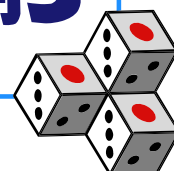


基研研究会

モンテカルロ法の新展開3



プログラシ & アブストラクト

2月28日(月)、3月1日(火)、2日(水)

京都大学 基礎物理学研究所(旧講堂)

基研研究会 「モンテカルロ法の新展開3」

日時：2005年2月28日、3月1日、2日

場所：京都大学 基礎物理学研究所（旧講堂）

スコープ

これまで、基礎物理学研究所において、モンテカルロ法の方法論とシミュレーション結果の解析法を中心とした分野横断的な研究会として、「モンテカルロ法の新展開」（1999年2月）、及び「モンテカルロ法の新展開2」（2000年10月）を開催してきました。最後の集会から4年余りが経過し、当時の大学院生がこの分野の中核となる研究者になろうとしています。その間の展開を総括するとともに、新たな若手の育成や今後の方向性を議論するのに適した時期であると考え、上記の研究会の基本精神を引き継いだ研究会を開催することとしました。

具体的な内容としては、従来からのテーマであり、最近ますます関心が高まってきている領域である以下の2つを中心に据えます。

モンテカルロ法や分子動力学法の新しい手法

拡張アンサンブル法やクラスターモンテカルロ法、確率変動法など新しい手法の発展、PERM や逐次モンテカルロ法など。

方法論そのものだけでなく、それによって可能になったこと、新たに開けた応用、についての報告も重要な要素として含まれますが、量的な拡大や物理的に新しい結果よりも、質的な変化、適用形態の新しいものをより歓迎します。

シミュレーション結果の発見的解析手法

主成分分析、多変量解析・パターン認識の諸手法の応用、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推定など、「測定・解析すべき物理量が何か」ということ自体をデータから適応的に定めるタイプの研究をおもに扱います。そのほか、以下のテーマも対象とします。

量子系のダイナミクス

数値的密度行列くりこみ群，直接シミュレーション などによる量子系（量子スピン系，量子カオス系，量子計算機など）のダイナミクスのシミュレーション．

モンテカルロ法の新分野・物理以外の分野への応用

統計科学，コンピュータ・グラフィックス等への応用など．

世話人

- 伊庭 幸人 （統数研）
- 菊池 誠 （阪大サイバー）
- 高野 宏 （慶応理工）
- 原田 健自 （京大情報）
- 富田 裕介 （物性研）
- 福島 孝治 （東大総合）

プログラム

1日目、《2月28日(月)》

【モンテカルロ法の方法論と応用 1】

- 13:00-14:00 伊庭 幸人 (統計数理研究所)
拡張アンサンブル法と逐次モンテカルロ法：簡単な紹介と問題提起
- 14:00-14:30 福田 育夫 (産業技術総合研究所 生物情報解析研究センター)
Tsallis 統計による拡張アンサンブル法の展開
- 14:30-15:00 奥村 久士 (自然科学研究機構 分子科学研究所)
マルチバーリック・マルチサーマルアンサンブルにおける
レナード・ジョーンズ流体のモンテカルロシミュレーション

15:00-15:30 【休憩】

【量子系 1】

- 15:30-16:00 鈴木 正 (東京大学 新領域創成科学研究科)
量子アニーリング法に伴う残留エネルギー
- 16:00-17:00 藤堂 眞治 (東京大学大学院 工学系研究科)
Stochastic Series Expansion 量子モンテカルロ法とその応用

17:00-17:15 【休憩】

- 17:15-18:00 原田 健自、川島 直輝 (京都大学、東京大学物性研究所)
非バイナリループを用いる世界線量子モンテカルロ法

2日目、《3月1日(火)》

【モンテカルロ法の方法論と応用 2】

10:30-11:00 富田裕介, 松下勝義, 黒田明, 菅野量子, 高山一 (物性研、日立基礎研)
ダイポール格子系のモンテカルロ計算

11:00-11:30 岡部 豊 (東京都立大学 理学研究科)
状態密度を計算するモンテカルロ法を用いた Fisher 零点の研究

11:30-12:00 Hwee Kuan Lee and Yutaka Okabe (Tokyo Metropolitan University)
Using Sequential Importance Sampling for Nonequilibrium
Reweighting

