

## 物理学特別講義

伊庭幸人

情報・システム研究機構統計数理研究所  
(東工大 連携教員)

## この講義の構成

本日 モンテカルロ法入門

(前) モンテカルロ法入門

(後) マルチカノニカル法入門

毎回前半はやすく  
後半はかなり難しい

後半難しくても次の  
前半はわかるはず

18日 ベイズ統計とモンテカルロ法

(前) ベイズ統計入門

(後) 逆問題とモンテカルロ法

20日 情報理論と統計科学

(前) 情報圧縮入門

(後) MDLとベイズ統計

最初の2回とはほぼ独立

## 参考書

- 前半2回

「ベイズ統計と統計物理」 伊庭幸人  
岩波書店, 講座 物理の世界

「統計科学のフロンティア12 計算統計II」  
伊庭ほか, 岩波書店, (全12巻)



## モンテカルロ法入門

伊庭幸人

## マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC)

1950年代前半に誕生

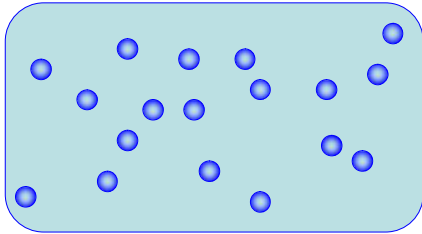
電子計算機の誕生

多数の原子や分子の振る舞いの計算

「(動的)モンテカルロ法 (MC)」

MCMCという名前は他の分野(統計科学など)  
で使われるようになってからのもの。

## 統計力学



理想気体 簡単 相互作用あり 簡単でない

## MCMCの要点

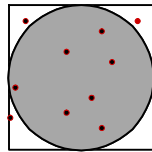
物理のことはでいうと  
(粗視化された)物理過程を「マルコフ連鎖」  
で真似して擬似乱数を使ってシミュレート  
ということになる

実際は物理以外でもOK

もうひとつの方法 分子動力学(MD)  
ニュートンの運動方程式を解く

## 普通のモンテカルロ法との違い

普通のモンテカルロ 「の計算」  
ランダムに点をばらまいて  
円の中に入った個数 ÷ 全体の個数



### 方法の違い

MCMCはマルコフ連鎖を用いる  
ランダムな「操作」を繰り返す  
生成される状態に相関がある

### 特徴

MCMCは高次元・多変量の場合に強い

## 熱浴法(ギブス・サンプラー)

いろいろな方法で目的に合うような  
「マルコフ連鎖」を作ることができる

一番簡単なのが

熱浴法(heat bath 法) : 統計物理  
Gibbs Sampler : 統計・情報  
(同じもの)

## 熱浴法(ギブス・サンプラー)のしくみ

以下を何回も何回も繰り返す  
iをランダム(または規則的)に選ぶ  
i以外の要素を固定した条件付き確率

$$P(\cdot | S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_N)$$

で  $S_i$  の値をランダムに取りなおす

## 同時確率と条件付き確率

A: 緑色の眼 B: 栗色の髪

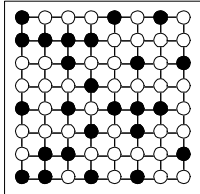
$P(A|B)$  髪が栗色のときに、眼が緑色の確率

$P(A, B)$  髪が栗色で、かつ、眼が緑色の確率

$$P(A, B) = P(A|B)P(B)$$

## 正方格子上のイジングモデル

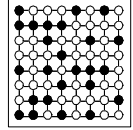
2状態 +1( )と -1( )



「まわりの環境」によってエネルギーが決まる

## 強磁性イジング模型の統計力学

- $(i,j)$ は格子の上の隣接する対
- $S_i$ と $S_j$ が同符号ならエネルギー小
- $S_i$ と $S_j$ が異符号ならエネルギー大



$$P(S_1, S_2, \dots, S_N) = \frac{\exp(\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j)}{Z}$$

$$Z = \sum_{\text{config.}} \exp(\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j)$$

## 協力現象・相転移・臨界点

$$\beta J = 0.446..$$

システムが大きいきを上の値を境にして  
強結合(低温)と弱結合(高温)で性質  
が全く異なる振る舞いをする

## 計算がたいへん

$$P(S_1, S_2, \dots, S_N) = \frac{\exp(\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j)}{Z}$$

$$Z = \sum_{\text{config.}} \exp(\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j)$$

$$\sum_{\text{config.}} \quad 10 \times 10 \text{なら} 2 \text{の} 100 \text{乗通り!}$$

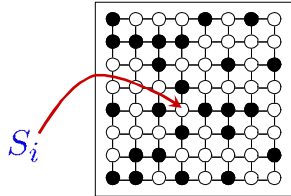
## イジングのデモ

- [javatest¥ising3.html](#)
- [javatest¥ising.html](#)
- [javatest¥ising2.html](#)

### 熱浴法(ギブス・サンプラー)

$$P(\cdot | S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_N)$$

で  $S_i$  の値をランダムに取りなおす



### 同時確率と条件付き確率

A: 緑色の眼 B: 栗色の髪

$P(A|B)$  髪が栗色のときに, 眼が緑色の確率

$P(A, B)$  髪が栗色で, かつ, 眼が緑色の確率

$$P(A, B) = P(A|B)P(B)$$

$$P(A|B) = \frac{P(A, B)}{P(B)}$$

$$P(S_i | S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_N)$$

$$= \frac{P(S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_i, S_{i+1}, \dots, S_N)}{P(S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_N)}$$

$$= \frac{\frac{1}{Z} \exp\left(\beta J S_i \sum_{j \in N(i)} S_j + \beta J \sum_{k, l \notin N(i)} J S_k S_l\right)}{\frac{1}{Z} \sum_{S_i = \pm 1} \exp\left(\beta J S_i \sum_{j \in N(i)} S_j + \beta J \sum_{k, l \notin N(i)} J S_k S_l\right)}$$

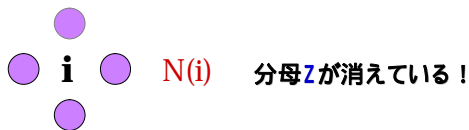
$$= \frac{\exp\left(\beta J S_i \sum_{j \in N(i)} S_j\right)}{\sum_{S_i = \pm 1} \exp\left(\beta J S_i \sum_{j \in N(i)} S_j\right)}$$

$$= \frac{\exp\left(\beta J S_i \sum_{j \in N(i)} S_j\right)}{\exp\left(\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j\right) + \exp\left(-\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j\right)}$$

