

# 計算機実験 II (L1) — モンテカルロ法

藤堂眞治

wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

2023/10/06

- 1 講義・実習の概要
- 2 乱択アルゴリズム
- 3 物理過程のシミュレーション
- 4 モンテカルロ積分
- 5 多体系の統計力学
- 6 マルコフ連鎖モンテカルロ

# 講義・実習の目的

- 理論・実験を問わず、学部～大学院～で必要となる現代的かつ普遍的な計算機の素養を身につける
- UNIX 環境に慣れる (シェル、ファイル操作、エディタ)
- ネットワークの活用 (リモートログイン、共同作業)
- プログラムの作成 (C 言語、コンパイラ、プログラム実行)
- 基本的な数値計算アルゴリズム・数値計算の常識を学ぶ
- 科学技術文書作成に慣れる ( $\text{\LaTeX}$ , グラフ作成)
- 物理学における具体的な問題を通して実践的な知識と経験を身につける

# 身に付けて欲しいこと

- ツールとしてないものは自分で作る (物理の伝統)
- すでにあるものは積極的に再利用する (車輪の再発明をしない)
- 数学公式と数値計算アルゴリズムは別物
- 刻み幅・近似度合いを変えて何度か計算を行う
- グラフ化して目で見てみる
- 計算量 (コスト) のスケーリング (次数) に気をつける
- (計算機は指示したことを指示したようにしかやってくれないということ認識する)
- 問題の解き方は一通りではない
- いろいろな手法を組み合わせる

# 講義・実習内容

- 問題解決型: 計算機実験 I で身に付けた知識をもとに、より高度な数値計算手法・アルゴリズムを学び、物理学における具体的な問題への応用を通して実践的な知識と経験を身につける
  - ▶ 取り上げる問題
    - ランダムプロセス
    - 統計力学 (イジング模型)
    - 拡散方程式、波動方程式
    - 量子力学 (1 粒子系、実時間発展、横磁場イジング模型、量子コンピュータ)
    - 力学系・粒子系
  - ▶ 取り上げる計算手法・アルゴリズム
    - モンテカルロ法・マルコフ連鎖モンテカルロ法
    - 行列の対角化・疎行列分解
    - 有限差分法、偏微分方程式の解法
    - 常微分方程式の積分、分子動力学
    - 連続最適化、離散最適化

などを予定

# 講義日程 (予定)

## ■ 全 8 回 (金曜 5 限 16:50-18:35)

- ▶ 10 月 6 日 (金) 講義 1: 多体系の統計力学とモンテカルロ法
- ▶ 10 月 13 日 (金) 実習 1
- ▶ 10 月 20 日 (金) 休講 (物理学教室コロキウム)
- ▶ 10 月 27 日 (金) 講義 2: 偏微分方程式と多体系の量子力学
- ▶ 11 月 10 日 (金) 休講 (物理学教室コロキウム)
- ▶ 11 月 17 日 (金) 講義 3: 少数多体系・分子動力学
- ▶ 11 月 21 日 (火) 演習 2
- ▶ 12 月 1 日 (金) 講義 4: 最適化問題
- ▶ 12 月 8 日 (金) 実習 3
- ▶ 12 月 15 日 (金) 休講 (物理学教室コロキウム)
- ▶ 12 月 22 日 (金) 休講 (ニュートン祭)
- ▶ 1 月 5 日 (金) 実習 4
- ▶ 1 月 19 日 (金) 休講
- ▶ 1 月 26 日 (金) 休講

# 講義と実習

- スタッフ [computer@phys.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:computer@phys.s.u-tokyo.ac.jp)
  - ▶ 講義: 藤堂
  - ▶ 実習: 高橋助教、山崎助教
  - ▶ 実習 TA: 高波
- 講義・実習の進め方
  - ▶ 講義 (座学) と実習を実施
  - ▶ 実習の回には各自 PC を持参すること
- 評価
  - ▶ 出席 (ITC-LMS でのアンケートに回答)  
講義・実習当日 16:50-20:00 の間に回答
  - ▶ レポート (計 2 回)

