

2005年度 東京工業大学 大学院総合理工研究科 知能システム科学特別講義第4
その3 「マルコフ連鎖モンテカルロ法の実践」

福島 孝治

東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系

URL: <http://dbs.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima>
<mailto:hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp>

2005年10月17日(月)～18日(火)



この集中講義(第三部)の目的

- 統計力学で使われるモンテカルロ法と最近10年の進展について概観する
- モンテカルロ法を知らない人 $\Rightarrow$ 使えるようになる。
- モンテカルロ法を知っているけど、使わない人 $\Rightarrow$ ちょっと使ってみる気になる。
- モンテカルロ法を知っていて、使っている人 $\Rightarrow$ でなくてもよい。

この集中講義(第三部)の目的

- 統計力学で使われるモンテカルロ法と最近10年の進展について概観する
- モンテカルロ法を知らない人 $\Rightarrow$ 使えるようになる。
- モンテカルロ法を知っているけど、使わない人 $\Rightarrow$ ちょっと使ってみる気になる。
- モンテカルロ法を知っていて、使っている人 $\Rightarrow$ でなくてもよい。
 $\Rightarrow$ 目からウロコな講義を目指す。

Outline

1. はじめに

- 確率的アルゴリズムとしてのモンテカルロ法
- モンテカルロ法の目的

2. モンテカルロ法のいろは

- モンテカルロ積分から重みつきサンプリングへ
- メトロポリスの方法
- 遅い緩和の問題
- アルゴリズムの改良について

3. 拡張アンサンブル法

- 様々な拡張アンサンブル法
- 拡張アンサンブルらしい応用
- 拡張アンサンブルの拡張



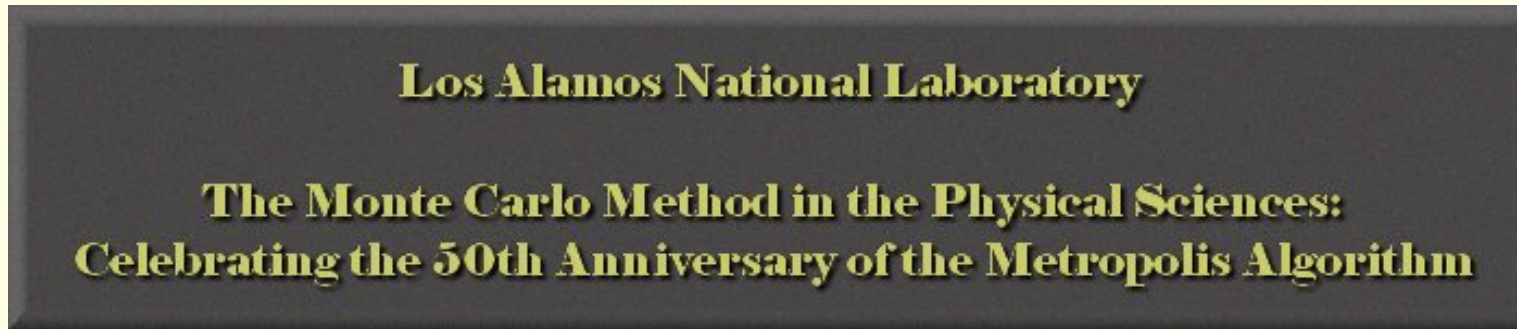
The Best of the 20th Century: Top 10 Algorithms

SIAM(Society for Industrial and Applied Mathematics) News, Vol 33,No.4

1. 1946: J. von Neumann, S. Ulam and N. Metropolis, Monte Carlo method
2. 1947: G. Dantzig, simplex method for linear programming
3. 1950: M. Hestenes, E. Stiefel and C. Lanczos, Krylov subspace iteration method
4. 1951: A. Householder, decomposition approach to matrix computations
5. 1957: J. Backus, Fortran optimizing compiler
6. 1959-61: J.G.F. Francis, QR algorithm
7. 1962: T. Hoare, Quicksort
8. 1965: J. Cooley, fast Fourier transform
9. 1977: H. Ferguson and R. Foreade, integer relation detection algorithm
10. 1987: L. Greengard and V. Rokhlin, fast multipole algorithm



モンテカルロ法50周年



June, 2003 marks the 50th anniversary of the Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller, and Teller publication of what is now called the Metropolis algorithm. This algorithm made the Monte Carlo method a general purpose fixture for studying the properties of physical systems and sparked the development of other Monte Carlo algorithms.

<http://cnls.lanl.gov/Conferences/MonteCarloMethods/>

N.Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.H.Teller and E. Teller, J.Chem. Phys. **21**, 1087(1953).

確率的アルゴリズムとしてのモンテカルロ法

1. 決定論的推論か確率的推論か? (1・2部 vs 3部??)

● 確率伝搬法

- 決定論的なアプローチ：初期条件を与えて，収束解が求まる．
- 真の確率分布を**計算可能な分布族で近似**する．
 - * いかに精度のよい近似確率分布を見付けるか (設定するか)
 - * どのようにすばやく計算するか?
- ◎ うまくいくときは とてもよい．素晴らしく速い．

● マルコフ連鎖モンテカルロ法

- 確率的アプローチ：乱数を用いて，分布を再現する．
- いつ終了するのは，使用者が決める．与えられた精度が出るまで頑張る．
- × 恐ろしく遅い... 実用アプリとしては致命的．
- ◎一般性・汎用性が高い：近似分布族を探さなくても良い．

(マルコフ連鎖) モンテカルロ法の目的

1. 物理シミュレーションとしての観点

- 自然の摸写:
 - 自然界で起きていることを計算機の中でつくってみる
 - モデル化の妥当性
- 計算機実験:
 - 実験室では実現できない実験をやってみる
 - 実験室で観測できない、あるいは観測が難しい量を計算
- 『見てみること』へのあこがれ → 理解の手がかりになる

2. 大自由度確率分布からのサンプリングと期待値 (平均値) の評価

- 統計科学等の多くの分野と共有する点
- 大抵の場合は、 $O(N)$ の手続きなので、それなりに大きな系に適用可能.
- 非摂動論的アプローチ $\longleftrightarrow$ (平均場近似、摂動展開法等のとは対照的)
- 問題なのは系統誤差ではなくて、統計誤差であることが多い.
- 統計誤差を小さくするのはそれなりに大変.

(マルコフ連鎖) モンテカルロ法の目的

- d 次元空間の点 $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ の従う確率分布 $P(\mathbf{X})$ が与えられている。

1. 確率分布 $P(\mathbf{X})$ に従う様に, 点 $\mathbf{X}$ を**サンプリング**,

$$\{\mathbf{X}^{(i)}\} = \{\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \dots, \mathbf{X}^{(M)}\}.$$

- 確率分布 $P(\mathbf{X})$ の逆関数は求めることはできないとする。

2. $\mathbf{X}$ の関数 $A(\mathbf{X})$ の確率分布 $P(\mathbf{X})$ についての**期待値の計算**

$$\langle A \rangle = \int_D A(\mathbf{X}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(\mathbf{X}^{(i)}).$$

- 一般に多重積分はこの範疇に入ると考えられる. 求めたい積分を $I = \int_D dx g(x)$ とし, 確率分布 $P(x)$ に従う変数から評価するのは,

$$I = \int_D dx g(x) = \int_D dx \frac{g(x)}{P(x)} P(x) = \left\langle \frac{g(x)}{P(x)} \right\rangle$$

モンテカルロ積分: π の評価の場合

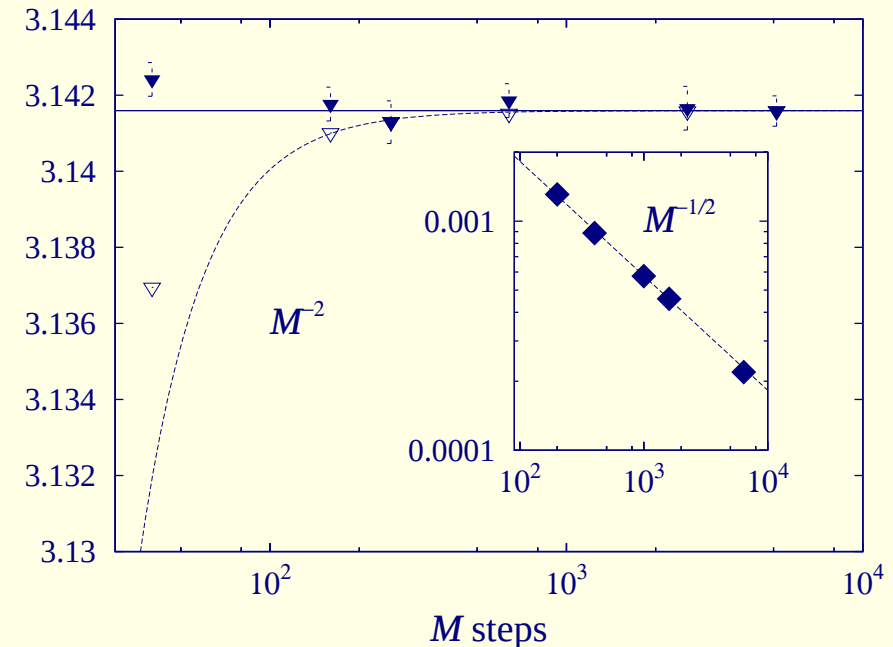
- 例えば, 一変数関数 $g(x) = 4\sqrt{1-x^2}$ を領域 $D \in [0, 1]$ で積分.

- 単純MC積分法: 領域 D から一様サンプリングする, $P(x) = \text{一定}$.

$$\tilde{I} = \frac{1}{M} \left(\frac{g(x^{(1)})}{1/D} + \cdots + \frac{g(x^{(M)})}{1/D} \right)$$

- モンテカルロ積分の誤差は, $O(M^{1/2})$ 程度

- 最も簡単な求積法である台形公式の誤差は, $O(M^{-2})$.



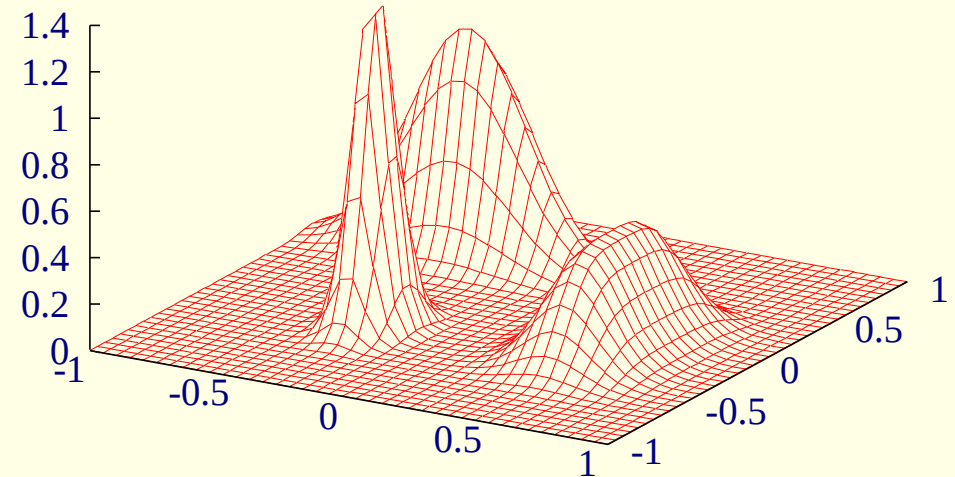
- 実際には, π の計算は, 誤差が大きくて, モンテカルロ法ではやらない.
- しかし, モンテカルロ法の誤差は原理的には**積分変数の次元に依らない**.

⇒ 次元が大きくなると, モンテカルロ法もやれる?!

モンテカルロ積分をより高次元に

● 一様ランダム・サンプリング積分を高次元へ応用した場合の**困難点**

1. 高次元空間の中で積分領域を一様にサンプルすることは意外に難しい。
2. ほとんどの点で被積分関数の値が小さく，無駄ばかりが多くなる。
 - － 分散が大きくなってしまう。
 - － よい評価が困難になる。



二次元分布関数の例：関数の値が有意な値を持つ領域は少なくなる．鞍点評価がよくなるような例だと，ますます辛い．

● 一様ランダム・サンプリングから，**重点的サンプリング**へ．

⇒ 分布関数 $P(X)$ に比例するようにサンプルしたい

メトロポリスのモンテカルロ法

- 確率仮定を用いて、逐次的に点列 $\mathbf{X}$ を生成する.
 - マルコフ連鎖：直前の点 $\mathbf{X}^{(t-1)}$ のみから新しい点 $\mathbf{X}^{(t)}$ を決定する.

$\mathbf{X}^{(t-1)} \rightarrow \mathbf{X}^{(t)} \rightarrow \mathbf{X}^{(t+1)} \rightarrow \dots$: 定常分布が $P(\mathbf{X})$ となるように...

- **モンテカルロ法の原理**：遷移確率 $W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}')$ の満たすべき必要条件

(A) 詳細つり合いの条件 遷移確率の関係式

$$P(\mathbf{X})W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}') = P(\mathbf{X}')W(\mathbf{X}' \rightarrow \mathbf{X})$$

(B) エルゴード条件 任意の2つの点 $\mathbf{X}$ と $\mathbf{X}'$ の遷移確率がゼロでないか、**有限個**のゼロでない遷移確率の積で表される.

⇒ どんな初期条件からでも、**唯一つの定常分布**に収束する.

詳細つりあいから

- 不変分布： $\int d\mathbf{X} P(\mathbf{X}) W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = P(\mathbf{Y})$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{X} P(\mathbf{X}) W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) &= \int d\mathbf{X} P(\mathbf{Y}) W(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}) \\ &= P(\mathbf{Y}) \int d\mathbf{X} W(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}) = P(\mathbf{Y}) \end{aligned}$$

– まだ物理の要素は入っていない。通常は、 $P(\mathbf{X}) \propto \exp(-\beta E(\mathbf{X}))$ 。

- 方法のミソは,
 1. どのような遷移確率 $W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})$ を選ぶか?
 2. どのような不変分布 $P(\mathbf{X})$ を設定するか?
 3. 他にもあるかも?

遷移確率のいろいろ

- 遷移確率の満たすべき (必要) 条件は緩くて、一意的には決定できない。

- 点 $\mathbf{X}$ の各成分 x_i が離散的な多値 ($\{\alpha_i^\mu, \mu = 1, \dots, A_i\}$) をとる場合:
- 遷移は, **ある成分** x_i の値を更新する状況を考える。

現在の状態 $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_d) \rightarrow$ 新しいの状態 $\mathbf{X}_\mu = (x_1, \dots, \alpha_i^\mu, \dots, x_d),$

メトロポリス型 : あらかじめ新しい値 α_μ をどれかに選択。

$$W_{\text{Metropolis}}(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_\mu) = \min \left(1, \frac{P(\mathbf{X}_\mu)}{P(\mathbf{X})} \right) \quad (1)$$

熱浴法, ギブスサンプラー 取り得る新しい値は A_i とおりある。

$$W_{\text{heatbath}}(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_\mu) = \frac{P(\mathbf{X}_\mu)}{\sum_\mu P(\mathbf{X}_\mu)} \quad (2)$$

- 各成分 x_i を一つずつ更新する限り, エルゴート条件は満たされることが多い。
- 連続変数の場合も新しい候補を離散化することで一般化は可能

メトロポリス・アルゴリズム

ステップ 0: 初期条件を適当に選ぶ: $\mathbf{X}^{(0)}$

ステップ 1: 現在の点 $\mathbf{X}^{(t)}$ からランダムに変化させた新しい候補点 $\mathbf{X}'$ を生成.