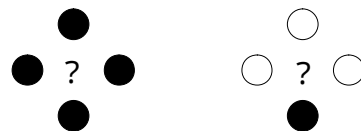
### ギブスサンプラー

$$P(S_i = +1 | \cdot) = \frac{\exp(\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j)}{\exp(\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j) + \exp(-\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j)}$$

$$P(S_i = -1 | \cdot) = \frac{\exp(-\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j)}{\exp(\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j) + \exp(-\beta J \sum_{j \in N(i)} S_j)}$$



### 条件付き確率の計算例



$$P(S_i = +1) = \frac{\exp(4\beta J)}{\exp(4\beta J) + \exp(-4\beta J)}$$

$$P(S_i = +1) = \frac{\exp(-2\beta J)}{\exp(-2\beta J) + \exp(+2\beta J)}$$

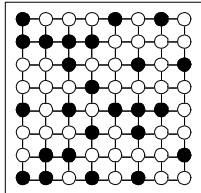
$$P(S_i = -1) = \frac{\exp(-4\beta J)}{\exp(4\beta J) + \exp(-4\beta J)}$$

$$P(S_i = -1) = \frac{\exp(2\beta J)}{\exp(-2\beta J) + \exp(+2\beta J)}$$

## 熱浴法 (ギブス・サンプラー)

$$P(\cdot | S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_N)$$

で  $S_i$  の値をランダムに取りなおす



# もう一回みてる

- [javatest¥ising3.html](#)
- [javatest¥ising.html](#)
- [javatest¥ising2.html](#)

## 2変数の場合

$$P(x_1, x_2)$$

$$P(x_1 | x_2) \quad x_1 \text{ をサンプル}$$

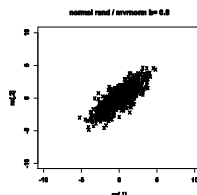
$$P(x_2 | x_1) \quad x_2 \text{ をサンプル}$$

適当な初期値からはじめて何回も何回もやる

## 2次元の正規分布

$$p(x_1, x_2) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{x_1^2 - 2bx_1x_2 + x_2^2}{2}\right)$$

$$Z = 2\pi / \sqrt{1 - b^2}$$



## 2次元正規分布のギブスサンプラー

$$x_1^2 - 2bx_1x_2 + x_2^2 = (x_1 - bx_2)^2 + (1 - b^2)x_2^2$$

$$p(x_1 | x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x_1 - bx_2)^2}{2}\right)$$

$$x_1^2 - 2bx_1x_2 + x_2^2 = (x_2 - bx_1)^2 + (1 - b^2)x_1^2$$

$$p(x_2 | x_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x_2 - bx_1)^2}{2}\right)$$

# 正規分布のデモ

なぜ、これでうまくいくか

もし、あるとき正しい分布

$$P(S_1, S_2, \dots, S_N) = \frac{\exp(\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j)}{Z}$$

からサンプリングできたとする

i番目を除いた同時分布

$$P(S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, S_N)$$

「定常性」の証明

$S'_i$  を条件付き確率

$$P(\cdot | S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, S_N)$$

に従ってとる

$$(S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S'_i, S_{i+1}, S_N)$$

一方、その確率は

$$P(S'_i | S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, S_N) P(S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S_{i+1}, \dots, S_N) \\ = P(S_1, S_2, \dots, S_{i-1}, S'_i, S_{i+1}, \dots, S_N)$$

同時確率と条件付き確率

A: 緑色の眼 B: 栗色の髪

$P(A|B)$  髪が栗色のときに、眼が緑色の確率

$P(A, B)$  髪が栗色で、かつ、眼が緑色の確率

$$P(A, B) = P(A|B)P(B)$$

マルコフ連鎖

直前の状態xにのみ

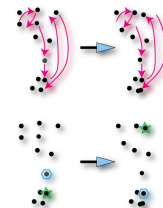
次の状態の出現確率  $\pi(x \rightarrow x')$  が依存

$$\sum_x P(x) \pi(x \rightarrow x') = P(x')$$

$P(x)$  多数の状態(状態空間の代表点)の分布

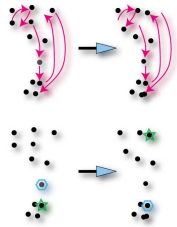
マルコフ連鎖の定常分布(不変分布)

$$\sum_x P(x) \pi(x \rightarrow x') = P(x)$$



### 定常分布の意味

「与えられた分布を定常分布に持つ」



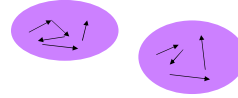
正しい分布 正しい分布

任意の分布 正しい分布 ?

簡単な条件のもとで証明できる

### 条件

まず、複数の部分にわかれていたのではだめ



条件 あるnがあってn回でどこでもいける

非周期条件

### マルコフ連鎖を設計する

与えられた分布を不変分布にする  
マルコフ連鎖は無数に存在する

ギブスサンプラーはそのひとつに過ぎない

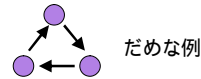
「設計の原理」 詳細釣り合い  
(detailed balance)

### 詳細釣り合い

$$P(x)\pi(x \rightarrow x') = P(x')\pi(x' \rightarrow x)$$

各ペアについてつりあう

$$\sum_x P(x)\pi(x \rightarrow x') = P(x) \quad \text{定常分布になる十分条件}$$



### メトロポリス法

与えられた分布を定常分布にする  
ような「マルコフ連鎖」を作る別の考え方

「候補」を選ぶ (乱数を使うこともある)  
乱数を発生させる  
ある基準がみたされたら候補を採用  
(この段階で乱数が必須)

### メトロポリス法

対称な提案分布  $Q(x, x') = Q(x', x)$

$x$  の候補  $x^{new}$  を  
提案分布  $Q(x, x^{new})$  に従って生成

一様乱数  $0 \leq r < 1$  を発生

$r < \frac{P(x^{new})}{P(x)}$  なら  $x$  を  $x^{new}$  で置き換える  
さもなければ何もしない

### 詳細釣り合いを満たすことの証明

2つの状態を  $\alpha, \gamma$  とする  
 $P(\alpha) \leq P(\gamma)$  として一般性を失わない

$$r < 1 \leq \frac{P(\gamma)}{P(\alpha)} \quad Q(\alpha, \gamma)$$

$$r < \frac{P(\alpha)}{P(\gamma)} \leq 1 \quad Q(\gamma, \alpha) \frac{P(\alpha)}{P(\gamma)}$$

### 続き

$$P(\alpha)\pi(\alpha \rightarrow \gamma) = P(\gamma)\pi(\gamma \rightarrow \alpha)$$

$$P(\alpha) \times Q(\alpha, \gamma) = P(\gamma) \times Q(\gamma, \alpha) \frac{P(\alpha)}{P(\gamma)}$$

$$Q(\alpha, \gamma) = Q(\gamma, \alpha)$$

### イジングモデルのメトロポリス法

要素の番号  $i$  を選ぶ (ランダム or 規則的)

