7pYL-10

格子ポリマー系の拡張アンサンブル ・モンテカルロ

統数研 [A]、阪大理 [B] ○伊庭幸人 [A]、菊池誠 [B]、千見寺浄慈 [B]

Monte Carlo simulation of lattice polymers with extended ensamble algorithms

Inst. Stat. Math., Osaka Univ. Yukito Iba, Makoto Kikuchi, George Chikenji

格子ポリマー系のモンテカルロシミュレーションにおいては、緩和の遅さとエルゴード性の確認の困難さが大きな問題である。本講演では拡張アンサンブルの考えを利用することでこれらの困難を克服する試みについて述べる。

拡張アンサンブル法、すなわち、対象とする分布を拡張ないし結合したアンサンブルをシミュレートする手法群のうち、マルチカノニカル法については、格子ポリマー系への実装例がすでに存在する(N. Urakami, M. Takasu, J. Phys. Soc. of Japan, 65, 2694 (1996), Molecular Simulation, 19, 63 (1997))。

マルチカノニカル法の適用はそれなりの効果があると思われるが、格子ポリマーの場合、self-avoiding条件がそれ以外の相互作用エネルギーとは別に付加されるという問題がある。このため素朴にマルチカノニカル法を実装した場合には、高いエネルギー状態 (高温)においてもself-avoiding条件が残ってしまう。これはしばしば緩和の障害となり、また単純なダイナミクスのもとではエルゴード性が保証されない原因になる。われわれはこの障害を除去するために、(1)温度とself-avoiding条件のゆるめ方を少しずつ変えた一連の系同士の交換を考える、(2)温度とself-avoiding条件の 2 方向への拡張を考える、の 2 つの方法を提案し、実装した。これらの方法は、それ自身としてはこの問題専用のものであるが、拡張アンサンブル法において“拡張”を行なう方向を問題に応じて選ぶことでより効果的な方法を構成できることを示す例としても興味深い。

本手法の概略は、春の学会において講演“ヘテロポリマーの設計問題”(菊池、伊庭、時田)の中で述べられたが、われわれはそれを発展させ、その正当性の検証、効率の比較について具体的なデータを示す予定である。