「交換法」のランダムスピン系への応用

東大物性研　福島 孝治

「交換法」は「拡張アンサンブル法」の一つの典型例として、特にスピングラスの研究に精力的に用いられている。ここでは、方法の概略を述べた後で、普段はあまり触れられない平衡化の問題を議論し、後半には「交換法」の「拡張アンサンブル」的な応用例を一つ示す。

1 「交換法」

1.1 はじめに

一般に相転移に伴う「遅い緩和現象」には、一次転移の際の準安定状態間の遷移時間が系の大きさに対して指数関数的に増大するものと、二次転移の際の相関長の発散に伴う臨界緩和がある。スピングラスは多数の準安定状態が存在する系であり、その臨界現象を調べるにはちょうど一次転移と二次転移の難点を合わせた状況になる。この問題に対して、最近モンテカルロ法での緩和を速めることを目的とした「拡張アンサンブル」の方法が注目を集めている。これは緩和が速くなるようにダイナミクス自身を改良するのではなく、知りたいアンサンブルに何らかの修正を加える方法である。拡張アンサンブル法の一つである「交換法」と呼ばれる方法では、温度だけが異なる複数の系 (合体系) を同時にシミュレートし、適当な2つの系の温度をモンテカルロ法の素過程として交換する。(方法の詳細は、佐々木氏の解説にすでに述べられているので、ここでは割愛する。) この温度交換は詳細釣合の条件を満たすように構成されるので、熱力学的性質は通常のモンテカルロ法と同様に評価できる。ただし、温度交換を導入することにより、低温である準安定状態に系が捕まっていても、高温に移ることでそこから抜け出すことができるというメリットが得られる。

1.2 うまくいくための必要条件

この方法を使い始めた当初は、方法の簡単さにもかかわらず非常に有用で、できなかった計算ができるようになったという驚きが大きかったように記憶している。しかし、冷静になってみると、“うまくいく” という言葉は極めて曖昧だし、“本当にできない計算ができるようになった” ことは事実どうかを示すことは一般には困難である。モンテカルロ法である限り、“できた” といえる十分条件はないわけで、幾つかの満たすべき必要条件をできうる範囲でチェックするしかない。以下に交換法において考えられる条件を挙げてみる。[1, 3]

条件 1 交換が有意な確率で実現している。

条件 2 それぞれの状態が合体系を動き回っている。

条件 3 その結果、状態が記憶を無くしている。

条件 4 物理量が収束している。

特に条件1、2はこの方法に特有のことなので詳しく説明をする。

1.2.1 条件 1：温度の決め方

まず、この方法が「交換法」と呼ばれるためには、シミュレーション中に交換が実際に成立していなくてはならない。そうでないと通常のモンテカルロ法となんら変わらない。この方法で交換が実現するように調整できるパラメータは温度だけである。どのように設定すべきであるかは完全にはわからないが、例えば、「交換確率が温度によらない」というのは一つの指針である。このための実装方法は、佐々木氏の記事あるいは、文献[2]の付録を参照頂きたい。ここでは適当に設定した場合の悪い例を一つ示す。図1は、有限温度相転移(逆温度で $\beta_c \sim 0.44$) を示す2次元強磁性イジング模型の例である。左図は、逆温度で等間隔に設定した温度を用いた計算で、サイズとともに臨界温度近傍の交換確率が激減している。そのために、温度方向に関して、低温側と高温側が実質的に分離されてしまい、高温での速い緩和が低温に伝わっていない。この問題は、温度をうまく設定することで改善され、右図のように温度に依らない確率を実現している。つまり、前項の条件1は満たされている。ここで要する手続きは、短いモンテカルロステップ数で大雑把にエネルギーの振舞を調べるだけである。マルチカノニカル法[4]やテンパリング[5]のように、逐次的なパラメータの学習は必要ない。もっとも、全温度差を固定し、また温度数も固定しているので、サイズとともに交換確率は減少している。例えば相転移点近傍だけに興味があるのであれば、サイズと共に全温度差を変化させるか、温度点を増やす工夫が望ましい。