乱数  $r$  を発生

$$\exp(-2\beta JS_i \sum_{k \in N(i)} S_k) < r$$

ならば  $S_i = -S_i$

### 説明

要素の番号  $i$  を選ぶ (ランダム or 規則的)

$S_i^{new}$  の定義

$$S_i^{new} = -S_i \quad (S_j^{new} = S_j, j \neq i)$$

$$S_i = S_i^{new} = -S_i$$

### 説明 (続き)

乱数  $r$  を発生

$$\frac{P(S^{new})}{P(S)} = \frac{\exp(-\beta JS_i \sum_{k \in N(i)} S_k + \sum_{j, k \notin N(i)} S_j S_k)}{\exp(\beta JS_i \sum_{k \in N(i)} S_k + \sum_{j, k \notin N(i)} S_j S_k)}$$

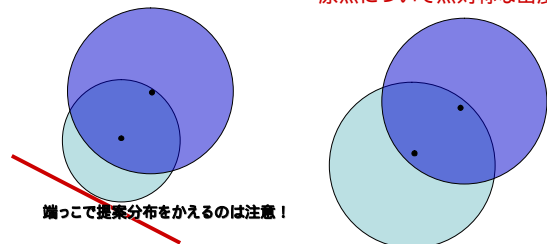
$$\frac{P(S^{new})}{P(S)} = \exp(-2\beta JS_i \sum_{k \in N(i)} S_k) < r$$

厄介な分母  $Z$  が消えていることに注意

### 2次元ガウス分布

$$Q(x, x') = q(x - x') dx'$$

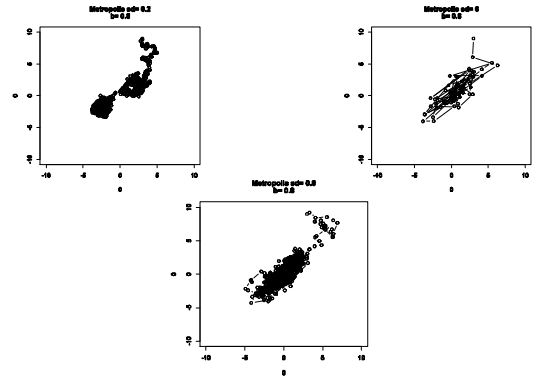
原点について点対称な密度



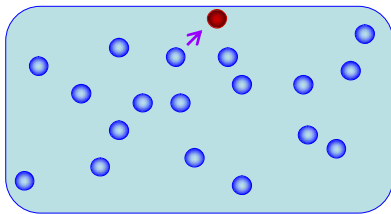


# デモ

## ステップ幅の影響



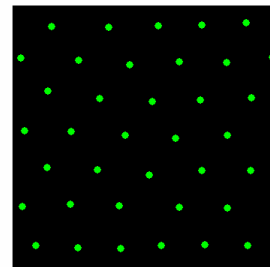
## 液体のシミュレーション



$$r < \frac{P(x^{new})}{P(x)}$$

# 分子のデモ

- [javatest¥pmol0.html](#)
- [javatest¥pmol.html](#)



## メトロポリス・ヘイスティングス法(MH)

$$Q(x, x') \neq Q(x', x)$$

$$r < \frac{P(x^{new})Q(x^{new}, x)}{P(x)Q(x, x^{new})}$$

なら  $x$  を  $x^{new}$  で置き換える  
さもなければ何もしない

## ギブスサンプラーはMHの一種

$$\frac{P(x^{new})Q(x^{new}, x)}{P(x)Q(x, x^{new})}$$

$$Q(x, x^{new}) = P(x_i^{new} | \{x_j \neq i\}) \delta(\{x_j \neq i\}, \{x_j^{new} \neq i\})$$

$P(\{x_j \neq i\})$  を分母・分子に掛け, 条件つき確率の定義を使う

$$\frac{P(x^{new})P(x)}{P(x)P(x^{new})} = 1 \quad 100\% \text{ acceptされる}$$

## まとめ

ワンパターンさと簡潔さ  
明快な原理

使えるアルゴリズム

## 拡張アンサンブル法入門 (マルチカノニカル法入門)

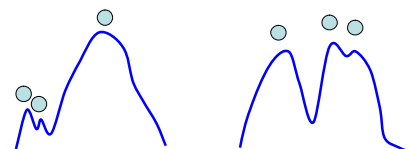
## 拡張アンサンブル法

「与えられた分布を拡張した分布」  
「与えられた分布族を合併した分布」

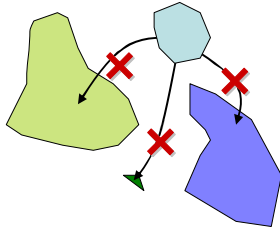
を任意のMCMCでサンプルすることで  
正しいサンプリングを行いつつマルコフ連鎖  
の混合を画期的によくする手法群

1970年代から「アンブレラ法」などがあるが  
1990年代から物理や統計科学の一部で発展

## MCMCが困難に陥る場合

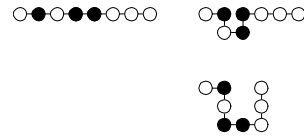


確率密度の大きいところが複数に分かれる



**困難な問題の例(1): HP模型**  
(格子タンパク模型の一種)

と が並んだ1次元の鎖: 最初に決める  
格子の上の鎖の置き方  $\mathcal{X}$ : 確率変数



$\{x_i\}$ : 粒子 ( または ) の格子上的位置  
 $-E(\{x_i\})$  置き方  $\{x_i\}$  が隣合う数

**困難な問題の例(2): 魔方陣を作る**

魔方陣  
3 × 3

4	9	2
3	5	7
8	1	6

魔方陣になっている

$$E = 0$$

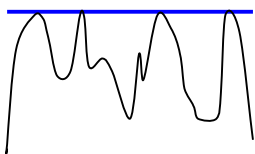
$$E(\{x_i\}) = \sum_{row} |rowsum - C|^2 + \sum_{col} |colsum - C|^2 + \sum_{diag} |diagsum - C|^2$$

rowsum=行の数字の和, colsum=列の数字の和,  
diagsum=対角線の数字の和: 対角線2本の和 diag

FIG.3. A typical conformation with  $E = -50$  of the second sequence in Table I. This value of the energy is reached for the first time by MSOE.

