

第三日目:内容

1. モンテカルロ法と二量体の計算

- ・モンテカルロ法の基礎
- ・二量体の計算

実習の進め方などはホームページに掲載する.
Netscapeを起動して, 次のサイトにアクセスする.
<http://www.phys.polym.kyoto-u.ac.jp/exp/>

モンテカルロ法(単純サンプリング)

- カノニカル集団(N,V,T)では物理量Aの平均

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q} \int d\{\mathbf{r}\} A e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})}$$

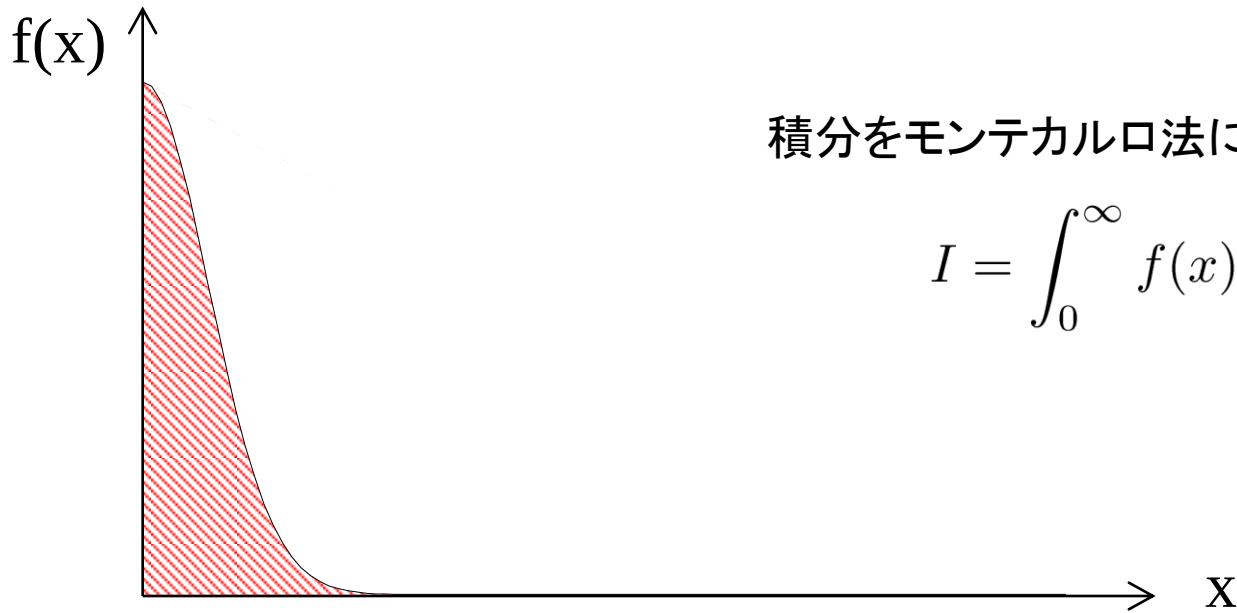
$$Q = \int d\{\mathbf{r}\} e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})}$$

$$\beta = 1/k_B T$$

- 単純サンプリング

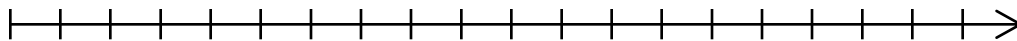
$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^M A(\{\mathbf{r}^n\}) e^{-\beta U(\{\mathbf{r}^n\})}}{\sum_{n=1}^M e^{-\beta U(\{\mathbf{r}^n\})}}$$

単純サンプリング



積分をモンテカルロ法により見積もる

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx$$



単純サンプリング

$$I \simeq \frac{1}{n} \sum f(x_i)$$

二量体のモンテカルロシミュレーション

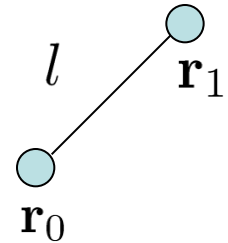
モデル

- 二量体なので, ビーズは2つ.
- 原点にビーズ0があるとする.
- 系のエネルギーはボンド長のみの関数:

