

問題 1

(1)

問題

円周率を求める為に (1) 式の左辺のモンテカルロ計算を行う. サンプル数は $10, 10^3, 10^5, 10^7$ とした独立な計算を 10 回おこなうことで, (2) 式から各サンプル数での推定値とその精度を報告せよ.

$$\int_0^1 dx \frac{4}{1+x^2} = \pi \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{推定値 } \bar{f} &\equiv \frac{\sum_i \bar{f}_i}{N_M} \\ \text{精度} &\equiv \sqrt{\frac{\sum_i (\bar{f}_i - \bar{f})^2}{N_M(N_M - 1)}} \end{aligned} \quad (2)$$

結果

prob1.c を用いて, 計算を行ったときの推定値と精度は表 1 となった.

表 1 サンプル数に対する推定値と精度

サンプル数	推定値	精度
10	3.054660	4.810140×10^{-2}
10^3	3.150047	6.184993×10^{-3}
10^5	3.141384	4.283122×10^{-4}
10^7	3.141558	5.412121×10^{-5}

(2)

問題

前問の結果と (3) 式と比較し, (2) 式の妥当性を検証せよ.

$$\text{平均 } \langle f(X) \rangle, \text{ 分散 } \frac{1}{M} [\langle f^2(X) \rangle - \langle f(X) \rangle^2] \quad (3)$$

解答

推定値が表 1 より, 真の値 π に近づいていることから推定値の式は妥当であることがわかる. また, 精度は表 1 よりサンプル数が 100 倍になると $\frac{1}{10}$ になっている, つまり分散のルートと同様にサンプル数 M に対して $\frac{1}{\sqrt{M}}$ で減少していることから精度の式は妥当であることがわかる.

問題 2

(1)

問題

メトロポリス法の遷移確率が次の詳細釣り合い条件を満たす事を証明せよ.

$$P(X \rightarrow Y)W(X) = P(Y \rightarrow X)W(Y) \quad (4)$$

解答

メトロポリス法の手順より遷移確率 $P(X \rightarrow Y)$ は $P(X \rightarrow Y) = Q(X, Y) \min \left[1, \frac{W(Y)}{W(X)} \right]$ と表せる.
これより,

$$P(X \rightarrow Y)W(X) = Q(X, Y) \min \left[1, \frac{W(Y)}{W(X)} \right] W(X) \quad (5)$$

$$= Q(X, Y) \min \left[\frac{W(X)}{W(Y)}, 1 \right] W(Y) \quad [\because W(X) \geq 0, W(Y) \geq 0] \quad (6)$$

$$= Q(Y, X) \min \left[1, \frac{W(X)}{W(Y)} \right] W(Y) \quad [\because Q \text{ が対称}] \quad (7)$$

$$= P(Y \rightarrow X)W(Y) \quad (8)$$

(2)

問題

遷移確率が詳細釣り合い条件 ((4) 式) を満たす場合は, 釣り合い条件 ((9) 式) が成立する事を証明せよ

$$\forall X, W(X) = \sum_Y P(Y \rightarrow X)W(Y) \quad (9)$$

解答

(4) 式の両辺で Y について状態空間 S 全体で和をとると,

$$\sum_{Y \in S} P(X \rightarrow Y)W(X) = \sum_{Y \in S} P(Y \rightarrow X)W(Y) \quad (10)$$

$$\therefore W(X) = \sum_{Y \in S} P(Y \rightarrow X)W(Y) \quad [\because \sum_{Y \in S} P(X \rightarrow Y) = 1] \quad (11)$$

今, X は任意であるので

$$\forall X, W(X) = \sum_Y P(Y \rightarrow X)W(Y) \quad (12)$$

問題 3

100 回コインを投げて表が出る回数を考える.ただし, 表と裏が出る確率が等しいコインを用いるとする.

(1)

問題

表の出る回数を k 回とした時の, 確率変数 k の従う確率分布を導け.

