

## 第5章 モンテカルロシミュレーション

### 5.1 はじめに

沢山のものが集まった物理的システムについて、統計物理学では、確率的なものとして記述することで、多くの興味深い結果を得ることに成功している。

モンテカルロ法は、そのような確率的システムに対するユニークな計算手法として発展してきた。現在では、ものだけでなく事の集まりである情報システムも含めて、幅広い対象に対する強力なツールとして用いられている。

本章では、最初に、疫病の確率的な伝染モデル(有向浸透現象モデル, パーコレーション)を例に、確率変数の期待値をサンプル平均として近似的に評価するモンテカルロシミュレーションの具体例を示し、その数理的な仕組み(重み付きモンテカルロ法)について説明する。その後、相互作用する磁性体の研究やパターン認識などの情報処理に利用されている統計物理学のイジングモデルを例に、マルコフ連鎖を利用したサンプル作成を行うマルコフ連鎖モンテカルロ法について、その代表的なアルゴリズムと実装について説明する。本章で扱うモンテカルロシミュレーションは、for 文を含むアルゴリズムが必要になる。とくに Python を用いる学生は素朴にコードを書くと計算速度が著しく遅くなるため、for 文を避けるコードを意識して書くこと。

### 5.2 疫病の確率的な伝染モデル

疫病の伝染をモデル化することを考える。簡単化のため、人の移動はないと考えて、図 5.1 のように、人が 1 列に並んだ状況を考え、場所  $i$  にいる人が疫病にかかった状況を、状態変数  $s_i$  を使っ

て、 $s_i = 1$ 、また、疫病でない状態を  $s_i = 0$  で表す。さらに時間進行も離散的であるとする。

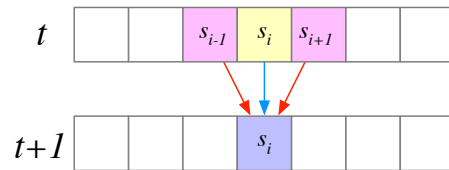


図 5.1: 疫病の確率的な 1 次元格子伝染モデル。

特に重要なこととして、疫病にかかった人が、確率的に、近隣の人を感染させたり治ったりすると仮定する。したがって、次の時刻  $(t+1)$  の場所  $i$  の人の感染状況  $s_i(t+1)$  は、前の時刻  $t$  での場所  $[i-1, i, i+1]$  での感染状況  $[s_{i-1}(t), s_i(t), s_{i+1}(t)]$  にのみ依存して確率的に決まる。簡単化のために、左右を区別しないことにすると、この条件付き確率は、両隣との和  $n_i(t) = s_{i-1}(t) + s_{i+1}(t)$  と  $s_i(t)$  に依存する形になる:  $P(s_i(t+1)|s_i(t), n_i(t))$ 。この時、 $(s_i, n_i)$  の組み合わせは  $2 \times 3$  通りあり、それぞれの場合で、次時刻に疫病にかかる確率を決定すると疫病の確率的伝染モデルが完成する。ただし、自分と近隣が疫病でない場合  $(s_i, n_i) = (0, 0)$  は、疫病になることはないので、その場合の確率は必ず 0 になる。

$$\begin{aligned} P(s_i(t+1) = 1 | (s_i(t), n_i(t)) = (0, 0)) \\ = P(1 | (0, 0)) = 0 \end{aligned} \quad (5.1)$$

この時、このモデルには非常に特殊な状態が存在する。それは、疫病にかかっている人が全くいない状態で、この状態に一旦なるとずっとその状態を維持する。つまり、システムはこの特殊な状態から脱出することができない。そのため、このような状態を吸収状態という。

まとめると、この疫病の確率的伝染モデルは、 $(s_i, n_i) = (0, 0)$  以外の 5 つの場合に次時刻に疫病にかかる確率  $P(1 | (s_i, n_i))$  をパラメータとした確率的時間発展をするシステムで、疫病が全くない吸収状態をもつ。なお、この例のように、有限の過去の状態のみ依存して、次状態が確率的に決定する確率過程は、マルコフ過程(マルコフ連鎖)と呼ばれている。

例えば、遷移確率を次のように1つのパラメータ  $p$  を用いて定義する<sup>1</sup>。

$$\begin{aligned} P(1|(0,1)) &= p^2, \\ P(1|(0,2)) &= P(1|(1,0)) = p^2(2-p^2), \\ P(1|(1,1)) &= p^2(p^3-2p^2-p+3), \\ P(1|(1,2)) &= p^2(2-p)(p^3-2p^2+2) \quad (5.2) \end{aligned}$$

この時、システムに含まれる人の数（システムサイズ）が十分大きければ、 $p_c = 0.6447\dots$  を境に挙動が変わり、 $p < p_c$  ならば、十分時間が立つと吸収状態になり、 $p > p_c$  ならば、いつまでも疫病の人がいることが知られている。つまり、 $p_c$  を境にシステムの振る舞いが大きく変わる。このようにシステム全体の振る舞いが変わる現象を統計物理学では、相転移現象と呼ぶ。この例では、吸収状態になる相と、そうでない状態である活性状態相の間の相転移現象で、特に吸収相転移と呼ばれることもある。実は、このモデルの時間方向を下向き方向と解釈すると、確率的に存在する隙間を通して物質の中を液体が重力に引かれ下方向に浸透する現象のモデルとして解釈することができ、有向浸透現象モデルと言われている。特に、 $p = p_c$  の相転移点近傍の振る舞いは、種々の量がベキ則に従うなど興味深い振る舞いを示し、臨界現象と呼ばれる。臨界現象は、特定のモデルだけではなく、似たモデル全てに共通する性質（ベキ則）があり、普遍性を持つと言われる。そのため、このモデルについては、非平衡臨界現象の雛形モデルとして、多くの研究がある [2]。

