

モンテカルロで行こう！、または、ダイスをころがせ

大阪大学理学部物理学科 菊池誠*

1 顛末、枕

せっかく物性若手夏の学校でモンテカルロ法の初歩を話す機会をもらったのに、テキストには殆ど予告編みたいなものしか書けませんでした。要するにさぼっちゃったわけだけど、申し訳なかったかなあとちょっと（だけ）反省しています。今回は（またまた）ちょうどよい機会なので、夏の学校で話したことをまとめさせてもらいます。内容は、本当に初心者のためのモンテカルロシミュレーション入門です。これはこれで初歩的すぎて（特に初めのほうは）『物性研究』の一般読者のかたには役に立たないかもしれません。

実は、最初にいろいろと与太話をしたのですが、あれは夏の学校だけのお楽しみということで、ここではちゃんと書きません。たとえば、日本で一番大きなシミュレーション装置は東京ディズニーランドだ、とか、すべての計算機シミュレーションを1次元に並べると両端にはヴァーチャル・リアリティとアーティフィシャル・リアリティがくる（だからヴァーチャル・リアリティを「人工現実感」と訳してはいけない）、とか、そういった類の話でした。しょうもないですね。

2 統計力学と計算機シミュレーション

さて、統計力学関連の分野で用いられるシミュレーション手法の中でもよく使われるのはモンテカルロ法（メトロポリス法）と分子動力学法でしょう。この二つは主として熱平衡状態を計算機の中で作りだすために用いられます。熱平衡にこだわらず、非線形動力学のシミュレーションを行うのなら、もちろんほかにもさまざまな方法がありえます。セルオートマトンや結合写像あたりが最近のトレンドでしょうか。ここでは、話を前者の熱平衡状態を作りだすシミュレーションに限ることにします。

分子動力学法 (MD) は古典粒子系に対してよく用いられますが、原理的には古典的な運動方程式を持

つ系ならどんなものにでも適用できます。やることはいたって簡単で（実際に計算するとなると話は別）、粒子を並べておいて、適当な初期条件から運動方程式を数値積分していただくだけです。つまり、ハミルトニアンによって決まる個々の粒子の運動を数値的に忠実に追いかけるわけです。こうすれば、エルゴード性が成り立つ限り、長時間極限で全粒子の軌跡がミクロカノニカルアンサンブルを与えるはずで、考えてみると、熱力学量のアンサンブル平均は長時間平均の代わりとして導入されたものだったはずで、そういう意味では、MD ではアンサンブルなんていう変なものを考えずに長時間平均をいきなり計算しているのだ、と考えられます。もっとも実際には長時間極限は取れないので、有限時間の計算によってエネルギー一定の部分位相空間のうちでも代表的なところは漏らさず回ってくれと期待することになります。

このように、MD 法がハミルトニアンによって決まる「現実の」ダイナミクスを用いるのに対し、モンテカルロ法 (MC) は確率過程によってカノニカルアンサンブルを実現しようとします。ここで用いる確率過程は、あくまでも定常分布がカノニカルアンサンブルを与えるように決められるのもので、一般には「現実の」ダイナミクスとは関係がありません。実は MD 法にも、仮想的な自由度を導入することによりカノニカルアンサンブルを実現するというすぐれた方法があるのですが（能勢の方法）、この場合にも余分に取り入れた自由度のためにダイナミクスは現実のものではなくなります。

3 モンテカルロ法

では、定常分布がカノニカルアンサンブルを与えるような時系列を作ること考えます。つまり、時系列に関する時間平均が

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(t_i) = \langle A \rangle$$

のようにカノニカルアンサンブルでの平均に一致するようにしたいわけです。

モンテカルロ法ではこの時系列を確率過程（マルコフ連鎖）によって作り出します。マルコフ連鎖ですから、ある時刻での系の状態は直前の時刻での状態のみに依存して決まり、それ以前の歴史にはよりません。系の取りうるすべての状態に対して次の時刻に他の状態に遷移する確率を与えればマルコフ連鎖が定義できます。状態 i から状態 j に遷移する確率を w_{ji} とすると、

$$0 \leq w_{ji} \leq 1$$

$$\sum_j w_{ji} = 1$$

を満たさなくてはなりません。

ここで、時刻 t での状態分布関数 (系が状態 i をとる確率) $P(i; t)$ を考えることにします。当然、

$$\sum_i P(i; t) = 1$$

が各時刻で成り立っています。この分布関数を遷移確率によって時間発展させます。たとえば、1 ステップ後の分布関数は

$$P(i; t+1) = \sum_j w_{ji} P(j; t)$$

です。この分布関数をベクトルで、また遷移確率を行列で表すと、

$$\vec{P}(t+1) = W \vec{P}(t)$$

と書けます。我々が欲しいのは長時間の極限

$$\vec{P}_\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} W^n \vec{P}(t_0)$$