ステップ 2: 遷移確率 $P(\mathbf{X}')/P(\mathbf{X}^{(t)})$ を計算

ステップ 3: 一様乱数 $r \in [0, 1]$ を生成し, 以下のように次の状態 $\mathbf{X}^{(t+1)}$ を決める;

$$\mathbf{X}^{(t+1)} = \begin{cases} \mathbf{X}' & \text{if } r \leq P(\mathbf{X}')/P(\mathbf{X}^{(t)}) \\ \mathbf{X}^{(t)} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

ステップ 4: ステップ 1 へ戻り, 繰り返す.

ステップ1から4までの試行を1モンテカルロステップと呼ぶことにする.

詳細つりあい条件再び：Metropolis-Hastings

- 詳細つりあい条件: $P(\mathbf{X})W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = P(\mathbf{Y})W(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})$
- Hastings の一般化：任意の関数 $f(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ を使って

$$\frac{P(\mathbf{X})}{f(\mathbf{X}, \mathbf{Y})} f(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = \frac{P(\mathbf{Y})}{f(\mathbf{Y}, \mathbf{X})} f(\mathbf{Y}, \mathbf{X}) W(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})$$

- 熱浴型

遷移確率 $W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})$ と関数 $f(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ は行き先 $\mathbf{Y}$ だけに依存している

- Metropolis-Hastings 型

$$W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = f(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) \min \left[\frac{P(\mathbf{Y}) f(\mathbf{Y}, \mathbf{X})}{P(\mathbf{X}) f(\mathbf{X}, \mathbf{Y})}, 1 \right]$$

- * Metropolis 法: $f(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = 1$
- * 常に新しい状態にトライ: $f(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = 1 - \delta(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$

具体的な例1：イジング模型

- 各格子点にスピン変数 $S_i = \pm 1$
- 状態の数は 2^N

$$\mathbf{X} = (S_1, S_2, \dots, S_N) (= (1, -1, 1, \dots))$$

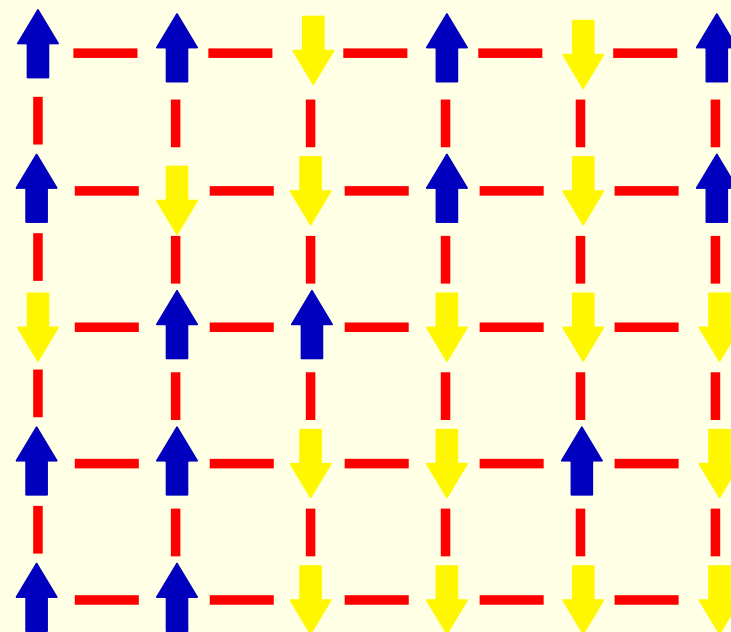
- 確率分布：ギブス関数

$$P(\mathbf{X}) = \frac{\exp(-E(\mathbf{X})/T)}{\sum_{\mathbf{X}'} \exp(-E(\mathbf{X}')/T)}$$

$E(\mathbf{X})$ はエネルギー関数

$$E(\mathbf{X}) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j$$

- 相互作用 $J_{ij} = J$ の場合
 - $S_i S_j = 1$: $-J$ エネルギーが下がる
 - $S_i S_j = -1$: $+J$ エネルギーが上る



- 物理量の例

– 磁化 $M = \frac{1}{N} \sum_i S_i$

$$\langle |M| \rangle = \left(\sum_{S_i=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N} \right) |M| P(\{S\})$$

具体的な例題2： N クイーン 問題

$N \times N$ のボードの上に N 個のクイーンが
お互いにぶつからないように配置する.

- 各行に1つだけクイーンを配置する.
クイーン変数

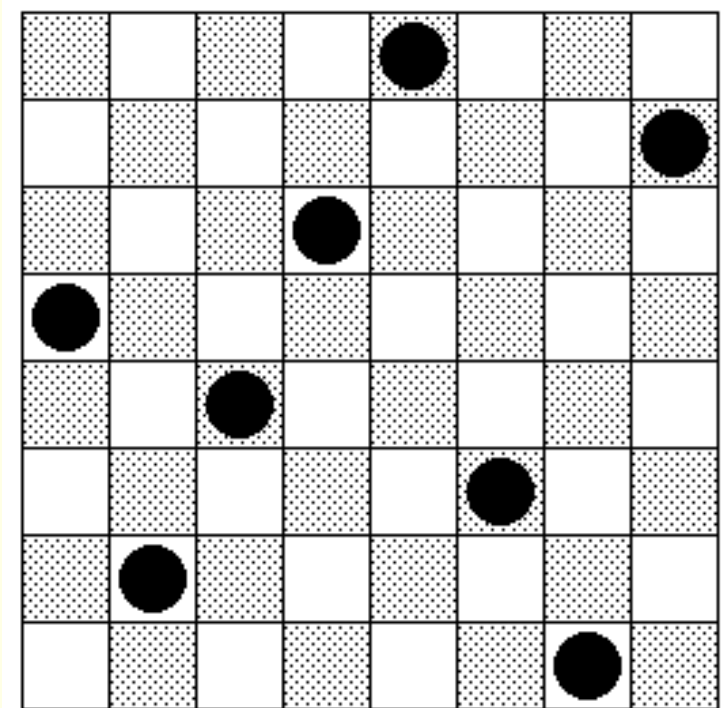
$$X_i = (1, 2, \dots, N), (i = 1, \dots, N)$$

状態の数は N^N .

- 確率分布はどうとるかは自由だが、ギブス関数的にエネルギーをクイーンがぶつかる件数として,

$$P(\mathbf{X}) \propto \exp(-(\text{エネルギー})/T)$$

- クイーン問題はお互いにぶつからない配置, すなわちエネルギーゼロの配置を求めること. 温度 T を低くして, 確率分布を最大にする配置 $\mathbf{X}$ を求めたい.



8クイーン問題の解答例

イジング模型を例に具体的なメトロポリス・アルゴリズム (1)

ステップ 0: 初期スピン配位

初期点 $\mathbf{X}$ をランダムに選ぶ: $\mathbf{X}^{(0)} = (S_1^{(0)}, S_2^{(0)}, \dots, S_N^{(0)}) = (1, -1, \dots, -1)$

ステップ 1: 次のスピン配位の選択 (メトロポリス型)

ランダムに選んだ格子点 k のスピンを反転したスピン配位

$$\mathbf{X}' = (S_1^{(t)}, S_2^{(t)}, \dots, -S_k^{(t)}, \dots, S_N^{(t)})$$

ステップ 2: 遷移確率の計算: 遷移コストを評価する.

$$\frac{P(\mathbf{X}')}{P(\mathbf{X}^{(t)})} = \frac{\exp\left(\sum_i' J S_i^{(t)} (-S_k^{(t)}) / T\right)}{\exp\left(\sum_i' J S_i^{(t)} S_k^{(t)} / T\right)} = \exp\left(-2 \sum_i' J S_i^{(t)} S_k^{(t)} / T\right)$$

- **現在** のスピン配位だけで表される
- 注目する格子点 k の **近接の和だけ** で計算できる.

イジング模型を例に具体的なメトロポリス・アルゴリズム(2)

ステップ 3: 乱数との比較で更新.

一様乱数 r と比較することにより, ルール

$$X^{(t+1)} = \begin{cases} X' & \text{if } r \leq P(X')/P(X^{(t)}) = \exp\left(-2 \sum_i' J S_i^{(t)} S_k^{(t)} / T\right) \\ X^{(t)} & \text{otherwise} \end{cases}$$

に従って, 次の状態 $X^{(t+1)}$ を決定する.

一つ注意する点は, この更新で実際の状態の変化が無い場合 ($X^{(t+1)} = X^{(t)}$) でも, 状態更新と見なして, 平均の計算には考慮する必要がある.

ステップ 4: くりかえし ステップ1に戻って, 同じ操作を繰り返す.

- 通常は, 全スピン数 N 回の繰り返しを, **1 モンテカルロステップ数** と言う.
- メトロポリス法で作られるサンプル列 $\{X^{(1)}, X^{(2)}, \dots, X^{(M)}\}$ の間には**強い相関**が残ることが推測される.

イジング模型を例に具体的なメトロポリス・アルゴリズム(3)

ステップ 4 のつづき : 強いMCステップ相関. 独立と思えるくらいにサンプル間のMCステップを離す. 目安は相関時間 τ^* ,

$$C(\tau) = \frac{\langle A(\mathbf{X}^{(t)})A(\mathbf{X}^{(t+\tau)}) \rangle - \langle A(\mathbf{X}^{(t)}) \rangle^2}{\langle A(\mathbf{X}^{(t)})^2 \rangle - \langle A(\mathbf{X}^{(t)}) \rangle^2} \sim \exp(-\tau/\tau^*)$$

を見積もって, τ^* くらいは離してサンプリングしたい.

$$\{\mathbf{X}^{(t)}, \mathbf{X}^{(t+\tau^*)}, \mathbf{X}^{(t+2\tau^*)}, \dots, \mathbf{X}^{(t+M\tau^*)} \dots\}$$

これは, 単純モンテカルロ積分から重点サンプリングに移行する際の代償か.

期待値(平均値)の測定

任意の温度の物理量 $A(\mathbf{X})$ のカノニカル平均は,

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{\int d\mathbf{X} A(\mathbf{X}) \exp(-\beta E(\mathbf{X}))}{\int d\mathbf{X} \exp(-\beta E(\mathbf{X}))} \simeq \frac{\sum_t A(X(t)) \exp(-\beta E(X(t))) P^{-1}(X(t))}{\sum_t \exp(-\beta E(X(t))) P^{-1}(X(t))}$$

と求めることができる. 特に, M をサンプリング数として,

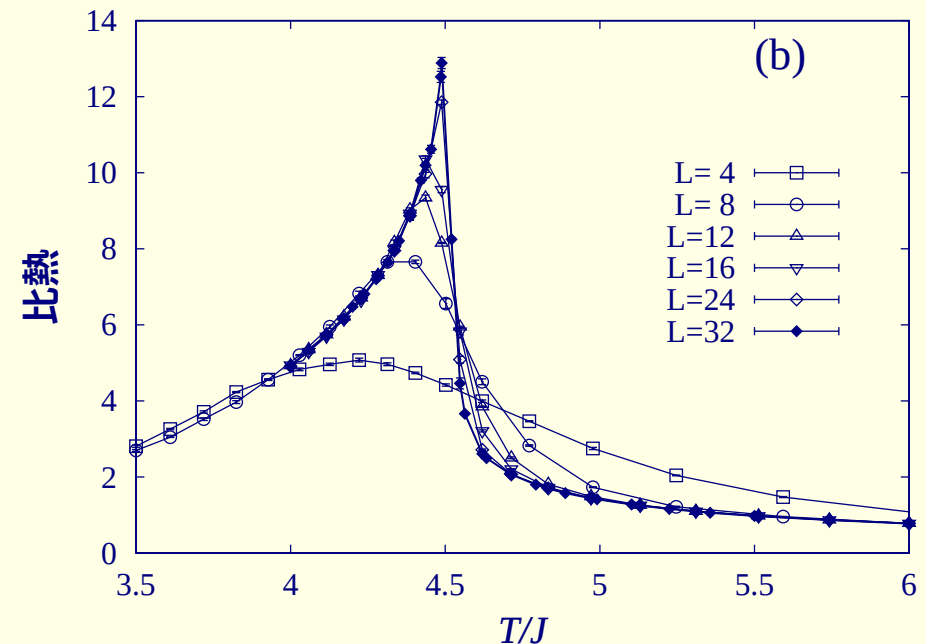
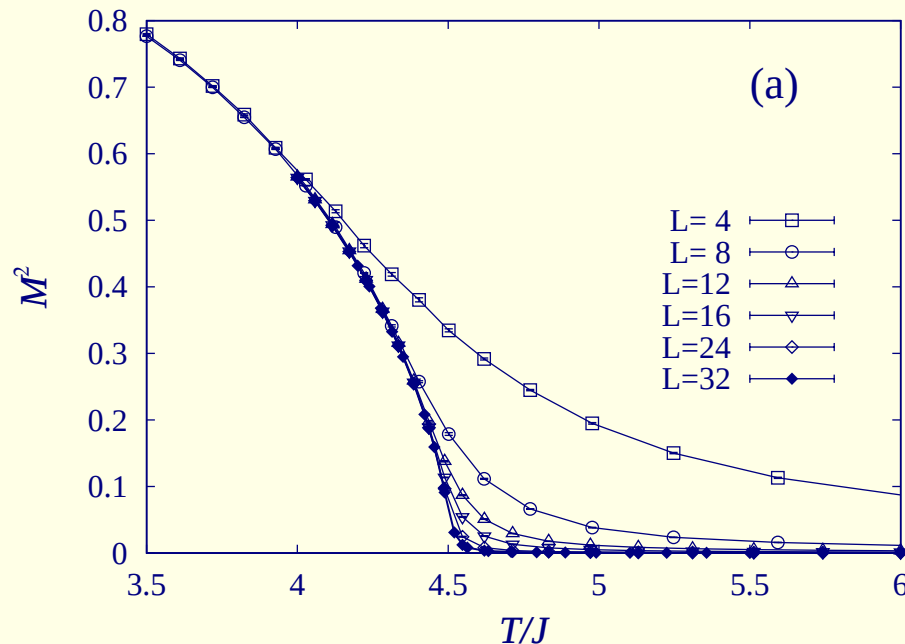
- $P(\mathbf{X}) = \exp(-\beta E(\mathbf{X}))$ とすれば,

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M A(X(t))$$

- この式は, 観測した物理量 $A(\mathbf{X})$ を $P^{-1} \exp(-\beta E)$ で再重率しているとみることができる. 必ずしも同じ温度の不変分布を用意する必要はない.
 - 温度 β' でマルコフ連鎖を作り, 温度 β で期待値の計算 $\Longrightarrow$ **ヒストグラム法**
 - ギブス分布でなくてもいいかも... $\Longrightarrow$ **拡張アンサンブル法**

イジング模型の結果

3次元イジング模型の結果：磁化(左)と比熱(右)の温度依存性



- ある温度で特異な振るまいが見られる．相転移の存在．
- スピン数は、 $N = 4^3 \sim 32^3$ ． $N = 32^3$ のときの全状態数は 2^{32768} ．
- この程度の計算が一晩で、できる時代になった．
- ($N \rightarrow \infty$ への外挿や相転移の捕まえ方は物理特有の問題：別途ご相談ください．)

まとめ 1

- 統計力学の中でのモンテカルロ法
- (マルコフ連鎖) モンテカルロ法の基本として, メトロポリス法の解説
 - メトロポリス法, 熱浴法
 - メトロポリス・アルゴリズムのイジング模型への具体的な応用
- 応用例は沢山ある.
 - 参考文献
 1. D. P. Landau and K. Binder: A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics, Cambridge University Press (2000).
 2. J. S. Liu: Monte Carlo Strategies in Scientific Computing, Springer-Verlag New York (2001).

