

## 量子モンテカルロ法の最近の発展

京都大学 大学院情報学研究科  
原田健自

### 目次

1	はじめに	2
2	経路積分と量子モンテカルロ法	3
2.1	経路積分表現	3
2.2	量子 $s = 1/2$ スピンモデルにおける経路積分表現	4
2.3	負符号問題	6
3	グラフ変数をふくむ経路積分表現	6
3.1	ローカルな更新単位のみを用いる問題点	6
3.2	グラフ変数	7
3.3	グラフ変数空間とスピン変数空間上のマルコフ過程	8
3.4	グラフ変数に関するマルコフ過程の遷移確率	8
3.5	スピン変数に関するマルコフ過程の遷移確率	8
4	ループアルゴリズム	9
4.1	デルタ演算子のグラフ表現	9
4.2	反強磁性ハイゼンベルクモデルのループアルゴリズム	10
4.3	ループアルゴリズムの一般的な手続き	10
4.4	ループアルゴリズムの問題点	11
5	方向付きループアルゴリズム	12
5.1	ワームによるスピン変数の更新	12
5.2	ワームの散乱に関する詳細釣り合い	13
5.3	ワームの散乱確率の最適化問題	14
6	まとめ	14

# 1 はじめに

我々の生活はそれを支える技術が発展することで大きく変わるが、20世紀の始めの微視的現象に対する理解の革命的な変化の影響は振り返ると非常にめざましいものであった。量子力学としてまとめられた全く新しい自然現象の捉え方がいったん確立すると、様々な物質の理解が進み、我々の生活を大きく変えた。そして、今世紀においても引き続き量子的な性質がますます重要になってくると考えられている。

ところで、数値的な手法で直接的にモデルの振る舞いをシミュレートするという研究スタイルが、計算機の発展と共にますます有効性を増して来ているが、そのような手法は量子力学の法則に従う系においても適用可能であるだろうか？

現在、我々の用いる事ができる計算機は、0もしくは1という状態しかとれないビットを用いた計算しかおこなうことができない。それに反して、シュレディンガーの猫の例え話にあるとおり、量子力学に従う系では、状態の重ね合わせという古典系にはない量子的な状態をとることができる。したがって、このような状態を利用できない古典的な計算機を用いて量子的な世界を効率よくシミュレートできるのかという疑問が生ずる。

例えば、量子的な系の重ね合わせの状態を正確に記述するために必要なビット量は、構成要素数に対して指数関数的に増える。したがって、時間発展を計算することは大きな量子系では不可能になる。では、量子コンピュータのような新しい計算機の登場までまたなければいけないのだろうか。

まず、シミュレーションにおいてどのような量の計算が必要かを見る為に、話をいったん古典系に戻す。古典系の平衡状態における性質は、古典統計力学によればカノニカルアンサンブルという特殊なアンサンブル平均で記述することができる。統計力学によれば、エネルギー  $E(\psi)$  をもつ状態  $\psi$  の出現頻度がボルツマン重み  $\exp(-\beta E(\psi))$  に比例するため、物理量  $A$  の観測平均値  $\langle A \rangle$  は  $\sum_{\psi} A(\psi) \exp(-\beta E(\psi)) / Z$  となる。ここで、 $\beta$  は温度の逆数で、 $Z$  はボルツマン重みの規格化因子である。このようなボルツマン重みをもつアンサンブルはカノニカルアンサンブルと呼ばれ、さまざまな物質の性質を研究する上で非常に重要である。

ところが、考えられる全ての状態の平均をとる事は、古典系においてさえ、状態数が構成要素数に対して指数関数的に増えてしまうため、非常にコストがかかる。そこで厳密な計算をあきらめ、状態  $\psi$  を確率  $\exp(-\beta E(\psi)) / Z$  でサンプリングし、そのサンプリング平均から近似的にカノニカルアンサンブル平均を計算するという手法が広く用いられている。このような手法はモンテカルロ法と呼ばれ、さまざまなモデルで成功をおさめている。

では、我々は、(古典的な計算機をもちいて) 量子的な系のカノニカルアンサンブル平均もモンテカルロ法のような手法で効率よく計算することができるのだろうか。現状では一部ではすくなくともできるといえる。量子系の時間発展を厳密に計算することは難しくても、量子系のカノニカルアンサンブル平均は効率よく計算できるというのは直感に反するかもしれないが、そのような手法は量子モンテカルロ法と呼ばれ、広く用いられている。

量子モンテカルロ法の最初の定式化は1970年代であるが、量子系の状態サンプリングに、非常に効率のよいアルゴリズムが最近いくつか提案されてきている [3][9][10][13]。本稿では、量子モンテカルロ法の計算原理とこれら新しいタイプの手法についてとりあげ、量子系のモンテカルロシミュレーションのアルゴリズムの現状を概説する。

## 2 経路積分と量子モンテカルロ法

量子力学では、観測可能な物理量は、量子状態を元とするヒルベルト空間に対するエルミート演算子で定義される。例えば、ハミルトニアン演算子  $\mathcal{H}$  は、古典系のハミルトニアンに対応し、エネルギー  $E$  の状態  $\psi_E$  を固有値  $E$  の固有状態としてもつエルミート演算子として定義される。

古典系のカノニカルアンサンブル平均を拡張すると、量子系の物理量  $A$  のカノニカルアンサンブル平均は

$$\langle A \rangle \equiv \sum_{\psi_E} A(\psi_E) \exp(-\beta E(\psi_E)) / Z = \frac{1}{Z} \text{Tr} A \exp(-\beta \mathcal{H}) \quad (1)$$

であることが量子統計力学より示される。ここでは、エネルギー固有状態がヒルベルト空間の完備正規直交基底であることを用いた。

本章では、経路積分表現をもちいて、上記の量子系のカノニカルアンサンブル平均 (式 (1)) を、サンプリング平均として評価する量子モンテカルロ法の計算原理について述べる。

### 2.1 経路積分表現

一般的に、量子系のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は、局所的な構成要素間の相互作用を表す局所ハミルトニアン  $\mathcal{H}_b$  の和で定義される。

$$\mathcal{H} \equiv \sum_{b=1}^M \mathcal{H}_b. \quad (2)$$

この局所ハミルトニアン同士がお互いに非可換であるため、式 (1) に含まれる指数演算子のトレースの計算が困難になる。例えば、系に含まれる構成要素数が  $N$  の場合、非可換性より同時対角化ができず、ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の行列表現のサイズが  $a^N \times a^N$  程度になり、計算コストは非常に高くなる。

そこで、トロツタ分解公式  $\exp(A+B) = \lim_{L \rightarrow \infty} (\exp(A/L) \exp(B/L))^L$  をもちいて、指数演算子を行列表現のサイズが小さな局所ハミルトニアンの指数演算子の積に分解することを考える。