12:00-13:30 【 昼食 】

【シミュレーションの解析の方法】

13:30-15:00 光武亜代理、飯島寛充、高野宏 (慶応義塾大学 理工学部)
高分子系の主成分解析と緩和モード解析

15:00-17:00 【 ポスター 】

18:00- 【 懇親会 】

3日目、《3月2日(水)》

【新しい応用分野】

10:00-10:05 【趣旨説明】

10:05-11:05 瀧内 元気 (エヌテクノロジー株式会社)
MCMC のコンピュータ・グラフィックスへの応用

11:05-11:20 【休憩】

11:20-12:30 川崎 光宏、佐々 真一 (新潟大学、東京大学)
大自由度カオスの周期軌道アンサンブル

12:20-13:30 【昼食】

【量子系 2】

13:30-13:33 【趣旨説明】

13:33-14:33 齊藤 圭司 (東京大学大学院 理学系研究科)
離散準位を反映した量子ダイナミクス - 物理現象から制御まで -

ポスター講演

- [001] 求 幸年、古川信夫（理化学研究所、青山学院大学）
Order N 多項式展開モンテカルロ法とその電子系への適用
- [002] 上田幸治, 大谷両太, 西尾幸暢, Andrej Gendiar, 西野友年（神戸大）
角転送行列繰り込み群による古典スピン系のスナップショット生成
- [003] 末谷大道、伊庭幸人、合原一幸
（科学技術振興機構、統数研、東大生研・科学技術振興機構）
結合カオス系における隠れた同期の検出：カーネル正準相関分析に基づくアプローチ
- [004] 西尾幸暢, Andrej Gendiar, 西野友年（神戸大学）
二次元量子スピン系のテンソル積変分法による解析
- [005] 神吉 一樹（大阪府立大学）
連続スピン系におけるミクロカノニカルなモンテカルロ法
- [006] 中西 良樹、菊池 誠（大阪大学）
格子タンパク質二量体の自由エネルギーランドスケープ
- [007] 光武亜代理（慶應義塾大学）
17 残基からなるヘリカルペプチドの拡張アンサンブルシミュレーション
- [008] 大西弘明（日本原子力研究所）
スピン $S = 1$ ハルデン系における t_{2g} 軌道自由度の効果
- [009] 藤田 早苗（東北大学 大学院）
準結晶上の frustrate した Ising spin 系の示す磁性について、MC 法を用いた研究
- [010] 鈴木洋一（京都大学）
電荷 - 双極子相互作用及び、双極子 - 双極子相互作用する格子モデルの自由エネルギー面
- [011] 山本晃介（慶應義塾大学）
分子動力学法による高分子ブラシの静的及び動的特性の解析

- [012] 宮原慎（青山学院大学）
遊休計算機を利用した PC クラスタ構築
- [013] 宮原慎（青山学院大学）
八ニカム格子上の電子間相互作用と電子格子相互作用の競合
- [014] 下村能弘（青山学院大学）
反強磁性二重交換模型におけるフラストレーションの効果
- [015] 萩田克美（慶應義塾大学）
平行板間に閉じ込められた高分子溶融体の緩和モード解析
- [016] 福島孝治（東京大学）
BEG 模型からのスピングラスへの接近
- [017] 伊庭幸人（統計数理研究所）
力学系における「珍しい現象」のモンテカルロ・サンプリング

口頭講演

拡張アンサンブル法と逐次モンテカルロ法： 簡単な紹介と問題提起

伊庭幸人（統計数理研究所）

イントロダクションを兼ねて、レプリカ交換モンテカルロ法，マルチカノニカル法，逐次モンテカルロ法について，それぞれ簡単な紹介を行う．また，以下の問題について，ラテン方格の数え上げ，3体相互作用のスピン系，など簡単な事例を論じつつ，問題提起を行う（答を出すわけでは無い）．

1次転移ではマルチカノニカル法はレプリカ交換法より有利なのか．

拡張アンサンブル法はアニーリングと本当に違うのか．

PERMは原理的にやばくないのか．

解説・例・問題提起は，昨年6月の京大でのセミナー，講義，その際の質疑等で既出のものと大部分重なります．既に聞かれた方には申し訳ありません．

Tsallis 統計による拡張アンサンブル法の展開

福田 育夫 (産業技術総合研究所)