です。ところで、power method によって行列の最大絶対値を持つ固有値および対応する固有ベクトルが求められることを思い出せば、上の極限が W の最大固有値に属する固有ベクトルを与えることがわかるでしょう。今の場合、 W がマルコフ行列であることから、最大固有値は 1 でその固有ベクトルは縮退していないことが保証されています。つまり、

$$W \vec{P}_\infty = \vec{P}_\infty$$

が成り立つわけですから、 $\vec{P}_\infty$ はこの確率過程の定常分布を与えることになります。というわけで、長時間極限は初期状態の取り方によらず、定常分布を

一意に与えます。ただし、位相空間がいくつかの副空間に分離してしまうと困るので、エルゴード性の条件が必要です。ここでいうエルゴード性とは、系の任意の状態から全ての状態へ有限回のステップで遷移する道筋が存在することを意味するもので、所謂エルゴード理論とはとりあえず別ですので注意しましょう（そんなものが任意の系に証明されたら大変）。イジング模型などの古典スピン系では、多くの場合、このエルゴード性が自明に成り立つようにできますが、量子モンテカルロ法では問題になることがあります。

あとは、この定常分布がカノニカルアンサンブルの平衡分布に一致するように W を決めればよいわけです。

$$P_\infty(i) = P_{eq}(i) \equiv \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$$

このために W が取るべき条件は詳細釣り合い

$$w_{ji} P_{eq}(i) = w_{ij} P_{eq}(j)$$

あるいは、書き直して

$$\frac{w_{ij}}{w_{ji}} = \frac{P_{eq}(i)}{P_{eq}(j)} = \exp(-\beta \Delta E_{ji})$$

を満たすことです。ここで、 $\Delta E_{ji} \equiv E_j - E_i$ です。実際、この条件を満たしていれば、

$$\begin{aligned} (W \vec{P}_{eq})_j &= \sum_i w_{ji} P_{eq}(i) = \sum_i w_{ij} P_{eq}(j) \\ &= P_{eq}(j) \sum_i w_{ij} = P_{eq}(j) \end{aligned}$$

ですから、定常分布がカノニカル分布になることがわかります。ところが、これは w_{ji} と w_{ij} の比だけにに関する制限なので、これを満たす W は一通りではありません。この条件を満たす限り、どんな W を使ってもカノニカルアンサンブルが得られます。たとえば、いわゆる (狭義の) メトロポリス法では

$$w_{ji} = \min[1, \exp(-\beta \Delta E_{ji})]$$

とします。各状態のエネルギーそのものではなく、遷移前後のエネルギー差だけが現われていることに注目してください。つまり、遷移確率の計算には状態間のエネルギー変化だけが必要なのです。

こうして決められた確率過程が実際にカノニカル分布を与えることを簡単な例で見てみましょう。2 スピンからなるイジングモデルを考えます。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J S_1 S_2$$

で与えられ、 $S_1, S_2 = \pm 1$ です。各ステップで、スピン 1 または 2 をランダムに選び、メトロポリス法によって遷移させるものとする、遷移行列は

$$W = \begin{pmatrix} 1-q & 1/2 & 1/2 & 0 \\ q/2 & 0 & 0 & q/2 \\ q/2 & 0 & 0 & q/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 1-q \end{pmatrix}$$

です。状態は上から++, +-, -+, --に対応します。ただし $q \equiv \exp(-\beta J)$ としました。したがって、 n ステップ分の遷移を表す行列として

$$W^n = \frac{1}{2(1+q)} \begin{pmatrix} A & B & B & C \\ D & E & E & D \\ D & E & E & D \\ C & B & B & A \end{pmatrix}$$

$$A = (1-q)^n (1+q) + 1 + (-1)^n q^{1+n}$$

$$B = 1 - (-1)^n q^n$$

$$C = -(1-q)^n (1+q) + 1 + (-1)^n q^{1+n}$$

$$D = q - (-1)^n q^n$$

$$E = q + (-1)^n q^n$$

が得られます。この行列について $n \rightarrow \infty$ の極限をとれば

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W^n = \frac{1}{2(1+q)} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ q & q & q & q \\ q & q & q & q \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

であり、これより、たしかに初期条件によらず

$$\bar{P}_\infty = \bar{P}_{eq}$$

が成り立つのがわかります。ここで、極限をとったときに q^n 、 $(1-q)^n$ が消えることで平衡分布に到達したことに注目。これは一般的な事情であって、平衡への接近は常に $\exp(-n/\tau)$ の形を取ります。 τ は緩和時間です。

こうしてカノニカル分布を与える確率過程が定義できました。上の導出では分布関数の時間発展を扱いましたが、実際のシミュレーションでは適当に選んだ初期状態から遷移確率に従って次々と状態間を遷移させることにより、時系列を発生させます。緩和時間に比べて十分に長いシミュレーションをおこ