### 5.2.1 サンプル状態列

このモデルでは、時間順に状態を並べた状態列として、様々なものが確率的に出現することになる。以下では、状態列のサンプルを確率的に作る方法を考える。

この例では、次状態への遷移確率が局所的に定義されているので、時間の順にサンプル状態を確

率的に作成できる。つまり、現在の状態  $\{s_i(t)\}$  がある時に、次の時刻の状態  $\{s_i(t+1)\}$  は、(5.2) のような遷移確率  $P(s_i(t+1)|(s_i(t), n_i(t)))$  にしたがって確率的に決定される。例えば、 $s_i(t) = 0, n_i(t) = 2$  なら、確率  $P(1|(0,2))$  で  $s_i(t+1) = 1$  に、確率  $P(0|(0,2)) = 1 - P(1|(0,2))$  で  $s_i(t+1) = 0$  にすることで、次時刻のサンプル状態  $\{s_i(t+1)\}$  を確率的に作成することができる。この手続きは、具体的には、次の擬似乱数を使うことで実装できる。

### 乱数

ある区間にでたらめ（一様）に値をとる数を乱数と呼ぶ。乱数同士は定義より独立であるが、ルールに基づいて乱数を作成するとそのような事は原理的にはできない。しかし、實際上、ほぼ独立に見えるような擬似乱数の作り方がいくつか提案されている。例えば、C 言語関数 xor128 は、区間  $[0, 2^{32} - 1]$  の擬似乱数を作成する<sup>2</sup>。

```
uint32_t xor128(void) {
    static uint32_t x = 123456789;
    static uint32_t y = 362436069;
    static uint32_t z = 521288629;
    static uint32_t w = 88675123;
    uint32_t t;
    t = x ^ (x << 11);
    x = y;
    y = z;
    z = w;
    return w = (w ^ (w >> 19)) ^ (t ^ (t >> 8));
}
```

この擬似乱数を区間の長さ ( $2^{32}$ ) で割る事で、区間  $[0, 1]$  の一様分布に従う疑似確率変数を作成することができる。現在、擬似乱数の研究は非常に進んでおり、標準的な関数として言語に内包されていたりライブラリー等の形で使用できるのでそれらの利用を勧める。

### 遷移確率に従ったサンプル状態の作成方法

コイン投げで見られるように、ある確率で表、そうでなければ裏になるような試行を、一様分布

<sup>1</sup>有向ボンド浸透をモデル化した Domany-Kinzel オートマトンの2ステップ遷移確率 [1]

<sup>2</sup>本コードは unsigned long が4バイトである C 言語処理系を前提にしている。また、x, y, z, w は種と呼ばれる。ここでは適当な初期値を設定してある。

に（擬似的に）従う変数（擬似乱数からで作成）を使って再現することができる。

例えば、確率  $\alpha$  で  $s_i(t+1) = 1$  とし、確率  $(1-\alpha)$  で  $s_i(t+1) = 0$  とするためには、

#### アルゴリズム 1

1. 区間  $[0, 1]$  の擬似一様乱数  $r$  を作る。
2. もし、 $r \leq \alpha$  ならば、 $s_i(t+1) = 1$  とし、そうでなければ、 $s_i(t+1) = 0$  とする。

この方法を場所ごとに繰り返し、次時刻のサンプル状態  $\{s_i(t+1)\}$  を作れるので、時刻  $t=0$  から順にサンプル状態列を得ることができる。例えば、図 5.2 は (5.2) の遷移確率をもつモデルにおいて、 $p = p_c$  として、1 人だけ疫病にかかった初期状態から作成したサンプル状態列である。

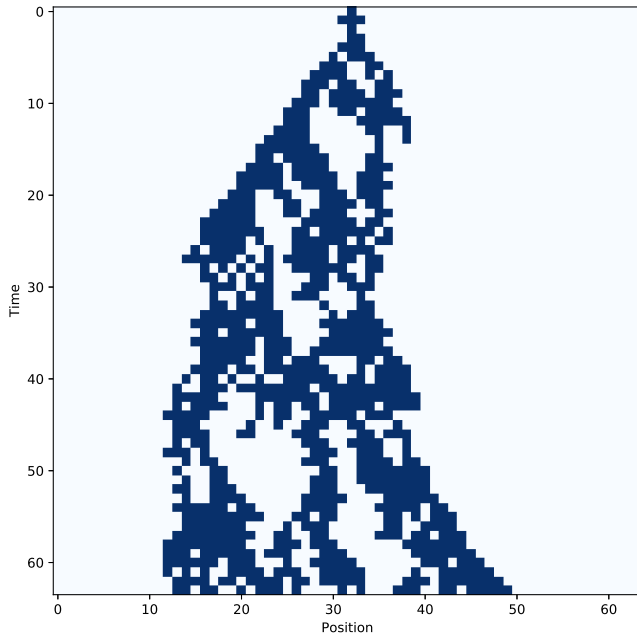


図 5.2: 疫病の確率的な伝染モデルの時間発展例。縦軸は時間、横軸は人の場所を表し、疫病にかかっている人の場所を濃青色で表している。場所の数は 64 で、時刻  $t=0$  に中心の 1 人だけが疫病にかかっている人がいる設定にしている。遷移確率は (5.2) で  $p = p_c$  とした。