以下では、P. M. Dirac の記法にしたがい、量子状態  $\psi$  を表すヒルベルト空間の元をケット  $|\psi\rangle$  で、これに双対な複素共役なものをブラ  $\langle\psi|$  で表す。この表記では、内積を  $\langle\psi|\phi\rangle$ 、外積を  $|\psi\rangle\langle\phi|$  と書く。特に外積は  $(|\psi\rangle\langle\phi|)|\alpha\rangle \equiv (\langle\phi|\alpha\rangle)|\psi\rangle$  を意味し、例えば、恒等演算子は  $I = \sum_{\psi} |\psi\rangle\langle\psi|$  と表す事ができる (完備関係式)。ここで  $\{|\psi\rangle\}$  はヒルベルト空間の完備正規直交基底である。

トロツター分解後の局所指数演算子間に完備関係式を挿入することで、指数演算子は次のような小さなサイズの指数演算子の行列要素の積で表す事ができる [12]。

$$Z \equiv \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\psi_b(k)\}} \prod_{k=1}^L \prod_{b=1}^M \langle \psi_{b+1}(k) | \exp(-(\Delta\tau) \mathcal{H}_b) | \psi_b(k) \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_S W_L(S). \quad (3)$$

ここで、 $\Delta\tau \equiv \beta/L$  とし、 $\psi_{M+1}(k) \equiv \psi_1(k+1)$ 、 $\psi_1(L+1) \equiv \psi_1(1)$  (周期的境界条件) とする。また、

$$W_L(S) \equiv \prod_u w(S_u), \quad w(S_u) \equiv \langle \psi'_u | \exp(-(\Delta\tau) \mathcal{H}_u) | \psi_u \rangle \quad (4)$$

とした。なお、表記を簡単化するために、 $(b, k)$  を  $u$ 、 $\psi_b(k)$  を  $\psi_u$ 、 $\psi_{b+1}(k)$  を  $\psi'_u$ 、 $\mathcal{H}_b$  を  $\mathcal{H}_u$ 、 $\{\psi_b(k)\}$  を  $S$  としている。

式 (3) の和は数学的には経路積分に対応しており、分配関数  $Z$  の経路積分表現と呼ばれる。実際、状態  $S$  は、図 1 のように、経路の集まりとして、グラフィカルに表現することができ、ワールドライ

ン状態と呼ばれる。経路積分表現を採用する利点は、 $W_L(S)$  が局所ハミルトニアン of 行列要素の積なので容易に計算できる点にある。その計算コストは  $O(L \times M)$  である。

同様に、カノニカルアンサンブル平均は、

$$\langle A \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_S A(S) W_L(S) / Z \quad (5)$$

となり、確率  $W_L(S)/Z$  でサンプリングした状態  $S$  のサンプル平均として、統計的に評価することができる。これが量子モンテカルロ法の計算原理である。

トロッター分解で導入されたトロッター数  $L$  による打ち切り誤差は、性質の良いもので、外挿をとることが可能であるうえ、本稿で述べる最近のアルゴリズムでは  $L \rightarrow \infty$  極限をとった形式にすることも可能である。しかし、以下では、説明の簡便化のため、トロッター数  $L$  は有限とする。

## 2.2 量子 $s = 1/2$ スピンモデルにおける経路積分表現

電子などがもつ磁気モーメントは量子スピンとよばれる。磁性的な量子現象は量子スピンモデルを用いて古くから研究されている。以後、量子スピンモデルを例として、量子モンテカルロ法のアルゴリズムを見て行く。そのため、本節では、量子スピンの基本的な性質と量子スピンモデルにおける経路積分表現について述べる。

量子  $s = 1/2$  スピンの  $(x, y, z)$  方向成分を表す物理量であるスピン演算子  $(S^x, S^y, S^z)$  は、次のような非可換な交換関係式

$$[S^x, S^y] \equiv S^x S^y - S^y S^x = i\hbar S^z, [S^y, S^z] = i\hbar S^x, [S^z, S^x] = i\hbar S^y \quad (6)$$

とスピンの大きさ  $(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = 3/4$  で定義される (以下、 $\hbar = 1$  とする)。これらの演算子を  $S^z$  の 2 つの固有値  $\pm \frac{1}{2}$  に対応する固有状態  $|\pm \frac{1}{2}\rangle$  を基底に用いて行列表現すると次のようになる (パウリの 2 成分スピノル形式)。

$$S^x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, S^y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i \\ \frac{1}{2}i & 0 \end{pmatrix}, S^z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

また、この形式では状態ケット  $|\pm \frac{1}{2}\rangle$  や状態ブラ  $\langle \pm \frac{1}{2}|$  はそれぞれ次のような縦、横ベクトルでそれぞれ表現される。

$$|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \langle +| \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}, \langle -| \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

代表的な量子スピン間の相互作用として、反強磁性ハイゼンベルク (**HAF**) 相互作用がある。HAF 相互作用はスピンの方向が互いに反対方向に向いた時にエネルギーが低くなるという性質を表し、格子点  $i$  と  $j$  上の量子スピン間の HAF 相互作用を表す局所ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_{ij}^{\text{HAF}} \equiv (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) \quad (9)$$

で定義される。

一般的に、量子スピンモデルを作る際には、結晶構造を反映した局所的な有効相互作用だけを考慮する。例えば、ある分子鎖上の原子は、一次元格子点上ならんだ隣接する量子スピン同士が HAF

