モンテカルロ法の新しい傾向とその背景

HOW TO WALK ON RUGGED LANDSCAPES

新しい傾向の背景

統計物理で使われている動的モンテカルロ法は、数値計算の方法であると同時に、実際の物理過程の模倣という性格も持っている。この点で、動的モンテカルロ法は技巧的なトリックを用いた最適化手法や乱数生成法 (“人工派” の方法) とは反対の極にある、いわば “自然派” の方法であるといえる。 “自然派” の方法論は、

> 計算のための表現は対象の物理モデルそのままで、アルゴリズムは物理的な要素過程からなっている。
> 複雑な動作は要素過程の協調から自然に生じる。

と要約される。この観点からみると、 simulated annealing 法による組合せ的最適化や動的モンテカルロ法のベイズ統計への適用は、 “自然派” の手法の物理以外の分野への進出として位置づけられる。

しかし、本当に物理的な自然を完全に真似ることが計算の手法として最良であろうか。実際の物理世界にも極めて緩和時間が長い現象はめずらしくない。また、人間の脳にしても、物理的な自然と同じ表現やアルゴリズムを利用して計算しているとは限らない。おそらく、両方の極の中間の方法論

> 表現は対象の物理モデルを変形したものであり、アルゴリズムは単純な要素過程からなるが、 “非物理過程” も含む。複雑な動作は (これらの仕掛けのもとで)“自然に” 生じる。

が必要とされているのではないか。現在、モンテカルロ法の世界で話題になっているマルチカノニカル法や交換法などの人工的アンサンブルを使う方法 (以下 “拡張アンサンブル” 法と総称する) は、この方向に向かっての最初の一歩と思われる。

また、マルチカノニカル法は、統計的解析の分類

(1) 測定結果の誤差評価やバイアス補正をする。
(2) 不完全・間接的な情報から欲しい情報を得る。 (例: 量子系での解析接続)
(3) ある時点までに得られた情報にもとづいて、それ以後の情報採取の戦略を設計する。

のうち、 (3) のレベルに位置する点でも興味深い。

拡張アンサンブルのいろいろ

マルチカノニカル法

カノニカル平均を求めるためには、温度 T ごとに動的モンテカルロ法を利用してサンプリングを行なうのが普通である。しかし、緩和時間が長い場合には、エネルギーの高い状態をある程度許してサンプリングすることによって緩和を速くすることが考えられる。 “凍結” を防ぎながら、低エネルギー状態の情報を十分採取するためには重みを慎重に選ばねばならない。ひとつの方法は、ボルツマン因子 $\exp(-E/T)$ の代わりに状態密度 $D(E)$ の逆数 $1/D(E) = \exp(-S(E))$ を重みに用いることである。この考えの難点は、状態密度 $D(E)$ があらかじめわかっていないとできないことであるが、これを $D(E)$ の逐次推定 (学習) で解決するのがマルチカノニカル法 [1] である。マルチカノニカルアンサンブルでは、エネルギーの周辺分布は一様分布になるが、各サンプルのエネルギーを記録しておけば、サンプリングで得た結果から必要な温度でのカノニカル平均を計算することは容易である。

交換法・ simulated tempering 法

同様の効果をもたらす別の方法は、複数のカノニカルアンサンブルを混ぜ合わせることである。 (語感からいえば、こちらの方がマルチカノニカル法の名にふさわしいかもしれない。) simulated tempering 法 [2] では、逆温度 β も確率変数と考えてシミュレーションを行なう。そのままで高温に滞在する確率がほとんど 1 になってしまうから、各逆温度に滞在する確率がほぼ等しくなるように罰金項を設ける。罰金項 $g(\beta)$ はやはり逐次推定 (学習) で求める。

交換法 [3](Metropolis-coupled chain, 時間的一様な並列アニーリング法、レプリカ交換法) は、 simulated tempering 法に似ているが、実際に複数の温度のことなるカノニカルアンサンブルを並列にシミュレートする点が違う。複数の系の状態は、各対のその時点でのエネルギー E_a, E_b に依存した確率$\max\{1, \exp((E_a - E_b)(1/T_a - 1/T_b)\}$で