#### 病人数のサンプル平均

時刻  $t$  で疫病にかかっている人数は、 $m(t) = \sum_i s_i(t)$  のサンプル値平均は、サンプル数が無限の極限では、確率変数である  $m(t)$  の期待値に収束する。逆に言えば、有限のサンプルから計算したサンプル値平均は、確率変数  $m(t)$  の期待値の近似と考えることができる。このように、確率変数の期待値をサンプル値平均として近似的に評価する方法を、モンテカルロ法と呼ぶ。また、モンテカルロ法の実行をモンテカルロシミュレーションという。今の場合、アルゴリズム 1 を用いることで、疫病の確率的な伝染モデルに従ったサンプル状態列を作成することができているので、時刻  $t$  のサンプル状態  $\{s_i(t)\}$  を用いて、確率変数  $m(t)$  の期待値の近似的評価として、 $m(t)$  のサンプル値平均を計算することができる。

図 5.3 は、サンプル数  $M$  を 100、10000 とした場合の (5.2) に従うモデルでの各時刻の  $m(t)$  のサンプル値平均とその分散の平方根を同時にプロットしている。このように、十分なサンプル数を用いたサンプル値平均は、時刻  $t$  で疫病にかかっている人数の期待値  $\langle m(t) \rangle = \sum_i \langle s_i(t) \rangle$  に収束していきそうなのがわかる<sup>3</sup>。

#### 問題 1

1. 遷移確率 (5.2) で  $p = 0.7$  に従ったサンプル状態列を 10 個作成し、各サンプルに対する各時刻での  $m(t)$  を同時にプロットせよ。ただし、システムサイズは 64、最終時刻は 256 までとし、初期状態は、中心の 1 人だけが疫病にかかっているとす。また、境界条件は周期的とする。つまり、 $s_{65}(t) = s_1(t)$ 、 $s_0(t) = s_{64}(t)$  と定義する。
2.  $p = 0.64, 0.66, 0.68, 0.7$  の場合で、各時刻の  $m(t)$  のサンプル数  $M = 10000$  のサンプル値平均をプロットせよ。ただし、システムサイズ、最終時刻、初期状態、境界条件は前問と同じとする。

<sup>3</sup> $\langle \cdot \rangle$  は統計物理学での期待値を表す記号である。

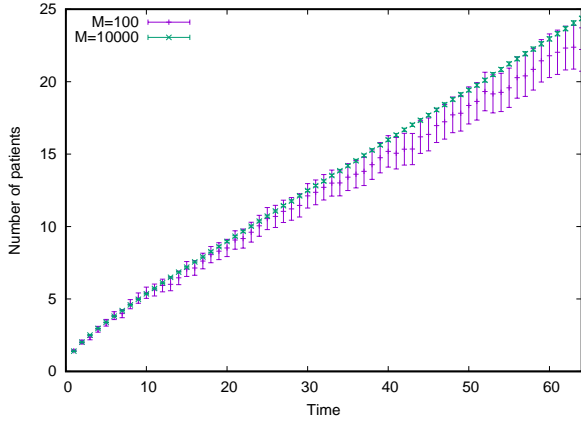


図 5.3: 疫病の確率的な伝染モデルの病人数のサンプル値平均。横軸は時間とし、場所の数は 64 で、時刻  $t = 0$  に中心の 1 人だけが疫病にかかっている人がいる設定にしている。遷移確率は (5.2) で  $p = 0.7$  とした。サンプル数  $M$  は、100, 10000 としている。

### 5.3 期待値のモンテカルロ計算

この節では、確率変数の期待値計算について、改めて、サンプル値平均による確率的近似計算としてのモンテカルロ法を定式化する。

システムが状態  $X$  になる確率を  $P(X)$  とする。その場合、状態  $X$  に依存する量  $f(X)$  の期待値  $\langle f(X) \rangle$  は次式で定義される<sup>4</sup>。

$$\begin{aligned} \langle f(X) \rangle &\equiv \sum_X f(X)P(X) \\ &\text{又は} \equiv \int dX f(X)P(X), \end{aligned} \quad (5.3)$$

ここで、後者は状態変数  $X$  が連続変数だった場合を表す。

状態の総数が少ない場合は全ての  $X$  について  $f(X)P(X)$  を足し上げる事で計算することができるが、例えば、 $X = (x_1, x_2, \dots, x_D)$  のような多成分の場合、多重和となり全列挙による計算は困難になる。

<sup>4</sup>例えば、 $f(X)$  は状態が  $X$  の時の対象からの出力値等。

$$\begin{aligned} \langle f(X) \rangle &\equiv \sum_{x_1} \cdots \sum_{x_D} f(x_1, \dots, x_D)P(x_1, \dots, x_D), \\ &\text{又は} \equiv \int \cdots \int \prod_{i=1}^D dx_i f(x_1, \dots, x_D)P(x_1, \dots, x_D). \end{aligned} \quad (5.4)$$

実際、状態変数  $X$  の各成分  $x_i$  が  $K$  種類の値を取りうる時、状態総数は  $K^D$  となり、多重度  $D$  に対して指数関数的に増加する。連続変数の場合も同様である。例えば、 $D$  重積分の場合、それぞれの積分区間を  $K$  個ずつに分割すると積分領域は  $K^D$  個の積分要素に分割される。これは多重度  $D$  に対して指数関数的に大きくなるため、その全列挙は困難である。従って、多重度が大きな場合、全列挙しない方法が必要である。

元々、各状態  $X$  が出現する確率が  $P(X)$  として与えられていたので、素朴に、確率  $P(X)$  に従って生成されたサンプル集団  $\{X_t\}$  の平均として、期待値を近似的に求めることができるように思われる。

$$\langle f(X) \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{t=1, \dots, M} f(X_t). \quad (5.5)$$