なえば、分布関数は平衡分布に達するはずですから、その後の時系列は平衡分布関数からのサンプリングになります。これにより、得られた時系列での物理量の平均値は平衡分布での平均に一致するわけです。言い換えるとシミュレーションの初めのほうは、平衡分布になっていないので、捨てる必要があります。

では、メトロポリス法の手順を簡単に説明しておきましょう。

1. まず、問題とする系の適当な状態を用意します。イジング模型でいえば、各スピンの向きを全部与えてやれば状態が決まります。
2. 次に状態を変えることを考えます。原理的にはどう変えてもいいのですが、どれか一個のスピンだけを反転するのが一番簡単でしょう。これなら、エルゴード性は自明に満たされています。くだんのスピンの選び方は、ランダムでもいいし、規則的でも構いません。計算の効率からいえば、規則的なほうが使う乱数が少ないという利点があります。
3. 変える先の状態でのエネルギーと現在の状態とのエネルギー差 ΔE を計算し、この状態変更でエネルギーが下がるなら、新しい状態を採用します。エネルギーが上がる場合は、確率 $\exp(-\beta \Delta E)$ で新しい状態を採用し、確率 $1 - \exp(-\beta \Delta E)$ で元の状態のままにすればよいのですが、このためには、0 と 1 の間の一様実数乱数を発生し、それが $\exp(-\beta \Delta E)$ より大きい小さいかで決めます。確率を使う部分についてはダイスを振ろうがコインを投げようが勝手です。もっとも、いちいちそんなことをしては大変なので、普通の人には計算機上で乱数を発生して決めます。
4. 以下、この要領で次々と状態を変更していきます。

4 動的な解釈

上のような確率過程で作られた時系列は、原理に忠実に考える限りは、現実のダイナミクスとなんの関係もないはずですが、しかし、熱浴に接した現実の系で実際に起こっていることを考えると、やっぱり、

ある瞬間にはこのスピン、次の瞬間にはあのスピン、という具合に次々と熱揺らぎによって反転しているのしょうから、モンテカルロ法による系の時間変化は現実を反映しているようにも思えてきます。現状では、よほど変なことをしない限りはモンテカルロ法で得られる時系列を現実のダイナミクスと似たものと見ていいだろう、というあたりが大方の人の一致するところでしょう。よほど変なことというのは、たとえばたくさんスピンのからなる大きな塊を一度にひっくり返そうとするとか、そういった類です。こういう(暗黙の)了解のもとに、モンテカルロ法によって系の動的な性質を計算することもよく行われています。経験的にはこれで問題は生じないようです。なお、イジングモデルはもともと運動方程式がない系なので確率過程でしかダイナミクスを考えることができません。この場合はモンテカルロ法が正しいダイナミクスを与えます。

5 乱数

乱数には熱雑音などから作りだされる自然乱数と計算機上のアルゴリズムで生成する疑似乱数があります。自然乱数が使えらるといいのですが、自然乱数発生器は高価(という噂)なのでおいそれとは使えませんから、普通の人は疑似乱数を使うことになります。では、計算機で生成されるものはなぜ「疑似」なのか。

代表的な疑似乱数生成法に乗算合同法があります。これは

$$r_{n+1} = ar_n \pmod{b}$$

という漸化式から整数乱数列 $\{r_i\}$ を生成するというものです。大雑把に言えば、大きい整数に大きい整数を掛けて整数で割った余りは乱数に見える、というわけです。この方法は、周期が短いとか生成された乱数の間にある種の相関が見られるとかいう理由で、最近(少なくともそのままの形では)あまり用いられませんが、例としてわかりやすいのでこれで話を進めます。まず、生成アルゴリズムが非常に簡単で乱数列は完全に予測可能なものになっています。一見するとベルヌイシフトのようなものですから予測不能のカオスを生成するような気がしますが、残念ながら有限精度(32ビットとか)の整数しか使わないのでそうはいきません。また、同じ理由で、上で

も触れた通り周期があります。周期がある以上、本当の乱数ではありえません。これに限らず、現実にはアルゴリズムで生成される乱数は必ず周期を持ちます。でも、乱数と呼ぶからには周期以内ではランダムに見えるのしょうから、実用上は、シミュレーションで使う乱数の個数がその周期よりも十分に少ないことを確認しておくべきです。

