

場の理論のモンテカルロ計算における乱数

筑大電子情報 小柳義夫 (Yoshio Oyanagi)

1. はじめに

格子ゲージ場の理論のモンテカルロ計算は、目下世界中で競って行われている大規模 (CDC 7600 や M200H で数百時間以上の CPU) な計算であり、極めて多くの乱数を用いる (1 時間に $0.5 \sim 5 \times 10^8$ 個) 事例でもあるので、乱数の専門家の方に user の立場から紹介し、御批判や御示唆を仰ぎたい。

モンテカルロ法は物理学の諸分野でも広く用いられているが、大きく分けて数値計算法 (とくに多次元積分) の手法として用いられる場合と、物理系のシミュレーションを行う場合がある。前者は、QED (量子電気力学) の Feynman 積分や多体系の位相空間積分などを含み興味ある問題であるが今回は割愛する。後者はさらに、実験装置の設計・校正のように既知の運動法則から複雑な系の振舞いを計算する場合と、

多粒子系のシミュレーションのように既知のマクロな性質を説明するようなミクロの運動法則を求める場合とがある。本稿では後の場合を取上げる。このような研究方法はしばしば計算機実験と呼ばれる。現実には存在しない相互作用、高純度、高温、高圧などの条件を設定することができ、実際には測定できないミクロの相関、集団運動についての知見を得ることができる。ただし真の実験とは異なり、自然そのものではなくそこから抽象したある数値モデルを対象としている。

2. 場の理論

場の理論（正確には場の量子論）は素粒子を記述する理論であり、空間の各点が素粒子を生成・消滅させる働きを持っている。コンピュータ・シミュレーションにおいては空間や時間を離散化し、格子上のゲージ系、スピン系として取り扱う。陽子、 π 中間子などのハドロンの世界は、クォークとグルオンのQCD（量子色力学）で記述できると考えられており、これを離散化した格子ゲージ理論の数値的な研究が盛んに行われている。第一原理（基礎方程式）から素粒子の質量などが予言できるというので、最近2~3年はフィーバーが続いている。あわせて、同等の性質をもつ二次元スピンの研究も行われている。

モンテカルロ法が量子力学で使えるのは、Feynmanの経路積分表示において時間を虚数化 ($t \rightarrow i\tau$, ユークリッド化ともいう) したもので、

$$\langle Q[\phi] \rangle = \frac{\int Q[\phi] \exp\{-S[\phi]/\hbar\} D[\phi]}{\int \exp\{-S[\phi]/\hbar\} D[\phi]}$$

と、統計力学

$$\langle Q[\phi] \rangle_T = \frac{\int Q[\phi] \exp\{-H[\phi]/kT\} D[\phi]}{\int \exp\{-H[\phi]/kT\} D[\phi]}$$

との形式的な類似に基づく。ここで $\int \dots D[\phi]$ は、場の量 ϕ に関する汎関数積分であり、離散化すれば超多次元積分となる。たとえば4次元で 10^4 の格子上的 $SU(3)$ ゲージ理論では32万次元の積分となる。

3. 統計平衡の出現

この積分を評価することにより、ある物理量 Q の期待値が求まるが、このためには $\exp(-\beta H)$ ($\beta = 1/kT$) に比例した確率で $[\phi]$ を発生させ、その上で Q の平均をとればよい。Langevin方程式による方法もあるが、通常はマルコフ過程によつて発生させる。便宜上状態を離散的とし、 $i, j, \dots$ で表す。 $i \rightarrow j$ の遷移確率 T_{ij} が detailed balance

$$p_i^e T_{ij} = p_j^e T_{ji} \quad \text{for } i, j$$

を満たせば、充分多数回遷移を繰り返した後、平衡分布 p^e に従った状態が生成される (connectivity 等は仮定)。実際にはすべての量 $[\phi]$ を同時に変化させることはできないので、 ϕ の中の一つ、すなわちある一点 x における場の量 $\phi(x)$ について変化させる遷移を考え、その積として全体の遷移を与える。各 $\phi(x)$ に関する T_{ij} が detailed balance を満たしていれば、その積 (中間状態については総和をとる) も満たす。

一点の量についての遷移を起す方法に熱浴法と Metropolis's 法とがある。前者は T_{ij} として、

$$T_{ij} = \begin{cases} c p_j^e & \text{if } j \in \mathcal{S}(i) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