このような計算手法を重み付きモンテカルロ法と呼ぶ<sup>5</sup>。

(5.5) の右辺のサンプル値平均が真の期待値に収束することは容易に示す事ができる。サンプル値平均は確率変数の集合  $\{X_t\}$  によって定義されているのでこれ自身も確率変数と見なす事ができる。従って、その期待値を計算すると次の様になる。

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{M} \sum_{t=1, \dots, M} f(X_t) \right\rangle &= \frac{1}{M} \sum_{t=1, \dots, M} \langle f(X_t) \rangle \\ &= \langle f(X) \rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

分散も同様に計算すると、

$$\frac{1}{M} [\langle f^2(X) \rangle - \langle f(X) \rangle^2] \quad (5.7)$$

<sup>5</sup>確率的な方法であるため、カジノで有名な都市にちなんだ名前が付いている。

となることがわかる。従って、サンプル数  $M$  が大きな極限で期待値  $\langle f(X) \rangle$  に収束する事が示せた。もう少し正確に言えば、中心極限定理により、重み付きモンテカルロ法で求めたサンプル平均値が、サンプル数  $M$  が大きい極限で、次の平均と分散をもつガウス分布に収束する事がわかる。

$$\begin{aligned} \text{平均 } \langle f(X) \rangle, \\ \text{分散 } \frac{1}{M} [\langle f^2(X) \rangle - \langle f(X) \rangle^2]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

この結果からモンテカルロ法の誤差はサンプル数  $M$  が大きくなると  $\frac{1}{\sqrt{M}}$  で減少していくことがわかる。

このように、モンテカルロ法は期待値の近似的な値を出すだけで、その誤差はサンプル数と共に減少していくが速度は早くはない。そのため、メリットがないように思われるが、上で述べたように全列挙が困難な場合、つまり、多重度が高い場合は誤差が多重度によらない事が大きなメリットになる。

これまでは、期待値計算の手法として、モンテカルロ法を紹介してきたが、通常 **の多重積分や多重和**も、適時、確率分布  $P(X)$  に相当するものを設定すれば、モンテカルロ法で計算可能となる。例えば、多重和の状態総数や多重積分の積分範囲の大きさがわかっている場合は、 $P(X) = 1/(\text{状態総数})$ 、又は、 $1/(\text{積分範囲の大きさ})$  に設定することができ、モンテカルロ法で多重和や多重積分が評価できる。

上で述べたように (5.8) のガウス分布の分散のルートがモンテカルロ法の精度を意味するが、与えられた確率分布による期待値を解析的に得ることは一般的にはできず、(5.8) 自身の評価は通常できない。そこで、(独立な) モンテカルロ計算の平均値の集合  $\{\bar{f}_i\}$  から、近似的に分散を推定することで精度の評価を行うことがしばしば行われる。その場合、期待値の推定値とその精度は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \text{推定値 } \bar{f} &\equiv \frac{\sum_{i=1}^{N_M} \bar{f}_i}{N_M}, \\ \text{精度 } &\sqrt{\frac{\sum_i (\bar{f}_i - \bar{f})^2}{N_M(N_M - 1)}}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

ここで、 $N_M$  は独立なモンテカルロ計算  $\{\bar{f}_i\}$  の回数である。

### 5.3.1 円周率の計算

以下の積分にモンテカルロ法を適用し、円周率をモンテカルロ法で求める事を考える。

$$\int_0^1 dx \frac{4}{1+x^2} = \pi. \quad (5.10)$$

いま、状態変数を区間  $[0, 1]$  に属する 1 次元実数  $X$  と考える。そして、確率密度を  $P(X) = 1$  とすれば、円周率を  $\pi = \langle 4/(1+X^2) \rangle$  のように期待値と見なすことができ、モンテカルロ法によって期待値 (円周率) を評価する事ができる。

区間  $[0, 1]$  の一様分布に従うサンプル列  $\{X_t\}$  はすでに述べたように擬似乱数から作成することができるので、それを用いて円周率をモンテカルロ法で評価することができる。

#### 問題 2

1. 円周率を求める為に (5.10) の左辺のモンテカルロ計算を行う。サンプル数は  $10, 10^3, 10^5, 10^7$  とした独立な計算を 10 回おこなうことで、(5.9) から各サンプル数での推定値とその精度を報告せよ。
2. 前問の結果を (5.8) との比をとって比較し、(5.9) の妥当性を検証せよ。

### 5.3.2 サンプルの作成方法

重み付きモンテカルロ法では、確率分布  $P(X)$  に従ったサンプルを作成する方法が必要である。その手法としては、下記で述べる直接的なものと、次節で紹介するマルコフ過程を用いるものの 2 種類がある。

#### 低次元確率分布の場合

与えられた確率分布が指数分布やガウス分布などの低次元の確率分布の場合は、一様分布等を使

う事で直接的にサンプルを作成することができる。このような手法には、逆関数法と棄却法が有名である。

**逆関数法** 区間  $[0,1]$  の一様分布に従う確率変数  $U$  とターゲット確率分布の累積分布関数  $F(x) = \Pr(X < x)$  の逆関数による次の関係式より、ターゲット確率分布のサンプルを作ることができる。

$$X = F^{-1}(U) \quad (5.11)$$

具体的には、次の手順で作成する。

#### アルゴリズム 2

1. サンプル  $v$  を区間  $[0,1]$  の一様分布に従って作成。
2. ターゲット確率分布のサンプル  $x = F^{-1}(v)$ 。

累積分布関数の逆関数が解析的に計算できる多くの 1 次元確率分布に対してこの手法は適用可能である。

**棄却法** 前提として、次のような式を満たす確率分布  $g(v)$  に従うサンプル  $v$  を生成できるとする。

$$\forall x, p(x) \leq cg(x) \quad (c > 1) \quad (5.12)$$

すると、以下の手順で、作成可能な確率分布  $g(\cdot)$  からのサンプリングを用いて、ターゲット確率分布  $p(\cdot)$  のサンプルを作成することができる。

