

講義 「物理工学実験技法(A)」 第13回 (担当 藤堂)

- 計算機実験の技術
 - 物性物理におけるシミュレーション手法
 - 数値対角化 / モンテカルロ法 / . . .
 - パッケージソフトウェアの利用
 - 物質科学シミュレーションのポータルサイト
 - MateriApps - <http://ma.cms-initiative.jp>
 - MateriApps Live!
 - ALPSシミュレーションパッケージ
 - スクリプト言語の利用
 - バージョン管理システム

講義資料: <http://todo.issp.u-tokyo.ac.jp/ja/lectures>

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター神戸分室

@理化学研究所 計算科学研究機構 AICS



理化学研究所 計算科学研究機構 AICS



東京大学物性研究所計算物質科学研究センター神戸分室



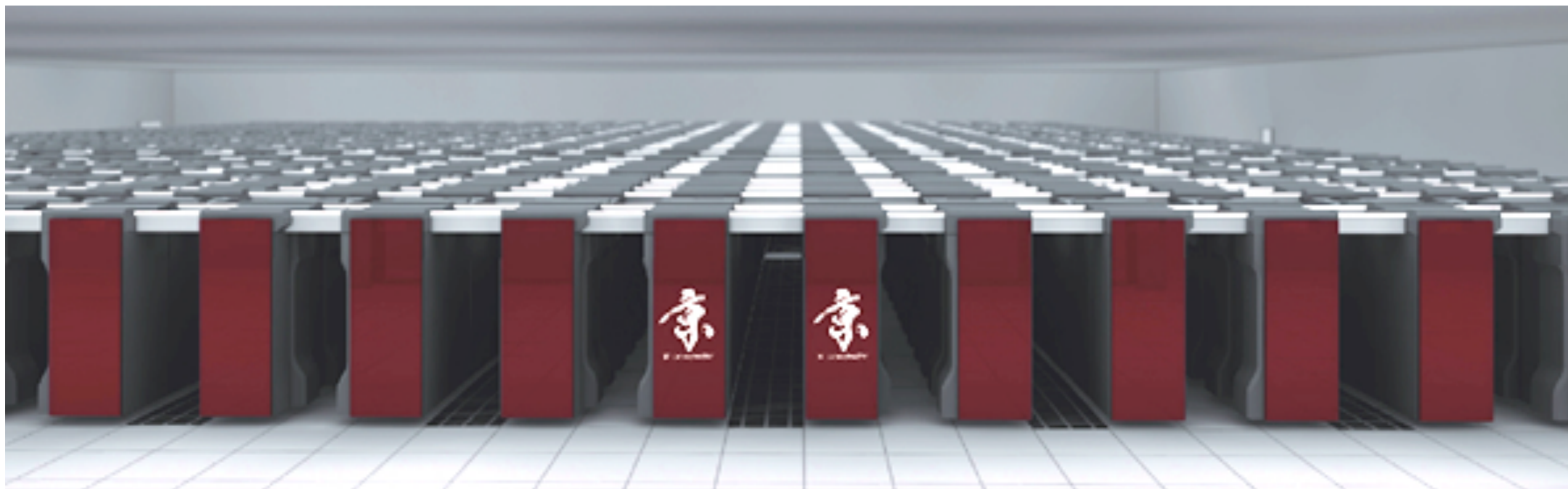
AICS R501

Staff : Todo, Kitaura (Kobe Univ.), Sakashita
Yamashita, Matsushita



スーパーコンピュータ「京」

- 2011年6月、2011年11月 世界一位。2012年6月完成 @ 神戸
- 計算能力: 毎秒1京回 = 10^{16} flops = 10 Pflops



HPCI戦略プログラム：戦略5分野

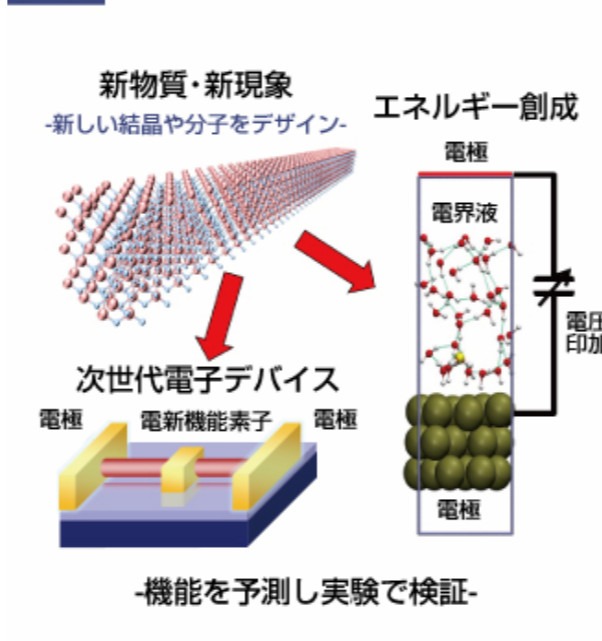
1 予測する生命科学・医療
および創薬基盤



ゲノム 全身
タンパク質 組織、臓器
細胞
多階層の生命現象

This diagram illustrates the multi-layered nature of life phenomena. It shows a central human figure with internal organs labeled '組織、臓器' (tissues and organs). To the left, a DNA double helix is labeled 'ゲノム' (genome), and a protein structure is labeled 'タンパク質' (protein). Below the human figure, a red, textured sphere represents a '細胞' (cell). A yellow circular arrow indicates a cycle or prediction process. The text '多階層の生命現象' (multi-layered life phenomena) is at the bottom.

2 新物質・エネルギーの創成



新物質・新現象
-新しい結晶や分子をデザイン-

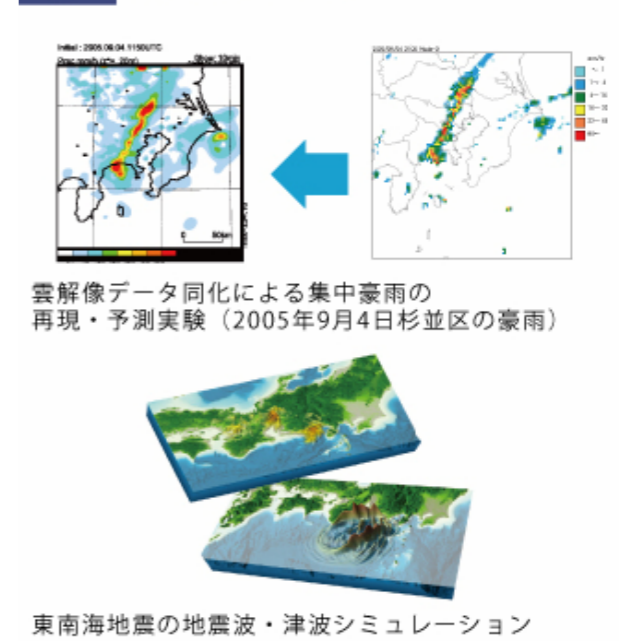
エネルギー創成
電極
電界液
電圧印加
電極

次世代電子デバイス
電極 電新機能素子 電極

-機能を予測し実験で検証-

This diagram shows the creation of new materials and energy. On the left, a 3D model of a crystal lattice is labeled '新物質・新現象 -新しい結晶や分子をデザイン-' (new materials/new phenomena -designing new crystals or molecules-). On the right, a schematic of an energy creation system shows '電極' (electrode) at the top and bottom, '電界液' (electrolyte) in the middle, and '電圧印加' (voltage application) indicated by a lightning bolt symbol. Below this, a schematic of a '次世代電子デバイス' (next-generation electronic device) shows '電極' (electrode) on the left and right, and '電新機能素子' (new functional element) in the center. The text '-機能を予測し実験で検証-' (predict function and verify with experiment) is at the bottom.

3 防災・減災に資する
地球変動予測

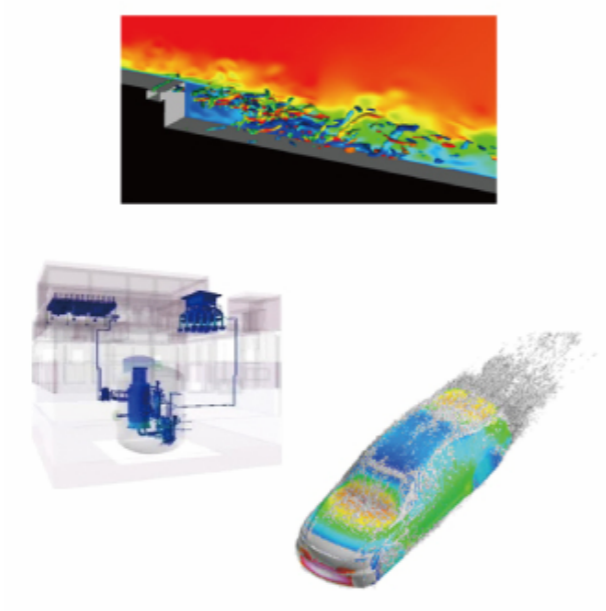


雲解像データ同化による集中豪雨の
再現・予測実験 (2005年9月4日杉並区の豪雨)

東南海地震の地震波・津波シミュレーション

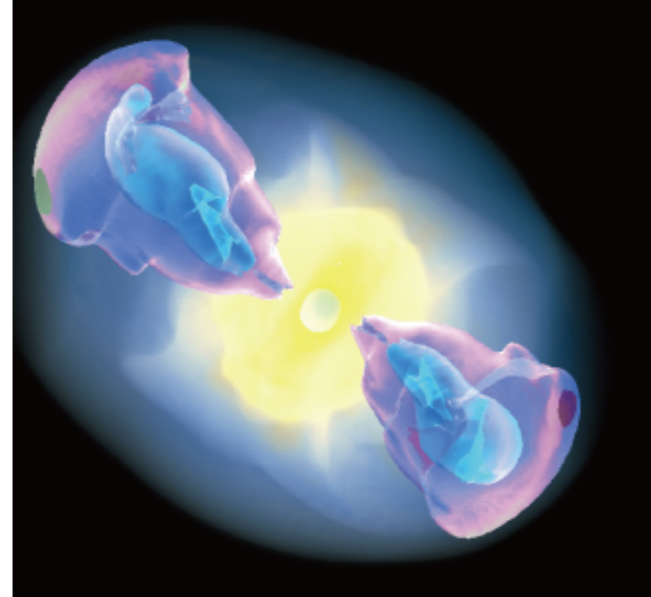
This block contains two main diagrams. The top diagram shows two maps of Japan with a blue arrow pointing from the right map to the left map. The left map is labeled '雲解像データ同化による集中豪雨の再現・予測実験 (2005年9月4日杉並区の豪雨)' (reproduction and prediction experiment of concentrated heavy rain using cloud resolution data assimilation (heavy rain in Suginami Ward on September 4, 2005)). The right map is labeled '東南海地震の地震波・津波シミュレーション' (simulation of seismic waves and tsunamis from the Great East Japan Earthquake). Below the maps are two 3D block diagrams showing topographical features and water levels, representing tsunami simulations.

4 次世代ものづくり



This block features three images related to next-generation manufacturing. The top image is a 3D visualization of a manufacturing process with a color gradient from red to blue. The bottom-left image shows a 3D model of a factory or industrial facility. The bottom-right image shows a 3D model of a car or vehicle with a complex internal structure.

5 物質と宇宙の起源と構造



This block contains a single large image showing a glowing yellow sphere in the center, surrounded by two translucent, blue and purple structures that resemble molecular or atomic models. The background is dark, suggesting a cosmic or microscopic environment.

物質科学分野における大規模シミュレーション



計算物質科学イニシアティブCMSI: <http://cms-initiative.jp>

物性物理における代表的なシミュレーション手法

- 密度汎関数法 (density functional theory)
 - 経験的なパラメタを含まない：「第一原理計算」
 - 相関・ゆらぎが強い場合には破綻
- モデル計算
 - 有効模型(ハイゼンベルグ模型など)に対する計算手法
 - 相関・ゆらぎの効果を正確に取り入れた大規模計算が可能：「第一原理的」
 - 数値対角化(厳密対角化) (ED)
 - 古典/量子モンテカルロ法 (MC/QMC)
 - 密度行列くりこみ群 (DMRG)
 - 動的平均場近似 (DMFT)
- 量子化学計算、分子動力学

数値対角化

- 有限の大きさの系のハミルトニアンを行列の形で書き下し、数値的に対角化
- 例：ハイゼンベルグ模型

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,k \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k = J \sum_{\langle j,k \rangle} \left[S_j^z S_k^z + \frac{1}{2} (S_j^+ S_k^- + S_j^- S_k^+) \right]$$

- スピン数 $N \Rightarrow$ 行列のサイズ $(2S+1)^N \times (2S+1)^N$
- 例： $S=1/2, N=20 \Rightarrow$ 行列のサイズ $1048576 \times 1048576 \Rightarrow$ メモリ 8TB
- どうやって対角化するか
 - 完全対角化：Householder法 (三重対角化) + QR分解など (LAPACKなどを使う)
 - 計算量が行列の次元の3乗に比例
 - スピンを1つ増やすと、次元は2倍、メモリは4倍、計算時間は8倍!

