

平成 22年 6月 9日現在

研究種目：特別領域研究

研究期間：2006～2009

課題番号：18079004

研究課題名（和文） 確率的アルゴリズムの統計力学への応用と開発

研究課題名（英文） Applications and development of probabilistic algorithms to statistical mechanics problems

研究代表者

福島 孝治 (HUKUSHIMA KOJI)

東京大学・大学院総合文化研究科・准教授

研究者番号：80282606

研究成果の概要（和文）：情報統計力学の多くの問題では数が非常に多い確率を計算する必要があるが、そのための数値計算技法の開発を行った。稀に起こる事象を効率よくサンプルする方法や確率最大を与える状態の効率よい探索方法を提案し、研究した。

研究成果の概要（英文）：Large-scale probabilistic calculations are required in information processing based on statistical mechanics. In this project, we proposed some probabilistic algorithms that are efficient numerical methods for sampling rare events, for searching states with high probabilities and for enumerating possible states.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	4,100,000	0	4,100,000
2007年度	8,100,000	0	8,100,000
2008年度	5,800,000	0	5,800,000
2009年度	3,900,000	0	3,900,000
年度			
総計	21,900,000	0	21,900,000

研究分野：統計物理

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：相転移、計算物理、確率アルゴリズム

## 1. 研究開始当初の背景

大自由度確率分布からのサンプリングや期待値計算のように、大自由度の確率モデルを扱う方法が近年注目されている。一つは、マルコフ連鎖モンテカルロ法の最近の発展であり、もう一つは統計物理と情報理論で発展してきた確率伝播法である。これらの相違点を整理し、それぞれの利点を共有することは、今後の展開のために必要である。統計物理の多くの問題では大自由度確率分布であるギブス分布の期待値としてマクロな観測量は

定式化され、それを扱う汎用アルゴリズムの発展が望まれている。また、統計学では大規模データ解析の必要性が年々増しており、そこで利用可能なアルゴリズムの開発は学問の分野を超えて議論すべき課題となっている。

## 2. 研究の目的

確率的な状態更新であるモンテカルロ法と決定論的な状態更新である確率伝播法が、大規模確率分布を扱う近似的確率アルゴリズム

ムとして注目されている。これらの二種類の確率アルゴリズムは独立に研究され、様々な問題への応用を通じて相違点が明らかになってきた。本研究では、これらの確率アルゴリズムの相互的な性能評価と統計物理の問題へのさらなる展開を目的とする。さらに、確率伝搬法も含めた広い意味での確率アルゴリズムの方法論的な開発も視野に入れる。

## 2. 研究の方法

確率アルゴリズムの統計力学を含めた新たな問題への応用や新たなアルゴリズムの開発を行うために、大きく以下の2つの点を重点として研究を進めていく。

### (1) 確率アルゴリズムの新しい方法開発：

マルコフ連鎖モンテカルロ法や確率伝播法のように、大自由度確率モデルを扱う確率アルゴリズムはその柔軟性から、問題に応じて変更できる自由度が大きい。そのことを利用して、問題固有の困難点の解消法を探りながら、様々な問題に共通する汎用性の高いアルゴリズムの開発を行う。

(2) 確率アルゴリズムの統計物理系への応用：  
元来、確率伝搬法は物理での平均場近似と深く関係していたが、近年の情報理論の応用を通じて、特にアルゴリズムとしての側面が大きく発展してきた。その成果を再び物理系や関連する問題へ応用することは新たな展開になると考えられる。また、視点の異なった応用例を模索していくことも方法論の発展として、大変重要であると考えており、新たな展開も模索していく。

## 4. 研究成果

本研究期間中に得られた主な結果は以下のとおりである。

### (1) 二温度系への数値計算技法の提案

ランダムスピンの統計力学的な取扱いで、要素間の相互作用が確率的なランダム変数で与えられ、その元で要素が熱揺らぎを受けていると考える。その結果、二つの変数は時間スケールが分離されて、異なる熱浴と接すると考えるとランダム系を一般化した二温度系として定式化される。ランダムスピン系だけでなく、学習理論や進化の問題も広い意味ではこの範疇に入る。本研究では、この系を数値計算の方法で調べる際の一つの方法を提案した。具体的には遅い変数に対して、陽にモンテカルロ法を行うことである。これを現実的にするには速い変数の計算の加速が必要であるが、我々は確率伝搬法と組み合わせることで実現し、ある種のランダム系で実際にうまくいくことを示した。この方法は確率伝搬法が使える問題に適用は限定されるものの、ランダムスピン系を含めた広