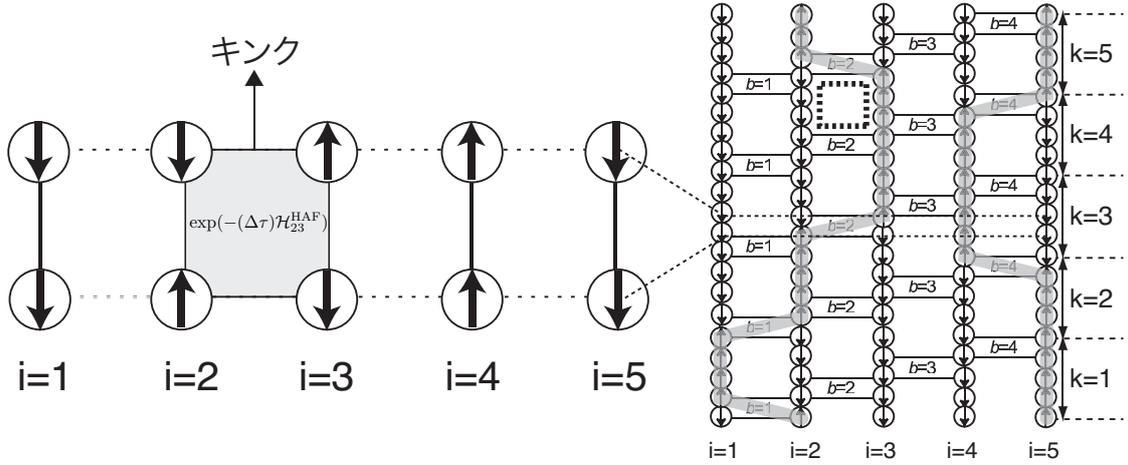


図 1: 量子 HAF モデルの世界ライン状態. 5 個の格子点からなる 1 次元格子上的量子スピンの隣接格子点間と HAF 相互作用している. トロッター数  $L$  は 5 とした. 縦方向がトロッター分解によって導入された方向でトレースより周期的境界が設定されている. 右側はワールドライン状態の全体図で, 左側は  $u = (b = 2, k = 3)$  の部分の拡大図である. 共に, 上 (下) 矢印が  $|+\rangle(|-\rangle)$  を表している. さらに, 右図では, グレーの太線が  $|+\rangle$  の部分に引かれている. 右図の左上の破線四角形はローカルな更新でのスピン変数のフリップ範囲を表す.

相互作用しているモデルとしてあつかうことができる. 実際には少なすぎるが 5 個の原子が 1 次元上に並んでいる場合のハミルトニアンは次式のように定義される.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{12}^{\text{HAF}} + \mathcal{H}_{23}^{\text{HAF}} + \mathcal{H}_{34}^{\text{HAF}} + \mathcal{H}_{45}^{\text{HAF}}. \quad (10)$$

図 1 はこの量子スピンモデルの経路積分表現におけるワールドライン状態をグラフィカルに表現したものである. ワールドライン状態は  $\{\psi_u\}$  の値で表現できる. 一般的に, 量子状態空間の基底  $\{|\psi\rangle\}$  には, 各格子点上の量子スピンの  $S^z$  演算子の固有状態の直積 (ここでは,  $|m_1 m_2 m_3 m_4 m_5\rangle$ , ただし,  $m_i = \pm\frac{1}{2}$ ) を用いることが多い. 従って,  $\{\psi_u\}$  を, 系に含まれるスピン数  $N$  に  $(L \times M)$  を掛けた個数の変数として表現できる. これらを各  $u = (b, k)$  の順番に従って積み重ねたのが図 1 である. ここでは, 図の横方向は実空間方向, 縦方向はトロッター分解によって導入された方向 (トロッター方向) とし, 2次元の格子点 (頂点) 上に状態変数を配置している. このように, トロッター分解によって量子モデルは次元が 1 つ増えた状態空間をもつ古典モデルに変換されたと考える事ができる. この新しく付け加わった次元は虚数時間ともよばれる. ただし, 上下端の境界には分配関数の定義にあるトレースによる周期的境界条件が設定されていることには注意が必要である.

経路積分表現によるボルツマン重み  $W_L(S)$  では, スライス  $\psi_u$  とスライス  $\psi'_u$  の間に局所演算子  $\exp(-(\Delta\tau)\mathcal{H}_u)$  が挿入されている. 局所的な演算子であるため, 演算子の前後でボルツマン重みが 0 にならないような状態変数の変化には制限が生ずる. 例えば,  $\langle \psi'_{(b=2, k=3)} | \exp(-(\Delta\tau)\mathcal{H}_{23}^{\text{HAF}}) | \psi_{(b=2, k=3)} \rangle$  では, 関係する 4 つの状態成分  $m_2, m_3, m'_2, m'_3$  以外は  $m'_i = m_i (i \neq 2, 3)$  のようにスライス間で一致しなければ重みは 0 になる. このような制限を 2 つの頂点を縦方向に結ぶ線分で, さらに, 局所的に相互作用する特別な 4 頂点を 4 つの頂点からなる箱で視覚化している (図 1 の左図参照).

我々がサンプルしたい重みが 0 でないワールドライン状態を表現するには, このような頂点, 箱, 縦方向の線分の組み合わせで十分である. 図 1 では, 頂点とそれを結ぶ直線に色をぬることで現在

の状態値を表示しているが、一般的に状態  $S$  は図にあるように折れ曲がる連続線 (ワールドライン) で視覚化できる。しかし、以下では、量子スピンモデルのみを論ずるため、ワールドライン状態をスピン状態と呼び、状態変数  $S$  をスピン変数と呼ぶ。

### 2.3 負符号問題

定義より、HAF 相互作用の行列表現は

$$\mathcal{H}_{ij}^{\text{HAF}} \equiv (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

になる。ここでは  $(i, j)$  スピン空間の基底は  $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$  の順番にとった。

この例にあるように、局所ハミルトニアンに正の成分を持つ行列要素が存在する場合、経路積分表現では重み  $W_L(S)$  が負になることもあり、モンテカルロ法が適用できないことがある。これを負符号問題と呼ぶ。

負符号問題を回避する方法として、例えば、 $W_L$  の代わりに  $|W_L|$  を重みとし、さらに  $W_L$  自身の符号のサンプリング平均をとっておくことでカノニカル平均を評価するという手法がある。しかし、この方法では、しばしば正と負の重みをもつ状態がほぼ均等にでてしまい、深刻な桁落ち現象がおきて、シミュレーションの精度が非常に悪くなる。

しかしながら、たとえ局所ハミルトニアンの非対角要素に正の成分があっても、例えば HAF 相互作用のみの場合、単純立方格子のような bipartite な格子では全系では必ず偶数回の負符号が出現し、したがって全系のボルツマン重みは必ず正となる。このことは、ユニタリー変換により全ての局所ハミルトニアンの非対角要素を負に変換することにより明示的に示すことができる。実際、1次元格子点に並んでいる隣接スピン同士が HAF 相互作用をしている場合では、奇数格子点のスピンの向きを  $z$  軸中心に 180 度回転させるようなユニタリー変換を施せば、式 (11) の非対角要素の符号を反転させることができる。さらに、ハミルトニアンから定数を引けば、結局、次のような局所ハミルトニアンをもつモデルをシミュレーションすればよいことになる。

$$\mathcal{H}_{ij}^{\text{HAF}} = -\frac{1}{2} \hat{\Delta}_{ij}(g_{\text{H}}), \quad \hat{\Delta}_{ij}(g_{\text{H}}) \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

このようなことが常におこなえるわけではなく、負符号問題は量子系のモンテカルロシミュレーションにおいて最大の障害で一般的な解決策は今のところない。本稿では、負符号問題がおきない場合に限って論ずることにする。

## 3 グラフ変数をふくむ経路積分表現

### 3.1 ローカルな更新単位のみを用いる問題点

一般にハミルトニアンの行列要素は、式 (12) にあるように、ほとんどの部分が 0 である。例えば、HAF モデルではワールドライン (図 1 のグレーの太線) が途切れることはなく隣接格子点にジャン

プしている状態のみで重み  $W_L(S)$  が 0 でない. このような重みが 0 でない状態だけをサンプリングするためには工夫が必要である.

