# 28pWL-1　　拡張アンサンブル法とその後

**東大院総合文化　福島 孝治**

**Extended Ensemble Monte Carlo Methods and More**

**University of Tokyo　　Koji Hukushima**

1953 年にメトロポリスらによって提唱されたモンテカルロ法は今年ちょうど生誕 50 周年を迎える。アルゴリズムについての 20 世紀十大発明のひとつと言われたこの方法は、物理学をはじめ様々な分野に応用され、方法自身もまた進化を続けてきた。ここ数年では、拡張アンサンブルの考え方を用いた方法が提唱され、これまで応用が難しかったスピングラスやタンパク質などにも積極的に応用されるようになってきた。こうした最近の発展を紹介し、今後の展望について議論したい。

## 遅い緩和の問題

動的モンテカルロ法，または統計学者にはマルコフ連鎖モンテカルロ法と呼ばれる方法は，疑似乱数を用いて多変数確率分布関数を再現する計算手法と言える．この方法の基本は，多変数空間の点 $X$ に対して，我々の求めたい分布関数 $P(X)$ を不変にするマルコフ連鎖を構成することであり，その一般性から、統計物理の問題だけではなく，確率分布関数を対象とする様々な問題に応用されてきた．しかしながら，一方で， マルコフ連鎖を構成する遷移確率が実質的に極めて小さくなり，広大な多変数空間の中のある局所的な部分空間に留まり続けてしまうことがたびたび起こる．この現象は「遅い緩和の問題」と呼ばれ，**相転移に伴う臨界緩和**や**複雑な自由エネルギー構造を持つ系**等の物理的に興味のある問題に現れ，モンテカルロ法の応用範囲を狭めている．

## 拡張アンサンブル法[1]

標題の「拡張アンサンブル法」は，主に後者の問題を対象に，1990 年代に次々と考案された，マルチカノニカル法 [2]，シミュレーテッド・テンパリング [3]，交換法 [4] 等の一連の方法群である．その特徴は，元の調べたい確率分布関数を変形したり，あるパラメータについて拡張した分布関数をモンテカルロ法で再現する．拡張アンサンブル法についてはその提案された初期の段階に，日本物理学会で「モンテカルロ法の最近の発展」としてシンポジウムが組まれた [5].

それらの方法は，個々の異なる研究分野で考案されたが，それらに共通する性質をみることで，遅い緩和問題を解消する一つの指導原理を見出すことができる．すなわち，速く緩和する部分 (**ソース**) となかなか緩和しないが興味ある部分 (**ターゲット**) を含む拡張されたアンサンブルを構成し，2 つを結びつけることでターゲットの緩和をソースで促進するのである．例えば，マルチカノニカル法では高エネルギー状態 (ソース) と低エネルギー (ターゲット) をエネルギーで結びつけ，交換法では高温と低温を温度で繋いでいる．ターゲットのより近くにソースを，あるいは効率の良い経路を見付けることが出来ればよい．このように考えると，また個々の問題に対して，拡張アンサンブル法の拡張を構成することができる．この考え方を明示的に実践した例は文献 [6] に見ることができる．また，近年拡張アンサンブル法とは異なる文脈からブロード (フラット) ヒストグラムモンテカルロ法の

系統が発展してきたが，これもまたある種の拡張アンサンブルと思える．

## より深部へ迫るシミュレーションへ–そこが知りたい–

拡張アンサンブル法は個々の方法の背後にある一般的な概念を見出すことができたよい例であると考えているが，やはり研究者にとって，より興味のあるのは個別のテーマでの応用であり，そこから得られる新しい知見であろう．確かに**その後**は，これまでシミュレーションが困難であったスピングラス系，タンパク質，ガラス，最適化問題への応用が主要であった．その中でも勢力的に応用されたのは，タンパク質のシミュレーションであり [7], 本会でも他のシンポジウムでの講演が予定されている．また，スピングラス系では精度と信頼性が向上し、平衡状態に関する計算で拡張アンサンブルを用いない研究はない程になってきた．これらの応用に特徴的なのは，自由エネルギーの**底**がどうなっているかの探索の挑戦とも思える．ガラス系への応用は，現実のガラスでは決して平衡状態は実現しないと考えながらも，低 (励起) エネルギー状態を理解したいとの考えからではないかと推測される．それは拡張アンサンブル法の出現ならではの発想であろう．

## シミュレーションから解析へ–そこはどこか–

拡張アンサンブルの発展により，遅い緩和問題からある程度開放され，様々な準安定状態，つまり自由エネルギー極小状態 (**底**) を巡ることができるようになると，次の新しい問題に直面する．それは，複雑な準安定状態をいかに記述するかという問題である．複雑な自由エネルギーを表すデコボコした曲線をたびたび目にするが，その横軸の意味がいつも明確ではない．そのような一次元空間でのランドスケープ図に決定的に欠けているのはその多次元性である．今後は，複雑な自由エネルギー構造の**探索**から**記述**へ向けた研究が重要になってくるであろう．ここでは，統計学での多変量解析をシミュレーションデータの解析法として用いる試みを紹介する．

ここでの議論の多くは，伊庭 幸人氏 (統数研) との共同研究を通じて学んだことであり、感謝します．また，研究会等での議論・討論から有益な助言を頂いた多くの方々に感謝いたします．

[1] 「拡張アンサンブル法」の総合的なレビューとして，Y. Iba: Int. J. Mod. Phys. C**12** (2001) 623 (cond-mat/0012323).

[2] B. A. Berg and T. Neuhaus: Phys. Lett. B**267** (1991) 249. , マルチカノニカル法のレビューとして，in “Monte Carlo Methods” edited by N. Madras, American Mathematical Scociety, Providence, Rhode Island, (2000) page 1. (cond-mat/9909236).

[3] E. Marinari and G. Parisi, Europhys. Lett. **19** (1992) 451.; A. P. Lyubartsev, et. al.: J. Chem. Phys., **96** (1992) 1776.

[4] K. Hukushima and K. Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1604. ; C. J. Geyer: in *Computing Science and Statistics: Proc. of 23rd symposium on the interface.* ed. by E. M. Keramides (1991) p156. ; 伊庭 幸人: 物性研究 **60** (1993) 677.

[5] 統計力学・物性基礎論シンポジウム「モンテカルロ法の最近の進展」 1995 年 3 月．またそれに続く形で，1999 年と 2000 年に京大基研研究会「モンテカルロ法の新展開」が開かれた．その報告集は，物性研究 **74** (2000) 113.，物性研究 **76** (2001).

[6] G. Chikenji, M. Kikuchi and Y. Iba: Phys. Rev. Lett., **83** (1999) 1886.

[7] 例えば，杉田 有治，光武 亜代理，岡本 祐幸: 日本物理学会誌 **56** (2001) 591.