Neal–Jarzynski法のスピングラス系への応用
(Population Annealing法と名付けてみた)

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

福島 孝治

mailto:hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp

2003年3月28日

共同研究者：統計数理研究所 伊庭幸人氏

Statistical-Mechanical Approach to Probabilistic Information Processing

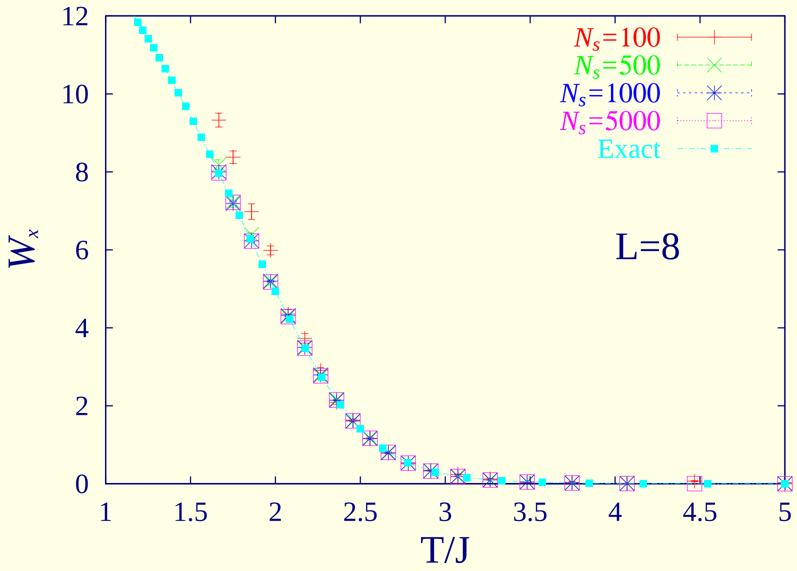
Jarzynski 等式からはじまる....

2000.5.18 高山研セミナーでの論文紹介

C. Jarzynski, Non-equilibrium Equality for Free-Energy Differences, PRL **78**, 2690 (1997), PRE **56**, 5018 (1997).

$$\overline{\exp(-\beta W)} = \int \left[\prod_n dz_n\right] \mathcal{P}(z_0, z_1, \cdots, z_N) \exp(-\beta W) = \exp\left(-\beta(F_1 - F_0)\right)$$

ドメイン壁自由エネルギーの計算



Jarzynski estimator (2D Ising model)

いまひとつうけなかった理由

- 自由エネルギーだけ計算できてうれしいか？
- 初期条件として平衡状態を用意する必要がある
- 数値的な安定性の不安：重み因子のゆらぎ

Population Annealing

STEP0: initial condition 高温でMヶの状態$x_0^k, (k = 1, 2, \cdots, M)$を用意する。重みは$W_k(0) = 1$。

STEP1: Annealing 状態を更新

$\{x_i^k\} \Longrightarrow \{x_{i+1}^k\}$:普通のモンテカルロステップ (Metroplis 等)

$\beta_i \Longrightarrow \beta_{i+1} = \beta_i + \Delta\beta$: 温度を下げる

STEP2: Neal–Jayzynski 重みの更新 $\{W_k(i)\} \Longrightarrow \{W_k(i+1)\}$

$$W_k^{(i)} = W_k(x_0^k, x_1^k, \cdots, x_i^k)$$

$$W_k^{(i+1)} = W_k^{(i)} \frac{P_{\beta_{i+1}}(x_{i+1}^k)}{P_{\beta_i}(x_{i+1}^k)} = W_k^{(i)} \exp(-\Delta\beta E(x_{i+1}^k))$$

STEP 1 へ

物理量の計算 $\langle A \rangle_{\beta_i} = \frac{\sum_{k=1}^M A(x_i^k) W_k(i)}{\sum_{k=1}^M W_k(i)}$

Population Annealing STEP 3 : resampling 復活の呪文

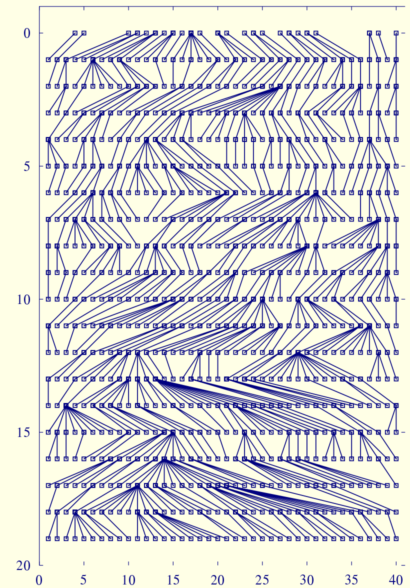
- NJ重みW_kに比例するように random walkers をサンプリングする
  - 重みW_kが大きいWalkerは分裂させる
  - 重みが小さいのは消滅