そもそも、Algorithmic Complexity の立場からすると、本当にランダムな数列とは、それを表現するには数列そのものを打ち出すプログラムを書くしかないもののことです。だから、こんなふうにプログラムが一行で書けてしまうほどアルゴリズム的に簡単なものが乱数として使えること自体、自明ではありません。実際、どんなによくできた(ように見える)疑似乱数にも、かならずそれを落第させるような検定を原理的には見つけることができるはず。言い換えると、あるシミュレーションにうまく使えた疑似乱数が別のシミュレーションでもうまく使える保証はありません。こういった話を考え始めるときりがありませんが、四則演算で乱数を作ろうってのは神に背こうとする行為だ、とフォン・ノイマンも言っているらしいので、このくらいにしましょう。要は、周期が短いとか相関があるとか、そういうことが初めから分かっている乱数はとりあえず使わないことにして、その先はケースバイケースなのです。使っている計算機に初めから組み込まれている乱数については、特に注意しましょう。昔、IBM の汎用機のライブラリーに標準ではいていた乱数ルーチン RANDU は、続けて得られる3つの数を座標とみなして3次元空間に点を打っていくと、すべての点があたった15枚の平行な面上に乗ってしまうというものだった、という有名な話があります(IBM を使ってる人は急いでチェック!)。

合同法に代わって最近(特にスピン系の分野で)よく用いられるのはM系列と呼ばれる乱数です。この方法では、整数乱数列を

$$r_n = r_{n-p} \oplus r_{n-q}$$

として生成します。 $\oplus$ は排他的論理和で、 (p, q) としては $(250, 103)$ などがよく使われています(この組み合わせによる乱数生成ルーチンを R250 と呼ぶことがあります)。この方法は、周期が非常に長く取れるにもかかわらず、基本的な部分は排他的論理和ひ

とつでできるという簡単さが特徴です。詳細は文献を参照してください。

6 ヒストグラム法

さて、プログラムも書いたし、使う乱数も決めたし、あとはシミュレーションをするだけです。普通に考えれば、温度を決めたなら、その温度での物理量だけが計算できるはず。そこをちょっとひねって、シミュレーションを行なった温度とは別の温度での物理量も計算してしまおう、というのがヒストグラム法です。これは Ferrenberg and Swendsen (FS) の提唱以来大流行しましたが、実際には大昔から何度も再発見されてきたものです(日本でも FS 以前に阿久津-阿久津によって使われています)。ただ、この方法を本当に実用的に使うには速い計算機がどうしても必要なので、FS 以前にはなかなか普及しなかったのでしょう(教訓: タイミングが大事)。

ヒストグラム法の原理はとても簡単です。ある温度 β でシミュレーションを行い、そのエネルギーの出現頻度分布(ヒストグラム) $P(E; \beta)$ を作ったとしましょう。これは状態密度 $N(E)$ と

$$P(E; \beta) \propto N(E) \exp(-\beta E)$$

の関係にありますから、逆に解くことにより $N(E)$ が (factor は別にして) 得られます。すると、別の温度 β' でのエネルギー分布が

$$P(E; \beta') \propto P(E; \beta) \exp((\beta - \beta')E)$$

で与えられるはず。このとき、物理量 $Q(E)$ の温度 β' での平均値は

$$\langle Q(\beta') \rangle = \frac{\sum_E Q(E) P(E; \beta) \exp((\beta - \beta')E)}{\sum_E P(E; \beta) \exp((\beta - \beta')E)}$$

から計算できます。これで、温度についての外挿ができました。温度以外のパラメータについても同様に考えられます。

2次元イジング模型について実際に計算してみましょう。図1に 32×32 の系をちょうど相転移点 β_c で計算して作ったエネルギーヒストグラムを示します。これを $1.025T_c$ ($T_c = 1/\beta_c$) にシフトしたのが図2、逆に $0.95T_c$ にシフトしたのが図3です(規格化してません)。とりあえず、もっともらしい形をしているのが第1点。でも、高温へシフトしたほうでは

高エネルギー側、低温へシフトしたほうでは低エネルギー側がぎざぎざしているのが第2点です。第2点については、結局もとのヒストグラムでは値が小さかったところ(従って、統計誤差も大きい)を指数関数を掛けて無理やり持ちあげたのが原因です。特に $0.95T_c$ のほうでは端のほうがちぎれています。これはもとのヒストグラムがこれ以上低いエネルギーのところに値を持たなかったためです。ない袖は振れないんだからしょうがない。

これをふまえて、エネルギーの温度依存性(図4)を見てください。白丸は T_c でのシミュレーションからの温度外挿、黒丸は $0.9T_c$ からの温度外挿、菱形は外挿せずに直接その温度で計算したものです。外挿は温度のシフトがあまり大きくなければよい結果をあたえることがわかります。あまり温度を大きく動かそうとすると外挿結果が悪くなるのも見ることができます。これは「ない袖は振れない現象」なので仕方ありません。結局、温度外挿が信頼できるのは袖が振れる範囲ですから、だいたい比熱 C とスピンの数 N を用いて、 $\sqrt{CN}$ 程度の範囲になります。その範囲でも、まだ問題はあります。上で見たようにシフトしたヒストグラムの精度が左右対象ではないので、なにか系統的な統計誤差が現れる可能性があります。これらの問題を解決するためには、複数の温度でヒストグラムを作って、その間を内挿するような方法が考えられます。