我々は、Tsallis 分布を生成する決定論的方程式を導き、それをを用いて物理系の simulation を可能にすることを示し、そのサンプリング能力の有効性を検証してきた。今回、我々は、適当な事前シミュレーションで得られる統計量を元に、エネルギー分布のデザインが可能になる Tsallis パラメタ値の一般的な導出法を提案する。さらにまた、別アプローチとして、適切なパラメタ値を限定するのではなく、各パラメタ値を伴った多数の分布を同時に生成する MD の手法も開発したので報告する。

関連論文

1. I. Fukuda, "Application of the Nose Hoover method to optimization problems", Phys. Rev. E 64, 016203 (2001).
2. I. Fukuda and H. Nakamura, "Tsallis dynamics using the Nose Hoover approach", Phys. Rev. E 65, 026105 (2002).
3. I. Fukuda and H. Nakamura, "Deterministic generation of the Boltzmann-Gibbs distribution and the free energy calculation from the Tsallis distribution", Chem. Phys. Lett. 382, 367 (2003).
4. I. Fukuda and H. Nakamura, "Efficiency in Generation of the Boltzmann-Gibbs Distribution by the Tsallis Dynamics Re-weighting Method", J. Phys. Chem. B, 108, 4162 (2004).
5. I. Fukuda, M. Horie, and H. Nakamura, "Deterministic design for Tsallis distribution sampling", Chem. Phys. Lett. (2005) in press.

マルチバーリック・マルチサーマルアンサンブルにおける レナード・ジョーンズ流体のモンテカルロシミュレーション

奥村久士（自然科学研究機構）

マルチカノニカル法ではポテンシャルエネルギー空間上のランダムウォークを実現し、エネルギー障壁を乗り越えることができるという利点がある。しかしながらこの方法では体積を一定に保ってシミュレーションを行うので、体積変化を伴う現象を扱うことも圧力を指定することもできない。そこで最近我々は、新しい拡張アンサンブルモンテカルロ法 - マルチバーリックマルチサーマル法 - を提案した (1,2)。この方法ではエネルギー空間上と体積空間上の両方でランダムウォークを実現する。このため、広い範囲の温度と圧力における定温定圧アンサンブルを得ることが可能になる。本講演ではこの方法を Lennard-Jones 液体に応用し、詳細な解析を行った結果を示す。

(1) H. Okumura and Y. Okamoto: Chem. Phys. Lett. 383 (2004) 391-396.

(2) H. Okumura and Y. Okamoto: J. Phys. Soc. Jpn. 73 (2004) 3304-3311.

量子アニーリング法に伴う残留エネルギー

鈴木 正 (東京大学)

量子アニーリング法とそれに伴う残留エネルギーについての研究を発表したい。量子アニーリング法は、ランダムイジング模型の基底状態探索問題といった古典系の問題に対する量子アルゴリズムである。よく知られているシミュレーテッド (熱的)・アニーリング法が熱揺らぎを用いて最適化解を探すのに対して、この手法では量子揺らぎが利用される。これまでにいくつかの実験、理論により、量子アニーリング法が熱的アニーリングに比べてより効率よく解を導き出すことが示唆されている。しかし、それを裏付ける定量的な議論はなされていない。なぜなら、量子アニーリング法を実行するには波動関数の量子ダイナミクスを見る必要があり、それが難しいからである。我々は、いくつかの模型を取り上げ、数値計算が可能な程度のサイズに対して量子アニーリングを実行した。そして得られた解が真の解にどれだけ近いかを表す残留エネルギーに注目し、それが消費時間の増加とともにどのように減少するかを見た。その結果、残留エネルギーは消費時間が長い極限で時間の逆二乗で漸近的にスケールされることがわかった。さらに、このスケール則は量子力学の断熱定理から導かれることもわかった。熱的アニーリングの場合は対数の逆ベキなので、この結果は量子アニーリング法の効率のよさを物語っている。発表では、もし余裕があれば、我々が現在進めている数値計算の一端についても触れてみたい。

Stochastic Series Expansion 量子モンテカルロ法とその応用

藤堂眞治 (東京大学大学院)

量子スピン系などの熱平衡状態に対するモンテカルロシミュレーションでは、従来より主として鈴木-トロッター分解にもとづく経路積分表示 (世界線法) が用いられてきた。しかし近年、stochastic series expansion (SSE) と呼ばれる新しい表示を用いる量子モンテカルロ法も広く使われるようになってきている。この方法はハミルトニアンの高温展開から出発するが、経路積分表示との共通点も多く、ループアルゴリズムなどの非局所更新法を導入することも同様に可能となっている。本講演では経路積分表示との対比を交えつつ、この SSE 量子モンテカルロ法の基本原理について具体的に解説する。さらに、SSE の特徴を活かした新しいアルゴリズム (量子 Wang-Landau 法、基底状態ループアルゴリズム) などについても紹介する。