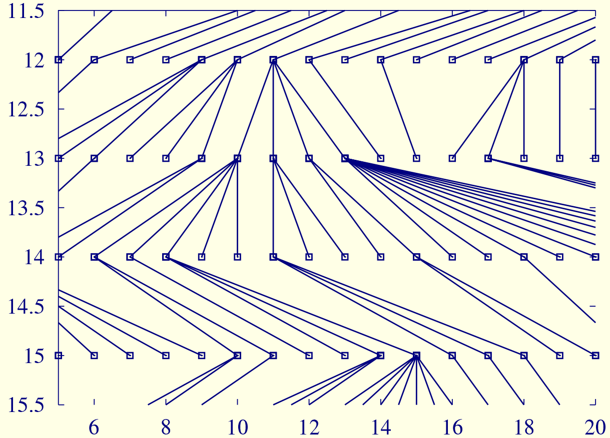
  (Reweighting, Prune/Enrichment, Reconfiguration, Resampling....)

- 一番簡単な方法としては、確率 $\omega_k = \frac{W_k}{\sum_k W_k}$ に従うように次の世代の random walker を生成する。重みは $W_k = 1$ にリセット。

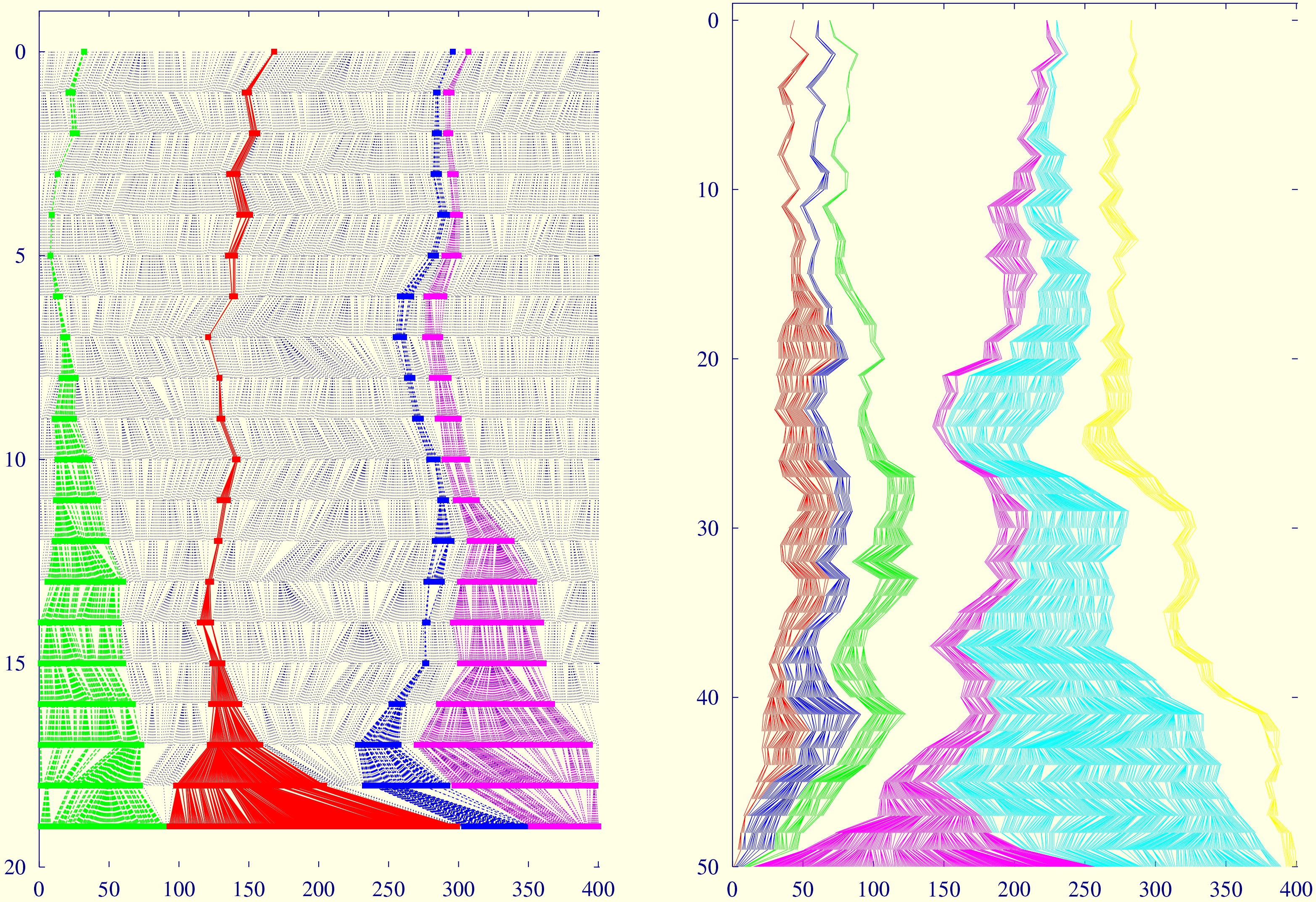
- random walker の個数は一定

random walker の家系図の例





STEP 3 : 家系図の例

