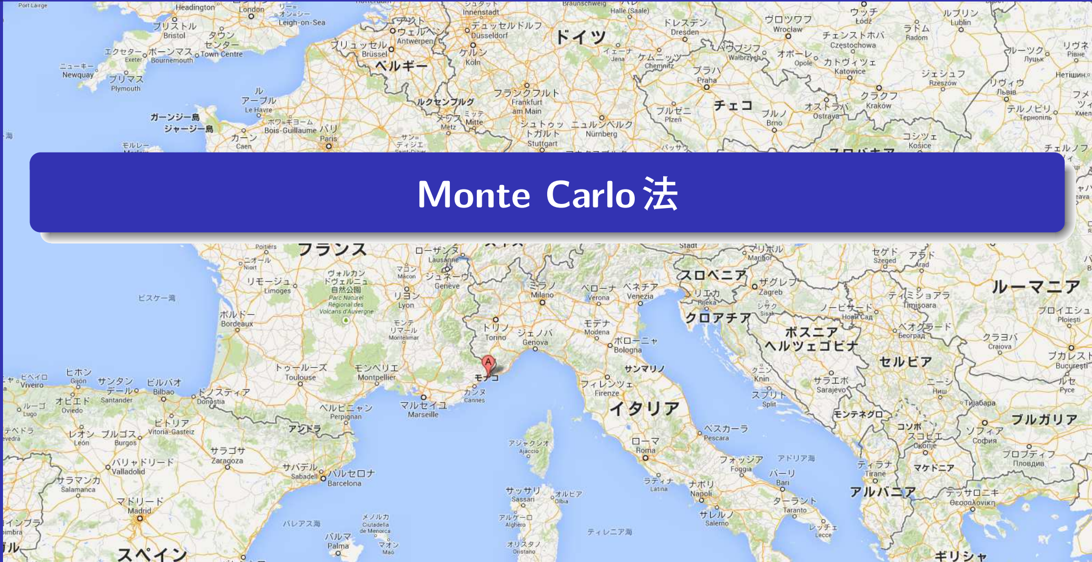
Monte Carlo 法



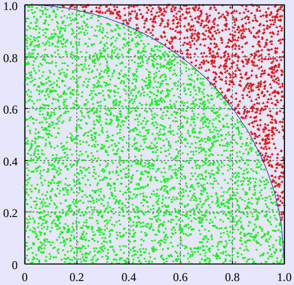
モンテカルロ法

乱数を用いたモデル計算

- 確率微分方程式
  Brown 運動
  (Langevin 方程式)
- 交通流
  渋滞発生のメカニズム

数値積分

例：π の計算



Metropolis 法

確率過程を用いた統計平均の計算方法 (古典系)

↑ を利用して多体系の Schrödinger 方程式を解く。
量子モンテカルロ法

統計平均

- 多体系の物理量 X の観測値

$$\overline{X} = \frac{1}{t-t_0}\int_{t_0}^{t} X(t')dt' \qquad t-t_0 : \text{観測時間}$$

- モンテカルロ (MC) 法

$$\langle X\rangle = \int_{\text{位相空間}} X(\vec{r}^N, \vec{p}^N) f(\vec{r}^N, \vec{p}^N) d\vec{r}^N d\vec{p}^N \qquad f(\vec{r}^N, \vec{p}^N) : \text{確率分布関数}$$

エルゴード仮説

系の取りうる全ての状態は $t \sim t_0$ の間に満遍なく出現する。

$$\overline{X} = \langle X\rangle$$

Metropolis 法 [Metropolis et al., 1953]

Canonical 平均

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\text{位相空間}} X(\vec{r}^N, \vec{p}^N) \exp\left\{-\beta H(\vec{r}^N, \vec{p}^N)\right\} d\vec{r}^N d\vec{p}^N$$

$$\to \left\{ \sum_{i=\text{全ての状態}} X_i \exp(-\beta H_i) \right\} \Big/ \left\{ \sum_{i=\text{全ての状態}} \exp(-\beta H_i) \right\}$$