#### アルゴリズム 3

1.  $v$  を分布  $g(v)$  に従って作成。
2. 確率  $p(v)/(cg(v))$  で  $v$  をサンプル  $x$  として採用、そうでなければ棄却。
3. 採用されるまで繰り返す。

この手法で採用されるまでに作られるサンプル候補の平均数は  $c$  回である。

#### 高次元確率分布の場合

高次元では、各成分が独立である場合や、疫病の確率的な伝染モデルのように遷移確率により、サンプルを直接的に作れる場合もあるが、一般に、サンプルを効率的に作ることは難しい。このような場合によく用いられるのが、次節で述べる確率過程の 1 種であるマルコフ過程（連鎖）を用いてサンプルを生成するマルコフ連鎖モンテカルロ法 [3] である。

### 5.4 マルコフ連鎖モンテカルロ法

#### 5.4.1 マルコフ過程とその状態の出現頻度の分布

確率過程は状態列を表す確率的モデルの一つで、特に、マルコフ過程は過去の有限ステップの状態にだけ依存して未来の状態が確率的に決定される確率過程として定義される。最もシンプルなマルコフ過程の例は、過去 1 ステップ分だけに依存する場合である。このようなマルコフ過程では、現在の状態  $X(t)$  に対し未来の状態が  $X(t+1)$  である確率、遷移確率  $P(X(t) \rightarrow X(t+1))$  によって定義される。

定義より遷移確率  $P(X \rightarrow Y)$  は次の性質を満たす。

$$\forall X, \sum_Y P(X \rightarrow Y) = 1. \quad (5.13)$$

状態空間（全状態から構成される空間）の要素である各状態に番号をつけて  $X_i$  と書く事にして、遷移確率  $P$  から次の遷移行列  $T$  を定義すると便利である:  $T_{ij} \equiv P(X_j \rightarrow X_i)$ . このような行列  $T$  は確率行列（stochastic matrix）とも呼ばれる。ここでは、遷移行列  $T$  の成分は非負であるが、特に、 $T^k > 0$ 、つまり、全ての成分が正となる整数  $k$  が存在する事を仮定する（このような性質をもつ非負行列を既約であるという）。この仮定は有限回の遷移でどの状態からスタートしても任意の状態に到達する可能性があると言う事を意味する。 $T^k$  をあたためて遷移行列とおけば、ペロン・フロベニウスの定理より、遷移行列の最大固有値

は1であり対応する固有ベクトルは1つしかなく、更にその成分は全て正、更に、他の固有値は絶対値が1未満である事が示される。今、ステップ $t$ での各状態を取る確率を成分とするベクトルを $\mathbf{v}(t)$ とすると、ステップ0からスタートして、ステップ $t$ のベクトル $\mathbf{v}(t)$ は次のようになる。

$$\mathbf{v}(t) = (T)^t \mathbf{v}(0). \quad (5.14)$$

従って、ステップ数を大きくすると固有値1に対応するベクトル $\mathbf{v}_T$ に収束することがわかる。つまり、マルコフ過程のサンプル列の分布は次の定常分布 $W_T$ に収束する。

$$W_T(X_i) \equiv \frac{(\mathbf{v}_T)_i}{\sum_i (\mathbf{v}_T)_i} \quad (5.15)$$

ベクトル $\mathbf{v}_T$ の定義式を

$$\mathbf{v}_T = T \mathbf{v}_T. \quad (5.16)$$

と書き換えると、次式（釣り合い条件）になる。

$$\forall X, \quad W(X) = \sum_Y P(Y \rightarrow X) W(Y). \quad (5.17)$$

従って、逆にこの式を満たす遷移確率に基づくマルコフ過程から、確率分布 $W$ に従うサンプル列が生成されることがわかる。

(5.17)が釣り合い条件と呼ばれる理由は、右辺が状態 $X$ に入ってくる割合、左辺が状態 $X$ から出て行く割合を表すからである（ $\sum_Y P(X \rightarrow Y) = 1$ より）。もし、状態の出現頻度がこの釣り合いを破っていても、負のフィードバックが働き、釣り合い条件(5.17)が成立するような頻度に自動的に戻ってくる。例えば、状態 $X$ が出現しすぎているということは、(5.17)で確率分布 $W$ を頻度に置き換えた時に左辺が大きいということになっている。そのような時は出て行く割合の方が大きくなるので、最終的に釣り合いがとれる方向に状態 $X$ の頻度が減少して行く。

#### 5.4.2 マルコフ連鎖モンテカルロ法のアルゴリズム

釣り合い条件(5.17)を満たす遷移確率は一つだけではない。実際、さまざまな手法が提案されて

いる。代表的なものがメトロポリス・ヘイスティングス法（メトロポリス法）やギブスサンプリング（熱浴法）である。以下では、それぞれを物理での名称であるメトロポリス法、熱浴法と呼ぶ。それぞれの手順は以下の通りである<sup>6</sup>。