注意すべき点

- ある修士論文審査会にて,
審査の先生：「あなたのモンテカルロ計算は**なぜ正しい**といえるのか？」

注意すべき点

- ある修士論文審査会にて,
審査の先生：「あなたのモンテカルロ計算は**なぜ正しい**といえるのか？」
学生：「私を信じて下さい!!」

注意すべき点

- ある修士論文審査会にて,
審査の先生：「あなたのモンテカルロ計算は**なぜ正しい**といえるのか？」
学生：「私を信じて下さい!!」
 - プログラムのバグ:いろいろありうる. いつもある変数だけ更新を忘れていたりとか...
 - 乱数の性質: 周期性の問題. 64bit化が進む中で, どうなるか.
 - エルゴード性の問題
 - * 本質的なダメなアルゴリズム: 広義のバグ?
 - * **実質的にエルゴード性が満たされない**場合: 原理的には正しくても...
 - 有効サンプリングの問題: 統計誤差の評価, サンプル点数 M は幾つ必要か?
- 一般的な対策はない: 必要条件の積み重ね
 - 厳密にできるところをチェック. 例えばサイズの小さいところで, 全状態数え上げ.
 - 満たすべき恒等式や不等式のチェック

乱数について

- 合同乗算法 (使ってはいけないと言われて来た)

$$I_{n+1} = \text{mod}(aI_n, P), \quad \text{ex. } a = 5^{11} = 48828125, P = 2147483647$$

– 切り混ぜ

- トーズワース法, シフトレジスター法, M系列 推奨されてきた

$$I_n = \text{XOR}(I_{n-r}, I_{n-s})$$

– m-tap法

- メルセンヌ・ツイスター法 今ならばこれか?

- 自然乱数(ハードウェア) : 再現性がない. デバグができない.

モンテカルロ法における定常分布への遅い緩和の問題

ある状況では、マルコフ連鎖の状態の遷移確率が著しく小さくなり、**実質的に遷移が起こらない。**



独立なサンプリングが少なくなり、期待値の評価に問題が生じる

広い状態空間のある局所的な部分に留まり続けるというイミで

実質的なエルゴード条件の破れ ≒ 遅い緩和の問題

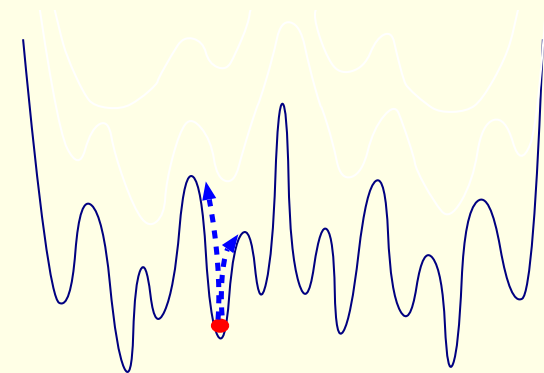
と呼ばれていて、物理的に興味のある系でこの困難に直面する。例えば、

- **複雑な系での分布の多峰性**

(Spin) Glass, タンパク質、最適化問題等に共通拘束条件の強い系で広く一般的に見られる。

あっちを立てればこっちが立たない状況

- **ある相転移に関する slowing down**



(自由) エネルギー表面の
多数の局所的な安定状態 = 分布の
多峰性

東工大 集中講義

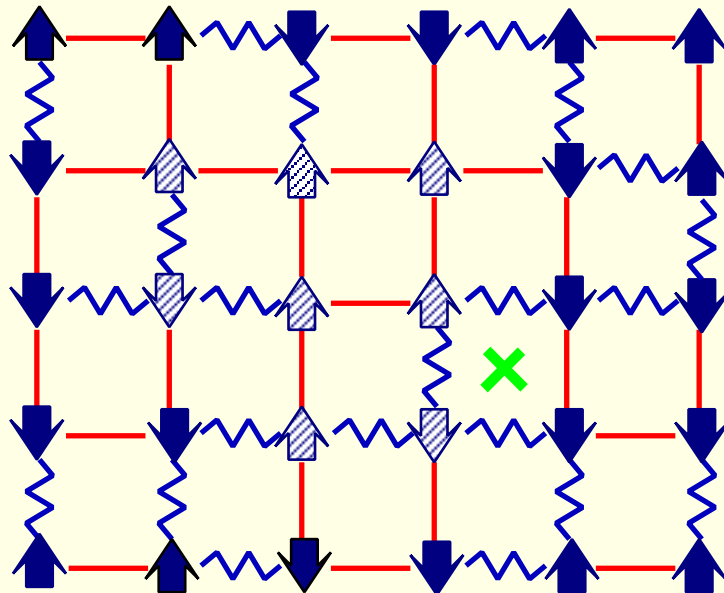
『マルコフ連鎖モンテカルロ法の実践』

2005年10月18日, 25

拘束条件の強い例

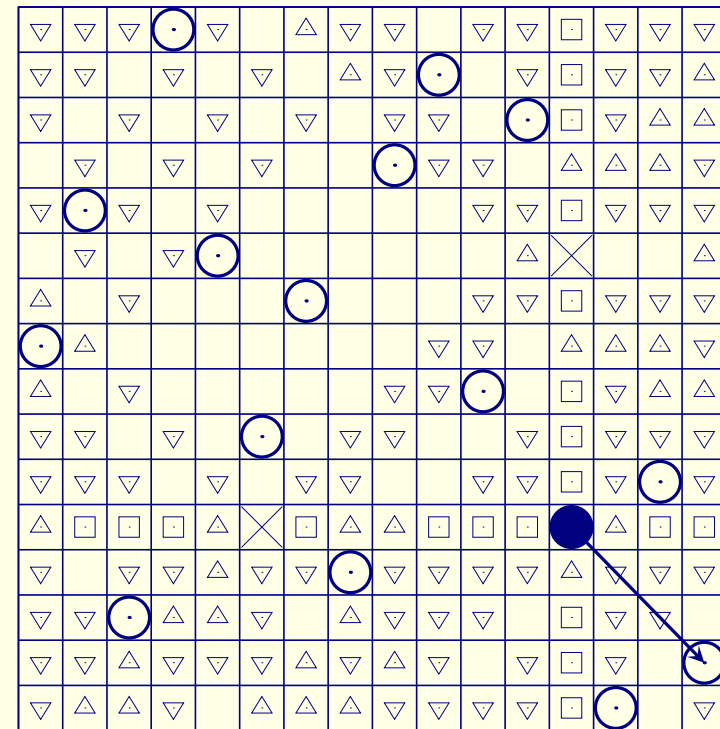
イジング模型の応用：スピングラス

- 相互作用 J_{ij} を正負ランダムにすると...
波線は -1 , 直線は $+1$
- 緑×の四角形にはうまくスピンを置けない.
- エネルギーが低い状態が沢山ある.
- 薄色のスピンを全部ひっくり返しても良い.
- が, 一つずつひっくり返す途中にエネルギーの高い点がある.



N クイーン問題の例：

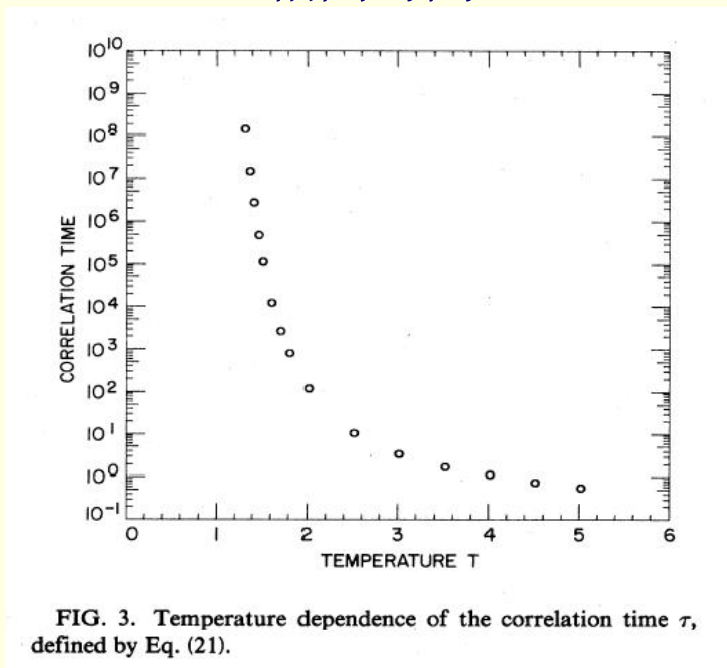
- この配位は, 一つのクイーンがぶつかっている.
- 一つずつ動かすと, 一度は2つぶつかっている配位を通らなければならない.



スピングラス系での大規模MC計算(昔)：Ogielski (1985)

A. T. Ogielski, Phys. Rev. B 32, 7384 (1985). : 3次元イジングスピングラス模型

相関時間

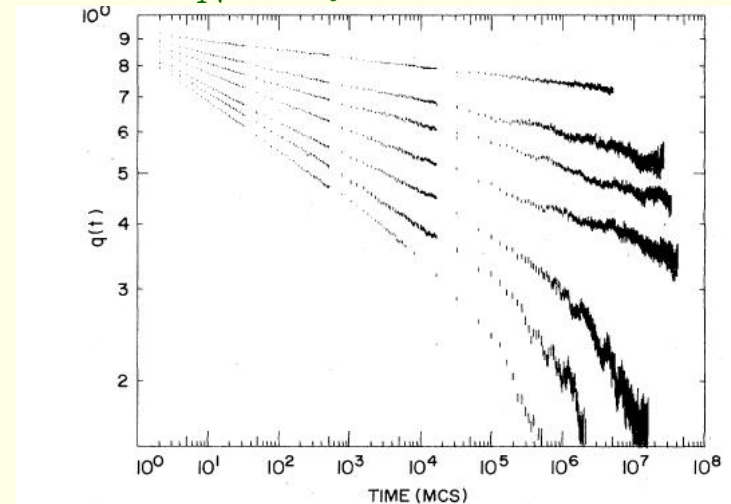


$\tau(T) \sim |T - T_g|^{-z\nu}$ with $z\nu \sim 7$

有限温度で発散： グラス転移
スピングラス転移の存在は肯定的に。。

自己相関関数(重なり関数)

$$q(t) = \frac{1}{N} \langle \sum_i S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \rangle$$



低温相でもまだベキ的
非常に遅い緩和現象

Simulated Annealing: 最適化技法としての観点

S. Kirkpatrick, et al, Science **220** 671, (1983).

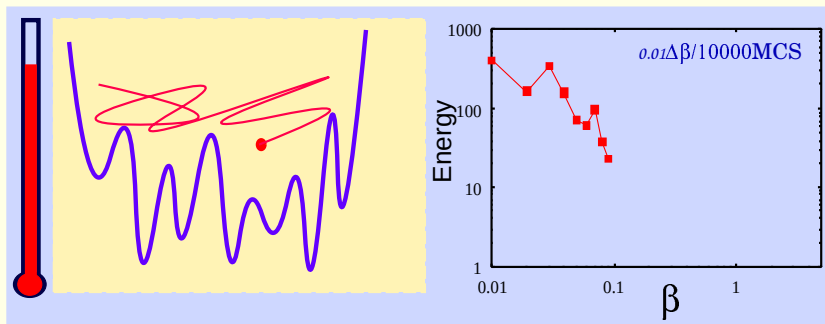
- 一般の確率分布 $P(\mathbf{X})$ に対して、温度パラメータ T の導入

$$P_T(\mathbf{X}) = \frac{P^{1/T}(\mathbf{X})}{\sum_{\mathbf{X}} P^{1/T}(\mathbf{X})} \quad \left(= \frac{e^{-E(\mathbf{X})/T}}{\sum_{\mathbf{X}} e^{-E(\mathbf{X})/T}} \text{ for Gibbs dist.} \right)$$

- 温度を徐々に下げる：徐冷法

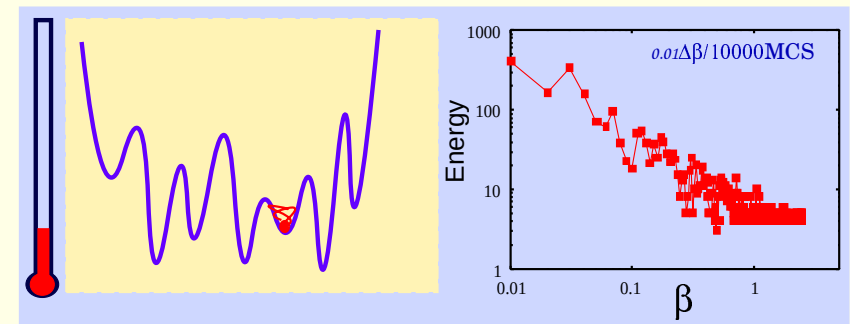
高温極限：無作為抽出法

エネルギーの低い状態は探せない
準安定状態に捕まる可能性は低い



低温極限：急冷法

常にエネルギーの低い状態を探す
準安定状態に捕まる可能性は高い



SA 法の限界....ジレンマ

1. 温度のスケジュールはどうすればよいか？

- 速く温度を下げすぎると、復旧が難しい。
- 遅すぎると、無駄な計算。

(対数的にゆっくりと冷やせばよいが、現実的ではない。)

