

最終回の「統計熱力学の講義で話すこと」... 迷ったこと.

1. 従来の(古典)統計力学の例題

- Debyeの固体比熱の問題
- 不完全気体の問題
- 黒体輻射

2. 量子統計力学 (5 学期)

- 理想気体の統計性
 - フェルミガス, フェルミ縮退
 - ボーズガス, ボーズ・アインシュタイン凝縮

3. 時間依存した統計力学, 非平衡現象

- ブラウン運動, ランジュバン方程式, ... 輸送現象

4. 多体問題

- 相関(相互作用)の強い系 ... くりこみ群

5. (最近の)物理以外の応用 : 情報理論, 経済学

モンテカルロ法入門

—サイコロを振って積分する方法—

福島 孝治

東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系

URL: <http://dbs.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima>
<mailto:hukushima@phys.c.u-tokyo.ac.jp>

2005 年 1 月 21 日

今日のお品書き

1. はじめに

- 統計力学の手続きの概観

2. モンテカルロ積分

- モンテカルロ法と言えは「 π の計算」?
- なぜモンテカルロ法が必要なのか?

3. メトロポリスのモンテカルロ法

- マルコフ連鎖モンテカルロ法の原理の概要
- メトロポリス法, 熱浴法, ギブスサンプラー
- 具体的な例として, イジング模型 ...

4. まとめ

統計力学の手続き (1)

STEP 1 解析したい(物理)現象のモデル化

1. ミクロな状態 X の設定

e.g. ...

- 液体・気体の物理 : 原子分子の位置と運動量 $X = \{x_i, p_i\}$
- 磁性体の場合 : 磁気モーメントの大きさ $X = \{S_i\}$

2. それぞれのミクロな状態に対するエネルギー $E(X)$ の具体的な関数

- なんとかポテンシャルとか ... 例えば,

$$\mathcal{H}(\{x_i, p_i\}) = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |x_i - x_j|} + \dots$$

STEP 2 確率分布の導入

- 温度 T でのカノニカル分布 : ミクロな状態 X_i が実現する確率

$$P(X_i) = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{E(X_i)}{k_B T} \right)$$

統計力学の手続き (2)

STEP 3 物理量の計算

- 物理量 $A(X_i)$ は確率が与えられた元での期待値として計算される .

$$\langle A \rangle = \sum_{i \in \text{全てのミクロな状態}} A(X_i) P(X_i)$$

e.g. 先の例で全運動エネルギーを計算したいとき

$$\left\langle \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} \right) \right\rangle = \int x_1 \cdots x_N \int p_1 \cdots p_N \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} \right) P(\{x_i, p_i\})$$

- 大抵の場合は , 分配関数 $Z(T)$ の計算をしておけば , その $\log$ 微分から物理量の期待値は得られる . e.g. $E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$
- 問題は分配関数が計算できるか???, 期待値は計算できるか???**
 - できる : 相互作用がない系 (理想気体 , 調和振動子系 , 二準位系...)
 - 一般に難しい: 相互作用のある系 (状態を指定する変数が絡み合っている .)
 - がんばってする : 厳密に計算する
 - サボりながらする : 平均場近似等の近似計算 (e.g. 強磁性の計算)
 - 計算機にさせる : 数値計算 (モンテカルロ法)

モンテカルロ法の統計物理における特徴

1. 大自由度確率分布からのサンプリングと期待値(平均値)の評価

- 統計科学等の多くの分野と共有する点
- よい点
 - 近似が無い：平均場近似、摂動展開法等の摂動的なアプローチとは対照的
 - * 摂動的計算では、特に相転移に関して定量的・定性的に誤差を含む
- 悪い点
 - 有限サイズ系でしか計算できない
 - * 計算機の中でアボガドロ数の粒子を置くことはできない。

2. シミュレーションとしての観点

- 自然の摸写：
 - 自然界で起きていることを計算機の中でつくってみる
 - モデル化の妥当性
 - 計算機実験：
 - 実験室では実現できない実験をやってみる
 - 実験室で観測できない、あるいは観測が難しい量を計算
 - 『見てみること』へのあこがれ → 理解の手がかりになる
-

(マルコフ連鎖) モンテカルロ法の目的

- d 次元空間の点 $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ の従う確率分布 $P(\mathbf{X})$ が与えられている。

1. 確率分布 $P(\mathbf{X})$ に従う様に, 点 $\mathbf{X}$ を **サンプリング**,

$$\{\mathbf{X}^{(i)}\} = \{\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \dots, \mathbf{X}^{(M)}\}.$$

- 確率分布 $P(\mathbf{X})$ の逆関数は求めることはできないとする。

2. $\mathbf{X}$ の関数 $A(\mathbf{X})$ の確率分布 $P(\mathbf{X})$ についての **期待値の計算**

$$\langle A \rangle = \int_D A(\mathbf{X}) P(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(\mathbf{X}^{(i)}).$$

