「拡張アンサンブル」セッションのまとめと展望

統計数理研究所　伊庭幸人 [1]

「まとめと展望」のための時間はあまりなかったが，以下の話題について簡単に触れた [1].

1　3つの手法の比較

現在のところ，Exchange Monte Carlo (交換法，Metropolis-Coupled Chain) [2, 3, 4, 5], Simulated Tempering [6] (Expanded Ensemble [7]), Multicanonical Monte Carlo [8] の3つのアルゴリズム，あるいは，インプリメントの形式が提案されているが，それぞれ得手不得手があるはずである．これらは，ちょっとした工夫の有無によって違ってくるし，簡単に最終的な判断をするわけにはいかないが，仮に現状のまとめをしておくのは有意義だと思う．いくつかの項目について表にまとめたものを次に示す．

Subjects	Comment #	Exchange Monte Carlo	Simulated Tempering	Multicanonical Monte Carlo
1次転移	1	×	×	◯
「指数分布族」でない場合	2	◯	◯	×
独立レプリカ間の重なり	3	◯	×	×
学習	4	◯	?	?
連続系でのステップ幅	5	◯	◯	?

1. 1次転移
   温度を変えたとき1次転移を示す系（例：多色のポッツ模型）に有効なのはマルチカノニカル法だけである．ほかの方法は，カノニカル分布から拡張アンサンブルを組み立てるので，温度方向の拡張を考える限り [9]，拡張アンサンブルのカバーするエネルギーの範囲にギャップができてしまい，アルゴリズムはうまく働かないことが予想される．

2. 「指数型分布族」でない場合
   逆に，マルチカノニカル法は，温度/エネルギー方向以外のパラメータについて拡張する場合に難点を示すことがある．具体的には

$$P_{\boldsymbol{\lambda}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp\left(\sum_l \lambda_l f_l(\boldsymbol{x})\right)}{Z} \tag{1}$$

[1] E-mail: iba@ism.ac.jp

のような「指数型分布族」($\boldsymbol{\lambda} = \{\lambda_l\}$ がパラメータ) に対しては，

- $\{\lambda_l\}$ の異なる分布の直積を考える (多次元) 交換法
- $\{\lambda_l\}$ の異なる分布を混合する (多次元) Simulated Tempering
- $\{f_l(\boldsymbol{x})\}$ についての (多次元) マルチカノニカル法

の 3 つとも使えるが，一般の分布族 $P_{\boldsymbol{\lambda}}(\boldsymbol{x})$ についてはマルチカノニカル法はそのままでは使えない. これは，たとえば，コーシー分布

$$P_\lambda(x) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\lambda^2 + x^2} \tag{2}$$

を考えてみればわかる．

3. 独立レプリカ間の重なり

ランダム系の研究では 2 つの独立サンプルの間の重なり・距離の分布が欲しいことがしばしば起こる．最も簡単にこの目的を達成できるのは交換法である．2 つの交換モンテカルロ法を独立に走らせて，対応する温度 (一般にはパラメータ) のサンプルの重なり・距離の分布を求めればよい．Simulated Tempering やマルチカノニカル法では 2 つのシミュレーションを独立に走らせると，それぞれが温度軸・エネルギー軸上を勝手にランダムウォークするので，各時点で両者の重なり・距離を計算しても偶然に温度やエネルギーが一致する (近い値) を取る場合を除いて有効なサンプルが得られない．Simulated Tempering では 2 つの系を一体化したものをひとつの系とみて共通の温度でシミュレーションするという方法があるが，明らかに効率は低下する．マルチカノニカル法ではさらに面倒になる．すべてのデータを保存しておいて off line で計算するという手もあるが，たくさんの記憶容量が必要になる．最近開発された Multioverlap Ensemble に基づく方法 [10] もこの問題のひとつの解決策であろうが，単に独立レプリカ間の重なりの分布を求めるだけなら，交換法のほうがより簡単である．

4. 学習

Simulated Tempering では，離散化した温度 (パラメータ) の間隔と各温度 (パラメータ) でのウェイトの両方を学習させなくてはならないのに対し，マルチカノニカル法ではウェイトのみでよく，交換法では温度間隔のみでよい．この点からすると，交換法が一番シンプルなように思われる．

