくことを意味している. IC ア

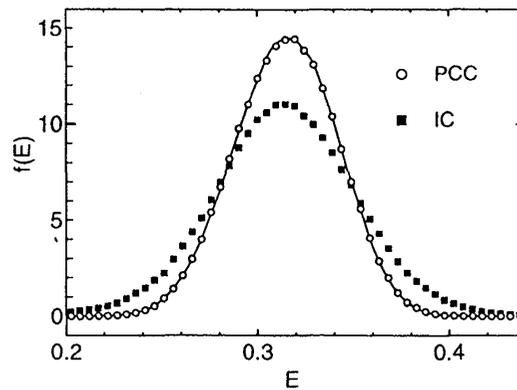


図 2: PCC アルゴリズムと IC アルゴリズムによるエネルギーヒストグラム $f(E)$. 2次元イジングモデルでサイズは $L = 64$ で topological 規則の結果. 温度一定の計算によるエネルギーヒストグラムを実線により示してある.

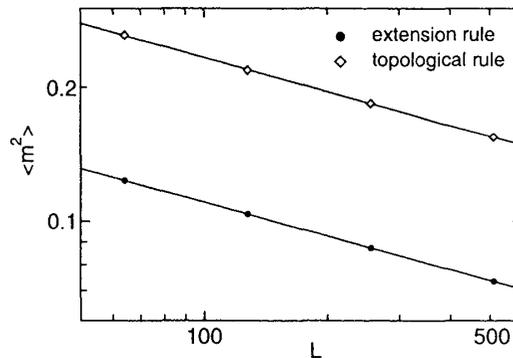


図 3: 2次元イジングモデルの場合の $\langle m^2 \rangle$ の L 依存性. 対数スケールを用いている.

ルゴリズムのエネルギーヒストグラムも 2 図に示しているが, 高エネルギー側と低エネルギー側の両方にすそを引いていることがわかる.

磁気的な指数 β を評価するために磁化の 2 乗の平均値 $\langle m^2 \rangle$ を L の関数として 3 図にプロットしてある. 我々のサンプルは $p = p_c(L)$, すなわち $T = T_c(L)$ のまわりに鋭く分布しているので,

$$\langle m^2 \rangle_{T=T_c(L)} \sim L^{-2\beta/\nu} \quad (2)$$

の有限サイズスケーリングの関係式を使うことができる. 傾きから, extension (topological) 規則の場合に $\beta/\nu = 0.125(2)$ ($0.126(2)$) という評価値が得られたが, 厳密な値 $1/8 (=0.125)$ と良い一致を示す.

我々のアルゴリズムでは, 最終的な $p_c(L)$ の値を求める方法として系が浸透しているかどうかを判定し, 負のフィードバックがかかるようなランダムウォークを用いた. 決定論的な過程を取り入れられないかなど, 次の p を見つける方法の提案もあり [11], 更なる改良が望まれる.

臨界点 T_c の分布が重要となるランダムスピン系 [12] の研究などにおいては, PCC アルゴリズムはそれぞれのランダムサンプルの臨界点を自動的に求められるので, 特に有効である. 他にも量子モンテカルロ法のクラスターアルゴリズムへの応用なども可能である.

3 ブロード（フラット）ヒストグラム法

ブロードヒストグラム法は Oliveira 等 [5] により提唱された手法でマルチカノニカル法に似ている面もあるが、考え方はかなり違いもある。まず注目する物理量がポテンシャルムーブと呼ばれる量 $N(\sigma, \Delta E)$ である。ここで σ はある配置を表し、シングルスピントリフリップによりエネルギーが ΔE だけ変化する可能な数を表す。イジングモデルの場合は N をスピン数として $\sum_{\Delta E} N(\sigma, \Delta E) = N$ となる。ここで $g(E)$ をエネルギー状態密度として

$$g(E) \langle N(\sigma, \Delta E) \rangle_E = g(E + \Delta E) \langle N(\sigma', -\Delta E) \rangle_{E+\Delta E} \quad (3)$$

の関係式が成り立つことに注目する。この式をブロードヒストグラム方程式と呼ぶ。 $\langle N(\sigma, \Delta E) \rangle_E$ は、エネルギー E を指定した $N(\sigma, \Delta E)$ のマイクロカノニカル平均である。従って、遷移確率は

$$p(E \rightarrow E + \Delta E) = \min \left(1, \frac{\langle N(\sigma', -\Delta E) \rangle_{E+\Delta E}}{\langle N(\sigma, \Delta E) \rangle_E} \right) \quad (4)$$