7 変なアンサンブル

モンテカルロ法の原理のところへ戻ってみると、カノニカルアンサンブルが得られたのは結局、詳細釣り合いの式にカノニカルの平衡分布を入れたからでした。当然、ほかのアンサンブルを考えることもできます。ここでは、代表的なものとして、カノニカルよりもエネルギー幅が狭くなるミクロカノニカル法と、逆にエネルギー幅が広がるマルチカノニカル法を取りあげます。

7.1 ミクロカノニカル法

ミクロカノニカルアンサンブルといえば全エネルギー保存のアンサンブルですが、ここでは Creutz によって提唱された daemon 法について説明しましょう。この方法では、問題とする系(たとえばスピン

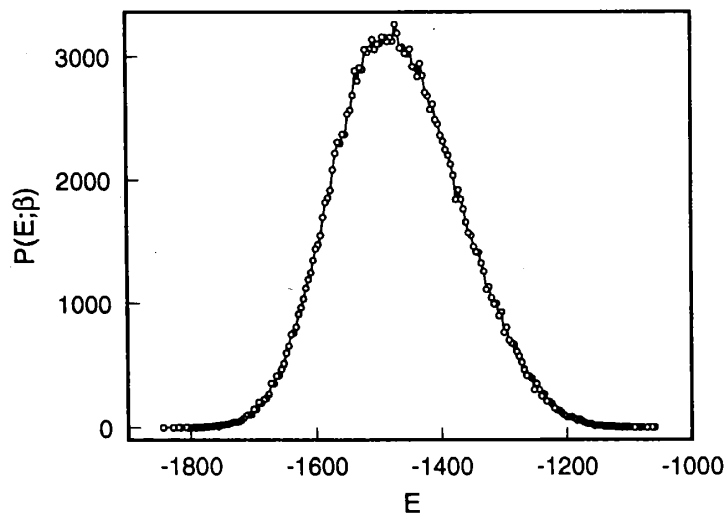


図 1: β_c でのシミュレーションで作ったヒストグラム

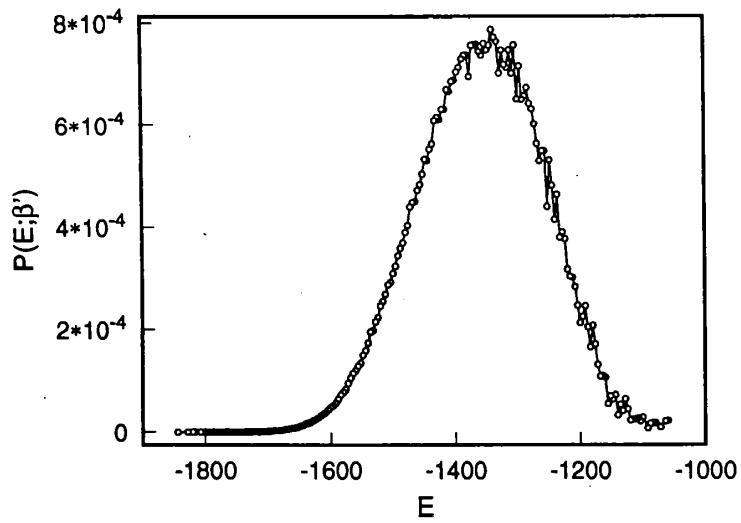


図 2: β_c から $1.025T_c$ へシフトしたヒストグラム

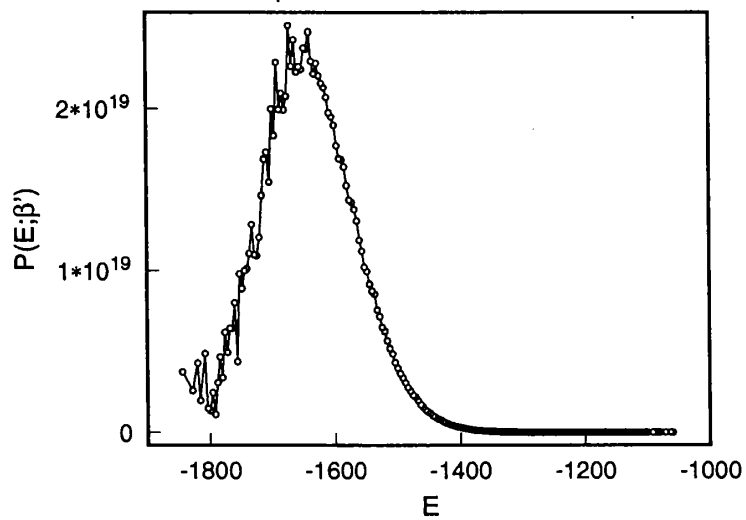


図 3: β_c から $0.95T_c$ へシフトしたヒストグラム

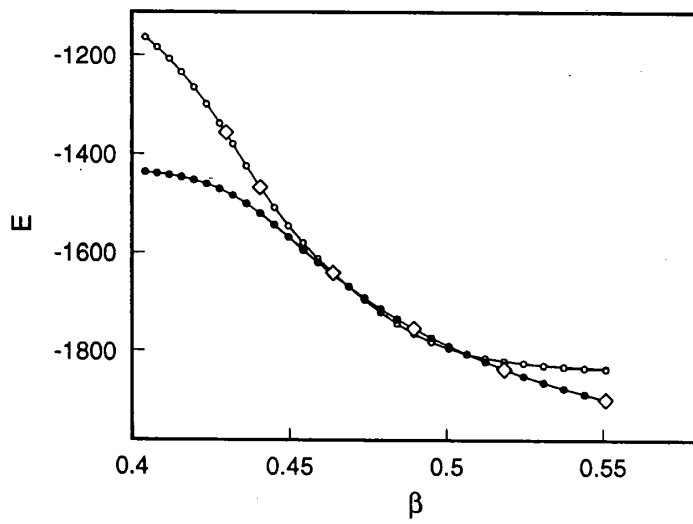


図4: ヒストグラム法によるエネルギーの平均値。白丸は T_c からの温度外挿、黒丸は $0.9T_c$ からの温度外挿、菱形は直接その温度で計算したもの。

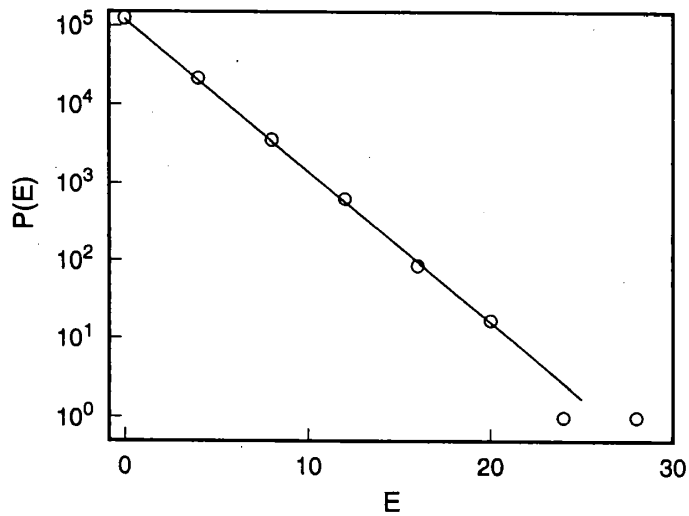


