

量子モンテカルロ法

川島 直輝 (東京都立大学)

2003年7月 千葉大学

§ 1 大自由度積分とモンテカルロ法

- 分配関数は状態数が多すぎてまともには計算不可能

- ただし, self-averaging は期待してもよい

- つまり, 瞬間値でだいたいあっている

- 平衡分布

$$P_{eq}(S) \propto W(S) = \exp(-\beta E(S))$$

に従って状態を選び出さないといけない

- rejection 法は大自由度問題ではうまくいかない

§ 2 マルコフ鎖とメトロポリス法

■ マルコフ過程

$$P(S_{n+1}) = \sum_{S_n} T(S_{n+1}|S_n) P(S_n) \quad (\mathbf{P}_{n+1} = T \mathbf{P}_n)$$

■ 遷移行列 $T(S_{n+1}|S_n)$

■ 詳細つりあい $T(S'|S)W(S) = T(S|S')W(S')$

■ エルゴード性 $\exists n \left(\forall i, j \left((T^n)_{ij} > 0 \right) \right)$

■ 収束性 $\lim_{n \rightarrow \infty} T^n \mathbf{P}_0 = \mathbf{P}_{eq} = a \mathbf{W}$ (for any \mathbf{P}_0)

§ 3 イジングモデル

■ イジングモデル

$$E(S) = -J \sum_{(ij)} \delta_{S_i, S_j}$$

$$S = (S_1, S_2, S_3, \dots, S_N) ; S_i = \pm 1$$

■ single-spin-flip 遷移行列

$$T(S' | S) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{N} (f_k(S) \Delta(S', F_k S) + (1 - f_k(S)) \Delta(S', S))$$

F_k = [k 番目のスピンを反転する演算子]

$$f_k(S) = \min \left(1, \frac{W(F_k S)}{W(S)} \right)$$

■ 臨界緩和の問題あり

§ 4 Swendsen-Wang アルゴリズム

■ 相関長程度の範囲をいっぺんに更新できればよい

■ Fortuin-Kasteleyn 表示

$v = (i, j) \dots$ 再隣接格子点对

$$S_v = (S_i, S_j)$$

$G \equiv \bigoplus_v G_v \dots$ グラフ; $G_v = 0, 1 \dots$ グラフ要素 (0:線なし, 1:線あり)

$$W(S) = \sum_G W(S, G); \quad W(S, G) = \prod_v w(S_v, G_v) = \prod_v v(G_v) \Delta(S_v, G_v)$$

■ Swendsen-Wang アルゴリズム

1回の遷移を2つのステップで実現

- 1) S に対して G を確率 $W(S, G)/W(S)$ で発生.
- 2) G に対して S を確率 $W(S, G)/W(G)$ で発生.

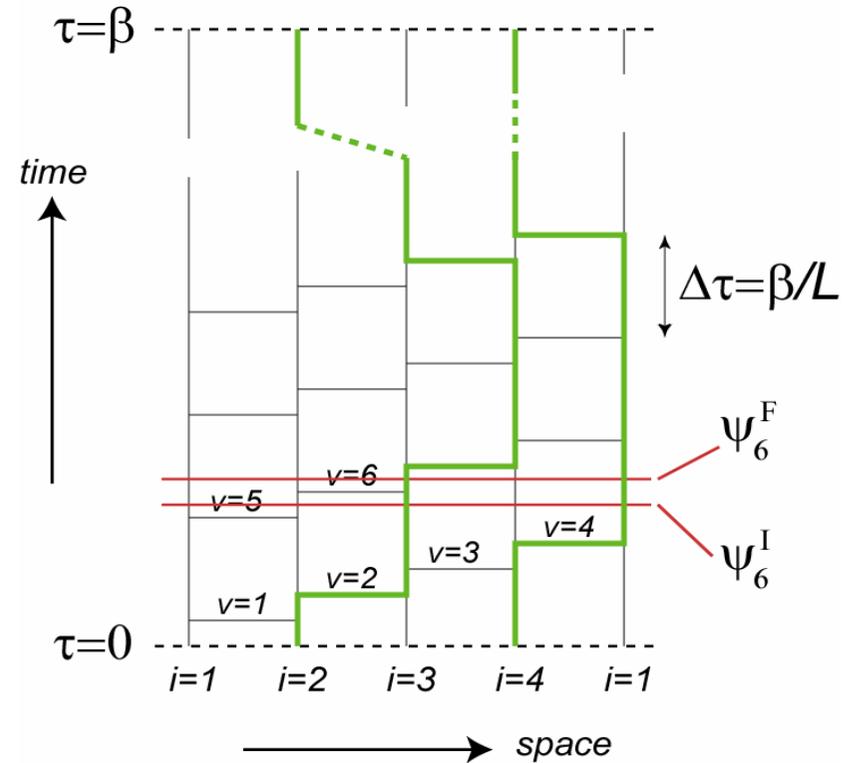
§ 5-1 経路積分と量子モンテカルロ

■ 量子系の分配関数の経路積分表示

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\psi_0} \langle \psi_0 | e^{-\beta H} | \psi_0 \rangle$$

$$= \sum_S \prod_v w(S_v) = \sum_S W(S)$$

$$\left(\begin{array}{l} S \equiv \bigoplus_v S_v, \quad S_v \equiv (\psi_v^F, \psi_v^I), \quad \Delta\tau \equiv \frac{\beta}{L} \\ v = ((ij), k) \dots \text{バーテックス}, \\ \psi_v^I \dots \text{バーテックス直前の状態} \\ \psi_v^F \dots \text{バーテックス直後の状態} \\ w(S_v) \equiv \langle \psi_v^F | e^{-(\Delta\tau)H_{ij}} | \psi_v^I \rangle \end{array} \right)$$