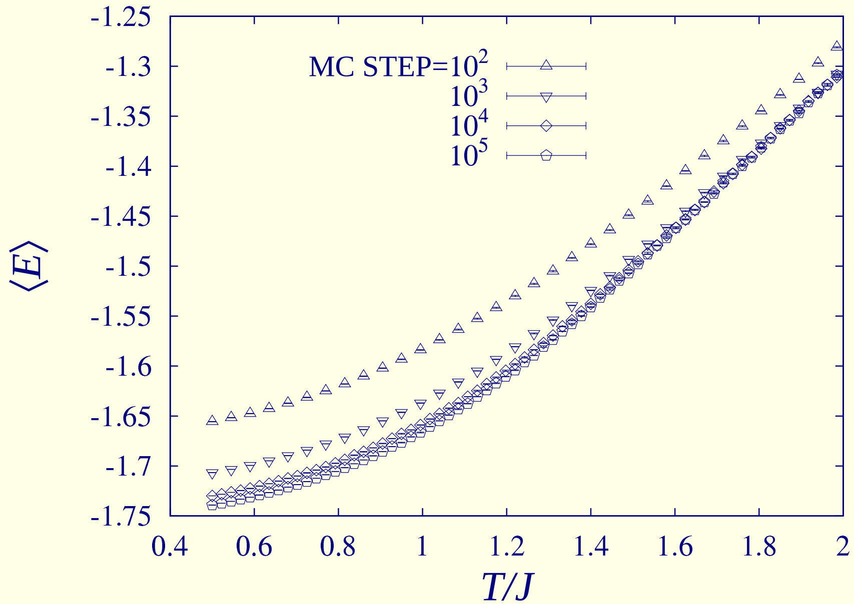

0
5
10
15
20
0
50
100
150
200
250
300
350
400
0
10
20
30
40
50
0
50
100
150
200
250
300
350
400

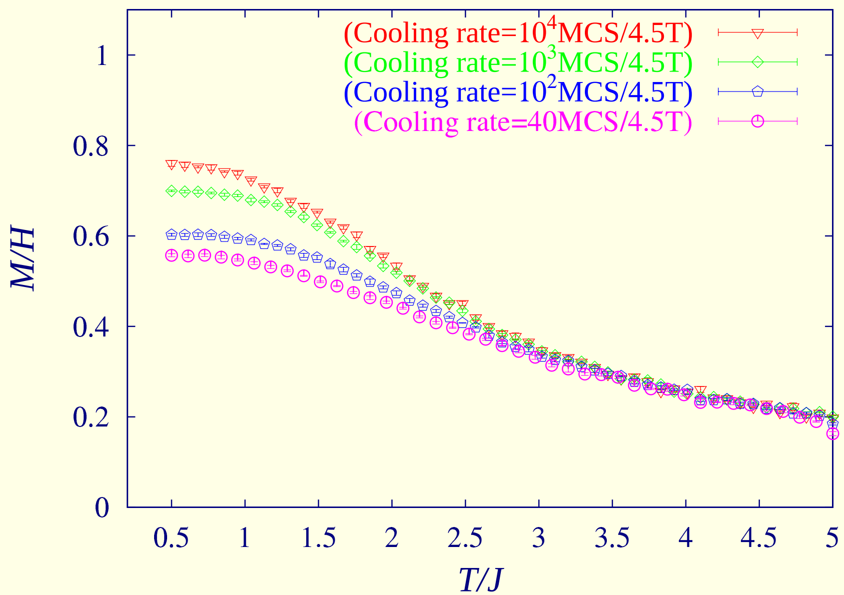
スピングラス系への応用について、気になるところ

- **POSITIVE** : 沢山の random walker での探索は本質的にいいかもしれない。
  - McMillan, MC quench method
  - Kawamura-Tanemura, application to XY Spin glass