図5: demon のエネルギー分布

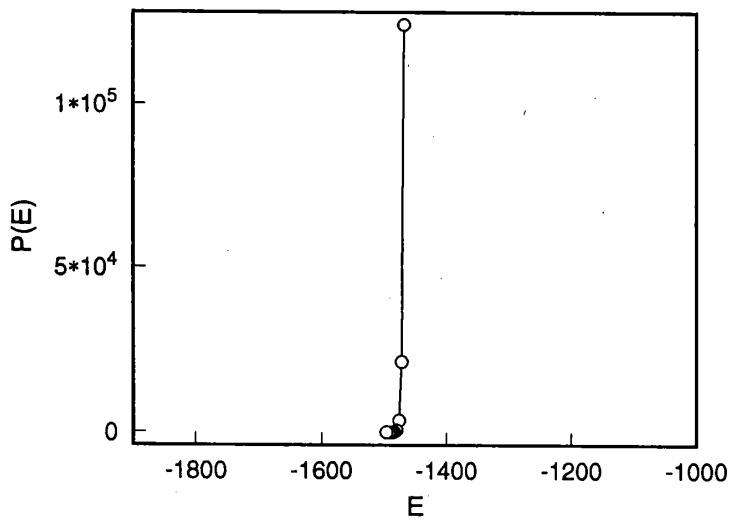


図6: demon 法によるスピン系のエネルギーヒストグラム

系)のほかに、demon と呼ばれる余分の自由度を用意します。demon は背中にエネルギーをいれた袋を背負っています (Creutz がそう言っている)。系の状態を変えたときにエネルギーが下がるなら、demon は系の状態を変えた上で、発生した余分のエネルギーを袋にしまします。逆にエネルギーが上がる場合は、その分を袋の中のエネルギーでまかなえるときだけ状態を変化させ、エネルギーを袋の中から系に移します。こうして、系と demon の全体としてはエネルギーを保存しつつ、系の状態を更新してゆくことができます。ここで、学部統計力学で習ったことを思い出してください。大きい系と小さい系が接触して全体として孤立系になっている時には小さい系のエネルギー分布がカノニカル分布になるのです。図5は、前と同じ 32×32 のイジング模型で demon 法によるシミュレーションを行ったときの、demon のエネルギー分布です。確かに

$$P(E) \propto \exp(-\beta E)$$

の形になっているのがわかります。このグラフの傾きから温度 β が求められます。ただ 32×32 程度の系がちゃんと熱浴の働きをするのもちょっと驚きです。ちなみに、このときの、系のエネルギーヒストグラムは図6のように非常に鋭いものになります。

