

力学系における「珍しい現象」のモンテカルロ・サンプリング

統計数理研究所 伊庭幸人¹

1 研究の背景と従来の研究

動的なモンテカルロ法は、統計物理では、熱平衡のギブス分布からのサンプリングに用いられるのが普通である。しかし、状態空間において「極端に偏って局在する分布」のサンプリング法であるという観点からみると、目的に応じたアンサンブルを人為的に定義することで、さまざまな「珍しい現象」を扱うことが可能になる。「大偏差を扱う普遍的方法」としてモンテカルロ法を見るわけである。

微分方程式や離散時間の写像で表わされる動的な現象についてこの見方を適用すると、まず出てくるのは、適当に粗視化または雑音を入れた周期解や両端固定の「経路」「運動方程式の解」の全体をアンサンブルと考え、それをサンプリングするという考え方である。具体的には、Doll et al. [1] (エノン・アイルズ系) や Zimmer [4] の先駆的工作、Chandler のグループの提唱している “transition path ensemble” [3], 本研究会でも発表のあった川崎・佐々 [2] の研究、などがある (アンサンブルのサンプリングでなく、1本の軌道を最適化で求めることに重点のある研究はもっと沢山ある、たとえば [7, 8, 9] など)。筆者もこの種の考え方に以前から興味を持って来た [5, 6]。これらの研究の多くでは、ある経路が実現する確率の対数にマイナスをつけたものをその経路の仮想的な「エネルギー」とし、それで定義されるカノニカル・アンサンブルをモンテカルロ法でサンプリングする、というのが基本になっている。決定論的な場合は、雑音を加えた系の極限として経路に確率を与えるか、確率的な系に変形してから扱うことになる。

2 ここで考えること

ここでは別のことを考える。もともとの系が決定論的な力学系であれば、「初期条件」の関数として、さまざまな量、たとえば「有限ステップのデータで求めたリアプノフ数」「何ステップで決められた範囲から脱出するか」などが決まるはずである。そこで、これらの量について「珍しい」現象、たとえば「長い時間与えられた領域に留まるが、結局は脱出する」に興味がある場合、初期条件の関数としてのこれらの量 (にマイナス符号をつけたもの) を「エネルギー」に見立ててギブス分布を考えることで、珍しい現象を生じる「初期条件のアンサンブル」を考えることができる。これを、モンテカルロ法でサンプリングすることで、力学系の大偏差的性質を知ることができるのではないか。

¹E-mail: iba@ism.ac.jp

「周期解」や「両端固定の解」の探索については、どうしても軌道全体のアンサンブルを考える必要があり、この方法は使えないが、他にも知りたいことはたくさんあるはずである。動的モンテカルロ法の立場からいうと、これは、力学系のシミュレーションを「エネルギー」の計算のための「サブルーチン」(内側ループ)として呼ぶことに相当する。すなわち、「エネルギー」 E について定義された逆温度 β の「カノニカル・アンサンブル」に対して、メトロポリス法を適用した場合、以下の「外側ループ」を繰り返すことになる。

1. 初期条件を現在の値 $\mathbf{x}$ とちよつと変えたものを $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta$ とする。
 Δ は原点对称な密度から発生させた乱数。
2. $\mathbf{x}'$ を初期値として力学系のシミュレーション(内側ループ)を有限ステップ行い、「珍しさを表わす量」 $-E(\mathbf{x}')$ を計算する。
3. 新しく計算された「珍しさを表わす量」の値 $-E(\mathbf{x}')$ を現在の値 $-E(\mathbf{x})$ と比較し、一様乱数 $0 < R \leq 1$ を生成して受理か棄却かを判定する。

$$R < \frac{\exp(-\beta E(\mathbf{x}'))}{\exp(-\beta E(\mathbf{x}))} \quad \text{なら } \mathbf{x} \text{ を } \mathbf{x}' \text{ で置き換える。}$$

β を大きくすれば、珍しい現象を与えるような初期条件の上に集中した分布が得られる。対応するミクロカノニカル分布に結果を換算することで、珍しい現象を生じる初期値の密度を「珍しさ」の度合いを横軸にして求めることもできるはずである。

多くの場合には、遅い緩和を克服するために、これに、レプリカ交換モンテカルロ法やマルチカノニカル法のような拡張アンサンブル系の手法を組みあわせることになる。次第に β を大きくして行けば、アニーリングによって、極端に「珍しい」軌道を与える一個の初期値を求めることもできるが、ここでは、多数の初期値の集合を求める方に重点を置きたい。