古典系と同じく, 量子モンテカルロ法でも重み  $W_L(S)$  が複雑な分布であるため, 平衡状態における状態出現頻度が  $W_L(S)$  に従うマルコフ過程によって, 現在の状態から次の状態を確率的に作成し, 状態サンプリングする方法が一般的である. しかし, 上記のような制約があるため, そのような方法の構成も難しく, 例えば, 図 1 にあるようなローカルな更新単位 (破線の四角形) を用いて, 徐々にスピン状態を更新する方法が長らく用いられていた.

しかし, 系の巨視的な振る舞いが変わる臨界相転移点付近では, 有限長離れたスピン変数間に相関が存在するため, それと無関係なローカルな更新単位では, サンプル間の相関時間 (緩和時間) が非常に長くなってしまいう問題が発生していた (臨界緩和). この問題を回避するためにあらかじめ固定した大きなサイズの更新単位をつかう方法も提案されたが, 空間方向に関しても改善にはならず, さらに, トロッター数  $L$  を大きくすると新しい状態に遷移する確率が非常に小さくなる問題も発生していた (低温の凍り付きの問題).

## 3.2 グラフ変数

図 1 にあるようなワールドラインが隣接格子点にジャンプしているような箇所, つまり, トロッター方向に不連続に状態が変化している箇所をキंकという. キंकを含むワールドライン状態の重みが 0 でない理由は, キंक前後の局所的な状態変化に対応する局所ハミルトニアン  $\mathcal{H}_u$  の行列要素が 0 でないからである. つまり,

$$\langle \psi'_u | \exp(-(\Delta\tau)\mathcal{H}_u) | \psi_u \rangle \approx \langle \psi'_u | (I - (\Delta\tau)\mathcal{H}_u) | \psi_u \rangle = -(\Delta\tau) \langle \psi'_u | \mathcal{H}_u | \psi_u \rangle \neq 0 \quad (\Delta\tau \ll 1), \quad (13)$$

ただし,  $\langle \psi'_u | \psi_u \rangle = 0$  とした.

このことより, 局所指数演算子  $\exp(-(\Delta\tau)\mathcal{H}_u)$  を 2 つの部分,  $I$  と  $(-\Delta\tau)\mathcal{H}_u$  に, 分けてあつかうと, キंकなどの量子系特有の状態変化に対する制約条件をうまく処理できる可能性がある. そこで, 2 つの項 ( $I$  または  $(-\Delta\tau)\mathcal{H}_u$ ) の選択を表すグラフ変数  $G_u$  を次のように導入する.

$$\exp(-(\Delta\tau)\mathcal{H}_u) \approx \sum_{G_u=0}^1 ((-\Delta\tau)\mathcal{H}_u)^{G_u}. \quad (14)$$

新しくグラフ変数を導入することでサンプリング空間の大きさは広がるが, 以降でみるように, 実際, 非局所的な状態の更新が可能となり, 量子的な制約をうまく満たすサンプリングが効率よくおこえるようになる. このようなグラフ変数の導入は古典系のモンテカルロシミュレーションで最初に提案され非常に成功をおさめた手法であり, Evertz ら [3] によって初めて量子系に適用された.

グラフ変数の導入により, 重み全体は次のようにスピン変数とグラフ変数によって新しく定義される拡張された重み  $W_L(S, G)$  の和に分解される.

$$W_L(S) \equiv \sum_{G_u=0,1} \prod_u \langle \psi'_u | (-\Delta\tau)\mathcal{H}_u^{G_u} | \psi_u \rangle = \sum_G W_L(S, G), \quad (15)$$

$$W_L(S, G) \equiv \prod_u w(S_u, G_u), \quad w(S_u, G_u) \equiv \langle \psi'_u | (-\Delta\tau)\mathcal{H}_u^{G_u} | \psi_u \rangle. \quad (16)$$

式 (15) より, 拡張された重み  $W_L(S, G)$  にもとづき, スピン変数とグラフ変数の同時状態  $(S, G)$  のサンプリングを行えば, スピン状態  $S$  の出現確率は重み  $W_L(S)$  に従うことがわかる. よって, 拡張された重み  $W_L(S, G)$  で状態  $(S, G)$  のサンプリングができれば, カノニカルアンサンブル平均が評価できる.

### 3.3 グラフ変数空間とスピン変数空間上のマルコフ過程

ボルツマン重みに従って独立な状態を直接的につくることは難しいため、モンテカルロシミュレーションでは、平衡状態における状態出現頻度がボルツマン重みに従うようなマルコフ過程を構成するという手法がとられる。ここでも新しく導入されたグラフ変数を含む状態  $(S, G)$  を重み  $W_L(S, G)$  に従いサンプリングするためにマルコフ過程を用いる。その際、スピン変数とグラフ変数を同時に更新するのではなく、交互にそれぞれの変数を更新していくという戦略をとる。このようにする理由はマルコフ過程の遷移確率が単純になるからである。

平衡状態の分布が  $W_L(S, G)$  に従うためには、マルコフ過程における状態間の遷移確率  $T(S \rightarrow S'|G)$  や  $T(G \rightarrow G'|S)$  が、

$$T(G \rightarrow G'|S)W_L(S, G) = T(G' \rightarrow G|S)W_L(S, G'), \quad (17)$$

$$T(S \rightarrow S'|G)W_L(S, G) = T(S' \rightarrow S|G)W_L(S', G). \quad (18)$$

を満たせば十分である。これらの式は状態間の遷移の比が平衡状態の重みに従って釣り合っている事を表し、詳細釣り合い条件と呼ばれる。

### 3.4 グラフ変数に関するマルコフ過程の遷移確率

グラフ変数に関しては、遷移確率を条件付き確率

$$T(G \rightarrow G'|S) \equiv \frac{W_L(S, G')}{W_L(S)} = \prod_u \left( \frac{w(S_u, G'_u)}{w(S_u)} \right) = \prod_u \left[ \frac{\langle \psi'_u | (-\Delta\tau)\mathcal{H}_u^{G'_u} | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | (I - (\Delta\tau)\mathcal{H}_u) | \psi_u \rangle} \right] \quad (19)$$

