マルコフ連鎖モンテカルロ法の新展開

福 島 孝 治

URL: http://dbs.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima

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

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

2010 年 6 月 15 日, IBISML 研究会

Outline

Outline

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, decompositional approach to matrix computations
5. 1957: J.Backus, Fortran optimizaing 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

マルコフ連鎖モンテカルロ法の目的

1. **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
   - 非摂動論的アプローチ
     - 平均場近似、摂動展開法等の摂動的なアプローチとは対照的
     - 有限サイズ系でしか計算できない
     - 時間の情報がない:平衡状態の計算
2. (物理では) **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
   - 理論や理解の手がかりを得る

(マルコフ連鎖) モンテカルロ法

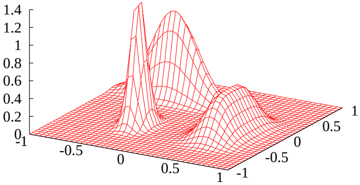
- 擬似乱数を用いて、大自由度確率分布関数を再現する計算手法
- d 次元空間の点 $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_d)$ の従う確率分布 $P(\mathbf{X})$ が与えられている.

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

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

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**

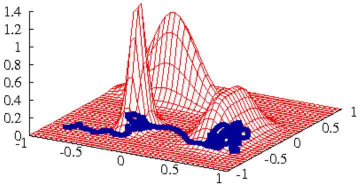
$$\langle A \rangle = \int_D A(\mathbf{X}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \simeq \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} A(\mathbf{X}^{(i)}).$$



- 確率の大きなところだけで近似
- 尤もらしい $\mathbf{X}$ の探索問題

メトロポリスのモンテカルロ法

- 確率過程を用いて，逐次的に点列 $\mathbf{X}$ を生成する．
  $\mathbf{X}^{(t-1)} \to \mathbf{X}^{(t)} \to \mathbf{X}^{(t+1)} \to \cdots$
  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 $W(\mathbf{X} \to \mathbf{X}')$ 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

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

  (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．

$\Longrightarrow$ どんな初期条件からでも，**唯一つの定常分布**に収束する．

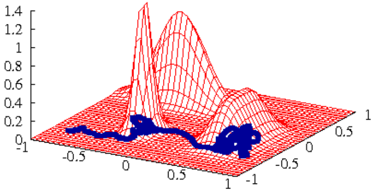
何が問題だったのか？–モンテカルロ法における遅い緩和の問題–

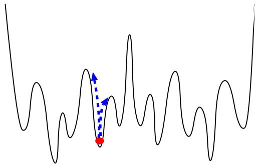
広大な状態空間のある局所的な部分に留まり続けるというイミで

実質的なエルゴード条件の破れ $\simeq$ 遅い緩和の問題

と呼ばれていて、 興味のある系でこの困難に直面する。

- **複雑な系での分布の多峰性**
  拘束条件の強い系，縮退のある問題等で広く一般的に見られる．
- (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





山と山の間には谷がある！

(少し前の)マルコフ連鎖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 (1987,1478), Wolf (88,1188):
   - 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, (1991,748)
     - entropic sampling：Lee
     - Broad histogram MC：Oliveira (1998)
     - Flat histogram MC，Transition Matrix MC：Wang (1999)
     - Wang-Landau method....,(2001,712)
   - Simulated tempering：Marinari-Parisi, (1992,807)
     - Expanded ensemble method：Lyubartsev et. al. (1992,424)
   - Exchange MC method：Hukushima-Nemoto, (1996,788)
     - Multiple coupled Markov chain MC(Geyer)，Parallel tempering

Outline

Exchange Monte Carlo Method (1)

拡張された確率分布関数

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

レプリカ系(ギブス分布のとき)：M 個のレプリカ系を用意

$$\mathcal{H}_{\rm eff}(\{X\}) = \sum_{m=1}^{M} \beta_m \mathcal{H}(X_m),$$

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

状態更新

1. (通常ステップ) それぞれのレプリカについて、状態更新
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

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

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

ギブス分布のときの交換のコスト関数は、

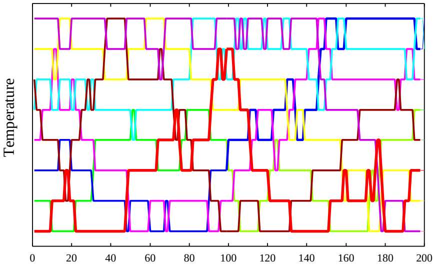
$$
\Delta(X, X'; \beta_m, \beta_n) = (\beta_n - \beta_m)(\mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X')).
$$