一見すると、demon 法は完全に決定論的にも行なえそうです。しかし、なまじ状態更新に乱数を使わないだけに、スピンの選び方まで規則的にしてしまうとエルゴード性を満足する保証がありません。実際、非常に低温を考えると、場合によっては周期的な状態更新になってしまうことがすぐにわかります。ですから、スピンの選び方はランダムにしておくのが無難なようです。実は、demon なんてものを考えずにスピン系だけでエネルギーを保存しつつ状態を更新する方法もあるのですが、実用性はともかくとして、あんまり面白くないので (あんまり変じゃないので) 説明しません。

7.2 マルチカノニカル法

最近の面白い方法といえば、このマルチカノニカル法が一番でしょう。ヒストグラム法が使えるなら、シミュレーション自体はカノニカルアンサンブルでやらなくたって構わない、というのが発想のもとです。実際、エネルギーの勝手な関数 $f(E)$ を

使ってボルツマン重率の代わりに

$$P_{eq}(i) \propto \exp(-f(E_i))$$

としても (βE の代わりに $f(E)$)、こうして得られたエネルギーヒストグラム $P(E)$ からカノニカルエネルギー分布を構成できます。Berg and Neuhaus によるマルチカノニカル法では、なるべく

$$\exp(-f(E)) \propto \frac{1}{N(E)}$$

に近くなるように $f(E)$ を決めます。これが完全に成り立っていれば、エネルギーヒストグラムは全エネルギーにわたって一定値になるはずですが、これなら、ヒストグラム法によってどの温度のカノニカル分布を作ろうと「ない袖は振れない」現象に悩まされる心配はありません。しかし、考えてみると、 $1/N(E)$ を知っているというのは答を知っていることですから、これはとてもできそうに思えません。Berg and Neuhaus の賢いところは、別に完全じゃなくてもいいじゃないか、必要なエネルギー範囲でだいたい $1/N(E)$ に近ければ実用的には問題ないじゃないか、と気づいたことです。だいたい合っていればいいというなら、カノニカルモンテカルロ法を使っていろいろな温度で短い計算をして、それをもとに $f(E)$ を決められます。一度で満足な結果が得られなければ、その $f(E)$ でまた短い計算をして、その結果からさらに $f(E)$ を改良すればいいのです。そうして、満足できる $f(E)$ が決まったところで、改めて長いシミュレーションを行ない、物理量を計算します。

ところで、問題は $f(E)$ です。いきなり多項式なりなんなりで $1/N(E)$ を表してもいいはずですが、Berg and Neuhaus の提案は、エネルギーをいくつかの区間に区切って、各区間で

$$f_i(E) = \alpha_i + \beta_i E$$

とすることでした (i はエネルギー区間の番号、 α_i 、 β_i は定数)。こうすると、各区間ごとに違う温度 β_i でシミュレーションしているように見えて、なんとなく気持ちがいいからでしょうか。 α_i は、 $f_i(E)$ が区間の境界で滑らかにつながるように決めます。結局これは、 $\log N(E)$ を折れ線で近似したことにはほかなりません。まあ、実用上はこれでよいようです。だめなら別の関数を考えればよろしい。なお、注意ですが、この方法では区間をまたがるような状態更新の

際に $f(E)$ の関数形が必要になるため、遷移確率はエネルギー差だけでは書けず、系の全エネルギーの情報を必要とします。また、ヒストグラム法の有効範囲と同じ議論から、系が大きくなればエネルギーの分割数を増やさなくてはならないことがわかってきます。

これも、例によってイジング模型での例をお目にかけます。図7はマルチカノニカル法で得たエネルギーヒストグラムです。なんだかみっともないですが、これはパラメータを適当に決めて、その後の改良をやっていないからです。頑張れば、もっと広いエネルギー範囲でもっと平らなヒストグラムにできます。もっとも、いくつかの山がはっきり見えていて、いかにも区間ごとに違う温度でシミュレーションしたのがよくわかるので、デモンストレーションとしてはかえっていいかもしれません。とにかく、このヒストグラムが一回のシミュレーションで得られました。これから、ヒストグラム法によってエネルギーの温度依存性を計算したのが図8の実線です。各温度で直接計算した菱形のデータと非常によく合っているのがわかります。

このマルチカノニカル法は、そもそも、1次相転移点のように状態間の自由エネルギー障壁が高くて平衡分布が得にくい問題のために開発されました。自由エネルギー障壁の高いところは、カノニカルのシミュレーションをやるとヒストグラムが小さな値しかとらず、ひどい時にはまったく障壁を越えられないことがあります。マルチカノニカル法でヒストグラムを平らにするのは、ちょうど自由エネルギー障壁を低くしてやることに対応するので、こういう問題に有効だろうというわけです。また、これはスピングラスのように複雑な自由エネルギー構造を持つ系にも有効とされています。ただ、自由エネルギーが本当に多谷構造を持っているとすると、どこまで有効なものやよくわかりません。いろいろ試してみる必要があるでしょう。