2. 多数に縮退した解はどのように求めるのか？

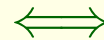
- 何度も繰り返すのか？

3. 途中の温度の情報は？

- 温度を下げる過程で詳細釣り合いの条件を破っているので、平衡状態の情報は得られない。サンプリングとしての保障がない。

詳細釣り合いを満たして、平衡状態を作りたい

低温で準安定状態に捕まってしまう



温度を上げ下げして準安定状態から脱出したい

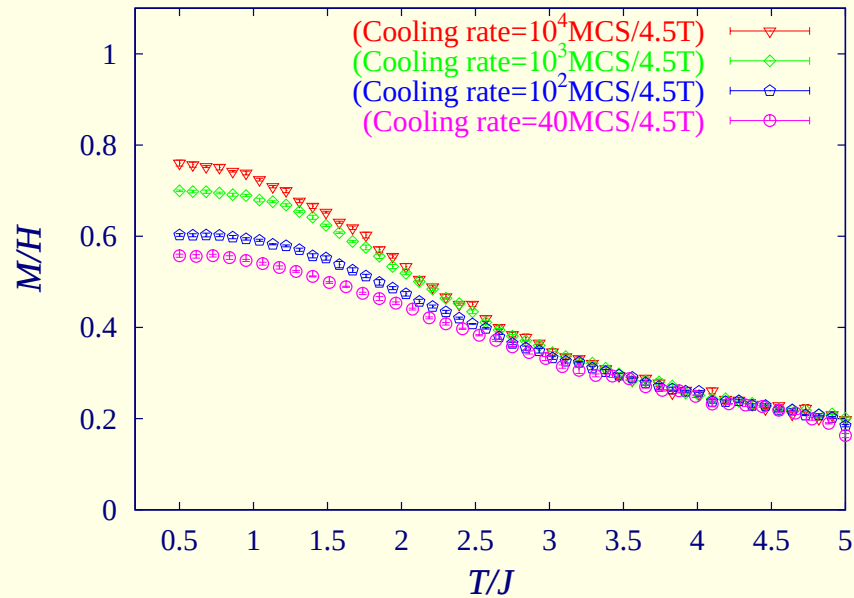
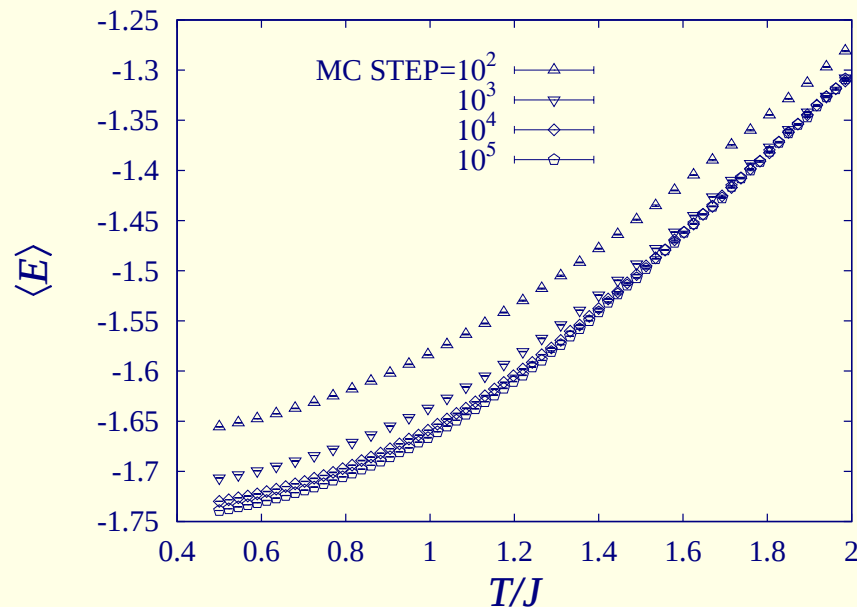
平衡状態がわからない

SA の例.....平衡状態計算法ではない...

Simulated Annealing の結果：cooling rateを変えたときの物理量の期待値

スピングラス系: エイジング現象と呼ばれる**非常**に遅い緩和

磁場中磁化



cooling rate に依存した結果

⇒ 例えば，エネルギーの熱力学積分は正しい自由エネルギーを与えない。

最近のモンテカルロ法の発展

1. 非局所的状態更新 (クラスターアルゴリズム)

- Swendsen-Wang (1987), Wolf (88): スピン系で固まりでフリップする方法
- 高分子の非局所ムーブとして, pivot algorithm

2. 拡張アンサンブル法

確率分布関数を拡張したり、合体したアンサンブルを考えてみる。

- **マルチカノニカル法** : Berg-Neuhaus, (1991)
 - entropic sampling : Lee
 - Broad histogram MC : Oliveira (1998)
 - Flat histogram MC, Transition Matrix MC : Wang (1999)
 - Wang-Landau method....
- **Simulated tempering** : Marinari-Parisi, (1992)
 - Expanded ensemble method : Lyubartsev et. al. (1992)
- **交換法** : Hukushima-Nemoto, (1996)
 - Multiple coupled Markov chain MC , Parallel tempering

Exchange Monte Carlo Method (1)

レプリカ系：ある調べたい系 $E(X)$ に対して, M 個のレプリカ系を考える。

$$E_{\text{eff}}(\{X\}) = \sum_{m=1}^M \beta_m E(X_m),$$

拡張された状態は $\{X\} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$ で表される。

拡張された確率分布関数

$$P_{\text{eq}}(\{X\}; \{\beta\}) = \prod_{m=1}^M P_{\text{eq}}(X_m; \beta_m) = \prod_{m=1}^M \frac{1}{Z(\beta_m)} \exp(-\beta_m E(X_m))$$

モンテカルロ・ステップ

1. (通常ステップ) それぞれのレプリカについて、状態更新

$$X_m \Longrightarrow X'_m$$

2. 2つのレプリカ系 X_m と X_n について **状態の交換**

$$\{X_m, X_n\} \Longrightarrow \{X_n, X_m\}$$

Exchange Monte Carlo Method (2)

詳細釣り合いの条件

$$\begin{aligned} & P(\{\cdots, X, \cdots, X', \cdots\}; \{\cdots, \beta_m, \cdots, \beta_n, \cdots\}) \times W(X, X'; \beta_m, \beta_n) \\ &= P(\{\cdots, X', \cdots, X, \cdots\}; \{\cdots, \beta_m, \cdots, \beta_n, \cdots\}) W(X', X; \beta_m, \beta_n). \end{aligned}$$

$$\frac{W(X, X'; \beta_m, \beta_n)}{W(X', X; \beta_m, \beta_n)} = \exp(-\Delta),$$

交換のコスト関数は、

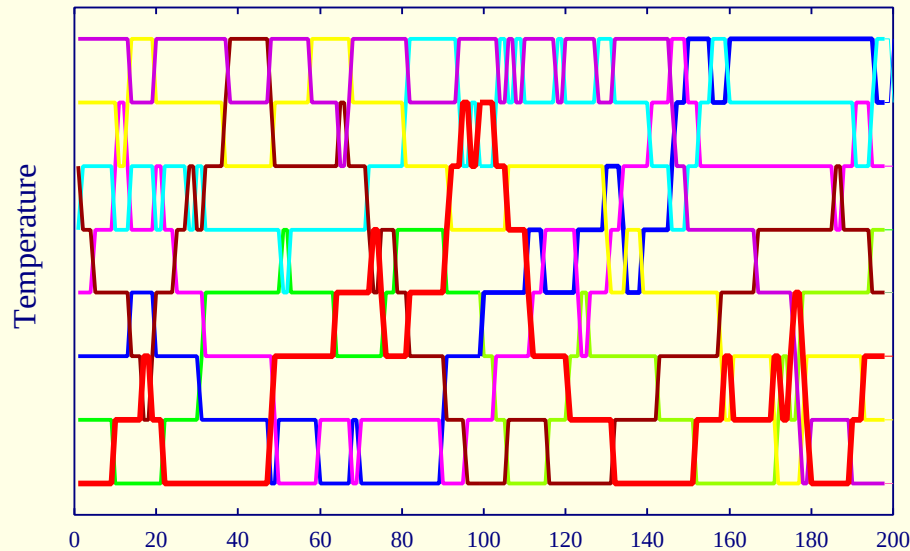
$$\Delta(X, X'; \beta_m, \beta_n) = (\beta_n - \beta_m)(E(X) - E(X')).$$

交換のための遷移確率

$$W(X, X'; \beta_m, \beta_n) = \begin{cases} \min[1, \exp(-\Delta)], & \text{for Metropolis type,} \\ \frac{\exp(-\Delta/2)}{\exp(-\Delta/2) + \exp(\Delta/2)} & \text{for heat bath type.} \end{cases}$$

Exchange Monte Carlo Method (3)

Monte Carlo Procedure



1. 通常のMCの手続きに従って、それぞれのレプリカは独立に同時に状態更新する

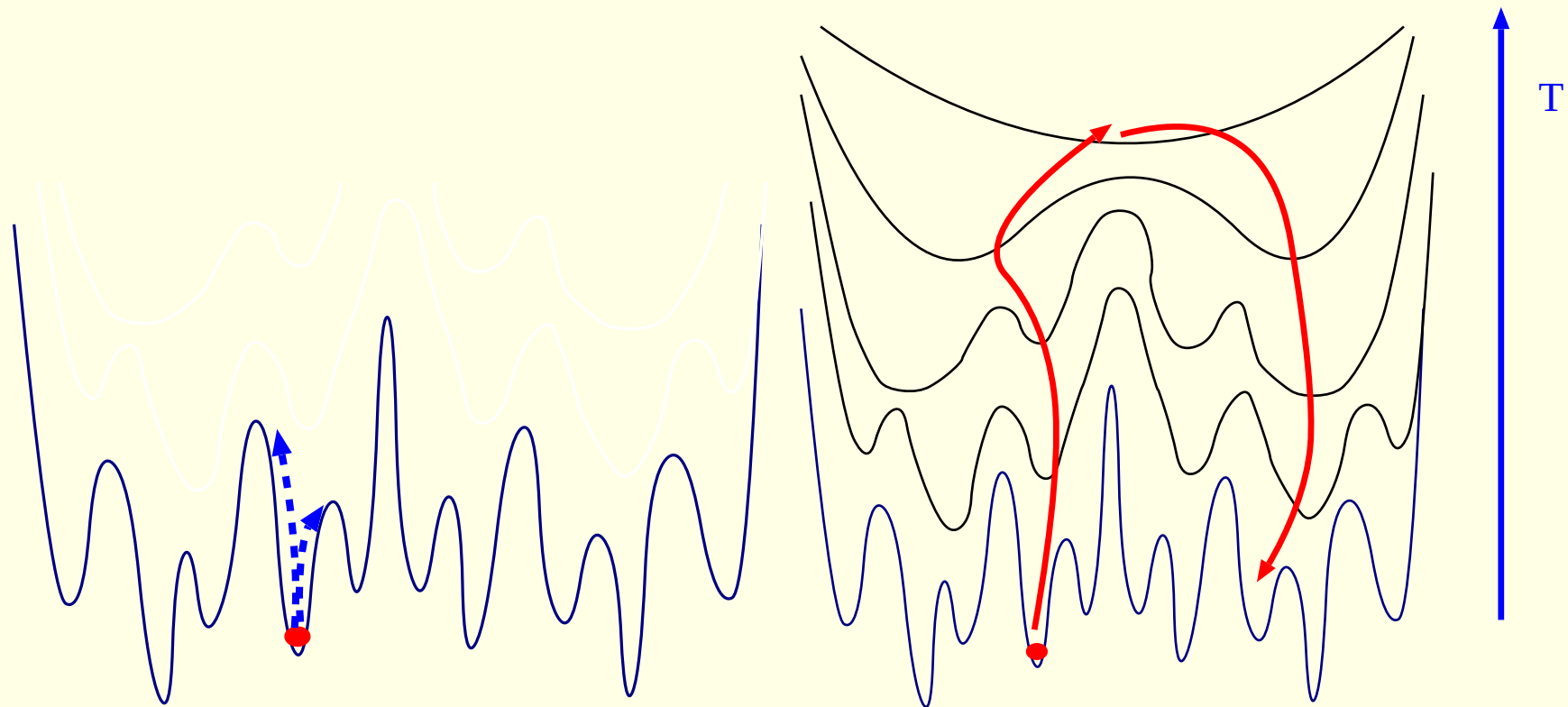
$$\{X_m\} \Rightarrow \{X'_m\}$$

2. 2つのレプリカの状態 X_m と X_{m+1} を遷移確率 $W(X_m, X_{m+1})$ に従って交換する

$$\{X_m, X_{m+1}\} \Rightarrow \{X_{m+1}, X_m\}$$

- それぞれのレプリカ状態は温度軸上をランダムウォークする
 - 自分自身で自動的アニーリング(ヒーティング)
 - 温度上昇もするので、準安定状態から脱出する手段を備えている
- それぞれの温度では定常分布が再現される：平均値の計算ができる。

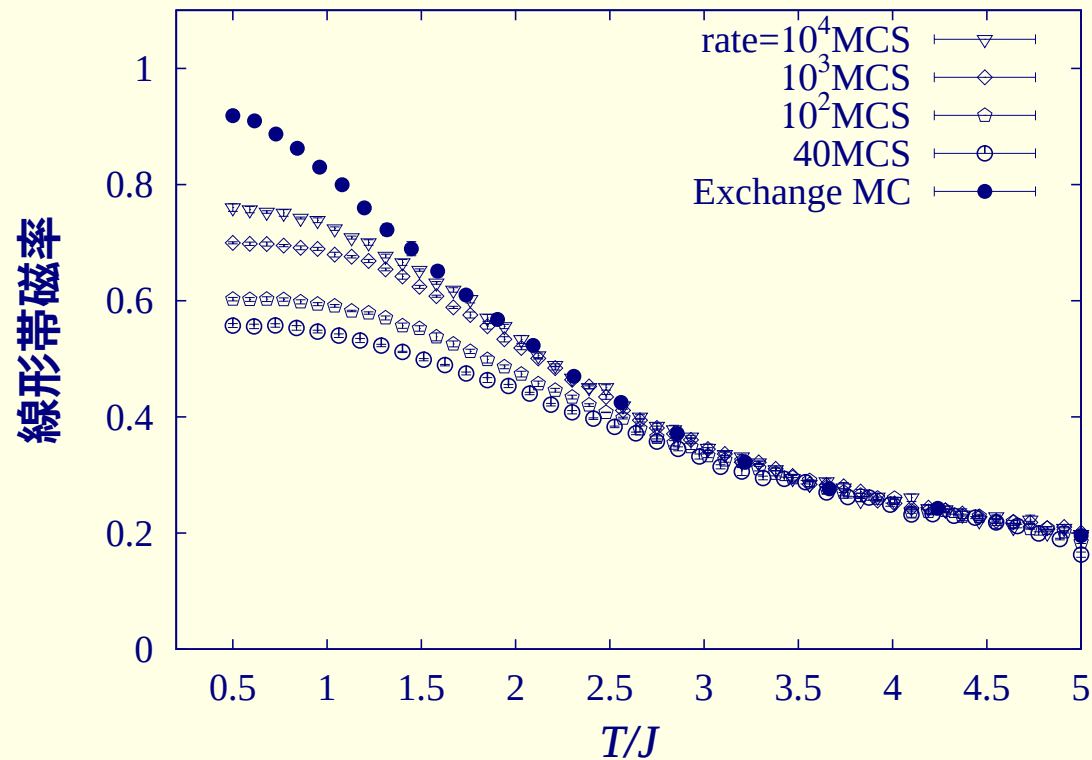
絵を書いてみると.....