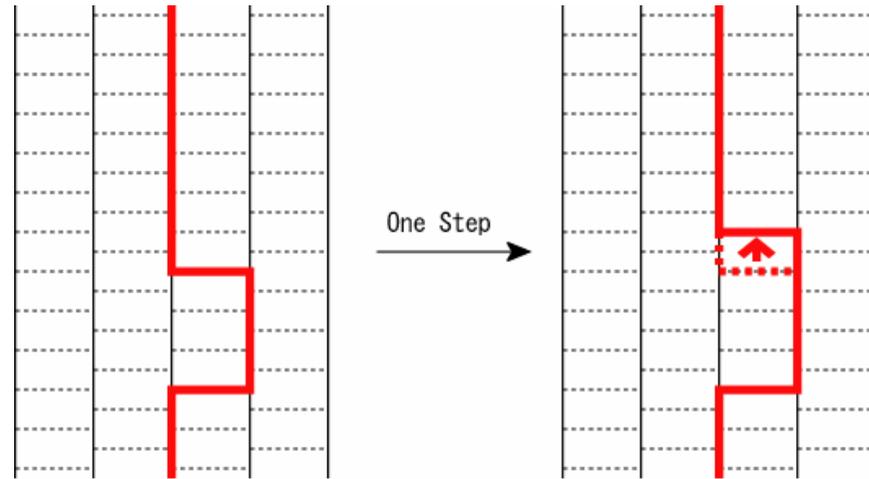


§ 5-2 経路積分と量子モンテカルロ

■ 局所的状態更新

問題点:

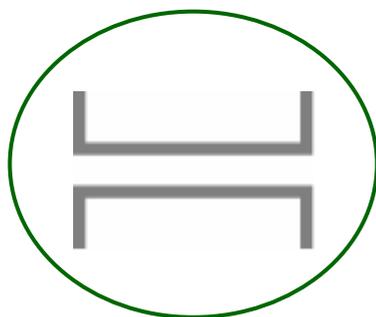
- (1) 離散化誤差
- (2) 遅い緩和
(臨界緩和,
ギャップレス相,
小さい離散化幅, など)
- (3) 人為的保存量
(全磁化, 全ワインディング数, など)
- (4) 非対角グリーン関数
- (5) 負符号問題



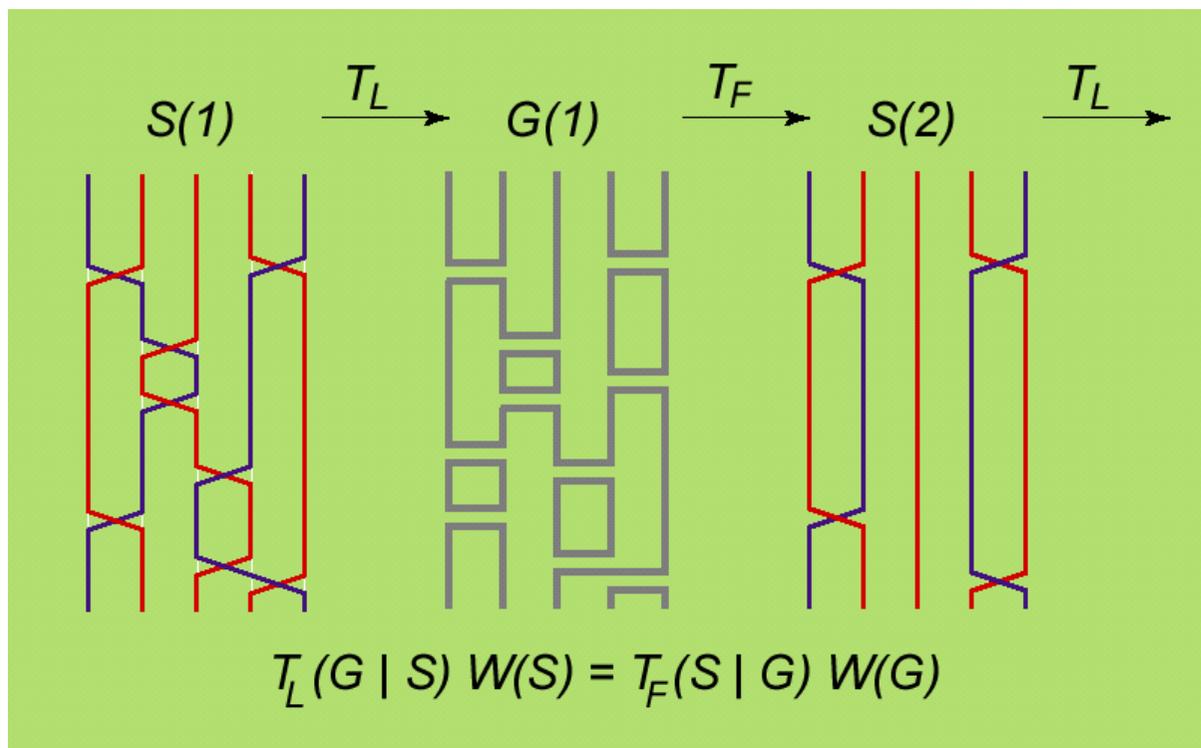
§ 6-1 クラスタによる更新

Evertz-Lana-Marcu 1993

経路積分表示上のクラスタアルゴリズム



↑
 グラフの
 基本構成要素
 (反強磁性
 ハイゼンベルク
 モデルの場合)



§ 6-2 クラスタによる更新

$$w(S_v) \equiv \langle \psi_v^F | e^{-(\Delta\tau)H} | \psi_v^I \rangle = \sum_{G_v} w(S_v, G_v)$$

と書けるときの状態更新:

1. 各バーテックスに対して, 確率

$$w(S_v, G_v) / w(S_v)$$

でグラフを割り当てる.