##### メトロポリス法

初期状態 $X(0)$ を与え、以下の手順で状態列を更新。

**手順1** 現状態を $X(t)$ とし、次状態候補 $X'$ を確率分布 $Q(X(t), X')$ に従って作成。ただし、簡単化の為、確率分布 $Q(X, Y)$ は対称と仮定する： $Q(X, Y) = Q(Y, X)$ 。

**手順2** 次状態候補 $X'$ を確率 $\min \left[ 1, \frac{W(X')}{W(X(t))} \right]$ で次の状態（ $X(t+1) \equiv X'$ ）とし、そうでなければ、現在の状態 $X(t)$ を次の状態（ $X(t+1) \equiv X(t)$ ）とする。

**手順3** 手順1に戻る。

##### 熱浴法

初期状態 $X(0)$ を与え、以下の手順で状態列を更新。

**手順1** 現状態 $X(t) = (x_1, x_2, \dots)$ を構成する状態変数から1つをランダムに選ぶ。例えば、 $x_i$ を選んだとすると、この $i$ 番目の状態変数だけを更新する（それ以外はそのまま）。その際、更新後の値 $x'_i$ を以下の確率にしたがって決定する。

$$P(x'_i) = \frac{W(x_1, \dots, x'_i, \dots)}{\sum_{x_i} W(x_1, \dots, x_i, \dots)} \quad (5.18)$$

**手順2** 手順1に戻る。

熱浴法は、もっと一般的に書くと、結局、選んだ変数をそれ以外が与えられた時の条件付き確率に従って更新していると言える。解析的に条件付き確率が計算できる場合に広く用いられている。

<sup>6</sup>ここでは説明の為に設定を簡略化してある。



これらのアルゴリズムでは、次状態の作成に、確率分布の比だけしか必要ない。これは、確率分布が正規化をのぞいて定義されているような場合、例えば、統計物理学のモデルのようにボルツマン重みだけから確率分布（ボルツマン分布）が定義されている場合に、特に有用である。実際、ボルツマン重みの和である規格化因子は分配関数と呼ばれ、それ自身が物理量の生成関数として、非常に重要であるが、計算することは多重和の計算量の問題から困難であり、様々な計算手法の研究が現在もなされている。

### 問題 3

1. メトロポリス法の遷移確率が次の詳細釣り合い条件を満たす事を証明せよ。

$$\begin{aligned} & \forall X, \forall Y \text{ に対して} \\ & P(X \rightarrow Y)W(X) = P(Y \rightarrow X)W(Y). \end{aligned} \quad (5.19)$$

2. 熱浴法の遷移確率が詳細釣り合い条件を満たす事を証明せよ。
3. 遷移確率が詳細釣り合い条件 (5.19) を満たす場合は、釣り合い条件 (5.17) が成立する事を証明せよ。

### 5.4.3 マルコフ連鎖モンテカルロ法で注意すべき点

マルコフ過程を用いてサンプルを生成するとき、各サンプルは過去のサンプルに依存して確率的に生成されてきたので、当然、サンプル同士に統計的な相関がある。通常、有限個しかサンプルは生成できないので、相関が強い場合は、実質的な独立なサンプル数が少なくなる。(5.8) の分散の分母は統計的に独立なサンプル数なので、モンテカルロ計算の精度は相関が強くなると悪くなる。その為、相関の強さを確認しながら計算を進めることが必要である。もちろん、相関を弱める手法の研究も進んでいる<sup>7</sup>。

<sup>7</sup>一般的にはレプリカ交換法などのアンサンブルを拡張するタイプの方法がいくつか提案されている [3, 5]。

## 5.5 イジングモデル

統計物理は多数の要素からなる系の性質を対象とする物理学の理論の 1 つである。ボルツマンなど多くの研究者により、特に平衡系の性質に対する強力な理論が構築されている。その成果は、近年、物理現象だけではなく、ニューラルネットワークやネットワークコミュニティなど、多数の要素からなる一般的なシステムの解析にも応用されるなど、様々な分野で活用されている。

統計物理での重要な概念の理解には理論モデルが有用である。その中でもイジングモデルは各要素が相互に影響する最も基本的なモデルであり、統計物理では極めて重要なモデルとなっている。また、近年注目されている機械学習分野でもボルツマンマシンと呼ばれ基礎的な計算モデルとして用いられている。以下では、イジングモデルのシミュレーションにマルコフ連鎖モンテカルロ法を適用する方法についてのべる。

### 5.5.1 エネルギー

イジングモデルは多数の素子から構成されるシステムである。各素子の状態を表す変数  $s_i$  は、 $\pm 1$  の値のどちらかをとる。そして、システムのエネルギー  $E$  は以下の形の相互作用の総和になっている。

$$E(S) \equiv - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} s_i s_j \quad (5.20)$$

ここで、 $\langle i, j \rangle$  は相互作用対  $(i, j)$  を、 $J_{ij}$  は  $s_i$  と  $s_j$  の間の相互作用の強さを決める相互作用係数である。

統計物理の理論によると、周りの環境とのエネルギーのやりとりがあると、システムの状態  $S = \{s_i\}$  は環境の温度  $T$  によって支配される次のボルツマン分布（カノニカル分布）に従う。

$$P(S) \equiv \exp(-E(S)/k_B T) / Z \quad (5.21)$$

ここで、 $k_B$  はボルツマン定数。また、 $Z$  は規格化因子で分配関数と呼ばれ、

$$Z = \sum_S \exp(-E(S)/k_B T) \quad (5.22)$$



$$F = -k_B T \log Z \quad (5.23)$$

という形で自由エネルギー  $F$  を定義する。以下、簡単化の為、ボルツマン定数  $k_B = 1$  とする。また、 $\exp(-E(S)/k_B T)$  をボルツマン重みと呼ぶ。