深みにはまりこんだら、這い上がるのではなく、回り込むのがよい。

交換法の応用例

先のスピングラスの例



- 先程お見せしたイジング模型の例も **交換法**の結果

“うまくいく”ための必要条件

条件 1 交換が有意な確率で実現している。

交換が起こらなければ、通常の温度一定MCと同じなので、交換確率がある程度確保されないといけない。

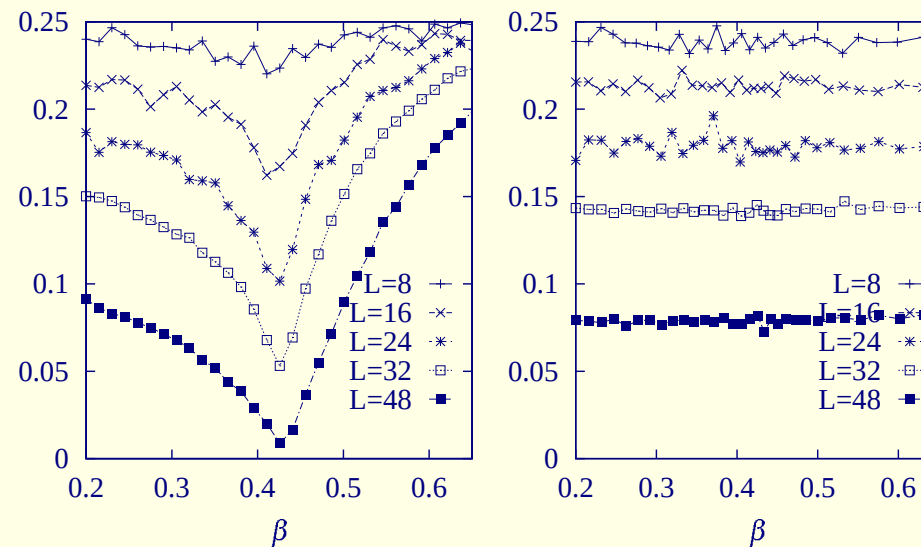
$$\log(\text{交換確率}) = (\beta - \beta')(E(X) - E(X')) \sim \left(\frac{d}{d\beta} \langle E \rangle \right) (\beta - \beta')^2$$

- 隣接する温度差は、おおよそ $1/\sqrt{N}$
 - 遠く離れた温度間で交換を試みるのは効率悪い。
 - 全体の調べたい温度領域が決まれば、その中には $O(\sqrt{N})$ 程度必要
 - エネルギーのゆらぎが大きいところでは、交換確率は減る。
 - ましてや、一次転移のように潜熱、エネルギーの飛びがある場合は深刻。
- 適用限界

“うまくいく”ための必要条件(2)

- 温度を均等分割で設定したときに

二次元強磁性イジング模型の例



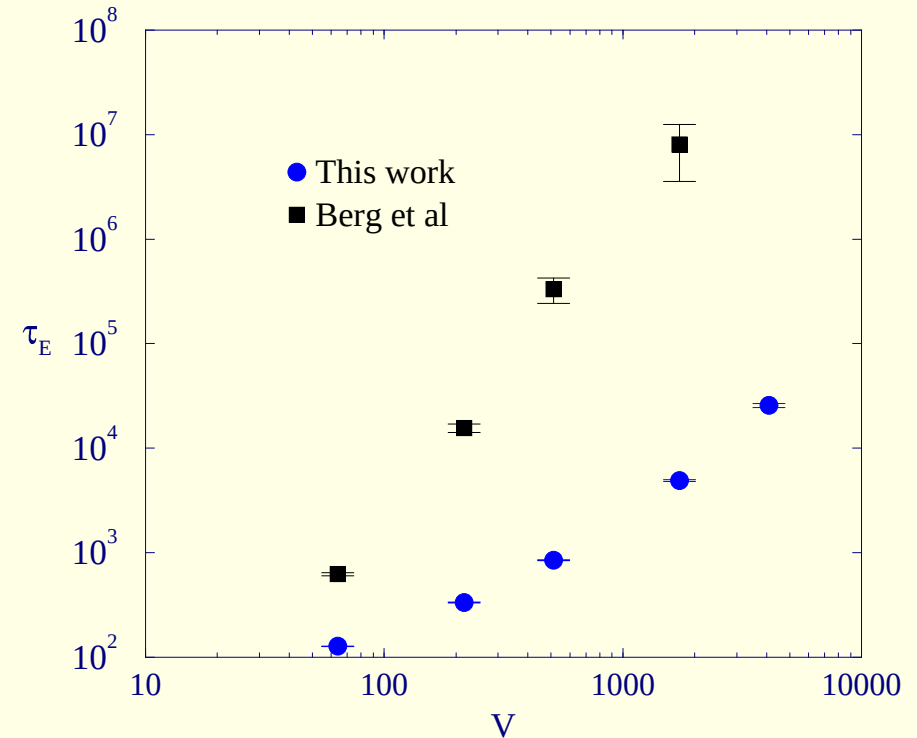
- エネルギーの温度依存性の概略が分かれば、交換確率を均等にする温度の設定は容易にできる。
- 近似的なエネルギーは比較的簡単にわかる。

“うまくいく”ための必要条件(3)

条件 2 それぞれの状態が合体系を動き回っている。

- 近接する温度間で交換が起こっていても、全体で混ざっているかどうかは自明ではない。
- **エルゴード時間**: あるレプリカが最低温度から最高温度に達するために必要な時間
- このエルゴード時間がそこそこの(小さな)時間スケールに収まっていることを確認すべし。

エルゴード時間 vs 系のサイズ



三次元スピングラス模型の例

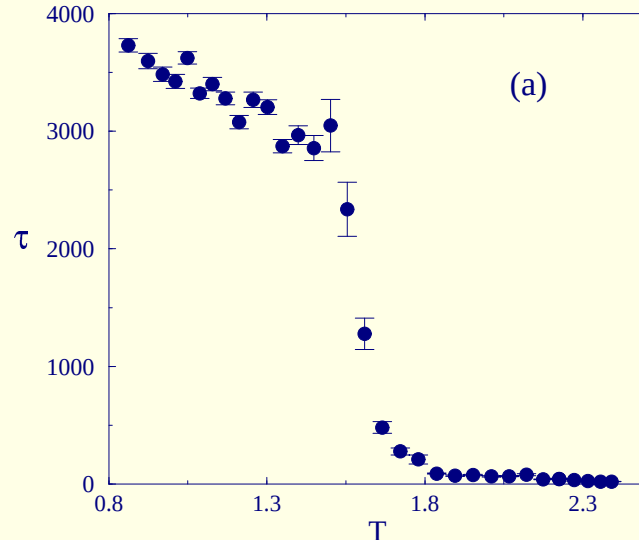
“うまくいく”ための必要条件(4)

条件 3 その結果、状態が記憶を無くしている。

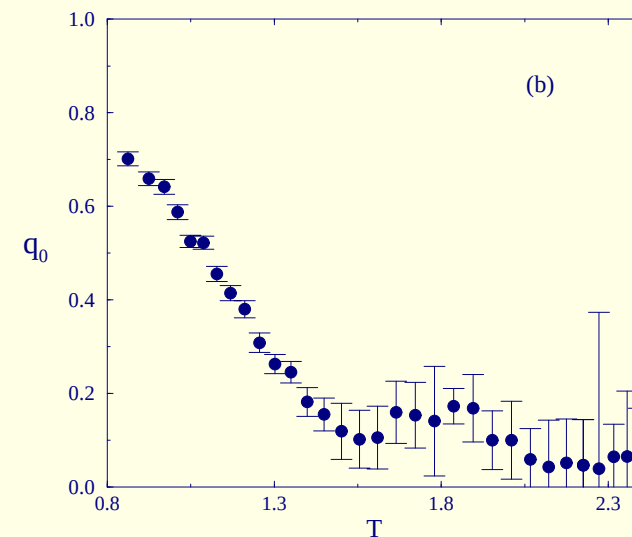
- 相関が無くなっている時間スケールを確かめる．おそらく，エルゴード時間程度になっているはず．例えば，

$$C(t, t_0; T) = \sum_i \frac{1}{N} \langle S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \rangle_T \sim q_0 \exp(-t/\tau)$$

特性時間 τ の温度依存性



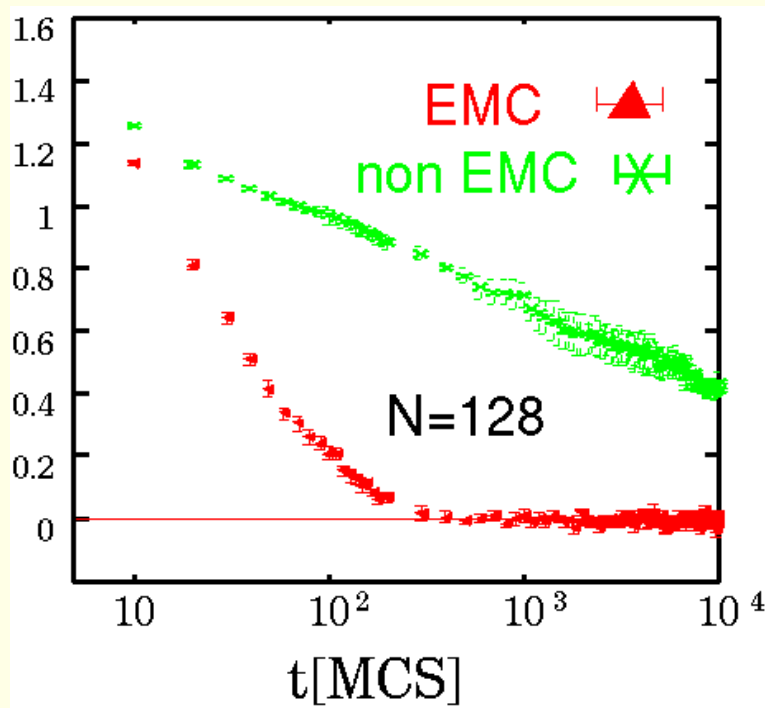
緩和重み q_0 の温度依存性



“うまくいく”ための必要条件(5)

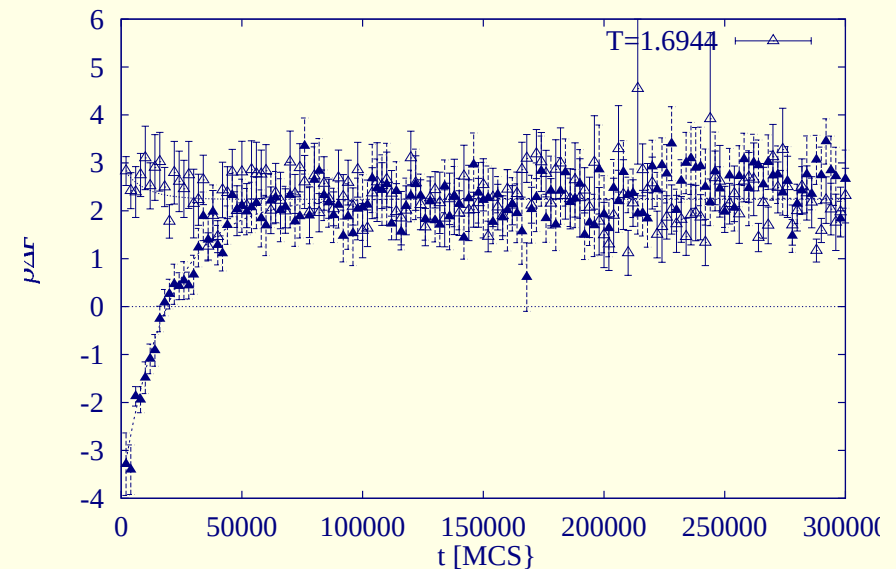
条件 4 物理量が収束している。...どんな数値計算でもやるべきこと。

平衡状態でなりたつ別の評価の差が無くなる。



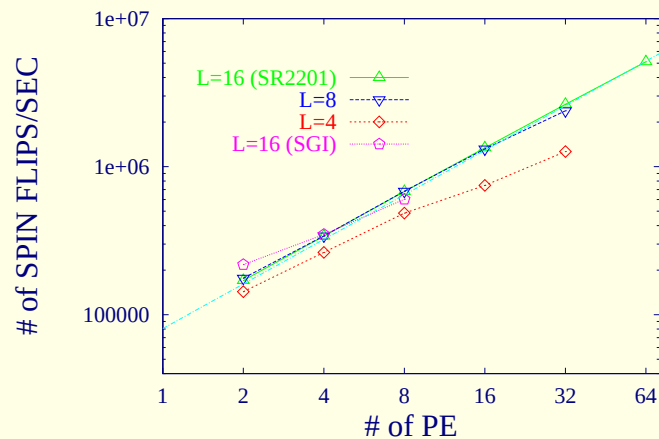
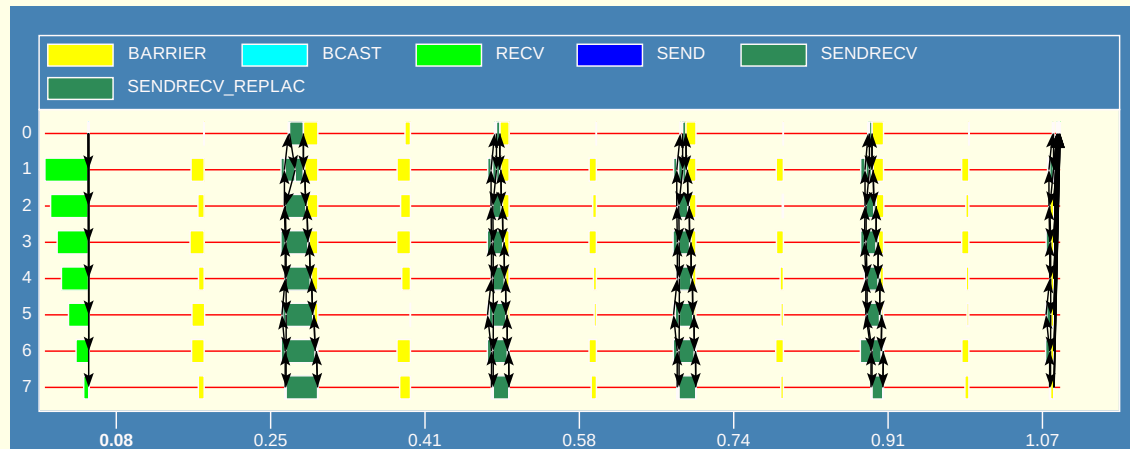
上下から抑えられるとより尤もらしいか。

極端に異なる初期条件から始めて、収束具合を確認する。



並列化について

- 各計算機(PE)にそれぞれの温度レプリカを割り当てれば、通信は少ない。



- 一秒間に更新したスピン数 vs PE 数
- 計算時間は PE 数に比例!
- Pande のタンパク折り畳み Grid 計算

交換モンテカルロ法の応用例の一部

- **Polymer**
 - A. Irbäck and E. Sandelin, J. Chem. Phys. 110 (1999) 12256.
- **Protein folding simulation** :
 - A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto, Biopolymer 60 (2001) 96.
- **Glass transition, Supercooled liquid**
 - R. Yamamoto and W. Kob, PRE 61 (2000) 5473.
- **Strongly correlated system**
 - P.Sengupta, A.W.Sandvik and D.K.Campbell, PRB **65** 155113, (2002).
- **Optimization Problems, SAT Problems**
 - K. Pinn and C. Wiecekowsky(1998)
 - K. Hukushima, Comp. Phys. Comm **147** 77, (2002)
- **Spin Glasses, Random spin systems**
 - K. Hukushima,many other groups....