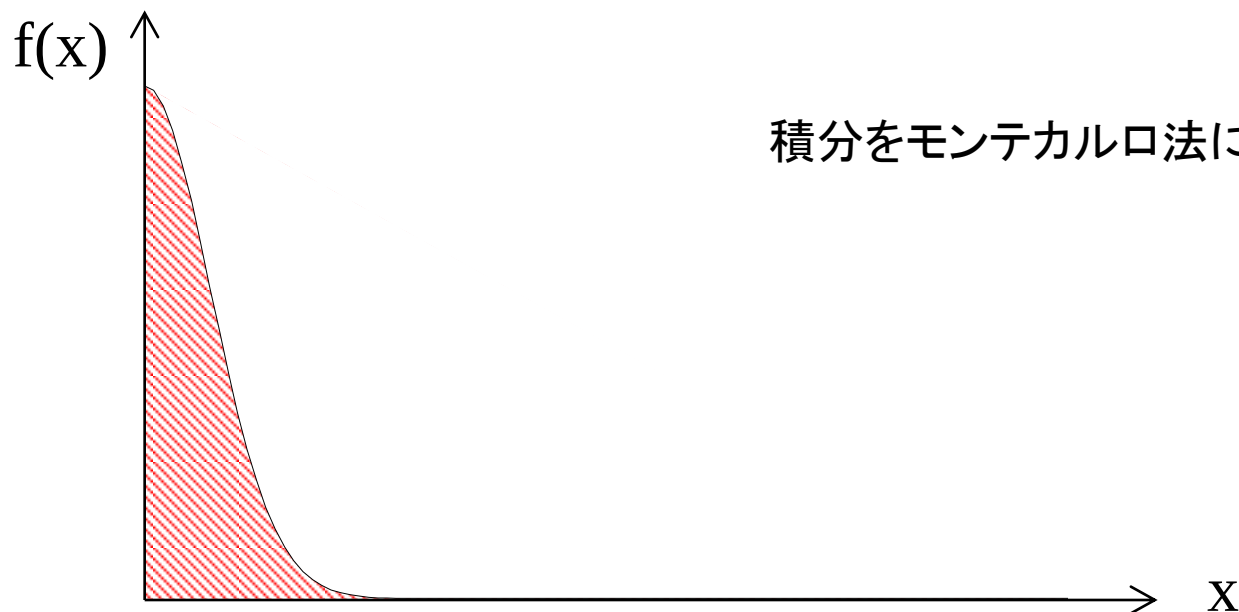
$$U = U_b(l) \quad U_b(l) = \frac{k_b}{2} l^2$$

- 様々な配置を出現させて, 末端間距離の2乗の平均値 $\langle R^2 \rangle$ を計算する.

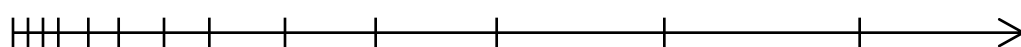
$$\langle R^2 \rangle = \langle |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|^2 \rangle$$



重みつきサンプリング



積分をモンテカルロ法により見積もる



重みつきサンプリング

$$I = \int_0^\infty \frac{f(x)}{w(x)} w(x) dx = \int_0^\infty \frac{f(x(y))}{w(x(y))} dy \quad dy/dx = w(x)$$

$$I \simeq \frac{1}{n} \sum \frac{f(x(y_i))}{w(x(y_i))}$$

モンテカルロ法(重みつきサンプリング)

- カノニカル集団(N,V,T)では物理量Aの平均

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q} \int d\{\mathbf{r}\} A e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})} \quad Q = \int d\{\mathbf{r}\} e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})}$$

- 重みつきサンプリング(一般の場合)