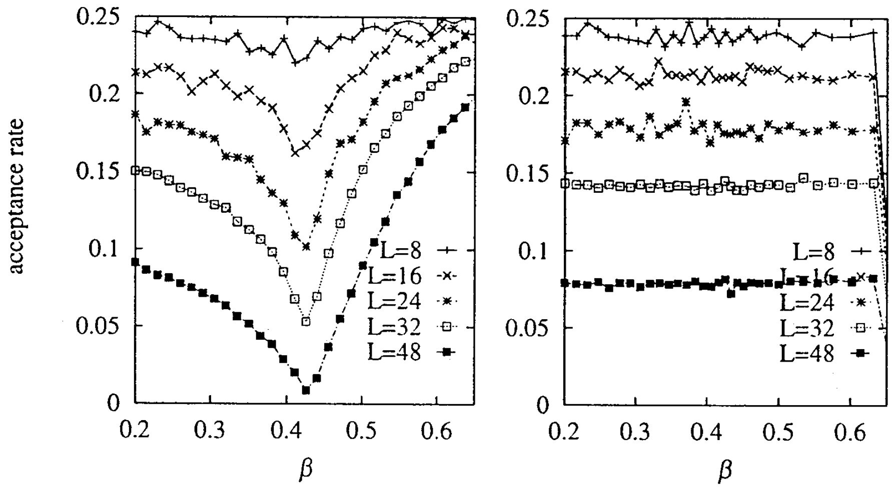


図 1: 交換法における交換確率を逆温度の関数として示す。左は逆温度を等間隔で設定したもの、右は文献[2]の方法で設定した温度を用いた。どちらも最低温度と最高温度、全温度数は等しい。

1.2.2　条件 2 ： エルゴード時間

温度の設定によって、各温度における交換確率は保証されるが、本当に重要なのは各状態が温度空間をランダムウォークしていることである。失敗する場合として、各温度ではそれぞれ適当な交換が実現しているが、全体としては温度空間の中の狭い領域に閉じ込められていることがある得る。条件 2はこの問題を考慮している。実際の計算では、適当にマークをつけた状態を追跡し、全温度空間を一度巡る時間スケールを調べることができる。この時間スケールはエルゴード時間と呼ばれ、もともとはマルチカノニカル法[4]で導入された量だが、一般の「拡張アンサンブル法」で対応する量は定義することができる。この時間が調べている合体系の平衡化に要する特徴的な時間を与えていると考えられるので、平衡化のチェックとして是非押えておきたい量である。

1.2.3　条件 3、4 ： 平衡状態はどのように確認するか？

一般のモンテカルロ法において、遅い緩和現象を示す系での "物理量の収束" は必ずしも平衡化を意味しない。ガラスのように激しく遅い緩和の場合は、準平衡状態につかまっていることと平衡状態に達していることの区別は難しいので、十分な注意が必要である。しかし、拡張アンサンブル法を用いると、準安定状態から脱出する動的過程を方法自身が原理的には持っているために、準安定状態に系が留まり続ける可能性は低く、むしろ "物理量の収束"が平衡化の確認条件として復活できる。図 2 にスピングラスの平均場模型での交換モンテカルロ法での緩和の様子を示す。縦軸はこの模型の特殊な対称性から 0 になる量で、モンテカルロステップの関数として単調に緩和していくことがわかる。交換法の結果は、通常のモンテカルロ法よりも速く平衡条件に満たすことは当然であるが、その緩和関数はある特性時間をもった指数関数でよく表される。また、その時間スケールのサイズ依存性、温度依存性等の振舞は前項のエルゴード時間のそれとほぼ一致していることから、温度交換を利用して緩和が促進されるとする我々の期待が実現されていることがわかる。[6]

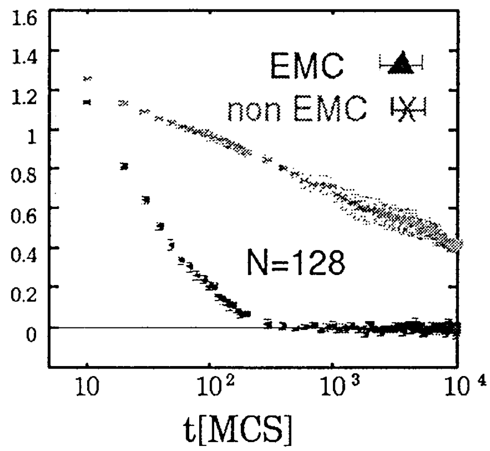
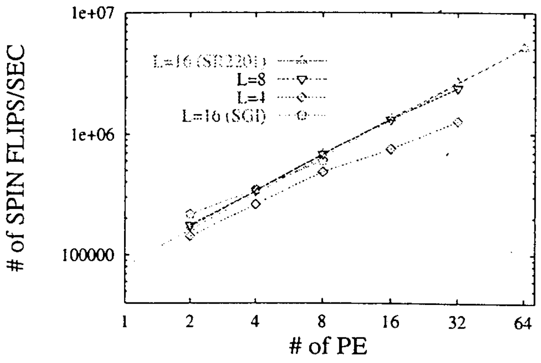