8 おわりに

というわけで、夏の学校で話した内容をまとめさせて貰いました。僕にはよい機会でしたが、「物性研究」読者のかたにとってよかったかどうかはよくわかりません。慌てて書いたので、思い違いや間違い

もあると思います。御指摘いただければ幸いです。

本稿を書くにあたっては、共同研究者である都立大理学部岡部豊氏、東大工学部の伊藤伸泰氏との日頃の議論が有益でした。また、統計数理研の伊庭幸人氏にも有益な議論をしていただきました。そして、話す機会を与えていただいたサブゼミ世話人の相川明さんはじめ夏の学校の関係者のみなさんにも感謝しております。

超不完全な references

* e-mail : kikuchi@godzilla.phys.sci.osaka-u.ac.jp

1. スピン系を中心としたモンテカルロシミュレーションの標準的な教科書としては

Monte-Carlo Simulation in Statistical Physics — An Introduction, 2nd. edition : K. Binder and D. W. Heermann (Springer, 1992)

2. モンテカルロ法の立場から統計力学を見直したもののとして

情報の統計力学：篠本滋 (丸善、1993)

統計学者・数理工学者のための統計物理入門— 格子スピン模型とマルコフ連鎖モンテカルロ法を中心に
して：伊庭幸人 (プレプリント)

3. 乱数の問題については

乱数：伏見正則 (東大出版会、1989)

The Art of Computer Programming, Vol. 2, 2nd. edition: D.E. Knuth (Addison-Wesley, 1981) (準数値算法：サイエンス社、1981)

4. 高速化(ベクトル化・マルチスピンコーディング)の解説

岡部・菊池：固体物理 **21** (1986) 725.

5. ヒストグラム法

Y. Akutsu and N. Akutsu : J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 9.

A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen : Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635.; Phys. Rev. Lett. **63** (1988) 1195.

6. demon 法

Creutz : Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1411.

7. マルチカノニカルアンサンブル

B. A. Berg and T. Neuhaus : Phys. Lett. **B267** (1991) 249 ; Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 9.

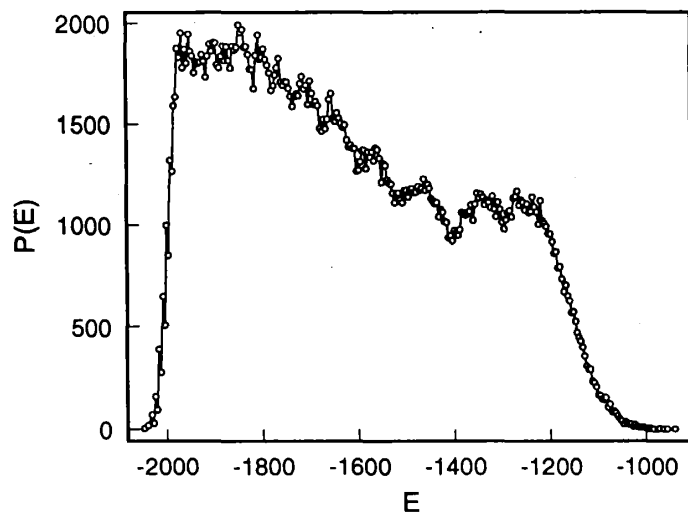


図 7: マルチカノニカル法によるエネルギー分布

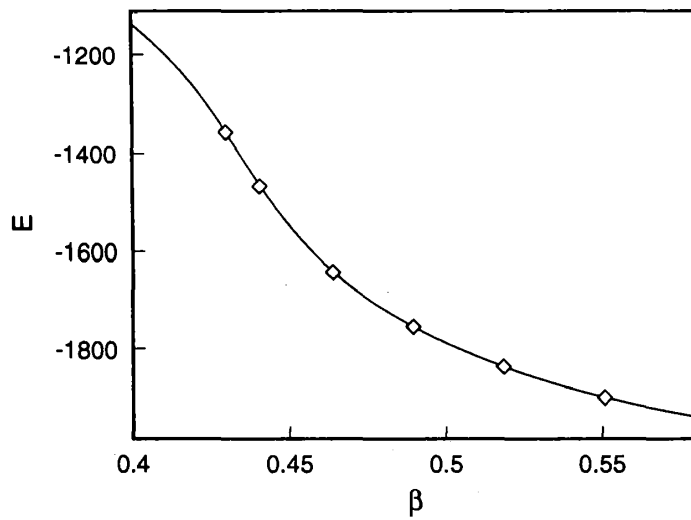


図 8: マルチカノニカル法によるエネルギーの平均値。菱形は直接その温度で計算したもの。