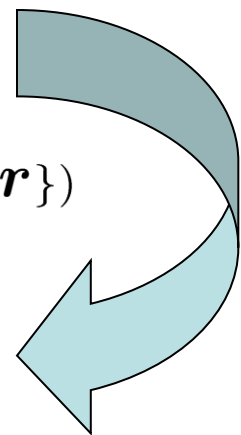
$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q} \int \frac{A}{w(\{\mathbf{r}\})} e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})} w(\{\mathbf{r}\}) d\{\mathbf{r}\}$$

カノニカル集団の場合には $w(\{\mathbf{r}\}) = \frac{1}{Q} e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})}$

$$\langle A \rangle = \int A w(\{\mathbf{r}\}) d\{\mathbf{r}\}$$

サンプリングの際にはAの出現確率がwになるようにする

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^M A(\{\mathbf{r}^n\})}{M}$$



メトロポリス法

- 確率分布関数の時間発展

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{\mathbf{r}\}, t) = \sum_{\{\mathbf{r}'\}} W(\{\mathbf{r}'\} \rightarrow \{\mathbf{r}\}) P(\{\mathbf{r}'\}, t) - \sum_{\{\mathbf{r}'\}} W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}'\}) P(\{\mathbf{r}\}, t)$$

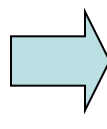
- 定常状態

$$\sum_{\{\mathbf{r}'\}} W(\{\mathbf{r}'\} \rightarrow \{\mathbf{r}\}) P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}'\}) = \sum_{\{\mathbf{r}'\}} W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}'\}) P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}\})$$

カノニカル集団の場合には $P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}\}) = \frac{1}{Q} e^{-\beta U(\{\mathbf{r}\})}$

- 詳細釣り合い条件

$$W(\{\mathbf{r}\}' \rightarrow \{\mathbf{r}\}) P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}'\}) = W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}'\}) P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}\})$$

 $\frac{W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}'\})}{W(\{\mathbf{r}\}' \rightarrow \{\mathbf{r}\})} = \frac{P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}'\})}{P_{\text{eq}}(\{\mathbf{r}\})} = e^{-(U(\{\mathbf{r}\}') - U(\{\mathbf{r}\}))}$

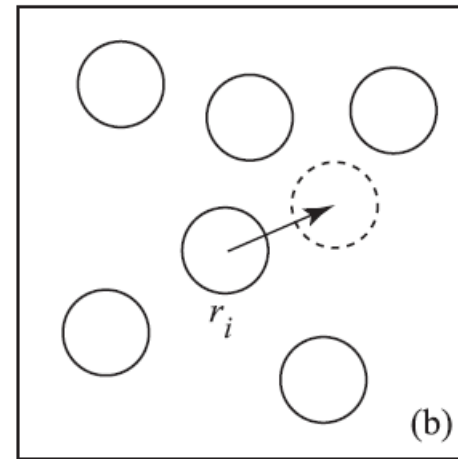
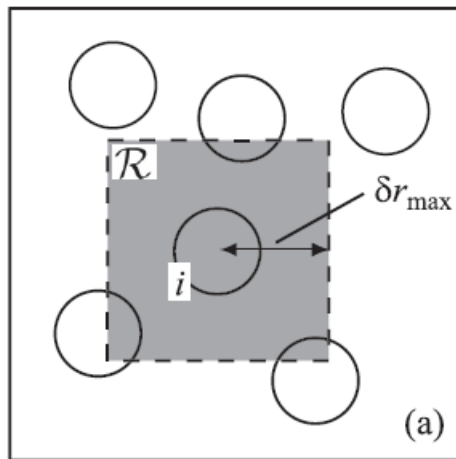
メトロポリス法

- 遷移確率

$$W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}'\}) = \begin{cases} \alpha(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{r}'\}) & \Delta U \leq 0 \\ \alpha(\{\mathbf{r}\}, \{\mathbf{r}'\}) e^{-\beta \Delta U} & \Delta U > 0 \end{cases}$$