- 一般に多重積分はこの範疇に入ると考えられる。求めたい積分を $I = \int_D dx g(x)$ とし, 確率分布 $P(x)$ に従う変数から評価するのは,

$$I = \int_D dx g(x) = \int_D dx \frac{g(x)}{P(x)} P(x) = \left\langle \frac{g(x)}{P(x)} \right\rangle$$

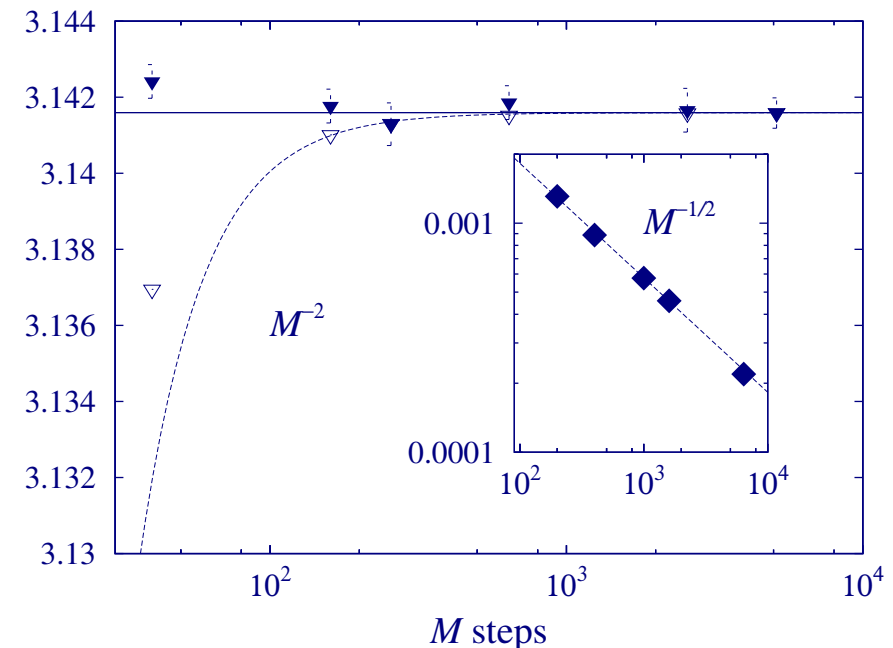
モンテカルロ積分: π の評価の場合

- 例えば, 一変数関数 $g(x) = 4\sqrt{1-x^2}$ を領域 $D \in [0, 1]$ で積分.

- 単純MC積分法: 領域 D から一様サンプリングする, $P(x) = \text{一定}$.

$$\tilde{I} = \frac{1}{M} \left(\frac{g(x^{(1)})}{1/D} + \cdots + \frac{g(x^{(M)})}{1/D} \right)$$

- モンテカルロ積分の誤差は, $O(M^{-1/2})$ 程度
 - 最も簡単な求積法である台形公式の誤差は, $O(M^{-2})$.

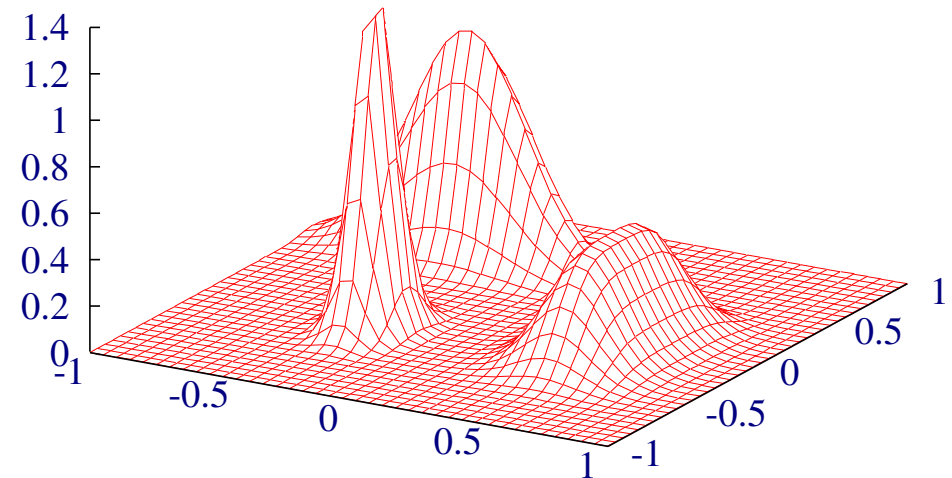


- 実際には, π の計算は, 誤差が大きくて, モンテカルロ法ではやらない.
 - しかし, モンテカルロ法の誤差は原理的には積分変数の次元に依らない.
- $\Rightarrow$ 次元が大きくなると, モンテカルロ法もやれる?!