数値対角化における計算上の工夫

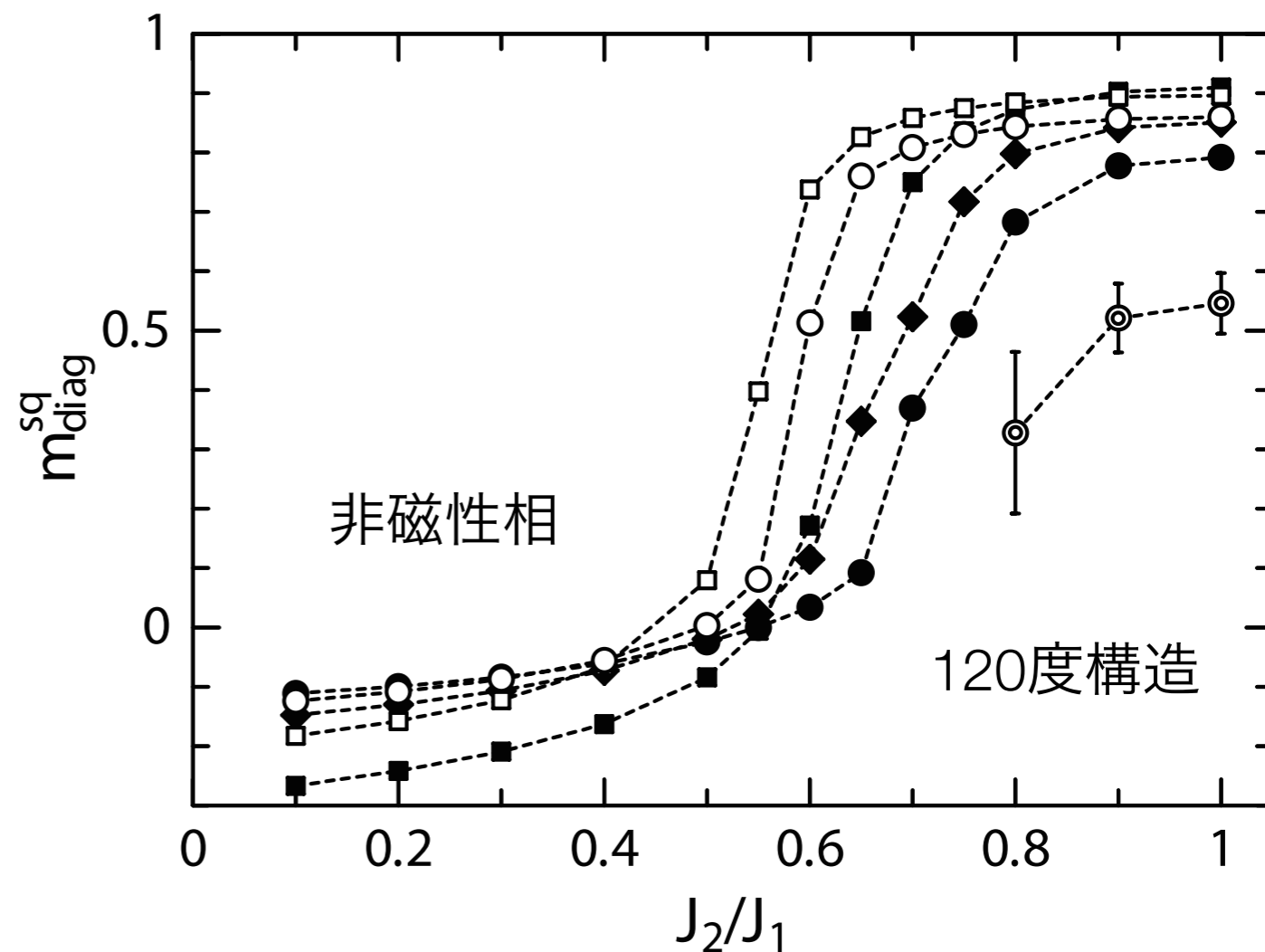
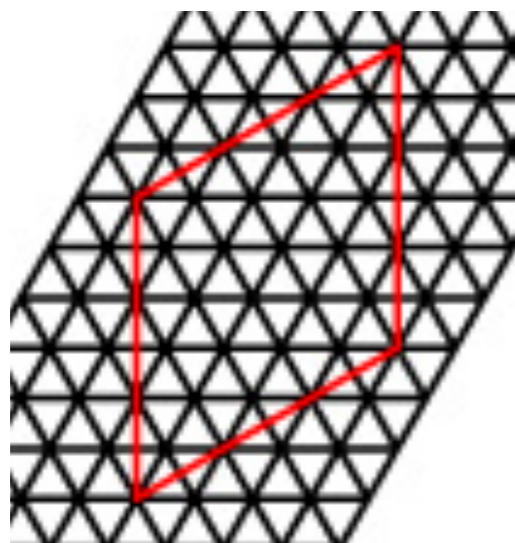
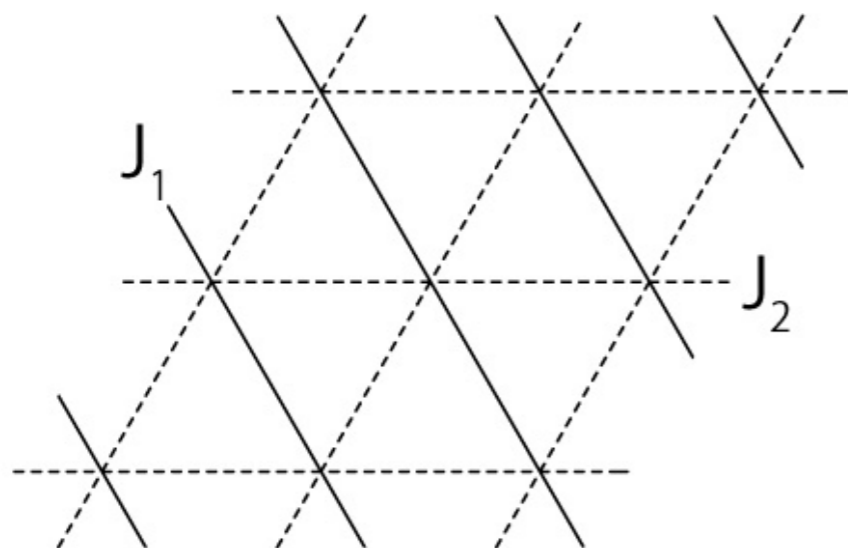
- 行列のサイズを小さくする
 - 保存量(ハミルトニアンと可換な量)を使う (total momentam, total S, etc)
 - ハミルトニアンは保存量毎にブロック対角化。それぞれを独立に対角化
 - 例：total Sz \Rightarrow N=20 の系で total Sz=0 の部分空間の次元

$${}_{20}C_{10} = \frac{20!}{10!10!} = 184\,756 \ll 2^{20} = 1\,048\,576$$

- 全固有値・固有ベクトルではなく、基底状態と低励起状態だけを求める
 - ハミルトニアン行列はかなり「疎」 (1行/1列の非零要素の数 \sim ボンド数)
 - べき乗法の利用： $\mathcal{H}^n v \rightarrow \Psi_0$ (絶対値最大の固有ベクトルに収束)
 - 行列の非零要素のみ保存、あるいは行列要素をその場で計算
 - べき乗法の改良：Lanczos法、CG (共役勾配)法

超大規模数値対角化の例 (Nakano et al 2013)

- (歪んだ)三角格子 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグ模型
- $N=27 \Rightarrow$ 次元 712 070 156 203 \Rightarrow メモリ15TB (情報基盤センター FX10 4400ノード)



モンテカルロ法の種類と応用

- モンテカルロ積分
 - 単純サンプリング, 重点的サンプリング
- マルコフ連鎖モンテカルロ (高次元分布の生成, 人工的な「時系列」の生成)
 - 平衡状態のシミュレーション: 古典系, 世界線量子モンテカルロ
 - クラスターアルゴリズム, 拡張アンサンブル法
 - 非平衡状態, ダイナミクス, 基底状態の探索(焼き鈍し法)
- 逐次モンテカルロ
 - 転送行列モンテカルロ, グリーン関数モンテカルロ
- 格子 QCD, タンパク質の折り畳み, 組み合わせ最適化問題, ベイズ推定, 生態系, 金融工学, 在庫管理, 交通流, etc

イジング模型 Ising Model

- 格子の上に規則的に並んだ磁気モーメント(スピン) $\sigma_i = \pm 1$

- ハミルトニアン Hamiltonian $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i$

- 分配関数 partition function

$$Z = \sum_k e^{-\beta E^{(k)}}$$

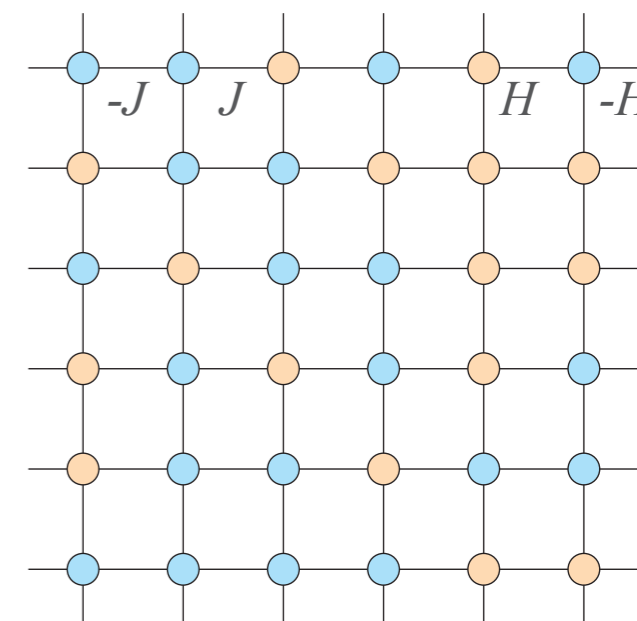
- 状態 k の出現確率 = ボルツマン重み $e^{-\beta E^{(k)}}$

- 物理量 physical quantities

- ギブス自由エネルギー Gibbs free energy $f = -\frac{1}{N\beta} \ln Z$

- 内部エネルギー internal energy

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{\sum_k E^{(k)} e^{-\beta E^{(k)}}}{Z}$$



イジング模型に対するマルコフ連鎖モンテカルロ

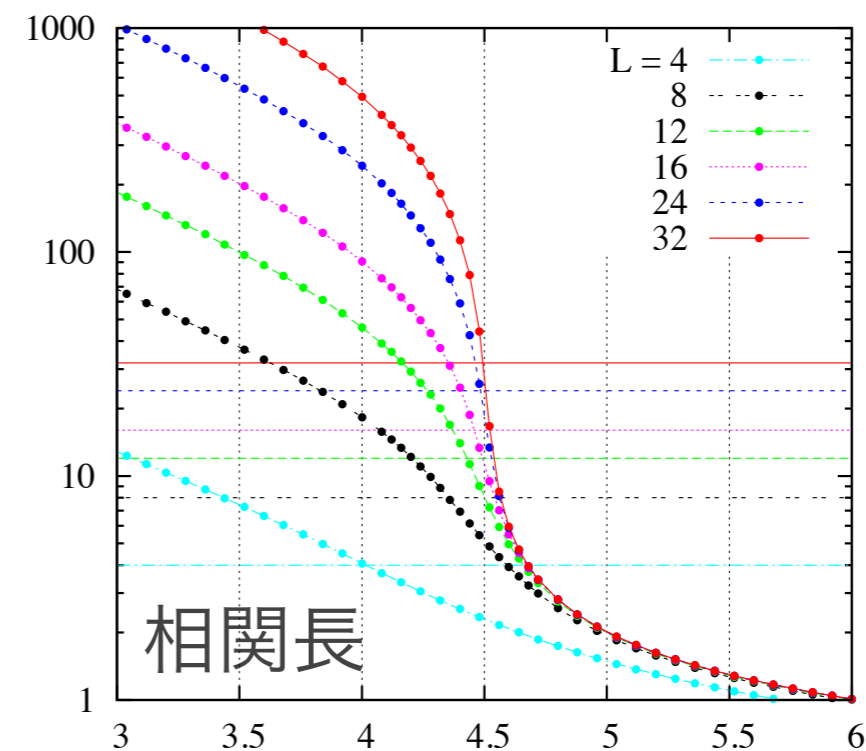
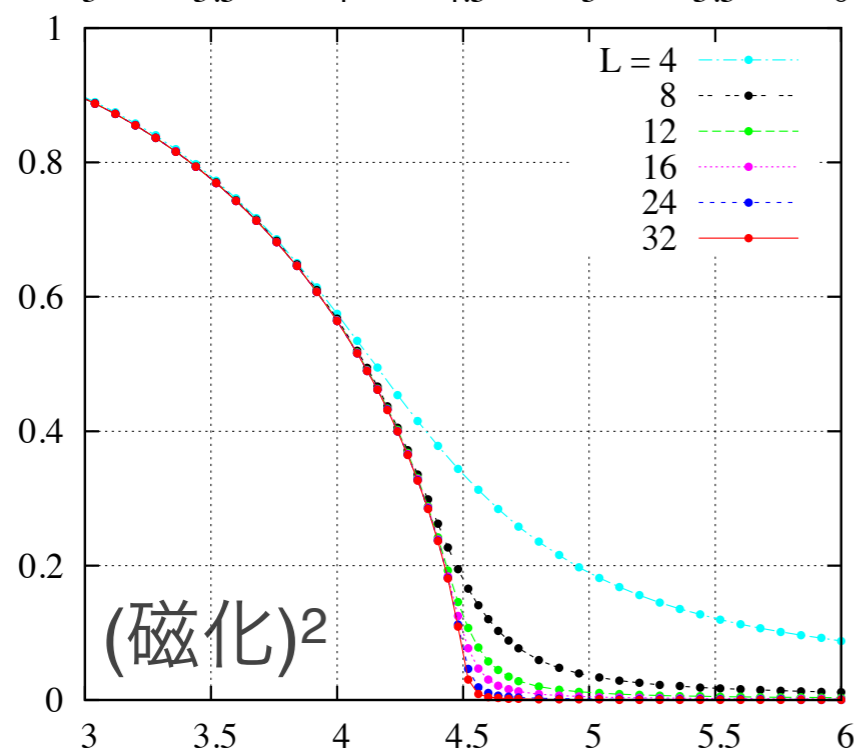
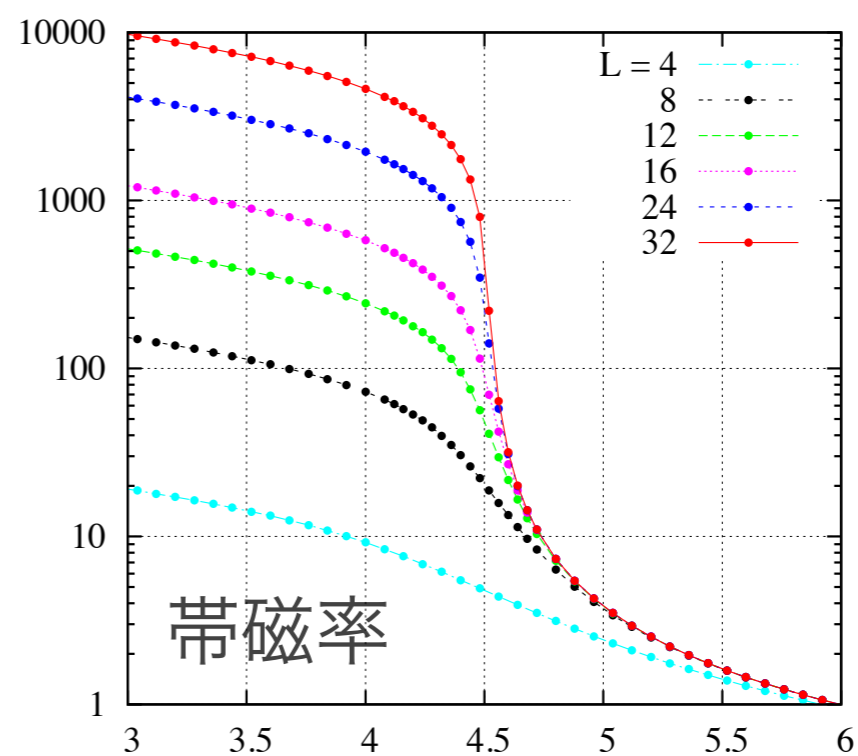
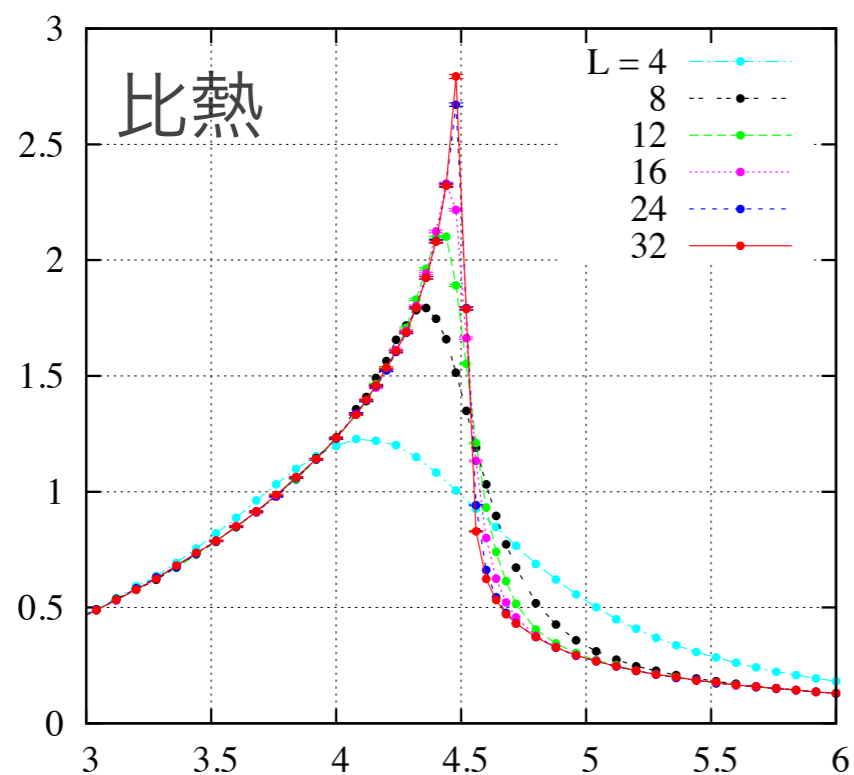
メトロポリス法 Metropolis

```
for (int m = 0; m < total_mcs; ++m) { // loop over Monte Carlo steps
  for (int s = 0; s < num_sites; ++s) { // loop over lattice sites
    double delta = 0;
    for (int j = 0; j < num_neighbors; ++j) {
      int v = neighbor(s, j);
      delta += 2 * J * spin[s] * spin[v]; // calculate energy difference
    }
    if (random() < exp(-beta * delta)) // accept/reject trial configuration
      spin[s] = -1 * spin[s];
  }
  // measure physical quantities
}
```