をとる。 $\mathcal{S}(i)$ は状態 i から一回の遷移で移る可能性のある状態の集合で、例えば一点 x の量 $\phi(x)$ だけを変化させた状態。

もし、 $j \in \mathcal{S}(i) \Leftrightarrow i \in \mathcal{S}(j)$ なら detailed balance を満たす。

T_{ij} が明示的には i に依らないので熱浴法とよばれる。

Metropolis's 法では、まず一様に $\mathcal{S}(i)$ の中から j を取り出し、もし $p_j^e \geq p_i^e$ なら j を採用し、さもなければ p_j^e / p_i^e の確率で j を採用する。 j が採用されなければ i のままにしておく。この冊法も detailed balance を満たす。

両者の方法を比較すると、後者は一様なサンプリングのみでよいが、前者では p_j^e に比例したサンプリングが必要にな

る。しかしその反面、独立性の高い配位 $[\phi]$ が得られずという意味で、熱浴法の方が能率がよい。可能なら熱浴法を用いるべきである。

4. 群多様体上の乱数発生

通常場の量 $\phi(x)$ は、 $SU(3)$ や $O(N)$ などの群の表現となっている。従ってモンテカルロ・シミュレーションにおいては、これらの群の表現上での一様乱数や $\exp(-\beta H)$ の重みの乱数を発生させることが必要になる。以下にその例を挙げる。

i) $O(3)$ Heisenberg 模型 —— 球面上の乱数

半径 1 の球面上の点を極座標 (θ, φ) で表せば、測度は $\sin \theta \, d\theta \, d\varphi = d(\cos \theta) \, d\varphi$ であるから、 $\cos \theta$ を $[-1, 1]$ 、 φ を $[0, 2\pi]$ から一様に取り出せばよい。熱浴法では、 $\exp(-c \cos \theta) \, d(\cos \theta) \, d\varphi$ に比例した乱数が必要になるが、 $\cos \theta$ について不定積分できるので、逆関数法によって簡単に生成できる。

ii) 平面回転子模型 —— 円周上の乱数

上の例から一次元以下のもので、一様乱数はトリビアルであるが、熱浴法では、 $\exp(-c \cos \varphi) \, d\varphi$ に比例した乱数が必要になり、今度は不定積分ができない。上の測度を、

$$\exp\left\{-c\left(\cos\varphi + \frac{2}{\pi}c|\varphi|\right)\right\} \exp\left(\frac{2c}{\pi}|\varphi|\right) d\varphi \quad (-\pi \leq \varphi < \pi)$$

と変形し、まず $\exp(\frac{2c}{\pi}|\varphi|) d\varphi$ の積分を発生した後、第1の因子については棄却法を用いる。

iii) $2N$ 次元空間内の超球面上の乱数 —— 洗谷の方法

$O(2N)$ の一様乱数は、次の方法で生成することができる。

$r_1, \dots, r_{N-1}$ を $(N-1)$ 個の $[0, 1)$ の一様乱数とする。これを
 $0 \leq r_1 \leq r_2 \leq \dots \leq r_{N-1} < 1$ とするよう並べ換え、

$$\begin{cases} p_1 = \sqrt{r_1} \\ p_2 = \sqrt{r_2 - r_1} \\ \vdots \\ p_N = \sqrt{1 - r_{N-1}} \end{cases}$$

とあく、 N 個の $[0, 2\pi)$ の一様乱数 $\theta_1, \dots, \theta_N$ を作り

$$\begin{cases} x_1 = p_1 \cos \theta_1, & x_2 = p_1 \sin \theta_1, \\ x_3 = p_2 \cos \theta_2, & x_4 = p_2 \sin \theta_2, \\ \vdots \\ x_{N-1} = p_N \cos \theta_N, & x_N = p_N \sin \theta_N \end{cases}$$