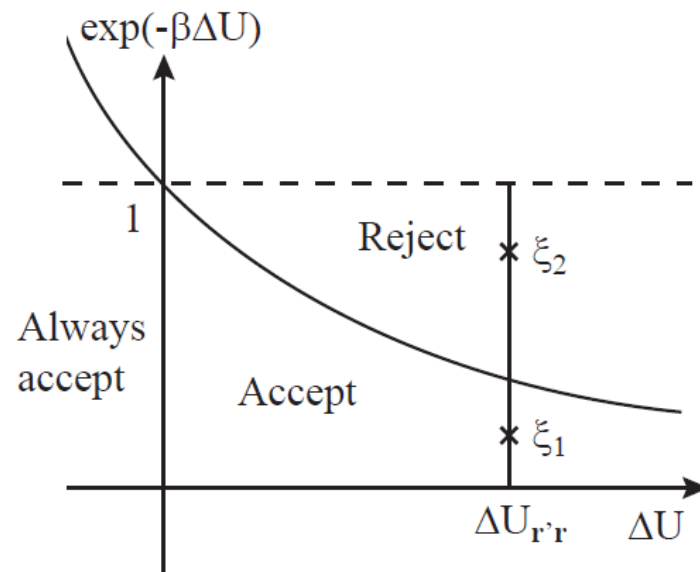
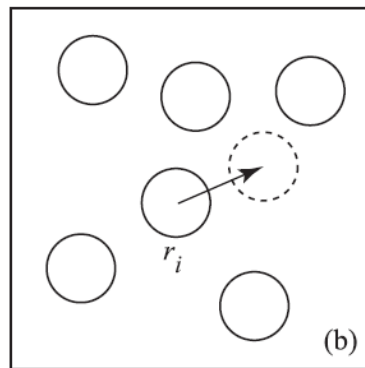
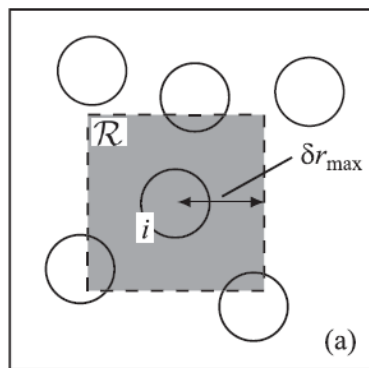
$$W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}\}) = 1 - \sum_{\{\mathbf{r}'\} (\neq \{\mathbf{r}\})} W(\{\mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{r}'\})$$