ウェイトの学習の効率については，Simulated Tempering やマルチカノニカル法で素朴な方法 (頻度のヒストグラムを構成する方法 [11]) を用いた場合には温度あるいはエネルギー軸上の乱歩による揺らぎがもろに効くので効率的に損であり，ウェイトの調整を要さず，温度間隔も交換頻度から調整できる ([12]) 交換法の利点が目立つ．しかし，この差はより洗練された学習アルゴリズム [13, 14] の採用によって縮まるかもしれない．また，難しい問題では，基底状態のごく近く，あるいは基底状態そのもの

のウェイトの決定が学習のボトルネックになる場合も多いが，その場合にこれらの差がどれだけ問題になるのかもよくわからない．

5. 連続系でのステップ幅
   連続変数のメトロポリス法では，変数をどの程度のステップ幅で変えようとするかが効率を大きく左右する．この際，効率が良いステップ幅は温度やエネルギーによって異なるのが普通である．交換法や Simulated Tempering では温度を動かす部分と微視的な変数 (スピンや原子) を動かす部分がはっきり分かれているので，温度によって違うステップ幅を実装するのは容易である．しかし，マルチカノニカル法ではそうなっていないので，系のエネルギーによってステップ幅を変えることはできない (少なくとも工夫を要する)．
   マルチカノニカル法の利点を保ったまま，ステップ幅を可変にするひとつの方法は，いくつかのマルチカノニカルアンサンブルを交換法類似の手法で貼り合わせて，それぞれにおいて別のステップ幅を用いることである．貼り合わせ式の手法の例は，[16] にある．

2　今後の展望

今後の発展が期待できる方向は無数にあると思うが，ここでは少し変わったものを 2 つ取り上げる．

2.1　ダイナミクスへの応用

本来，拡張アンサンブル法は「自然なダイナミクス」を実現する方法では無いので，「平衡分布を求める方法ですから，ダイナミクスを調べるのには使えません」というのが一番素直であるが，ここはあえてダイナミクスへの応用を議論してみよう．

一番わかりやすいのは，「平衡緩和」を調べるための初期条件を拡張アンサンブル法で準備するという方法である．これはすでに使われている (たとえば，[15])．いわゆるエージングのような現象の研究で非平衡緩和をしらべるときに，「行き着く先」である平衡緩和についての情報が得られていれば便利である．

もう少し本格的な応用としては，時間発展の経路そのもののアンサンブル [17, 18, 19] を考え，それを拡張アンサンブル法でシミュレートするという方向がある．このような「space-time ensemble」はまれにしか起こらない動的現象についての情報を得るのに便利であるが，制約の強い，フラストレーションを多く含む系を考えることになるので，通常の動的モンテカルロ法でシミュレートするのが困難なことが多い．そこで，拡張アンサンブルの手法が有用になるわけである．簡単な例として，小さなイジング系の 2 つの秩序状態をつなぐ最短パスの全体についてその動的な実現確率がどのように分布するかを調べた

結果を，研究会で発表したことがある [20]．現在，この方向の別の研究を準備している．

2.2　拡張アンサンブルそのものの意味付け

拡張アンサンブル・モンテカルロ法においては，拡張アンサンブルは計算手段であり，それ自体は物理的に意味がないのが普通である．この点がむしろ新しいともいえるが，なにか本当に意味のあるような例が出てくれば，それはそれで興味深い．

特殊なもの，いわゆるツアリス・アンサンブルなどについては，すでに物理的意味が議論されているようであるが，天然自然に存在するというのではなく，人為的に作るほうはどうであろう．筆者の実験物理の知識では具体的な手法までは考えられないが，物理系の緩和時間より応答の速い外部フィードバックを巨視的な外場に対してかけられれば，揺らぎがどんどん大きくなるようにしむけて，「巨視的な物体に対して巨視的な揺らぎの存在する状態」を作ることができるかもしれない．

別の方向で興味深いのは，拡張アンサンブルの情報処理問題における意味づけである．交換率あるいは温度変化率が一定になるように構成されたアンサンブルが統計学でいう Jeffreys Mixture に関係付けられることは容易に理解できるが [21]，さらに進んで，マルチカノニカル・アンサンブルやツアリス・アンサンブルが統計的推定の問題でどのような意味を持つかを考えることは非常に興味深い．この方向の研究も現在準備中である．

参考文献

[1] 現在審査中の伊庭の学位請求論文には，拡張アンサンブル法全体についての方法論を主体としたサーベイが含まれている．これは手を入れた上で総合報告として投稿する予定なので，筆者の立場からのより詳しいまとめとしてはそちらを参照されたい．

[2] K. Hukushima and Y. Nemoto (1996), J. Phys. Soc. Jpn., 65, 1604.