図 2: 2つの異なる定義でのエネルギーの差のモンテカルロステップ依存性。[6] 平衡状態ではゼロになる。上が通常の方法、下が交換法による結果を示す。

1.3 並列化について

方法の構造からほぼ自明なことではあるが、「交換法」は並列計算に向いている。各ノードに交換法の要素を割り当てれば、交換過程は各ノードでシミュレートすべき温度等の外部パラメータを必要に応じて、他のノードからもらうことになる。つまり、ノード間の転送量は系の大きさとは無関係に非常に少なく済む。一方で、ノード間の転送を無くしてしまうと、それは通常のモンテカルロ法に他ならず、緩和問題の解消は期待できない。結局、非常に少ない転送が大きな利益 (緩和問題の解消) を実現しているわけである。



MPIを用いた交換法において、一秒間当りの状態更新数を使った計算機数 (PE) の関数として示した。系の大きさ L の小さい場合を除いて、PE数に比例して更新数が増加していることがわかる。

2 応用

単純にこの方法をスピングラス系に応用した仕事は、現在までにたくさん存在する。ここでは「拡張アンサンブル法」らしい使い方を紹介する。

2.1 交換法の応用：自由エネルギー差の計算法

系の秩序に共役な境界条件とそれをひねった境界条件の元での自由エネルギー差は臨界現象を調べる際に重要な量である。しかし、自由エネルギーやエントロピーはモンテカルロ法でも調べるのは難しい量である。一方で、それはマルチカノニカル法の得意とする部分だが、ここではあえて交換法で考えてみる。

調べるスピン系のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_{\rm tot}(\{S\},\alpha) = -\sum_{ij} J_{ij}S_iS_j - \alpha J_{\rm BC}\sum_{i\in\partial_1 V, j\in\partial_2 V} S_iS_j, \qquad (1)$$

とする。第一項はバルクに対する項であり、第二項の ∂_1, ∂_2 はそれぞれある一つの境界面とそれと正反対の境界面を表している。また、結合定数 α は ±1 の値をとり、その符号が正の場合は周期的境界条件であり、負の場合は反周期的境界条件でとする。今、位相空間をスピン自由度 $\{S_i\}$ に加えて、先に定義した「境界条件」である α の符号も含める。この時、温度 T において、(反) 周期的境界条件を見つける確率、すなわち α が $1(-1)$ である確率は、

$$P(\alpha=1,(-1);T) = \frac{{\rm Tr}_{\{S\}}\delta_{\alpha=1,(-1)}\exp(-\mathcal{H}_{\rm tot}/T)}{Z_{\rm tot}(T)} = \frac{Z_{\rm (A)PBC}}{Z_{\rm tot}}, \qquad (2)$$

となる。一方、計算したい量は、周期的境界条件と反周期的境界条件の元での自由エネル

ギー差 $\Delta F(T)$ であり、次のように表される。

$$\exp(\Delta F/T) = \frac{Z_{\mathrm{PBC}}}{Z_{\mathrm{APBC}}} = \frac{P(\alpha=1)}{P(\alpha=-1)} \tag{3}$$

これは、モンテカルロ法の中で α もスピン変数 $\{S_i\}$ と同様に動的変数として扱い、その頻度の商から自由エネルギー差が計算できることを意味している。ただし、α は L^{d-1} 個のスピンと結合しており、その反転確率は大変小さい。つまり、自由エネルギー差をモンテカルロ法の言葉で書き下した代償として、緩和の問題が表面化したことになる。しかし、拡張アンサンブル法を用いれば、この問題は深刻ではない。むしろ、式 (3) はモンテカルロ法で方法として難しい量を、緩和が深刻だが計算自体は簡単な量に焼き直すことができたと言える。

この方法を用いて、3 次元 $\pm J$ イジングスピングラス模型の自由エネルギー差を計算した。この模型はスピングラス研究の最も標準的な模型であり、今なおその性質が議論されている。これまでの研究から、スピングラス相転移は有限温度で起こるとされているが、その低温相についてはわかっていないことが多い。例えば、秩序パラメータが有限に残るかははっきりと決着がついていない。図 3 に結果を示す。サイズの違う自由エネルギー差の交点として、転移温度がわかるが、データは 1.1 近傍で交点があり、有限温度相転移を示唆している。この値はこれまでに報告されている値と矛盾しない。一方で、転移温度以下ではっきりとした発散傾向が確認でき、これは低温相がしっかりとした硬い相であり、有限の秩序パラメータが存在することを強く示唆している。