**MCMCによる計算**

$$E(\{x_i\}) = 0$$



極度に多峰性の分布  
パラレルテンパリング

$$\{P(x^k | \beta_k)\}$$

$$k = 1, \dots, K$$

**simulated annealing**

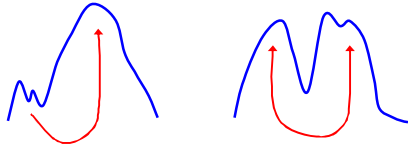
分布  $P(x)$  最大にする  $x$  が求めたい

「温度」  $T$  で変形 ゆっくり  $T \rightarrow 0$

$$P_T(x) = \frac{\{P(x)\}^{1/T}}{\sum_x \{P(x)\}^{1/T}}$$

アニーリングは最適化  
サンプリング法ではない

アニーリングOK アニーリングだめ



多数を与えられた確率の値に忠実に従って作る

## 拡張アンサンブル法

「与えられた分布を拡張した分布」  
「与えられた分布族を合併した分布」

を任意のMCMCでサンプルすることで  
正しいサンプリングを行いつつマルコフ連鎖  
の混合を画期的によくする手法群

1970年代から「アンブレラ法」などがあるが  
1990年代から物理や統計科学の一部で発展

## 拡張アンサンブル法の特徴

- マルコフ連鎖の混合がよくなる
- 特にマルチモーダル(多峰性)の分布によい
- アニーリングとは違い期待値計算OK

さらに...

- 積分の計算に有用
- 組み合わせの数の数え上げにも有効

## 拡張アンサンブル法のいろいろ

simulated tempering法  
parallel tempering法  
or レプリカ交換モンテカルロ法  
(adaptive) umbrella法  
マルチカノニカル法  
ワン・ランダウ法  
フラット・ヒストグラム法

## レビュー論文

拡張アンサンブル法のレビュー  
(cond-matにもあります)

Iba, Y. 2001

Extended Ensemble Monte Carlo  
International Journal of Modern Physics,  
C12 (2001) pp.623-656

## レプリカ交換モンテカルロ法

たくさんの系を並列にシミュレートする

$$\{P_k(x^k)\}, k = 1, 2, \dots, K$$

### 「たくさんの系」の作り方

それぞれ温度が少しずつ段階的に違うようにする

$$P_k(x^k) = \frac{\exp(-\beta_k E(x^k))}{Z(\beta_k)}$$

任意のハイパーパラメータ( )についての族でもよい  $P_k(x^k) = P(x^k | \beta_k)$

### 交換操作

一定の規則で隣同士の状態を交換する

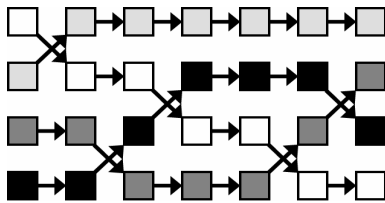
$$P_k(x^k) \quad P_{k+1}(x^{k+1})$$

$$x^{k(t+1)} \leftarrow x^{k+1(t)}$$

$$x^{k+1(t+1)} \leftarrow x^k(t)$$

### 交換の様子

(温度の異なる系4つの場合)



### 交換の規則

- 以下の比を計算

$$W = \frac{P_{k+1}(x^k(t)) P_k(x^{k+1}(t))}{P_{k+1}(x^{k+1}(t)) P_k(x^k(t))}$$

- 一様乱数  $0 < rnd < 1$  を発生  
 $rnd < W$  なら交換する

### 交換の規則

- 以下の比を計算

$$W = \exp\left((\beta_k - \beta_{k+1})(E(x_k^{(t)}) - E(x_{k+1}^{(t)}))\right)$$

- 一様乱数  $0 < rnd < 1$  を発生  
 $rnd < W$  なら交換する

### 同時分布についての詳細釣り合い

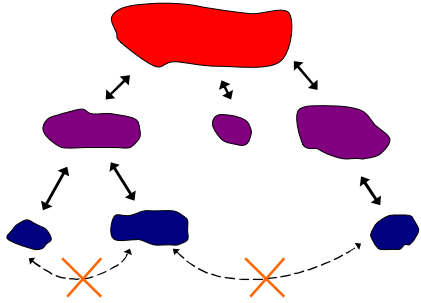
同時分布が交換操作を含めたマルコフ連鎖の不変分布になっている

$$P(x^1, x^2, \dots, x^K) = P(x^1)P(x^2) \dots P(x^K)$$

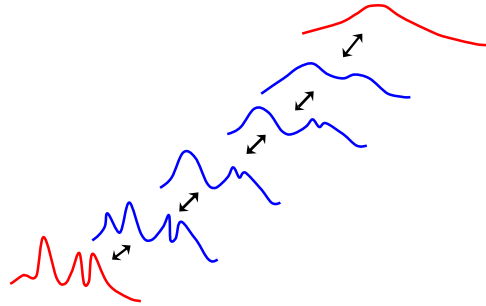
「交換」の部分がメトロポリス法の試行に相当

$$W = \frac{P(x^1) \dots P(x^k) P(x^{k+1}) \dots P(x^K)}{P(x^1) \dots P(x^{k+1}) P(x^k) \dots P(x^K)}$$

交換の効果で「橋」をかける



やさしい分布から難しい分布への「道」をつくる



例：魔方陣を多数生成

Pinn et al. (1998)  
魔方陣  
3 × 3

4	9	2
3	5	7
8	1	6

魔方陣になっている  
 $E = 0$

= 2 が Pinn 流, あとの伊藤の流では = 1

$$E(\{x_i\}) = \sum_{row} |rowsum - C|^{\alpha} + \sum_{col} |colsum - C|^{\alpha} + \sum_{diag} |diagsum - C|^{\alpha}$$

rowsum=行の数字の和, colsum=列の数字の和,  
diagsum=対角線の数字の和: 対角線2本の和 diag

多重和の計算に帰着させる

$$E(\{x_i\}) = \sum_{row} |rowsum - C|^2 + \sum_{col} |colsum - C|^2 + \sum_{diag} |diagsum - C|^2$$

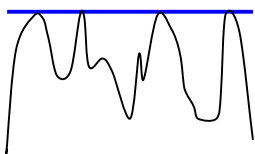
$$P(\{x_i\}|\beta) = \frac{\exp(-\beta E(\{x_i\}))}{Z}$$

$$Z(\beta) = \sum_x \exp(-\beta E(\{x_i\}))$$

$\beta \rightarrow \infty$   $Z \rightarrow \#$  of magic squares

MCMCによる計算

$$E(\{x_i\}) = 0$$



極度に多峰性の分布  
パラレルテンパリング

$$\{P(x^k|\beta_k)\}$$

$k = 1, \dots, K$

多重和の評価(原理は積分と同じ)

