

モンテカルロ・シミュレーションの実践

0.モンテカルロ法

モンテカルロ法が実用化されたのは、第二次世界大戦中のことである。Neumanらが、通常の実験では時間がかかりすぎ危険であった物質内での中性子の運動の研究に適用し、その暗号名がモンテカルロ法であった。現在モンテカルロ法と言えば乱数を用いた数値シミュレーションの総称であり、解析的な公式が得られない場合や、実験的な手法が不可能である場合に用いられる手法の一つである。

1. Buffon の針

Neuman 以前にモンテカルロ法概念を用いた例として、18世紀のフランスの自然学者 Buffon の観察が挙げられる。

まず、平面上に等間隔で平行線を何本か引き、一定の長さの針をその上に落とす。針はランダムに落ち、平行線で交わるものとそうでない物が存在する。

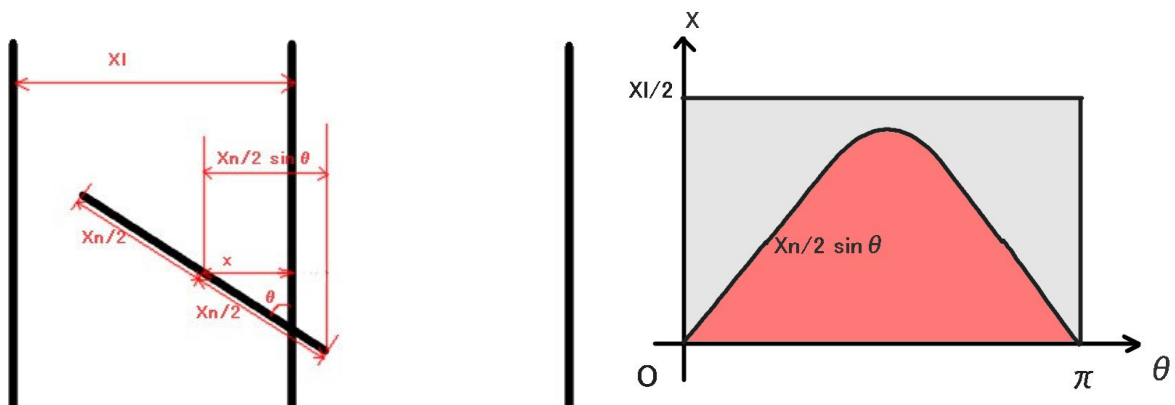


図1 buffon の針

図1のように変数を置いたとき、図より明らかに $x \leq \frac{x_n}{2} \sin \theta$ であるならば針は平行線に触れる。この場合、 θ は $0 \leq \theta < \pi$ の範囲をとり、 x は $0 \leq x < \frac{x_l}{2}$ の間に存在することから、針が平行線に触れる確率の理論値は $2x_n/\pi x_l$ となる。

この実験を実際に行い、 $\frac{\text{交わった回数}}{\text{針を落とした回数}}$ を計算すると、近似的に $2x_N/\pi x_l$ に等しくなる。このことから、針を繰り返し平行線上に落とすことで円周率を求められることがわかる。
この実験を計算機上で行ったシミュレーション結果を図2に示す。

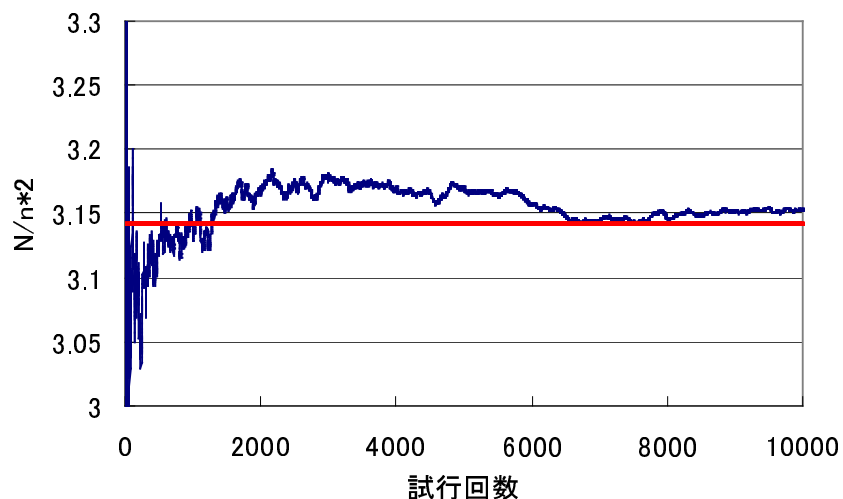


図2 試行回数と円周率(buffonの針)