3 ジュリア集合

本来は、初期状態の空間自体が高次元の場合に挑戦すべきであろうが、ここでは、手慣らしとして、ジュリア集合²の近傍をサンプルする問題を扱う。具体的には、一変数の複素写像

$$z = z^2 + C \tag{1}$$

について、「長い時間かけて結局は $|z| > 2$ となってしまうような初期値 x をサンプルせよ」という問題を考えよう。 $z = x$ からはじめて、式(1)をiterateしたとき、「 n 回目に初めて $|z| > 2$ となる」とする。このとき、初期値 x (複素数)の「エネルギー」 $E(x)$ (珍しさの度合)の定義の仕方としては、(1) $E(x) = -n$ 、(2) $E(x) = -\log n$ などが考えられる。(1)では $P \sim \exp(-\beta E) = \exp(\beta n)$ となるのに対し、(2)では $P \sim \exp(-\beta E) = n^\beta$ となる。どちらの場合も、規定の回数 N たっても抜けないときは、たとえば $E(x) = 0$ のように、 E を大きい値に設定する。以上のもとで、レプ

²時間無限大でも無限遠に抜けない初期値の集合を充填ジュリア集合、その境界をジュリア集合という。

研究会報告

リカ交換法（パラレル・テンパリング）[11]を用いて、異なる逆温度 β の分布を並列に交換しながらシミュレートした。

メトロポリス法を用い、最高温度の系では毎回 $|z| \leq 2$ の円内の一様分布から候補を選び、それより低温では、現在のサンプルを中心とする小さな円の中の一様分布から候補を選んでいる。円の半径 δ は、温度によって異なり、予備的なrunで、適応的に決めている。図1に $E(x) = -\log n$ の場合の結果の例をしめす。規定の回数 N たっても抜けないときは、 $E(x) = 0$ としている。 $C = (-1.0, 0.0)$ 。力学系のシミュレーション（内側のループ）の打ち切り回数は $N = 800$ 。逆温度 β を0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0, 10.0としてレプリカ交換法で計算を行った。最初の5000MCSを捨てたが、その間、1000MCSごとに、候補の受理の割合を規準にして、候補を選ぶ円の大きさを4回調整している。

4 マンデルブロ集合の縁

また、この考えを拡張すれば「珍しい現象を起こす初期値」の代わりに「珍しい現象を起こすパラメータ」の空間を探索することもできる。すなわち、パラメータの空間（適当な測度が入っているとすると）の上に、上記と同様にしてアンサンプルを定義し、それを動的モンテカルロ法でサンプルするわけである。

この考えのテストとして、同じ写像 $z = z^2 + C$ について、パラメータ C の空間の探索、すなわち「マンデルブロ集合の縁のサンプリング」を試みた。前節とパラレルに、パラメータ C （複素数）の「エネルギー」（珍しさの度合）を考える。ここでは初期値 x は $x = C$ に固定して考え、「パラメータ C のとき、初期値 $x = C$ からスタートして、 n 回目にはじめて $|z| > 2$ となる」とする。前と同様に、(1) $E(C) = -n$, (2) $E(C) = -\log n$ などの選び方が考えられる。図2に $E(C) = -\log n$ の場合の結果の例をしめす。力学系のシミュレーション（内側のループ）の打ち切り回数は $N = 800$ 、規定の回数 N たっても抜けないときは、 $E(x) = 0$ としている。変数の取りうる値の範囲は $|C| \leq 4.5$ に制限している。メトロポリス法を用い、最高温度の系では毎回 $|C| \leq 4.5$ の円内の一様分布から候補を選び、それより低温では、現在のサンプルを中心とする小さな円の中の一様分布から候補を選んでいる。レプリカ交換法では $\beta = 0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0, 10.0$ とした。この例では最初の5000MCSを捨て、その間、1000MCSごとに、候補の受理の割合を規準にして、候補を選ぶ円の大きさを4回調整している。結果の例を図2に示した。実際には「ジュリア集合」より、こちらを先に研究したので、いくらか詳しい結果が得られている。

- レプリカ交換法を使うとうまくいくが、使わないとだめだった。ただし、これはメトロポリス法で候補を選ぶ分布に裾の長い分布を使うと違うかもしれない（川崎光宏氏の本研究会での講演でも裾の長い分布で候補を提示していた）³

