

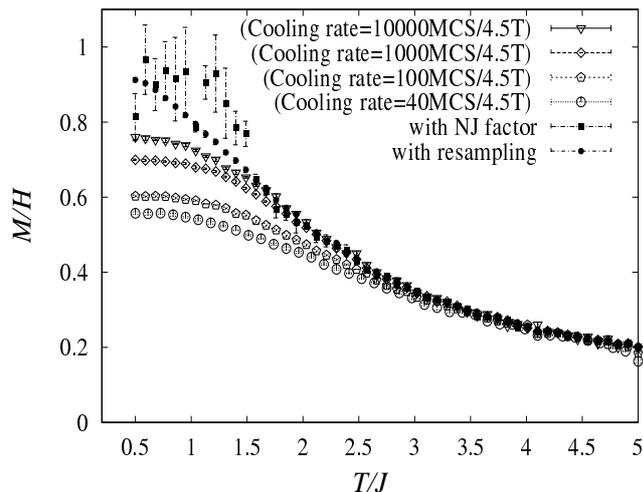
## Application of Neal-Jarzynski Method to a Spin Glass

The University of Tokyo and The Institute of Statistical Mathematics<sup>A</sup>Koji Hukushima and Yukito Iba<sup>A</sup>

最近、非平衡統計力学の一つの進展として、非平衡下での総仕事量と平衡状態での自由エネルギー差の間に成り立つ Jarzynski 等式 [1] の発見が挙げられる。通常熱力学で知られているのはそれらの間の不等式であり、等式が成り立つのは準静的過程の場合だけである。Jarzynski 等式の重要な点は準静的だけでなく、任意の速さの過程でも成り立つことである。この等式を温度徐冷過程に適用することで、有限温度サンプリングが可能なモンテカルロ法を構成でき、重み因子の計算を通じて任意の物理量の評価ができる [2]。我々はこの方法を Neal-Jarzynski (NJ) 法と呼ぶことにする [1,2]。この方法は、拡張アンサンブル法のようにマルコフ連鎖型のモンテカルロ法ではなく、量子系のモンテカルロ法の代表である拡散モンテカルロ法やグリーン関数モンテカルロ法、あるいは高分子系で有名な PERM 法のように多数のランダムウォーカーが確率分布を近似するポピュレーション型のモンテカルロ法に属する方法である [3]。

我々はこの方法のスピングラス等の緩和の遅い系への応用を試みた。NJ 方法には、操作過程 (温度徐冷速度) に 2 つの極限、すなわち、非常に速い極限と遅い準静的極限があるが、それぞれ再重率法と熱力学積分に対応する。それらは、精度と効率の面で一長一短であるが、その中間に実効的なトレードオフがあると考えられる。一方で、スピングラス系はエージング現象と呼ばれる顕著な徐冷速度依存性があり、我々はそのような系で NJ 法がどのように振る舞うかに興味がある。講演では、数値実験の詳細を報告する。

図：3次元イジングスピングラス模型のあるサンプルについて、幾つかの徐冷速度での磁場中冷却時のアニーリング磁化の温度依存性 (open mark) と NJ 法を用いた結果 (filled) を示す。は重み因子補正だけ行った単純な NJ 法の結果であり、データはかなり揺らいでいるが、さらに resampling を行った場合 ( ) は安定した結果が得られた。これらは徐冷速度が (1000MCS/4.5T) であり、徐冷速度を遅くしたアニーリング磁化はこの NJ 法の結果に近付いてきていることがわかる。



[1] C. Jarzynski, Physical Review Letters (1997) **78**, 2690.

[2] R. M. Neal, Statistics and Computing (2000) **11**, 125.

[3] Y. Iba, Transactions of the Japanese Society for Artificial Intelligence **16** (2001) 279, cond-mat/0008226.