$\downarrow$ サンプル平均で近似

$$\sim \left\{ \sum_{i=\text{サンプル状態}} X_i \exp(-\beta H_i) \right\} \Big/ \left\{ \sum_{i=\text{サンプル状態}} \exp(-\beta H_i) \right\}$$

「全ての状態」は数が莫大なので、サンプルについての平均を考える。

重み付きサンプリング
importance sampling

サンプル平均

$$\langle X \rangle \propto \sum_{i=1}^{M} X_i \exp(-\beta H_i)$$

位相空間からサンプルを M 個 無作為抽出
位相空間が広いと、ほとんどのサンプルで $\exp(-\beta H_i) \sim 0$ となり、ほとんどのサンプルが無駄
無作為抽出をやめて、$\exp(-\beta H_i) \neq 0$ がたくさん出るように 作為的に抽出

$$\langle X \rangle \propto \int_{\text{位相空間}} \left[\underset{\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim}{\frac{X(\vec{r}^N, \vec{p}^N)}{w(\vec{r}^N, \vec{p}^N)} \exp\left\{-\beta H(\vec{r}^N, \vec{p}^N)\right\}} \right] w(\vec{r}^N, \vec{p}^N) d\vec{r}^N d\vec{p}^N$$

↑ 確率 $w(\vec{r}^N, \vec{p}^N) d\vec{r}^N d\vec{p}^N$ で状態を 作為的に抽出

重み付きサンプリングの例

TV の視聴率

- 全世帯調査：不可能
- サンプリング調査
- 無作為抽出
  $w(\vec{r}) =$ 一定 だと
  $\rightarrow$ 一票の格差が生じる
- 人口密度で重み付けして格差を是正
  $w(\vec{r}) \neq$ 一定
- 平日と正月で $w(\vec{r})$ は違う

* [日本地図の無料イラスト集,]

重みの選び方

$$\langle X\rangle \propto \int_{\text{位相空間}} \left[\frac{X(\vec{r}^N, \vec{p}^N)}{w(\vec{r}^N, \vec{p}^N)} \exp\left\{-\beta H(\vec{r}^N, \vec{p}^N)\right\} \right] w(\vec{r}^N, \vec{p}^N) d\vec{r}^N d\vec{p}^N$$

作為的抽出

$$w(\vec{r}^N, \vec{p}^N) = \frac{\exp\left\{-\beta H(\vec{r}^N, \vec{p}^N)\right\}}{Z}$$

$$\langle X\rangle = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} X_i$$

ある β のとき、状態 i の他の状態 j に対する相対的確率が不明 (Z が？)

無作為抽出

$$w(\vec{r}^N, \vec{p}^N) = 1$$

$$\langle X\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{M} X_i \exp(-\beta H_i)$$

$$Z = \sum_{i=1}^{M} \exp(-\beta H_i)$$

Metropolis 法とは

Metropolis 法

- 既約なエルゴード的 Markov 過程により、状態を

$$
\begin{array}{ccccccccc}
1 & \cdots & i & i+1 & \cdots & j & \cdots & M \\
(\vec{r}_{\upsilon}^{\,N}, \vec{p}_{\upsilon}^{\,N}) & \cdots & (\vec{r}_{\upsilon}^{\,N}, \vec{p}_{\upsilon}^{\,N}) & (\vec{r}_{\gamma}^{\,N}, \vec{p}_{\gamma}^{\,N}) & \cdots & (\vec{r}_{\zeta}^{\,N}, \vec{p}_{\zeta}^{\,N}) & \cdots & (\vec{r}_{\zeta}^{\,N}, \vec{p}_{\zeta}^{\,N})
\end{array}
$$

  次々に生成 (サンプリング) する。
- 状態 α から β への遷移確率 $p_{\alpha\beta}$ を適当に選ぶと、状態 α を望みの確率で出現させられる。
- Z が分からなくても、$w(\vec{r}_{\alpha}^{\,N}, \vec{p}_{\alpha}^{\,N}) = \dfrac{\exp\left\{-\beta H(\vec{r}_{\alpha}^{\,N}, \vec{p}_{\alpha}^{\,N})\right\}}{Z}$ を満たすように状態 α をサンプリングできる。