熱浴法 heat bath

```
if (random() < (1 + tanh(-beta * delta / 2)) / 2)
  spin[s] = -1 * spin[s];
```

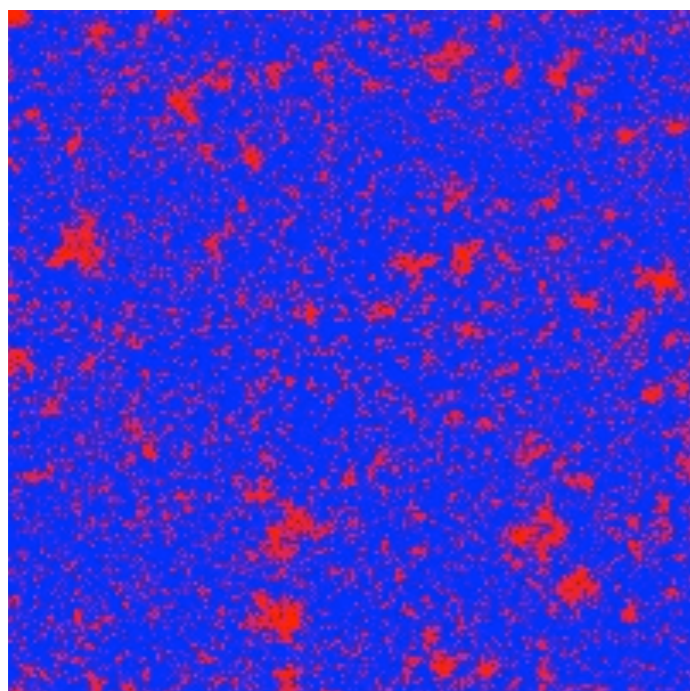
三次元立方格子強磁性イジングモデル



イジングモデルにおける相転移 Phase Transition

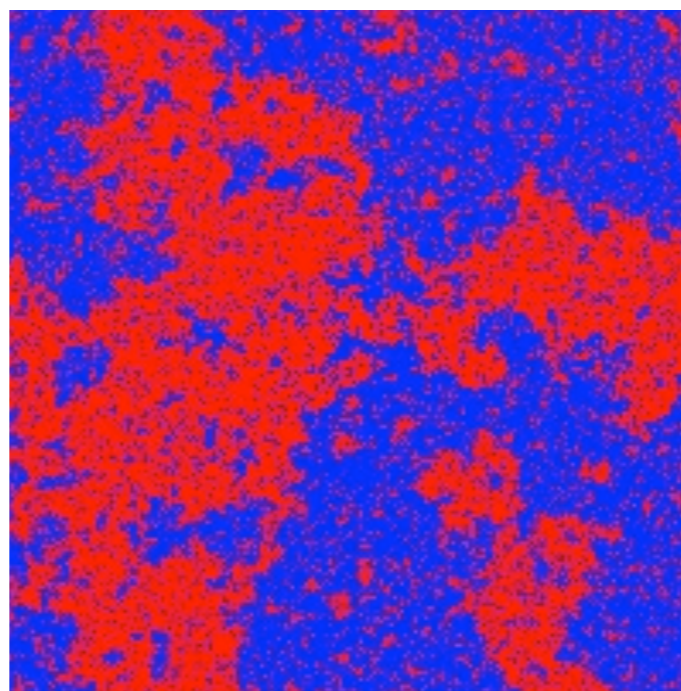
$$F = E - TS$$

$T=0.995T_c$



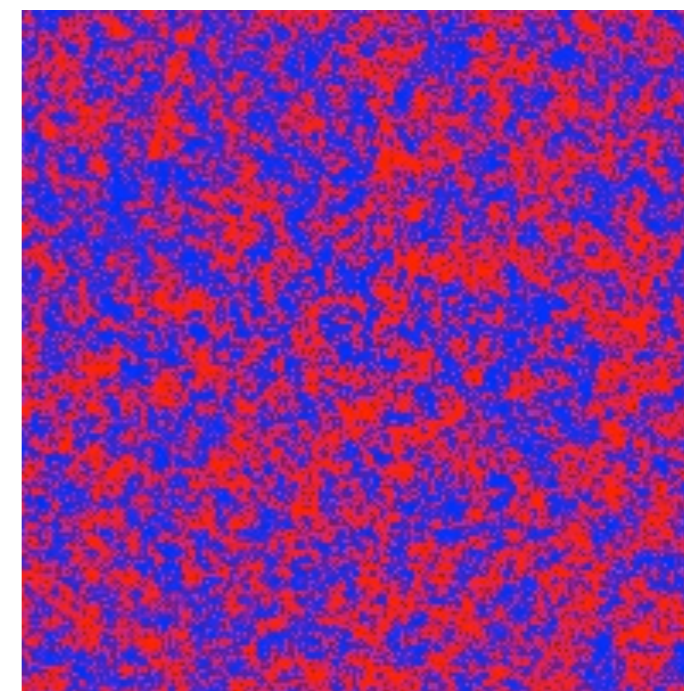
エネルギー利得
秩序状態
ordered state

$T=T_c$



臨界点 critical point

$T=1.05T_c$



エントロピー利得
無秩序状態
disordered state

- 量子系の分配関数と物理量の期待値

$$Z = \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr} A e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}$$

- 量子系では H, A 等は全て演算子(or 行列)
- モンテカルロ法を使うには物理量の期待値を

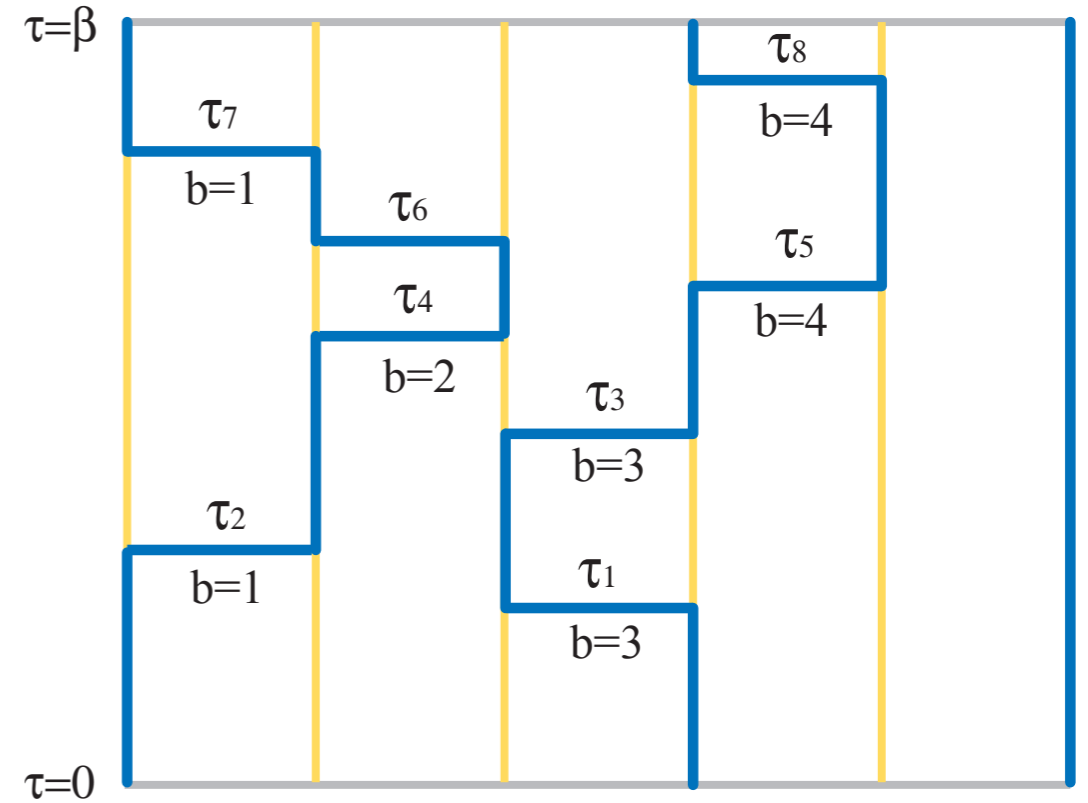
$$\langle A \rangle = \sum_c A(c) W(c)$$

の形で書きたい ($A(c)$ も $W(c)$ も c -数)

- 量子系の場合の「配位」 c と対応する「重み」 $W(c)$ は何か?
- 経路積分や高温展開を利用して「配位」や「重み」を定義する

表示・表現 (representation)

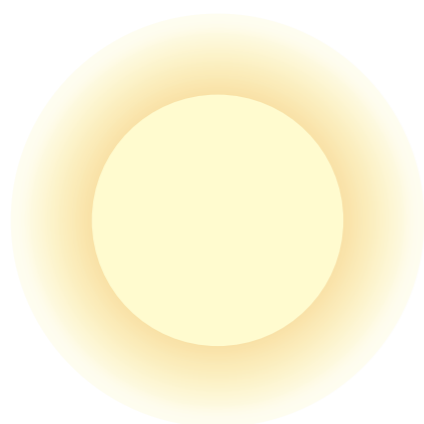
- メトロポリス法・熱浴法・拡張アンサンブル法・クラスターアルゴリズムの利用



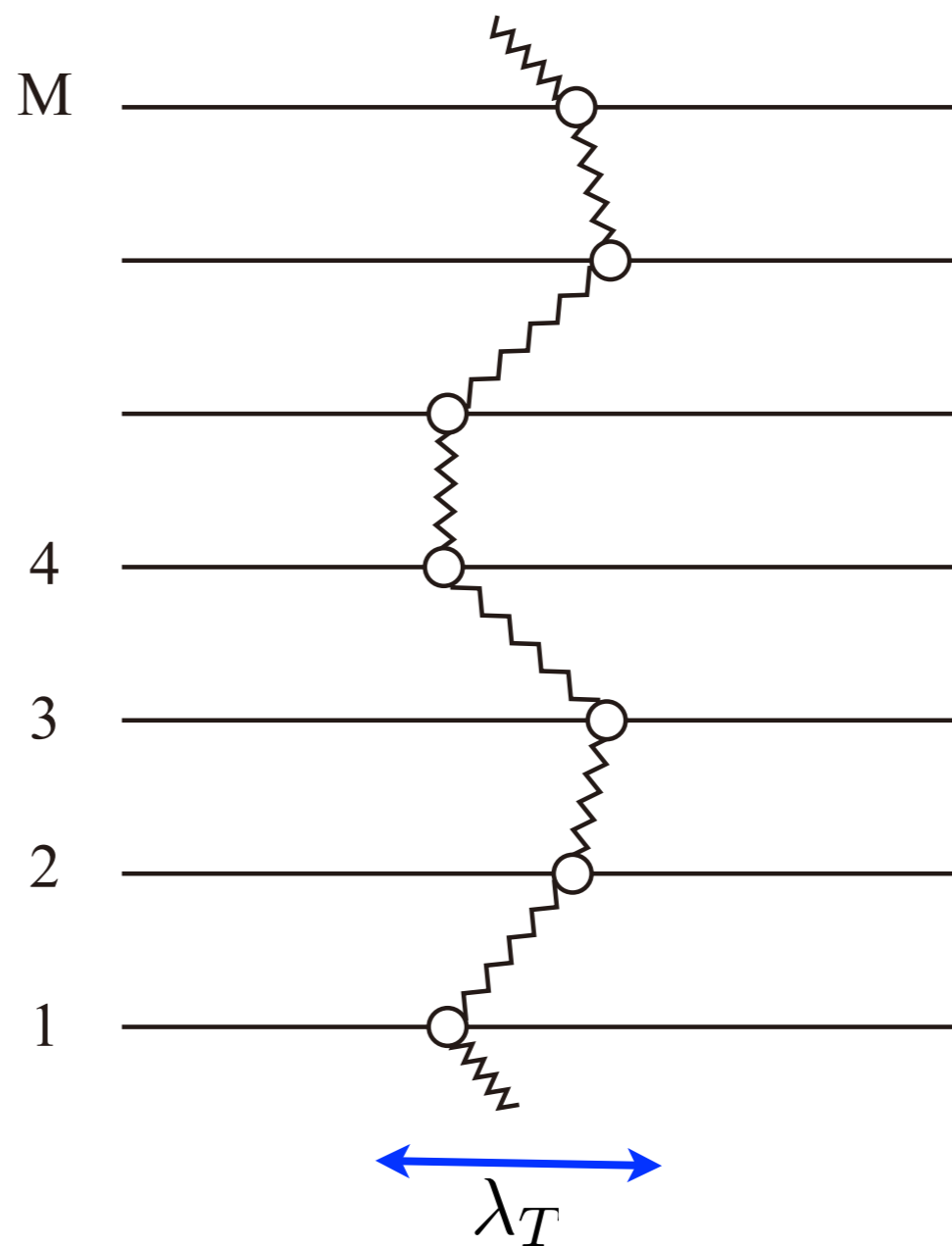
連続虚時間経路積分表示

虚時間経路積分表示

量子1粒子



古典M粒子 (ポリマー)



量子格子模型 (quantum lattice models)