Applications of Exchange MC method: 自分の仕事

- サイトランダム模型・完全フラストレート模型
 - K. Hukushima, Y. Nonomura, Y. Ozeki and H. Takayama, JPSJ(1997) 12256.
 - L. W. Bernardi, K. Hukushima, and H. Takayama, J.Phys.A(1999) 12256.
- 交換法のダイナミクス
 - SK 模型での交換法の緩和の解析: Hukushima-Takayama-Yoshino, JPSJ(1998)
- ドメイン壁自由エネルギーの計算方法とその応用
 - 方法の提案と4次元スピングラスの臨界現象: K. Hukushima, PRE(1999)
 - 3次元ランダムイジング模型のランダム固定点: K. Hukushima, JPSJ(2000)
- 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型のカイラルグラス転移とその性質
 - K. Hukushima and H. Kawamura, PRE (2000)... PRB(2005)
 - and more...
- Optimization Problems....
 - N クイーン問題の解の個数: K. Hukushima, Comp.Phys.Comm (2002)

マルチカノニカル ... こっちの方が有名

- 要点

- ギブス分布 $\exp(-\beta E(X))$ の代わりに、状態密度 $g(E)$ に反比例するようにマルコフ鎖を構成する。

$$P_{mul}(\mathbf{X}) \simeq 1/g(E(\mathbf{X}))$$

- エネルギーの周辺分布 $H(E) = \sum_{E(\mathbf{X})=E} g(E) P_{mul}(\mathbf{X}) = \text{一定}$ 。結果として、系はエネルギー軸上のランダムウォークが実現。
- 問題は、どのように $g(E)$ を事前に知るか。

- References

1. Berg-Neuhaus, Phys.Lett. B267 (1991) 249.
2. B.A.Berg, in *Monte Carlo Methods*, edited by Madras, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, page 1 (2000).
3. Bergの最近のレビュー：プログラムのコードも公開

マルチカノニカル法：手続き (1)

Step 0(初期分布の設定)： エネルギーの取り得る値は離散的 ($\{E_k, k = 1, \dots, M\}$) とし, (近似的) 状態密度の初期値として $g(E) = \text{定数}$, または予測値を代入.

Step 1 (シミュレーションとヒストグラム)： 近似的状態密度を用いて, 確率分布 $P_{mul}^{(t)}(\mathbf{X}) = 1/g^{(t)}(E(\mathbf{X}))$ を不変にするようにモンテカルロシミュレーションを行い, エネルギー E の頻度分布 $h^t(E_k)$ を更新する.

$$e.g. \quad W(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}') = \min \left(1, \frac{g(E(\mathbf{X}))}{g(E(\mathbf{X}'))} \right)$$

Step 2 (分布の更新)： 得られた頻度分布から, 新しい近似状態密度を評価する.

$$\frac{1}{g^{t+1}(E_k)} := \frac{1}{g^t(E_k)} \cdot \frac{1}{h^t(E_k) + \epsilon}, \quad \text{あるいは,} \quad \log g^{t+1}(E_k) := \log g^t(E_k) + \log(h^t(E_k) + \epsilon)$$

ϵ は $h^t(E_k) = 0$ の場合の発散を防ぐための適当な定数である.

マルチカノニカル法：手続き (2)

Step 3 (規格化): 状態密度の規格化を行う.

$$\log g^{t+1}(E_k) := \log g^{t+1}(E_k) - \frac{1}{M} \sum_k \log g^{t+1}(E_k). \quad (4)$$

この操作は必ずしも必要無いが、学習の収束性を観測するためのものである.

Step 4 (逐次操作): $t:=t+1$ として, Step 1 へ.

物理量の計算: 一度長い観測用シミュレーションを行うことにより, **任意の温度**の物理量 $A(X)$ のカノニカル平均が再重率法により求まる.

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{\sum_t A(X(t)) \exp(-\beta E(X(t))) P^{-1}(X(t))}{\sum_t \exp(-\beta E(X(t))) P^{-1}(X(t))} \quad (5)$$

この式は, 観測した物理量を $P^{-1} \exp(-\beta E)$ で再重率しているとみることができ.

マルチカノニカル 分布... ???

- マイクロカノニカル分布は,

$$P_{\text{micro}}(X; E) = \frac{\delta(E(X) - E)}{g(E)}$$

で与えられる.

- マルチカノニカル法のポイントは, 適当なエネルギーの範囲 $E \in [E_{\min} : E_{\max}]$ のマイクロカノニカル分布を同じ重みで重ね合わせた混合分布

$$P_{\text{mul}}(X) \equiv \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE P_{\text{micro}}(X; E)$$

を不変分布とすることであるが, これは単純に $P_{\text{mul}}(X) \sim 1/g(E(X))$ となる.

本当は, 「マルチマイクロカノニカル法」と呼ばれるべきもの??

マルチカノニカル法の流儀

- 応用例は実に沢山ある．特に一次転移でも完全に問題ない．
- 流儀
 - Berg 流 (前処理非重要視派)
 - * ミソはエネルギー空間でランダムウォークして，緩和を進めるところ．
 - * ネック：状態密度の評価する手続きがちょっと大変
 - * マルチカノニカル分布は，適当でよい．状態密度はまじめに求めなくてもよい．
 - * 興味ある物理量は，再重率でもとめる．
 - その他流 (前処理重要派)
 - * Broad histogram, Flat histogram, Transition matrix MC ...
 - * Wang-Landau 法：
 1. 状態更新ごとに状態密度を変更： $g(E) := g(E)f, f > 1$
 2. update f factor: $f^{t+1} := \sqrt{f^t}$
 - * 状態密度を正確に求めることが最終目的

拡張アンサンブルに共通の考え方・特徴

- ダイナミクスとの分離: 分子動力学への拡張, クラスター法との合体
- 緩和の促進の観点から

ターゲットの長い緩和時間は, ソースの速い緩和を使って軽減できる?!

ターゲット		ソース
Low energy	マルチカノニカル法 ⇐ Energy ⇒	High energy
Low temperature	Mixing !! ⇐ temperature ⇒ 交換法	High temperature High entropy
⇒ 遅い緩和		⇒ 速い緩和

拡張アンサンブル法の拡張

- 温度やエネルギー以外の例

	マルチカノニカル法	Simulated tempering 交換モンテカルロ法
$Z = \text{Tr} \exp(-\beta E)$	Energy E	Temperature β
magnetic interaction $E' = -HM$	Magnetization M	Magnetic field H
Spin glass $E' = -\epsilon Q$	Berg-Janke(1998) $Q = \sum_i S_i^{(1)} S_i^{(2)}$ replica overlap	not yet ϵ replica coupling
合体系 $E = E^{(1)} + kE^{(2)}$ 自由粒子+相互作用	$E^{(2)}$	k

- 大事なところは、ランダムウォークの軸上にエントロピーの豊富なところが無いとダメ。秩序変数だけで拡張するのはこの意味で少し不安(失敗例もある)。
- 多次元版の拡張も可能。

ここまでのまとめ

- 拡張アンサンブルの例
 - 交換法
 - マルチカノニカル法
- 拡張アンサンブルのキモと拡張の可能性

この時間のお話

- 拡張アンサンブルらしい応用

1. 遅い緩和の問題の原因である**拘束条件をはずしてみる**

格子タンパク模型での応用 (伊庭さん達の仕事)

- 困難さ (格子タンパクの時は排除体積効果) をほどこように、拡張アンサンブルの軸を選ぶ.
- 物理的でない状態へ移行しても、(全体として効率が上がるのならば) 気にしない.

2. わざわざ**緩和の遅い問題にしてから解く**

ドメイン壁自由エネルギー差の計算

- 遅い緩和の問題を解決できる方法として、「拡張アンサンブル法」の一群の方法があるのだから、そこに問題を変換すればよい.

3. **数を勘定する**ことを考えてみる

N クイーン問題の解の個数と...

- 新しい道具が見つかったときに、それが適応できる問題があるかもしれない.

格子タンパク模型

- 最も単純なタンパク質のモデル—格子タンパク HP 模型
 - タンパク質の相互作用のうち、疎水性(H)と親水性(P)のみを考慮する塩基列.
 - 各塩基は格子上にしか定義されない.
 - 塩基配列は、HとPの文字列で表される. ex. HPHHPHPPPHP...
 - 塩基間の相互作用は、以下の二種類のみ.

$$U(H, H) = -1, \quad U(H, P) = U(P, P) = 0$$

- i 番目の塩基の種類: $S_i = (H, P)$, 位置 r_i
- 格子タンパクの形 $r = \{r_i\}$ のエネルギーは,

$$E(r) = \sum_{i < j-1} U(S_i, S_j) \Delta(r_i - r_j)$$

で与えられる.

- 問い: 最低エネルギー状態はどんな形か?

格子タンパク模型の問題点：排除体積効果

- 競合：HP 相互作用と塩基配列の間
- 障壁：異なるタンパク質の形の間には，**排除体積効果**のために経路が細い。
⇒ この状況は高温でも解消されない。
- 原因は排除体積効果だとすれば，それは外せばよい！ 各格子点上に存在する塩基の個数を n_i とすれば，排除体積条件からのずれは，

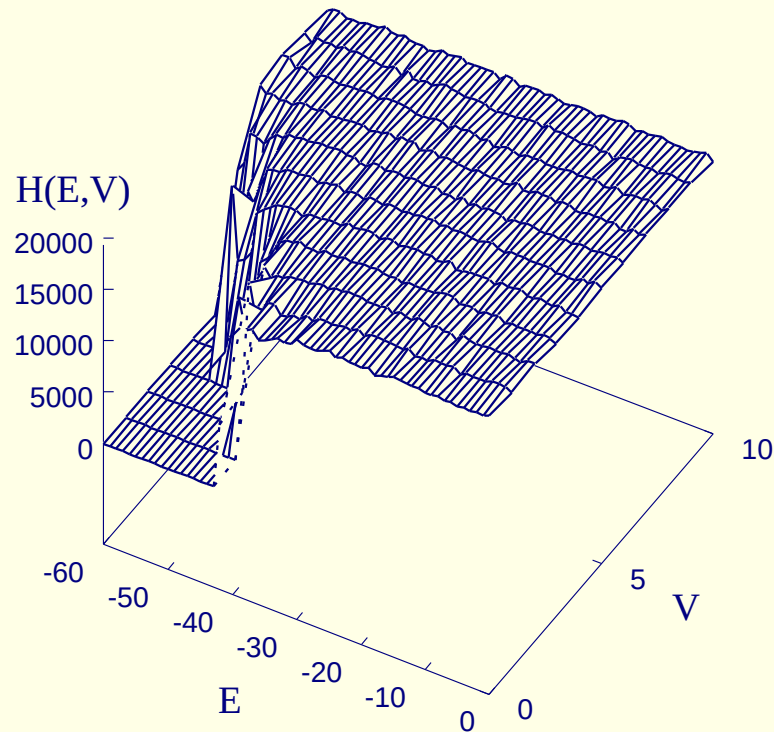
$$V = \sum_i (n_i - 1)^2$$

と表せる． $V = 0$ は排除体積条件を満たしていて， $V > 0$ では破っている．

- この変数 V とエネルギーの 2 次元変数空間マルチカノニカルを構成しよう (Chickenji-Kikuchi-Iba, PRL **83**(1999)1886).

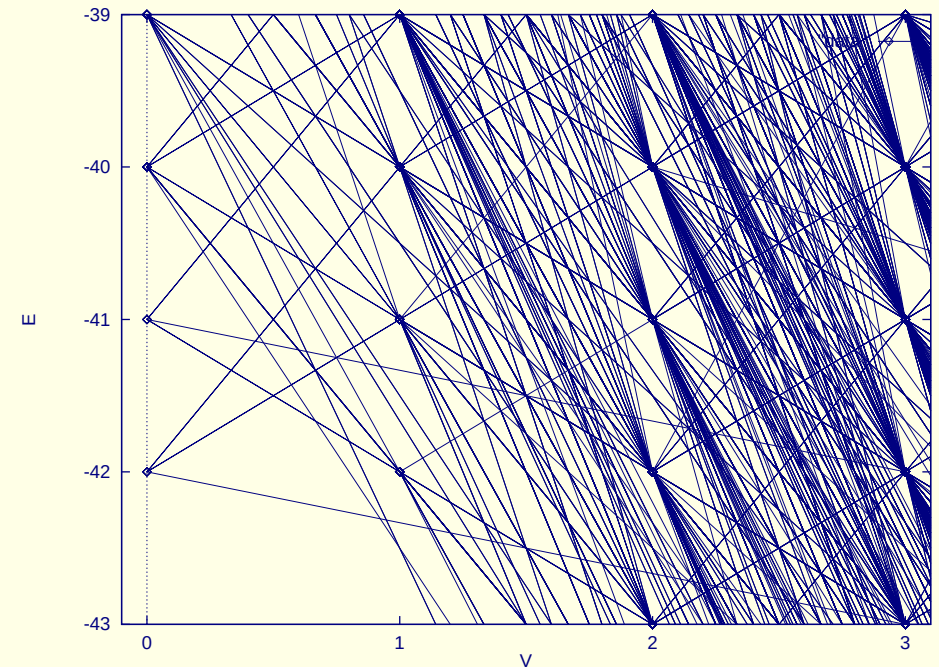
格子タンパク模型の排除体積効果をゆるめる

$V - E$ 空間でのヒストグラムをフラットにする。



物理的には $V = 0$ だけが意味がある空間だが、無駄空間 $V > 0$ も緩和の意味では無駄ではない。 $\Rightarrow$

低エネルギー状態と高エネルギー状態の経路が、 $V > 0$ を介して実現している！



世界記録!