したがって、状態変数による物理量  $A$  の期待値は以下の式で定義される。

$$A(T) \equiv \sum_S A(S) P(S) \quad (5.24)$$

$$= \sum_S A(S) \exp(-E(S)/T) / Z \quad (5.25)$$

$$\equiv \langle A(S) \rangle \quad (5.26)$$

ここでは、記号  $\langle . \rangle$  は、統計物理で用いられる期待値を表す記法である。

### 5.5.2 トーラス上のイジングモデルの相転移現象（臨界現象）

一般的に、要素数が無限大の極限（熱力学的極限）では、システムのコントロールパラメータ（イジングモデルでは温度）を変えると、システム全体の性質が突然切り替わる現象が現れる。システム全体の性質が本質的に同じである領域を相と呼び、それが突然、切り替わるこの現象を相転移現象と呼ぶ。イジングモデルの研究により、特に、相転移現象の1種である臨界現象に関する理解が非常に進んだ。特に2次元イジングモデルは臨界現象を示す最も簡単なモデルとして重要であり、以下で取り上げることにする。

### 5.5.3 対称性の自発的破れ

ドーナツ形状（トーラス）の表面に貼付けたグリッドを考える（図5.4参照）。グリッドの格子点の座標を  $(x, y)$  ( $0 \leq x, y \leq (L-1)$ ) とすると、ドーナツ形状より格子点  $(L, y)$  は  $(0, y)$  と、 $(x, L)$  は  $(x, 0)$  と同一点になる（周期的境界条件）。この各格子点にイジング素子（イジングスピン）が1つずつあり、上下左右とだけ相互作用をしているとする。特に相互作用定数  $J$  が正で全て同じである場合は2次元強磁性イジングモデルと呼ばれる。

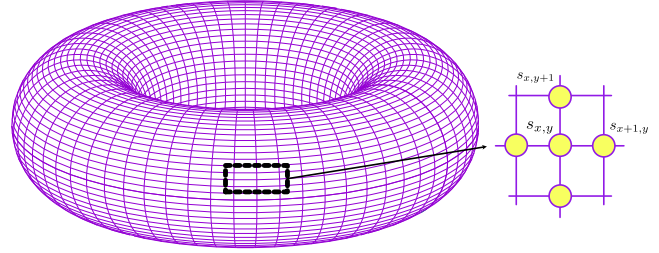


図 5.4: トーラス上のイジングモデル。各格子点上のイジングスピンが上下左右の4つの格子点上の各イジングスピンと相互作用している。

強磁性イジングモデルは全てのイジングスピンの符号を反転させてもエネルギーが変わらないという対称性をもつ。エネルギーが変わらないのでボルツマン分布による状態の出現確率は全反転でも同じである。つまり、ある状態とそれを全反転した状態は同じ確率で出現する。一方で、温度を下げていくと、エネルギーが低い状態の出現確率がボルツマン分布の式から上がることがわかる。したがって、温度が非常に低くなると、全てのイジングスピンの符号が揃った状態が出現することになる。しかも、上に述べたように、対称性があるので、そのような状態は2つある。

しかし、環境とのエネルギーのやりとりは局所的である為、状態の変更は局所的にしかおきず、全反転するような状態に変化する為には途中でエネルギーが大きくなる場所を通る必要がある。その為、低温では片方の状態からもう片方の状態に移移することはほぼ起きない。このようにもともとあった対称性が勝手に破れたような現象を自発的対称性の破れという。実際、2次元イジングモデルは、熱力学的極限である温度以下で自発的対称性の破れが起きることが証明されている。

さらに、対称性が自発的に破れた相への相転移現象も興味深い。例えば、相転移が起きる温度（臨界温度）では、ちょうどイジングスピンの揃った始まるギリギリのところで、図5.5にあるように、様々なスケールのイジングスピンの揃ったクラスターが自己相似的（フラクタル）に現れることが知られている。

自発的な対称性の破れをみる為に磁化  $m$  と呼

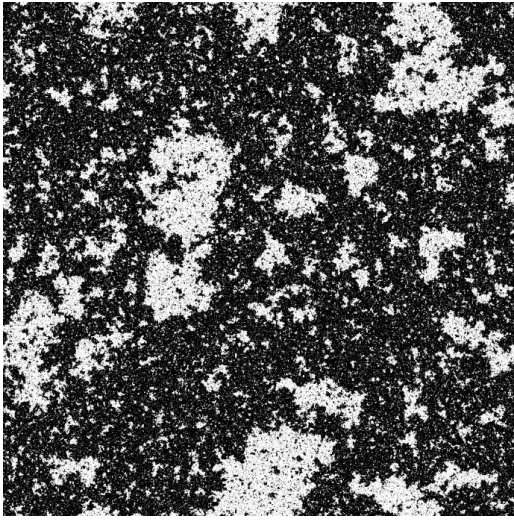


図 5.5: 臨界温度でのトーラス上のイジングモデルの状態例。イジングスピンの値が+1になっている場所を黒く塗っている。システムサイズは  $L = 2048$ 。

ばれる以下の物理量を考える。

$$m = \frac{1}{N} \left| \sum_i s_i \right| \quad (5.27)$$

ここで、 $|\cdot|$  は絶対値を表し、 $N$  はイジングスピン数を表す。有限系では対称性より絶対値をつけない場合はこの量の期待値は常に 0 になるが、絶対値をつけることで揃ったイジングスピンが多い場合は大きくなるので、対称性の破れを有限系でも見ることができる。