交換のための遷移確率

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

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

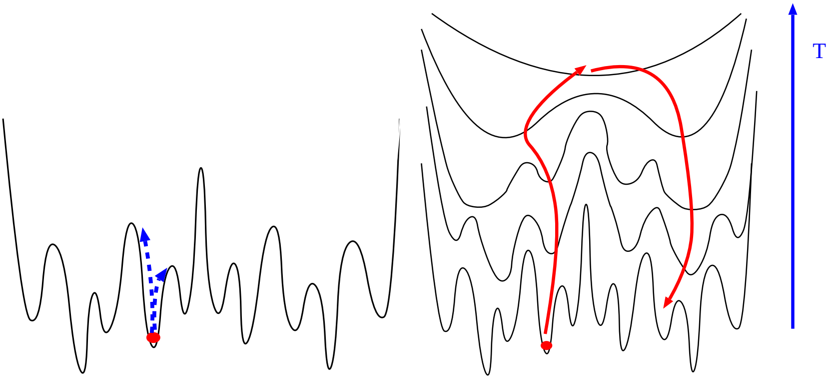
$$\{X_m\} \Longrightarrow \{X_m'\}$$

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

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

- 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平衡分布：熱期待値の計算ができる

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．
- 確率の大きな山に入ったら，一度 β を小さくして，一様分布に近い分布を探索してから，戻るのがよい．

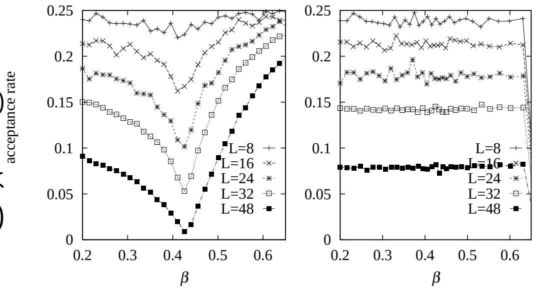
交換モンテカルロ法でのパラメータの設定

- うまくいくための条件として，交換が実現しないといけない．
  - 交換確率 $\simeq \exp(\beta - \beta')(E(X) - E(X'))$
  - 隣接する温度間隔は，自由度の大きさを N として，$O(N^{-1/2})$ 程度
  - 全温度領域が決まっていると，その間に $O(N^{1/2})$ 個の温度が必要
- 設定が悪いと失敗する例：相転移がある場合

イジング模型の交換確率

- 左：等間隔
- 右：調整後
- 調整方法 (Hukushima,2000)
- 交換確率一定がよいとは限らない．(Trebst,2006)

交換確率の温度依存性



最近の方法論としての発展

- 交換法の**弱点**：沢山のマルコフ連鎖を同時並列に.
  $\Longrightarrow$ 超並列計算機時代なら OK?
- 温度点の数: $O(\sqrt{N})$.
  - できれば温度間隔は離したい.
  - でも離れていると，交換確率は減少して，失敗する.
- Jarzynski 等式の利用
  - すぐ交換しない...

Ballard-Jarzynski, PNAS(2009).

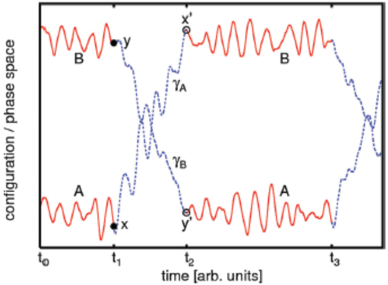


Fig. 1. Schematic depiction of RENS. The solid red lines depict intervals of equilibrium sampling in replicas A and B, and the dashed blue lines represent work simulations.

遷移確率：$(X, Y) \Longleftrightarrow (Y', X')$

$$W(Y', X'|X_0, Y_0) = \min\left(1, e^{-\omega_A - \omega_B}\right)$$

$$\omega_A(X \to X') = \beta' E(X) - \beta E(X') - \log J_A(X \to X')$$

$$\omega_B(Y \to Y') = \beta E(Y') - \beta' E(Y) - \log J_B(Y \to Y')$$

Outline

マルチカノニカル法 (B.A.Berg)