## 乱択アルゴリズム (randomized algorithm)

- 実行中に乱数を参照してその値によって振る舞いをかえるアルゴリズム
- ラスベガスアルゴリズム
  - ▶ 乱数の出方によらず常に正しい結果を与えるアルゴリズム
  - ▶ 平均化効果を利用するアルゴリズム：クイックソート
- モンテカルロアルゴリズム
  - ▶ 乱数の出方によっては誤った結果を与えるアルゴリズム
  - ▶ 標本を利用するアルゴリズム：最大カット問題
  - ▶ くじ引き型のアルゴリズム：素数性判定、関数の同一性、行列積の検算
  - ▶ サンプルングアルゴリズム：モンテカルロ積分、マルコフ連鎖モンテカルロ

# 乱択クイックソート

- 分割統治法に基づく再帰的なソートアルゴリズム
  - ▶ 配列の中から要素 (ピボット) を一つ選び、左からその値以上の要素を、右からその値未満の要素を検索し入れ替え
  - ▶ 検索が終了したら 2 つの集合に分ける
  - ▶ それぞれの集合について再帰的にソートを行う
  - ▶ 結果を結合
- ほぼ同じ大きさの集合に分けることができる場合の実行ステップ数  $\sim \mathcal{O}(n \log n)$
- 最悪 (ピボットが常に最大 or 最小値) の場合のステップ数  $\sim \mathcal{O}(n^2)$
- 分割に用いる要素を「ランダムに」選ぶ  $\Rightarrow$  平均ステップ数  $\sim \mathcal{O}(n \log n)$

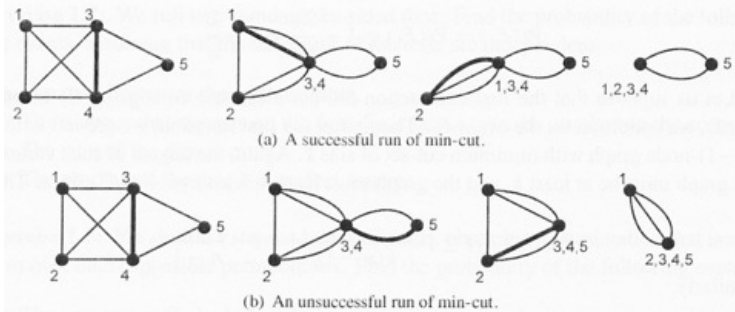


The diagram illustrates the recursive splitting and merging of an array for Merge Sort. The initial array is [3, 2, 2, 6, 3, 9, 1, 4, 5, 8, 1, 8, 7, 9, 2, 5]. It is split into two halves: [2, 2, 1, 1] and [9, 3, 4, 5, 8, 6, 8, 7, 9, 3, 5]. The left half is further split into [2, 2, 2] and [1]. The right half is split into [5, 3, 4, 5, 8, 6, 8, 7, 3] and [9, 9]. The process continues until single elements are reached, and then the elements are merged back in sorted order. The final sorted array is [1, 1, 2, 2, 2, 3, 3, 4, 5, 5, 6, 7, 8, 8, 9, 9].

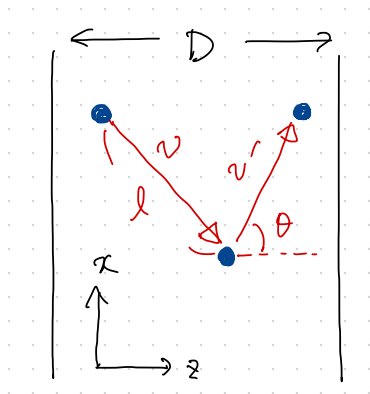
# 最小カット問題

- 「最小カット (min-cut)」 = 連結グラフを二つの部分に分けるために切らなければならない辺 (エッジ) の集合のうち、もっとも小さいもの
- “Randomized Min-Cut Algorithm”
  - ▶ ランダムに辺を一つ選ぶ
  - ▶ 辺の両端の頂点を一つにつぶす (自己ループは取り除く)
  - ▶ 残りの頂点が二つになるまで繰り返す
- 上の試行を何回も繰り返して、得られたうちで最小なカットを結果とする
- 頂点の数が  $n$  のグラフに関して、正解が得られる確率：少なくとも  $\frac{2}{n(n-1)}$