[3] C. J. Geyer (1991), *Computing Science and Statistics*, ed. E. M. Keramides, (Interface Foundation, Fairfax Station, Va.,1991) p.156.
C. J. Geyer and E. A. Thompson (1995), Journal of the American Statistical Association, 90, 909.

[4] 木村宏一，瀧和男 (1990), 時間的一様な並列アニーリングアルゴリズム，
信学技報, NC-90-1, 1.
M. Hirosawa, M, R. J. Feldmann, D. Rawn, M. Ishikawa, M. Hoshida, and G. Micheals (1992), Folding simulation using temperature parallel simulated annealing, in *Proceedings of the international conference on fifth generation computer systems*(ICOT,1992) p.300.
石川幹人, 金久實 (1993), 日本物理学会誌, 48, No.5, 341-343 (1993).

[5] 伊庭幸人 (1993), 統計数理, 41, 65 [英訳が [21] に含まれる予定].
伊庭幸人 (1993), 物性研究, 60, 677.

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

[7] A. P. Lyubartsev, A. A. Martsinovskii, S. V. Shevkunov, P. N. Vorontsov-Velyaminov (1992), New approach to Monte Carlo calculation of the free energy: Method of expanded ensembles, J. Chem. Phys., 96, 1776-1783.

[8] B. A. Berg and T. Neuhaus (1991), Phys. Lett. B267, 249.
B. A. Berg and T. Neuhaus (1992), Phys. Rev. Lett., 68, 9.
B. A. Berg and T. Celik (1992), Phys. Rev. Lett., 69, 2292.

[9] ポッツ模型の場合に「色方向」(スピンの要素数の方向)の拡張を考え，クラスターダイナミクスを用いると速く計算できるという不思議な研究が以下にある．W. Kerler and A. Weber (1993), Cluster dynamics for first-order phase transitions in the Potts model, Phys. Rev. B, 47, 563-566.

[10] B. A. Berg and W. Janke (1998), Multioverlap Simulations of the 3D Edwards-Anderson Ising Spin Glass, Phys. Rev. Lett., 80, 4771. 伊庭, 千見寺, 菊池の "Multi-Self-Overlap Ensemble" とは全く別物なので注意．

[11] J. Lee (1993), Phys. Rev. Lett. 71, 211.

[12] K. Hukushima (1999), Domain-wall free energy of spin glass models: Numerical method and boundary conditions, Phys. Rev. E 60, 3606.

[13] G. R. Smith, A. D. Bruce (1995), A study of the multi-canonical Monte Carlo method, J. Phys. A., 28, 6623.

[14] W. Kerler and P. Rehberg (1994), Phys. Rev. E ,50 4220.

[15] H. Kawamura and K. Hukushima, in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XI, Eds. D. P. Landau and H. B. Schüttler, (Springer Verlag, Heidelberg, Berli, 1998) p.7–21.

[16] U. H. E. Hansmann (1997), Chem. Phys. Lett., 281, 140.

[17] M. F. Zimmer (1995), Monte Carlo updating of space-time configurations : New algorithm for stochastic, classical dynamics, Phys. Rev. Lett., 75, 1431-1434.

[18] K. Nemoto, (1988), Metastable states of the SK spin glass model, J. Phys. A, 21, L287.

[19] この方面への筆者の興味の背景については以下参照．伊庭幸人 (1998), 無時間の思想,「物性研究」**71-2** (1998 年 11 月号) 189-208.

[20] 伊庭幸人 (1997), 物性研究所研究会「物性研究における計算物理学」(1997 年 6 月), `http://www.ism.ac.jp/~iba/houkoku3e.html`
で「物性研だより」に載った報告が見られる(があまり情報量は無い).

[21] 伊庭幸人，Ph. D Thesis，審査中
(及びその中の文献): とりあえず入手不能ですいません．