解答

100 回のうち, どの k 回で表が出るかの組み合わせは ${}_{100}C_k$ である. また, 表が k 回出る確率は $\left(\frac{1}{2}\right)^k$, 裏が $100 - k$ 回出る確率は $\left(\frac{1}{2}\right)^{100-k}$ である. したがって, 求める確率分布 $P(k)$ は

$$P(k) = {}_{100}C_k \left(\frac{1}{2}\right)^k \left(\frac{1}{2}\right)^{100-k} \quad (13)$$

$$= \frac{100!}{k!(100-k)!} \frac{1}{2^{100}} \quad (14)$$

(2)

問題

乱数を使って, 100 回コインを投げる事に相当する試行を 10000 回行い, (1) の結果と比較せよ.

解答

prob3.2.cにより 100 回コインを投げるシミュレーションを 10000 回試行し, 10000 回分の表の出た回数についての相対度数ヒストグラムが図 1 である. なお, 緑線は (1) で求めた確率分布 $P(k)$ である.

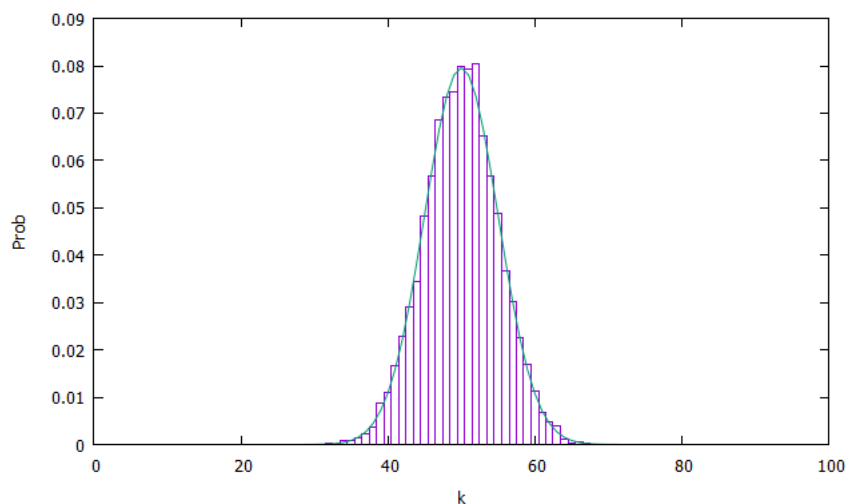


図 1 シミュレーションデータのヒストグラムと確率分布 $P(k)$ (緑線)

図 1 より, シミュレーションによる相対度数ヒストグラムと実際の確率分布がほとんど合致していることがわかる.

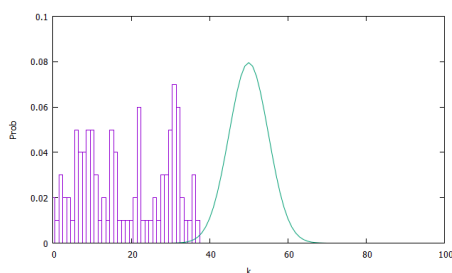
(3)

問題

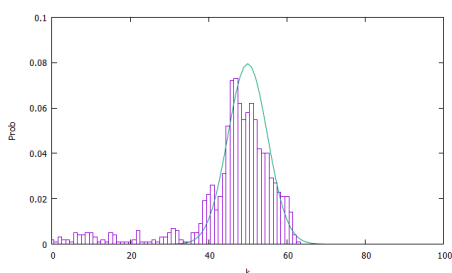
メトロポリスの方法を使って, (1) で求めた確率分布に従うマルコフ過程から 10000 個分のサンプル列を作成せよ.そして, サンプル列のヒストグラムの遷移を (2) の場合と比較し定常分布への収束を報告せよ.初期値として, $k = 0, 50$ の 2 通りの場合を試す.また, $Q(k, k') \equiv \frac{1}{2}\delta_{|k-k'|=1} + \frac{1}{2}\delta_{(k,k')=(0,100)} + \frac{1}{2}\delta_{(k,k')=(100,0)}$ とする.ここで, $\delta_{\text{条件式}}$ は, 条件式が成立している場合に 1, 不成立では 0 とする (クロネッカーのデルタ).

