確率の流れをあやつるモンテカルロ法
――詳細つりあいの破れとリフティング

諏 訪 秀 磨
東京大学大学院理学系研究科
suwamaro@phys.s.u-tokyo.ac.jp

藤 堂 眞 治
東京大学大学院理学系研究科
wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

マルコフ連鎖モンテカルロ法は多自由度系に対する強力な数値積分手法として，さまざまな分野で広く用いられている．この手法では，積分変数を状態変数とみなして，状態を逐次的に更新するシミュレーションを行う．このとき状態遷移が確率的であることがモンテカルロ法の特徴である．十分長時間のシミュレーションにより，任意の分布（例えばボルツマン分布）からの状態サンプリングが可能となる．

ここで確率的な状態遷移を，状態空間中でのランダムウォークとみなすことができる．遷移確率は，通常，**詳細つりあい**を満たすように決められる．これは状態空間に正味の確率流がないこと，つまりは平衡状態からのサンプリングに対応する．このときの時間発展ダイナミクスは可逆である．

マルコフ連鎖モンテカルロ法では，ランダムウォークのおかげで，長時間待てばどんな複雑な分布からもサンプリングができるが，悩ましいことに，そのランダムさゆえに計算効率が悪くなってしまう．ダイナミクスが拡散的であるため，行ってほしいところになかなかたどり着けないのである．

計算効率を上げるには，逆説的ではあるが，ランダムウォークのランダム性をうまく抑える必要がある．つまり，詳細つりあいを破ることで，状態空間に確率の流れを作り出し，その流れに沿って，効率的にサンプリングを行えばよい．たとえ詳細つりあいを破っても，分布の収束先（定常分布）を不変に保つことができれば，非平衡定常状態からのサンプリングにより，平衡状態を用いたときと同じ積分計算を実行できるのだ．

このような動機のもと，20世紀末頃から，詳細つりあいを満たさない不可逆なダイナミクスが数学的に議論され始めた．典型的な可逆ダイナミクスに対して摂動的に可逆性を破ると，必ず分布の収束が速まることが証明された．また状態空間が1次元などの特殊な場合，収束のスケーリングが大幅に改善されることが示された．しかしながら，物理的に興味のある多体問題に対して不可逆モンテカルロ法が実用的かどうかは，長い間わかっていなかった．

そのような状況の中，ようやくここ10年ほどで，実用的かつ効率的な不可逆モンテカルロ法が開発された．中でも，状態空間を拡張し，その拡張された空間で確率の流れを導入するアプローチ――**リフティング**――がさまざまな系に用いられている．例えば**イベント連鎖モンテカルロ法**では，どの粒子を動かすかという自由度も状態変数として扱い，一般的な相互作用粒子系に対して効率的なサンプリングを実現する．また，量子系における粒子数保存則などのような制約が状態空間にある場合，**ワームアルゴリズム**がよく用いられている．この手法の拡張版として，状態空間に向きの自由度を加えた有向ワームアルゴリズムが開発された．向きのない場合と比べて，計算効率を大幅に改善することができる．

このようにリフティングはさまざまな系に適用することができ，幅広い分野でますます重要となるであろう．今後，不可逆モンテカルロ法の基礎理論の発展と共に，さらなる効率的なアルゴリズムが生まれてくると期待される．

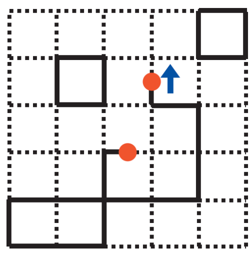
――用語解説――

詳細つりあい：
状態空間に正味の確率の流れがないことを表す条件．この条件を満たすと，物理的には平衡状態のシミュレーションを行っていることになる．一見すると不可欠な条件に思われるが，モンテカルロ法を積分手法と捉えると，詳細つりあいは必要条件ではない．

リフティング：
状態変数に自由度を追加し，拡張された状態空間で確率の流れを作り出すアプローチ．空間の拡張の仕方は問題に応じてさまざまであり，どのような自由度を追加するかが鍵となる．

イベント連鎖モンテカルロ法：
相互作用ポテンシャルの影響で粒子の動きが止められるイベントを逐次的に発生させる手法．粒子が全く動かない非効率な過程をなくすことができ，一般的な2体相互作用系で効率的なサンプリングを実現する．

ワームアルゴリズム：



制約のある状態空間を効率的にサンプリングするモンテカルロ法のひとつ．図は実線のループ制約を破るキンク（赤点）のランダムウォークによる状態更新を表す．ランダムウォークのランダム性を抑えることで計算効率が改善する．