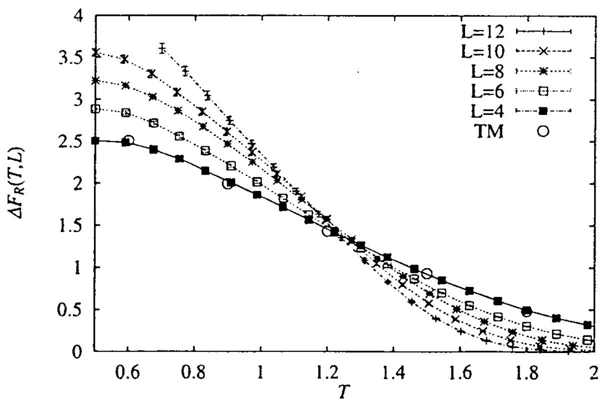


図 3: 3 次元 $\pm J$ Ising スピングラス模型の自由エネルギー差の温度依存性。転移温度 ($T_c \sim 1.1$) を境に、サイズとともに減少する高温相と増加するスピングラス相の違いがよくわかる。

この方法は、境界条件は離散状態で表現できれば、応用可能であり、たとえば、トポロギカルな欠陥を伴うような相転移についても調べられる。

3 まとめ

これまでに、拡張アンサンブル法の一つである交換法の実用上の注意点をまとめて、後半にスピングラスへの応用例を説明した。交換法はスピングラス系を中心に多くの応用例

があるが、平衡化のチェックに関する統一的な見解はなく、それぞれの研究でまちまちである。ここでは交換法での一連のチェック事項を提案し、その例を示した。平衡化のチェックはモンテカルロ法によるデータに信頼性を与える重要な問題なので、マルチカノニカル法の場合も含めて今後整備されるべきである。

拡張アンサンブル法は、緩和の問題を解消する一般的な方法である。アンサンブル空間のなかに、良く緩和する部分(ソース)と、なかなか緩和しないが非常に興味ある部分(ターゲット)があるとすると、緩和の問題を解決する指針は得られたというわけである。つまり、その二つを結びつけることで、ターゲットの緩和をソースで解消するのである。その具体的な方法は、マルチカノニカル法であったり、交換法であったり、何でもいいのであろう。例えば、交換法では交換対象が温度である必要はないので、温度以外の変数を交換することにより、ターゲットのより近くにソースを見つけることができればよりよいわけである。これは、今まで緩和の問題で悩まされてきた系に対するアプローチの一つの指針を与えているのと同時に、緩和以外の困難な問題も緩和の問題に置き換えることができれば、解を求めうる可能性をも与えている。また、こうした考えの自然な拡張に挙げられる、千見寺氏らにより提案された良く緩和する非物理的空間の利用法 [7] はその典型である。彼らの方法は、ターゲットとソースをつなぐパスを賢く選んだ例である。どうすれば、興味ある空間の近くに緩和を解消してくれる空間を見つけるかが腕のみせどころであろう。今後は、それぞれ興味ある系や物理量に特化した拡張アンサンブルを探して行くのが一つの方向かと思われる。そして、出てきた色々なアンサンブル系を統一してみることができた時に、方法論として次の大きなステップになることを期待する。

参考文献

[1] K. Hukushima and K. Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1604.

[2] K. Hukushima: Phys. Rev. E **60** (1999) 3606.

[3] E. Marinari: *Optimized Monte Carlo Methods*, lectures given at the 1996 Budapest Summer School on Monte Carlo Methods, ed. by J. Kertesz and I. Kondor, Springer-Verlag.

[4] B. A. Berg and T. Neuhaus: Phy. Lett. B **267** (1991) 249.、及び比較的最近書かれたレビューとして、B. A. Berg, cond-mat/9909236.

[5] E. Marinari and G. Parisi, Europhys. Lett. **19** (1992) 451.

[6] K. Hukushima, H. Yoshino and H. Takayama: J. Phys. Soc. Jpn. 67 (1998) 12.

[7] G. Chikenji, M. Kikuchi and Y. Iba, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 1886., 及び千見寺氏の記事。