- 1. のエネルギーだと「2相共存」のようになる。すなわち、 β の値が大きくなって、サン

³候補を選ぶ円の半径 δ の設定法が恣意的なので、それにもよるかもしれない。図2では、測定時の δ は、高温から（交換あり）0.4, 0.4, 0.4, 0.035, 0.025, 0.025, 0.025, 0.025, 0.025, (なし) 0.4, 0.4, 0.1, 0.4, 0.07, 0.05, 0.141, 0.025, 0.035. 対応する受理率(%)は（交換あり）98, 98, 76, 5.5, 1.8, 0.8, 0.9, 0.2, 0.0, (なし) 98, 97, 50, 67, 0.5, 1.2, 0.3, 0.5, 0.3.

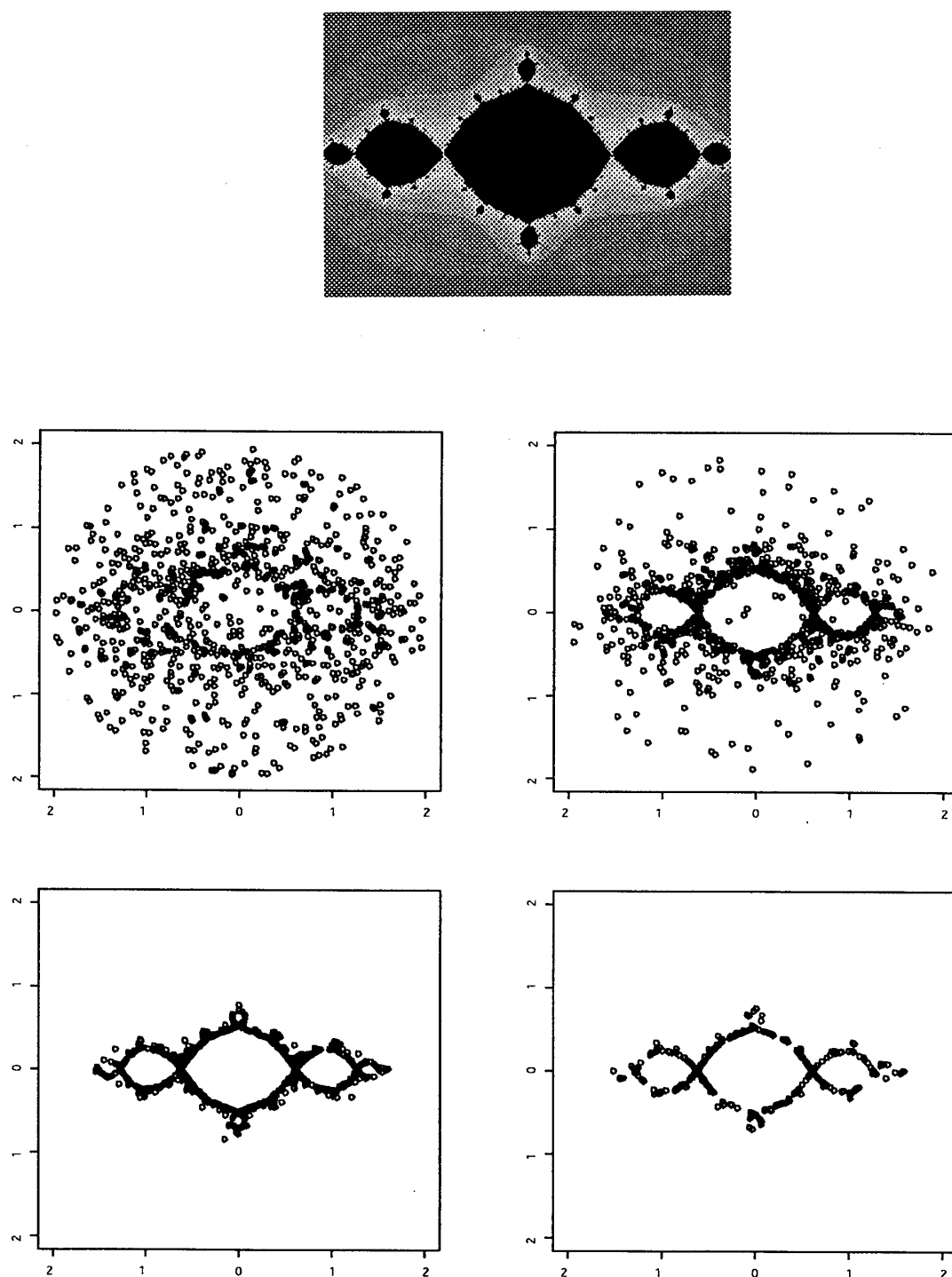


図 1: ジュリア集合. 一番上は, ウェブ上のソフト [10] で書いた絵. 下の4つは, 左上, 右上, 左下, 右下の順に $\beta = 1.0, 2.0, 5.0, 10.0$. いずれも, 測定は100000MCS で100MCS ごとに x の位置を複素平面上にプロットした.

