Title	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(2004年度後期基礎物理学研究所研究会「モンテカルロ法の新展開3」,研究会報告)
Author(s)	伊庭, 幸人
Citation	物性研究 (2005), 85(3): 332-334
Issue Date	2005-12-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/110385
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

研究会報告

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 —

統計数理研究所　伊庭幸人 [1]

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（パラレル・テンパリング），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った．また若干マニアックな以下の問題を提起した．

1　1次転移におけるレプリカ交換モンテカルロ法とマルチカノニカル法.

拡張アンサンブル法にはレプリカ交換モンテカルロ法やシミュレーテッド・テンパリングのような温度（一般に示強変数）の値が違うものを同時に扱うという考え方とマルチカノニカル法のようにエネルギー（共役な示量変数）に基づくものの２種類がある．これらが本質的に異なるのは，１次転移がある場合で，前者においてはさまざまな温度の系を同時に考えても利用できないエネルギーの範囲が生じるが，後者では学習によってこのギャップを埋めるような重みを獲得することが可能である．液体の固化の場合，この学習過程は「結晶核」の表面エネルギーに人為的な補正を加えて，核の大きさをゼロにすることに対応すると解釈できる．

… というのが，一般に言われていることであり，筆者もレビュー [1] にはそう書いた．しかし，組み合わせ的に複雑な，基底状態の探索が容易にできないような問題でも，これはあてはまるのであろうか．もし，有限温度でのサンプリングについてそうなら，基底状態探索についてはどうだろう．符号解読や組み合わせ的最適化においても，エネルギーに基づいたマルチカノニカル的・閾値的なアニーリング法のほうが，通常の温度ベースのシミュレーテッド・アニーリング法より優れていることになるのだろうか．

高橋と伊庭は３体の相互作用を持つネットワーク上のイジングスピン系について，マルチカノニカル法でサンプリングされる分布の形状を（**エネルギー，秩序変数**）の２次元平面への射影で観察し，マルチカノニカル法の優位は疑わしいことを示唆する結果を得た [2]．この問題においては，潜熱・２相共存が明瞭に観測されるにもかかわらず，１変数のマルチカノニカル法の学習過程でエネルギー軸上の周辺分布を平坦化することは，（**エネルギー，秩序変数**）平面における密度の谷間を埋めるのに，あまり役立っていない印象がある．

上の例は，通常の「核形成」からはかなり遠いように思われる．もっと素直な１次転移を示すシステムについてはどうだろう．多状態のポッツモデルについての予備的な結果によれば，こちらの場合は，マルチカノニカル法でエネルギー方向の周辺分布を平坦化することは緩和を速くす

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

るために役に立ちそうにみえる．また，本研究会で発表された液体の拡張アンサンブル・シュミレーションの結果も，講演のスライドで見た限りでは，同様である．

> 潜熱を有する１次相転移をマルチカノニカル法とレプリカ交換モンテカルロ法の効率の比較という観点から考察し，分類すること

は興味ある課題であると思われる．

2　アニーリングと拡張アンサンブル

シミュレーテッド・アニーリング法と拡張アンサンブル法（たとえばレプリカ交換法）は，前者が最適化の方法，後者がサンプリング・期待値計算の手法であるという点で異なっている．しかし，実践的には，アニーリングを行いながら，順次，期待値を計算するなどの運用が行われている．そこで，

> アニーリングを行いながらサンプルを取った場合と拡張アンサンブル法の違いについて，現実的な問題，および，解析的・数値対角化的に解けるおもちゃの問題について比較研究する．

ことが望まれる．特に，魔法陣の数の計算 [3]，N-Queen の数の計算 [4]，ラテン方陣の数の計算 [9] など，与えられた条件を満たす対象を近似的に数え上げる問題においては，きわめて多数の最小値を持つエネルギー関数からサンプルすることになる．そこで，

> 近似的な数え上げ問題におけるアニーリングと拡張アンサンブル法の比較．また，拡張アンサンブル法による数え上げが機能するための条件．

に興味が持たれる．

素因数分解などの例を考えればわかるように，どのような問題でも適当なエネルギー関数を与えて，アニーリングによって最適化を行うことができる訳ではないが，サンプリングや近似数え上げの場合は，それだけでなく，一見よい近似値が得られるようにみえても，測度の小さい特別な解のグループを系統的に見逃している可能性にも留意する必要がある．