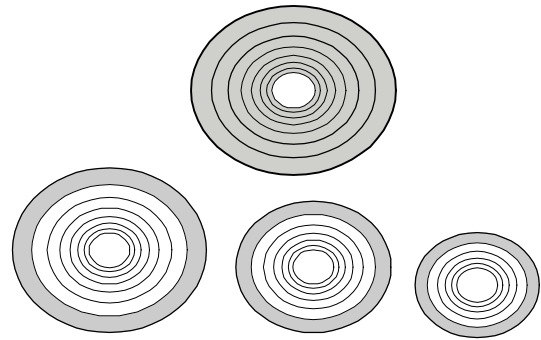
$$\log Z(\beta_{\infty}) = \log Z(\beta_0) +$$

$$\sum_k \log \langle \exp(-(\beta_{k+1} - \beta_k)E(x)) \rangle_{\beta_k}$$

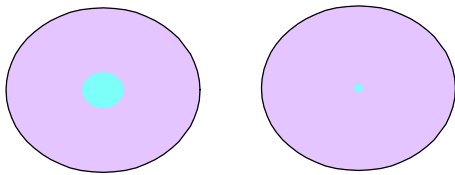
$$\langle \cdot \rangle_{\beta_k} = \frac{\sum_x \cdot \exp(-\beta_k E(x))}{Z(\beta_k)}$$

$$\begin{aligned} & \sum_k \log \langle \exp(-(\beta_{k+1} - \beta_k)E(x)) \rangle_{\beta_k} \\ &= \log \prod_k \left\{ \sum_x \exp(-\beta_{k+1}E(x) + \beta_k E(x)) \frac{\exp(-\beta_k E(x))}{Z(\beta_k)} \right\} \\ &= \log \prod_k \left\{ \frac{\sum_x \exp(-\beta_{k+1}E(x))}{Z(\beta_k)} \right\} \\ &= \log \prod_k \left\{ \frac{Z(\beta_{k+1})}{Z(\beta_k)} \right\} \\ &= \log \frac{Z(\beta_\infty)}{Z(\beta_0)} = \log Z(\beta_\infty) - \log Z(\beta_0) \end{aligned}$$

### 玉ねぎの皮むき



### 多重和の評価の原理



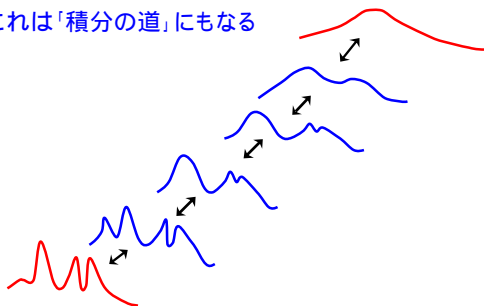
### 1000次元球は皮ばかり

半径1メートル = 100cm の球  
1cmの皮を除いた「芯」の比率  
次元が増えるとどんどん小さくなる

3次元  $(0.99)^3 = 0.970$   
 100次元  $(0.99)^{100} = 0.366$   
 1000次元  $(0.99)^{1000} = 4.32 \times 10^{-5}$

### 既知の分布から未知の分布への「道」をつくる

これは「積分の道」にもなる



### 結果 (Pinn et al. (1998))

(以下は対称性の因子8で割った数字)

- N=4    879.53    880
- N=5    27550####    275305204
- N=6  
0.17744 × 10の20乗

## 例 . ラテン方格 (方陣) の個数

### N-queenの個数

Koji Hukushima *Comp. Phys. Comm.* 147 (2002) 77-82

同じじゃんか...と思ったが、自分もやりたくなった  
(統計学会に出すネタがほしかったという説もある)

統計のほうでは分割表のMCMC計算が  
流行っているということもある  
(エルゴード性の細かな議論が沢山ある)

## ラテン方陣 (例)

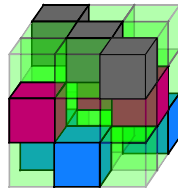
A Latin square

```

A I Z W O F X B N E D R L G G U C K M V Y H P J T S
Y L R U T H D Z W X S J B C F V K M E Q G I N P O A
X O R Y P S U A G J Z E C F H D I K W R V L M T
J H P S A X Y K L Z M N I O R Q V D F T B C W G U E
G B E Q R T Z F H Y O C J X V M L U S K A I W D P
C J Q F K O H V U D T G R A Y B E P Z L N X S M W I
N K D O F U P S A B W V G Z M L X Q T E C J Y R I H
H G I C E A K R J Q L O N S B W Z X D Y F V M T P U
W M S A D Z T U O R X B P E O F G Y I J H N K C L V
D E K L G E M W S P C U Y T J A F H R D I Z O N V X
P U Y R N E L C D F A M T O G H I J Y O Z B X S W
T C V M H G Q D O N U X E R W P B A L I S F J K Y Z
M T N Z J K A L F G P H S I X R Y W U V E D O B
O V X N M D I E T U K Q W Y P S R C J B A G H F Z L
L S T H I C W Y R V E Z D J K X U N P G M Q F B A O
Z R A E B V S K I O L U N D Y W G O F P T C H J M
B X C K L Y R N P S F I Z H T O M V W U E D Q A G J
S Y H I X W J O B M G D V K Z E P L C R T U A Q N F
E D F V O P N G Z A B W O U I J T R Y H X M L S K C
K Z G X Y M E J I L V F H P C T A S Q N O W U D B R
R O M D C I B P V W H S F L N G J T X A U O S Y E K
D F J T U L G I M C N P O V A K O B H Z W S X E R Y
U P O B Z O V H C K R Y M W S G D E A X J L T I F N
V W L P S J F T X H Y A K D E N I O S M R B Z U C Q
F A U J W N O M E T I K X B L C O Z S P D Y R V H G
I N W G V R C Q Y O J T A M U H S F B K L P E Z X D
    
```

## ラテン方陣

3	2	1
1	3	2
2	1	3



## ラテン方陣 (3次元表示)

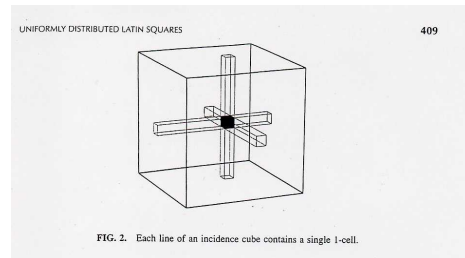


FIG. 2. Each line of an incidence cube contains a single 1-cell.