確率過程

- 時刻 t_n における変数 X のとる値が $\{x_i\}$ の中から確率的に決まるとき、X を確率過程と言う。
- $X(t_n)$ の値は一般に $t_0 \sim t_{n-1}$ の X の値に依存し、t_n で x_{k_n} をとる確率は

$$W(t_0; x_{k_0},\ \ t_1; x_{k_1},\ \ \cdots,\ \ t_{n-1}; x_{k_{n-1}},\ \ t_n; x_{k_n})$$

と書け、$X(t_{n-1}) = x_{k_{n-1}}$ から $X(t_n) = x_{k_n}$ に遷移する (遷移) 確率は

$$P(t_0; x_{k_0}, t_1; x_{k_1}, \cdots, t_{n-1}; x_{k_{n-1}} | t_n; x_{k_n}) = \frac{W(t_0; x_{k_0}, t_1; x_{k_1}, \cdots, t_{n-1}; x_{k_{n-1}}, t_n; x_{k_n})}{W(t_0; x_{k_0}, t_1; x_{k_1}, \cdots, t_{n-1}; x_{k_{n-1}})}$$

- Markov 過程

$$P(t_0; x_{k_0}, t_1; x_{k_1}, \cdots, t_{n-1}; x_{k_{n-1}} | t_n; x_{k_n}) = P(t_{n-1}; x_{k_{n-1}} | t_n; x_{k_n})$$

Chapman-Kolmogorov 方程式

$$W(t_0;x_{k_0},\cdots,t_n;x_{k_n}) = W(t_0;x_{k_0})\prod_{i=1}^{n} P(t_{i-1};x_{k_{i-1}}|t_i;x_{k_i})$$

$$W(t_0;x_{k_0},t_1;x_{k_1},t_2;x_{k_2}) = W(t_0;x_{k_0})P(t_0;x_{k_0}|t_1;x_{k_1})P(t_1;x_{k_1}|t_2;x_{k_2})$$

2 回の遷移で $(t_0;x_{k_0}) \to (t_2;x_{k_2})$ になる確率

$$P^{(2)}(t_0;x_{k_0}|t_2;x_{k_2}) \equiv \sum_{k_1} P(t_0;x_{k_0}|t_1;x_{k_1})P(t_1;x_{k_1}|t_2;x_{k_2})$$

$\downarrow$ 一般化 (Chapman-Kolmogorov 方程式)

$$P^{(n)}(t_0;x_{k_0}|t_n;x_{k_n}) \equiv \sum_{k_\ell} P^{(\ell)}(t_0;x_{k_0}|t_\ell;x_{k_\ell})P^{(n-\ell)}(t_\ell;x_{k_\ell}|t_n;x_{k_n})$$

遷移確率 $P(t_{i-1};x_{k_{i-1}}|t_i;x_{k_i})$ が時間によらない。 $x_\alpha \to x_\beta$ の確率 $P_{\alpha\beta}$

$$P^{(n)}_{\alpha\beta} = \sum_{\lambda} P^{(\ell)}_{\alpha\lambda}P^{(n-\ell)}_{\lambda\beta}$$

遷移確率行列

遷移確率 $x_\alpha \to x_\beta$ $(P_{\alpha\beta})$ を、第 α 行 第 β 列の要素とする行列 $(\mathrm{P})_{\alpha\beta} = P_{\alpha\beta}$

$$\mathrm{P} \equiv \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} & \cdots \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & \cdots \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \sum_\beta P_{\alpha\beta} = 1$$