モンテカルロ積分をより高次元に

- 一様ランダム・サンプリング積分を高次元へ応用した場合の**困難点**

- 高次元空間の中で積分領域を一様にサンプルすることは意外に難しい。
- ほとんどの点で被積分関数の値が小さく、無駄ばかりが多くなる。
 - 分散が大きくなってしまう。
 - よい評価が困難になる。



二次元分布関数の例：関数の値が有意な値を持つ領域は少なくなる．鞍点評価がよくなるような例だと，ますます辛い．

- 一様ランダム・サンプリングから，**重点的サンプリング**へ．

⇒ 分布関数 $P(X)$ に比例するようにサンプルしたい

メトロポリスのモンテカルロ法

- 確率過程を用いて，逐次的に点列 X を生成する．
 - マルコフ連鎖：直前の点 $X^{(t-1)}$ のみから新しい点 $X^{(t)}$ を決定する．

$X^{(t-1)} \rightarrow X^{(t)} \rightarrow X^{(t+1)} \rightarrow \dots$: 定常分布が $P(X)$ となるように ...

- モンテカルロ法の原理：遷移確率 $W(X \rightarrow X')$ の満たすべき必要条件

(A) 詳細つり合いの条件 遷移確率の関係式

$$P(X)W(X \rightarrow X') = P(X')W(X' \rightarrow X)$$

(B) エルゴード条件 任意の2つの点 X と X' の遷移確率がゼロでないか，有限個のゼロでない遷移確率の積で表される．
 $\implies$ どんな初期条件からでも，唯一つの定常分布に収束する．

遷移確率のいろいろ

- 遷移確率の満たすべき (必要) 条件は緩くて, 一意的には決定できない .
 - 点 $\mathbf{X}$ の各成分 x_i が離散的な多値 ($\{\alpha_i^\mu, \mu = 1, \dots, A_i\}$) をとる場合:
 - 遷移は, ある成分 x_i の値を更新する状況を考える .
 現在の状態 $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_d) \rightarrow$ 新しいの状態 $\mathbf{X}_\mu = (x_1, \dots, \alpha_i^\mu, \dots, x_d)$,
- メトロポリス型 : あらかじめ新しい値 α_μ をどれかに選択 .

$$W_{\text{Metropolis}}(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_\mu) = \min \left(1, \frac{P(\mathbf{X}_\mu)}{P(\mathbf{X})} \right) \quad (1)$$

熱浴法, ギブスサンプラー 取り得る新しい値は A_i とおりある .

$$W_{\text{heatbath}}(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_\mu) = \frac{P(\mathbf{X}_\mu)}{\sum_\mu P(\mathbf{X}_\mu)} \quad (2)$$

- 各成分 x_i を一つずつ更新する限り, エルゴート条件は満たされることが多い .
- 連続変数の場合も新しい候補を離散化することで一般化は可能

メトロポリス・アルゴリズム

ステップ 0 : 初期条件を適当に選ぶ : $X^{(0)}$

ステップ 1 : 現在の点 $X^{(t)}$ からランダムに変化させた新しい候補点 X' を生成 .

ステップ 2 : 遷移確率 $P(X')/P(X^{(t)})$ を計算

ステップ 3 : 一様乱数 $r \in [0, 1]$ を生成し , 以下のように次の状態 $X^{(t+1)}$ を決める ;

$$X^{(t+1)} = \begin{cases} X' & \text{if } r \leq P(X')/P(X^{(t)}) \\ X^{(t)} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

ステップ 4 : ステップ 1 へ戻り , 繰り返す .

ステップ 1 から 4 までの試行を 1 モンテカルロステップと呼ぶことにする .