- ギブス分布 $\exp(-\beta E(\mathbf{X}))$ 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。

$$P_{\mathrm{multi}}(\mathbf{X}) \propto \frac{1}{g(E(\mathbf{X}))}$$

- エネルギーの周辺分布 $H(E) = \sum_{\mathbf{X}:E(\mathbf{X})=E} g(E)P_{\mathrm{multi}}(\mathbf{X}) =$ 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。**
  - 一般に，エネルギーが高い状態の数は多くて，見つけるのは簡単.
  - エネルギーが低くて，確率が大きいところが知りたい.
- 問題は、どのように $g(E)$ を事前に知るか。

マルチカノニカル法2

- 逐次的学習:
  t ステップ時の重み $1/g^{(t)}(E_k)$ とエネルギー頻度分布 $H^{(t)}(E_k)$ から、次の重みを推定。

$$\frac{1}{g^{(t+1)}(E_k)} = \frac{1}{g^{(t)}(E_k)} \frac{1}{H^{(t)}(E_k)}$$

- 期待値の計算：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**の確率変数 $A(X)$ の期待値が再重率法により求まる.

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

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る.

マルチカノニカル法のパラメータ設定

- 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.
- Wang-Landau 流 (前処理重要派)
  - Broad histgram, Flat histgram, Transition matrix MC ...
  - Wang-Landau 法 (2001)：
    1. 修正因子を用いて，状態更新ごとに状態密度を変更：

$$
\begin{aligned}
g(E) &:= g(E)f, \qquad (f > 1) \\
H(E) &:= H(E) + 1
\end{aligned}
$$

    2. $H(E)$ が一定になれば，修正因子 f の更新： f factor: $f^{(t+1)} := \sqrt{f^{(t)}}$
  - g(E) は状態密度に収束する
  - 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

- 緩和の促進の観点から
  ターゲットの遅い緩和は，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
	Mixing !!	
Low temperature	⇐ temperature ⇒ 交換法	High temperature High entropy
⟹ 遅い緩和		⟹ 速い緩和

Outline

数え上げ問題

- 状態を表す多次元ベクトル:$\mathbf{X} = \{X_1, X_2, \cdots, X_N\}$
- その要素の間に満たすべきたくさんの条件:

  $\Longrightarrow$ **すべての条件を満たすベクトルの数を知りたい**
- 例えば…
  - 非線形連立方程式の解の個数
  - 制約充足問題やパズルの解の個数
    - K-SAT 問題, グラフ彩色問題…, e.g.

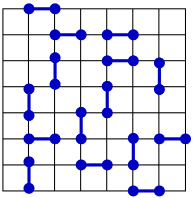
$$X_i = \{0, 1\}, \qquad (i = 1, \cdots, N)$$
$$X_1 + X_3 + X_{15} = 1(mod2), \qquad X_3 + X_5 + X_8 = 0, \cdots$$

    - ラテン方陣，魔方陣, N クイーン問題…
- MCMC での問題
  - 確率分布の規格化定数を評価する問題に帰着できる.
  - エントロピーや自由エネルギーの評価の問題
  - MCMC で評価できるのは，基本的に期待値.

例：ダイマー敷き詰め問題

格子上に長さ k の棒を互いに重ならないように
おく：

k=2 の例



統計力学：確率分布の導入

- $\mathbf{X}$: 棒の配置
- $E(\mathbf{X})$: 棒の数

$$P(\mathbf{X}) = \frac{\exp\left(+\beta E(\mathbf{X})\right)}{Z(\beta)}$$

- 液晶のもっとも単純なモデル：
- $g(E)$:棒を E 個おく場合の数
- $g(E)$ がわかれば熱力学関数がわかる.
- 沢山つめるのは結構むずかしい.

例：ダイマー敷き詰め問題

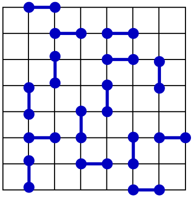
格子上に長さ k の棒を互いに重ならないようにおく：

統計力学：確率分布の導入

- $\mathbf{X}$: 棒の配置
- $E(\mathbf{X})$: 棒の数

$$P(\mathbf{X}) = \frac{\exp\left(+\beta E(\mathbf{X})\right)}{Z(\beta)}$$

k=2 の例



- 液晶のもっとも単純なモデル：
- $g(E)$:棒を E 個おく場合の数
- $g(E)$ がわかれば熱力学関数がわかる.
- 沢山つめるのは結構むずかしい.