とすれば明らかに式 (17) を満たす。しかも、遷移確率は各  $u$  毎の積になっているので、グラフ変数  $G_u$  の更新は独立におこなえる。

### 3.5 スピン変数に関するマルコフ過程の遷移確率

スピン変数に関してもグラフ変数の場合と同様に条件付き確率

$$T(S \rightarrow S'|G) \equiv \frac{W_L(S', G)}{\sum_S W_L(S, G)} \quad (20)$$

で遷移確率を定義することができる。しかし、グラフ変数の場合と違い、各スピン変数は複数の局所重み  $w(S_u, G_u)$  に含まれるため独立ではない。さらに、HAF モデル (式 (12)) のように、重みが 0 になる場合が多く、全体の重みが 0 でないスピン変数の割り付けは大幅に制限される。

詳細釣り合い条件 (式 (18)) を満たすスピン変数の確率的な更新の方法として、最近、注目されている方法はおもに 2 種類に分けられる。1 つはグラフを用いるアルゴリズム (ループアルゴリズム)、もう 1 つはワームを用いるアルゴリズム (方向付きループアルゴリズム) である。共にグラフ変数とスピン変数からなる状態空間でスピン変数をグラフ変数の制限の下でうまく変更していく方法である。

表 1: デルタ演算子  $\hat{\Delta}_{ij}(g)$  のグラフ表現と行列要素の対応. グラフ中の枝が表す制限を強調するために破線と実線を用いた. 破線はスピンがお互いに異なる状態, 実線は同じ状態という制限を表す.

$\hat{\Delta}_{ij}(g_I)$	$\hat{\Delta}_{ij}(g_C)$	$\hat{\Delta}_{ij}(g_H)$	$\hat{\Delta}_{ij}(g_{CB})$	$\hat{\Delta}_{ij}(g_{HB})$
				
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

## 4 ループアルゴリズム

### 4.1 デルタ演算子のグラフ表現

HAF モデルのハミルトニアンはデルタ演算子  $\hat{\Delta}_{ij}(g_H)$  のみからなる. デルタ演算子とは行列要素が 0 もしくは 1 の値のみをとる演算子である. 一部のデルタ演算子は値が 1 になるスピン状態の条件をグラフでうまく表現できる. そのようなデルタ演算子で重要なものを表 1 にまとめた.

表 1 のグラフは 4 つの頂点とそれらをむすぶ枝から構成される (表 1 の中段). 上の 2 つの頂点が  $\langle \sigma'_i \sigma'_j |$ , 下の 2 つの頂点が  $|\sigma_i \sigma_j \rangle$  を表し, グラフの枝がその両端の頂点のスピン状態に対する制限を表す. 表 1 では, 破線はスピンがお互いに異なる状態, 実線は同じ状態であるという制限を表し, これらの制限を満たすスピン状態に対応するデルタ演算子の行列要素だけが 1 という値をとる.

ハミルトニアンがデルタ演算子  $\hat{\Delta}(g)$  の和で構成される場合を考える.

$$\mathcal{H}_u = -c_u \hat{\Delta}_u(g_u) \quad (c_u > 0). \quad (21)$$

式 (14) より,  $G_u = 1$  ならばデルタ演算子  $\hat{\Delta}_u(g_u)$  が,  $G_u = 0$  ならばデルタ演算子  $I = \hat{\Delta}_u(g_I)$  が選択されていることを表す. デルタ演算子の行列要素は 0 もしくは 1 の値しかとらないため, グラフ状態  $G$  が固定されている場合, 重み  $W_L(S, G)$  は, 0, もしくは, 値  $\prod_u (c_u \Delta \tau)^{G_u}$  のどちらかをとる. したがって, 式 (20) を満たすには, 与えられた  $G$  の下で重みが 0 でないスピン状態をランダムに 1 つ構成できれば十分である.

重みが 0 でないスピン状態を作成するためにデルタ演算子のグラフ表現が役立つ. デルタ演算子に対応するグラフを,  $G_u = 1$  の場所 (図 2 の中央のダイアグラムにあるグレーの箱) においてみる. グラフ中の枝はスピン変数に関する制限をあらわしているため, 枝でリンクされているスピン変数間には制限があるが, リンクされていないスピン変数同士は独立である. さらに, 枝の表す制限は相対的 (同じ, または, 異なるという関係) であるため, リンクされているスピン変数の集団は完全に同期していれば 2 種類の状態のどちらをとっても同じ重みになる. したがって, 全スピン変数をグラフによってグループにわけ, それぞれのグループ毎に 2 種類の状態からランダムに次の状態を選択すれば, 重みが 0 でないスピン状態をランダムに作成できることになる. 実際には, 現在のスピン状態をスピン変数のグループ毎に確率 1/2 で反転 (フリップ) するだけで十分である.

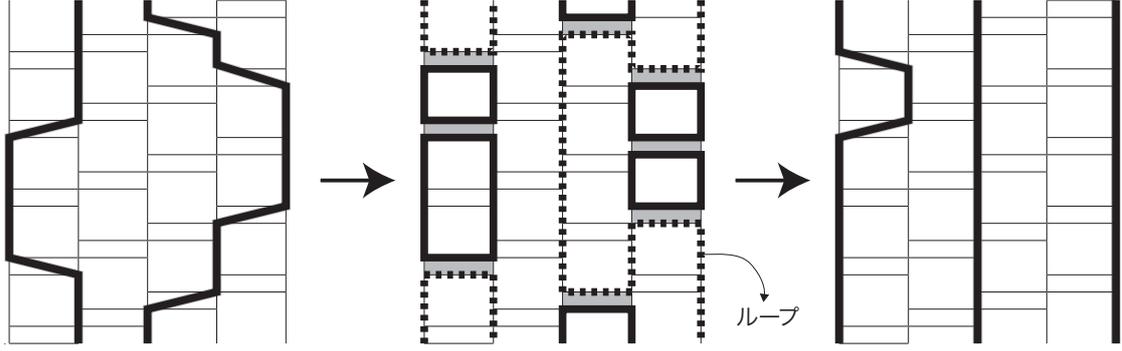


図 2: ループによる更新. ループへの分解 (左から中央) とループ毎のスピンの状態の変更 (中央から右) を HAF モデルの場合で示した. 右と左のダイアグラムにある黒い太線の部分は  $|+\rangle$  状態であることを示している. また, 中央のダイアグラムでは, グラフ変数  $G_u = 1$  である場所をグレーで塗りつぶしてある. さらに, 破線のループはフリップ (現在と反対の状態に変化すること) したことを表す. その他のループはフリップしなかったことを表す.

#### 4.2 反強磁性ハイゼンベルクモデルのループアルゴリズム

HAF モデルのハミルトニアン (式 (12)) はデルタ演算子  $\hat{\Delta}_{ij}(g_H)$  のみで記述でき, 対応するグラフは 4 つのスピンの変数を上下の 2 つのグループに分けるので水平グラフ (表 1 の第 3 列目) とよばれる. 水平グラフを用いる HAF モデルの状態更新手続きは以下のようになる (図 2 参照).