## 最小カット問題



## 物質中の中性子輸送



# 物質中の中性子輸送

- ある板状の物質 (厚さ  $D$ ) に垂直に中性子が入射したときの吸収率・透過率・反射率
- 中性子はある確率で物質の原子核に衝突し、確率  $p_c$  で吸収、 $p_s = 1 - p_c$  で散乱される
  - ▶ 衝突は確率的に起きるので、次の衝突までの距離  $\ell$  は指数分布にしたがう ( $\lambda^{-1}$ : 平均自由行程)

$$p(\ell) = \lambda e^{-\lambda \ell}$$

- ▶ 衝突時、ランダムな方向に散乱されるとすると

$$p(\theta, \phi) d\theta d\phi = \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi$$

$$p(\theta) = \frac{\sin \theta}{2} \quad p(\phi) = \frac{1}{2\pi}$$



# モンテカルロ積分

## ■ 円周率を与える公式

$$\pi = \lim_{c \rightarrow \infty} \int_0^c f(x) dx \quad f(x) = \frac{2}{\cosh x}$$

## ■ スタンダードな数値積分法: 台形公式 (一次式補間), シンプソン公式 (二次式補間), etc

## ■ カットオフ $c$ の値

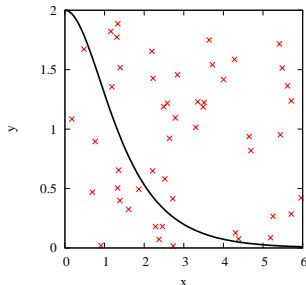
- ▶ 誤差は  $c$  が大きくなると指数関数的に小さくなる
- ▶ 例えば  $c = 20$  で誤差は  $8.3 \times 10^{-9}$  以下

# 単純サンプリング

- $[0, c]$  と  $[0, 2]$  の一様分布から二次元上の点  $(x, y)$  を  $M$  組生成
- $f(x)$  の下に入った数  $N$  をカウント

$$\pi \simeq 2c \times \frac{N}{M}$$

| $M$     | 平均値   | 誤差    |
|---------|-------|-------|
| 100     | 4.8   | 1.3   |
| 10000   | 3.12  | 0.11  |
| 1000000 | 3.154 | 0.011 |





# 統計誤差の評価

- このモンテカルロ積分が実際に評価している積分

$$\frac{1}{2c} \int_0^c \int_0^2 \theta(x, y) dx dy \quad \theta(x, y) = \begin{cases} 2c & \text{if } y < f(x) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- 統計誤差の評価

- ▶ 試行の成功確率 (success probability):  $q = \frac{\pi}{2c}$
- ▶ 一回の試行の平均値 (mean):  $\mu = 2c \times q = \pi$
- ▶ 分散 (variance):

$$s^2 = (2c)^2 q + 0^2(1 - q) - \mu^2 = 2c\pi - \pi^2 = 4c^2 q(1 - q)$$

- ▶  $c = 20$  の時:

$$q \simeq 0.0785 \quad s^2 \simeq 116$$

# 中心極限定理 (central limiting theorem)

- $M$  回の試行のうち  $N$  回成功する確率 ( $\pi$  の見積もり値が  $m = 2cN/M$  となる確率)

$$p(m = 2c \frac{N}{M}) = \frac{M!}{N!(M-N)!} q^N (1-q)^{M-N}$$

- 両辺の対数をとってスターリングの公式を使う

$$\log p(m) \simeq \frac{M}{2c} (m \log \frac{\pi}{m} + (2c - m) \log \frac{2c - \pi}{2c - m})$$

- $m$  に関して平均値  $\pi$  の周りで二次まで展開

$$\log p(m) \simeq -\frac{M}{2s^2} (m - \pi)^2$$

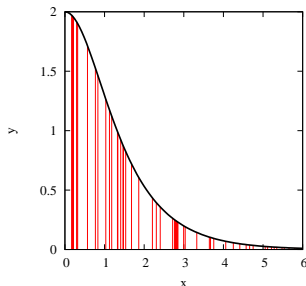
- 分散  $s^2/M$  の正規分布 (中心極限定理)
- 統計誤差は  $\sqrt{M}$  に反比例して減少  $\Rightarrow$  1桁小さくするには 100 倍の計算が必要