具体的な例1：イジング模型

- 各格子点にスピン変数 $S_i = \pm 1$
- 状態の数は 2^N

$$\mathbf{X} = (S_1, S_2, \dots, S_N) (= (1, -1, 1, \dots))$$

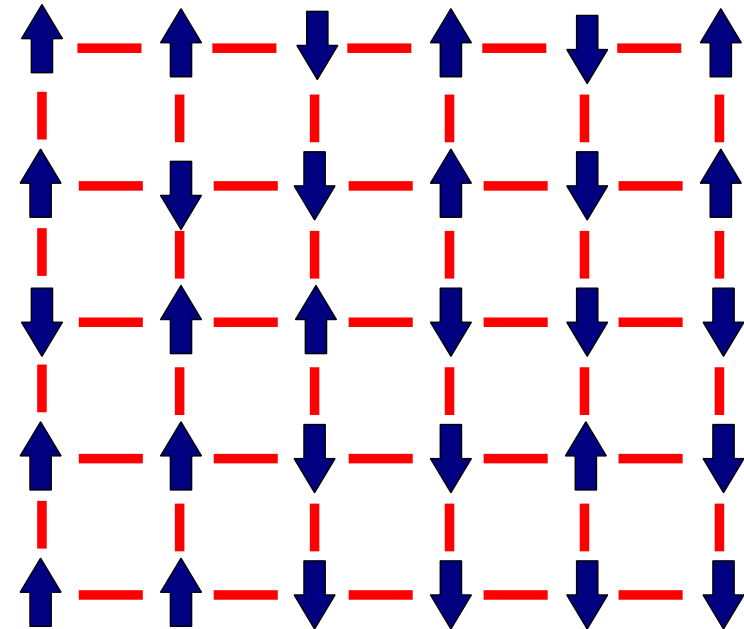
- 確率分布：ギブス関数

$$P(\mathbf{X}) = \frac{\exp(-E(\mathbf{X})/T)}{\sum_{\mathbf{X}'} \exp(-E(\mathbf{X}')/T)}$$

$E(\mathbf{X})$ はエネルギー関数

$$E(\mathbf{X}) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j$$

- 相互作用 $J_{ij} = J$ の場合
 - $S_i S_j = 1$: $-J$ エネルギーが下がる
 - $S_i S_j = -1$: $+J$ エネルギーが上る



- 物理量の例

$$\begin{aligned} \text{磁化 } M &= \frac{1}{N} \sum_i S_i \\ \langle |M| \rangle &= \left(\sum_{S_i=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N} \right) |M| P(\{S\}) \end{aligned}$$

イジング模型を例に具体的なメトロポリス・アルゴリズム (1)

ステップ 0: 初期スピン配位

初期点 $\mathbf{X}$ をランダムに選ぶ: $\mathbf{X}^{(0)} = (S_1^{(0)}, S_2^{(0)}, \dots, S_N^{(0)}) = (1, -1, \dots, -1)$

ステップ 1: 次のスピン配位の選択 (メトロポリス型)

ランダムに選んだ格子点 k のスピンを反転したスピン配位

$$\mathbf{X}' = (S_1^{(t)}, S_2^{(t)}, \dots, -S_k^{(t)}, \dots, S_N^{(t)})$$

ステップ 2: 遷移確率の計算: 遷移コストを評価する.

$$\frac{P(\mathbf{X}')}{P(\mathbf{X}^{(t)})} = \frac{\exp\left(\sum_i' J S_i^{(t)} (-S_k^{(t)}) / T\right)}{\exp\left(\sum_i' J S_i^{(t)} S_k^{(t)} / T\right)} = \exp\left(-2 \sum_i' J S_i^{(t)} S_k^{(t)} / T\right)$$

- 現在のスピン配位だけで表される
- 注目する格子点 k の近接の和だけで計算できる.

イジング模型を例に具体的なメトロポリス・アルゴリズム (2)

ステップ 3: 乱数との比較で更新 .

一様乱数 r と比較することにより , ルール

$$X^{(t+1)} = \begin{cases} X' & \text{if } r \leq P(X')/P(X^{(t)}) = \exp \left(-2 \sum_i' J S_i^{(t)} S_k^{(t)} / T \right) \\ X^{(t)} & \text{otherwise} \end{cases}$$

に従って , 次の状態 $X^{(t+1)}$ を決定する .

一つ注意する点は , この更新で実際の状態の変化が無い場合 ($X^{(t+1)} = X^{(t)}$) でも , 状態更新と見なして , 平均の計算には考慮する必要がある .

ステップ 4: くりかえし ステップ1に戻って , 同じ操作を繰り返す .

- 通常は , 全スピン数 N 回の繰り返しを , 1 モンテカルロステップ数と言う .
- メトロポリス法で作られるサンプル列 $\{X^{(1)}, X^{(2)}, \dots, X^{(M)}\}$ の間には強い相関が残ることが推測される .

イジング模型を例に具体的なメトロポリス・アルゴリズム (3)

ステップ 4 のつづき： 強い MC ステップ相関．独立と思えるくらいにサンプル間の MC ステップを離す．目安は相関時間 τ^* ,

$$C(\tau) = \frac{\langle A(\mathbf{X}^{(t)}) A(\mathbf{X}^{(t+\tau)}) \rangle - \langle A(\mathbf{X}^{(t)}) \rangle^2}{\langle A(\mathbf{X}^{(t)})^2 \rangle - \langle A(\mathbf{X}^{(t)}) \rangle^2} \sim \exp(-\tau/\tau^*)$$