解答

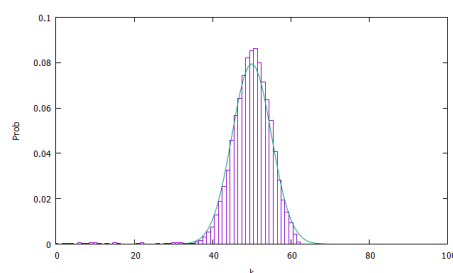
prob3_3.cによりメトロポリス法を用いて, 各初期値に対する 10000 個のサンプル列を生成する.初期値 $k = 0$ におけるサンプル列の最初から 100 個, 1000 個, 10000 個についての相対頻度ヒストグラムが図 2 である.また, 初期値 $k = 50$ におけるサンプル列の最初から 100 個, 1000 個, 10000 個についての相対頻度ヒストグラムが図 3 である.比較のための (2) のシミュレーションのデータの最初から 100 個, 1000 個, 10000 個についての相対頻度ヒストグラムが図 4 である.なお, 緑線は (1) で求めた確率分布である.



(i) サンプル数 100 個

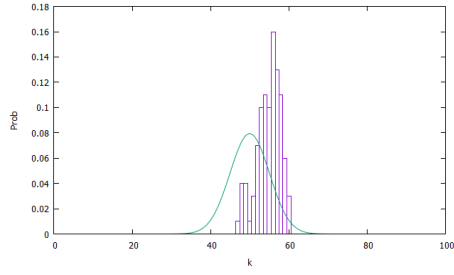


(ii) サンプル数 1000 個

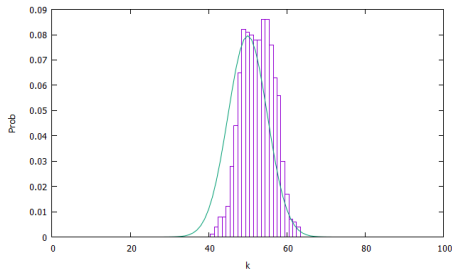


(iii) サンプル数 10000 個

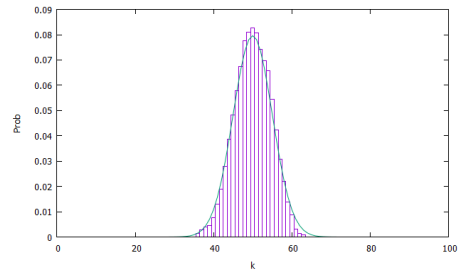
図 2 初期値 $k = 0$ のサンプル列のヒストグラムと確率分布 $P(k)$ (緑線)



(i) サンプル数 100 個

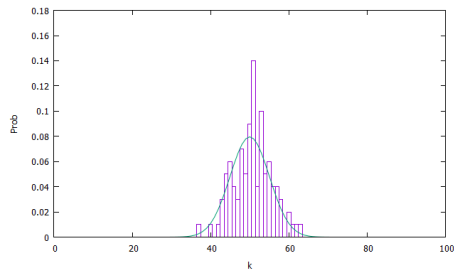


(ii) サンプル数 1000 個

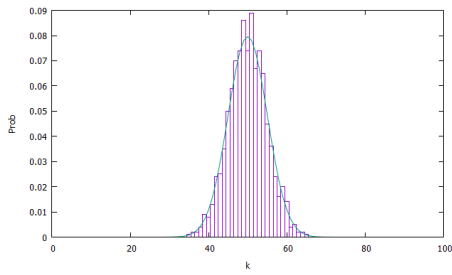


(iii) サンプル数 10000 個

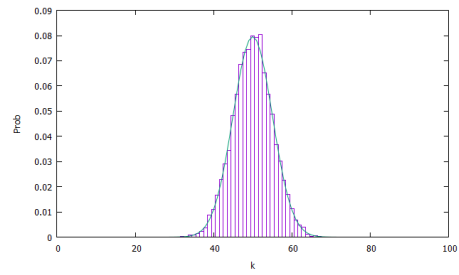
図 3 初期値 $k = 50$ のサンプル列のヒストグラムと確率分布 $P(k)$ (緑線)