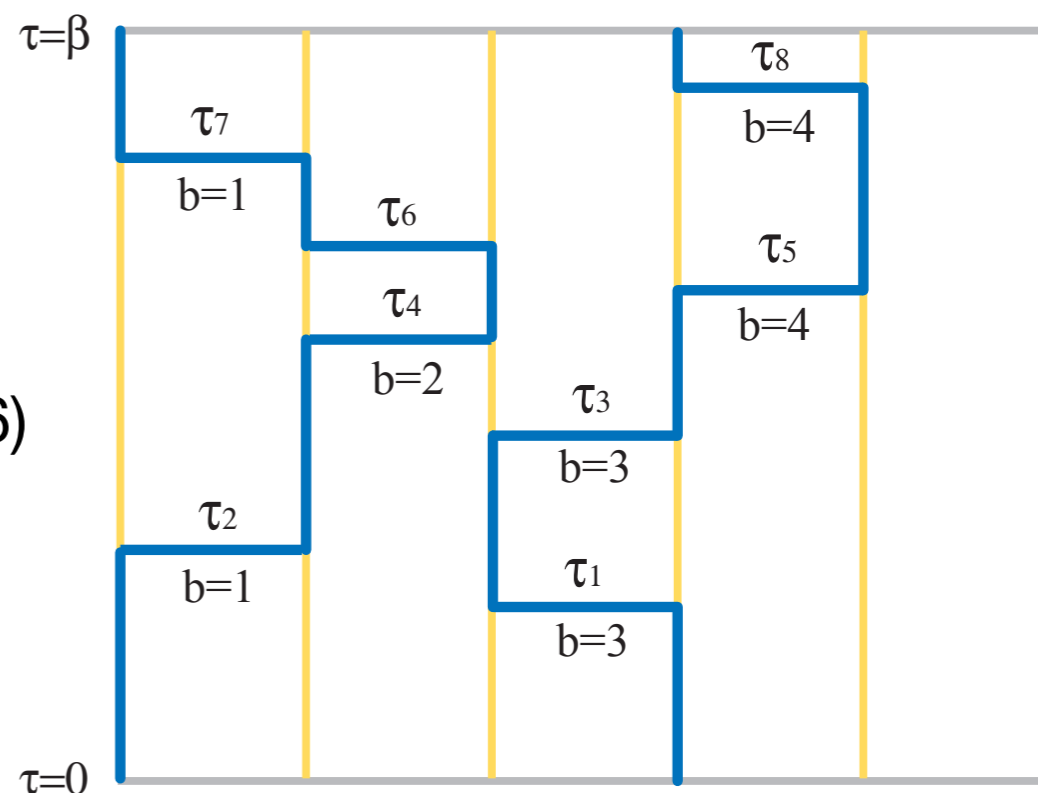
- 量子スピン模型

$$\mathcal{H} = \frac{J^{xy}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J^z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$

- ハバード模型 (量子格子気体)

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- 虚時間経路積分表示が可能 (Suzuki 1976)
- 粒子がジャンプする場所と(虚)時刻だけを覚えておけば良い \Rightarrow 連続虚時間表示 (Beard-Wiese 1996)
- 粒子数は保存 \Rightarrow 世界線は途中で途切れない

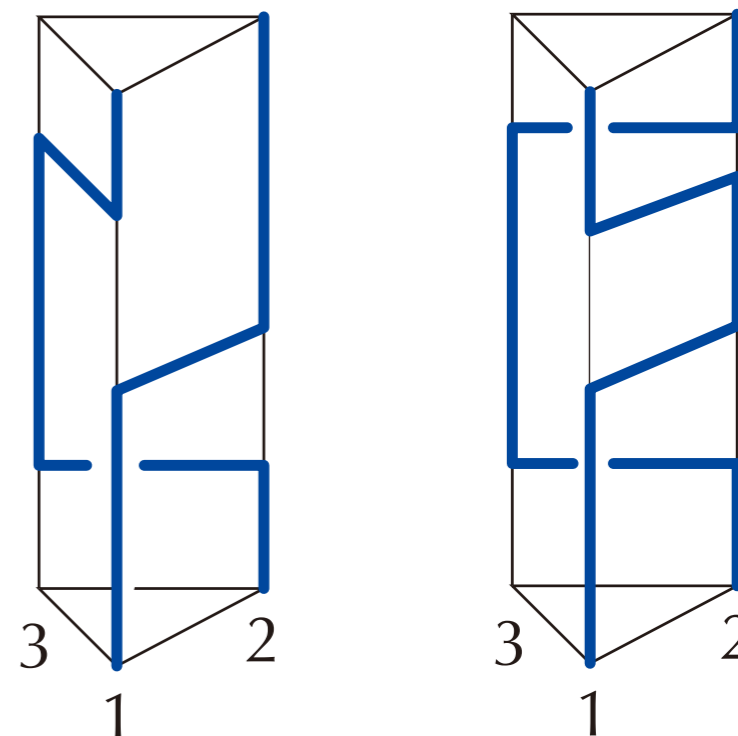


負符号問題 (negative sign problem)

- フェルミ粒子は粒子の交換に対して、波動関数の符号が入れ替わる

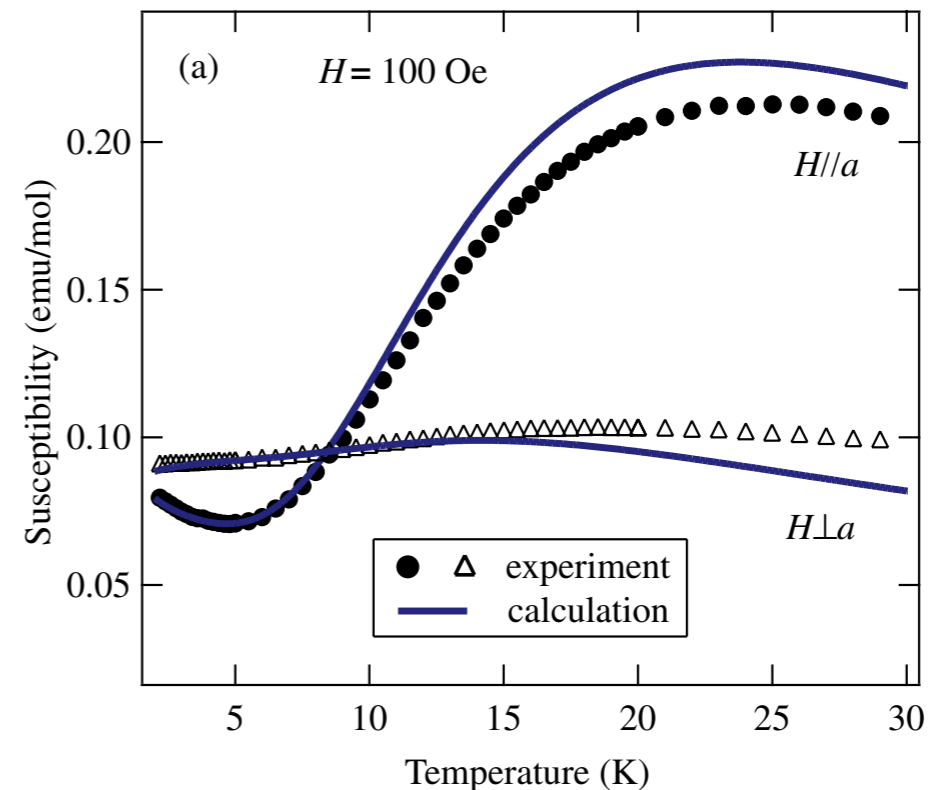
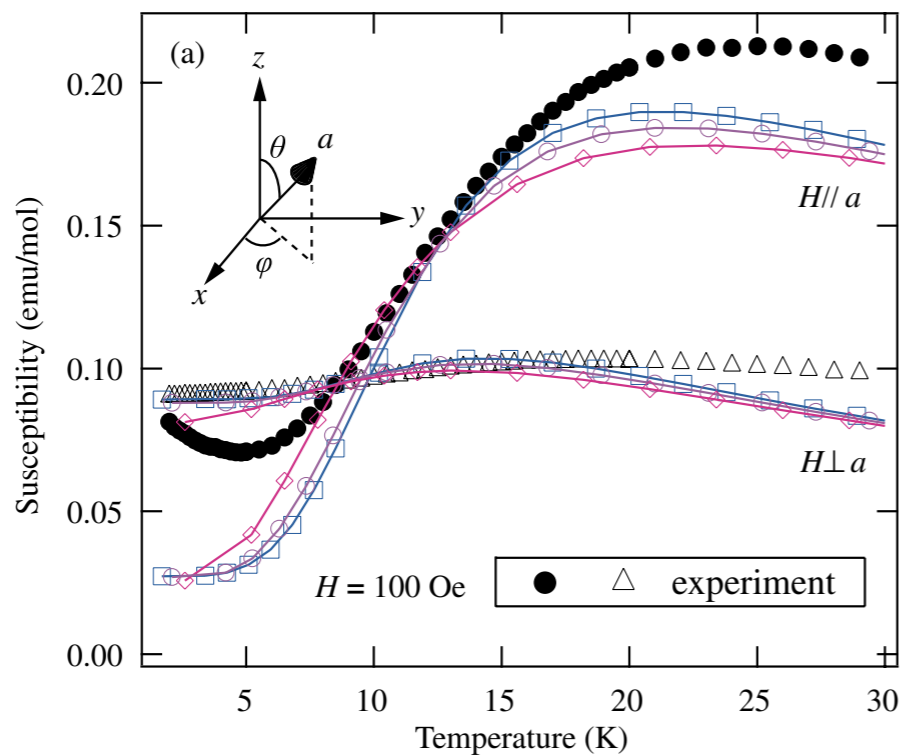
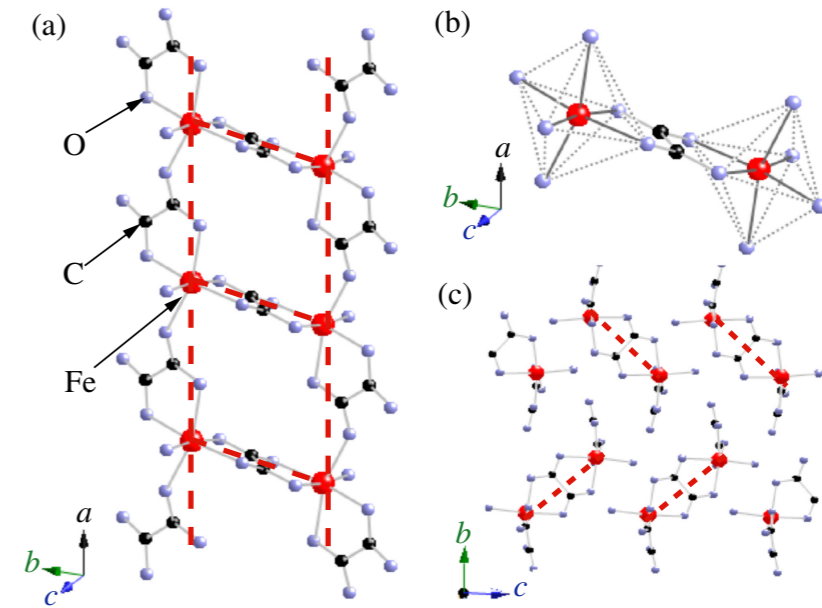
フェルミ統計・フェルミの排他律

- 虚時間経路積分表示した際に粒子が交換すると重みが負になる
- フラストレーションのある量子スピン模型の場合にも負の重みが現れる
- 重みが0以下になるので、確率として解釈することができない
- 量子モンテカルロにおける**最大の問題!**



Spin ladder material $\text{Na}_2\text{Fe}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_2$

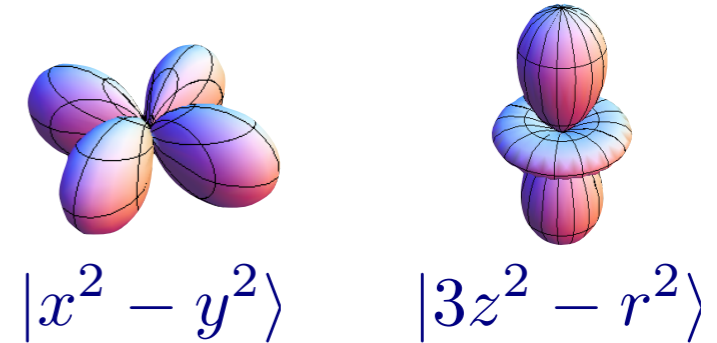
- Fe^{2+} ions in octahedral crystal field
⇒ **effective $S=1$ spins** at low T
- Fitting experimental data by QMC results for several theoretical models (**ladders**, **dimers**, etc)



Yamaguchi, Kimura, Honda, Okunishi, Todo, Kindo, Hagiwara (2009)

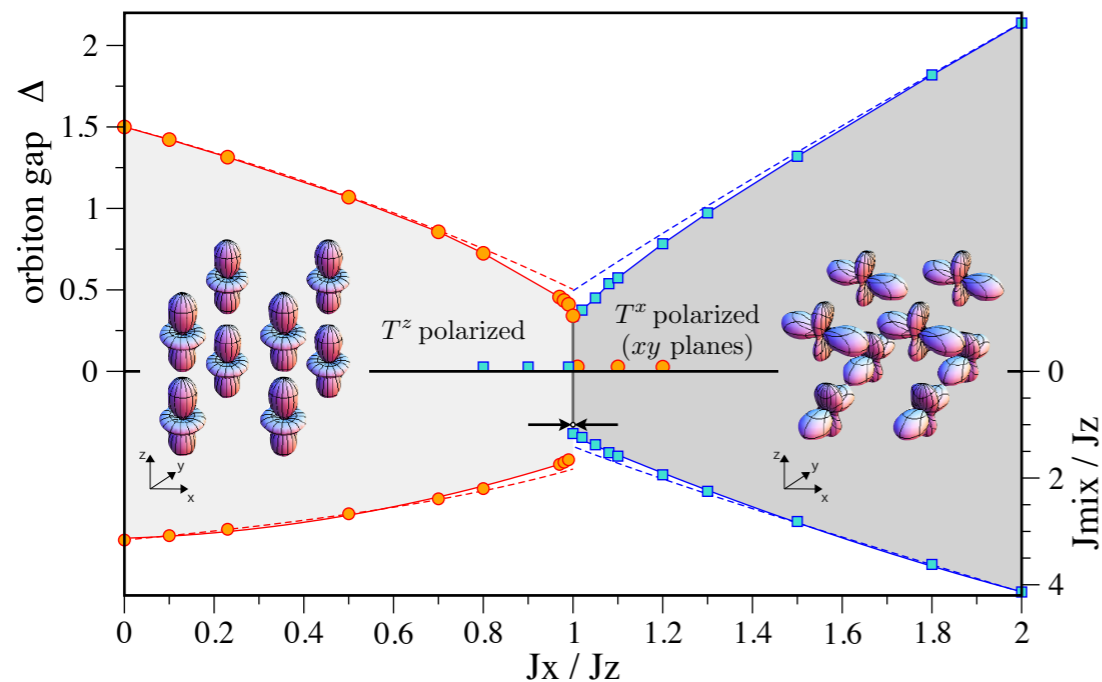
Orbital ordering in e_g orbital systems

- Mott insulators with partially filled d-shells
- Non-trivial interplay of charge, spin, and orbital degrees of freedom



- Effective Hamiltonian for orbital degrees of freedom (120° model)

$$H_{120} = - \sum_{i, \gamma=x,y} \frac{1}{4} \left[J_z T_i^z T_{i+\gamma}^z + 3J_x T_i^x T_{i+\gamma}^x \right. \\ \left. \pm \sqrt{3} J_{\text{mix}} (T_i^z T_{i+\gamma}^x + T_i^x T_{i+\gamma}^z) \right] - \sum_i J_z T_i^z T_{i+z}^z$$



