メトロポリス法について

二次元イジングモデルのシミュレーションというところでは、詳細釣合原理を使って、状態 s が P(s) の割合で出現する平衡状態への近づけ方について記しました。

具体的には、状態 a か状態ら b に遷移する確率 $T(a \longrightarrow b)$ を、ハミルトニアンの差

$$H_{s2} - H_{s1} = \Delta E$$

としたときに、

$$T = \min\{e^{-\beta\Delta E}, 1\}$$

とすればよい、というものでした。

詳細釣合原理についての補足

状態の組、$s_0, s_1, \cdots$ の分布が確率分布 P(s) に従うようにしたい状況を考えます。状態の組は何らかの方法で作り、別に同じ状態が出てきても構いません。物理系で言えば、この場合 P(s) とは平衡状態における状態 s の出現確率分布です。この状態の組の作り方の一つの指針を与えるのが詳細釣合の原理です。

詳細釣合原理とは、2 状態 a,b 間の遷移確率 T が詳細釣合の条件

$$P(a)T(a \longrightarrow b) = P(b)T(b \longrightarrow a)$$

を満たすようにしてやれば、それにしたがって作られる状態列 $\{s_i\}$ の分布は P(s) に収束する、というものです。

ところで

$$T(a \longrightarrow b) = min\{1, p(x_j)/p(x_i)\}$$

としてやれば、詳細釣合条件を満たします。平衡状態への近づけ方というところで述べた方法は T をこのようにした場合に相当します。

メトロポリス法

メトロポリス法とは、

$$T(a \longrightarrow b) = \min\{e^{-\beta\Delta E}, 1\}$$

による状態遷移の実装です。

1. 初期の微視的状態の設定
2. ランダムな試行変化（仮の状態遷移）を行う。実際に状態遷移させるかどうかは今から決める。
3. 試行変化によるエネルギー増分 $\Delta E = E_{\text{試行後}} - E_{\text{試行前}}$ を計算する。
4. $\Delta E \leq 0$ であれば、その状態遷移を行う。状態遷移確率が 1 であることに相当する。8 へ。
5. $\Delta E > 0$ であれば、$w(e^{-\beta\Delta E})$ を計算する。
6. $[0, 1]$ 間の乱数 r を発生させる。
7. $r \leq w$ のとき試行を受け入れ、それ以外の期とは受け入れないで元の状態のまま。これは状態遷移確率が w となることに相当する。

8. 必要な物理量を計算する。（その時の磁化やエネルギー等）
9. 2 から 8 を十分な数の微視的状態が得られるまで行う。
10. 一定の間隔[*1]で、その間の平均エネルギーや平均磁化等を計算する。

こんな感じです。

[*1] 1 モンテカルロステップ (mcs) のことである。1mcs あたりスピンの個数回だけ 2 から 8 の実行をする等がありうる。