## 単純サンプリング (2)

- $y$  に関してあらかじめ積分
- $[0, c]$  の一様乱数  $x$  を用いて

$$\int_0^c \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx \simeq \frac{1}{M} \sum_i c f(x_i) \quad p(x) = \frac{1}{c}$$

| $M$     | 平均値   | 誤差    |
|---------|-------|-------|
| 100     | 3.1   | 0.8   |
| 10000   | 3.00  | 0.08  |
| 1000000 | 3.147 | 0.008 |



## 誤差の評価

- 関数  $f(x)/p(x)$  の分散

$$s^2 = \int_0^c \left( \frac{f(x)}{p(x)} \right)^2 p(x) dx - \pi^2 = c \int_0^\infty f^2(x) dx - \pi^2 = 4c - \pi^2$$

- $c = 20$  のとき  $s^2 \simeq 70.1$
- 同じ試行回数  $M$  の時, 誤差は  $\sqrt{70.1/116} = 0.77$  倍
- もしくは  $M$  を  $116/70.1 = 1.65$  倍したのと同じ効果
- 積分次元は低ければ低いほど良い

# 次元の呪い (curse of dimensionality)

- $n$  次元超立方体 (1 辺の長さ 2, 体積  $2^n$ ) に対する  $n$  次元単位球の体積の割合

$$q = \frac{\pi^{n/2} / \Gamma(\frac{n}{2} + 1)}{2^n} \sim (\pi/n)^{n/2}$$

$n = 10$  で 0.2%,  $n = 20$  で  $10^{-8}$ ,  $n = 100$  で  $10^{-70}$

- モンテカルロ積分で球の体積を計算しようとするとき、標準偏差に対する平均値の割合は指数関数的に小さい

$$\frac{q}{\sqrt{q(1-q)}} \sim \sqrt{q}$$

- 次元が高くなるにつれて指数関数的に大きな  $M$  が必要となる
- c.f. 通常の数値積分 (台形公式等) でも同様

# 重点的サンプリング

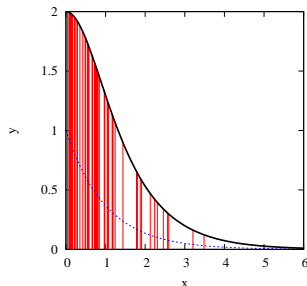
- (平均値が同じなら) 被積分関数の分散が小さければ小さいほど良い  
(= 統計誤差が小さい)
- サンプリングの分布  $p(x)$  の形が  $f(x)$  に近い程良い
- $f(x)$  の値が大きい所はより頻繁にサンプリング
- 重点的サンプリング (importance sampling)

# 重点的サンプリング

- 積分への寄与が大きな箇所をより重点的にサンプリング

$$p(x) = e^{-x}$$

| $M$     | 平均値    | 誤差     |
|---------|--------|--------|
| 100     | 3.06   | 0.06   |
| 10000   | 3.142  | 0.006  |
| 1000000 | 3.1412 | 0.0006 |

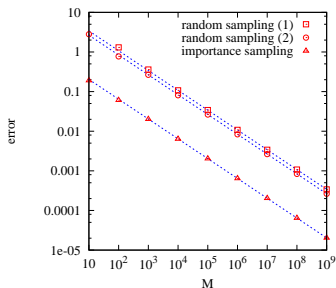


# 誤差のサンプル数依存性

- 関数  $f(x)/p(x)$  の分散

$$s^2 = \int_0^c \left( \frac{f(x)}{p(x)} \right)^2 p(x) dx - \pi^2 \simeq 2(2 + \pi) - \pi^2 = 0.414$$

- 同じ試行回数  $M$  の時, 誤差は  
 $\sqrt{0.414/116} = 0.06$  倍
- もしくは  $M$  を 280 倍したのと同じ





# 理想的な重点的サンプリング?

- 理想的には  $p(x)$  を  $f(x)$  に比例するように取れば良い
- このとき  $f(x)/p(x)$  は定数 (分散 0)  $\rightarrow$  1 回のサンプリングで厳密な結果が得られる???
- 実際には  $p(x)$  が確率密度となるように規格化条件から定数  $c$  を決めておく必要あり

$$\int p(x) dx = c \int f(x) dx = 1$$

- $c$  は今欲しい答そのもの!