非バイナリループを用いる世界線量子モンテカルロ法

原田健自、川島直輝（京都大学、東京大学物性研究所）

世界線量子モンテカルロ法的一种であるループアルゴリズムを非バイナリ値をとるループをもちいる形に拡張する方法をのべ、対称性の高い量子スピンモデルに応用した例を簡単に紹介する。

ダイポール格子系のモンテカルロ計算

富田裕介、松下勝義、黒田明義、菅野量子、高山一（東京大学物性研究所、日立基礎研）

近年のナノテクノロジーの進展によりナノサイズの磁性体の合成が可能となり、研究の対象として関心を集めている。磁性の相転移・臨界現象の研究では主に交換相互作用が中心となることが多いが、ナノサイズの磁性体間の相互作用ではダイポール相互作用が中心となる。本講演ではモンテカルロ法を用いて格子上のダイポール系を計算した結果について報告する。また、分子動力学法を用いた計算結果についても比較として紹介する。

状態密度を計算するモンテカルロ法を用いた Fisher 零点の研究

岡部 豊 (東京都立大学)

Yang-Lee の先駆的な研究以来、複素平面上の状態和の零点分布が議論されてきた。Yang-Lee が磁場変数に関する零点を議論したのに対して、Fisher は温度変数の零点を議論した。最近、ヒエラルキー構造をもつ格子上の状態和の零点に興味をもたれている。ここでは、ペンローズ格子上のイジングモデルの Fisher 零点を議論する。エネルギー状態密度を計算するモンテカルロ法 (マルチカノニカル法や Wang-Landau 法) を用いることにより、Fisher 零点を計算することができる。規則格子の場合と異なり、準結晶上のイジングモデルの零点はある曲線上に乗るのではなく、複素平面で広く分布する。一方、正の実軸に近い零点はある分布をするが、その包絡線が有限サイズスケーリングに従うことを示す。

Using Sequential Importance Sampling for Nonequilibrium Reweighting

Hwee Kuan Lee and Yutaka Okabe (Tokyo Metropolitan University)

We propose a reweighting scheme, based on the Sequential Importance Sampling, for nonequilibrium systems. Where only simulations at one temperature are required to calculate the time evolution of physical quantities for a range of temperatures. This method is general and may be applied in various areas such as nonequilibrium relaxation and nonequilibrium steady state studies. This method may also be combined with different Monte Carlo update schemes. We will illustrate its implementation on nonequilibrium relaxation of Ising model and dynamical behavior of the driven diffusive lattice gas.

高分子系の主成分解析と緩和モード解析

光武亜代理、飯島寛允、高野宏（慶應義塾大学）

高分子系の動的性質を、シミュレーションのデータから解析するために用いられてきた方法に、緩和モード解析の方法がある。この方法は、タンパク質の静的性質の解析に用いられる主成分解析の方法の動的拡張になっていると見ることができる。良溶媒中の孤立高分子鎖の系および複数の準安定状態を持つ小ペプチド鎖の系のシミュレーションを行い、その結果に主成分解析と緩和モード解析を適用し、これらの方法の比較検討を行う。

MCMC のコンピュータ・グラフィックスへの応用

瀧内元気 (エヌテクノロジー株式会社)

3次元形状モデルを用いて写実的な画像を生成するためには、大域照明モデルに基づく光輸送問題を解く必要がある。その解法として、MH アルゴリズムを利用した視覚的な重要性に基づくインポートランス・サンプリングを行う Metropolis Light Transport 法 (E. Veach, L. Guibas, SIGGRAPH97 (1997)) が考案された。これにより、従来難しかった複雑な経路による光輸送の計算効率が格段に向上した。

講演では、光輸送問題について基礎的な説明を行い、MLT 法によるレンダリング手法について、従来手法との比較や生成画像を交えて紹介する。

大自由度カオスの周期軌道アンサンブル

川崎光宏、佐々真一（新潟大学、東京大学）

ある簡単な大自由度散逸カオス系のモデルに関し、それ一本のみから巨視的物理量の期待値が分かる特別な周期軌道のアンサンブルをモンテカルロ法により構成した。この結果はモデル特有のものではなく、一般性をリーズナブルな仮定のもとに示すことができる。また、この結果により、一本の周期軌道から乱流統計が得られるという驚くべき結果 (G. Kawahara and S. Kida, J. Fluid Mech. 449, 291 (2001); S. Kato and M. Yamada, Phys. Rev. E 68, 025302(R)(2003); L. Veen, S. Kida and G. Kawahara, preprint) に一つの解釈が与えられる。