2. 各クラスタを確率

$$W(S', G) / (W(S, G) + W(S', G)) \quad (S' \text{はクラスタ反転後の状態})$$

で反転する.

(とくに, $w(S_v, G_v) = v(G_v) \Delta(S_v, G_v)$ と書けるときには
確率 $1/2$ で反転.)

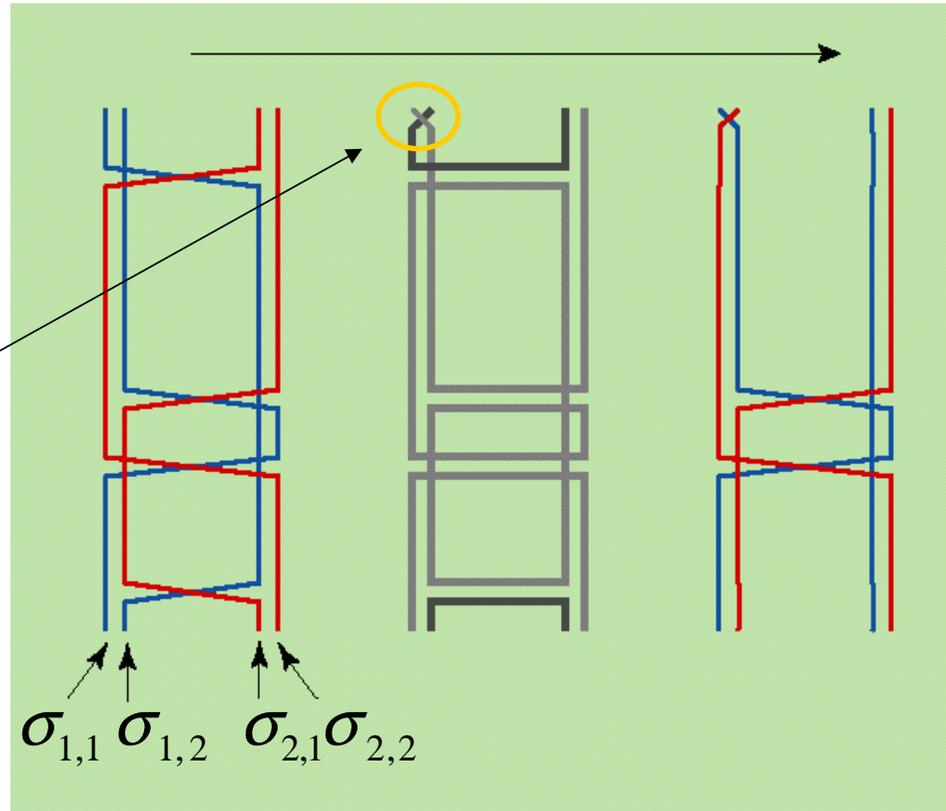
§ 7 $S > 1/2$ の場合

Kawashima-Gubenas 1995

Split-spin trick

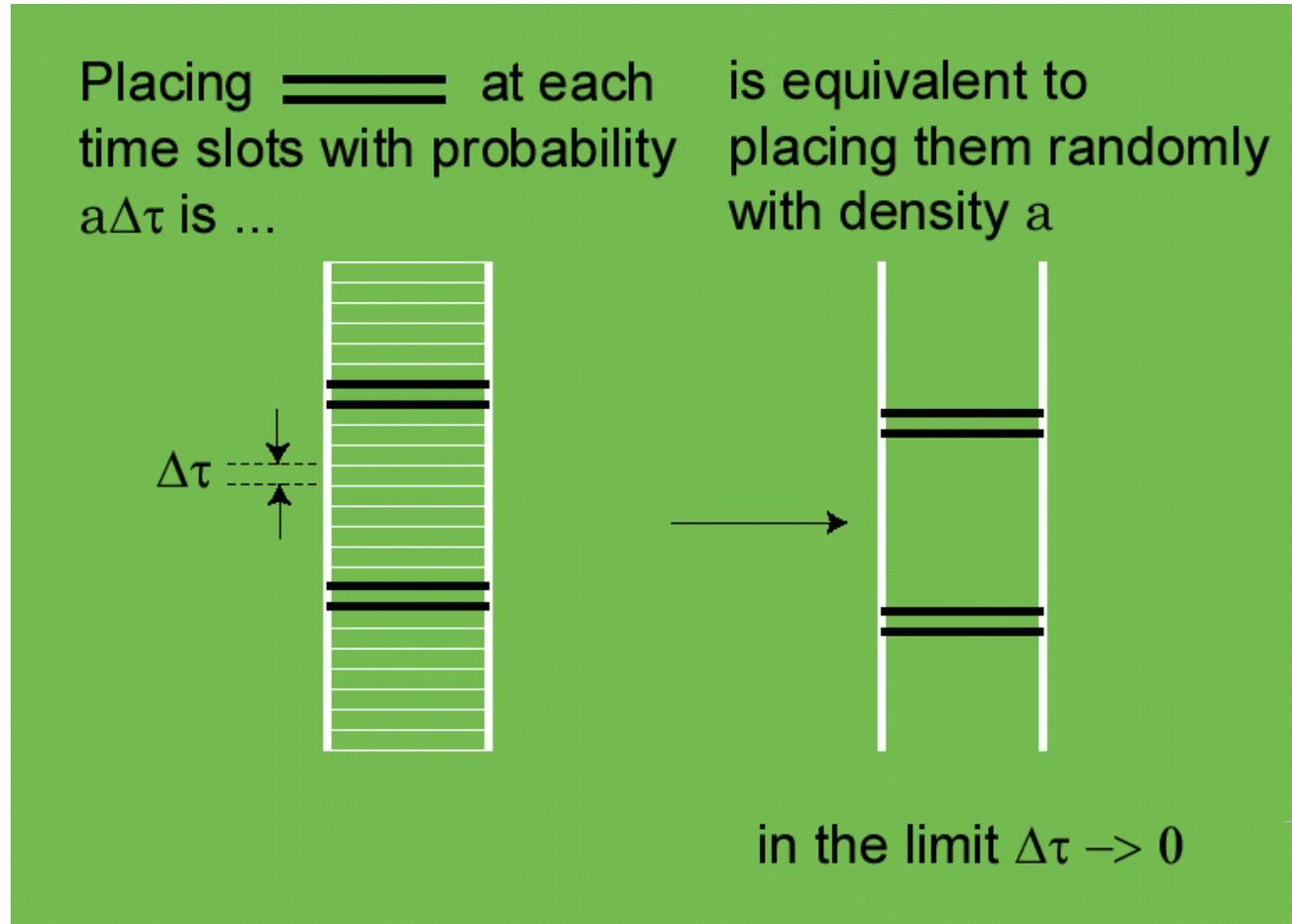
$$\hat{\mathbf{S}}_i \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{2S} \hat{\sigma}_{i,\mu}$$

$$\text{Tr}_S(\dots) = \text{Tr}_\sigma(\hat{P}\dots)$$



DEMO

§ 8-1 連続虚数時間極限



No need for Trotter extrapolation

§ 8-2 連続虚数時間極限

$$u(S_v) \equiv \langle \psi_v^F | -H | \psi_v^I \rangle = u_0(\psi_v^I) \delta_{\psi_v^F, \psi_v^I} + \sum_{G_v: \text{non-trivial}} u(S_v, G_v)$$

と書けるときの状態更新:

1. 確率密度 $u(S_v, G_v)$ で全区間に非自明グラフを割り当てる.
2. 確率 $u(S_v, G_v)/u(S_v)$ で全キンクに非自明グラフを割り当てる.
3. 非自明グラフ同士を縦線でつないでループをつくる.

3. 確率

$W(S', G)/(W(S, G) + W(S', G))$ (S' はクラスタ反転後の状態)

で各クラスタを反転. ただし,

$$W(S, G) = \exp\left(\int_0^\beta d\tau u_0(\psi(\tau))\right) \times \prod_{v: \text{kink}} u(S_v, G_v)$$

特に, $u_0(\psi) = 0$ のときには確率 $1/2$ で反転.

§ 9 物理量の測定

■ エネルギー

$$\langle H \rangle = \langle E(S) \rangle_{MC}$$