研究会報告

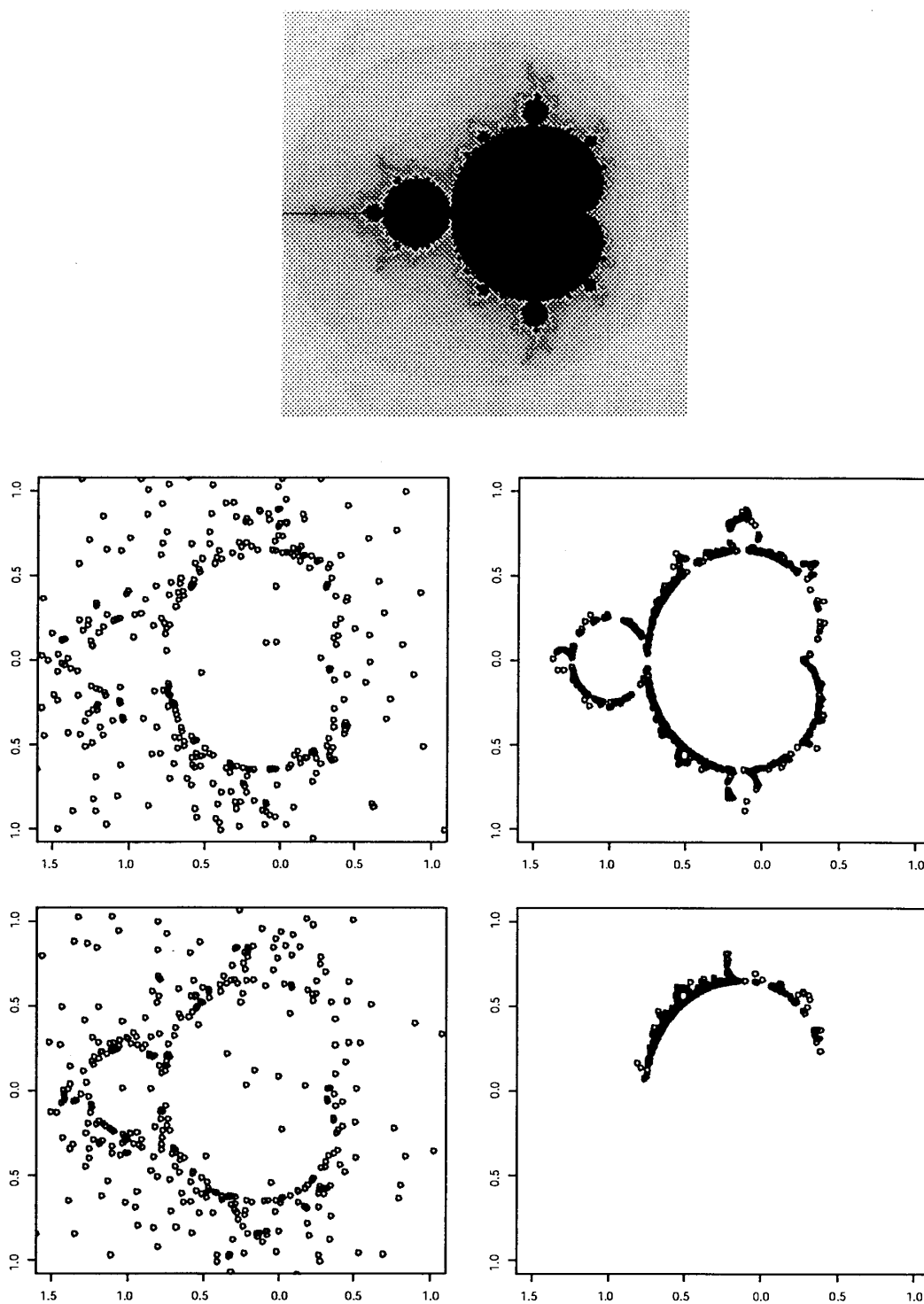


図 2: マンデルブロ集合の縁. 一番上は, ウェブ上のソフト [10] で書いた絵. 下の4つは, 左上, 右上がそれぞれ $\beta = 1.0, 3.0$ に対応. 左下, 右下はそれぞれ直上と同じ β で, レプリカ交換を行わない場合. いずれも, 測定は 100000MCS で, 100MCS ごとに x の位置を複素平面上にプロットしてある.