Chapman-Kolmogorov 方程式

$$P^{(n)}_{\alpha\beta} = \sum_\lambda P^{(\ell)}_{\alpha\lambda} P^{(n-\ell)}_{\lambda\beta}$$

$$(\mathrm{P}^n)_{\alpha\beta} = \sum_\lambda (\mathrm{P}^\ell)_{\alpha\lambda} (\mathrm{P}^{n-\ell})_{\lambda\beta}$$

$$\mathrm{P}^n = \mathrm{P}^\ell \mathrm{P}^{n-\ell}$$

$P^{(\ell)}_{\alpha\beta}$: 遷移回数 ℓ で $\alpha \to \beta$

$$P^{(3)}_{\alpha\beta} = \sum_\lambda \sum_\nu (\mathrm{P})_{\alpha\lambda} (\mathrm{P})_{\lambda\nu} (\mathrm{P})_{\nu\beta}$$

$f^{(\ell)}_{\alpha\beta}$: 遷移回数 ℓ で始めて $\alpha \to \beta$

$$f^{(3)}_{\alpha\beta} = \sum_{\lambda\neq\beta} \sum_{\nu\neq\beta} (\mathrm{P})_{\alpha\lambda} (\mathrm{P})_{\lambda\nu} (\mathrm{P})_{\nu\beta}$$

Markov 過程

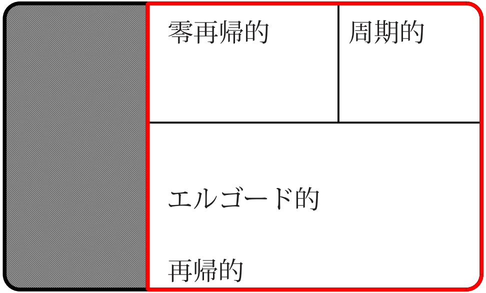
Markov 過程によって生成される状態の性質

1	$\cdots$	i	$i+1$	$\cdots$	j	$\cdots$	M	$\cdots$
$(\vec{r}_\upsilon^N, \vec{p}_\upsilon^N)$	$\cdots$	$(\vec{r}_\upsilon^N, \vec{p}_\upsilon^N)$	$(\vec{r}_\gamma^N, \vec{p}_\gamma^N)$	$\cdots$	$(\vec{r}_\zeta^N, \vec{p}_\zeta^N)$	$\cdots$	$(\vec{r}_\zeta^N, \vec{p}_\zeta^N)$	$\cdots$

- 元の状態に戻れるか (再帰的)、戻れないか (非再帰的)

  再帰的な場合

- 無限の時間がかかる (零再帰的)
  周期的に戻る (周期的)
  いつでも戻れる (エルゴード的)
- 統計平均をしたいならエルゴード的 Markov 過程



エルゴード的 Markov 過程のご利益

系の状態が α にある：$\boldsymbol{\pi}_0 = (0, 0, \cdots, 1, 0, \cdots)$ $((\boldsymbol{\pi}_0)_\gamma = \delta_{\alpha\gamma})$ として

$$\boldsymbol{\pi}_1 \equiv \boldsymbol{\pi}_0 \mathrm{P} = (0, 0, \cdots, 1, 0, \cdots) \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} & \cdots \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & \cdots \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = (P_{\alpha 1}, P_{\alpha 2}, P_{\alpha 3}, \cdots)$$

$$(\boldsymbol{\pi}_1)_\beta = \sum_\gamma (\boldsymbol{\pi}_0)_\gamma (\mathrm{P})_{\gamma\beta} \quad \longrightarrow \quad (\boldsymbol{\pi}_1)_\beta = P_{\alpha\beta}$$

<u>もし $\boldsymbol{\pi}_0$ によらず</u>

$$\lim_{n\to\infty} \boldsymbol{\pi}_n = \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{\pi}_0 \mathrm{P}^n = \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{\pi}_{n-1} \mathrm{P} = \boldsymbol{\pi}$$

なら

$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}\mathrm{P}, \qquad \boldsymbol{\pi}_0 \mathrm{P}^\infty = \boldsymbol{\pi}$　エルゴード的 Markov 過程では P^∞ が存在する

$$(\boldsymbol{\pi})_\beta = \sum_\gamma (\boldsymbol{\pi}_0)_\gamma (\mathrm{P}^\infty)_{\gamma\beta} = (\mathrm{P}^\infty)_{\alpha\beta}$$