(i) データ数 100 個



(ii) データ数 1000 個



(iii) データ数 10000 個

図 4 (2) のシミュレーションデータのヒストグラムと確率分布 $P(k)$ (緑線)

図 2 と図 3 と図 4 よりサンプル数が 10000 個のとき, 初期値に依らずサンプル列の相対頻度ヒストグラムは定常分布 $P(k)$ へ収束することがわかる. しかし, サンプル数が 100 個のとき, 初期値 $k = 50$ の場合は定常分布と似たような $k = 50$ あたりに山を持つ分布であるのに対し, 初期値 $k = 0$ の場合は定

常分布とは大きく異なる分布になっている。すなわち、サンプル数が少ないと初期値の影響が出てくるが、サンプル数が十分大きくなるにつれて消えていくことがわかる。

問題 4

ドーナツ形状の表面に貼付けたグリッドを考える。グリッドの格子点の座標を (x, y) ($0 \leq x, y \leq (L-1)$) とすると、ドーナツ形状より格子点 (L, y) は $(0, y)$ と、 (x, L) は $(x, 0)$ と同一点になる (周期的境界条件)。さらに各格子点 (x, y) とその上下左右にある一つの格子点を連結することをその格子点間にボンドを置くと表現することにする。

(1)

問題

システムサイズ $L = 16$ で各々のボンドをランダムに (確率 $1/2$ で) 置いた場合の浸透確率 p (浸透がおきる確率) を、サンプル数 10^4 のモンテカルロ計算から求めよ。ここでは、あるクラスターがシステムに分断面 $x = 0$ と $x = L/2$ に同時に接触している場合を伸長していると定義する。

解答

prob4.1.cにより計算した結果は $p = 0.9804$ である。

(2)

問題

浸透しているクラスターに含まれる格子点の数 M の割合 (M/L^2) の変化をシステムサイズ $L = 16, 32, 64$ と変えて、サンプル数を 10^4 としたモンテカルロ計算より求めよ。ただし、浸透していない場合は $M = 0$ と定義する事。また、複数の浸透クラスターがある場合、それらの最大サイズのクラスターに含まれる格子点の数を M とする。

解答

prob4.2.cにより計算した結果は表 2 である。

表 2 システムサイズ (L) と最大浸透クラスターに含まれる格子点の割合 (M/L^2)

L	M/L^2
16	0.731102
32	0.678903
64	0.632563

表 2 より、システムサイズが大きくなるにつれて最大浸透クラスターに含まれる格子点の割合は小さくなっていくことがわかる。

問題 5

(1)

問題

マルコフ連鎖モンテカルロ法のサンプル列の相関を見る為に, 初期状態の影響が消える様子をグラフを用いて示せ. 観察する量は隣接する人が同じ状態である確率 E :

$$E(S) \equiv \frac{1}{2L^2} \sum_{\langle \mathbf{r} \mathbf{r}' \rangle} \delta_{s(\mathbf{r}), s(\mathbf{r}')} \quad (15)$$

ただし, 活動度は $z = \sqrt{2}$, システムサイズは $L = 48$ とし, 正気状態 $S(t = 0)$ は完全にランダムなものとする.

解答

prob5_1.cにより 5 つの初期状態から各々 500 個の状態 S を生成し, $E(S)$ を計算する. ステップ数と $E(S)$ の関係は図 5 である.