$$\Delta U = U(\{\mathbf{r}'\}) - U(\{\mathbf{r}\})$$

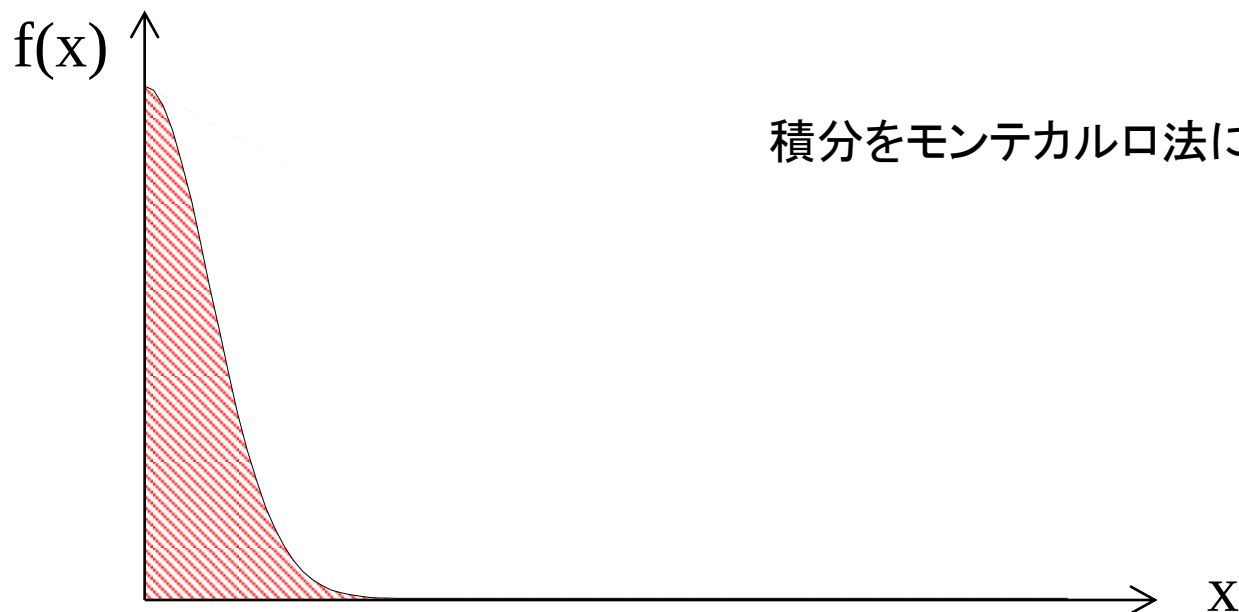


メトロポリス法のアルゴリズム

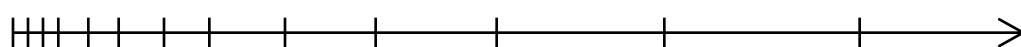
1. ランダムに粒子を一つ選ぶ.
2. 粒子を領域 $\mathcal{R}$ 内の位置にランダムに変位させ, 試行的な配置 $\{\mathbf{r}'\}$ を生成する (図 1(b)).
3. 配置 $\{\mathbf{r}'\}$ での系のポテンシャルエネルギー $U(\{\mathbf{r}'\})$ を計算し, $\Delta U = U(\{\mathbf{r}'\}) - U(\{\mathbf{r}\})$ を計算する.
4. $\Delta U \leq 0$ であれば, 配置 $\{\mathbf{r}'\}$ を次の新しい配置として採用し, ステップ 1 から繰り返す.
5. $\Delta U > 0$ であれば, $[0, 1)$ 区間の乱数 ξ を生成し
 - (a) $e^{-\beta\Delta U} > \xi$ ならば, 配置 $\{\mathbf{r}'\}$ を次の新しい配置として採用し, ステップ 1 から繰り返す.
 - (b) $e^{-\beta\Delta U} \leq \xi$ ならば, 配置 $\{\mathbf{r}'\}$ を棄却し, 変位前の配置 $\{\mathbf{r}\}$ を次の配置として採用しステップ 1 から繰り返す.



重みつきサンプリング



積分をモンテカルロ法により見積もる



重みつきサンプリング

$$I = \int_0^\infty \frac{f(x)}{w(x)} w(x) dx = \int_0^\infty \frac{f(x(y))}{w(x(y))} dy \quad dy/dx = w(x)$$

$$I \simeq \frac{1}{n} \sum \frac{f(x(y_i))}{w(x(y_i))}$$

第三日目:宿題

- ・モンテカルロ法と二量体の計算に関して簡単なレポートを作成して, 7月3日(火)に提出.

1. モンテカルロ法の原理

2. 二量体の計算結果とそれに基づいた単純サンプリングと重みつきサンプリングの違いについての考察.

3. 二量体の末端間距離の理論値の導出.

二量体の平均2乗末端間距離

- 系のエネルギーはボンド長のみの関数: $U = U_b(l)$

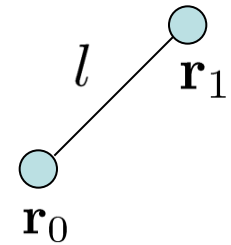
$$U_b(l) = \frac{k_b}{2} l^2$$

- ボンド l の状態が実現される確率は $\exp(-\beta U_b(l))$ に比例する.

- カノニカル集団では, 物理量 A の平均値は

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q} \int d\{r\} A e^{-\beta U(\{r\})} = \frac{1}{Q} \int d\vec{l} A e^{-\beta U(l)}$$

$$Q = \int d\vec{l} e^{-\beta U(l)}$$



- 二量体なのでボンドベクトル $\vec{l}$ と末端間ベクトル $\vec{R}$ は同じなので, R^2 の平均値は上式で $A = R^2$ として計算できる.