再帰性

$$P^{(n)}_{\alpha\beta} = f^{(1)}_{\alpha\beta} P^{(n-1)}_{\beta\beta} + f^{(2)}_{\alpha\beta} P^{(n-2)}_{\beta\beta} + \cdots + f^{(n-1)}_{\alpha\beta} P^{(1)}_{\beta\beta} + f^{(n)}_{\alpha\beta} P^{(0)}_{\beta\beta} = \sum_{\ell=1}^{n} f^{(\ell)}_{\alpha\beta} P^{(n-\ell)}_{\beta\beta}$$

$$\begin{aligned} P^{(3)}_{\alpha\beta} &= \sum_{\lambda}\sum_{\nu} (\mathrm{P})_{\alpha\lambda}(\mathrm{P})_{\lambda\nu}(\mathrm{P})_{\nu\beta} \\ &= (\mathrm{P})_{\alpha\beta} \sum_{\nu} (\mathrm{P})_{\beta\nu}(\mathrm{P})_{\nu\beta} + \sum_{\lambda\neq\beta} (\mathrm{P})_{\alpha\lambda}(\mathrm{P})_{\lambda\beta}(\mathrm{P})_{\beta\beta} + \sum_{\lambda\neq\beta}\sum_{\nu\neq\beta} (\mathrm{P})_{\alpha\lambda}(\mathrm{P})_{\lambda\nu}(\mathrm{P})_{\nu\beta} \end{aligned}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} P^{(n)}_{\alpha\beta} = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\ell=1}^{n} f^{(\ell)}_{\alpha\beta} P^{(n-\ell)}_{\beta\beta} = \sum_{\ell=1}^{\infty}\sum_{n=\ell}^{\infty} f^{(\ell)}_{\alpha\beta} P^{(n-\ell)}_{\beta\beta} = \sum_{\ell=1}^{\infty} f^{(\ell)}_{\alpha\beta} \sum_{m=0}^{\infty} P^{(m)}_{\beta\beta}$$

$$P_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta}\left\{P_{\beta\beta} + P^{(0)}_{\beta\beta}\right\}, \qquad P^{(0)}_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$$

$$f_{\alpha\beta} = \frac{P_{\alpha\beta}}{P_{\beta\beta}+1}, \qquad P_{\alpha\alpha} = \frac{f_{\alpha\alpha}}{1-f_{\alpha\alpha}}, \qquad P_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta}\sum_{k=0}^{\infty}\{f_{\beta\beta}\}^{k}$$

Markov 過程の分類

再帰性

$$f_{\alpha\alpha}\begin{cases} = 1 & \alpha \text{ は再帰的} \\ < 1 & \alpha \text{ は非再帰的} \end{cases}$$

$$P_{\alpha\alpha}\begin{cases} = \infty & \alpha \text{ は再帰的} \\ < \infty & \alpha \text{ は非再帰的} \end{cases}$$

$$P_{\alpha\alpha}^{(\infty)}\begin{cases} \neq 0 & \alpha \text{ は再帰的} \\ = 0 & \alpha \text{ は非再帰的} \end{cases}$$

$$f_{\alpha\alpha} = \frac{P_{\alpha\alpha}}{P_{\alpha\alpha}+1}, \quad P_{\alpha\alpha} = \frac{f_{\alpha\alpha}}{1-f_{\alpha\alpha}}$$

再帰的 Markov 過程

- 零再帰的
  $$\sum_{n=1}^{\infty} n f_{\alpha\alpha}^{(n)} \to \infty$$
- 周期的
  $P_{\alpha\alpha}^{(\ell)} > 0$ となる
  ℓ の最大公約数 > 1
- エルゴード的
  任意の状態間遷移がいつでも (非周期的)、何度でも ($\neq$ 零再帰的) 起こる