## ラテン方陣の個数

大きさ6 (410000 MCS × レプリカ27個)

厳密 812851200 (対数 20.52)

推定 826590527 (対数 20.53)

大きさ10 (510000 MCS × レプリカ49個)

厳密  $9.98 \times 10^{36}$

推定  $9.85 \times 10^{36}$

大きさ11 (510000 MCS × レプリカ50個)

厳密  $7.77 \times 10^{47}$

推定  $7.74 \times 10^{47}$   $7.74 \times 10^{47}$   $8.05 \times 10^{47}$   $7.91 \times 10^{47}$

## ラテン方格について

「あらゆる整数列の情報」サイト

<http://www.research.att.com/~njas/sequences/Seis.html>

N=11まで厳密数え上げができています

比較的シンプルな(逐次的に作るタイプの)

モンテカルロで精度よく数が計算できる

McKay and Rogoyski, *Electronic J. Combinatorics* 2, R3, 1-4, 1995.

$N = 11$ ,  $10^6$  trials :  $7.764 \times 10^{33}$

さっきの結果 いまいち? 1 trialに時間かかりそうな方法ではあるが..



## いろいろ

「表の数上げは逐次的に作ったほうがよい」という意見は他にもある (Chen et al.)

一方, ラテン方格のmoveに特化した研究もある  
**Jacobson and Matthews (1996)**  
 (長大でよくわからない)  
 constraintを僅かに破る状態を含めればOK

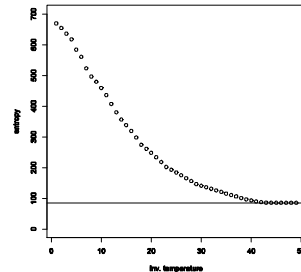
Latin square の相転移 (穴をあける): 出発前にwebで発見

Dimitris Achlioptas  
 Microsoft  
 Carla P. Gomes  
 Cornell University  
 Henry Kautz  
 University of Washington  
 Bart Selman

## 温度とエントロピー

実はこんな高い精度まで煮詰まっている

サイズ10  
 のラテン方陣



縦軸は対数  
 (エントロピー)

横軸は温度の番号

## マルチカノニカル法

温度やintensiveな量でなく, それに共役な  
 エネルギーやextensiveな量で考える

$x$  は高次元・多変量でも

$E(x)$  はスカラー値の関数

## 状態密度 $D(E_0)$

$E(x) = E_0$  となる  $x$  の個数

$$Z(\beta) = \sum_x \exp(-\beta E(x))$$

↓

$$Z(\beta) = \sum_E \exp(-\beta E) D(E)$$

## マルチカノニカル法の基本的考え方

いろいろな  $E(x)$  について  $\exp(-\beta E(x))$  を重みとして計算する

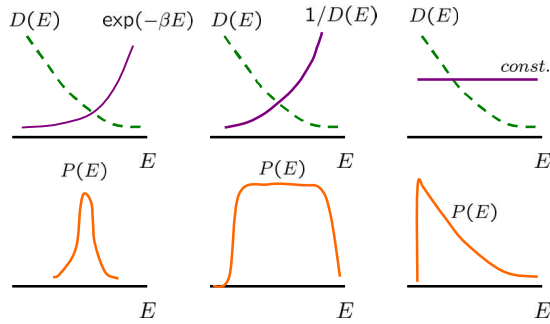
↓ 代わりに

$1/D(E(x))$  を重みとする一回のシミュレーションからあらゆる  $E(x)$  についての結果を得る

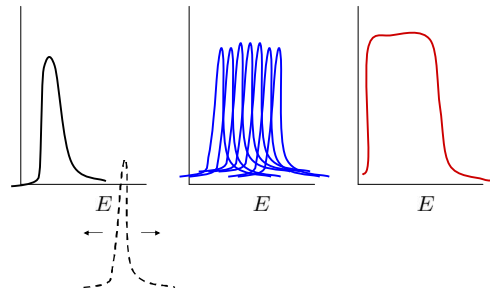
$$1/D(E(x)) \times D(E(x)) = 1$$

なのですべての  $E$  の値を等確率で実現することになる

もとの分布・マルチカノニカル・ランダム  
用いる重みと出てくるEの周辺分布



ランダム・交換法・マルチカノニカル



Rewighting公式

$$\sum_x A(x)P(x) = \frac{\sum_t A(x^{(t)}) \cdot \exp(-\beta E(x^{(t)})) \cdot \tilde{D}(E(x^{(t)}))}{\sum_t \exp(-\beta E(x^{(t)})) \cdot \tilde{D}(E(x^{(t)}))}$$

$$\frac{Z(\beta)}{N_{total}} = \frac{\sum_t \exp(-\beta E(x^{(t)})) \cdot \tilde{D}(E(x^{(t)}))}{\sum_t \tilde{D}(E(x^{(t)}))}$$

- 形式的 任意の $\tilde{D}(E)$ について成立
- 大きい系であらゆる  $\tilde{D}(E) \sim D(E)$  が必要

Q.  $D(E)$ を知らないのにどうする？

Ans.

予備的なシミュレーションを繰り返して学習

「沢山出たら重みを下げる」 Entropic Sampling

$k$ 回目のシミュレーションで  $M_k$  回中  
値  $E$  の出た回数  $H_k(E)$

$$\frac{1}{\tilde{D}^{(k+1)}(E)} := \frac{1}{\tilde{D}^{(k)}(E)} \cdot \frac{M_k}{H_k(E)}$$

例: イジング模型

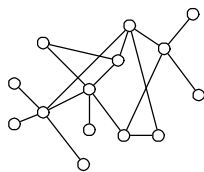
ランダムネットワーク上の「強磁性」イジング模型

$\sum_{(i,j)}$  ネットワーク上の隣接和

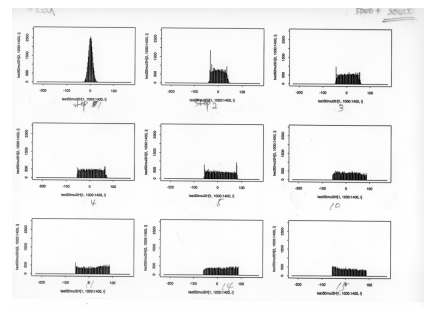
$$x_i \in \{+1, -1\}$$

$$E(\{x_i\}) = - \sum_{(i,j)} x_i x_j$$

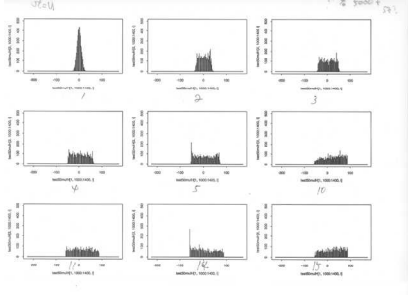
$$P(\{x_i\}) = \frac{\exp(-\beta E(x))}{Z(\beta)}$$