講演では、周期軌道のアンサンブル生成が複雑な拘束条件付きの最適化問題と類似点を持つことを指摘し、交換モンテカルロ法により別のモデルを解いた事例、より現実的な系の周期軌道アンサンブルを生成する際の深刻な困難についても述べる予定である。

離散準位を反映した量子ダイナミクス -物理現象から制御まで-

齊藤圭司（東京大学大学院）

本講演では主に離散準位系が関係する量子ダイナミクスを中心に、その物理と方法論とをおりまぜて講演する予定である。最初に非断熱遷移、特に Landau-Zener(LZ) 遷移やその周辺の基礎的なことを説明し、それらが重要になるいくつかの物理系を解析していく。取り上げる話題としては分子磁性体の非断熱磁化過程における散逸効果、そして量子コヒーレンスが重要になる量子ドットを介した非断熱量子ポンピングや電子制御の話をする。前者では量子マスター方程式が、後者ではケルディッシュグリーン関数や LZ 遷移を解析するための転送行列法が活躍する。

ポスター講演

Order N 多項式展開モンテカルロ法とその電子系への適用

求 幸年、古川信夫（理化学研究所、青山学院大学）

我々の開発した多項式展開モンテカルロ法のアルゴリズムとその応用について報告する。この新しいモンテカルロ法は、古典的な自由度と相互作用する電子系を対象としたもので、チェビシェフ多項式展開を有効に用いることによって、計算時間が系の大きさに比例する Order N 法を実現するものである。講演では、アルゴリズムの解説とともに、二重交換模型などの電子系にこれを適用して得られた結果についても解説する。

角転送行列繰り込み群による古典スピン系の スナップショット生成

上田幸治, 大谷両太, 西尾幸暢, Andrej Gendiar, 西野友年 (神戸大)

数値繰り込み群の手法の一つである, 角転送行列繰り込み群を用いたスナップショット生成方法を考えた. スナップショットとは, 系のスピン配列のアンサンブル中から, ボルツマンウェイトを用いて確率的に取り出された, 一つのスピン配列である. スナップショットを観測すると, 系の様子を「視覚的に」理解できる. 今回は, スナップショット生成方法の紹介と, この方法を用いて得た結果を示す.

結合カオス系における隠れた同期の検出： カーネル正準相関分析に基づくアプローチ

末谷大道、伊庭幸人、合原一幸（科学技術振興機構、統数研、東大生研・科学技術振興機構）

結合カオス系において、個々の素子の時間発展則が異なる場合でも、2つの素子のダイナミクスの中に（時間に依存しない）関数が存在するという意味での同期状態が観察されることがあり、一般化同期（Generalized Synchronization: GS）と呼ばれている。この2つのダイナミクスを結ぶ関数は一般に非線形であるため、相関関数などの線形手法ではGSの特徴を捉えることが困難であり、観測データに対して何らかの非線形変換を施す必要がある。最近、機械学習の分野ではデータに内在する非線形構造を抽出する手法として（再生核）カーネル法が注目を集めている。その中に、二つの多変量データ間の相関を測る手法である正準相関分析（Canonical COrrrelation Analysis: CCA）にカーネル法の概念を適用したカーネルCCAが赤穂らによって提案されている。本研究では、GSにおける非線形関係の定量化や非自明な運動を抜き出すためにこのカーネルCCAを用いた解析を行う。幾つかのモデルに対する数値シミュレーション結果から提案手法の有用性について検討する。

二次元量子スピン系のテンソル積変分法による解析

西尾幸暢, Andrej Gendiar, 西野友年 (神戸大学)

我々が研究を進めている、二次元量子スピン系の基底状態に対する解析手法、テンソル積変分法について報告する。テンソル積変分法は、試行波動関数を一様な局所テンソルの積の形に仮定した数値的な変分計算である。今回の発表では、正方格子反強磁性ハイゼンベルグモデルに対する計算方法を説明し、得られた基底エネルギーの近似精度の評価を行う。さらに手法の拡張などについても話したい。