により新しい配置を作っていけば、配置の出現確率が $P(\sigma) \propto 1/g(E(\sigma))$ となり、平らなヒストグラムが得られることになる。しかし、(4) 式で $\langle N(\sigma, \Delta E) \rangle_E$ の値は前もってわかっていないので、適当な初期値から出発してモンテカルロを進めていく上でそれまでの累積値を使うことが考えられる。Oliveira 等の最初の頃の論文 [5] におけるこの選び方がエルゴード性を満足しないものであったために批判の対象となったが、Wang [6] のフラットヒストグラム法で解決されている。なお、 $\langle N(\sigma, \Delta E) \rangle_E$ の初期値は適当な値でよく、マルチカノニカル法 [3] で初期データを決めるための準備が必要であるのと比べて簡便である。

ポテンシャルムーブ $N(\sigma, \Delta E)$ は系のダイナミックスを決めると共に、

$$\frac{g(E + \Delta E)}{g(E)} = \frac{\langle N(\sigma, \Delta E) \rangle_E}{\langle N(\sigma', -\Delta E) \rangle_{E+\Delta E}} \quad (5)$$

の関係式によりエネルギー状態密度の決定に使われる。(5) 式の右辺では累積値を用いればよいが、 ΔE は 1 通りとは限らないので、決めるべき $g(E)$ の数より多い関係式が得られることになる。このことを逆に利用して $g(E)$ を精度良く決定するような工夫もされている [13]。任意の物理量の熱平均値は、エネルギーを指定したマイクロカノニカル平均 $A(E)$ の測定量から

$$\langle A \rangle = \frac{\int A(E) g(E) e^{-\beta E} dE}{\int g(E) e^{-\beta E} dE} \quad (6)$$

の式で計算される。

最近、Lima 等 [14] と Oliveira [15] がブロードヒストグラム法について言及していて、方法に関する理解が進んできた。

1. $\langle N(E, \Delta E) \rangle_E$ を求めることはダイナミックスとは独立な問題で、例えばカノニカルシミュレーションでもよい。
2. 従ってブロードヒストグラム方程式 (3) を用いて状態密度を計算する場合に異なるエネルギーのヒストグラムの相対比は問題でない。

3. ブロードヒストグラム法は reweighting とは直接関係ない考え方である.
4. ブロードヒストグラム法においては 同じエネルギーをとる状態を均等にサンプリングするダイナミックスを用いることが重要である.

などの指摘を行っている.

なお, 研究会の直後に Wang and Landau [16] が拡張アンサンブル法の1つとして状態密度を高精度に計算できるアルゴリズムを提唱した. 2次転移, 1次転移の両方に有効であることが示されていて注目されることを, 最後に付け加える.

参考文献

- [1] R. H. Swendsen and J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 86.
- [2] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **60** (1988), 1461; **62** (1989), 361.
- [3] B. A. Berg and T. Neuhaus, Phys. Lett. B **267** (1991), 249; Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 9.
- [4] K. Hukushima and K. Nemoto, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996), 1604.
- [5] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna, and H. J. Herrmann, Braz. J. Phys. **26** (1996), 677; Eur. Phys. J. B **1** (1998), 205.
- [6] J.-S. Wang, Eur. Phys. J. B **8** (1998), 287.
- [7] P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26** (1969), 11; C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, Physica **57** (1972), 536.
- [8] A. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 2635.
- [9] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 572.
- [10] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer, and L. V. Chayes, Phys. Rev. Lett. **75** (1995), 2792; Phys. Rev. E **54** (1996), 1332.
- [11] R. H. Swendsen, private communication; J.-S. Wang, private communication.
- [12] S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), 22; Phys. Rev. E **58** (1998), 2938.
- [13] J.-S. Wang and L. W. Lee, Comp. Phys. Commun. **127** (2000), 131; J.-S. Wang, Prog. Theor. Phys. Suppl. **138** (2000), 454.
- [14] A.R. Lima, P. M. C. de Oliveira, and T. J. P. Penna, J. Stat. Phys. **99** (2000), 691.
- [15] P. M. C. de Oliveira, Braz. J. Phys. **30** (2000), 195.
- [16] F. Wang and D. P. Landau, cond-mat/0011174.