試行回数を重ねるにつれて。値が円周率に近づく様子が分かる。
10回の試行では、 $\pi=2.8$ (誤差 0.34)、100回の試行では $\pi=3.12$ (誤差 0.021)、
1000回の試行では 3.132(誤差 0.0095)といった具合に徐々に近づいていくが、
6000回以降は精度の改善があまり見られない。

2.円周率の計算

より単純な円周率の算出を試みる。

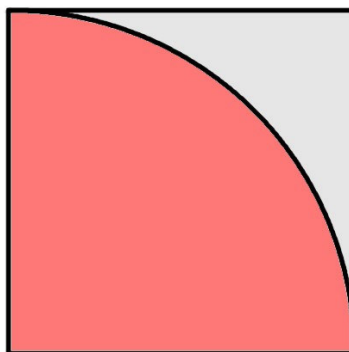


図3 四半円

図の四半円の面積は、正方形の面積を 1 としたときには、 $\pi/4$ となる。
この正方形を、雨の降る中にさらしたとすれば、雨粒は均一に降り注ぐため、四半円内に落ちる雨粒と、全体に落ちた雨粒の数の比は $\pi/4$ に近づく。
これを計算機でシミュレーションする。0 から 1 までの二つの異なる乱数を発生させ、それぞれを 2 乗した和と 1 との大小を比較し、小さい場合にはその結果を採択し、四半円内の点として数え上げる。
これを多数回繰り返して、四半円内に落ちる雨粒の全体に占める割合を算出し、その値に 4 を乗じることで、円周率を計算する。
結果は次のようになった。

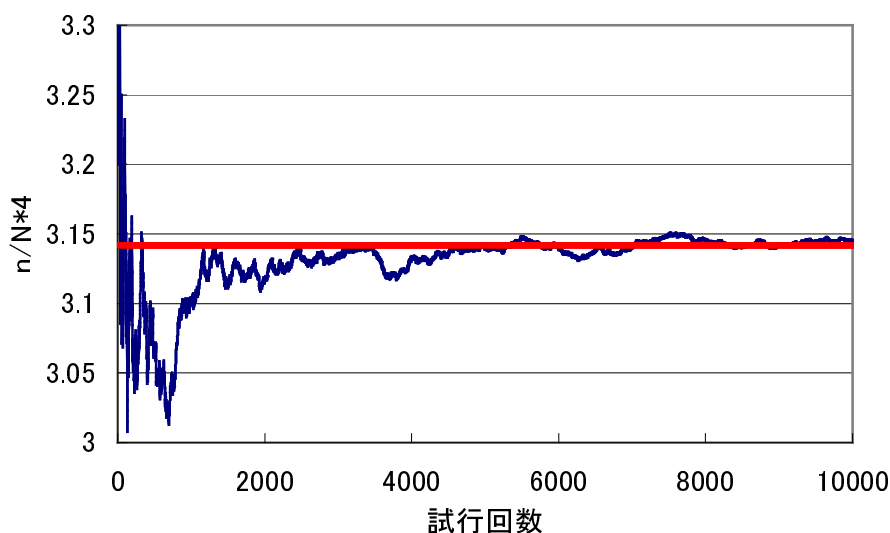


図 4 試行回数と円周率(四半円)

単純なモンテカルロ法では、大数の法則によって確率が一定値に近づくことを利用し、解を得る。その分散は $1/N$ によるため、誤差は $1/\sqrt{N}$ にしたがって小さくなる。10 倍の精度を得るのに 100 倍の計算が必要であり、収束は遅い。モンテカルロ法の欠点の一つである。

3. Ising モデル

温度を高くすると、原子は次第に無秩序化し、スピン状態が上向きのもものと下向きのもものが現れてくる。向きがばらばらになると、鉄全体の磁気モーメントはほぼ零となり、鉄は磁石でなくなってしまう。これを、強磁性体からの相転移という。