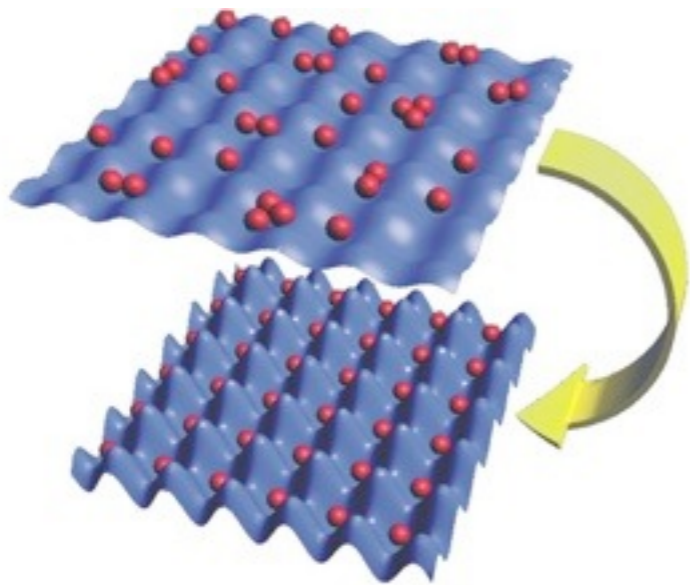
van Rynbach, Todo, Trebst (2010)

Supersolid in extended Bose-Hubbard model

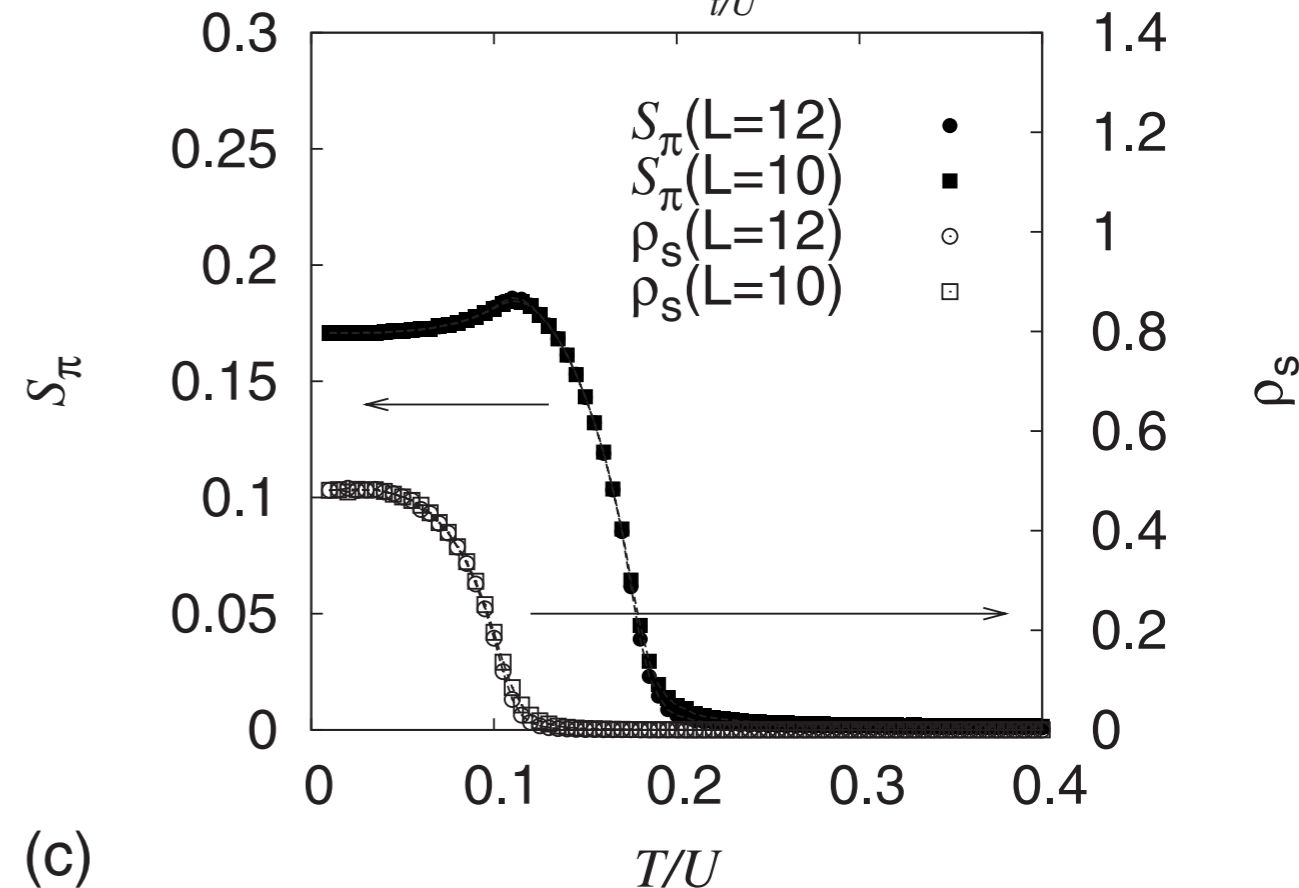
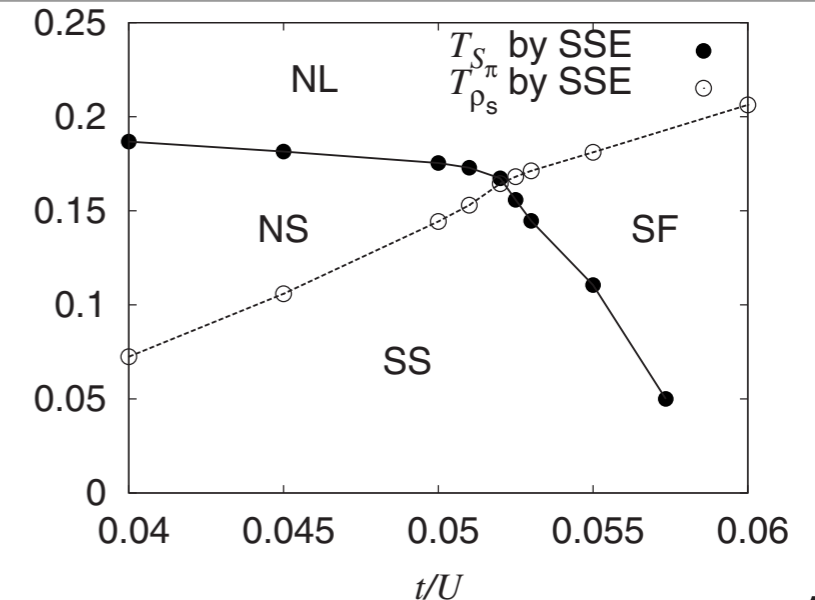
- Interacting soft-core bosons

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \frac{1}{2} U \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad T/U$$

- Supersolid = co-existence of diagonal long-range order (=solid) and off-diagonal long-range order (=superfluid)
- Experimental realization: optical lattice?



<http://www.uibk.ac.at/th-physik/go>



(c)

Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

パッケージソフトウェアの利用

- 世の中には物性物理のための様々なパッケージソフトウェアが存在する
 - 有償：Gaussian、VASP、WIEN2k、
 - 無償：GAMESS、Quantum ESPRESSO、ABINIT、Amber、Gromacs、ALPS、
- 日本国内でも数多くの高性能なソフトが開発・公開されている
 - 小さなグループでこつこつと開発しているソフトが多い
 - 知名度は高くない
 - ドキュメント、宣伝、ユーザインタフェース、ユーザサポートなどの問題
- 開発者から見ると
 - ソフトを開発・公開しただけでは成果にならない (職がない)
 - ドキュメント作成やユーザサポートには時間も手間もかかる
 - 海外の大規模なソフトに対抗するのはしんどい

物質科学シミュレーションのポータルサイト

MateriApps

<http://ma.cms-initiative.jp/>

⇒ MateriApps

アプリの横断的な利用、開発を促進するWebサイト



サイト活用によるメリット

- 利用者の立場から
 - ・利用したいアプリが見つかる！
 - ・アプリの使い方をサポート！
 - ・フォーラムで意見交換、疑問解消！
- 開発者の立場から
 - ・開発・公開をサポート
 - ・開発者の生の声を届ける！

機能

- 「やりたいこと」からアプリを検索できるシステム
検索タグ：対象となる物質・模型、計算手法・アルゴリズム、知りたい物理量・物理現象
- 開発者の声を利用者に届けるアプリ紹介開発者ページの設置 (アプリ最大の魅力、アプリの将来性・応用性 etc.)
- 掲示板を利用した意見交換の促進
- 共同研究・開発を支えるシステム (実装予定)
Web 上でのバージョン管理・ソースコード開発

お問い合わせ先：ma@cms-initiative.jp

MateriApps Live! - <http://github.com/cmsi/MateriAppsLive>

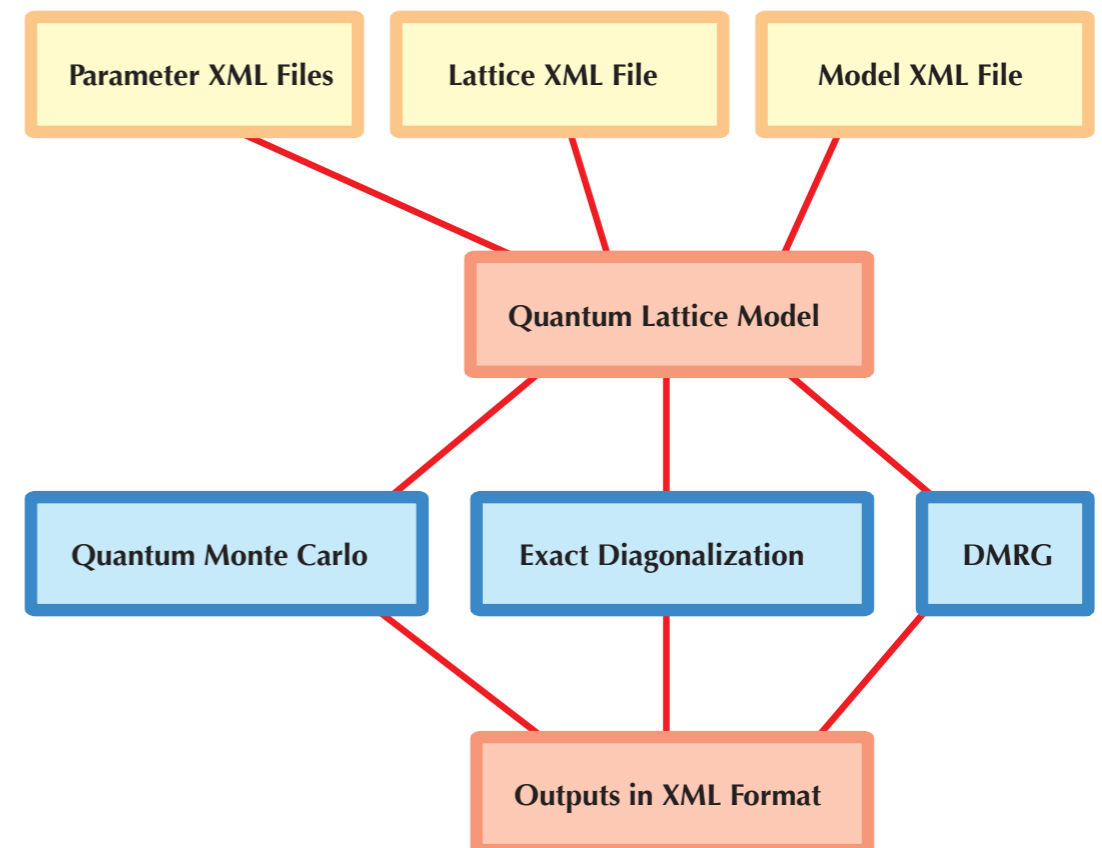
- USBメモリから直接ブートできる Linux システム (Debian Live)
- MateriAppsで紹介している公開ソフト・ツールがあらかじめインストールされている
- Windows、Macなどで利用可
- 2013年7月末 ver. 1 公開予定
 - MateriApps サイトで配布
 - 学会・アプリ講習会でも配布予定



ALPS プロジェクト

- <http://alps.comp-phys.org/>
- 量子格子模型(量子スピン系、電子系)のための並列シミュレーションソフトウェアパッケージの開発
- 開発物(ライブラリ・アプリケーション)をフリーウェアとして公開
- 様々な模型に対する様々なシミュレーションアルゴリズムの入力・計算結果を

XML 形式で統一的に入出力可能に



The ALPS project

ALPS = **A**lgorithms and **L**ibraries for **P**hysics **S**imulations

- International collaboration for developing **open-source softwares** for simulation of **quantum lattice models**, such as quantum spin systems, electron systems, etc
- **ALPS Libraries** = collection of **generic C++ libraries**
- **ALPS Applications** = collection of application packages using **modern algorithms** such as QMC, DMRG, ED, etc
- **ALPS Framework** = environment for executing large-scale parallel simulations including XML schemas, tools, scheduler, etc

Target audience

- **Experimental physicists**
 - Use “canned codes” to **model materials**
 - **Determine microscopic parameters** by fitting experimental data to simulations
- **Theoretical physicists**
 - **Quick check of theoretical ideas** using many modern algorithms
 - Monte Carlo, Diagonalization, DMRG, ...
 - Also useful for debugging
 - Libraries **simplify and accelerate code development**

ALPS libraries and applications

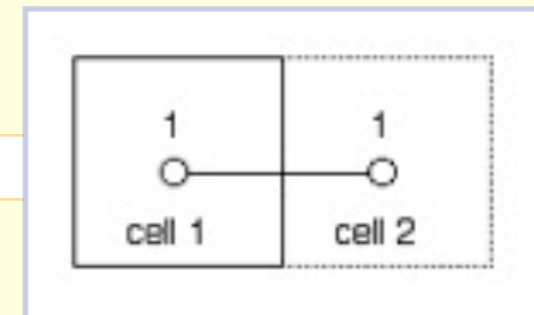
tools	XML manipulation	GUI	database	
applications	MC	QMC	ED	DMRG
domain-specific libraries	lattice	model	observables	scheduler
numerics	random	ublas	iterative eigenvalue solver	
generic C++	Boost library	graph	serialization	XML/XSLT
C / Fortran	BLAS	LAPACK	MPI	

ALPS Lattice XML

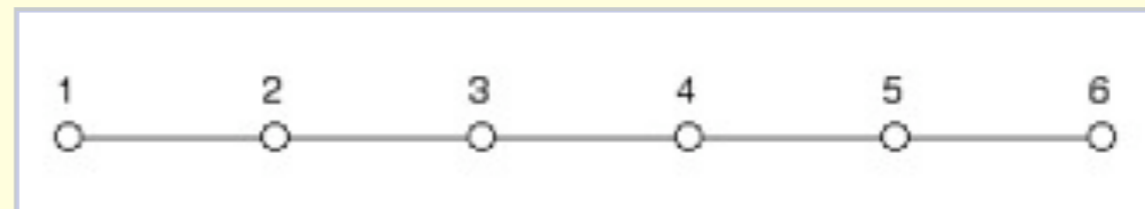
periodic chain with length L

```
<LATTICE name="chain lattice" dimension="1">  
  <BASIS><VECTOR> 1 </VECTOR></BASIS>  
</LATTICE>
```

```
<UNITCELL name="simple1d" dimension="1" vertices="1">  
  <EDGE>  
    <SOURCE vertex="1" offset="0"/><TARGET vertex="1" offset="1"/>  
  </EDGE>  
</UNITCELL>
```



```
<LATTICEGRAPH name = "chain lattice">  
  <FINITELATTICE>  
    <LATTICE ref="chain lattice"/>  
    <PARAMETER name="L"/>  
    <EXTENT size = "L"/>  
    <BOUNDARY type="periodic"/>  
  </FINITELATTICE>  
  <UNITCELL ref="simple1d"/>  
</LATTICEGRAPH>
```