連続スピン系におけるミクロカノニカルなモンテカルロ法

神吉 一樹 (大阪府立大学)

XY, ハイゼンベルク, あるいは一般に $O(N)$ スピン系について, ミクロカノニカル・アンサンブルを生成し, エネルギーの関数としてミクロカノニカルな温度を計算することを試みた。エネルギー一定の状態を生成していくアルゴリズムとして over-relaxation 法を用い, 通常のカノニカル・アンサンブルを生成する Metropolis 法, 熱浴法, あるいは Creutz の demon 法による結果と比較した。

17残基からなるヘリカルペプチドの 拡張アンサンブルシミュレーション

光武亜代理（慶應義塾大学）

近年、マルチカノニカル法、レプリカ交換法、シミュレーティッド・テンパリング法などを組み合わせたいくつかの新しい拡張アンサンブル法の開発が成された。本ポスターでは、これらの手法を用いて17残基からなるペプチドのモンテカルロシミュレーションを行ったので、この結果について報告する。

スピン $S = 1$ ハルデン系における t_{2g} 軌道自由度の効果

大西弘明（日本原子力研究所）

t_{2g} 軌道縮退ハバード模型一次元鎖の基底状態を密度行列繰り込み群法によって解析し、スピン $S = 1$ ハルデン系における軌道自由度の効果について調べた。フント結合を大きくしていくと、スピンギャップを持ついわゆるハルデン状態から、ギャップレスの軌道励起を持つ強磁性状態への相転移が起こることが分かった。

準結晶上の frustrate した Ising spin 系の示す磁性について、 MC 法を用いた研究

藤田 早苗（東北大学 大学院）

1984 年に金属合金として発見された準結晶の持つ非周期的秩序構造は次のような著しい特徴を持つ：系に含まれる任意の局所構造が有限密度で分布するのみならず、その分布における隣り合った局所構造の間の距離はその局所構造のサイズ程度となる。従って、準結晶がどのような磁性的性質を持つかは興味深い問題と言える。ところが、沢山の磁性準結晶（局在モーメントを持つ準結晶）が調べられたにも拘わらず、磁氣的秩序（強磁性など）を示すものは一つも見つかっていない。これらの磁性準結晶は低温において例外なくスピングラス的凍結現象を示す。局在モーメント間に働く RKKY 相互作用がその原因と考えられているが、それを裏付ける理論的研究は存在しない。そこで我々は、次近接相互作用を反強磁性にすることで、幾何学的フラストレーションと最近接の強磁性相互作用との競合を導入した、HBS タイリング（2次元準結晶）上の Ising model の磁性の様子を、古典モンテカルロシミュレーションによる焼鈍し法やエントロピックサンプリング等の計算によって、明らかにしようと試みた。その結果、低温でエントロピーが残ったまま凍結する振る舞いが見られることが分かった。

電荷 - 双極子相互作用及び、双極子 - 双極子相互作用する 格子モデルの自由エネルギー面

鈴木洋一（京都大学）

溶液やガラス構造を議論する際には自由エネルギー面の理解が有用である。また、自由エネルギー面が、緩和などのダイナミクスとどのように関連しているかという問題は大変興味深い。分光スペクトルなど、系の緩和と密接に関わる物理量と、自由エネルギー面構造の関連を明らかにすることを本研究の最終目的とする。自由エネルギー面とダイナミクスの関連を調べる第一段階として、系の統計的性質及び、動的性質を同時に調べることのできるモデルの開発が必要である。我々は、電荷 - 双極子相互作用及び、双極子 - 双極子相互作用をする格子モデルを導入し、エントロピーサンプリング法を用いて、自由エネルギー面の計算を行った。その際、格子点から双極子をずらして配置することで空間的に不均一な相互作用を生じさせた。本発表では、不均一な相互作用の効果が自由エネルギー面や、物理量にどのように反映されるかを報告する予定である。

分子動力学法による高分子ブラシの静的及び動的特性の解析

山本晃介（慶應義塾大学）

高分子鎖を二次元表面に植込んだ時に形成される構造は一般に高分子ブラシと呼ばれる。分子動力学シミュレーションにより、高分子ブラシの静的及び動的特性を調べ、理論や従来のシミュレーションの結果との比較を行う。結果として、静的特性に関しては自己無撞着場理論やスケーリング理論との良い一致を確認した。動的特性に関しては緩和モード解析の方法により緩和時間を調べ、ブロップモデルによる予測に近い結果を得た。これは、従来のシミュレーション結果や、それを説明するために提案された理論と異なる結果であり、高分子ブラシの緩和がブロップモデルで十分記述できることを示唆している。