1. 各局所ハミルトニアンの場所  $u$  (図 2 の各長方形の箱) に水平グラフを確率

$$\frac{\langle \psi'_u | \left( \frac{\Delta\tau}{2} \hat{\Delta}_u(g_H) \right) | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | \left( I + \frac{\Delta\tau}{2} \hat{\Delta}_u(g_H) \right) | \psi_u \rangle} = \begin{cases} \frac{\Delta\tau}{2} \langle \psi'_u | \hat{\Delta}_u(g_u) | \psi_u \rangle & (\langle \psi'_u | \psi_u \rangle = 1) \\ 1 & (\langle \psi'_u | \psi_u \rangle = 0) \end{cases} \quad (22)$$

で置き ( $G_u = 1$ ), そうでない場合は  $\hat{\Delta}_u(g_I)$  に対応するグラフ (ストレートグラフ) をおく ( $G_u = 0$ ).

2. グラフの枝で結合されたスピンの変数のグループ毎に 2 つの状態のどちらかをランダムに選択する.

図 2 にあるように, リンクされたスピンの変数の集団は一般にループの形をとるため, ここで述べたグラフを用いる量子モンテカルロ法はループアルゴリズム [3] と呼ばれている.

#### 4.3 ループアルゴリズムの一般的な手続き

結局, ハミルトニアンがグラフ表現をもつデルタ演算子の和で与えられる場合,

$$\mathcal{H} = - \sum_b c_b \hat{\Delta}_b(g_b) \quad (c_b > 0), \quad (23)$$

ループアルゴリズムの手続きは以下のようにまとめられる.

## 1. 確率

$$\frac{\langle \psi'_u | \left( (c_u \Delta \tau) \hat{\Delta}_u(g_u) \right) | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | \left( I + (c_u \Delta \tau) \hat{\Delta}_u(g_u) \right) | \psi_u \rangle} = \begin{cases} c_u \Delta \tau \langle \psi'_u | \hat{\Delta}_u(g_u) | \psi_u \rangle & (\langle \psi'_u | \psi_u \rangle = 1) \\ 1 & (\langle \psi'_u | \psi_u \rangle = 0) \end{cases} \quad (24)$$

に従い対応するグラフ  $g_u$  を置き、それ以外の場合はストレートグラフ  $g_I$  を置く。

## 2. リンクされたスピン変数のグループ毎に独立に確率 $\frac{1}{2}$ でフリップする。

アルゴリズムに現れるループは非局所的な構造をしており、ローカルな固定された更新サイズを用いた場合に比べて、1ステップでサンプル間の相関が著しく低下することもしばしばある。実際、HAF モデルの場合、カノニカルアンサンブル下でのスピン変数間の相関と2つのスピン変数が同じループに属しているかどうかに対応していることを示す事ができ、相関長程度の大きさの更新が1ステップでおこなえる。このため、ローカルな更新のみを用いる場合にみられた種々の問題点は完全に解消される。

ループアルゴリズムを用いた数値的な研究はすでに非常に多くあり、従来のアルゴリズムでは到達する事が難しかった結果がいくつも得られている。例えば、2次元格子上のハードコアポテンシャルをもつボーズ粒子系をループアルゴリズムを用いてシミュレートした結果が図3である。横軸に温度、縦軸に超流動密度をとっている。2次元ボーズ粒子系は臨界温度  $T_c$  で一定の密度の超流動密度をもった超流動相に相転移することが予想されるが、モンテカルロシミュレーションの結果により、その予想が正しい事が示されている。この実験ではボーズ粒子系を同値なスピン粒子系に変換することでループアルゴリズムを適用したが、従来の量子モンテカルロ法のようなローカルな更新では、ループが格子に巻き付いている回数の二乗で定義される超流動密度を変化させることは不可能であった。そのため、この結果はループアルゴリズムを用いずには得る事は難しい。この他にも、様々な量子系について、ループアルゴリズムは広く用いられるようになってきており、数多くの成果が報告されている。しかし、スペースの関係上、そのような応用例については、論文 [4] の網羅的な実験論文リストにゆずり、割愛させていただくことにする。

## 4.4 ループアルゴリズムの問題点

例えば、一様磁場下の HAF モデルでは、ハミルトニアンはスピンのフリップに対称なデルタ演算子だけでは記述できない。これは、スピンの磁場方向にむいたときにエネルギーが低く、磁場に対して反対方向に向いたときエネルギーが高くなるからである。このように対称なデルタ演算子以外のものがハミルトニアンに含まれるとループの状態に応じて別の重み因子を導入する必要がある。

しかし、新しく導入される重み因子をループのフリップ確率に反映させると、緩和時間が非常に大きくなる場合がある。例えば、HAF モデルの場合、まず、水平グラフによりループを作成するとループ中に磁場に平行な状態のスピン変数と反平行な状態のスピン変数が両方とも含まれてしまう。したがって、ループをいくらフリップしてもトータルには磁場の方向にそろった状態が出現しない現象が観測される。実際、カノニカルアンサンブル下でのスピン変数間の相関がスピン変数が同一ループに属するかと対応していないため、緩和時間が小さくならないばかりか、逆に指数関数的に大きくなるという事態を引き起こす。したがって、このようにループの特性とスピン変数間の相関に対応がつかない場合に、ループアルゴリズムを適用しても緩和問題の改善にはならない。それに対して、Sandvik や Syljuåsen によって提案された方向付きループアルゴリズム [10][13] は磁場のような非対称な重みを考慮しつつ非局所的な状態更新を可能にする手法である。