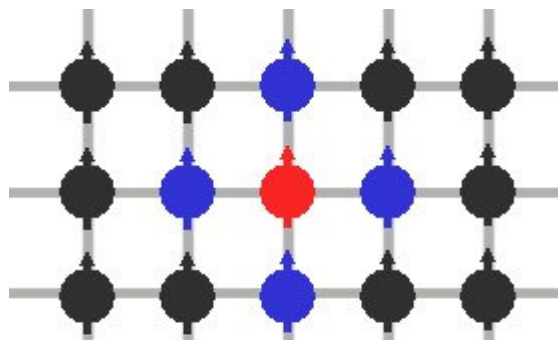


図 5 Ising モデル

ここで、原子の状態は、上向き、下向きの 2 状態のみを取ると考え、それを $s(i, j) = 1, s(i, j) = -1$ とする。ある原子 (i_0, j_0) が、周りの原子から受ける相互作用によるエネルギーは、外部磁場の無い場合、周りの原子のスピン方向と、自らのスピン方向によって決まり、その値は

$$e = -s(i_0, j_0) \times \sum_{i \neq i_0, j \neq j_0} J \times s(i, j)$$

となる。なお、 J は物質によって異なる値をとり、原子から離れるにしたがって小さな値となる。すなわち、近傍の原子ほど原子に与える影響は大きい。

ここでは、原子から見て、隣り合う原子からのみ相互作用を受けると考え、先の式を

$$e = -s(i_0, j_0) \times J \times [s(i_0, j_0 - 1) + s(i_0, j_0 + 1) + s(i_0 - 1, j_0) + s(i_0 + 1, j_0)]$$

と簡略化して考える。

このモデルは、提唱者の名をとって Ising モデルと呼ばれている。

また、二次元イジング・モデルは相転移を起こすことが知られている。

モンテカルロ法を用いて、Ising モデルを計算機上で実現し、相転移の様子シミュレーションを試みた。モデルとして、 33×33 の二次元格子状に並んだ原子を想定する。初期状態は絶対零度で、スピンの様に $s(i_0, j_0) = 1$ を向き、全ての原子のスピンがそろっているとする。

原子一つを選び相互作用のエネルギーを計算し、そのスピン状態を吟味する。ここでは、メトロポリス法と呼ばれる判定法を用いる。メトロポリス法とは、新しい状態を棄却するか採択するか基準の与え方の一つであり、具体的には、系のエネルギー E の変化 ΔE によって採択の確率を

$$P = \begin{cases} 1 & (\Delta E \leq 0) \\ e^{-\beta\Delta E} & (\Delta E > 0) \end{cases}$$

とする方法である。

(なお、プログラムでは、 $w = kT/J$ と置いている。)

この作業を $31 \times 31 = 961$ 回繰り返すと、各原子について平均一回処理を行ったと考えられるので、クロックを1進めることにする。また、0行、32行、0列、32列の値は、境界条件としてそれぞれ31行、1行、31列、1列の値を代入する。

その後、スピンの正の方向を向いている原子の数をかぞえて、磁化率を計算する。磁化率は、スピンが全てそろっていれば1をとり、1と-1のスピンが半分ずつ混在していれば0をとる。

まず、温度を変化させて（実際には w を変化させて）、系の磁性の変化をシミュレーションした。 w を0.50から2.00まで変化させ、それぞれ100時間ステップ分試行した。結果は図7のようになった。