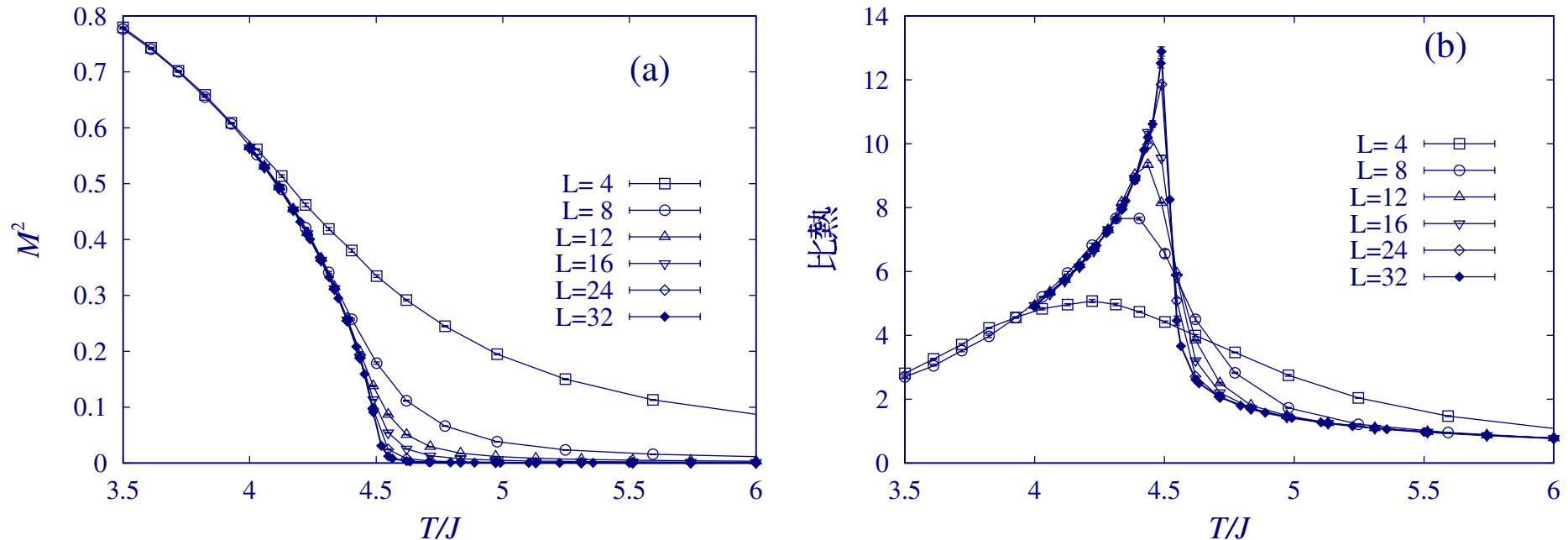
を見積もって , τ^* くらいは離してサンプリングしたい .

$$\{\mathbf{X}^{(t)}, \mathbf{X}^{(t+\tau^*)}, \mathbf{X}^{(t+2\tau^*)}, \dots, \mathbf{X}^{(t+M\tau^*)} \dots\}$$

これは , 単純モンテカルロ積分から重点サンプリングに移行する際の代償か .

イジング模型の結果

3次元イジング模型の結果：磁化(左)と比熱(右)の温度依存性



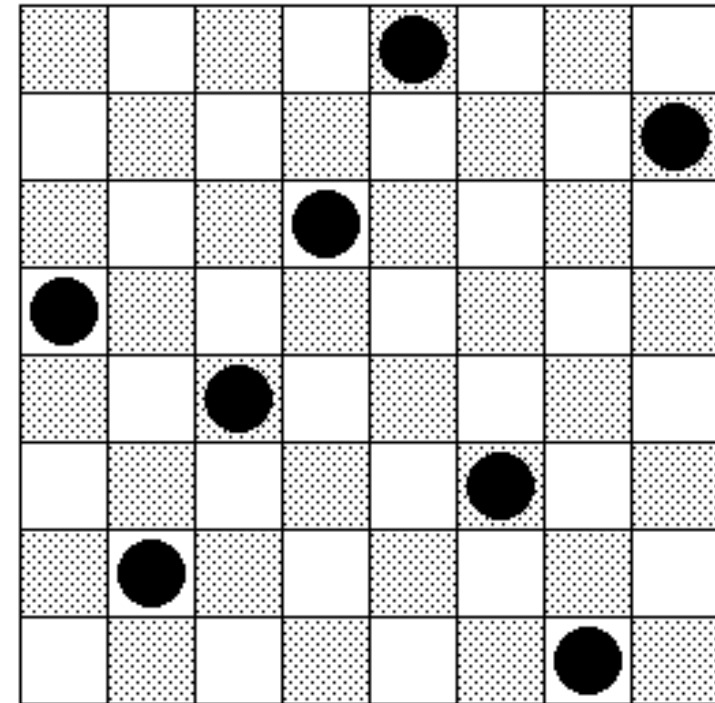
- ある温度で特異な振るまいが見られる．相転移の存在．
- スピン数は， $N = 4^3 \sim 32^3$ ． $N = 32^3$ のときの全状態数は 2^{32768} ．
- この程度の計算が一晩で，できる時代になった．