とすればよい。この方法が洗谷政昭氏によるものであることを研究会の席上で知った (M. Sibuya, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 14 (1962) 81-85)。奇数 $O(2N+1)$ の場合は、 $O(2N+2)$ を作り、1成分捨てて正規化すればよい。他の方法もある。

iv) $SU(2)$ — 2次元ユニタリ行列上の乱数

クォークのカラーは3色なので本当は $SU(3)$ なのであるが、計算の簡単のため2色に減らした模型がしばしば用いられる。実は $SU(2)$ は $O(4)$ と関係が深く、 $O(4)$ の乱数を (x_1, x_2, x_3, x_4) としたとき、

$$U = \begin{pmatrix} x_4 + ix_3 & ix_1 + x_2 \\ ix_1 - x_2 & x_4 - ix_3 \end{pmatrix}$$

は $SU(2)$ の測度上で一様な乱数となる。また熱浴法の場合は V を任意の 2×2 複素行列として

$$\exp \{ -c \operatorname{Re} \operatorname{Tr}(UV^*) \}$$

の重みの乱数 U を発生させる必要があるが、 V を

$$V = \begin{pmatrix} y_4 + iy_3 & iz_1 + z_2 \\ iy_1 - y_2 & z_4 - iz_3 \end{pmatrix}$$

と書けば、 $\operatorname{Re} \operatorname{Tr}(UV^*) = \vec{x} \cdot (\vec{y} + \vec{z})$ となるのでよく知られた $O(4)$ の問題に帰着できる。

v) $SU(3)$ 上の一様乱数

独立な $O(6)$ 上の乱数2つ $(x_1, \dots, x_6)$ と $(y_1, \dots, y_6)$ を生成する。 $u = (x_1 + ix_2, x_3 + ix_4, x_5 + ix_6)$, $v' = (y_1 + iy_2, \dots, y_5 + iy_6)$ をつくり、 v' を u と直交化して v とする。 $w = (u \times v)^*$ とつくれば、 3×3 のユニタリ行列

$$U = \begin{pmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{pmatrix}$$

は, $SU(3)$ 上で一様な乱数となる。最近, 熱浴法の重み付きの乱数を発生させるアルゴリズムが Parisi によ, て提案されている。

5. 並列計算機のための乱数アルゴリズム

筆者は構造工学系星野研究室の並列計算機 PAX-32 ャ PAX-128 によ, てスピン系, ゲージ系の計算を行, ているが, 各PU (プロセッサ・ユニット) 毎に独立に乱数の計算を行う必要がある。乗算合同法で, 同一の乗数を用いて

$$x_i^{(l)} \equiv x_{i-1}^{(l)} * 48828125 \pmod{2^{31}}, \quad r_i^{(l)} = x_i^{(l)} / 2^{31} \\ (l=1 \sim 128)$$

とした場合, PU 間で思わぬ相関が生いたりしないであろうか。最も簡単な横相関

$$C_{12} = \frac{12}{N} \sum_{i=1}^N (r_i^{(1)} - \frac{1}{2})(r_i^{(2)} - \frac{1}{2})$$

についてテストした, $\sqrt{\langle (C_{12})^2 \rangle}$ はほとんどの場合 0.10 / (N=10000 の場合) で OK であるが, $x_0^{(1)}=555$, $x_0^{(2)}=777$ とすると C_{12} は異常に大き, $\sqrt{\langle (C_{12})^2 \rangle} = 0.03125$ とな, た (100 回の平均)。これは 3σ の異常である。杉原正顕氏が

全周期にわたる相関を Dedekind sum を用いて計算したところ、異常に大きい 0.0286 の値が得られた。このようなことを防ぐにはどうしたらよいであろうか？

- i) 安全な初期値の組の選ひ方 — 上の例は単純な整数比であることが原因と思われるが、充分条件は？
- ii) 乗数を P 毎に変える — しかし相関が計算できなくなる。理論的保証なし。また 128 個ものよい乱数の乗数を見出すのは至難の業。
- iii) M 系列を使え — 伏見・手塚の多次元分布が一樣な乱数²を用いる。

同様な困難は、パイプライン型のスーパーコンピュータで乱数をバクトル的に発生させる場合にもある。

乱数は物理学において広く使われているにもかかわらず、多くの場合手近かなプログラムを無反省に使っていることが多い。もちろん乱数の“良さ”は目的に依存する概念であるが、ある程度性質の分かった良質の乱数をパッケージとして提供することは意味のあることであろう。π や $\sqrt{2}$ の多桁が用意されているようであるが、使い捨てにするのはもったいないので、乗算合同法と組み合わせて何事にも利用したらよいであろう。