# 典型的な統計力学モデル

## ■ 古典粒子系 (連続変数)

▶ 調和振動子  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2$

▶ 多粒子系

$$H = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{ij} V(x_i, x_j)$$

▶ バネビーズ模型 (高分子の模型)

$$H = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \frac{k}{2} \sum_{ij} |x_i - x_j|^2$$

## ■ 古典スピン模型 (離散変数/連続変数)

▶ イジング模型  $H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad \sigma_i = \pm 1$

▶ ハイゼンベルグ模型  $H = -J \sum_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad |\vec{S}_i| = 1$

# 多体系の統計力学

- カノニカル分布  $\pi(s) = \exp[-\beta H(s)]/Z$  ( $\beta = k_B T$ )
- 分配関数・自由エネルギー

$$Z(T) = \int \exp[-\beta H(p, x)] dp dx \quad (\text{連続変数})$$

$$= \sum_s \exp[-\beta H(s)] \quad (\text{離散変数})$$

$$f(T) = -\beta^{-1} \log Z(T)$$

- 物理量の期待値

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \int A(p, x) \exp[-\beta H(p, x)] dp dx \quad (\text{連続変数})$$

$$= Z^{-1} \sum_s A(s) \exp[-\beta H(s)] \quad (\text{離散変数})$$

# 多体系の統計力学

## ■ 内部エネルギー

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = Z^{-1} \sum_s H(s) \exp[-\beta H(s)] = \langle H \rangle$$

## ■ 比熱

$$C = \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\beta^2}{N} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)$$

# 様々な数値計算手法

- 数え上げ・数値積分 (離散変数・連続変数)
  - ▶ 計算コスト  $\times$  (指数関数的)
  - ▶ メモリコスト  $\circ (\mathcal{O}(1))$
- 転送行列法 (離散変数)
  - ▶ 計算コスト  $\triangle$  (指数関数的)
  - ▶ メモリコスト  $\triangle$  (指数関数的)
- 分子動力学法 (連続変数)
  - ▶ 計算コスト  $\circ (\mathcal{O}(N))$
  - ▶ メモリコスト  $\circ (\mathcal{O}(N))$
  - ▶ 統計誤差あり
- マルコフ連鎖モンテカルロ法 (離散変数・連続変数)
  - ▶ 計算コスト  $\circ (\mathcal{O}(N))$
  - ▶ メモリコスト  $\circ (\mathcal{O}(N))$
  - ▶ 統計誤差あり

- カノニカル分布:  $\pi(s) = \exp[-\beta\mathcal{H}(s)] / \sum_s \exp[-\beta\mathcal{H}(s)]$
- 物理量の期待値:  $\langle A \rangle = \sum_s A(s) \exp[-\beta\mathcal{H}(s)] / \sum_s \exp[-\beta\mathcal{H}(s)]$
- $\sum_s$  は全ての状態に関する和 (系の体積に対して指数関数的に増加)  
⇒ 次元の呪い
- 全ての状態について和をとるかわりに、ボルツマン重みが多い (=  $\mathcal{H}$  が小さい) ところだけを重点的にサンプリング  
低温では  $\exp[-\beta\mathcal{H}(s)]$  の分散が指数関数的に大きくなる ⇒ 配位  $s$  をカノニカル分布にしたがって生成することで分散を小さく

# マルコフ連鎖モンテカルロ

- 任意の多次元確率分布 (今の場合はカノニカル分布) について、その分布したがるサンプル (状態) を生成する方法
  - ▶ 直接カノニカル分布から独立したサンプリングをおこなうことは難しい
  - ▶ 直前の状態からある確率にしたがって、次の状態を生成 (マルコフ連鎖、Markov chain)

$$\begin{aligned}\Pr(X_{n+1} = s_j \mid X_0 = s_{i_0}, X_1 = s_{i_1}, \dots, X_n = s_i) \\ = \Pr(X_{n+1} = s_j \mid X_n = s_i) = P_{i,j}\end{aligned}$$