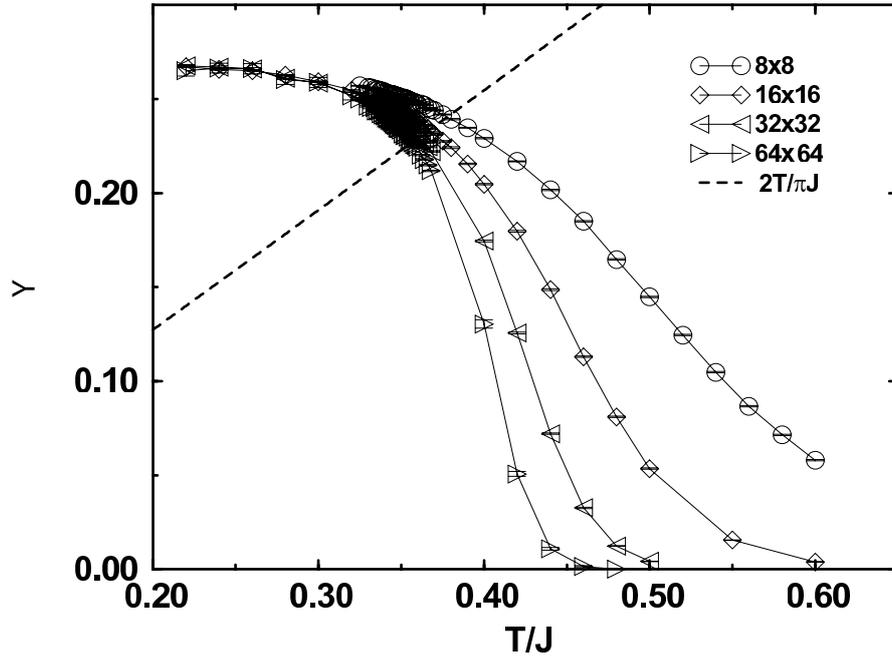


図 3: 2次元格子ハードコアボーズ粒子系における温度に対する超流動密度の変化. 横軸は温度  $T$ , 縦軸は超流動密度  $\Upsilon$  をとった. 粒子数密度は 0.5 にとった. 破線  $\Upsilon = 2T/\pi J$  と超流動密度が交わる場所でユニバーサルジャンプが起きている (図は K. Harada and N. Kawashima[5] より採択).

## 5 方向付きループアルゴリズム

### 5.1 ワームによるスピン変数の更新

HAF モデルにおいて, ループアルゴリズムでサンプル間の相関時間が逆に悪くなったのは, ループの作成時に無視した重みが原因である. ループのような非局所的な更新単位をすべての重みを考慮しつつ行う方法として, ワームを用いる手法 [9][10][13] が最近注目されている.

まず, 図 4(a)(b) にあるような, スピン状態がその前後で不連続に変化する特異点を考える. このような特異点には, スピン状態が  $|+\rangle$  から  $|-\rangle$  に変わるもの (図 4(a)) と,  $|-\rangle$  から  $|+\rangle$  に変わるもの (図 4(b)) の 2 つのタイプが考えられる. これら 2 つのタイプの特異点をペアにすれば, ペアの前後の状態は変化しないため, 任意の場所にも置く事ができる. このようなペアをワームと呼ぶ.

ワームの 2 つの特異点の 1 つを頭として確率的に動かすことで, スピン状態を徐々に更新していく手法が, 方向付きループアルゴリズムとよばれる. その手続きは以下ようになる (図 4(c) 参照).

1. グラフ変数を条件付き確率 (式 (19)) に従い更新する.
2. ランダムに場所を選んでワームを生成し, ワームの頭をランダムに選択する.
3. グラフ変数  $G_u = 1$  の場所  $u$  に到達するまでワームの頭を進める.
4. 散乱確率  $T$  に従い, ワームの頭の散乱後の場所と進行方向を決定する.
5. ワームの頭が尾の場所に戻れば, ワームを消滅させ, さもなければ, 3 に戻る.

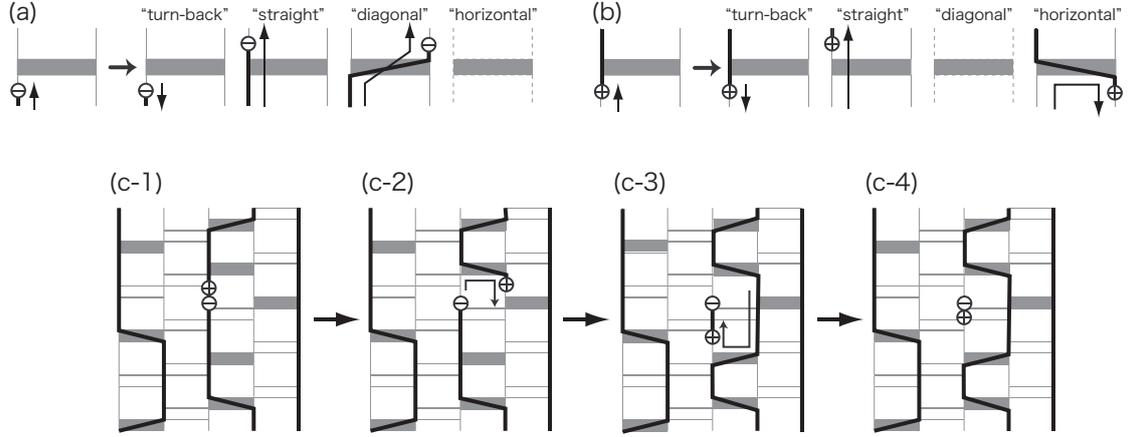


図 4: 2 種類の不連続点に対する散乱例と方向付きループアルゴリズムにおけるスピン状態の更新例. (a),(b) 散乱方向は 4 つで、それぞれ、turn-back, straight, diagonal, horizontal と呼ばれる. 図中で破線になっている散乱例は HAF モデルでは許されない散乱をあらわしている. また、黒い太線の部分は  $|+\rangle$  状態であることを示している. (c) ワームの対生成後と対消滅直前までの更新例. 図中のグレーに塗りつぶされた箱部分はグラフ変数  $G_u = 1$  となっている場所を示している.

ワームの移動によってスピン状態は徐々に更新されていく. このようなワームのパスは、ワームが  $G_u = 1$  の場所で確率的に散乱されることで作られるが、その際にループアルゴリズムでは無視していた重みを考慮することができる可能性がある. そのため、磁場下での HAF モデルなどループアルゴリズムでは難しかったケースにおいて、有効であることが示されている [13][6].

## 5.2 ワームの散乱に関する詳細釣り合い

ワームの頭や尾などの不連続点を無視し、従来通り  $W_L(S(k), G)$  を考える. ただし、 $S(k)$  には、ワームによる不連続点が 2 つ含まれているとする. ワームの頭は、図 4(a)(b) のように場所  $u$  ( $G_u = 1$ ) に左下から近づいた時、4 つの方向に散乱されて移動するとする. もし、この散乱方向の選択確率  $T(S(k) \rightarrow S(k+1)|G)$  が、詳細釣り合い条件

$$T(S(k) \rightarrow S(k+1)|G)W_L(S(k), G) = T(\bar{S}(k+1) \rightarrow \bar{S}(k)|G)W_L(\bar{S}(k+1), G) \quad (25)$$

を満たしていれば、マルコフ過程によって、ワームの不連続点を無視した重み  $W_L(S(k), G)$  に従うスピン状態  $S(k)$  がサンプリングできる. ここで、式 (25) のスピン状態  $\bar{S}(k)$  はスピン状態やワームの頭と尾の位置は  $S(k)$  と同じだが、ワームの頭の進行方向が逆になっている状態を表している.