$$E(S) \equiv \beta^{-1} \left(\int_0^\beta d\tau \langle \psi(\tau) | H | \psi(\tau) \rangle - N_{kink}(S) \right)$$

■ 比熱

$$C = \beta^2 \left(\langle E(S)^2 \rangle_{MC} - \langle E(S) \rangle_{MC}^2 - T^2 N_{kink}(S) \right)$$

■ 相関関数

$$\Gamma(X', X) \equiv \mathfrak{S} \langle \hat{S}_j^z(\tau') \hat{S}_i^z(\tau) \rangle = \langle S_{X'} S_X \rangle_{MC}$$

$$X \equiv (i, \tau), \quad X' \equiv (j, \tau'), \quad S_X \equiv \psi_i(\tau)$$

■ 帯磁率

$$\chi = \frac{\beta}{N} \left(\langle M(S)^2 \rangle_{MC} - \langle M(S) \rangle_{MC}^2 \right)$$

$$M(S) \equiv \frac{1}{\beta} \int dX S_X$$

§ 10 グラフで定義される測定量

■ エネルギー

$$\langle H \rangle = -\beta^{-1} \langle N_{nt}(G) \rangle_{MC}$$

$N_{nt}(G)$ = (total number of non-trivial graphs)

■ 比熱

$$C = N^{-1} \left(\langle N_{nt}(G)^2 \rangle_{MC} - \langle N_{nt}(G) \rangle_{MC}^2 - \langle N_{nt}(G) \rangle_{MC} \right)$$

■ 対角相関

$$\Gamma_{zz}(X', X) \equiv \mathfrak{S} \langle \hat{S}_j^z(\tau') \hat{S}_i^z(\tau) \rangle = \langle \gamma_{X',X}(G) \rangle_{MC}$$

$$\gamma_{X',X}(G) = \begin{cases} \pm 1/4 & (X \text{ と } X' \text{ が同じクラスタ上}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