い応用範囲がある。また、二つの変数ともに効率よく計算できるモンテカルロ法も考案し、生物進化の問題に応用することに成功した。そこでは、有限温度の性質が進化の重要な概念である頑強性の獲得に重要な役割を果たしていることを見出した。今後は、情報理論やニューラルネットワークの問題への展開が期待される。

### (2) 稀な事象のサンプリング法の提案：

「稀な事象」が統計物理や統計学において重要な役割を果たすことがたびたびある。これらを効率よくサンプルできることは、その事象の研究のために不可欠である。これまでランダムスピン系で稀な相互作用が相転移の特異性の起源である例を調べたが、新たな話題として、情報通信の誤り訂正符号の問題で大きな復号誤差を伴う通信ノイズの抽出に応用し、論文にまとめた。また、ランダム行列にも応用し、特に最大固有値がゼロになる、つまり全ての固有値が負になるランダム行列の抽出に成功し、その実現確率の行列サイズに関する漸近形を評価することができた。いずれも実現確率が  $10^{-10}$  以下の極めて稀な事象の抽出に成功している。これまでは理論的に対称性の高い問題が精力的に研究されてきたが、この成果により今後は広く一般の場合の研究に対する数値的な研究が可能になる。また、このような例題を重ねていくことで、方法として整備されてきて、化学反応のような例への展開の土台が築けた。

### (3) 一段階レプリカ対称性の破れと熱力学構造：

情報統計力学の理論的手法の一つであるレプリカ法の数理論理構造、特にレプリカ対称性の破れに関する研究に取り組んだ。これはレプリカ理論の形式が自然に熱力学構造を持つことから、熱力学的な制約条件がレプリカ理論の中に十分条件として存在することを明示的に利用している。その結果、一段階のレプリカ対称性の破れる解の具体的な構成法を提案するに至った。このことは、レプリカ対称性の破れ方に対する普遍的な性質を明らかにしただけではなく、まだ厳密解が知られていない問題に対する解の構成法の処方箋を与えていることにもなる。本研究では疎結合スピングラス模型について、具体的な解を提示し、数値計算による検証を行った。その途中に解くべき式が、キャビティ理論の導出と一致することも見出した。これにより、他の理論で陰に陽に仮定されていた前提条件のいくつかは正当化でき、また物理的な解釈を与えることができた。

### (4) アニーリング限界と交換法：

ランダムグラフ上に定義される制約充足問

題に確率アルゴリズムの一つであるモンテカルロ法を応用し、その性質を調べた。近年、確率伝搬法を基礎とした理論的研究から、あるクラスの制約充足問題では相空間の構造に相転移が起こり、それにともなって局所探索型アルゴリズムの適用限界があることが示唆されている。我々は局所探索型ではあるものの大域的な探索が可能であると予想される交換モンテカルロ法を適用し、アニーリング法との比較を行った。その結果、アニーリング法では到達できない領域で、かつ交換法では到達可能な領域が有限系で確かに存在することが確認できた。これは、交換法の有効性を示すとともに、制約充足問題、さらには物理の問題としてはガラスの平衡状態の研究への展望が開けたことになる。実際に、有限次元格子上的の同様なガラスの模型において熱平衡相転移を示唆する結果を得た。今後のガラス研究への展開も期待される。

(5) ランダムグラフ上の彩色問題の相転移：  
ランダムグラフ上の2つの隣接する頂点に同じ色を置かないように彩色する問題は典型的な制約充足問題であり、近年物理の分野でも積極的に研究されている。我々はその問題を統計力学の反強磁性ポッツモデルと対応させ、有限温度における統計力学的性質を交換モンテカルロ法により調べた。各頂点の平均結合数をパラメータとしたときに幾つかの特徴的な相が現れることが予想されていたが、我々は有限温度においてガラス相が安定に存在することを見出した。平均結合数が十分大きいところに現れるスピングラス相は、絶対零度の彩色可能—不可能転移とはずれた領域に存在することが明らかになり、また特徴的な1段階レプリカ対称性の破れた相とよく似た性質を示すことがわかった。これらはキャビティ法による近似理論により予想されていたが、直接数値計算で確認したのは我々が初めてである。

