

モンテカルロ法に関する近年の話題について

福島孝治

東京大学大学院総合文化研究科

モンテカルロ法は確率分布からの汎用サンプリング手法として、統計物理や統計科学をはじめ様々な分野で応用されている。統計物理やベイズ統計では必然的に高次元の確率分布を扱うニーズがあり、主に重点サンプリング法が使われてきた。重点サンプリングはポピュレーション型モンテカルロ法とマルコフ連鎖モンテカルロ法に大別できる。マルコフ連鎖モンテカルロ法は90年代に統計物理の分野で拡張アンサンブルに基づく進展があり、マルチカノニカル法や交換法などが提案された。それらの方法は高次元かつ多峰的な分布からのサンプリングにもある程度耐えられる方法であり、応用範囲が非常に広がった。マルコフ連鎖モンテカルロ法の基本原理は単純であり、その設計部分は定常分布の設定と遷移確率の選択に分けられる。拡張アンサンブルでは定常分布を求めたい分布から拡張することにより、定常分布への収束性を改善している。一方で、遷移確率の模索はこれまでにあまりなされてこなかった。最近、Suwa-Todo[1]により、従来用いられてきた詳細釣り合い条件を緩めることにより緩和時間が短くなることが示され、遷移確率の選択の重要性が注目されつつあるように思われる。効率のよさを考えたときに、詳細釣り合い条件の位置づけはそれほど明確にはなっていないようであり、また改めてマルコフ連鎖モンテカルロ法の収束判定基準の不明瞭さを再認識させられる。我々は可解模型の知見から、詳細釣り合い条件を破ることの動力学への影響を考察する。具体的には、動的次元イジング模型について、詳細釣り合い条件を破る効果を研究した。我々はTuritsynら[2]のタイプの詳細釣り合い条件の破れたつりあい条件を考え、そのタイプに属するいくつかの遷移確率について調べた。その中で、ある遷移確率について熱力学極限において時間発展が閉じた方程式で記述されることを見出し、その緩和時間を評価した。それによれば、詳細釣り合い条件の破れは一つのパラメータで表され、詳細釣り合い点がかつとも緩和時間が遅いことがわかった。

拡張アンサンブルの遷移確率の設定方法も議論されるべき問題である。交換法では温度の設定方法とも関係する問題であり、これまでに様々な議論がなされてはいるが効率の観点から確定していることはなさそうである。元々の提案では、交換確率は温度に依らないことを指針として、それを実現する設定方法が提案されている。しかしながら、多くの応用例ではそれに従っているわけではなく、等(逆)温度間隔を基本に転移温度近傍で適当な補正をいれているだけのようである。近年、この指針は効率の観点から最適ではなく、交換遷移についての拡散定数を一定にすることが提案されている。また、できるだけ平衡状態に近づけてから交換を行う方法や、最近接だけでなく離れた温度交換を導入するのがよいとする説やJarzynski等式を用いることで温度間隔を離す方法などいくつかの提案がされている。これらを概観しながら、今後の展望を議論する。

本研究は、酒井佑士氏との共同研究である。

[1]H. Suwa and S. Todo, Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 120603.

[2]K. S. Turitsyn, M. Chertkov and M. Vucelja, Physica D **240** (2011) 410.