- **NEGATIVE**：非常に遅い緩和現象を示す系でも大丈夫か?

Simulated Annealing の結果(NJ因子を考慮しない平均物理量)

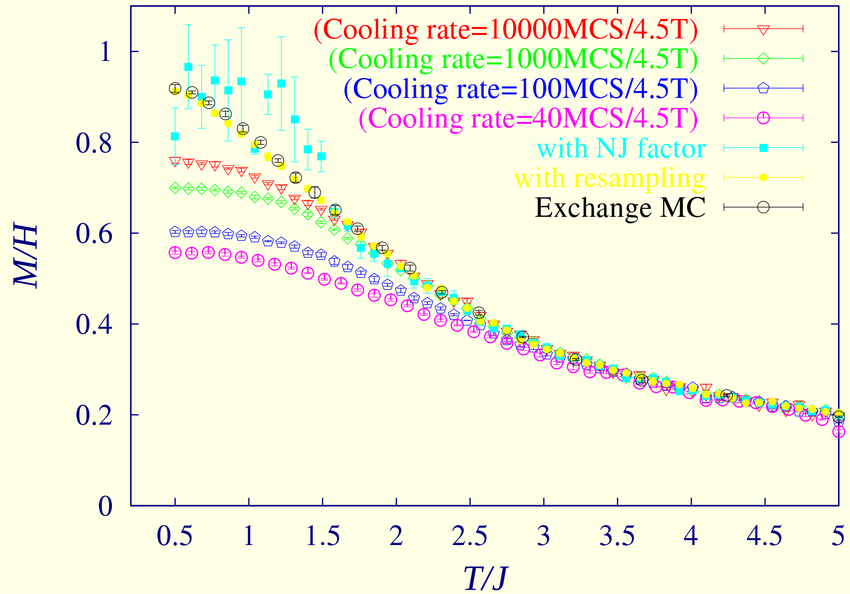




スピングラス系への応用:結果1

例題：３次元イジングスピングラス模型$(L = 8)$

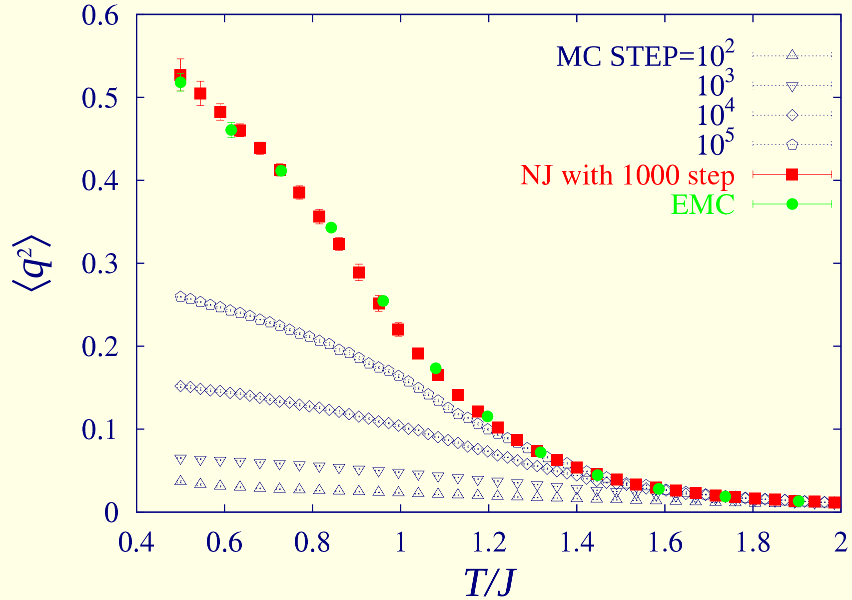
磁場中冷却磁化の温度依存性
(アニーリングとNJ)