既約と可約

可約性

S : x_α の集合

$x_\alpha, x_\beta \in S,\ k, k' \geqq 1$

$P^{(k)}_{\alpha\beta} > 0 \ \wedge\ P^{(k')}_{\beta\alpha} > 0 \rightarrow S$: 既約

($\uparrow$ 以外 S : 可約)

S:既約 $\wedge\ x_\alpha, x_\beta \in S$ が再帰的

$$\begin{cases} f_{\alpha\beta} &= 1 \\ P_{\alpha\beta} &= \infty \end{cases}$$

エルゴード仮説

系の取りうる全ての状態は、
観測時間の間に満遍なく出現する。

$$\overline{X} = \langle X \rangle$$

S は既約で、含まれる状態が全て再帰的でなければ $\langle X \rangle$ を求められない。

$$f_{\alpha\beta} \equiv \sum_{n=1}^{\infty} f_{\alpha\beta}^{(n)}$$

α, β が再帰的状態なら $f_{\alpha\alpha} = f_{\beta\beta} = 1$

p : $\alpha \to \beta$ の確率。ただし、途中で α に戻っていない

$1 - f_{\beta\alpha}$: β から α に戻らない確率

$p(1 - f_{\beta\alpha})$: α から β に到達したけど、その後 α に戻らない確率

$1 - f_{\alpha\alpha}$: α から α に戻らない確率

$$0 \leq p(1 - f_{\beta\alpha}) \leq 1 - f_{\alpha\alpha} = 0$$

$f_{\beta\alpha} = f_{\alpha\beta} = 1$ 　　α と β が互いに到達可能なら

$$P_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \{f_{\beta\beta}\}^k = \infty$$

確率過程 Z_ℓ

$$Z_\ell = \begin{cases} 1 & X_0 = x_\alpha \to x_\kappa \to x_\zeta \to \cdots \to x_\beta \to \cdots \to X_\ell = x_\beta \\ 0 & X_0 = x_\alpha \to x_\gamma \to x_\xi \to \cdots \to x_\beta \to \cdots \to X_\ell = x_{\eta \neq \beta} \end{cases}$$

$$M_{\alpha\beta}^{(n)} \equiv \sum_{\ell=1}^{n} Z_\ell = 0 \sim n$$ x_βの到達回数

$$\overline{M_{\alpha\beta}^{(n)}} = \sum_{\ell=1}^{n} \overline{Z_\ell}$$ x_β の平均到達回数

$$= \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} \xrightarrow{n\to\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = P_{\alpha\beta}$$

極限分布
再帰時間

遷移 $\alpha \to \beta$ に要する平均遷移回数

$$\tau_{\alpha\beta}^{(n)} \equiv \sum_{\ell=1}^{n} \ell f_{\alpha\beta}^{(\ell)} = n \Big/ \overline{M_{\alpha\beta}^{(n)}} = n \Big/ \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)}$$

平均再帰時間 $\tau_{\alpha\alpha}$: 状態 x_α が、平均何遷移ごとに出るか

$$\frac{1}{\tau_{\alpha\beta}} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = 1 \Big/ \left\{ \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell f_{\alpha\beta}^{(\ell)} \right\} \to 1 \Big/ \left\{ \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell f_{\beta\beta}^{(\ell)} \right\} = \frac{1}{\tau_{\beta\beta}}$$

非再帰的状態 : $\tau_{\alpha\alpha} = \infty \quad \because P_{\alpha\alpha}^{(\infty)} = 0$
零再帰的状態 : $\tau_{\alpha\alpha} = \infty$
周期的状態 : $\tau_{\alpha\alpha} > 0$ **有限だけど収束しない**
エルゴード的 : $\tau_{\alpha\alpha} > 0$ **有限で収束する**

$0 < \overline{M_{\alpha\alpha}^{(n)}} \le n$ 　 $P_{\alpha\alpha}^{(\ell)} > 0$ **となる** ℓ **の公約数の有無**

極限分布
定常分布 (壱)