- ▶ 長時間極限でカノニカル分布が達成されるように遷移確率 (行列) $P_{i,j}$ を選ぶ

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(X_n = s_j) \sim \pi_j = \exp[-\beta \mathcal{H}(s_j)]$$

# 遷移行列が満たすべき条件

- 確率であるための条件:  $0 \leq P_{i,j} \leq 1$
- 確率保存:  $\sum_j P_{i,j} = 1$
- エルゴード性 (ergodicity):  
ある整数  $M$  が存在し、 $n \geq M$  の全ての  $n$  で  $(P^n)_{i,j} > 0$
- つりあいの条件 (balance condition):

$$\sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j} = \pi_j$$

カノニカル分布が固有値 1 の左固有ベクトル



◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ≡ ▶ ◀ ≡ ▶ ≡ ↺ 🔍 ↻ [mcmc-04.tex] 33/43

## 詳細つりあいの条件

- 実際には「つりあいの条件」よりもさらに厳しい「詳細つりあいの条件 (detailed balance condition)」を考えることが多い

$$\pi_i P_{i,j} = \pi_j P_{j,i}$$

- 両辺を  $i$  について和をとると「つりあいの条件」に帰着する
- 「詳細つりあいの条件」は「つりあいの条件」の十分条件

## ■ ポテンシャルエネルギー

$$V(x) = x^2$$

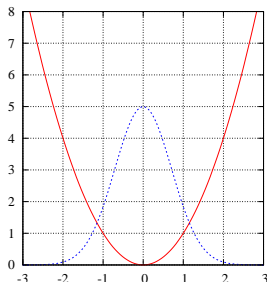
- ## ■ カノニカル分布

$$P(x) = \frac{e^{-\beta V(x)}}{\int e^{-\beta V(x)} dx}$$

- ## ■ 物理量の期待値

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int x^2 e^{-\beta V(x)} dx}{\int e^{-\beta V(x)} dx}$$

- 逆温度  $\beta$  が大きいと被積分関数の分散が非常に大きい  $\Rightarrow$  重点的サンプリング

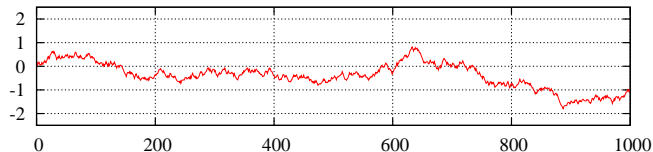


## Metropolis 法

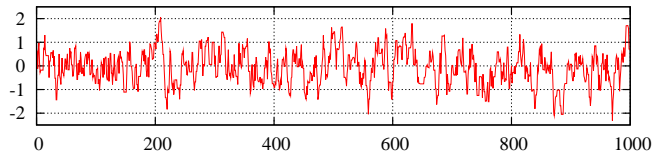
- 現在の配位  $x$  から、試行配位 (trial configuration)  $x'$  を  $x - \Delta \sim x + \Delta$  の一様分布より選ぶ
- 確率  $\min\left(1, \frac{e^{-\beta V(x')}}{e^{-\beta V(x)}}\right)$  で  $x'$  を採択 (accept)。棄却 (reject) された場合にはもとの  $x$  のまま
- 物理量の測定 (reject された場合にもカウントする)
- 採択確率 (acceptance probability) は、 $\frac{e^{-\beta V(x')}}{e^{-\beta V(x)} + e^{-\beta V(x')}}$  でもよい
- 例: [harmonic.c](#)

# Metropolis 法によるシミュレーション

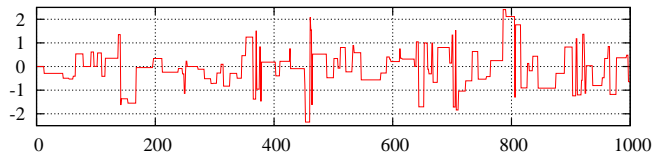
■  $\Delta = 0.1$



■  $\Delta = 1$



■  $\Delta = 10$



## 自己相関関数 (autocorrelation function)

- エルゴード性 + つりあい条件  $\Rightarrow$  原理的に正しいマルコフ連鎖モンテカルロ
- 実際には自己相関を考慮する必要あり
- 自己相関関数