ワームの頭が尾の場所に戻ってきたときにはかならず対消滅させることができる. 対生成前のスピン状態  $S(0)$  と対消滅後のスピン状態  $S(q)$  の遷移確率は、

$$T(S(0) \rightarrow S(q)|G) \equiv \prod_{k=1}^q T(S(k-1) \rightarrow S(k)|G) \quad (26)$$

なので、式 (25) を順次適用することで、 $S(0)$  と  $S(q)$  間に詳細釣り合い条件

$$T(S(0) \rightarrow S(q)|G)W_L(S(0), G) = T(S(q) \rightarrow S(0)|G)W_L(S(q), G) \quad (27)$$

が成立する。したがって、詳細釣り合い条件(式(25))を満たしながら、ワームを移動させれば、ワームの消えた状態に関しては重み  $W_L(S, G)$  に従ったサンプリングが行なえる。

### 5.3 ワームの散乱確率の最適化問題

ワームの散乱方向を決める散乱確率  $T$  を求めるには式(25)を解けばよい。ワームの散乱前後に変化するスピン状態はワーム周辺のスピン変数のみなので、結局4つの方程式からなる閉じた連立方程式を解けば十分であることがわかる。このような連立方程式はすべての要素が正になる解を必ず1つ以上もつ。例えば、

$$T(S(k) \rightarrow S(k+1)|G) = \frac{W_L(S(k+1), G)}{W_L(S(k), G) + W_L(S(k+1), G)} \quad (\text{熱浴解}). \quad (28)$$

しかし、このような熱浴解は、一般にサンプル間の相関が非常に強く、効率がよくないことが知られている。現在でも、緩和時間最小の最適な散乱確率解の条件に関してはあまり理解が進んでいないが、turn-back 方向の散乱が少ない方がよいのではないかと一般には信じられている。実際、一様磁場下の HAF モデルの場合、turn-back 最小の条件を設定すると磁場の強さに応じて turn-back 方向への散乱確率が減少し、無磁場ではワームは turn-back せず、ループアルゴリズムとまったく同じ形状のパスを生ずる。このように、ループアルゴリズムと方向付きループアルゴリズムがまったく同じ更新になる場合もある。

しかし、ワームの頭が通ってきたパスは常に枝分かれする事なく一本道であるのに対して、ループアルゴリズムでは、複数のループがバインドしたようなクラスタータイプの更新も1回でおこなえる(表1の第4, 5列目参照)。このため、ループアルゴリズムを用いた場合は効率がよいが、ワームによる方法では非常に効率が悪くなるケースもある。

以上のことから、ループアルゴリズムと方向付きループアルゴリズムはお互いに共通している部分もあるが、それ以外では相補的な関係にあると考えられている。

## 6 まとめ

本稿では、量子モデルのカノニカルアンサンブル平均を計算する手法として、量子モンテカルロ法を紹介し、最近の発展を特にループアルゴリズムと方向付きループアルゴリズムを中心として解説してきた。しかし、紙面の都合上、解説できなかった重要なトピックスも多くある。

例えば、有限の Trotter 数  $L$  の場合、打ち切り誤差が非常に小さい多項式展開表現がある [10]。また、ループアルゴリズムなどと組み合わせることで事前に  $L \rightarrow \infty$  極限をとる技法 [1] も存在し、本稿で解説したアルゴリズムは共に打ち切り誤差のない定式化が可能である。

量子モデルについては、スピンの大きさが  $s = 1/2$  の場合のみを例としてとりあげたが、一般のスピン  $s > 1/2$  に拡張する方法 [8][6] も提案されている。また、スピンモデル以外のボーズ粒子系 [11] や一部のフェルミ粒子系 [2] にもループアルゴリズムや方向付きループアルゴリズムは定式化可能である。以上、本稿で省いた詳細に関しては論文 [4][7] を参考にさせていただきたい。

本稿で取り上げた新しいアルゴリズムの登場により、量子モンテカルロ法の緩和時間の問題が大幅に改善されてきた。このことが冒頭に述べた量子系のシミュレーションを古典的コンピュータで一部だが効率よく実行可能であると述べた根拠である。しかし、重要なモデルで効率的な計算手法が見つかっていない例は多くある。そのような問題に対して、さまざまな新しい試みが現在も活発におこなわれている。

## 謝辞

京都大学大学院情報学研究科の野木達夫先生には、本稿執筆に関して様々な助言をいただきました。また、東京大学物性研究所の川島直輝氏には、いろいろと議論にお付き合いいただきました。その他にも多くの方々の協力なしでは本稿の完成はありませんでした。ありがとうございました。

## 参考文献

- [1] Beard, B. B., and Wiese, U.-J., Simulations of Discrete Quantum Systems in Continuous Euclidean Time, *Physical Review Letters*, 77 (1996), 5130 – 5133.
- [2] Chandrasekharan, S., and Wiese, U.-J., Meron-Cluster Solution of Fermion Sign Problems, *Physical Review Letters*, 83 (1999), 3116 – 3119.
- [3] Evertz, H. G., Lana, G., and Marcu, M., Cluster algorithm for vertex models, *Physical Review Letters*, 70 (1993), 875 – 879.
- [4] Evertz, H. G., The loop algorithm, *Advances in Physics*, 52 (2003), 1 – 66.
- [5] Harada, K., and Kawashima, N., Universal jump in the helicity modulus of the two-dimensional quantum XY model, *Physical Review B*, 55 (1997), R11949 – R11952.
- [6] Harada, K., and Kawashima, N., Coarse-grained loop algorithms for Monte Carlo simulation of quantum spin systems, *Physical Review E*, 66 (2002), 056705-1 – 056705-12, Publisher’s Note: Coarse-grained loop algorithms for Monte Carlo simulation of quantum spin systems [Phys. Rev. E 66, 056705 (2002)], *Physical Review E*, 67 (2003), 039903(E).
- [7] Harada, K., and Kawashima, N., Recent Developments of World-Line Monte Carlo Methods, *Journal of the Physical Society of Japan*, 73 (2004), 1379 – 1414.
- [8] Kawashima, N., and Gubernatis, J. E., Loop Algorithms for Monte Carlo Simulations of Quantum Spin Systems, *Physical Review Letters*, 73 (1994), 1295 – 1298.
- [9] Prokov’ev, N. V., Svistunov, B. V., and Tupitsyn, I. S., Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 87 (1998), 310 – 321.
- [10] Sandvik, A. W., Stochastic series expansion method with operator-loop update, *Physical Review B*, 59 (1999), R14157 – R14160.
- [11] Smakov, J., Harada, K., and Kawashima, N., Quantum Monte Carlo algorithm for softcore boson systems, *Physical Review E*, 68 (2003), 046708-1 – 046708-5.
- [12] Suzuki, M., Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising System : Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations, *Progress of Theoretical Physics*, 56 (1976), 1454 – 1469.
- [13] Syljuåsen, O. F., and Sandvik, A. W., Quantum Monte Carlo with directed loops, *Physical Review E*, 66 (2002), 046701-1 – 046701-28.