統計力学系の
Monte Carlo Simulation

熱平衡

- 初期条件によらず平衡状態に到達する
  - 熱浴とのエネルギー交換
  - ランダムなエネルギーの出入り
  - エネルギー極小値から、熱雑音を使って脱出する
- 熱雑音による確率過程として捉える

熱平衡量の計算

- エネルギーの平均 $\langle E \rangle = Z^{-1} \sum_{s} e^{-\beta E(s)} E(s)$
- ランダムにM 個の状態をサンプルするとする

$$\langle E \rangle_M = Z_M^{-1} \sum_{i=0}^{M-1} e^{-\beta E_i} E_i$$

$$Z_M = \sum_{i=0}^{M-1} e^{-\beta E_i}$$

ランダムサンプリングは良くない

- 低エネルギー状態ほど、指数関数的に出現確率が大きい
- ランダムサンプリングは、指数関数的に小さい寄与をする状態を多数生成してしまう。
- 従って、良い近似にならない。
- これは、スピン数が多くなったり、低温になると、ますます悪い近似となる。

適切なサンプリング

- 各状態i の出現がある確率p_iに従うサンプル

$$\langle E \rangle_{\text{sample}} = Z_{\text{sample}}^{-1} \sum_{i=0}^{M-1} e^{-\beta E_i} E_i \, p_i^{-1}$$

$$Z_{\text{sample}}^{-1} = \sum_{i=0}^{M-1} e^{-\beta E_i} p_i^{-1}$$

- 平衡分布に従って状態をサンプリングする

$$p_i \propto e^{-\beta E_i}$$

$$\langle E \rangle = M^{-1} \sum_{i=0}^{M-1} E_i$$

- 一様でない確率でサンプリングすることをimportance samplingと呼ぶ

Metropolis法

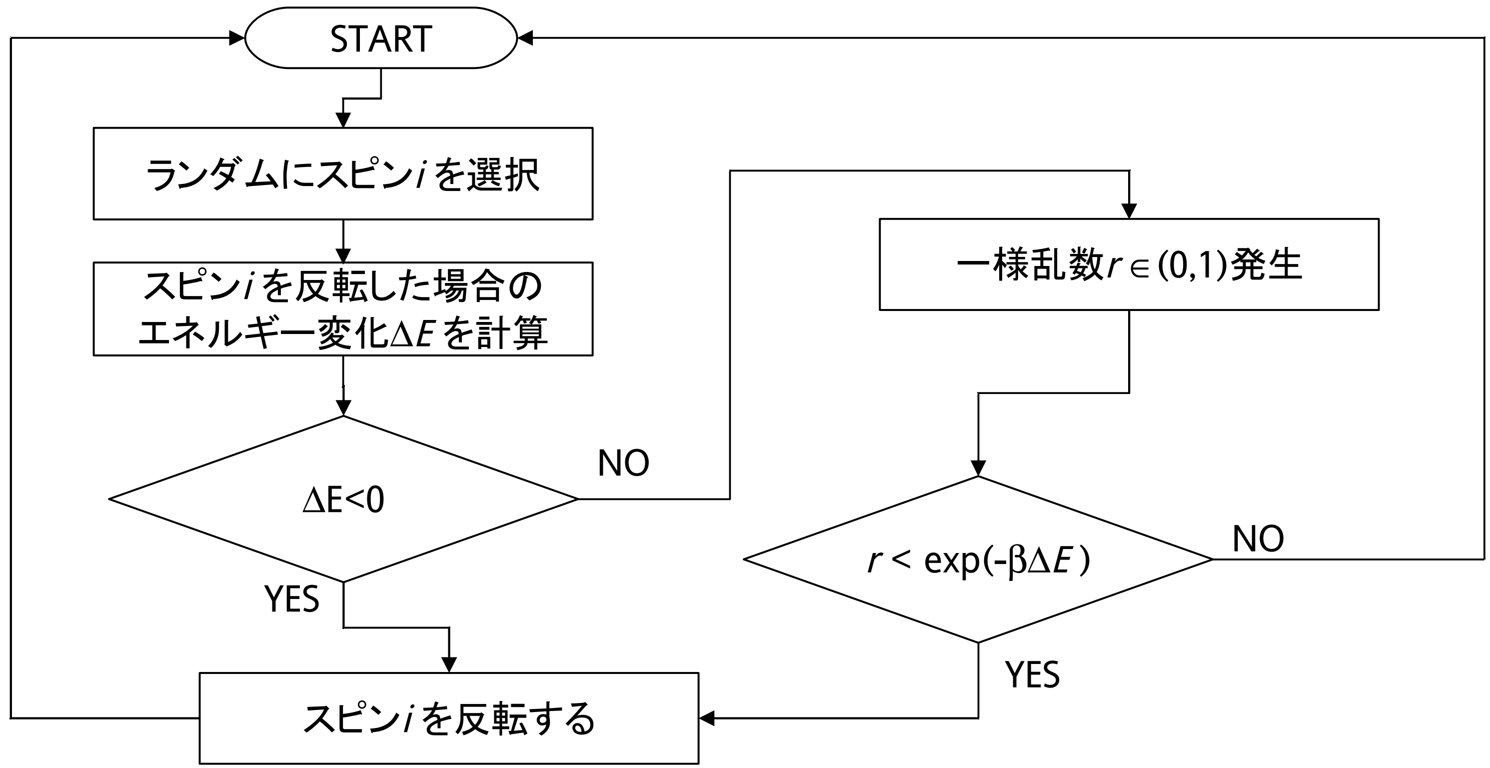
- **状態生成を確率過程を通じて行う**
- **状態遷移確率**

$$P(\mu \to \nu) = \begin{cases} 1 & \text{if} \quad \Delta E \le 0 \\ e^{-\beta \Delta E} & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\Delta E = E_\nu - E_\mu$$

- N. Metropolis, et al., *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087.

Metropolis法



- 演習1：Metropolis法の平衡分布
  - Metropolis法の平衡分布がBoltzmann分布であることを示しなさい。
- 演習2：Monte Carlo Simulation
  - エネルギーが

$$E=-J\sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j$$

で与えられる最近接相互作用するIsingスピン系のシミュレーションを実行しなさい。

参考文献

- **特集：物性における計算物理、日本物理学会誌 40**(11)(1985).
- **日本物理学会編「計算物理学」(培風館**, 1991)
- K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer, 1992)
- M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford UP, 1999)
- D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge, 2000)
- **伏見正則「確率的方法とシミュレーション」(岩波講座応用数理**9, 1994)