6×6 **の厳密数え上げ:** (Krauth)

0	1
1	72
2	2340
3	45456
4	589158
5	5386752
6	35826516
7	176198256
8	645204321
9	1758028568
10	3538275120
11	5185123200
12	5409088488
13	3885146784
14	1829582496
15	524514432
16	81145872
17	5415552
18	90176

状態数の求め方–統計力学的数え上げ法–

- 規格化定数 $Z(\beta)$: $Z(\beta) = \sum_X \mathrm{e}^{-\beta E(X)}$.
- 状態数 $g(E)$: エネルギーが E である状態 X の数

$$Z(\beta) = \sum_X \sum_E \delta(E, E(X)) \mathrm{e}^{-\beta E(X)} = \sum_E g(E) \mathrm{e}^{-\beta E}.$$

- 頻度分布 $H_\beta(E)$ at β MCMC で計算できる量:

$$H_\beta(E) = \langle \delta(E, E(\{X\})) \rangle = \frac{g(E) e^{-\beta E}}{Z(\beta)} \Longleftrightarrow g(E) = \frac{H_\beta(E)}{e^{-\beta E} / Z(\beta)}$$

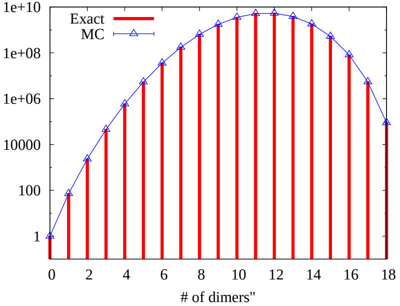
- 反復方程式: $Z(\beta)$ and $g(E)$ by using $H_\beta(E)$

$$g(E) = \frac{\sum_m H_{\beta_m}(E)}{\sum_m e^{-\beta_m E} / Z(\beta_m)}, \Longleftrightarrow Z(\beta_m) = \sum_E g(E) e^{-\beta_m E},$$

熱力学積分法と基本的には同じ

ダイマー問題への応用

$k=2$ ダイマーの状態数



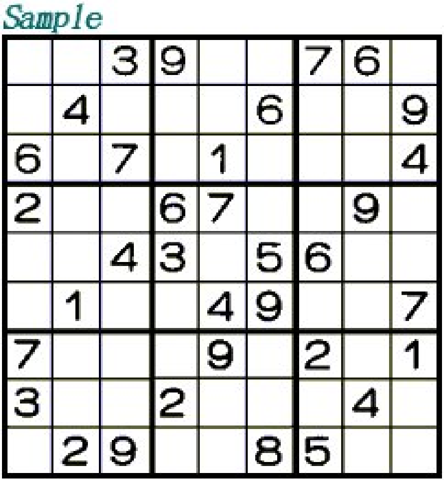
- 全体の定数倍は不定.
- $E=0$ は，一通りしかない.

- MCMC ステップ数は，10^5 程度.
- 10^9 くらいは求まっている.
- すべての状態の尽くしているわけではない.
- この程度の精度 (有効数字 2 桁) なら簡単に出せる.

数独問題の個数の N 依存性

- 初期ヒントなしでの全数独の問題数:$\mathcal{N}(N) = g(E = 0, N)$
- $N = 2$ ときの厳密解:
  $g(E = 0, 2) = 288$
- $N = 3$ のときの厳密解,
  6670903752021072936960
  $\sim 6.67 \times 10^{21}$
- $N \geq 4$ は厳密解はない.
- $\mathcal{N}(N) \leq \mathcal{N}_{\mathrm{LatinSquares}}(N)$
- 他の計算方法はおそらくないだろう.
- $N \to \infty$ の漸近系?

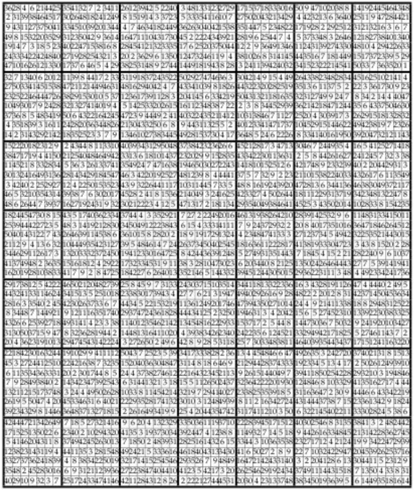
数独の例



数独問題の個数の N 依存性

- 初期ヒントなしでの全数独の問題数:$\mathcal{N}(N) = g(E=0, N)$
- $N=2$ ときの厳密解:
  $g(E=0,2)=288$
- $N=3$ のときの厳密解,
  6670903752021072936960
  $\sim 6.67 \times 10^{21}$
- $N \geq 4$ は厳密解はない.
- $\mathcal{N}(N) \leq \mathcal{N}_{\text{LatinSquares}}(N)$
- 他の計算方法はおそらくないだろう.
- $N \rightarrow \infty$ の漸近系?

