理論物理学特論[1] 龍谷大学理工学部数理情報学科 2002 年 06 月 26 日 樋口さぶろお[2]

10 モンテカルロ法のメトロポリスアルゴリズム

$$\vec{u}(t) = M^t \vec{u}(0) = Q \begin{pmatrix} (\frac{2}{5})^t & & \\ & (\frac{2}{3})^t & \\ & & 1^t \end{pmatrix} Q^{-1}\vec{u}(0) \overset{t\to+\infty}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} (Q^{-1}\vec{u}(0))_3 \tag{1}$$

ただし,

$$Q = \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \vec{v}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -4 & 0 & 2 \\ 3 & 1 & 3 \end{pmatrix} \tag{2}$$

ここで, 規格化条件 $\sum_{x=1}^{3} P(x, +\infty) = 1$ より, $(Q^{-1}\vec{u}(0))_3 = 1/6$ であるはずで,

$$\lim_{t\to\infty} \vec{u}(t) = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 2/6 \\ 3/6 \end{pmatrix} \tag{3}$$

$(Q^{-1}\vec{u}(0))_3 = 1/6$ は, Q^{-1} の真剣な計算結果と, $\sum_{x=1}^{3} P(x, 0) = 1$ とからも導ける.

11 マルコフ鎖と遷移行列

1. 空間離散 $(x = 0, 1, \ldots, N-1)$, 時間離散 $(\ t = 0, 1, 2, \ldots)$ の対称ランダムウォークを考える. ただし, 空間に周期境界条件 $x = 0 \sim N$ を課す. すなわち, 環状をなす N 個の点だとする. $N \times N$ の遷移行列をかこう. 固有値 1 の右固有ベクトルを見つけよう.

2. 次のような 6×6 遷移行列を持つマルコフ鎖を考える. ランダムウォークとしてみると, どのようなものか. また, 定常状態を求めよう.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

---

[1] `http://sparrow.math.ryukoku.ac.jp/~hig/theorphys/`

[2] `mailto:hig@math.ryukoku.ac.jp`, `http://www.math.ryukoku.ac.jp/~hig/`,
へや 1-508, でんわ 077-543-7501