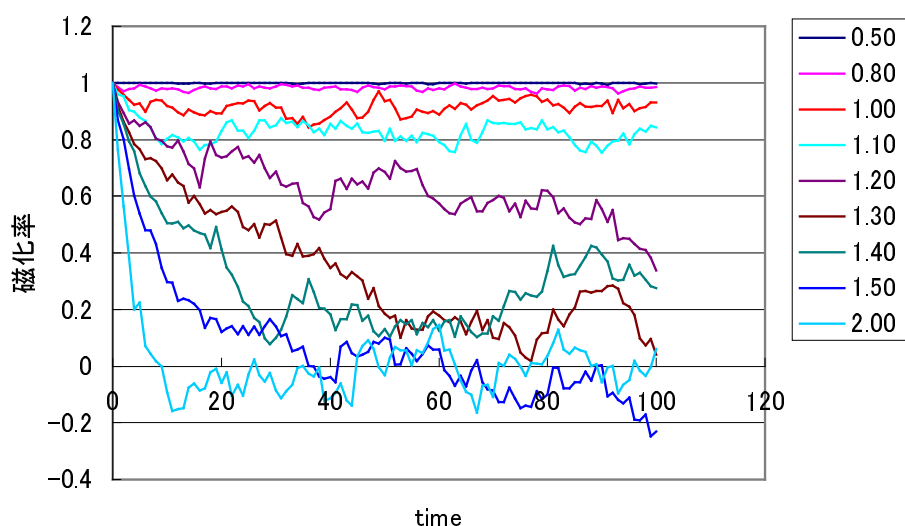


図7 w の変化による磁化率の変化の様子

$w=1.10$ 以下の低温では、時間が経過しても磁化率は 0 とならず、磁石のままである。しかし、 $w=1.20$ を越える温度になると、時間の経過とともに磁化率が低下し、磁石としての性質が失われる様子が分かる。また、高温であればあるほど磁性が短時間のうちに失われている。

今回のモデルの場合は $w=1.20$ 付近がキュリー点となっていると考えられる。

次に、絶対零度からある程度温度を上げたとき ($w=1.5$)、系全体のスピン状態の変化を時間の変化で追った。結果は図 8 のようになった。図の正のモーメントを青色、負のモーメントを黄色で示している。

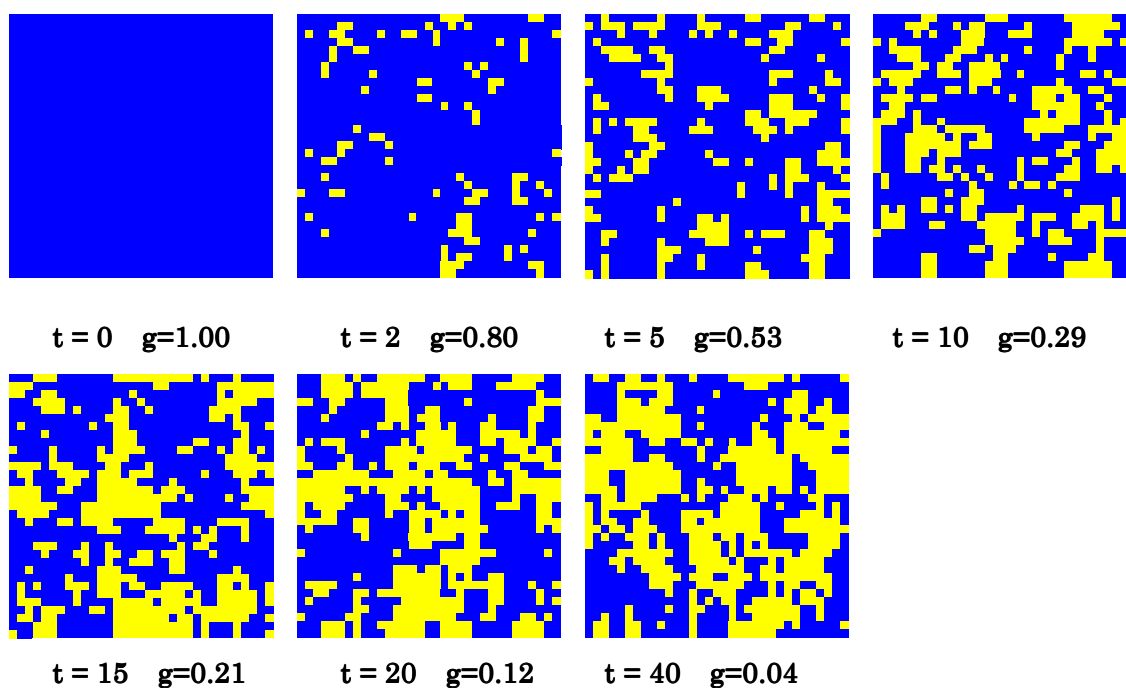


図 8 $w = 1.50$ における、spin 状態の時間変化

絶対零度では一面に正のモーメントであったものが、次第に負のモーメントの部分が生じ、時間の経過とともにまとまり（磁気ドメイン）を形成している様子が分かる。最終的には青と黄色の割合がほぼ等しくなり、磁性が失われている。

参考文献

パソコン・シミュレーション入門 企画センター 石川宏
数値計算法 S.クオ

<http://www.geocities.jp/eyeofeconomyandhealth/>

<http://utkhii.px.tsukuba.ac.jp/~watanabe/HP/kadai3-1.html>

FORTRAN77 入門 高木征弘†