#### 5.5.4 イジングモデルのメトロポリス法

以下の手順 (1 Monte Carlo Sweep(MCS) と呼ぶ) で次の状態  $S(t+1)$  を確率的に作成する。

手順 1 ランダムに格子点を 1 つ選ぶ。

手順 2 選んだ格子点の状態変数  $s$  をフリップしたものを次状態候補  $s'$  とする。フリップとは、 $s = 1$  なら  $-1$  に、またはその逆の操作を意味する。

手順 3 区間  $[0,1]$  の一様乱数  $r$  を作成し、もし、

$$r \leq \min \left[ 1, \frac{P(\cdots, s', \cdots)}{P(\cdots, s, \cdots)} \right] \quad (5.28)$$

ならば  $s$  をフリップする。それ以外は何もしない。

手順 4 以上の手順を総格子点数の回数だけ行う。

ここでは、手順 2 でランダムに格子点を選んだが、これを格子を規則的に 1 巡するものに置き換えても良い。例えば、端から順番に更新しても良い。この場合も、格子を一巡 (1MCS) するごとに、状態を見れば、詳細釣り合いを満たすからである。

#### 問題 4

トーラス上の強磁性イジングモデル  $J_{ij} = J = 1$  ( $i, j$  は相互作用対) を考える。システムサイズは  $L \times L$  とする。

1. イジングモデルの熱浴法の手順を書け。
2. マルコフ連鎖モンテカルロ法のサンプル列内の相関を見る為に、初期状態の影響が消える様子をグラフを用いて示せ。観察する量は各ステップでの磁化。ただし、温度  $T$  は  $z = \exp(2/T) - 1 = \sqrt{2}$  の解、システムサイズは  $L = 64$  とし、初期状態  $S(t=0)$  は全てのイジングスピンの値が 1 とする。特に、メトロポリス法、熱浴法それぞれでシミュレーションを行い、それらの結果を比較すること。
3. 磁化の期待値について、温度とシステムサイズへの依存性をモンテカルロ法により求めて報告せよ。ただし、 $z$  は区間  $(1.2, 1.5]$  内に均等に 12 点以上、システムサイズは  $L = 12, 16, 24, 32, 48, 64$  とし、各モンテカルロ計算でのサンプリング数はトータルで  $10^6$  MCS 以上 (例:  $10^5$  MCS を 10 セット) とする。また、初期値の影響が残らないように、問題 (2) の結果を参考に、最初の (十分な) ステップを平均値の計算には含めないようにすること。
4. (3) の計算結果に基づき、システムサイズが大きくなった極限での磁化の割合の振る舞いを議論せよ (特に相転移が起きる温度とその近傍での振る舞いについて)。

## 5.6 おわりに

本章では数値計算手法としてのモンテカルロ法のさまざまな性質については証明などはせず、簡単に紹介だけをした。例えば、収束性などについて詳しく知りたい場合は、参考文献 [3] などを参考にされたい。

また、今回、取り上げなかったモンテカルロ法のアルゴリズムも多くある。特に、連続的な確率変数に対するマルコフ連鎖モンテカルロ法のアルゴリズムとしては、素粒子物理学での連続場の理論モデルのモンテカルロシミュレーションのために考案されたハイブリッド（ハミルトニアン）モンテカルロ法がよく用いられている。これについては、パターン認識などの機械学習分野での応用も多く、参考文献 [4] に詳しい。さらに、イジングモデルの 1 種で相互作用にランダムなフラストレーションがあるスピングラスモデルや不連続転移を示すモデルなど、マルコフ連鎖を用いてもサンプリングが困難な場合によく用いられる拡張アンサンブル法（レプリカ交換法等）についても取り上げなかった。これについては、最近の講義録 [5] を参考文献として上げておく。

冒頭に述べたように、モンテカルロ法は多数の要素からなる確率的なシステムの研究には欠かせないものとなっている。このような多数の要素からなるシステムは物理では多体系と呼ばれ、素粒子から物質、宇宙までのスケールを超える研究対象となっている。多体系では、各要素の振る舞い（相互作用）は単純であってもシステム全体としては、相転移現象などに見られる、相互作用から非自明な現象が創発し、興味深い研究の対象となっている。このような多体系の特性に関するアンダーソン博士の *More is different* の気持ちを、モンテカルロシミュレーションを通して、多くの人に知っていただければと思う [6]。

## 参考文献

- [1] E. Domany and W. Kinzel: “Equivalence of Cellular Automata to Ising Models and

Directed Percolation,” Phys.Rev.Lett., Vol. 53, No. 4, pp. 311 (1984).

- [2] M. Henkel, H. Hinrichsen, and S. Lübeck: Non-Equilibrium Phase Transitions. Volume 1: Absorbing Phase Transitions, Springer (2008).
- [3] 伊庭 幸人, 種村 正美, 大森 裕浩, 和合 肇, 佐藤 整尚, 高橋 明彦: 計算統計 II マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺 (統計科学のフロンティア 12), 岩波書店 (2005 年).
- [4] C.M. ビショップ: (日本語版) パターン認識と機械学習, 丸善出版 (2012).
- [5] 福島 孝治: モンテカルロ法の基礎と応用: 計算物理学からデータ駆動科学へ, 物性研究・電子版, Vol.7, No.2., pp. 072214 (2018 年).
- [6] 原田 健自: 一般書籍「数理工学の世界」 第 3 章「沢山からできている世界」, 日本評論社 (2019 年).

[原田健自]