- $(\boldsymbol{v})_\beta = v_\beta = 1/\tau_{\alpha\beta} = 1/\tau_{\beta\beta}$ は確率分布となる。

$$\sum_\beta v_\beta = \sum_\beta \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} \sum_\beta P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} 1 = 1$$

- $\boldsymbol{v}\mathrm{P} = \boldsymbol{v}$ $\quad \sum_\beta v_\beta P_{\beta\gamma} = v_\gamma$ $\quad$ $\boldsymbol{v}$ **は定常分布**

$$\sum_\beta v_\beta P_{\beta\gamma} = \sum_\beta \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} P_{\beta\gamma} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\gamma}^{(\ell+1)}$$

$$= \lim_{n\to\infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right) \frac{1}{n+1} \left\{ \sum_{\ell=1}^{n+1} P_{\alpha\gamma}^{(\ell)} + P_{\alpha\gamma} \right\} = v_\gamma$$

極限分布
定常分布 (弐)

- $\boldsymbol{\pi}$ が P の定常分布なら $\boldsymbol{\pi}\mathrm{P} = \boldsymbol{\pi}\mathrm{P}^2 = \boldsymbol{\pi}\mathrm{P}^3 = \cdots = \boldsymbol{\pi}\mathrm{P}^n = \boldsymbol{\pi}$

$$\pi_\gamma = \lim_{n\to\infty} \sum_\beta \pi_\beta \left\{ \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{\beta\gamma}^{(\ell)} \right\}, \qquad \boldsymbol{\pi} = \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{\pi} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} \mathrm{P}^\ell \right\}$$

$$= \sum_\beta \pi_\beta v_\gamma = v_\gamma$$

  P の定常分布は $\boldsymbol{v}$ だけ

- $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}\mathrm{P}^\infty, \quad \pi_\gamma = \sum_\beta \pi_\beta P_{\beta\gamma}^{(\infty)}$

$$P_{\beta\gamma}^{(\infty)} = v_\gamma = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{\infty} P_{\beta\gamma}^{(\ell)}$$

  P^n の極限分布 $(n \to \infty)$ が定常分布 $\boldsymbol{v}$ に一致する。

How to Metropolis 法

v_α が状態 α の確率 $\exp(-\beta H_\alpha)/Z$ に一致するように $P_{\gamma\alpha}$ を定める。

1. $P_{\gamma\alpha} > 0$ 全ての α, γ に対して
2. $\sum_\alpha P_{\gamma\alpha} = 1$ 全ての γ に対して $\quad P_{\gamma\gamma} = 1 - \sum_{\alpha\neq\gamma} P_{\gamma\alpha}$

4. $v_\alpha P_{\alpha\gamma} = v_\gamma P_{\gamma\alpha}$ 全ての α, γ に対して (詳細釣り合い)

$$\frac{P_{\gamma\alpha}}{P_{\alpha\gamma}} = \frac{\exp(-\beta H_\alpha)}{\exp(-\beta H_\gamma)} = \exp\left(-\beta H_{\alpha\gamma}\right) = \frac{1}{\exp\left(\beta H_{\alpha\gamma}\right)} = \frac{\exp\left(-\beta H_{\alpha\gamma}\right)}{1}$$

遷移 $\gamma \to \alpha$ を試みる：$H_{\alpha\gamma} \leq 0$ なら遷移させる。$H_{\alpha\gamma} > 0$ なら $\exp\left(-\beta H_{\alpha\gamma}\right)$ の確率で ($\xi < \exp\left(-\beta H_{\alpha\gamma}\right)$, ξ は $[0,1]$ の一様乱数) 遷移させる。

参考文献

- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., and Teller, A. H. (1953).
  Equation of state calculation by fast computing machines.
  J. Chem. Phys., **21**(10):1087–1092.
- 日本地図の無料イラスト集.
  http://map.finemakeyuri.com/.
- 伏見正則. (2004).
  確率と確率過程, 朝倉書店 ISBN:978-4-254-29553-5.
- 有馬隆司, 生駒明之, 河野明日美, (2008).
  Ising 模型の厳密解と Monte Carlo シミュレーション (2007 年度卒論).