(6) 統計力学的解の個数評価法：  
最終年度には新たな確率的アルゴリズムとして、非線形多変数方程式の解の個数計算法を提案した。これは基本的にはこれまでに続けてきたモンテカルロ法によるエントロピー計算の新たな応用であるが、方程式の解からのずれをエネルギー関数としたところが新奇な点である。この方法によって、例えば平均場方程式や確率伝搬法の解の個数の情報を得ることができる。これまでに理論研究があるスピングラスの平均場方程式の個数を数値的に評価し、精度を確認することに成功した。今後は、より一般の系について調べることが可能となり、例えば確率伝播法がう

まくいかない問題の背後にある解空間の構造変化の研究にも応用が可能となる。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 19 件)

- ① A. Sakata, K. Hukushima and K. Kaneko, Noise shapes funnel landscapes with mutational robustness through evolution, *Physical Review Letters*, 査読有, 102, 2009, 14801-1-4
- ② T. Nakajima, K. Hukushima, Thermodynamic construction of a one-step replica-symmetry-breaking solution in finite-connectivity spin glasses, *Physical Review E*, 査読有, 80, 2009, 011103-1-9.
- ③ T. Nakajima, K. Hukushima, Large deviation property of the free energy of p-body Sherrington-Kirkpatrick model, *Journal of Physical Society of Japan*, 査読有, 77, 2008, 074718.
- ④ Y. Iba and K. Hukushima, Testing error correcting codes by multicanonical sampling of rare events, *Journal of Physical Society of Japan*, 査読有, 77, 2008, 103801.
- ⑤ K. Hukushima and Y. Iba, A Monte Carlo algorithm for sampling rare events: application to a search for the Griffiths singularity, *Journal of Physics: conference series*, 査読有, 95, 2008, 012005.
- ⑥ I. A. Campbell, K. Hukushima, H. Takayama, Extended scaling for Ferromagnets, *Physical Review B*, 査読有, 76, 2007, 13442.
- ⑦ I. A. Campbell, K. Hukushima, H. Takayama, Extended scaling scheme for critically divergent quantities in ferromagnets and spin glasses, *Physical Review letters*, 査読有, 97, 2006, 117202-1-4.

[学会発表] (計 61 件)

- ① 福島孝治, 佐々真一, 有限次元格子ガラス模型の熱力学相図, 日本物理学会年次大会(岡山大学), 2010年3月, 岡山.
- ② K. Hukushima, T. Tanaka, statistical mechanical enumeration of the number of possible SUDOKU grid, International meeting on "Inference, computation and spin glasses 2010", 2010年3月18日, 京都, キャンパスプラザ京都

- ③ K.Hukushima, An extended ensemble Monte Carlo study for a simple glass model, Workshop “Physics of Algorithms”, 2009年9月3日, 米国, Santa Fe.
- ④ K.Hukushima, Phase transitions in a random-graph coloring problem, Supercomputing in Solid State Physics 2009(東京大学物性研究所), 2009年2月, 千葉, 柏.
- ⑤ K.Hukushima, Extended scaling scheme and critical exponents of an Ising spin glass, JSPS Japan-France bilateral joint seminar 2008, 2008年11月, 京都.
- ⑥ 福島孝治, ランダムグラフ上の彩色問題の準安定状態, 日本物理学会秋季大会(岩手大学), 2008年9月, 岩手, 盛岡.
- ⑦ K.Hukushima, A Monte Carlo algorithm for sampling rare events, 1<sup>st</sup> international conference of the grand challenge to next-generation integrated nano-science, 2008年6月5日, 東京, みらい館
- ⑧ 福島孝治, レア・イベント・モンテカルロ法の応用, 東京大学物性研究所短期研究会「計算物理学の進展」, 2007年11月, 千葉, 柏
- ⑨ 福島孝治, 門田雄介, 数独の統計力学的研究, 日本物理学会秋季大会(北海道大学), 2007年9月, 北海道, 札幌.
- ⑩ K.Hukushima, Extended scaling scheme and its application to spin glasses, 統計力学国際会議 STATPHYS23, 2007年7月11日, Italy, Genova.

(3)連携研究者  
なし

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.maildbs.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima/wiki.cgi>

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

福島 孝治 (HUKUSHIMA KOJI)

東京大学・大学院総合文化研究科・准教授  
研究者番号：80282606

### (2)研究分担者

なし