例題：物理屋が調べた N クイーン 問題

N クイーン問題とは、 $N \times N$ のチェスボード上に N 個のクイーンをお互いに攻撃しないように配置せよ。

典型的な制約充足問題:

- それぞれの行には1つのクイーン
- それぞれの列にも1つのクイーン
- それぞれの斜めには高々1つのクイーン
- N 個のクイーンを配置



8クイーン問題の解の例。全部で92個。

N クイーン問題のモデル化: N クイーン問題の統計力学

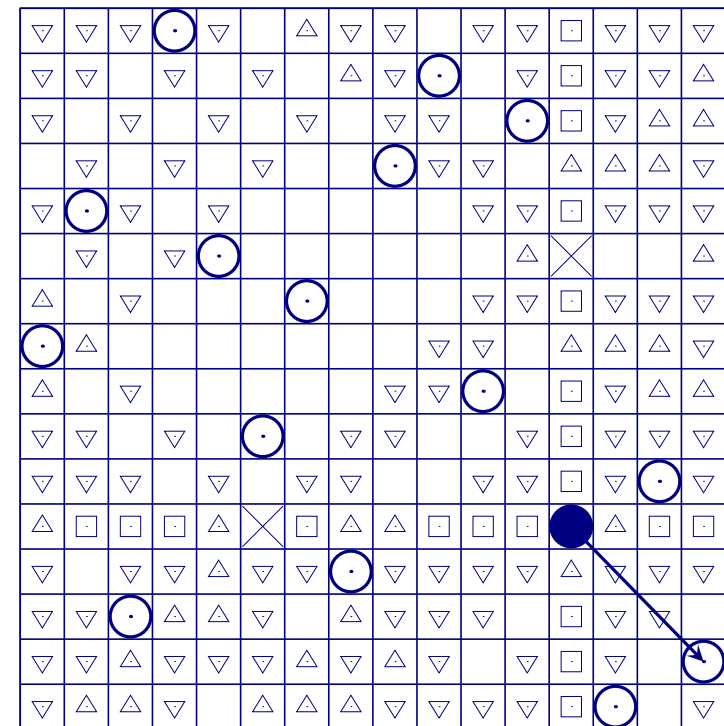
それぞれのクイーン配置に対して、エネルギー関数を以下のように定義する。

$S_i = \pm 1$ は各格子のクイーンの占有状態を表す。

$$\begin{aligned}
 E(\{S_i\}) = & \sum_{\text{columns } c} \left(\sum_{i \in c} S_i - 1 \right)^2 \\
 & + \sum_{\text{rows } r} \left(\sum_{i \in r} S_i - 1 \right)^2 \\
 & + \sum_{\text{diagonals } d} \left(\sum_{i \in d} S_i - 1 \right)^2 \\
 & \times \left(1 - \delta_{\sum_{i \in d} S_i, 0} \right),
 \end{aligned}$$

$E = 0$ がクイーン問題の解

A nearly optimal solution of 16 queens problem with $E = 1$.



この配位から、解には一度エネルギーを上げる必要がある

最適化問題と統計力学

- 最適化問題として興味あること

1. 制約条件を満たしている解を探す (存在するか否か)
2. あるならば, その解の個数を知りたい

- 統計力学では ...

- 最低エネルギー状態 $\Rightarrow$ 温度ゼロの統計力学
- 解の個数は, 最低エネルギーの状態数
 $\Rightarrow$ 温度ゼロでのエントロピーを求めればよい (熱力学的には変な状況) .
- 有限温度は? 意味がないように思えるのだが ...
有限温度の分布から熱力学積分

$$S(T) = -\frac{\partial}{\partial T} F = S(T = \infty) - \int_{\infty}^T dT' \frac{\partial^2}{\partial T'^2} F = S(T = \infty) - \int_0^{\infty} (dT') \frac{C}{T}$$

から $T \rightarrow 0$ 極限をとって計算できる。

エネルギーヒストグラムから状態数

複数の温度でのエネルギー分布関数
 $N_m(E)$ at β_m .