交換される。この交換が同時確率分布 $\exp(-E_a/T_a)\exp(-E_b/T_b)/(Z_aZ_b)$ を不変にすることは簡単に示せる。 simulated tempering 法を温度方向についての single spin flip のメトロポリス法としたとき、交換法は川崎ダイナミクスに相当する。交換法で調節すべきパラメータは逆温度の組 $\{1/T_1, 1/T_2, 1/T_3..\}$ の選び方である。

その他

“拡張する方向” としてエネルギー以外の物理量を選ぶことも可能である (たとえば [4])。変わった例をあげれば、システムサイズの違う系をまとめたものを拡張アンサンブルと考えることも概念的に可能である。

量子系での reweighting 法 [5] として提案されているものと古典系の拡張アンサンブルの関係はいまひとつはっきりしない。量子系固有の問題は何かという点の議論が必要である。

拡張アンサンブルの限界

拡張アンサンブルだからといって、エネルギーを大きく変えるような試行、たとえば無茶な multispin flip などが許容されるわけではない。マルチカノニカル法の場合、エネルギー変化 dE が生じる割合は $D(E+dE)$ と $D(E)$ の比で決まり、 dE が大きくなるとともに急激に小さくなる。したがって、期待できるのはエネルギー軸上の刻みの小さい乱歩である。しかも、この乱歩には長期記憶があるかもしれない。交換法の場合も隣どうしが盛んに交換しているからといって全体が良く混ざっているという保証はない。

当然であるが、途中のエネルギーや温度の情報が不要だとしてもその部分も計算しないわけにはいかない。エネルギーや温度ならまだ良いが、変てこな拡張アンサンブルを作った場合にはこの点が実用上の障害になる。

拡張アンサンブルの比較

マルチカノニカル法と比較した場合の交換法・ simulated tempering 法の弱点は 1 次転移の取り扱いにあると思われる。実際に試したことはないが、おそらくうまくいかないであろう。この点の解決につながることを期待して、筆者は前回の学会でカノニカルでないアンサンブルの混合による交換法を提案したが、効率は良くないようである。交換法の利点としては、ベクトル化が楽で、種々の方法 (Molecular dynamics とのハイブリッド法、ランジュバン方程式など) と併用した場合でもインプリメントが容易なことがあげられる。

ダイナミクスの改良

拡張アンサンブルの限界を乗り越えるためには、やはりダイナミクスの改良という難題に挑戦しなくてはならない。クラスターダイナミクスと拡張アンサンブルの組合せなどがすでに行なわれている (たとえば [4]) が、さらに多様な展開が望まれる。ヒントになるのは、

(1) スピングラスのクラスターダイナミクス [6]
(2) Molecular dynamics とのハイブリッド法 [7]
(3) ダイナミクスの学習 [8]

などであろう。講演までに研究が間に合えば、具体的な “拡張ダイナミクス” の可能性について考察したい。

[1] Berg,B.A. and Neuhaus,T.(1991) Phys.Lett.B267 p.249;
Berg,B.A. and Celik,T.(1992) Phys.Rev.Lett. 69 p.2292.
[2] Marinari,E. and Parisi,G.(1992) Europhys.Lett. 19 p.451.
[3] Geyer,C.J.(1991) In Computing Science and Statistics: Proc.of the 23rd symposium on the interface (E.M.Keramides,ed.); 木村宏一, 瀧和男 (1990) 電子情報通信学会 NC-90-1 p.1; 高畠一哉 (1992) 電子情報通信学会秋期大会 A-172; 伊庭幸人 (1993) 統計数理 41 No.1 p.65; 福島孝治 (1994) 物理学会 秋の分科会.
[4] Janke,W. and Kappler,S.(1995) Phys.Rev.Lett. 74 p.212.
[5] Nakamura,T., Hatano,N. and Nishimori,H.(1992) J.Phys.Soc.Jpn. 61 p.3494.
[6] Swendsen,R.H. and Wang,J.S.(1986) Phys.Rev.Lett. 57 p.2607.
[7] たとえば、 Kogut,J.B.(1986) Nuclear Physics B275[FS17] p.1.
[8] Bouzida,D., Kumar,S and Swendsen,R.H.(1992) Physical Review A 45 p.8894.