遊休計算機を利用したPCクラスタ構築

宮原慎（青山学院大学）

2004年度夏期休暇中に、青山学院大学内の教育用計算機資源（140台）を利用して、PCクラスタとして運用した。構築したシステムの科学技術用計算機としての計算速度、安定性、人的、時間的、金銭的コストの検証結果について報告する。

ハニカム格子上の電子間相互作用と電子格子相互作用の競合

宮原慎（青山学院大学）

ハニカム格子では、電子間相互作用と電子格子相互作用の競合により、パイエルズ転移や反強磁性秩序転移が起こることが期待される。量子モンテカルロ法を用いて相転移について調べた結果について報告する。

反強磁性二重交換模型におけるフラストレーションの効果

下村能弘（青山学院大学）

カゴメ格子、パイロクロア格子上の二重交換系にスピンの一軸異方性を課すことにより、擬スピン間に反強磁性相互作用を持つ二重交換系を考えることができる。電子系におけるフラストレーションの効果を広く調べるために、このような反強磁性二重交換模型を一般の幾何学的フラストレーションを持つ格子へ拡張し、モンテカルロ法を用いて調べる。本発表では、カゴメ格子と三角格子上の反強磁性二重交換模型の結果について報告する。

平行板間に閉じ込められた高分子溶融体の緩和モード解析

萩田克美（慶應義塾大学）

平行板間に閉じ込められた高分子溶融体中の1本の高分子鎖の最長緩和時間、自己拡散係数の挙動を、モンテカルロシミュレーションで調べる。実験では、高分子鎖の大きさに比べて平行板の間隔が小さい場合には、板による拘束によって緩和が遅くなるのではなく、緩和が速くなる事実が観測されている。緩和が速くなる原因は、表面の効果によるものと考えられている。理論の立場からは、高分子鎖の大きさに比べて平行板の間隔が十分小さい場合に、平行板の間に複数本の鎖が入らないと考えると、2次元の高分子濃厚系の振る舞いを示すと予想できる。本研究の動機の一つは、上記の予想が成り立つかどうかについて確認することである。我々のシミュレーション結果によると、重合度が増すと、最長緩和時間等の重合度依存性の冪指数がバルクよりも急激に小さくなるが、単純に2次元的な振る舞いの冪指数に収束していなかった。これは、高分子鎖が長いケースについてシミュレーション長が短い可能性や選んだサンプルが悪かった可能性も考えられる。まずは、高分子鎖の大きさに比べて平行板の間隔が十分小さい場合に2次元の高分子濃厚系の振る舞いを示すかどうかについて確かめるために、2次元的な振る舞いが成立つ本数の少ない状態から本数を増やし濃厚系に移り変わるときの変化について、調べている。

BEG 模型からのスピングラスへの接近

福島孝治（東京大学）

前回の基研研究会あたりで議論されたように、拡張アンサンブル法の一つの使い方として、系に存在する強い拘束条件をゆるめる方向に拡張軸をとる方向性が示された。しかも、それは非物理的状态であっても緩和を促進するためには有効である例が示された。しかしながら、その後、積極的にこの路線にある研究は少ないように思われる（結局盛り上がらなかったみたい）。我々はその例として、BEG スピングラス模型のシミュレーションを考える。ここでは通常の拡張アンサンブル法の拡張軸が温度－エネルギーとは異なり、化学ポテンシャル－粒子数を拡張軸に取るのが自然である。化学ポテンシャルを導入し、粒子数の少ない希釈された系から、粒子数が充填された通常のスピングラス模型に近づく戦略をとる。発表では、その背景と計算結果を議論したい。

力学系における「珍しい現象」のモンテカルロ・サンプリング

伊庭幸人（統計数理研究所）

力学系における「珍しい現象」（測度の小さい現象）を動的モンテカルロ法を使って積極的に取り出すことは興味ある課題である．この講演では，拡張アンサンブル法によるサンプリングについて，いくつかの簡単な例でその可能性をさぐる．珍しい軌道を生成する初期値のサンプリング，珍しい現象を生じるパラメータのサンプリングの両者を論じる，後者の例としてはマンデルブロ集合の「縁」（長い過渡状態を生むパラメータ）のサンプリングがある．