予想通り Resamplingなしでは精度が得られないが、Resamplingありは OK。

Resamplingは重要

重なり関数の温度依存性



PA：粒子数 $M = 1000$

$T/J = 5.0$〜0.5 までを $1,000$ ステップで冷却

交換法と一致

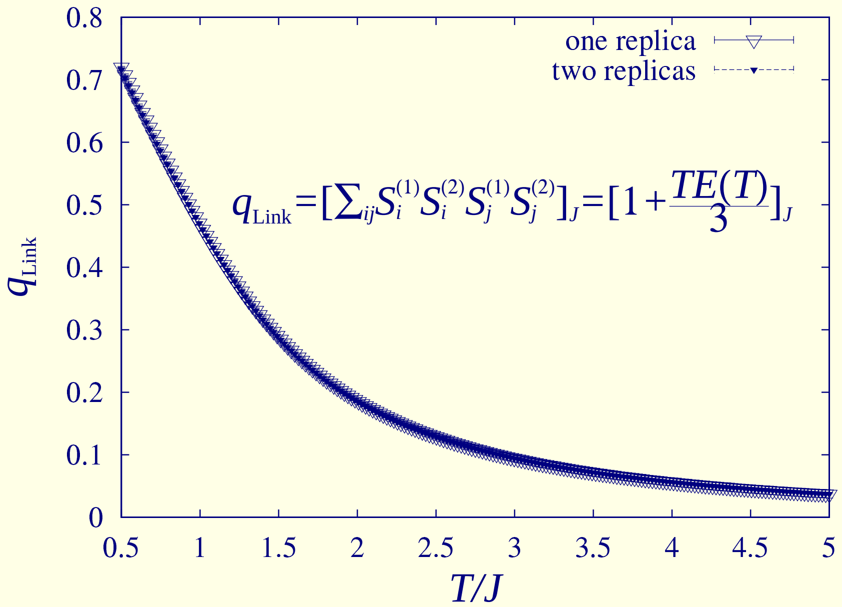
スピングラス系への応用:結果2

Link-overlap function

(平衡のチェック)

$$q_{\rm link} = \frac{1}{Nz/2}\sum_{\langle ij\rangle}\left[S_i^{(1)}S_j^{(1)}S_i^{(2)}S_j^{(2)}\right]_J$$

$$q'_{\rm link} = 1 + \frac{T}{Nz/2}\sum_{\langle ij\rangle}\left[J_{ij}S_iS_j\right]_J$$

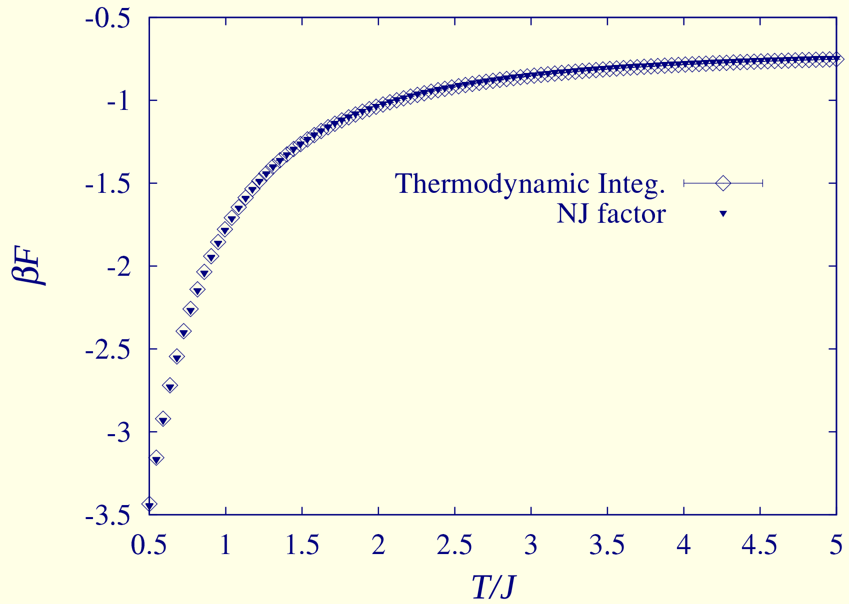


$P(J_{ij})$ が連続分布の場合は、ランダム平均を採った2つの量は一致する。

自由エネルギーも

NJ重みそのものは自由エネルギー

$$\frac{Z(\beta_i)}{Z(\beta_0)} = \langle\omega_k(x_0,x_1,\cdots,x_{i-1})\rangle_{path}$$