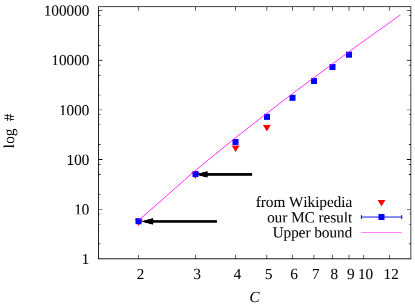
7 数独問題



数独問題の個数の N 依存性

- 初期ヒントなしでの全数独の問題数:$\mathcal{N}(N) = g(E=0,N)$
- $N=2$ ときの厳密解: $g(E=0,2) = 288$
- $N=3$ のときの厳密解, 6670903752021072936960 $\sim 6.67 \times 10^{21}$
- $N \geq 4$ は厳密解はない.
- $\mathcal{N}(N) \leq \mathcal{N}_{\mathrm{LatinSquares}}(N)$
- 他の計算方法はおそらくないだろう.
- $N \to \infty$ の漸近系?

問題の個数の N 依存性



- △: $(N^2!)^{N^2}$.
- line: Upper bound of Latin square
- ▽: from Wikipedia

Outline

Rare Event Sampling

- **レア・イベント**: 統計的に極めて低い確率で実現する事象
  - 統計的に rare な event が物理的には重要な役割を果たすことがある.
    めったに起きないけど，起きると大変なことや大事なこと
  - 例えば... 一次転移の共存状態, 反応系の遷移状態, Glassy 系の準安定状態, 大変形する低励起状態, 大偏差統計
- 知りたいこと：
  - Rare Event の性質：まずは Rare Events を抽出して，見てみる.
  - どのくらいの頻度：その出現確率の評価する.
- モデル設計問題: 確率分布としての統計学的モデル化
  - $P(\mathbf{J})$: モデルを特徴付けるパラメーター $\mathbf{J}$ の確率分布
  - $P(\mathbf{X}|\mathbf{J})$: $\mathbf{J}$ が与えられた元での内部自由度 $\mathbf{X}$ の実現確率分布
  - $A(\mathbf{X})$: 実現した $\mathbf{X}$ のときの **“機能”**
  - $P(A)$ を知りたい．大きな (小さな)A を出す $\mathbf{J}$ は一般に Rare.

Simple sampling：普通の方法

- 多くの数値計算はランダム平均は Simple Sampling するしかない.
  1. 確率変数 $\mathbf{J}$ を確率分布 $P(\mathbf{J})$ より発生:
  2. 与えられた確率変数 $\mathbf{J}$ のもとで**何かしらの量** $A(\mathbf{J})$ を計算：
     (例えば熱期待値 $\Longleftarrow$ **拡張アンサンブル法が貢献したのはここ**)
  3. これらを繰り返して，物理量を**ランダム平均** $\overline{A(\mathbf{J})}$
- 物理量 $A(\mathbf{J})$ の確率変数 $\mathbf{J}$ に関する分布を評価したいときには,

$$P(A) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\delta(A - A_J), \quad M \text{ はランダム平均の標本数}$$

  - ランダム系の性質は平均値だけでなくて、分布そのものに表れているはず.
  - **典型的な A を与える確率変数 $\mathbf{J}$ は? 逆に変な (Rare)$\mathbf{J}$ は?**
  - 分布の裾の統計性質はどうなっているか?
    - 精度は，$1/M$ で決まる．つまり rare な event は rare なまま...

A guiding function $\tilde{P}(A)$

- 確率変数 $\mathbf{J}$ に関するマルコフ連鎖を構成:不変分布 P_{sim}
$\Longrightarrow P_{\mathrm{sim}} \sim 1/\tilde{P}(A)$, $\tilde{P}(A)$ は真の分布関数 $P(A)$ の近似関数.
- 詳細つり合い条件：

$$\frac{1}{\tilde{P}(A(\mathbf{J}))} W(\mathbf{J} \to \mathbf{J}') = \frac{1}{\tilde{P}(A(\mathbf{J}'))} W(\mathbf{J}' \to \mathbf{J})$$

- 例えば，遷移確率 $W(\mathbf{J} \to \mathbf{J}')$: $W(\mathbf{J} \to \mathbf{J}') = \min \left(\frac{\tilde{P}(A(\mathbf{J}))}{\tilde{P}(A(\mathbf{J}'))}, 1 \right)$
- A の頻度分布は $H(A) \propto P(A)/\tilde{P}(A)$ なので，ほぼ一定に出現.
- もちろん，よい近似関数 $\tilde{P}(A)$ は知らない.
- 仮定すると失敗するかもしれないので，学習しよう!