$\Leftrightarrow$

状態数
 $W(E)$

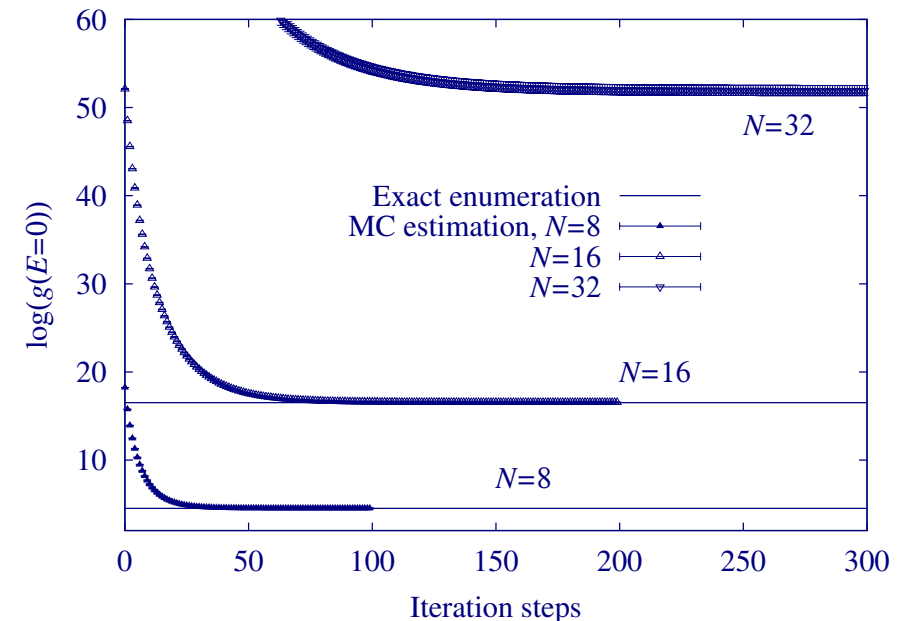
The Multiple-Histogram Method gives an estimate:

$$W(E) = \frac{\sum_{m=1}^M w_m^{-1} N_m(E)}{\sum_{m=1}^M w_m^{-1} n_m e^{f_m - \beta_m E}}, \quad (4)$$

where

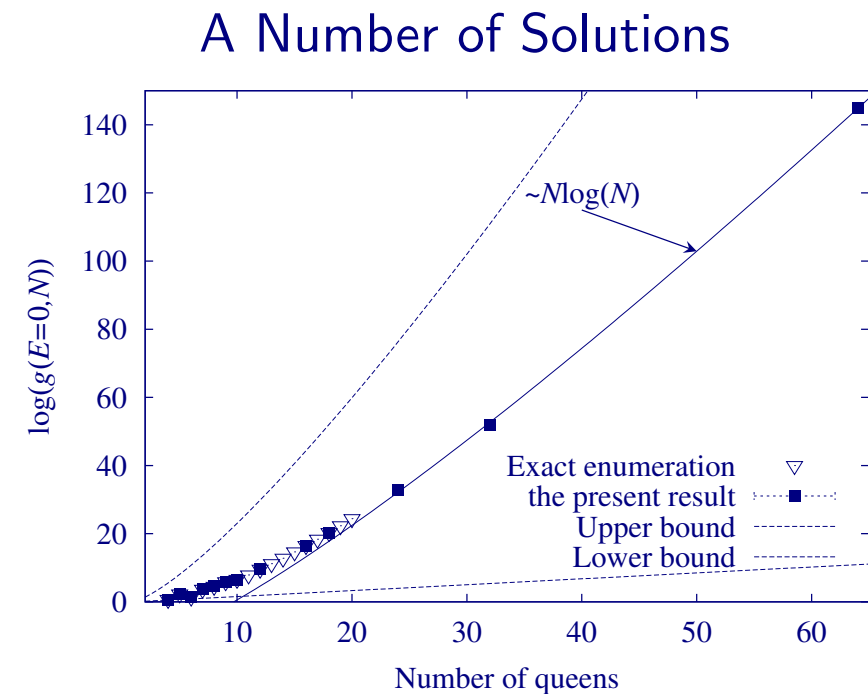
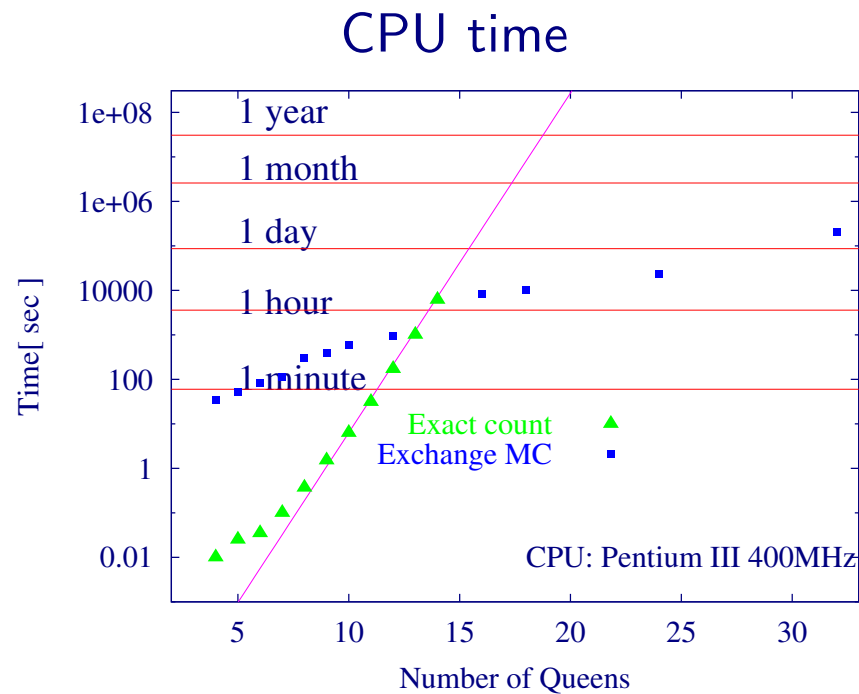
$$e^{-f_m} = \sum_E W(E) e^{-\beta_m E}, \quad (5)$$