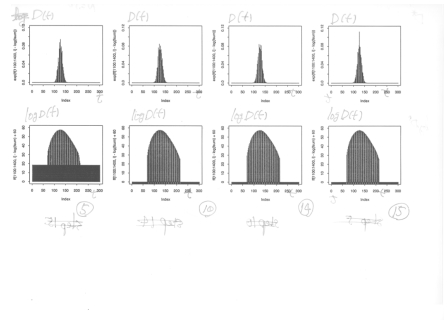
状態密度の学習  
(学習に用いるステップ数が多い場合)



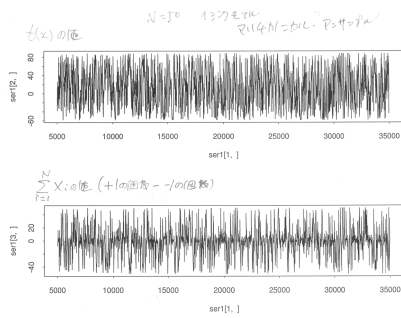
### 状態密度の学習 (学習に用いるステップが少ない場合)



### log D(E)とD(E)

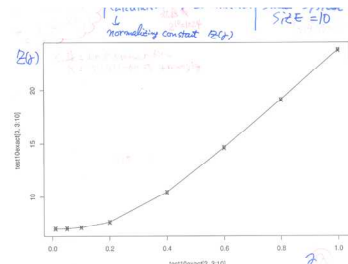


### マルチカノニカル生成する系列



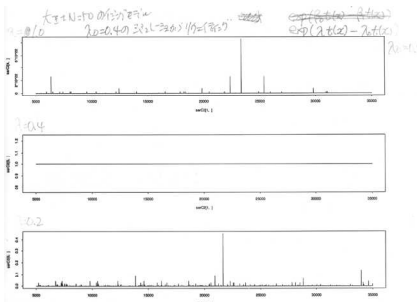
### 規格化定数(積分)の計算

縦軸  $\log Z(\beta)$  横軸 変数の数10(1024状態)

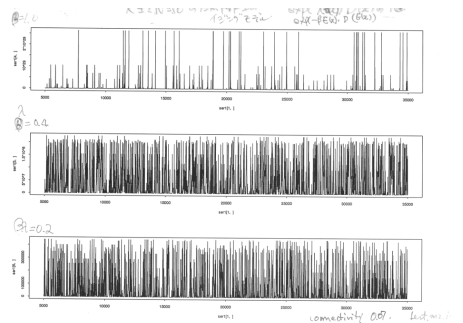


### Rewighting(悪い例)

- 上から
- $E = -0.4$
- から
- $E = -1.0$
- $E = -0.4$
- $E = -0.2$
- ^

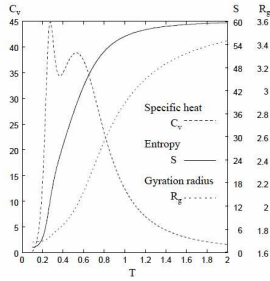


### マルチカノニカルRewighting





## ギブス分布での期待値の計算



## ヒストグラムの平坦化の様子

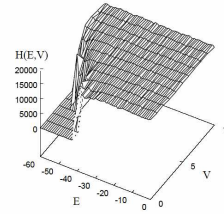


FIG. 2. Bivariate histogram  $H(E, V)$  obtained by a measurement run of the  $N = 64$  HP sequence shown in Table I.

## 通常のマルチカノニカルと提案手法との比較 (単なるメトロポリス法との比較は問題にならない)

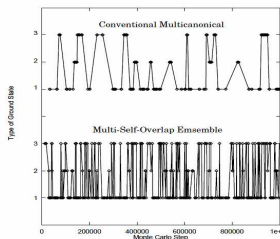


FIG. 4. Itinerancy among the ground states of three types against the Monte Carlo steps. The upper figure is for the conventional multicanonical ensemble, and the lower one is for the multi-self-overlap ensemble. The ordinate indicates the type of the ground states.

## 重なりを許すことによる「道」の生成

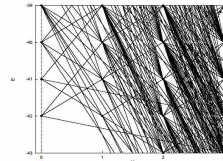


FIG. 1. Observed transitions on the  $(E, V)$  plane during a MSOE run of the  $N = 64$  HP sequence in Table I. Solid lines connecting two states represent the transitions between them. Only a small part of the entire  $(E, V)$  plane near the ground state is shown.

## ここまでのまとめ (1)

多峰性分布について混合を促進する手法群である「**拡張アンサンブル法**」から、  
 「**パラレルテンパリング法**」  
 「**マルチカノニカル法**」  
 の2つを紹介した。これらは積分計算にも有効。  
 MCMCといっても対象によりピンからキリまで

## ここまでのまとめ (2)

多変量分布      状態を少しずつ変える  
 分布族          分布族を少しずつ変える(「**梯子**」)  
 「**橋をかける**」  
 橋の中に全部いってしまわない工夫が必要  
 拡張アンサンブル法がそれを提供

## 補論：手法の比較や例など

ところで、

マルチカノニカル法とパラレルテンパリング法  
はどう使い分けるのがよいのだろうか？

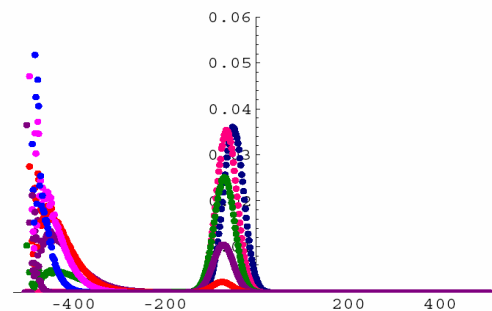
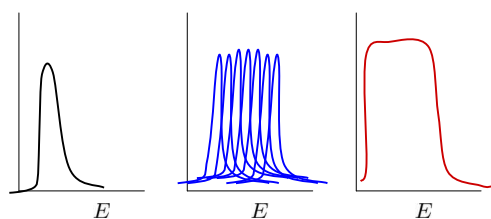
普通の(マニアの)人の答

latent heatのある(エントロピーギャップのある)