Model XML for describing Hamiltonian

XXZ spin model with two types of bonds (e.g. nearest and next nearest neighbor interactions)

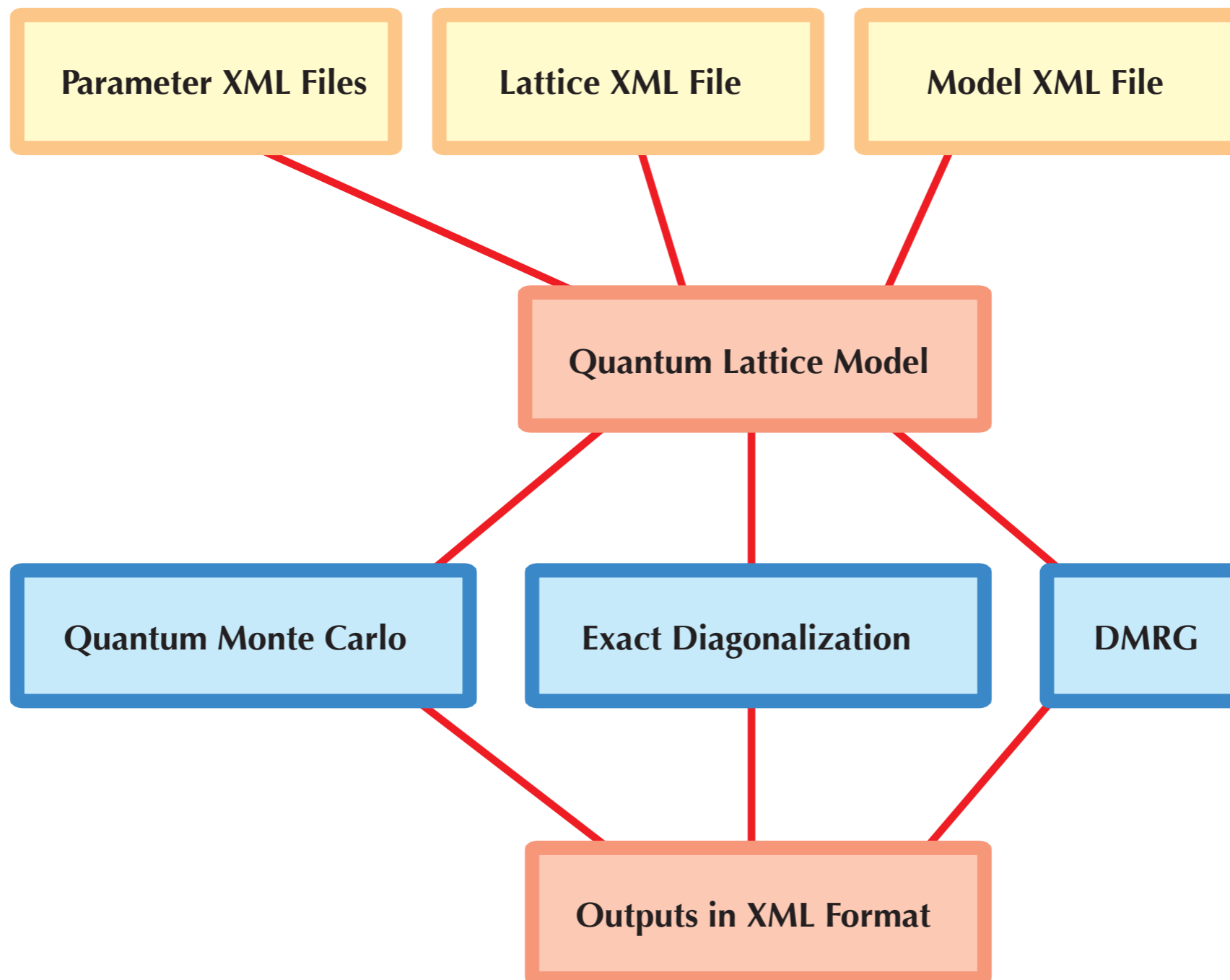
```

<HAMILTONIAN name="spin">
  <PARAMETER name="Jz" default="J"/>
  <PARAMETER name="Jxy" default="J"/>
  <PARAMETER name="J" default="1"/>
  <PARAMETER name="Jz'" default="J'"/>
  <PARAMETER name="Jxy'" default="J'"/>
  <PARAMETER name="J'" default="0"/>
  <PARAMETER name="h" default="0"/>
  <BASIS ref="spin"/>
  <SITETERM site="i"> -h * Sz(i) </SITETERM>
  <BONDTERM type="0" source="i" target="j">
    Jz * Sz(i) * Sz(j) + Jxy * (Splus(x)*Sminus(y)+Sminus(x)*Splus(y)) / 2
  </BONDTERM>
  <BONDTERM type="1" source="i" target="j">
    Jz' * Sz(i) * Sz(j) + Jxy' * (Splus(x)*Sminus(y)+Sminus(x)*Splus(y)) / 2
  </BONDTERM>
</HAMILTONIAN>

```

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[J_z S_i^z S_j^z + \frac{J_{xy}}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] - \sum_i h S_i^z$$

Simulations with ALPS



ALPS Version 2.1

- 2012年5月
- 論文 - JSTAT P05001 (2011)
- <http://alps.comp-phys.org/>

The ALPS project release 2.0:
open source software for strongly correlated systems

B. Bauer¹ L. D. Carr² H.G. Evertz³ A. Feiguin⁴ J. Freire⁵
S. Fuchs⁶ L. Gamper¹ J. Gukelberger¹ E. Gull⁷ S. Guertler⁸
A. Hehn¹ R. Igarashi^{9,10} S. Isakov¹ D. Koop⁵ P.N. Ma¹
P. Mates^{1,5} H. Matsuo¹⁷ O. Parcollet¹² G. Pawłowski¹³
J.D. Picon¹⁴ L. Pollet^{11,1} T. Pruschke⁶ E. Santos⁵
V.W. Scarola¹⁵ U. Schollwöck¹⁶ C. Silva⁵ B. Surer¹ S. Todo^{17,10}
S. Trebst¹⁸ M. Troyer^{1†} M. L. Wall² P. Werner¹ S. Wessel^{19,20}

¹Theoretische Physik, ETH Zurich, 8093 Zurich, Switzerland

²Department of Physics, Colorado School of Mines, Golden, CO 80401, USA

³Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Graz, A-8010 Graz, Austria

⁴Department of Physics and Astronomy, University of Wyoming, Laramie, Wyoming 82071, USA

⁵Scientific Computing and Imaging Institute, University of Utah, Salt Lake City, Utah 84112, USA

⁶Institut für Theoretische Physik, Georg-August-Universität Göttingen, Göttingen, Germany

⁷Columbia University, New York, NY 10027, USA

⁸Bethe Center for Theoretical Physics, Universität Bonn, Bonn, Germany

⁹Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency, 110-0015 Tokyo, Japan

¹⁰Core Research for Evolutional Science and Technology, Japan Science and Technology Agency, 332-0012 Kawaguchi, Japan

¹¹Physics Department, Harvard University, Cambridge 02138, Massachusetts, USA

¹²Institut de Physique Theorique, CEA/DSM/IPhT-CNRS/URA 2306, CEA-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

¹³Faculty of Physics, A. Mickiewicz University, ul. Umultowska 85, 61-614 Poznan, Poland

¹⁴Institute of Theoretical Physics, EPF Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland

¹⁵Department of Physics, Virginia Tech, Blacksburg, Virginia 24061, USA

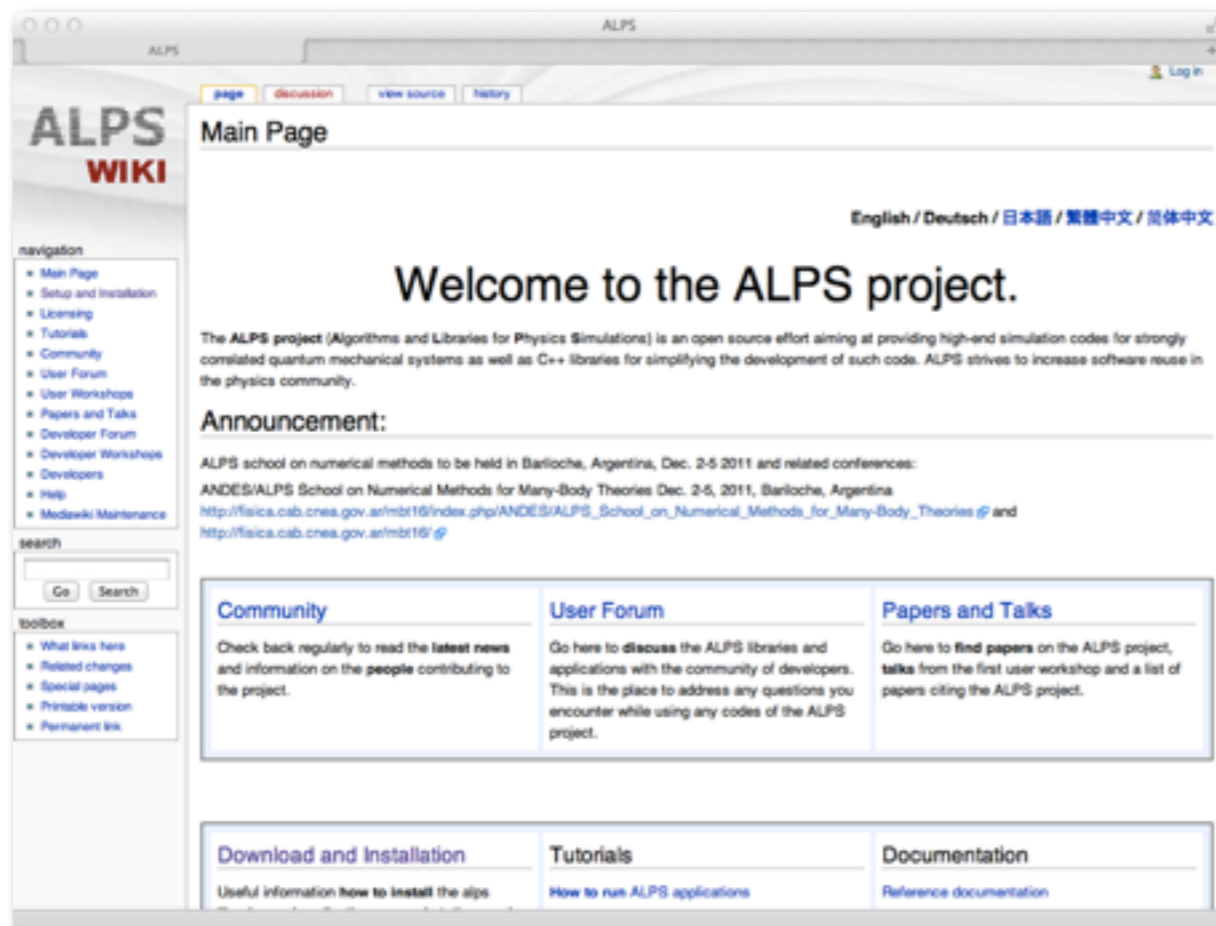
¹⁶Arnold Sommerfeld Center for Theoretical Physics and Center for NanoScience, University of Munich, Theresienstrasse 37, 80333 Munich, Germany

¹⁷Department of Applied Physics, University of Tokyo, 113-8656 Tokyo, Japan

¹⁸Microsoft Research, Station Q, University of California, Santa Barbara, CA 93106, USA

¹⁹Institute for Solid State Theory, RWTH Aachen University, 52056 Aachen, Germany

²⁰Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart, Germany



<http://www.iop.org/EJ/abstract/1742-5468/2011/05/P05001>

スクリプト言語の利用

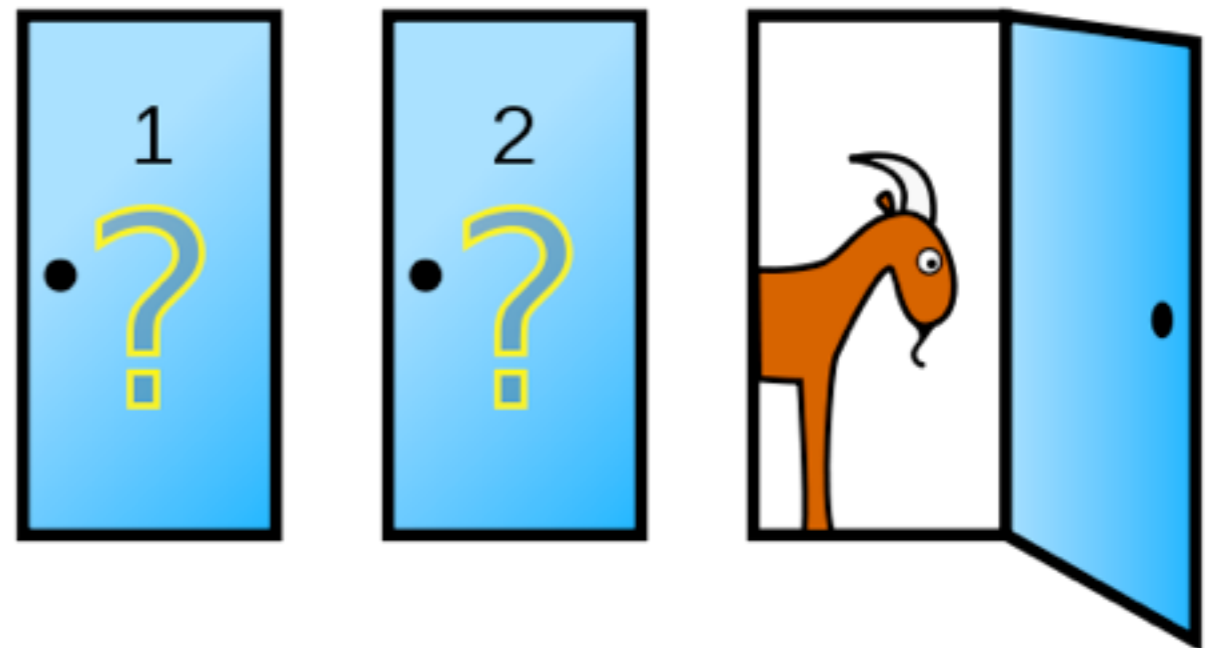
- スクリプト言語とは
 - コンパイルなしでその場で実行できる(簡易)プログラミング言語
 - メジャーなスクリプト言語：Perl、Python、Rubyなど
 - Mac OS X や Linux には、あらかじめインストールされている
 - Windows では、バイナリパッケージをダウンロード & インストール
 - ソースの編集・コンパイル・インストールなどの手間がかからない
 - その場で入力 ⇒ 即実行 ⇒ 出力
 - 電卓代わりに
 - パッケージ(ライブラリ、モジュール)が充実しているので便利
 - CSV/XML/HDF5の読み書き、DBへのアクセス、ネットワーク、CGI、機器の制御、文字列処理、線形演算・最適化、計算・実験結果の加工、図の作成、GUI、、、
- いろいろなアイデアを手軽に試すことが可能