where n_m is the number of MC samplings and w_m is a weight factor.



The ground-state entropy $\log W(E = 0)$ for $N = 8, 16$ and 32 , as a function of iteration sweeps for solving the multiple-histogram equations.

“最適解” と “解の個数”



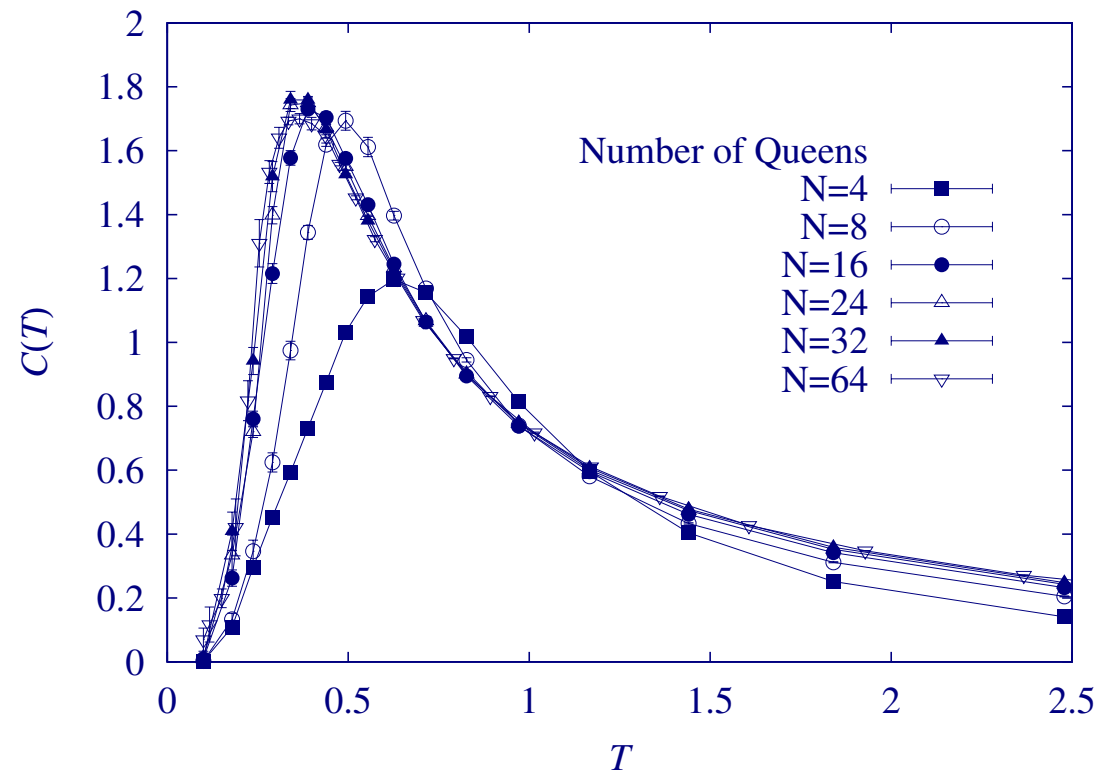
厳密数え上げ $N = 16$: 14772512, $\Longleftrightarrow$ 我々の評価 : $1.46(5) \times 10^7$.

N の大きな極限の漸近形は、

$$\log g(E=0, N) = 0.593(8)N \log N + 13.1(9) \implies \# \sim N^{\alpha N}.$$

N クイーン問題の熱力学的性質

比熱の温度依存性



No divergence of the specific heat

まとめ

- 統計力学の中でのモンテカルロ法
- (マルコフ連鎖) モンテカルロ法の基本として, メトロポリス法の解説
 - メトロポリス法, 熱浴法
 - メトロポリス・アルゴリズムのイジング模型への具体的な応用
- 応用例は沢山ある .
 - 参考文献
 1. D. P. Landau and K. Binder: A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics, Cambridge University Press (2000).
 2. J. S. Liu: Monte Carlo Strategies in Scientific Computing, Springer-Verlag New York (2001).