■ 非対角相関

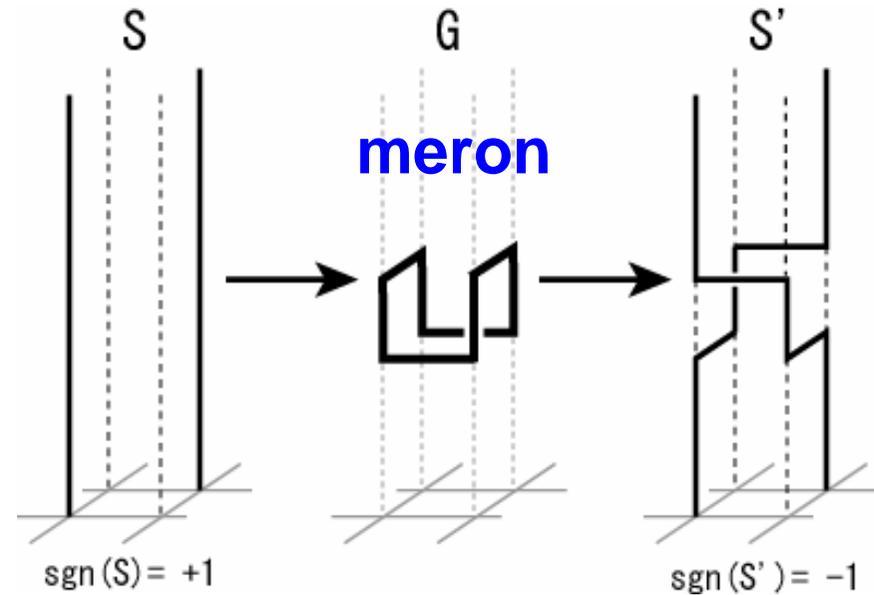
$$\Gamma_{xx}(X', X) \equiv \mathfrak{S} \langle \hat{S}_j^x(\tau') \hat{S}_i^x(\tau) \rangle = \langle \eta_{X',X}(G) \rangle_{MC}$$

$$\eta_{X',X}(G) = \begin{cases} 1/4 & (X \text{ と } X' \text{ が同じクラスタ上}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

§ 11 負符号問題が解決される場合

Chandrasekharan and Wiese 1999

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_S [\text{sgn}(S) \times W(S)] \\
 &= \sum_S \sum_G [\text{sgn}(S) \times V(G) \times \Delta(S, G)] \\
 &= \sum_G \left[V(G) \sum_{\{\sigma_l\}} \prod_l (-1)^{\sigma_l} \right] \\
 &= \sum_{G: \text{no meron}} V(G)
 \end{aligned}$$



Merlon アルゴリズムがうまくいく条件:

- 1) 符号がループ符号の積に因子化できる.
- 2) メロンの含まれたグラフは分配関数に寄与しない.
- 3) メロンを含まないグラフは分配関数に正の寄与をする.

1成分フェルミ粒子系では負符号問題を解消できる!

§ 12-1 Syljuasen-Sandvik アルゴリズム

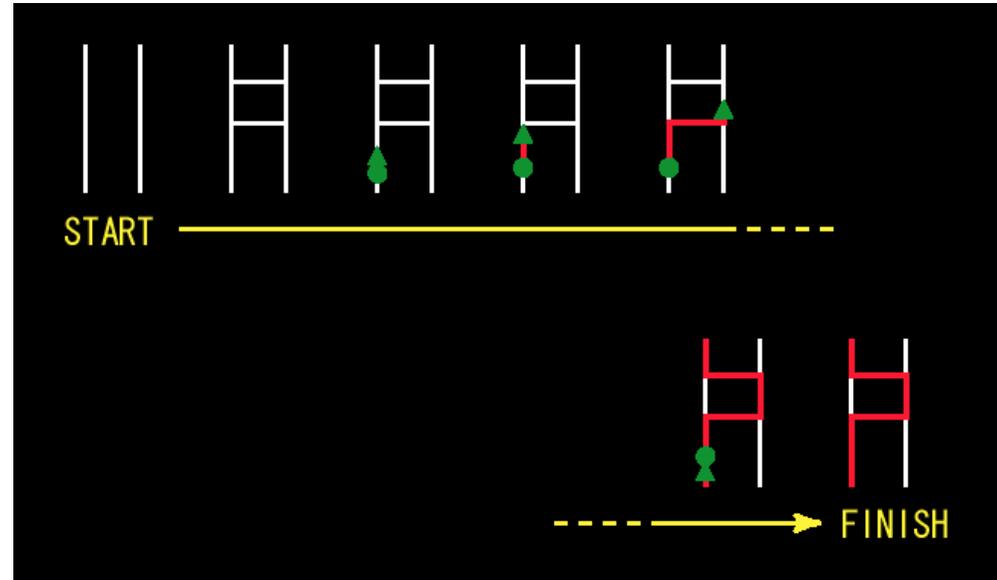
Syljuasen-Sandvik 2002

バーテックス密度:

$$\rho_{lm} = W(\Sigma)$$

ワーム散乱確率:

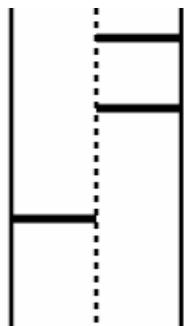
$$P(\Sigma' | \Sigma)$$



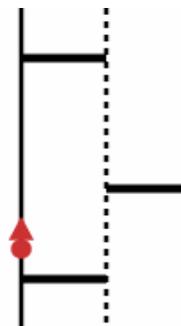
$$\Sigma = \begin{pmatrix} l' & m' \\ l^\sigma & m \end{pmatrix} = \begin{array}{c|c} l' & m' \\ \hline l^\sigma & m \end{array}$$