ルの多くがマンデルブロ集合の「縁」に集まるようになって、それから遠く離れたサンプルが全体に散在する。この場合に、動的モンテカルロ法の仮想時間についてのダイナミクスは間歇性を示す。2. のエネルギーで、同様な振る舞いが見られるかどうかは微妙だが、少なくとも 1. ほどは顕著でない。

5 問題点と展望

本稿の範囲では、あくまで「練習」ということで、系統的に探索を行った場合との効率の比較等を行っていない。複素力学系を扱ったのは単なる思い付きであるが、対応する実 1 次元の場合より滑らかなポテンシャルが得られているのではないかという気もする（確認したわけではない）。力学系に関するほかの問題でも変数の値を複素変数に拡張する方法は有効かもしれない。

「初期値のアンサンブル」（「パス断片のアンサンブル」）の物理的・数理的意味については、川崎光宏氏も講演で触れられように、はっきりしない点がある。たとえば、エネルギーを有限時間のリアプノフ数（力学系が訪れる点での導関数の絶対値の積）の対数で定義した場合に意味がわかりやすいのは「初期値を不変分布で重み付けした経路の集合」で、これは本稿のタイプの方法をそのまま適用した場合に、自然に求まるものとは違うように思われる。

逐次モンテカルロ法 [12, 13] の利用も興味ある話題であるが、筆者はまだ良い結果を得ていない。有限時間のリアプノフ数の対数をエネルギーとして重み付けした経路のサンプリングに適用したことがあるが、リアプノフ数の小さいところでは、雑音を加えても粒子同士が離れていかない。雑音の加え方によってはうまくいくこともあるかもしれない。

- [1] Cho, A. E., Doll, J. D.; Freeman, D. L. (1994): The construction of double-ended classical trajectories, *Chemical Physics Letters*, vol. 229, no. 3, pp.218-224.
- [2] Kawasaki, M. and Sasa, S. (2004): Statistics of unstable periodic orbits of a chaotic dynamical system with a large number of degrees of freedom, *nlin.CD/0408013*
- [3] Chandler group (David Chandler) のサイト : <http://gold.cchem.berkeley.edu/index.html>.
- [4] Zimmer, M.F. (1995): Monte Carlo updating of space-time configurations : New algorithm for stochastic, classical dynamics, *Physical Review Letters*, 75, pp.1431-1434.
- [5] 伊庭 幸人 (1997): 物性研究所研究会「物性研究における計算物理学」(1997 年 6 月), <http://www.ism.ac.jp/~iba/houkoku3e.html>, で「物性研だより」に載った報告が見られる。
- [6] 伊庭 幸人 (2000): 無時間の思想, 基研研究会「認知・行動の基底としての力学と論理」報告, 「物性研究」71-2 (2000 年 11 月号).
- [7] Moore, C. (1993): Braids in classical dynamics, *Physical Review Letters*, 70, pp.3675-3679.
- [8] Nemoto, K. (1988): Metastable states of the SK spin glass model, *J. Phys. A*, 21, L287.
- [9] Passerone, D., Ceccarelli, M., and Parrinello, M. (2002): A concerted variational strategy for investigating rare events, *cond-mat/0212619*.
- Passerone, D. and Parrinello, M. (2001): Action-derived molecular dynamics in the study of rare events, *cond-mat/0104204*.
- [10] Joyce, D. E. , Julia and Mandelbrot Set Explorer, <http://aleph0.clarku.edu/~djoyce/julia/explorer.html>
- [11] Iba, Y. (2001): Extended Ensemble Monte Carlo, *International Journal of Modern Physics C*, 12, pp.623-656
- [12] Doucet, A., de Freitas, N., Gordon, N. (eds.) (2001): *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*, Springer.
- [13] Iba, Y. (2001): Population Monte Carlo algorithms, *Transactions of the Japanese Society for Artificial Intelligence*, Vol.16 No.2, pp.279-286. (e-print, *cond-mat/0008226*).