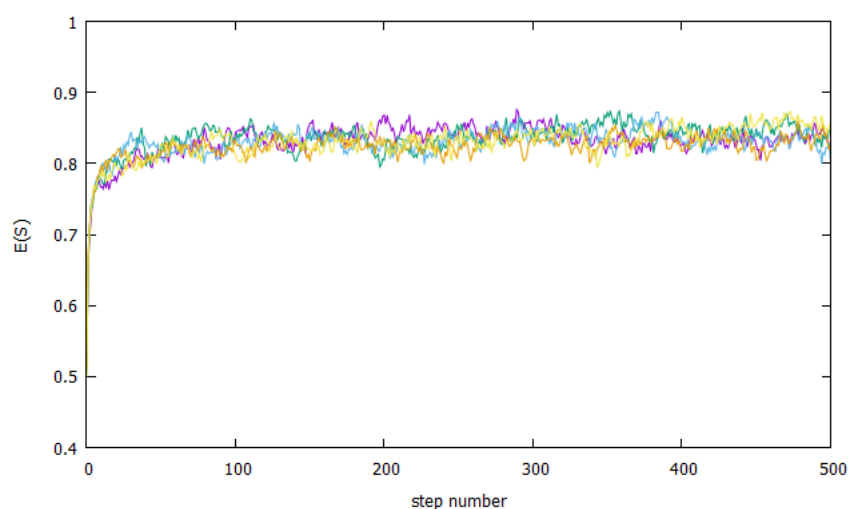


図 5 ステップ数と $E(S)$ の関係

図 5 より, ステップ数が大きくなると初期状態に依らず $E(S)$ が一定の値に収束し, 初期状態の影響が消えていることがわかる.

(2)

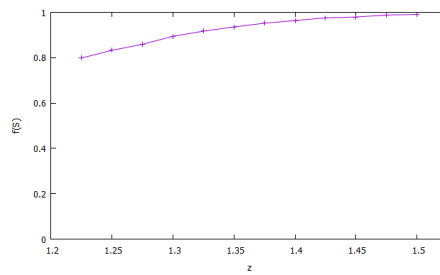
問題

2 つの量 ($f_p(G)$ と $m(S, G)$) の期待値について, 活動度とシステムサイズへの依存性をモンテカルロ法により求めて報告せよ. ただし, 活動度は区間 $(1.2, 1.5]$ 内に均等に 12 点以上, システムサイズは $L = 12, 16, 24, 32, 48$ とし, 各モンテカルロ計算でのサンプリング数は 10^5 MCS 以上 (例: 10^4 MCS

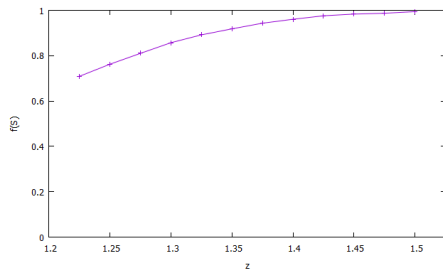
を 10 セット) とする. また, 初期値の影響が残らないように, 別途の 10^3 MCS を最初に行い, 平均値の計算にはそれを含めない事.

解答

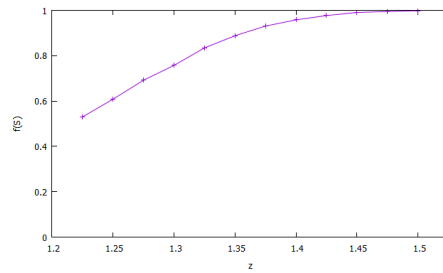
10^4 MCS を 10 セット行い, 合計 10^5 MCS のサンプルを生成する. ただし, 各セットのはじめに別途に 10^3 MCS 行う. prob5.2.c により計算した各システムサイズにおける活動度 z と $f_p(G)$ の期待値の関係は図 6 である. また, 活動度 z と $m(S, G)$ の期待値の関係は図 7 である.