§ 12-2 Syljuasen-Sandvik アルゴリズム

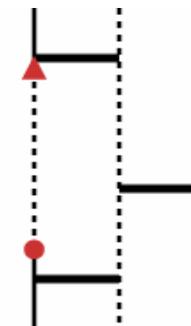
1. 初期状態。縦実線は上向きスピン状態の場所、点線は下向きスピン。横線はアクティブパーテックス（以下単にパーテックス）



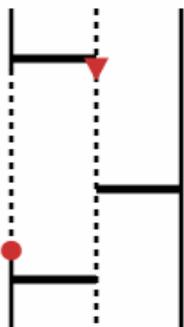
2. パーテックスの更新およびワーム対の発生



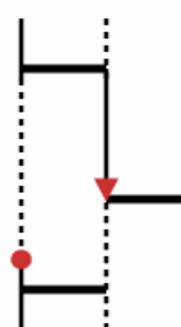
3. ワームを進行方向に次のパーテックスまで移動。（ワームが通過した部分はスピン状態が変わる。）



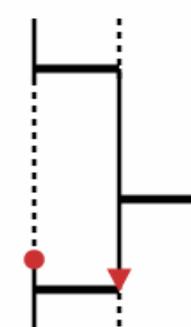
4. ワームのパーテックスにおける散乱。散乱方向はサイコロで（確率的に）きまる。



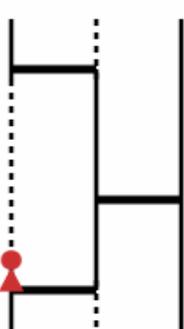
5. 再びパーテックスにあたるまで移動



6. 今回は直進して更に次のパーテックスまで移動



7. パーテックスにおける散乱



8. 対消滅



§ 12-3 Syljuasen-Sandvik アルゴリズム

Weight: $W \begin{pmatrix} l' & m' \\ l^\varepsilon & m \end{pmatrix} \equiv \langle l', m' | (\text{const}) - H | l, m \rangle$

$\varepsilon = \pm 1, \pm 2, \dots =$ [the magnitude of spin change caused by the worm]

Extended Weight : $W(\Sigma', \Sigma)$

Weight Equation : $W(\Sigma) = \sum_{\Sigma'} W(\Sigma', \Sigma)$

Detailed Balance : $W(\Sigma', \Sigma) = W(\bar{\Sigma}, \bar{\Sigma}')$

Σ' : the final state of scattering

$\bar{\Sigma}$: inverse of Σ

$\bar{\Sigma}'$: inverse of Σ'

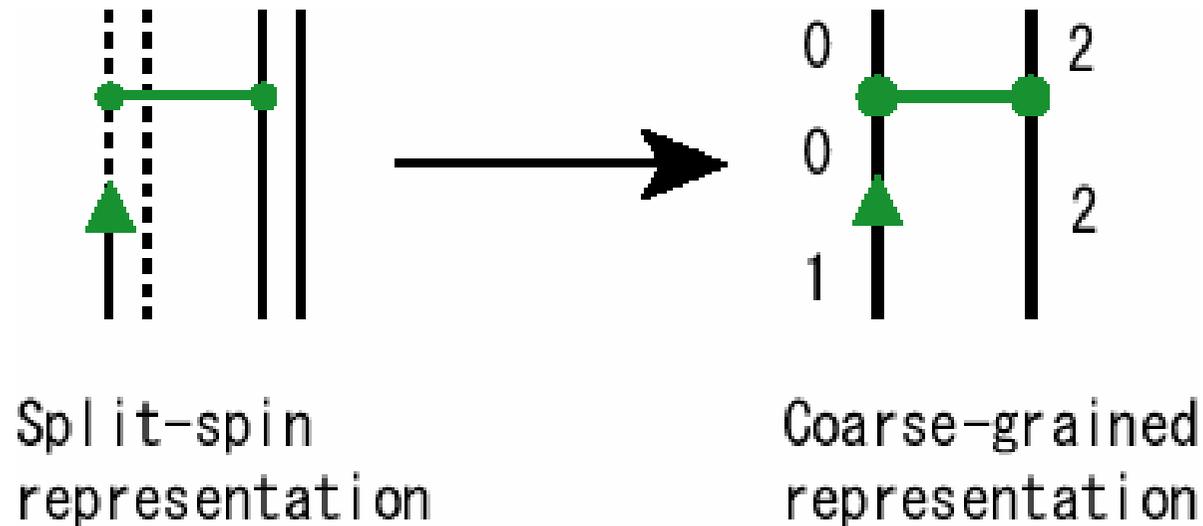
Vertex Density : $\rho_{lm} = W \begin{pmatrix} l & m \\ l & m \end{pmatrix}$

Scattering Prob. : $P(\Sigma' | \Sigma) = \frac{W(\Sigma, \Sigma')}{W(\Sigma)}$

Solution is not unique

§ 13-1 粗視化アルゴリズム

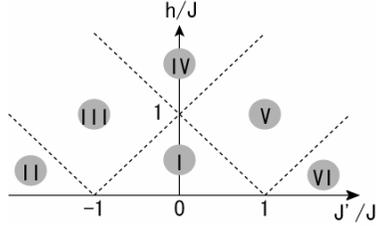
Harada-Kawashima 2002



我々の戦略:

1. スピン分割表示でアルゴリズムをつくる(簡単).
2. そのアルゴリズムを「粗視化」してスピン分割しないアルゴリズムをつくる.