例) Monty Hall 問題

- ゲームのルール

- 三つのドアのうち、一つには車、他の二つにはヤギが隠されている
- 「挑戦者」はまずどれかの一つドアを選ぶ
- 「親切な司会者」は残り二つのうちから、ヤギ (= ハズレ)の入っているドアを開いて見せてくれる
- 「挑戦者」には、現在選んでいるドアから残りもう一つのドアに変更する権利が与えられる

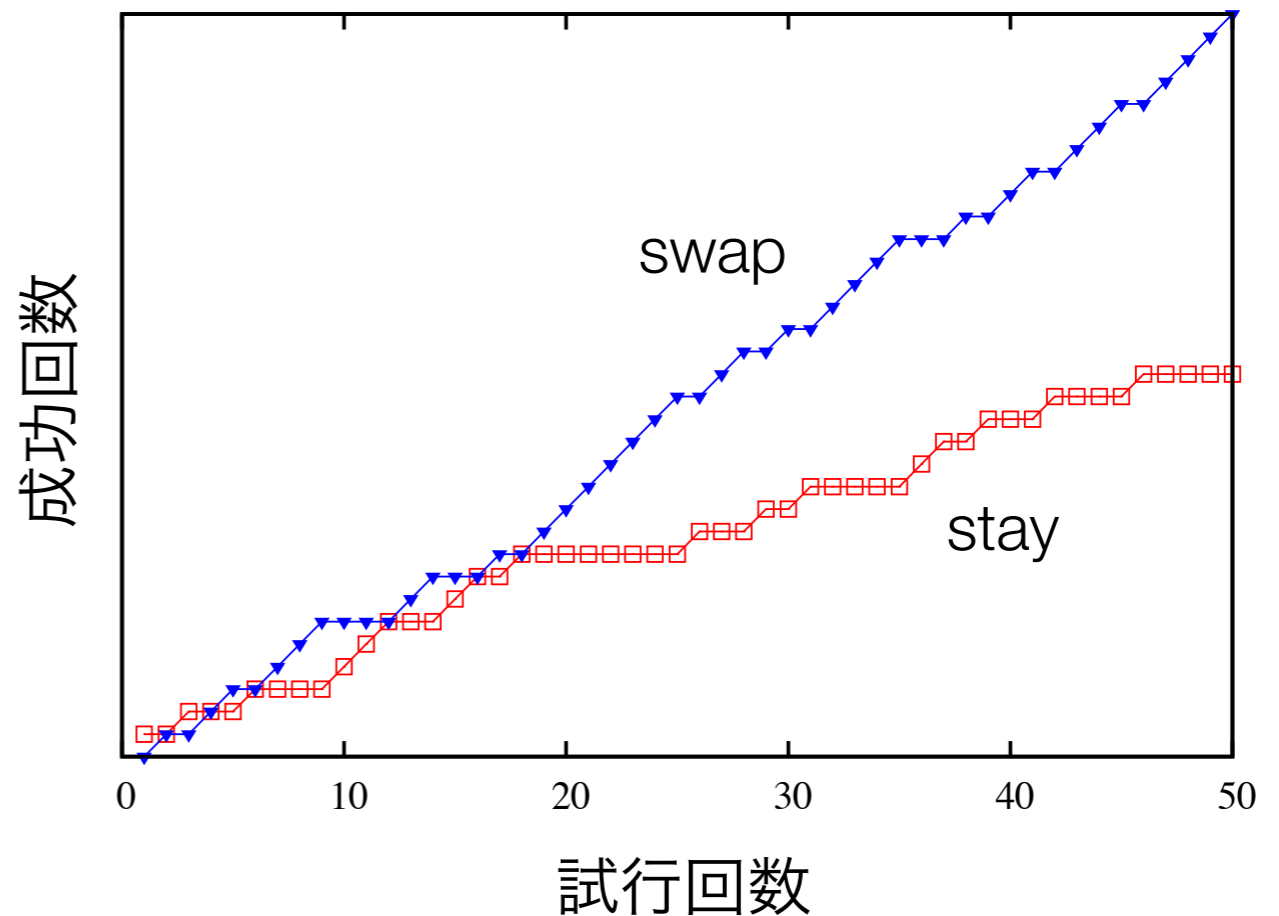
- 最初の方が良いのか?
- もう一つのドアに変更すべきか?



Pythonによる乱数を使ったシミュレーション

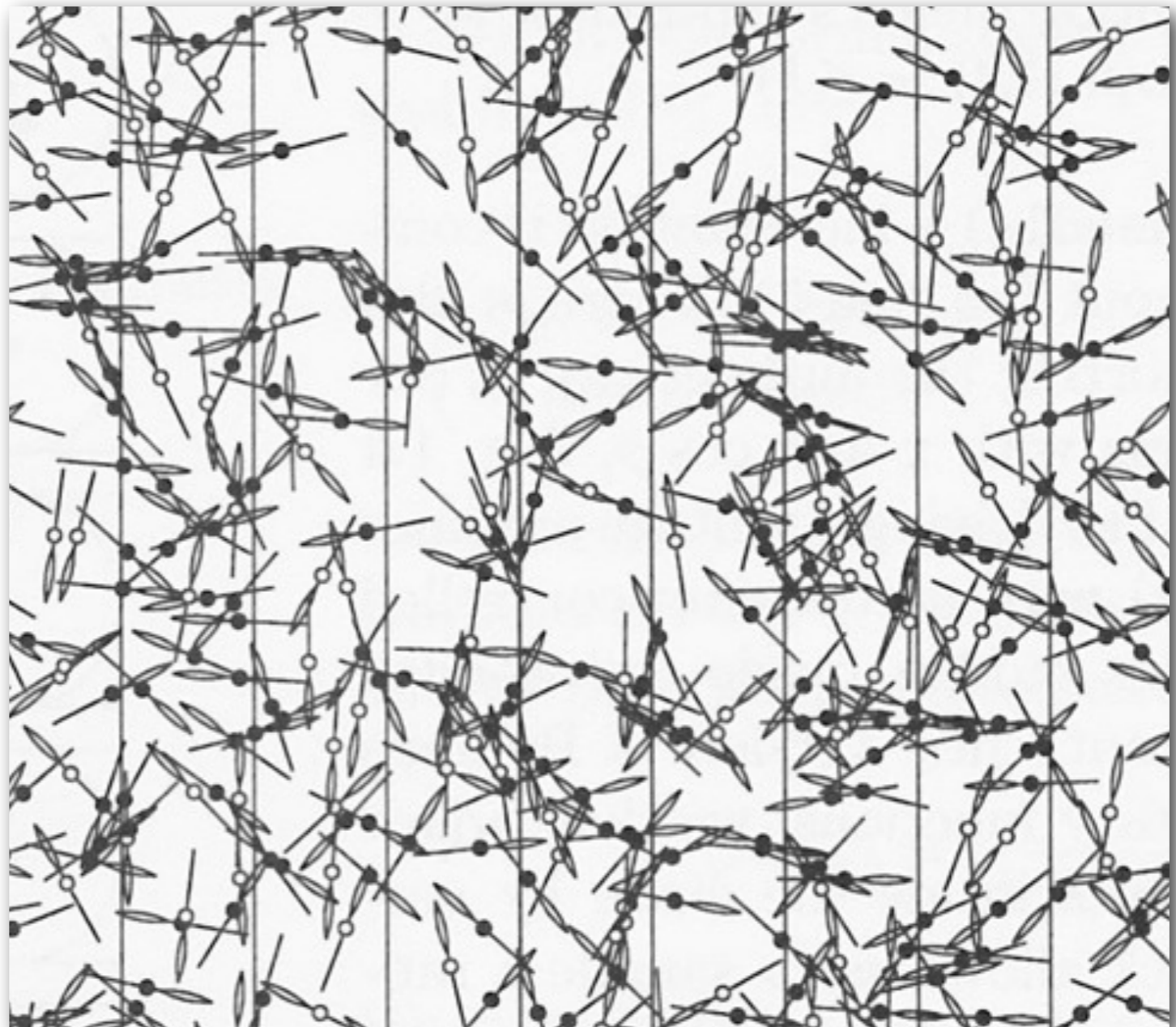
```
import random
success_stay = 0
success_swap = 0
for i in range(1000):
    bingo = random.randint(0,2)
    choice = random.randint(0,2)
    blank = []
    for k in range(3):
        if k != choice and k != bingo:
            blank.append(k)
    show = random.choice(blank)
    remain = 0 + 1 + 2 - choice - show

    if choice == bingo:
        success_stay += 1
    if remain == bingo:
        success_swap += 1
    print i+1, bingo, choice, show, remain, success_stay, success_swap
```



Buffon の針

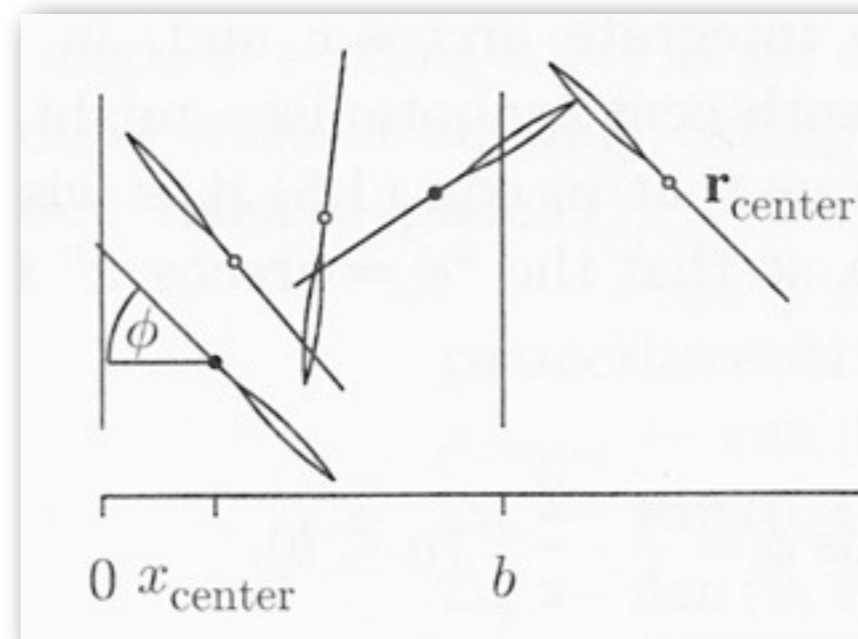
- 等間隔 b で線が描かれた床の上に長さ a の針をばらまく (ただし $a < b$ とする)
- 線に針がかかる確率は?



Buffon の針 (つづき)

- 最も近い線から、針の中心までの距離 x は $0 \sim b/2$ に均一に分布
- 中心のまわりの針の角度 ϕ は $0 \sim \pi/2$ に均一に分布
 - $x < (a/2) \cos \phi$ ならば、針は線にかかる $N_{\text{hits}}(x, \phi) = 1$

$$P = \frac{\int_0^{b/2} dx \int_0^{\pi/2} d\phi N_{\text{hits}}(x, \phi)}{\int_0^{b/2} dx \int_0^{\pi/2} d\phi} = \frac{a}{b} \cdot \frac{2}{\pi}$$

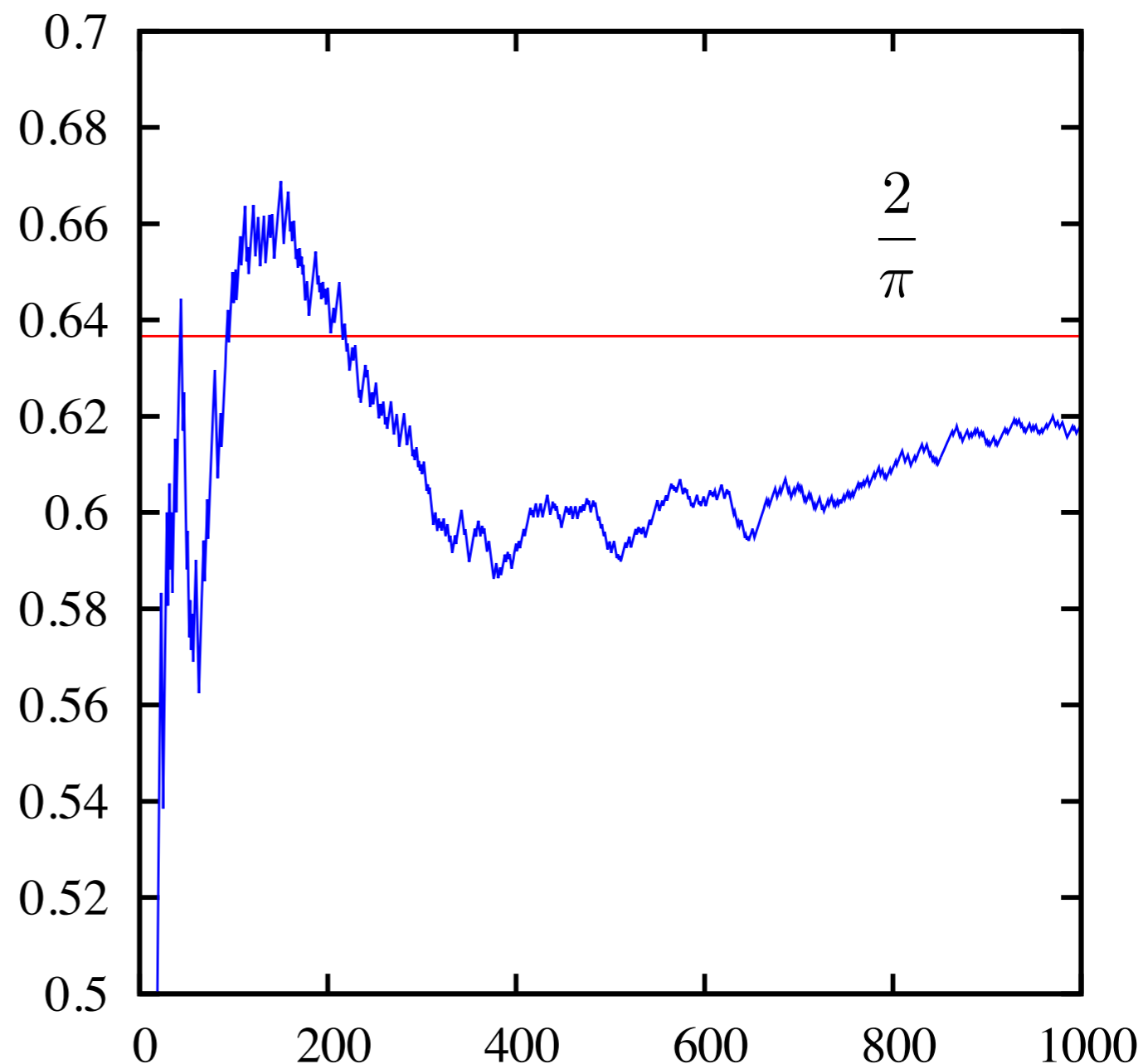


- この確率過程を計算機中でシミュレーションすれば、円周率が求まる!
 - モンテカルロ積分、モンテカルロ・サンプリング

乱数によるサンプリング – モンテカルロ法

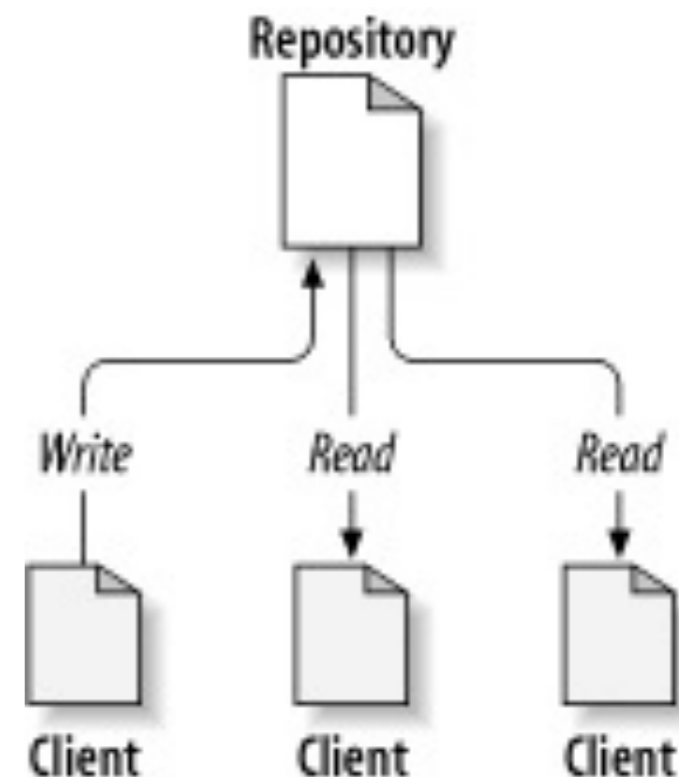
- $a = b = 1$ のとき

```
import math
import random
success = 0
for i in range(10000):
    x = 0.5 * random.random()
    phi = (math.pi/2) * random.random()
    if (x < 0.5 * math.cos(phi)):
        success += 1
    print i, success / float(i+1)
```