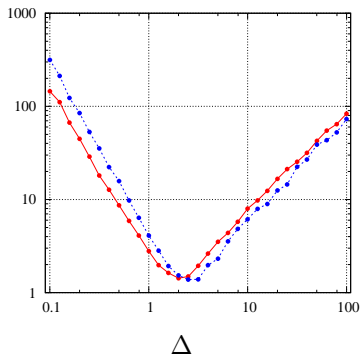
$$C(t) = \frac{\langle A_{i+t} A_i \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \sim \exp(-\frac{t}{\tau})$$

- $\tau$ : 自己相関時間 (autocorrelation time)
- 自己相関の影響により、統計的な「有効サンプル数」が減少

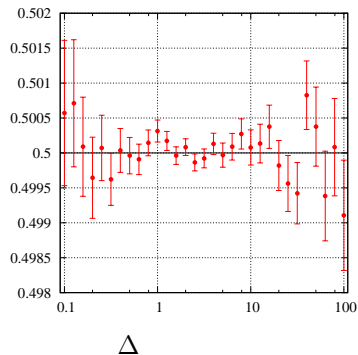
$$M \rightarrow \frac{M}{1 + 2\tau}$$

# 自己相関時間と統計誤差

自己相関時間



統計誤差



# マルコフ連鎖モンテカルロ法

- 任意の多次元確率分布関数について、その分布したがるサンプルを生成する方法
  - ▶ 分布関数は正規化されている必要はない
  - ▶ 逆に、正規化定数をマルコフ連鎖モンテカルロで計算するのは難しい
- 統計誤差はサンプルの生の分散  $s^2$  とサンプル数  $M$ 、自己相関時間  $\tau$  で決まる

$$\sigma^2 \simeq \frac{s^2(1 + 2\tau)}{M}$$

- ▶ 一度に大きく配位を動かそうとすると棄却率が増加  $\Rightarrow \tau$  が増加
  - ▶ 動かす幅を小さくすると棄却率が高いが相関が消えない  $\Rightarrow \tau$  が増加
  - ▶ 非局所更新法、拡張アンサンブル法など様々な方法が使われている
- 物理以外でも、Bayes 推定や機械学習、社会現象のシミュレーションなど広く使われている



# イジング模型に対するモンテカルロ法

- 更新の単位は一つのスピンとするのが一番自然
- メトロポリス法に必要なのは更新前後のエネルギー差だけなので、全エネルギーを計算しなおす必要なし

```
for (s = 0; s < num_sites; ++s) {  
    delta = 0.0;  
    for (j = 0; j < num_neighbors; ++j) {  
        v = mat_elem(neighbor, s, j);  
        delta += 2 * J * spin[s] * spin[v];  
    }  
    if (random() < exp(-beta * delta))  
        spin[s] = -1 * spin[s];  
}
```

# 物理量の計算

## ■ 内部エネルギー $E$

- ▶ 初期状態のスピンを全て上向き (1) に取ると  $E = -J \times \text{ボンド数}$
- ▶ モンテカルロステップ毎にエネルギーの変化分を計算しているので、採択された場合にはその値を足し込む

## ■ 比熱 $C$ : 内部エネルギーのゆらぎから計算できる

$$C = \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{NT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

## ■ 磁化 $m$ : スピンの値の平均値 $m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$

- ▶ 外部磁場がない場合、対称性から  $m$  の長時間平均は厳密には零になる
- ▶ 熱力学極限では対称性が自発的に破れて、低温で有限の  $m$
- ▶ シミュレーションでは  $m$  ではなく  $m^2$  を見るとよい

- 全てのスピンについて一通り更新を試すのを、1 モンテカルロステップと数える
- どれくらいのモンテカルロステップが必要かは、あらかじめは分からない
- 典型的には、 $10^4$ — $10^6$  程度にとることが多い
- 熱平衡化 (thermalization)
  - ▶ 初期配位依存性を取り除くため、モンテカルロステップの最初の部分は捨てる (burn-in time)
  - ▶ 典型的には、全体の 1 割程度を捨てることが多い