

二見 太

東京大学大学院新領域創成科学研究科
大学院生(博士課程)

相互作用系を活用したサンプリング手法の開発

§ 1. 研究成果の概要

研究計画書のとおり第一段階である、1 台の計算機のみという単純な設定において、相互作用を含む並列な Langevin dynamics (LD) の基本的な理論・数値的挙動を明らかにした。

図 1

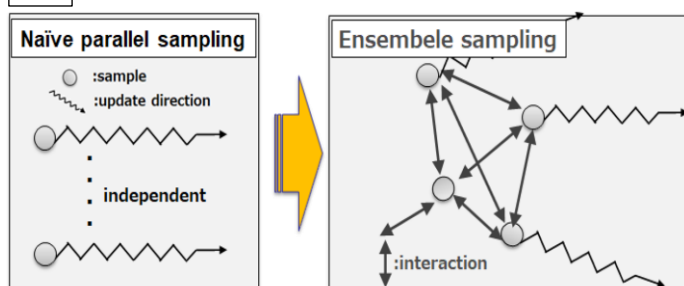


図1の左側は相互作用がない並列な LD を表しており、サンプルが独立に時間発展することを表している。右側はサンプル間に相互作用がある LD である。我々は相互作用がある場合に目的の分布に、相互作用がない場合と比べてどれぐらい早く収束するのかについて研究を行った。

図 2

$$J = \begin{pmatrix} \overbrace{\begin{pmatrix} d \\ 0 \\ -J'_{12} \\ \vdots \\ -J'_{1N} \end{pmatrix}}^{dN} & \overbrace{\begin{pmatrix} d \\ J'_{12} \\ 0 \\ \ddots \\ \vdots \end{pmatrix}}^{d} & \cdots & \overbrace{\begin{pmatrix} d \\ J'_{1N} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}}^{d} \end{pmatrix}.$$

その際には相互作用をどのように設計するかが重要な課題となる。我々は図2のような反対称行列を使うことが理論及び数値的に有効であることを確認した。図2では一つのサンプルがd次元で N 個のサンプル間に相互作用を入れる時の反対称行列の様子を表している。例えば1番目のサンプルは2番目のサンプルと J'_{12} を通して相互作用し、N 番目のサンプルとは J'_{1N} を通して相互作用をする。

こうした反対称行列に勾配ベクトルを掛け合わせたものを LD のドリフト項に加え相互作用項を構成し、それが理論的・数値的に相互作用項がない場合よりより小さい誤差を生むということを確認した。