§ 13-2 粗視化アルゴリズム



$$h \equiv \frac{H}{zS} = \frac{H}{2dS}$$

$$H_{ij} = -J(\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y) - J' \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{H}{z}(\hat{S}_i^z + \hat{S}_j^z)$$

TABLE I: The coarse-grained algorithm for the XXZ spin models. The density of vertices ρ , and the scattering probabilities of worms P . $h \equiv H_p/(2S)$, $\bar{l} \equiv 2S - l$, and $\bar{m} \equiv 2S - m$.

Σ		Region I	Region II	Region III	Region IV	Region V	Region VI
$\begin{pmatrix} l & m \\ l & m \end{pmatrix}$	$\rho(\Sigma) =$	A	B	B	B	A	C
$\begin{pmatrix} l & m \\ l^+ & m \end{pmatrix}$	$P(\downarrow \Sigma) =$	0	$\frac{m(-J-J'-h)}{2B}$	0	0	0	$\frac{\bar{m}(-J+J'-h)}{2C}$
	$P(\nearrow \Sigma) =$	$\frac{\bar{m}(J+J'-h)}{4A}$	0	0	0	$\frac{\bar{m}(J+J'-h)}{4A}$	$\frac{\bar{m}J}{2C}$
	$P(\rightarrow \Sigma) =$	$\frac{m(J-J'-h)}{4A}$	$\frac{mJ}{2B}$	$\frac{m(J-J'-h)}{4B}$	0	0	0
$\begin{pmatrix} l & m \\ l^- & m \end{pmatrix}$	$P(\downarrow \Sigma) =$	0	$\frac{\bar{m}(-J-J'+h)}{2B}$	$\frac{\bar{m}(-J-J'+h)}{2B}$	$\frac{m(-J+J'+h)}{2B} + \bar{m}(-J-J'+h)$	$\frac{m(-J+J'+h)}{2A}$	$\frac{m(-J+J'+h)}{2C}$
	$P(\nearrow \Sigma) =$	$\frac{m(J+J'+h)}{4A}$	0	$\frac{m(J+J'+h)}{4B}$	$\frac{mJ}{2B}$	$\frac{mJ}{2A}$	$\frac{mJ}{2C}$
	$P(\rightarrow \Sigma) =$	$\frac{\bar{m}(J-J'+h)}{4A}$	$\frac{\bar{m}J}{2B}$	$\frac{\bar{m}J}{2B}$	$\frac{\bar{m}J}{2B}$	$\frac{\bar{m}(J-J'+h)}{4A}$	0
$\begin{pmatrix} l+1 & m \\ l^+ & m+1 \end{pmatrix}$	$P(\downarrow \Sigma) =$	0	0	0	0	0	0
	$P(\nearrow \Sigma) =$	$\frac{J+J'+h}{l(2J)}$	0	$\frac{J+J'+h}{l(2J)}$	$\frac{1}{l}$	$\frac{1}{l}$	$\frac{1}{l}$
	$P(\rightarrow \Sigma) =$	$\frac{J-J'-h}{l(2J)}$	$\frac{1}{l}$	$\frac{J-J'-h}{l(2J)}$	0	0	0
$\begin{pmatrix} l-1 & m \\ l^- & m-1 \end{pmatrix}$	$P(\downarrow \Sigma) =$	0	0	0	0	0	0
	$P(\nearrow \Sigma) =$	$\frac{J+J'-h}{l(2J)}$	0	0	0	$\frac{J+J'-h}{l(2J)}$	$\frac{1}{l}$
	$P(\rightarrow \Sigma) =$	$\frac{J-J'+h}{l(2J)}$	$\frac{1}{l}$	$\frac{1}{l}$	$\frac{1}{l}$	$\frac{J-J'+h}{l(2J)}$	0
$\begin{pmatrix} l+1 & m \\ l^- & m+1 \end{pmatrix}$		$P(\downarrow \Sigma) = P(\nearrow \Sigma) = P(\rightarrow \Sigma) = 0$, and $P(\uparrow \Sigma) = 1$					
$\begin{pmatrix} l-1 & m \\ l^+ & m-1 \end{pmatrix}$		$P(\downarrow \Sigma) = P(\nearrow \Sigma) = P(\rightarrow \Sigma) = 0$, and $P(\uparrow \Sigma) = 1$					

$$A \equiv \frac{1}{4}[lm(J+J'+3h) + (l\bar{m} + \bar{l}m)(J-J'+h) + \bar{l}\bar{m}(J+J'-h)]$$

$$B \equiv lmh + (l\bar{m} + \bar{l}m)\frac{-J'+h}{2}, \quad C \equiv \frac{1}{2}[lm(J'+h) + \bar{l}\bar{m}(J'-h)]$$

§ 14 ボーズ粒子系のアルゴリズム

■ ホルシュタイン-プリマコフ変換 $b \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2S}} S^-, b^+ \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2S}} S^+$

$$H_{\text{Bose}} = -t \sum_{(R',R)} (b_{R'}^+ b_R + b_R^+ b_{R'}) - \mu \sum_R b_R^+ b_R$$

$$\Rightarrow H_{\text{Spin}} = -J \sum_{(R',R)} (S_{R'}^+ S_R + S_R^+ S_{R'}) - H \sum_R S_R^z + O(S^{-1})$$

手順:

1. ランダムに場所を選んでボーズ粒子を作るワームをおく.
2. もしワームが粒子数を増やすタイプならポアソン課程で

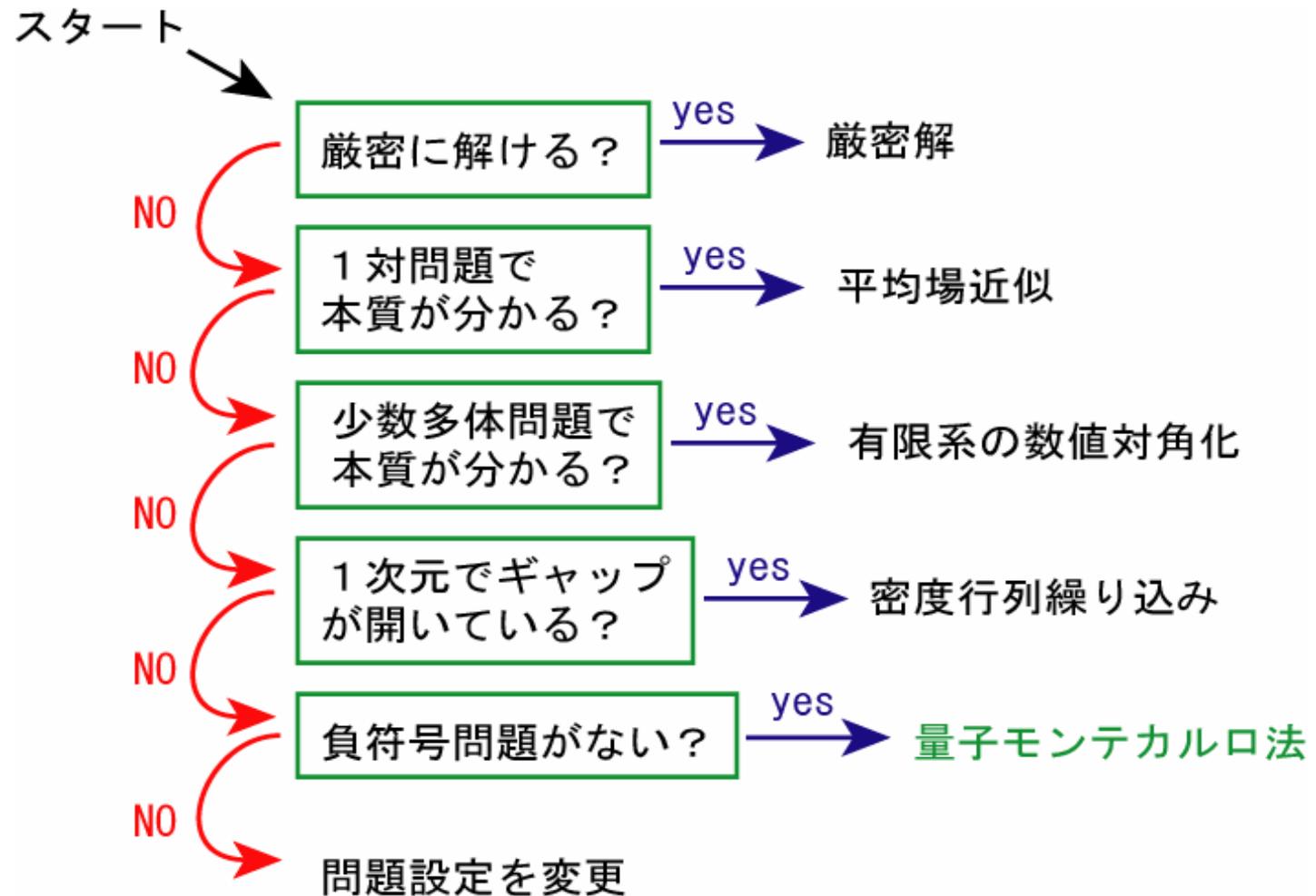
散乱させる. 散乱頻度は $\Lambda \left(\downarrow \left| \begin{array}{cc} l & m \\ l^- & m \end{array} \right. \right) = \frac{|\mu| - dt}{2d}, \Lambda \left(\nearrow \left| \begin{array}{cc} l & m \\ l^- & m \end{array} \right. \right) = \frac{t}{2}$

もしワームが粒子数を減らすタイプならキルクでのみ散乱させる. 散乱確率は $1/\bar{l}$

3. ワームがもとの場所に戻ってきたときには確率 $1/\bar{l}$ で消滅させる. 消滅しない場合はそのまま通過.
4. 2と3をワームが消滅するまで繰り返す.

§ 15-1 まとめと未解決の問題

量子モンテカルロ法はどのようなときに使うか？



§ 15-2 まとめと未解決の問題

10年前とくらべて進んだこと:

- 虚数時間の離散化が必要なくなった
- 場合によっては臨界緩和が抑えられるようになった
- グランドカノニカル平均やワインディング数が計算できるようになった
- 非対角グリーン関数が効率的に計算できるようになった
- 負符号問題が解決できる例が見つかった
- 磁場のかかった任意の大きさのスピンのXYZモデルに大して統一的なアルゴリズムができた。(多くの場合バウンス確率が0.)
- ボーズ系に対する非局所アルゴリズムができた.
- 拡張アンサンブル法との組み合わせ

§ 15-3 まとめと未解決の問題

まだできていないこと:

- 結晶場異方性の存在する場合
- イジング的XXZモデルの場合もカバーする一般化
- 負符号問題の解決(そもそも一般解はあるのか?)