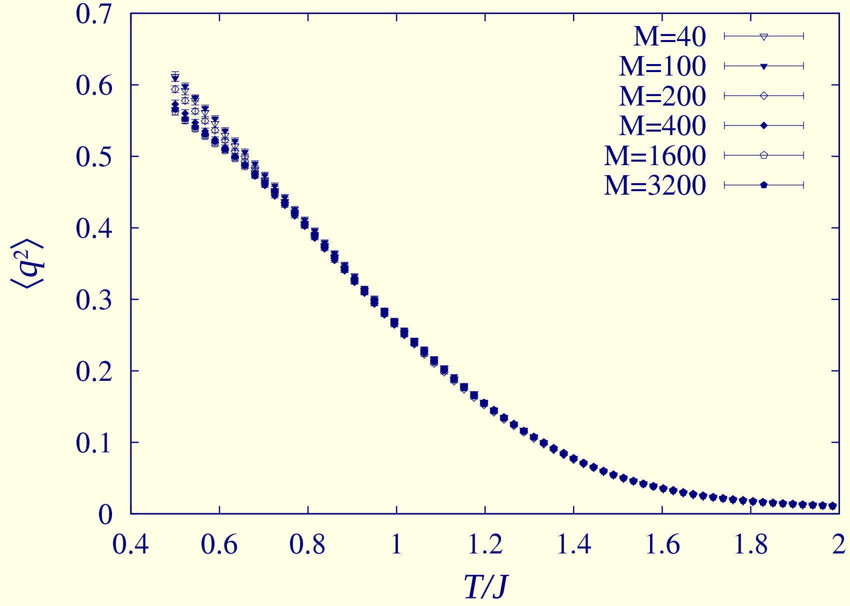


熱力学積分でもできてる。。。

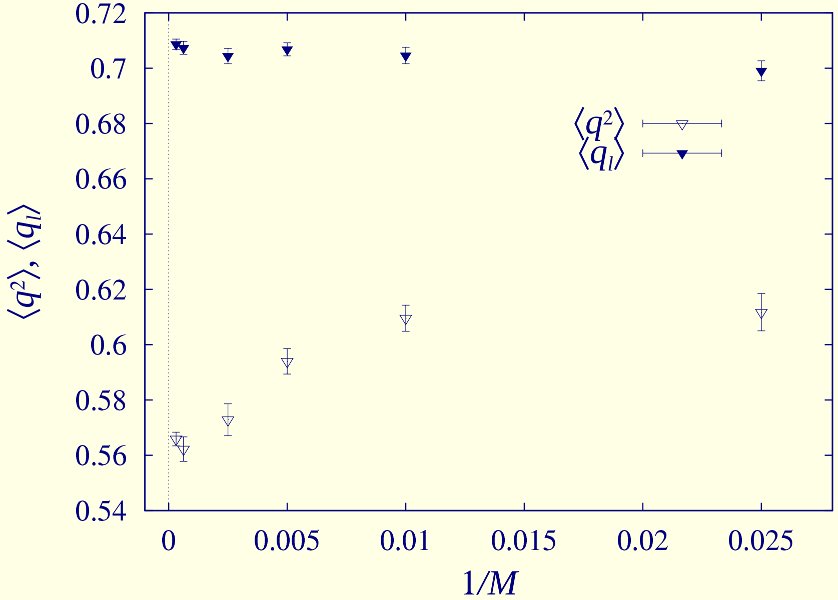
スピングラス系への応用:粒子数依存性

重なり関数の温度依存性

粒子数 M: $40 \sim 3200$



$\langle q^2 \rangle$ と $\langle q_{\rm link} \rangle$ の粒子数依存性



Summary

- Population Annealing法の提案
  - Jarzynski等式の使い方として、Simulated Annealingと組み合わせる。温度を時間とともに変化させるのが効率がよい(?)。
    - ∗ 交換法では温度は上げ下げされるが、PAでは一方行しかない。自由エネルギー表面が複雑なのは、多点探索で。
  - Rresamplingをやらないと、失敗する。
  - Neal-Jarzynski 重みで平均すれば、自由エネルギーだけでなくて、任意の物理量が計算できる。

- スピングラス系への応用
  - 比較的速いcooling rateでも平衡量が計算できている。
  - いろいろ不安も残る。