1次相転移はマルチカノニカル、

あとは同じようなもの

## ランダム・交換法・マルチカノニカル



## 本当か？

エネルギー

基底状態との距離(に近い意味を持つ)秩序変数

の2次元平面にマルチカノニカル法でサンプルされて  
いる密度をプロットする

ボトルネックは埋まるのか？

- 以下,高橋久尚氏との共同研究

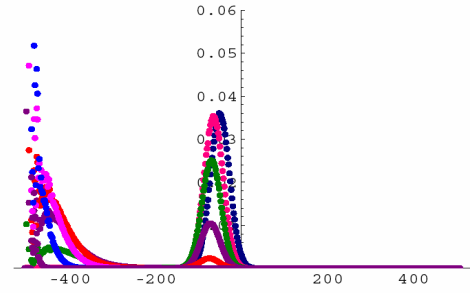
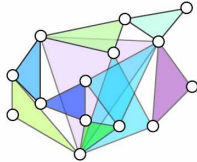
三体の系のハミルトニアン

$$E = - \sum_{\langle i,j,k \rangle} J_{ijk} S_i S_j S_k,$$

$$J_{ijk} = 0 \text{ or } \pm 1, \quad S_i = \pm 1$$

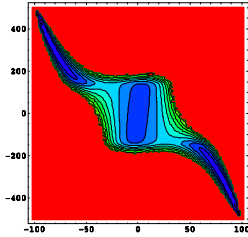
$i, j, k$  をランダムに選び  $J_{ijk} = 1$  が  $N$  個に達するまでネットワークを作っていく。

フラストレーションを入れる場合  
更にこの中から負の相互作用を一定数ランダムに選ぶ。

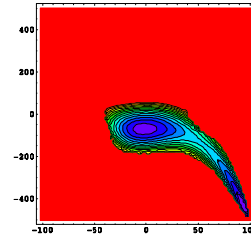


マルチカノニカル(ferro・3体・サイズ100)

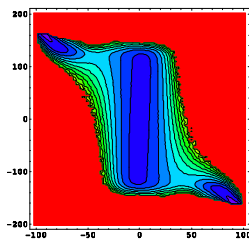
- 縦軸がエネルギー，横軸が磁場



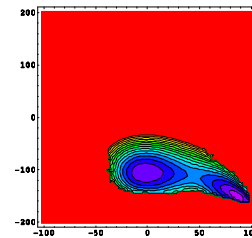
転移点の近くのカノニカル(3体・ferro)



マルチカノニカル(マイナスボンドあり, 3体)



転移点の近くのカノニカル(マイナスあり・3体)



## ここまでの結果

cond-mat/0407396

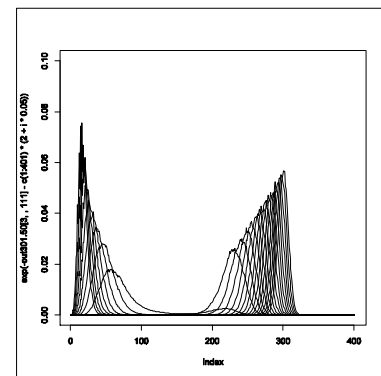
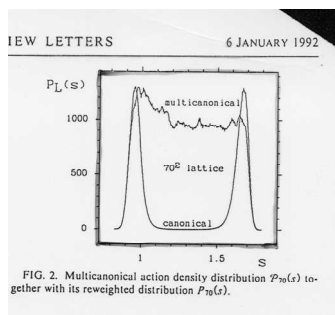
Multi-dimensional Density of States  
by Multicanonical Monte Carlo  
[Yukito Iba](#), [Hisanao Takahashi](#)

じゃあ、

多状態のPotts模型とか普通の一次転移の  
ものはどうなっているのだろう？

この模型(3体のイジング)が「難しい」  
から特別なのだろうか？

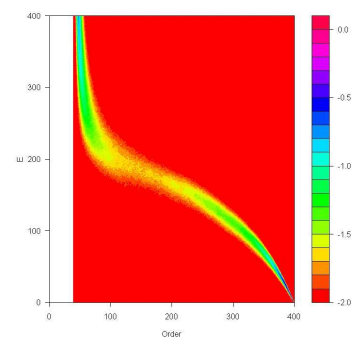
## Berg et al.(1992)



## 実験

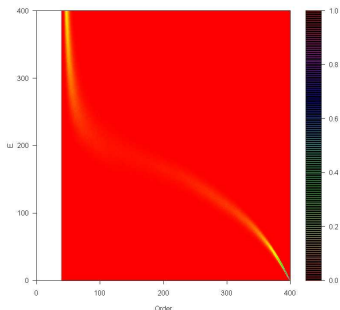
- 10状態のポッツ模型
- 強磁性
- 2次元正方格子上
- $M = \max(10 \text{個の一樣状態との重なり})$

log(マルチ密度): 縦軸 E, 横軸 M





(マルチ密度): 縦軸 E, 横軸 M



### セルオートマトンの周期解

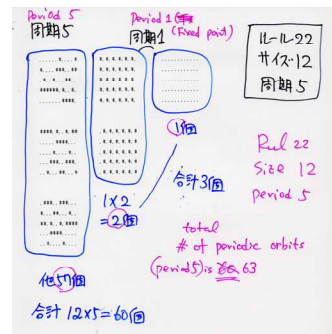
時間方向を周期境界条件

(もともと空間方向も周期境界だとトーラスに巻いた形になる)

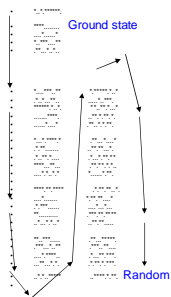
ルールが破れた箇所  $S_i^{t+1} \neq f(S_{i-1}^t, S_i^t, S_{i+1}^t)$   
の数をエネルギーとする

周期解は  $E(\{S_i^T\}) = 0$  と同値

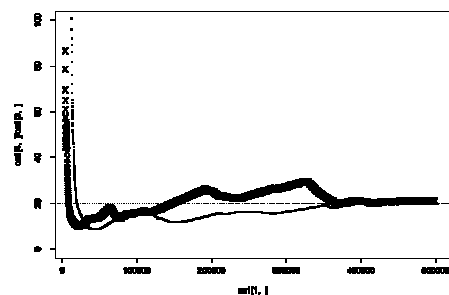
周期解の個数は基底状態の個数



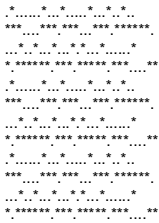
### パラレルテンパリングの列



### 収束の様子(46レプリカ)



### 少し大きい系の周期解



ルール54  
サイズ28  
周期12の解

### カオス写像の周期解

logistic map

$$E = \sum_{t=1}^{N-1} |x_{t+1} - \lambda x_t(1 - x_t)|$$

マルチカノニカル法

マルチカノニカル的なpopulation annealing法

(Skilling(2004): Nested Samplingというのと同じ?)

あとの図は後者

### logistic map(周期7)