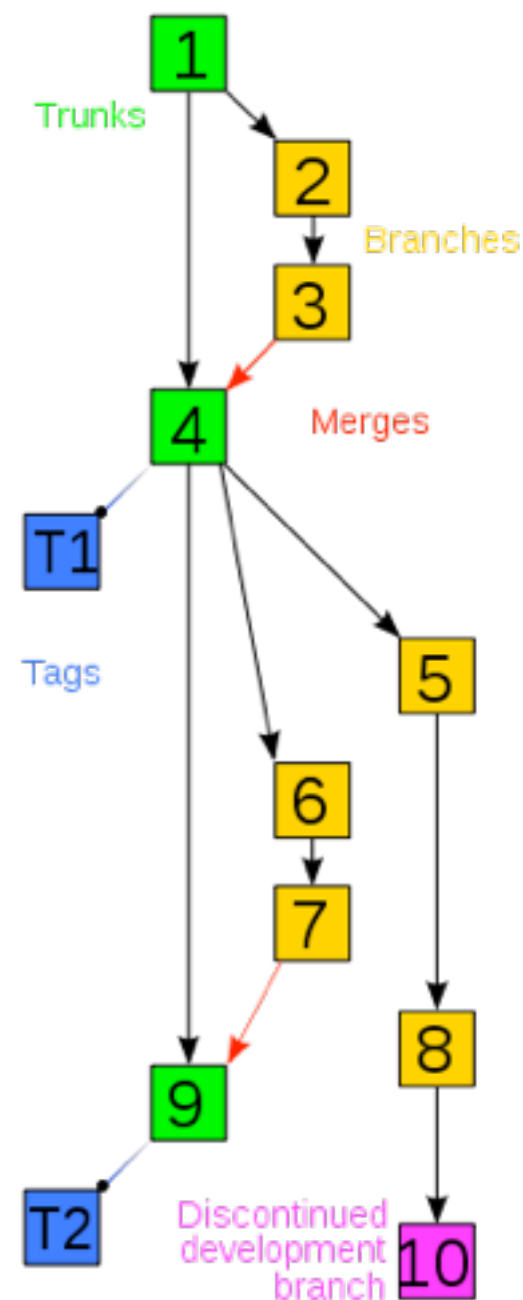
バージョン管理システム(VCS)の利用

- バージョン管理システムとは？
 - ファイルの履歴をデータベース(リポジトリ)で一括管理するシステム
- もともとはプログラムのソースコードのためのシステム
 - それ以外のファイル(例えば TeX ファイル)管理にも使える
- 一人で使っても複数人で使っても超便利
 - 超優秀な秘書のようなもの

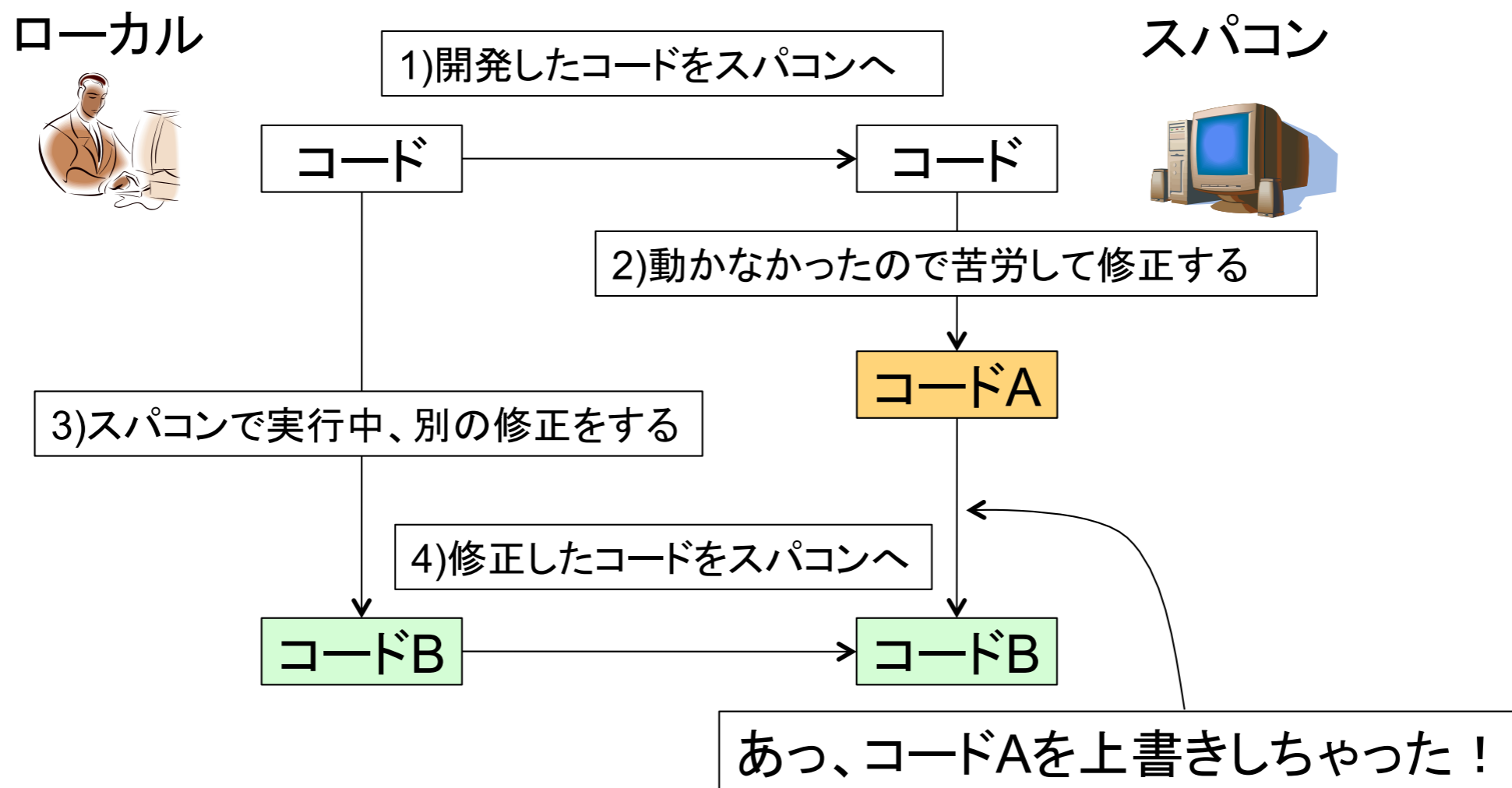


バージョン管理システム(VCS)の利用

- 作業者 and/or 作業場所が複数になると、ファイル名や手書きのログファイルによるバージョン管理はすぐに破綻する
 - ネットワーク経由でファイルを check out/check in
 - 更新毎に一意的なバージョン番号 (リビジョン) を付与
 - 任意のバージョン間の比較が容易
 - バックアップの代わりに
- 複数箇所から同時に更新した場合に衝突を回避するしくみ
- ブランチ・マージ・タグ付けなどが可能

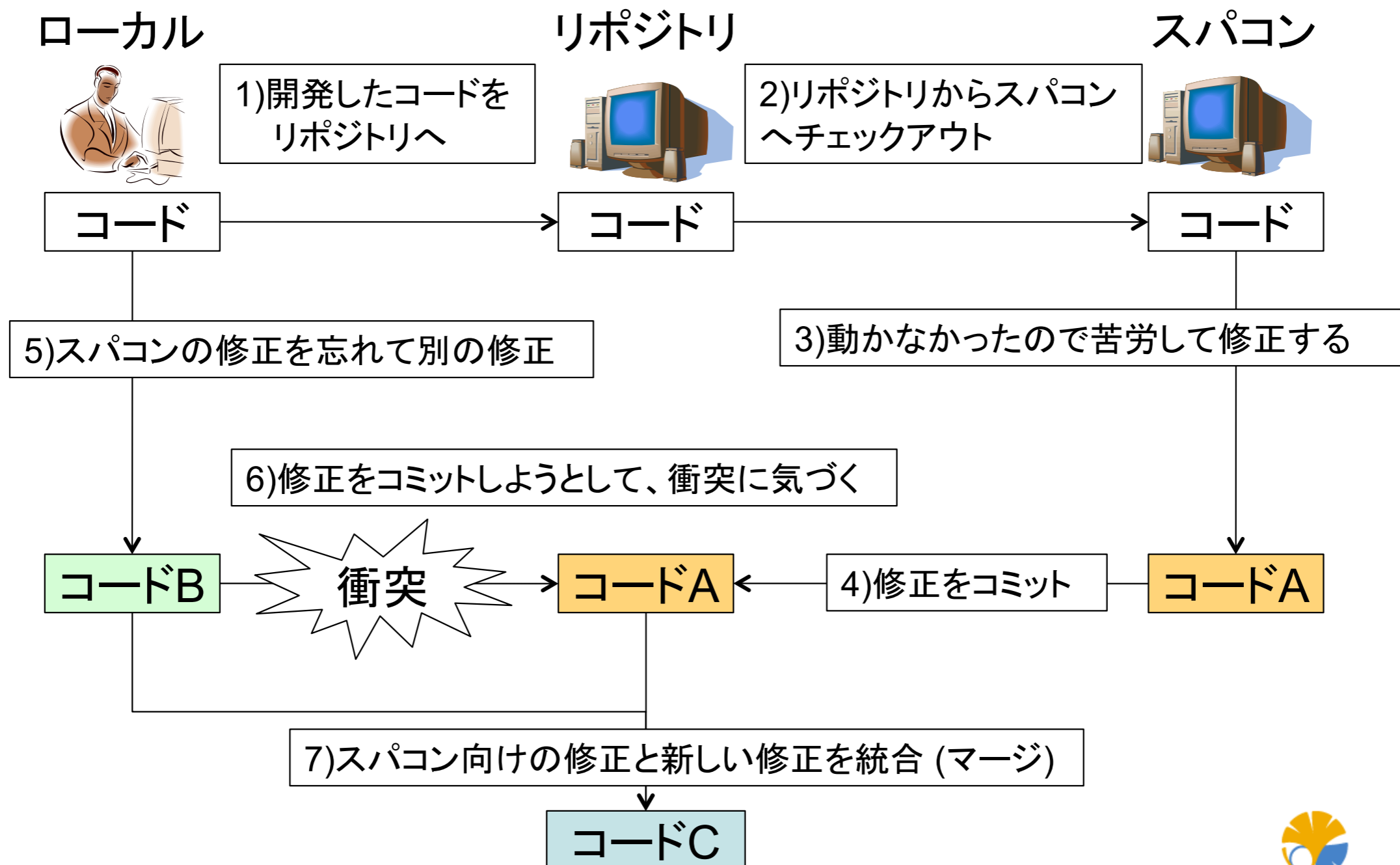


ありがちなパターン



University of Tokyo

バージョン管理している場合



主なバージョン管理システム

- BitKeeper - かつて Linux のカーネルのソース管理に使われていた
- CVS (Concurrent Versions System) - ネットワークでの利用を考慮とした初めてのバージョン管理システム。以前はよく使われていた
- Git - 現在 Linux の開発に使われている。分散型リポジトリ
- Mercurial - Git のライバル。分散型リポジトリ
- SCCS (Source Code Control System) - 70年代にベル研で開発された世界初のバージョン管理システム。現在は使われない
- Subversion - CVSの改良版として開発された。現在最もポピュラー? Mac OS X や多くの Linux には最初からインストールされている。Windows 版クライアント (TortoiseSVN)もある

バージョン管理システムの欠点(面倒な点)

- 修正前に最新の状態にアップデートしなければならない
 - ⇒ 慣れると習慣になります
- 全ての修正を「コミット」しなければならない
 - ⇒ 慣れると習慣になります
- 衝突(コンフリクト)が発生した時に対処しなければならない
 - ⇒ 衝突に気づかずに修正してしまうほうが怖いです
- サーバのセットアップが面倒くさい
 - ⇒ まずはホスティングサービス(sourceforge, github, bitbucket)を試してみましょう
 - ⇒ まわりにいるプロ(?)に相談しましょう
- バージョン管理システムを使うと作業効率が倍以上になる
 - ⇒ 使わないと人生を半分損する (c) 2013 渡辺宙志

Subversion の利用に役立つ資料

- Subversion によるバージョン管理
 - <http://todo.issp.u-tokyo.ac.jp/archive/subversion/book.html>
- 「Subversion によるバージョン管理」の読み方
 - <http://todo.issp.u-tokyo.ac.jp/ja/members/wistaria/log/subversion-intro>
 - 「Subversionって何?」 ⇒ 「リポジトリ」 ⇒ 「バージョン管理モデル」 ⇒ 「最初のチェックアウト」 ⇒ 「基本的な作業サイクル」 ⇒ 「作業コピーの更新」 ⇒ 「作業コピーに変更を加えること」 ⇒ 「自分の変更点の調査」 ⇒ 「変更点のコミット」
- CVS/Subversionを使ったバージョン管理（前編：バージョン管理の基礎）
 - <http://sourceforge.jp/magazine/08/09/09/1038233>
- CVS/Subversionを使ったバージョン管理（後編：SVNを使ったバージョン管理）
 - <http://sourceforge.jp/magazine/08/09/24/113215>