確率変数 J に対する Importance Sampling

1. **外側ループ**(確率変数 J の Sampling)
   1. **内側ループ**(与えられた確率変数 J の元での計算)
      - 注目する事象を指定する量の計算. e.g. 固有値
      - ここが素早く計算できることが望ましい
2. 確率変数の更新
   1. ちょっとだけ変化させた新しい確率変数 $\mathbf{J}'$ を作成
   2. $A(\mathbf{J}')$ を計算して，Metropolis 的に accecpt(reject) する

- $P_{\mathrm{sim}}(A)$ を A についての定常分布として,

$$P_{\mathrm{accept}} = \min\left\{\frac{P_{\mathrm{sim}}(A(\mathbf{J}))}{P_{\mathrm{sim}}(A(\mathbf{J}'))}, 1\right\}$$

- $P_{\mathrm{sim}}(A) \sim P^{-1}(A)$ としたい.

確率変数 J に対する Importance Sampling

1. **外側ループ**(確率変数 J の Sampling)
   1. **内側ループ**(与えられた確率変数 J の元での計算)
      - 注目する事象を指定する量の計算. e.g. 固有値
      - ここが素早く計算できることが望ましい
2. 確率変数の更新
   1. ちょっとだけ変化させた新しい確率変数 $\mathbf{J}'$ を作成
   2. $A(\mathbf{J}')$ を計算して，Metropolis 的に accecpt(reject) する

- $P_{\mathrm{sim}}(A)$ を A についての定常分布として,

$$P_{\mathrm{accept}} = \min\left\{\frac{P_{\mathrm{sim}}(A(\mathbf{J}))}{P_{\mathrm{sim}}(A(\mathbf{J}'))}, 1\right\}$$

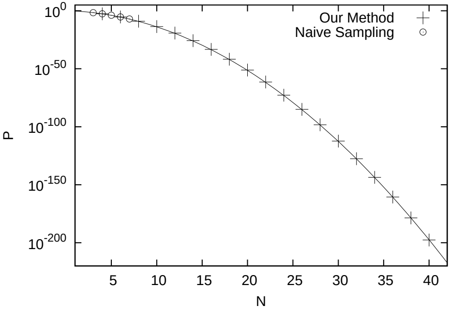
- $P_{\mathrm{sim}}(A) \sim P^{-1}(A)$ としたい.
- 我々は multicanonical 的に $P_{\mathrm{sim}}(A)$ を学習 (Wang-Landau 法) する.

応用例

固有値が全て負になる行列の出現確率

Saito-Iba-Hukushima(arXiv:1002.4499)

- 行列要素がガウス分布に従うランダム行列：



行列サイズ

- 他の応用例
- 誤り訂正符号のビットエラー分布: キラーノイズの検出, (Iba-Hukushima, ’08)
- スピングラスの分配関数ゼロ点の分布: 相転移, (Matsuda-Nishimori-Hukushima, ’08)
- ランダムイジングの帯磁率分布: Griffiths 特異性, (Hukushima-Iba,’08)
- 他にもいろいろある…

Outline

まとめ

- 拡張アンサンブルを基本としたマルコフ連鎖モンテカルロ法
  - 提案からもうすぐ 20 年が経って，現在は応用モード.
    - 特に，生体分子系.
  - 他の分野でも使えるはず.
  - その間に，パラメータの設定方法は整ってきた.

- 拡張アンサンブル法の応用例
  - 大きな数を勘定する
  - 稀な事象をサンプルする

まとめ

- 拡張アンサンブルを基本としたマルコフ連鎖モンテカルロ法
  - 提案からもうすぐ 20 年が経って，現在は応用モード.
    - 特に，生体分子系.
  - 他の分野でも使えるはず.
  - その間に，パラメータの設定方法は整ってきた.
  - 一方で，数理は整備されていない．なぜなら，議論しているのは物理学者なので。。。
    - そもそも収束するのか？
    - なぜうまくいくのかは「証明」はない.
- 拡張アンサンブル法の応用例
  - 大きな数を勘定する
  - 稀な事象をサンプルする