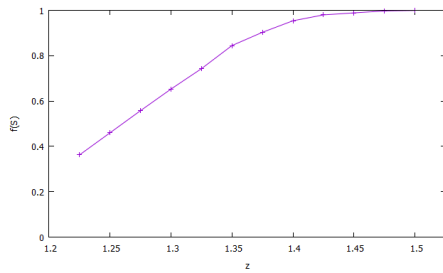
(i) L=12



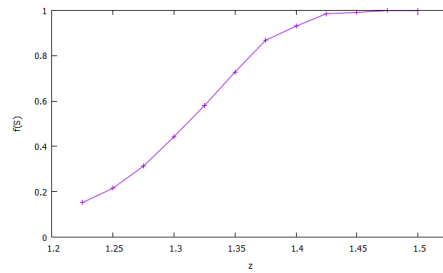
(ii) L=16



(iii) L=24

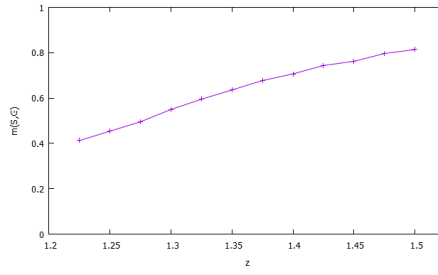


(iv) L=32

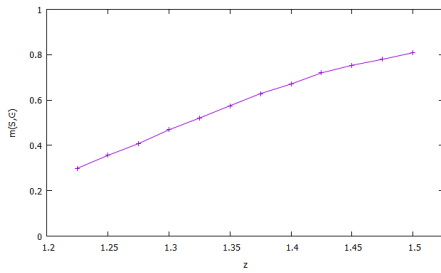


(v) L=48

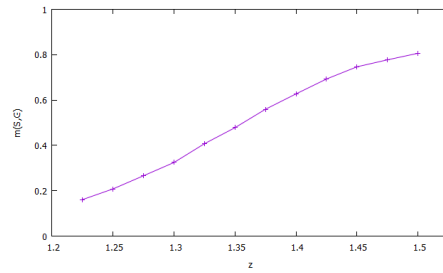
図 6 各システムサイズにおける活動度 z と $f_p(G)$ の期待値の関係



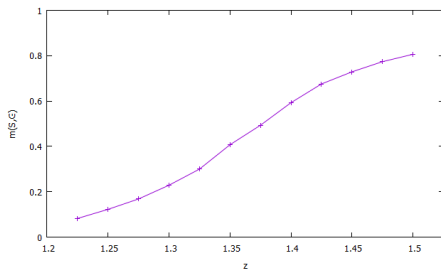
(i) L=12



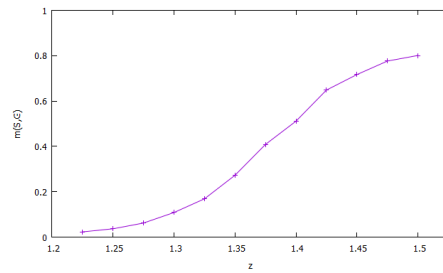
(ii) L=16



(iii) L=24



(iv) L=32



(v) L=48

図 7 各システムサイズにおける活動度 z と $m(S, G)$ の関係

図 6, 図 7 より, $f_p(G)$ と $m(S, G)$ の期待値は活動度 z が大きくなるにつれて大きくなり, システムサイズが大きくなるにつれて小さくなることがわかる. また, z が 1.4 より大きくなるとシステムサイズに依らず $f_p(G)$ はほとんど 1 になる.

(3)

問題

上の計算結果に基づき, システムサイズが大きくなった極限での浸透確率と浸透クラスターに含まれる人数の割合の振る舞いを予測せよ.

解答

図 6, 図 7 よりグラフはシグモイド関数のようになっていることがわかる. ここでシグモイド関数と

は $f(x) = \frac{1}{1+e^{-ax}}$ で表される関数である. システムサイズが大きくなるにつれてグラフのカーブが急激になる, つまりシグモイド関数のパラメータ a が大きくなったグラフになる. したがって, システムサイズを極限に大きくするとシグモイド関数のパラメータは無限大になる. ここで, $a = \infty$ のシグモイド関数は階段関数となる. 以上のことから, システムサイズが大きくなった極限での浸透確率と浸透クラスターに含まれる人数の割合の振る舞いはある閾値 $z = z_0$ 以下では 0, z_0 以上では 1 となると予想される.