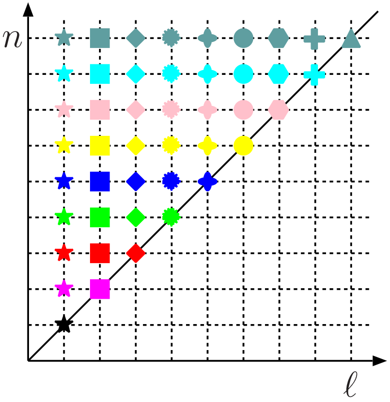
$$\begin{aligned}
P_{\alpha\beta} &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} P_{\alpha\beta}^{(n)}, \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{n} f_{\alpha\beta}^{(\ell)} P_{\beta\beta}^{(n-\ell)} \\
&= \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{n=\ell}^{\infty} f_{\alpha\beta}^{(\ell)} P_{\beta\beta}^{(n-\ell)} \\
&= \sum_{\ell=1}^{\infty} f_{\alpha\beta}^{(\ell)} \sum_{m=0}^{\infty} P_{\beta\beta}^{(m)} \\
&= f_{\alpha\beta}(P_{\beta\beta}+1)
\end{aligned}$$

$$f_{\alpha\beta} \equiv \sum_{n=1}^{\infty} f_{\alpha\beta}^{(n)}$$

先に色を指定してマークで合計

先にマークを指定して色で合計

$$\boxed{m = n - \ell}$$



$$\overline{M_{\alpha\beta}^{(n)}} = \sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = (n\ \text{回の遷移で}\ \beta\ \text{が出た平均回数})$$

$$\tau_{\alpha\beta}^{(n)} = n \Big/ \overline{M_{\alpha\beta}^{(n)}} = (\beta\ \text{が出るまでの平均遷移回数}) = \sum_{\ell=1}^{n} \ell f_{\alpha\beta}^{(\ell)}$$

$$\frac{1}{n}\overline{M_{\alpha\beta}^{(n)}} = 1 \Big/ \sum_{\ell=1}^{n} \ell f_{\alpha\beta}^{(\ell)} = (\beta\ \text{が出る確率})$$

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty} 1 \Big/ \sum_{\ell=1}^{n} \ell f_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\tau_{\alpha\beta}^{(n)}} = \frac{1}{\tau_{\alpha\beta}} \qquad (\alpha \neq \beta)$$

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\alpha}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty} 1 \Big/ \sum_{\ell=1}^{n} \ell f_{\alpha\alpha}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\tau_{\alpha\alpha}^{(n)}} = \frac{1}{\tau_{\alpha\alpha}} \qquad (\alpha = \beta)$$

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty}\sum_{\ell=1}^{n}\sum_{m=1}^{\ell} f_{\alpha\beta}^{(m)} P_{\beta\beta}^{(\ell-m)} = \lim_{n\to\infty}\sum_{m=1}^{n}\sum_{\ell=m}^{m} f_{\alpha\beta}^{(m)} P_{\beta\beta}^{(\ell-m)}$$

$$= \lim_{n\to\infty}\sum_{m=1}^{n}\sum_{k=0}^{n-m} f_{\alpha\beta}^{(m)} P_{\beta\beta}^{(k)} \to \lim_{n\to\infty}\sum_{m=1}^{n} f_{\alpha\beta}^{(m)} \sum_{k=0}^{n} P_{\beta\beta}^{(k)}$$

$$\sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \sum_{\ell=1}^{n} f_{\alpha\beta}^{(\ell)} \sum_{\ell=0}^{n} P_{\beta\beta}^{(\ell)}$$

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} P_{\alpha\beta}^{(\ell)} = \lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} f_{\alpha\beta}^{(\ell)} \sum_{\ell=1}^{n} P_{\beta\beta}^{(\ell)} = f_{\alpha\beta}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} P_{\beta\beta}^{(\ell)} = f_{\alpha\beta}/\tau_{\beta\beta}$$