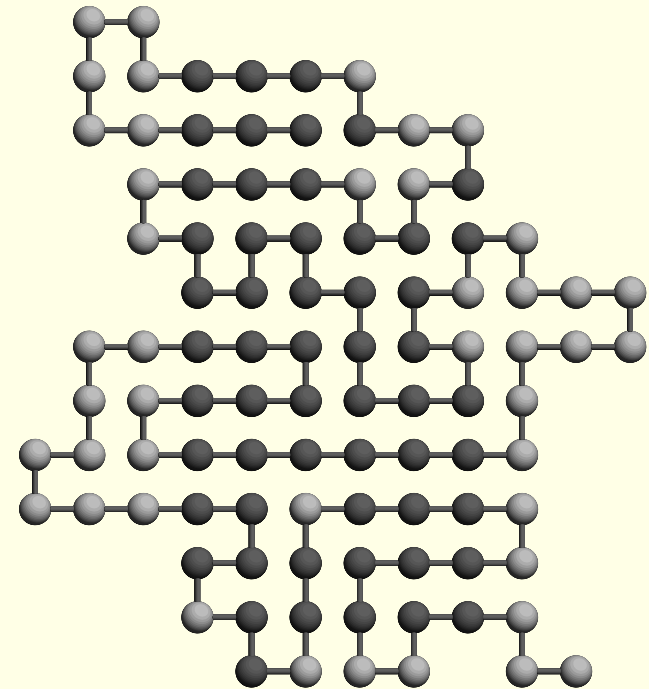
- 黒丸はH, 白丸はP.
- 図は最低エネルギー $E = -50$ をもつ形.
- 他の方法では見付かっている配位.
- 無駄が報われている.

拡張アンサンブルは一般的な方法論



問題に特化した拡張アンサンブルの構成

本質的な困難点を除去する方向

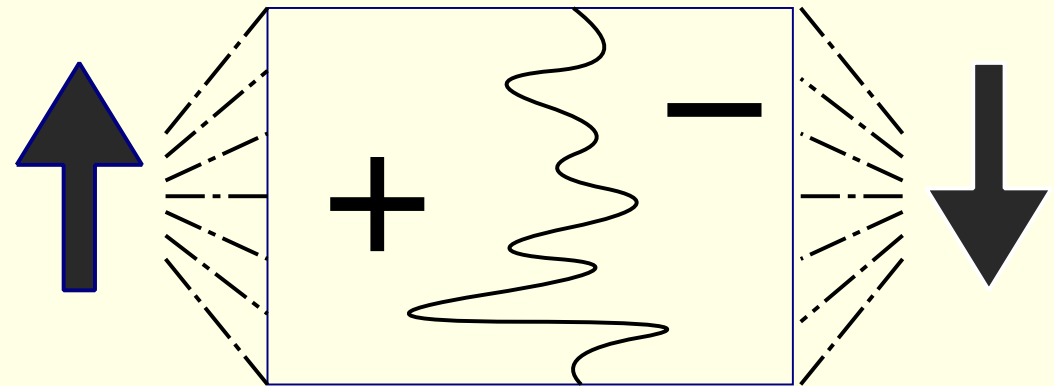


スピン系の相転移

- 問い：スピン系の長距離秩序の有無を知りたい：
 - (よい)秩序変数を定義して，その有無を調べる
 - 剛性を獲得しているか否か．捻ったときに硬いか？

domain-wall free energy

$$\Delta F \equiv F_{\text{APBC}} - F_{\text{PBC}}$$



- 期待される系のサイズ依存性

$$\Delta F(T, L) \sim L^{\theta},$$

θ は剛性指数 (Stiffness exponent)

* $\theta > 0$ ordered phase

* $\theta < 0$ disordered phase

ドメイン壁自由エネルギー差を求めるには...

レベル1： 通常の方法 (熱力学積分)

- それぞれ2つの境界条件に対して、自由エネルギー $F_{\text{PBC}}, F_{\text{APBC}}$ を求める.
- 自由エネルギーの微分量を求めて、積分する.

$$\beta F(\beta) = \int_0^\beta \frac{d}{d\beta'} (\beta' F(\beta')) d\beta' = \int_0^\beta \langle E(\beta') \rangle d\beta'$$

- ○：自由エネルギーは求められなくても、エネルギーならばできる
- △：積分するところは気持ち悪い. (積分メッシュ, 精度...)

レベル2： 拡張アンサンブル経由で求める

- マルチカノニカルで状態密度を評価して、自由エネルギーを得る.
- 交換法でエネルギーのエネルギーヒストグラムを求めて、ヒストグラム法で計算

ドメイン壁自由エネルギー差を求めるには... (2)

レベル3： 直接観測量に落とす

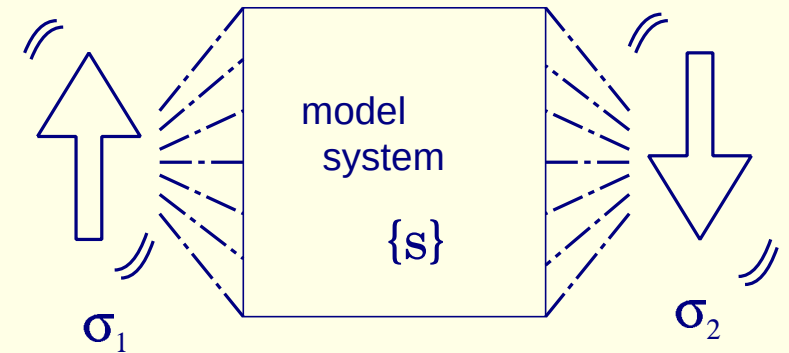
- ドメイン壁自由エネルギー**差**自体を物理量に書き換えてみる

total Hamiltonian

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{tot}}(\{S\}, \sigma_1, \sigma_2) &= \mathcal{H}_{\text{model}}(\{S\}) \\ &+ \mathcal{H}_{\text{boundary}}(\{S\}, \sigma)\end{aligned}$$

Boundary Conditions

- Periodic BC $\rightarrow \sigma_1 = \sigma_2$
- Anti-Periodic BC $\rightarrow \sigma_1 = -\sigma_2$



ドメイン壁自由エネルギー差を求めるには... (3)

レベル3： 直接観測に落とす(つづき)

Probability distribution for BCs $\{\sigma\}$

$$P(\sigma_1 = \pm\sigma_2; T) = \frac{\text{Tr}_{\{S\}} \delta_{\sigma_1 = \pm\sigma_2} \exp(-\beta \mathcal{H}_{\text{tot}})}{Z_{\text{tot}}(T)} = \frac{Z_{(\text{A})\text{PBC}}}{Z_{\text{tot}}}$$

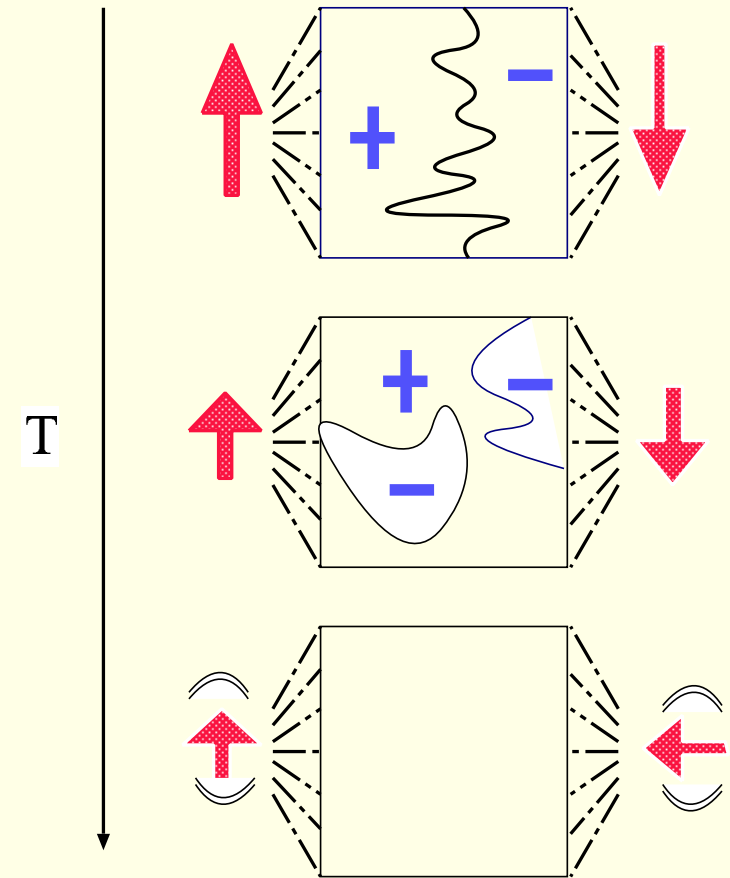
Domain-Wall Free-Energy: $\Delta F \equiv F_{\text{APBC}} - F_{\text{PBC}}$

$$\exp(\beta \Delta F) = \frac{Z(\text{PBC})}{Z(\text{APBC})} = \frac{P(\sigma_1 = \sigma_2)}{P(\sigma_1 = -\sigma_2)}$$

- ○：温度を決めたときに、それぞれ観測出来る量(境界条件の出現頻度比)になった.
- △：結構難しそうな量ではある. どうするか? →

Boundary Flip Monte Carlo 法

- 境界スピンは沢山のスピン $O(L^{d-1})$ と相互作用しているためになかなかひっくりかえりそうにない.
- 低温ではそれぞれの“境界条件”が深い準安定状態になっている.
 - これは典型的な**遅い緩和の問題**, しかし...
 - * Cluster MC method (Hasenbusch's work)
 - * **Exchange MC method (present work)**



測るのが難しそうな量



遅い緩和の問題へ変換

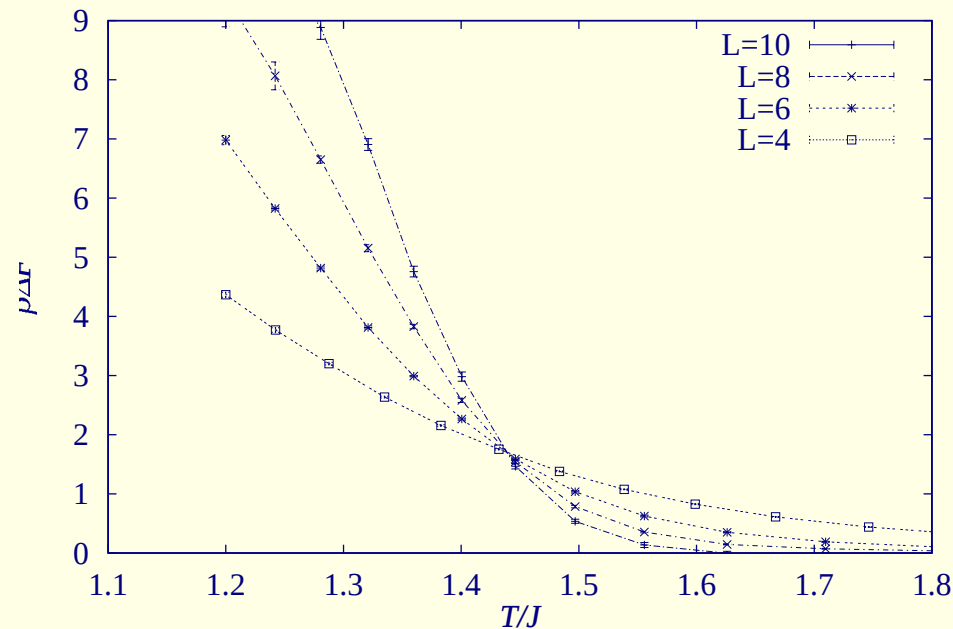


拡張アンサンブル

ドメイン壁自由エネルギーの結果:連続自由度版

- モデル：三次元強磁性ハイゼンベルグスピン模型 on 立方格子

$$\mathcal{H}_{\text{model}}(\mathbf{S}_i) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad \text{with} \quad \mathbf{S}_i = (S_x, S_y, S_z), \quad |\mathbf{S}_i| = 1$$



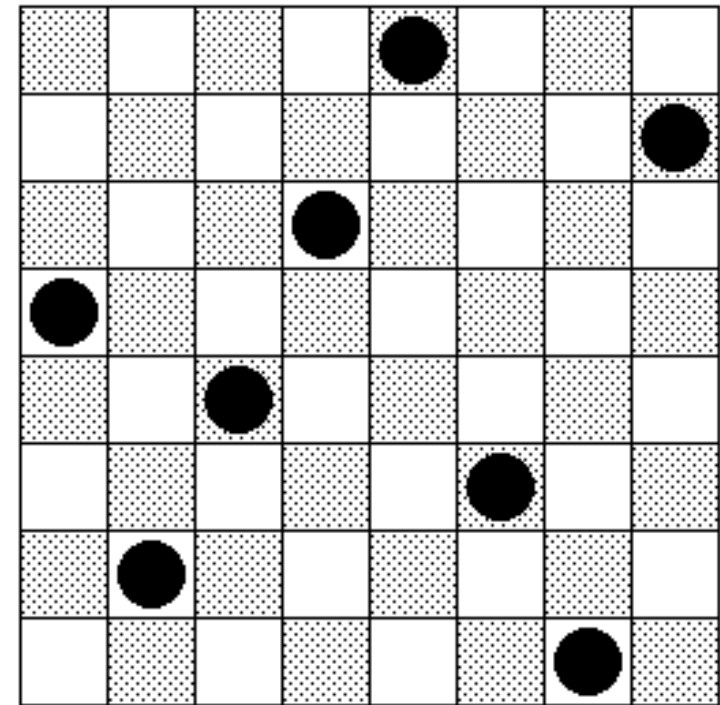
- 剛性を獲得する温度として，転移温度を評価： $T_c \sim 1.45J$

例題：物理屋が調べた N クイーン 問題

N クイーン問題とは、 $N \times N$ のチェスボード上に N 個のクイーンをお互いに攻撃しないように配置せよ。

典型的な制約充足問題:

- それぞれの行には1つのクイーン
- それぞれの列にも1つのクイーン
- それぞれの斜めには高々1つのクイーン
- N 個のクイーンを配置



8クイーン問題の解の例。全部で92個。

N クイーン問題のモデル化: コスト関数(エネルギー)の定義

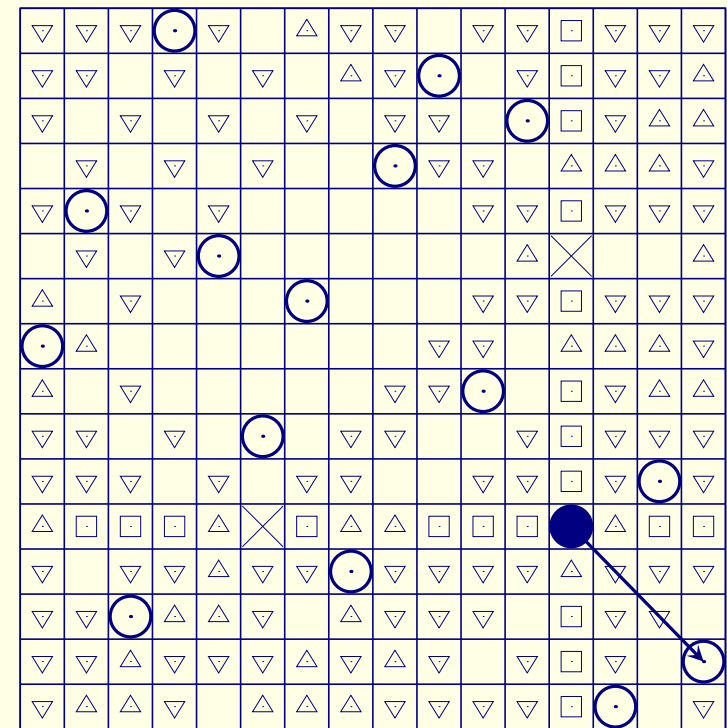
それぞれのクイーン配置に対して、エネルギー関数を以下のように定義する。

$S_i = \pm 1$ は各格子のクイーンの占有状態を表す。

$$\begin{aligned}
 E(\{S_i\}) = & \sum_{\text{columns } c} \left(\sum_{i \in c} S_i - 1 \right)^2 \\
 & + \sum_{\text{rows } r} \left(\sum_{i \in r} S_i - 1 \right)^2 \\
 & + \sum_{\text{diagonals } d} \left(\sum_{i \in d} S_i - 1 \right)^2 \\
 & \times \left(1 - \delta_{\sum_{i \in d} S_i, 0} \right),
 \end{aligned}$$

$E = 0$ がクイーン問題の解

A nearly optimal solution of 16 queens problem with $E = 1$.