3　逐次モンテカルロ法 — 危ない場合と安全な場合

通常の動的モンテカルロ法（マルコフ連鎖モンテカルロ法）とは少し違ったモンテカルロ手法に逐次モンテカルロ法 [5]（より包括的な名称としてポピュレーション型のモンテカルロ法 [6]）がある．この手法では，遺伝的アルゴリズム (GA) のように，多数の系のコピー（粒子）を複製増殖・消滅・突然変異させることで分布の期待値の計算を行う．この際，最適化が目標の GA とは異なり，分布を歪めるような操作（交差など）は行わない．物理への応用では，量子系への応用である拡散モンテカルロ・グリーン関数モンテカルロが有名であるが，ほかにもさまざまな応用

が知られている [6]. 最近5〜10年ほど，ベイズモデルや状態空間モデルなど統計科学・機械学習の分野でこの系統の方法が流行している [5]. また，それとは独立に，化学物理・高分子物理を中心として PERM(Prune-Enriched Rosenbluth Method) の名での応用が発展している [7, 8].

これらの方法は，粒子を多数用意することで，オンラインの処理や並列探索など，通常の動的モンテカルロ法にない利点を実現しているが，反面「増殖・消滅」のステップがあるために，動的モンテカルロ法よりデリケートである．たとえば，PERM の最も簡単な例である自己回避酔歩について考えてみると，PERM で作った長い鎖のアンサンブルの「アタマ」の部分は少数の種類だけになってしまう（「木村資生の中立説」などで知られている遺伝的浮動の固定に関する議論と原理的に同じ．この例については篠本滋氏の指摘が役立った）．すなわち，自己回避酔歩のアンサンブルとしては偏ったものになってしまう．それではPERM は不正確かというと，問題によっては非常に長い鎖を生成でき，臨界指数の計算に利用できることが示されている [8]. 一方，すべての逐次モンテカルロ法・ポピュレーション型のモンテカルロ法の応用が，この種の問題に悩まされるわけではない．たとえば，時系列のフィルタリングの計算では，「現在」の状態（自己回避酔歩なら末端の位置に相当）にのみ興味があるので，この問題はあまり深刻ではない [2]．これらをまとめると，次のような問題が提起される．

> 逐次モンテカルロ法・ポピュレーション型のモンテカルロ法のうち，上の意味で問題のあるものと心配のないものを区別すること．PERM がうまく働くための条件とその理由は何か．

参考文献

[1] Iba,Y. (2001): Extended Ensemble Monte Carlo, International Journal of Modern Physics, C12, pp.623-656

[2] Iba, Y. and Takahashi, H. (2005): Exploration of multi-dimensional density of states by multicanonical Monte Carlo algorithm, Progress of Theoretical Physics Supplement No.157, pp.345-348.

[3] Pinn, K. and Wieczerkowski, C. (1998) : Number of magic squares from parallel tempering Monte Carlo, Int. J. Mod. Phys. C, 9 541-.

[4] Hukushima, K. (2002): Extended ensemble Monte Carlo approach to hardly relaxing problems, Comp. Phys. Comm., 147 pp.77-82.

[5] Doucet,A., de Freitas,N., Gordon,N. (eds.) (2001): Sequential Monte Carlo Methods in Practice, Springer.

[6] Iba,Y. (2001): Population Monte Carlo algorithms, Transactions of the Japanese Society for Artificial Intelligence, Vol.16 No.2, pp.279-286 (e-print: cond-mat/0008226).

[7] Grassberger, P. (2002): Go with the winners: a general Monte Carlo strategy, Computer Physics Communications, Volume 147, pp.64-70, (e-print: cond-mat/0201313).

[8] Grassberger, P. (1997): Pruned-enriched Rosenbluth method: Simulations of theta polymers of chain length up to 1000000, Phys. Rev. E 56, pp.3682-3693.

[9] 伊庭幸人：2004 年度　統計関連学会　連合大会　講演報告集 (2004) pp.89 - 90，及び，統計科学のフロンティア 12 巻「計算統計 II」（岩波書店，近刊）の伊庭の担当部分.

[2] 自己回避酔歩や PERM の多くの応用が本質的に非マルコフである点も，問題を難しくしている（この指摘は A. Doucet 氏ほかによる）．