この配位から、解には一度エネルギーを上げる必要がある

統計力学的に解の個数を勘定する

- 本当の解を一つ一つ数え上げるのは実質ムリ (指数関数以上ある).
 - 最適解の探索 $\iff$ 最適化問題 (SA) (絶対零度 $T = 0$)
 - 解の個数 $\iff$ サンプリング (MC²) (有限温度 $T \neq 0$)
- 初級的方法：微分してから，積分する方法 (熱力学積分)
 - モンテカルロ法で規格化定数を計算するのは難しいが，期待値は簡単.

$$\frac{d}{d\beta} \log(Z(\beta)) = -\frac{\sum E e^{-\beta E}}{Z} = \langle E \rangle_{\beta} \implies \log Z(\beta) = -\int_0^{\beta} d\beta' \langle E \rangle_{\beta'}$$

- $E_{\min} = 0$ ならば， $\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z(\beta)$ が解の個数.
 - $\langle E \rangle_{\beta}$ を β の関数として必要. 積分のメッシュは?
 - 交換 MC 法を使えば多くの温度の情報が手に入る.
- 原理的には，エネルギーの頻度分布からもっとわかるはず.

交換法の結果をヒストグラム法で解析

- ヒストグラム法 (Ferrenberg-Swendsen):

- 自由エネルギー $F(T)$: $e^{-\beta F(T)} = Z(T) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E(\{\sigma\})}$
- エネルギー状態密度 $g(E)$: エネルギーが E であるミクロな状態 $\{\sigma\}$ の個数

$$e^{-\beta F(T)} = \sum_E g(E) e^{-\beta E} \quad \text{求めたいのは } g(E_{\min})$$

- 温度 T におけるエネルギー頻度分布 $H_T(E)$:

$$H_T(E) = \langle \delta(E - E(\{\sigma\})) \rangle = \frac{g(E) e^{-\beta E}}{e^{-\beta F(T)}} \iff g(E) = \frac{H_T(E)}{e^{\beta F(T) - \beta E}}$$

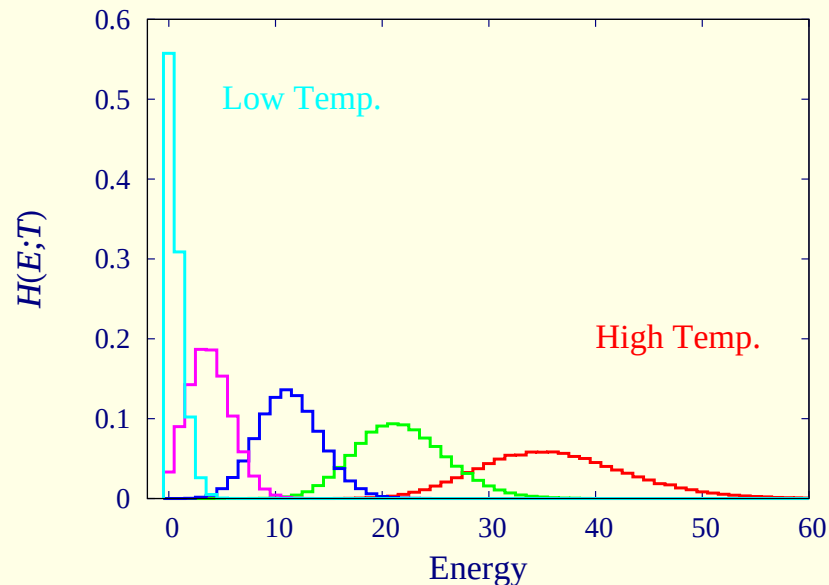
- 観測量 $H_T(E)$ を入力として, $F(T)$ と $g(E)$ の反復方程式
- マルチヒストグラム法: $F(T_m)$ と $g(E)$

$$g(E) = \frac{\sum_{m=1}^M H_m(E)}{\sum_{m=1}^M e^{\beta F(T_m) - \beta_m E}}, \iff e^{-\beta F(T_m)} = \sum_E g(E) e^{-\beta_m E},$$

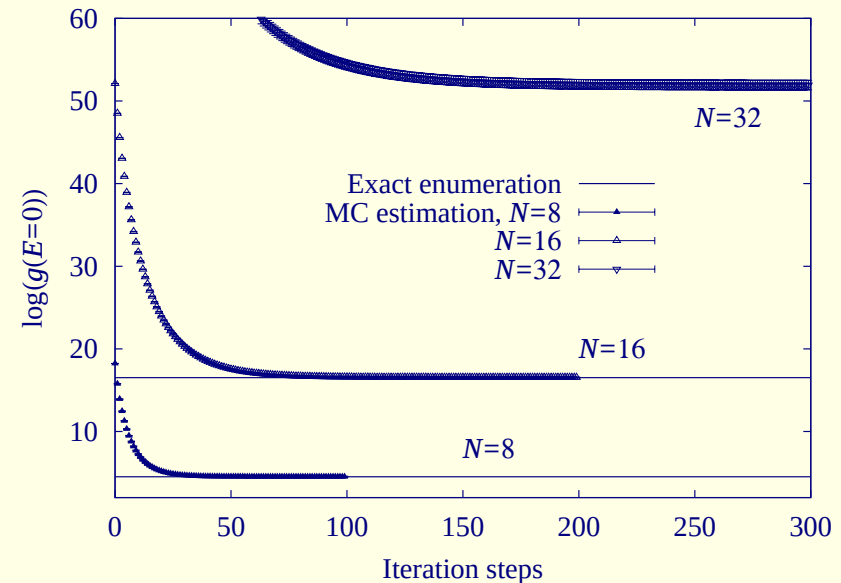
エネルギーヒストグラムから状態密度

INPUT:

複数の温度でのエネルギー分布関数
 $H_T(E)$ at β_m .



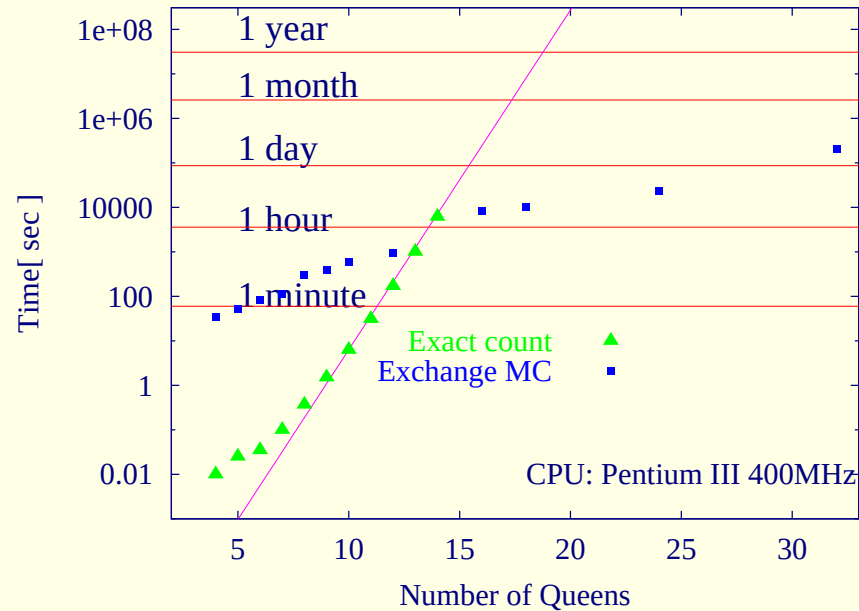
OUTPUT 状態密度 $g(E)$



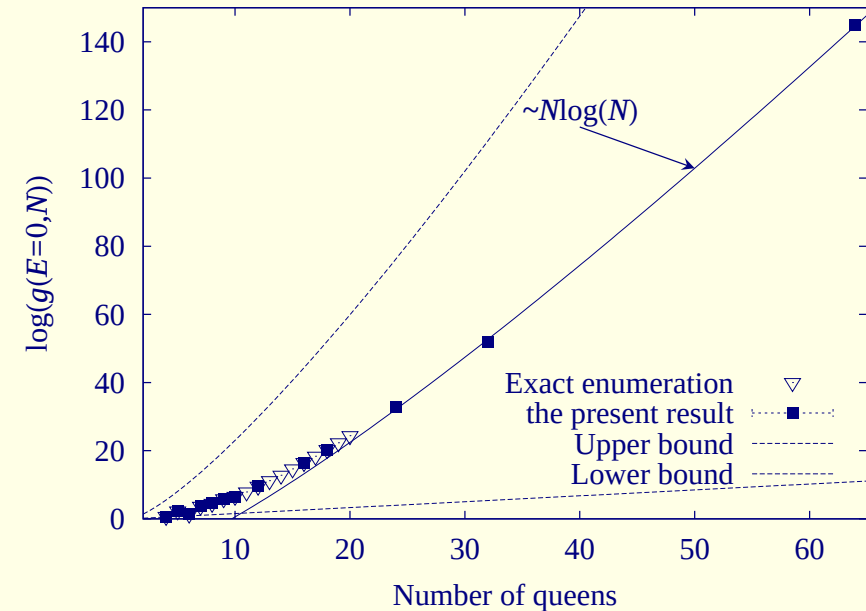
The ground-state entropy $\log g(E = 0)$ for $N = 8, 16$ and 32 , as a function of iteration sweeps for solving the multiple-histogram equations.

“最適解” と “解の個数”

CPU time



A Number of Solutions



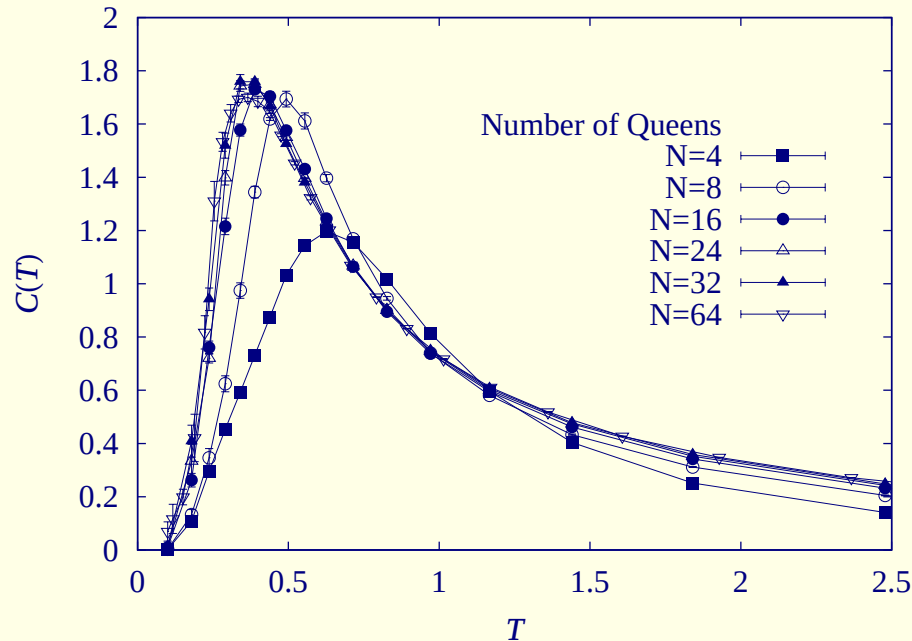
厳密数え上げ $N = 16$: 14772512, $\iff$ 我々の評価 : $1.46(5) \times 10^7$.

N の大きな極限の漸近形は、

$$\log g(E = 0, N) = 0.593(8)N \log N + 13.1(9) \implies \# \sim N^{\alpha N}.$$

N クイーン問題の熱力学的性質??

比熱の温度依存性



- 比熱の発散するような相転移は見られない。
- エネルギー(罰金項)の決め方に依存するはず。
 - 例えば, $|\text{罰金}|$ か $(\text{罰金})^2$ か?
- 相転移するのが良いのか?悪いのか?
 - 最適化を見付けやすいエネルギーの形
 - 解の個数が計算しやすいエネルギーの形

統計力学的に数え上げる

- 拡張アンサンブル法は，“解”の個数を勘定する道具として使えそうである。
 - (有限温度のサンプリングを行っていることはキモ)
 - “解”からのずれをエネルギーとして導入して，状態密度，基底状態エントロピーを評価する
 - * 魔方陣の解: Pinn ... (1998)
 - * Number partition問題: ...(1999) マルチカノニカル法
 - * N クイーン問題の解: Hukushima (2002)
 - * ラテン方阵: Iba(2005),
 - * K-SAT問題: Hukushima(2005)
 - “解”とは，ある条件を満たすことと思えば...
 - * カオスの微分方程式の周期解(Iba):
 - ・ 条件: 周期 T で軌道が閉じる
 - * 周期解の個数からKSエントロピー: Hayashi-Sasa(2005)
 - * 状態方程式の解: $m_i = \tanh(\beta \sum_j J_{ij} m_j)$
- 数理科学の5月号